УДК 621.891: 621.026

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СЛУЧАЙНОГО ТРАНСПОРТА С УЧЕТОМ ЭФФЕКТОВ ПАМЯТИ

Л. В. Королев, Д. О. Бытев
Ярославский государственный технический университет

В работе предложено кинетическое уравнение стохастического транспорта, описывающее эволюцию во времени одночастичной плотности распределения частиц в произвольном фазовом пространстве. С помощью данного уравнения был исследован процесс одномерного случайного переноса частиц в среде с ловушками. Показано, что в зависимости от соотношения распределений случайных длительностей свободного движения частицы и ее неподвижного пребывания в ловушке, могут иметь место четыре различных режима транспорта частиц: диффузионный, субдиффузионный, супердиффузионный и супердиффузионный с длительным пребыванием в ловушке. Предложенное кинетическое уравнение может применяться для моделирования случайного переноса частиц, осложненного эффектами памяти и наличием нескольких совместно протекающих случайных процессов.

Ключевые слова: стохастический транспорт, субдиффузия, супердиффузия, эффекты памяти.

Модели случайного транспорта частиц вещества применяются при изучении смешивания, измельчения, химических реакций, тепломассопереноса и других процессов химических технологий. Применение кинетических уравнений, для марковских случайных процессов в этих моделях, представляется обоснованным, если средний интервал времени $<\tau>$, в течение которого частица «помнит» свое предшествующее состояние, мал по сравнению со временем наблюдения t [1].

Если это условие не выполнено и отношение $<\tau>/t$ не может считаться малым, то существенными становятся эффекты памяти, такие как волновой транспорт и асимметрия распределений, которые не описываются этими уравнениями для марковских процессов. Особенно сильно проявляются эти эффекты в тех случаях, когда длительность интервала между случайными переходами распределена по степенному закону и величина $<\tau>$ является бесконечной, что приводит к возникновению субдиффузионного и супердиффузионного режимов транспорта. В настоящей работе предлагается кинетическое уравнение, позволяющее учитывать указанные эффекты памяти [2, 3].

Пусть состояние частицы, совершающей случайные блуждания, описывается набором переменных $Q=\{X, \ V, \ Z\}$, где $X=\{x_\alpha\}$ - переменные, изменяющиеся непрерывно (например, пространственные координаты), $V=\{v_\alpha\}$ - мгновенные скорости изменения этих переменных, $Z=\{z_i\}$ - совокупность дискретных и скачкообразно меняющихся непрерывных координат процесса (например, принадлежность частице к определенной фазе, размер частицы). Частица перемещается в фазовом пространстве Q вследствие случайных воздействий m различных типов, которые будем нумеровать индексом a. Каждый тип воздействия характеризуется плотностью вероятности $W_a(Q\,|\,Q^{/})$ перевода частицы из точки фазового пространства $Q^{/}$ в точку Q и распределением $p_a(\tau_a)$ длительности τ_a интервала между случайными воздействиями. Средняя длительность интервала $<\tau_a>=\int_0^\infty p_a(\tau)\tau\,d\tau$ может быть произвольной и даже бесконечной, поэтому в общем случае описываемый процесс транспорта частиц не является марковским. Однако его можно будет рассматривать как марковский, если дополнить фазовое пространство переменными, в которых будет храниться информация о предшествующих состояниях частицы по отношению к каждому из типов случайных воздействий.

В качестве таких переменных можно взять набор $\mathrm{T} = \{\tau_a\}$, где τ_a - время, прошедшее с момента последнего случайного воздействия типа a на частицу. Переменную τ_a можно назвать собственным временем частицы по отношению к случайному воздействию a [4]. Эти переменные должны непрерывно расти с течением времени t со скоростями $C = \{c_a\}$ и обращаться в ноль в момент очередного воздействия a. Скорости $c_a = c_a(Q)$ должны быть равны единице в тех точках пространства Q, где воздействие a имеет место и обращаться в ноль в остальных точках. Тогда можно записать следующее уравнение для плотности распределения частиц $f(Q, \mathrm{T}, t)$ в расширенном фазовом пространстве (1):

$$\frac{\partial f(Q,\mathrm{T},t)}{\partial t} = -\sum_i v_i \frac{\partial f(Q,\mathrm{T},t)}{\partial x_i} - \sum_{a=1}^{m} c_a(Q) \frac{\partial f(Q,\mathrm{T},t)}{\partial \tau_a} +$$
$$+ \sum_{a=1}^{m} \int dQ' d\mathrm{T}' W_a(Q,\mathrm{T} \mid Q',\mathrm{T}') S_a(\tau'_a) f(Q',\mathrm{T}',t) - \tag{1}$$
$$- \sum_{a=1}^{m} S_a(\tau_a) f(Q,\mathrm{T},t),$$

где $S_a(\tau_a) = p_a(\tau_a)/(1 - \int_0^{\tau_a} p_a(\tau)d\tau)$ - вероятность того, что частица подвергнется случайному воздействию a в интервале $[t, t+\Delta t]$, отнесенная к Δt. Символ $\int dQ d\mathrm{T}$ означает интегрирование по всем непрерывным переменным и суммирование по всем дискретным переменным из набора Q, а также интегрирование по всем собственным временам из набора T в пределах $[0, \infty)$.

При выполнении условий $\int dQ d\mathrm{T} W_a(Q,\mathrm{T} \mid Q',\mathrm{T}') = 1$ нормировочный интеграл плотности $\int dQ d\mathrm{T} f(Q,\mathrm{T},t)$ не изменяется с течением времени.

Рассмотрим в качестве примера применения кинетического уравнения (1) следующую модельную задачу. Частица, находящаяся в момент $t = 0$ в начале координат, совершает одномерное движение в положительном направлении оси x с постоянной скоростью v_0. В случайные моменты времени, интервалы между которыми τ_{lon} распределены по закону $p_{lon}(\tau_{lon})$, частица попадает в ловушку и ее движение прекращается. В ловушке частица находится в течение случайного интервала времени τ_{tr}, распределенного по закону $p_{tr}(\tau_{tr})$, по истечении которого частица выходит из ловушки и продолжает движение. Такая модель может соответствовать, фильтрации взвешенных частиц вещества через гребешковую структуру или гравитационному движению частиц сыпучего материала вдоль поверхности обрушения [3, 4]. В данном случае, при записи кинетического уравнения (1), следует рассматривать плотность распределения частиц в расширенном фазовом пространстве $\{x, z, \tau_{lon}, \tau_{tr}\}$, где координата z указывает на свободное или связанное состояние частицы. На рис. 1 представлены зависимости коэффициента вариации $V_C = (\sigma / < x >) 100\%$, где $< x >$ - среднее смещение частицы, σ - среднеквадратическое отклонение, найденные в результате численного решения уравнения (1). Анализ полученных решений позволяет выделить четыре режима транспорта, которые определяются видом распределений $p_{lon}(\tau)$ и $p_{tr}(\tau)$. При $p_{lon}(\tau) = p_{tr}(\tau) = \exp(-\tau / \tau_0) / \tau_0$, где τ_0 - константа размерности времени, возникает классический диффузионный режим транспорта $< x >\sim (v_0 t)$, $\sigma \sim (v_0^2 \tau_0 t)^{1/2}$, $V_C \sim (t / \tau_0)^{-1/2}$ (кривая 1 на рис. 1).

При $p_{lon}(\tau) = \exp(-\tau / \tau_0) / \tau_0$, $p_{tr}(\tau) = (0.5 / \tau_0)(1 + \tau / \tau_0)^{-3/2}$ имеет место субдиффузионный транспорт. Средняя скорость частиц замедляется из-за долгого пребывания в ловушках $< x >\sim (v_0^2 \tau_0 t)^{1/2}$ и становится сравнимой со скоростью роста $\sigma \sim (v_0^2 \tau_0 t)^{1/2}$ (кривая 2 на рис. 1).

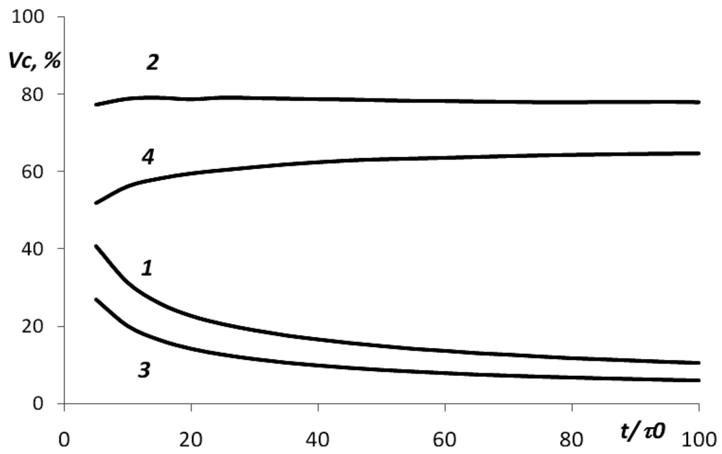

Рис. 1. Зависимость коэффициента вариации положения частицы от времени: 1 - диффузия, 2 - субдиффузия, 3 - супердиффузия, 4 - супердиффузия с длительным пребыванием в ловушке

При $p_{lon}(\tau) = (0.5 / \tau_0)(1 + \tau / \tau_0)^{-3/2}$, $p_{tr}(\tau) = \exp(-\tau / \tau_0) / \tau_0$ наблюдается супердиффузионный перенос частиц (кривая 3 на рис. 1). Зависимости $< x >$ и σ от времени имеют тот же вид, что и в случае обычной диффузии, но коэффициент пропорциональности, определяющий скорость роста $< x >$, увеличивается примерно в 2 раза.

Если положить $p_{lon}(\tau) = p_{tr}(\tau) = (0.5 / \tau_0)(1 + \tau / \tau_0)^{-3/2}$, то наблюдается супердиффузионный перенос частиц с длительным пребыванием в ловушке (кривая 4 на рис. 1). В этом режиме $< x >\sim \sigma \sim (v_0 t)$.

Предложенное в работе кинетическое уравнение может применяться для моделирования случайного транспорта, осложненного эффектами памяти и наличием нескольких совместно протекающих случайных процессов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гардинер К. В. Стохастические методы в естественных науках М.: Мир, 1986. 538 с.
2. Matveev L.V Impurity transport in a dual-porosity medium with sorption // Journal of Experi-

mental and Theoretical Physics. (2012) 115. P. 829-836.
3. Королев Л. В., Бытев Д. О. Случайный перенос в пористой сорбирующей среде // Известия вузов. Химия и химическая технология. 2013. Т. 56. № 6. С. 86-89.
4. Королев Л. В., Бытев Д. О. Собственное время в модели случайного процесса // Математика и естественные науки. Теория и практика: Межвузовский сборник. научных трудов. Вып. 11. Ярославль: Изд-во ЯГТУ, 2016. С. 215 – 218.

Статья публикуется при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках реализации проекта №18-03-20102-г.

Рукопись поступила в редакцию 22.10.2018

MODELLING OF PROCESSES OF CASUAL TRANSPORT TAKING INTO ACCOUNT EFFECTS OF MEMORY

L. Korolev, D. Bytev

In work the kinetic equation of stochastic transport, describing evolution in time of of the single-particle density of distribution of particles in any phase space is offered. With the help of this equation, the process of one-dimensional random transfer of particles in a medium with traps was studied. It is shown that, depending on the ratio of distributions of random durations of free movement of a particle and its stationary stay in a trap, four different modes of particles transport can take place: diffusion, subdiffusion, superdiffusion and superdiffusion with a long stay in the trap. The proposed kinetic equation can be used to simulate the random transport of particles, complicated by the effects of memory and the presence of several concurrent random processes.

Key words: stochastic transport, subdiffusion, superdiffusion, effects of memory.

References

1. Gardiner K. V. Stohasticheskie metody v estestvennyh naukah M.: Mir, 1986. 538 s.
2. Matveev L.V. Impurity transport in a dual-porosity medium with sorption. Journal of Experimental and Theoretical Physics. (2012) 115. P. 829- 836.
3. Korolev L. V., Bytev D. O. Sluchajnyj perenos v poristoj sorbiruyushchej srede. Izvestiya vuzov. Himiya i himicheskaya tekhnologiya. 2013. T. 56. № 6. S. 86-89.
4. Korolev L. V., Bytev D. O. Sobstvennoe vremya v modeli sluchajnogo processa. Matematika i estestvennye nauki. Teoriya i praktika: Mezhvuzovskij sbornik. nauchnyh trudov. Vyp. 11. YAroslavl': Izd-vo YAGTU, 2016. S. 215 – 218.