

# СУБДИФфуЗИЯ С ИСЧЕЗНОВЕНИЕМ ЧАСТИЦ В МОМЕНТ СКАЧКА

*В. П. Шкилев\**

*Институт химии поверхности Национальной академии наук Украины  
03164, Киев, Украина*

Поступила в редакцию 8 ноября 2010 г.

Выведены уравнения субдиффузии-реакции, соответствующие мономолекулярной химической реакции, происходящей в момент диффузионного скачка. Показано, что подход к выводу подобных уравнений, предложенный ранее в работе [8], дает правильный результат в случае асимптотической субдиффузии, но не применим в практически важном случае переходной субдиффузии.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Уравнения диффузии-реакции широко используются при моделировании различных процессов в физике, химии, биологии и других науках. Популярность этих уравнений обусловлена их способностью описывать разнообразные пространственно-временные структуры, в частности, волны переключения, бегущие импульсы, спиральные волны, различного вида фронты, стационарные и осциллирующие пространственные структуры [1]. Стандартное уравнение диффузии-реакции основано на предположении, что диффузия подчиняется законам Фика. Однако во многих сложных средах диффузия не подчиняется классическим закономерностям, т. е. является аномальной. В качестве примеров аномальной диффузии можно назвать диффузию в неупорядоченных твердых телах, в пористых средах, в стекловидных материалах, в живых тканях, в турбулентных потоках и т. д. [2–5]. В последние годы внимание исследователей привлекает вопрос, какой вид должно иметь уравнение диффузии-реакции в случае аномальной диффузии. Эта проблема рассматривалась в ряде работ [6–17]. Оказалось, что, в отличие от классического случая, при аномальной диффузии вид уравнений зависит от особенностей элементарного реакционного акта. В настоящей работе рассматривается субдиффузия, сопровождающаяся превращением частиц, происходящим в момент совершения диффузионного скачка. Такая ситуация может реализоваться, например, при диффу-

зии по поверхности. Некоторые диффузионные скачки могут приводить к уходу частицы с поверхности, что формально можно трактовать как химическую реакцию, результатом которой является исчезновение частицы [18]. Данная задача ранее рассматривалась в работе [8]. Однако использованный в этой работе подход имеет ограниченную применимость. Ниже будет показано, что он дает правильный результат в случае асимптотической субдиффузии (когда отклонения от классического поведения наблюдаются неограниченно долго), но не применим в случае переходной субдиффузии (когда отклонения от классического поведения весьма продолжительны, но все-таки ограничены во времени). Кроме необратимой реакции в настоящей работе рассматривается также обратимая реакция. В этом случае в уравнениях появляются перекрестные диффузионные члены, что является следствием жесткой связи между химическим превращением и диффузионным скачком. Кроме модели случайных блужданий с непрерывным временем (СБНВ) при выводе уравнений используется также модель случайных ловушек. Показано, что обе модели приводят к одним и тем же окончательным уравнениям.

## 2. НЕОБРАТИМАЯ РЕАКЦИЯ

При выводе уравнений субдиффузии-реакции, соответствующих исчезновению частиц в момент диффузионного скачка, авторы работы [8] использовали в качестве исходных следующие уравнения:

\*E-mail: shkilevv@ukr.net

$$q(x, t) = \rho(x, 0)\delta(t) + (1 - \kappa) \times \sum_{x'} \int_0^t \psi(t - t')\lambda(x - x')q(x', t') dt', \quad (1)$$

$$\rho(x, t) = (1 - \kappa) \int_0^t \Psi(t - t')q(x, t') dt'. \quad (2)$$

Здесь  $q(x, t)$  — плотность вероятности того, что частица прибывает в точку  $x$  в момент времени  $t$ ,  $\rho(x, t)$  — концентрация,  $\psi(t)$  — функция распределения времени ожидания,

$$\Psi(t) = 1 - \int_0^t \psi(\tau) d\tau$$

— функция распределения времени выживания,  $\lambda(x)$  — функция распределения длин скачков,  $\kappa$  — вероятность исчезновения частицы в момент скачка. Переход в уравнениях (1), (2) к переменным Фурье и Лапласа, исключение переменной  $q(k, s)$  и переход к пределу больших пространственных масштабов дают следующее уравнение:

$$s\rho(k, s) - \rho(k, 0) = -\frac{\kappa}{1 - \kappa} \frac{1}{\Psi(s)} \rho(k, s) - \frac{k^2\sigma^2}{2} \frac{\psi(s)}{\Psi(s)} \rho(k, s), \quad (3)$$

где  $k$  и  $s$  — переменные Фурье и Лапласа,

$$\sigma^2 = \int x^2\lambda(x) dx.$$

Плотность вероятности  $q(x, t)$ , фигурирующая в уравнениях (1), (2), определяется выражением

$$q(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} q_n(x, t), \quad (4)$$

где  $q_n(x, t)$  — плотность вероятности того, что частица прибывает в точку  $x$  в момент времени  $t$  после  $n$  шагов. Подставляя (4) в (2), мы видим, что член

$$\int_0^t \Psi(t - t')q_0(x, t') dt'$$

умножается на  $1 - \kappa$ . Этот член равен вероятности того, что частица, расположенная в точке  $x$ , не сделала ни одного скачка в интервале времени  $(0, t)$ . Согласно предположению, исчезновение частицы происходит только в момент совершения ею диффузионного скачка, поэтому вероятность исчезновения частицы, которая не совершила ни одного

скачка, равна нулю. Следовательно, рассматриваемый член не должен умножаться на коэффициент  $1 - \kappa$ , так как такое умножение соответствует уменьшению числа частиц за счет их исчезновения. Таким образом, уравнения (1), (2) не согласуются с основным предположением и должны быть заменены другими.

Чтобы получить правильные уравнения, следует вместо переменной  $q(x, t)$ , включающей частицы, не совершившие ни одного скачка, использовать переменную

$$F(x, t) = q(x, t) - \rho(x, 0)\delta(t),$$

включающую только те частицы, которые совершили хотя бы один скачок. В этом случае исходные уравнения можно записать в виде

$$F(x, t) = \sum_{x'} \psi(t)\lambda(x - x')\rho(x', 0) + \sum_{x'} \int_0^t \psi(t - t')\lambda(x - x')(1 - \kappa)F(x', t') dt', \quad (5)$$

$$\rho(x, t) = \rho(x, 0)\Psi(t) + \int_0^t \Psi(t - t')(1 - \kappa)F(x, t') dt'. \quad (6)$$

Для случая чистой диффузии (т. е. без коэффициента  $1 - \kappa$ ) эти уравнения приведены в работе [19]. В отличие от уравнений (1), (2), в этих уравнениях члены, соответствующие частицам, не совершившим ни одного скачка, не умножаются на коэффициент  $1 - \kappa$ . Исключая отсюда переменную  $F(x, t)$  и переходя к пределу больших пространственных масштабов, получим следующее уравнение в переменных Фурье–Лапласа:

$$s\rho(k, s) - \rho(k, 0) = -\kappa \frac{\psi(s)}{\Psi(s)} \rho(k, s) - (1 - \kappa) \frac{k^2\sigma^2}{2} \frac{\psi(s)}{\Psi(s)} \rho(k, s). \quad (7)$$

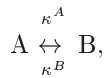
Это уравнение имеет три отличия от уравнения (3). 1) Первый член в правой части умножается не на  $\kappa/(1 - \kappa)$ , а на  $\kappa$ . 2) Второй член дополнительно умножается на  $1 - \kappa$ . 3) В первом члене вместо функции  $1/\Psi(s)$  фигурирует функция  $\psi(s)/\Psi(s)$ . Поскольку коэффициент  $\kappa$  должен быть малым по сравнению с единицей (иначе частицы будут исчезать, не совершив достаточного числа скачков, так что диффузионное уравнение не будет иметь смысла), первые два отличия не играют существенной роли. Если субдиффузия является асимптотической, т. е., если

переменную  $s$  можно считать достаточно малой для того, чтобы в выражении  $\psi(s)/\Psi(s)$  функцию  $\psi(s)$  можно было заменить единицей, то третье отличие также не будет играть существенной роли. Однако на практике субдиффузия, как правило, носит переходный характер, поэтому третье отличие может играть принципиальную роль. В случае переходной диффузии должны учитываться все значения функции  $\psi(s)$ , в том числе и соответствующие большим значениям переменной  $s$ , поэтому замена выражения  $\psi(s)/\Psi(s)$  выражением  $1/\Psi(s)$  будет неправомерной. Это видно, в частности, из того, что при больших значениях переменной  $s$  последнее выражение неограниченно растет, вследствие чего обратный переход к физическому времени в уравнении (3) оказывается невозможным.

**3. ОБРАТИМАЯ РЕАКЦИЯ.  
РАССМОТРЕНИЕ В РАМКАХ МОДЕЛИ  
СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ С  
НЕПРЕРЫВНЫМ ВРЕМЕНЕМ**

В работе [8] рассмотрены только необратимые превращения, происходящие в момент диффузионного скачка. Однако на практике могут встретиться и случаи обратимых превращений. Например, если имеются две близко расположенные поверхности и частицы диффундируют по этим поверхностям, то частицы, находящиеся на одной поверхности, можно считать принадлежащими к одному типу, а находящиеся на другой поверхности — к другому. Химическому превращению будет соответствовать десорбция частиц с одной поверхности и их адсорбция на другой поверхности.

Выведем уравнения, описывающие субдиффузию частиц типов А и В, участвующих в обратимой реакции, идущей по схеме



где  $\kappa^A$  ( $\kappa^B$ ) — вероятность того, что частица типа А(В) в момент скачка превращается в частицу типа В(А). Исходные уравнения запишутся следующим образом:

$$F^A(x, t) = \sum_{x'} \psi(t)\lambda(x - x')\rho^A(x', 0) + \sum_{x'} \int_0^t \psi(t - t')\lambda(x - x') \times [(1 - \kappa^A)F^A(x', t') + \kappa^B F^B(x', t')] dt', \quad (8)$$

$$\rho^A(x, t) = \rho^A(x, 0)\Psi(t) + \int_0^t \Psi(t - t') \times [(1 - \kappa^A)F^A(x, t') + \kappa^B F^B(x, t')] dt', \quad (9)$$

$$F^B(x, t) = \sum_{x'} \psi(t)\lambda(x - x')\rho^B(x', 0) + \sum_{x'} \int_0^t \psi(t - t')\lambda(x - x') \times [(1 - \kappa^B)F^B(x', t') + \kappa^A F^A(x', t')] dt', \quad (10)$$

$$\rho^B(x, t) = \rho^B(x, 0)\Psi(t) + \int_0^t \Psi(t - t') \times [(1 - \kappa^B)F^B(x, t') + \kappa^A F^A(x, t')] dt'. \quad (11)$$

В переменных Фурье–Лапласа эти уравнения имеют следующий вид:

$$F^A(k, s) = \lambda(k)\psi(s) \times [\rho^A(k, 0) + (1 - \kappa^A)F^A(k, s) + \kappa^B F^B(k, s)], \quad (12)$$

$$\rho^A(k, s) = \Psi(s) \times [\rho^A(k, 0) + (1 - \kappa^A)F^A(k, s) + \kappa^B F^B(k, s)], \quad (13)$$

$$F^B(k, s) = \lambda(k)\psi(s) \times [\rho^B(k, 0) + (1 - \kappa^B)F^B(k, s) + \kappa^A F^A(k, s)], \quad (14)$$

$$\rho^B(k, s) = \Psi(s) \times [\rho^B(k, 0) + (1 - \kappa^B)F^B(k, s) + \kappa^A F^A(k, s)]. \quad (15)$$

Суммируя уравнения (13) и (15), получаем

$$\rho^A(k, s) + \rho^B(k, s) = \Psi(s) \times [\rho^A(k, 0) + \rho^B(k, 0) + F^A(k, s) + F^B(k, s)]. \quad (16)$$

Отсюда можно выразить  $F^B(k, s)$ :

$$F^B(k, s) = \frac{\rho^A(k, s) + \rho^B(k, s)}{\Psi(s)} - \rho^A(k, 0) - \rho^B(k, 0) - F^A(k, s). \quad (17)$$

Из уравнений (12) и (13) следует, что

$$F^A(k, s) = \lambda(k) \frac{\psi(s)}{\Psi(s)} \rho^A(k, s). \quad (18)$$

Подставляя соотношения (17) и (18) в (12), получаем

$$\begin{aligned} & \frac{\rho^A(k, s) - \kappa^B \rho^A(k, s) - \kappa^B \rho^B(k, s)}{\Psi(s)} - \\ & - [\rho^A(k, 0) - \kappa^B \rho^A(k, 0) - \kappa^B \rho^B(k, 0)] = \\ & = (1 - \kappa^A - \kappa^B) \lambda(k) \frac{\psi(s)}{\Psi(s)} \rho^A(k, s). \end{aligned} \quad (19)$$

Совершая преобразования и переходя к пределу малых волновых чисел, приходим к уравнению

$$\begin{aligned} & s [\rho^A(k, s) - \kappa^B \rho^A(k, s) - \kappa^B \rho^B(k, s)] - \\ & - [\rho^A(k, 0) - \kappa^B \rho^A(k, 0) - \kappa^B \rho^B(k, 0)] = \\ & = -\frac{k^2 \sigma^2}{2} (1 - \kappa^A - \kappa^B) \frac{\psi(s)}{\Psi(s)} \rho^A(k, s) + \frac{\psi(s)}{\Psi(s)} \times \\ & \times [\kappa^B \rho^B(k, s) - \kappa^A \rho^A(k, s)]. \end{aligned} \quad (20)$$

Сумма концентраций удовлетворяет обычному уравнению субдиффузии:

$$\begin{aligned} & s [\rho^A(k, s) + \rho^B(k, s)] - \rho^A(k, 0) - \rho^B(k, 0) = \\ & = -\frac{k^2 \sigma^2}{2} \frac{\psi(s)}{\Psi(s)} [\rho^A(k, s) + \rho^B(k, s)]. \end{aligned} \quad (21)$$

Комбинируя уравнения (20) и (21), получаем окончательное уравнение для концентрации частиц типа А:

$$\begin{aligned} & s \rho^A(k, s) - \rho^A(k, 0) = -\frac{k^2 \sigma^2}{2} \frac{\psi(s)}{\Psi(s)} \times \\ & \times [\rho^A(k, s) - \kappa^A \rho^A(k, s) + \kappa^B \rho^B(k, s)] + \\ & + \frac{\psi(s)}{\Psi(s)} [\kappa^B \rho^B(k, s) - \kappa^A \rho^A(k, s)]. \end{aligned} \quad (22)$$

В физических переменных это уравнение выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho^A(x, t)}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^t \theta(t - \tau) \times \\ & \times [(1 - \kappa^A) \rho^A(x, \tau) + \kappa^B \rho^B(x, \tau)] d\tau + \\ & + \int_0^t \theta(t - \tau) [\kappa^B \rho^B(x, \tau) - \kappa^A \rho^A(x, \tau)] d\tau, \end{aligned} \quad (23)$$

где  $\theta(t)$  — функция памяти, определяемая в пространстве изображений Лапласа как

$$\theta(s) = \frac{s\psi(s)}{1 - \psi(s)}. \quad (24)$$

Для концентрации частиц типа В будем иметь аналогичное уравнение:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho^B(x, t)}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \times \\ & \times \int_0^t \theta(t - \tau) [(1 - \kappa^B) \rho^B(x, \tau) + \kappa^A \rho^A(x, \tau)] d\tau - \\ & - \int_0^t \theta(t - \tau) [\kappa^B \rho^B(x, \tau) - \kappa^A \rho^A(x, \tau)] d\tau. \end{aligned} \quad (25)$$

Отличительной чертой этих уравнений является наличие перекрестных диффузионных членов. Эти члены будут присутствовать, в том числе и в классическом случае, когда функция распределения времени ожидания является экспоненциальной. Наличие этих членов объясняется тем, что превращения частиц жестко связаны с диффузионными скачками. Скачок частицы типа А дает вклад в диффузионный поток либо частиц типа В, либо частиц типа А, в зависимости от того, происходит в этот момент превращение или нет.

Если в качестве исходных уравнений возьмем уравнения, обобщающие уравнения (1), (2) на случай обратимой реакции:

$$\begin{aligned} & q^A(x, t) = \rho^A(x, 0) \delta(t) + \sum_{x'} \int_0^t \psi(t - t') \lambda(x - x') \times \\ & \times [(1 - \kappa^A) q^A(x', t') + \kappa^B q^B(x', t')] dt', \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} & \rho^A(x, t) = \int_0^t \Psi(t - t') \times \\ & \times [(1 - \kappa^A) q^A(x, t') + \kappa^B q^B(x, t')] dt', \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} & q^B(x, t) = \rho^B(x, 0) \delta(t) + \sum_{x'} \int_0^t \psi(t - t') \lambda(x - x') \times \\ & \times [(1 - \kappa^B) q^B(x', t') + \kappa^A q^A(x', t')] dt', \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} & \rho^B(x, t) = \int_0^t \Psi(t - t') \times \\ & \times [(1 - \kappa^B) q^B(x, t') + \kappa^A q^A(x, t')] dt', \end{aligned} \quad (29)$$

то получим уравнения, не содержащие перекрестных членов. Для концентрации частиц типа А уравнение будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho^A(x, t)}{\partial t} &= \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \times \\ &\times \int_0^t \theta(t - \tau) \rho^A(x, \tau) d\tau + \frac{1}{1 - \kappa^A - \kappa^B} \times \\ &\times \int_0^t \theta_1(t - \tau) [\kappa^B \rho^B(x, \tau) - \kappa^A \rho^A(x, \tau)] d\tau, \end{aligned} \quad (30)$$

где  $\theta_1(t)$  — функция памяти, определяемая в пространстве изображений Лапласа как

$$\theta_1(s) = \frac{s}{1 - \psi(s)}. \quad (31)$$

Для частиц типа В будем иметь аналогичное уравнение. Отсутствие в этих уравнениях перекрестных диффузионных членов еще раз подтверждает тот факт, что уравнения (1), (2) неточны.

#### 4. ОБРАТИМАЯ РЕАКЦИЯ. РАССМОТРЕНИЕ В РАМКАХ МОДЕЛИ СЛУЧАЙНЫХ ЛОВУШЕК

Среднеполевые уравнения, описывающие субдиффузию в рамках модели случайных ловушек, имеют следующий вид [20]:

$$\frac{\partial \rho_i(x, t)}{\partial t} = -\nu_i \rho_i(x, t) + \alpha_i F(x, t), \quad (32)$$

$i = 1, 2, \dots, N,$

$$F(x, t) = \sum_{i=1}^N \nu_i \rho_i(x, t) + \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^N \nu_i \frac{\partial^2 \rho_i(x, t)}{\partial x^2}, \quad (33)$$

$$\sum_{j=1}^N \rho_j(x, t) = \rho(x, t). \quad (34)$$

Здесь  $\rho_i(x, t)$  — парциальная концентрация частиц, находящихся в узлах  $i$ -го типа,  $\nu_i$  — частота, с которой частицы покидают узлы  $i$ -го типа,  $\alpha_i$  — доля узлов  $i$ -го типа,  $N$  — число типов узлов. Функция  $F(x, t)$  имеет смысл числа скачков, совершаемых частицами в единицу времени в единице объема.

Если частицы могут превращаться в момент скачка, то из общего числа частиц типа А, совершающих скачки, некоторая доля  $\kappa^A$  превратится в частицы типа В, а оставшаяся доля завершит скачок в виде частиц типа А. Аналогично, некоторая доля  $\kappa^B$  частиц типа В в момент скачка превратится в частицы типа А. Таким образом, при наличии превращений уравнения для парциальных концентраций частиц типов А и В будут иметь вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i^A(x, t)}{\partial t} &= -\nu_i \rho_i^A(x, t) + \\ &+ \alpha_i [(1 - \kappa^A) F^A(x, t) + \kappa^B F^B(x, t)], \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i^B(x, t)}{\partial t} &= -\nu_i \rho_i^B(x, t) + \\ &+ \alpha_i [(1 - \kappa^B) F^B(x, t) + \kappa^A F^A(x, t)]. \end{aligned} \quad (36)$$

Переходя к изображениям Лапласа, получим

$$\begin{aligned} \rho_i^A(x, s) &= \\ &= \frac{[(1 - \kappa^A) F^A(x, s) + \kappa^B F^B(x, s) + \rho^A(x, 0)] \alpha_i}{s + \nu_i}, \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \rho_i^B(x, s) &= \\ &= \frac{[(1 - \kappa^B) F^B(x, s) + \kappa^A F^A(x, s) + \rho^B(x, 0)] \alpha_i}{s + \nu_i}. \end{aligned} \quad (38)$$

Суммируя эти равенства по  $i$ , выразим выражения в квадратных скобках через общие концентрации:

$$\begin{aligned} (1 - \kappa^A) F^A(x, s) + \kappa^B F^B(x, s) + \rho^A(x, 0) &= \\ &= \frac{\rho^A(x, s)}{\Psi(s)}, \end{aligned} \quad (39)$$

$$\begin{aligned} (1 - \kappa^B) F^B(x, s) + \kappa^A F^A(x, s) + \rho^B(x, 0) &= \\ &= \frac{\rho^B(x, s)}{\Psi(s)}, \end{aligned} \quad (40)$$

где

$$\Psi(s) = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{\nu_i + s}.$$

Подставляя выражение

$$F^A(x, t) = \sum_{i=1}^N \nu_i \rho_i^A(x, t) + \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^N \nu_i \frac{\partial^2 \rho_i^A(x, t)}{\partial x^2}$$

и аналогичное выражение для  $F^B$  в уравнения (35) и суммируя по  $i$ , получим уравнение для общей концентрации частиц типа А:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho^A(x, t)}{\partial t} &= \frac{\sigma^2}{2} (1 - \kappa^A) \sum_{i=1}^N \nu_i \frac{\partial^2 \rho_i^A(x, t)}{\partial x^2} + \\ &+ \frac{\sigma^2}{2} \kappa^B \sum_{i=1}^N \nu_i \frac{\partial^2 \rho_i^B(x, t)}{\partial x^2} - \kappa^A \sum_{i=1}^N \nu_i \rho_i^A(x, t) + \\ &+ \kappa^B \sum_{i=1}^N \nu_i \rho_i^B(x, t). \end{aligned} \quad (41)$$

Переходя в этом уравнении к изображениям Лапласа, подставляя в него выражения (37), (38) и учитывая (39), (40), получим уравнение, совпадающее с уравнением (22).

Таким образом, модель случайных ловушек приводит к тем же уравнениям относительно общих концентраций частиц, что и модель СБНВ. Этот факт может использоваться при практическом численном решении уравнений. В частности, реальную физическую систему, адекватно описываемую моделью СБНВ, можно описывать уравнениями модели случайных ловушек. Использование этих уравнений может быть предпочтительным в связи с тем, что они являются марковскими и поэтому не требуют запоминания больших объемов информации.

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Уравнения с дробными производными, которые обычно используются для описания асимптотической субдиффузии, при их применении к переходной субдиффузии могут давать принципиально неверные результаты. Например, в работе [18] было установлено, что для асимптотической субдиффузии с исчезновением частиц в момент скачка при постоянном притоке частиц в рассматриваемую область стационарный профиль концентрации не существует. В случае переходной субдиффузии стационарный профиль концентраций можно найти из уравнений (35) и (41). При необратимой реакции эти уравнения сводятся к следующим:

$$\nu_i \rho_i(x) - \alpha_i(1 - \kappa)F(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (42)$$

$$(1 - \kappa) \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^N \nu_i \frac{d^2 \rho_i(x)}{dx^2} - \kappa \sum_{i=1}^N \nu_i \rho_i(x) = 0. \quad (43)$$

Из уравнения (42) следует, что парциальные концентрации выражаются через общую концентрацию:

$$\rho_i = \frac{\alpha_i}{\nu_i \xi} \rho, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (44)$$

где

$$\xi = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{\nu_i}$$

— среднее время пребывания частицы в узле. (Переходная и асимптотическая субдиффузии различаются тем, что для первой величина  $\xi$  конечна, а для второй — бесконечна.) Подстановка соотношений (44) в уравнение (43) дает обычное стационарное уравнение диффузии-реакции:

$$\frac{d^2 \rho(x)}{dx^2} = \frac{2\kappa}{\sigma^2(1 - \kappa)} \rho(x). \quad (45)$$

Следовательно, в случае переходной субдиффузии стационарный профиль концентраций существует и выражается формулой

$$\rho(x) = \frac{\xi q}{\sigma} \sqrt{\frac{2}{\kappa(1 - \kappa)}} \exp\left(-\sqrt{\frac{2\kappa}{1 - \kappa}} \frac{x}{\sigma}\right), \quad (46)$$

где  $q$  — поток в точке  $x = 0$ . Этот пример показывает, что уравнения с дробными производными нельзя применять к переходной субдиффузии. Поскольку переходная субдиффузия часто наблюдается в эксперименте (см., например, работу [21] и ссылки в ней), для практических приложений важно иметь уравнения, справедливые как в случае асимптотической субдиффузии, так и в случае переходной субдиффузии.

### ЛИТЕРАТУРА

1. А. Ю. Лоскутов, А. С. Михайлов, *Введение в синергетику*, Наука, Москва (1990).
2. В. В. Учайкин, *ЖЭТФ* **124**, 903 (2003).
3. J.-P. Bouchaud and A. Georges, *Phys. Rep.* **195**, 127 (1990).
4. M. B. Isichenko, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 961 (1992).
5. R. Metzler and J. Klafter, *Phys. Rep.* **339**, 16 (2000).
6. B. I. Henry and S. I. Wearne, *Physica A* **276**, 448 (2000).
7. B. I. Henry and S. I. Wearne, *SIAM J. Appl. Math.* **62**, 870 (2002).
8. B. I. Henry, T. A. M. Langlands, and S. I. Wearne, *Phys. Rev. E* **74**, 031116 (2006).
9. T. A. M. Langlands, B. I. Henry, and S. I. Wearne, *Phys. Rev. E* **77**, 021111 (2008).
10. I. M. Sokolov, M. G. W. Schmidt, and F. Sagues, *Phys. Rev. E* **73**, 031102 (2006).
11. M. G. W. Schmidt, F. Sagues, and I. M. Sokolov, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 06511 (2007).
12. F. Sagues, V. P. Shkilev, and I. M. Sokolov, *Phys. Rev. E* **77**, 032102 (2008).
13. M. O. Vlad and J. Ross, *Phys. Rev. E* **66**, 061908 (2002).
14. A. Yadav and W. Horsthemke, *Phys. Rev. E* **74**, 066118 (2006).
15. В. П. Шкилев, *ЖЭТФ* **135**, 403 (2009).
16. В. П. Шкилев, *ЖЭТФ* **136**, 984 (2009).
17. S. Fedotov, *Phys. Rev. E* **81**, 011117 (2010).
18. G. Hornung, B. Berkowitz, and N. Barkai, *Phys. Rev. E* **72**, 041916 (2005).
19. J. W. Haus and K. W. Kehr, *Phys. Rep.* **150**, 264 (1987).
20. В. П. Шкилев, *ЖЭТФ* **128**, 655 (2005).
21. M. S. Mommer and D. Lebedez, *SIAM J. Appl. Math.* **70**, 112 (2009).