УДК: 519.63; 544.034

ПРИМЕНЕНИЕ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ИСЧИСЛЕНИЯ К ПРОБЛЕМАМ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ И ФОТОНИКИ

А. В. ОРЛОВСКИЙ, д-р физ.-мат. наук, доц. А. В. НОВИЦКИЙ

(Белорусский государственный университет, Минск)

В данной работе рассматривается применение аппарата дробно-дифференциального исчисления к вопросам аномальной диффузии и фотоники. В частности, рассматриваются обобщенные уравнения диффузии для флуоресцирующих молекул красителя, находящихся вблизи наноантенны. Используя решения этих уравнений, была получена зависимость излучаемого системой излучения от времени.

Ключевые слова: *дробные производные; аномальная диффузия; фотоника.*

Введение. В настоящее время дробно-дифференциальный анализ находит применение во многих разделах физики. С его помощью описываются процессы распространения электромагнитных волн в сложных средах [1], релаксационные процессы [2], динамика хаотических систем [2] и др., однако наиболее широкое применение он нашел в теории аномальной диффузии.

Диффузия во многих системах, встречающихся в природе, не может быть описана классическим уравнением диффузии

$$\frac{\partial n(r,t)}{\partial t} = D\Delta n(r,t) \tag{1}$$

фундаментальное решение которого имеет вид

$$n(r,t) = 1/\sqrt{4\pi Dt}\exp\left(-r^2/4Dt\right), \tag{2}$$

где n – концентрация вещества, D – коэффициент диффузии.

Вывод этого уравнения основывается на том, что движение частиц диффундирующего вещества является броуновским, т. е. математически описывается как винеровский процесс. В реальных же системах это предположение может не выполняться, и для описания движения частиц вещества следует использовать другие математические модели. Соответственно, уравнение диффузии уже не будет иметь вид (1), а фундаментальное решение такого уравнения будет существенно отличаться от (2).

Зная закон, по которому в веществе происходит диффузия, можно многое сказать о свойствах этого вещества. В данной работе рассматривается, как с помощью знания закона диффузии флуоресцирующего вещества можно получить зависимость регистрируемой интенсивность его излучения от времени, что в свою очередь ведет к возможности определения различных характеристик излучающего вещества без непосредственного контакта с ним.

Математический аппарат дробно-дифференциального исчисления и его применение в теории аномальной диффузии. Следует отметить, что существует много подходов к обобщению интегралов и производных на дробные порядки, поэтому ниже будут описаны только те из них, что нашли устоявшееся применение в физике [3].

Дробный интеграл Римана-Лиувилля порядка α (произвольное комплексное число, $\Re(\alpha)>0$) определяется как

$$I_{\alpha}^{\alpha} f(x) = 1/\Gamma(\alpha)\int_{\alpha}^{x}(x-\xi)^{\alpha-1} f(\xi)d\xi, \tag{3}$$

где $\Gamma(\alpha)$ – гамма-функция. По определению, $I_{\alpha}^{\alpha} f(x) = f(x)$. Для дальнейших вычислений полезно получить преобразование Лапласа дробного интеграла:

$$\mathcal{L}\left[I_a^{\alpha} f(t)\right] = s^{-\alpha}\mathcal{L}\left[f(t)\right].$$

Общая стратегия для отыскания дробной производной порядка μ заключается в разделении оператора $D^{\mu} \equiv d^{\mu}/dx^{\mu}$ на $D^{\mu} = D^{n} I^{n-\mu}$, либо, $D^{\mu} = I^{n-\mu} D^{n}$ где $n = \lceil \mu \rceil$.

Дробная производная Римана-Лиувилля порядка μ определяется как

$$D_{RL}^{\mu} f(x) = \frac{d^n}{dx^n} I^{n-\mu} f(x) = \frac{d^n}{dx^n}\frac{1}{\Gamma(n-\mu)}\int_{0}^{x}(x-\xi)^{(n-\mu)-1} f(\xi)d\xi. \tag{4}$$

Дробный оператор Лапласа порядка $0<s<1$ можно определить в виде сингулярного интегрального оператора [4]:

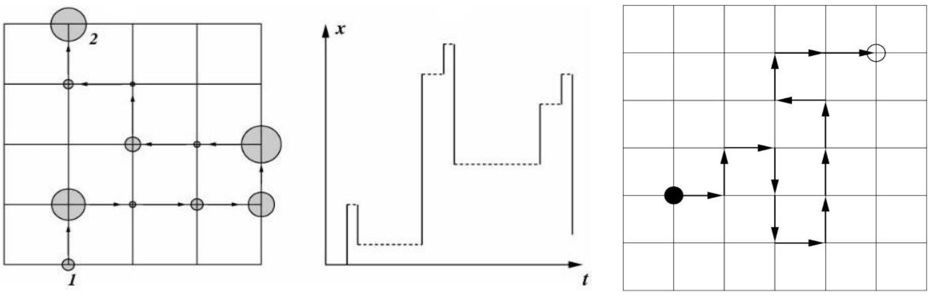
$$(-\Delta)^{8} f(\vec{r}) = c_{d,s} p.\upsilon.\int_{R}\frac{f(\vec{r}+\vec{r}\,')-f(\vec{r}\,')}{|\vec{r}\,'|^{d+2s}}d\vec{r}\,', \tag{5}$$

где $p.\upsilon.$ обозначает интеграл в смысле главного значения по Коши, d – размерность пространства, на котором определена функция $f(\vec{r})$, а

$$c_{d,s} = -4^{s}\Gamma(d/2+s)/\pi^{d/s}\Gamma(-s).$$

Броуновское движение, являющееся классической моделью нормальной диффузии, может быть описано в рамках теории случайного блуждания, согласно которой частица за равные промежутки времени Δt совершает шаги в случайном направлении к ближайшему соседнему узлу решетки, удаленному на расстояние постоянной решетки Δx (рисунок 1). Уравнение такого стохастического процесса имеет следующий вид: $W(x,t+\Delta t)=1/2\left(W(x-\Delta x,t)+W(x+\Delta x,t)\right)$, где $W(x,t)$ – вероятность, что частица окажется в положении *x* в момент *t*. В пределе $\Delta x \to 0$, $\Delta t \to 0$, разлагая в ряд Тейлора, получим классическое уравнение диффузии (1) с фундаментальным решением (2). При таком решении среднеквадратичное смещение частицы линейно зависит от времени: $\left\langle r^2 \right\rangle = 2dDt$, где *d* – размерность пространства.

Модель случайного блуждания с непрерывным временем (CTRW) представляет собой обобщение броуновской модели случайного блуждания и используется для описания явлений аномальной диффузии. Суть этой модели заключается в том, что, в отличие от броуновской модели, время нахождения частицы в узле решетки становится непрерывной случайной величиной. Характерной особенностью такого типа диффузий является степенная зависимость MSD от времени: $\left\langle r^2 \right\rangle \sim t^{\alpha}$, т. е. отличается от броуновской линейной зависимости. Если $0<\alpha<1$, то такой случай называют субдиффузией, а если $\alpha>1$ – супердиффузией.



a *b*

Рисунок 1. – Схематическое изображение классического броуновского движения (*a*) CTRW процесса (*b*) [3]

В [3] было показано, что CTRW процесс может быть описан многими видами дробно-дифференциальных уравнений, в частности,

$$\partial W(x,t)/\partial t = D_t^{1-\alpha} K_{\alpha} \partial^2 W(x,t)/\partial x^2,$$

где $D_t^{1-\alpha}$ – оператор дробной производной Римана-Лиувилля по переменной *t*, K_{α} обобщенный коэффициент диффузии размерности $L^2 T^{-\alpha}$. Его решение выражается через H-функцию Фокса, а среднеквадратичное отклонение координаты зависит от времени как $\left\langle r^2(t) \right\rangle = 2K_{\alpha} t^{\alpha} / \Gamma(1+\alpha)$.

Модифицированные уравнения диффузии, их решения и применение к излучению флуоресцирующих молекул. В статье [5] рассматривается излучения флуоресцирующих молекул красителя, находящихся вблизи наноантенны. Диффузия излучающего вещества при наличии

$$\partial n / \partial t = D\Delta n - \gamma(\vec{r})n, \tag{6}$$

где $\gamma(\vec{r}) = \gamma_0 F(\vec{r})$ – темп затухания, $F(\vec{r})$ – фактор Парселла. В случае сферической симметрии интенсивность регистрируемого излучения равна

$$I(t) = 4\pi\gamma_0 \int_0^\infty F^{rad}(r) n(r,t) dr, \tag{7}$$

где a – радиус излучающей частицы, $F^{rad}(r)$ – радиационный фактор Парселла, причем интенсивность зависит от времени только через $n(r,t)$.

Рассмотрим три обобщения уравнения (6):

$$\partial n(\vec{r},t) / \partial t = \partial / \partial t \int_0^t K(t-t')\left[D\Delta n(\vec{r},t') - \gamma(r) n(\vec{r},t')\right] dt', \tag{8}$$

$$\partial n(\vec{r},t) / \partial t = \partial / \partial t \int_0^t K(t-t') D\Delta n(\vec{r},t') dt' - \gamma(r) n(\vec{r},t), \tag{9}$$

$$\partial n(\vec{r},t) / \partial t = -D\partial / \partial t \int_0^t K(t-t')(-\Delta)^\alpha n(\vec{r},t') dt' - \gamma(r) n(\vec{r},t). \tag{10}$$

1. Можно показать, что решение уравнения (8) имеет вид

$$n(\vec{r},t) = \int_0^\infty \rho(\vec{r},\tau) q(\tau,t) d\tau$$

где $\rho(\vec{r},\tau)$ – решение обыкновенного уравнения диффузии (6), а $q(\tau,t)$ определяется через ее преобразование Лапласа:

$$\tilde{q}(\tau,s) = 1 / s\tilde{K}(s) \exp\left(-\tau / \tilde{K}(s)\right)$$

Подставляя это решение в уравнение (7) получим, что

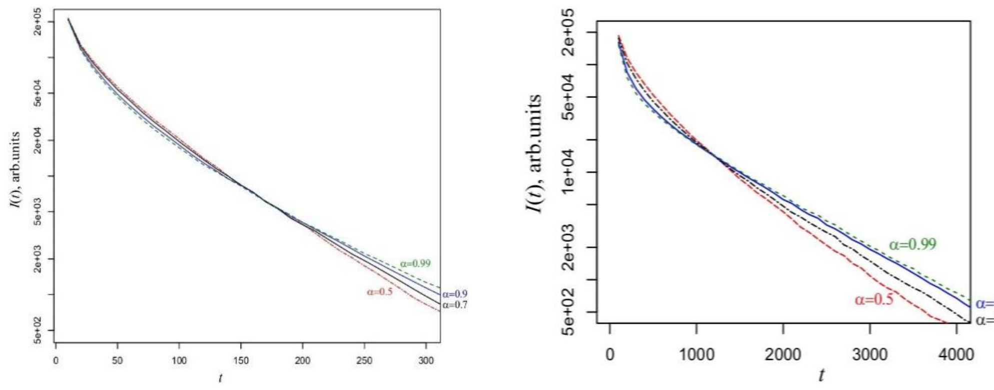
$$I(t) = \int_0^\infty I_{ND}(\tau) q(\tau,t) d\tau, \tag{11}$$

где $I_{ND}(\tau)$ – излучение в случае нормальной диффузии. Если подставить в (11) явный вид функции $q(\tau,t)$, то получим, что $\lim_{t\to\infty} I(t) \sim t^{-\alpha} / \Gamma(1-\alpha)$, т. е. закон затухания из экспоненциального в случае нормальной диффузии переходит в степенной в случае аномальной диффузии.

2. Исследуем уравнение (9) численно при помощи метода, описанного в [6]. Выполняя поиск решения в таком же виде, как и в предыдущем случае, придем к интегро-дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t}=D\Delta\rho(\vec{r},t)-\frac{\gamma(\vec{r})}{\Gamma(1/\alpha-1)}\int_0^t\frac{\rho(\vec{r},t')}{(t-t')^{2-1/\alpha}}dt'$$

Результаты численного решения этого уравнения для двух значений γ_0 представлены на рис. 2.



a *b*

Рисунок 2. – Зависимость испускаемого системой излучения при $\gamma_0=10^{-2}$ **(*a*)** $\gamma_0=10^{-4}$ **(*b*)**

3. Проводя преобразование Лапласа по переменной *t* над уравнением (10), а также учитывая интегральный вид дробного оператора Лапласа (5), придем к уравнению (в случае сферической симметрии)

$$\tilde{n}(r,s)f(r,s)-n(r,0)/\beta(s)=p.\upsilon.\int_{-(r-a)}^{\infty}\left(\tilde{n}(r+r',s)-\tilde{n}(r,s)\right)/r'^{1+\alpha}dr', \qquad (12)$$

где $p.\upsilon.$ означает главное значение интеграла по Коши, $f(r,s)=\left(s+\gamma(r)\right)/\beta(s)$, $\beta(s)=-4\pi c_{3,\alpha}Ds\tilde{K}(s)$. Дискретизируем уравнение (12), учитывая, что $\tilde{n}(r,s)$ определена в области $r\geq\alpha$:

$$\tilde{n}(a+j\Delta r',s)f(a+j\Delta r',s)-\frac{n(a+j\Delta r')}{\beta(s)}=\sum_{i=-j,i\neq0}^{N-j}\frac{\tilde{n}(a+(j+i)\Delta r',s)-\tilde{n}(a+j\Delta r',s)}{|i\Delta r'|^{1+\alpha}}\Delta r' \qquad (13)$$

причем N должно быть достаточно большим, чтобы хорошо аппроксимировать исходный интеграл, а $\Delta r'$ достаточно малым, чтобы исключить влияние слагаемых в окрестности особой точки ($r'=0$) подынтегральной функции; $j\in1,2,...,N$. Решая полученную систему N алгебраических уравнений, получим массив из значений функции $\tilde{n}(r,s)$ в точках разбиения отрезка интегрирования. Беря обратное преобразование Лапласа от каждого члена этого массива и подставляя полученные значения в (7), можно получить искомую интенсивность излучения.

Заключение. В данной работе был проведен анализ применения дробно-дифференциального исчисления к проблемам аномальной диффузии и фотоники. Было рассмотрено три обобщения уравнения диффузии для флуоресцирующих молекул красителя, находящихся вблизи наноантенны, для одного из них получено аналитическое решение, для одного – численное. В качестве продолжения изучения данной тематики можно предложить численное решение уравнения (10) посредством его дискретизации (13).

ЛИТЕРАТУРА

1. Optical Solitons and Vortices in Fractional Media: A Mini-Review of Recent Results / B. A. Malomed // Photonics — 2021. — Vol. 8.
2. Applications of Fractional Calculus in Physics / R. Hilfer // World Scientific. – 2000. – 472 p.
3. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach / Ralf Metzler, Joseph Klafter // Physics Reports. – 2000. – Vol. 339. – P. 1–77.
4. The Fractional Laplacian / Wenxiong Chen // World Scientific Publishing, Singapore 2020. – 344 p.
5. Diffusion-inspired time-varying phosphorescent decay in a nanostructured environment / D. Kislov, D. Novitsky, A. Kadochkin, D. Redka, A. S. Shalin, and P. Ginzburg // Phys. Rev. B. – 2020. – Vol. 101. – P. 035420.
6. Monte Carlo simulation of uncoupled continuous-time random walks yielding a stochastic solution of the space-time fractional diffusion equation / D. Fulger, E. Scalas, G. Germano // Phys. Rev. E. – 2008. – Vol. 77. – P.021122.