

Subdyfuzja w układach membranowych

Tadeusz Kosztołowicz

Institute of Physics, Jan Kochanowski University,
ul. Świętokrzyska 15, 25-406 Kielce, Poland,
tadeusz.kosztolowicz@ujk.edu.pl

Między teorią a zastosowaniami — matematyka w działaniu
Będlewo, 16–22 czerwca 2013 r.

Spis treści

- 1 Pochodne ułamkowe
- 2 Pochodne ułamkowe wykorzystywane w równaniach subdyfuzji
- 3 Dlaczego subdyfuzja jest opisywana przez równania różniczkowe z pochodną ułamkową?
- 4 Równania dyfuzji anomalnej z pochodnymi ułamkowymi
- 5 Numeryczna metoda rozwiązywania równania subdyfuzji
- 6 Subdyfuzja w układzie membranowym
- 7 Czy równania nieliniowe mogą zastąpić równania ułamkowe w opisie subdyfuzji?

Pierwsza próba - różniczka rzędu 1/2

List Leibniza do de l'Hospitala (1695)

$$d^{1/2}x = x\sqrt{dx} : x$$

Przepis na pochodną rzędu ułamkowego (dodatniego)

- Bierzemy wyrażenie związane z pochodną rzędu naturalnego n ,
- zamieniamy $n \rightarrow \alpha$, $\alpha > 0$,
- zamieniamy $n! = \Gamma(1 + n) \rightarrow \Gamma(1 + \alpha)$.

Każdy operator, który zawiera parametr α i który dla $\alpha = n$ odpowiada operatorowi, który charakteryzuje pochodną rzędu n , może być traktowany jako operator pochodnej ułamkowej dodatniego rzędu.

Przepis na pochodną rzędu ułamkowego (ujemnego)

- Pochodna rzędu -1 to całka $\int_a^x f(x)dx$,
- bierzemy wyrażenie związane z powyższą całką i zamieniamy $n \rightarrow \alpha$, $\alpha < 0$,
- zamieniamy $n! = \Gamma(1 + n) \rightarrow \Gamma(1 - \alpha)$.

Każdy operator, który zawiera parametr α i który dla $\alpha = -1$ odpowiada całce oznaczonej, może być traktowany jako operator pochodnej ułamkowej ujemnego rzędu.

Pochodna Lacroix

Klasyczne wyrażenie:

$$\frac{d^n x^m}{dx^n} = \frac{m!}{(m-n)!} x^{m-n}.$$

$$m, n \in \mathbb{N}, m \geq n.$$

Pochodna Lacroix (1819)

$$\frac{d^\alpha x^m}{dx^\alpha} = \frac{\Gamma(1+m)}{(\Gamma(1+m-\alpha))} x^{m-\alpha}.$$

Pochodna Hadamarda

Klasyczne wyrażenie:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k .$$

$$\frac{d^\alpha f(x)}{dx^\alpha} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k!}{(k - \alpha)!} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k .$$

Pochodna Hadamarda (1892)

$$\frac{d^\alpha f(x)}{dx^\alpha} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k + 1)}{\Gamma(k + 1 - \alpha)} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k .$$

Pochodna Fouriera

Klasyczne wyrażenia:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) du \int_{-\infty}^{\infty} \cos[z(x - u)] dz ,$$

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) du \int_{-\infty}^{\infty} z^n \cos[z(x - u) + \frac{1}{2} n\pi] dz ,$$

Pochodna Fouriera (1822)

$$\frac{d^\alpha f(x)}{dx^\alpha} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(u) du \int_{-\infty}^{\infty} z^\alpha \cos[z(x - u) + \frac{1}{2} \alpha\pi] dz .$$

Pochodna Liouville'a

Klasyczne wyrażenie:

$$\frac{d^n \exp(ax)}{dx^n} = a^n \exp(ax).$$

Pochodna Liouville'a (1832)

$$\frac{d^\alpha \exp(ax)}{dx^\alpha} = a^\alpha \exp(ax).$$

Pochodna Grünwalda–Letnikova

$$\frac{df(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t) - f(t - \Delta t)}{\Delta t},$$

uogólniając powyższy wzór na n -tą pochodną otrzymamy

$$\frac{d^n f(t)}{dt^n} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{n!}{k!(n-k)!} f(t - k\Delta t)}{(\Delta t)^n}.$$

Pochodna ułamkowa Grünwalda–Letnikova (1867)

$$\frac{{}_a d^\alpha f(t)}{dt^\alpha} = \lim_{i \rightarrow \infty} \left(\frac{t-a}{i} \right)^{-\alpha} \sum_{k=0}^i (-1)^k \binom{\alpha}{k} f \left(t - k \frac{t-a}{i} \right),$$

gdzie $\binom{\alpha}{k} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{k! \Gamma(\alpha-k+1)}$, $\Delta t = \frac{t-a}{i}$.

Pochodna Grünwalda–Letnikova

Wykorzystując relację $1/\Gamma(-n) = 0$, $n = 0, -1, -2, \dots$ łatwo sprawdzić, że dla $\alpha = n$ powyższe wzory zgadzają się. Dla ujemnego rzędu pochodna definiowana jest wzorem

$$\frac{{}_a d^{-\alpha} f(t)}{dt^{-\alpha}} = \lim_{i \rightarrow \infty} \left(\frac{t-a}{i} \right)^\alpha \sum_{k=0}^i (-1)^k \binom{\tilde{\alpha}}{k} f \left(t - k \frac{t-a}{i} \right),$$

gdzie $\binom{\tilde{\alpha}}{k} = \frac{\alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+k-1)}{k!}$, $\alpha > 0$. Dla $\alpha = 1$, wzór przyjmuje postać całki oznaczonej Riemanna $\frac{d^{-1}f(t)}{dx^{-1}} = \int_a^t f(t') dt'$.

Pochodna Riemanna-Liouville'a

$$\alpha \geq 0$$

$$\frac{{}_a d^\alpha f(t)}{dt^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_a^t (t-t')^{n-\alpha-1} f(t') dt',$$

gdzie n jest najmniejszą liczbą naturalną spełniającą warunek $n \geq \alpha$,

$$\frac{{}_a d^{-\alpha} f(t)}{dt^{-\alpha}} = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^t (t-t')^{\alpha-1} f(t') dt'.$$

Pochodna Riemanna-Liouville'a

Podajmy przykłady ilustrujące własności pochodnych ułamkowych odmienne od pochodnych rzędu naturalnego. I tak np.

$$\frac{{}_a d^\alpha (t-a)^p}{dt^p} = \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-\alpha+1)} (t-a)^{p-\alpha},$$

gdzie $p > -1$. Wzór ten, zastosowany do funkcji stałej, daje

$$\frac{{}_a d^\alpha 1}{dt^p} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} (t-a)^{-\alpha}.$$

Pochodna ułamkowa iloczynu funkcji wyraża się wzorem

$$\frac{{}_a d^\alpha [f(t)g(t)]}{dt^\alpha} = \sum_{i=0}^{\infty} \binom{\alpha}{k} \frac{{}_a d^{\alpha-i} f(t)}{dt^{\alpha-i}} \frac{d^i g(t)}{dt^i}.$$

Pochodna Riemanna-Liouville'a - transformata Laplace'a

$$L\{f(t)\} = \hat{f}(s) = \int_0^{\infty} \exp(-st)f(t)dt ,$$

$$a = 0$$

$$L\left\{\frac{d^{\alpha}f(t)}{dt^{\alpha}}\right\} = s^{\alpha}\hat{f}(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^k \frac{d^{\alpha-k-1}f(t)}{dt^{\alpha-k-1}} \Big|_{t=0} .$$

$$0 < \alpha < 1, |f(t')| \leq A, t' \in [0, t],$$

$$L\left\{\frac{d^{\alpha}f(t)}{dt^{\alpha}}\right\} = s^{\alpha}\hat{f}(s) .$$

$$\frac{d^{\alpha-1}f(t)}{dt^{\alpha-1}} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-t')^{-\alpha} f(t') dt' \leq \frac{A}{\Gamma(1-\alpha)} t^{1-\alpha} .$$

Pochodna Caputo

$$\frac{d_C^\alpha f(t)}{dt^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^t (t-t')^{\alpha-1} \frac{d^n f(t')}{dt'^n} dt' .$$

Związek pomiędzy pochodnymi RL i Caputo wyraża się wzorem

$$\frac{d^\alpha f(t)}{dt^\alpha} = \frac{d_C^\alpha f(t)}{dt^\alpha} + \sum_{k=0}^{n-1} \Phi_{k-\alpha+1}(t) \left. \frac{d^k f(t)}{dt^k} \right|_{t=0} ,$$

gdzie

$$\Phi_{q+1}(t) = \begin{cases} \frac{t^q}{\Gamma(q+1)} , & t > 0 , \\ 0 , & t \leq 0 . \end{cases}$$

Transformata Laplace'a pochodnej Caputo wyraża się wzorem

$$L \left\{ \frac{d_C^\alpha f(t)}{dt^\alpha} \right\} = s^\alpha \hat{f}(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1} \left. \frac{d^k f(t)}{dt^k} \right|_{t=0} .$$

Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids

Harvey Scher

Xerox Webster Research Center, 800 Phillips Road, Webster, New York 14580

Elliott W. Montroll

Institute for Fundamental Studies,* Department of Physics and Astronomy, University of Rochester, Rochester, New York 14627

(Received 13 January 1975)

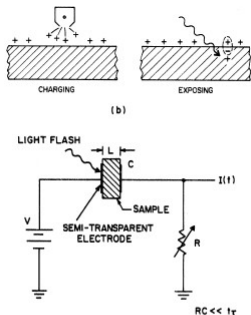


FIG. 1. (a) Initial steps in the xerographic copying process: (1) A high-resistivity photoconductor is charged by a corotron. (2) An absorbed photon creates an electron-hole pair. The electron neutralizes the positive ion on the surface while the hole moves through the photoconductor to neutralize the countercharge on the electrode. The remaining positive ions constitute the latent image. (b) Schematic diagram for a transient photoconductivity measurement. A light flash of duration much shorter than the transit time t_T is absorbed in a depth much less than the sample thickness L . Carriers of one sign move across the sample, inducing a time-dependent current $I(t)$ in the external circuit.

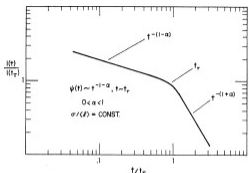
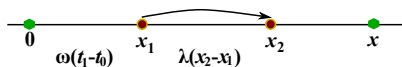


FIG. 7. A $\log I$ - $\log t$ plot indicating the current $I(t)$ associated with a packet of carriers moving, in an electric field, with a hopping-time distribution function $\psi(t) \sim t^{-(1-\alpha)}$, $0 < \alpha < 1$, towards an absorbing barrier at the sample surface.



Green's function

$$G(x, t; x_0) \Delta x = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n}{N}$$

The initial condition

$$G(x, 0; x_0) = \delta(x - x_0) .$$

Funkcja Green'a

$$G_0(x, t; 0) = \int_0^t \phi(t - t') Q(x, t'; 0) dt' ,$$

gdzie $Q(x, t')$ oznacza, że cząsteczka - startując z punktu 0 - przeskoczyła do punktu x po raz ostatni dokładnie w chwili t' , $\phi(t - t')$ jest prawdopodobieństwem tego, że w przedziale czasowym $t - t'$ cząsteczka nie zmieniła swojego położenia.

$$Q(x, t') = \sum_{j=0}^{\infty} \Psi_j(t') n_j(x) ,$$

gdzie $\Psi_j(t')$ jest prawdopodobieństwem zdarzenia, że w przedziale czasowym $(0, t')$ cząsteczka wykona j kroków, $n_j(x)$ - prawdopodobieństwo tego, że dotarcie do punktu x zostanie dokonane także w j krokach.

$$\Psi_j(t) = \int_0^t \omega(t-t')\Psi_{j-1}(t')dt' , \quad \Psi_1(t) = \omega(t) ,$$
$$n_j(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(x-x')n_{j-1}(x')dx' , \quad n_0(x) = \delta(x) .$$

Transformata Fouriera

$$\hat{f}(k) \equiv F\{f(x)\} := \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-kx)f(x)dx$$

$$F\left\{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(x-x')dx'\right\} = \hat{f}(k)\hat{g}(k),$$

Transformata Laplace'a

$$\hat{f}(s) \equiv L\{f(t)\} := \int_0^{\infty} \exp(-st)f(t)dt$$

$$L\left\{\int_0^t f(t)g(t-t')dt'\right\} = \hat{f}(s)\hat{g}(s).$$

$$G(x, t; 0) = \int_0^t \phi(t - t') Q(x, t'; 0) dt' ,$$

$$Q(x, t') = \sum_{j=0}^{\infty} \Psi_j(t') n_j(x) ,$$

$$\Psi_j(t) = \int_0^t \omega(t - t') \Psi_{j-1}(t') dt'$$

$$\Psi_1(t) = \omega(t) ,$$

$$n_j(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(x - x') n_{j-1}(x') dx'$$

$$n_0(x) = \delta(x) ,$$

$$\phi(t) = 1 - \int_0^t \omega(t') dt' = \int_t^{\infty} \omega(t') dt'$$

Po transformatach

$$\hat{G}(k, s; 0) = \hat{\phi}(s) \hat{Q}(k, s) ,$$

$$\hat{Q}(k, s) = \sum_{j=0}^{\infty} \hat{\Psi}_j(s) \hat{n}_j(k)$$

$$\hat{\Psi}_j(s) = \hat{\omega}^j(s)$$

$$\hat{n}_j(k) = \hat{\lambda}^j(k)$$

$$\hat{\phi}(s) = \frac{1 - \hat{\omega}(s)}{s} .$$

Zakładając $\hat{\omega}(s)\hat{\lambda}(k) < 1$ otrzymujemy

$$\hat{Q}(k, s) = \sum_{j=0}^{\infty} [\hat{\omega}(s)\hat{\lambda}(k)]^j = \frac{1}{1 - \hat{\omega}(s)\hat{\lambda}(k)} .$$

$$\hat{G}(k, s; 0) = \frac{1 - \hat{\omega}(s)}{s} \frac{1}{1 - \hat{\omega}(s)\hat{\lambda}(k)} .$$

$$\hat{\omega}(s) = \int_0^{\infty} \exp(-st)\omega(t)dt, \quad \hat{\lambda}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-kx)\lambda(x)dx$$

$$\exp(u) = \sum_{j=0}^{\infty} u^j/j!,$$

$$\langle t^j \rangle = \int_0^{\infty} t^j \omega(t)dt, \quad \langle x^j \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^j \lambda(x)dx,$$

$$\hat{\lambda}(k) = \sum_{j=0}^{\infty} (ik)^j \frac{\langle x^j \rangle}{j!}, \quad \hat{\omega}(s) = \sum_{j=0}^{\infty} (-s)^j \frac{\langle t^j \rangle}{j!}.$$

$$\langle x^2 \rangle = 2\sigma^2 = - \left. \frac{d^2 \hat{\lambda}(k)}{dk^2} \right|_{k=0}, \quad \langle t \rangle = \tau = - \left. \frac{d\hat{\omega}(s)}{ds} \right|_{s=0}.$$

$$\langle x \rangle = 0$$

$$\hat{\omega}(s) \approx 1 - \tau s, \quad \hat{\lambda}(k) \approx 1 - \frac{\sigma^2}{2} k^2,$$

$$D = \frac{\sigma^2}{2\tau}$$

$$\hat{G}(k, s; 0) = \frac{1}{Dk^2 + s}.$$

$$\hat{G}(k, s; 0) = \frac{1}{Dk^2 + s} .$$

Wykorzystując odwrotne transformaty

$$F^{-1}\{\exp(-k^2/(4a))\} = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \exp(-ax^2) ,$$

$$L^{-1}\left\{\frac{1}{s + \beta}\right\} = \exp(-\beta s) ,$$

otrzymamy

$$G(x, t; 0) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} .$$

$$s\hat{G}(k, s; 0) - 1 = -Dk^2\hat{G}(k, s; 0)$$

$$F^{-1}\{-k^2\hat{f}(k)\} = \frac{d^2f(x)}{dx^2}, \quad F^{-1}\{1\} = \delta(x) = G(x, t; 0)|_{t=0},$$

$$L^{-1}\{s\hat{f}(s) - f(0)\} = \frac{df(t)}{dt},$$

$$\frac{\partial G(x, t; 0)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 G(x, t; 0)}{\partial x^2}.$$

$$C(x, t) = \int_A G(x, t; x_0) C(x_0, 0) dx_0.$$

$$G(x, 0; x_0) = \delta(x - x_0)$$

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}.$$

Funkcja Greena dla subdyfuzji

$$\hat{\omega}(s) \approx 1 - \tau_\alpha s^\alpha, \quad \hat{\lambda}(k) \approx 1 - \frac{\sigma^2}{2} k^2,$$

$\langle t \rangle = - \left. \frac{d\hat{\omega}(s)}{ds} \right|_{s=0} = \infty$. $\hat{\omega}(s) = e^{-\tau_\alpha s^\alpha}$, co jest transformatą jednostronnego rozkładu α -stabilnego.

T. Kosztołowicz, J. Phys. A: Math. Gen. 37, 10779 (2004).

$$L^{-1} \left\{ s^\nu e^{-as^\beta} \right\} \equiv f_{\nu,\beta}(t; a) = \frac{1}{t^{1+\nu}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k! \Gamma(-k\beta - \nu)} \left(-\frac{a}{t^\beta} \right)^k,$$

gdzie $a, \beta > 0$.

Wykorzystując wzór $\frac{1}{\Gamma(-u)} = -\frac{\sin(\pi u)\Gamma(1+u)}{\pi}$ zauważymy, że

$$\omega(t) \approx \frac{\tau_\alpha \sin(\pi\alpha)\Gamma(1+\alpha)}{\pi} t^{-(\alpha+1)}.$$

Funkcja Greena dla subdyfuzji

Transformata funkcji Green'a

$$\hat{G}(k, s; 0) = \frac{1}{D_\alpha s^{1-\alpha} k^2 + s},$$

gdzie $D_\alpha = \sigma^2/(2\tau_\alpha)$ jest współczynnikiem subdyfuzji.

Korzystając ze wzorów

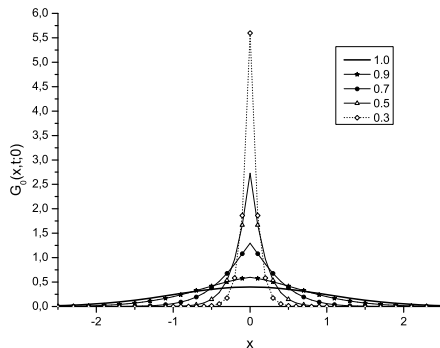
$$F^{-1} \left\{ \frac{1}{k^2 + a^2} \right\} = \frac{1}{2a} e^{-a|x|},$$

$a > 0$,

$$G(x, t; 0) = \frac{1}{2\sqrt{D_\alpha}} f_{\alpha/2-1, \alpha/2} \left(t; \frac{|x|}{\sqrt{D_\alpha}} \right).$$

W przypadku, w którym położenie początkowe x_0 jest dowolne, proces opisany jest przez powyższą funkcję po dokonaniu w niej zamiany $|x| \rightarrow |x - x_0|$.

Funkcja Greena dla subdyfuzji



Rysunek : Funkcje Green'a dla różnych wartości parametru α podanych w tabelce, $\alpha = 1$ odpowiada dyfuzji normalnej, w każdym przypadku $D = 0.001$, $t = 500$.

Równanie subdyfuzji

Równanie subdyfuzji z pochodną Reimanna–Liouville'a

$$s\hat{G}(k, s; 0) - 1 = -D_\alpha s^{1-\alpha} k^2 \hat{G}(k, s; 0).$$

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \tilde{D}_\alpha \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < \alpha < 1.$$

$$L \left\{ \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} C(x, t) \right\} = s^{1-\alpha} \hat{C}(x, s) - \frac{\partial^{-\alpha} C(x, t)}{\partial t^{-\alpha}} \Big|_{t=0}.$$

$$s\hat{C}(x, s) - C(x, 0) = \tilde{D}_\alpha s^{1-\alpha} \frac{\partial^2 \hat{C}(x, s)}{\partial x^2} - \tilde{D}_\alpha \frac{\partial^{-\alpha}}{\partial t^{-\alpha}} \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \Big|_{t=0}.$$

Subdiffusion equations

Równanie subdyfuzji z pochodną Caputo

$$s^\alpha \hat{G}_0(k, s; 0) - s^{\alpha-1} = -D_\alpha k^2 \hat{G}_0(k, s; 0),$$
$$\frac{{}^C \partial^\alpha C(x, t)}{\partial t^\alpha} = \tilde{D}_\alpha \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}, \quad \alpha \in (0, 1),$$

$$L \left\{ \frac{{}^C \partial^\alpha C(x, t)}{\partial t^\alpha} \right\} = s^\alpha \hat{C}(x, s) - s^{\alpha-1} C(x, 0), \quad 0 < \alpha < 1.$$

$$s^\alpha \hat{C}(x, s) - s^{\alpha-1} C(x, 0) = \tilde{D}_\alpha \frac{\partial^2 \hat{C}(x, s)}{\partial x^2}.$$

Dyfuzja anomalna

Średni kwadrat długości przemieszczenia cząsteczki

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle$$

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = D_\alpha t^\alpha,$$

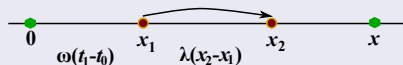
where

- α – parametr dyfuzji anomalnej,
- D_α – współczynnik dyfuzji anomalnej, $[D_\alpha] = m^2 s^{-\alpha}$.

Klasyfikacja dyfuzji α

- $0 < \alpha < 1$ – subdyfuzja,
- $\alpha = 1$ – dyfuzja normalna,
- $\alpha > 1$ – superdyfuzja.

Dyfuzja anomalna i subdyfuzja



$\langle \lambda^2(x) \rangle < \infty$ $\langle \omega(t) \rangle < \infty$	$\langle \lambda^2(x) \rangle < \infty$ $\langle \omega(t) \rangle = \infty$	$\langle \lambda^2(x) \rangle = \infty$ $\langle \omega(t) \rangle < \infty$
dyfuzja normalna	subdyfuzja	superdyfuzja
$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ $\lambda(x) \sim e^{-x^2/2\sigma}$	$\frac{\partial C}{\partial t} = \tilde{D}_\alpha \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ $\lambda(x) \sim e^{-x^2/2\sigma}$	$\frac{\partial C}{\partial t} = D_\beta \frac{\partial^\beta C}{\partial x^\beta}$ $\lambda(x) \sim \sigma^{-\beta} x ^{-1-\beta}$ $ x \gg \sigma, 1 < \beta < 2$
$\omega(t) \sim e^{-t/\tau}$	$\omega(t) \sim \left(\frac{\tau}{t}\right)^{1+\alpha}, t \gg \tau, 0 < \alpha < 1$	$\omega(t) \sim e^{-t/\tau}$

Średni kwadrat długości przemieszczenia $\langle \Delta x^2(t) \rangle$ dla subdyfuzji

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = \frac{2\tilde{D}_\alpha}{\Gamma(1+\alpha)} t^\alpha, \quad \text{for } 0 < \alpha < 1,$$

gdzie

- \tilde{D}_α – współczynnik subdyfuzji,
- $\Gamma(z)$ – funkcja Gamma.

Numeryczne rozwiązanie równania subdyfuzji

$$\frac{{}^C \partial^\alpha f(t)}{\partial t^\alpha} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (\Delta t)^{-\alpha} \sum_{r=0}^{\lfloor \frac{t}{\Delta t} \rfloor} (-1)^r \binom{\alpha}{r} f(t - r\Delta t) - \frac{1}{t^\alpha \Gamma(1-\alpha)} f(0)$$

Rozwiązanie numeryczne

$$\begin{aligned} C(x, t) = & - \sum_{r=1}^L (-1)^r \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2) \cdots [\alpha-(r-1)]}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots r} C(x, t - r\Delta t) + \\ & + \tilde{D}_\alpha \frac{(\Delta t)^\alpha}{(\Delta x)^2} [C(x + \Delta x, t - \Delta t) - 2C(x, t - \Delta t) + \\ & + C(x - \Delta x, t - \Delta t)] + \frac{1}{t^\alpha \Gamma(1-\alpha)} C(x, 0) \end{aligned}$$

Rozwiązanie analityczne

$$\frac{{}^C\partial^\alpha C(x, t)}{\partial t^\alpha} = \tilde{D}_\alpha \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2},$$

rozwiązanie z warunkami brzegowymi

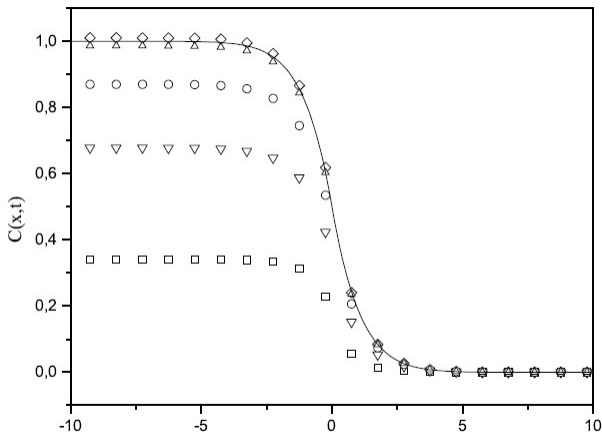
$$C(x, 0) = \begin{cases} C_0, & x < 0, \\ 0, & x \geq 0, \end{cases}$$

jest następujące

$$C(x, t) = \begin{cases} C_0 - \frac{C_0}{\alpha} H_{11}^{10} \left(\frac{(-x)^{2/\alpha}}{\tilde{D}_\alpha^{1/\alpha} t} \middle| \begin{matrix} 1 & 1 \\ 0 & 2/\alpha \end{matrix} \right), & x < 0, \\ \frac{C_0}{\alpha} H_{11}^{10} \left(\frac{x^{2/\alpha}}{\tilde{D}_\alpha^{1/\alpha} t} \middle| \begin{matrix} 1 & 1 \\ 0 & 2/\alpha \end{matrix} \right), & x \geq 0, \end{cases}$$

gdzie H oznacza funkcję Foxa

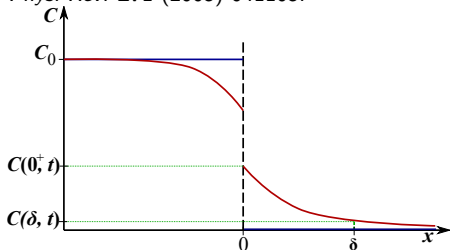
$$H_{11}^{10} \left(\frac{x^{2/\alpha}}{\tilde{D}_\alpha^{1/\alpha} t} \middle| \begin{matrix} 1 & 1 \\ 0 & 2/\alpha \end{matrix} \right) = \frac{2}{\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k! \Gamma(1 - k\alpha/2)} \left(-\frac{x}{\sqrt{\tilde{D}_\alpha} t^{\alpha/2}} \right)^k.$$



Rysunek : The concentration profiles $C(x, t)$ calculated for $\alpha = 0.2$, $\tilde{D}_\alpha = 0.2$, $t_{s,max} = 50$ and with different memory length $L = 50(\diamond)$, $40(\triangle)$, $30(\circ)$, $20(\nabla)$, $10(\square)$ i $5(\times)$; continuous line represents the exact analytical solution. *K.D. Lewandowska, T. Kosztołowicz, Acta Phys. Pol. B 38, 1847 (2007)*

Comparison with the experimental data

T. Kosztołowicz, K. Dworecki, S. Mrówczyński, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 170602, *Phys. Rev. E* **71** (2005) 041105.



The initial condition

$$C_0(x, 0) = \begin{cases} C_0, & x < 0, \\ 0, & x > 0. \end{cases}$$

Near membrane layer

$$C(\delta, t) = \kappa C(0^+, t).$$

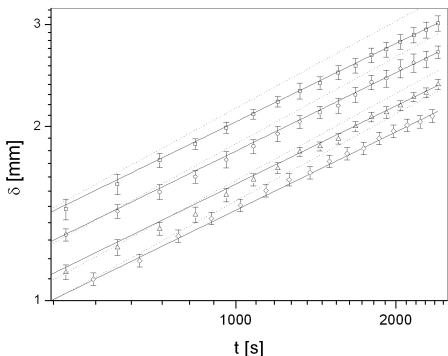
$$C(x, t) = \frac{2C_0}{\alpha} \frac{b_1}{b_1 - b_2} H_{11}^{10} \left(\left(\frac{x}{\sqrt{\tilde{D}_\alpha t^\alpha}} \right)^{2/\alpha} \middle| \begin{matrix} 1 & 1 \\ 0 & 2/\alpha \end{matrix} \right),$$

$$\delta(t) = A(\alpha, \tilde{D}_\alpha, \kappa) t^{\alpha/2}, \quad A(\alpha, \tilde{D}_\alpha, \kappa) = \sqrt{\tilde{D}_\alpha} \left[(H_{11}^{10})^{-1} \left(\frac{\alpha\kappa}{2} \middle| \begin{matrix} 1 & 1 \\ 0 & 2/\alpha \end{matrix} \right) \right]^{\alpha/2},$$

where

$$H_{11}^{10} \left(\frac{a^{1/\beta}}{t} \middle| \begin{matrix} 1 & 1 \\ (1+\nu)/\beta & 1/\beta \end{matrix} \right) = \frac{\beta a^{(1+\nu)/\beta}}{t^{1+\nu}} \sum_{k! \Gamma(-k\beta - \nu)}^{\infty} \frac{1}{k! \Gamma(-k\beta - \nu)} \left(-\frac{a}{t^\beta} \right)^k$$

Comparison with the experimental data



The experimentally measured thickness of near-membrane layer over time $\delta(t)$ for glucose with $\kappa = 0.05(\square)$, $\kappa = 0.08(\circ)$, and $\kappa = 0.12(\triangle)$ and for sucrose with $\kappa = 0.08(\diamond)$ on log-log scale. The solid lines represent function $At^{0.45}$, the dotted lines correspond to the function $At^{0.50}$.

$$\delta(t) = A(\alpha, \tilde{D}_\alpha, \kappa) t^{\alpha/2}$$

$$\delta_E(t) = A_E t^\gamma$$

For glucose

$$A_E = 0.091 \pm 0.004 \quad \text{for} \quad \kappa = 0.05$$

$$\gamma = 0.45$$

$$A_E = 0.081 \pm 0.004 \quad \text{for} \quad \kappa = 0.08$$

$$\gamma = 0.45$$

$$A_E = 0.071 \pm 0.004 \quad \text{for} \quad \kappa = 0.12$$

$$\gamma = 0.45$$

$$\alpha = 0.90$$

$$\tilde{D}_{0.90} = (9.8 \pm 1.0) \times 10^{-4} \text{ mm}^2/\text{s}^{0.90}$$

For sucrose

$$A_E = 0.064 \pm 0.003 \quad \text{for} \quad \kappa = 0.08$$

$$\gamma = 0.45$$

$$\alpha = 0.90$$

$$\tilde{D}_{0.90} = (6.3 \pm 0.9) \times 10^{-4} \text{ mm}^2/\text{s}^{0.90}$$

Układ dwumembranowy

PHYSICAL REVIEW E 86, 021123 (2012)

Subdiffusion in a system with thin membranes

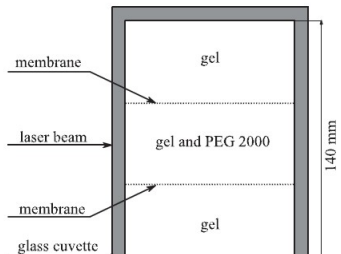
Tadeusz Kosztołowicz* and Kazimierz Dworecki†

Institute of Physics, Jan Kochanowski University, ul. Świętokrzyska 15, 25-406 Kielce, Poland

Katarzyna D. Lewandowska‡

Department of Radiological Informatics and Statistics, Medical University of Gdańsk, ul. Tuwima 15, 80-210 Gdańsk, Poland

(Received 13 June 2012; published 20 August 2012)



Układ dwumembranowy

$$C_M(x,t) = \begin{cases} C_0 \left[1 - \frac{\lambda_1(t)}{1+\lambda_1(t)} f_{-1,\alpha/2} \left(t; \frac{x-x_1}{\sqrt{D_\alpha}} \right) \right], & x \in (x_1, a), \\ C_0, & x \in (a, b), \\ C_0 \left[1 - \frac{\lambda_2(t)}{1+\lambda_2(t)} f_{-1,\alpha/2} \left(t; \frac{x_2-x}{\sqrt{D_\alpha}} \right) \right], & x \in (b, x_2), \end{cases}$$

$$C_2(x,t) = \frac{C_0 \lambda_2(t)}{1 + \lambda_2(t)} f_{-1,\alpha/2} \left(t; \frac{x - x_2}{\sqrt{D_\alpha}} \right).$$

$$C_1(x_1^-, t) = \lambda_1(t) C_M(x_1^+, t),$$

$$C_2(x_2^+, t) = \lambda_2(t) C_M(x_2^-, t),$$

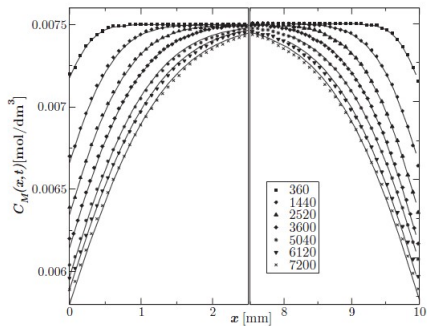
as well as (see the Appendix)

$$J_1(x_1^-, t) = J_M(x_1^+, t),$$

$$J_M(x_2^-, t) = J_2(x_2^+, t),$$

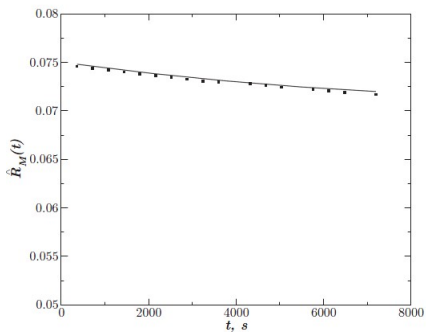
$$\lambda_1(t) = a_1 - b_1 e^{-w_1 t}, \quad \lambda_2(t) = a_2 - b_2 e^{-w_2 t},$$

Układ dwumembranowy



Układ dwumembranowy

$$\dot{R}_M(t) = C_0 A \left[d - \left(\frac{\lambda_1(t)}{1 + \lambda_1(t)} + \frac{\lambda_2(t)}{1 + \lambda_2(t)} \right) \frac{\sqrt{D_\alpha} t^{\alpha/2}}{\Gamma(1 + \alpha/2)} \right].$$



Porównanie rozwiązań

PHYSICAL REVIEW E **86**, 021108 (2012)

First-passage time for subdiffusion: The nonadditive entropy approach versus the fractional model

Tadeusz Kosztołowicz*

Institute of Physics, Jan Kochanowski University, ul. Świętokrzyska 15, 25-406 Kielce, Poland

Katarzyna D. Lewandowska†

Department of Radiological Informatics and Statistics, Medical University of Gdańsk, ul. Tuwima 15, 80-210 Gdańsk, Poland

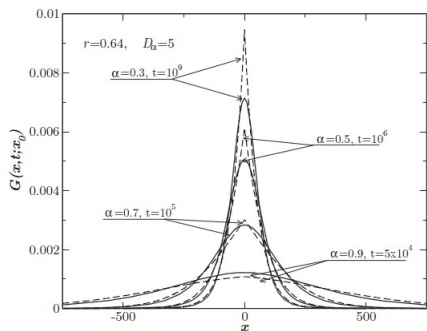
(Received 14 May 2012; published 10 August 2012)

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = Q_i \Psi_i[P] \frac{\partial^2 P^r(x,t)}{\partial^2 x},$$

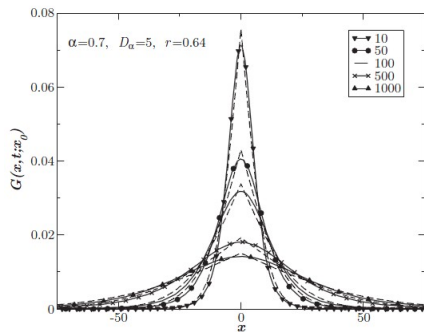
$$\Psi_{SM}[P] = \left(\int P^r dx \right)^{\frac{q-r}{r-1}}$$

Porównanie rozwiązań

$$G_{SM}(x, t; x_0) = \frac{1}{\sqrt{2D_\alpha(3r-1)t^\alpha}|z_r|} \left[\left\{ 1 - \frac{(r-1)(x-x_0)^2}{2D_\alpha(3r-1)t^\alpha} \right\}_+^{\frac{1}{r-1}} \right], \quad (27)$$



Porównanie rozwiązań



$$r = 3.008\alpha^5 - 5.471\alpha^4 + 3.768\alpha^3 - 0.869\alpha^2 + 0.101\alpha + 0.463.$$

$$q = \frac{2}{\alpha} - 1$$