

ГЛАВА V

СЛУЧАЙНЫЕ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ДИФФУЗИИ

Во всех предыдущих главах мы рассматривали *детерминированные* движения частиц; другими словами, знание начального состояния частицы полностью определяло ее дальнейшее движение, т. е. ее координаты в любой последующий момент. Другой важный класс составляют случайные движения частиц под действием случайных импульсов — например, движение молекул диффундирующего вещества под действием случайных толчков молекул среды, в которой происходит диффузия. Здесь принципиально невозможно предсказать движение каждой отдельной частицы, оно допускает только вероятностное описание. Однако замечательно, что если частиц, движущихся случайно и независимо друг от друга, много, то поведение среды из этих частиц, т. е. *диффундирующей среды* *) в целом (а только это, как правило, и представляет основной интерес) может быть предсказано вполне однозначно.

Мы начнем с рассмотрения самой простой схемы случайных перемещений, применяя элементарные понятия теории вероятностей (см., например, ЭПМ, гл. XIII).

§ 1. Простейшая схема блуждания по прямой

Вдоль аллеи, на которой находится ось x , расположено большое число магазинов через равные промежутки h один от другого. Из одного из них, служащего началом отсчета, выбегает дама: она только что услышала, что где-то продают французские зонтики. Наугад выбрав направление вдоль аллеи, она за время τ подбегает к сосед-

*) Отметим, что в процессе диффузии участвуют две среды. Мы примем условно, что одна из них диффундирует, а другая служит как бы базой, опорой, в которой происходит диффузия. Вторую мы не будем исследовать (она для нас имеет только то значение, что влияет на параметры диффузии) и потому всегда, говоря о среде, будем иметь в виду первую. Конечно, такое разделение сред не имеет абсолютного характера, оно возможно, если концентрация первой среды мала.

нему магазину. Услышав, что там французских зонтиков нет, она от волнения полностью забывает, откуда она прибежала, и потому бежит опять наугад в одну из двух сторон. Через время τ она опять получает отрицательный ответ и, вновь потеряв ориентировку, опять наугад выбирает направление дальнейшего пути и т. д. Где она окажется через время $n\tau$? (Для простоты принимаем, что слух был ложным и потому процесс поиска французского зонтика бесконечен *).)

Конечно, точно предсказать это невозможно, можно лишь указать вероятности того, что дама в момент $n\tau$ будет иметь ту или иную координату. Пусть, например, $n=3$. Тогда у дамы имеется $2^3=8$ вариантов движения (рис. 86), которые все равновероятны и потому каждый имеет вероятность $1/8$. Один из этих вариантов (когда на всех трех этапах дама бежит вперед по оси x) приводит в точку $3h$, три — в точку h , три — в точку $(-h)$ и, наконец, один — в точку $(-3h)$. Поэтому вероятности того, что в момент 3τ дама будет иметь такие координаты, равны соответственно $1/8$, $3/8$, $3/8$ и $1/8$.

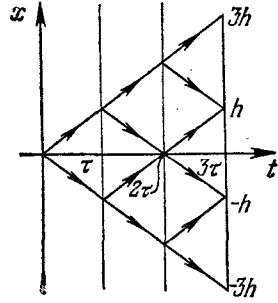


Рис. 86.

Мы предоставляем читателю показать, что при любом $n=1, 2, 3, \dots$ в момент $n\tau$ дама может оказаться в точках $-nh$, $(-n+2)h$, $(-n+4)h, \dots, (-n+2n)h=nh$, причем вероятность того, что она окажется в точке $(-n+2k)h$, равна $\frac{n!}{k!(n-k)!} \cdot 2^{-n}$. (Нетрудно понять, что вычисление этой вероятности равносильно рассмотренному в §§ XIII.2—3 ЭПМ вычислению вероятности выпадения k гербов при n бросаниях монеты. Более подробно: в точку $(-n+2k)h$ при заданном числе шагов n приводит $\frac{n!}{k!(n-k)!}$ вариантов движения, а вероятность каждого варианта равна 2^{-n} .) Эти вероятности служат последовательными членами формального разложения степени $(\frac{1}{2} + \frac{1}{2})^n$ по формуле бинома Ньютона; отсюда, в частности, видно, что их сумма при любом n равна единице, как и должно быть (почему?). Например, $(\frac{1}{2} + \frac{1}{2})^3 = \frac{1}{8} + \frac{3}{8} + \frac{3}{8} + \frac{1}{8}$, что отвечает вероятностям, указанным выше в связи с рис. 86.

Непосредственное применение приведенной формулы удобно лишь для небольших n и k . В дальнейшем мы преобразуем эту

* Для иллюстрации случайных блужданий обычно приводят пример пьяного, который падает каждые несколько шагов и после каждого падения забывает направление, по которому шел (см., например, Ф. Морс и Г. Фешбах, Методы теоретической физики, т. I, ИЛ, 1958, стр. 653). Однако мы избрали иной пример, чтобы лишний раз не напоминать читателю о распространенном пороке.

формулу так, что ее окажется возможным применять и для больших n и k , что существенно, в частности, при рассмотрении множества из большого числа невзаимодействующих дам, блуждающих по оси x . Это позволяет также перейти к простой непрерывной модели рассматриваемого процесса при $h \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$ (причем будет ясно и необходимое соотношение между h и τ), которую можно будет исследовать независимо от ее более громоздкого дискретного первоисточника.

В дальнейшем, чтобы не пугать читателя толпой дам и не соблазнять его звоном монет, мы будем говорить о движении частиц. При этом будет, как всегда, считаться, что частицы не взаимодействуют между собой (по-прежнему, подвергаясь действию случайных сил!), в частности, различные частицы могут иметь одинаковую координату. Пусть в каждый момент $t=0, \tau, 2\tau, \dots$ любая из частиц может иметь любую из координат $0, \pm h, \pm 2h, \dots$, причем если какая-либо частица в момент $n\tau$ имела координату jh , то в момент $(n+1)\tau$ эта частица может с равной вероятностью $1/2$ оказаться либо в точке $(j-1)h$, либо же в точке $(j+1)h$. Можно себе представить, как будто частицы сидят в клетках, каждая из которых расположена на расстоянии h от следующей, причем через каждый промежуток времени τ двери всех клеток раскрываются и каждая из частиц перебегает наугад в одну из двух соседних клеток — *независимо от поведения остальных частиц и независимо от своего предшествующего поведения*. Предсказать поведение каждой отдельной частицы при этом, конечно, невозможно; но каково поведение системы в целом?

Допустим, что число частиц в каждой из точек jh , в которой эти частицы находятся, велико. Тогда очевидно, что с как угодно большой относительной точностью можно утверждать, что половина всех частиц, находящихся в момент $n\tau$ в точке jh , за время τ перейдет по оси x на h вперед и половина — назад. Примем, что этот закон является совершенно точным и обозначим через

$$N_{jn} \quad (j=0, \pm 1, \pm 2, \dots; n=0, 1, 2, \dots) \quad (1)$$

количество частиц в точке jh в момент $n\tau$; тогда мы приходим к соотношению

$$N_{j, n+1} = \frac{1}{2} (N_{j-1, n} + N_{j+1, n}): \quad (2)$$

в последующий момент в любую точку придет половина всех частиц, находящихся в предыдущий момент в ближайшей точке слева, и половина всех частиц, находящихся в ближайшей точке справа.

Основное соотношение (2) дает возможность, зная начальное распределение частиц, т. е. все значения N_{j0} , найти это распределение и во все последующие моменты времени. В самом деле, положив

в этом соотношении $n=0$, мы найдем все значения N_{j1} ; зная эти значения и положив в соотношении (2) $j=1$, мы найдем все значения N_{j2} и т. д. Как известно, соотношения такого типа в математике называются *рекуррентными*.

Процесс построения решения с помощью рекуррентного соотношения (2) легко проиллюстрировать геометрически. Изобразим для наглядности закон начального распределения частиц в виде линии, проходящей через точки $(jh; N_{j0})$ (на рис. 87 это линия $P_0 A_0 \dots Q_0$); это — сложенная начальная плотность системы частиц. Тогда построение значений N_{jh} по формуле (2) равносильно перемещению каждой из упомянутых точек по вертикали на середину хорды, проходящей через две соседние из этих точек. (На рис. 87 показано, как точка B_0 перемещается на середину хорды $A_0 C_0$ и определяет точку B_1 .) Если так проделать со всеми точками начального распределения, мы получим распределение частиц при $t=\tau$ (рис. 87). Затем то же можно проделать с построенными точками и получить значения N_{j2} и т. д. Этот графический метод построения решения называется *методом Шмидта*.

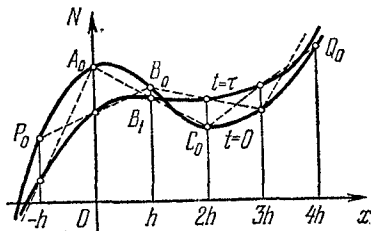


Рис. 87.

На этой иллюстрации хорошо видно свойство выравнивания, определяющее характер изменения распределения частиц с возрастанием времени. Именно, если число частиц в какой-либо точке меньше среднего арифметического значений в соседних точках, то это число возрастает, а если больше — то убывает. Только если на некотором интервале частицы распределены по линейному закону, то во внутренних точках число частиц некоторое время остается неизменным (сколько частиц приходит с одной стороны, столько же уходит в другую), пока этот интервал не «размоет» с краев *).

Нетрудно указать дискретный аналог понятия потока массы, введенного в § 1.6. Так как за время от $n\tau$ до $(n+1)\tau$ интервал от jh до $(j+1)h$ проходит $N_{jn}/2$ частиц в положительном направлении и $N_{j+1,n}/2$ — в отрицательном, то соответствующий поток, который естественно сопоставить точке $x = (j + \frac{1}{2})h$ и моменту $t = (n + \frac{1}{2})\tau$,

*) Впрочем, при рассматриваемой схеме процесса возможная начальная асимметрия между точками с четными и нечетными номерами не выравнивается; это особенно хорошо видно, если все частицы были в начальный момент сосредоточены в одной точке (продумайте это!). Чтобы устранить эту асимметрию, можно усреднить результат по двум соседним точкам, либо рассмотреть схему блужданий, указанную в упражнении, в которой частицы могут не только переходить в соседние точки, но и с определенной вероятностью оставаться на месте.

равен

$$q_{j+\frac{1}{2}, n+\frac{1}{2}} = \frac{m_0}{2} (N_{jn} - N_{j+1, n}) \cdot \frac{1}{\tau}, \quad (3)$$

где m_0 — масса каждой частицы.

Допустим теперь, что значения n и $n - |j|$ велики. (Говоря подробнее, значение n должно быть таким, чтобы «пики» в начальном распределении частиц, если они были, успели рассосаться настолько, что изменение числа частиц за один временной шаг будет существенно меньше характерного значения этого числа. Условие на $n - |j|$ означает, что мы находимся вдалеке от краев расплывающегося по оси x с течением времени «облака» частиц, где потребовалось бы особое рассмотрение. Впредь мы, как правило, не будем приводить подобные уточнения, а будем пользоваться краткими формулировками.) Тогда можно дискретную картину заменить на ее непрерывную модель, введя плотность $\rho = \rho(x, t)$ среды из частиц, причем

$$\rho(x, t) = \frac{m_0}{h} N_{jn} \quad (x = jh, \quad t = n\tau). \quad (4)$$

Из соотношения (3) получаем выражение для потока массы непрерывной среды

$$q(x, t) = \frac{m_0}{2\tau} \frac{h}{m_0} (\rho(x, t) - \rho(x+h, t)) = -\frac{h^2}{2\tau} \rho'_x(x, t) \quad (5)$$

(при этих переходах мы отбрасываем величины высшего порядка малости).

Таким образом, мы получили, что *поток диффундирующей массы прямо пропорционален градиенту плотности и направлен противоположно этому градиенту*, т. е. в сторону убывания плотности, как это и следовало ожидать. Соответствующий коэффициент пропорциональности

$$\kappa = \frac{h^2}{2\tau} \quad (6)$$

называется *коэффициентом диффузии*. Таким образом, можно написать связь между потоком массы и градиентом плотности

$$q = -\kappa \frac{\partial \rho}{\partial x}. \quad (7)$$

Мы приняли выше, что h и τ постоянны, а n и $n - |j|$ увеличиваются. Переход от дискретной схемы к непрерывной можно совершить и другим, в принципе равносильным способом, приняв, что x и t фиксированы, а h и τ стремятся к нулю. (Это тот же способ, каким мы в § XII.1 ЭПМ перешли от системы частиц, связанных пружинками, к непрерывной струне.) Из формулы (6) видно, как при таком переходе должны быть связаны между собой h и τ ; именно, τ должно иметь порядок h^2 (а не h , как могло бы сначала показаться!).

Отсюда вытекает, в частности, интересное следствие. Пусть в начальный момент все частицы были расположены на конечном интервале оси x . Тогда с ростом времени края «облака» частиц расходятся со скоростью $v = \frac{h}{\tau} \propto \frac{h}{h^2} \xrightarrow{h \rightarrow 0} \infty$. Таким образом, в пределе могут найтись частицы, перемещающиеся за единицу времени как угодно далеко. Тем не менее, в § 7 мы увидим, что среднее абсолютное значение приращения координаты частицы за единицу времени остается конечным, так как в условиях, когда направления перемещения случайны, вероятность того, что все эти перемещения будут совершаться в одну сторону, весьма быстро стремится к нулю при $\tau \rightarrow 0$.

Имея выражение (7) для потока массы, можно воспользоваться уравнением неразрывности в форме (I.7.2); мы получаем *уравнение диффузии*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \quad (8)$$

которому должна удовлетворять плотность диффундирующего вещества.

Уравнение (8) играет важную роль в математической физике; оно описывает также процессы, родственные процессу диффузии. Одним из них служит процесс распространения тепла в прямолинейном однородном стержне. В самом деле, пусть $\vartheta = \vartheta(x, t)$ — температура стержня в точке x в момент t . Тогда плотность тепловой энергии Q равна $\rho_Q = c\rho_0\vartheta$, где ρ_0 — массовая линейная плотность стержня, а c — коэффициент теплоемкости, который при небольшом изменении температур можно принять постоянным. С другой стороны, с достаточной точностью оправдывается закон Фурье, согласно которому поток тепловой энергии пропорционален градиенту температуры: $q_Q = -a \frac{\partial \vartheta}{\partial x}$ (ср. с (7)), где коэффициент теплопроводности a также можно считать постоянным. Отсюда, составляя по правилам § I.7 уравнение неразрывности для тепловой энергии, получаем

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-a \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial t} (c\rho_0\vartheta) = 0;$$

вынеся за скобки $-a$ и $c\rho_0$ и обозначив $\kappa = \frac{a}{c\rho_0}$ (в данном рассмотрении κ называется коэффициентом температуропроводности), приходим к тому же уравнению (8) для температуры ϑ . Поэтому уравнение (8) называется также *уравнением теплопроводности*.

Из-за важности уравнения (8) приведем еще один его вывод, исходя непосредственно из рекуррентного соотношения (2). Для этого с помощью равенства (4) перепишем его в виде

$$\rho(x, t + \tau) = \frac{1}{2} [\rho(x - h, t) + \rho(x + h, t)]. \quad (9)$$

Разлагая плотность в ряд Тейлора, получим

$$\rho + \tau \frac{\partial \rho}{\partial t} + \dots = \frac{1}{2} \left(\rho - h \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \dots + \rho + h \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \dots \right)$$

(значения ρ и производных берутся при не сдвинутых значениях аргументов x, t), откуда, приводя подобные члены и отбрасывая величины высшего порядка малости, легко приходим к (8).

Наконец, можно рассуждать следующим образом: перепишем соотношение (2) в виде

$$N_{j, n+1} - N_{jn} = \frac{1}{2} (N_{j-1, n} - 2N_{jn} + N_{j+1, n})$$

или, равносильно,

$$\frac{N_{j, n+1} - N_{jn}}{\tau} = \kappa \frac{N_{j-1, n} - 2N_{jn} + N_{j+1, n}}{h^2} \quad \left(\kappa = \frac{h^2}{2\tau} \right). \quad (10)$$

Левая часть и дробь в правой части служат известными приближенными выражениями для производных 1-го и 2-го порядков (см., например, ЭПМ, § II.2). Заменяя эти приближенные выражения на точные, мы вновь приходим к уравнению (8).

Обратите внимание на размерность коэффициента диффузии $[\kappa] = [l]^2 [t]^{-1}$, которая видна как из его явного выражения (6), так и из самого уравнения (8), так как размерности числителей в обеих частях одинаковы.

Обратно, если мы исходим из уравнения диффузии (8), то соотношение (2) можно рассматривать как конечноразностное приближение этого уравнения. Подобрать шаги h и τ так, чтобы выполнялось равенство (6), можно с помощью соотношений (2) и (4) построить приближенное решение уравнения (8), если задано начальное условие $\rho|_{t=0} = \rho_0(x)$.

Отсюда, в частности, видно, что решения уравнения (8) обладают свойством выравнивания, о котором говорилось при рассмотрении дискретной картины. Впрочем, это свойство нетрудно вывести и непосредственно из уравнения (8). В самом деле, пусть для некоторого t значение $\rho(x, t)$ будет для какого-то x меньше среднего арифметического значения ρ в близких симметричных точках. Тогда график зависимости ρ от x при рассматриваемом t — выпуклый книзу (почему?), а это означает, что $\left. \frac{d^2 \rho}{dx^2} \right|_t = \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} > 0$. Но тогда в силу уравнения (8) будет $\frac{\partial \rho}{\partial t} > 0$, т. е. ρ возрастает. Аналогично проверяем, что если $\rho(x, t)$ больше среднего арифметического значений ρ в близких симметричных точках, то ρ будет убывать. Таким образом, в обоих случаях зависимость ρ от x имеет тенденцию выравнивания либо до константы (так будет, в частности, если рассматривается эволюция среды из частиц суммарной конечной массы на бесконечной оси, так как тогда плотность среды в каждой точке оси стремится к нулю),

либо до линейной зависимости, не сводящейся к константе. В первом случае на рассматриваемом интервале оси x в пределе, при $t \rightarrow \infty$, устанавливается полное статистическое равновесие, при котором поток массы в каждой точке равен нулю. Во втором же случае процесс в пределе переходит в стационарный, для которого плотность и поток в каждой точке не зависят от времени, причем (в одномерном случае, который мы сейчас рассматриваем!) поток одинаков во всех точках. Такая картина получится, если на одном конце интервала частицы поступают с постоянной интенсивностью, тогда как на другом конце частицы удаляются из системы с той же интенсивностью.

Обратите внимание на различие между равновесием и стационарным процессом!

Упражнение

Выведите аналог уравнения диффузии для случая, когда в интервал времени от $n\tau$ до $(n+1)\tau$ любая частица, имевшая координату jh , с вероятностью α переходит в положение $(j-1)h$, с той же вероятностью — в положение $(j+1)h$ и с вероятностью β остается на месте ($2\alpha + \beta = 1$).

§ 2. Общая схема блуждания по прямой

Вернемся к дискретной схеме, с которой мы начали § 1, когда одинаковые частицы в моменты $0, \tau, 2\tau, \dots$ могут находиться в положении $0, \pm h, \pm 2h, \dots$; однако рассмотрим теперь более общий по сравнению с § 1 случай, когда в каждый промежуток времени от $n\tau$ до $(n+1)\tau$ частицы могут сменять любое из этих положений на любое другое (не обязательно соседнее!) с заданными вероятностями *). Как и раньше, эти вероятности для каждой частицы не зависят ни от поведения остальных частиц, ни от состояния всей системы в предшествующие моменты времени, т. е. от предистории. Вероятностные процессы, обладающие последним свойством (отсутствием последействия), называются *марковскими* по имени выдающегося русского математика А. А. Маркова, который их впервые глубоко исследовал. Первое же свойство, очевидно, приводит к возможности применения принципа суперпозиции — при сложении начальных распределений частиц их распределения в любой последующий момент также складываются (свойство линейности).

Обозначим через $P(i, j, n)$ вероятность того, что частица, имевшая в момент $n\tau$ координату ih , перейдет к моменту $(n+1)\tau$ в положение jh . Ясно, что при любых i, n будет

$$\sum_j P(i, j, n) = 1, \quad (1)$$

*) Как будто раз в год ($\tau=1$ году) для «крепостных» — частиц объявляется «Юрьев день», когда они могут по произволу сменить свое «имение» — узловую точку jh на оси x , причем не обязательно на соседнее имение, как в § 1, а на любое другое. Можно представить себе также, что систему через каждый интервал времени τ «встряхивают», в результате чего частицы могут перескакивать из одних «лунок» в другие.