либо до линейной зависимости, не сводящейся к константе. В первом случае на рассматриваемом интервале оси x в пределе, при $t\to\infty$, 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 $0, \tau, 2\tau, \ldots$ могут находиться в положении $0, \pm h, \pm 2h, \ldots$; 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 предыстории. 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

$$\sum_j P(i, j, n) = 1, \tag{1}$$

*) 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.

так как частица обязательно должна где-нибудь оказаться; в остальном вероятности $P(i, j, n)$ могут быть произвольными. Отметим, в частности, что сумма $\sum\limits_i P(i, j, n)$ не обязана равняться единице; она может оказаться большей (меньшей) единицы, если точка jh чем-то привлекательна (непривлекательна) для частиц.

Пусть обозначение N_{jn} имеет тот же смысл, что в § 1; рассмотрим, что произойдет в точке jh на интервале времени от $n\tau$ до $(n+1)\tau$. В начале этого интервала в точке было N_{jn} частиц. На протяжении интервала из этой точки в любую другую точку $ih\,(i\neq j)$ перешло $N_{jn}P(j, i, n)$, обратно же перешло $N_{in}\,P(i, j, n)$ частиц. Таким образом, взамен (1.2) мы получаем рекуррентное соотношение

$$N_{j,n+1}=N_{jn}+\sum_{i\neq j}N_{in}P(i,\ j,\ n)-\left[\sum_{i\neq j}P(j,\ i,\ n)\right]N_{jn}. \qquad (2)$$

Соотношение (2) хорошо показывает баланс частиц, но формально его можно упростить. Для этого воспользуемся равенством (1), переставив в нем буквы i и j. Это даст

$$N_{j,n+1}=N_{jn}+\sum_{i\neq j}N_{in}P(i,\ j,\ n)-[1-P(j,\ j,\ n)]N_{jn}=$$
$$=\sum_i N_{in}P(i,\ j,\ n). \qquad (3)$$

Этот результат тоже ясен, так как любая частица в момент $(n+1)\,\tau$ должна в положение jh откуда-нибудь прийти.

Теперь хорошо видно, что соотношение (1.2) является весьма специальным примером общего соотношения (3), равносильного (2): (1.2) получится, если в (3) положить

$$P(i,\ j,\ n)=\frac{1}{2} \qquad (|i-j|=1),$$
$$P(i,\ j,\ n)=0 \quad \text{(для прочих комбинаций } i,\ j).$$

Как и в § 1, устремляя h и τ к нулю, можно перейти к непрерывной модели рассмотренной дискретной схемы. Если при этом средний пробег частицы за один временной шаг (т. е. «свободный пробег») также стремится к нулю (так будет, например, если $P=P(i-j)$, причем P не зависит от n), то в пределе мы получим уравнение, в котором будут «завязаны» только частицы, находящиеся в бесконечной близости друг от друга, т. е. дифференциальное уравнение — например, уравнение диффузии (1.8). Но если мы обобщаем рассмотрение и, вообще говоря, не требуем, чтобы свободный пробег при переходе к пределу стремился к нулю, то «завязанными» оказываются все частицы, т. е. в предельном соотношении суммы превратятся в интегралы, а не в производные, как выше. (То, что это действительно более общий случай, будет подробно показано в конце параграфа.) Перенеся в соотношении (2) член N_{jn} в левую часть, видим, что непрерывным аналогом этого соотношения будет

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \int K(s,\ x,\ t)\,\rho(s,\ t)\,ds - \left[\int K(x,\ s,\ t)\,ds\right]\rho(x,\ t), \tag{4}$$

где интегрирование распространено по всему интервалу оси x, занятому средой; для простоты можно считать, что интегралы берутся от $-\infty$ до ∞. Таким образом, для неизвестной плотности $\rho(x,\ t)$ среды из диффундирующих частиц получается *интегро-дифференциальное уравнение.*

Смысл *ядра* $K(x,\ s,\ t)$ в уравнении (4) вытекает из самого этого уравнения: $K(x,\ s,\ t)$ равно относительной скорости переноса (плотности вероятности переноса, отнесенной к единице времени) в момент t частиц из положения x в положение s. Точнее говоря, вероятность того, что частица, которая в момент t находилась в положении x, в момент $t+dt$ окажется на интервале от s до $s+ds\,(s\neq x)$, равна $K(x,\ s,\ t)\,ds\,dt$. Ядро $K\geqslant 0$ может быть, вообще говоря, произвольным: его размерность $[K]=[l]^{-1}[t]^{-1}$.

Впредь мы будем для простоты считать рассматриваемую систему автономной, другими словами, считать, что ядро K не зависит от t. Не представляет труда проследить, какие из получающихся результатов немедленно распространяются на неавтономные системы.

Два интеграла в правой части (4) можно объединить, что дает возможность формально упростить уравнение. Для этого надо обозначить

$$K_1(s,\ x) = K(s,\ x) - \delta(x-s)\int K(x,\ s_1)\,ds_1. \tag{5}$$

Мы предоставляем читателю проверить, что ядро K_1 удовлетворяет соотношению $\int K_1(s,\ x)\,dx=0$ и что с помощью этого ядра уравнение (4) можно переписать в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \int K_1(s,\ x)\,\rho(s,\ t)\,ds.$$

Однако мы будем впредь пользоваться ядром K, имеющим более наглядный смысл, чем K_1.

Физические предположения о рассматриваемой системе можно выразить в виде требований на ядро K. Так, если среда, в которой происходит диффузия, однородная, так что условия диффузии одинаковы во всех точках оси x, то ядро $K(x,\ s)$ не меняется при добавлении к x и s одной и той же постоянной; другими словами, тогда $K=K(x-s)$. Если среда не только однородна, но и изотропна, то $K(x-s)\equiv K(s-x)$, другими словами, $K=K(|x-s|)$.

Получим выражение для потока диффундирующей массы в какой-либо точке x в момент t. Для этого надо просуммировать всю массу, переносимую за единицу времени из левой по отношению к x полуоси в правую, и из результата вычесть массу, переносимую в обратном направлении. Получится

$$q(x,t)=\int_{-\infty}^{x} d\xi \int_{x}^{\infty} K(\xi, s)\,\rho(\xi, t)\,ds-\int_{x}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{x} K(\xi, s)\,\rho(\xi, t)\,ds. \qquad (6)$$

Мы предоставляем читателю проверить, что соответствующее уравнение неразрывности (I.7.2) совпадает с уравнением (4); это естественно, так как условие сохранения массы каждой порции частиц в процессе эволюции было заложено в вывод этого уравнения.

Перейдем теперь к рассмотрению важного специального случая, о котором мы упомянули при выводе уравнения (4),— случая, когда свободный пробег частиц мал (по сравнению с характерным интервалом изменения решения). Это означает, что ядро $K(x, s)$ при любом фиксированном x отлично от нуля лишь при s, близких к x, или, во всяком случае, достаточно быстро стремится к нулю при возрастании $|s-x|$ (мы уточним это требование в конце параграфа). В этом случае основной вклад интегралов в (4) совершается по интервалу s, близкому к x, и потому можно воспользоваться разложением в ряд Тейлора

$$\rho(s, t)=\rho(x, t)+(s-x)\,\rho'_x(x, t)+\frac{(s-x)^2}{2}\,\rho''_{xx}(x, t)+\ldots \qquad (7)$$

Кроме того, будем требовать, чтобы среда, в которой происходит диффузия, была однородной и изотропной, т. е. чтобы $K=K(|s-x|)$.

Мы сейчас покажем, что в рассматриваемом специальном случае, независимо от конкретного вида ядра K, плотность ρ удовлетворяет уравнению диффузии (1.8). Это можно сделать, либо непосредственно исходя из общего уравнения (4), либо воспользовавшись выражением (6) для потока массы.

Пойдем сначала по первому пути и подставим разложение (7) в первый интеграл правой части (4); мы получим

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\int K(|x-s|)\,ds\cdot\rho+\int K(|x-s|)\,(s-x)\,ds\cdot\frac{\partial\rho}{\partial x}+$$
$$+\int K(|x-s|)\,\frac{(s-x)^2}{2}\,ds\,\frac{\partial^2\rho}{\partial x^2}+\ldots-\int K(|s-x|)\,ds\cdot\rho. \qquad (8)$$

Первый и последний из выписанных интегралов взаимно уничтожаются, тогда как второй, как интеграл от нечетной относительно $s-x$ функции по симметричному интервалу интегрирования, равен нулю. Обозначая

$$\int K(|x-s|)\,\frac{(s-x)^2}{2}\,ds=\int_0^{\infty} K(\xi)\,\xi^2\,d\xi=\varkappa \qquad (9)$$

и отбрасывая члены высшего порядка малости, мы приходим к уравнению (1.8). В формуле (9) можно воспользоваться и ядром K_1 (см. (5)), взамен K, так как $\int_0^\infty K_1\xi^2\,d\xi = \int_0^\infty K\xi^2\,d\xi$ (почему?).

Чтобы применить второй способ, разложим в выражении (6) для потока массы плотность $\rho(\xi, t)$ в ряд по степеням $\xi - x$, учитывая, что в каждом из интегралов (6) основной вклад дают значения, близкие $\xi = x$, $s = x$ (почему?). Мы получим

$$q = \int_{-\infty}^{x} d\xi \int_{x}^{\infty} K(|\xi - s|)\,ds\cdot\rho + \int_{-\infty}^{x} d\xi \int_{x}^{\infty} K(|\xi - s|)(\xi - x)\,ds\cdot\frac{\partial\rho}{\partial x} + \ldots$$

$$\ldots - \int_{x}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{x} K(|\xi - s|)\,ds\cdot\rho - \int_{x}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{x} K(|\xi - s|)(\xi - x)\,ds\cdot\frac{\partial\rho}{\partial x} - \ldots \quad (10)$$

Первые интегралы в первой и второй строках взаимно уничтожатся, если во втором из них поменять обозначения ξ на s и обратно. Остальные два интеграла после такого преобразования объединяются в интеграл

$$\int_{-\infty}^{x} d\xi \int_{x}^{\infty} K(|\xi - s|)(\xi - s)\,ds = \left|\begin{matrix} \xi = x - \xi_1 \\ s = x + s_1 \end{matrix}\right| =$$

$$= -\int_0^\infty ds \int_0^\infty K(|\xi_1 + s_1|)(\xi_1 + s_1)\,d\xi_1.$$

Если во внутреннем интеграле сделать замену $\xi_1 + s_1 = \xi$, а затем переставить порядок интегрирования, мы получим (проверяйте вычисления!)

$$-\int_0^\infty ds_1 \int_{s_1}^\infty K(\xi)\,\xi\,d\xi = -\int_0^\infty d\xi \int_0^\xi K(\xi)\,\xi\,ds = -\int_0^\infty \xi^2 K(\xi)\,d\xi.$$

Получился в точности интеграл (9). Поэтому, отбрасывая в правой части (10) члены высшего порядка малости, обозначенные многоточиями, мы приходим к выражению (1.7) для потока массы, откуда уравнение диффузии (1.8) получается с помощью стандартного применения уравнения неразрывности (I.7.2).

Остановимся еще на вопросе о скорости убывания ядра $K(\xi)$ при росте ξ. Уже из самой формулировки исходной задачи (см. уравнение (4)) вытекает, что интеграл $\int_0^\infty K(\xi)\,d\xi$ должен быть сходящимся. Для перехода к уравнению диффузии требуется уже, чтобы сходился и интеграл $\int_0^\infty K(\xi)\,\xi^2\,d\xi$. Это требование сходимости проистекает из того, что в разложении (7) функции ρ в ряд Тейлора мы воспользовались членом со второй производной.

Но, конечно, одной лишь сходимости подобных интегралов недостаточно, нужно, чтобы основные значения ядра $K(\xi)$ были сосредоточены вблизи точки $\xi=0$. Что это означает? Если продолжить разложение (8), то член с третьей производной отпадет, но член с $\frac{\partial^4\rho}{\partial x^4}$ останется. И чтобы можно было его отбросить, должно быть

$$2\int_0^\infty K(\xi)\frac{\xi^4}{4!}d\xi\cdot\left|\frac{\partial^4\rho}{\partial x^4}\right| \ll 2\int_0^\infty K(\xi)\frac{\xi^2}{2}d\xi\cdot\left|\frac{\partial^2\rho}{\partial x^2}\right|. \qquad (11)$$

Пусть для функции ρ характерный интервал изменения $\Delta x=L$, а характерный диапазон изменения на этом интервале $\Delta\rho=R$. Тогда можно принять, что последовательные производные от ρ по x имеют порядки $\frac{R}{L}$, $\frac{R}{L^2}$ и т. д. Поэтому, отвлекаясь от числовых коэффициентов, можно переписать условие (11) в виде

$$\int_0^\infty K(\xi)\,\xi^4\,d\xi \ll L^2\int_0^\infty K(\xi)\,\xi^2\,d\xi.$$

Это и есть условие возможности перехода к уравнению диффузии. Как видим, оно связывает ядро K с характерным интервалом изменения плотности. Таким образом, одно и то же ядро может в задачах со сравнительно большим характерным интервалом изменения плотности приводить к уравнению диффузии, а в других задачах, для которых этот интервал мал,— к более сложному интегро-дифференциальному уравнению.

Упражнения

1. Вычислите коэффициент диффузии для ядер $K(x, s)=A\delta(|x-s|-h)$; $Ae(h-|x-s|)$ (e — единичная функция); $A\exp[-|x-s|/h]$; $A\exp[-(x-s)^2/h^2]$ (A, $h>0$).

2. Пусть $K(x, s)\equiv A\delta(x-s)$. Выпишите уравнение (4), его решение при заданном начальном условии $\rho|_{t=0}=\rho_0(x)$ и истолкуйте результат.

3. То же для $K(x, s)\equiv A\delta'(x-s)$.

4. Выпишите уравнение (4) для $K(x, s)\equiv A\delta''(x-s)$ и рассмотрите отличие результата от результата упражнения 2 на основе формулы (7).

5. Пусть $K(x, s)=\frac{1}{2\tau}\delta(|x-s|-h)$ (h, $\tau>0$), а уравнение (4) решается приближенно, с помощью замены $\frac{\partial\rho}{\partial t}$ на $\frac{\rho(x, t+\tau)-\rho(x, t)}{\tau}$. Покажите, что тогда мы приходим к ситуации, рассмотренной в § 1.

6. Пусть $K(x, s)\equiv K(|x-s|)=K(|\xi|)$ ($\xi=x-s$); тогда и $K_1(x, s)=K_1(|\xi|)$. Выразите $\int_{-\infty}^{\infty}\xi^n K_1(|\xi|)\,d\xi$ ($n=0, 1, 2, \ldots$) через аналогичный интеграл для K.