

§ 3. Диффузия на плоскости и в пространстве

Здесь мы распространим результаты §§ 1 и 2 на плоские и пространственные движения частиц; мы более подробно разберем плоские движения, так как пространственные рассматриваются совершенно аналогично.

Рассмотрим сначала простейшую дискретную схему. Пусть частицы в каждый момент $0, \tau, 2\tau, \dots$ могут находиться в любой из точек с координатами $x=jh, y=kh$ ($j, k=0, \pm 1, \pm 2, \dots$), т. е. узловых точек квадратной сетки с шагом h , причем за промежуток времени от $n\tau$ до $(n+1)\tau$ любая такая частица может с равной вероятностью $1/4$ перейти в любую из четырех соседних узловых точек (рис. 88), т. е. точек с координатами $((j-1)h; kh), (jh; (k+1)h), ((j+1)h; kh), (jh; (k-1)h)$. Тогда, если обозначить через N_{jkn} число частиц в точке $(jh; kh)$ в момент $n\tau$ (которое предполагается большим), то аналогично (1.2) мы приходим к соотношению

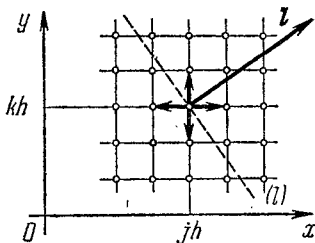


Рис. 88.

$$N_{jkn+1} = \frac{1}{4} (N_{j-1, kn} + N_{j, k+1, n} + N_{j+1, kn} + N_{j, k-1, n}). \quad (1)$$

С помощью этого рекуррентного соотношения можно, зная начальное распределение частиц N_{jk0} и полагая в (1) $n=0, 1, 2, \dots$, найти последовательно все значения N_{jk1} , затем все значения N_{jk2} и т. д., т. е. распределение частиц в последовательные узловые моменты времени.

Как и в § 1, если значения $|j|, |k|, n$ велики (или, что то же, если изменения величин N_{jkn} за пространственный или временной шаг относительно малы), то можно перейти к непрерывным переменным. Для этого введем плотность $\rho(x, y, t)$ среды из частиц, так что

$$\rho(x, y, t) = \frac{m_0}{h^2} N_{jkn} \quad (x = jh, y = kh, t = n\tau).$$

Тогда уравнение (1) можно переписать в виде

$$\rho(x, y, t + \tau) = \frac{1}{4} [\rho(x-h, y, t) + \rho(x, y+h, t) + \rho(x+h, y, t) + \rho(x, y-h, t)].$$

Применение формулы Тейлора дает

$$\rho(x, y, t) + \tau \frac{\partial \rho}{\partial t} + \dots = \frac{1}{4} \left(4\rho + h^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + h^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + \dots \right), \quad (2)$$

откуда после приведения подобных членов и отбрасывания членов высшего порядка малости приходим к уравнению диффузии (уравнению теплопроводности) на плоскости

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} \right); \quad (3)$$

здесь коэффициент диффузии $\kappa = h^2/4\tau$.

В правой части уравнения (3) получился лапласиан $\nabla^2 \rho$, инвариантный относительно выбора направления осей координат. Интересно, что эта инвариантность (изотропность) не была заложена в постановку задачи, где направления осей сетки были выделенными. Для изотропности было существенно, что мы в правой части разложения (2) удержали только члены второго порядка и тогда получилось уравнение диффузии, для которого выделенность осей не играет роли; в конечном счете здесь причина в том, что линия второго порядка с равными d в u и m главными осями есть окружность, у которой в s и e оси равны. Если бы мы уточнили уравнение (3), удержав в разложении (2) дальнейшие члены (например, 4-го порядка), то такой изотропии уже не было бы, и после поворота осей, скажем, на 45° уточненное дифференциальное уравнение не осталось бы инвариантным.

Приведем еще один вывод уравнения диффузии, основанный на применении понятия потока массы при плоском движении (§ 1.6). Для этого заметим, что поток массы между соседними узлами $(jh; kh)$ и $((j+1)h, kh)$ равен

$$\frac{m_0}{\tau} \cdot \frac{1}{4} (N_{jkn} - N_{j+1, kn}) = \frac{h^2}{4\tau} [\rho(x, y, t) - \rho(x+h, y, t)] = -\frac{h^3}{4\tau} \frac{\partial \rho}{\partial x}$$

(с точностью до членов высшего порядка малости). Поэтому если на плоскости x, y проведена линия (l) с ортом внешней нормали \mathbf{l} (см. рис. 88), то на единицу длины этой линии приходится $\cos(\widehat{\mathbf{l}, x}) h^{-1}$ горизонтальных слоев сетки, по которым через (l) проходит

$$-\frac{h^3}{4\tau} \frac{\partial \rho}{\partial x} \cos(\widehat{\mathbf{l}, x}) h^{-1} = -\frac{h^2}{4\tau} \frac{\partial \rho}{\partial x} \cos(\widehat{\mathbf{l}, x})$$

единиц массы в единицу времени. Аналогично рассматривается движение массы по вертикальным слоям; в сумме получим, что через единицу длины линии (l) проходит в положительном направлении

$$-\frac{h^2}{4\tau} \left[\frac{\partial \rho}{\partial x} \cos(\widehat{\mathbf{l}, x}) + \frac{\partial \rho}{\partial y} \cos(\widehat{\mathbf{l}, y}) \right]$$

единиц массы среды из частиц в единицу времени. Это выражение можно переписать в виде

$$-\frac{h^2}{4\tau} \text{grad } \rho \cdot \mathbf{l};$$

поэтому, применяя обозначения § 1.6, наше утверждение можно записать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{4\tau} \text{grad } \rho \cdot d\mathbf{l} = \frac{d^2m}{dt}.$$

Сравнивая эту формулу с (1.6.2), получим выражение для вектора потока массы диффундирующих частиц

$$\mathbf{q}(x, y, t) = -\frac{\hbar^2}{4\tau} \text{grad } \rho.$$

Отсюда можно стандартным образом написать уравнение неразрывности для массы (§ 1.8):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div } \mathbf{q} = \frac{\hbar^2}{4\tau} \text{div grad } \rho = \frac{\hbar^2}{4\tau} \nabla^2 \rho.$$

Мы вновь пришли к уравнению (3).

При движении частиц в пространстве уравнение диффузии имеет вид, аналогичный (3), но с трехмерным лапласианом; коэффициент диффузии при этом равен $\kappa = \frac{\hbar^2}{6\tau}$.

Аналогом общего уравнения (2.4) распространения частиц при плоском или пространственном движениях служит интегро-дифференциальное уравнение

$$\rho'_t(P, t) = \int_{(H)} K(Q, P, t) \rho(Q, t) d_Q H - \left[\int_{(H)} K(P, Q, t) d_Q H \right] \rho(P, t), \quad (4)$$

где P, Q — произвольные текущие точки области (H) , занятой средой из диффундирующих частиц, а индекс при дифференциале указывает на то, что интегрирование идет по точке Q при фиксированной P . Смысл ядра K тот же, что в § 2.

Если среда, в которой происходит диффузия, является однородной, то ядро $\overline{K}(P, Q, t)$ зависит не от «разрозненных» точек P и Q , а от вектора \overline{PQ} ; если среда к тому же изотропная, то ядро K зависит от единственной геометрической скалярной величины — расстояния PQ (и, быть может, от времени t).

Чтобы ввести для рассматриваемой системы понятие потока массы (§ 1.6), надо принять то или иное допущение (рабочую гипотезу), позволяющее судить, пересечет ли частица, перешедшая за время dt из положения A в положение B , мысленно выделенную площадку $(d\sigma)$ или нет.

В однородном изотропном случае естественно принять, что такое пересечение состоится, если отрезок AB пересекается с $(d\sigma)$. Для подсчета потока массы частиц при таком допущении вычислим сначала, какая доля всех частиц, расположенных в некоторой точке

Q , пройдет за время dt через малую ориентированную площадку $(d\sigma)$, расположенную в какой-либо другой точке P . Обозначив $\overrightarrow{PQ} = \mathbf{r}$ и разбив часть пространства, затененную площадкой $(d\sigma)$ при источнике света в Q , сферами с центром в Q и радиусами s ($r \leq s < \infty$) на кусочки, получаем, что искомая доля равна

$$\int_r^\infty d\sigma \cdot \cos(\widehat{\overrightarrow{QP}, d\sigma}) \frac{s^2}{r^2} K(s) ds dt = - \left(\frac{1}{r^3} \int_r^\infty s^2 K(s) ds \right) \mathbf{r} \cdot d\sigma dt.$$

Суммируя все источники частиц, получаем, что баланс частиц, прошедших через $(d\sigma)$ за время dt в положительном направлении, будет равен

$$- \int_{(H)} \left[\left(\frac{1}{r^3} \int_r^\infty s^2 K(s) ds \right) \mathbf{r} \cdot d\sigma dt \right] \rho(Q, t) d_Q H.$$

Сравнивая этот результат с формулой (1.6.2), получаем выражение потока массы диффундирующих частиц в точке P :

$$\mathbf{q}(P, t) = - \int_{(H)} \left(\frac{1}{r^3} \int_r^\infty s^2 K(s) ds \right) \mathbf{r} \rho(Q, t) d_Q H \quad (\mathbf{r} = \overrightarrow{PQ}). \quad (5)$$

Предположим теперь дополнительно, что пробег частиц мал по сравнению с характерным интервалом изменения плотности ρ , так что можно воспользоваться разложением в ряд Тейлора

$$\rho(Q, t) = \rho(P, t) + \text{grad } \rho \cdot \mathbf{r} + \dots \quad (6)$$

$$(\text{grad } \rho = \rho'_x(P, t) \mathbf{i} + \dots).$$

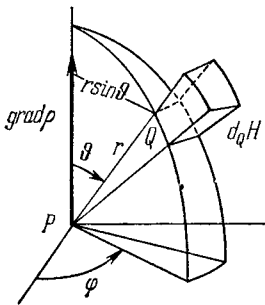


Рис. 89.

Можно заранее, из соображения инвариантности потока относительно выбора декартовых осей заключить, что если ограничиться производными 1-го порядка, то поток должен быть пропорционален $\text{grad } \rho$ — единственному, с точностью до скалярного множителя, вектору, выражающемуся через производные 1-го порядка и инвариантному относительно выбора декартовых осей. Мы получим тот же факт из формулы (5); это даст возможность выразить коэффициент пропорциональности между \mathbf{q} и $\text{grad } \rho$ через ядро K .

Если подставить разложение (6) в правую часть (5), то интеграл от первого слагаемого будет равен нулю (члены с \mathbf{r} и с $-\mathbf{r}$ взаимно уничтожаются) и остается, с точностью до малых высшего порядка,

$$\mathbf{q}(P, t) = - \int_{(H)} \left(\frac{1}{r^3} \int_r^\infty s^2 K(s) ds \right) (\text{grad } \rho \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r} d_Q H,$$

причем за область (H) нужно взять все пространство, так как влияние далеких его частей на точку P несущественно. Чтобы вычислить последний интеграл, перейдем к *сферическим координатам* r, ϑ, φ с центром P и осью, параллельной $\text{grad } \rho$ (рис. 89). Тогда из рисунка видно, что

$$\text{grad } \rho \cdot \mathbf{r} = |\text{grad } \rho| r \cos \vartheta, \quad d_Q H = r d\vartheta \cdot dr \cdot (r \sin \vartheta) d\varphi,$$

т. е.

$$q(P, t) = - \int_0^{2\pi} d\vartheta \int_0^{\pi} d\vartheta \int_0^{\infty} \sin \vartheta \cos \vartheta \left(\int_r^{\infty} s^2 K(s) ds \right) r dr |\text{grad } \rho|.$$

В этом интеграле проекции вектора \mathbf{r} на плоскость, перпендикулярную $\text{grad } \rho$, взаимно уничтожаются, поэтому вместо $\mathbf{r} |\text{grad } \rho|$ можно поставить

$$r \cos \vartheta (\text{grad } \rho)^0 |\text{grad } \rho| = r \cos \vartheta \text{grad } \rho.$$

Весь интеграл принимает вид

$$\begin{aligned} q(P, t) &= - \int_0^{\infty} r dr \int_r^{\infty} s^2 K(s) ds \int_0^{\pi} \sin \vartheta \cos^2 \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \text{grad } \rho = \\ &= - \frac{4}{3} \pi \text{grad } \rho \int_0^{\infty} r dr \int_r^{\infty} s^2 K(s) ds. \end{aligned}$$

Перестановка порядка интегрирований по r и s (продумайте ее!) дает

$$q(P, t) = - \frac{4}{3} \pi \text{grad } \rho \int_0^{\infty} s^2 K(s) ds \int_0^s r dr = - \frac{2}{3} \pi \text{grad } \rho \int_0^{\infty} s^4 K(s) ds.$$

Отсюда, введя коэффициент диффузии

$$\kappa = - \frac{2}{3} \pi \int_0^{\infty} s^4 K(s) ds, \quad (7)$$

получаем окончательно

$$q = - \kappa \text{grad } \rho. \quad (8)$$

Таким образом, формула (7) и определяет искомый коэффициент пропорциональности. На основании уравнения неразрывности (I.8.3) приходим к уравнению

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \text{div } q = \kappa \text{div grad } \rho = \kappa \nabla^2 \rho, \quad (9)$$

т. е. к тому же уравнению диффузии, которое было выведено ранее на основе дискретной схемы процесса.

Упомянем еще об одном выводе уравнения диффузии для общей схемы частиц с малым пробегом, не использующем понятие потока массы. Для этого надо выбрать в пространстве систему координат x, y, z , после чего разложить $\rho(Q, t)$ в уравнении (4) по степеням приращений координат $x_Q - x_P, y_Q - y_P, z_Q - z_P$, положив $K = K(r)$. Тогда интеграл от первого члена, не содержащего этих приращений, взаимно уничтожается с последним интегралом в (4); интегралы от линейных членов, а также от квадратичных членов с произведением приращений координат равны нулю в силу нечетности подинтегральных функций. Таким образом, в группе квадратичных членов остается только интеграл

$$\left[\int_{(H)} K(r) \cdot \frac{1}{2} (x_Q - x_P)^2 d_Q H \right] \cdot \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (10)$$

$$(r = \sqrt{(x_Q - x_P)^2 + (y_Q - y_P)^2 + (z_Q - z_P)^2}),$$

а также аналогичные интегралы, в которых вместо x стоит соответственно y или z . Вычисление этих интегралов осуществляется с помощью перехода к сферическим координатам, в точности так, как это было проделано выше. Мы предоставляем читателю проверить, что интеграл в выражении (10) как раз равен коэффициенту (7). Складывая полученные выражения и отбрасывая члены выше второго порядка малости, мы вновь приходим к уравнению (9).

Уравнение диффузии (9) допускает наглядное истолкование, о котором для одномерного случая мы говорили в конце § 1. Для этого напомним (см., например, ЭПМ, § X.9) одно из равносильных определений лапласиана*):

$$\nabla^2 u(P) = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{6}{r^2} [\bar{u}^P \cdot r - u(P)], \quad (11)$$

где под $\bar{u}^P \cdot r$ понимается среднее значение функции u по сфере с центром в точке P и радиусом r . Поэтому уравнение (8) означает, что если плотность среды в некоторой точке P меньше, чем средняя плотность по малым сферам с центром в этой точке, то плотность в точке P будет возрастать (к точке P будет подходить больше частиц, чем отходить от нее). Если же плотность в P больше упомянутой средней плотности, то плотность в P будет убывать. Это свойство наглядно вытекает из однородности и изотропности среды, в которой происходит диффузия частиц с малым пробегом.

Формулу (11) удобно применить для вывода уравнения диффузии для случая следующей схемы случайного движения частиц: в моменты $\tau, 2\tau, 3\tau, \dots$ каждая частица перескакивает на расстояние h в л ю б о м направлении (уже не обязательно параллельном одной

*) Для обозначения лапласиана часто вместо $\nabla^2 u$ пишут Δu ; мы здесь не пользуемся таким обозначением, чтобы не смешивать лапласиан с приращением.

из осей координат, как в начале этого параграфа), причем все направления такого перескока равновероятны; в промежутках между этими моментами частицы покоятся. Тогда в малый объем, расположенный в некоторой точке P , при таком перескоке приходят частицы со сферы радиуса h с центром в P , поэтому

$$u(P) |_{t+\tau} = \bar{u}^{P, h} |_t.$$

Отсюда

$$\frac{1}{\tau} [u(P) |_{t+\tau} - u(P) |_t] = \frac{1}{\tau} [\bar{u}^{P, h} - u(P)]_t = \kappa \left\{ \frac{6}{h^2} [\bar{u}^{P, h} - u(P)]_t \right\} \\ \left(\kappa = \frac{h^2}{6\tau} \right).$$

Заменяя при малых τ, h левую часть на $\frac{\partial u}{\partial t}$, а выражение в фигурных скобках, в силу формулы (11), — на $\nabla^2 u$, мы приходим к уравнению диффузии (9).

Упражнения

1. Получите аналог формулы (11) для среднего значения по шару с центром в точке P .

2. Напишите общее уравнение (4) для $K(P, Q, t) = Ae(h-PQ)$ ($e(s)$ — единичная функция) и получите отсюда уравнение диффузии (9) при $h \rightarrow 0$, $A = A(h)$ с помощью упражнения 1.

§ 4. Свойства решений уравнения диффузии в безграничной среде

В этом параграфе мы покажем, что целый ряд свойств решений уравнения диффузии

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \kappa \nabla^2 \rho \quad (1) = (3.8)$$

можно вывести непосредственно из самого этого уравнения, не располагая еще формулами для решения. Мы будем для определенности рассматривать одномерный случай $\left(\nabla^2 \rho = \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right)$, хотя аналогичные свойства справедливы также на плоскости и в пространстве. Кроме того, будем считать, что ρ при $x \rightarrow \pm \infty$ достаточно быстро стремится к нулю.

Первым свойством является принцип суперпозиции (возможность наложения плотностей друг на друга), о котором мы упоминали в § 2. Математически это свойство выражается в том, что уравнение (1), которому удовлетворяют распределения плотностей, — линейное и однородное, а потому сумма его решений служит решением того же уравнения. Из принципа суперпозиции вытекает, в частности, что хотя плотность среды из частиц по своему физическому смыслу не может быть отрицательной, но имеет смысл рассматривать решения уравнения (1), имеющие произвольный знак, которые могут быть истолкованы как отличие одной плотности от другой (например,