

УДК 532.72+532.772:517.9

ФИЗИКА

В. Н. Айрапетян, Ю. Н. Айрапетян

Поведение коэффициента диффузии на «краю расплывающегося облака частиц»

(Представлено академиком АН Армянской ССР Г. М. Гарибяном 18/IV 1984)

Рассмотрим процесс одномерной диффузии, т. е. рассмотрим частицу, блуждающую вдоль прямой случайным образом. Обозначим через $K(y, x, t)$ вероятность, с которой частица, находящаяся в момент t в положении y , окажется в момент $t+dt$ в интервале $x, x+dx$ (т. е. $K(y, x, t)$ — плотность вероятности переноса, отнесенная к единице времени — относительная скорость переноса ($[K]=[t^{-1}][t^{-1}]$). Заметим, что вместо того чтобы рассматривать процесс блуждания одной частицы, можно представить себе очень большое количество частиц, первоначально находящихся в тождественных условиях и совершающих затем случайные перескоки без каких-либо взаимных влияний (оба эти представления (языка) полностью эквивалентны (^{1,2})). Тогда эволюцию плотности числа диффундирующих частиц $\rho(x, t)$ можно описать уравнением

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^x K(y, x, t) \rho(y, t) dy - \left[\int_{-\infty}^{+\infty} K(y, x, t) dy \right] \rho(x, t). \quad (1)$$

Здесь в первом интеграле пределы берутся от $-\infty$ до x , так как в окрестность x частицы могут попасть только из области, расположенной „левее“ x (если x крайняя „правая“ точка „расплывающегося облака частиц“). Мы ограничимся рассмотрением диффузии только на „правом“ краю, так как диффузия на другом краю протекает, очевидно, совершенно таким же образом). Во втором интеграле пределы интегрирования берутся от $-\infty$ до $+\infty$, так как частица, находящаяся в точке x , может за время dt „уйти“ из этой точки „куда угодно“ — как „направо“, так и „налево“. Заметим теперь, что поскольку на самом „краю“ $\rho(x, t) \equiv 0$, то второй интеграл в (1) в точности равен нулю. Это предположение ($\rho(x, t) \equiv 0$ на самом „краю“) фактически есть единственно возможное в данном случае следствие фундаментального физического принципа, согласно которому любые частицы могут перемещаться лишь с конечной скоростью (см. об этом подробнее ниже).

Будем считать систему автономной, однородной и изотропной, т. е.

$$K(y, x, t) = K(y, x) = K(|y-x|). \quad (2)$$

В силу быстрого убывания $K(|y-x|)$ (оно содержит Больцмановский множитель, экспоненциально быстро убывающий с ростом $|y-x|$ ⁽²⁾) разложим $\rho(y, t)$, входящее в (1), по степеням $y-x=\xi$. Учитывая, что на самом „краю“ $\rho(x, t) \equiv 0$, получим из (1)

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} \int_0^\infty \xi K(|\xi|) d\xi + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \int_0^\infty \xi^2 K(|\xi|) d\xi. \quad (3)$$

Рассмотрим простейший случай: частица диффундирующего вещества с вероятностью, равной $\frac{1}{2}$, может совершать перескоки на расстояние h „направо“ и „налево“ за время τ . Этот случай реализуется, если положить

$$K(|x-y|) = K(|\xi|) = A \delta(|\xi| - h). \quad (4)$$

Здесь δ — δ -функция Дирака, $A = \frac{1}{2\tau}$ (определяется из условия нормировки, так как за время τ частица обязательно должна „перескочить“ „направо“ или „налево“). Подставив (4) в (3), получим

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = - \frac{h}{2\tau} \cdot \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + \frac{h^2}{4\tau} \cdot \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2}. \quad (5)$$

Таким образом, появление в (5) члена $\left(-\frac{h}{2\tau}\right) \rho'_x$ и коэффициента $h^2/4\tau$ вместо коэффициента $h^2/2\tau$, который появляется в уравнении, описывающем тот же процесс, только не на „краю“ (ур. типа (7), см. ниже), есть следствие асимметрии „правого“ и „левого“ полупространств относительно краевой точки („слева“ в нее частицы могут поступать, а „справа“ нет). Уравнение (5), описывающее эволюцию ρ в приграничной области, является, фактически, уравнением Фоккера — Планка. Конкретный вид коэффициентов при ρ'_x и ρ''_{xx} связан с выбором в качестве $K(x, y, t)$ — δ -функции. В дальнейшем мы исследуем влияние функциональной зависимости $K(y, x, t)$ на вид коэффициентов при ρ'_x и ρ''_{xx} .

Линейное уравнение диффузии, описывающее процесс распространения частиц, происходящий по механизму случайных блужданий вдали от „краев“ „облака“ (см., например, ^(2,4)), при предельном переходе $h \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$, таком, что $D = \frac{h^2}{2\tau} = \text{const}$, имеет фундаментальное решение (описывающее эволюцию единичной массы, первоначально сосредоточенной в точке $x=0$)

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right), \quad (6)$$

которое обращается в нуль лишь асимптотически, что влечет за собой бесконечно большую скорость распространения частиц (так как при сколь угодно больших x и конечных t $\rho(x, t)$, задаваемое (6), не обращается в нуль ^(2,5,6)).

Если и в уравнении (5) предельный переход $h \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$ совершать таким образом, чтобы $D = \frac{h^2}{2\tau} = \text{const} \neq 0$, то тогда $h/2\tau = \frac{v}{2} = \frac{D}{h} \rightarrow \infty$ и определяющим (т. е. дающим основной вклад в правую часть ур. (5)) будет именно член $\frac{h}{2\tau} \rho'_x$. При предельном же перехо-

де, проводящемся так, чтобы выполнялось $\frac{h}{\tau} = v = \text{const}$ и, следовательно, $D = \frac{vh}{2} \rightarrow 0$, опять-таки определяющим „справа“ в ур. (5)

оказывается тот же член. В силу вышесказанного конечная скорость распространения частиц влечет за собой „зануление“ коэффициента диффузии D на самом „краю облака распространяющихся частиц“ (другими словами, на „фронте волны концентрации“ D обращается в нуль одновременно с $\rho(x, t) \rightarrow 0$). Очевидно, что учет этого обстоятельства существен для тех стадий процесса диффузии, когда возмущение („фронт волны концентрации“) „не успело дойти“ до граничных точек рассматриваемой среды, т. е. на начальных стадиях процесса диффузии в пространственно ограниченные среды и при диффузии в полуограниченную среду.

Возникает вопрос: возможно ли на „краю“ одновременное выполнение $\rho'_x(x, t) \equiv 0$ и $\frac{h^2}{2\tau} = D = \text{const} \neq 0$ при $h \rightarrow 0$ и $\tau \rightarrow 0$. Если это было бы возможным, то ур. (5) приняло бы вид:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} - \frac{D}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} = 0. \quad (7)$$

Уравнение же (7) имеет фундаментальное решение

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{2Dt}\right), \quad (8)$$

которое обращается в нуль лишь асимптотически и, следовательно, не имеет „края“. Получилось противоречие, поэтому на поставленный вопрос с необходимостью следует отрицательный ответ.

Обсудим различные определения скорости v распространения диффундирующих частиц.

Пусть в процессе случайного блуждания частица с вероятностью $1/2$ в моменты $n\tau$ ($n=1, 2, \dots, \infty$) „перескакивает“ в соседние точки на расстояния h . Скачок, совершаемый из каждого i -того положения, — независимое событие. Тогда за t секунд совершается t/τ скачков. Отсюда дисперсия за t секунд

$$\frac{t}{\tau} h^2 = 2 \frac{h^2}{2\tau} \cdot t = 2Dt, \quad (9)$$

где $D = \frac{h^2}{2\tau} = \text{const}$. Следовательно, модуль среднего отклонения с те-

чением времени изменяется по закону $\Delta r = \sqrt{2Dt}$, поэтому естественно за v принять

$$\frac{d\Delta r}{dt} = \sqrt{\frac{D}{2t}}. \quad (10)$$

Если же подсчитать суммарный путь, пройденный частицей в процессе случайного блуждания, то он окажется равным

$$\frac{t}{\tau} h = \frac{h^2}{\tau} \cdot \frac{t}{h} = D \frac{2t}{h} \quad (11)$$

и будет стремиться к бесконечности при $h \rightarrow 0$, $D = \text{const}$ и конечных t . Следовательно, и $v \rightarrow \infty$. При этом все перемещения могут быть и одного знака, и именно поэтому какая-то часть частиц в „облаке“ имеет конечную вероятность „уйти“ на бесконечность. Для того чтобы совместить получающуюся таким образом бесконечную скорость распространения частиц с конечной дисперсией, и вводится предположение о бесконечной частоте осцилляции частиц (см., например, (*), с. 261).

При $D \neq \text{const}$ естественно „разбить“ t (или x) на участки, на которых D можно считать постоянным, и подсчитать дисперсию на каждом участке, а потом их складывать (так как „перескоки“ на каждом участке — суть независимые события, то их дисперсии складываются).

При описании диффузии в неограниченную и полуограниченную области (именно эти случаи мы обсуждаем) правомочна подстановка Больцмана (6) $u = x/2\sqrt{Dt}$. Тогда изоконцентрационный профиль $\rho(x, t) = \rho\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) = \text{const}$ распространяется со скоростью, определяемой из условия $x = 2\gamma\sqrt{t}$ (где γ некоторая постоянная).

Заметим, что определения v , за исключением данного с помощью формулы (11), — макроскопические и, в сущности, совпадающие. Определение же v , данное с помощью (11), являясь микроскопическим, противоречит не только макроскопическим определениям, но и фундаментальному физическому принципу, требующему конечной скорости распространения частиц. При этом даже введение бесконечной частоты и осцилляции не снимает этого противоречия, ибо «край облака» по-прежнему будет мгновенно «уходить» на бесконечность.

Для преодоления этого противоречия заметим, что эволюция плотности диффундирующих частиц на самом «краю облака» будет описываться уравнением (5), являющимся уравнением Фоккера—Планка. Как было показано выше, это обстоятельство является следствием учета конечной скорости распространения частиц (откуда следует и факт наличия «края»). Поэтому скорость v , введенная с помощью (11), является принципиально ненаблюдаемой, так же как не может быть наблюдаем (из физических соображений) отдельный акт «перескока» частицы на расстояние h , происходящий за время τ , при $h \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$. Поэтому определение v по формуле (11) лишено физического смысла. Таким образом и внутри «облака» скорость распространения частиц не бесконечна и должна определяться макроскопически.

Автори выражают глубокую благодарность академику АН Армянской ССР Г. М. Гарибяну и чл.-корр. АН Армянской ССР Д. М. Седракяну и всем участникам теоретического семинара кафедры общей физики ЕГУ за полезное обсуждение работы.

Ереванский государственный
университет

Վ. Ն. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ, ՅՈՒ. Ն. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ

Դիֆուզիայի գործակցի վարժը «մասնիկների նապաղվող ամպի եզրին»

Դիտարկված է «չփոխադրող մասնիկների ամպի» նապաղման պրոցեսը, երբ մասնիկները սկզբում կենտրոնացված են տարածության սահմանափակ տիրույթում:

Նշելով դիֆուզիոն մասնիկների շարժման արագության սահմանափակ լինելու սկզբունքից՝ վերլուծված է դիֆուզիայի գործակցի վարժը «ամպի եզրում»: Արված է հետևյալ եզրակացությունը՝ «ամպի» եզրին դիֆուզիայի գործակցը պետք է հավասար լինի զրոյի:

Ամպի եզրին չփոխադրող մասնիկների նապաղման պրոցեսը նկարագրվում է Ֆոկեր-Պլանկի հավասարումով: Ստացված են այդ հավասարման գործակիցները:

ЛИТЕРАТУРА — ԴՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

- ¹ С. Чандрасекар, Стохастические проблемы в физике и астрофизике, ИЛ, М., 1947. ² Я. Б. Зельдович, А. Д. Мышкис, Элементы математической физики, Наука, М., 1973. ³ Л. Жирифалько, Статистическая физика твердого тела, Мир, М., 1975. ⁴ Ю. А. Розанов, Введение в теорию случайных процессов, Наука, М., 1982. ⁵ Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений, Наука, М., 1966. ⁶ А. Н. Тихонов, А. А. Самарский, Уравнения математической физики, Наука, М., 1966.