Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1973

УДК 53:519.25

А. М. ТОБОЛЬЦЕВ

К ТЕОРИИ ОБОБЩЕННЫХ УРАВНЕНИЙ ДИФФУЗИИ

Получены обобщенные уравнения диффузии, целесообразность рассмотрения которых показана в книге А. А. Власова [1]. Исследован характер полученных уравнений при непрерывных изменениях параметров соответствующих схем.

Существуют физические случаи поведения частиц, требующие учета конечных изменений статистических функций распределения при малых изменениях независимых переменных. К таким системам относятся взвешенные частицы в жидкости, находящиеся в броуновском движении, электроны в плазме при наличии достаточно большой плотности нейтральных частиц и т. д.

Время релаксации является основной характеристикой этих систем и процессов в них. А. А. Власов для описания подобных систем получил обобщенные уравнения диффузии путем введения конечных разностей в статистические законы сохранения и показал физическую целесообразность этого обобщения. При этом разностный шаг во времени τ отождествлялся со временем релаксации, конечные интервалы в пространстве координат и скоростей выражались как следствие через тот же интервал времени. В настоящей статье этот метод описания распространен на более общие конечно-разностные схемы и изучаются новые свойства обобщенных уравнений диффузии. Конечные разности будем вводить по схемам

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} \to \frac{\rho(t+\tau)-\rho(t)}{\tau}, \quad \frac{\partial\rho}{\partial t} \to \frac{\rho(t)-\rho(t-\tau)}{\tau},$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} \to \frac{\rho\left(t+\frac{\tau}{2}\right)-\rho\left(t-\frac{\tau}{2}\right)}{\tau},$$

$$\operatorname{div}_{\vec{r}}\vec{v} f \to \frac{f(\vec{r}+\tau\vec{v})-f(\vec{r})}{\tau},$$

$$\operatorname{div}_{\vec{r}}\vec{v} f \to \frac{f(\vec{r})-f(\vec{r}-\tau\vec{v})}{\tau},$$

[1] См. А. А. Власов. Статистические функции распределения, гл. 3. М., 1966.

$$\operatorname{div}_{\vec r}\vec v f \to \frac{f\left(\vec r+\frac{\tau}{2}\vec v\right)-f\left(\vec r-\frac{\tau}{2}\vec v\right)}{\tau}.$$

Здесь без ограничения общности можно считать $\tau>0$, так как $\tau<0$ переводит, очевидно, эти схемы одну в другую или саму в себя.

Мы исходим из рассмотрения цепочки законов сохранения для функции $\rho(\vec r, t)$, $f(\vec r, \vec v, t)$, $f(\vec r, \vec v, \dot{\vec v}, t), \ldots$, заменяя в них производные конечноразностными соотношениями. Обрыв этой цепочки должен вводиться извне с помощью физической гипотезы, которая приводила бы к замкнутому аппарату теории, обобщая известные результаты.

Обрыв первой строки обеспечивается постулатом

$$f(\vec r, \vec v, t) = \rho(\vec r, t)\, w(v^2),$$

где $w(v^2)$ — максвелловское распределение. Этот обрыв приводит к правильному уравнению диффузии при малых τ и при $\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$ выводится из второй строки законов сохранения. Тогда для соответствующих схем получим

$$\int \operatorname{div}_{\vec r}\vec v f d\vec v = \frac{1}{\tau}\sum_{\mu=1}^{\infty}\frac{1}{\mu!}\left(\tau^2\frac{\theta}{2m}\right)^{\mu}\Delta^{\mu}\rho,$$

$$\int \operatorname{div}_{\vec r}\vec v f d\vec v = -\frac{1}{\tau}\sum_{\mu=1}^{\infty}\frac{1}{\mu!}\left(\tau^2\frac{\theta}{2m}\right)^{\mu}\Delta^{\mu}\rho,$$

$$\int \operatorname{div}_{\vec r}\vec v f d\vec v = 0.$$

Итак, вместо девяти уравнений, соответствующих трем схемам по времени и трем схемам по координатам, имеем только шесть, отбрасывая три тривиальных уравнения, соответствующих $\rho=\mathrm{const}$.

Выпишем эти уравнения и соответствующие им схемы:

$$\sum_{\mu=1}^{\infty}\frac{1}{\mu!}\tau^{\mu}\frac{\partial^{\mu}\rho}{\partial t^{\mu}}-\sum_{\mu=1}^{\infty}\frac{1}{\mu!}\left(\tau^2\frac{\theta}{2m}\right)^{\mu}\Delta^{\mu}\rho=0,$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}\to\frac{\rho(t+\tau)-\rho(t)}{\tau},\quad \operatorname{div}_{\vec r}\vec v f\to\frac{f(\vec r)-f(\vec r-\tau\vec v)}{\tau}, \tag{1}$$

$$-\sum_{\mu=1}^{\infty}\frac{1}{\mu!}(-\tau)^{\mu}\frac{\partial^{\mu}\rho}{\partial t^{\mu}}+\sum_{\mu=1}^{\infty}\frac{1}{\mu!}\left(\tau^2\frac{\theta}{2m}\right)^{\mu}\Delta^{\mu}\rho=0,$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}\to\frac{\rho(t)-\rho(t-\tau)}{\tau},\quad \operatorname{div}_{\vec r}\vec v f\to\frac{f(\vec r+\tau\vec v)-f(\vec r)}{\tau}, \tag{2}$$

$$-\sum_{\mu=1}^{\infty}\frac{1}{\mu!}(-\tau)^{\mu}\frac{\partial^{\mu}\rho}{\partial t^{\mu}}-\sum_{\mu=1}^{\infty}\frac{1}{\mu!}\left(\tau^2\frac{\theta}{2m}\right)^{\mu}\Delta^{\mu}\rho=0,$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}\to\frac{\rho(t)-\rho(t-\tau)}{\tau},\quad \operatorname{div}_{\vec r}\vec v f\to\frac{f(\vec r)-f(\vec r-\tau\vec v)}{\tau}, \tag{3}$$

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{1}{\mu!} \tau^{\mu} \frac{\partial^{\mu}\rho}{\partial t^{\mu}} + \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{1}{\mu!} \left(\tau^2 \frac{\theta}{2m}\right)^{\mu} \Delta^{\mu}\rho = 0,$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} \to \frac{\rho(t+\tau)-\rho(t)}{\tau}, \quad \operatorname{div}_{\vec{r}} \vec{v} f \to \frac{f(\vec{r}+\tau\vec{v})-f(\vec{r})}{\tau}, \tag{4}$$

$$2\sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{1}{(2\mu-1)!} \left(\frac{\tau}{2}\right)^{2\mu-1} \frac{\partial^{2\mu-1}\rho}{\partial t^{2\mu-1}} - \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{1}{\mu!} \left(\tau^2 \frac{\theta}{2m}\right)^{\mu} \Delta^{\mu}\rho = 0,$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} \to \frac{\rho\left(t+\frac{\tau}{2}\right)-\rho\left(t-\frac{\tau}{2}\right)}{\tau}, \quad \operatorname{div}_{\vec{r}} \vec{v} f \to \frac{f(\vec{r})-f(\vec{r}-\tau\vec{v})}{\tau}, \tag{5}$$

$$2\sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{1}{(2\mu-1)!} \left(\frac{\tau}{2}\right)^{2\mu-1} \frac{\partial^{2\mu-1}\rho}{\partial t^{2\mu-1}} + \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{1}{\mu!} \left(\tau^2 \frac{\theta}{2m}\right)^{\mu} \Delta^{\mu}\rho = 0,$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} \to \frac{\rho\left(t+\frac{\tau}{2}\right)-\rho\left(t-\frac{\tau}{2}\right)}{\tau}, \quad \operatorname{div}_{\vec{r}} \vec{v} f \to \frac{f(\vec{r}+\tau\vec{v})-f(\vec{r})}{\tau}. \tag{6}$$

Для анализа полученных уравнений нам понадобится рассмотрение общей схемы:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} \to \frac{\rho\left[t+\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\tau\right]-\rho\left[t-\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\tau\right]}{\tau} \qquad -\frac{1}{2} \leqslant \alpha \leqslant \frac{1}{2},$$

$$\operatorname{div}_{\vec{r}} \vec{v} f \to \frac{f\left[\vec{r}+\left(\frac{1}{2}+\beta\right)\tau\vec{v}\right]-f\left[\vec{r}-\left(\frac{1}{2}-\beta\right)\tau\vec{v}\right]}{\tau} \qquad -\frac{1}{2} \leqslant \beta \leqslant \frac{1}{2},$$

дающей весь спектр обобщенных уравнений диффузии. Аналогично получаем общее уравнение диффузии

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{1}{\mu!} \tau^{\mu} \left[\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)^{\mu} - (-1)^{\mu}\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)^{\mu}\right] \frac{\partial^{\mu}\rho}{\partial t^{\mu}} +$$

$$+ \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{1}{\mu!} \left(\tau^2 \frac{\theta}{2m}\right)^{\mu} \left[\left(\frac{1}{2}+\beta\right)^{2\mu} - \left(\frac{1}{2}-\beta\right)^{2\mu}\right] \Delta^{\mu}\rho = 0, \tag{7}$$

из которого при соответствующем выборе параметров α и β следуют все предыдущие уравнения (1)—(6) как частные случаи.

Анализ полученных уравнений

Уравнение 1. В первом приближении получаем обычное уравнение диффузии $\frac{\partial\rho}{\partial t} = \tau \frac{\theta}{2m} \Delta\rho$ с коэффициентом диффузии, зависящим от шага τ: $D = \tau \frac{\theta}{2m}$. При этом снимается парадокс Эйнштейна о бесконечной скорости броуновских частиц.

Не разлагая разности в ряды, запишем это уравнение в разностно-интегральном виде

$$\rho(\vec{r}, t+\tau) - \rho(\vec{r}, t) = \int [\rho(\vec{r} - \delta\vec{r}, t) - \rho(\vec{r}, t)]\, w(\delta\vec{r}, \tau)\, d(\delta\vec{r}), \quad (8)$$

откуда следует уравнение Смолуховского

$$\rho(\vec{r}, t+\tau) = \int \rho(\vec{r} - \delta\vec{r}, t)\, w(\delta\vec{r}, \tau)\, d(\delta\vec{r}). \quad (9)$$

Представляя решение уравнения (1) в виде ряда Фурье

$$\rho(\vec{r}, t) = \rho_0 + \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}} e^{-\lambda_k t + i\vec{k}\vec{r}}, \quad (10)$$

получим

$$\lambda_k = \tau \frac{\theta}{2m} k^2, \quad (11)$$

т. е. дисперсионное соотношение оказалось таким же, как и для обычного уравнения диффузии, поэтому уравнение (1) можно назвать полным уравнением диффузии.

Уравнение 2. Первое приближение дает уравнение антидиффузии

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\tau \frac{\theta}{2m} \Delta\rho.$$

Запишем дисперсионное соотношение для этого уравнения

$$\lambda_k = -\tau \frac{\theta}{2m} k^2. \quad (12)$$

Так как коэффициенты Фурье определяются начальным распределением плотности и только им (не зависят от вида уравнений), то решения уравнений (1) и (2) с одинаковым начальным распределением плотности (см. (10), (11) и (12)) являются симметричными по времени (рис. 1).

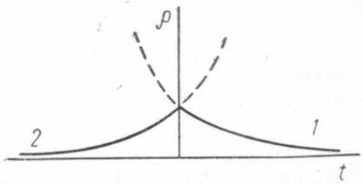

Рис. 1

Аналогичное утверждение справедливо для уравнений (3) и (4), (5) и (6), как мы увидим ниже.

Имеем альтернативу. 1. Решение каждого из уравнений (1)—(6) справедливо для всех t.

2. Уравнения (1)—(6) следует рассматривать парами (решения каждого уравнения пары являются симметричными по времени), причем решение пары сшивается их сходящихся кусков решений каждого уравнения этой пары (жирная линия на рис. 1).

Из первого предположения получаем следствие: наряду со статистическими процессами, сопровождающимися возрастанием энтропии (типа диффузии), должны быть процессы с убыванием энтропии (типа антидиффузии).

Из второго предположения получаем. Следствие 1. Статистические процессы протекают так, что начальный момент наблюдения является особой точкой процесса. Следствие 2. Все статистические процессы являются t-инвариантными. Следствие 3. Задача Коши для обратного направления времени в статистических процессах является тривиальной.

Указанные следствия говорят в пользу второй гипотезы.

Уравнение 3. Первое приближение дает обычное уравнение диффузии. Разностно-интегральное уравнение

$$\rho(\vec{r}, t) - \rho(\vec{r}, t-\tau) = \int [\rho(\vec{r}-\delta\vec{r}, t) - \rho(\vec{r}, t)]\, w(\delta\vec{r}, \tau)\, d(\delta\vec{r}) \qquad (13)$$

дает уравнение типа уравнения Смолуховского

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{1}{2}\left[\rho(\vec{r}, t-\tau) + \int \rho(\vec{r}-\delta\vec{r}, t)\, w(\delta\vec{r}, \tau)\, d(\delta\vec{r}).\right. \qquad (14)$$

Из дисперсионного соотношения

$$\lambda_k\tau = \ln\left(2 - e^{-\tau^2 \frac{\theta}{2m} k^2}\right) \qquad (15)$$

видно, что $0 \leqslant \lambda_k\tau < \ln 2$, т. е. λ_k ограничено. Уравнение (3) в физическом смысле лучше уравнения (1) и обычного уравнения диффузии, так как в этом уравнении устраняются бесконечные релаксации.

Уравнение 4. Первое приближение дает антидиффузию. Из дисперсионного соотношения

$$\lambda_k\tau = -\ln\left(2 - e^{-\tau^2 \frac{\theta}{2m} k^2}\right) \qquad (16)$$

видно, что уравнения (3) и (4) образуют пару.

Уравнение 5. Первое приближение дает обычное уравнение диффузии. Соответствующее разностно-интегральное уравнение

$$\rho\left(\vec{r}, t+\frac{\tau}{2}\right) - \rho\left(\vec{r}, t-\frac{\tau}{2}\right) = \int [\rho(\vec{r}-\delta\vec{r}, t) - \rho(\vec{r}, t)]\, w(\delta\vec{r}, \tau)\, d(\delta\vec{r}) \qquad (17)$$

приводит к уравнению типа уравнения Смолуховского

$$\rho\left(\vec{r}, t+\frac{\tau}{2}\right) = \rho\left(\vec{r}, t-\frac{\tau}{2}\right) - \rho(\vec{r}, t) + \int \rho(\vec{r}-\delta\vec{r}, t)\, w(\delta\vec{r}, \tau)\, d(\delta\vec{r}). \qquad (18)$$

Дисперсионное соотношение

$$\operatorname{sh}\frac{\lambda_k\tau}{2} = \frac{1}{2}\left(1 - e^{-\tau^2 \frac{\theta}{2m} k^2}\right) \qquad (19)$$

обеспечивает ограниченность λ_k:

$$0 \leqslant \lambda_k < \lambda_{\max} = \ln\frac{3+\sqrt{5}}{2}. \qquad (20)$$

Уравнение 6. В первом приближении получаем антидиффузию. Дисперсионное соотношение имеет вид

$$\operatorname{sh}\frac{\lambda_k\tau}{2} = -\frac{1}{2}\left(1 - e^{-\tau^2 \frac{\theta}{2m} k^2}\right), \qquad (21)$$

т. е. уравнения (5) и (6) образуют пару.

Общее уравнение (7) дает следующее дисперсионное соотношение:

$$e^{-\alpha\lambda\tau}\operatorname{sh}\frac{\lambda\tau}{2} = -e^{\left(\frac{1}{4}+\beta^2\right)\tau^2 \frac{\theta}{2m} k^2} \cdot \operatorname{sh}\beta\tau^2\frac{\theta}{2m}k^2. \qquad (22)$$

Из (22) следует.

Во-первых, $\lambda > 0$ при $\beta < 0$, $\lambda < 0$ при $\beta > 0$, $\lambda = 0$ при $\beta = 0$, причем знак λ не зависит от значений α, т. е. «положительные» уравнения спектра (имеющие сходящиеся решения для $t > 0$) получаются при $\beta < 0$, $-\frac{1}{2} \leqslant \alpha \leqslant \frac{1}{2}$; схемы по временной переменной и пространственным переменным неравнозначны. Более того, характер уравнения в смысле «положительности» или «отрицательности» не зависит от схемы по временной переменной.

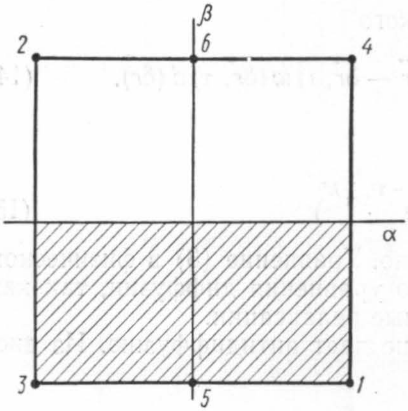

Рис. 2

Во-вторых, уравнение (22) инвариантно относительно замены $\alpha \to -\alpha$, $\beta \to -\beta$, $\lambda \to -\lambda$, т. е. если есть решение (α, β, λ), то есть и решение $(-\alpha, -\beta, -\lambda)$ или $\lambda(-\alpha, -\beta, k^2) = -\lambda(\alpha, \beta, k^2)$. Таким образом, уравнению со схемой (α, β) соответствует парное уравнение со схемой $(-\alpha, -\beta)$ (рис. 2). Цифрами (*1*—*6*) на рис. 2 обозначены схемы рассмотренных уравнений, заштрихована область «положительных» уравнений.

Полное исследование уравнения (22) дает следующие результаты.

При $-\frac{1}{2} < \beta < 0$ и $-\frac{1}{2} \leqslant \alpha \leqslant \frac{1}{2}$ имеем «положительные» уравнения с бесконечно медленными релаксациями.

При $\beta = -\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2} \leqslant \alpha < \frac{1}{2}$ имеем «положительные» уравнения с ограниченной релаксацией, при этом выбор схемы по t влияет на величину $\lambda_{\max}$.

При $\beta = -\frac{1}{2}$ и $\alpha = \frac{1}{2}$ имеем «положительное» уравнение с бесконечно быстрой релаксацией (уравнение (1)).

Автор благодарен проф. А. А. Власову за предложенные темы и постоянные консультации при выполнении работы.

Поступила в редакцию
20.3 1972 г.

Кафедра
теоретической физики