Металлофиз. новейшие технол. / Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2013, т. 35, № 1, сс. 95–111
Оттиски доступны непосредственно от издателя
Фотокопирование разрешено только
в соответствии с лицензией

ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ

PACS numbers: 02.50.Ga, 05.10.Gg, 05.20.Dd, 05.40.Fb, 05.60.Cd, 66.30.Dn

К выводу уравнения Фоккера–Планка

Л. В. Танатаров

*Национальный научный центр
«Харьковский физико-технический институт» НАН Украины,
ул. Академическая, 1,
61108 Харьков, Украина*

Показано, что в общем случае диффузии передемпфированных частиц уравнение Фоккера–Планка не содержит производной по координате от силового поля, которое предполагается независящим от времени, в противоположность традиционному виду этого уравнения, где такая производная присутствует.

Виявлено, що в загальному випадку дифузії передемпфованих частинок рівняння Фоккера–Планка не має похідної за координатою від силового поля, яке не залежіть від часу, на противагу традиційному вигляду цього рівняння, де така похідна присутня.

As shown, in the general case of overdamped-particles' diffusion, the Fokker–Planck equation does not contain the coordinate derivative of the stationary force field, as contrasted to its traditional form.

Ключевые слова: передемпфированная частица, диффузия, случайная сила, уравнение Ланжевена, марковский процесс.

(Получено 26 ноября 2012 г.)

1. ВЫВОД УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПЕРЕДЕМПФИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

Уравнение Фоккера–Планка (ФП) для передемпфированных частиц в постоянном по времени силовом поле $F(x)$ выводится обычно для случая линейной силы (осциллятора). Связано это с тем, что в этом случае можно точно решить уравнение Ланжевена и выразить решение в терминах случайной силы, действующей на частицу, что, вообще говоря, невозможно сделать для произвольной силы $F(x)$. Однако по аналогии пишут уравнение ФП в виде [1–3]:

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left[F(x)f(x,t)\right]=D\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}.$$

В данной работе делается попытка получить одномерное уравнение ФП, исходя из уравнений Ланжевена и Колмогорова для частиц в произвольном постоянном по времени поле. Уравнение движения частицы в поле $F(x)$ под действием случайной силы $\tilde{Y}(t)$ и сопротивления, пропорционального скорости:

$$m\ddot{x}+\gamma\dot{x}=F(x)+\tilde{Y}(t).$$

Проинтегрируем это уравнение, формально считая правую часть известной функцией времени; получим:

$$x(t)-x(0)=\dot{x}(0)\frac{m}{\gamma}(1-e^{-\gamma t/m})+\frac{1}{\gamma}\int_0^t dt'[1-e^{-\frac{\gamma}{m}(t-t')}][F(x(t'))+\tilde{Y}(t')].$$

Передемпфированному движению соответствует $m\to 0$. В этом случае получаем для $\Delta x\equiv x(t)-x(0)$:

$$\Delta x=\int_t^{t+\Delta t}Y(t')dt'+\frac{1}{\gamma}\int_t^{t+\Delta t}F(x(t'))dt',\,Y(t)\equiv\frac{1}{\gamma}\tilde{Y}(t).\tag{1}$$

Отметим, что значение начальной скорости при этом «моментально» забывается, что является основанием считать процесс перемещения такой частицы марковским. При этом фазовое пространство размерности 2 редуцируется в одномерное конфигурационное пространство.

Пусть $f(x,t)$ плотность функции распределения частиц в пространстве и времени, подлежащая определению. В силу условия марковости она удовлетворяет уравнению Колмогорова:

$$f(x,t+\Delta t)=\int_{-\infty}^{\infty}dx'f(x',t)w_{\Delta t}(x',x).\tag{2}$$

Здесь $w_{\Delta t}(x',x)$ — вероятность перехода из точки x' в точку x за время Δt. Обычно нам известна функция $w_{\Delta t}(x',x)$ в отсутствие поля, когда перемещение частицы из точки x' в x определяется только действием случайной силы $\tilde{Y}(t)$. Если эта сила не действует, то траектория частицы однозначно определяется действием силового поля $F(x)$, а плотность вероятности перехода обращается в δ-функцию

$$w_{\Delta t}(x',x)=\delta(x-x'-x(\Delta t)),$$

где $x(\Delta t)$ — решение уравнения движения частицы. Удобно переписать уравнение (2), вводя разность $\Delta x=x-x'$; тогда

$$f(x,t+\Delta t)=\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\Delta x w_{\Delta t}(x-\Delta x,x)f(x-\Delta x,t). \tag{2a}$$

Будем в дальнейшем считать Δt малой величиной. Первое слагаемое правой части (1) — смещение, порожденное случайной силой $Y(t)$. Обозначим его через $\Delta x'$. Пусть $\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x')$ — плотность вероятности смещения $\Delta x'$ частицы за время Δt в отсутствие поля $F(x)$. Очевидно, что при $\Delta t\to 0$ $\tilde{w}_{\Delta t}(x')$ стремится к $\delta(\Delta x')$. Очевидно также, что в отсутствие поля $w_{\Delta t}(x-\Delta x,x)=\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x)$. Наоборот, при наличии поля в отсутствие случайной силы

$$w_{\Delta t}(x-\Delta x,x)=\delta\left(\Delta x-\frac{1}{\gamma}\int\limits_{t}^{t+\Delta t}F\left(x(t')\right)dt'\right).$$

$\int\limits_{t}^{t+\Delta t}F\left(x(t')\right)dt'$ — функционал, который получается, если вместо $x(t')$ подставить точное решение уравнения Ланжевена в отсутствие случайной силы. Подставляя в (2а), получаем:

$$f(x,t+\Delta t)=\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\Delta x f(x-\Delta x,t)\delta(\Delta x-\frac{1}{\gamma}\int\limits_{t}^{t+\Delta t}F(x(t'))dt'),$$

или

$$f(x,t+\Delta t)=f(x-\frac{1}{\gamma}\int\limits_{t}^{t+\Delta t}F(x(t'))dt',t).$$

Раскладывая левую часть по Δt, а правую — по $\frac{1}{\gamma}\int\limits_{t}^{t+\Delta t}F(x(t'))dt'$, получаем:

$$\frac{\partial f}{\partial t}\Delta t=-\frac{\partial f}{\partial x}\frac{1}{\gamma}\int\limits_{t}^{t+\Delta t}F(x(t'))dt'.$$

Но $\int\limits_{t}^{t+\Delta t}F(x(t'))dt'=\Delta tF(x-\theta\Delta x)$, где $0<\theta<1$. Подставляя в предыдущее равенство и сокращая на Δt, а также учитывая, что $\Delta x\to 0$ при $\Delta t\to 0$, получаем:

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{1}{\gamma}F(x)\frac{\partial f}{\partial x}=0. \tag{3}$$

По сути дела мы получили уравнение Лиувилля, что и должно быть в этом случае. Уже на этом этапе возникает вопрос, как при традиционном написании уравнения ФП производная по x может «перескочить» через силовое поле $F(x)$ при появлении бесконечно малой случайной силы. Заметим, что мы полагали случайную силу зависящей только от времени. Если рассматривается диффузия частиц в поле случайно расположенных силовых центров, то сила порождается их совокупным случайным полем. Оно не мало́ по сравнению с полем внешней силы, но именно из-за случайного расположения центров их среднее результирующее поле можно считать равным нулю; именно поэтому в уравнении (3) под $F(x)$ понимается внешнее поле. В этом смысле выбор случайной силы как величины, зависящей только от времени, уже является некоторым приближением.

Если силовое поле $F(x)$ и случайная сила действуют одновременно, то $\Delta x = \Delta x' + \frac{1}{\gamma}\int\limits_t^{t+\Delta t} F(x(t'))dt'$; тогда согласно (2а) для одной определенной траектории:

$$f(x, t + \Delta t) =$$
$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\Delta x f(x - \Delta x, t)\delta(\Delta x - \Delta x' - \frac{1}{\gamma}\int\limits_t^{t+\Delta t} F(x(t'))dt') = f(x - \Delta x' - \frac{1}{\gamma}\int\limits_t^{t+\Delta t} F(x(t')), t).$$

Среднее значение этой величины —

$$f(x, t + \Delta t) = \left\langle f(x - \Delta x' - \frac{1}{\gamma}\int\limits_t^{t+\Delta t} F(x(t'))dt', t)\right\rangle.$$

Здесь случайной величиной является $\Delta x'$. По ней и проводится усреднение, т.е.

$$f(x, t + \Delta t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x - \Delta x, t)\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x')d\Delta x'. \tag{4}$$

Уравнение (1) связывает $\Delta x'$ с Δx:

$$\Delta x' = \Delta x - \frac{1}{\gamma}\int\limits_t^{t+\Delta t} F(x(t'))dt'. \tag{5}$$

Здесь под знаком интеграла $x - \Delta x \le x(t') \le x$. Выделим явную зависимость интеграла

$$\int\limits_t^{t+\Delta t} F(x(t'))dt'.$$

от Δx. Пользуясь (1), можем записать:

$$x(t') = x - \Delta x + \int_t^{t'} Y(t'')dt'' + \frac{1}{\gamma}\int_t^{t'} F(x(t''))dt''.$$

Раскладывая $F(x(t'))$ в ряд Тейлора в окрестности точки $x - \Delta x$, получаем:

$$\int_t^{t+\Delta t} F(x(t'))dt' =$$

$$= \Delta t F(x - \Delta x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n F(x - \Delta x)}{\partial x^n} \int_t^{t+\Delta t} dt' [\int_t^{t'} Y(t'')dt'' + \frac{1}{\gamma}\int_t^{t'} F(x(t''))dt'']^n.$$

Вследствие ограниченности $F(x)$ $\left|\frac{1}{\gamma}\int_t^{t'} F(x(t''))dt''\right| < \frac{1}{\gamma}|F|\Delta t$ и

$$\left|\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} F(x(t''))dt''\right| < |F|(\Delta t)^2,$$

а так как мы сохраняем только слагаемые, пропорциональные Δt, вторым слагаемым в квадратных скобках можно пренебречь. Итак,

$$\int_t^{t+\Delta t} F(x(t'))dt' = \Delta t F(x - \Delta x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} F^{(n)}(x - \Delta x) \int_t^{t+\Delta t} dt' \left(\int_t^{t'} Y(t'')dt''\right)^n =$$

$$= \int_t^{t+\Delta t} F\left(x - \Delta x + \int_t^{t'} Y(t'')dt''\right)dt'.$$

Вместо (5) теперь можно записать

$$\Delta x' = \Delta x - \frac{1}{\gamma}\int_t^{t+\Delta t} F\left(x - \Delta x + \int_t^{t'} Y(t'')dt''\right)dt'.$$

Введем обозначение

$$\widehat{F}_{\Delta t}(x) - \Delta x \equiv \frac{1}{\Delta t}\int_t^{t+\Delta t} F\left(x - \Delta x + \int_t^{t'} Y(t'')dt''\right)dt'.$$

Уравнение (5) теперь перепишем в виде:

$$\Delta x' = \Delta x - \frac{\Delta t}{\gamma}\widehat{F}(x - \Delta x). \tag{6}$$

Заметим, что при $\Delta t \to 0$ $\widehat{F}_{\Delta t}(x - \Delta x) \to F(x - \Delta x)$. Из (6) следует соотношение между дифференциалами $\Delta x'$ и Δx:

$$d\Delta x' = d\Delta x - \frac{\Delta t}{\gamma} d_{\Delta x} \widehat{F}_{\Delta t}(x - \Delta x). \tag{7}$$

Пусть $W_{\Delta t}(k)$ — образ Фурье функции $\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x')$. Так как при $\Delta t \to 0$ $\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x')$ должна стремиться к $\delta(\Delta x')$, Фурье-образ $W_{\Delta t}(k) \to 1$, т.е. при малых Δt $W_{\Delta t}(k) = 1 - \Delta t \tilde{v}(k)$.

Представим $\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x')$ через $W_{\Delta t}(k)$, воспользовавшись (5):

$$\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x') = \frac{1}{2\pi} \int dk W_{\Delta t}(k) \exp\{-ik\Delta x + \frac{ik}{\gamma} \Delta t \widehat{F}_{\Delta t}(x - \Delta x)\}.$$

При малых Δt

$$\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x') = \frac{1}{2\pi} \int dk (1 - \Delta t \tilde{v}(k)) e^{-ik\Delta x} \left[1 + \frac{ik\Delta t}{\gamma} \widehat{F}_{\Delta t}(x - \Delta x)\right].$$

Согласно (6) и (7)

$$\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x') d\Delta x' = [d\Delta x - \frac{\Delta t}{\gamma} d_{\Delta x} \widehat{F}_{\Delta t}(x - \Delta x)]\{\delta(\Delta x) +$$

$$+ \frac{\Delta t}{2\pi\gamma} \widehat{F}_{\Delta t}(x - \Delta x) \int ik dk e^{-ik\Delta x} - \frac{\Delta t}{2\pi} \int dk \tilde{\nu}(k) e^{-ik\Delta x}\}$$

или, сохраняя члены, пропорциональные Δt:

$$\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x') d\Delta x' = d\Delta x \delta(\Delta x) - \frac{\Delta t}{\gamma} \delta(\Delta x) d_{\Delta x} \widehat{F}_{\Delta t}(x - \Delta x) -$$

$$- \frac{\Delta t}{\gamma} \widehat{F}_{\Delta t}(x - \Delta x) d_{\Delta x} \delta(\Delta x) - d\Delta x \frac{\Delta t}{2\pi} \int dk \tilde{\nu}(k) e^{-ik\Delta x} =$$

$$= d\Delta x \delta(\Delta x) - \frac{\Delta t}{\gamma} d_{\Delta x}[\delta(\Delta x) \widehat{F}_{\Delta t}(x - \Delta x)] - d\Delta x \frac{\Delta t}{2\pi} \int dk \tilde{\nu}(k) e^{-ik\Delta x}.$$

Подставляя в (2а) и пользуясь (4), получаем

$$\frac{f(x, t + \Delta t) - f(x, t)}{\Delta t} = -\frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} f(x - \Delta x, t) d_{\Delta x}[\widehat{F}(x - \Delta x)\delta(\Delta x)] -$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta x f(x - \Delta x, t) \int dk \tilde{v}(k) e^{-ik\Delta x}.$$

Устремим в обеих частях этого соотношения Δt к нулю; получим:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} f(x - \Delta x, t) d_{\Delta x}[F(x - \Delta x)\delta(\Delta x)] -$$

$$-\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta x f(x-\Delta x,t)\int dk\tilde{v}(k)e^{-ik\Delta x}. \tag{8}$$

Распишем последнее слагаемое, меняя порядок интегрирования:

$$-\frac{1}{2\pi}\int dk\tilde{v}(k)\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta x f(x-\Delta x,t)e^{-ik\Delta x} =$$

$$=-\frac{1}{2\pi}\int dk\tilde{v}(k)e^{-ikx}\int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta x - x)f(x-\Delta x,t)e^{ik(x-\Delta x)} = \frac{1}{2\pi}\int dk\tilde{v}(k)\tilde{f}(k,t)e^{-ikx}, \tag{9}$$

где $\tilde{f}(k,t)$ — Фурье-образ от функции $f(x,t)$. Распишем первое слагаемое, интегрируя по частям:

$$-\frac{1}{\gamma}\int_{-\infty}^{\infty} d_{\Delta x}[\delta(\Delta x)F(x-\Delta x)]f(x-\Delta x,t) = -\frac{1}{\gamma}f(x-\Delta x,t)\delta(\Delta x)\,F(x-\Delta x)\Big|_{-\infty}^{\infty} +$$

$$+\frac{1}{\gamma}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(\Delta x)F(x-\Delta x)d_{\Delta x}(x-\Delta x,t) = -\frac{1}{\gamma}F(x)\frac{\partial}{\partial x}f(x,t). \tag{10}$$

Из (8), (9), (10) получаем:

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{1}{\gamma}F(x)\frac{\partial}{\partial x}f(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\tilde{v}(k)\tilde{f}(k,t)e^{-ikx} \tag{11}$$

или

$$\dot{f}+\frac{1}{\gamma}F(x)\frac{\partial}{\partial x}f(x,t) = v(x)*f(x,t). \tag{12}$$

Здесь $v(x)$ — оригинал $\tilde{v}(k)$, а знак $*$ означает свертку.

В случае полетов Леви

$$W_{\Delta t}(k) = \exp(-D\Delta t\,|k|^{\alpha}),$$

откуда $\tilde{v}(k) = D|k|^{\alpha}$. Подставляя в (11), получаем:

$$\dot{f}+\frac{1}{\gamma}F(x)\frac{\partial}{\partial x}f(x,t) = \frac{D}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,|k|^{\alpha}\tilde{f}(k,t)e^{-ikx}$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{1}{\gamma}F(x)\frac{\partial}{\partial x}f(x,t) = D\frac{\partial^{\alpha} f}{\partial x^{\alpha}}. \tag{13}$$

Отметим, что традиционная запись уравнения ФП такова:

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x}[F(x)f(x,t)]=D\frac{\partial^{\alpha}f}{\partial x^{\alpha}}. \tag{14}$$

В приведенном выше выводе формула (13) — следствие уравнения (4). Если сравнить (4) с (2а), то можно было бы записать

$$w_{\Delta t}(x-\Delta x,x)d\Delta x=\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x')d\Delta x'. \tag{4a}$$

Если бы мы использовали равенство плотностей переходных вероятностей

$$w_{\Delta t}(x-\Delta x,x)=\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x'),$$

то получили бы формулу (14). Однако, поскольку плотности вероятности не имеют непосредственного смысла вероятности, нам кажется правильным приравнивать вероятности, то есть считать более правильным равенство (4а). Рассуждаем так: рассмотрим наряду с одномерным пространством Δx пространство $\Delta x'$, связанное с первым соотношением (1). Любой интервал пространства $\Delta x'$ отображается в интервал пространства Δx с помощью (7). «Число переходов» из каждого интервала $d\Delta x'$ в точку x пропорционально

$$\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x')d\Delta x'=w_{\Delta t}(x-\Delta x,x)d\Delta x,$$

т.е. равно «числу переходов» из интервала $d\Delta x$ в точку x. Случайность определяется действием случайной силы, результатом которого оказывается смещение $\Delta x'$.

Проанализируем еще одно предположение, сделанное вначале. Оно — об аналитичности функции $W_{\Delta t}(k)$ по отношению к аргументу Δt. То, что при $\Delta t\to 0$ $W_{\Delta t}(k)\to 1$, — очевидно. Это следует из начального условия для функции $\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x)$. Она должна стремиться к $\delta(\Delta x)$, как это следует из (2а). Но то, что при малых Δt отклонение $W_{\Delta t}(k)$ от единицы пропорционально первой степени Δt не столь очевидно. То, что это так, следует из требования независимости процесса по отношению к сдвигу по времени (марковость). Если такой независимости нет, т.е. $W_{\Delta t}(k)=1-\tilde{v}(k)(\Delta t)^{\alpha}$, свойство марковости теряется. Если чисто формально продолжить вывод уравнения ФП в предположении $W_{\Delta t}(k)=1-\tilde{v}(k)(\Delta t)^{\alpha}$, $|\alpha|<1$, приходим к соотношению

$$\lim\Big|_{\Delta t\to 0}\frac{f(x,t+\Delta t)-f(x,t)}{(\Delta t)^{\alpha}}=v(x)*f(x,t), \tag{15}$$

говорящему о том, что функция f удовлетворяет условию Гельдера при любом t. Действительно, в данном случае

$$\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\left[1-\tilde{v}(k)(\Delta t)^{\alpha}\right]e^{-ik\Delta x}\left[1+\frac{ik\Delta t}{\gamma}\widehat{F}_{\Delta t}(x-\Delta x)\right]=$$

$$=\delta(\Delta x)-(\Delta t)^{\alpha}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\tilde{v}(k)e^{-ik\Delta x}+O(\Delta t),$$

$$\tilde{w}_{\Delta t}(\Delta x')d(\Delta x') = \delta(\Delta x)d\Delta x - d\Delta x(\Delta t)^{\alpha}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{v}(k)e^{-ik\Delta x}dk+O(\Delta t).$$

Подставляя в (2а), получаем (15).

Вывод уравнения Фоккера–Планка приводится в большом числе учебников и монографий. Так, в монографии [1] и книге [3] приведены два независимых вывода этого уравнения, один из которых основан на разложении выражения $f(x-\Delta x,t)w_{\Delta t}(x-\Delta x,\Delta x)$ в ряд по случайной переменной Δx, входящей в первые аргументы обеих функций. В дальнейшем Δt устремляется к нулю. Но при этом функция $w_{\Delta t}(x-\Delta x,\Delta x)$ стремится к δ-функции, поэтому аналитичность произведения $fw_{\Delta t}$ вызывает некоторое сомнение. Если разложить в ряд по Δx лишь первый сомножитель, т.е. $f(x-\Delta x,t)$, то станет очевидным, что уравнение ФП не может содержать слагаемое, пропорциональное $f(x,t)$. Будут входить только производные по x от этой функции, т.е. это уравнение имеет вид (9), а не (9а). Последнее становится очевидным, если разложить $f(x-\Delta x,t)$ по Δx в правой части (4):

$$f(x-\Delta x,t)=f(x,t)-\frac{\partial f}{\partial x}\Delta x,$$

Но согласно (5) $\Delta x \approx \Delta x' + \frac{1}{\gamma}F\Delta t$, где $\Delta x' = \int_0^{\Delta t} Y(t')dt'$, а в силу симметрии $\langle \Delta x' \rangle = 0$, и мы сразу из (4) получаем уравнение (3) или (12).

В приведенном выводе наименьшим параметром задачи считалась масса частицы. Мы ее устремили к нулю и в этом предположении определили Δx как функцию Δt. При переходе к частной производной по времени от функции распределения нам пришлось и Δt устремить к нулю. Точное соотношение для $x(t)-x(0)$, приведенное вначале, содержит отношение t/m или, что то же, $\Delta t/m$. Но если масса равна нулю, то при любом Δt это отношение бесконечно. Казалось бы, что устремлять Δt к нулю в этом случае нельзя, и появляется сомнение в правильности вывода уравнения (3) или (14).

Для того чтобы устранить эти сомнения, нужно было бы последовательно рассмотреть случай $\Delta t/m \ll 1$.

При этом основную роль в выражении для $x(t)-x(0)$ играет начальное условие:

$$x(t+\Delta t)-x(t)=\dot{x}(t)\Delta t+\frac{1}{m}\int_0^{\Delta t}(\Delta t-\Delta t')(F/\gamma+\tilde{Y})d\Delta t'. \qquad (16)$$

Второе слагаемое пренебрежимо мало по сравнению с первым (оно пропорционально $(\Delta t)^2$). Согласно уравнению движения передемпфированной частицы

$$\dot{x}(t)=F/\gamma+\tilde{Y}.$$

Подставляя в (16), получаем:

$$\Delta x=\Delta t(F/\gamma+\tilde{Y}).$$

Для одной определенной траектории

$$w(x-\Delta x,x)=\delta(\Delta x-\Delta t(F/\gamma+\tilde{Y})).$$

Подставляя в (2a), находим:

$$f(x,t+\Delta t)=f(x-\Delta t(F/\gamma+\tilde{Y}),t).$$

Но $\Delta t\tilde{Y}=\Delta x'$. Правую часть предыдущего уравнения нужно усреднить по $\Delta x'$, т.е.

$$f(x,t+\Delta t)=\int d\Delta x'\tilde{w}(\Delta x')f(x-\Delta t\frac{F}{\gamma}-\Delta x')=$$

$$=f(x,t)-\Delta t\frac{F}{\gamma}\frac{\partial f}{\partial x}-O((\Delta t)^2)+\cdots$$

Точками обозначены производные высшего порядка по x. Таким образом, и в этом случае в уравнении ФП отсутствует производная от силы по координате.

В книге [2] при выводе уравнения просто ошибочно сила была введена под знак дифференцирования. Эти обстоятельства в какой-то степени явились побудительным мотивом для более тщательного вывода этого уравнения.

В приведенном выводе существенным образом использовалось условие марковости. Мы предполагали, что состояние системы в данный момент определяется ее состоянием в предыдущий момент. Аналитическим выражением этого является уравнение (2). В книге [1] при выводе уравнения ФП не используется марковость процесса, а решается уравнение движения частицы с использованием начального условия. Таким образом, состояние частицы в данный момент задается предысторией ее движения до этого момента. Повидимому, в этом случае уравнение (2) уже не справедливо, поскольку условие марковости не выполняется. Возможно, в этом — причина различия вида уравнения ФП при учете марковости и без такого учета. Отметим, что в цитируемой работе масса частицы не считается равной нулю, в то время как свойство марковости возникает как раз вследствие стремления массы к нулю. Как уже говорилось, при этом размерность фазового пространства уменьшается вдвое, остается только конфигурационное пространство. При выводе уравнения ФП для конечной массы можно было бы также использовать условие марковости, но уже в пространстве шести измерений. Формальная причина расхождения лежит в том, что усреднение происходит не по Δx, а по $\Delta x'$, т.е. по смещениям, вызванным именно случайными силами (формула (4а)).

Приведем еще одно соображение в пользу того, что в уравнении (14) сила не должна дифференцироваться по координате. При температуре, равной или близкой к нулю, правые части уравнений (13) и (14) могут быть отброшены, поскольку стремится к нулю коэффициент диффузии. Пусть начальное распределение — одиночный «горб». Он перемещается вправо со скоростью, вообще говоря, зависящей от координаты. Если сила — величина постоянная, то распределение — волна, бегущая вправо, что естественно. Если сила не постоянна, то все равно она перемещает «горб» вправо. При этом затухание отсутствует, ибо частицы никуда не исчезают, а диффузия не «размазывает» первоначальное распределение, что и следует из уравнения (13).

Из уравнения же (14) вытекает, что распределение затухает со временем. Покажем это. Уравнение (14) имеет вид:

$$f_t + af_x + fa_x = 0. \tag{14а}$$

Положим $f = e^{-\lambda t}v$, где λ — функция x. Отметим сразу, что уравнение (13) отличается от уравнения (14) отсутствием последнего слагаемого. Уравнение (14а) после указанной подстановки приобретает вид:

$$v_t - \lambda v + av_x - \lambda_x v + a_x v = 0.$$

Выбираем функцию $\lambda(x)$ из условия $\lambda_x + \lambda = a_x$, тогда для v получаем уравнение, идентичное уравнению (14а) без последнего слагаемого. Его решение —

$$v = \varphi\left(\int_0^x \frac{dx'}{a(x')} - t\right);$$

тогда

$$f = e^{-\lambda(x)t}\varphi\left(\int_0^x \frac{dx'}{a(x')} - t\right).$$

Здесь $\lambda(x) = \lambda_0 e^{-x} + \int_0^x dx' e^{-(x-x')} a_{x'}(x')$, т.е. решение (14а) отличается от решения уравнения (13) множителем $e^{-\lambda t}$.

2. ДИФФУЗИЯ ПЕРЕДЕМПФИРОВАННОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ СЛУЧАЙНО РАСПОЛОЖЕННЫХ СИЛОВЫХ ЦЕНТРОВ В ОТСУТСТВИЕ ВНЕШНЕГО ПОЛЯ

Пусть имеется случайно распределенный в пространстве набор силовых центров, взаимодействующих с передемпфированной частицей. Число силовых центров N также случайная величина. Пусть $\tilde{P}(N)$ — вероятность этого числа. Уравнение движения передемпфированной частицы —

$$\gamma\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{Y}, \tag{17}$$

где $\mathbf{Y}$ — случайная сила, равная сумме сил от всех силовых центров. Пусть $f(\mathbf{r}, t)$ — функция распределения передемпфированных частиц. В силу марковости для нее можно написать уравнение

$$f(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \int d\Delta\mathbf{r} w_{\Delta t}(\mathbf{r} - \Delta\mathbf{r}, \mathbf{r}) f(\mathbf{r} - \Delta\mathbf{r}, t). \tag{18}$$

Считаем силы, действующие на частицу, центральными, т.е. вида $\mathbf{r}_i\psi(r_i)$, где $\mathbf{r}_i$ разность радиус векторов силового центра и частицы. Полная сила от всех N центров равна

$$\mathbf{Y} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i\psi(r_i).$$

Усредненное по числу силовых центров смещение частицы за время Δt, обусловленное полной силой, согласно (17) равно

$$\mathbf{U} = \frac{\Delta t}{\gamma}\sum_N \tilde{P}(N)\sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i\psi(r_i). \tag{19}$$

Построим характеристическую функцию величины $\mathbf{U}$, учитывая независимость смещений от отдельных силовых центров:

$$\langle \exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{U}\rangle = \prod_{N=1}^{\infty} \exp\left[\frac{i\mathbf{k}}{\gamma}\Delta t\tilde{P}(N)\cdot\sum_{i=1}^{N}\mathbf{r}_i\psi(r_i)\right].$$

Заменяя суммирование интегрированием и вводя плотность $n_N(\mathbf{r})$ силовых центров, получаем:

$$\langle \exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{U}\rangle = \exp\left[\frac{i\Delta t}{\gamma}\int(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r}\psi(r)\bar{n}(\mathbf{r})\right],\ \bar{n}(\mathbf{r}) \equiv \sum_N \tilde{P}(N)n_N(\mathbf{r}). \quad (20)$$

Плотность вероятности смещения $\mathbf{U}$ равна

$$P(\mathbf{U}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}\exp\left\{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{U} + \frac{i\Delta t}{\gamma}\int(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r}\psi(r)\bar{n}(\mathbf{r})\right\} \approx$$

$$\approx \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{U}}\left[1 + \frac{i\Delta t}{\gamma}\int(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r}\psi(r)\bar{n}(\mathbf{r})\right] =$$

$$= \delta(\mathbf{U}) + \frac{i\Delta t}{\gamma(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{l})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{U}),\ \mathbf{l} \equiv \int\mathbf{r}d\mathbf{r}\psi(r)\bar{n}(\mathbf{r}). \quad (21)$$

Если $\bar{n}(\mathbf{r})$ изотропно, т.е. является функцией только r, то $\mathbf{l} = \mathbf{0}$. Перепишем (21) в виде

$$P(\mathbf{U}) = \delta(\mathbf{U}) - \frac{\Delta t}{\gamma}\mathbf{l}\cdot\nabla_{\mathbf{U}}\delta(\mathbf{U}). \quad (22)$$

Теперь (19) можно переписать, заменив $w_{\Delta t}(\mathbf{r}-\Delta\mathbf{r},\mathbf{r})$ на $P(\mathbf{U})$:

$$\frac{\Delta f}{\Delta t} + \frac{\mathbf{l}}{\gamma}\cdot\int d\mathbf{U}f(\mathbf{r}-\mathbf{U},t)\nabla_{\mathbf{U}}\delta(\mathbf{U}) = 0, \quad (23)$$

$$f(\mathbf{r}-\mathbf{U},t)\nabla_{\mathbf{U}}\delta(\mathbf{U}) = \nabla_{\mathbf{U}}(f(\mathbf{r}-\mathbf{U},t)\delta(\mathbf{U})) - \delta(\mathbf{U})\nabla_{\mathbf{U}}f(\mathbf{r}-\mathbf{U},t),$$

но

$$-\nabla_{\mathbf{U}}f(\mathbf{r}-\mathbf{U},t) = \nabla_{\mathbf{r}}f(\mathbf{r}-\mathbf{U},t),$$

$$\int d\mathbf{U}f(\mathbf{r}-\mathbf{U},t)\cdot\nabla_{\mathbf{U}}\delta(\mathbf{U}) = \oint_{\mathbf{U}} d\mathbf{S}\delta(\mathbf{U})f(\mathbf{r}-\mathbf{U},t) + \int d\mathbf{U}\delta(\mathbf{U})\cdot\nabla_{\mathbf{r}}f(\mathbf{r}-\mathbf{U},t).$$

Первый интеграл правой части равен нулю, второй равен $\nabla_{\mathbf{r}}f(\mathbf{r})$. Таким образом, устремляя к нулю Δt, уравнение (23) перепишем в виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{l}}{\gamma}\cdot\nabla f = 0. \quad (24)$$

Решение этого уравнения — плоская волна, бегущая по направлению $\mathbf{l}$ со скоростью $\mathbf{l}/\gamma$:

$$f = f_0(\mathbf{r} - \mathbf{l}\gamma^{-1}t), \quad (25)$$

где f_0 — функция распределения в момент $t = 0$.

Из формул (24) и (25) следует, что при $\mathbf{l} = \mathbf{0}$ $f = f_0(\mathbf{r})$. Вывод — неожиданный. Дело в том, что мы не учли температуру. Наличие температуры должно привести к появлению в правой части (24) члена, пропорционального оператору Лапласа. Тогда уравнение (24) превращается в уравнение диффузии в некотором эффективном внешнем поле. Если $\mathbf{l}$ зависит от $\mathbf{r}$, то формула (25) не верна. Нужно искать решение уравнения (24) методом характеристик, т.е. искать общее решение системы уравнений

$$\gamma dt = \frac{dx}{l_x} = \frac{dy}{l_y} = \frac{dz}{l_z}.$$

Оно содержит три константы. В качестве таких констант берем начальные значения характеристик x_0, y_0, z_0, т.е. $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}_0(\mathbf{r}, t)$. Тогда решением уравнения (24) будет $f_0(\mathbf{r}_0(\mathbf{r}, t))$. В итоге распределение частиц при $t \to \infty$ оказывается равным $\lim\limits_{t\to\infty} f_0(\mathbf{r}_0(\mathbf{r}, t))$. Как видно из (24), оно оказывается однородным в пространстве.

При определении величины $\mathbf{l}$ (формула (22)) предполагалось, что начало координат находится в точке нахождения передемпфированной частицы. Очевидно, что при наличии анизотропии, т.е. независимого от координат градиента $\nabla\bar{n}$

$$\bar{n}(\mathbf{r}) = \bar{n}(0) + (\mathbf{r}\cdot\mathbf{a}),\ \mathbf{a} = \nabla_{\mathrm{r}}\bar{n}.$$

Выбирая в качестве оси OZ направление вектора $\mathbf{a}$ в интеграле для $\mathbf{l}$, получим:

$$\mathbf{l} = \int \mathbf{r} d\mathbf{r} \psi(r)\left[\bar{n}(0) + (\mathbf{r}\cdot\mathbf{a})\right] = \int \mathbf{r} d\mathbf{r} \psi(r)(\mathbf{r}\cdot\mathbf{a}) = \nabla_{\mathrm{r}}\bar{n}\,\frac{4\pi}{3}\int\limits_0^\infty r^4\psi(r)dr.$$

Если $\mathbf{l}$ направлено от частицы, что соответствует ее притяжению к скоплению силовых центров, то частица притягивается к этому скоплению. При $\mathbf{l}$, направленном в противоположную сторону (отталкивание), частица отталкивается от скопления. Очевидно, что $\mathbf{l} = \mathbf{0}$, если

$$\int r^4 dr \varphi(r) = 0,$$

что возможно, когда $\varphi(r)$ меняет знак с ростом r. Это условие можно трактовать как условие устойчивости рассматриваемой системы, исходя из соображения, что при абсолютном нуле температуры никакие движения в системе не должны иметь место.

В приведенном рассмотрении предполагалось, что внешнее поле отсутствует. Кроме того, не учитывалось взаимодействие самих передемпфированных частиц. Если эти частицы распределены в пространстве равномерно, то действующая на одну из них сила равна нулю. В противном случае эта сила пропорциональна градиенту их концентрации с обратным знаком, т.е. $-\alpha\nabla f$. Эту силу и внешнее поле нужно прибавить к силе $\mathbf{Y}$ при нахождении смещения. Уравнение движения частицы таково:

$$\gamma\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{Y} - \alpha\nabla f + \mathbf{F}(\mathbf{r}),$$

где $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ — внешнее поле, т.е. в формуле (19) в правую часть нужно добавить слагаемые $\Delta t\mathbf{F}(\mathbf{r}) / \gamma$ и $-\alpha\Delta t\nabla f / \gamma$. При этом

$$\langle \exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{U}\rangle = \exp\left[\frac{i\Delta t}{\gamma}\int(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r}\psi(r)\bar{n}(\mathbf{r}) - \frac{i\alpha\Delta t}{\gamma}\mathbf{k}\cdot\nabla f + \frac{i\Delta t\mathbf{k}}{\gamma}\cdot\mathbf{F}(\mathbf{r})\right].$$

Плотность вероятности смещения

$$P(\mathbf{U}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{U}}\left[1 + \frac{i\Delta t}{\gamma}\left\{\int d\mathbf{r}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\psi(r)\bar{n}(\mathbf{r}) - \alpha\mathbf{k}\cdot\nabla f + \mathbf{k}\cdot\mathbf{F}(\mathbf{r})\right\}\right] =$$

$$= \delta(\mathbf{U}) + \frac{i\Delta t}{\gamma(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{l})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{U}) - \frac{i\Delta t\alpha\nabla f}{\gamma(2\pi)^3}\cdot\int d\mathbf{k}\mathbf{k}\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{U}) +$$

$$+\frac{i\Delta t\mathbf{F}(\mathbf{r})}{\gamma(2\pi)^3}\cdot\int d\mathbf{k}\mathbf{k}\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{U}).$$

Подставляя это выражение вместо $w_{\Delta t}$ в (18), получаем уравнение Фоккера–Планка в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{l} + \mathbf{F}}{\gamma}\cdot\nabla f - \frac{\alpha}{\gamma}(\nabla f)^2 = 0.$$

При наличии температуры в правой части появляется слагаемое, пропорциональное Δf, т.е. $D\Delta f$, где D — коэффициент диффузии. Таким образом, мы видим, что при учете взаимодействия передемпфированных частиц уравнение Фоккера–Планка становится нелинейным:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{A}\cdot\nabla f - D\Delta f = \frac{\alpha}{\gamma}(\nabla f)^2,\ \mathbf{A} = \frac{\mathbf{l} + \mathbf{F}}{\gamma}. \tag{26}$$

Считая α / γ малым параметром, решаем уравнение методом теории возмущений. В качестве нулевого приближения возьмем решение однородного уравнения (уравнения без правой части), удовлетворяющего начальному условию $f(\mathbf{r}, 0) = f_0(\mathbf{r})$:

$$f(\mathbf{r}, t) = \tilde{G} * f_0(\mathbf{r}),$$

где $\tilde{G}$ — функция Грина уравнения

$$\dot{f} + \mathbf{A}\cdot\nabla f - D\Delta f = 0.$$

Итак, $\tilde{G} * f_0(\mathbf{r})$ — решение уравнения (26) в нулевом приближении по α. В качестве поправки первого порядка по α берем решение уравнения (26), удовлетворяющее нулевому начальному условию:

$$f^{(1)} = \frac{\alpha}{\gamma}\tilde{G} ** (\nabla\tilde{G} * f_0(\mathbf{r}))^2.$$

Значок $*$ обозначает свертку по координатам, а $**$ — свертку по координатам и времени. Таким образом, в первом приближении

$$f(\mathbf{r},t) = \tilde{G} * f_0(\mathbf{r}) + \frac{\alpha}{\gamma}\tilde{G} ** (\nabla\tilde{G} * f_0(\mathbf{r})).$$

Будем считать $\mathbf{F}$ не зависящей от координат; тогда $\mathbf{A}$ — постоянный вектор. Введем новую искомую функцию $u(\mathbf{r},t)$ по формуле

$$f(\mathbf{r},t) = u(\mathbf{r},t)\exp\left(\frac{\mathbf{A}\cdot\mathbf{r}}{2D} - \frac{A^2 t}{4D}\right).$$

Для $u(\mathbf{r},t)$ получаем уравнение:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D\Delta u = \frac{\alpha}{\gamma}(B^2 u + \mathbf{B}\cdot\nabla u^2 + (\nabla u)^2)\exp\left(\frac{\mathbf{A}\cdot\mathbf{r}}{2D} - \frac{A^2 t}{4D}\right),\quad \mathbf{B} = \frac{\mathbf{A}}{2D}. \tag{27}$$

Обозначая правую часть уравнения (27) через $\psi(\mathbf{r},t)$, получаем в первом приближении:

$$u(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi Dt)^{3/2}}\int d\mathbf{r}' f_0(\mathbf{r}')\exp\left\{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{4t} - \frac{\mathbf{A}\cdot\mathbf{r}'}{2D}\right\} +$$

$$+\frac{\alpha}{\gamma(2\pi D)^{3/2}}\int_0^t \frac{dt'}{(t-t')^{3/2}}\int d\mathbf{r}'(B^2 u^{(0)} + \mathbf{B}\cdot\nabla u^{(0)2} + (\nabla u^{(0)})^2)\times$$

$$\times\exp\left\{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{4D(t-t')} + \frac{\mathbf{A}\cdot\mathbf{r}'}{2D} - \frac{A^2 t'}{4D}\right\}.$$

Здесь $u^{(0)}(\mathbf{r},t) = \dfrac{1}{(2\pi Dt)^{3/2}}\displaystyle\int d\mathbf{r}' f_0(\mathbf{r}')\exp\left[-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{4Dt} - \frac{\mathbf{A}\cdot\mathbf{r}'}{2D}\right].$

Выражение $f(\mathbf{r},t)$ получим, умножая $u(\mathbf{r},t)$ на $\exp\left(\dfrac{\mathbf{A}\cdot\mathbf{r}}{2D} - \dfrac{A^2 t}{4D}\right)$:

$$f(\mathbf{r},t)=\frac{e^{-\frac{A^2t}{4D}}}{(2\pi Dt)^{3/2}}\int d\mathbf{r}' f_0(\mathbf{r}')\exp\left\{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{4Dt}+\frac{\mathbf{A}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{2D}\right\}+$$

$$+\frac{\alpha}{\gamma(2\pi D)^{3/2}}\int_0^t\frac{dt'}{(t-t')^{3/2}}\int d\mathbf{r}'(B^2u^{(0)}(\mathbf{r}',t')+\mathbf{B}\cdot\nabla u^{(0)2}(\mathbf{r}',t')+(\nabla u^{(0)})^2)\times$$

$$\times\exp\left\{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{4D(t-t')}+\frac{\mathbf{A}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{r}')}{2D}-\frac{A^2(t+t')}{4D}\right\}.$$

Отметим, что в книге [4] предполагалось, что силовые центры (источники) распределены равномерно в пространстве, т.е. в нашем случае это означает, что $\mathbf{l}$ равно нулю, в отличие от случая конечного, не равного нулю $\mathbf{l}$.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. А. И. Ахиезер, С. В. Пелетминский, *Методы статистической физики* (Москва: Наука: 1977).
2. Г. Хакен, *Синергетика* (Москва: Мир: 1980).
3. С. Чандрасекар, *Стохастические проблемы в физике и астрономии* (Москва: Иностр. лит.: 1947).
4. В. М. Золотарев, *Одномерные устойчивые распределения* (Москва: Наука: 1983).