

К теории классической мезодиффузии

© В.В. Учайкин, В.В. Саенко

Ульяновский государственный университет, Институт теоретической физики
432700 Ульяновск, Россия
E-mail: uchaikin@sv.uven.ru

(Поступило в Редакцию 27 марта 2000 г.)

На простой модели классического блуждания частиц с постоянной скоростью и анизотропным угловым распределением исследуются характерные особенности мезодиффузии, т.е. промежуточной стадии между баллистическим режимом (малые времена) и обычной диффузией (большие времена). В крайнем случае анизотропии — блуждании по прямой процесс описывается телеграфным уравнением, в решении которого присутствуют δ -функции, отражающие баллистическую компоненту. С уменьшением анизотропии δ -сингулярность переходит в фронтovou всплеск (квазибаллистическая компонента), за пределами которого распределение удовлетворительно описывается телеграфным приближением. В другом крайнем случае — изотропном блуждании фронтové всплески исчезают, а телеграфное приближение, вопреки распространенному мнению, оказывается более грубым, чем диффузионное.

Введение

Создание полупроводниковых материалов высокой частоты с совершенной кристаллической структурой породило новое направление в физике конденсированного состояния — исследование мезоскопических систем [1–3]. Мезоскопические наноструктуры представляют уникальную возможность экспериментального исследования процесса переноса в среде с хорошо определенным потенциальным полем, не искаженным случайными примесями и другими дефектами. При этом весьма существенным оказывается наличие трех временных областей с разными режимами переноса: интервал $(0, t_1)$ с преобладанием баллистического переноса, область (t_2, ∞) , $(t_2 > t_1)$, где устанавливается режим нормальной (гауссовой) диффузии, и промежуточная область (t_1, t_2) , режим переноса в которой назван в [4] мезоскопической диффузией (мы будем использовать термин мезодиффузия).

Квантово-механический анализ одномерной задачи, проведенный в [4], показал, что отличительной особенностью мезодиффузии является отклонение от закона Фика

$$j = -D \frac{\partial \rho}{\partial x},$$

заменяемого в этой области соотношением Максвелла–Каттанео

$$j = -D \frac{\partial \rho}{\partial x} - \Theta \frac{\partial j}{\partial t}, \quad \Theta > 0.$$

Вместе с уравнением непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$$

оно приводит к уравнению для плотности распределения частиц $\rho(x, t)$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \Theta \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2},$$

называемому телеграфным. Характерной особенностью его решения для ограниченного по времени (например, мгновенного) источника является наличие диффузионного фронта, за пределами которого диффундирующие частицы отсутствуют, а в окрестности самого фронта они движутся в баллистическом режиме. При больших временах баллистическая компонента затухает, а оставшаяся часть решения в образцах больших размеров превращается в гауссов пакет, удовлетворяющий обычному дифференциальному уравнению.

Результаты, полученные в [4], относятся, однако, к довольно искусственной модели — блужданию частицы вдоль фиксированной оси x с нулевой поперечной и знакопеременной продольной компонентами скорости (одномерное блуждание). В этой модели отсутствует различие между нерассеянными частицами и многократно рассеянными в одном (скажем, положительном) направлении оси x , что, с одной стороны, стирает различие между телеграфным и кинетическим уравнениями и, с другой стороны, порождает специфическую δ -сингулярность на фронте диффузионной волны, отсутствующую в реальном физическом процессе.

Крайним случаем противоположного типа можно считать односкоростную модель изотропного рассеяния, стационарный вариант которой тщательно изучен в связи с его использованием в нейтронно-физических и ядерно-реакторных задачах [5–7]. Нестационарному же варианту этой модели посвящено относительно небольшое число работ (см. библиографию в [8–10]), где телеграфное уравнение появляется как приближенное. Однако количественного анализа его точности до сих пор не проведено.

В настоящей работе рассматривается класс мезодиффузионных моделей, зависящих от параметра $\nu \in [1/\sqrt{3}, 1]$. Предполагается, что распределение косинуса угла ω между осью x и направлением движения частицы после рассеяния не зависит от направления

движения до рассеяния и имеет плотность

$$W_\nu(\omega) = \frac{\alpha + 1}{2} |\omega|^\alpha, \quad |\omega| \leq 1, \quad \alpha = \frac{3\nu^2 - 1}{1 - \nu^2} \geq 0. \quad (1)$$

С такой же плотностью распределено и начальное направление частицы, в момент времени $t = 0$ начинающей движение из начала координат. Параметр

$$\nu = \left[\int_{-1}^1 \omega^2 W_\nu(\omega) d\omega \right]^{1/2} = \left(\frac{\alpha + 1}{\alpha + 3} \right)^{1/2} \geq \frac{1}{\sqrt{3}}$$

есть среднеквадратичный косинус: при $\nu = 1/\sqrt{3}$ он соответствует изотропному блужданию, а при $\nu = 1$ мы имеем дело с одномерным блужданием. Плавная зависимость индикатрисы рассеяния (1) от параметра ν позволяет проследить эволюцию самих распределений с изменением ν и сделать заключение о соотношении решений диффузионного, телеграфного и кинетического уравнений.

Телеграфное уравнение и одномерная мезодиффузия

Телеграфное уравнение, выведенное (как указано в [11]) лордом Кельвином в связи с проведением первого трансатлантического кабеля, в безразмерных единицах времени t имеет вид

$$\frac{\partial^2 f_\nu}{\partial t^2} + \frac{\partial f_\nu}{\partial t} = \nu^2 \frac{\partial^2 f_\nu}{\partial x^2}. \quad (2)$$

Его решение $f_\nu(x, t)$ имеет смысл тока в точке x проводника в момент времени t , а параметр ν связан с самоиндукцией и сопротивлением единицы длины проводника. При начальных условиях

$$f_\nu(x, 0) = \delta(x), \quad [\partial f_\nu(x, t) / \partial t]_{t=0} = 0$$

оно состоит из двух слагаемых

$$f_\nu(x, t) = f_\nu^{(0)}(x, t) + f_\nu^{(s)}(x, t). \quad (3)$$

Первое описывает два мгновенных импульса, расходящихся из начала координат со скоростью ν ,

$$f_\nu^{(0)}(x, t) = \frac{1}{2} [\delta(x - \nu t) + \delta(x + \nu t)] \exp\{-t/2\}.$$

Второе дает непрерывную часть решения, заполняющего интервал между этими импульсами ($-\nu t < x < \nu t$),

$$f_\nu^{(s)}(x, t) = \frac{1}{4\nu} \left[I_0 \left(\sqrt{(t^2 - x^2/\nu^2)/4} \right) + t I_1 \left(\sqrt{(t^2 - x^2/\nu^2)/4} \right) / \sqrt{t^2 - x^2/\nu^2} \right] e^{-t/2}.$$

Отметим следующие свойства приведенного решения:

$$\begin{aligned} f_\nu(x, t) &> 0, \quad |x| \leq \nu t, \\ f_\nu(x, t) &= 0, \quad |x| > \nu t, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\int_{-\nu t}^{\nu t} f_\nu(x, t) dx = 1, \quad (5)$$

$$\int_{-\nu t}^{\nu t} x^2 f_\nu(x, t) dx = 2\nu^2 [t + \exp\{-t\} - 1], \quad (6)$$

$$f_\nu(x, t) \sim g_\nu(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\nu^2 t}} \exp\left\{-\frac{x^2}{4\nu^2 t}\right\}, \quad t \rightarrow \infty. \quad (7)$$

Перечисленные свойства оказались как нельзя кстати при описании совершенно иного процесса — симметричного блуждания по прямой [12–15], где $f_\nu(x, t)$ имеет смысл плотности вероятности в момент времени t ; параметр ν — смысл скорости свободного движения частицы; $f_\nu^{(0)}(x, t)$ описывает распределение частиц, не менявших до момента времени t направления своего движения. Они находятся в точках $x = \nu t$ и $x = -\nu t$, образуя фронт диффузионного пакета, занимающего отрезок $[-\nu t, \nu t]$; вероятность обнаружить частицу за пределами отрезка равна нулю. При $t \rightarrow \infty$ решение $f_\nu(x, t)$ стремится к нормальному распределению $g_\nu(x, t)$ с дисперсией $2\nu^2 t$ [13], удовлетворяющему обычному диффузионному уравнению

$$\frac{\partial g_\nu}{\partial t} = \nu^2 \frac{\partial^2 g_\nu}{\partial x^2}$$

с начальным условием $g_\nu(x, 0) = \delta(x)$. В силу своего приближенного (асимптотического) характера оно уже не содержит информации о диффузионном фронте, а описывает лишь центральную (впрочем, довольно большую) часть диффузионного пакета (рис. 1).

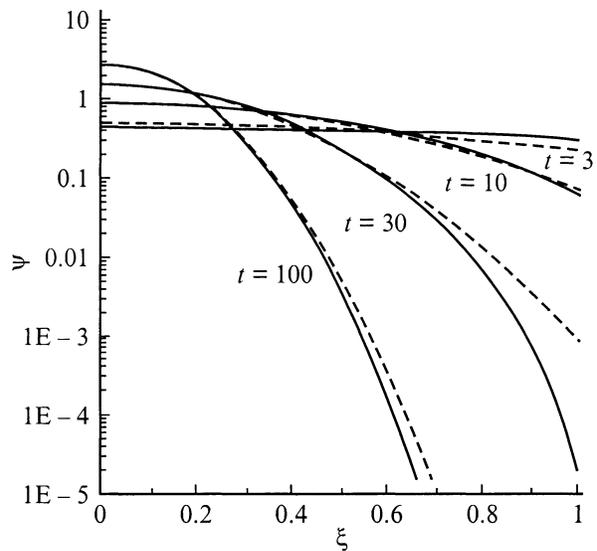


Рис. 1. Распределения $\psi(\xi, t) = t f_1(\xi t, t)$ (сплошная кривая) и $\psi'(\xi, t) = t g_1(\xi t, t)$ (штриховая кривая) для одномерного блуждания.

Изотропная мезодиффузия

С физической точки зрения, однако, одномерная модель, рассмотренная в [4], представляется довольно искусственной: в результате столкновений скорость реальной частицы может принимать и другие направления, а не только коллинеарные оси x . Выберем единицу измерения длины таким образом, чтобы абсолютная величина скорости частицы между расстояниями (она предполагается постоянной) была равна 1. В случае одномерного блуждания такой частицы вдоль оси x ее распределение описывалось бы плотностью $f_1(x, t)$. Если же в результате столкновения частица получает новое направление, не зависящее от предыдущего и имеющее то же распределение, что и начальное, то плотность распределения ее x -координаты в момент времени t $\rho(x, t)$ удовлетворяет интегральному кинетическому уравнению [10,16]

$$\rho(x, t) = \rho^{(0)}(x, t) + \int_0^t dt' \int_{-t'}^{t'} dx' \rho^{(0)}(x', t') \rho(x - x', t - t'), \quad (8)$$

где $\rho^{(0)}(x, t)$ есть плотность распределения x -координаты нерассеянной частицы.

Из элементарных вероятностных соображений можно установить, что при изотропном источнике эта величина равномерно распределена между $-t$ и t (скорость, напомним, равна 1)

$$\rho^{(0)}(x, t) = \begin{cases} (2t)^{-1} \exp\{-t\}, & |x| < t, \\ 0, & |x| > t. \end{cases} \quad (9)$$

Пусть $\psi(x, \omega, t)$ — совместная плотность распределения x -координаты и косинуса угла между скоростью частицы и направлением оси x в момент времени t

$$\int_{-1}^1 \psi(x, \omega, t) d\omega = \rho(x, t).$$

Известно [16], что интегральное уравнение (8) с ядром (9) эквивалентно интегро-дифференциальному уравнению Больцмана

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \omega \frac{\partial}{\partial x} + 1 \right] \psi(x, \omega, t) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \psi(x, \omega, t) d\omega \quad (10)$$

с начальным условием

$$\psi(x, \omega, t) = \frac{1}{2} \delta(x).$$

Разложением по полиномам Лежандра

$$\psi(x, \omega, t) = \sum_{l=0}^{\infty} (l+1/2) P_l(\omega) \psi_l(x, t),$$

$$\psi_l(x, t) = \int_{-1}^1 P_l(\omega) \psi(x, \omega, t) d\omega, \quad \psi_0(x, t) \equiv \rho(x, t)$$

уравнение (10) приводится к цепочке уравнений

$$\frac{\partial \psi_l}{\partial t} + \frac{1}{2l+1} \left[(l+1) \frac{\partial \psi_{l+1}}{\partial x} + l \frac{\partial \psi_{l-1}}{\partial x} \right] + (1 - \delta_{l0}) \psi_l = 0.$$

Оставляя в ней $L+1$ первых уравнений и отбросив в последнем из них член $\partial \psi_{L+1} / \partial x$, получаем хорошо известное в нейтронной физике P_L -приближение [7–9]. В частности, в P_1 -приближении

$$\frac{\partial \psi_0}{\partial t} + \frac{\partial \psi_1}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \psi_1}{\partial t} + \frac{1}{3} \frac{\partial \psi_0}{\partial x} + \psi_1 = 0.$$

Исключая отсюда ψ_1 , приходим к уравнению для $\psi_0 \equiv \rho$ в виде

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{3} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2},$$

так что

$$\rho(x, t) = f_{1/\sqrt{3}}(x, t). \quad (11)$$

Происхождение $\nu = 1/\sqrt{3}$ понятно, поскольку речь идет о среднеквадратичной проекции изотропно распределенного единичного вектора скорости на одну из координатных осей. Но решение (11) в соответствии со свойствами (4)–(7) отлично от нуля лишь на отрезке $[-t/\sqrt{3}, t/\sqrt{3}]$ и имеет δ -сингулярности в граничных точках, тогда как точное решение сосредоточено на отрезке $[-t, t]$ и в граничных точках имеет конечные разрывы величиной $(2t)^{-1} \exp\{-t\}$, обусловленные нерассеянным излучением (9). Рис. 2 показывает, что в этой задаче телеграфное приближение описывает процесс переноса хуже, чем диффузионное. Этот, на первый взгляд, неожиданный результат заставляет с осторожностью относиться к выводам работ, в которых нестационарное диффузионное приближение уточняется переходом к телеграфному уравнению [17,18].

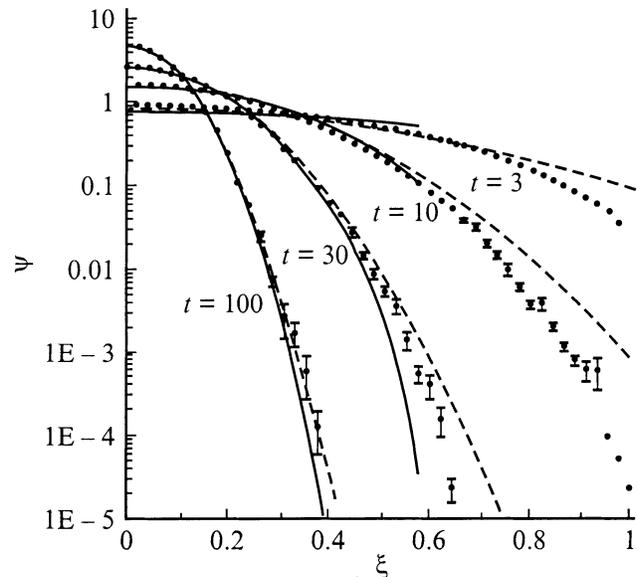


Рис. 2. Распределения $\psi(\xi, t) = t\rho(\xi, t)$ для изотропного блуждания (значки — результаты метода Монте-Карло, сплошные кривые — телеграфное приближение, штриховые — диффузионное приближение).

Анизотропная мезодиффузия

Как видно из предыдущего, отношения диффузионного и телеграфного уравнений к кинетическому в рассматриваемых крайних случаях в определенном смысле противоположны: в одномерном случае диффузионное решение хуже аппроксимирует точное, в трехмерном изотропном, наоборот, телеграфное приближение хуже диффузионного. Плавный переход от одного случая к другому удобно осуществить, выбрав угловое распределение частицы после вылета из источника и после каждого рассеяния в виде (1).

Телеграфное приближение в этой схеме легко получить путем преобразования Фурье–Лапласа интегрального уравнения (8) с распределением нерассеянных частиц, соответствующим индикатрисе рассеяния (1),

$$\rho^{(0)}(x, t) = t^{-1} W_\nu(x/t) \exp\{-t\}, \quad |x| < t. \quad (12)$$

Как следует из (8), трансформанта

$$\tilde{\rho}(k, \lambda) = \int_0^\infty dt \int_{-t}^t dx \exp\{ikx - \lambda t\} \rho(x, t)$$

удовлетворяет уравнению

$$\tilde{\rho}(k, \lambda) = \tilde{\rho}^{(0)}(k, \lambda) [1 + \tilde{\rho}(k, \lambda)], \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}^{(0)}(k, \lambda) &= \int_0^\infty dt \int_{-t}^t dx \exp\{ikx - \lambda t\} \rho^{(0)}(x, t) \\ &= (\alpha + 1)(\lambda + 1) \int_0^1 \frac{\omega^\alpha d\omega}{(\lambda + 1)^2 + (\omega k)^2} \\ &= \frac{\alpha + 1}{\lambda + 1} \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n}{2n + \alpha + 1} \left(\frac{k}{\lambda + 1}\right)^{2n}. \end{aligned}$$

При $k \rightarrow 0$ эта трансформанта имеет асимптотику

$$\tilde{\rho}^{(0)}(k, \lambda) \sim \frac{\lambda + 1}{(\lambda + 1)^2 + \nu^2 k^2},$$

подставляя которую в (13) и производя несложные преобразования, получим

$$[\lambda^2 + \lambda + \nu^2 k^2] \tilde{\rho}(k, \lambda) = \lambda + 1.$$

Это соотношение является ничем иным как преобразованием Фурье–Лапласа телеграфного уравнения

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \nu^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \quad t > 0 \quad (14)$$

с начальными условиями $\rho(x, 0) = \delta(x)$ и $[\partial \rho(x, t) / \partial t]_{t=0} = 0$.

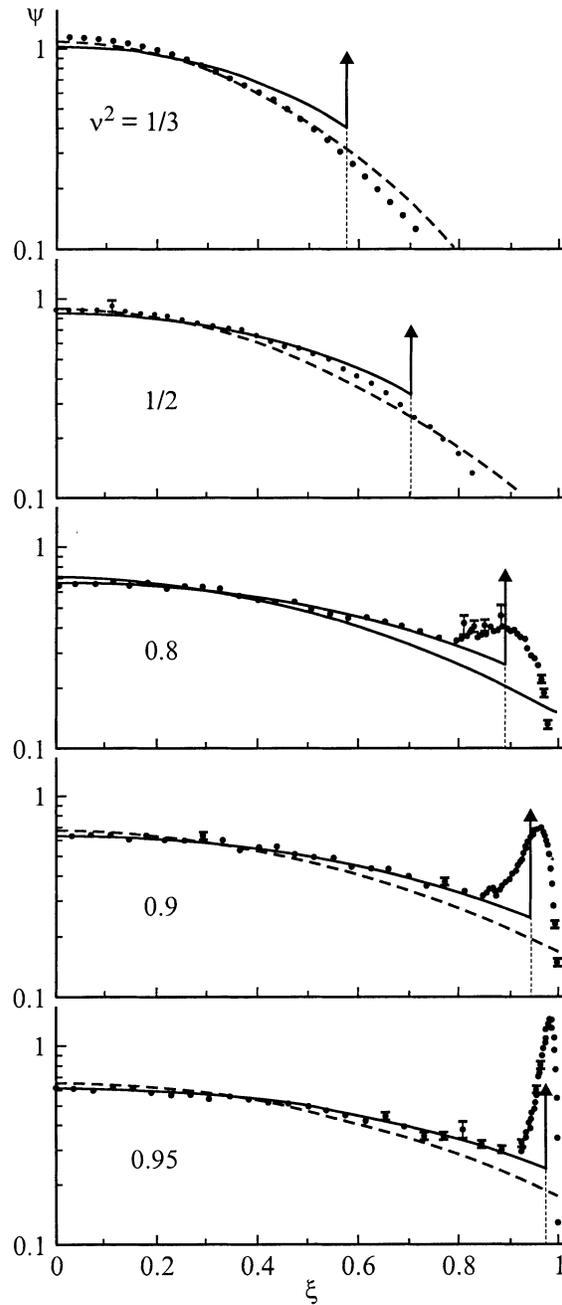


Рис. 3. Распределения $\psi(\xi, t)$ для $t = 5$ и указанных значений ν^2 . Верхний график соответствует изотропному блужданию. Обозначения те же, что и на рис. 2. Вертикальной стрелкой обозначено δ -бипгулярности в телеграфном приближении.

Сопоставление приведенного выше решения (3) уравнения (14) с результатами численного решения интегрального уравнения (8) с ядром (12), полученного методом Монте-Карло (см. Приложение), показано на рис. 3 в переменных $\xi = x/t$ и

$$\psi(\xi, t) = t \rho(\xi t, t).$$

В верхней части рисунка видно, что уже при $\nu^2 = 1/2$, когда угловое распределение линейно зависит от ω , в области $\xi < \nu$ телеграфное решение оказывается ближе к точному, чем диффузионное. По мере дальнейшего увеличения анизотропии в точном решении появляется фронтовой всплеск, описывающий распределение частиц, движущихся все время с положительной x -проекцией скорости. В пределе $\nu^2 \rightarrow 1$ этот всплеск переходит в конечную δ -функцию телеграфного решения. При $\nu^2 \geq 0.7$ за пределами фронтового всплеска телеграфное приближение уже хорошо согласуется с точным решением.

Фронтовой всплеск

Аналитическое описание фронтового всплеска удобно получить методом моментов [19,20]. Пусть $z = t - x$ — отставание частицы от самой крайней точки фронта t и $\rho^+(z, t)$ — распределение по z в момент времени t частиц, двигавшихся все время в положительном направлении оси x , точнее, имевших все время положительную проекцию скорости на эту ось. Для этой плотности также будет справедливо уравнение типа (8) (с поправкой на неотрицательность z)

$$\rho^+(z, t) = \rho^{(0)}(z, t) + \int_0^t dt' \int_0^{t'} dz' \rho^{(0)}(z', t') \rho^+(z - z', t - t'), \quad (15)$$

где

$$\rho^{(0)}(z, t) \equiv t^{-1} W_\nu(1 - z/t) \exp\{-t\}, \quad 0 < z < t. \quad (16)$$

Теперь по обеим переменным z и t удобно выполнить преобразование Лапласа

$$\tilde{\rho}(s, \lambda) = \int_0^\infty dt \int_0^\infty dz \exp\{-\lambda t - sz\} \rho^+(z, t),$$

в результате чего мы приходим к формуле

$$\tilde{\rho}^+(s, \lambda) = \frac{\tilde{\rho}^{(0)}(s, \lambda)}{1 - \tilde{\rho}^{(0)}(s, \lambda)}. \quad (17)$$

Очевидно,

$$[\partial^n \tilde{\rho}^+(s, \lambda) / \partial s^n]_{s=0} = (-1)^n \tilde{m}_n(\lambda),$$

где

$$\tilde{m}_n(\lambda) = \int_0^\infty \exp\{-\lambda t\} m_n(t) dt$$

— преобразование Лапласа n -го момента распределения $\rho^+(z, t)$

$$m_n(t) = \int_0^\infty z^n \rho^+(z, t) dz.$$

Для нерассеянного излучения

$$\tilde{\rho}^{(0)}(s, \lambda) = \frac{\alpha + 1}{2} \int_0^1 \frac{\omega^\alpha d\omega}{1 + \lambda + (1 - \omega)s},$$

откуда

$$\tilde{m}_0^{(0)}(\lambda) = \frac{1}{2(1 + \lambda)}, \quad \tilde{m}_1^{(0)}(\lambda) = \frac{1}{2(1 + \lambda)^2(\alpha + 2)},$$

$$\tilde{m}_2^{(0)}(\lambda) = \frac{2}{(1 + \lambda)^3(\alpha + 2)(\alpha + 3)}$$

и т.д. Дифференцированием (17) по s находим соответствующие выражения для моментов распределения всех частиц, образующих фронтовой всплеск,

$$\tilde{m}_0(\lambda) = \frac{1}{1 + 2\lambda},$$

$$\tilde{m}_1(\lambda) = \frac{2}{(\alpha + 2)(2\lambda + 1)^2},$$

$$\tilde{m}_2(\lambda) = 4 \frac{2(2\lambda + 1)(\alpha + 2) + (\alpha + 3)}{(\alpha + 2)^2(\alpha + 3)(\lambda + 1)(2\lambda + 1)^3}$$

и т.д. Обратное преобразование Лапласа методом вычетов даст

$$m_0(t) = (1/2) \exp\{-t/2\},$$

$$m_1(t) = \frac{t}{2(\alpha + 2)} \exp\{-t/2\}, \quad (18)$$

$$m_2(t) = \left[\frac{4 - 2t + t^2/2}{(\alpha + 2)^2} + \frac{4(t - 2)}{(\alpha + 2)(\alpha + 3)} \right] \exp\{-t/2\}$$

$$+ \frac{4(\alpha + 1)}{(\alpha + 2)^2(\alpha + 3)} \exp\{-t\}. \quad (19)$$

Пользуясь найденными выражениями для моментов, нетрудно установить положение центра тяжести рассматриваемого распределения частиц

$$\bar{x} = t - \bar{z} = t - m_1(t)/m_0(t) = \frac{\alpha + 1}{\alpha + 2} t = \frac{2t}{1 + \nu^{-2}},$$

скорость которого

$$\dot{\bar{x}} = \frac{2}{1 + \nu^{-2}}$$

при ν^2 , близком к предельному значению 1, лишь немного меньше скорости фронта, формируемого нерассеянными частицами (16), движущимися параллельно оси x . Дисперсия же рассматриваемого пакета

$$\sigma_x^2 = \sigma_z^2 = m_2(t)/m_0(t) - [m_1(t)/m_0(t)]^2$$

растет при $t \rightarrow \infty$ как $4(\alpha + 1)t / [(\alpha + 2)^2(\alpha + 3)]$, так что относительная ширина его

$$\delta(t) = \sigma_x(t)/\bar{x}(t) \sim \frac{2}{\sqrt{(\alpha + 1)(\alpha + 3)t}}$$

Параметры γ, μ в формуле (21)

t	ν^2							
	0.8		0.9		0.95		0.99	
	γ	μ	γ	μ	γ	μ	γ	μ
2	0.854	12.69	0.765	35.73	0.729	84.69	0.703	484.8
4	1.103	3.777	0.978	9.908	0.928	22.70	0.892	126.5
6	1.401	1.808	1.229	4.505	1.161	10.07	1.111	55.01
8	1.756	1.093	1.521	2.622	1.428	5.752	1.362	30.98
10	2.184	0.758	1.861	1.767	1.737	3.822	1.650	20.36
12	2.709	0.573	2.262	1.308	2.096	2.799	1.981	14.78
14	3.378	0.459	2.747	1.032	2.521	2.189	2.368	11.48
16	4.280	0.384	0.348	0.851	3.035	1.793	2.828	9.359
18	5.609	0.332	4.129	0.726	3.678	1.521	3.391	7.900
20	7.914	0.294	5.213	0.635	4.524	1.324	4.107	6.849

с течением времени стремится к нулю как $t^{-1/2}$. Назовем режим распространения таких частиц квазибаллистическим. Он включает в себя и частицы баллистического режима — нерассеянные частицы, распределение которых дается плотностью (16) и характеризуется скачком конечной величины

$$\Delta\rho^{(0)} = \rho^{(0)}(0, t) = \frac{\alpha + 1}{2t} \exp\{-t\}. \quad (20)$$

Доля баллистических частиц в квазибаллистическом пакете

$$\eta(t) = m_0^{(0)}(t)/m_0(t) = \exp\{-t/2\}.$$

Пренебрегая скачком (20), аппроксимируем решение уравнения (15) формулой

$$\rho^+(z, t) = \frac{\gamma\mu^2 z}{2\Gamma(2/\gamma)} \exp\{-t/2 - (\mu z)^\gamma\}.$$

Она удовлетворяет условию нормировки

$$\int_0^\infty \rho^+(z, t) dz = (1/2) \exp\{-t/2\}$$

и имеет моменты

$$\int_0^\infty z^n \rho^+(z, t) dz = \frac{\Gamma((n+2)/\gamma)}{2\mu^n \Gamma(2/\gamma)} \exp\{-t/2\}.$$

Приравнявая первый и второй моменты к (18) и (19) соответственно, получаем систему уравнений для определения параметров γ и μ как функций t и ν^2

$$\frac{2\Gamma(4/\gamma)\Gamma(2/\gamma)}{[\Gamma(3/\gamma)]^2} = \frac{m_2(t)}{[m_1(t)]^2} \exp\{-t/2\},$$

$$\mu = \frac{\Gamma(3/\gamma)}{2m_1(t)\Gamma(2/\gamma)} \exp\{-t/2\}.$$

Результаты численных расчетов $\gamma(t, \nu^2)$ и $\mu(t, \nu^2)$ приведены в таблице. На рис. 4 аппроксимация

$$\begin{aligned} \psi^+(\xi, t) &= t\rho^+((1-\xi)t, t) \\ &= \frac{t^2\gamma\mu^2(1-\xi)}{2\Gamma(2/\gamma)} \exp\{-t/2 - (\mu t(1-\xi))^\gamma\} \quad (21) \end{aligned}$$

сравнивается с результатами моделирования методом Монте-Карло распределения частиц, движущихся все время в положительном направлении оси x . Хорошее согласие этих результатов позволяет представить решение кинетического уравнения в виде суммы медленно меняющейся компоненты решения телеграфного уравнения и двух всплесков $\psi^+(\xi, t)$ и $\psi^-(\xi, t)$ симметричных относительно начала координат.

Выводы

Основные выводы работы можно сформулировать следующим образом. Пространственное распределение частиц от мгновенного, точечного источника в случае мезодиффузии отличается от обычного диффузионного распределения наличием фронта, за пределами которого плотность равна нулю. Фронт движется от источника со скоростью свободного движения частицы.

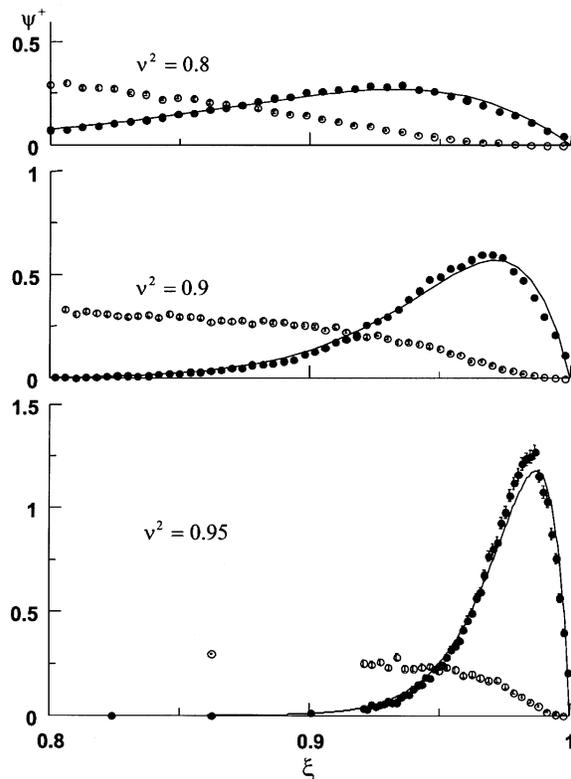


Рис. 4. Распределения $\psi^+(\xi, t) = t\rho^+(\xi t, t)$ частиц, движущихся в положительном направлении оси x (темные кружки — Монте-Карловские результаты, сплошные кривые — аппроксимация (21)), и остальных частиц, хотя бы один раз изменивших знак x -компоненты скорости (светлые кружки — результаты метода Монте-Карло).

В случае одномерной мезодиффузии в обеих точках фронта находятся δ -сингулярности, отражающие баллистический режим. Вместе с непрерывной частью решения телеграфного уравнения они дают точное решение кинетического уравнения Больцмана.

Учет углового распределения частиц приводит к исчезновению сингулярностей и появлению на их месте фронтовых всплесков, ярко выраженных при сильной анизотропии, когда $\nu^2 > 0.8$ близко к единице, и исчезающих на фоне плавной компоненты при $\nu^2 < 0.7$. Форма всплесков, отражающих баллистический режим, хорошо аппроксимируется формулой (21).

При $\nu^2 > 0.7$ непрерывная часть телеграфного уравнения вполне удовлетворительно согласуется с решением кинетического уравнения (при ξ не слишком близком к 1) и вместе с указанной выше аппроксимацией фронтового всплеска может быть использована для аппроксимации точного решения.

В случае слабой анизотропии телеграфное приближение хуже аппроксимирует точное решение, чем диффузионное приближение.

Приложение. Решение уравнений (8) и (15) методом Монте-Карло

Аналоговое моделирование рассматриваемого процесса сложностей не представляет, однако гистограммная форма представления получаемых при этом результатов не очень удобна для описания плотности в области его большого градиента. Действительно, при аналоговом моделировании оценка значения плотности ρ в точке x^* в момент времени t^* получается путем построения в окрестности точки x^* элементарного отрезка (слоя) толщиной Δx^* и вычисления величины

$$\hat{\rho}(\Delta x^*, t^*) = \frac{N(\Delta x^*, t^*)}{N_0 \Delta x^*}, \quad (\text{П1})$$

где N_0 — полное число разыгранных траекторий; $N(\Delta x^*, t^*)$ — число тех из них, которые в момент времени t^* оказались в слое Δx^* .

Оценка (П1) не является несмещенной, ее математическое ожидание

$$M\hat{\rho}(\Delta x^*, t^*) = \frac{1}{\Delta x^*} \int_{\Delta x^*} \rho(x, t^*) dx$$

равно усредненной по Δx^* функции $\rho(x, t^*)$, а не ее искомому значению $\rho(x^*, t^*)$. По теореме о среднем

$$\frac{1}{\Delta x^*} \int_{\Delta x^*} \rho(x, t^*) = \rho(x', t^*),$$

где $x' \in \Delta x^*$, но точное положение x' не известно.

Эта неопределенность является источником "горизонтальной" погрешности. Сама же оценка (П1) содержит статистическую "вертикальную" погрешность.

Понятно, что горизонтальная составляющая погрешности может быть уменьшена путем уменьшения Δx^* , что ведет в свою очередь к увеличению вертикальной погрешности. Полностью освободить результаты от горизонтальной погрешности можно переходом от аналоговой схемы к следующей модификации метода. Пусть

$$J_h(t^*) = \int_0^{t^*} dt \int dx h(x, t) \rho(x, t), \quad (\text{П2})$$

а $X_1, T_1, X_2, T_2, \dots, X_{N(t^*)}, T_{N(t^*)}$ — случайные координаты и моменты времени столкновений частицы в данной реализации траектории; $N(t^*)$ — случайное число столкновений в интервале $(0, t^*)$. Очевидно, что

$$\hat{J}_h(t^*) \equiv \sum_{i=1}^{N(t^*)} h(X_i, T_i) \quad (\text{П3})$$

есть несмещенная оценка функционала (П2)

$$MJ_h(t^*) = J_h(t^*).$$

Представим теперь уравнение (8) в виде

$$\rho(x^*, t^*) = \rho_0(x^*, t^*) + J_h(t^*),$$

где

$$h(x, t) = \rho_0(x^* - x, t^* - t).$$

Согласно (П2), (П3), несмещенной оценкой функционала $J_h(t^*)$ является

$$\hat{J}_h = \sum_{i=1}^{N(t^*)} \rho_0(x^* - X_i, t^* - T_i). \quad (\text{П4})$$

Поскольку $\rho_0(x^* - X_i, t^* - T_i)$ в принятой системе единиц описывает плотность потока и плотность столкновений нерассеянных частиц, то оценка (П4) может рассматриваться как разновидность локальной оценки [21].

Данная работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 0001-00284 и 00-02-17507).

Список литературы

- [1] Лифшиц И.М., Гредескул С.А., Пастур Л.А. Введение в теорию неупорядоченных систем. М.: Наука, 1982.
- [2] Гантмахер В.Ф., Фейгельсон М.В. // УФН. 1998. Т. 168. С. 113.
- [3] Direction in Condensed Matter Physics. Physics of mesoscopic system / Ed. G. Grinstein, G. Mazenko. Singapore: World Scientific Press, 1986.
- [4] Salvador Godoy, Garcia-Colin L.S. // Physica A. 1998. Vol. 258. P. 414–428.
- [5] Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960.
- [6] Марчук Г.И. Методы расчета ядерных реакторов. М.: Госатомиздат, 1961.

- [7] Кейз К., Цвайфель П. Линейная теория переноса. М.: Мир, 1972.
- [8] Вейнберг А.М., Вигнер Е.П. Физическая теория ядерных реакторов. М.: ИЛ, 1961.
- [9] Бекурц К., Виртц К. Нейтронная физика. М.: Атомиздат, 1968.
- [10] Garcia-Pelayo R. // Physica A. 1998. Vol. 258. P. 365.
- [11] Garcia-Pelayo R. // Physica A. 1995. Vol. 216. P. 299.
- [12] Франк Ф., Мизес Р. Дифференциальные и интегральные уравнения математической физики. М., Л.: ОНТИ, 1937.
- [13] Монин А.С. // Изв. АН СССР. Сер. геофиз. 1995. № 3. С. 234.
- [14] Кац М. Несколько вероятностных задач физики и математики. М.: Наука, 1967.
- [15] Монин А.С., Яглом А.М. Статистическая гидромеханика. СПб.: Гидрометеоздат, 1992. Т. 1.
- [16] Uchaikin V.V. // Physica A. 1998. Vol. 255. P. 65–92.
- [17] Соболев С.Л. // УФН. 1997. Т. 167. С. 1095.
- [18] Лыков В.А., Николаев В.Г. // ЖВМиМФ. 1998. Т. 38. С. 1907.
- [19] Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 6. С. 22–29.
- [20] Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 9. С. 6–9.
- [21] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Курс статистического моделирования. М.: Наука, 1976.