ЖЭТФ, 2012, том 141, вып. 1, стр. 195–204

УРАВНЕНИЯ ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ФУНКЦИОНАЛОВ ОТ ТРАЕКТОРИИ СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ В НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ

В. П. Шкилев[*]

Институт химии поверхности Национальной академии наук Украины
03164, Киев, Украина

Поступила в редакцию 6 апреля 2011 г.

В рамках модели случайных ловушек с использованием приближения среднего поля выведено уравнение, позволяющее вычислять распределение функционала от траектории частицы, совершающей случайные блуждания по узлам неоднородной решетки. Полученное уравнение является обобщением уравнения Фейнмана – Каца на случай неоднородной среды. Выведено также обратное уравнение, в котором в качестве независимой переменной используется не конечное положение частицы, а ее положение в начальный момент времени. В качестве примера применения полученных уравнений рассмотрена одномерная задача вычисления распределения времени первого прохождения. Показано, что средние времена первого прохождения для однородной и неоднородной сред с одинаковыми коэффициентами диффузии совпадают, но дисперсия распределения для неоднородной среды может быть во много раз больше, чем для однородной среды.

1. ВВЕДЕНИЕ

Если $x(t)$ представляет собой траекторию броуновской частицы, то броуновский функционал определяется как

$$A = \int_0^t U\left(x(\tau)\right)\, d\tau, \qquad (1)$$

где $U(x)$ — заданная функция, вид которой зависит от рассматриваемой проблемы. Поскольку траектория $x(t)$ является случайной величиной, функционал A также будет случайной величиной. Задача заключается в вычислении распределения этой случайной величины. Броуновские функционалы появляются при решении многих задач в различных областях науки. Например, при изучении кинетики химических реакций возникает функционал, равный времени пребывания частицы в некоторой области Ω [1–4]. В этом случае функция $U(x)$ равна единице при x, принадлежащем Ω, и нулю в противном случае. Функционалы с функциями $U(x) = x$ и $U(x) = x^2$ представляют интерес для теории ядерного магнитного резонанса [5]. Случай функции $U(x) = x^2$ рассматривался также при изучении динамики растущей поверхности [6].

Используя метод интегрирования по траекториям, предложенный Фейнманом, Кац вывел уравнение в частных производных, решая которое можно найти распределение броуновского функционала с произвольной положительной функцией $U(x)$ [7]:

$$\frac{\partial G(x,p,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 G(x,p,t)}{\partial x^2} - pU(x)G(x,p,t). \qquad (2)$$

Здесь $G(x,p,t)$ — преобразование Лапласа по переменной A функции $G(x,A,t)$, равной плотности вероятности того, что в момент времени t частица находится в точке x, а значение функционала равно A; D — коэффициент диффузии. Впоследствии это уравнение Фейнмана – Каца широко использовалось для вычисления распределений функционалов с различными функциями $U(x)$ [8].

Уравнение (2) выведено в предположении, что среда, в которой проходит процесс случайных блужданий, является однородной. Однако реальные среды во многих случаях неоднородны. Вычислению распределений функционалов в неоднородных средах посвящены работы [9, 10]. В этих работах выводится уравнение, решая которое можно найти распределение функционала для отдельной реализации

[*]E-mail: shkilevv@ukr.net

неоднородной среды. Для полного решения задачи после нахождения этого распределения необходимо провести усреднение по ансамблю конфигураций. В общем случае решение этой задачи представляет собой сложную проблему, поэтому авторы выполнили усреднение для частной модели Синая. Но эта модель является весьма специфической и слабо отражает свойства реальных неоднородных сред. В частности, некоторые величины, вычисленные в рамках этой модели, не удовлетворяют требованию самоусреднения, т. е. изменяются в широких пределах при переходе от одного образца к другому [9, 10].

В данной работе проблема вычисления распределения функционала для неоднородной среды рассматривается в рамках модели случайных ловушек. С использованием приближения среднего поля выводятся уравнения, решая которые можно найти окончательные распределения функционалов, не требующие дальнейшего усреднения по конфигурациям. Рассматривается только случай положительной функции $U(x)$. Переход к произвольной функции требует внесения в рассуждения несущественных изменений, а именно: преобразование Лапласа по переменной A должно быть заменено преобразованием Фурье. Тогда в окончательных уравнениях вместо переменной p ($p > 0$) будет фигурировать переменная $-ip$ ($-\infty < p < \infty$), где i — мнимая единица [11]. Полученные уравнения позволяют изучать влияние неоднородности на распределения функционалов от траектории случайных блужданий.

2. МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ

Мы интересуемся вычислением распределения функционала (1) в том случае, когда движение частицы, траектория которой фигурирует под знаком интеграла, описывается уравнением

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = \sum_m W_{nm} P_m(t) - \sum_m W_{mn} P_n(t), \qquad (3)$$

где $P_n(t)$ — вероятность того, что в момент времени t частица находится в узле n; W_{mn} — скорость, с которой частица переходит из узла n в узел m.

Вывод уравнений для распределений функционала будет состоять из двух этапов. На первом этапе получим соответствующие уравнению (3) микроскопические уравнения (прямое и обратное) относительно функций $G_n(A,t)$ и $H_n(A,t)$. Функция $G_n(A,t)$ равна совместной вероятности того, что в момент времени t частица находится в узле n, а значение функционала равно A. Функция $H_n(A,t)$ равна вероятности того, что в момент времени t значение функционала равно A при условии, что в начальный момент времени частица находится в узле n. На втором этапе проведем усреднение микроскопических уравнений по ансамблю конфигураций. В результате будут получены уравнения относительно усредненных плотностей распределений функционала $G(r,A,t)$ и $H(r,A,t)$, где r — пространственная координата.

На первом этапе на решетку узлов, на размерность пространства, в которое погружена решетка, и на скорости W_{mn} не накладывается никаких ограничений.

Запишем уравнение (3) в эквивалентной форме уравнений случайных блужданий с непрерывным временем [12]:

$$\eta_n(t) = \sum_m q_{nm} \int_0^t \psi_m(\tau)\eta_m(t-\tau)\,d\tau + \sum_m q_{nm}\psi_m(t)P_m^0, \qquad (4)$$

$$P_n(t) = \int_0^t \Psi_n(\tau)\eta_n(t-\tau)\,d\tau + \Psi_n(t)P_n^0, \qquad (5)$$

где $\eta_n(t)$ — вероятность того, что частица прибывает в узел n в момент времени t; $\psi_m(t) = v_m \exp(-v_m t)$ — функция распределения времени ожидания для узла m; $v_m = \sum_n W_{nm}$ — суммарная скорость, с которой частица покидает узел m; $q_{nm} = W_{nm}/v_m$ — вероятность того, что частица, совершающая скачок из узла m, попадает в узел n;

$$\Psi_m(t) = 1 - \int_0^t \psi_m(\tau)\,d\tau$$

— функция распределения времени выживания для узла m; P_m^0 — вероятность того, что в начальный момент времени частица находится в узле m.

Вначале получим прямое уравнение. Следуя работе [11], перейдем от уравнений (4), (5) к уравнениям относительно распределения функционала $G_n(A,t)$:

$$\chi_n(A,t) = \sum_m q_{nm} \int_0^t \psi_m(\tau)\chi_m(A-\tau U_m, t-\tau)\,d\tau + \sum_m q_{nm}\psi_m(t)P_m^0\delta(A - tU_m), \qquad (6)$$

$$G_n(A,t) = \int\limits_0^t \Psi_n(\tau)\chi_n(A-\tau U_n, t-\tau)\,d\tau + \\ + \Psi_n(t)P_n^0\delta(A-tU_n). \quad (7)$$

Здесь $\chi_n(A,t)$ — вероятность того, что в момент времени t частица прибывает в узел n и при этом значение функционала равно A; U_n — значение функции U в узле n. Первое слагаемое в правой части уравнения (6) соответствует ситуации, при которой частица в некоторый момент времени $t-\tau$ прибывает в некоторый узел m и затем в момент времени t совершает скачок в узел n. Поскольку частица в течение времени τ находится в узле m, значение функционала в момент времени t будет равно A, если в момент времени $t-\tau$ оно равно $A-\tau U_m$. Второе слагаемое соответствует ситуации, при которой частица в начальный момент времени находится в узле m и в момент времени t совершает свой первый скачок в узел n. Поскольку частица все время находится в узле m, значение функционала в момент времени t будет равно A, если в момент времени $t=0$ оно равно $A-tU_m$. В уравнении (7) первое слагаемое соответствует ситуации, при которой частица в момент времени $t-\tau$ совершает скачок в узел n и остается в этом узле. Второе слагаемое соответствует ситуации, при которой частица в начальный момент времени находится в узле n и остается в этом узле вплоть до момента времени t.

Уравнения (6), (7) имеют вид уравнений случайных блужданий с непрерывным временем. Однако усреднять удобнее уравнения, записанные в виде основного кинетического уравнения. Поэтому преобразуем эти уравнения соответствующим образом. Обозначим лаплас-образ функции $\chi_n(A,t)$ при двойном преобразовании $A\to p$, $t\to s$ через $\chi_n(p,s)$. Заметим, что

$$\int\limits_0^\infty \exp(-Ap)\chi_m(A-\tau U_m,t)\,dA = \exp(-p\tau U_m)\times \\ \times \int\limits_{-\tau U_m}^\infty \exp(-A^*p)\chi_m(A^*,t)\,dA^* = \\ = \exp(-p\tau U_m)\chi_m(p,t).$$

Здесь использован тот факт, что при $A<0$ функция $\chi_m(A,t)=0$. Совершая преобразования Лапласа над уравнениями (6) и (7) по переменным A и t, получим

$$\chi_n(p,s) = \sum_m q_{nm}\psi_m(s+pU_m)\chi_m(p,s) + \\ + \sum_m q_{nm}\psi_m(s+pU_m)P_m^0, \quad (8)$$

$$G_n(p,s) = \Psi_n(s+pU_n)\chi_n(p,s) + \Psi_n(s+pU_n)P_n^0. \quad (9)$$

Исключение из уравнения (8) переменной $\chi_n(p,s)$ дает уравнение относительно $G_n(p,s)$:

$$(s+pU_n)G_n(p,s) - P_n^0 = \\ = \sum_m W_{nm}G_m(p,s) - \sum_m W_{mn}G_n(p,s). \quad (10)$$

В ходе преобразований был учтен конкретный вид функций ψ_n и Ψ_n. Переходя от переменной s к физическому времени, получаем прямое микроскопическое уравнение, подлежащее усреднению:

$$\frac{\partial G_n(p,t)}{\partial t} = \sum_m W_{nm}G_m(p,t) - \\ - \sum_m W_{mn}G_n(p,t) - pU_nG_n(p,t). \quad (11)$$

Обратное уравнение, соответствующее уравнениям (4), (5), имеет следующий вид:

$$H_n(A,t) = \sum_m q_{mn}\int\limits_0^t \psi_n(\tau)H_m(A-\tau U_n, t-\tau)\,d\tau + \\ + \Psi_n(t)P_n^0\delta(A-tU_n). \quad (12)$$

В данном случае в начальный момент времени частица с вероятностью, равной единице, находится в узле n, поэтому $P_n^0=1$. Смысл этого уравнения состоит в следующем. Частица, находящаяся в начальный момент времени в узле n, в интервале времени $(0,t)$ либо перейдет в какой-либо другой узел m, либо останется в узле n. Поэтому вероятность $H_n(A,t)$ можно представить в виде суммы соответствующих вероятностей. Если частица в интервале времени $(\tau,\tau+d\tau)$ переходит в узел m, то соответствующее слагаемое будет иметь вид

$$q_{mn}\psi_n(\tau)\,d\tau\,H_m(A-\tau U_n, t-\tau).$$

Если частица все время остается в узле n, то слагаемое будет равно

$$\Psi_n(t)H_n(A-tU_n,0).$$

При записи внеинтегрального члена в правой части уравнения учтен тот факт, что $H_n(A,0)=\delta(A)$. Совершая преобразования Лапласа по переменным A и t, получаем

$$H_n(p,s) = \sum_m q_{mn}\psi_n(s+pU_n)H_m(p,s) + \\ + \Psi_n(s+pU_n). \quad (13)$$

Проводя алгебраические преобразования, приходим к уравнению

$$(s+pU_n)H_n(p,s) - 1 = \sum_m W_{mn}H_m(p,s) - \\ - \sum_m W_{mn}H_n(p,s). \quad (14)$$

Переходя от переменной s к физическому времени, получаем обратное микроскопическое уравнение, подлежащее усреднению:

$$\frac{\partial H_n(p,t)}{\partial t} = \sum_m W_{mn}H_m(p,t) - \\ - \sum_m W_{mn}H_n(p,t) - pU_nH_n(p,t). \quad (15)$$

Данное уравнение отличается от уравнения (11), во-первых, порядком расположения индексов в первой сумме в правой части, во-вторых, смыслом индекса у функции $H_n(p,t)$. Здесь индекс указывает не узел, в котором частица находится в момент времени t, а узел, в котором она находилась в начальный момент времени.

3. УСРЕДНЕННЫЕ УРАВНЕНИЯ

При усреднении уравнений (11) и (15) будем использовать предположения модели случайных ловушек. Будем считать, что скорость W_{mn} зависит только от исходного узла: $W_{mn} = W_n$, а также, что скачки совершаются только в ближайшие узлы. Разделим всю совокупность узлов решетки на типы. К одному типу будем относить узлы с одинаковыми значениями скорости v_m (в модели случайных ловушек $v_m = zW_m$, где z — координационное число решетки). Усредним уравнение (11) по таким реализациям неоднородной среды, для которых в точке r находится узел фиксированного типа [13, 14]. Усредненное уравнение представим в виде

$$\frac{\partial \theta_i(r,p,t)}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j v_j \int \theta_j(r',p,t)\lambda(|r-r'|)\,dr' - \\ - v_i\theta_i(r,p,t) - pU(r)\theta_i(r,p,t), \\ i = 1,2,\ldots,N. \quad (16)$$

Здесь $\theta_i(r,p,t)$ — плотность вероятности того, что в момент времени t частица находится в узле i-го типа в точке r, а значение переменной, лаплас-сопряженной к переменной A, равно p; α_j — доля узлов j-го типа среди узлов решетки; $\lambda(|r'-r|)\,dr'$ — вероятность того, что в элементе объема dr' в окрестности точки r' находится узел, соседний к узлу, расположенному в точке r; N — число типов узлов.

Разлагая функции $\theta_j(r')$ в ряды в окрестности точки r, подставляя полученные разложения в (16) и удерживая в разложении члены до второго порядка включительно, получим

$$\frac{\partial \theta_i(r,p,t)}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j v_j \left\{\theta_j(r,p,t) + \sigma^2\Delta\theta_j(r,p,t)\right\} - \\ - v_i\theta_i(r,p,t) - pU(r)\theta_i(r,p,t), \\ i = 1,2,\ldots,N, \quad (17)$$

где

$$\sigma^2 = \frac{1}{6}\int (r-r')^2\lambda(|r-r'|)\,dr',$$

Δ — оператор Лапласа.

Вводя вместо вероятностей, отнесенных к количеству узлов, вероятности, отнесенные к объему, $G_i = \theta_i\alpha_i\rho^m$, где ρ^m — количество узлов в единице объема среды, приведем уравнения (17) к следующему виду:

$$\frac{\partial G_i(r,p,t)}{\partial t} = -v_iG_i(r,p,t) + \alpha_iF(r,p,t) - \\ - pU(r)G_i(r,p,t), \quad i = 1,2,\ldots,N, \quad (18)$$

где

$$F = \sum_{j=1}^{N} v_j\left\{G_j + \sigma^2\Delta G_j\right\}.$$

Суммируя уравнения (18), получим уравнение для общей плотности вероятности:

$$\frac{\partial G(r,p,t)}{\partial t} = \sigma^2\sum_{j=1}^{N} v_j\Delta G_j(r,p,t) - \\ - pU(r)G(r,p,t), \quad (19)$$

где

$$G(r,p,t) = \sum_{i=1}^{N} G_i(r,p,t)$$

— плотность вероятности того, что в момент времени t частица находится в точке r, а значение переменной, лаплас-сопряженной к переменной A, равно p.

Чтобы исключить из рассмотрения величины $G_i(r,p,t)$, перейдем в уравнениях (18), (19) от физического времени к переменной Лапласа s:

$$sG_i(r,p,s) - \beta_i G(r,p,0) = -v_i G_i(r,p,s) + \\ + \alpha_i F(r,p,s) - pU(r)G_i(r,p,s), \\ i = 1,2,\ldots,N, \quad (20)$$

$$sG(r,p,s) - G(r,p,0) = \\ = \sigma^2 \sum_{j=1}^{N} v_j \Delta G_j(r,p,s) - pU(r)G(r,p,s). \quad (21)$$

Здесь β_i — вероятность того, что в начальный момент времени частица находится в узле i-го типа. Поскольку в начальный момент времени частица находится в заданной точке, а значение функционала равно нулю, т. е.

$$G(r,A,0) = \delta(r-r_0)\delta(A),$$

величина $G(r,p,0)$ будет равна $\delta(r-r_0)$. Исключение величин $G_i(r,p,s)$ дает

$$sG(r,p,s) - \delta(r-r_0) = \\ = \sigma^2\Delta\left[\Theta_1\left(s+pU(r)\right)G(r,p,s)\right] + \\ + \sigma^2\Delta\left[\Theta_2\left(s+pU(r)\right)\delta(r-r_0)\right] - \\ - pU(r)G(r,p,s), \quad (22)$$

где

$$\Theta_1(s) = \frac{s\psi(s)}{1-\psi(s)}, \quad \Theta_2(s) = \frac{\varphi(s)-\psi(s)}{1-\psi(s)}$$

— две функции памяти,

$$\varphi(s) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\beta_i v_i}{v_i + s}$$

— функция распределения времени ожидания первого скачка,

$$\psi(s) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\alpha_i v_i}{v_i + s}$$

— функция распределения времени ожидания второго и последующих скачков. Переходя обратно к физическому времени, окончательно получим

$$\frac{\partial G(r,p,t)}{\partial t} = \sigma^2\Delta\left[\int_0^t \exp\left(-pU(r)(t-\tau)\right) \times \right. \\ \left. \times\ \Theta_1(t-\tau)G(r,p,\tau)\,d\tau\right] + \\ + \sigma^2\Delta\left[\exp\left(-pU(r)t\right)\Theta_2(t)\delta(r-r_0)\right] - \\ - pU(r)G(r,p,t). \quad (23)$$

Чтобы найти распределение функционала (1), нужно решить это уравнение, проинтегрировать найденную функцию $G(r,p,t)$ по координате и совершить обратное преобразование Лапласа $p \to A$.

При $p = 0$ функция

$$G(r,0,t) = \int_0^\infty G(r,A,t)\,dA$$

сводится к $G(r,t)$ — вероятности того, что в момент времени t частица находится в точке r вне зависимости от значения функционала. Соответственно, уравнение (23) сводится к уравнению субдиффузии:

$$\frac{\partial G(r,t)}{\partial t} = \sigma^2 \int_0^t \Theta_1(t-\tau)\Delta G(r,\tau)\,d\tau + \\ + \sigma^2\Theta_2(t)\Delta\delta(r-r_0). \quad (24)$$

Отметим две особенности уравнения (23), отличающие его от уравнения (2). Во-первых, это уравнение нелокально по времени, во-вторых, вычисленное с его помощью распределение функционала будет зависеть не только от начальной точки r_0, но и от параметров β_i, т. е. от того, с узлов какого типа стартует частица. В случае однородной среды, когда $\psi(t) = \varphi(t) = v\exp(-vt)$, уравнение (23), как и должно быть, сводится к уравнению (2).

Теперь усредним обратное уравнение (15). В этом случае выкладки, в основном, совпадают с предыдущими. Усредненное уравнение запишем следующим образом:

$$\frac{\partial \theta_i(r,p,t)}{\partial t} = v_i \sum_{j=1}^{N} \int \alpha_j \theta_j(r',p,t)\lambda(|r-r'|)\,dr' - \\ - v_i\theta_i(r,p,t) - pU(r)\theta_i(r,p,t), \\ i = 1,2,\ldots,N. \quad (25)$$

Здесь $\theta_i(r,p,t)$ — плотность вероятности того, что в момент времени t значение переменной, лаплас-сопряженной к переменной A, равно p при условии, что в начальный момент времени частица находится в узле i-го типа в точке r. Разлагая функции $\theta_j(r')$ в ряды в окрестности точки r, получим

$$\frac{\partial \theta_i(r,p,t)}{\partial t} = v_i \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \left\{\theta_j(r,p,t) + \sigma^2\Delta\theta_j(r,p,t)\right\} - \\ - v_i\theta_i(r,p,t) - pU(r)\theta_i(r,p,t), \\ i = 1,2,\ldots,N. \quad (26)$$

Вводя вместо вероятностей, отнесенных к количеству узлов, вероятности, отнесенные к объему, $H_i = \theta_i \alpha_i \rho^m$, приведем уравнения (26) к виду

$$\frac{\partial H_i(r,p,t)}{\partial t} = -v_i H_i(r,p,t) + \alpha_i v_i F(r,p,t) - pU(r) H_i(r,p,t), \quad i = 1,2,\ldots,N, \tag{27}$$

где

$$F = H + \sigma^2 \Delta H, \quad H(r,p,t) = \sum_{i=1}^{N} H_i(r,p,t).$$

Суммируя уравнения (27), получим уравнение для общей плотности вероятности:

$$\frac{\partial H(r,p,t)}{\partial t} = -\sum_{j=1}^{N} v_j H_j(r,p,t) + \sum_{j=1}^{N} \alpha_j v_j F(r,p,t) - pU(r) H(r,p,t). \tag{28}$$

Чтобы исключить из рассмотрения величины $H_i(r,p,t)$, перейдем в уравнениях (26), (27) от физического времени к переменной Лапласа s:

$$sH_i(r,p,s) - \beta_i = -v_i H_i(r,p,s) + \alpha_i v_i F(r,p,s) - pU(r) H_i(r,p,s), \quad i = 1,2,\ldots,N, \tag{29}$$

$$sH(r,p,s) - 1 = -\sum_{j=1}^{N} v_j H_j(r,p,s) + \sum_{j=1}^{N} \alpha_j v_j F(r,p,s) - pU(r) H(r,p,s). \tag{30}$$

Здесь учтен тот факт, что в начальный момент времени частица находится в точке r, т. е., что $H(r,p,0) = 1$. Из уравнения (29) находим

$$H_i(r,p,s) = \frac{\beta_i}{s+pU+v_i} + \frac{\alpha_i v_i}{s+pU+v_i} F(r,p,s), \quad i = 1,2,\ldots,N. \tag{31}$$

Используя это соотношение, получаем

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_j v_j F(r,p,s) - \sum_{j=1}^{N} v_j H_j(r,p,s) = -\varphi(s+pU) H(r,p,0) + s\psi(s+pU) F(r,p,s). \tag{32}$$

Суммируя равенства (31) и выражая из полученного соотношения $H(r,p,s)$, находим, что

$$H(r,p,s) = \frac{\Phi(s+pU)}{1-\psi(s+pU)} + \frac{\psi(s+pU)}{1-\psi(s+pU)} \sigma^2 \Delta H(r,p,s), \tag{33}$$

где

$$\Phi(s) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\beta_i}{s+v_i}.$$

Подставляя выражения (32) и (33) в (30), приходим к уравнению относительно функции $H(r,p,s)$:

$$sH(r,p,s) - 1 = \sigma^2 \Theta_1(s+pU) \Delta H(r,p,s) - \Theta_2(s+pU) - pU H(r,p,s). \tag{34}$$

Переходя к физическому времени, получаем

$$\frac{\partial H(r,p,t)}{\partial t} = \sigma^2 \int_0^t \exp\left(-pU(r)(t-\tau)\right) \times \Theta_1(t-\tau) \Delta H(r,p,\tau)\, d\tau - \exp\left(-pU(r)t\right) \Theta_2(t) - pU(r) H(r,p,t). \tag{35}$$

По смыслу обратного уравнения при $p = 0$ ему должна удовлетворять функция

$$H(r,0,t) = \int_0^\infty H(r,A,t)\, dA,$$

тождественно равная единице. Однако, если функция $\Theta_2(t)$ отлична от нуля, то при $p = 0$ функция $H(r,0,t) = 1$ не удовлетворяет уравнению (35). Это означает, что уравнение (35) справедливо только при равной нулю функции $\Theta_2(t)$, т. е. при $\beta_i = \alpha_i$. Таким образом, обратное уравнение будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{\partial H(r,p,t)}{\partial t} = \sigma^2 \int_0^t \exp\left(-pU(r)(t-\tau)\right) \times \Theta_1(t-\tau) \Delta H(r,p,\tau)\, d\tau - pU(r) H(r,p,t). \tag{36}$$

Преимущество этого уравнения перед уравнением (23) состоит в том, что найденную с его помощью функцию $H(r,p,t)$ не нужно интегрировать по координате. С другой стороны, недостатком этого уравнения является тот факт, что его можно использовать только в тех случаях, когда в начальный момент времени частица попадает на узлы разного типа случайным образом (т. е. при $\beta_i = \alpha_i$).

4. ВРЕМЯ ПЕРВОГО ПРОХОЖДЕНИЯ

Задачу о первом прохождении границы области можно решить непосредственно, используя уравнение, описывающее случайные блуждания частицы. В рамках рассматриваемой здесь модели таким уравнением является уравнение (24). Если в качестве области взять интервал $(-l, l)$ и предположить, что частица стартует из точки $x = 0$, то это уравнение следует дополнить начальным условием $G(x, 0) = \delta(x)$ и граничными условиями $G(-l, t) = G(l, t) = 0$. Эту же задачу можно решить с использованием выведенных в предыдущем разделе уравнений (23) и (36). При этом в качестве функции $U(x)$ нужно взять функцию [11, 15]

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| < l, \\ 1, & |x| > l. \end{cases} \tag{37}$$

После нахождения функции $H(x, p, t)$ нужно воспользоваться соотношением Каца

$$\Pr\{t_f < t\} = 1 - \lim_{p\to\infty} H(0, p, t),$$

где t_f — время первого прохождения [11, 15]. В левой части этого соотношения стоит интегральная функция распределения времени первого прохождения. Следовательно, плотность распределения будет равна

$$\frac{\partial}{\partial t} \Pr\{t_f < t\}.$$

Функцию $H(0, p, t)$ можно найти либо с помощью обратного уравнения, либо путем решения прямого уравнения с начальным условием $G(x, p, 0) = \delta(x)$ и последующего интегрирования найденной функции $G(x, p, t)$ по координате. Таким образом, находя решение различными способами, мы сможем убедиться в согласованности полученных уравнений.

Совершим преобразование Лапласа по переменной t над одномерным аналогом уравнения (24):

$$sG(x, s) - \delta(x) = \sigma^2 \Theta_1(s) \frac{\partial^2 G(x, s)}{\partial x^2} + \sigma^2 \Theta_2(s) \frac{\partial^2 \delta(x)}{\partial x^2}. \tag{38}$$

Решение этого уравнения будем искать в виде

$$G(x, s) = G_1(x, s) + \frac{\psi(s) - \varphi(s)}{s\psi(s)}\, \delta(x), \tag{39}$$

где

$$G_1(x, s) = \begin{cases} C_1 \exp\left(\dfrac{x}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s}{\Theta_1(s)}}\right) + C_2 \exp\left(-\dfrac{x}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s}{\Theta_1(s)}}\right), & x > 0, \\ C_2 \exp\left(\dfrac{x}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s}{\Theta_1(s)}}\right) + C_1 \exp\left(-\dfrac{x}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s}{\Theta_1(s)}}\right), & x < 0. \end{cases} \tag{40}$$

Для определения коэффициентов C_1, C_2 имеем граничное условие

$$G_1(l, s) = 0 \tag{41}$$

(при выполнении условия (41) условие $G_1(-l, t) = 0$ удовлетворится автоматически). Кроме того, подставляя (39) в (38) и интегрируя от -0 до $+0$, получаем еще одно условие:

$$\sigma^2 \Theta_1(s) \left[\left.\frac{\partial G_1(x, s)}{\partial x}\right|_{x=+0} - \left.\frac{\partial G_1(x, s)}{\partial x}\right|_{x=-0} \right] = -\frac{\varphi(s)}{\psi(s)}. \tag{42}$$

Решением уравнений (41) и (42) являются величины

$$C_1 = -C_2 B^2,$$

$$C_2 = \frac{\varphi(s)\,[1 - \psi(s)]}{2\sigma s \psi^2(s)} \sqrt{\frac{\Theta_1(s)}{s}}\, \frac{1}{1 + B^2},$$

где

$$B = \exp\left(-\frac{l}{\sigma}\sqrt{\frac{s}{\Theta_1(s)}}\right).$$

Функция выживания равна интегралу от $G(x, s)$:

$$P(s) = \int_{-l}^{l} G(x, s)\, dx.$$

Подставляя сюда выражение для $G(x, s)$, получаем

$$P(s) = \frac{\psi(s) - \varphi(s)}{s\psi(s)} + \frac{\varphi(s)}{s\psi(s)}\, \frac{1 - 2B + B^2}{1 + B^2}. \tag{43}$$

Время первого прохождения связано с функцией выживания соотношением

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

или в пространстве изображений Лапласа — $f(s) = 1 - sP(s)$. Отсюда находим преобразование Лапласа времени первого прохождения:

$$f(s) = \frac{\varphi(s)}{\psi(s)}\, \mathrm{ch}^{-1}\left(\frac{l}{\sigma}\sqrt{\frac{s}{\Theta_1(s)}}\right). \qquad (44)$$

Теперь найдем решение этой задачи с использованием прямого уравнения (22). Если функция $U(x)$ задается выражением (37), то это уравнение приобретает вид

$$\begin{gathered} sG(x,p,s) - \delta(x) = \sigma^2\Theta_1(s)\frac{\partial^2 G(x,p,s)}{\partial x^2} + \\ + \sigma^2\Theta_2(s)\frac{\partial^2\delta(x)}{\partial x^2}, \quad |x| < l, \\ sG(x,p,s) = \sigma^2\Theta_1(s+p)\frac{\partial^2 G(x,p,s)}{\partial x^2} - \\ - pG(x,p,s), \quad |x| > l. \end{gathered} \qquad (45)$$

Решение будет выглядеть следующим образом:

$$G(x,p,s) = \begin{cases} G_2(x,p,s) + \dfrac{\psi(s)-\varphi(s)}{s\psi(s)}\,\delta(x), & |x| < l, \\ C_0(p)\exp\left(-\dfrac{|x|}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\right), & |x| > l, \end{cases} \qquad (46)$$

где

$$G_2(x,p,s) = \begin{cases} C_1(p)\exp\left(\dfrac{x}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s}{\Theta_1(s)}}\right) + C_2(p)\exp\left(-\dfrac{x}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s}{\Theta_1(s)}}\right), & x > 0, \\ C_2(p)\exp\left(\dfrac{x}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s}{\Theta_1(s)}}\right) + C_1(p)\exp\left(-\dfrac{x}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s}{\Theta_1(s)}}\right), & x < 0. \end{cases} \qquad (47)$$

Для определения коэффициентов C_0, C_1, C_2 имеем соотношение (42) (с заменой $G_1(x,s)$ на $G_2(x,p,s)$), а также условия в точке $x = l$:

$$\left.\frac{\partial\left[\Theta_1(s+pU)G(x,p,s)\right]}{\partial x}\right|_{x=l+0} - \left.\frac{\partial\left[\Theta_1(s+pU)G(x,p,s)\right]}{\partial x}\right|_{x=l-0} = 0, \qquad (48)$$

$$\Theta_1(s+pU)G(x,p,s)|_{x=l+0} - \Theta_1(s+pU)G(x,p,s)|_{x=l-0} = 0. \qquad (49)$$

(Эти условия получаются путем двукратного интегрирования уравнения (22) в пределах от $x = l - 0$ до $x = l + 0$.) Подставим выражение для функции $G(x,p,s)$ в (48) и (49):

$$\frac{C_0(p)}{\sigma}\sqrt{(s+p)\Theta_1(s+p)}\exp\left(-\frac{l}{\sigma}\sqrt{\frac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\right) = \frac{\sqrt{s\Theta_1(s)}}{\sigma}\left[C_2(p)B - C_1(p)B^{-1}\right], \qquad (50)$$

$$C_0(p)\Theta_1(s+p)\exp\left(-\frac{l}{\sigma}\sqrt{\frac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\right) = \Theta_1(s)\left[C_1(p)B + C_2(p)B^{-1}\right]. \qquad (51)$$

Комбинируя эти уравнения, получим

$$C_1(p)B + C_2(p)B^{-1} = \sqrt{\frac{s\Theta_1(s)}{(s+p)\Theta_1(s+p)}} \times \left[C_2(p)B - C_1(p)B^{-1}\right]. \qquad (52)$$

Нас интересует решение при $p \to \infty$. Поскольку подкоренное выражение в этом пределе равно нулю, условие (52) сводится к условию

$$\left[C_1(\infty)B + C_2(\infty)B^{-1}\right] = 0. \qquad (53)$$

Таким образом, функция $G(x,\infty,s)$ в интервале $(-l,l)$ удовлетворяет тому же уравнению и тем же начальному и граничным условиям, что и функция $G(x,s)$ (39). При $|x| > l$ функция $G(x,\infty,s)$ равна нулю:

$$\lim_{p\to\infty}\left\{\exp\left(\frac{l-|x|}{\sigma}\sqrt{\frac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\right) \times \frac{\Theta_1(s)}{\Theta_1(s+p)}\left[C_1(p)B + C_2(p)B^{-1}\right]\right\} = 0. \qquad (54)$$

Следовательно, интеграл

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} G(x,\infty,s)\,dx$$

равен выражению (43), а распределение времени первого прохождения совпадает с (44).

Обратное уравнение в рассматриваемом случае запишется как

$$sH(x,p,s)-1=\begin{cases}\sigma^2\Theta_1(s)\dfrac{\partial^2 H(x,p,s)}{\partial x^2}, & |x|<l,\\[2ex] \sigma^2\Theta_1(s+p)\dfrac{\partial^2 H(x,p,s)}{\partial x^2}-pH(x,p,s), & |x|>l.\end{cases} \tag{55}$$

Решение будет выглядеть следующим образом:

$$H(x,p,s)=\begin{cases}C_1(p)\,\mathrm{ch}\left(\dfrac{x}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\right)+\dfrac{1}{s}, & |x|<l,\\[2ex] C_0(p)\exp\left(-\dfrac{|x|}{\sigma}\sqrt{\dfrac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\right)+\dfrac{1}{s+p}, & |x|>l.\end{cases} \tag{56}$$

Коэффициенты C_0, C_1 находятся из условий непрерывности функций $H(x,p,s)$ и $\partial H(x,p,s)/\partial x$ в точке $x=l$:

$$C_0(p)\exp\left(-\frac{l}{\sigma}\sqrt{\frac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\right)+\frac{1}{s+p}= \\ =C_1(p)\,\mathrm{ch}\left(\frac{l}{\sigma}\sqrt{\frac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\right)+\frac{1}{s}, \tag{57}$$

$$-C_0(p)\sqrt{\frac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\,\exp\left(-\frac{l}{\sigma}\sqrt{\frac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\right)= \\ =C_1(p)\sqrt{\frac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\,\mathrm{sh}\left(\frac{l}{\sigma}\sqrt{\frac{s+p}{\Theta_1(s+p)}}\right). \tag{58}$$

Интересующая нас функция $H(0,\infty,s)$ оказывается равной

$$\frac{1}{s}\left[1-\mathrm{ch}^{-1}\left(\frac{l}{\sigma}\sqrt{\frac{s}{\Theta_1(s)}}\right)\right].$$

Отсюда находим распределение времени первого прохождения:

$$f(s)=\mathrm{ch}^{-1}\left(\frac{l}{\sigma}\sqrt{\frac{s}{\Theta_1(s)}}\right). \tag{59}$$

Данное выражение получается из выражения (44) при $\varphi(s)=\psi(s)$, т. е. при $\beta_i=\alpha_i$. Таким образом, в рассмотренном случае обратное уравнение так же, как и прямое уравнение, дает правильный результат.

Посмотрим, как сильно может повлиять неоднородность среды на распределение времени первого прохождения. Возьмем решетку с двумя типами узлов. Функция распределения времени ожидания будет иметь следующий вид:

$$\psi(s)=\frac{\alpha_1 v_1}{s+v_1}+\frac{\alpha_2 v_2}{s+v_2}. \tag{60}$$

Соответствующая функция памяти запишется как

$$\Theta_1(s)=\frac{1}{\xi}\,\frac{1+a\tau s}{1+\tau s}, \tag{61}$$

где $\xi=\alpha_1/v_1+\alpha_2/v_2$ — среднее время пребывания частицы в узле решетки, $\tau=1/(v_1v_2\xi)$ — характерное время установления равновесного распределения частиц по узлам разных типов, $a=\xi(\alpha_1v_1+\alpha_2v_2)$ — безразмерный параметр. Моменты времени первого прохождения выражаются через функцию $f(s)$ следующим образом:

$$m_k=(-1)^k\left.\frac{d^k f(s)}{ds^k}\right|_{s=0}. \tag{62}$$

Приведем выражения для двух первых моментов, соответствующих случаю $\varphi(s)=\psi(s)$. Первый момент, т. е. среднее время первого прохождения, не зависит от параметров a и τ:

$$m_1=\frac{\xi l^2}{2\sigma^2}. \tag{63}$$

Это означает, что среднее время первого прохождения для неоднородной среды будет таким же, как и для однородной среды с коэффициентом диффузии, равным равновесному коэффициенту диффузии для неоднородной среды (σ^2/ξ). Дисперсия распределения ($D=m_2-m_1^2$) выражается через параметры ξ, a и τ следующим образом:

$$D=\frac{\xi^2l^4}{4\sigma^4}\left[1+\frac{9}{2}(a-1)\frac{\tau\sigma^2}{\xi l^2}\right]. \tag{64}$$

Для однородной среды соответствующая величина равна $\xi^2l^4/4\sigma^4$. Поскольку при заданной величине ξ параметры a и τ могут принимать сколь угодно большие значения, дисперсия распределения для неоднородной среды может быть во много раз больше, чем дисперсия для однородной среды с тем же коэффициентом диффузии.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

Выведенные в данной работе уравнения аналогичны уравнениям, полученным в работах [11, 16, 17]. В этих работах уравнения выводятся в рамках модели случайных блужданий с непрерывным временем (СБНВ). При этом функция распределения времени ожидания задается в виде $\psi(t) \propto \propto t^{-(1+\alpha)}$. Такой выбор соответствует степенной зависимости среднеквадратичного смещения частиц от времени: $\langle x^2 \rangle \propto t^\alpha$. Однако во многих случаях экспериментальные зависимости $\langle x^2 \rangle(t)$ не описываются простой степенной функцией. В частности, на больших временах обычно происходит переход к классической линейной зависимости [18–20]. В таких случаях нужно вводить более сложные функции распределения времени ожидания. В рамках модели СБНВ вид этих функций может быть определен только эмпирическим путем, поэтому получающиеся уравнения будут содержать параметры с неясным физическим смыслом. В этом состоит недостаток подхода, основанного на феноменологической модели СБНВ.

В данной работе уравнения выводятся в рамках конкретной микроскопической модели. Функция распределения времени ожидания в этой модели выражается через характеристики неоднородной среды. Параметры полученных уравнений имеют ясный физический смысл, что позволяет изучать влияние неоднородности на распределения функционалов.

Использованный в данной работе способ усреднения микроскопических уравнений приводит к выражению для функции распределения времени ожидания, которое ранее было предложено в работе [21]

$$\psi(s) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\alpha_1 v_1}{v_1 + s}\,.$$

В работах [22, 23] было показано, что это выражение получается при использовании приближения Хартри. Таким образом, способ усреднения, использованный в данной работе, эквивалентен приближению Хартри, которое является простейшим нетривиальным приближением. О точности этого приближения в применении к рассматриваемым здесь задачам заранее судить трудно. В одномерном случае, по-видимому, оно будет довольно грубым [24, 25]. В то же время, в трехмерном случае оно может быть вполне удовлетворительным [25]. Известно, что в рамках модели случайных ловушек это приближение дает правильные предельные значения коэффициента диффузии [26]:

$$\lim_{t\to 0} D(t) = \sigma^2 \sum_{i=1}^{N} \alpha_i v_i, \quad \lim_{t\to\infty} D(t) = \sigma^2 \sum_{i=1}^{N} \left(\alpha_i v_i^{-1}\right)^{-1}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. A. H. Gandjbakhche and G. H. Weiss, Phys. Rev. E **61**, 6958 (2000).
2. A. Bar-Haim and J. Klafter, J. Chem. Phys. **109**, 5187 (1998).
3. N. Agmon, J. Chem. Phys. **81**, 3644 (1984).
4. D. S. Grebenkov, Phys. Rev. E **76**, 041139 (2007).
5. D. S. Grebenkov, Rev. Mod. Phys. **79**, 1077 (2007).
6. G. Foltin, K. Oerding, Z. Racz, R. L. Workman, and R. P. K. Zia, Phys. Rev. E **50**, R639 (1994).
7. M. Kac, Trans. Amer. Math. Soc. **65**, 1 (1949).
8. S. N. Majumdar, Curr. Sci. **89**, 2076 (2005).
9. S. N. Majumdar and A. Comtet, Phys. Rev. Lett. **89**, 060601 (2002).
10. S. Sabhapandit, S. N. Majumdar, and A. Comtet, Phys. Rev. E **73**, 051102 (2006).
11. S. Carmi, L. Turgeman, and E. Barkai, arXiv: cond-mat/1004.0943.
12. B. Berkowitz, A. Cortis, M. Dentz, and H. Scher, Rev. Geophys. **44**, RG2003 (2006).
13. В. П. Шкилев, ЖЭТФ **135**, 403 (2009).
14. В. П. Шкилев, ЖЭТФ **136**, 984 (2009).
15. M. Kac, in *Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, Berkeley, USA (1951), p. 189.
16. L. Turgeman, S. Carmi, and E. Barkai, Phys. Rev. Lett. **103**, 190201 (2009).
17. S. Carmi, L. Turgeman, and E. Barkai, J. Stat. Phys. **141**, 1071 (2010).
18. M. Dentz, A. Cortis, H. Scher, and B. Berkowitz, Adv. Water Resources **27**, 155 (2004).
19. R. T. Sibatov and V. V. Uchaikin, arXiv:cond-mat/ /1008.3969.
20. M. S. Mommer and D. Lebiedz, SIAM J. Appl. Math. **70**, 112 (2009).
21. H. Scher and M. Lax, Phys. Rev. B **7**, 4502 (1973).
22. M. Lax and H. Scher, Phys. Rev. Lett. **39**, 751 (1977).
23. T. Odagaki and M. Lax, Phys. Rev. B **24**, 5284 (1981).
24. V. M. Kenkre, Z. Kalay, and P. E. Parris, Phys. Rev. E **79**, 011114 (2009).
25. I. M. Sokolov, S. B. Yuste, J. J. Ruiz-Lorenzo, and K. Lindenberg, Phys. Rev. E **79**, 051113 (2009).
26. J. W. Haus and K. W. Kehr, Phys. Rep. **150**, 264 (1987).