

В. С. ВИХРЕНКО, Л. А. РОТТ

НЕКОТОРЫЕ СТОХАСТИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ, ПРИМЕНИМЫЕ К ОПИСАНИЮ КРИТИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

В настоящее время возможности полного статистического рассмотрения поведения вещества в критическом состоянии представляются еще далеко не ясными. Между тем все больше экспериментальных результатов указывают на особенности, которые проявляются в критической области как однокомпонентных, так и многокомпонентных систем. Особо привлекает внимание поведение броуновской частицы в критическом состоянии вещества, что, в частности, тесно связано с интерпретацией практического прекращения диффузии в критической точке разбавленного двойного раствора [1—5].

Ранее уже указывалось на возможность привлечения стохастических методов, которые позволяют в известной мере моделировать характерные свойства критического состояния вещества [1, 6]. Этой цели и служат рассматриваемые ниже две стохастические задачи. Но, помимо сказанного выше, они представляют и самостоятельный интерес (стохастические задачи, применительные к описанию состояний, далеких от критических, см., например, в работе [7]).

Задача 1

Исследуем стохастическую схему одномерного движения броуновской частицы.

Частица может совершать три рода шагов: смещение вправо, влево и шаг на месте. Под последним имеется в виду поведение частицы, при котором она в течение данного промежутка времени (шага) остается неподвижной (подразумевается топтание на месте). На порядок следования шагов никаких ограничений не накладывается.

Как и в работах [1, 2, 6], наделяем частицу «памятью»: если частица сделала шаг в некотором направлении, то вероятность следующего шага в том же направлении равна p_2 , вероятность частице сделать шаг в обратном направлении равна p_1 и вероятность шага-остановки — q . Из условия нормировки

$$p_1 + p_2 + q = 1. \quad (1.1)$$

Кроме того, предположим, что при остановке на произвольное число шагов частица сохраняет «память», т. е. все время «помнит», откуда она пришла, и вероятность продолжения движения в прежнем направлении снова равна p_2 и т. д.

Определим средний квадрат смещения частицы по истечении n шагов.

Пусть m_1 , m_2 и m — соответственно количества сделанных частицей шагов вправо, влево и шагов-остановок. Тогда

$$m_1 + m_2 + m = n. \quad (2.1)$$

Для решения используем следующую схему. Пусть имеется $m_1 + m_2$ квадратов, расположенных в ряд. Между каждыми двумя квадратами, а также по краям находится по одной окружности. Всего окружностей $m_1 + m_2 + 1$.

Каждый квадрат соответствует какому-либо шагу вправо или влево (заполнен каким-либо шагом). Каждая из окружностей может быть заполнена любым числом шагов-остановок от 1 до m или оставаться свободной. Но в любом случае по $m_1 + m_2 + 1$ окружностям размещается ровно m шагов. Следовательно, если между двумя соседними квадратами окружность не занята шагом-остановкой, то два шага, которые размещены в упомянутых квадратах, следуют непосредственно друг за другом, будь то шаги в одном и том же направлении или с изменением направления.

m шагов-остановок можно разместить по $(m_1 + m_2 + 1)$ ячейкам числом способов, равным [8]:

$$B = \frac{(m_1 + m_2 + 1 + m - 1)!}{(m_1 + m_2 + 1 - 1)! m!} = \frac{n!}{(m_1 + m_2)! m!} = C^n_m.$$

Искомый средний квадрат смещения частицы равен

$$\overline{x^2_n} = \sum_{m=0}^{n-1} C^n_m q^m \overline{x^2_{m_1+m_2}}, \quad (3.1)$$

где $\overline{x^2_{m_1+m_2}} = \overline{x^2_{n-m}}$ — выражение для среднего квадрата смещения частицы в результате $n-m$ шагов, которое находится без учета остановок, но с учетом того, что продолжение движения в прежнем направлении реализуется частицей с вероятностью p_2 , в обратном направлении — p_1 , причем $p_1 + p_2 < 1$. Аналогичная задача была решена в работе [6] с той лишь разницей, что там принималось $p_1' + p_2' = 1$ (в дальнейшем все обозначения со штрихами относятся к работе [6], а без штрихов — к случаю, когда $p_1 + p_2 < 1$). Основываясь на работе [6], для нашего случая запишем

$$\overline{x^2_{n-m}} = \sum_{l=0}^{\frac{n-m}{2}} (n-m-2l)^2 P_{n-m-2l}, \quad (4.1)$$

где P_{n-m-2l} — вероятность того, что частица, совершив $n-m$ шагов, пройдет расстояние, равное $n-m-2l$ шагам.

Если не использовать равенство $p_1' + p_2' = 1$, то выражение (2) из работы [6] будет частным случаем общего выражения

$$P_{n-m-2l} = (p_1 + p_2) (p_2)^{n-m-1} \left[A_{1, n-m-2l} \frac{p_1}{p_2} + A_{2, n-m-2l} \left(\frac{p_1}{p_2} \right)^2 + \dots + \right. \\ \left. + A_{2l, n-m-2l} \left(\frac{p_1}{p_2} \right)^{2l} \right] = (p_1 + p_2) p_2^{n-m-1} \sum_{k=1}^{2l} A_{k, n-m-2l} \left(\frac{p_1}{p_2} \right)^k, \quad (5.1)$$

где $A_{k, n-m-2l}$ указывает на возможное число исходов, при которых частица имела бы k поворотов.

Разделив и умножив правую часть последнего выражения на $(p_2')^{n-m-1}$ при условии выполнения равенства

$$\frac{p_1'}{p_2'} = \frac{p_1}{p_2}, \tag{6.1}$$

можно записать

$$P_{n-m-2l} = (p_1 + p_2) \frac{p_2^{n-m-1}}{(p_2')^{n-m-1}} \left[(p_2')^{n-m-1} \sum_{k=1}^{2l} A_{k, n-m-2l} \left(\frac{p_1'}{p_2'} \right)^k \right].$$

Следовательно, P_{n-m-2l} и P'_{n-m-2l} связаны соотношением

$$P_{n-m-2l} = (p_1 + p_2) \left(\frac{p_2}{p_2'} \right)^{n-m-1} P'_{n-m-2l}. \tag{7.1}$$

Подстановка (7.1) в (4.1) дает

$$\overline{x^2}_{n-m} = (p_1 + p_2) \left(\frac{p_2}{p_2'} \right)^{n-m-1} \sum_{l=0}^{\lfloor \frac{n-m}{2} \rfloor} (n-m-2l)^2 P'_{n-m-2l}$$

или

$$\overline{x^2}_{n-m} = (p_1 + p_2) \left(\frac{p_2}{p_2'} \right)^{n-m-1} (\overline{x^2}_{n-m})'. \tag{8.1}$$

Здесь при вычислении $(\overline{x^2}_{n-m})'$ должно быть соблюдено условие (6.1).

Подстановка (8.1) в (3.1) позволяет окончательно записать выражение для среднего квадрата смещения частицы:

$$\overline{x^2}_n = (p_1 + p_2) \left(\frac{p_2}{p_2'} \right)^{n-1} \sum_{m=0}^{n-1} C_m^n \left(\frac{qp_2'}{p_2} \right)^m (\overline{x^2}_{n-m})'. \tag{9.1}$$

Если положить $q=0$; $p_1=p_2=1/2$, то в (9.1) из всей суммы остается только один член для $m=0$.

При этом $p_2'=p_2=1/2$; $\overline{x^2}_{n-m}=n-m$ и сразу же получаем формулу Эйнштейна:

$$\overline{x^2}_n = (p_1 + p_2) \left(\frac{p_2}{p_1} \right) C_0^n (\overline{x^2}_n)' = n. \tag{10.1}$$

Исследуем частный случай: $p_1=p_2$, $q \neq 0$. $(\overline{x^2}_{n-m})'$ сейчас вычисляется при условии $p_1'=p_2'=1/2$ и снова приходим к формуле Эйнштейна $(\overline{x^2}_{n-m})'=n-m$.

Тогда из уравнения (9.1)

$$\begin{aligned} \overline{x^2}_n &= 2p_2 \sum_{m=0}^{n-1} C_m^n \left(\frac{q}{2p_2} \right)^m (2p_2)^{n-1} (n-m) = \\ &= 2p_2 \sum_{m=0}^{n-1} n C_m^{n-1} q^m (2p_2)^{n-1-m} = 2p_2 n \sum_{m=0}^{n-1} C_m^{n-1} q^m (1-q)^{n-m-1}. \end{aligned}$$

Следовательно, в случае равновероятности продолжить движение в прежнем направлении или изменить направление движения средний квадрат смещения частицы

$$\overline{x^2}_n = 2p_2 n = (1-q)n. \tag{11.1}$$

Здесь использовано разложение бинома Ньютона в ряд

$$[q + (1-q)]^{n-1} = \sum_{m=0}^{n-1} C_m^{n-1} q^m (1-q)^{n-m-1}.$$

Коэффициент диффузии будет $D = 1 - q$.

Приближенное решение можно получить и для общего случая, когда $p_1 \neq p_2$ и $q \neq 0$. Вычисления, произведенные в работе [6] показывают, что с большой степенью точности, особенно при больших значениях $n - m$, для среднего квадрата смещения частицы можно принять линейную зависимость

$$(\overline{x^2}_{n-m})' \cong D'(n-m) + a, \quad (12.1)$$

$$\text{где } D' \cong \frac{p_2'}{p_1'} = \frac{p_2}{p_1} \text{ и } a \cong 1/2.$$

Уравнение (9.1) с использованием (12.1) принимает вид

$$\overline{x^2}_n = \sum_{m=0}^{n-1} (p_1 + p_2) \left(\frac{p_2}{p_2'} \right)^{n-m-1} q^m C_m^n [D'(n-m) + a].$$

Далее, учитывая уравнения (1.1), (6.1), а также условие $p_1' + p_2' = 1$, находим

$$\frac{p_2}{p_2'} = \frac{p_1}{p_1'} = \frac{1-q-p_2}{1-p_2'}; \quad p_2 - p_2 p_2' = p_2' - q p_2' - p_2 p_2'.$$

Отсюда следует

$$\frac{p_2}{p_2'} = 1 - q. \quad (13.1)$$

Преобразуем выражение для среднего квадрата смещения частицы

$$\begin{aligned} \overline{x^2}_n &\cong \sum_{m=0}^{n-1} C_m^n (1-q)^{n-m} q^m [D'(n-m) + a] = \\ &= D' (1-q) n \sum_{m=0}^{n-1} C_m^{n-1} q^m (1-q)^{n-m-1} + a \left(\sum_{m=0}^n C_m^n q^m (1-q)^{n-m} - p^n \right); \\ \overline{x^2}_n &\cong D' (1-q) n + a (1-q^n). \end{aligned}$$

Если здесь положить $D' = \frac{p_2}{p_1}$ и пренебречь q^n по сравнению с единицей, то окончательно получим

$$\overline{x^2}_n \cong \frac{p_2}{p_1} (1-q) n + a. \quad (14.1)$$

Таким образом, снова имеем линейную зависимость среднего квадрата смещения частицы от количества шагов. Коэффициент диффузии будет

$$D = \frac{p_2(1-q)}{p_1}, \quad (15.1)$$

и он меньше, чем в случае равновероятного безостановочного движения частицы (некритическое состояние).

Задача 2

Полагаем, что после любого предыдущего шага смещения частицы влево и вправо равновероятны, т. е. частица может сделать из данного положения шаг влево с вероятностью p_1 и шаг вправо с вероятностью $p_2 = p_1$. Сделаем еще одно предположение

$$p_1 + p_2 = p < 1. \tag{1.2}$$

Значение $q = 1 - p$ представляет собой вероятность топтания частицы на месте сколь угодно долго, т. е. остановиться даже на бесконечно большое число последующих шагов.

Определим средний квадрат смещения частицы при условии, что частица сделала N шагов (включая шаги, в течение которых она стояла).

По определению средний квадрат смещения частицы

$$\overline{x^2_n} = 2 \sum_{k=0}^N k^2 P_{k, N}, \tag{2.2}$$

где $P_{k, N}$ — вероятность обнаружить частицу в точке k на прямой перемещения после N предоставленных ей шагов (здесь суммируется только по $k > 0$, и поэтому взят множитель 2).

Частица при своем движении может пройти всего $n < N$ шагов и остановиться, т. е. будет стоять остальные $N - n$ шагов в точке k . Тогда вероятность найти частицу в точке k равна:

$$P_{k, n} = \frac{n!}{\left(\frac{n+k}{2}\right)! \left(\frac{n-k}{2}\right)!} p_1^n q = C^n_{\frac{n+k}{2}} p_1^n q \quad n < N; \tag{3.2}$$

$$P_{k, n} = \frac{N!}{\left(\frac{N+k}{2}\right)! \left(\frac{N-k}{2}\right)!} p_1^N = C^N_{\frac{N+k}{2}} p_1^N \quad n = N.$$

Естественно, что для тех значений k и n , для которых $n+k$ — четное, $P_{k, n} = 0$.

Введем обозначения:

$$m_1 = \frac{n+k}{2} \text{ — число шагов вправо;}$$

$$m_2 = \frac{n-k}{2} \text{ — число шагов влево.}$$

Для определения полной вероятности нахождения частицы в точке k необходимо просуммировать все $P_{k, n}$ по n :

$$P_{k, N} = \sum_{n=k}^{N-1} C^n_{\frac{n+k}{2}} p_1^n q + C^N_{\frac{N+k}{2}} p_1^N. \tag{4.2}$$

Последнее слагаемое учитывает вероятность того, что частица все N шагов будет в движении. Здесь, естественно, суммирование распространяется на те значения n , при которых $n+k$ — четное. Последнее слагаемое тоже выпадает для тех значений k , при которых $N+k$ — четное.

Подстановка в (2.2) значения (4.2) дает

$$\overline{x^2}_N = 2 \sum_{k=0}^N k^2 \sum_{n=k}^{N-1} C^n_{\frac{n+k}{2}} p_1^n q + 2 \sum_{k=0}^N k^2 C^N_{\frac{N+k}{2}} p_1^N. \quad (5.2)$$

Изменим в (5.2) порядок суммирования

$$\overline{x^2}_N = 2q \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{k=0}^n k^2 C^n_{\frac{n+k}{2}} p_1^n + 2p_1^N \sum_{k=0}^N k^2 C^N_{\frac{N+k}{2}}. \quad (6.2)$$

Учитывая, что член $k^2 C^n_{\frac{n+k}{2}}$ симметричен относительно k , можем записать

$$2 \sum_{k=0}^n k^2 C^n_{\frac{n+k}{2}} = \sum_{k=-n}^n k^2 C^n_{\frac{n+k}{2}}.$$

Рассмотрим выражение

$$\sum_{k=-n}^n \left(\frac{n+k}{2} \right)^2 C^n_{\frac{n+k}{2}} = \sum_{m_1=0}^n m_1^2 C^n_{m_1}.$$

Приведем разложение в ряд для бинома

$$(x+yu)^n = \sum_{m_1=0}^n C^n_{m_1} x^{n-m_1} y^{m_1} u^{m_1}.$$

Продифференцируем затем обе части по u :

$$\frac{d}{du} (x+yu)^n = \sum_{m_1=1}^n m_1 C^n_{m_1} x^{n-m_1} y^{m_1} u^{m_1-1}.$$

А затем умножим последнее выражение на u и еще раз продифференцируем

$$\begin{aligned} \frac{d}{du} \left[u \frac{d}{du} (x+yu)^n \right] &= \sum_{m_1=1}^n m_1^2 C^n_{m_1} x^{n-m_1} y^{m_1} u^{m_1-1} = \\ &= uny (x+uy)^{n-1} + u^2 ny^2 (n-1) (x+uy)^{n-2}. \end{aligned}$$

При $x=y=u=1$ имеем:

$$\sum_{m_1=0}^n m_1^2 C^n_{m_1} = n2^{n-1} + n(n-1)2^{n-2} = \frac{n+n^2}{4} 2^n. \quad (7.2)$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} \sum_{k=-n}^n \left(\frac{n+k}{2} \right)^2 C^n_{\frac{n+k}{2}} &= 1/4 \left\{ n^2 \sum_{k=-n}^n C^n_{\frac{n+k}{2}} + 2n \sum_{k=-n}^n k C^n_{\frac{n+k}{2}} + \sum_{k=-n}^n k^2 C^n_{\frac{n+k}{2}} \right\} = \\ &= 1/4 \left[n^2 2^n + \sum_{k=-n}^n k^2 C^n_{\frac{n+k}{2}} \right]. \end{aligned}$$

Сопоставляя (6.2), (7.2) и (8.2), находим

$$2 \sum_{k=0}^n k^2 C^n_{\frac{n+k}{2}} = n2^n. \quad (9.2)$$

Выражение для среднего квадрата смещения принимает вид

$$\overline{x_N} = q \sum_{n=0}^{N-1} n 2^n p_1^n + N 2^N p_1^N = q \sum_{n=0}^{N-1} n p^n + N q^N. \quad (10.2)$$

Тогда при $q=0$ и $p=2p_1=1$ имеем формулу Эйнштейна $\overline{x_N}^2 = N$.

Для вычисления суммы в (10.2) рассмотрим геометрическую прогрессию

$$\frac{p^N - 1}{p - 1} = \sum_{n=0}^{N-1} q^n.$$

Продифференцируем обе части этого равенства и затем умножим на p

$$p \frac{d}{dp} \left(\frac{p^N - 1}{p - 1} \right) = \sum_{n=1}^{N-1} n p^n = \frac{p(1 - p^N) - N p^N (1 - p)}{(1 - p)^2}. \quad (11.2)$$

С учетом (11.2) и $q=1-p$ выражение (10.2) преобразуется к окончательному виду

$$\overline{x_N}^2 = \frac{p(1 - p^N)}{q}. \quad (12.2)$$

При $N \rightarrow \infty$ имеем:

$$\overline{x^2}_\infty = \frac{p}{q}. \quad (13.2)$$

Таким образом, в данной стохастической схеме средний квадрат смещения частицы уже конечен при сколь угодно большом количестве сделанных шагов.

Литература

- [1] И. Р. Кричевский, Л. А. Ротт. ДАН СССР, 136, 1368 (1961). [2] И. Р. Кричевский, Л. А. Ротт, Ю. В. Цеханская. ДАН СССР, 163, 674 (1965). [3] М. А. Леонтович. ЖЭТФ, 49, 1624, (1965). [4] М. Ш. Гитерман, М. Е. Герценштейн. ЖЭТФ, 50, 1084, (1966). [5] Я. А. Бальцевич, В. Г. Мартынец, Э. В. Матизен. ЖЭТФ, 51, 983, (1966). [6] Л. А. Ротт, А. А. Единолич. Сб. научн. тр. Бел. техн. ин-та, сер. общетехн., вып. 3, 47, Минск, 1966. [7] С. Чандрасекар. Стохастические проблемы в физике и астрономии. М., 1947. [8] Дж. Майер, М. Гепперт-Майер. Статистическая механика, М., 1952.