

УДК 517.98

Л.В. Коробенко, В.Ж. Сажбаев

Московский физико-технический институт
(государственный университет)

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ НА ПРЯМОЙ С РАЗРЫВНЫМ КОЭФФИЦИЕНТОМ¹

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе исследуется явление диффузии в области с переменным коэффициентом диффузии, негладко зависящим от точки области. Указанное явление возникает при изучении неоднородных материалов, сплавов, контактов двух химически различных сред, в частности, в физике полупроводников (см. [1]) и металлов ([2]). Коэффициент диффузии частиц (электронов в $p-n$ переходе, атомов вещества (примеси) на границе двух различных металлов) испытывает скачок при переходе из одной среды в другую.

Одной из главных целей работы является установление связи между видом дифференциального оператора задачи и марковским диффузионным процессом, который соответствует явлению диффузии. Исследованию указанной взаимосвязи посвящены ряд работ и монографий [8], [9], [10]. Нашей целью является исследование указанной взаимосвязи для операторов, действующих в пространствах интегрируемых по Лебегу функций $L_p(R)$.

В работе рассматривается марковский процесс, выбор которого продиктован *требованиями* минимальности отклонения от стандартного винеровского процесса в однородной среде, независимостью локальных свойств процесса в области однородности среды от свойств среды в дополнении к области однородности, а также требованиями регулярности процесса – конечности скоростей потока диффундирующих частиц и их концентрации.

Тем самым, выбор диффузионного процесса определяет область определения оператора диффузии, а область определения оператора диффузии позволяет задать дифференциальное выражение оператора диффузии. Постановка начально-краевой задачи определяется *требованиями* однозначно и выбор граничных условий для решения уравнения диффузии согласован с вероятностной и физической интерпретацией решения задачи.

¹Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 04-01-00457

После того, как оператор диффузии задан, однозначно определена постановка задачи Коши для уравнения диффузии. С помощью преобразования координат задача Коши сведена к стандартной задаче Коши для уравнения диффузии и установлена корректность постановки задачи Коши для уравнения диффузии с разрывным коэффициентом, а также определена формула для вероятности перехода из точки области в любое измеримое подмножество области.

Одним из важных вопросов исследования явления диффузии является изучение непрерывности зависимости решения уравнения диффузии от коэффициента диффузии в классе рассматриваемых коэффициентов. В данной работе показана сходимость решения задачи с непрерывным коэффициентом диффузии при стремлении параметра "сглаживания" к нулю. Т.о. показана устойчивость найденного решения к малым изменениям внешних параметров, а именно к малым изменениям коэффициента диффузии.

Важно отметить, что выведенное в настоящей работе уравнение диффузии (*) описывает диффузию и в среде с непрерывным коэффициентом, которое отличается от уравнения диффузии в дивергентной форме (см. [2], [1]). При этом постоянная функция не является стационарным решением уравнения (*), являясь при этом решением уравнения в дивергентной форме. Т.е. поток диффундирующего вещества, определяемый уравнением (*), не является пропорциональным градиенту концентрации, в отличие от потока, соответствующего уравнению в дивергентной форме.

1 Постановка задачи

Рассмотрим газ, разделенный перегородкой на две области пространства с разными коэффициентами диффузии, как показано на рис. 1. Начальные концентрации по обе стороны от перегородки - заданные дважды непрерывно дифференцируемые функции $U_{10}(x)$ при $x \in G_1 = \mathbf{R}_-$ и $U_{20}(x)$ при $x \in G_2 = \mathbf{R}_+$.

Для решения задачи нахождения концентрации $U(x, t)$ после снятия перегородки

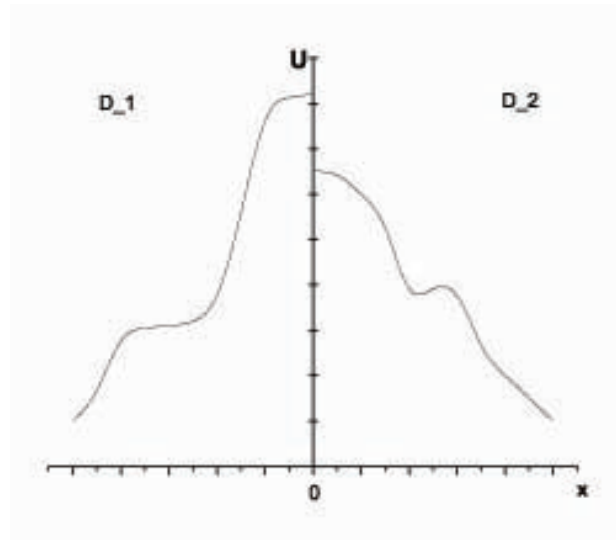


Рис. 1: Начальное распределение концентрации

необходимо записать уравнение диффузии. Предполагая, что диффузия газа в областях G_1 и G_2 происходит как диффузия газа с постоянными коэффициентами D_1 и D_2 и обозначив $U(x, t) = U_1(x, t)$ при $x < 0$ и $U(x, t) = U_2(x, t)$ при $x > 0$, запишем систему

уравнений для функций U_1, U_2 :

$$\begin{cases} \frac{\partial U_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 U_1}{\partial x^2}, & x \in G_1 = \mathbf{R}_-, \\ \frac{\partial U_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 U_2}{\partial x^2}, & x \in G_2 = \mathbf{R}_+. \end{cases} \quad (1)$$

с начальным условием

$$U(x, 0) = \begin{cases} U_{10}(x), & x \in G_1, \\ U_{20}(x), & x \in G_2. \end{cases} \quad (2)$$

При этом необходимо поставить граничные условия при $x = 0$ для концентрации и ее производной для каждого из уравнений. Анализ постановки граничных условий проведен в пункте 2.1.

2 Исследование процесса диффузии

2.1 Граничные условия

В процессе диффузии через границу $x = 0$ между областями G_1 и G_2 проходит поток диффундирующих частиц. Скорость потока из области G_i в область G_k равна:

$$J_k(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta N_k(t)}{\Delta t}$$

где $\Delta N_k(t)$ - приращение числа частиц в области G_k

Условие того, что частицы не накапливаются на границе, запишется в виде:

$$J_1(t) + J_2(t) = 0$$

Для того, чтобы установить условия, которым удовлетворяет концентрация и ее производная на границе раздела, сделаем следующие предположения:

Предположение 1. Диффузия частиц с дискретным временем $t \in \{n\tau, n \in \mathbf{Z}_+\}$, где $\tau > 0$ - шаг по времени, является стационарным марковским процессом с вероятностью перехода из точки $x \in \mathbf{R}$ во множество $B \subset \mathbf{R}$ $P(x, \tau, B)$, причем, если переход из точки $x \in G_i$ за время τ происходит в область G_i , то вероятность такого перехода определяется формулой:

$$P(x, \tau, B) = \int_B \frac{1}{2\sqrt{\pi D_i \tau}} \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4D_i \tau}\right) dy$$

Предположение 2. Скорость потока частиц из области G_1 в область G_2 в момент времени t определяется как:

$$J_2(t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} (N_{12}(t, \tau) - N_{21}(t, \tau)) \quad (3)$$

где N_{12} и N_{21} - число частиц перешедших из области G_1 в область G_2 при условии, что в области G_2 частиц нет, и из G_2 в G_1 соответственно, за время τ , начиная с момента времени t .

Предположение 3. Процесс диффузии частиц на прямой с коэффициентом диффузии

$$D(x) = \begin{cases} D_1, & x \in G_1, \\ D_2, & x \in G_2. \end{cases} \text{ происходит так, что скорость потока частиц конечна.}$$

Предположение 4. Полное количество частиц $N(t)$ сохраняется

$$\frac{dN(t)}{dt} = 0$$

Теорема 1. Пусть диффузия частиц с коэффициентом $D(x)$ удовлетворяет предположениям (1) и (2). Тогда скорость потока частиц через границу $x = 0$ в момент времени t конечна тогда и только тогда, когда концентрация частиц в момент времени t удовлетворяет условию:

$$U_1(t, 0)\sqrt{D_1} = U_2(t, 0)\sqrt{D_2} \quad (4)$$

При выполнении предположения (1) и условия (4) предел (3) существует и

$$J_2(t) = -\frac{1}{2}(D_1 \frac{\partial U_1}{\partial x}(0, t) + D_2 \frac{\partial U_2}{\partial x}(0, t))$$

Кроме того, условие сохранения полного числа частиц

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbf{R}} U(x, t) dx = 0$$

эквивалентно условию

$$D_1 \frac{\partial U_1}{\partial x}(0, t) = D_2 \frac{\partial U_2}{\partial x}(0, t) \quad (5)$$

Доказательство.

Для доказательства первого утверждения теоремы воспользуемся выражением (3) для скорости потока частиц и оценим $N_{12}(t, \tau)$ и $N_{21}(t, \tau)$. Представим, что справа частиц нет, а слева концентрация равна $U_1(x, t)$. Тогда оценим число частиц, перешедших через границу из области G_1 в область G_2 за время τ , начиная с момента времени t , при условии, что в области G_2 частиц нет. Согласно предположению (2), если в момент времени t частица находилась в точке $x \in G_1$, то вероятность остаться в области G_1 через время τ равна:

$$P(\tau, x, G_1) = \int_{-\infty}^0 \frac{1}{2\sqrt{\pi D_1 \tau}} \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4D_1 \tau}\right) dy$$

Тогда вероятность перейти в область G_2 равна:

$$P(\tau, x, G_2) = 1 - P(\tau, x, G_1)$$

Число частиц, перешедших из области G_1 в область G_2 за время τ равно:

$$N_{12}(t, \tau) = \int_{-\infty}^0 U_1(x, t) \left(1 - \frac{1}{2\sqrt{\pi D_1 \tau}} \int_{-\infty}^0 \exp\left(\frac{-(x-y)^2}{4D_1 \tau}\right) dy\right) dx$$

Используя то обстоятельство, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi D_1 \tau}} \exp\left(\frac{-(x-y)^2}{4D_1 \tau}\right)\right) dy = 1$$

Получаем:

$$N_{12}(t, \tau) = \int_{-\infty}^0 \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi D_1 \tau}} \int_0^{+\infty} U_1(x, t) \exp \left(\frac{-(x-y)^2}{4D_1 \tau} \right) dy \right) dx \quad (6)$$

Применяя аналогичные рассуждения для подсчета частиц, перешедших слева направо, получим:

$$N_{21}(t, \tau) = \int_0^{+\infty} \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 \tau}} \int_{-\infty}^0 U_2(x, t) \exp \left(\frac{-(x-y)^2}{4D_2 \tau} \right) dy \right) dx \quad (7)$$

Для того, чтобы оценить, как зависят интегралы (6) и (7) от времени, совершим следующее преобразование:

$$\begin{aligned} N_{12}(t, \tau) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi D_1 \tau}} \int_{-\infty}^0 \int_0^{\infty} U_1(x, t) \exp \left(\frac{-(x-y)^2}{4D_1 \tau} \right) dy dx = \left\{ \xi = \frac{x}{\sqrt{D_1 \tau}}, \eta = \frac{y}{\sqrt{D_1 \tau}} \right\} = \\ &= \frac{D_1 \tau}{2\sqrt{\pi D_1 \tau}} \int_{-\infty}^0 \int_0^{\infty} U_1(\xi \sqrt{D_1 \tau}, t) \exp \left(\frac{-(\xi - \eta)^2}{4} \right) d\eta d\xi = \\ &= \frac{\sqrt{D_1 \tau}}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 \int_0^{\infty} U_1(\xi \sqrt{D_1 \tau}, t) \exp \left(\frac{-(\xi - \eta)^2}{4} \right) d\eta d\xi \quad (8) \end{aligned}$$

Найдем предел $\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{N_{12}(\tau, t)}{\sqrt{\tau}}$. Используя теорему о предельном переходе под знаком интеграла и признак Вейерштрасса, получаем:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{N_{12}(\tau, t)}{\sqrt{\tau}} = A \sqrt{D_1} U_1(0, t) \quad (9)$$

где

$$A = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 \int_0^{\infty} \exp \left(\frac{-(\xi - \eta)^2}{4} \right) d\eta d\xi$$

Т.о. $N_{12}(\tau, t) = A \sqrt{D_1} U_1(0, t) \sqrt{\tau} + o(\sqrt{\tau})$. Найдем теперь предел $\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{N_{12}(\tau, t) - A \sqrt{D_1} U_1(0, t) \sqrt{\tau}}{\tau}$. Для этого делаем замену и используем правило Лопиталья:

$$\begin{aligned} &\lim_{\tau \rightarrow 0} \left(\frac{\frac{1}{2} \sqrt{\frac{D_1}{\pi}} \int_{-\infty}^0 \int_0^{\infty} U_1(\xi \sqrt{D_1 \tau}, t) \exp \left(\frac{-(\xi - \eta)^2}{4} \right) d\eta d\xi - A \sqrt{D_1} U_1(0, t)}{\sqrt{\tau}} \right) = \quad (10) \\ &= \{p = \sqrt{\tau}\} = \lim_{p \rightarrow +0} \left(\frac{\frac{1}{2} \sqrt{\frac{D_1}{\pi}} \int_{-\infty}^0 \int_0^{\infty} U_1(\xi \sqrt{D_1} p, t) \exp \left(\frac{-(\xi - \eta)^2}{4} \right) d\eta d\xi - A \sqrt{D_1} U_1(0, t)}{p} \right) = \\ &= \lim_{p \rightarrow +0} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{D_1}{\pi}} \frac{\partial}{\partial p} \int_{-\infty}^0 \int_0^{\infty} U_1(\xi \sqrt{D_1} p, t) \exp \left(\frac{-(\xi - \eta)^2}{4} \right) d\eta d\xi \end{aligned}$$

Используя правило дифференцирования под знаком интеграла, находим искомый предел (10):

$$N_{12}(\tau, t) = A \sqrt{D_1} U_1(0, t) \sqrt{\tau} + B D_1 U_1'(0, t) \tau + o(\tau)$$

где

$$B = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 \int_0^{\infty} \xi \exp\left(-\frac{(\xi - \eta)^2}{4}\right) d\eta d\xi = -\frac{1}{2} < 0$$

Аналогично, получаем:

$$N_{21}(\tau, t) = A\sqrt{D_1}U_2(0, t)\sqrt{\tau} - BD_2U_2'(0, t)\tau + o(\tau)$$

Тогда искомая скорость равна

$$J_2 = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{A(U_1(0, t)\sqrt{D_1} - U_2(0, t)\sqrt{D_2})}{\sqrt{\tau}} + B(D_1U_1'(0, t) + D_2U_2'(0, t))$$

Т.е. для того, чтобы она была конечной в момент времени t , необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие $U_1(0, t)\sqrt{D_1} = U_2(0, t)\sqrt{D_2}$. Отсюда также сразу следует выражение для скорости:

$$J_2 = B(D_1U_1'(0, t) + D_2U_2'(0, t)) = -\frac{1}{2}(D_1U_1'(0, t) + D_2U_2'(0, t))$$

Для доказательства последнего утверждения воспользуемся правилом дифференцирования под знаком интеграла и равенствами (1):

$$\begin{aligned} 0 = \frac{dN(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} U(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial U}{\partial t}(x, t) dx = \int_{-\infty}^0 \frac{\partial U_1(x, t)}{\partial t} dx + \int_0^{\infty} \frac{\partial U_2(x, t)}{\partial t} dx = \\ &= D_1 \int_{-\infty}^0 \frac{\partial^2 U_1(x, t)}{\partial x^2} dx + D_2 \int_0^{\infty} \frac{\partial^2 U_2(x, t)}{\partial x^2} dx = D_1 \frac{\partial U_1}{\partial x}(0, t) - D_2 \frac{\partial U_2}{\partial x}(0, t) \end{aligned}$$

Откуда и следует последнее утверждение. Теорема доказана.

2.2 Дифференциальный оператор уравнения диффузии

В пункте 1 мы записали систему уравнений (1), которую необходимо решить, а в пункте 2.1 установили граничные условия (5) и (4). Теперь попробуем найти такой дифференциальный оператор L , что:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = LU = \begin{cases} D_1 \frac{\partial^2 U_1}{\partial x^2}, & x < 0, \\ D_2 \frac{\partial^2 U_2}{\partial x^2}, & x > 0. \end{cases} \quad (11)$$

А его область определения составляют функции, удовлетворяющие условиям конечности потока и сохранения полного числа частиц, т.е.

$$D(L) = \{U(x) \in L_2(\mathbf{R}) \cap L_1(\mathbf{R}) : U(x)|_{\mathbf{R}_{\pm}} \in W_2^2(\mathbf{R}_{\pm}); \sqrt{D_1}U(-0) = \sqrt{D_2}U(+0), D_1U'(-0) = D_2U'(+0)\} \quad (12)$$

Здесь мы сталкиваемся с проблемой упорядочения последовательности применения операторов дифференцирования и умножения на функцию $D(x) = \begin{cases} D_1, & x < 0, \\ D_2, & x > 0 \end{cases}$.

Сформулируем следующее следствие к теореме 1, дающее вид оператора уравнения диффузии.

Следствие 1. Зависимость концентрации частиц от времени и координаты при диффузии с коэффициентом $D(x)$ при выполнении предположений (1)-(4) определяется задачей Коши:

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} &= LU, t > 0, x \in \mathbf{R} \\ LU &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\sqrt{D(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\sqrt{D(x)} U \right) \right) \\ D(L) &= \{U(x) \in L_2(\mathbf{R}) \cap L_1(\mathbf{R}) : U(x)|_{\mathbf{R}_{\pm}} \in W_2^2(\mathbf{R}_{\pm}); \sqrt{D_1}U(-0) = \sqrt{D_2}U(+0), D_1U'(-0) = D_2U'(+0)\} \\ U_{t=0} &= U_0(x, t) = \begin{cases} U_{10}(x), & x < 0, \\ U_{20}(x), & x > 0. \end{cases}\end{aligned}\quad (13)$$

Доказательство.

Докажем, что дифференциальный оператор L следующим образом действует на функцию $U(x)$:

$$LU = \begin{cases} D_1 \frac{\partial^2 U_1}{\partial x^2}, & x < 0, \\ D_2 \frac{\partial^2 U_2}{\partial x^2}, & x > 0, \end{cases}\quad (14)$$

и его область определения составляют функции 12.

Действие оператора L на функцию U заключается в последовательном применении операторов дифференцирования и умножения на функцию $\sqrt{D(x)}$, разрывную в нуле. Рассмотрим произвольную функцию $V(x) \in D(L)$. Тогда, т.к. $V \in W_2^2(\mathbf{R}_{\pm})$, то по теореме вложения $V \in C^1(\mathbf{R}_{\pm})$, причем при умножении функции $V(x)$ на функцию $\sqrt{D(x)}$ получается вновь функция из $C^1(\mathbf{R}_{\pm})$. Следовательно, функции $V(x)$, $\sqrt{D(x)}V(x)$, $D(x)V(x)$ задают регулярные обобщенные функции, которые можно дифференцировать по правилу:

$$\begin{aligned}\frac{\partial V}{\partial x} &= \left\{ \frac{\partial V}{\partial x} \right\} + [V]_0 \delta(x) \\ \frac{\partial^2 V}{\partial^2 x} &= \left\{ \frac{\partial^2 V}{\partial^2 x} \right\} + [V']_0 \delta(x) + [V]_0 \delta'(x)\end{aligned}$$

где $[V]_0 = V(+0) - V(-0)$, а $\left\{ \frac{\partial V}{\partial x} \right\}$ - обычная производная функции $V(x)$ в точках, где нет разрывов. Как видно, при дифференцировании функции $V(x)$ возникает δ -функция, и при умножении функции $\sqrt{D(x)}$, разрывной в нуле, на δ -функцию возникает неопределенность. Чтобы этого избежать, необходимо потребовать, чтобы коэффициент при δ обращался в ноль. Из этого требования вытекает условие на разрыв функции концентрации в нуле. Далее, для того чтобы оператор L действовал на функцию U по правилу (14) необходимо, чтобы коэффициент при δ -функции, возникающей при повторном применении оператора дифференцирования, в конечном выражении обращался в ноль. Из этого требования получаем условия на скачок V' в нуле. В нашем случае простой проверкой убеждаемся, что условия на функцию U и ее производную, получающиеся при действии оператора L , фигурирующего в следствии, это условия (5) и (4), входящие в область определения оператора L . Следствие доказано.

3 Решение уравнения

Задачу Коши (13) можно с помощью замены координат

$$\xi = \begin{cases} \alpha x = \sqrt{\frac{D_2}{D_1}} x, & x < 0 \\ x, & x > 0 \end{cases}$$

преобразовать к задаче Коши для уравнения диффузии в однородном пространстве. Новая функция концентрации $\tilde{U}(t, \xi)$ определится из условия неизменности полного числа частиц в произвольном интервале полуоси при преобразовании координат:

$$\int_{x_1}^{x_2} U(x, t) dx = \int_{\xi(x_1)}^{\xi(x_2)} \tilde{U}(\xi, t) d\xi$$

Т.е. $\tilde{U}(\xi, t)\xi'(x) = U(x, t)$, или

$$\tilde{U}(t, \xi) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha} U_1(t, x(\xi)), & x < 0, \\ U_2(t, x(\xi)), & x > 0 \end{cases}$$

Лемма 1. *Задача Коши (13) для функции $U(x, t)$ равносильна следующей задаче Коши для функции $\tilde{U}(\xi, t)$:*

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{U}}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 \tilde{U}}{\partial \xi^2} \\ \tilde{U}(-0, t) &= \tilde{U}(+0, t) \\ \tilde{U}'_{\xi}(-0, t) &= \tilde{U}'_{\xi}(+0, t) \\ \tilde{U}(\xi, 0) &= U_0(x(\xi)) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha} U_{10}(\frac{\xi}{\alpha}), & x < 0 \\ U_{20}(\xi), & x > 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Таким образом функция $\tilde{U}(\xi, t)$ является решением классического уравнения диффузии на прямой с постоянным коэффициентом D_2

$$\begin{aligned} \tilde{U}(\xi, t) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{U}(y, 0) \exp\left(-\frac{(\xi - y)^2}{4D_2 t}\right) dy = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \left(\int_{-\infty}^0 \frac{1}{\alpha} U_{10}(y/\alpha) \exp\left(-\frac{(\xi - y)^2}{4D_2 t}\right) dy + \int_0^{\infty} U_{20}(y) \exp\left(-\frac{(\xi - y)^2}{4D_2 t}\right) dy \right) \end{aligned}$$

Переходя обратно к функции $U(x, t)$, получаем:

$$\begin{aligned} U_1(x, t) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \int_{-\infty}^0 U_{10}(y \sqrt{\frac{D_1}{D_2}}) \exp\left(-\frac{(\sqrt{\frac{D_2}{D_1}} x - y)^2}{4D_2 t}\right) dy + \\ &+ \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{D_2}{D_1}} U_{20}(y) \exp\left(-\frac{(\sqrt{\frac{D_2}{D_1}} x - y)^2}{4D_2 t}\right) dy, \quad x < 0 \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} U_2(x, t) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \int_{-\infty}^0 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} U_{10}(y \sqrt{\frac{D_1}{D_2}}) \exp\left(-\frac{(x - y)^2}{4D_2 t}\right) dy + \\ &+ \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \int_0^{\infty} U_{20}(y) \exp\left(-\frac{(x - y)^2}{4D_2 t}\right) dy, \quad x > 0 \end{aligned} \quad (16)$$

Или окончательно:

$$U(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi D_1 t}} \int_{-\infty}^0 U_{10}(y) \exp\left(\frac{-(x-y)^2}{4D_1 t}\right) dy + \frac{1}{2\sqrt{D_1 \pi t}} \int_0^{\infty} U_{20}(y) \exp\left(\frac{-(\sqrt{\frac{D_2}{D_1}} x - y)^2}{4D_2 t}\right) dy, & x < 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \int_{-\infty}^0 U_{10}(y) \exp\left(\frac{-(x - \sqrt{\frac{D_2}{D_1}} y)^2}{4D_2 t}\right) dy + \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \int_0^{\infty} U_{20}(y) \exp\left(\frac{-(x-y)^2}{4D_2 t}\right) dy, & x > 0 \end{cases}$$

Используя выражение функции концентрации в любой момент времени через функцию в начальный момент времени можем записать плотность вероятности перехода в точке с координатой x

$$p(x|y; t) = \begin{cases} \theta(-y) \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \exp\left(\frac{-(x-y)^2}{4D_1 t}\right) + \theta(y) \frac{1}{\sqrt{D_1 \pi t}} \exp\left(\frac{-(\sqrt{\frac{D_2}{D_1}} x - y)^2}{4D_2 t}\right), & x < 0 \\ \theta(-y) \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \exp\left(\frac{-(x - \sqrt{\frac{D_2}{D_1}} y)^2}{4D_2 t}\right) + \theta(y) \frac{1}{2\sqrt{\pi D_2 t}} \exp\left(\frac{-(x-y)^2}{4D_2 t}\right), & x > 0 \end{cases}$$

4 Исследование устойчивости

Рассмотрим теперь задачу со "сглаживанием" и посмотрим будет ли решение этой задачи сходиться в каком-либо смысле к решению задачи (13) при стремлении параметра сглаживания к нулю.

Рассмотрим следующую задачу Коши:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_\varepsilon}{\partial t} &= L_\varepsilon U_\varepsilon, t > 0, x \in \mathbf{R} \\ L_\varepsilon U &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\sqrt{D_\varepsilon(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\sqrt{D_\varepsilon(x)} U_\varepsilon \right) \right) \\ U_\varepsilon|_{t=0} &= U_0(x, t) = \begin{cases} U_{10}(x), & x < 0, \\ U_{20}(x), & x > 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (17)$$

Коэффициент диффузии $D_\varepsilon(x)$ задан следующим образом:

$$D_\varepsilon(x) = \omega_\varepsilon * D = \int_{-\infty}^{\infty} \omega_\varepsilon(y) D(x-y) dy$$

Где ω_ε — "шапочка":

$$\omega_\varepsilon(x) = \begin{cases} a(\varepsilon) \exp\left(\frac{\varepsilon^2}{x^2 - \varepsilon^2}\right), & |x| < \varepsilon, \\ 0, & |x| \geq \varepsilon. \end{cases}$$

$$a(\varepsilon) : \int_{-\infty}^{\infty} \omega_\varepsilon(x) dx = 1$$

График функции $D_\varepsilon(x)$ схематически показан на рис.2

Для доказательства сходимости $U_\varepsilon(x, t)$ к $U(x, t)$ (в L_2 -норме), где $U_\varepsilon(x, t)$ и $U(x, t)$ — решения соответствующих задач Коши, совершим следующие преобразования:

$$\begin{aligned} \tilde{U}_\varepsilon(\xi) &= U(x(\xi)) \frac{dx}{d\xi}, \quad \frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{\sqrt{D_\varepsilon}} \\ \tilde{U}(\xi) &= U(x(\xi)) \frac{dx}{d\xi}, \quad \frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{\sqrt{D}} \end{aligned}$$

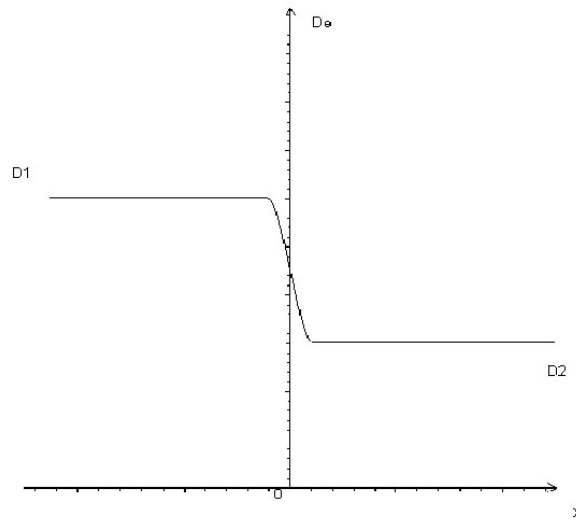


Рис. 2: "Сглаженный" коэффициент диффузии

Тогда, как нетрудно убедиться, задачи Коши (13) и (17) приобретают вид:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{U}}{\partial t} &= \frac{\partial^2 \tilde{U}}{\partial \xi^2} \\ \tilde{U}(\xi, 0) &= \tilde{U}_0(\xi) = U_0(x(\xi))\sqrt{D(x(\xi))}\end{aligned}\quad (18)$$

и

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{U}_\varepsilon}{\partial t} &= \frac{\partial^2 \tilde{U}_\varepsilon}{\partial \xi^2} \\ \tilde{U}_\varepsilon(\xi, 0) &= \tilde{U}_{0\varepsilon}(\xi) = U_0(x(\xi))\sqrt{D_\varepsilon(x(\xi))}\end{aligned}\quad (19)$$

Для доказательства сходимости решения (17) к решению (13) будем использовать сходимость решения задачи (19) $\tilde{U}_\varepsilon(\xi, t)$ к решению задачи (18) $\tilde{U}(\xi, t)$, которая будет показана ниже.

Прежде всего заметим, что

$$\xi(x) = \int_0^x \frac{p}{\sqrt{D(p)}} dp = \begin{cases} \frac{x}{\sqrt{D_1}}, & x < 0, \\ \frac{x}{\sqrt{D_2}}, & x > 0. \end{cases}\quad (20)$$

$$\xi(x, \varepsilon) = \int_0^x \frac{p}{\sqrt{D_\varepsilon(p)}} dp; \quad \xi(x, \varepsilon) = \begin{cases} \frac{x}{\sqrt{D_1}} + C_1(\varepsilon), & x < -\varepsilon, \\ \frac{x}{\sqrt{D_2}} + C_2(\varepsilon), & x > \varepsilon. \end{cases}\quad (21)$$

(будем считать, что $\xi(0, \varepsilon) = \xi(0) = 0$) Сделаем несколько оценок, на которые будет опираться доказательство сходимости решения "сглаженной" задачи к решению предельной задачи.

1.

$$\|\tilde{U}_\varepsilon(\xi) - \tilde{U}(\xi)\| \leq \|\tilde{U}_{0\varepsilon}(\xi) - \tilde{U}_0(\xi)\| \quad (22)$$

Умножим разность уравнений (19) и (18) на $\tilde{U}_\varepsilon - \tilde{U}$, проинтегрируем обе части и возьмем интеграл в правой части равенства по частям:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial(\tilde{U}_\varepsilon - \tilde{U})}{\partial t} (\tilde{U}_\varepsilon - \tilde{U}) d\xi = - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial(\tilde{U}_\varepsilon - \tilde{U})}{\partial \xi} \right)^2 d\xi \quad (23)$$

(пределы на бесконечности равны нулю, т.к. обращаются в ноль функции $\tilde{U}_\varepsilon(\xi)$ и $\tilde{U}(\xi)$, как и функции $U(x)$, $U_\varepsilon(x)$).

Из (23) получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{U}_\varepsilon - \tilde{U})^2 d\xi &= - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \tilde{U}_\varepsilon - \tilde{U}}{\partial x} \right)^2 d\xi < 0 \\ \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{U}_\varepsilon - \tilde{U})^2 d\xi &\leq \int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{U}_{0\varepsilon} - \tilde{U}_0)^2 d\xi \end{aligned}$$

Т.е. справедливо неравенство (22).

2.

$$\|U_\varepsilon(x) - U(x)\| \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \|U_\varepsilon(x) - U(x)\| &= \left\| \frac{\tilde{U}_\varepsilon(\xi(x, \varepsilon))}{\sqrt{D_\varepsilon(x)}} - \frac{\tilde{U}(\xi(x))}{\sqrt{D(x)}} \right\| \leq \\ &\leq \left\| \frac{\tilde{U}_\varepsilon(\xi(x, \varepsilon))}{\sqrt{D_\varepsilon(x)}} - \frac{\tilde{U}(\xi(x))}{\sqrt{D_\varepsilon(x)}} \right\| + \left\| \frac{\tilde{U}(\xi(x))}{\sqrt{D_\varepsilon(x)}} - \frac{\tilde{U}(\xi(x))}{\sqrt{D(x)}} \right\| \leq \\ &\leq \sup_x \left| \frac{1}{\sqrt{D_\varepsilon(x)}} \right| \cdot \|\tilde{U}_\varepsilon(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))\| + \sup_x |\tilde{U}(\xi(x))| \cdot \left\| \frac{1}{\sqrt{D_\varepsilon(x)}} - \frac{1}{\sqrt{D(x)}} \right\| \end{aligned}$$

3.

$$\left\| \frac{1}{\sqrt{D_\varepsilon(x)}} - \frac{1}{\sqrt{D(x)}} \right\| \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (25)$$

$$\left\| \frac{1}{\sqrt{D_\varepsilon(x)}} - \frac{1}{\sqrt{D(x)}} \right\| \leq \sup_{x \in (-\varepsilon; \varepsilon)} \left| \frac{1}{\sqrt{D_\varepsilon(x)}} - \frac{1}{\sqrt{D(x)}} \right| \cdot 2\varepsilon = A \cdot \varepsilon \rightarrow 0$$

4.

$$\|\tilde{U}_\varepsilon(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))\| \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \|\tilde{U}_\varepsilon(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))\| &\leq \|\tilde{U}_\varepsilon(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x, \varepsilon))\| + \|\tilde{U}(\xi(x)) - \tilde{U}(\xi(x, \varepsilon))\| \leq \\ &\leq \sqrt{\sup_\xi |\sqrt{D_\varepsilon(x(\xi))}|} \cdot \|\tilde{U}_\varepsilon(\xi) - \tilde{U}(\xi)\| + \|\tilde{U}(\xi(x)) - \tilde{U}(\xi(x, \varepsilon))\| \leq \\ &\leq \sqrt{\sup_\xi |\sqrt{D_\varepsilon(x(\xi))}|} \cdot \|\tilde{U}_{0\varepsilon}(\xi) - \tilde{U}_0(\xi)\| + \|\tilde{U}(\xi(x)) - \tilde{U}(\xi(x, \varepsilon))\| \end{aligned}$$

5.

$$\|\tilde{U}_{0\varepsilon}(\xi) - \tilde{U}_0(\xi)\| \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \|\tilde{U}_{0\varepsilon}(\xi) - \tilde{U}_0(\xi)\| &= \|U_0(x(\xi, \varepsilon))\sqrt{D_\varepsilon(x(\xi, \varepsilon))} - U_0(x(\xi))\sqrt{D(x(\xi))}\| \leq \\ &\leq \|U_0(x(\xi, \varepsilon))\sqrt{D_\varepsilon(x(\xi, \varepsilon))} - U_0(x(\xi, \varepsilon))\sqrt{D(x(\xi))}\| + \|U_0(x(\xi, \varepsilon))\sqrt{D(x(\xi))} - U_0(x(\xi))\sqrt{D(x(\xi))}\| \leq \\ &\leq \sup_x |U_0(x)| \cdot \|\sqrt{D_\varepsilon(x)} - \sqrt{D(x)}\| + \sup_\xi |\sqrt{D(x)}| \cdot \|U_0(x(\xi, \varepsilon)) - U_0(x(\xi))\| \leq \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\leq \sup_{\xi} |U_0(x(\xi, \varepsilon))| \cdot \left(\|\sqrt{D_{\varepsilon}(x(\xi, \varepsilon))} - \sqrt{D(x(\xi, \varepsilon))}\| + \|\sqrt{D(x(\xi, \varepsilon))} - \sqrt{D(x(\xi))}\| \right) + \\ &\quad + \sup_{\xi} |\sqrt{D(\xi)}| \cdot \|U_0(x(\xi, \varepsilon)) - U_0(x(\xi))\| \\ &\|\sqrt{D_{\varepsilon}(x(\xi, \varepsilon))} - \sqrt{D(x(\xi, \varepsilon))}\| \leq \sup_{\xi} |\sqrt{D_{\varepsilon}(x(\xi, \varepsilon))} - \sqrt{D(x(\xi, \varepsilon))}| \cdot 2\varepsilon = B \cdot \varepsilon \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Таким образом, из пунктов 1-5 вытекает следующая оценка:

$$\begin{aligned} \|U_{\varepsilon}(x) - U(x)\| &\leq \sup_x |\tilde{U}(\xi(x))| \cdot A\varepsilon + \sup_x \left| \frac{1}{\sqrt{D_{\varepsilon}(x)}} \right| \cdot (\|\tilde{U}(\xi(x)) - \tilde{U}(\xi(x, \varepsilon))\| + \\ &\quad + \sqrt{\sup_{\xi} |\sqrt{D_{\varepsilon}(x(\xi))}| (\sup_{\xi} |\sqrt{D(\xi)}| \cdot \|U_0(x(\xi, \varepsilon)) - U_0(x(\xi))\| + \\ &\quad + \sup_{\xi} |U_0(x(\xi, \varepsilon))| \cdot (\|\sqrt{D(x(\xi, \varepsilon))} - \sqrt{D(x(\xi))}\| + B \cdot \varepsilon))} \end{aligned} \quad (28)$$

Т.к. функции $\tilde{U}$, U_0 , D_{ε} ограничены и функция D_{ε} не обращается в ноль, то для доказательства сходимости осталось показать, что

$$\|\sqrt{D(x(\xi, \varepsilon))} - \sqrt{D(x(\xi))}\| \rightarrow 0 \quad (29)$$

$$\|U_0(x(\xi, \varepsilon)) - U_0(x(\xi))\| \rightarrow 0 \quad (30)$$

$$\|\tilde{U}(\xi(x)) - \tilde{U}(\xi(x, \varepsilon))\| \rightarrow 0 \quad (31)$$

при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Первое из этих выражений равно нулю тождественно. Действительно, т.к. $\xi(0, \varepsilon) = \xi(0) = 0$ и, очевидно, $\xi(x, \varepsilon)$, $\xi(x) > 0$ при $x > 0$ и $\xi(x, \varepsilon)$, $\xi(x) < 0$ при $x < 0$, то $D(x(\xi, \varepsilon)) = D(x(\xi))$. Для доказательства второго и третьего утверждения используем следствие к следующей теореме:

Теорема 2. Для $1 < p < \infty$, для любого финитного элемента $f \in L_p(R^n)$ существует такая положительная неубывающая функция $\delta(\varepsilon)$, что $\|f(x + \Delta) - f(x)\|_{L_p} \leq \varepsilon$ при $|\Delta| < \delta(\varepsilon)$.

Доказательство теоремы дано, например, в [12].

Следствие 2. Пусть $f(x) \in L_2$. Тогда $\lim_{\Delta \rightarrow 0} \|f(x + \Delta) - f(x)\| = 0$

Покажем, что

$$x(\xi, \varepsilon) - x(\xi) = O(\varepsilon) \quad (32)$$

$$\exists \xi_1(\varepsilon) : x(\xi_1, \varepsilon) = \varepsilon$$

$$\Rightarrow x(\xi, \varepsilon) = \int_0^{\xi_1} \frac{1}{\sqrt{D_{\varepsilon}(x(s, \varepsilon))}} ds + \int_{\xi_1}^{\xi} \frac{1}{\sqrt{D_{\varepsilon}(x(s, \varepsilon))}} ds = \varepsilon + \sqrt{D_2}(\xi - \xi_1), \quad \xi \geq \xi_1 > 0$$

Т.о. $x(\xi, \varepsilon) - x(\xi) = \varepsilon - \sqrt{D_2}\xi_1(\varepsilon)$. Далее

$$\frac{1}{\sqrt{D_2}} \leq \frac{d\xi}{dx} \leq \frac{1}{\sqrt{D_1}} \Rightarrow \frac{\varepsilon}{\sqrt{D_1}} \leq \xi_1(\varepsilon) \leq \frac{\varepsilon}{\sqrt{D_2}}$$

$$\Rightarrow \varepsilon \left(1 - \sqrt{\frac{D_2}{D_1}} \right) \leq x(\xi, \varepsilon) - x(\xi) \leq 0$$

Аналогично производится оценка при $0 > \xi_2 \geq \xi$, где $\xi_2 : x(\xi_2, \varepsilon) = -\varepsilon$.
Аналогично показывается, что

$$\xi(x, \varepsilon) - \xi(x) = O(\varepsilon) \quad (33)$$

$$x_1 : \xi(x_1, \varepsilon) = \varepsilon$$

$$0 \leq \xi(x, \varepsilon) - \xi(x) \leq \varepsilon \left(1 - \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \right)$$

Для оценки нормы $\|\tilde{U}_\varepsilon(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))\|$ поступим следующим образом:

$$\begin{aligned} & \|\tilde{U}(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))\|_{L_2(R)} \leq \|\tilde{U}(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))\|_{L_2(-\infty; -\varepsilon)} + \\ & + \|\tilde{U}(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))\|_{L_2(-\varepsilon; \varepsilon)} + \|\tilde{U}(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))\|_{L_2(\varepsilon; +\infty)} \leq \\ & \leq |\tilde{U}(\xi(x) + C_1(\varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))|_{L_2(-\infty; -\varepsilon)} + |\tilde{U}(\xi(x) + C_2(\varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))|_{L_2(\varepsilon; +\infty)} + \\ & + \sup_{x \in (-\varepsilon; \varepsilon)} |\tilde{U}(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))| \cdot 2\varepsilon \end{aligned}$$

где $C_i(\varepsilon) = O(\varepsilon)$ (см. (21), (33)).

Тогда первые два члена оцениваются с помощью следствия, а последний член равен $O(\varepsilon)$.
Т.о. мы доказали, что

$$\|\tilde{U}(\xi(x, \varepsilon)) - \tilde{U}(\xi(x))\| \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0$$

Абсолютно аналогично проводится доказательство того, что

$$\|U_0(x(\xi, \varepsilon)) - U_0(x(\xi))\| \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0$$

Следовательно, используя оценки (28), (29)-(31), получаем:

$$\forall t > 0 \quad \|U_\varepsilon(x, t) - U(x, t)\|_{L_2(R)} \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0$$

Т.е. нами доказана следующая теорема:

Теорема 3. *Решение "сглаженной" задачи Коши (17) сходится к решению задачи Коши (13) в L_2 -норме.*

5 Выводы

В работе исследована диффузия в среде с разрывным коэффициентом в одномерном случае. Коэффициент диффузии является постоянным на полуосях, а на границе испытывает скачок. Для этого случая найдены граничные условия на функцию концентрации и ее производную, отвечающие требованиям конечности скорости потока частиц и постоянства полного числа частиц. Скорость потока вводилась через вероятность перехода частицы из точки с заданной координатой в заданную область. Также решена задача нахождения оператора уравнения диффузии, область определения которого задается найденными граничными условиями. При этом расстановка операторов дифференцирования и умножения на функцию не соответствует классическому уравнению диффузии, чем объясняется отличие выражения для потока от классического. Нами также получено аналитическое решение уравнения диффузии с заданными граничными условиями. Решение получено с помощью преобразования координат, приводящего наше уравнение к уравнению диффузии с постоянным коэффициентом, решение которого на прямой дается формулой Пуассона.

Исследован также случай диффузии со сносом, т.е. с дополнительным членом в уравнении, пропорциональным первой производной от функции концентрации. Для этого случай найдены граничные условия, причем условие на функцию концентрации такое же как и в отсутствие сноса, тогда как условие на производную оказывается другим. В соответствии с найденными граничными условиями записан оператор уравнения диффузии со сносом. Завершающим пунктом в исследовании является исследование устойчивости решения уравнения диффузии без сноса к "сглаживанию" коэффициента диффузии. Нами показано, что решение задачи в случае непрерывного коэффициента диффузии сходится в L_2 -норме к решению предельной задачи при стремлении параметра сглаживания к нулю, т.е. при стремлении коэффициента диффузии к разрывному.

Список литературы

- [1] Р.Ш. Малкович Математика диффузии в полупроводниках. С.-Петербург, Наука, 1999.
- [2] А.А. Смирнов Молекулярно-кинетическая теория металлов. М.: Наука, 1966
- [3] Д.М. Гитман, И.В. Тютин Каноническое квантование полей со связями. М.: Наука, 1986
- [4] О.А. Ладыженская Краевые задачи уравнений математической физики. М.: Наука, 1973.
- [5] В.Ж. Сакбаев О функционалах на решениях задачи Коши для уравнения Шредингера с вырождением на полупрямой // Журн. выч. мат. и матем. физ., 2004, т. 44, № 9 с. 1654–1673
- [6] В.В. Жиков, С.М. Козлов, О.А. Олейник Усреднение дифференциальных операторов. М.: Физматлит, 1993.
- [7] G. Fichera On a united theory of boundary value problems for elliptic-parabolic equations of second order // Boundary problems in differential equations, The University of Wisconsin Press, Madison, 1960, p. 97–120.
- [8] М.И. Фрейдлин, А.Д. Вентцель Флуктуации в динамических системах под действием малых случайных возмущений. М.: Наука, 1979.
- [9] В. Феллер Введение в теорию вероятностей и её приложения / 2 издание , Мир, 1964.
- [10] И.И. Гихман, А.В. Скороход Введение в теорию случайных процессов. М.: Наука, 1977
- [11] Я.И. Белопольская Вероятностный подход к решению систем нелинейных параболических уравнений // Теория вероятностей и ее применения, 2004, т. 49, вып. 4 с. 625–652
- [12] С.Л. Соболев Избранные вопросы теории функциональных пространств и обобщенных функций. М.: Наука, 1989