

## ГЛАВА 2 СЛУЧАЙНЫЕ БЛУЖДЕНИЯ И ПРОЦЕСС ДИФФУЗИИ ЧАСТИЦ

### 2.1. Простейшая схема блуждания по прямой. Задача о «пьяном матросе»

Несмотря на то, что название задачи напоминает об, увы, распространенном пороке, именно под таким именем она входит в большинство зарубежных учебников по теории случайных процессов (Drunk sailor problem).

Итак, есть бар (рис.2.1). От стойки бара до двери  $m$  шагов (будем для определенности считать, что 5 шагов, т.е.  $m=5$ ). От стойки начинает движение пьяный матрос, делая обязательно один шаг за другим, но в какую сторону – как бог пошлет. Какова вероятность того, что за  $N$  шагов он вылетит за дверь?

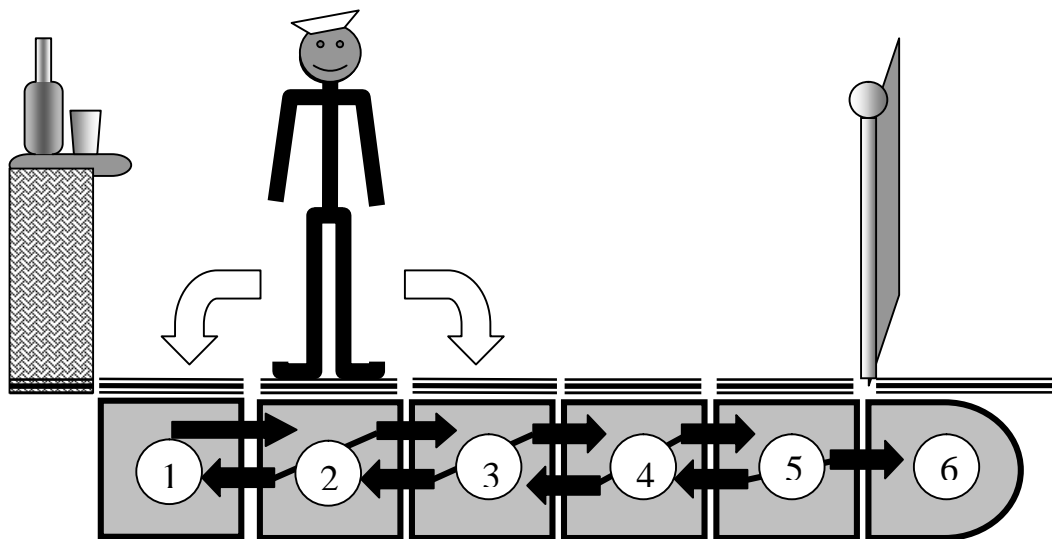


Рис.2.1. Расчетная схема блужданий пьяного матроса

Посмотрим, как развивается этот случайный (в силу нетрезвости матроса) процесс. Матрос может находиться в одном из шести показанных на рисунке состояний: 5 состояний внутри бара и 1 снаружи (вылетел). Этот полный спектр возможных пребываний матроса образует пространство состояний задачи. Как описать его блуждание?

Если он начинает движение от стойки, то первый шаг он обязательно сделает вправо, так как влево нельзя, то есть перейдет из положения 1 в положение 2. На втором шаге он может шагнуть и вправо, и влево. Так как он считается пьяным совершенно, вероятность того и другого

одинакова. Давайте бросим монетку, и если выпадет орел, то подвинем его вправо, а если решетка, то влево (в компьютере роль монетки играет генератор случайных чисел). В зависимости от результата он окажется в положении 1 или 3. Если в 1, то следующий шаг точно вправо, а если в 3, то надо снова бросать монетку. Мы отвели матросу  $N$  шагов. Значит, по этому правилу его надо «подвинуть»  $N$  раз. Если после какого-то из  $N$  шагов он окажется в положении 6, то игру можно прервать и пометить, что этот матрос вылетел. Если после всех  $N$  шагов он останется внутри бара, то есть в положениях  $1 \dots 5$ , то он не вылетел. Каждый раз, запуская задачу, вы будете получать разные схемы блужданий матроса. Поиграть с этими блужданиями можно с помощью программы MCh1, приведенной в приложении. На рис.2.2 показано четыре реализации этого случайного процесса, когда матросу отведено 20 шагов: в двух из них матрос не дошел до двери, а в двух – вылетел за нее. Значит ли это, что вероятность покинуть бар за 20 шагов равна 0,5?

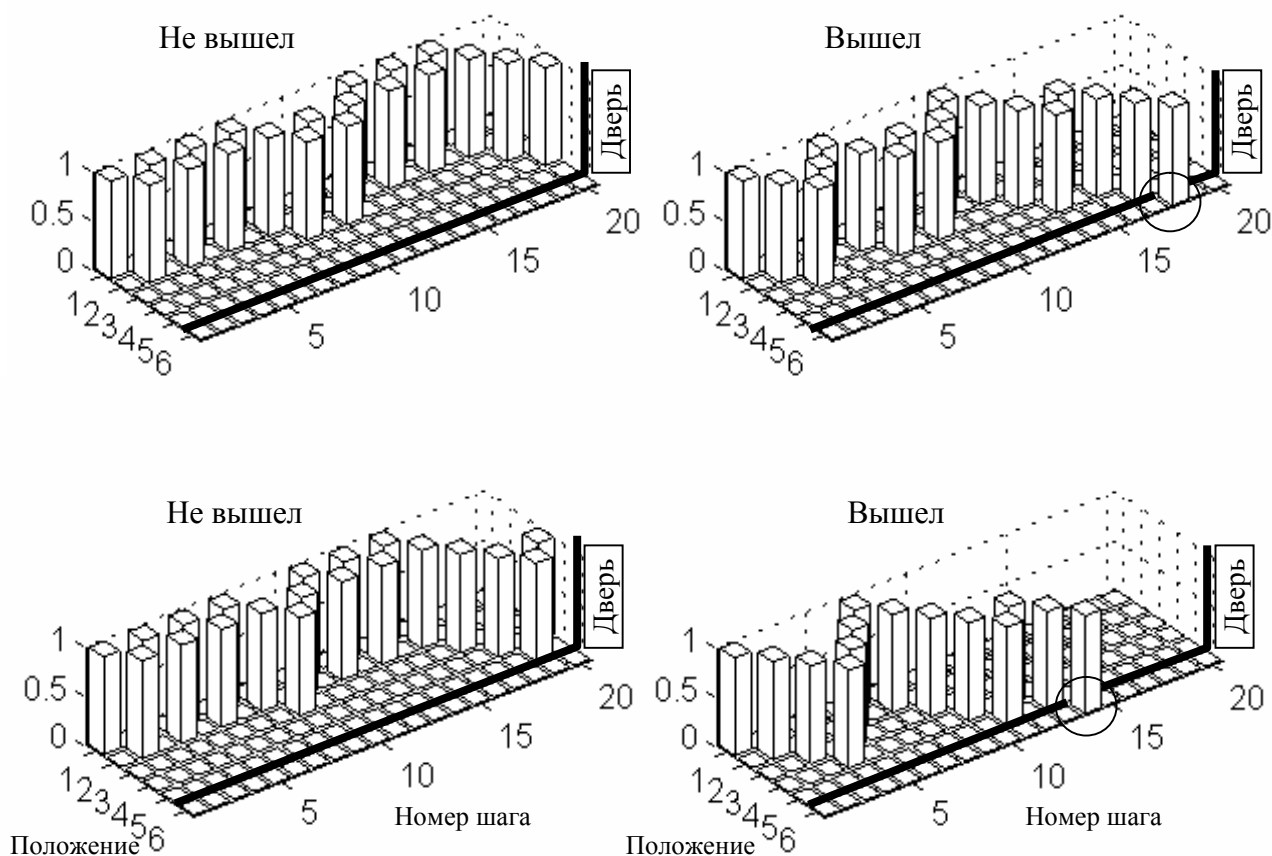


Рис.2.2. Примеры реализации случайных блужданий матроса

Заметим, что в этой модели движения матроса не так уж важно, в какую сторону и с какой вероятностью он каждый раз шагает (ниже мы рассмотрим и другие варианты). Важно то, что, делая каждый шаг, он совершенно не помнит, откуда он пришел: его будущее положение определяется только настоящим положением и никак не зависит от предыдущего. Именно это и относит его блуждания к марковскому процессу.

Напомним, что **вероятность** – это **отношение числа благоприятных исходов испытания к общему числу испытаний** (здесь *благоприятных* не несет смысла *желаемых*; это те исходы, о которых спрашивают в задаче – в нашем случае «вылетел»). Причем число испытаний должно быть очень большим (формально – стремиться к бесконечности).

Таким образом, нам надо запустить не 4, а, скажем, 100 матросов по рассмотренной выше схеме их блуждания, сосчитать, сколько из них за 20 шагов достигли положения 6, и результат разделить на 100. Но почему именно 100, а не больше? Очевидно, что надо провести столько испытаний, чтобы результат *практически* перестал зависеть от их числа. Пример такого исследования показан на рис.2.3. Он выполнен с помощью программы MCh2, работая с которой вы можете выполнить аналогичное исследование сами.

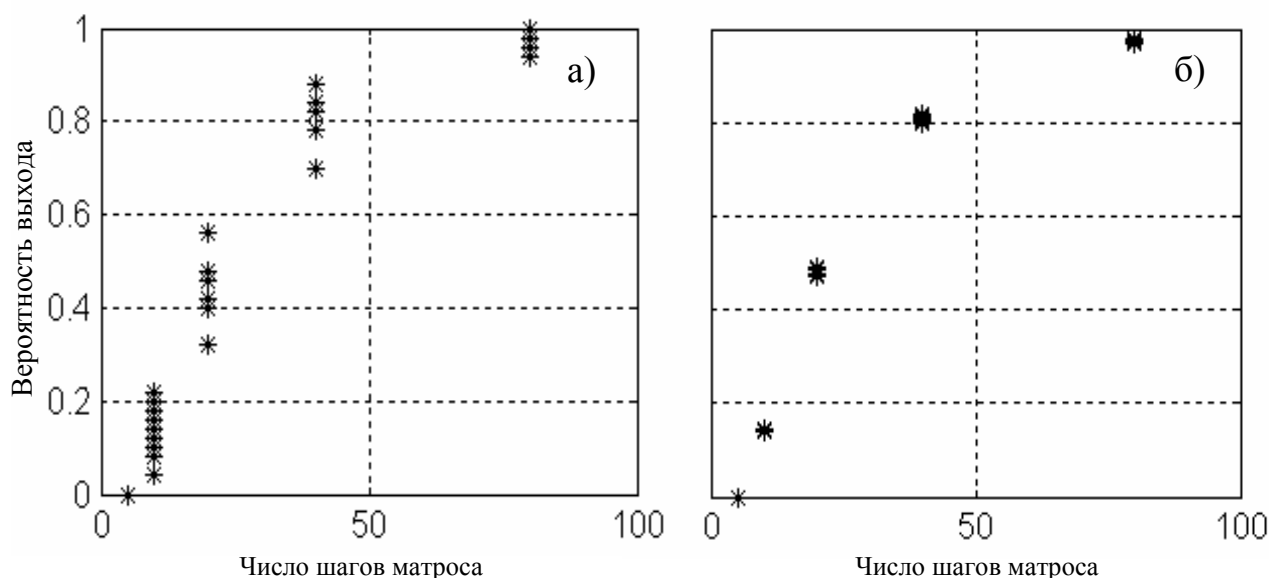


Рис.2.3. Влияние полного числа испытаний на разброс вероятности выхода матроса: а – 10 тестов по 50 испытаний; б – 10 тестов по 5000 испытаний

На рис.2.3,а показана рассчитанная таким образом вероятность выхода за 5, 10, 20, 40 и 80 шагов при 50 испытаниях, причем каждый тест

повторен 10 раз. Видно, что разброс вероятностей в каждом тесте очень велик, и одноразовый запуск задачи с 50 испытаниями может дать весьма недостоверный результат. На рис.2.3,б показаны результаты той же игры, но с 5000 испытаний в каждом тесте. Здесь вероятности достаточно плотно группируются около какого-то среднего значения и их разброс невелик. Что значит «невелик» – заранее сказать нельзя: это зависит от конкретной решаемой задачи. Если мы действительно интересуемся пьяным матросом, то эта точность выглядит вполне приемлемой, но в других задачах ее может быть явно недостаточно.

В рассмотренной выше задаче мы навязали матросу определенные правила игры: обязательно делать шаг, причем, кроме первого положения, с одинаковой вероятностью влево и вправо. Так мы поступаем всегда, чтобы построить математическую модель реального процесса. Но правила игры могут быть и другими. Например, если пол имеет уклон в сторону двери, естественно предположить, что вероятность шага вправо будет больше вероятности шага влево. Кроме того, за отведенное на шаг время матрос может вообще не сделать шага, то есть остаться в том же положении, что и был. Попытаемся построить модель общего случая блуждания матроса.

Пространство состояний модели такого же размера, что и в предыдущей схеме, показано на рис.2.4.

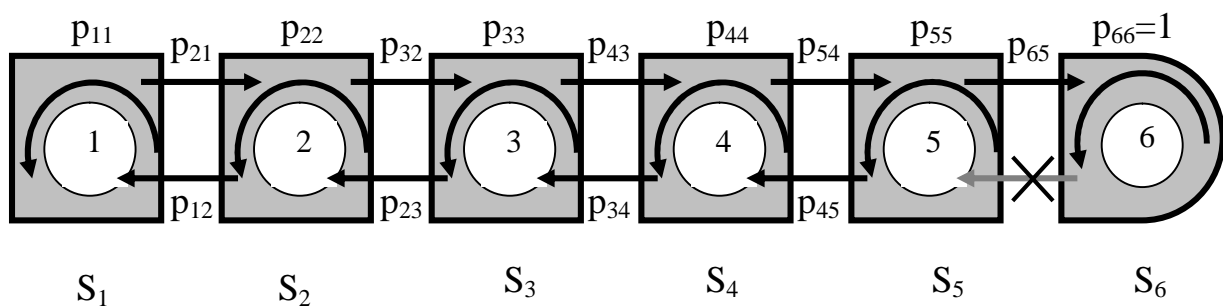


Рис.2.4. Цепная модель процесса случайных блужданий матроса – цепь Маркова

Обозначим вероятность найти матроса в каком-либо  $i$ -м состоянии через  $S_i$ ,  $i=1,2,\dots,6$ . Очевидно, что в каком-то из 6 состояний матрос найдется обязательно, поэтому

$$\sum_{i=1}^6 S_i = 1. \quad (2.1)$$

В дальнейшем будет удобно представлять набор вероятностей  $S_i$  в виде вектора-столбца

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \dots \\ S_6 \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

Целесообразно еще раз обратиться к смыслу величин  $S_i$ . Можно представить один за другим много баров, в каждом из которых от стойки начинает блуждание пьяный матрос. У каждого из них будет своя реализация этого случайного процесса. В какой-то момент времени можно посмотреть, сколько матросов находится в каждом состоянии. Поделив эти числа на общее число матросов, получим те вероятности состояния, которые обозначены  $S_i$ .

Теперь введем в рассмотрение время процесса. Пусть матросу на каждый шаг отведено время  $\Delta t$  – продолжительность одного перехода. Мы фиксируем состояние процесса только в дискретные моменты времени  $t_k = (k-1)\Delta t$ , где  $k$  – номер временного состояния, начиная с первого: матрос у стойки. Величина  $k$  может рассматриваться как дискретный аналог текущего времени.

Получилось так, что все переменные задачи стали целочисленными: положение матроса в пространстве характеризуется номером ячейки  $i$ , а время – номером временного перехода  $k$ .

Вернемся к рис.2.4. Пусть в  $k$ -м временном состоянии распределение вероятностей характеризуется вектором  $\mathbf{S}^k$ . Спустя  $\Delta t$  (время перехода, то есть продолжительность одного шага матроса) он перейдет в вектор  $\mathbf{S}^{k+1}$ . Рассмотрим, какие изменения обуславливают это переход. За это время матрос может остаться в ячейке, сделать шаг влево и сделать шаг вправо. Введем вероятности этих событий  $p_{ij}$ , где первый индекс показывает, куда осуществляется переход, а второй – откуда он происходит. Очевидно, что  $p_{ii}$  – вероятность остаться в ячейке. Эти вероятности называются переходными. Поскольку какое-то из этих событий произойдет обязательно, то

$$\sum_{j=1}^m p_{ij} = 1, j=1,2,\dots,m. \quad (2.3)$$

Несмотря на то, что суммирование записано по всем  $m$  ячейкам, в рассматриваемой модели слагаемых не больше трех. Однако это условие необязательно. Например, если регистрировать положение матроса через вдвое больший промежуток времени, чем требуется для одного шага, появятся вероятности перехода через одну ячейку, то есть их может оказаться пять.

Кроме того, по определению эти вероятности должны удовлетворять условиям

$$0 \leq p_{ij} \leq 1. \quad (2.4)$$

Используя эти вероятности, легко описать баланс прихода-ухода матросов в каждой ячейке на  $k$ -м переходе. Это показано в системе балансовых уравнений (2.5). Их легче воспринимать, оперируя числом матросов в ячейке (не поделенным на общее число матросов в игре), а вероятности рассматривать как доли перемещающихся между ячейками матросов от их числа в ячейке во временном состоянии  $k$ . Например, если в первой ячейке было 200 матросов, а во второй 100 и вероятность остаться в первой равна 0,25, а прийти из второй – 0,5, то после перехода в первой ячейке будет  $200 \cdot 0,25 + 100 \cdot 0,5 = 100$  матросов.

$$\begin{aligned}
 S_1^{k+1} &= \overbrace{p_{11}S_1^k}^{\text{Осталось в 1}} + \overbrace{p_{12}S_2^k}^{\text{Пришло из 2}} + \overbrace{0S_3^k + 0S_4^k + 0S_5^k + 0S_6^k}^{\text{Ничего из 3 и т.д.}} \\
 S_2^{k+1} &= p_{21}S_1^k + p_{22}S_2^k + p_{23}S_3^k + 0S_4^k + 0S_5^k + 0S_6^k \\
 S_3^{k+1} &= \overbrace{0S_1^k}^{\text{Ничего 1}} + \overbrace{p_{32}S_2^k}^{\text{Пришло из 2}} + \overbrace{p_{33}S_3^k}^{\text{Осталось в 3}} + \overbrace{p_{34}S_4^k}^{\text{Пришло из 4}} + \overbrace{0S_5^k + 0S_6^k}^{\text{Ничего из 5 и т.д.}} \\
 S_4^{k+1} &= 0S_1^k + 0S_2^k + p_{43}S_3^k + p_{44}S_4^k + p_{45}S_5^k + 0S_6^k \\
 S_5^{k+1} &= 0S_1^k + 0S_2^k + 0S_3^k + p_{54}S_4^k + p_{55}S_5^k + 0S_6^k \\
 S_6^{k+1} &= 0S_1^k + 0S_2^k + 0S_3^k + 0S_4^k + p_{65}S_5^k + 1S_6^k
 \end{aligned} \quad (2.5)$$

Эту систему равенств удобно записать в матричной форме

$$\begin{bmatrix} S_1^{k+1} \\ S_2^{k+1} \\ S_3^{k+1} \\ S_4^{k+1} \\ S_5^{k+1} \\ S_6^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{32} & p_{33} & p_{34} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{43} & p_{44} & p_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{54} & p_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{65} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1^k \\ S_2^k \\ S_3^k \\ S_4^k \\ S_5^k \\ S_6^k \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

или

$$S^{k+1} = PS^k, \quad (2.7)$$

где матрица  $P$  – уже знакомая нам матрица переходных вероятностей. Для задачи, с которой мы начали рассмотрение процесса, эта матрица имеет вид

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 0,5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0,5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,5 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.8)$$

Для того чтобы начать расчеты по рекуррентному матричному равенству (2.6) или (2.7), необходимо задать начальный вектор состояния, определяемый условиями задачи. Если в начале матрос находился у стойки бара с вероятностью 1, то начальный вектор имеет вид

$$S^0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]^T, \quad (2.9)$$

где индекс «Т» означает транспонирование вектора и матрицы (здесь и далее он используется для меньшей «высоты» формул).

Применение равенства (2.7) с матрицей (2.8) и начальным вектором состояния (2.9) уже не требует «запуска» множества матросов: эволюция вероятностей его положения полностью определяется эволюцией вектора состояния  $\mathbf{S}^k$ . Пример моделирования процесса показан на рис.2.5. Рис.2.5,а иллюстрирует полную картину процесса, когда вектор состояния эволюционирует от  $\mathbf{S}^0=[1\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0]$  к  $\mathbf{S}^\infty=[0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 1]$ . Правда, последнее формально наступает лишь асимптотически при  $k \rightarrow \infty$ , но практически  $\mathbf{S}_6^k$  становится близкой к единице уже при конечном числе переходов. Эволюция вероятности шестого (улица) состояния видна на трехмерном графике рис.2.5,а, а также вынесена отдельно на рис.2.5,б, откуда видно, что уже за 100 переходов вероятность найти матроса в баре близка к нулю.

График на рис.2.5,а показывает, какова вероятность того, что матрос вылетит за дверь *после k шагов*. Представляет интерес выяснить, какова вероятность вылететь *на k-м шаге*. Можно заранее сказать, что эта вероятность будет иметь максимум по числу шагов. Она равна вероятности пятого состояния, умноженной на вероятность выхода из него за дверь (в нашем случае – 0,5). Вначале в пятом состоянии «мало матросов», потому что они еще не дошли до двери, а потом там «мало матросов» вообще, потому что многие уже покинули бар. Очевидно, что эту вероятность можно рассчитать по формулам

$$q_k = \mathbf{S}_5^k \mathbf{p}_{65} = \mathbf{S}_6^{k+1} - \mathbf{S}_6^k. \quad (2.10)$$

График этой зависимости показан на рис.2.5,в. Она называется дифференциальной гистограммой выхода  $q_k(k)$  в отличие от кумулятивной (интегральной) гистограммы выхода  $Q_k(k)$ , показанной на рис.2.5,б. Очевидно, что  $\sum_1^\infty q_k = 1$  и  $Q_k = \sum_1^k q_k$  (продумайте эти формулы).

Сколько же шагов в среднем сделает матрос до того, как вылетит из бара? Гистограмма  $q_k(k)$  – дискретное распределение вероятности вылета по числу сделанных шагов. Следовательно, среднее число шагов до вылета – это математическое ожидание для этого распределения:

$$\langle k \rangle = \sum_1^\infty k q_k. \quad (2.11)$$

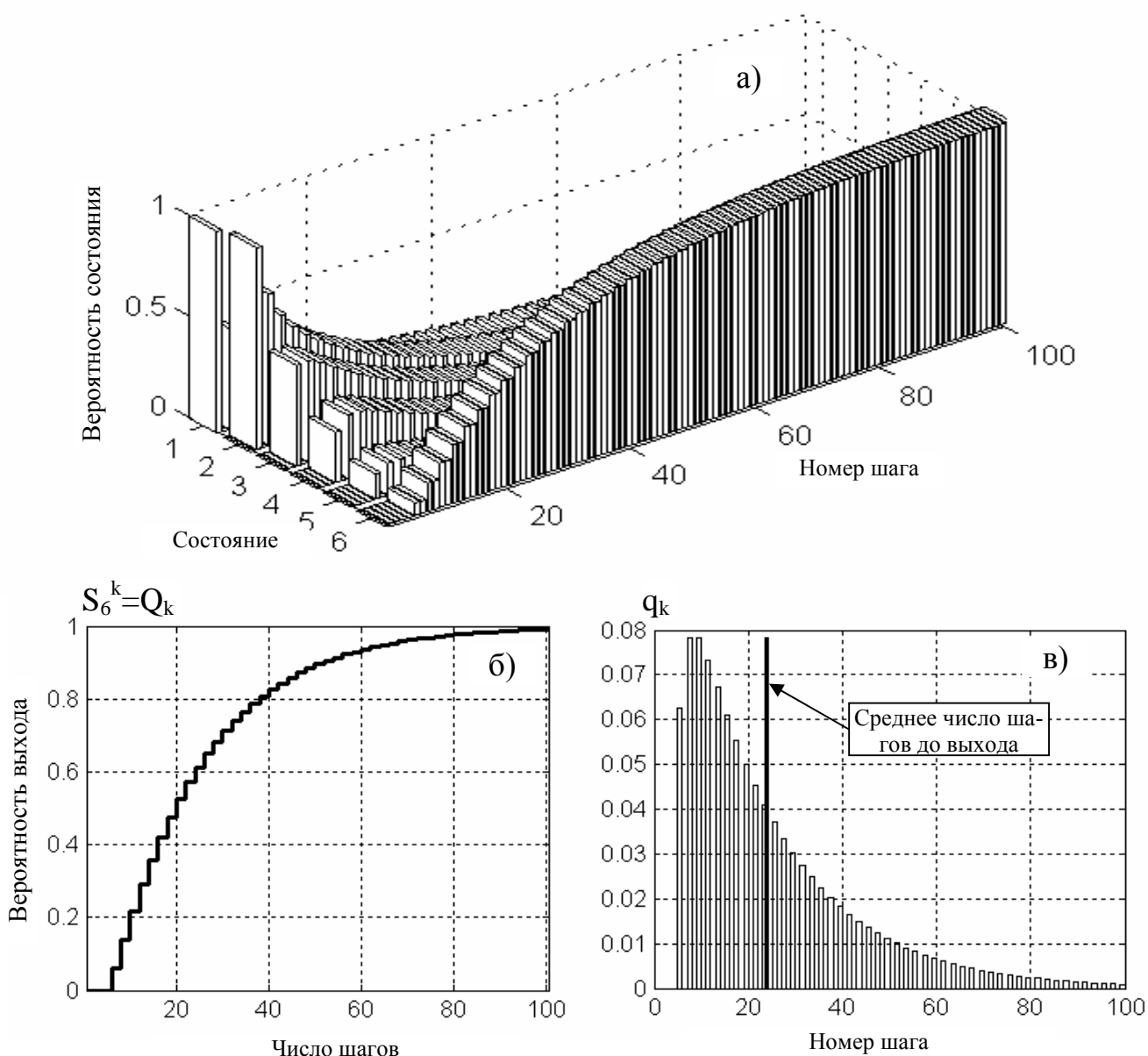


Рис.2.5. Эволюция состояния процесса случайных блужданий матроса (на основе цепи Маркова): а – эволюция вектора состояния; б – влияние числа шагов на вероятность выхода; в – вероятность выхода на шаге в зависимости от номера шага

На рис.2.5,в это среднее число шагов нанесено вертикальной линией и составляет около 22.

Компьютерная программа MCh3 позволит вам выполнить моделирование этого процесса и оценить влияние его параметров на исследуемые распределения и их характеристики. Эта программа предполагает одинаковую вероятность шага вправо и влево ( $d=0,5$ ), но допускает и введение вероятности остаться ( $d<0,5$ ). Попробуйте самостоятельно записать матрицу переходных вероятностей для трезвого посетителя бара, желающего покинуть бар от стойки, и обдумайте характеристики этого процесса.

Конечно, рассмотренные модели предназначены не для исследования поведения пьяных матросов. Это веселый и наглядный образ многих задач теории случайных процессов (в частности, рассматриваемой нами теории цепей Маркова), статистической физики и других отраслей знания. Например, движения матроса очень напоминают броуновское движение и диффузию частиц, описание которой с помощью теории цепей Маркова приведено ниже.

## 2.2. Одномерная диффузия. Виды и влияние краевых условий

В наиболее простом определении диффузия – это взаимное проникновение частиц двух или нескольких веществ. Чаще всего речь идет о молекулярной диффузии, когда эти частицы – молекулы диффундирующих компонентов. Процесс диффузии легко наблюдать, если в прозрачное горизонтальное корытце с водой капнуть каплю чернил



(рис.2.6). Вначале капля локализована в месте падения, и ее цвет резко отличается от цвета окружающей жидкости. Концентрация чернил в этом месте максимальна. Но поведение молекул чернил очень напоминает поведение пьяного матроса: двигаясь случайным образом влево и вправо, они продвигаются в зону, где их кон-

Рис.2.6. Иллюстрация процесса диффузии

центрация меньше. Постепенно края капли размываются, а жидкость в прилегающей зоне темнеет. Асимптотически вся жидкость окрашивается в равномерный цвет, светлее, чем капля, но темнее, чем вода: концентрация чернил равномерно распределена по длине корытца.

Не надо думать, что теория диффузии занимается только рассмотрением чернил в корытце. Диффузионные процессы играют важнейшую роль в физике, химии, экономике, социальных процессах и других отраслях знания.

Основой теории диффузии служит эмпирический закон Фика

$$q_d = -D \frac{\Delta c}{\Delta x}, \quad (2.12)$$

где  $q_d$  – плотность потока массы диффундирующего вещества, кг/м<sup>2</sup>с;  $\Delta c$  – разность его концентрации на расстоянии  $\Delta x$ ;  $D$  – коэффициент пропорциональности, называемый коэффициентом диффузии, м<sup>2</sup>/с. Этот закон показывает, что диффузия всегда идет в сторону убывания концентрации, а поток массы тем больше, чем сильнее она убывает. Из этого закона можно вывести дифференциальное уравнение диффузии (вывод мы опускаем), которое имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.13)$$

и описывает эволюцию распределения концентрации вещества с течением времени. Это дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа. Получение и анализ его решений рассматриваются в разделе математики «Уравнения математической физики». Это уравнение имеет и вероятностную трактовку. Если поделить концентрацию на полную массу вещества, то получится его относительная концентрация, а при одинаковой массе молекул – их относительное число. Тогда  $c(x,t)$  приобретает смысл меняющейся со временем плотности вероятности распределения молекул диффундирующего вещества. Процессы, описываемые этим уравнением, относятся к марковским процессам, непрерывным в пространстве и во времени. Как и ранее, здесь главное то, что переход к будущему моменту времени  $t+dt$  требует информации только о *настоящем* состоянии процесса  $c(x,t)$  и никак не зависит от его *прошлого* состояния, то есть процесс не сохраняет памяти о прошлых состояниях.

Попытаемся построить модель диффузионного процесса на основе цепи Маркова, использовавшейся для описания эволюции положения пьяного матроса. Если ранее этот процесс был заведомо дискретным в пространстве (мы навязали матросу перемещаться на один одинаковый шаг), то при диффузии чернил в корытце эту дискретизацию придется сделать искусственно, разбив длину корытца на  $m$  ячеек длиной  $\Delta x = L/m$ , где  $L$  – длина корытца. Опять будем фиксировать состояние процесса через малые, но конечные промежутки времени  $\Delta t$ , в течение которых чернила успевают проникнуть только в соседнюю ячейку, но не далее. Тогда текущее время определится как  $t = (k-1)\Delta t$ , где  $k$  – номер временного перехода, который может рассматриваться как дискретный аналог времени.

Обратимся снова к рис.2.4. Пусть ячейки 1...5 принадлежат корытцу,

левый край корытца закрыт для диффундирующего вещества полностью, а через правый край чернила могут проникать в некоторый объем 6, причем условия проникновения мы можем регулировать дверцей. Например, если дверца закрыта, то чернила заперты в корытце с обеих сторон и диффузия происходит в условиях, принятых на рис.2.6.

Итак, в каждой промежуточной ячейке за время перехода  $\Delta t$  молекулы чернил могут попасть в соседние ячейки справа и слева и остаться в данной ячейке. В общем случае вероятности перейти влево и вправо не равны друг другу. Мы обсуждали этот вопрос в случае блуждания матроса, ссылаясь, например, на наклонный в сторону двери пол бара. Такой же «наклон» может иметь место и в диффузии частиц при действии на них некоторого силового поля (например, диффузия электронов в электростатическом поле).

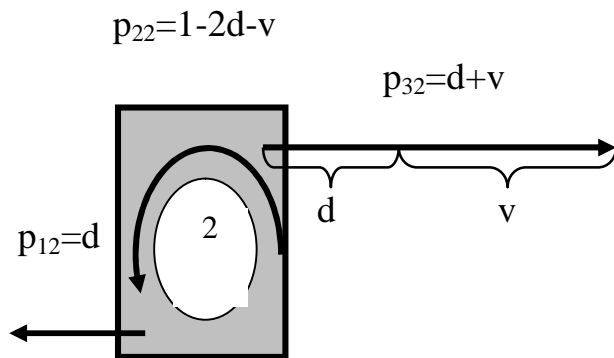


Рис.2.7. Выделение симметричной составляющей вероятностей перехода

На рис.2.7 выделена ячейка с номером 2 и показаны связанные с ней переходные вероятности. Пусть вероятность перейти вправо больше, чем вероятность перейти влево. Обозначим вероятность перейти влево буквой  $d$ . Тогда вероятность перейти вправо может быть представлена как сумма вероятности  $d$  и дополнительного слагаемого  $v$ , определяющего несимметрию процесса. При  $v=0$  процесс становится

полностью симметричным и называется чистой диффузией; при  $v \neq 0$  процесс несимметричен, а диффузия называется конвективной, или вынужденной. Очевидно, что вероятность остаться в ячейке определится как разность между единицей и двумя вероятностями выхода.

Введем еще одну характеристику процесса – вероятность  $v_f$  выхода в течение  $\Delta t$  из последней ячейки в ячейку 6, которая не принадлежит корытцу и называется поглощающей. Определив таким образом все переходные вероятности, легко по описанным выше правилам построить матрицу переходных вероятностей, которая имеет вид

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1-d-v & d & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d+v & 1-2d-v & d & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d+v & 1-2d-v & d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d+v & 1-2d-v & d & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d+v & 1-d-v_f & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v_f & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.14)$$

Положив  $v_f=0$ , мы навсегда закроем «дверь на улицу», и масса впрыснутых в корытце чернил будет оставаться постоянной. Если при этом положить и  $v=0$ , то получится модель чистой диффузии на отрезке с закрытыми краями, которая описывается матрицей

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1-d & d & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d & 1-2d & d & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d & 1-2d & d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d & 1-2d & d & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d & 1-d & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (2.15)$$

где поглощающее состояние (ячейка 6) стало недостижимым, так как вероятность перехода в него равна нулю.

На рис.2.8 показана эволюция содержания относительного содержания чернил в ячейках, рассчитанная по матричному равенству (2.7), когда первоначально единичная порция чернил впрыснута в центральную ячейку 5. Левый график относится к процессу чистой диффузии. Асимптотическое распределение чернил по ячейкам корытца оказывается, как и ожидалось, равномерным. Можно доказать (предлагаем попробовать это сделать самим), что асимптотическое распределение будет равномерным при любой переходной матрице, у которой сумма элементов в каждой строке равна единице, как и есть в матрице (2.15).

Справа показана эволюция содержания чернил при наличии конвективного переноса вправо. Асимптотическое распределение уже неравномерно и смещено в ту сторону, в которую действует вынуждающая сила.

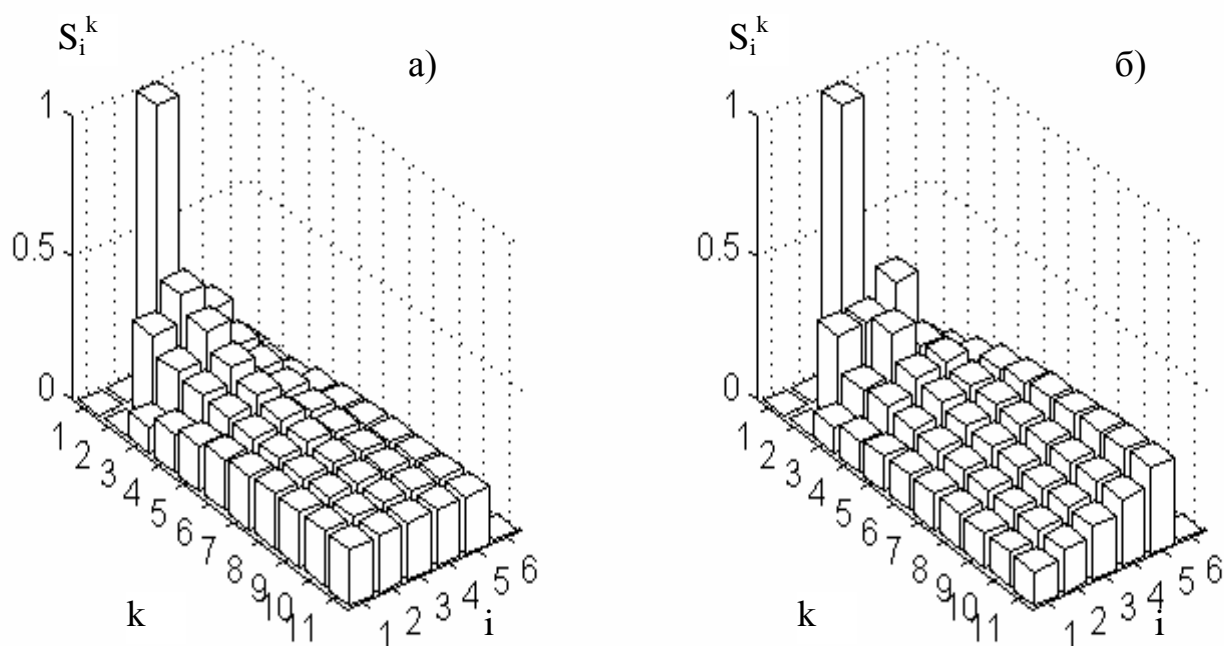


Рис.2.8. Эволюция содержания диффундирующего вещества на отрезке с закрытыми границами (краевые условия второго рода,  $d=0,3$ ; а)  $v=0$ ; б)  $v=0,1$ )

Асимптотическое распределение можно получить непосредственно из матрицы переходных вероятностей, минуя рекуррентные расчеты по формуле (2.7). Действительно, если наступило стационарное асимптотическое распределение  $\mathbf{S}^\infty$ , то следующий переход ничего не изменит, то есть  $\mathbf{S}^\infty = \mathbf{P}\mathbf{S}^\infty$ . Из этого следует, что вектор  $\mathbf{S}^\infty$  является одним из собственных векторов матрицы  $\mathbf{P}$ , соответствующим собственному числу  $\lambda$ , равному единице (обязательно вспомните, что такое собственные числа и собственные векторы матрицы). Очевидно, что асимптотическое распределение  $\mathbf{S}^\infty$  зависит только от матрицы  $\mathbf{P}$  и никак не зависит от начального распределения. Но так и должно быть в марковском процессе, который «не помнит» своих прошлых состояний. Собственные векторы любой матрицы находятся в среде MATLAB выполнением одной команды. Откуда известно, что среди собственных чисел матрицы попадетсся единица? Без доказательства примем, что если матрица удовлетворяет условиям (2.3), (2.4), то это случится обязательно. Матрица конвективной диффузии, по которой был построен график рис.2.8,а, и ее собственный вектор, соответствующий  $\lambda=1$  и дающий асимптотическое распределение, соответственно равны

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0,6 & 0,3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,4 & 0,3 & 0,3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,4 & 0,3 & 0,3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,4 & 0,3 & 0,3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,4 & 0,7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}^\infty = \begin{bmatrix} 0,1037 \\ 0,1383 \\ 0,1844 \\ 0,2458 \\ 0,3278 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.16)$$

причем практически близкое к асимптотическому распределение достигается уже за 11 переходов.

До сих пор мы выбирали  $\Delta t$  и  $\Delta x$  (или  $m$ ), не оглядываясь на какие-либо ограничения. Если оперировать величинами  $d$  и  $v$  (матрица (2.14)), то шаги пространственной и временной дискретизации процесса вообще не фигурируют. Но реальная диффузия зависит от «настоящих» коэффициента диффузии  $D$  и скорости дрейфа  $V$ . Можно показать, что безразмерные  $d$  и  $v$  связаны с размерными  $D$  и  $V$  соотношениями

$$d = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}, \quad (2.17); \quad v = V \frac{\Delta t}{\Delta x}. \quad (2.18)$$

С другой стороны, величины  $d$  и  $v$  должны удовлетворять условию (2.4), из которого следует, что

$$1 - 2d - v \geq 0. \quad (2.19)$$

В частности, при  $v=0$  должно выполняться условие  $d \leq 0,5$ . Цепная модель диффузии соответствует явной разностной схеме численного решения уравнения (2.13), которое тем ближе к точному решению, чем меньше  $\Delta t$  и  $\Delta x$ . Однако, уменьшая  $\Delta x$ , мы сталкиваемся с двумя проблемами. Во-первых, растет размерность матрицы  $\mathbf{P}$ , поскольку при заданной длине корытца  $m=L/\Delta x$ . Рано или поздно это может сказаться на продолжительности операций с матричными равенствами. Во-вторых, с уменьшением  $\Delta x$  возрастают величины  $d$  и  $v$  ( $d$  – более, а  $v$  – менее резко), которые не должны выходить за пределы, гарантирующие выполнение условия (2.19). Скомпенсировать их рост можно, уменьшая  $\Delta t$ , что становится не только желательным с точки зрения точности, но и необходимым. Однако при малом  $\Delta t$ , для того чтобы

добраться до реального времени окончания процесса, требуется все большее число переходов, то есть опять возрастает продолжительность расчетов. Мы не будем здесь рассматривать математические аспекты этого противоречия. Пока достаточно того, что вы знаете о существовании проблемы. Достаточно часто ее решают следующим математически нестрогим способом: уменьшают  $\Delta t$  и  $\Delta x$  до тех пор, пока их дальнейшее уменьшение не перестает сказываться с заданной точностью на рассчитываемых характеристиках эволюции процесса.

До сих пор (в частности, на рис.2.8) мы рассматривали эволюцию распределения чернил в закрытом с обоих торцов корытце, то есть их поток через границы отрезка, на котором происходит диффузия, был заведомо равен нулю. Такое условие на краю отрезка называется *краевым условием второго рода*. Если на обоих краях отрезка заданы краевые условия второго рода, то полная масса диффундирующего вещества на отрезке сохраняется, а при чистой (неконвективной) диффузии асимптотическое распределение является равномерным.

Теперь сделаем правую дверцу корытца проницаемой для чернил, то есть разрешим им выход в поглощающую ячейку 6. Если ее емкость безгранична, то каким бы ни было начальное распределение чернил рано или поздно они все покинут корытце и вода в нем вновь станет прозрачной. Для того чтобы открыть дверцу, достаточно в матрице (2.14) положить  $v_f \neq 0$ . С точки зрения условия (2.4) самое большое допустимое открытие дверцы соответствует  $v_f = 1 - d$ . Однако можно поставить более «открытое» условие: все частицы, попавшие в последнюю ячейку корытца, немедленно покидают ее, уходя в поглощающую ячейку. Очевидно, что при таком условии  $S_m^k = 0$  при любом  $k$ . Это самое «открытое» условие не может быть вписано в матрицу  $P$  и должно задаваться отдельно на каждом переходе. Оно называется *краевым условием первого рода*. Если поток частиц через дверцу считается пропорциональным концентрации частиц перед ней, то такое условие называется *краевым условием третьего рода*. В цепной модели оно реализуется через введение величины  $v_f$ , которая по существу является коэффициентом этой пропорциональности.

На рис.2.9,2.10 показана эволюция содержания чернил в цепи с открытой правой границей. Рис.2.9 относится к чистой диффузии. Левый график относится к правому краевому условию первого рода. Видно, что за 50 переходов процесс еще далек от асимптотического состояния: в поглощающую ячейку 6 вышло около 80 % чернил, тогда как в пределе должно выйти 100 %. Справа показана эволюция

процесса при правом краевом условии третьего рода. Здесь частицы покидают рабочие ячейки медленнее, чем справа (кстати, попробуйте проверить, какой собственный вектор для  $\lambda=1$  будет у этой матрицы).

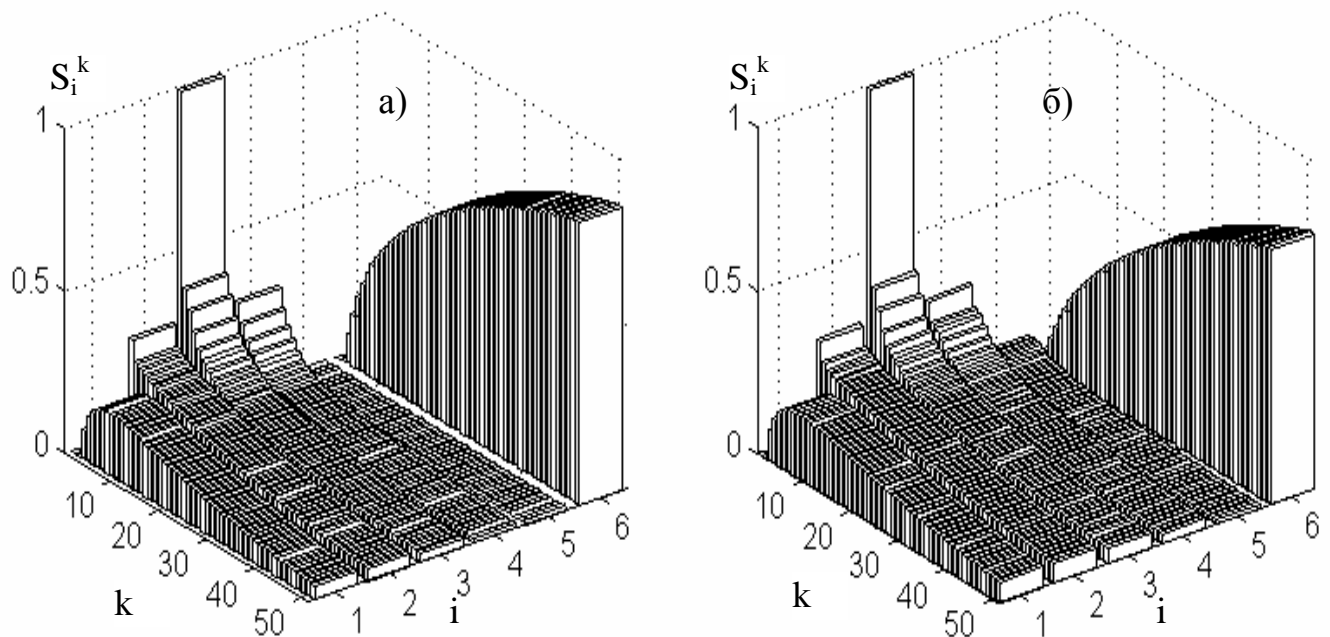


Рис.2.9. Эволюция содержания диффундирующего вещества на отрезке с открытой правой границей при  $d=0,3$ ;  $v=0$ :

а – краевые условия первого рода; б – краевые условия третьего рода,  $v_f=0,5$

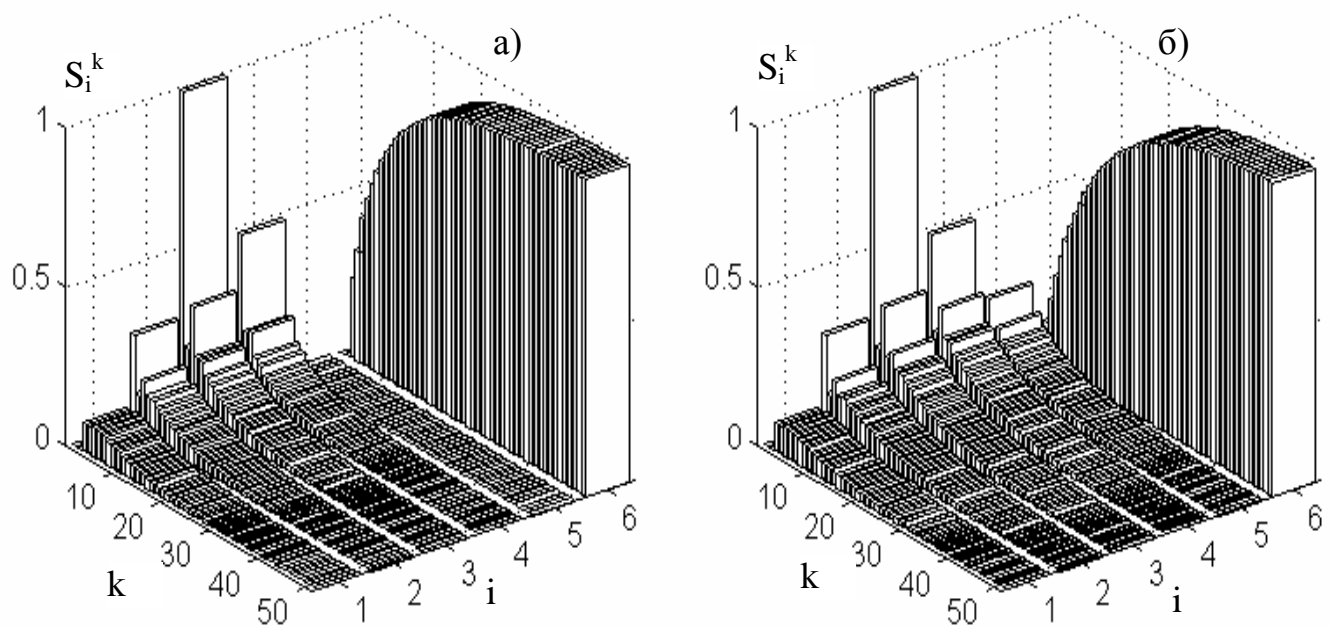


Рис.2.10. Эволюция содержания диффундирующего вещества на отрезке с открытой правой границей при  $d=0,3$ ;  $v=0,2$ :

а – краевые условия первого рода; б – краевые условия третьего рода,  $v_f=0,5$

Рис.2.10 относится к конвективной диффузии со скоростью осредненного движения, направленной вправо. Естественно, что здесь процесс выхода чернил происходит быстрее, чем на предыдущем рисунке, поскольку несимметричная составляющая вероятности перехода  $v$  «помогает» чернилам двигаться в сторону открытой границы.

Используя программу MCh4, вы можете самостоятельно моделировать различные варианты протекания диффузионного процесса и исследовать влияние его параметров на скорость и особенности эволюции содержания диффундирующего вещества. В этой программе левая граница цепи все время закрыта, а характером правой границы можно манипулировать. Мы рекомендуем вам самостоятельно модернизировать программу так, чтобы обе границы могли менять свои свойства.

### 2.3. Диффузия с источниками или процесс с порождением частиц

Выше мы рассмотрели эволюцию содержания мгновенно впрыснутой в одну из ячеек корытца единичной порции чернил (кстати, откуда следует, что порция была единичной?). Пусть в одну из этих ячеек (например, в первую) чернила подаются постоянно, то есть на каждом переходе впрыскивается еще одна порция. В этой ячейке происходит как бы порождение частиц, участвующих в диффузии, появляется их источник. В общем случае впрыск не обязан быть локализован в первой ячейке: он может осуществляться в любую (в том числе, в разные) ячейку или распределен между ними. Введем в рассмотрение вектор-столбец источников частиц  $S_f^k$ , имеющий такой же размер, что и вектор состояния  $S$ , где верхний индекс  $k$  показывает, что он может меняться от перехода к переходу. Очевидно, что задача с неограниченным непрерывным порождением частиц в цепи с закрытыми границами лишена смысла: элементы вектора состояния будут неограниченно возрастать (чернила в корытце польются через край). Поэтому будем рассматривать цепь с открытой правой границей.

Для того чтобы составить эволюционное уравнение этого процесса, достаточно после каждого перехода добавлять к вектору состояния вектор подачи

$$S^{k+1} = PS^k + S_f^k. \quad (2.20)$$

При этом естественно (хотя и необязательно) предположить, что в

начале процесса цепь была «пустой» (в корытце не было чернил), то есть начальный вектор состояния был нулевым.

В практике моделирования чаще всего встречаются следующие виды  $S_f^k$ :

- однократная импульсная подача в 1-ю ячейку

$$S_f^k = [1 \ 0 \ \dots \ 0]^T \text{ при } k=1, S_f^k = [0 \ 0 \ \dots \ 0]^T \text{ при } k=1, 2, \dots \quad (2.21)$$

Этот случай был рассмотрен выше, когда однократный импульсный ввод чернил задавался через начальный вектор состояния. Здесь выход материала в поглощающую ячейку дает распределение времени пребывания частиц диффундирующего вещества в цепи (см. рис.2.5), являющееся исчерпывающей характеристикой однородной цепи и позволяющее рассчитать все остальные случаи подачи материала;

- непрерывная постоянная подача в 1-ю ячейку

$$S_f^k = [1, 0, \dots, 0]^T, \text{ при } k=1, 2, \dots, z, \quad (2.22)$$

где  $z$  может быть конечным или стремиться к бесконечности. Этот случай соответствует процессу установления заполнения ячеек диффундирующим веществом и позволяет рассчитать заполнение корытца и отдельных его ячеек в переходном и установившемся режимах;

- переменная подача в 1-ю ячейку (например, постоянная с наложенной на нее переменной составляющей)

$$S_f^k = [S_{f1}(k), 0, \dots, 0]^T \text{ при } k=1, 2, \dots, z. \quad (2.23)$$

В этом случае поток диффундирующего вещества в поглощающую ячейку также будет переменным, и расчет позволяет сравнить характеристики переменных составляющих на входе и выходе.

На рис.2.11 показаны пары графиков подачи в первую ячейку и выхода из пятой для трех рассмотренных выше случаев подачи. Для переменной подачи использована синусоидальная функция

$$S_{f1}^k = 1 + A_f \sin\left(\frac{2\pi}{K_f} k\right), \quad (2.24)$$

где  $A_f$  – амплитуда переменной составляющей;  $K_f$  – ее период, выраженный через число переходов ( $A_f=0,2$ ;  $K_f=60$ ). На рисунке введены

обозначения подачи и выхода в поглощающую ячейку на каждом переходе  $q_{in}^k$  и  $q_{out}^k$  соответственно.

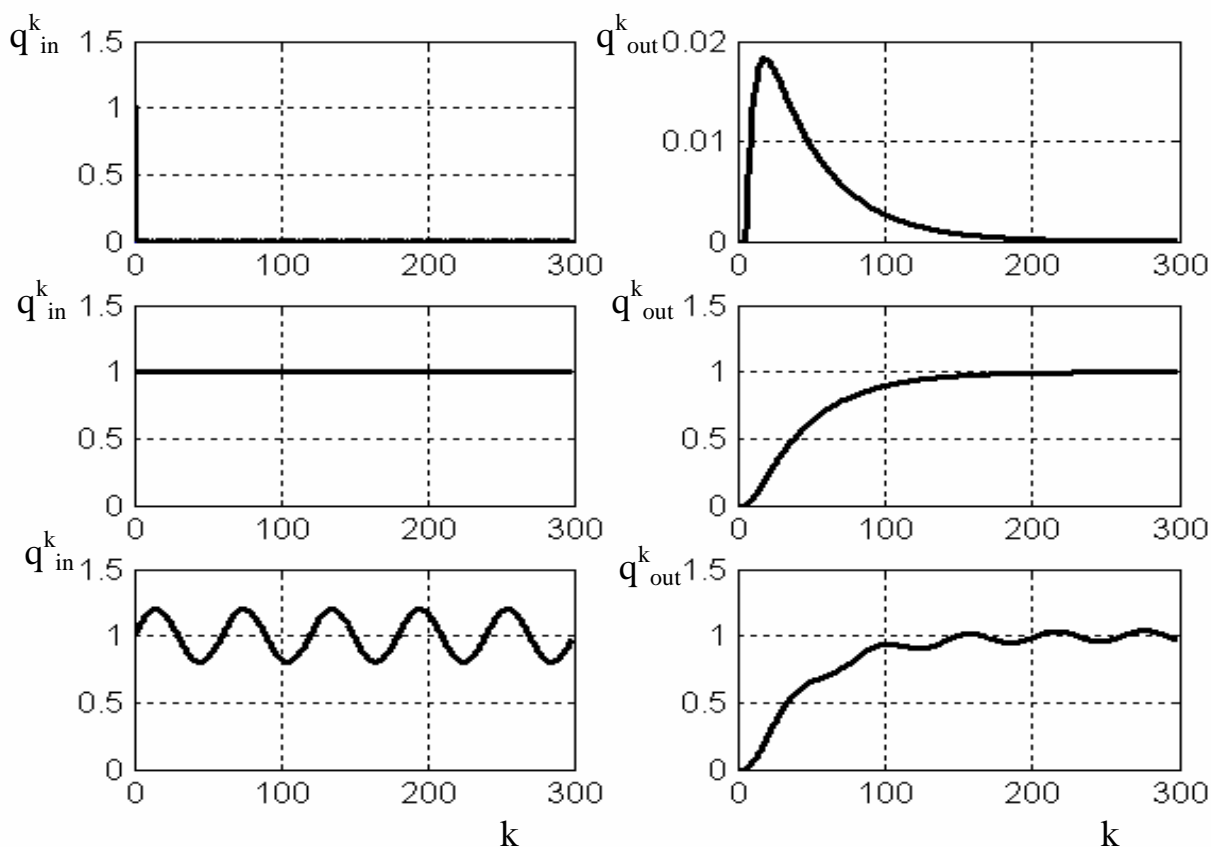


Рис.2.11. Связь вида подачи вещества в первую ячейку и его выхода в поглощающую ячейку ( $d=0,3$ ;  $v=0,1$ ;  $v_f=0,1$ )

Верхняя пара графиков относится к единичной импульсной подаче (слева). Справа показан отклик на нее в виде выхода в поглощающую

ячейку, одновременно являющийся распределением времени пребывания диффундирующего вещества в рабочих ячейках цепи (в корытце). Рассчитанное по формуле (2.11) его среднее время пребывания составляет около 51-го перехода.

Средняя пара относится к непрерывной единичной подаче. Выход вещества в поглощающую ячейку постепенно нарастает до тех пор,

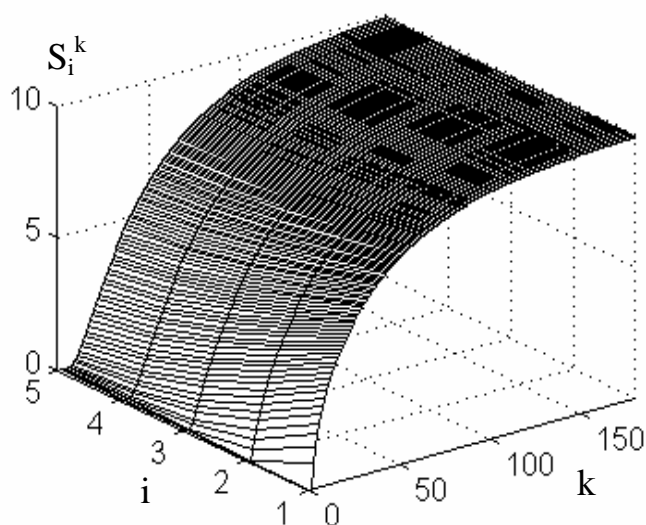


Рис.2.12. Кинетика заполнения ячеек веществом при непрерывной единичной подаче

пока не сравняется с подачей, то есть с единицей. В этом состоянии  $S_5^\infty v_f = 1$ , откуда  $S_5^\infty = 1/v_f = 10$ . Это противоречит вероятностной трактовке решения, но дает представление о заполнении ячеек веществом. Кинетика этого заполнения показана на рис.2.12. Очевидно, что сначала быстрее заполняются первые ячейки, но затем распределение заполнения выравнивается.

Для того чтобы вернуться к вероятностям, надо вспомнить, что в процессе при такой подаче участвует не единичная порция, а  $1 \times k$  частиц. Тогда вероятность найти меченую частицу в  $i$ -й ячейке в  $k$ -м состоянии будет равна  $S_i^k/k$ , причем с ростом  $k$  львиная доля вероятности будет приходиться на 6-ю поглощающую ячейку, так как содержание диффундирующего вещества (число его частиц) в ней неограниченно возрастает.

Нижняя пара графиков на рис.2.11 относится к нестационарной синусоидальной подаче. Отклик на нее также является синусоидальным с таким же периодом, но с меньшей амплитудой, то есть при заданных параметрах процесса колебания подачи на входе подавляются.

Вы можете самостоятельно моделировать процесс с порождением частиц с помощью программы MCh5. В частности, небезынтересно будет исследовать, как влияет соотношение периода подачи и среднего времени пребывания на степень подавления амплитуды пульсаций на входе. Кроме того, можно ввести другие программы изменения подачи, например, постоянную подачу с наложенной на нее случайной составляющей.

Наконец, было бы полезно осмыслить все сделанные выше описания и выводы в терминах прохождения сигнала через распределенную (дискретизированную) систему, обладающую свойством марковости. Это осмысление позволит отойти от образа чернил в корытце и позволит ощутить, что данный математический аппарат может найти применение в широком спектре отраслей знания.

## **2.4. Случайные блуждания и диффузия на плоскости**

В настоящем разделе мы обобщим полученные выше результаты на случайные блуждания и диффузию частиц на плоскости. Основные идеи описания движения останутся такими же, как и при одномерном блуждании по прямой, но появятся некоторые особенности, заслуживающие внимания. Начнем с описания блужданий матроса в баре, который теперь разграфлен на двухмерную сетку ячеек (рис.2.13).

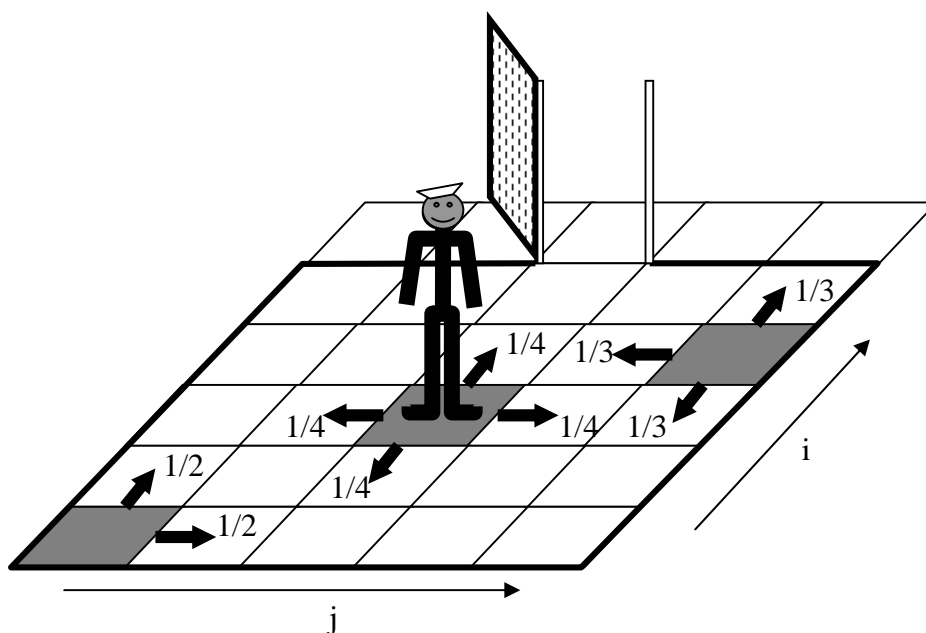


Рис.2.13. Расчетная схема блужданий пьяного матроса на плоскости

Будем считать, что матрос может шагать только через стороны квадрата, в котором он находится, но не через его углы. Если шаг делается обязательно, а направления его равновероятны, то сами вероятности зависят от того, в каком месте матрос находится. На рисунке выделены темным некоторые ячейки, и для них показаны возможные направления переходов и их вероятности. Очевидно, что для принятой схемы блужданий вероятность перехода из ячейки равна единице, деленной на число возможных направлений перехода. Далее игра развивается, как и в одномерном случае. Мы ставим матроса в некоторое начальное положение, смотрим на число возможных направлений переходов из него, бросаем «монетку» и в зависимости от выпавшего результата направляем матроса по одному из разрешенных направлений. (Кстати, одним бросанием монетки можно обойтись только для угловых ячеек; подумайте, сколько граней должен иметь игральный кубик, чтобы с помощью одного его броска можно решать вопрос о направлении перехода для любой ячейки.) Если после очередного перехода матрос оказывается в ячейке за дверью, процедура заканчивается. Вы помните, в чем заключается игра? Матросу отведено  $N$  шагов. С какой вероятностью он окажется за дверью? Чтобы ее определить, надо «запустить» много матросов и посмотреть, какая часть из них за  $N$  или меньше шагов окажется в «задверной» ячейке. Вы можете понаблюдать за блужданиями матроса и оценить соответствующие вероятности с помощью программы MCh6. Она составлена

для маленького бара размером  $3 \times 3$  шагов именно для этого размера. Мы рекомендуем вам попытаться составить аналогичную программу для сетки ячеек произвольного размера  $n \times m$ .

Пример индивидуальной реализации процесса блужданий матроса показан на рис.2.14, где изображены положения матроса за первые семь шагов и положение после 15-го шага, когда он вышел из бара. На следующем рис.2.15 показана вероятность этого выхода в зависимости от отведенного числа шагов. Здесь для каждого числа шагов нанесены расчетные данные по пяти тестам, каждый из которых состоит из 1000 испытаний. Разброс данных по тестам хотя и невелик, но все-таки заметен.

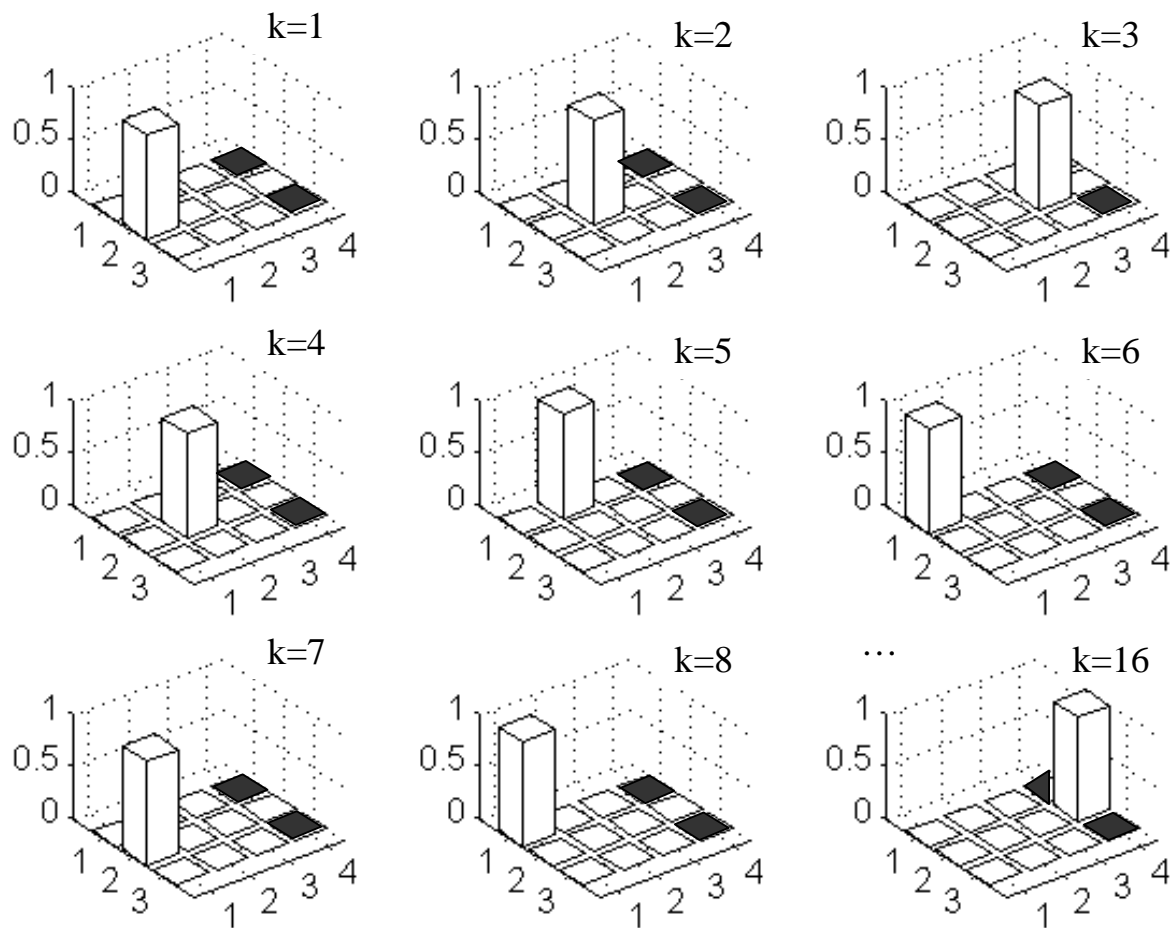


Рис.2.14. Пример реализации процесса случайных блужданий матроса на плоскости

Если сравнить данные рис.2.15 с данными рис.2.3, то можно увидеть, что несмотря на гораздо меньший размер бара, при блуждании по плоскости требуется гораздо больше шагов, чтобы достичь выхода, чем при одномерной схеме. Появление дополнительной степени сво-

боды блужданий матроса (по перпендикулярному направлению к пути к двери), не ведущей к достижению благоприятного исхода испытания,

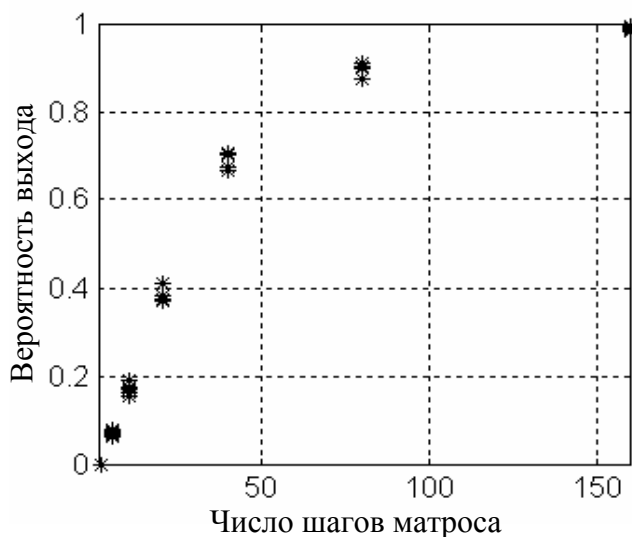


Рис.2.15. Влияние числа шагов матроса на вероятность выхода (5 тестов по 1000 испытаний)

значительно уменьшает вероятность выхода из бара за одинаковое число шагов.

Теперь перейдем к построению матричной модели процесса, как это было сделано для одномерной схемы блужданий. Начнем рассмотрение алгоритма построения ячеечной двумерной модели с небольшой цепи размером 3x3, показанной на рис.2.16, причем, помня о физическом сходстве случайных блужданий и процесса диффузии частиц, сразу будем оперировать терминами процесса диффузии.

Чтобы не загромождать расчетные формулы, ограничимся пока рассмотрением чисто диффузионного переноса, разрешенные направления которого показаны на рисунке стрелками.

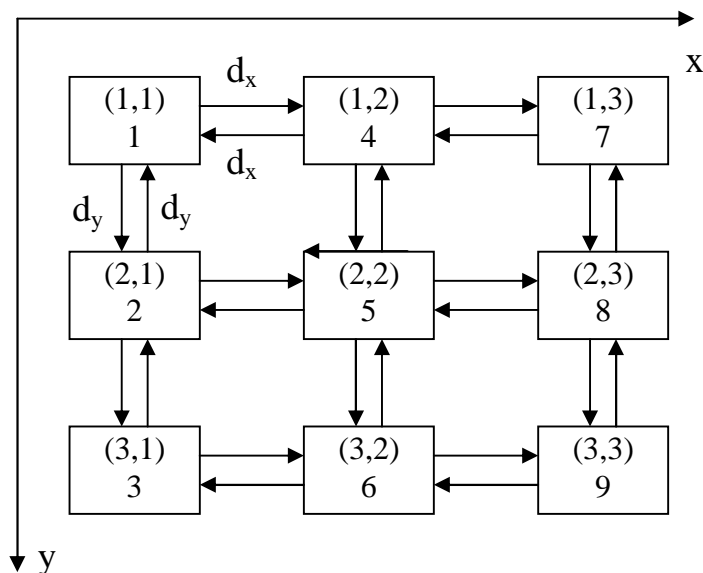


Рис.2.16. Схема ячейечной модели двумерной цепи размером 3x3

Очевидно, что эта схема соответствует плоскому корытцу с закрытыми границами, то есть с краевыми условиями второго рода на всех ограничивающих область диффузии линиях. Для такой цепи распределение содержания диффундирующего вещества (чернил) удобно представить матрицей состояния

$$\mathbf{Sm} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{bmatrix}. \quad (2.25)$$

Однако для построения матрицы переходных вероятностей и выполнения последующих матричных операций ячейки модели должны быть пронумерованы в прямой последовательности, как это показано на рис.2.16 и отражено в матрице

$$\mathbf{Sm} = \begin{bmatrix} S_1 & S_4 & S_7 \\ S_2 & S_5 & S_8 \\ S_3 & S_6 & S_9 \end{bmatrix}, \quad (2.26)$$

которая затем должна быть преобразована в вектор-столбец состояния

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \dots \\ S_8 \\ S_9 \end{bmatrix}. \quad (2.27)$$

При такой нумерации ячеек становится очевидным правило построения матрицы переходных вероятностей, которая имеет размер 9x9 и в каждом столбце содержит вероятности перехода из данной ячейки в соседние в соответствии с их прямой одномерной нумерацией. В этой матрице на главной диагонали содержатся доли ключевого компонента, остающиеся в ячейках за один переход и получаемые вычитанием из единицы суммы вероятностей переходов в соседние ячейки. Ниже показаны возможные переходы в матрице:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 \rightarrow 1 & 2 \rightarrow 1 & 0 & 4 \rightarrow 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 \rightarrow 2 & 2 \rightarrow 2 & 3 \rightarrow 2 & 0 & 5 \rightarrow 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 \rightarrow 3 & 3 \rightarrow 3 & 0 & 0 & 6 \rightarrow 3 & 0 & 0 & 0 \\ 1 \rightarrow 4 & 0 & 0 & 4 \rightarrow 4 & 5 \rightarrow 4 & 0 & 7 \rightarrow 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 \rightarrow 5 & 0 & 4 \rightarrow 5 & 5 \rightarrow 5 & 6 \rightarrow 5 & 0 & 8 \rightarrow 5 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \rightarrow 6 & 0 & 5 \rightarrow 6 & 6 \rightarrow 6 & 0 & 0 & 9 \rightarrow 6 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \rightarrow 7 & 0 & 0 & 7 \rightarrow 7 & 8 \rightarrow 7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \rightarrow 8 & 0 & 7 \rightarrow 8 & 8 \rightarrow 8 & 9 \rightarrow 8 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \rightarrow 9 & 0 & 8 \rightarrow 9 & 9 \rightarrow 9 \end{bmatrix}. \quad (2.28)$$

Вероятности переходов в соседние ячейки рассчитываются в соответствии с законом Фика по формуле (2.18). Для прямоугольных ячеек размером  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  эти вероятности имеют вид

$$d_x = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}, \quad d_y = D \frac{\Delta t}{\Delta y^2}, \quad (2.29)$$

где  $D$  – коэффициент макродиффузии, считающейся изотропной, то есть одинаковой по любому направлению. Матрица переходных вероятностей для этого случая имеет вид

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1-d_y-d_x & d_y & 0 & d_x & 0 & 0 & \dots \\ d_y & 1-2d_y-d_x & d_y & 0 & d_x & 0 & \dots \\ 0 & d_y & 1-d_y-d_x & 0 & 0 & d_x & \dots \\ d_x & 0 & 0 & 1-d_y-2d_x & d_y & 0 & \dots \\ 0 & d_x & 0 & 0 & 1-2d_y-2d_x & d_y & \dots \\ 0 & 0 & d_x & 0 & d_y & 1-d_y-2d_x & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}. \quad (2.30)$$

Однако наиболее распространенным случаем моделирования является использование квадратных ячеек, когда  $\Delta x = \Delta y$  и  $d_x = d_y = d$ , что позволяет записать матрицу (2.30) следующим образом

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1-2d & d & 0 & d & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d & 1-3d & d & 0 & d & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d & 1-2d & 0 & 0 & d & 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 & 1-3d & d & 0 & d & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 & d & 1-4d & d & 0 & d & 0 \\ 0 & 0 & d & 0 & d & 1-3d & 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 & d & 0 & 0 & 1-2d & d & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d & 0 & d & 1-3d & d \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d & 0 & d & 1-d \end{bmatrix}. \quad (2.31)$$

Поскольку из данной ячейки возможно не более четырех переходов, то наименьшее значение вероятности остаться равно  $1 - 4d$ , откуда следует условие устойчивости вычислительной процедуры  $d \leq 1/4$ , так

как в соответствии с физическим смыслом вероятности не могут быть отрицательными.

Таким образом, эволюция состояния ключевого компонента может быть описана рекуррентным матричным равенством

$$\mathbf{S}^{k+1} = \mathbf{P}\mathbf{S}^k, \quad (2.32)$$

которое по форме полностью совпадает с аналогичным равенством для одномерной цепи. Естественно, что для начала расчетов должен быть задан начальный вектор состояния. Поскольку сумма элементов матрицы  $\mathbf{P}$  (2.31) в каждой строке равна единице (нормировка по строкам), то асимптотическое распределение содержания ключевого компонента при  $k \rightarrow \infty$  будет равномерным, что соответствует физической сущности процесса. Если в процессе присутствует и конвективный перенос вещества, то к величинам  $d_x$  и  $d_y$  в соответствующих строках должны быть добавлены величины  $v_x$  и/или  $v_y$ .

Попробуем несколько иначе «прочитать» физический смысл матрицы переходных вероятностей для двухмерной сетки ячеек, например, матрицы (2.31). Ее можно разбить на меньшие матрицы, как это показано в формуле

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 1-2d & d & 0 \\ d & 1-3d & d \\ 0 & d & 1-2d \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} d & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} d & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1-3d & d & 0 \\ d & 1-4d & d \\ 0 & d & 1-3d \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} d & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} d & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1-2d & d & 0 \\ d & 1-3d & d \\ 0 & d & 1-d \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad (2.33)$$

и переписать в виде блочной матрицы, которая сама состоит из матриц меньшего размера

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_{11} & \mathbf{P}_{12} & \mathbf{Z} \\ \mathbf{P}_{21} & \mathbf{P}_{22} & \mathbf{P}_{23} \\ \mathbf{Z} & \mathbf{P}_{32} & \mathbf{P}_{33} \end{bmatrix}, \quad (2.34)$$

где соответствие матриц видно из сравнения двух последних формул. Присмотревшись, мы увидим, что матрицы, стоящие на главной диагонали матрицы **P**, описывают переходы между строками в первом, втором и третьем столбцах сетки ячеек (рис.2.16). (Только не надо торопиться с вычислением вероятностей остаться, так как они рассчитываются с учетом *всех* выходов из ячейки.) Матрицы, стоящие под главной диагональю, являются диагональными матрицами (с одной главной диагональю – все остальные элементы нулевые) и описывают переходы вправо между столбцами. Соответственно матрицы, стоящие над главной диагональю матрицы **P**, также являются диагональными и описывают переходы влево между столбцами. Вероятности же остаться рассчитываются, как и ранее, путем вычитания из единицы суммы всех остальных вероятностей в данном столбце. Разберитесь внимательно с этой интерпретацией: она существенно упрощает понимание и построение матрицы переходных вероятностей для двумерной цепи ячеек.

Программа MCh7 позволяет моделировать процесс диффузии на плоскости. Она составлена для прямоугольной двумерной сетки размером  $n \times m$  с закрытыми границами и допускает учет конвективного переноса вправо. Для освоения материала будет очень полезно самостоятельно модифицировать ее для включения в каких-то периферийных ячейках краевых условий третьего рода, а также для моделирования процессов с порождением частиц.

На рис.2.17 показана рассчитанная по ней эволюция содержания диффундирующего вещества на сетке размером  $5 \times 10$  при изотропной диффузии, дополненной конвективным переносом вправо. Расчеты выполнены для  $d=0,5$  и  $v=0,5$  при начальной локализации вещества в ячейке (1,1). Одновременно с конвективным переносом происходит поперечное выравнивание содержания диффундирующего вещества, и асимптотическое распределение становится однородным по ширине корытца, но смещенным в сторону действия массовой силы, вызывающей конвективный перенос. На рис.2.18 показаны результаты моделирования диффузии в этом же корытце, но с установленной между столбцами 5 и 6 перегородкой с отверстием в одну ячейку.

Этот достаточно сложный для моделирования случай весьма просто решается рассматриваемым методом. Для этого достаточно запретить переходы между всеми ячейками столбцов 5 и 6, кроме нижних.

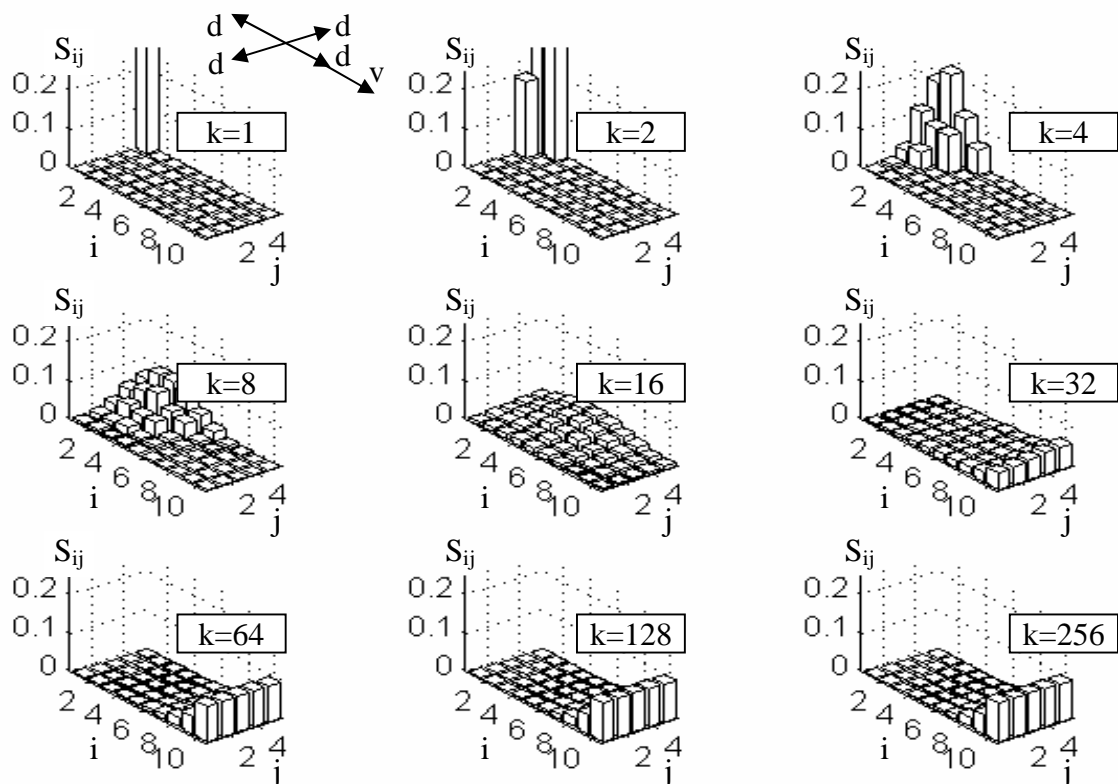


Рис.2.17. Распределение содержания диффундирующего вещества в различные моменты времени на плоской сетке ячеек

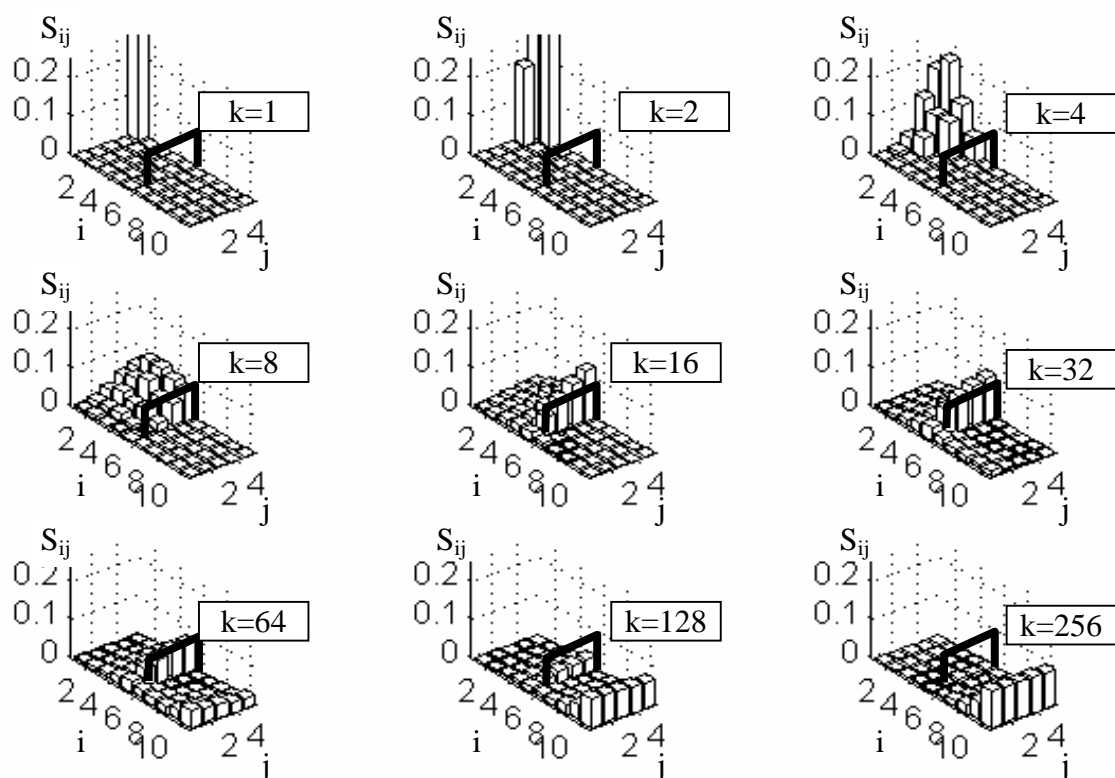


Рис.2.18. Распределение содержания диффундирующего вещества в различные моменты времени на плоской сетке ячеек с перегородкой между 5-м и 6-м столбцами с отверстием в одну ячейку

Если вспомнить интерпретацию матрицы  $\mathbf{P}$  как блочной матрицы, то в ней достаточно записать

$$\mathbf{P}_{65} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d+v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}_{56} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d \end{bmatrix}, \quad (2.35)$$

оставив все остальные матрицы переходов между столбцами с полными главными диагоналями.

Помещенное в ячейку (1,1) диффундирующее вещество благодаря конвективному переносу сначала довольно быстро распространяется до перегородки, которая не пропускает его дальше. Поперечная диффузия переносит его в зону отверстия, через которое оно начинает перетекать во вторую камеру. Асимптотическое распределение совпадает с таковым при отсутствии перегородки, но стремление к нему происходит значительно медленнее, чем в предыдущем случае. Вы можете самостоятельно разместить перегородку в любом месте сетки, сделать отверстие (или несколько отверстий) любой допустимой ширины и посмотреть, как это будет сказываться на эволюции содержания диффундирующего вещества. Подумайте, как изменится алгоритм построения матрицы переходных вероятностей, если перегородка будет продольной.

Итак, мы убедились, что теория цепей Маркова является эффективным инструментом математического моделирования многих процессов, когда пространство состояний некоторого случайного процесса отождествляется с принадлежностью к некоторому положению объекта, то есть рассматривается эволюция пространственного распределения вероятностей. Перейдем к рассмотрению моделирования других процессов, где пространство состояний имеет другой физический смысл.