YU — ISSN 0039—2480

STROJNIŠKI VESTNIK

LETNIK 22 LJUBLJANA, MAREC—APRIL 1976 ŠTEVILKA 3—4

UDK 532.5.013

Značilnosti naključnega gibanja delcev nehomogene snovi

IGOR GRABEC

Uvod

Večina snovi, ki jih uporabljamo v tehniki, je heterogenih. Pogosto naletimo na primere, ko je heterogenost izbrane snovi posledica prisotnosti delcev druge snovi ali faze. Kot značilne primere lahko navedemo strojno olje s primešanimi kovinskimi delci, mešanico vode in mehurčkov pare, razne suspenzije in emulzije, mešanice različnih vrst prahu itd. Sestava teh snovi je naključne narave, zato moramo pri opisu njihovih lastnosti uporabljati statistične metode. Kadar je heterogena snov predmet obdelave v tehniškem procesu, pogosto naletimo na problem popisa njenih transportnih lastnosti. Namen članka je dokazati, kako lahko nekatere značilne transportne lastnosti heterogene snovi napovemo po zelo splošnih predpostavkah o naključni naravi gibanja delcev opazovane komponente. V ta namen bomo obravnavali statistični opis gibanja skupine delcev izbrane komponente pod naključnimi vplivi okolice. Vzeli bomo, da so delci v statističnem pomenu medsebojno neodvisni, lastnosti snovi pa stacionarne in krajevno neodvisne. S tem najpreprostejšim modelom bomo pokazali, katere osnovne podatke potrebujemo za popis transportnih lastnosti heterogene snovi. Naš končni namen pa je pokazati, kako lahko do teh podatkov pridemo z merjenjem korelacijskih funkcij veličin, ki jih uporabljamo za popis fizikalnega stanja snovi.

Statistični opis naključnega gibanja delcev

Zamislimo si množico enakih delcev, ki se gibljejo pod naključnimi vplivi okolja. Kot primer lahko vzamemo zrna kovine v tekočini. Vsakega od delcev si zamišljamo označenega z indeksom in za vsakega naj obstaja značilna točka, recimo težišče, s katero bomo opisovali lego delca. Zaradi preprostosti bomo obravnavali le enodimenzijsko gibanje. Gibanje j-tega delca opišemo z odvisnostjo koordinate X_j od časa t:

$$X_j = X_j(t) \tag{1}$$

Gibanje skupine delcev je deterministično opredeljeno, če poznamo časovne poteke vseh koordinat. Nabor vseh koordinat je večdimenzijski vektor, ki ga bomo označili

$$X(t) = (X_1(t), X_2(t), \ldots) \tag{2}$$

Kadar je gibanje delcev naključno, pomeni vektor $X(t)$ naključni večdimenzijski proces. Po statističnem vidiku izčrpno opredelimo ta proces, če podamo vse možne porazdelitve verjetnosti za vse možne trenutke [1, 2]. Naj bo ustrezni popis podan s funkcijo

$$\begin{aligned} &\mathrm{d}P\,(x_{11} < X_1(t_{11}) \leq x_{11} + \mathrm{d}x_{11}, \\ &x_{12} < X_1(t_{12}) \leq x_{12} + \mathrm{d}x_{12}, \ldots \\ &x_{21} < X_2(t_{21}) \leq x_{21} + \mathrm{d}x_{21}, \ldots \\ &x_{jk} < X_j(t_{jk}) \leq x_{jk} + \mathrm{d}x_{jk}, \ldots = \\ &f(x_{11}, t_{11}; x_{12}, t_{12}; \ldots; x_{jk}, t_{jk}; \ldots)\,\mathrm{d}x_{11}\,\mathrm{d}x_{12} \ldots \mathrm{d}x_{jk} \end{aligned} \tag{3}$$

Pri tem smo z velikimi X_j označili naključne spremenljivke, z malimi x_{jk} pa možne vrednosti v različnih trenutkih. Zgoraj zapisana funkcija podaja porazdelitev povezane verjetnosti, da zavzamejo koordinate $X_1, X_2 \ldots, X_j, \ldots$ v časovnih trenutkih $t_{11}, t_{12}, \ldots, t_{21}, \ldots, t_{jk}, \ldots$ vrednosti v intervalih s širinami $\mathrm{d}x_{11}, \mathrm{d}x_{12}, \mathrm{d}x_{21}, \ldots, \mathrm{d}x_{jk}, \ldots$ v okolici $x_{11}, x_{12}, \ldots, x_{21}, \ldots, x_{jk}, \ldots$.

V naši obravnavi bomo vzeli, da je proces, ki ga predstavlja vektor $X(t)$, stacionaren, kar pomeni, da morajo biti vse verjetnostne porazdelitve neodvisne od začetka štetja časa [1, 2]. Zato mora biti v primeru, ko se porazdelitev nanaša na eno samo koordinato ob določenem trenutku, ustrezna gostotna funkcija f neodvisna od časa; v več trenutkih pa je lahko odvisna le od časovnih razlik. Mi bomo še nadalje vzeli, da so delci medsebojno naključno neodvisni. V tem primeru je mogoče gostoto verjetnostne porazdelitve zapisati kot produkt verjetnostnih gostot, ki se nanašajo na posamezne delce z indeksi 1, 2, ... j

$$f = f_1(x_{11}, t_{11}; x_{12}, t_{12}; \ldots) \cdot \cdot f_2(x_{21}, t_{21}; \ldots) \ldots f_j(x_{jk}, t_{jk}; \ldots) \tag{4}$$

Kadar imamo opravka z enakimi delci, so njihove lastnosti po statističnem vidiku enake, zato mora biti gostota porazdelitve verjetnosti, ki se nanaša na posamezen delec, neodvisna od njegovega indeksa. Omejili se bomo na obravnavo takšnih primerov delno zaradi preprostosti, delno pa zato, ker so zelo pogosti.

Za opis transportnih lastnosti naključno gibajočih se delcev je nadalje osnovnega pomena gostota povezane verjetnosti za posamezni delec v dveh trenutkih. Navadno jo izrazimo s pogojno verjetnostjo:

$$f(x_{11}, t_{11}; x_{12}, t_{12}) = f(x_{11}, t_{11}) \,.\, f(x_{12}, t_{12} \mid x_{11}, t_{11}) \tag{5}$$

Pri tem popisuje $f(x_{11}, t_{11})$ gostoto verjetnosti, da bo prvi delec v okolici x_{11} pri času t_{11}, $f(x_{12}, t_{12} \mid x_{11}, t_{11})$ pa podaja gostoto pogojne verjetnosti, da bo isti delec pri x_{12} ob času t_{12} s pogojem, da je bil ta delec pri x_{11} ob času t_{11}. Pri stacionarnih procesih mora biti gostota $f(x_{11}, t_{11})$ neodvisna od t_{11}, gostota pogojne verjetnosti pa je lahko odvisna le od časovne razlike $t = t_{12} - t_{11}$. To pomeni, da verjetnost za premik delca od x_{11} k x_{12} ni odvisna od preteklosti delca. Ustrezne procese imenujemo *markovske* [2].

Pogosto imamo opravka s heterogenimi snovmi, pri katerih transportne lastnosti niso odvisne od kraja. Takšne snovi so v statističnem smislu homogene. Ustrezajoča pogojna verjetnost za prehod delca od x_{11} k x_{12} mora biti odvisna le od razlike $x_{12} - x_{11} = x$. Nadalje bomo zaradi preprostosti obravnavali le procese te vrste, gostoto pogojne verjetnosti pa bomo zapisovali v obliki

$$p(x, t) = f(x_{12}, t_{12} \mid x_{11}, t_{11}) \tag{6}$$

Ta verjetnostna gostota je veličina, s katero bomo opisali trasportne lastnosti skupine naključno gibajočih se delcev in si bomo zato njene značilnosti ogledali podrobneje.

Najbolj značilna lastnost gibanja delca je, da je mogoče izraziti premik v nekem časovnem intervalu kot vsoto premikov v pripadajočih časovnih podintervalih. To lastnost popišemo z enačbo

$$X(t + t') = X(t) + X(t') \tag{7}$$

Ta osnovna lastnost se mora kazati tudi na funkcijski obliki verjetnostne gostote za premik $p(x, t)$. Če jo želimo upoštevati moramo izhajati iz tega, da je premik v poljubnem časovnem intervalu naključna spremenljivka, ki jo je mogoče izražati z vsoto dveh drugih medsebojno neodvisnih naključnih spremenljivk. Gostoto porazdelitve verjetnosti vsote pa dobimo s konvolucijo verjetnostnih gostot, pripadajočih sumandoma [1, 2]

$$p(x, t + t') = \int p(x - s, t')\, p(s, t)\, \mathrm{d}s \tag{8}$$

Rešitvi te integralne enačbe se približamo tako, da vpeljemo karakteristično funkcijo s Fourierovo transformacijo verjetnostne gostote [1, 2, 3, 4]

$$p(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} F(k, t)\, \mathrm{d}k \tag{9}$$

Iz prejšnje enačbe (8) nato izhaja:

$$\frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} F(k, t + t')\, \mathrm{d}k =$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int\!\!\int\!\!\int e^{ik'(x-s)} F(k', t') \,.\, e^{ikx} F(k, t)\, \mathrm{d}k\, \mathrm{d}k'\, \mathrm{d}s \tag{10}$$

Po s lahko integriramo, če upoštevamo izraz za Fourierovo transformacijo delta funkcije [2]

$$\delta(k - k') = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(k-k')s}\, \mathrm{d}s \tag{11}$$

S tem izrazom lahko nato integriramo še po k', tako da dobimo naslednjo enačbo

$$\frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} F(k, t + t')\, \mathrm{d}k =$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} F(k, t')\, F(k, t)\, \mathrm{d}k \tag{12}$$

Enačba je izpolnjena, če karakteristična funkcija zadošča pogoju

$$F(k, t + t') = F(k, t') \,.\, F(k, t) \tag{13}$$

Temu pogoju zadošča eksponentna funkcija, ki jo bomo zapisali v obliki

$$F(k, t) = e^{-i\, w(k)\, t} \tag{14}$$

pri čemer je $w(k)$ lahko še kompleksna funkcija.

Fizikalni pomen funkcije $w(k)$ lahko razložimo, če izrazimo karakteristično funkcijo z verjetnostno gostoto prek Fourierovega obrata

$$F(k, t) = e^{-i\, w(k)\, t} = \int e^{-ikx}\, p(x, t)\, \mathrm{d}x \tag{15}$$

Funkcijo $w(k)$ lahko popišemo s Taylorjevo vrsto. V ta namen moramo poznati vrednosti funkcije in njenih odvodov pri $k = 0$. Izračunamo jih lahko iz enačbe (15)

$$e^{-i\, w(0)\, t} = \int p(x, t)\, \mathrm{d}x = 1 \tag{16}$$

ali $w(0) = 0$.

Z odvajanjem karakteristične funkcije po k dobimo za $k = 0$ naslednja izraza

$$(-i\,t) \frac{\mathrm{d}w(0)}{\mathrm{d}k} = \int (-i\,x)\, p(x, t)\, \mathrm{d}x = -i\, E_t[x] \tag{17}$$

$$(-i\,t)^2 \left(\frac{\mathrm{d}w(0)}{\mathrm{d}k}\right)^2 - i\,t\, \frac{\mathrm{d}^2 w(0)}{\mathrm{d}k^2} =$$
$$= \int (-i\,x)^2\, p(x, t)\, \mathrm{d}x = -E_t[x^2] \tag{18}$$

V teh izrazih smo z E_t [...] označili statistično poprečje nakazane veličine pri času t. Iz zadnjega izraza lahko dobimo drugi odvod

$$-i\,t\,\frac{d^2 w(0)}{dk^2} = -E_t[x^2] + (E_t[x])^2 = \\ = -E_t[(x - E_t[x])^2] \tag{19}$$

Izraza (17) in (19) kažeta, da se odvoda funkcije $w(k)$ pri $k = 0$ izražata preprosto s statističnimi poprečji premika x pri določenem času. Zaradi nazorne fizikalne interpretacije navadno vpeljemo pojem poprečne hitrosti z izrazom

$$v = \frac{E_t[x]}{t} = \frac{dw(0)}{dk} \tag{20}$$

Poprečni kvadratični odmik od srednje vrednosti opisuje raztros v gibanju delcev, zato definiramo z njim difuzijski koeficient prek izraza

$$2\,D = \frac{E_t[(x - E_t[x])^2]}{t} = i\,\frac{d^2 w(0)}{dk^2} \tag{21}$$

Poprečna hitrost in difuzijski koeficient do drugega reda popisujeta statistične transportne lastnosti naključno gibajočih se neodvisnih delcev. Hkrati je z njima do drugega reda popisana funkcija $w(k)$. Splošno bi lahko pokazali, da ustreza izčrpen popis statističnih poprečij premika podajanju Taylorjeve vrste za funkcijo $w(k)$. Navidezno z vpeljavo karakteristične funkcije nismo ničesar pridobili. Vendar ne smemo pozabiti, da sta v karakteristični funkciji, ki jo popisuje (14), že vsebovani sestavljivost premika in naključna neodvisnost sestavnih delov, kar je bistvena predpostavljena lastnost naključnega gibanja delcev. Ta lastnost se kaže v tem, da lahko gostoto verjetnosti $p(x, t)$, ki je odvisna od dveh spremenljivk, izrazimo s funkcijo ene same spremenljivke $w(k)$. Zanimivo je nadalje, da sama oblika karakteristične funkcije omogoča približno oceniti tudi obliko verjetnostne gostote. Zapišimo v ta namen najprej izraz za verjetnostno gostoto, ki izhaja iz enačb (9) in (14), ter nato še za njena prva parcialna odvoda:

$$p(x, t) = \frac{1}{2\pi}\int e^{ikx - iw(k)t}\,dk \tag{22}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{2\pi}\int (-i\,w(k))\,e^{ikx - iw(k)t}\,dk \tag{23}$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{1}{2\pi}\int i\,k\,e^{ikx - iw(k)t}\,dk \tag{24}$$

Uporaba operatorjev $i\partial/\partial t$ in $-i\partial/\partial x$ ustreza množenju z $w(k)$ in k pod integralnim znakom. Če torej uporabimo operator $-i\partial/\partial x$ tako, kakor nakazuje funkcija w, moramo dobiti operator $i\partial/\partial t$. Simbolično zapišemo ta sklep v obliki

$$i\,\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = w\left(-i\,\frac{\partial}{\partial x}\right) p(x, t) \tag{25}$$

S tem smo integralno enačbo za $p(x, t)$ prevedli v diferencialno. Če nas zanimajo le statistični podatki do drugega reda momentov, zapišemo

$$w(k) \cong w(0) + \frac{dw(0)}{dk}\cdot k + \frac{d^2 w(0)}{dk^2}\cdot\frac{k^2}{2!} \tag{26}$$

in z upoštevanjem izrazov (20) in (21) še

$$w(k) \cong v\,k - i\,D\,k^2 \tag{27}$$

Diferencialno enačbo za verjetnostno gostoto lahko nato zapišemo v obliki

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = -v\,\frac{\partial p(x, t)}{\partial x} + D\,\frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \tag{28}$$

Verjetnostna gostota torej približno zadošča posplošeni difuzijski enačbi. Ker je zaradi končnih hitrosti delcev $x = 0$ za $t = 0$, kar ustreza gotovemu dogodku, moramo pri reševanju enačbe (28) izbrati tisto rešitev, ki zadošča pogoju

$$\lim_{t \to 0} p(x, t) = \delta(x) \tag{29}$$

Ustrezna rešitev je podana z izrazom [5]

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\,e^{-\frac{(x - v t)^2}{4 D t}} \tag{30}$$

Doslej smo gledali na funkcijo $p(x, t)$ kot na verjetnost za premik posameznega delca. Zaradi povezanosti z difuzijsko enačbo pa lahko podamo tudi naslednjo razlago [5]. Zamislimo si skupino enakih, medsebojno statistično neodvisnih delcev, ki so pri $x = 0$ ob času $t = 0$. Po preteku časa t bo relativno število delcev v infinitezimalnem intervalu okoli x enako verjetnosti za premik x. Verjetnostno gostoto $p(x, t)$ lahko zato obravnavamo kot koncentracijo delcev v prostoru okoli x po preteku časa t, če so bili delci pri $t = 0$ v koordinatnem izhodišču.

Pri opisovanju transportnih pojavov, ki so posledica naključnega premikanja izbrane vrste delcev, se navadno zadovoljimo z opredelitvijo poprečne hitrosti in difuzijskega koeficienta. Tako pri teoretični kakor pri eksperimentalni obravnavi naključnega gibanja se pojavi problem povezave teh dveh parametrov z vzroki naključnega gibanja. Po teoretični poti skušamo to povezavo najti s primerno formulacijo modela naključnega gibanja, ki mora upoštevati vse specifičnosti opisovanega pojava. Največ je bilo v tej smeri narejenega pri študiju Brownovega gibanja mikroskopskih delcev v tekočinah [4, 5]. Ustrezne obravnave bi nas odvedle predaleč od namena tega članka in se jim bomo zato izognili.

Jedro eksperimentalnega dela je še do nedavnega pomenilo iskanje verjetnosti $p(x, t)$ oziroma parametrov v in D z zasledovanjem poti velikega števila posameznih delcev in določanja poprečij po teh merjenjih. Preizkusi te vrste so še posebej zamudni v primerih, ko iščemo vplive raznih fizikalnih veličin na potek naključnega gibanja. V novejšem obdobju je vpeljava elektronske obdelave podatkov to delo precej olajšala. Zasledovanje gibanja posameznih delcev pa je za avtomatično elektronsko obdelavo podatkov neprikladno zaradi težav pri razpoznavanju delcev. Zaradi tega je za študij transportnih lastnosti, ki so posledica naključnega gibanja, bolj primerno uporabljati elektronsko korelacijsko tehniko. V tem primeru ne opazujemo gibanja posameznih delcev, temveč merimo korelacijske funkcije fizikalnih veličin, ki nam rabijo za popis stanja snovi. Kako iz njih sklepamo o lastnostih naključnega gibanja, si bomo ogledali v naslednjem delu članka.

Statistični opis polja naključno potujočih delcev

Doslej smo okarakterizirali posamezni delec le z njegovo lego, ki jo podaja koordinata $X_j(t)$. Če hočemo stanje bolj izčrpno popisati, moramo povedati še, kako se v okolici ustrezne točke spreminjajo fizikalne veličine, ki rabijo za popis stanja snovi, kakor na primer gostota snovi ali električno polje. Naj funkcija $g(x—X_j)$ označuje potek izbrane fizikalne veličine v prostoru okoli delca z indeksom j. Pogosto imamo opravka s primeri, ko lahko vpliv skupine prisotnih delcev na lastnosti snovi izrazimo z vsoto vplivov posameznih delcev

$$z(x, t) = \sum_j g(x - X_j(t)) \tag{31}$$

Pri tem smo s funkcijo $z(x, t)$ opisali spreminjanje merjene fizikalne veličine v odvisnosti od kraja in časa. Ta funkcija pomeni zaradi naključnega gibanja delcev naključno polje. Navadno statistično okarakteriziramo takšno polje s poprečno vrednostjo in korelacijsko funkcijo spremenljivke $z(x, t)$, ki ju pišemo

$$E[z(x, t)] = m_z(x, t) \tag{32}$$

$$E[z(x, t)\, z(x + \Delta x, t + \Delta t)] = \\ = R_z(x, t, \Delta x, \Delta t) \tag{33}$$

To sta tudi veličini, ki ju najpogosteje eksperimentalno določamo. Naša želja je ugotoviti, kako se lastnosti naključnega gibanja delcev kažejo na teh dveh poprečjih. V ta namen uporabljamo podobne metode, kakršne smo uporabili v članku o impulznih naključnih procesih [6].

Vpeljimo najprej naključno gostoto delcev s tem, da zapišemo funkcijo z v obliki

$$z(x, t) = \int g(x - x')\, I(x', t)\, \mathrm{d}x' \tag{34}$$

Če hočemo, da velja izraz (31), mora biti naključna gostota podana z naslednjo zvezo

$$I(x', t) = \sum_j \delta(x' - X_j(t)) \tag{35}$$

Ta veličina nam posreduje prehod od števno dimenzionalnega procesa naključnih koordinat k naključnemu polju. Z njo lahko izrazimo tudi poprečno vrednost in korelacijsko funkcijo

$$m_z = \int g(x - x')\, E[I(x', t)]\, \mathrm{d}x' \tag{36}$$

$$R_z = \int g(x - x')\, g(x + \Delta x - x'') \cdot \\ \cdot E[I(x', t)\, I(x'', t'')]\, \mathrm{d}x'\, \mathrm{d}x'' \tag{37}$$

Pri tem smo upoštevali, da se operacija poprečenja nanaša samo na naključne spremenljivke. V izrazih (36) in (37) sta se pojavili poprečna vrednost in korelacijska funkcija gostote delcev. Nekatere njune značilnosti lahko opredelimo, če upoštevamo lastnosti naključnega gibanja delcev. Iz definicije naključne gostote izhaja najprej

$$E[I(x', t)] = \int \sum_j \delta(x - X_j(t))\mathrm{d}P = \sum_j f_j(x', t) \tag{38}$$

V tej enačbi opisuje $f_j(x', t)$ gostoto verjetnosti, da zavzame koordinata X_j pri času t vrednost v okolici x'. Že v prvem delu članka smo vzeli, da je ta gostota konstanta, neodvisna od vrednosti x', časa t in indeksa j. Zato lahko zapišemo

$$E[I(x', t)] = I_0 \tag{39}$$

Z integracijo te veličine dobimo poprečno število delcev v izbranem integracijskem intervalu [6]

$$N = \int_L I_0\, \mathrm{d}x = I_0 \, . \, L \tag{40}$$

in dalje

$$I_0 = \frac{N}{L} \tag{41}$$

Iz zadnjega izraza je razvidno, da mora biti za izbrani naključni proces poprečno število delcev odvisno samo od velikosti izbranega intervala in ne od njegove lege.

Za poprečno vrednost polja nadalje izhaja enačba

$$m_z = I_0 \int g(x - x')\, \mathrm{d}x' = I_0\, \overline{g} = \mathrm{const} \tag{42}$$

Ugotovili smo, da je poprečna vrednost polja neodvisna od lege in časa v statistično homogenem in stacionarnem stanju snovi.

Podobno kakor za poprečno vrednost dobimo za korelacijsko funkcijo gostote delcev enačbo

$$E[I(x',t')\,I(x'',t'')] = \int \sum_j \sum_k \delta(x - X_j(t'))\cdot$$
$$\cdot\,\delta(x'' - X_k(t''))\,\mathrm{d}P = \sum_j \sum_k f_{jk}(x',t';x'',t'') \quad (43)$$

V tej enačbi podaja funkcija $f_{jk}(x', t'; x'', t'')$ gostoto povezane verjetnosti, da zavzame koordinata j-tega delca pri času t' vrednost x' in koordinata k-tega delca pri času t'' vrednost x''. Dvojno vsoto v izrazu (43) lahko razstavimo na del, ki se nanaša samo na posamezne delce, ter na preostali del, ki se nanaša na pare delcev

$$\sum_j \sum_k f_{jk}(x',t';x'',t'') = \sum_j f_{jj}(x',t';x'',t'') +$$
$$+ \sum\sum_{j\neq k} f_{jk}(x',t';x'',t'') \quad (44)$$

Kakor smo pokazali že v prvem delu članka, je mogoče izraziti verjetnostno gostoto v prvem delu vsote z gostoto verjetnosti za premik oziroma pogojne verjetnosti

$$f_{jj}(x',t';x'',t'') = f_j(x',t')\,p_j(x''-x',t''-t') \quad (45)$$

Ker smo vzeli, da sta oba faktorja neodvisna od indeksa j in od vrednosti časa, je prvi del vsote enak

$$I_0 \cdot p(x''-x', t''-t')$$

V drugem delu vsote (44) lahko zaradi statistične neodvisnosti delcev gostoto povezane verjetnosti zapišemo kot produkt verjetnostnih gostot, ki se nanašajo na posamezne delce. Tako dobimo izraz

$$\sum\sum_{j\neq k} f_{jk}(x',t';x'',t'') = \sum_j f_j(x',t') \sum_{k\neq j} f_k(x'',t'') \quad (46)$$

Vrednost tega izraza se z naraščajočim številom delcev približuje I_0^2. Za koleracijsko funkcijo gostote delcev lahko zato zapišemo

$$E[I(x',t')\,.\,I(x'',t'')] = I_0\,p(x''-x',t''-t') + I_0^2 \quad (47)$$

Iz zadnjega izraza se vidi, da lahko z merjenjem korelacije gostote delcev preverimo, če se njihovo gibanje pokorava difuzijskemu zakonu. Vendar navadno ne merimo korelacijske funkcije številske gostote delcev, temveč korelacijsko funkcijo polja $z(x, t)$. Ta je s korelacijsko funkcijo gostote povezana prek izraza (37), ki dobi z upoštevanjem enačbe (47) obliko

$$R_z(\Delta x, t''-t') = I_0 \iint g(x-x')\, g(x+\Delta x - x'')\,.$$
$$\cdot\, p(x''-x'\, t''-t')\,\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}x'' + I_0^2\,\bar{g}^2 \quad (48)$$

Če vpeljemo korelacijsko funkcijo polja enega delca z izrazom

$$R_g(y) = \int g(x')\,g(x'+y)\,\mathrm{d}x' \quad (49)$$

lahko enačbo (48) zapišemo v obliki

$$R_z(\Delta x, t) = I_0 \int R_g(\Delta x - s)\,p(s,t)\,\mathrm{d}s + m_z^2 \quad (50)$$

Tu smo zaradi preglednosti vpeljali spremenljivko $t = t'' - t'$. Korelacijsko funkcijo polja lahko torej izrazimo s konvolucijo korelacijske funkcije enega delca ter verjetnostne gostote za prehod. Ker je $p(s, 0) = \delta(s)$ je nadalje

$$R_z(\Delta x, 0) = I_0\,R_g(\Delta x) + m_z^2 \quad (51)$$

Iz izraza (51) je razvidno, da lahko z merjenjem korelacijske funkcije polja določimo korelacijsko funkcijo enega delca. Seveda moramo v ta namen izmeriti tudi poprečno vrednost polja in gostoto delcev. Verjetnostne gostote za prehod $p(x, t)$ neposredno z merjenjem korelacijske funkcije polja ne moremo določiti, ker sta povezani prek konvolucije. To nam lahko povzroči tudi delne težave pri določanju poprečne hitrosti gibanja delcev in difuzijskega koeficienta. Vendar pa lahko pogosto oba parametra hitro opredelimo na osnovi naslednjega sklepanja. Z naraščajočim časom se verjetnostna gostota razširi iz delta funkcije pri $t = 0$ v Gaussovo, ki ima vrh pri $s = v\,t$. Kvadrat njene širine, ki ga opišemo s srednjim kvadratičnim odmikom od srednje vrednosti, znaša $2\,D\,t$. Sklepamo lahko, da bo imela tudi korelacijska funkcija polja vrh pri $x = v\,t$, medtem ko se bo njena širina z naraščajočim časom večala glede na širino pri $t = 0$. Pogosti so primeri, ko je tudi korelacijska funkcija delca R_g Gaussova funkcija, ali njej zelo podobna. V tem primeru je kvadrat širine korelacijske funkcije polja R_z kar vsota kvadratov širin funkcij R_g in p, ali kvadrat širine korelacijske funkcije polja se s časom poveča za $2\,D\,t$. Ta sklep ki je posledica znanih lastnosti konvolucijskega integrala, lahko pomaga pri hitrem ocenjevanju vrednosti difuzijskega koeficienta iz izmerjenih korelacijskih funkcij polja.

Sklep

Obravnavo naključnega gibanja delcev smo omejili z vrsto predpostavk. Tako smo po analitični poti lahko prišli do sklepa, da naključno gibanje enakih delcev vodi do pojava difuzije. Seveda se takoj pojavlja vprašanje, če bi bilo mogoče naš preprost model razširiti. Pregled storjenih korakov bi nam pokazal, da s širjenjem obravnave iz ene na več dimenzij ne bi imeli težav, le da bi dobili posplošeno difuzijsko enačbo za večdimenzijski primer [5]. Težav tudi ne bi imeli, če bi bila množica gibajočih se delcev sestavljena iz več medsebojno neodvisnih različnih komponent. Teže pa bi bilo obravnavati statistično nestacionaren in nehomogen pojav. Tak primer še vedno skušamo obravnavati kot difuzijo, le da parametri, kakor so poprečna gostota delcev, poprečna hitrost in difuzijski koeficient, niso več konstante, temveč funkcije kraja ali časa. Pri tem se delno spremeni tudi oblika difuzijske enačbe. Dosti bolj previdni pa moramo biti pri uporabi modela naključnega gibanja, če delci niso medsebojno naključno neodvisni. To je predvsem takrat, ko njihovo gibanje ni posledica velikega števila medsebojno neodvisnih vplivov. V takšnih primerih lahko pričakujemo bistveno različne pojave od difuzije. V formalizmu, ki smo ga podali, tudi ni upoštevano nastajanje ali izginevanje delcev, vendar bi bilo mogoče ta dva pojava upoštevati, tako da bi vpeljali v posplošeno difuzijsko enačbo izvire in ponore.

V naši obravnavi nismo poskusili povezati poprečne hitrosti in difuzijskega koeficienta z vplivi, ki povzročajo gibanje. Če hočemo to storiti, moramo najprej vplive oziroma ustrezne sile statistično okarakterizirati. To je naslednji korak v popisu pojava in je odvisen od izbranega modela naključnega gibanja. Pogosto nas ta korak pripelje do vpeljave gibljivosti in agilnosti gibanja, ki jo dostikrat popišemo s temperaturo [5].

Po eksperimentalni poti se skušamo približati povezavi poprečne hitrosti in difuzijskega koeficienta z vplivi, tako da izmerimo njuno odvisnost od drugih fizikalnih veličin, ki jih uporabljamo za popis stanja snovi. V ta namen merimo korelacijsko funkcijo polja in iz nje ocenimo ustrezno povezavo. S tehniške strani je prav ta povezava najzanimivejša in je to tudi razlog za vse češčo uporabo korelacijske tehnike pri popisu transportnih lastnosti nehomogenih snovi.

LITERATURA

[1] W. B. Davenport, Probability and random processes, McGraw Hill, New York, 1970.

[2] G. A. Korn, T. M. Korn, Mathematical handbook for scientists and engineers, McGraw Hill, New York, 1968.

[3] N. T. J. Bailey, The elements of stochastics processes, J. Wiley & Sons, New York, 1964.

[4] E. Parzen, Stochastic processes, Holden Day, San Francisco, 1962.

[5] S. Chandrasekhar, Rev. Mod. Physics, *15*, 1 (1943).

[6] I. Grabec, Strojniški vestnik, *20*, 211 (1974).

Avtorjev naslov: doc. dr. Igor Grabec,
Fakulteta za strojništvo,
Univerze v Ljubljani

POPRAVEK

V članek dr. Andra Alujeviča »Termične napetosti v tableti keramičnega gorivnega elementa«, objavljen v prejšnji številki (SV 1976/1-2, str. 1—4), so se vrinile nekatere napake, ki jih v naslednjem popravljamo:

1) Pomeni izrazov za napetosti, deformacije in termične raztezke se pravilno glase:

$$\{\sigma\} = \{\sigma_{11}\ \sigma_{22}\ \sigma_{33}\ \tau_{12}\ \tau_{23}\ \tau_{31}\}$$

$$\{\varepsilon\} = \{\varepsilon_{11}\ \varepsilon_{22}\ \varepsilon_{33}\ 2\,\gamma_{12}\ 2\,\gamma_{23}\ 2\,\gamma_{31}\}$$

$$\{\varepsilon^t\} = \alpha\,\{1\ 1\ 1\ 0\ 0\ 0\}\,T$$

2) Enačba (25) se pravilno glasi:

$$\begin{bmatrix}\sigma_r\\ \sigma_z\\ \sigma_\Phi\\ \tau_{rz}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L+2G & L & L & 0\\ L & L+2G & L & 0\\ L & L & L+2G & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix} \cdot \left(\begin{bmatrix}\varepsilon_r\\ \varepsilon_z\\ \varepsilon_\Phi\\ 2\,\gamma_{rz}\end{bmatrix} - \alpha \begin{bmatrix}1\\1\\1\\0\end{bmatrix} \cdot T \right) \tag{25}$$

3) Enačba (35) se pravilno glasi:

$$\sigma_z(r) = \frac{\alpha E}{1-\nu} \cdot \left(\frac{2\,\nu}{b^2 - a^2} \int_a^b T(r)\, r\, \mathrm{d}r - T(r) \right) \tag{35}$$

4) Slika 3 podaja obodne napetosti v valju (termična obremenitev).

Avtor in uredništvo se bralcem opravičujeta za spregledane napake in nejasnost zapisa.