DIFÚZIA, ENTROPIA, KRIVOSŤ

...fyzika, štatistika a geometria sa stretnú v rovnici...

Veronika Gáliková

Táto zbierka poznámok nie je myslená ako ďalší návod na metódy riešenia **difúznej rovnice / rovnice vedenia tepla**. Skôr ju treba vnímať ako pokus o vyjasnenie spojenia tejto známej rovnice s niektorými **štatistickými** a **geometrickými** pojmami.

Niekedy je tendencia rýchlo odbaviť predstavenie rovnice a potom sa nechať tak zahltiť technikalitami riešenia, že pochopenie niektorých súvislostí sa môže v procese stratiť. Iste nie je žiaduce iba sa vycvičiť na narábanie s rovnicou v rôznych súradných sústavách, s rozličnými počiatočnými a okrajovými podmienkami, a pritom vynechať **súvislosti medzi geometrickými, štatistickými a fyzikálnymi aspektmi problému**.

Posnažme sa tu prezentovať dobre známy fyzikálny proces šírenia tepla alebo difúzie aj ako napredovanie systému k väčšej **entropii** (štatistický pohľad) a ako laplaciánom vedený tok k **menšej krivosti** (geometrický pohľad).

1 Jednoduchý model popisu difúzie

Známa najjednoduchšia verzia difúznej rovnice (2. Fickov zákon) opisuje **zmenu** funkcie $u(x, y, z, t)$ (typicky interpretovanú ako **koncentrácia** difundujúcej látky) **v priestore (x,y,z) a čase (t)**

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}u &= D\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)u \\ \partial_t u &= D\,\Delta u \qquad (1) \end{aligned}$$

Udáva súvis medzi prvou časovou a súčtom druhých priestorových derivácií našej funkcie. Suma druhých priestorových derivácií má veľmi peknú geometrickú interpretáciu, ktorej sa neskôr budeme venovať. Takáto kombinácia operácií na funkcii si zaslúži názov, budeme ju volať **laplacián** funkcie a označovať Δu. Naša rovnica vlastne hovorí, že **časový vývoj funkcie** (v zmysle $\partial_t u$) je daný istou jej priestorovou charakteristikou (Δu). V tejto najjednoduchšej verzii D predstavuje konštantný **difúzny koeficient.** Aby bol problém plne špecifikovaný, je potrebné ešte dodať informáciu o **počiatočných a okrajových podmienkach**.

Fyzik čo sa aspoň obtrel o **termodynamiku** si musí všimnúť analógiu s **prenosom tepla** z teplejších oblastí do studenších; v tej súvislosti rovnicu možno rozumieť ako opis **tendencie difundujúcej látky obsadiť dostupnú oblasť čo najrovnomernejšie**, postupujúc pritom k stavu charakterizovanom najvyššou **entropiou** (v analógii s tendenciou energie rovnomerne sa distribuovať v súlade s **2. zákonom termodynamiky**.)

Z **geometrického** pohľadu, vzhľadom na fakt že **časový vývoj je daný laplaciánom**, matematik rozozná typické črty vývoja **strednej krivosti**.

Geometrický, fyzikálny a štatistický aspekt sa stretávajú v jednej rovnici. Chceme ukázať prepojenie týchto aspektov, súvislosť laplaciánu, strednej krivosti, entropie, pravdepodobnosti a difúzie/šírenia tepla. Ak sa cestou podarí odstrániť niektoré nedorozumenia, ktoré občas pretrvajú aj niekoľko absolvovaných fyzikálnych kurzov, tým lepšie.

Tok a zachovanie častíc

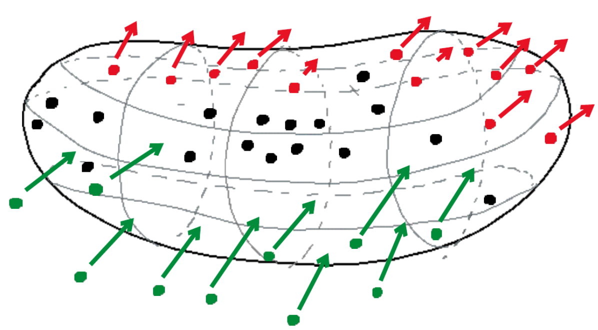
Začnime zmienkou o spôsobe, akým sa **rovnica difúzie (2. Fickov zákon)** niekedy prezentuje - ako dôsledok **1. Fickovho zákona** (spájajúceho koncentráciu u s tokom $\overrightarrow{j}$) a **rovnice kontinuity** (vyjadrujúcej zachovanie difundujúcej látky)

$$\overrightarrow{j} = -D\,\vec{\nabla} u \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\iiint_V u\,dV = -\oiint_S \overrightarrow{j}.d\overrightarrow{S} \tag{3}$$

1. Fickov zákon (2) nám hovorí, že **tok** $\overrightarrow{j}$ **(množstvo látky prechádzajúce jednotkovou plochou za jednotku času) je úmerný zápornému gradientu koncentrácie** $\vec{\nabla} u$, v súlade s intuitívnou predstavou, že látka prúdi z oblastí s vyšším obsadením do tých, kde je koncentrácia nižšia. Termodynamická analógia hovorí, že teplo prúdi z teplejšieho telesa na chladnejšie.

Rovnica kontinuity (3) napísaná v integrálnom tvare hovorí, že **rýchlosť zmeny množstva látky v danom objeme** V **je daná tokom cez hranicu** S **tohto objemu** - ak častice nevznikajú a nezanikajú, potom jediný spôsob, ako sa môže zmeniť ich počet v danej oblasti, je ich prechod cez hranicu - dnu alebo von.



Obr. 1: Tok častíc cez plochu ohraničujúcu daný objem, určujúci zmeny množstva látky v ňom. Červenou je znázornený úbytok častíc z oblasti - tok cez hranicu smerom von, zelenou prírastok - tok cez hranicu dnu, čiernou častice čo boli aj ostali v oblasti

Aby sme intuitívne tvrdenie rovnice kontinuity (3) dostali do formy lepšie spojiteľnej s 1. Fickovým zákonom (2) a skombinovali ich do obvyklej formy difúznej rovnice, treba rovnicu kontinuity (3) prepísať pomocou Gaussovej vety, ktorá spája tok cez plochu S ohraničujúcu objem V s divergenciou v tomto objeme:

$$\oiint_S \vec{j}.d\vec{S} = \iiint_V \vec{\nabla}.\vec{j}\,dV$$

Potom rovnica kontituity v diferenciálnom tvare vyzerá nasledovne:

$$\frac{\partial}{\partial t}u + \vec{\nabla}.\overrightarrow{j} = 0 \tag{4}$$

Po dosadení $-D\vec{\nabla}u$ za tok $\vec{j}$ máme v druhom člene (4) divergenciu gradientu ktorú označujeme ako laplacián $\vec{\nabla}.\vec{\nabla}u = \Delta u$ a dostávame našu difúznu rovnicu (1). Intuitívnosť diferenciálneho tvaru (4) však závisí od toho, nakoľko je pre čitateľa intuitívna Gaussova veta. Ak oboznámenosť s ňou chýba, aj odvodenie difúznej rovnice pomocou nej bude trochu "cudzie".

Mohlo by byť vhodným didaktickým ťahom ponúknuť ešte jeden pohľad na vec, ktorý odkrýva geometrický význam laplaciánu samotného a ukazuje, že jeho objavenie sa v difúznej rovnici je veľmi prirodzené - nielen ako dôsledok faktu že 1. Fickov zákon obsahuje gradient a rovnica kontinuity divergenciu. **Laplacián funkcie sám osebe súvisí s mierou nerovnomernosti distribúcie hodnôt zmienenej funkcie a krivosťou (hyper)povrchu daného jej grafom.** Aj obvyklé vyjadrenie **laplaciánu ako "divergencie gradientu"** potom azda bude dávať lepší zmysel.

2 Limity modelu

Dôležitou súčasťou štúdia akéhokoľvek modelu je ujasnenie si v akých situáciách je nepoužiteľný. Rozvíjanie teórie bez zváženia jej limít je trochu podobné riešeniu diferenciálnej rovnice bez okrajových podmienok. Milé, úhľadné, krátkodobo stráviteľnejšie - a málo užitočné pre väčšinu reálnych aplikácií.

Predpoklady na použitie difúznej rovnice nie sú ostro vymedzené (ak sú splnené lepšie, výsledky budú vernejšie skutočnosti), ale poukázať na limity má zmysel aj tak - hoci aj ako nápoveda k možnej diagnóze, ak výpočty budú viesť k podivným záverom.

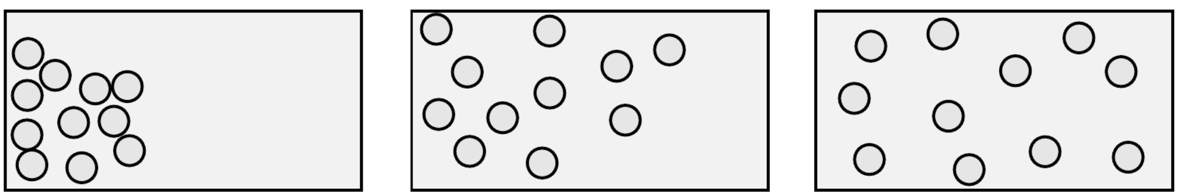
Častice sa "necítia"

Prvý Fickov zákon $\overrightarrow{j} = -D\,\vec{\nabla}u$ (tvrdiaci že častice majú tendenciu ísť v smere menšej koncentrácie) je azda zriedka spochybňovaný. Avšak aby sme predišli prijatiu správneho záveru z nesprávneho dôvodu, adresujme tu jeden nesprávny pohľad, hoci podporujúci prijatie vzťahu medzi gradientom koncentrácie a tokom v súlade s prvým Fickovým zákonom. Konkrétne, človek by mal byť opatrný s predstavou, že častice prúdia do menej obsadených oblastí kvôli tomu, že ostatné im "zavadzajú", alebo že častice opúšťajú preplnené oblasti pretože ostatné ich odtiaľ akosi "vykopnú".

Difúzna rovnica v jednoduchom tvare (1) totiž práve počíta s podmienkou, že spomenuté scenáre sa dejú len v zanedbateľnej miere. Predpokladá, že každá častica je **nezávislá od ostatných** a pravdepodobnosť, že pôjde niektorým smerom **nie je ovplyvnená porítomnosťou či neprítomnosťou ostatných**. Ak tento predpoklad nie je rozumne splnený, jedná sa práve o prípad keď (1) s konštantným D *nemá* byť použitá a treba pohľadať zložitejší model.

Pre oprávnenosť použitia najjednoduchšej verzie difúznej rovnice 1) je potrebné, aby bolo časticiam k dispozícii **omnoho viac voľného priestoru ako obsadeného**, a častice by sa **nemali ovplyvňovať** [1]. Bolo by nevhodné postaviť porozumenie rovnice (1) na predpokladoch, ktoré s ňou nie sú kompatibilné.

Tendencia difundujúcej látky rozšíriť sa do oblasti je v našom modeli daná pravdepodobnostným rozdelením pre rozličné konfigurácie a má viac do činenia so štatistikou náhodnej prechádzky a entropiou ako so snahou častíc uhnúť si vzájomne z cesty. Pod "náhodnosťou"sa tu myslí štatistický termín. Máme tu klasický model bez kvantovej neurčitosti.



Obr. 2: Obrázky ilustrujúce 1. Fickov zákon (2) a teda tendenciu rovnomerného rozpyľovania sa do dostupnej oblasti obvykle nie sú kreslené v reálnych proporciách. Treba si dať pozor aby nepovzbudzovali predstavy o "neznášanlivo interagujúcich"časticiach aj tam kde nie sú namieste.

Počet častíc by mal oprávňovať použitie štatistických metód a situácia by mala byť aproximovateľná spojitým modelom

Aby bolo použitie difúznej rovnice relevantné, je potrebné aby **častíc bolo dosť veľa** na nasadenie **štatistickej** mašinérie, keďže naša rovnica patrí do takej kategórie.

Ďalšia vec na zváženie je to, že máme diferenciálnu rovnicu ktorá využíva diferenciálny počet s jeho predpokladom **kontinua**, aj keď je jasné že pri difúznom procese je nemálo **diskrétnych** aspektov. V žiadnom experimente nemáme látku rozloženú ako dokonalé kontinuum. Ak sa pozeráme na veľmi malé oblasti, s našim modelom narazíme na skokovité zmeny koncentrácie a pod. Častice sa ani nepohybujú až tak hladko ako rovnica naznačuje.

Množstvo častí, ich **rozmer** (v pomere k dostupnému priestoru) a **vlastnosti ich pohybu** by mali byť vzaté do úvahy keď sa rozhodujeme či je **spojitá funkcia** vhodná na približný popis konfigurácie častíc, a či **diferenciálna rovnica** je vhodný model zmien zmienených konfigurácií v priestore a čase.

[1] Toto je samozrejme idealizácia; čím je jej skutočná situácia vzdialenejšia, tým viac treba uvažovať o iných modeloch.

3 Štatistický vývoj k vyššej entropii

Difúzna rovnica (1) ako model predstavuje **spojitú aproximáciu náhodného, v istých ohľadoch diskrétneho procesu ktorým sa systém vyvíja smerom k maximálnej entropii**. Náhodnosť sa tu myslí v zmysle klasickej fyziky - teda len v zmysle že nedisponujeme všetkými informáciami a preto uchopíme vec štatistickými metódami. Pojem entropie si azda zasluhuje pár poznámok. Ľudia povrchne oboznámení so štatistickou fyzikou majú tento pojem niekedy voľne asociovaný s "neporiadkom" alebo "nedostatkom usporiadania". Vhodnosť asociácie závisí od toho, čo sa myslí pod usporiadanosťou alebo jej nedostatkom.

Vezmime si ako príklad rovno našu difúznu rovnicu: tu je zjavná tendencia častíc rozmiestniť sa rovnomerne (nakoľko ďalšie podmienky umožňujú) po dostupnom priestore, a stav charakteristický najrovnomernejším rozmiestnením je práve **rovnovážny**, s **najvyššou entropiou**. Ale mnoho ľudí by zrovna takéto rovnomerné usporiadanie nevnímali ako "najneporiadnejšie", a pre týchto je asociácia entropie s "neporiadkom"skôr nedorozumením.

Azda menej nebezpečné chápanie entropie je **"miera skrytia informácie"**. Aj toto však vyžaduje istý komentár pre neexpertov na štatistický žargón. Pokúsme sa vec trochu vyjasniť.

Začnime s dvoma pojmami vyskytujúcimi sa v definícii entropie v štatistickej fyzike: **mikrostav a makrostav**. Makrostav je akási trieda ekvivalencie pre mikrostavy. **Entropia je charakteristikou makrostavu a je úmerná logaritmu počtu jeho mikrostavov.** Pre naše účely teraz postačí informácia, že makrostavy ktorým prislúcha viac mikrostavov majú vyššiu entropiu.

Jednoduchý model hodu mincou

Známy príklad nám môže pomôcť vyjasniť pojmy: Predstavme si N mincí ktoré rozdeľujeme do dvoch skupín alebo nádobiek, pričom umiestnenie tej-ktorej mince je rozhodnuté na základe hodu touto mincou. Ak minca dopadla lícovou stranou nahor, ide do prvej skupiny (L), ak padla rubom nahor, ide do druhej (R). Po N hodoch máme všetky mince rozdelené a môžeme spočítať, koľko je v ktorej skupine. V tomto jednoduchom modeli je počet mincí v jednotlivých kôpkach (napríklad $(N-k)$ rubov, k líc) kompletná charakteristika makrostavu. Naproti tomu, detailný záznam postupnosti rubov a líc ako padali za sebou (napr. RRRLR...LLL), teda záznam jednotlivých výsledkov všetkých hodov, predstavuje špecifikáciu mikrostavu.

Zjavne rozličné mikrostavy môžu patriť k tomu istému makrostavu. Čím viac mikrostavov k danému makrostavu prislúcha, tým je tento pravdepodobnejší. A zároveň máme pre pravdepodobnejší makrostav menej znalosti o tom akým mikrostavom sa realizoval - jednoducho je viac možností, mikro-scenárov, ktoré môžu byť za daným makro-výsledkom.

Poďme zistiť, ktorý je najpravdepodobnejší makrostav pri našom mincovom modeli. Ak je nejaký makrostav daný infromáciou "$N-k$ rubov, k líc", potom existuje $\binom{N}{k}$ rozličných postupností hodov (konkrétna postupnosť hodov predstavuje mikrostav)ktoré mohli viesť k takému celkovému výsledku. Počet všetkých možných postupností je $\sum_{k=0}^{N}\binom{N}{k}=2^N$, takže pravdepodobnosť pre spomenutý makrostav je daná pomerom $\frac{\binom{N}{k}}{\sum_{k=0}^{N}\binom{N}{k}}$. Tento výraz je zjavne maximálny pre makrostav pre ktorý $k=N/2$ (mince rozdelené do kôpok "najrovnomernejšie", pol na pol.
Naproti tomu, makrostavy zodpovedajúce hodnotám $k=0$ alebo $k=N$ (všetky mince v tej istej skupine) sú najmenej pravdepodobné. Všimnime si, že pre tieto najnepravdepodobnejšie makrostavy nám nechýba žiadna informácia o mikrostave (špecifickej realizácii) - ak napríklad vieme, že máme dočinenia s makrostavom v ktorom všetky mince sú v "rubovej" nádobke, vieme rovno aj celú postupnosť hodov ktorá k takému výsledku viedla (N rubov za sebou). Zmienený málo pravdepodobný makrostav má nulovú entropiu (1 mikrostav k dispozícii, a logaritmus 1 je 0).

Na porovnanie, v prípade najpravdepodobnejšieho makrostavu s hodnotou $k=N/2$, kde polovica hodov skončila lícom a polovica rubom, existuje $\binom{N}{N/2}$ mikrostavov (postupností hodov) ktoré mohli k finálnemu makro-výsledku viesť, teda mnoho informácie je "skrytej"(vysoká entropia) ak vieme iba makrostav.

Príklad - počet hodov N=4.

MAKROSTAVY A MIKROSTAVY PRE MINCOVÝ MODEL; N=4					
MAKROSTAV	0R+4L	1R+3L	**2R+2L**	3R+1L	4R+0L
MIKROSTAVY	LLLL	RLLL, LRLL, LLRL, LLLR	**RRLL, LLRR, RLLR, LRRL, RLRL, LRLR**	LRRR, RLRR, RRLR, RRRL	RRRR
POČET MIKROSTAVOV	1	4	**6**	4	1
PRAVDEPODOBNOSŤ MAKROSTAVU	1:16	4:16	**6:16**	4:16	1:16

Makrostav je daný celkovým počtom hodov ktoré dopadli ako rub (R) a líce (L). Mikrostav je daný aj konkrétnou informáciou ako dopadol každý hod. Celkový počet mikrostavov je 16, pravdepodobnosť daného makrostavu sa počíta ako počet jeho príslušných mikrostavov ku celkovému počtu všetkých mikrostavov. Makrostav zodpovedajúci najrovnomermejšiemu rozdeleniu rubov a líc má najviac mikrostavov, entropie a najvyššiu pravdepodobnosť uskutočnenia.

Zhrnutie: Entropia a pravdepodobnosť

- mikrostavy rovnako pravdepodobné
- makrostavom prislúchajú rôzne počty mikrostavov
- pravdepodobnosť makrostavu je úmerná počtu mikrostavov
- entropia makrostavu je úmerná logaritmu počtu mikrostavov
- entropickejšie makrostavy sú pravdepodobnejšie

Mincový model bol očividne "hračkársky", zamýšľaný ako pomôcka na ujasnenie súvisu medzi nárastom entropie a tendenciou obsadiť dostupné možnosti rovnomerne. V ďalšej časti by sme mali nájsť súvis medzi mierou rovnomerného obsadzovania a jej matematickým vyjadrením pomocou laplaciánu.

4 Princíp priemernosti a laplacián

Časový vývoj daný laplaciánom "$\Delta = \partial_t$"v difúznej rovnici matematicky vyjadruje "priemerujúcu tendenciu" počtu častíc v rozličných oblastiach (ktorou sa postupne obsadenosť typickej oblasti vyrovnáva priemeru susedných oblastí).

Náš mincový model z predchádzajúcich odsekov (teda rozdeľovanie mincí do dvoch nádob na základe hodu) zjavne nereprezentuje ešte viacero charakteristík difúzneho procesu. Pokúsme sa hrubý model postupne vylepšiť.

Začnime s pozorovaním že difundujúce častice začínajú kdesi v oblasti do ktorej sa postupne rozšíria, nie sú do svojich finálnych pozícií náhle umiestnené "zvonku" ako mince v modeli, a tiež že s istou pravdepodobnosťou sa môžu pohnúť alebo ostať na svojej počiatočnej pozícii. Tiež je vhodné zvážiť jemnejšie delenie oblasti ("viac ako dve miesta kde sa dá skončiť") - ale stále ešte zatiaľ zostaňme v diskrétnom prevedení.

Predpokladajme, že oblasť je rozdelená do mnohých kartézskych "buniek", ktorých rozmer zodpovedá typickej **dĺžke "kroku"** ϵ (takže na "zmenu adresy"stačí častici jeden krok). Samozrejme naše delenie priestoru na "bunky"je len myslené. Nech častice majú nejakú počiatočnú konfiguráciu, a skúmajme zmeny v systéme za krátky **časový interval** δt,,typicky postačujúci na nie viac ako jeden krok. Teda častice sa za čas δt môžu posunúť z aktuálnej bunky do susednej.

Neskoršie budeme uvažovať **limity krátkych časov a malých krokov**; preto už tu upozornime že veličiny δt a ϵ si **nemusia byť nevyhnutne úmerné v zmysle "rovnakého rádu"malosti**. Sú to veličiny s rôznymi fyzikálnymi rozmermi. Ako bolo spomenuté, za čas δt sa častica typicky nestihne vzdialiť do vzdialenosti väčšej ako ϵ, ale nijako sa nevylučuje, že ostane na mieste, teda urobí krok nulovej dĺžky, aj keď uplynie nenulový čas.

A ešte jeden odkaz pre budúcu referenciu: Všimnime si **hranicu bunky**. V jednorozmernom prípade je bunkou úsečka s dĺžkou ϵ a hranicou sú jej dva okrajové body. V dvojrozmernom prípade je bunkou štvorec so stranou ϵ a hranicu tvoria jeho okraje, teda miera tejto hranice je 4ϵ. V trojrozmernom prípade je bunkou kocka s hranou ϵ a hranicu tvorí jej povrch, teda miera tejto hranice je $6\epsilon^2$. K rozmerovej otázke súvisiacej s týmto sa ešte vrátime.

Uvažujme ďalej **pravdepodobnosť že častica prekročí hranicu** svojej bunky v danom časovom okne ako p. Hodnota p závisí od vlastností difundujucej látky, rozpúšťadla a ďalších okolností ovplyvňujúcich proces. Pravdepodobnosť zotrvania na pôvodnej adrese je teda $1-p$. Ak použijeme karteziánsky diskrétny "krabičkový" model v n **rozmeroch**, potom typická "krabička"/bunka "má $2n$ **susedov** s ktorými zdieľa aspoň "hranicu" (myslenú) a častica môže urobiť krok $2n$ spôsobmi. V **izotropickom** prípade [2] je pravdepodobnosť kroku do ktoréhokoľvek smeru rovnaká, teda $p/2n$. Povšimnime si že stále predpokladáme pravdepodobnosť krokov ktorejkoľvek častice ako nezávislú od toho čo robia ostatné.

Pre získanie kvalitatívnej predstavy, najprv zvážme **tok častíc** cez jednu hranicu spoločnú dvom susedným bunkám. **Ak bunky obsahujú rôzny počet častíc, spoločná hranica bude častejšie prekračovaná smerom z plnšej bunky do prázdnejšej ako opačne**, čím sa postupne bude rozdiel obsadenosti znižovať. Keď sa obsadenosť buniek vyrovná, toky častíc z jednej i druhej strany budú približne rovnaké, čím vzájomne kompenzujú svoje efekty.

Rovnováha v našom modeli náhodného kroku neznačí skončenie presunov, ale ich vyrovnanie. Systém stále môže meniť mikrostavy aj v rovnováhe; ale je veľmi nepravdepodobné, žeby sa pobral do iného makrostavu keď v rovnovážnom má toľko mikrostavov cez ktoré sa môže "prechádzať".
Zjavne náš model nemá nič dočinenia s časticami uhýbajúcimi si z cesty alebo vykopávajúcimi svojich susedov; skôr predstavuje dôsledky základných pravidiel pravdepodobnosti platných pre náhodné (a nezávislé!) "prechádzky" sústavy častíc.

Posuňme teraz naše úvahy opäť kúsok bližšie k realistickému procesu a tiež sa dostaňme do kvantitatívnejšieho módu. Typická bunka v n rozmeroch s diskrétnym karteziánkym ("krabičkovým") prevedením má $2n$ susedov a výmena častíc môže prebiehať so všetkými z nich. Sústreďme sa na bunku s "adresou" $X=(x_1,...,x_n)$, skrátene x_i, a označme počiatočný (v čase $(t=0)$) počet častíc v nej ako $N_X(0)$. V nasledujúcom budeme písať formulky pre všeobecný i-ty smer a dodatočne sčítame príspevky všetkých.
Voči centrálnej bunke majú jej dvaja susedia v i-tom smere posunuté svoje i-te súradnice o ϵ_i: $x_i+\epsilon_i$ and $x_i-\epsilon_i$. Označme počiatočnú obsadenosť časticami v nich ako $N_{x_i+\epsilon_i}(0)$ a $N_{x_i-\epsilon_i}(0)$.

adresa bunky	$x_i-\epsilon_i$	x_i	$x_i+\epsilon_i$
obsadenosť $t=0$	$N_{x_i-\epsilon_i}(0)$	$N_X(0)$	$N_{x_i+\epsilon_i}(0)$
obsadenosť $t=\delta t$		$N_X(\delta t)=?$	

[2] Teraz uvažujeme o takej situácii, ale pre budúcu referenciu tu zdôrazňujeme predpoklad. Ak by rozličné smery mali rôzne vlastnosti, tu by bolo potrebné robiť isté váhovanie pravdepodobnosti krokov do rôznych smerov.

Sústreďme sa na strednú bunku situovanú v x_i. Počiatočný stav bol $N_X(0)$ častíc. Odhadnime jeho populáciu častíc $N_X(\delta t)$ v čase δt (interval typicky postačujúci na krok dĺžky ϵ_i, teda zmenu adresy o jedno oddelenie). Na základe našich predpokladov o pravdepodobnostiach migrácie častíc a obsadenosti susedných oddelení očakávame [3]:

- $(1-p)N_X(0)$ častíc ostane v x_i- bunke
- $\frac{p}{2n}N_{x_i+\epsilon_i}(0)$ príde do x_i z "pravého susedstva v i-tom smere" $x_i+\epsilon_i$
- $\frac{p}{2n}N_{x_i-\epsilon_i}(0)$ príde do x_i z "ľavého susedstva v i-tom smere" $x_i-\epsilon_i$.

Teraz treba vziať do úvahy, že i nadobúda hodnoty $1,...,n$ a sčítať príspevky od všetkých. Potom celkový odhad populácie v X v čase δt bude

$$N_X(\delta t) = (1-p)N_X(0) + \frac{p}{2n}\sum_i (N_{x_i-\epsilon_i}(0) + N_{x_i+\epsilon_i}(0)) \tag{5}$$

Preusporiadaním členov in (5) a predelením rovnice δt dostávame **rýchlosť zmeny** populácie v X:

$$\frac{N_X(\delta t) - N_X(0)}{\delta t} = \frac{p}{\delta t}\left(\sum_i \left[\frac{N_{x_i-\epsilon_i}(0) + N_{x_i+\epsilon_i}(0)}{2n}\right] - N_X(0)\right) \tag{6}$$

Rovnica (6) hovorí, že **rýchlosť zmeny populácie častíc** v strednej (X) bunke je úmerná **rozdielu medzi jej aktuálnou populáciou a priemerom populácií u jej 2n susedov**. Zjavne tu máme tendenciu **spriemerovať sa**: čím viac sa populácia v uvažovanej bunke líši od priemernej populácie ostatných, tým vyššia je rýchlosť zmeny **smerom k vyrovnaniu**.

Toto azda nie je menej intuitívne ako 1. Fickov zákon. Ak všetky susedné bunky obsahujú viac (menej) častíc ako tá medzi nimi, očakávame že celkový tok častíc bude prevažne dovnútra (von zo) strednej bunky. Ak niektoré susedstvo je viac obsadené a iné menej ako uvažovaná bunka, bude sa táto zapĺňať alebo vyprázdňovať podľa toho ktorý rozdiel bol v absolútnej hodnote väčší. Táto intuícia je v súlade s "priemerovacou tendenciou": stredná bunka smeruje k strednej obsadenosti.
Osobitne zaujímavou je situácia, keď prebytok častíc (voči uvažovanej, strednej bunke) obsadenejšieho suseda je číselne rovný "nedostatku" častíc (znova voči strednej bunke) menej obsadeného suseda. V takom prípade podľa našej rovnice (6) by sa celková obsadenosť strednej bunky v nasledujúcom kroku nemala meniť - koľko príde, toľko odíde.

Azda sa už objasňuje podobnosť s difúznou rovnicou. Aby sme procesu ešte napomohli, preusporiadajme členy v (6) a použime 1 napísanú v šikovnom tvare ϵ^2/ϵ^2

[3] Opäť, uvažujeme tu o najjednoduchšom modeli, vyznačujúcom sa nielen izotropiou (kroky do rôznych smerov rovnako pravdepodobné), ale aj homogenitou (teda pravdepodobnosť sťahovania na rôznych miestach (tu $x_i+\epsilon$ a $x_i-\epsilon$) rovnaká.

$$\frac{N_X(\delta t) - N_X(0)}{\delta t} = \frac{p\epsilon^2}{2n\delta t}\sum_i \frac{(N_{x_i+\epsilon}(0) - N_X(0)) - (N_x(0) - N_{x_i-\epsilon}(0))}{\epsilon^2} \tag{7}$$

A teraz preveďme čo bolo značením naznačované už dávno, totiž zvážme veľmi krátke časové intervaly. Presuny ktoré častice za krátke časy dokážu urobiť sú potom tiež malé, a teda naše myslené "krabičky/bunky"v priestore sú malé - až tak, že sa cítime oprávnení použiť model zodpovedajúci kontinuu. Potom trochu poupratovaný **"rozdiel od priemeru susedov"** začne náramne pripomínať **sumu druhých priestorových derivácií - laplacián**. Druhé derivácie sú tu tzv. "symetrické", operujúce s hodnotami funkcie "vpravo aj vľavo". Ak tradičná druhá derivácia existuje, je rovná symetrickej.

Limita krátkych krokov v čase aj priestore, a podelenie počtu častíc veľkosťou bunky v ktorej sa nachádzajú na oboch stranách rovnice (zavedúc hustotu $u(x_1, ..x_n, t)$ ako množstvo difundujúcej látky na oblasť ktorú obsadzuje) nás privádza ku vzťahu

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x_1, ..x_n, t) = D\sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}u(x_1, ..x_n, t) \tag{8}$$

Zmienená limita konštanty úmernosti $\frac{p\epsilon^2}{2n\delta t}$ tu hrá rolu "**difúzneho koeficientu**"D.

Všimnime si predpoklady, za ktorých takto jednoducho platí úmernosť medzi sumou druhých priestorových derivácií a rýchlosťou zmeny: predpokladali sme model **izotropný** (presuny do všetkých smerov rovnako pravdepodobné) a **homogénny** (všetky oblasti majú častice s rovnakou tendenciou vysťahovať sa z nich alebo ostať). Náš model zjavne nepokrýva scenáre keď pravdepodobnosti presunov častíc závisia od smeru, miesta či času. Nie je účelom týchto poznámok ísť do technicky najkomplexnejších možností. Je však vhodné upozorniť že je tu priestor na zovšeobecnenie. Zjavne také prípady by nám neumožnili vyňať z každého člena ten istý faktor $p/2n$, a termín "konštanta úmernosti"pre difúzny koeficient by ani nebol celkom namieste.

Osobitne príhodné D v 3D prípade

Jednotky veličín skombinovaných do difúzneho koeficientu majú istú peknú črtu práve v najrelevantnejšom prípade trojrozmerného priestoru. Pozrime sa na výraz, ktorý nakonie hral úlohu difúzneho koeficientu: $\frac{p\epsilon^2}{2n\delta t}$, kde $n = 1, 2, 3$ je rozmer uvažovaného konfiguračného priestoru. Pripomeňme si ako sme k nemu prišli: ϵ^2 sa objavilo v rovnici (7) pretože sme násobili 1 v tvare ϵ^2/ϵ^2. Menovateľ sme použili aby sa dalo vidieť spojenie s druhou deriváciou, a ϵ^2 jednoducho ostalo v čitateli a bolo teda zahrnuté do faktora úmernosti medzi časovou zmenou a laplaciánom. $2n$ Prišlo z predpokladu že pravdepodobnosť p že častica počas daného obdobia δt opustí svoju bunku je rozdelená rovnomerne (izotropne) medzi všetky časti hranice.

Všimnime si tu fyzikálne jednotky: ϵ^2 má rozmer plochy, δt času. ($2n$ a p sú bezrozmerné čísla), takže difúzny koeficient má rozmer $\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-1}$, plocha za čas, bez ohľadu na rozmer uvažovaného konfiguračného priestoru v ktorom sa častice šíria. Avšak ukazuje sa že ono ϵ^2, zdanlivo len pozostatok akejsi výhodnej matematickej manipulácie je osobitne relevantné v trojrozmernom prípade.

Uvažujme, ktoré veličiny by sme prirodzene spájali so zmenou populácie častíc v nejakej oblasti (a všímajme si ich jednotky). Inklinácia/pravdepodobnosť častíc migrovať, dostupný čas na presťahovanie sa a rozsah hranice (ako množstvo "vchodov a východov") hrajú veľkú rolu. Osobitne si všimnime hranicu - mala by mať značnú úlohu pri zmenách v oblasti, keďže čokoľvek príde alebo odíde, musí tak urobiť cez ňu. Rozsah hranice súvisí s maximálnou rýchlosťou ktorú častice môžu mať. (hranica je rastúcou funkciou maximálnej vzdialenosti do ktorej častica môže prísť za čas δt)
Pekná vec na trojrozmernom prípade je, že rozsah hranice je vyjadrený práve v jednotkách aké má ϵ^2 (čo neplatí pre inak rozmerné konfiguračné priestory).

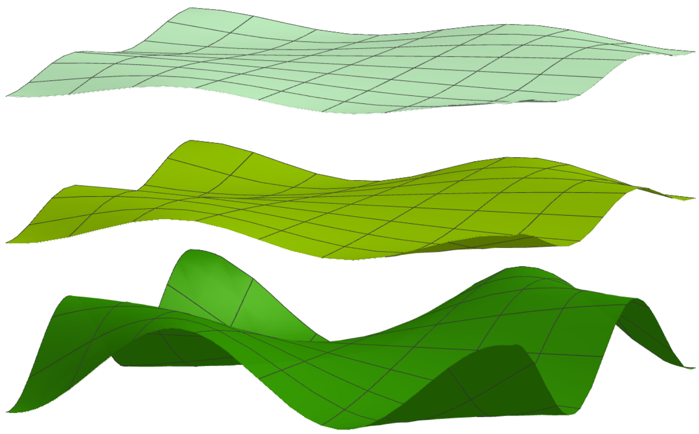
Výraz, ktorý sme identifikovali ako difúzny koeficient, má za úlohu (okrem iného) vyrovnať fyzikálne jednotky v oboch Fickových zákonoch - vo všetkých rozmeroch tie isté. Ale v trojrozmernom prípade sú to zároveň práve jednotky tých veličín, ktoré by sme prirodzene spojili s procesom príchodu/odchodu častíc do/z oblasti kde má podľa predpokladov platiť difúzna rovnica.

5 Laplaciánom kormidlovaný vyrovnávací tok

Zmieňme sa ešte o tom, čo by matematik s geometrickými sklonmi mohol vidieť v difúznej rovnici. Vzťah medzi štatistikou náhodnej prechádzky (vedúcej k vyššej entropii) a "priemerujúicej tendencie"(vyjadrenej ako laplacián čoby generátor časového vývoja) bol doposiaľ diskutovaný prevažne v diskrétnej verzii. Teraz sa sústreďme viac na jeden aspekt spojitého modelu: **krivosť**.

Jedná sa o častý geometrický výraz a ako taký ho ľudia skušali definovať už pred tisícročiami. Považovať niečo za skrivené predpokladá mať nejaký pojem o rovnom, takže snahou bolo sformulovať pojem "rovný". Jedna z navrhovaných definícií bola "majúci svoje elementy rovnomerne medzi susednými". Toto je relevantný pohľad pre tzv. **strednú krivosť** (to je práve tá súvisiaca s laplaciánom z predchádzajúcich odstavcov), ktorej samotný názov naznačuje **stredujúci/priemerujúci princíp**. Tuná uvažujeme krivosť vo vcelku abstraktnom prevedení: Ak skúmame **graf funkcie** $u(x, y, z, t_i)$ popisujúcej rozloženie častíc v nejakom čase t_i, skúmame vlastne **geometrický objekt**, (hyper)povrch ktorému možno spočítať strednú krivosť v jednotlivých bodoch.

Dvojrozmerný prípad je osobitne vhodný pre vizualizáciu (lebo má rozmer dosť vysoký na to aby stredná krivosť bola relevantný pojem, a dosť nízky na to aby sa do obrázka vošla časová os a teda sa vizualizoval aj časový vývoj). Graf funkcie $u(x, y, t_i)$ (popisujúci koncentráciu častíc v čase t_i v 2D oblasti so súradnicami x, y) môže byť vizualizovaný ako 2D povrch pre každý časový okamih t_i; **časový vývoj potom možno znázorniť ako postupnosť takých povrchov, plochejších a plochejších (v zmysle klesajúcej strednej krivosti) ako čas postupuje**. Tento vývoj je špeciálnym prípadom tzv. "**toku strednej krivosti (mean curvature flow)**".



Obr. 3: Vyrovnávanie počiatočnej nerovnomernej koncentrácie v 2D oblasti. Obrázok zachytáva vývoj situácie; spodný obrázok predstavuje počiatočný, vyššie neskorší stav.

Laplacián ako "divergencia gradientu"

Keď už sme pri spojitom modeli, zmieňme ešte definíciu laplaciánu ako **divergencie gradientu** a ukážme si že je konzistentná s intuitívnou predstavou **"miery rozdielu od priemeru susedov"**.

Uvažujme o **sklonoch povrchu** v nejakom bode - v smeroch x- ovej aj y- osi, teda **komponentách gradientu** v danom bode - ich **strmosť je mierou výmeny častíc v uvažovanom smere**. Teraz uvažujem **divergenciu** takéhoto gradientového poľa v spomenutom bode. Je **mierou toho nakoľko sa celkový tok dnu a von nevyrovnávajú**. Toto súvisí s tým, že divergencia vektorového poľa je nástroj na detekciu "zdrojovä "prepadlísk". Keď zvážime ako gradient kóduje informáciu o prírastkoch/úbytkoch funkčnej hodnoty v okolí uvažovaného bodu, je prirodzené že **celková bilancia prítokov a odtokov gradientového vektorového poľa je vyrovnaná, nulová, práve keď je funkčná hodnota v danom bode priemerom ostatných**. (Vyššie funkčné hodnoty jedným smerom sú kompenzované nižšími funkčnými hodnotami iným smerom, a toky idúce proti gradientom sa kompenzujú.)

Vyrovnanie v rámci možností (vplyv okrajových podmienok)

Keď sme rozoberali problém difúzie v diskrétnom prevedení, uvažovali sme o rýchlosti zmeny populácie častíc v "typickej bunke", časti priestoru, ktorá mala **susedov podobného chrakteru** ako bola sama. Spojitá verzia sa držala rovnakého predpokladu.

V reálnych situáciách sa však vždy stretávame s **hranicami** oblastí, kde predpoklad neplatí pre "bunky", oblasti na okraji. Tieto **nemajú všetkých susedov "príbuznej povahy"**. Toto je jeden z dôvodov, prečo sú **okrajové podmienky** také dôležité - dodávajú **informáciu, ktorá nebola obsiahnutá v predpokladoch**, za ktorých bola postavená naša rovnica. Riešenie diferenciálnej rovnice v rámci nejakej realistickej aplikácie je skvelá možnosť presvedčiť sa, že okrajové podmienky v žiadnom prípade nie sú nepodstatná "poznámka pod čiarou", ale majú významný **dopad na celkové riešenie**. Môžu byť nastavené tak, že rovnovážne riešenie nezodpovedá "celej oblasti rovnomerne obsadenej".

Graf funkcie zodpovedajúcej koncentrácii u nemusí v ustálenom stave skončiť ako plochý (hyper)povrch v euklidovskom zmysle. Avšak, ak pre dané podmienky existuje **ustálený, rovnovážny stav** (nemusí existovať), graf u sa bude vyznačovať **nulovou strednou krivosťou**. Veľmi pekná vizualizácia môže byť vytvorená mydlovou blanou na drôtenom ráme. Mydlový film sa ustáli tak aby povrch mal minimálnu plochu dovolenú hranicou a stredná krivosť v každom "vnútornom", nehraničnom bode bude nulová. Takýto mydlový film je analógom grafu funkcie ktorej laplacián je nulový v danej oblasti. **Miera strednej krivosti je vyjadrená laplaciánom funkcie**. A keďže podľa rovnice laplacián je **časovým generátorom**, **dosiahnutie nulovej strednej krivosti** v každom vnútornom bode (hyper)povrchu daného grafom u znamená, že **časový vývoj sa dovŕšil** a aktuálny **makrostav je konečný, stabilný - rovnovážny.**

6 Hniezdo otázok

Predkladaný text je aj pokusom predstaviť **difúznu rovnicu / rovnicu vedenia tepla** ako nielen ďalšiu výpočtovú hádanku, ale aj ako prepojenie širších pojmov: "náhodnej (v štatistickom zmysle) prechádzky "smerom k vyššej **entropii** a "plavby časom" smerom k **priemernej vyrovnanosti** (grafu funkcie vyjadrujúcej konfiguráciu, rozloženie častíc v priestore).

Spomeňme ešte bez ďalšieho komentára fakt, že študovaný jav je jednou z ilustrácií **druhého termodynamického zákona**, ktorý napriek množstvu jednoduchých formulácií (" existujú nevratné deje", "teplo prechádza z teplejšieho na studenšie teleso", " entropia uzavretého systému neklesá", ...) je jedným z najmenej porozumených zákonov s ktorými často automaticky počítame. Pojednanie o ňom je však Pandorina skrinka, ktorej otvorenie síce neprináša katastrofu, ale množstvo otázok vyššie ako má tento súbor ambíciu zmieniť. Pre predstavu: Prečo je čas jednosmerná cesta? (Je?) Čo je to vlastne? ... ???

Tento projekt získal financovanie z výskumného a inovačného programu EU Horizon 2020 v rámci Marie Sklodowska-Curie Dohody o grante č. 945478.