

УДК 51-74

ТЕОРЕТИКО-ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ ДИНАМИЧЕСКОЙ СОРБЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ

*д-р техн. наук, доц. С.Г. ЕХИЛЕВСКИЙ,
канд. физ.-мат. наук, доц. О.В. ГОЛУБЕВА, Д.В. ПЯТКИН
(Полоцкий государственный университет)*

Реализован полноценный метод моментов, позволяющий определить плотность вероятности случайной величины (координаты элементарного акта сорбции) через совокупность ее начальных моментов. В результате анализа зависимости этих моментов от времени получен вид асимптотики проскока при больших временах. Оценена погрешность при замене точного решения его асимптотическим выражением. Найденные решения позволяют сократить временные затраты в актуальном диапазоне аргументов в $10^4 \dots 10^5$ раз, в результате чего скорость численных экспериментов, как и сами их возможности, выводятся на качественно иной уровень.

Задача динамики сорбции лежит в основе многих промышленных и природоохраных технологий. Обычно для моделирования этого процесса используют уравнения математической физики. В частности, в области Генри после формирования квазистационарного распределения концентрации сорбтива доля его проскочивших молекул может быть найдена как решение интегро-дифференциального уравнения:

$$-\omega'_\xi = e^{-\tau} \left(e^{-\xi} + \int_0^\tau e^\tau d_\tau \omega \right), \quad (1)$$

где ω – приведенная концентрация сорбтива; ξ, τ – соответственно обезразмеренные координата и время [1].

Каждая порция регенерируемого воздуха содержит огромное (сравнимое с числом Авогадро) количество практически не взаимодействующих молекул примеси. То есть по закону больших чисел вероятность их проникновения в поглощающий слой на глубину ξ фактически не отличается от относительной частоты этого события $\omega(\xi, \tau)$. Соответственно, $1 - \omega(\xi, \tau)$ есть вероятность поглощения молекулы примеси таким слоем сорбента, а $f(\xi, \tau)$ – плотность упомянутой вероятности:

$$f(\xi, \tau) = \frac{\partial(1 - \omega(\xi, \tau))}{\partial \xi} = -\omega'_\xi(\xi, \tau). \quad (2)$$

Предложенная интерпретация $\omega(\xi, \tau)$ позволяет подключить к исследованию сорбционной активности мощный дополнительный ресурс, не задействованный в идеологии уравнений математической физики¹. В частности, вид $f(\xi, \tau)$ может быть установлен вариационно (без уравнения (1)) из независимых соображений, основанных на экстремальности энтропии. Так, в начальный момент ($\tau = 0$), когда сорбент не загрязнен и нет оснований какой-либо его участок предпочесть остальным, экстремальность S на полубесконечном интервале обеспечивается экспоненциальным законом [2], что и подтверждается непосредственным расчетом (см. формулы (1), (2)):

$$f(\xi, 0) = e^{-\xi}. \quad (3)$$

Чтобы выяснить, во что эволюционирует (3), необходимо установить зависимость от времени начальных моментов координаты элементарного акта сорбции:

$$v_n(\tau) = \int_0^\infty \xi^n f(\xi, \tau) d\xi. \quad (4)$$

Это было сделано в [3].

Рекуррентное соотношение имеет вид

$$v_n(\tau) = n \cdot \left[v_{n-1}(\tau) + \int_0^\tau v_{n-1}(\tau) d\tau \right]. \quad (5)$$

¹ В действительности такой ресурс задействован неявно, так как при описании кинетики сорбции использованы теоремы умножения вероятности и газовые законы, в основе которых нивелировка начальных условий движения молекул, ведущая к возрастанию энтропии S . Именно по этой причине решение уравнения (1) автоматически обеспечивает условный (в рамках рассматриваемой модели) максимум S в каждый момент времени, что и позволяет надеяться на успех развиваемого подхода.

Вместе с условием нормировки

$$v_0(\tau) = \int_0^{\infty} f(\xi, \tau) d\xi = 1 \quad (6)$$

соотношение (5) позволяет последовательно определить все $v_n(\tau)$ до любого номера² и заметить общую закономерность:

$$v_n(\tau) = n! \sum_{k=0}^n (-1)^k \tau^k \frac{1}{k!} \sum_{l=0}^k C_{n+1}^l (-1)^l, \quad (7)$$

где C_n^k – числа сочетаний.

Зная начальные моменты $v_n(\tau)$, нетрудно найти соответствующие центральные моменты, отвечающие искомому закону распределения ξ :

$$\mu_n(\tau) = \int_0^{\infty} (\xi - v_1(\tau))^n f(\xi, \tau) d\xi. \quad (8)$$

Выполнив под знаком интеграла в (7) биномиальное разложение, получим после интегрирования

$$\mu_n(\tau) = \sum_{i=0}^n (-1)^i C_n^{n-i} \cdot v_{n-i}(\tau) \cdot v_1^i(\tau). \quad (9)$$

В частности, из (9), (7) следует, что

$$v_1(\tau) = 1 + \tau = m(\tau), \quad (10)$$

$$\mu_2(\tau) = 1 + 2\tau = \sigma^2(\tau), \quad (11)$$

где $m(\tau)$ и $\sigma(\tau)$ – математическое ожидание и среднеквадратическое отклонение координаты элементарного акта сорбции ξ . Согласно (10), (11) при $\tau = 0$ среднеквадратическое отклонение совпадает с математическим ожиданием, как это и должно быть при экспоненциальном распределении случайной величины. Далее σ растет. Это означает, что график $f(\xi, \tau)$ не смещается как целое по мере отработки слоев продукта. Иными словами, меняется сам вид функции распределения. Существенно при этом, что $\sigma(\tau)$ растет медленнее, чем $m(\tau)$. Критическим является условие:

$$3\sigma(\tau) \leq m(\tau), \quad (12)$$

по достижении которого патрон из полубесконечного превращается как бы в бесконечный, ибо левее точки $\xi = m(\tau) - 3\sigma(\tau)$ в соответствии с правилом «3 σ » функция $f(\xi, \tau)$ практически не отличается от нуля. Такие времена будем называть большими. Согласно (10)...(12) наступают они при $\tau \geq 18$. Выполнение (12) приводит к новому качеству, так как экстремальность энтропии S на всей числовой оси обеспечивается уже не экспоненциальным, а нормальным распределением случайной величины (рис. 1) [2]:

$$f(\xi, \tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} f_N(\xi, \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(\tau)}} e^{-\frac{(\xi - m(\tau))^2}{2\sigma(\tau)^2}}. \quad (13)$$

В справедливости последних рассуждений можно убедиться и непосредственно, вычислив с помощью (9), (11) асимметрию и эксцесс функции распределения:

$$A(\tau) = \frac{\mu_3(\tau)}{\sigma^3(\tau)} = \frac{6\tau + 2}{(2\tau + 1)^{3/2}} = \frac{3}{\sigma(\tau)} - \frac{1}{\sigma^3(\tau)}, \quad (14)$$

$$E(\tau) = \frac{\mu_4(\tau)}{\sigma^4(\tau)} - 3 = \frac{9 + 36\tau + 12\tau^2}{(2\tau + 1)^2} - 3 = \frac{24\tau + 6}{(2\tau + 1)^2} = \frac{12}{\sigma^2(\tau)} - \frac{6}{\sigma^4(\tau)}. \quad (15)$$

Видно, что асимметрия и эксцесс являются бесконечно малыми при $\tau \rightarrow \infty$, как это и должно быть в случае нормального распределения случайной величины.

² Заметим, что для вычисления $v_n(\tau)$ мы использовали уравнение (1), но не решали его, что также является преимуществом развиваемого подхода.

Для логического завершения работы осталось определить отклонение асимптотического выражения (13) от дифференциальной функции распределения при конечных временах

$$f(\xi, \tau) = f_N(\xi, \tau) \cdot (1 + \varphi(\xi, \tau)), \quad (16)$$

где $\varphi(\xi, \tau)$ – относительная погрешность, возникающая при замене $f(\xi, \tau)$ нормальным законом.

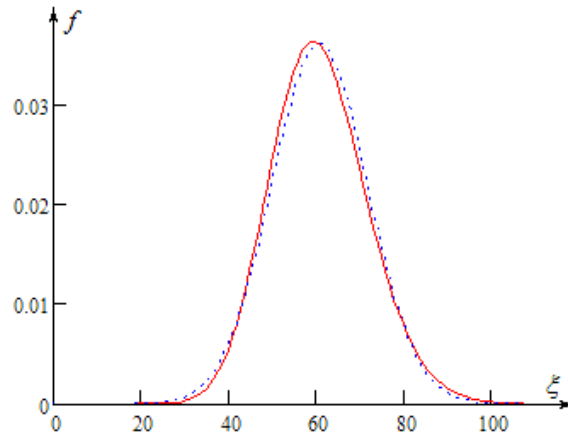


Рис. 1. Асимптотика дифференциальной функции распределения координаты элементарного акта сорбции при больших временах:
 $f(\xi, 60)$ – сплошная кривая; $f_N(\xi, 60)$ – пунктир

Прежде всего, получим уравнение относительно $\varphi(\xi, \tau)$.

Дифференцирование (1) по τ и ξ дает

$$f''_{\xi\tau} + f'_\xi + f'_\tau = 0. \quad (17)$$

Подставив (16) в (17), получим после сокращения на $f_N(\xi, \tau)$ искомое уравнение

$$\begin{aligned} & \varphi''_{\xi\tau} + \varphi'_\xi \left[1 - \sigma^{-2}(\tau) + \sigma^{-2}(\tau)(\xi - m(\tau)) + \sigma^{-4}(\tau)(\xi - m(\tau))^2 \right] + \\ & + \varphi'_\tau \left[1 - \sigma^{-2}(\tau)(\xi - m(\tau)) \right] + (1 + \varphi) \left[3\sigma^{-4}(\tau)(\xi - m(\tau)) - \sigma^{-6}(\tau)(\xi - m(\tau))^3 \right] = 0. \end{aligned} \quad (18)$$

Выражения в квадратных скобках таковы, что удобно перейти в систему координат, связанную с работающим слоем сорбента и в качестве характерного размера использовать среднее квадратическое отклонение:

$$x(\xi, \tau) = (\xi - m(\tau)) / \sigma(\tau). \quad (19)$$

При этом в (18) останется явная зависимость только от x и σ

$$\varphi''_{\xi\tau} + \varphi'_\xi \left[1 - \sigma^{-2}(\tau) + \sigma^{-1}(\tau)x + \sigma^{-2}(\tau)x^2 \right] + \varphi'_\tau \left[1 - \sigma^{-1}(\tau)x \right] + (1 + \varphi)\sigma^{-3}(\tau) \left[3x - x^3 \right] = 0, \quad (20)$$

т.е. в движущейся системе координат вся эволюция φ обусловлена только изменением σ :

$$\varphi'_\tau = \varphi'_x x'_\tau + \varphi'_\sigma \sigma'_\tau = \varphi'_x (-\sigma^{-1} - x\sigma^{-2}) + \varphi'_\sigma \sigma^{-1}, \quad (21)$$

где последнее равенство записано с учетом (11).

Согласно (19) также имеет место равенство:

$$\varphi'_\xi = \varphi'_x x'_\xi = \varphi'_x \sigma^{-1}. \quad (22)$$

Подставив (19), (21) и (22) в (20), получим

$$-\varphi''_{xx} \left[\sigma^{-2} + x\sigma^{-3} \right] + \varphi''_{\sigma\sigma} \sigma^{-2} + \varphi'_x \left[-2\sigma^{-3} + 2x^2\sigma^{-3} + x\sigma^{-2} \right] + \varphi'_\sigma \left[\sigma^{-1} - x\sigma^{-2} \right] = (1 + \varphi)\sigma^{-3} \left[x^3 - 3x \right]. \quad (23)$$

можно интерпретировать как приведенный центральный момент первого порядка случайной величины ξ (см. (19), (8)), тождественно равнялось нулю в соответствии со смыслом этой переменной:

$$0 = M(\tau) = \int_0^{\infty} f_N(\xi, \tau) \left(1 + \sigma^{-1}(0,5x^3(\xi, \tau) + c_{11}x(\xi, \tau) + \dots)\right) x(\xi, \tau) d\xi = \int_{-m(\tau)/\sigma(\tau)}^{\infty} (2\pi)^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{2}} \left[x + \sigma^{-1}(0,5x^4 + c_{11}x^2) + \dots\right] dx. \quad (30)$$

При больших временах первое слагаемое в квадратных скобках не дает вклада в матожидание, так как $m(\tau)/\sigma(\tau) \rightarrow \infty$ (см. (21), (22)), и возникает интеграл от нечетной функции в симметричных пределах. С учетом этого обстоятельства из (30) следует

$$c_{11} = -0,5 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} x^4 dx \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} x^2 dx = -\frac{3}{2}. \quad (31)$$

Определяемая формулами (28), (29), (31) поправка хорошо описывает отклонение функции распределения $f(\xi, \tau)$ от нормального закона (рис. 2, пунктирная кривая).

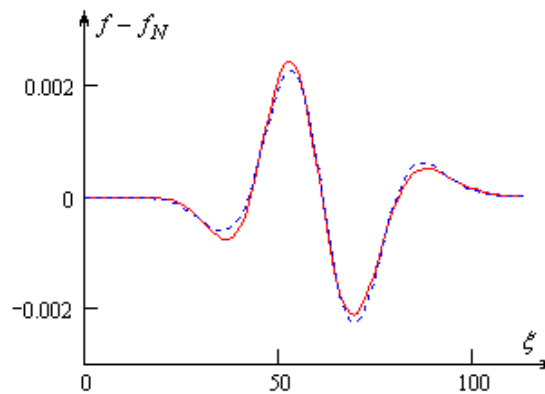


Рис. 2. Отклонение $f(\xi, 60)$ от нормального закона (сплошная кривая) и вклад в него поправки первого порядка по σ^{-1} (пунктир)

Для второго шага итерационной процедуры подставим найденную

$$\varphi_1(x) = -\frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^3 \quad (32)$$

в правую часть второго уравнения (25). В результате после дифференцирования и приведения подобных получим уравнение для определения $\varphi_2(x)$:

$$-\varphi_2'' + \varphi_2' x - 2\varphi_2 = 0,5(x^6 - 13x^4 + 33x^2 - 9). \quad (33)$$

Его решение будем искать в виде четного многочлена шестой степени.

Опять применив метод неопределенных коэффициентов, получим

$$\varphi_2(x) = c_{20} + c_{22}x^2 + \frac{1}{8}x^6 - \frac{11}{8}x^4 \quad (34)$$

и уравнение, связывающее коэффициенты c_{20} и c_{22} :

$$c_{20} + c_{22} = 9/4. \quad (35)$$

Дополним (35) следствием из определения дисперсии при $\tau \rightarrow \infty^3$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \left(c_{20}x^2 + c_{22}x^4 + \frac{1}{8}(x^8 - 11x^6) \right) dx = 0. \quad (36)$$

³ Нулевое приближение обеспечивает точное значение дисперсии, вклад первого приближения равен нулю в силу нечетности $\varphi_1(x)$.

Фигурирующие в (36) интегралы вычисляются дифференцированием по параметру, что дает искомую связь

$$c_{20} + 3c_{22} = 15/2 \tag{37}$$

и позволяет, решив систему (35), (37), завершить определение $\varphi_2(x)$ (см. (34)):

$$c_{20} = -3/8, \quad c_{22} = 21/8. \tag{38}$$

Если в (14), (15) и (24) пренебречь слагаемыми третьего и более высоких порядков по σ^{-1} , то нечетную часть относительной погрешности при замене $f(\xi, \tau)$ нормальным законом (13) можно связать с асимметрией, а четную – с эксцессом функции распределения:

$$\varphi(\xi, \tau) \approx \frac{A(\tau)}{6} (x^3(\xi, \tau) - 3x(\xi, \tau)) + \frac{E(\tau)}{96} (-3 + 21x^2(\xi, \tau) - 11x^4(\xi, \tau) + x^6(\xi, \tau)). \tag{39}$$

Благодаря фигурирующему в (16) быстро убывающему множителю $f_N(\xi, \tau)$ в актуальном диапазоне значений модуль x ограничен, что при больших временах (см. (14), (15)) обеспечивает малость правой части (39). Построенная с помощью (16), (24), (34), (38) пунктирная кривая $f_N \sigma^{-2} \varphi_2$ адекватно приближает отклонение Δ_1 первого приближения $f_N(1 + \sigma^{-1} \varphi_1)$ от $f(\xi, \tau)$ (рис. 3).

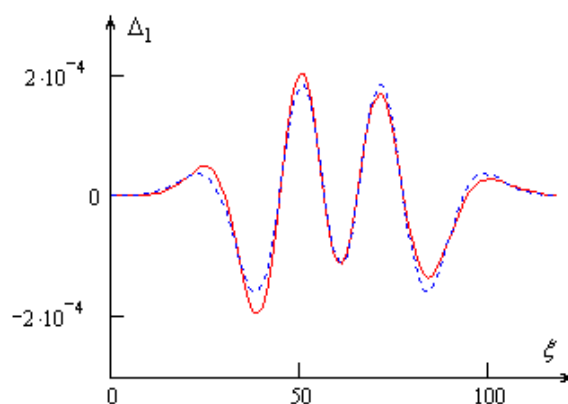


Рис. 3. Отклонение $f(\xi, 60)$ от своего первого приближения (сплошная кривая) и вклад в него эксцесса (пунктир)

Описанная итерационная процедура позволяет последовательно определить все $\varphi_n(x)$ до какого угодно номера. Ее недостатком является некоторая идеологическая непоследовательность. Развивая теоретико-вероятностный подход к моделированию динамической сорбционной активности, следует обойтись без решения дифференциальных уравнений (25). Тем более что знание всех моментов случайной величины (а они нами уже определены (см. (7))) эквивалентно знанию ее функции распределения. То есть $\varphi_n(x)$ с любым номером должна определяться с помощью центральных моментов ξ без развития итерационной процедуры. Покажем, как это делается. Фигурирующие в (27) коэффициенты c_{nk} подберем так, чтобы выполнялись тождества:

$$\frac{\mu_i(\tau)}{\sigma(\tau)^i} \equiv \int_0^\infty \left(\frac{\xi - m(\tau)}{\sigma(\tau)} \right)^i f(\xi, \tau) d\xi, \quad (i = 0, 1, 2, 3, \dots), \tag{40}$$

в левой части которых фигурируют найденные ранее центральные моменты ξ . Подставив (13), (16), (24) в (40) и выполнив замену переменной (19), получим

$$\frac{\mu_i(\tau)}{\sigma(\tau)^i} \equiv \int_{\frac{m(\tau)}{\sigma(\tau)}}^\infty x^i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left(1 + \sum_{n=1}^\infty \frac{\varphi_n(x)}{\sigma^n(\tau)} \right) dx. \tag{41}$$

Тождество (41) должно выполняться в любой, в том числе и в бесконечно удаленный момент времени, удобный для вычисления фигурирующих в (41) несобственных интегралов. При этом на нижнем пределе возникает $-\infty$, так как математическое ожидание $m(\tau)$ координаты элементарного акта сорбции растет со временем быстрее ее среднеквадратического отклонения $\sigma(\tau)$ (см. (10), (11)).

С учетом этого обстоятельства (41) примет вид

$$\frac{\mu_i(\tau)}{\sigma(\tau)^i} \equiv \int_{-\infty}^\infty x^i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left(1 + \sum_{n=1}^\infty \frac{\varphi_n(x)}{\sigma^n(\tau)} \right) dx. \tag{42}$$

Приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях $\sigma(\tau)$ в левой и правой частях (42), будем для четных i получать по одному уравнению относительно всех $\varphi_n(x)$ с четными номерами, а при нечетных i – по одному уравнению относительно всех $\varphi_n(x)$ с нечетными номерами. Меняя i , можно для любой $\varphi_n(x)$ записать нужное количество уравнений, достаточное для определения ее коэффициентов. Иными словами, соотношение (42) позволяет вычислять $\varphi_n(x)$ с любым номером, не пользуясь итерационной процедурой. Например, минуя вычисление $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$, найдем сразу $\varphi_3(x)$ (см. (27)):

$$\varphi_3(x) = c_{31}x + c_{33}x^3 + c_{35}x^5 + c_{37}x^7 + c_{39}x^9. \quad (43)$$

Интегралы в правой части (42) при коэффициентах c_{3k} будут отличны от нуля для нечетных i . С учетом вида правой части (43) нам потребуется пять линейно независимых уравнений (42) с нечетными номерами ($I = 1, 3, 5, 7, 9$). При этом в левой части (42) удобно выделить явную зависимость центральных моментов от $\sigma(\tau)$:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\mu_1(\tau)}{\sigma(\tau)^1} &= 0, \\ \frac{\mu_3(\tau)}{\sigma(\tau)^3} &= \frac{3}{\sigma(\tau)} - \frac{1}{\sigma(\tau)^3}, \\ \frac{\mu_5(\tau)}{\sigma(\tau)^5} &= \frac{30}{\sigma(\tau)} + \frac{50}{\sigma(\tau)^3} - \frac{36}{\sigma(\tau)^5}, \\ \frac{\mu_7(\tau)}{\sigma(\tau)^7} &= \frac{315}{\sigma(\tau)} + \frac{2415}{\sigma(\tau)^3} + \frac{714}{\sigma(\tau)^5} - \frac{1590}{\sigma(\tau)^7}, \\ \frac{\mu_9(\tau)}{\sigma(\tau)^9} &= \frac{3780}{\sigma(\tau)} + \frac{74340}{\sigma(\tau)^3} + \frac{213192}{\sigma(\tau)^5} - \frac{63792}{\sigma(\tau)^7} - \frac{94024}{\sigma(\tau)^9}. \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

Приравняв в упомянутых пяти уравнениях коэффициенты при $\sigma(\tau)^{-3}$ слева и справа, получим

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^1 e^{-\frac{x^2}{2}} \varphi_3(x) dx &= 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^3 e^{-\frac{x^2}{2}} \varphi_3(x) dx &= -1, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^5 e^{-\frac{x^2}{2}} \varphi_3(x) dx &= 50, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^7 e^{-\frac{x^2}{2}} \varphi_3(x) dx &= 2415, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^9 e^{-\frac{x^2}{2}} \varphi_3(x) dx &= 74340. \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

Подставив в (45) разложение (43) и выполнив интегрирование по x , получим записанную в матричной форме систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов $c_{3, 2k+1}$, ($k = 0, 1, \dots, 4$)

$$A^{(5)} \cdot \begin{pmatrix} c_{31} \\ c_{33} \\ c_{35} \\ c_{37} \\ c_{39} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 50 \\ 2415 \\ 74340 \end{pmatrix}, \quad (46)$$

где

$$A^{(n)} = \begin{pmatrix} I_1 & \cdot & \cdot & I_n \\ I_2 & \cdot & \cdot & I_{n+1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ I_n & \cdot & \cdot & I_{2n-1} \end{pmatrix}, \quad (47)$$

$$a \quad I_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^{2m} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2m-1), \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (48)$$

Единственным решением (46) является набор чисел:

$$c_{31} = \frac{23}{16}, \quad c_{33} = -\frac{31}{6}, \quad c_{35} = \frac{25}{8}, \quad c_{37} = -\frac{1}{2}, \quad c_{39} = \frac{1}{48}. \quad (49)$$

Подчеркнем, что система для их получения оказалась определенной и при этом мы никак не пользовались информацией о $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$. В качестве проверки можно подставить (43), (49) в третье уравнение (25) и с помощью (34), (38) непосредственно убедиться, что найденная $\varphi_3(x)$ обращает его в тождество. Аналогично определяются коэффициенты полинома $\varphi_4(x)$. В этом случае интегралы (42) при соответствующих коэффициентах будут отличны от нуля для четных i . Потребуется зависимость от σ семи центральных моментов $\mu_i(\tau)$ с четными номерами ($i = 0, 2, 4, \dots, 12$) и приравнивая будем коэффициенты при σ^4 в левой и правой частях (42). В результате получим

$$\varphi_4(x) = \frac{49}{128} - \frac{279}{64}x^2 + \frac{1373}{128}x^4 - \frac{653}{96}x^6 + \frac{183}{128}x^8 - \frac{7}{64}x^{10} + \frac{1}{384}x^{12}. \quad (50)$$

На рисунке 3 видно, как соответствующая поправка вписывается в отклонение функции распределения от своего приближенного выражения. Достижимая при этом относительная погрешность для рассматриваемого момента времени порядка 10^{-3} . Построенная с помощью (16), (24), (32), (34), (38), (43), (49), (50) зависимость сливается со сплошной кривой на рисунке 1. При этом временные затраты в актуальном диапазоне аргументов оказываются в $10^4 \dots 10^5$ раз меньше, чем при использовании формулы (3) с той же точностью. Таким образом, знание асимптотики $f(\xi, \tau)$ при больших временах многократно улучшает сходимость фигурирующих в (2), (3) двойных рядов.

В заключение осталось обсудить вопрос о максимальной степени полиномов $\varphi_n(x)$. Соотношения (27) были получены исходя из структуры уравнений (25). И эта информация использовалась при вычислении коэффициентов c_{nk} методом моментов, так как было заранее известно, сколько уравнений (42) потребуется для определения данной $\varphi_n(x)$. В принципе, без этой предварительной информации можно обойтись, опираясь только на алгебраические соображения. Например, при вычислении $\varphi_1(x)$ формально добавим к правой части (28) слагаемое более высокой степени, чем третья:

$$\varphi_1(x) = c_{11}x + c_{13}x^3 + c_{15}x^5. \quad (51)$$

Теперь для определения неизвестных коэффициентов потребуются три уравнения (42) с нечетными номерами. В их левые части попадут соответственно выражения из первой строчки (44). Приравняв слева и справа в упомянутых уравнениях коэффициенты при $\sigma(\tau)^{-1}$, вместо (46) получим

$$A^{(3)} \cdot \begin{pmatrix} c_{11} \\ c_{13} \\ c_{15} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 30 \end{pmatrix}. \quad (52)$$

Выполнив с помощью (48) интегрирование по x , покажем линейную зависимость строк третьего вспомогательного определителя:

$$\begin{vmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 3 & 15 & 3 \\ 15 & 105 & 30 \end{vmatrix} = 3 \cdot 15 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 1 & 5 & 1 \\ 1 & 7 & 2 \end{vmatrix} = 3 \cdot 15 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 1 & 5 & 1 \\ 2 & 10 & 2 \end{vmatrix} = 3 \cdot 15 \cdot 2 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 1 & 5 & 1 \\ 1 & 5 & 1 \end{vmatrix} = 0.$$

То есть в соответствии с теоремой Крамера $c_{15} = 0$, и мы опять возвращаемся к выражению (28).

Поступила 14.01.2013

PROBABILITY-THEORETICAL APPROACH TO MODELING OF DYNAMIC SORPTION ACTIVITY

S. EKHILEVSKY, O. GOLUBEVA, D. PYATKIN

The full method of the moments has been realized, allowing to define the density of probability of a random variable (coordinates of the elementary action of sorption) through set of its initial moments. As a result of the analysis of dependence of these moments from time the kind asymptotic of slippage is received at big times. The error is estimated at replacement of the exact decision with its asymptotic expression. The found decisions allow to reduce time expenses in an actual range of arguments in $10^4 \dots 10^5$ times therefore speed of numerical experiments, as well as their possibilities, are deduced on qualitatively other level.