Умножив первый столбец на найденное выше значение $R_{10} = -1$ и прибавив результат ко второму, умноженному на $R_{11} = 1$, получим третий столбец, так как каждая из трех строк образована коэффицентами и свободными членами решенных выше уравнений. Таким образом, исходя из теоремы Крамера и свойств определителей $R_{12} = \Delta_2/\Delta = 0$.

Получим теперь $R_2(\xi)$. Так как у этого полинома три коэффициента, потребуется три уравнения (12), содержащие τ^2. Поэтому положим последовательно $n = 2$, $n = 3$ и $n = 4$ и приравняем в полученных уравнения коэффициенты при τ^2:

$$2\sum_{l=0}^{2} C_3^l(-1)^l = 2 = \sum_{l=0}^{2} R_{2l}(2+l)! = 2R_{20} + 6R_{21} + 24R_{22},$$

$$6\sum_{l=0}^{2} C_4^l(-1)^l = 18 = \sum_{l=0}^{2} R_{2l}(3+l)! = 6R_{20} + 24R_{21} + 120R_{22},$$

$$24\sum_{l=0}^{2} C_5^l(-1)^l = 144 = \sum_{l=0}^{2} R_{2l}(4+l)! = 24R_{20} + 120R_{21} + 720R_{22}.$$

Решив полученную систему, найдем $R_{20} = 1$, $R_{21} = -2$, $R_{22} = 1/2$. Аналогично (выписав уравнения с $n = 3$, $n = 4$, $n = 5$ и $n = 6$, приравняв в них коэффициенты при τ^3 и решив полученную систему линейных алгебраических уравнений) найдем $R_{30} = -1$, $R_{31} = 3$, $R_{32} = -3/2$, $R_{33} = 1/6$.

Действуя так и далее, можно убедиться, что найденные коэффициенты являются частными проявлениями общей закономерности

$$R_{kl} = (-1)^{k-l} C_k^l / l!. \qquad (l = 0,1,...,k). \tag{13}$$

Заметим, что в нее укладывается и случай $k = 0$. Для него $R_{00} = 1$, что позволяет включить фигурирующую в (6) и отвечающую нулевому приближению единицу под знак суммы, поменяв в ней нижний предел суммирования на ноль.

$$f(\xi,\tau) = e^{-\xi}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\tau^k}{k!}\sum_{l=0}^{k}\xi^l(-1)^{k-l}C_k^l/l! = e^{-\xi}\sum_{k=0}^{\infty}\tau^k\sum_{l=0}^{k}\frac{(-1)^{k-l}\xi^l}{(k-l)!(l!)^2}. \tag{14}$$

При малых временах двойной ряд (14) быстро сходится к $f(\xi,\tau)$. Это позволяет с высокой точностью численно экспериментировать при создании установок регенерации атмосферы строительных производств и индивидуальных средств защиты дыхания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ехилевский, С.Г. Метод моментов в моделировании динамической сорбционной активности / С.Г. Ехилевский, Д.В. Пяткин // Создание новых и совершенствование действующих технологий и оборудования нанесения гальванических и их замещающих покрытий: материалы республ. науч.-техн. семинара, Минск, 6–7 дек. 2011 г. – Минск, 2011. – С. 150–153.

УДК 543.42; 517.518.45

ТЕОРЕТИКО-ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Д.В. КЛЮЧНИК
(Представлено: д-р техн. наук, проф. С.Г. ЕХИЛЕВСКИЙ; Е.П. ПОТАПЕНКО)

Предложена новая идеология поиска и исследования решений уравнений математической физики. Исходя из сути решаемой задачи вводится квазистационарная плотность вероятности некоторой случайной величины, связанной с искомой функцией. Асимптотика дифференциальной функции распределения устанавливается вариационно (из условия экстремальности энтропии). При этом параметры распределения получаются методом моментов с помощью самого уравнения, а также связанных с ним начальных (граничных) условий.

При создании установок по регенерации атмосферы промышленных предприятиях и производств строительной отрасли используются уравнения математической физики. Данные уравнения, описывающие явления переноса (вещества, энергии, импульса и т.п.) получаются на основе рассуждений, учитывающих молекулярную природу моделируемых процессов. Однако распространенные методы их решения эту природу игнорируют и сводятся к реализации абстрактного математического формализма (метода разделения переменных Фурье, операционного исчисления и т.п.). Такой подход существенно обедняет арсенал методов поиска и исследования решений, не позволяет применить аппарат, адекватный задаче.

Проиллюстрируем изложенное на примере уравнения диффузии. Ограничившись для простоты одномерным случаем, запишем последнее в виде

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2}, \tag{1}$$

где $n(x,t)$ – объемная концентрация переносимой субстанции (примеси); t – время; x – координата; D – коэффициент диффузии. При наличии начального условия

$$n(x,0) = n_0(x) \tag{2}$$

существует единственное решение задачи (1), (2) (см. [1]), которое позволяет достоверно предсказать значение концентрации $n(x,t)$ в любом месте в любой момент времени. Однако, несмотря на детерминизм задачи (1), (2), все молекулы примеси в результате броуновского движения «забывают» о своих начальных условиях. Это позволяет, соответствующим образом нормировав $n(x,t)$, ввести дифференциальную функцию распределения частиц примеси по координатам

$$f(x,t) = \frac{n(x,t)S}{N}, \tag{3}$$

где

$$N = S\int_{-\infty}^{\infty} n(x,t)dx, \tag{4}$$

равно общему числу диффундирующих молекул в тонкой трубке, параллельной оси OX с площадью поперечного сечения S. Заметим, что размерность $[f(x,t)] =$ м$^{-1}$, как это и должно быть.

Введенная вместо $n(x,t)$ новая неизвестная функция $f(x,t)$ вероятностно характеризует положение в момент времени t каждой отдельной молекулы примеси. И только их огромное количество, в соответствии с законом больших чисел, приводит к достоверному прогнозу эволюции $n(x,t)$, что находит свое формальное отражение в справедливости теорем существования и единственности решения задачи (1), (2).

Интерпретация $f(x,t)$ как плотности вероятности позволяет подключить дополнительный мощный ресурс в виде основных теорем теории вероятностей. В частности, асимптотика $f(x,t)$ и поправки к ней могут быть установлены с помощью начальных и центральных моментов случайной координаты отдельной молекулы примеси. Покажем, как это делается.

Подставив (3) в (1), получим уравнение относительно плотности вероятности $f(x,t)$

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2}. \tag{5}$$

Вначале рассмотрим задачу о расползании однородного концентрационного пятна шириной l

$$f(x,0) = \begin{cases} 1/l, & x \in [-l/2, l/2], \\ 0, & x \notin [-l/2, l/2]. \end{cases} \tag{6}$$

Зависимость (6) описывает равновесное состояние, ибо максимуму энтропии на отрезке отвечает равномерное распределение случайной величины [2]. Поэтому использование (6) в качестве начального условия вполне естественно.

Для дальнейшего удобно перейти к обезразмеренным времени τ и координате ξ:

$$\tau = \frac{Dt}{l^2}, \quad \xi = \frac{x}{l}. \tag{7}$$

В новых переменных соотношения (5), (6) соответственно примут вид

$$\frac{\partial f(\xi,\tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 f(\xi,\tau)}{\partial \xi^2}, \tag{8}$$

$$f(\xi,0) = \begin{cases} 1, & \xi \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right] \\ 0, & \xi \notin \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right] \end{cases}. \tag{9}$$

Вычисим начальные $\nu_{2n+1}(\tau)$ и центральные $\mu_{2n}(\tau)$ моменты распределения обезразмеренной координаты отдельной частицы примеси ξ, являющейся случайной величиной с плотностью вероятности $f(\xi,\tau)$. В силу симметрии задачи (8), (9) имеют место равенства:

$$\nu_{2n+1}(\tau)=\int_{-\infty}^{\infty}\xi^{2n+1}f(\xi,\tau)d\xi=0, \tag{10}$$

$$\mu_{2n}(\tau)=\nu_{2n}(\tau)=\int_{-\infty}^{\infty}\xi^{2n}f(\xi,\tau)d\xi, \qquad n=0,1,... \tag{11}$$

Из условия нормировки

$$\mu_0(\tau)=1, \tag{12}$$

а для остальных номеров n дифференцированием (11) по τ получим с помощью (8)

$$\mu_{2n}(\tau)'=\int_{-\infty}^{\infty}\xi^{2n}\frac{\partial f(\xi,\tau)}{\partial\tau}\partial\xi=\int_{-\infty}^{\infty}\xi^{2n}\frac{\partial^2 f(\xi,\tau)}{\partial\xi^2}\partial\xi. \tag{13}$$

Очевидно, что при любых конечных временах $f(\pm\infty,\tau)\equiv 0$. С учетом этого обстоятельства дважды проинтегрируем правую часть (13) по частям

$$\int_{-\infty}^{\infty}\underbrace{\xi^{2n}}_{U}\underbrace{\frac{\partial^2 f(\xi,\tau)}{\partial\xi^2}\partial\xi}_{dV}=2n(2n-1)\mu_{2n-2}(\tau). \tag{14}$$

Из (13), (14) следует искомое соотношение для определения $\mu_{2n}(\tau)$:

$$\mu_{2n}(\tau)'=2n(2n-1)\mu_{2n-2}(\tau). \tag{15}$$

С помощью (15) и условия нормировки (12) можно развить рекуррентную процедуру последовательного вычисления моментов любых четных порядков. В частности, для $n=1$ получим

$$\mu_2(\tau)'=2(2-1)\mu_0(\tau)=2, \tag{16}$$

Откуда, с учетом вытекающего из (11), (9) начального условия

$$\mu_2(0)=\int_{-1/2}^{1/2}\xi^2 d\xi=\frac{1}{12}, \tag{17}$$

следует

$$\mu_2(\tau)=2\tau+1/12=\sigma^2(\tau), \tag{18}$$

где $\sigma(\tau)$ – среднеквадратическое отклонение обезразмеренной координаты молекулы примеси ξ.

Аналогично для $n=2$ из (15) получим с учетом (18)

$$\mu_4(\tau)'=4(4-1)\mu_2(\tau)=24\tau+1. \tag{19}$$

Дополнив (19) вытекающим из (11), (9) начальным условием

$$\mu_4(0)=\int_{-1/2}^{1/2}\xi^4 d\xi=\frac{1}{80}, \tag{20}$$

найдем

$$\mu_4(\tau)=12\tau^2+\tau+1/80. \tag{21}$$

Найденных моментов достаточно для определения асимптотики $f(\xi,\tau)$ при больших временах. С этой целью вычислим эксцесс ξ

$$E(\tau)=\frac{\mu_4(\tau)}{\sigma(\tau)^4}-3=\frac{12\tau^2+\tau+1/80}{(2\tau+1/12)^2}-3=-\frac{1}{120\sigma^4(\tau)}\underset{\tau\to\infty}{\to}0. \tag{22}$$

Отсутствие эксцесса при больших временах означает, что в результате диффузионного перемешивания частицы примеси все дальше выходят за пределы отрезка $[-l/2, l/2]$ и первоначальное распределение (9) постепенно эволюционирует в нормальное

$$f(\xi,\tau) \underset{\tau\to\infty}{\to} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(\tau)} e^{-\frac{\xi^2}{2\sigma(\tau)^2}}, \tag{23}$$

обеспечивающее максимум энтропии в новых условиях (на всей числовой оси) [2].

Возвращаясь к размерным переменным (см. (7), вместо (18), (21)–(23) получим

$$\sigma_X(t)^2 = 2Dt + l^2/12, \tag{24}$$

$$E_X(t) = -l^4/120\sigma(t)^4. \tag{25}$$

Согласно (7) при $l = 0$ времена сразу становятся бесконечными.

Видно (см. (24), (25)), что $E(t)$ тем меньше, чем сильнее неравенство $t >> l^2/D$. Если $l = 0$ распределение становится нормальным сразу

$$n(x,t) = \frac{N/S}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \equiv \varphi(x,t)\, N/S\ . \tag{26}$$

Чтобы N при этом отличалось от нуля, $n(x,0)$ в соответствии с (3), (4), (6) должна обращаться в бесконечность при $x = 0$, что согласуется с одним из представлений для δ-функции Дирака [3].

$$n(x,0) = \underset{t\to 0}{Lim}\, n(x,t) = \delta(x)\, N/S. \tag{27}$$

Используем (26) для решения (1), (2) в общем виде (не конкретизируя $n_0(x)$). Рассмотрим участок $[l, l+dl]$ на числовой оси. В начальный момент ему (внутри упомянутой трубки) принадлежит

$$dN(l) = n(l,0)Sdl$$

молекул примеси. Заменив в (26) N на dN и x на $x-l$, запишем под знаком интеграла вклад в $n(x,t)$ рассматриваемого участка

$$n(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n(l,0)}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-l)^2}{4Dt}} dl. \tag{28}$$

Решение (28) с точностью до замены $\xi = l - x$ совпадает с полученным в [1] методом Фурье. Формально такая замена ничего не меняет, но вуалирует теоретико-вероятностный смысл подынтегрального выражения.

Таким образом, в работе предложена новая идеология поиска и исследования решений уравнений математической физики. Исходя из сути решаемой задачи, неизвестная функция заменяется плотностью вероятности некоторой случайной величины. Параметры ее распределения получаются методом моментов с помощью самого уравнения, а также связанных с ним начальных (граничных) условий. В качестве примера рассмотрена диффузия в бесконечной трубке.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бугров, Я.С. Высшая математика / Я.С. Бугров, С.М. Никольский. – М.: Наука, 1989. – 464 с.
2. Ехилевский, С.Г. Динамика сорбции активированными углями и закон возрастания энтропии / С.Г. Ехилевский // Вестн. Полоц. гос. ун-та. Сер. С. Фундаментальные науки. – 2006. – № 10. – С. 182 – 188.
3. Владимиров, В.С. Обобщенные функции в математической физике / В.С. Владимиров. – М.: Наука, 1979.