

УДК 543.42; 517.518.45

## ТЕОРЕТИКО-ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ

д-р техн. наук С.Г. ЕХИЛЕВСКИЙ;  
канд. физ.-мат. наук О.В. ГОЛУБЕВА; Е.П. ПОТАПЕНКО; С.А. ОЛЬШАНИКОВ  
(Полоцкий государственный университет)

*Демонстрируется 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. В качестве примера рассмотрена диффузия в бесконечной трубке. Асимптотика дифференциальной функции распределения и ее параметры получаются методом моментов с помощью самого уравнения, а также связанных с ним начальных условий. Показано, как погрешность при замене точного решения его асимптотическим выражением связана с эксцессами функции распределения.*

Уравнения математической физики, описывающие явления переноса, получаются на основе рассуждений, учитывающих молекулярную природу моделируемых процессов. Однако распространенные способы их решения эту природу игнорируют и сводятся к реализации абстрактного математического формализма (метода разделения переменных Фурье, изображений и т.п.). Такой подход существенно обедняет арсенал средств 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

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

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

При наличии начального условия

$$n(x,0) = n_0(x) \quad (2)$$

существует единственное решение задачи (1), (2) (см. [1]), которое позволяет достоверно предсказать значение концентрации  $n(x,t)$  в любом месте и в любой момент времени. Однако несмотря на такой детерминизм, координаты отдельных молекул примеси являются случайными величинами, закон распределения которых эволюционирует во времени.

Изложенное позволяет, соответствующим образом нормировав  $n(x,t)$ , ввести дифференциальную функцию распределения координаты частицы примеси

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

где

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

равно общему числу диффундирующих молекул в тонкой трубке, параллельной оси  $OX$ , с площадью поперечного сечения  $S$ .

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 (сравнимое с числом Авогадро) 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 диффузии как случайного процесса позволяет подключить к ее моделированию дополнительный мощный ресурс в виде основных теорем теории вероятностей, математической статистики и теории информации. В частности, асимптотика  $f(x,t)$  и поправки к ней могут быть установлены с помощью начальных и центральных моментов случайной координаты отдельной молекулы примеси. Найти моменты можно, используя (но не решая) уравнение (1) и соотношения (2), (3). Такой подход реализован в [2; 3] при исследовании динамической сорбционной активности. Применим его к решению уравнения диффузии.

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 расплывании 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 [4]. Поэтому использование (6) в качестве начального условия вполне естественно.

Для дальнейшего удобно перейти к обезразмеренным времени  $\tau$  и координате  $\xi$  :

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

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

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

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

Согласно [5], вся информация о плотности вероятности  $f(\xi, \tau)$  содержится в начальных  $v_n(\tau)$  или центральных  $\mu_n(\tau)$  моментах обезразмеренной координаты  $\xi$  отдельной частицы примеси. В силу симметрии задачи (8), (9) имеют место равенства

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

то есть

$$\mu_n(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} (\xi - v_1(\tau))^n f(\xi, \tau) d\xi = v_n(\tau). \tag{11}$$

Из условия нормировки

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

а для остальных (четных)  $n$  дифференцированием (11) по  $\tau$  с учетом (10) и при помощи (8) получим

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

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\xi^{2n}}_U \underbrace{\frac{\partial^2 f(\xi, \tau)}{\partial \xi^2}}_{dV} \partial \xi = \left| \begin{array}{l} dU = 2n\xi^{2n-1} d\xi \\ V = \frac{\partial f(\xi, \tau)}{\partial \xi} \end{array} \right| = 2n(2n-1)\mu_{2n-2}(\tau). \quad (14)$$

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

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

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

$$\mu_2(\tau)' = 2(2-1)\mu_0(\tau) = 2, \quad (16)$$

откуда с учетом вытекающего из (9)–(11) начального условия

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

следует, что

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

где  $\sigma(\tau)$  – среднеквадратическое отклонение обезразмеренной координаты  $\xi$  молекулы примеси в момент времени  $\tau$ .

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

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

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

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

выполним интегрирование

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

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

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

Отсутствие эксцесса при больших временах означает, что в результате диффузионного перемешивания частицы примеси все дальше выходят за пределы отрезка  $[-1/2, 1/2]$ , а первоначальное распределение (9) постепенно эволюционирует в нормальное

$$f(\xi, \tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(\tau)}} e^{-\frac{\xi^2}{2\sigma(\tau)^2}} \equiv f_0(\xi, \tau), \quad (23)$$

обеспечивающее максимум энтропии на всей числовой оси [4].

Согласно (7), при  $l \rightarrow 0$  безразмерные времена сразу ( $\forall t \neq 0$ ) становятся бесконечными, а распределение – нормальным (см. (18), (23)):

$$f(\xi, \tau) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{\xi^2}{4\tau}} \equiv \varphi(\xi, \tau). \quad (24)$$

Используем (24) для решения (8) в общем виде (без конкретизации начального распределения  $f(\xi, 0)$ ). Рассмотрим участок  $[\eta, \eta + d\eta]$  на числовой оси. В начальный момент молекула примеси принадлежит ему с вероятностью

$$dF(\eta, 0) = f(\eta, 0) d\eta, \quad (25)$$

где  $F(\eta, \tau)$  – интегральная функция распределения.

В соответствии с изложенным из малости  $d\eta$  следует, что при  $t \neq 0$  эта вероятность распределится по числовой оси с плотностью (24) при математическом ожидании  $\eta$ . Воспользовавшись линейностью (8), просуммируем вклады в  $f(\xi, \tau)$  отдельных участков, для чего выполним интегрирование по  $\eta$ :

$$f(\xi, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\eta, 0)}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{(\xi-\eta)^2}{4\tau}} d\eta. \quad (26)$$

В том, что (26) обращает (8) в тождество, можно убедиться непосредственно, продифференцировав абсолютно сходящийся интеграл (26) по параметрам  $\xi$  и  $\tau$ :

$$\frac{\partial f(\xi, \tau)}{\partial \xi} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\eta, 0)}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{(\xi-\eta)^2}{4\tau}} \left( -\frac{\xi-\eta}{2\tau} \right) d\eta,$$

$$\frac{\partial^2 f(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\eta, 0)}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{(\xi-\eta)^2}{4\tau}} \left[ \frac{(\xi-\eta)^2}{4\tau^2} - \frac{1}{2\tau} \right] d\eta, \quad (27)$$

$$\frac{\partial f(\xi, \tau)}{\partial \tau} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\eta, 0)}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{(\xi-\eta)^2}{4\tau}} \left[ -\frac{1}{2\tau^{3/2}} + \frac{(\xi-\eta)^2}{4\tau^{5/2}} \right] d\eta. \quad (28)$$

Видно, что правые части формул (27), (28) тождественно совпадают.

В справедливости начального условия для  $f(\xi, \tau)$ , определяемой правой частью (26), можно убедиться, воспользовавшись известным представлением для  $\delta$ -функции Дирака (см. [6]):

$$\varphi(\xi, 0) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{\xi^2}{4\tau}} = \delta(\xi). \quad (29)$$

С учетом (29)

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\eta, 0)}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{(\xi-\eta)^2}{4\tau}} d\eta = \int_{-\infty}^{\infty} f(\eta, 0) \delta(\xi - \eta) d\eta = f(\xi, 0), \quad (30)$$

как это и должно быть.

Решение (26) с точностью до замены  $z = \eta - \xi$  совпадает с полученным в [1] методом Фурье. Формально такая замена ничего не меняет, но вуалирует теоретико-вероятностный смысл подынтегрального выражения.

Вернемся теперь к начальному условию (9). С его учетом из (26) следует

$$f(\xi, \tau) = \int_{-1/2}^{1/2} \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{(\xi-\eta)^2}{4\tau}} d\eta = \Phi(\xi + 1/2, \tau) - \Phi(\xi - 1/2, \tau), \quad (31)$$

где  $\Phi(\xi, \tau)$  есть интегральная функция распределения, отвечающая нормальному закону (24):

$$\Phi(\xi, \tau) = \int_{-\infty}^{\xi} \varphi(\zeta, \tau) d\zeta. \quad (32)$$

Действительно,

$$\Phi(\xi + 1/2, \tau) = \int_{-\infty}^{\xi+1/2} \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{\zeta^2}{4\tau}} d\zeta = \left| \begin{array}{l} \zeta = \xi - \eta \\ d\zeta = -d\eta \end{array} \right| = \int_{-1/2}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{(\xi-\eta)^2}{4\tau}} d\eta,$$

поэтому

$$\Phi(\xi + 1/2, \tau) - \Phi(\xi - 1/2, \tau) = \int_{-1/2}^{1/2} \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\frac{(\xi-\eta)^2}{4\tau}} d\eta.$$

Определим погрешность при замене (31) асимптотическим выражением (23). Осуществив в (31) разложение по степеням  $1/2$ , получим

$$f(\xi, \tau) = \varphi(\xi, \tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1/2)^{2n}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n} \varphi(\xi, \tau)}{\partial \xi^{2n}}. \quad (33)$$

В качестве нулевого приближения в (33) при определении поправок к асимптотическому выражению следует выделить функцию  $f_0(\xi, \tau)$ , определяемую равенствами (23), (18).

Погрешность

$$\Delta(\xi, \tau) = f(\xi, \tau) - f_0(\xi, \tau) \quad (34)$$

в силу симметрии задачи – четная функция  $\xi$ , то есть экстремальная при  $\xi = 0$  (рис. 1).

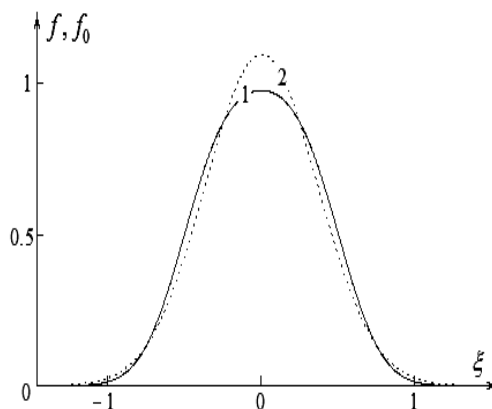


Рис. 1. Плотность вероятности  $f(\xi, \tau)$  (кривая 1) и ее асимптотика  $f_0(\xi, \tau)$  (кривая 2) в момент времени  $\tau = 0,025$

Видно, что экстремум абсолютный, то есть значение  $\Delta(0, \tau)$  может быть использовано для оценки погрешности при замене  $f(\xi, \tau)$  асимптотическим выражением  $f_0(\xi, \tau)$ .

Вычислив несколько фигурирующих в (33) производных и положив  $\xi = 0$ , получим

$$f(0, \tau) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} \left[ 1 + \frac{(1/2)^2}{3!} \left( -\frac{1}{2\tau} \right) + \frac{(1/2)^4}{5!} \frac{3}{(2\tau)^2} - \dots \right]. \quad (35)$$

Чтобы сравнить  $f_0(0, \tau)$  с правой частью (35), положим в (23)  $\xi = 0$  и выполним разложение по степеням  $\tau^{-1}$ :

$$f_0(0, \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(2\tau + 1/12)}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} \left[ 1 + \left(-\frac{1}{2}\right) \frac{1}{24\tau} + \left(-\frac{1}{2}\right) \left(-\frac{3}{2}\right) \frac{1}{2!} \left(\frac{1}{24\tau}\right)^2 - \dots \right]. \quad (36)$$

И наконец, вычтя нулевое приближение (36) из точного выражения (35), получим, пренебрегая высшими порядками по  $\tau^{-1}$ , относительную погрешность, вносимую при замене  $f(\xi, \tau)$  нормальным законом (23):

$$\frac{f(0, \tau) - f_0(0, \tau)}{f(0, \tau)} \approx -\frac{1}{960} \left(\frac{1}{2\tau}\right)^2 = \frac{1}{8} E(\tau), \quad (37)$$

где последнее равенство записано с учетом (18), (22).

Согласно (37) большими могут считаться времена

$$\tau \geq 0,05 \equiv \tau^*, \quad (38)$$

что обеспечивает малость относительной погрешности при замене  $f(\xi, \tau)$  нормальным законом (18), (23).

Рисунок 2 иллюстрирует, как равномерное распределение на отрезке по мере осуществления (38) трансформируется в нормальное на всей числовой оси. Интересно, что  $\tau^*$  отвечает примерно двукратное увеличение дисперсии (см. (18)).

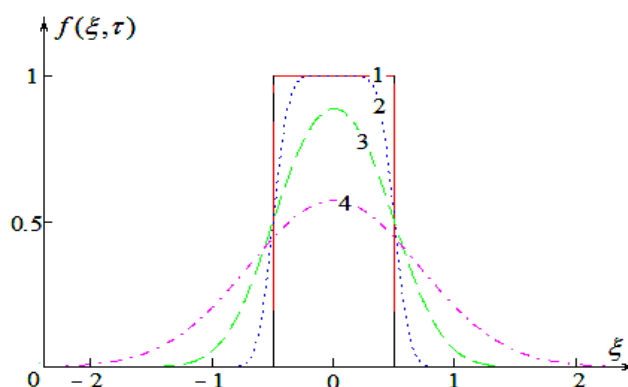


Рис. 2. Диффузионное «расползание» однородного концентрационного пятна:  
1 –  $\tau = 0$ ; 2 –  $\tau = 0,1\tau^*$ ; 3 –  $\tau = \tau^*$ ; 4 –  $\tau = 4\tau^*$

Используем моменты (11) для определения поправки к асимптотическому выражению (23). В соответствии с изложенным (см. (37), (22)) главная часть такой поправки порядка  $\sigma^{-4} f_0$ . Учет в разложениях (35), (36) следующих слагаемых приведет в (37) к вкладам более высоких порядков по степеням  $\tau^{-1}$ , обусловленных (см. (18)) эксцессами старших порядков:

$$E_{2k}(\tau) = \frac{\mu_{2k}(\tau)}{\sigma(\tau)^{2k}} - 1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2k - 1), \quad (k = 3, 4, \dots).$$

Поэтому плотность вероятности обезразмеренной координаты диффундирующей молекулы будем искать в виде

$$f(\xi, \tau) = f_0(\xi, \tau) \left( 1 + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\varphi_{2k}(\xi)}{\sigma^{2k}(\tau)} \right) = f_0(\xi, \tau) + \underbrace{f_1(\xi, \tau) + f_2(\xi, \tau) + \dots}_{\Delta(\xi, \tau)}, \quad (39)$$

где  $\xi$  – приведенная координата, учитывающая эволюцию актуального диапазона обезразмеренной координаты  $\xi$ .

Обезразмеренная координата  $\xi$  определяется из формулы

$$\zeta = \zeta(\xi, \tau) = \xi/\sigma(\tau). \tag{40}$$

Искомые функции  $\varphi_{2k}(\zeta)$  в силу симметрии задачи должны раскладываться по четным степеням  $\zeta$ . При этом согласно зависимости 1, изображенной на рисунке 3, для  $\varphi_4(\zeta)$  в таком разложении можно ограничиться тремя слагаемыми:

$$\varphi_4(\zeta) = C_{40} + C_{42}\zeta^2 + C_{44}\zeta^4. \tag{41}$$

Систему линейных алгебраических уравнений для определения фигурирующих в (41) коэффициентов  $C_{4i}$  ( $i = 0, 2, 4$ ) получим, используя уже найденные центральные моменты (12), (18), (21).

Согласно (22), (11), (39)

$$\frac{\mu_4(\tau)}{\sigma^4(\tau)} = 3 - \frac{1}{120\sigma^4(\tau)} = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \zeta^4 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta}_{=3} + \frac{1}{\sigma^4(\tau)} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \zeta^4 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \varphi_4(\zeta) \cdot d\zeta, \tag{42}$$

где выполнена замена переменной интегрирования (40).

Приравняв в (42) коэффициенты при одинаковых степенях  $\sigma^{-1}$ , получим с учетом (41)

$$3C_{40} + 15C_{42} + 105C_{44} = -1/120. \tag{43}$$

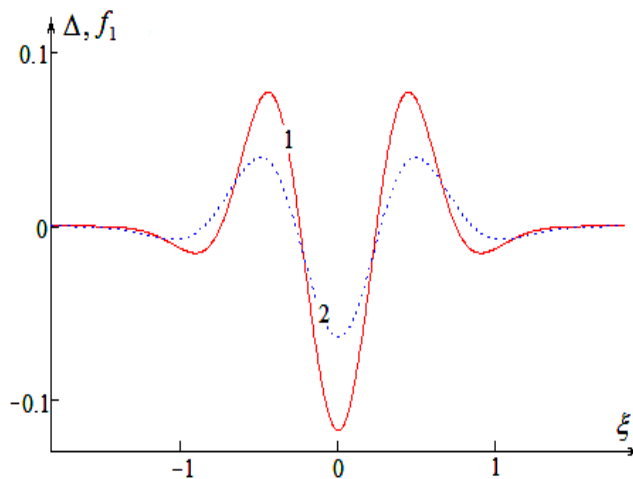


Рис. 3. Отклонение  $f(\xi, \tau)$  от своего асимптотического выражения (кривая 1) и поправка порядка  $\sigma^{-4}$  (кривая 2) для  $\tau = 0,5 \tau^*$

Аналогично получаются еще два уравнения для определения  $C_{4i}$ :

$$\frac{\mu_2(\tau)}{\sigma^2(\tau)} = 1 = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \zeta^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta}_{=1} + \frac{1}{\sigma^4(\tau)} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \zeta^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \varphi_4(\zeta) \cdot d\zeta + \dots \tag{44}$$

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} (C_{40}\zeta^2 + C_{42}\zeta^4 + C_{44}\zeta^6) d\zeta, \quad C_{40} + 3C_{42} + 15C_{44} = 0, \tag{45}$$

$$\frac{\mu_0(\tau)}{\sigma^0(\tau)} = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(\tau)} \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2\sigma^2(\tau)}} \cdot (1 + \frac{\varphi_4(\zeta)}{\sigma^4(\tau)} + \frac{\varphi_6(\zeta)}{\sigma^6(\tau)} + \dots) d\xi = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta}_{=1} + \frac{1}{\sigma^4(\tau)} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \varphi_4(\zeta) \cdot d\zeta + \dots \tag{46}$$

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} (C_{40} + C_{42}\zeta^2 + C_{44}\zeta^4) d\zeta,$$

$$C_{40} + C_{42} + 3C_{44} = 0. \tag{47}$$

Решение системы (47), (45), (43) удобно искать методом Жордана – Гаусса:

$$\begin{aligned} & \left\langle \begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 3 & 0 \\ 1 & 3 & 15 & 0 \\ 3 & 15 & 105 & -1/120 \end{array} \right\rangle \sim \left\langle \begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 12 & 0 \\ 0 & 12 & 96 & -1/120 \end{array} \right\rangle \sim \left\langle \begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 1 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 24 & -1/120 \end{array} \right\rangle \sim \\ & \sim \left\langle \begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 1 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1/2880 \end{array} \right\rangle \sim \left\langle \begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & 1 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1/2880 \end{array} \right\rangle \sim \left\langle \begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & -1/960 \\ 0 & 1 & 0 & 1/480 \\ 0 & 0 & 1 & -1/2880 \end{array} \right\rangle. \end{aligned}$$

Таким образом, главная часть  $\Delta(\xi, \tau)$  (с относительным вкладом порядка  $\sigma(\tau)^{-4}$  (см. (39)–(41) и (23)) имеет вид

$$f_1(\xi, \tau) = \frac{e^{-\frac{\xi^2}{2\sigma(\tau)^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma(\tau)}} \frac{1}{\sigma^4(\tau)} \left( -\frac{1}{960} + \frac{1}{480} \left( \frac{\xi}{\sigma(\tau)} \right)^2 - \frac{1}{2880} \left( \frac{\xi}{\sigma(\tau)} \right)^4 \right). \tag{48}$$

Рисунок 3 показывает, как  $f_1(\xi, \tau)$  (кривая 2) в момент времени  $\tau = 0,5 \tau^*$  вписывается в отклонение  $\Delta(\xi, \tau)$  плотности вероятности  $f(\xi, \tau)$  от своего асимптотического выражения  $f_0(\xi, \tau)$ . Учет  $f_1(\xi, \tau)$  позволяет вычислить  $f(\xi, \tau)$  с относительной погрешностью порядка  $\sigma(\tau)^{-6}$ .

Отклонение первого приближения  $f_1(\xi, \tau)$  (см. (39)) от точного выражения (34) для  $\Delta(\xi, \tau)$  представлено на рисунке 4 (кривая 1).

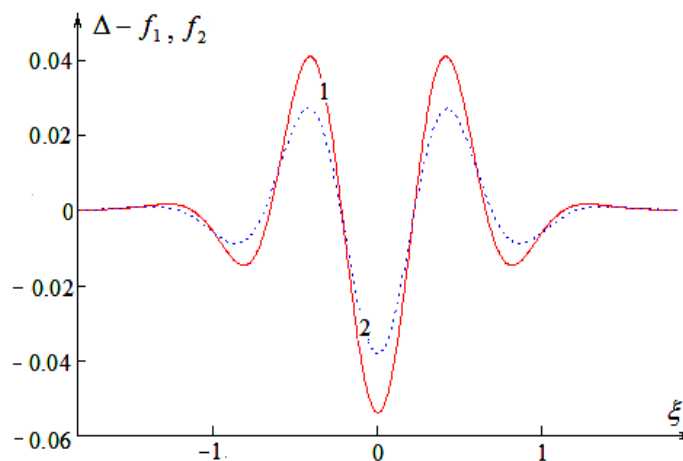


Рис. 4. Отклонение поправки порядка  $\sigma^{-6}$  (кривая 2) от погрешности первого приближения для  $\tau = 0,5 \tau^*$

Поведение построенной кривой позволяет искать фигурирующее в (39)  $\phi_6(\zeta)$  в виде

$$\phi_6(\zeta) = C_{60} + C_{62}\zeta^2 + C_{64}\zeta^4 + C_{66}\zeta^6. \tag{49}$$



Три уравнения для определения коэффициентов  $C_{6i}$  ( $i = 0, 2, 4, 6.$ ) получаются приравнением в левой и правой частях (46), (44), (42) коэффициентов при  $\sigma(\tau)^{-6}$ :

$$C_{60} + C_{62} + 3C_{64} + 15C_{66} = 0; \quad (50)$$

$$C_{60} + 3C_{62} + 15C_{64} + 105C_{66} = 0; \quad (51)$$

$$3C_{60} + 15C_{62} + 105C_{64} + 945C_{66} = 0. \quad (52)$$

Для получения четвертого уравнения необходимо вычислить приведенный момент шестого порядка. Поскольку его нужно выразить через  $\sigma(\tau)^2$ , используем в рекуррентном уравнении (15) функцию  $\mu_2(\tau)$  в качестве аргумента. Приняв во внимание (18) и первое равенство в (42), получим

$$\mu_6(\tau)' = \frac{d\mu_6}{d\mu_2} \frac{d\mu_2}{d\tau} = 2 \frac{d\mu_6}{d\mu_2} = 30\mu_4(\tau) = 90\mu_2^2(\tau) - \frac{1}{4}, \quad (53)$$

или

$$\mu_6(\tau) = \mu_6(0) + 15(\mu_2(\tau)^3 - \mu_2(0)^3) - \frac{1}{8}(\mu_2(\tau) - \mu_2(0)). \quad (54)$$

С помощью (9)–(11) вычислим

$$\mu_6(0) = \int_{-1/2}^{1/2} \xi^6 \partial \xi = \frac{1}{448}, \quad (55)$$

и приняв во внимание (17), найдем

$$\mu_6(0) - 15\mu_2(0)^3 + \frac{1}{8}\mu_2(0) = \frac{1}{252}, \quad (56)$$

Подставив результат в (54), выразим приведенный момент через  $\sigma(\tau)^2$  и запишем аналог (42):

$$E_6(\tau) = \frac{\mu_6(\tau)}{\sigma^6(\tau)} - 15 = \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{\sigma^{2k}(\tau)} \int_{-\infty}^{\infty} \zeta^6 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \varphi_{2k}(\zeta) d\zeta. \quad (57)$$

Прежде чем продолжить поиск последнего уравнения для определения коэффициентов  $\varphi_6(\zeta)$ , проведем с помощью (57) строгое доказательство справедливости вида, в котором искали  $\varphi_4(\zeta)$ . Увеличим степень полинома  $\varphi_4(\zeta)$ , добавив к правой части (41) слагаемое  $C_{46}\zeta^6$ . Тогда систему (47), (45), (43) следует модифицировать (добавив в матрицу коэффициентов при неизвестных четвертый столбец) и дополнить четвертым уравнением, получаемым приравнением в левой и правой частях (57) коэффициентов при  $\sigma(\tau)^{-4}$ :

$$15C_{40} + 105C_{42} + 945C_{44} + 945 \cdot 11C_{46} = -1/8. \quad (58)$$

Подставив в (58) ранее найденные  $C_{40} = -1/960$ ,  $C_{42} = 1/480$ ,  $C_{44} = -1/2880$ , получим, что  $C_{46} = 0$ , то есть модификация (47), (45), (43) не принципиальна и изначально использованное разложение (41) было верным.

Возвратимся теперь к определению  $\varphi_6(\zeta)$ . Приравняв в (57) коэффициенты при  $\sigma(\tau)^{-6}$ , получим последнее уравнение искомой системы:

$$15C_{60} + 105C_{62} + 945C_{64} + 945 \cdot 11C_{66} = 1/252. \quad (59)$$

Решив совместно (50)–(52) и (59), с помощью (49), (39) построим кривую 2, представленную на рисунке 4. Видно, что поправка порядка  $\sigma(\tau)^{-6}$  хорошо вписывается в отклонение первого приближения от  $f(\xi, \tau)$ . Программа соответствующих расчетов, выполненных в среде пакета MathCAD, представлена на рисунке 5.

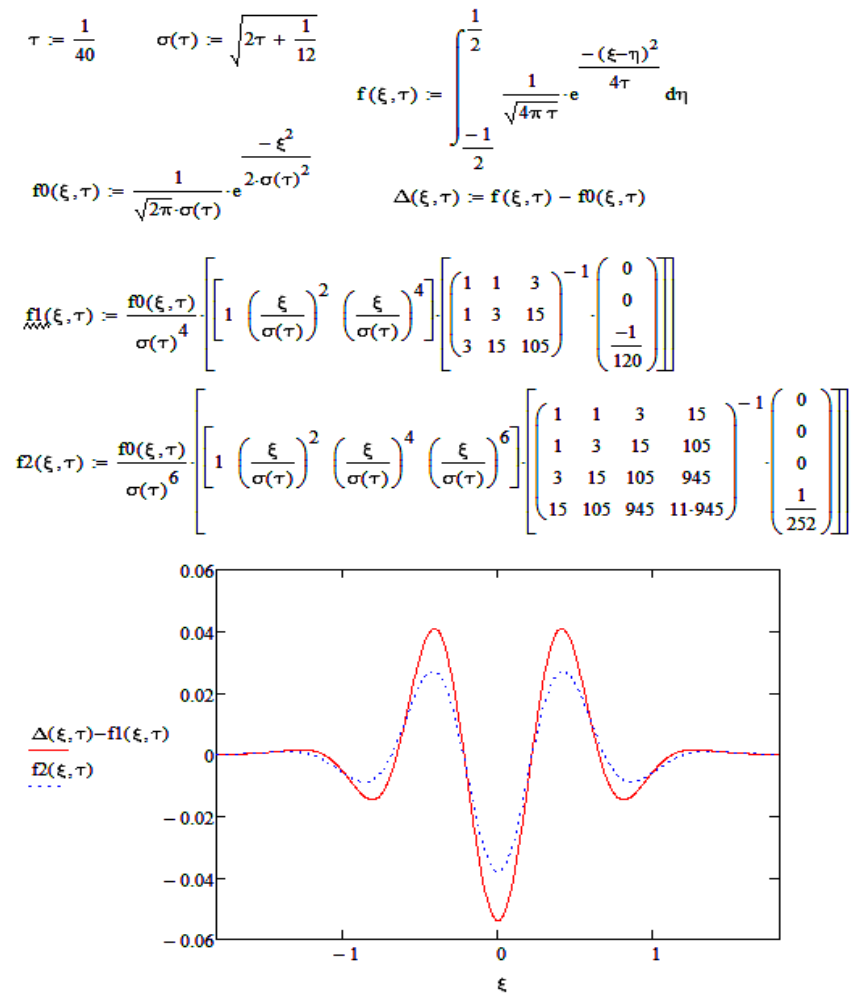


Рис. 5. Программа расчета поправок к асимптотике плотности вероятности координаты диффундирующей молекулы примеси

Таким образом, структура матрицы коэффициентов системы алгебраических уравнений для определения коэффициентов полиномов  $\varphi_{2k}(\zeta)$  понятна. По столбцам и строкам коэффициенты представляют собой последовательность произведений нечетных чисел. Столбец свободных членов состоит из нулей за исключением последнего элемента, равного константе в разложении  $\mu_{2k}(\tau)$  по степеням  $\mu_2(\tau)$ . В частности, для  $k = 4$  с помощью (15), (16), (57), а также (9)–(11) получим значение этой константы:

$$\mu_8(\tau)' = 56 \left( 15\mu_2(\tau)^3 - \frac{1}{8}\mu_2(\tau) + \frac{1}{252} \right),$$

$$\mu_8(\tau) = \mu_8(0) + 105(\mu_2(\tau)^4 - \mu_2(0)^4) - \frac{14}{8}(\mu_2(\tau)^2 - \mu_2(0)^2) + \frac{28}{252}(\mu_2(\tau) - \mu_2(0)), \quad (60)$$

$$\mu_8(0) - 105\mu_2(0)^4 + \frac{14}{8}\mu_2(0)^2 - \frac{28}{252}\mu_2(0) = -\frac{1}{576}. \quad (61)$$

Найденная с помощью (61) поправка  $f_3(\xi, \tau)$  (см. (39)) позволяет в актуальном диапазоне  $\xi$  построить  $f(\xi, \tau)$  с погрешностью  $3 \cdot 10^{-3}$ , что, в отличие от изображенного на рисунке 1, уже неразличимо на глаз. Заметим также, что следующее из (60), (61) уравнение

$$E_8(\tau) = \frac{\mu_8(\tau)}{\sigma^8(\tau)} - 105 = -\frac{14}{8\sigma^4(\tau)} + \frac{28}{252\sigma^6(\tau)} - \frac{1}{576\sigma^8(\tau)} = \int_{-\infty}^{\infty} \zeta^8 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\varphi_{2k}(\zeta)}{\sigma^{2k}(\tau)} d\zeta \quad (62)$$

приводит после приравнивания коэффициентов при  $\sigma^{-4}$  и  $\sigma^{-6}$  соответственно к двум новым уравнениям относительно коэффициентов полиномов  $\varphi_4(\zeta)$  и  $\varphi_6(\zeta)$ :

$$105C_{40} + 945C_{42} + 945 \cdot 11C_{44} = -14/8, \tag{63}$$

$$105C_{60} + 945C_{62} + 945 \cdot 11C_{64} + 945 \cdot 11 \cdot 13C_{66} = 28/252. \tag{64}$$

Нетрудно убедиться, что они обращаются в тождество с помощью уже найденных значений. То есть учет эксцессов высших порядков необходим лишь для определения коэффициентов соответствующего полинома в разложении (39). Вместе с тем, поскольку числа в правых частях (63), (64) с точностью до знака совпадают с соответствующими коэффициентами при степенях  $\mu_2(0)$  в (61), найденные при получении предыдущих поправок коэффициенты  $C_{ki}$  ( $k = 4, 6, \dots, 2n - 2$ ), ( $i = 0, 2, \dots, k$ ) могут быть использованы для определения свободного члена системы уравнений относительно коэффициентов  $C_{2ni}$  следующего полинома. Предлагаемый подход позволяет исключить интегрирование рекуррентного соотношения (15) и полностью формализовать процесс получения поправок  $f_n(\xi, \tau)$  к асимптотическому выражению  $f_0(\xi, \tau)$ . Фрагмент соответствующей программы по отысканию  $f_3(\xi, \tau)$  представлен на рисунке 6.

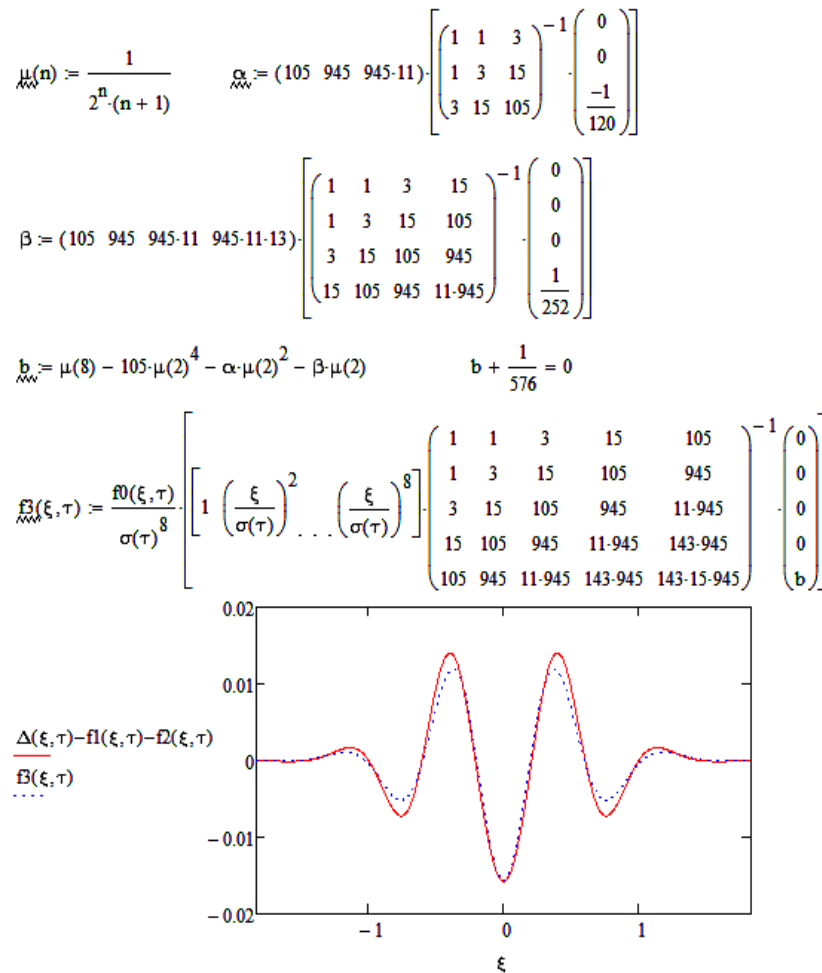


Рис. 6. Программа расчета поправки  $f_3(\xi, \tau)$  к плотности вероятности ( $\tau = 0,5 \tau^*$ )

Видим, что  $f_3(\xi, \tau)$  хорошо вписалась в отклонение погрешности  $\Delta(\xi, \tau)$  от своего второго приближения.

В заключение обсудим вопрос о сходимости ряда (39). Чтобы определить, при каких  $\tau$  она имеет место, заметим, что константа в разложении  $\mu_{10}(\tau)$  по степеням  $\mu_2(\tau)$  равна  $1/1584$ . То есть последова-

тельность отличных от нуля свободных членов в системах уравнений относительно коэффициентов полиномов  $\{-120^{-1}, 252^{-1}, -576^{-1}, 1584^{-1}, \dots\}$  убывает по модулю быстрее, чем  $2^{-n}/120$ . Поскольку столбцы свободных членов содержат только по одному отличному от нуля элементу, коэффициенты фигурирующих в (39) полиномов в соответствии с теоремой Крамера содержат в качестве общего множителя соответствующий элемент приведенной выше числовой последовательности. Знаменатель в разложении (39) должен убывать медленнее. Значит при  $\sigma^2(\tau) > 1/2$ , то есть (см. (18)) для  $\tau > 5/24$  ряд (39) будет сходиться, что и подтверждается численными расчетами.

**Выводы.** Предложена новая идеология поиска и исследования решений уравнений математической физики, описывающих явления переноса. Исходя из сути решаемой задачи, неизвестная функция заменяется плотностью вероятности некоторой случайной величины. Ее начальные и центральные моменты получаются с помощью самого уравнения (без его решения), а также связанных с ним начальных условий. Информация о моментах позволяет установить параметры и асимптотику переменной плотности вероятности введенной случайной величины. Разработана методика определения поправок к асимптотическому выражению дифференциальной функции распределения. В качестве примера рассмотрено диффузионное расплывание однородного концентрационного пятна в бесконечной трубке. Введена плотность вероятности координаты диффундирующей молекулы примеси. Получено рекуррентное уравнение для определения центральных моментов рассматриваемой случайной величины. Найдены среднее квадратическое отклонение и эксцесс функции распределения. Показано, что со временем формируется нормальное распределение координаты, причем погрешность при замене точного решения его асимптотическим выражением пропорциональна эксцессу функции распределения. Определены как функции координат и времени главная часть погрешности и поправки, связанные с учетом эксцессов высших порядков.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бугров, Я.С. Высшая математика / Я.С. Бугров, С.М. Никольский. – М.: Наука, 1989. – 464 с.
2. Ехилевский, С.Г. Теоретико-вероятностный подход к моделированию динамической сорбционной активности / С.Г. Ехилевский, О.В. Голубева, Д.В. Пяткин // Вестн. Полоц. гос. ун-та. Серия В. Промышленность. Прикладные науки. – 2013. – № 11. – С. 144–151.
3. Ехилевский, С.Г. Метод моментов и динамика сорбционной активности при малых временах / С.Г. Ехилевский, О.В. Голубева, С.А. Ольшанников // Вестн. Полоц. гос. ун-та. Серия В. Промышленность. Прикладные науки. – 2013. – № 3. – С. 150–156.
4. Гнеденко, Б.В. Курс теории вероятностей / Б.В. Гнеденко. – М.: Наука, 1988. – 451 с.
5. Гихман, И.И. Теория вероятностей и математическая статистика / И.И. Гихман, А.В. Скороход, М.И. Ядренко. – М., 1979. – 408 с.
6. Владимиров, В.С. Обобщенные функции в математической физике / В.С. Владимиров. – М.: Наука, 1979.

Поступила 10.03.2015

#### PROBABILITY-THEORETIC APPROACH TO THE SOLUTION OF THE EQUATION OF DIFFUSION

**S. EKHILEVSKIY, O. GOLUBEVA,  
E. POTAPENKO, S. OLSHANNIKOV**

*In work the new ideology of search and research of solutions of the equations of mathematical physics is offered. Proceeding from an essence of the solved task the quasistationary frequency function of some random variable connected with required function is entered. As an example diffusion in an infinite tube is considered. An asymptotic of differential distribution function and its parameters turn out by method of the moments by means of the equation, and also the related entry conditions. It is shown how the error when replacing the exact decision with its asymptotic expression is connected with distribution function excesses.*