МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

том **10** номер **6** год **1998**

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ

ВЕРОЯТНОСТНОЕ РЕШЕНИЕ НАЧАЛЬНО-КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ МАССОПЕРЕНОСА

© *В.А.Сиренек, А.Ф.Крючков*

С.-Петербургский государственный Технологический институт (технический университет)
198013, С.-Петербург, Загородный пр., 49.

Получены некоторые вероятностные представления решений краевых задач для телеграфного уравнения на полупрямой и на отрезке. Обсуждается применение метода Монте-Карло.

PROBABILISTIC SOLUTION OF THE BOUNDARY VALUE PROBLEM FOR THE HYPERBOLIC EQUATION OF THE MASS TRANSPORT

V.A.Sirenek, A.E.Kryuchkov

St.-Petersburg State Institute of Technology (Technical University)
198013, St.-Petersburg, Zagorodny pr., 49

Some probabilistic formulas for the solution of the boundary value problem for the telegraphist's equation on the semi-straight line and on the segment are given. An application of the Monte Carlo sampling technique is discussed.

1.Введение

При математическом описании нестационарных процессов массоэнергопереноса с учетом релаксационных эффектов с успехом используются гиперболические дифференциальные уравнения. Простейшим из них является так называемое волновое уравнение тепломассопереноса (уравнение волновой диффузии — в терминологии [1]):

$$\theta(\partial^2 c / \partial t^2) + \partial c / \partial t = D(\partial^2 c / \partial x^2), \tag{1}$$

где $c(t,x)$ — потенциал переносимого физического поля (в дальнейшем, для определенности, концентрация переносимой субстанции), D — коэффициент переноса (коэффициент диффузии), θ — время релаксации среды (время концентрационной релаксации). Для (1) имеет место соотношение $w^2 = D / \theta$, где w — конечная скорость распространения возмущений физического поля. При малых (относительно значений t) величинах θ (практически при $t>10\theta$) первым членом в левой части (1) можно пренебречь, тогда (1) переходит в параболическое уравнение (классическое уравнение диффузии Фика).

Однако на начальных стадиях (при $t<<\theta$) многих процессов, особенно связанных с диффузионно-химическим взаимодействием твердого тела с какими-либо реагентами (такие процессы лежат в основе многих современных производств), регистрируются, если использовать уравнение Фика, запаздывания диффузионных потоков. До сих пор эти эффекты мало изучены, и при моделировании напрямую, как правило, не учитываются. В этой связи оправдал себя феноменологический подход, основанный на использовании уравнения (1).

Нахождение приближенного решения (1) традиционными методами, используемыми в математической физике (например, методом конечных разностей), наталкивается на трудности, связанные с искажениями концентрационного фронта, возникающими при переходе от дифференциального уравнения к разностному. Принципиально иной подход к этой проблеме доставляют вероятностные методы, успешное применение которых к эллиптическим и параболическим уравнениям хорошо известно. Кроме того, что стохастический подход доставляет исследователю новую важную информацию об изучаемом объекте, он лишен отмеченных выше недостатков и позволяет использовать весьма простой численный метод — метод Монте-Карло.

Что касается вероятностного решения гиперболических уравнений, то отправной точкой исследований здесь принято считать работу М.Каца [2], где рассмотрена стохастическая модель (блуждание частицы на прямой), связанная с одномерным телеграфным уравнением (видоизмененным уравнением (1)), и получено вероятностное решение одной частной задачи Коши для этого уравнения. Кизинский [3] обобщил этот результат на случай задачи Коши с начальными условиями общего вида. В [4] получен трехмерный аналог формулы Кизинского и обсуждается ее численная реализация методом Монте-Карло, реализации же этим методом формулы Каца посвящена более ранняя статья [5]. В то же время мы не можем указать ссылок на работы, где подобным образом изучались бы краевые задачи для таких уравнений. В ряде публикаций связь гиперболических уравнений с марковскими процессами рассматривалась с более общих позиций (см., например, [6]–[8]), но и там затрагивалась лишь задача Коши.

В настоящей работе мы разбираем две простейшие краевые задачи для уравнения (1) — на полупрямой и отрезке, чему посвящены соответственно пункты 3 и 4. Для этого в п.2 вводится один марковский процесс; отметим сразу, что приведенная конструкция допускает значительное обобщение и более широкое применение (эти вопросы найдут отражение в других публикациях). В п.5 обсуждается численная реализация методом Монте-Карло вероятностных формул, полученных в предыдущих пунктах. В п.6 приводится пример краевой задачи для уравнения (1) на полупрямой, когда известна аналитическая формула решения, и сравниваются результаты расчетов, проводимых по этой и вероятностной формуле.

2. Связь гиперболических уравнений с марковскими процессами

Напомним некоторые основные определения [9]. Пусть некоторый однородный марковский процесс задан в фазовом пространстве L; $P(t,z,B)$ — переходная функция этого процесса. Всякой функции φ, ограниченной и измеримой на L, можно сопоставить функцию

$$u_t(z) = \int_L \varphi(y) P(t,z,dy), \quad t \ge 0, \quad z \in L, \tag{2}$$

а также функцию

$$\psi(z) = \lim_{t \to 0+} \left[(u_t(z) - \varphi(z)) / t \right],$$

если этот предел существует. Если, кроме того, предел существует равномерно по z, то говорят, что φ принадлежит области определения инфинитезимального оператора A, и символически записывают этот факт в виде $\varphi \in D_A$, $\psi = A\varphi$. Если $\varphi \in D_A$, то $u_t(z)$ удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению:

$$\partial u_t(z) / \partial t = A u_t(z). \tag{3}$$

Теперь опишем конкретный марковский процесс, который будет использован в настоящей работе. На плоскости (x,ν), где x — пространственная координата, а ν — скорость, выделим две параллельные прямые: (x,w) и $(x,-w)$ (w=const), объединение которых примем за фазовое пространство L. Пусть Z_t — состояние процесса в момент времени t. Иногда вместо $Z_t \in L$ удобнее применять обозначение (x_t, ν_t), где $x_t \in \mathbf{R}$, $\nu_t = \pm w$. Потребуем, чтобы случайный процесс из состояния (x_t, ν_t) за бесконечно малый промежуток времени $(t, t+dt)$ с вероятностью $1\text{-}adt+o(dt)$ переходил в состояние $(x_t+\nu_t dt, \nu_t)$, а с вероятностью $adt+o(dt)$ совершал скачок в область $(x_t+O(1), -\nu_t)$ на другой прямой (при этом $O(1)\to 0$ при $dt\to 0$). Существование и единственность процесса, соответствующего такому описанию, были доказаны еще Феллером [10]. В рассматриваемом нами случае (фазовое пространство состоит из двух прямых) функцию φ на L удобно представить как пару функций (φ_1, φ_2):

$$\varphi(x,w) = \varphi_1(x), \quad \varphi(x,-w) = \varphi_2(x), \qquad x \in \mathbf{R}.$$

Компоненты $u_t(z) = (u_t(x,w), u_t(x,-w))$ также обозначим через $u_1(t,x)$ и $u_2 t,x)$ соответственно. Инфинитезимальный оператор A марковского процесса получает тогда следующее матричное представление [7]:

$$A = \begin{pmatrix} w(\partial / \partial x) - a & a \\ a & -w(\partial / \partial x) - a \end{pmatrix}, \tag{4}$$

а уравнение (3) переходит в гиперболическую систему дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка:

$$\begin{cases} \partial u_1 / \partial t = w(\partial u_1 / \partial x) - a(u_1 - u_2), \\ \partial u_2 / \partial t = w(\partial u_2 / \partial x) - a(u_2 - u_1). \end{cases} \tag{5}$$

При t=0 левая часть (2) обращается в $\varphi(z)$, то есть $u_1(0,x) = \varphi_1(x)$, $u_2(0,x) = (\varphi_2 x)$. Из (5) получаем тогда следующие начальные условия:

$$(\partial u_1(t,x) / \partial t)\big|_{t=0} = w\varphi_1'(x) - a(\varphi_1(x) - \varphi_2(x)),$$
$$(\partial u_2(t,x) / \partial t)\big|_{t=0} = -w\varphi_2'(x) - a(\varphi_2(x) - \varphi_1(x)).$$

Относительно функции $u(t,x) = (u_1 + u_2)/2$ систему (5) несложно свести в одно уравнение второго порядка:

$$\partial^2 u \big/ \partial t^2 + 2a(\partial u / \partial t) = w^2 (\partial^2 u \big/ \partial t^2), \tag{6}$$

известное в литературе как телеграфное уравнение, (6) можно считать стохастическим аналогом уравнения (1). Очевидно, что начальные условия для (6) таковы:

$$u(0,x) = (\varphi_1(x) + \varphi_2(x)) / 2,$$
$$(\partial u(t,x) / \partial t)\big|_{t=0} = (w/2)(\varphi_1'(x) - \varphi_2'(x)).$$

Эти начальные условия можно варьировать, подбирая надлежащим образом $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$. В настоящей работе наибольший интерес представляет случай, когда $\varphi_1(x)\equiv\varphi_2(x)\equiv f(x)$, и в дальнейших выкладках мы, как правило, ограничиваемся этим случаем.

Выражение (2) можно переписать в виде

$$u_t(z) = E_z\{\varphi(Z_t)\}, \tag{7}$$

где E — оператор математического ожидания в предположении, что $Z_0=z$ (в нашем случае $Z_0=(x_0,\nu_0)$). Пусть $\xi(t) = \int\limits_0^t (-1)^{N(s)}\,ds$ случайное (рандомизированное) время, здесь $N(s)$ — пуассоновский процесс интенсивности a ($N(s)$ равно количеству перемен знака величины ν_s за время s).

Если при $t=0$ состояние марковского процесса имело пространственную координату, равную x, то в произвольный момент времени t пространственные координаты будут равны соответственно $x^{\wedge} = x + w\xi(t)$ и $x^{\wedge\wedge} = x - w\xi(t)$, в зависимости от того, на какой из двух параллельных прямых будет находиться Z_t. Решение $u(t,x)$ уравнения (6) с учетом (7) и сделанного допущения ($\varphi_1(x)=\varphi_2(x)=f(x)$) примет вид

$$u(t,x) = E\left\{(f(x^{\wedge}) + f(x^{\wedge\wedge}))/2\right\}, \tag{8}$$

так как

$$u(t,x) = (u_t(x,w) + u_t(x,-w))/2 =$$
$$= \left[E_{(x,w)}\left\{f(x^{\wedge})\right\} + E_{(x,-w)}\left\{f(x^{\wedge\wedge})\right\}\right]\Big/2.$$

Нетрудно заметить, что (8) представляет собой среднее значение от известной формулы Даламбера (формулы для решения задачи Коши соответствующего (6) волнового уравнения (уравнения (6) при a=0) с начальными условиями: $u(0,x) = f(x)$, $\partial u(t,x)/\partial x\big|_{t=0} = 0$) и рандомизированным временем. Формула (8) была получена еще Кацем [2] другим способом, конструкция же работы [2] получается из нашего марковского процесса, если отождествить точки, лежащие на параллельных прямых и имеющие одинаковые координаты x. Тогда получим случайное блуждание на одной прямой вправо (при $\nu=w$) и влево (при $\nu=-w$), перескоки же будут означать мгновенные перемены направления движения точки (частицы). Эту аналогию будем иногда использовать в дальнейшем.

Заметим также, что промежутки времени между моментами изменения скорости у нашего случайного процесса являются независимыми случайными величинами с одним и тем же показательным законом распределения. Согласно этому определяется траектория пуассоновского процесса [11].

3. Краевая задача на полупрямой

Рассмотрим традиционную задачу об одномерной диффузии примеси в полуограниченный образец, то есть краевую задачу для уравнения (6), где

$$\begin{aligned} &u(0,x) = 0, \quad (\partial u(t,x)/\partial x)\big|_{t=0} = 0 \text{ при } x > 0; \\ &u(t,0) = 1 \quad (t \ge 0). \end{aligned} \tag{9}$$

Сведем эту задачу к задаче Коши. Пусть $\tilde{u}(0,x) = \operatorname{sign}(x)$,

$\partial\tilde{u}(t,x)\partial x\big|_{t=0} = 0.$

Поскольку (6) инвариантно относительно замены x на $-x$, то, как легко видеть, $\tilde{u}(t,-x) = -\tilde{u}(t,x)$ и, в частности, $\tilde{u}(t,0) = 0$. Но тогда функция $u(t,x) = 1-\tilde{u}(t,x)$ $(x \geq 0)$ является решением задачи (9), что проверяется непосредственно. Более того, $u(t,x) = 1-\tilde{u}(t,x)$ сама по себе является решением задачи Коши для (6) с начальными условиями:

$$u(0,x) = f(x) = 1-\mathrm{sign}(x), \quad (\partial u(t,x)/\partial x)\big|_{t=0} = 0, \quad x \in \mathbf{R}. \tag{10}$$

Таким образом, решая задачу (10), получаем и решение краевой задачи (9).

Для нахождения $\varphi(Z_t)$ необходимо знать лишь x_t: u_t не влияет на $\varphi(Z_t)$ (в предположении, что $\varphi_1(x) \equiv \varphi_2(x)$). Из (10) следует, что $\varphi(Z_t)=1-\mathrm{sign}(x_t)$, а из (10) — что

$u_t(z)=E_z\{\varphi(Z_t)\} = 2P\{x_t < 0\}$.

Объединяя теперь все эти факты с формулой (8), получаем вероятностную трактовку решения краевой задачи (9):

$$u(t,x) = P\{x^{\wedge} < 0\} + P\{x^{\wedge\wedge} < 0\}. \tag{11}$$

4. Краевая задача на отрезке

Поставим теперь следующую краевую задачу для уравнения (6):

$$\begin{aligned} &u(0,x) = 0, \quad (\partial u(t,x)/\partial t)\big|_{t=0} = 0, \quad x \in (0,\Gamma); \\ &u(t,0) = 1, \quad (\partial u(t,x)/\partial x)\big|_{x=\Gamma} = 0, \quad t > 0. \end{aligned} \tag{12}$$

Граничное условие на правом конце отрезка ($x=\Gamma$) свидетельствует об отсутствии потока, то есть говоря общепринятым в теории случайных блужданий языком, эта граница играет роль отражающего экрана.

Для решения этой задачи изменим веденный выше марковский процесс Z_t следующим образом. Фазовым пространством L будем считать теперь объединение двух отрезков на плоскости (x,v): при $|x| \leq \Gamma$ для первого из них положим $v=-w$, для второго же $v=w$. Отождествим (склеим) точки с координатами $(-\Gamma,-w)$ и $(-\Gamma,w)$, а также $(\Gamma,-w)$ и (Γ,w), это необходимо для сохранения стохастической непрерывности процесса [12]. Считаем, что вероятности перехода за бесконечно малый промежуток времени $(t,t+dt)$ задаются как и прежде, за исключением двух случаев: $Z_t=(\Gamma,w)$, $Z_t=(-\Gamma,-w)$, в которых полагаем:

$$P\{t,(\Gamma,w),B\} = P\{t,(\Gamma,-w),B\}, \quad P\{t,(-\Gamma,-w),B\} = P\{t,(-\Gamma,w),B\}.$$

Иначе говоря, если процесс Z_t, двигаясь по второму отрезку, доходит до точки (Γ,w), то он мгновенно перескакивает на первый отрезок; аналогичная ситуация имеет место и с точкой $(-\Gamma,-w)$ на первом отрезке. При этих перескоках, разумеется, Z_t меняет направление движения на противоположное. Нетрудно заметить, что L становится, таким образом, гомеоморфным окружности. Что касается представления $\varphi(x,v)$ парой функций $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ на $[-\Gamma,\Gamma]$, то приходим к дополнительным условиям:

$$\varphi_1(\Gamma) = \varphi_2(\Gamma), \quad \varphi_1(-\Gamma) = \varphi_2(-\Gamma). \tag{13}$$

Инфинитезимальный оператор A по-прежнему определяется соотношением $\psi=A\varphi$, где для пары $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ также выполнены условия, аналогичные (13). Несложные выкладки показывают, что тогда

$$\varphi_1'(\Gamma) = -\varphi_2'(\Gamma), \quad \varphi_1'(-\Gamma) = -\varphi_2'(-\Gamma); \tag{14}$$

равенства вида (13), (14) имеют место и для компонент $u_t(z)$ при любом t:

$$u_1(t,\pm\Gamma) = u_2(t,\pm\Gamma); \quad \partial u_1(t,x)/\partial x\big|_{x=\pm\Gamma} = -\partial u_2(t,x)/\partial x\big|_{x=\pm\Gamma}$$

знак у $\pm\Gamma$ выбирается одинаковым в обеих частях формул). Отсюда для $u(t,x)=(u_1(t,x)+$ $+u_2(t,x))/2$ находим, что $(\partial u(t,x)/\partial x)\big|_{x=\pm\Gamma}=0$. Таким образом, для $u(t,x)$ выполнены все условия (12).

Решение задачи (6), (12) сведем, как и в предыдущем пункте, к задаче Коши. Для моделирования видоизмененного марковского процесса (обозначим его через Z_t^*) нами разработаны различные варианты. Остановимся на том из них, где Z_t^* представляется как функционал от Z_t [13]. Положим

$$x_t^* = x_t - 4n\Gamma,\quad \nu_t^* = \nu_t \ \text{при}\ (4n-1)\Gamma \le x_t \le (4n+1)\Gamma,$$

$$x_t^* = -(x_t - (4n-2)\Gamma,\quad \nu_t^* = -\nu_t \ \text{при}\ (4n-3)\Gamma \le x_t \le (4n-1)\Gamma,\quad n\in\mathbf{Z}.$$

Поскольку $\varphi(Z_t^*) = 1 - \mathrm{sign}(x_t - 4n\Gamma)$, при $(4n-2)\Gamma < x < (4n+2)\Gamma$, $n\in\mathbf{Z}$, получим первое начальное условие искомой задачи Коши:

$$u(0,x) = f(x) = 1 - \mathrm{sign}(x - 4n\Gamma)\ \text{при}\ (4n-2)\Gamma < x < (4n+2)\Gamma,\quad n\in\mathbf{Z}. \tag{15}$$

Таким образом, если обозначить через V следующее объединение:

$$\bigcup_n((4n-2)\Gamma, 4n\Gamma),\quad n\in\mathbf{Z},$$

то получаем формулу для решения краевой задачи (6), (12), аналогичную формуле (11):

$$u(t,x) = P\{x^{\wedge} \in V\} + P\{x^{\wedge\wedge} \in V\}. \tag{16}$$

5. Повышение эффективности метода Монте-Карло

При малых значениях произведения at точность вычислений по методу Монте-Карло можно повысить. Дело в том, что математическое ожидание числа скачков пуассоновского процесса $N(s)$ интенсивности a на промежутке $[0,t]$ равно at; если оно мало, большинство реализаций $N(s)$ окажется тождественным нулем на $[0,t]$. Поэтому имеет смысл разбить $E_z\{\varphi(Z_t)\}$ на два слагаемых, одно из которых соответствует случаю отсутствия скачков у $N(s)$ на $[0,t]$, а другое — противоположному случаю. Вероятность первого случая равна $\exp(-at)$, второго — $(1-\exp(-at))$. В первой ситуации процесс Z_t детерминирован: $x_t = x_0 + \nu_0 t$, $\nu_t = \nu_0$. Во второй нам требуется знать условное распределение $N(s)$ при $N(t)\ge 1$. Время s, за которое произошло n скачков пуассоновского процесса ($N(s)=n$), как уже отмечалось в п.2, представляется в виде суммы независимых одинаково показательно распределенных случайных величин: $s = \sum_{i=1}^{n} T_i$. Временные интервалы T_i независимы и имеют плотности распределения $a\exp(-as)$. Условие $N(t)\ge 1$ эквивалентно тому, что $T_1\le t$. Поскольку последнее касается лишь T_1, а T_n ($n\ge 2$) независимы от T_1, то их условные распределения не отличаются от безусловных. Условное же распределение величины T_1 имеет плотность

$$p(s) = \begin{cases} a\exp(-as)/(1-\exp(-at)) & \text{при}\ 0 \le s \le 1, \\ 0 & \text{при}\ s > t. \end{cases}$$

Используя преобразования Смирнова [14] и учитывая, что $T_1\ge 0$, реализацию T_1 можно получить из соотношения $\int_0^{T_1} p(s)ds = r_1$, где r_1 — случайная величина, равномерно распределенная на [0,1]. Отсюда $T_1=-(1/a)\ln(1-r_1(1-\exp(-at)))$. Моделирование временных интервалов T_i ($i>1$) удобно осуществлять по известной формуле [14]: $T_i=-(\ln r)/a$.

При реализации (11) мы можем воспользоваться формулой полной вероятности, например:

$$P\{x^{\wedge}<0\}=\exp(-at)P\{x^{\wedge}<0|N(t)=0\}+(1-\exp(-at))P\{x^{\wedge}<0|N(t)\geq 1\}.$$

Первая вероятность в правой части здесь, очевидно, равна нулю, если $x+wt\geq 0$, и единице в противном случае; вторая же находится приближенно посредством моделирования условного процесса. Для второго слагаемого формулы (11) рассуждения аналогичны. Так как в нашей задаче величина $x+wt$ не может быть отрицательной, формуле (11) можно придать следующий вид:

$$u(t,x)=\exp(-at)\cdot\delta+(1-\exp(-at))\left[P\{x^{\wedge}<0|N(t)\geq 1\}+P\{x^{\wedge\wedge}<0|N(t)\geq 1\}\right], \qquad (17)$$

где δ равно 0, если $x-wt\geq 0$, и 1 в противном случае.

Аналогичное (17) выражение для $u(t,x)$ можно получить и для краевой задачи на отрезке. Тогда (16) заменяется на

$$u(t,x)=\exp(-at)\cdot\delta+(1-\exp(-at))\left[P\{x^{\wedge}\in V|N(t)\geq 1\}+P\{x^{\wedge\wedge}\in V|N(t)\geq 1\}\right],$$

где δ равно 0, если $x-wt$ принадлежит V, и 1 в противном случае.

6. Пример приложения: расчет начальных стадий диффузии в твердых телах

Математическое описание начальной стадии выхода какого-либо вещества из некоторого образца в результате диффузии в простейшем случае представляет собой краевую задачу на полупрямой. Для уравнения волновой диффузии (1) с типовыми начальными и граничными условиями в безразмерных переменных эта задача имеет вид

$$\partial^2 Y/\partial T^2+\partial Y/\partial T=\partial^2 Y/\partial X^2, \qquad (18)$$

$$Y(0,X)=1, \quad (\partial Y/\partial T)|_{T=0}=0 \quad (X\geq 0); \quad Y(T,0)=0 \quad (T>0). \qquad (19)$$

Здесь $Y(T,X)=(c(T,X)-c_2)/(c_1-c_2)$; $T=t/\theta$, $X=x(D\theta)^{1/2}$; постоянные c_1, c_2 — значения концентрации выходящего вещества соответственно в толще образца и на границе с реагентом (в данной задаче $c_1>c_2$).

Отметим, что эта математическая модель использовалась одним из авторов настоящей статьи при расчете процесса выщелачивания стекла [15].

Аналитическое решение задачи (18), (19) известно [16]:

$$Y(T,X)=1-(X/2)\int_X^T\left[\exp(-\tau/2)I_1((\tau^2-X^2)^{1/2}/2)(\tau^2-X^2)^{-1/2}\right]d\tau-$$
$$-\exp(-X/2) \text{ при } X\leq T, \quad Y(T,X)=1 \text{ при } X>T. \qquad (20)$$

В (20) $I_1(\ )$ — модифицированная функция Бесселя первого рода первого порядка. По графику $Y(T,X)$ (см. рис.1) видно, что в каждый момент времени T в образце имеется невозмущенная область (при $X>T$) и область, соответствующая проработанному в результате диффузии слою ($X\leq T$). Вертикальный фронт профиля распространяется в толщу образца с постоянной скоростью (для задачи (18), (19) эта скорость равна единице). Скачок концентрации на фронте профиля, равный $\exp(-X/2)$, со временем уменьшается, сглаживание происходит при больших (относительно 1) значениях T.

Кинетика моделируемого процесса изучалась в [17] на основе анализа зависимостей его интегральных характеристик от времени. Одной из таких характеристик является глубина продвижения профиля концентрации, пропорциональная количеству вещества, вышедшему из образца. В качестве оценки этой глубины рассмотрим среднюю интегральную величину $H(T)$, определяемую для задачи (18), (19) по формуле

$$H(T) = \int_0^{+\infty} (1 - Y(T, X))dX. \tag{21}$$

В дальнейшем мы получим для $H(T)$ вероятностную трактовку.

Вернемся к уравнению (18) и рассмотрим его с вероятностной точки зрения, изложенной в п.2. Очевидно, в этой интерпретации мы сталкиваемся с частным случаем (6), когда w=1, a=0.5. Так как для приведенной концентрации решение задачи о выходе вещества из образца $Y(T,X)$ и решение задачи о входе вещества в образец $U(T,X)$ в сумме дают единицу, то, используя (11), получаем следующее выражение для решения (18), (19):

$$Y(T, X) = 1 - P\{\xi(T) > X\} - P\{\xi(T) < -X\} = P\{|\xi(T)| < X\}. \tag{22}$$

Функция $P\{|\xi(T)| < X\}$ (обозначим ее для краткости через $F(X)$) — это функция распределения случайного смещения $|\xi(T)|$ блуждающей частицы. Как уже отмечалось, $Y(T,X)$ при фиксированном T имеет один скачок при $X=T$ (фронт волны), а в остальных точках (при $X>T$) непрерывна. Таким образом, $F(X)$ относится к смешанным распределениям случайных величин: непрерывная составляющая связана с непрерывным распределением времен скачков пуассоновского процесса, а дискретная — с отсутствием этих скачков.

В табл. 1 приведены значения концентрации $Y(T,X)$, рассчитанные по формулам (20) и (22). При численной реализации вероятностной формулы (22) методом Монте-Карло моделировалось 10^5 траекторий процесса Пуассона.

Таблица 1.

Значения приведенной концентрации $Y(T,X)$, рассчитанные двумя различными методами

T\X	0.01	0.1	0.5	1	3	10
0.01	0.050 / 0.0048	1	1	1	1	1
0.1	0.0049 / 0.0046	0.0490 / 0.0491	1	1	1	1
0.5	0.0044 / 0.0043	0.0444 / 0.0452	0.2212 / 0.2207	1	1	1
1	0.0040 / 0.0042	0.0401 / 0.0394	0.1995 / 0.2005	0.3169 / 0.3188	1	1
3	0.0029 / 0.0029	0.0293 / 0.0300	0.1461 / 0.1471	0.2892 / 0.2901	0.7767 / 0.7753	1
10	0.0018 / 0.0016	0.0179 / 0.0175	0.0896 / 0.0861	0.1780 / 0.1717	0.5010 / 0.4883	0.9933 / 0.9931

Верхние значения профиля концентрации $Y(T,X)$ рассчитаны по детерминированной формуле (20), нижние — по вероятностной формуле (22).

На основе полученного результата можно заключить, что с вероятностной точки зрения глубина продвижения концентрационного профиля, соответствующая уровню концентрации α, представляет собой α-квантиль (H_α) распределения $F(X)$ (то есть $F(H_\alpha)=\alpha$). На практике эту глубину исследуют на уровнях α=0.4-0.6. В целях избежания произвола в выборе уровня концентрации α естественно рассматривать среднее значение величины H_α. Как известно [14], некоторая случайная величина совпадает по распределению со своей α-квантилью, если α равномерно распределена на отрезке [0,1]; совпадение же распределений случайных величин влечет за собой равенство математических ожиданий. В нашем случае имеем:

$$E\{|\xi(\tau)|\} = E\{H_\alpha\} = \int_0^1 H_\alpha\, d\alpha.$$

Учитывая, что $|\xi(\tau)| \geq 0$, применяем интегрирование по частям:

$$E\{|\xi(\tau)|\} = \int_0^{+\infty} XdF(X) = -\int_0^{+\infty} Xd(1-F(X)) = \int_0^{+\infty}(1-F(X))dX.$$

Здесь X,T — безразмерные величины; $Y=Y(T,X)$ — относительная концентрация; H_α — α-квантиль распределения $F(X)$.

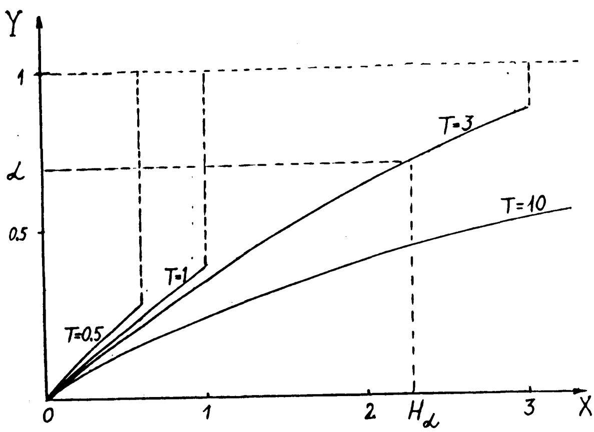

Рис.1. Концентрационные профили, соответствующие модели (18), (19).

Теперь, с учетом (21), (22) получаем выражение $H(T)$ в виде математического ожидания случайного смещения $|\xi(\tau)|$:

$$H(T) = E\{|\xi(\tau)|\}. \tag{23}$$

В [17] было получено аналитическое выражение для $H(T)$ в случае задачи (18), (19):

$$H(T) = T\exp(-T/2)(I_0(T/2) + I_1(T/2)), \tag{24}$$

где $I_0(\,)$ — модифицированная функция Бесселя первого рода нулевого порядка.

В табл. 2 приведены значения $H(T)$, вычисленные по формулам (24) и (23); причем вычисления по последней проводились методом Монте-Карло с тем же числом реализаций —

10^5. Как видно из этой таблицы, выборочное среднее квадратичное отклонение σ со временем заметно растет.

Таблица 2.
Значения эффективной глубины $H(T)$, вычисленной двумя различными методами**)

T	0.01	0.1	0.5	1	3	5	10
$H(T)_1$	0.01	0.0976	0.4446	0.8015	1.7594	2.3832	3.4751
$H(T)_2$	0.01	0.0975	0.4446	0.8021	1.7536	2.3825	3.4541
σ	0.0003	0.0126	0.1238	0.3052	1.0032	1.5262	2.4351

**)$H(T)_1$ — вычислены по детерминированной формуле (24);
$H(T)_2$ — вычислены по вероятностной формуле (23).
σ — выборочное средне-квадратичное отклонение.

Численные эксперименты, проведенные на конкретных примерах, показывают, что вероятностные формулы (22), (23) с приемлемой для практики точностью можно применять для достаточно широкого диапазона времен. Вероятностное исследование задачи о диффузии в твердых телах, имеющее в настоящем разделе чисто иллюстративный характер, позволило сделать достаточно важные в практическом отношении выводы. Адекватность математической модели (18), (19) конкретному диффузионному процессу (моделирование на макроуровне) и наличие вероятностной трактовки его основных характеристик дает предпосылку для моделирования этого процесса на микроуровне — использование случайного блуждания, порождающего уравнение (18), в качестве модели миграции носителей в процессе диффузии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. И.Н.Таганов. Моделирование процессов массо- и энергопереноса. Нелинейные системы. — Л.: Химия, 1979.
2. М.Кац. Несколько вероятностных задач физики и математики. — М.: Наука, 1967.
3. J.Kisynski. On M.Kac's probabilistic formula for the solution of the telegraphist's equations. // Ann.Polonici Math., 1974, v.29, p.259-272.
4. А.Ф.Крючков, В.А.Сиренек. О численно-вероятностных методах решения трехмерного гиперболического уравнения диффузии // Ж.вычисл. матем. и матем. физики, 1998, т.38, №1, с.107-114.
5. В.А.Сиренек, И.Н.Таганов. Решение гиперболического уравнения диффузии методом Монте-Карло // Вопросы математического моделирования и оптимизации. — Л.: ЛТИ им.Ленсовета, 1977, с.64-75. Деп. в НИИТЭХИМ (г. Черкассы), №1191/77.
6. R.Hersh. Stochastic solutions of hyperbolic equations. // Lect. Notes Math., 1975, v.446, p.283-300.
7. В.А.Сиренек, Н.В.Кузичкин. Вероятностное решение гиперболических моделей гетерогенного катализа. // Каталитические процессы и катализаторы. — Л.: ЛТИ им.Ленсовета, 1987, с.122-128.
8. А.Ф.Крючков, В.А.Сиренек. Марковские процессы и некоторые гиперболические уравнения математической физики. // Математика в вузе – стандарты образования. Тр. межд. научно-метод. конф., С.-Петербург: ГТУ, 1996, с.176.
9. И.И.Гихман, А.В.Скороход. Теория случайных процессов. Т.2. — М.: Наука, 1973.
10. В.Феллер. К теории стохастических процессов (теоремы существования и единственности) // УМН, 1938, вып.5, с.57-96.
11. И.М.Соболь. Численные методы Монте-Карло. — М.: Наука, 1973.
12. Ю.В.Прохоров, Ю.А.Розанов. Теория вероятностей. — М.: Наука, 1973.

13. В.А.Сиренек, А.Ф.Крючков. Решение граничных задач для гиперболических систем с использованием функционалов от марковских процессов // Математика в вузе. Тр. межд. научно-метод. конф., С.-Петербург: ГТУ, 1997, с.189-190.
14. С.М.Ермаков. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. — М.: Наука, 1975.
15. В.А.Сиренек, И.Н.Таганов. Математическая модель нестационарного выщелачивания стекол // Физ. и хим. стекла, 1981, т.7, №5, с.637-640.
16. B.Conicaux. La "pouse conductive" liberee de ses paradoxes Nouveaux calculas sur le regime variable faisant suite a un echelon de la temperature faciale sur une paroi plane semiinfinite. // EPE, 1967, v.3, №3, p.10-35.
17. V.A.Sirenek, V.A.Cholodnov, I.N.Taganov. Mathematische Modellierung des instationaren Auslaugens von Glas unter Beachtung der Verzogerung der Diffusionsstrome. // Wiss. Zeitschr. TH Leuna-Merseburg, 1987, -Bd.29, №4, s.470-478.

Поступила в редакцию 10.07.97