МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

МАТЕМАТИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра фундаментальної та прикладної математики

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА МАГІСТРА

на тему: **«МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЇ»**

Виконала: студентка 2 курсу, групи 8.1113-з

спеціальності 111 Математика
(шифр і назва спеціальності)

освітньої програми Математика
(назва освітньої програми)

С. І. Бабіч
(ініціали та прізвище)

Керівник доцент кафедри фундаментальної та прикладної математики, доцент, к.ф.-м.н. Клименко М.І
(посада, вчене звання, науковий ступінь, прізвище та ініціали)

Рецензент професор кафедри програмної інженерії, доцент, к.ф.-м.н. Кудін О.В
(посада, вчене звання, науковий ступінь, прізвище та ініціали)

Запоріжжя – 2024

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет математичний

Кафедра фундаментальної та прикладної математики

Рівень вищої освіти магістр

Спеціальність 111 Математика
(шифр і назва)

Освітня програма Математика

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри
фундаментальної математики,
професор, д.т.н
_____ Гребенюк С.М.
(підпис)

« ____ » _____ 2024 р.

З А В Д А Н Н Я

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ СТУДЕНТЦІ

Бабіч Світлані Ігорівні
(прізвище, ім'я та по-батькові)

1. Тема роботи (проекту) Математичне моделювання процесів дифузії

керівник роботи (проекту) Клименко Михайло Іванович, к.ф.-м.н., доцент
(прізвище, ім'я та по-батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом ЗНУ від «01» 03 2024 року № 384-с

2. Строк подання студентом роботи 29.11. 2024 р

3. Вихідні дані до роботи 1. Постановка задачі.
2. Перелік літератури.

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити)
1.Поняття та основні характеристики математичної моделі
2.Основи математичного моделювання процесів дифузії
3.Вдосконалення математичного моделювання процесів дифузії

5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень)
Презентація

6. Консультанти розділів роботи

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв

7. Дата видачі завдання 10.03.2024 р

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів кваліфікаційної роботи	Строк виконання етапів роботи	Примітка
1.	Розробка плану роботи.	03.09.24-08.09.24	
22.	Збір вихідних даних.	09.09.24-25.09.24	
3.	Обробка методичних та теоретичних	26.09.24-01.10.24	
	джерел.		
4.	Розробка першого розділу.	01.10.24-08.10.24	
5.	Розробка другого і третього розділів.	08.10.24-24.10.24	
6.	Оформлення та нормоконтроль	25.10.24-17.11.24	
	кваліфікаційної роботи.		
7.	Захист кваліфікаційної роботи.	10.12.24	

Студент _____ С.І. Бабіч
(підпис) (ініціали та прізвище)

Керівник роботи _____ М.І. Клименко
(підпис) (ініціали та прізвище)

Нормоконтроль пройдено

Нормоконтролер _____ О.Г. Спиця
(підпис) (ініціали та прізвище)

РЕФЕРАТ

Кваліфікаційна робота магістра «Математичне моделювання процесів дифузії»: 75 с., 14 джерел

ДИФУЗІЯ, КОНЦЕНТРАЦІЯ РЕЧОВИНИ, КРАЙОВА ЗАДАЧА, ОПЕРАЦІЙНИЙ МЕТОД, ПЕРЕТВОРЕННЯ ЛАПЛАСА, РІВНЯННЯ ДИФУЗІЇ, РІВНЯННЯ ЛАПЛАСА.

Об’єкт дослідження – математичні моделі дифузії та методи розв’язання задач дифузії. Предмет дослідження – процеси дифузії у різноманітних середовищах.

Мета роботи – дослідження математичних моделей дифузії та визначення можливості та умов застосування операційного методу до розв’язання задач дифузії.

Методи дослідження – математичне моделювання та операційний метод.

У роботі здійснено дослідження існуючих основних математичних моделей процесів дифузії. Здійснено аналіз основних методів розв’язання задачі дифузії. Розглянуто метод функцій Гріна, метод Фур’є, метод інтегральних перетворень. У роботі проаналізовані практично найбільш важливі задачі дифузії, зокрема вісесиметричну задачу, задачі дифузії у динамічному та активному середовищі та задачу екологічного прогнозування. Виконано дослідження особливостей та умов застосування операційного методу для розв’язування задач дифузії. Розв’язано операційним методом задачі дифузії з різними типами крайових та початкових умов. Перспективи подальших досліджень пов’язано з розв’язанням крайових задач для нелінійних моделей дифузійних процесів та використанням операційного методу для розв’язування таких задач.

SUMMARY

Master’s Qualification Thesis "Mathematical modeling of diffusion processes": 75 pages, 14 sources.

DIFFUSION, SUBSTANCE CONCENTRATION, EDGE PROBLEM, OPERATIONAL METHOD, LAPLACE TRANSFORMATION, DIFFUSION EQUATION, LAPLACE EQUATION.

Object of research - mathematical models of diffusion and methods for solving diffusion problems. The subject of research is diffusion processes in various media.

The purpose of the work is to study mathematical models of diffusion and determine the possibility and conditions for applying the operational method to solving diffusion problems.

Research methods - mathematical modeling and operational method.

The paper studies the existing basic mathematical models of diffusion processes. The analysis of the basic methods for solving the diffusion problem is carried out. The method of Green's functions, Fourier's method, method of integral transformations are considered. The paper analyzes almost the most important problems of diffusion, in particular the asymmetric problem, the problem of diffusion in a dynamic and active environment and the problem of ecological forecasting. The study of features and conditions of application of the operational method for solving diffusion problems is carried out. Solved by the operational method of the diffusion problem with different types of boundary and initial conditions. Prospects for further research are connected with the solution of boundary value problems for nonlinear models of diffusion processes and the use of an operational method to solve such problems.

ЗМІСТ

Завдання на кваліфікаційну роботу на кваліфікаційну роботу 2
Реферат 4
Summary 5
Вступ 7
1 Математичне моделювання процесів дифузії 9
1.1 Рівняння дифузії 9
1.2 Нестаціонарні крайові умови 12
1.3 Рівняння дифузії у циліндричних та сферичних координатах 25
2 Розв’язання спеціальних задач дифузії 31
2.1 Двовимірна вісесиметрична задача дифузії 31
2.2 Автомодельні розв’язки рівняння дифузії 37
2.3 Моделювання дифузійних процесів перенесення у динамічному середовищі 40
2.4 Дифузійний процес у активному середовищі 44
2.5 Задача екологічного прогнозування 49
3 Операційний метод розв’язування задач дифузії 54
3.1 Сутність операційного методу 54
3.2 Приклади розв’язання задачі дифузії операційним методом 62
Висновки 73
Перелік Посилань 75

ВСТУП

Створення нових технологій та технічних пристроїв, що розширюють можливості людей, пов’язані з використанням результатів фундаментальних досліджень. Перехід від отриманих у них теоретичних результатів до практичного їх використання пов’язано з необхідністю математичного моделювання. Використання математичного моделювання та обчислювального експерименту дозволяє вирішити завдання вибору оптимальної альтернативи для нового технічного вирішення проблеми. У зв’язку з цим зростає актуальність важливості досліджень у сфері математичного моделювання.

Прикладом такого дослідження є ця магістерська робота. Її мета – дослідження математичних моделей дифузії та визначення можливості та умов застосування операційного методу до розв’язання задач дифузії.

Об’єктом дослідження у магістерській роботі є математичні моделі дифузії та методи розв’язання задач дифузії. Предмет дослідження – процеси дифузії у різноманітних середовищах.

Для досягнення мети дослідження у роботі потрібно вирішити наступні задачі:

- дослідити існуючі основні математичні моделі процесів дифузії та основні фундаментальні закони природи, на які вони спираються;
- виконати аналіз основних методів розв’язання рівнянь дифузії – застосування функцій Гріна, методу Фур’є, інтегральних перетворень;
- дослідити особливості застосування методів розв’язання спеціальних типів задач дифузії, наприклад, вісесиметричної задачі, задачі моделювання дифузії у динамічному та активному середовищі, задачі екологічного прогнозування;

- проаналізувати особливості та умови застосування операційного методу для розв’язування задач з крайовими та початковими умовами для рівнянь у частинних похідних, зокрема для рівняння дифузії;
- розв’язати операційним методом задачі дифузії з різними типами крайових та початкових умов.

Останнім часом математичні моделі дифузійних процесів знайшли широке застосування у різноманітних галузях наукових досліджень, зокрема, у біології, біофізиці, екології. Це пояснюється, що всі живі системи є далекими від термодинамічної рівноваги, вони відкриті для потоків речовини та енергії. Для моделювання процесів переносу речовини та енергії використовують рівняння дифузії. Такі системи є складні для математичного моделювання, оскільки вони мають неоднорідну структуру та ієрархічну систему регуляції процесів при зміні внутрішнього стану та зовнішнього середовища системи, що є об’єктом моделювання. Тому математичне моделювання біологічних та соціальних систем полягає не у відображенні у математичній формі системи, а деяких якісних та кількісних характеристик процесів, що відбувається у таких системах.

Моделі у вигляді рівняння дифузії застосовуються при побудові математичних моделей тепло- та масо-обмінних процесів. Задачі математичного моделювання дифузійних процесів виникають у фізиці сплаві, механіки композитів, контактних задач при дослідження перехідного шару у зоні контакту між елементами з різних матеріалів. При розробці математичних моделей для проєктування процесів видобутку сланцевого газу та нафти використовують рівняння дифузії. Таким чином, сфера застосування математичних моделей дифузії постійно розширюється.

1 МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЇ

1.1 Рівняння дифузії

В процесі дифузії шуканою функцією є концентрація дифузної речовини, що залежить від координат точки та часу *t*. Позначимо її $\mathrm{c} = \mathrm{c}(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z}, \mathrm{t})$. Фізична сутність процесу дифузії подібна до процесу поширення тепла і вони моделюються аналогічними за структурою диференціальним рівнянням в частинних похідних другого порядку. Введена нами функція концентрація дифузної субстанції $\mathrm{c}(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z}, \mathrm{t})$ задовільняє рівнянню

$$\frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \mathrm{t}} = \mathrm{D}\Delta \mathrm{c}, \tag{1.1}$$

що є тотожним рівнянню теплопровідності. Додатній коефіцієнт D називається коефіцієнтом дифузії. Додатковими умовами для рівняння дифузії (1.1) є крайові умови та початкова умова. Початкова умова

$$C|_{\mathrm{t}-0} = \mathrm{f}(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z}), \tag{1.2}$$

задає початкову концентрацію. Крайові умови для цього рівняння визначають концентрацію дифузної речовини на межі області та її потік через цю межу. Таким чином, крайові умови мають вигляд:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \mathrm{n}}|_{\Gamma} = 0, \\ &\mathrm{c}|_{\Gamma} = 0, \end{aligned} \tag{1.3}$$

де Г-межа області в якій відбувається дифузія. Умова(1.3.1) означає, що Г є непроникною для дифузної речовини стінкою, а умова(1.3.2) задає концентрацію на межі Г.

Для лінійної одновимірної задачі дифузії в тонкій нескінченій трубці з непроникною стінкою математична модель складається з рівняння дифузії та початкової умови:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, C|_{t-0} = f(x).$$

Для цієї математичної моделі аналогом є математична модель розповсюдження тепла у нескінченному стержні. У рівняння дифузії для цього випадку у порівнянні з аналогічним рівнянням теплопровідності змінились лише позначення невідомої функцій та коефіцієнтів рівняння.

У більшості цікавих задач з точку зору практики коефіцієнт дифузії D є змінним. Це приводить до подальшого ускладнення задачі. Дослідники виділяють три найпоширеніші випадки змінного коефіцієнту дифузії для лінійних задач.

І Насамперед D залежить від температури . Оскільки температура до математичної постановки задачі явно не входить, але закон залежності температури від часу як правило, відомий, то коефіцієнт дифузії може розглядатися як функція часу:$D = D(t)$. Рівняння дифузії стає рівнянням зі зміним коефіцієнтом:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D(t)\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \quad (1.4)$$

Однак це рівняння легко привести до більш простого вигляду, вводячи замість змінної t нову змінну $D(t)$:

$$\vartheta = \int_0^t D(\tau)d\tau.$$

Оскільки $\mathrm{D} > 0$, то $\vartheta = \vartheta(\mathrm{t})$ монотонно зростає з t (а при $\mathrm{t} = 0$ також $\vartheta = 0$).Тому існує однозначна обернена функція $\mathrm{t} = \mathrm{t}(\vartheta)$ так що концентрацію можна вважати функцією x і ϑ. Але

$$\frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \mathrm{t}} = \frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \vartheta}\frac{\partial \vartheta}{\partial \mathrm{t}} = \frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \vartheta}\mathrm{D}(\mathrm{t})$$

(так як $\frac{\partial \vartheta}{\partial \mathrm{t}} = \mathrm{D}(\mathrm{t})$. Тому маємо спрощення рівняння (1.4). Воно набуває вигляду:

$$\frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \vartheta} = \frac{\partial^2 \mathrm{c}}{\partial \mathrm{x}^2}.$$

Початкова умова не змінюється: $\mathrm{C}|_{\vartheta=0} = \mathrm{f}(\mathrm{x})$, крайова умова також залишається незмінною.

II Якщо не брати до уваги зміни коефіцієнта дифузії з часом (наприклад, якщо процес дифузії відбувається при постійній температурі), то коефіцієнт дифузії D не повинен бути все ж таки бути сталим. Процес дифузії може відбуватися в неоднорідному середовищі і тоді D буде залежить від просторової координати x: $\mathrm{D} = \mathrm{D}(\mathrm{x})$. У цьому випадку рівняння дифузії набуває вигляд:

$$\frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \mathrm{t}} = \mathrm{D}(\mathrm{x})\frac{\partial^2 \mathrm{c}}{\partial \mathrm{x}^2} \qquad (1.5)$$

для розв’язання є значно складнішим, ніж рівняння(1.4), так як до його складу входить друга похідна невідомої функції, по змінній x, від якої залежить,

коефіцієнт $D(x)$. Рівняння (1.5) вже не може бути зведене до рівняння з сталим коефіцієнтом, найчастіше його доводиться розв’язувати наближено, використовуючи чисельні методи. Одним із простих методів наближеного рішення є заміна $D(x)$ шматково-постійною функцією. Для цього інтервал зміни змінної x (всю вісь, кінцевий інтервал або піввісь) розбивають на часткові інтервали (x_{k-1}, x_k) і в кожному частковому інтервалі вважають значення D сталим: $D = D_k$. В якості величини D_k (можемо взяти значення $D(x)$ в будь якій точці ξ_k часткового інтервалу: $D_k = D(\xi_k)$. В кожному частковому інтервалі задача розв'язується методом поділу змінних з крайовими умовами неперервності розв’язку у точках, що є межами частинних інтервалів. Якщо x_k-точка поділу (межа двох сусідніх часткових інтервалів), то в ній концентрація має бути неперервною.

Практично важливим є випадок, коли дифузія здійснюється через скінченну кількість середовищ з різними коефіцієнтами дифузії (тобто через кусково-однорідне середовище).

III При досить великих концентраціях коефіцієнт дифузії залежить від концентрації речовини: $D = D(c)$.

Відповідне рівняння дифузії у цьому випадку має вигляд

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D(c)\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}.$$

Це рівняння є нелінійним і на практиці розв'язується наближеними методами.

1.2 Нестаціонарні крайові умови

Однак у багатьох важливих задачах дифузії для кусково-однорідних середовищ доводиться мати справу і з такими крайовими умовами, коли концентрація речовини на межі області є певною заданою функцією часу. Зараз

ми розглянемо таку задачу, обмежуючись випадком напівнескінченої трубки. Далі вважатимемо, що трубка займає інтервал $l \leq x < \infty$, де $l \geq 0$. Відповідну крайову задачу сформулюємо наступним чином:

Знайти розв'язок рівняння дифузії

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \tag{1.6}$$

що задовольняє початковій умові

$$c|_{t-0} = 0 \quad x > l \tag{1.7}$$

та крайовій умові

$$c|_{x=l} = \varphi(t) \quad l > 0, \tag{1.8}$$

де $\varphi(t) \to 0$ при $t \to 0$.

Для того, щоб її розв'язати, необхідно в першу чергу замінити крайову умову (1.8) на однорідну шляхом введення нової шуканої функції

$$g(x,t) = c(x,t) - \varphi(t). \tag{1.9}$$

Тоді для $g(x,t)$ рівняння (1.6) набуде вигляду

$$\frac{\partial g}{\partial t} = D\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} - \frac{d\varphi}{dt}, \tag{1.10}$$

початкова умова (1.7) зводиться до умови

$$g|_{t-0} = 0 \quad x > l$$

(оскільки $g(t) = 0$ при $t = 0$), а крайова умова (1.8) набуває вигляд

$$g|_{x=l} = 0. \tag{1.11}$$

Таким чином ми замінили однорідне рівняння (1.6) з неоднорідною крайовою умовою (1.8) неоднорідним рівнянням (1.10) з однорідною крайовою умовою (1.11).

Розглянемо вираз

$$\int_0^t \psi(t-\tau)\chi(\tau)d\tau,$$

який називається згорткою функцій ψ і χ. Щоб знайти похідну згортки по t, використаємо правило Лейбніца (для диференціювання інтеграла від функції, яка залежить від параметра, за умови, що межі інтегрування також є функціями цього параметра):

$$\frac{d}{dt}\int_{a(t)}^{b(t)} f(\tau,t)d\tau = f(b,t)b'(t) - f(a,t)a'(t) + \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial f}{\partial t}\partial\tau.$$

Окремим випадком цього правила, є випадок, коли a і b не залежать від t. Похідна згортки дорівнює

$$\frac{d}{dt}\int_0^t \psi(t-\tau)\chi(\tau)d\tau = \psi(0)\chi(t) + \int_0^t \psi(t-\tau)\chi(\tau)d\tau.$$

Скористаємося цією формулою взявши за функцію ψ будь- який розв’язок $c_1(x,t)$ однорідного рівняння (1.6) і позначимо

$$\int_0^t c_1(x, t-\tau)\chi(\tau)d\tau = g_1(x, t). \quad (1.12)$$

Тоді

$$\frac{\partial g_1}{\partial t} = c_1(x, 0)\chi(t) + \int_0^t \frac{\partial c_1(x, t-\tau)}{\partial t}\chi(\tau)d\tau,$$

$$\frac{\partial^2 g_1}{\partial x^2} = \int_0^t \frac{\partial^2 c_1(x, t-\tau)}{\partial x^2}\chi(\tau)d\tau.$$

Отже

$$\frac{\partial g_1}{\partial t} - D\frac{\partial^2 g_1}{\partial x^2} = c_1(x, 0)\chi(t) + \int_0^t \left\{\frac{\partial c_1(x, t-\tau)}{\partial \tau} - D\frac{\partial^2 c_1(x, t-\tau)}{\partial x^2}\right\}\chi(\tau)d\tau.$$

Оскільки функція $c_1(x, t)$ обрана так, що вона є розв'язком рівняння(1.6), то підінтегральний вираз дорівнює нулю за будь якого значення $t > \tau$, отже

$$\frac{\partial g_1}{\partial t} - D\frac{\partial^2 g_1}{\partial x^2} = c_1(x, 0)\chi(t). \quad (1.13)$$

Нехай функція $c_1(x, t)$ задовольняє початковій умові

$$c_1(x, 0) = -1 \qquad (x > l) \quad (1.14)$$

і крайовій умові

$$c_1(l, t) = 0 \qquad (t > 0). \quad (1.15)$$

Функцію $c_1(x,t)$, яка є розв'язком рівняння(1.6) при умовах (1.14) і (1.15) можна визначити з фундаментального розв'язку цього рівняння, наведеного у роботі [1]. Ми отримаємо:

$$c_1(x,t) = -\Phi\left(\frac{x-1}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (x > 1, \qquad t > 0),$$

де $\Phi(x)$-інтеграл ймовірності. Легко перевірити, що при $x > l$ і $t \to 0$ функція $c_1(x,t) \to -l$, а при $t > 0$ і $x = l$ функція $c_1(l,t) = 0$. Такий вигляд мають початкова та крайова умова для цієї задачі. Тоді функція $g_1(x,t)$,визначена формулою (1.12) прийме вигляд

$$g_1(x,t) = \int_0^t \Phi\left(\frac{x-1}{2\sqrt{D(t-\tau)}}\right)\chi(\tau)d_\tau.$$

Відповідно до рівності (1.13) та умові(1.14) вона є розв'язком рівняння

$$\frac{\partial g}{\partial t} = D\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} - \chi(t), \tag{1.16}$$

а згідно (1.14) і (1.15) задовольняє умову

$$g_1|_{t-0} = 0\,, \;\; g_1|_{x-l} = 0. \tag{1.17}$$

Для отримання розв'язку задачі, приймемо

$$\chi(t) = \frac{d\varphi}{dt}$$

і задача розв'язана. Тоді остаточна функція $g(x,t)$, що задовільняє неоднорідному рівнянню (1.13) і умовам (1.14) і (1.15), буде мати вигляд

$$g(x,t) = -\int_0^t \Phi\left(\frac{x-1}{2\sqrt{D(t-\tau)}}\right)\varphi(\tau)d\tau$$

або після інтегрування по частинам,

$$g(x,t) = -\Phi\left(\frac{x-l}{2\sqrt{D(t-\tau)}}\right)\varphi(\tau)|_0^t + \int_0^t \varphi(\tau)\frac{\partial}{\partial\tau}\Phi\left(\frac{x-1}{2\sqrt{D(t-\tau)}}\right)d\tau.$$

Оскільки $\varphi(0) = 0$, $\Phi(\infty) = 1$ (отримаємо при $x > l$ і $\tau = t$)

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\Phi\left(\frac{x-1}{2\sqrt{D(t-\tau)}}\right) = \frac{\partial}{\partial\tau}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\frac{x-1}{2\sqrt{D(t-\tau)}}} e^{-z^2}dz = \frac{x-1}{2\sqrt{D(t-\tau)^{\frac{3}{2}}}}e^{-\frac{(x-l)^2}{4D(t-\tau)}}.$$

Згідно з формулою Дюамеля розв'язок поставленої задачі буде:

$$c(x,t) = \frac{x-l}{2\sqrt{\pi D}}\int_0^t \frac{\varphi(\tau)}{(t-\tau)^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{(\tau-l)^2}{4D(t-\tau)}}d\tau. \qquad (1.18)$$

Твердження, що функція $c(x,t)$ задовільняє початковій та крайовій умові, слід розуміти так:, що коли $x > t$ і $t \to 0$ функція $c(x,t) \to 0$, а при $t > 0$ і $x \to t$ функція $c(x,t) \to c(x,l) = \varphi(t)$. Перевірка останньої умови є дуже важлива, тому що на перший погляд з формули (1.18) випливає, що при $x = l$ функція $c(l,t)$ дорівнює нулю завдяки множнику перед інтегралом. Можна показати, що при $x = l$ інтеграл стає розбіжним це випливає з того, що $\varphi(\tau) = c \neq 0$. Дійсно,

$$\int_0^t \frac{d\tau}{(t-\tau)^{\frac{3}{2}}} = \frac{2}{\sqrt{t-\tau}}|_0^t$$

і при $\tau = t$ права частина прямує до ∞. Отже, просто підставляти значення $x = l$ в формулі (1.18) не можна. Щоб таки перевірити необхідну умову, перетворюємо цю формулу, здійснивши заміну змінної:

$$\frac{x-l}{2\sqrt{D(t-\tau)}} = z, \qquad \frac{(x-l)d\tau}{4\sqrt{D(t-\tau)^{\frac{3}{2}}}} = dz,$$

$$\tau = t - \frac{(x-1)^2}{4Dz^2}.$$

Тоді отримуємо вираз

$$c(x,t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x-t}{2\sqrt{Dt}}}^{\infty} \varphi\left[t - \frac{(x-l)^2}{4Dz^2}\right] e^{-z^2} dz.$$

Тепер видно, що при $x = l$ і $t > 0$

$$c(l,t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \infty(t) e^{-z^2}\, dz = \varphi(t).$$

Тут ми використали значення інтеграла Пуассона.

Розглянемо приклади розв'язування задач дифузії для неоднорідних середовищ. Наведені нижче розв'язки, знайдені методом функцій Гріна.

Нехай у тонкій нескінченній непроникній трубці знаходяться два середовища: 1)x<l(l>0) з коефіцієнтом дифузії D_1; 2) x>l з коефіцієнтом дифузії D_2. У момент t=0 в трубці при x=0 вводиться «погонна одиниця»

дифузної речовини (тобто така кількість, яка при рівномірному розподілі по одиниці довжини трубки дасть концентрацію, що дорівнює одиниці). Тоді в середовищі 1, тобто для x<l, маємо фундаментальний розв'язок [2]:

$$\varphi_0(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_1 t}} e^{-\frac{x^2}{4D_1 t}} = c_1(x,t).$$

Щоб отримати розв'язок у середовищі 2, ми повинні для відрізка трубки x>1 розв'язати наступну задачу : знайти розв'язок рівняння дифузії

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2},$$

що задовольняє початковій умові

$$c_2|_{t-0} = 0 \ \ (x > l)$$

і крайовій умові((умові «склеювання»)

$$c_2|_{x-1} = c_1|_{x-l} = c_1\,(l,t).$$

Ця задача є аналогічною задачею до задачі , яка була вище розв'язана (1.18) з використанням формули Дюамеля [2]. Отже, її розв'язок має вигляд

$$c_2(x,t) = \frac{x-l}{2\sqrt{D_2\pi}} \int_0^t \frac{c_1(l,\tau)}{(t-\tau)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(x-l)^2}{4D_2(t-\tau)}} d\tau,$$

$$c_1(l,\tau) = \frac{l}{2\sqrt{\pi D_1 \tau}} e^{-\frac{l^2}{4D_1\tau}}.$$

При фактичному знаходженні функції з $c_2(x,t)$ виникають труднощі, пов'язані з необхідністю численно обчислювати власні інтеграли.

Розглянемо наступну задачу дифузії. У нескінченній (непроникній) тонкій трубці x>0 кінець x=0 закритий непроникною перегородкою. У відрізку 0<x<1 є стала концентрація c_0 в середовищі з коефіцієнтом дифузії D_1. У відрізку трубки x>l дифузної речовини немає (концентрація дорівнює 0); цей відрізок заповнений середовищем з коефіцієнтом дифузії D_2. При x=1 знаходиться непроникна перегородка, яка у момент часу t=0 видаляється. З цього моменту починається процес дифузії, протягом якого потрібно визначити концентрацію речовини c(x,t) (x>0).

Для ділянки 0<x<1 розв’язок збігається з розв’язком задачі дифузії з аналогічними крайовими умовами, отриманими у роботі [2]. Отже, тут отримаємо

$$c(x,t) = c_1(x,t) = \frac{c_0}{2}\left\{\Phi\left(\frac{x+1}{2\sqrt{D_1 t}}\right) - \Phi\left(\frac{x-1}{2\sqrt{D_1 t}}\right)\right\}.$$

При x=1 концентрація буде дорівнювати

$$c_1(l,t) = \frac{c_0}{2}\Phi\left(\frac{1}{\sqrt{D_1 t}}\right),$$

і значення $c_1(l,t)$ служить (через умову «склеювання») крайовою умовою для концентрації $c_2(x,t)$ на відрізку x>1. Таким чином, для другої ділянки трубки потрібно розв'язати наступну задачу :

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2},$$
$$c_2|_{t=0} = 0 \ \ (x > l),$$

$$c_2|_{x=l} = \frac{c_0}{2}\Phi\left(\frac{1}{\sqrt{D_1 t}}\right).$$

Це задача співпадає з задачею (1.6) – (1.8) при

$$\varphi(t) = \frac{c_0}{2}\Phi\left(\frac{1}{\sqrt{D_1 t}}\right).$$

Її розв’язок надається формулою (1.18), тобто має вигляд

$$c_2(x,t) = \frac{c_0}{4\sqrt{D_2\pi}}\int_0^t \frac{\Phi\left(\frac{1}{\sqrt{D_1 t}}\right)}{(t-\tau)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(x-l)^2}{4D_2(t-\tau)}} d\tau \ \ (x > l).$$

Розглянемо задачу дифузію у тривимірному просторі. У цьому випадку друга похідна за просторовою координатою замінюється оператором Лапласа. Рівнянням Лапласа називається рівняння

$$\Delta u = 0,$$

де Δu – лапласіан, що має в декартових, циліндричних та сферичних координатах відповідно наступний вигляд:

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2},$$

$$\Delta u = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2},$$

$$\Delta u = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial u}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}.$$

Рівняння Лапласа відіграє важливу роль у розв’язуванні задач теплопровідності та дифузії для двовимірних та тривимірних середовищ. Наприклад, цьому рівнянні повинен задовольняти будь-який стаціонарний розділ температури . Дійсно , якщо температура $u = (x, y, z, t)$ не залежна від t, то $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ і рівняння теплопровідності зводиться до рівняння Лапласа . Застосування рівняння Лапласа виходить далеко за межі питання стаціонарного розподілу температури.

Функції, що задовольняють рівняння Лапласа, називають гармонічними. У кожній задачі стаціонарної дифузії, пов'язаній з рівнянням Лапласа , шукане рішення виділяється з багатьох гармонічних функцій певною додатковою умовою, яка найчастіше є крайовою. Таким чином, виникає наступна крайова задача: в області простору , обмеженої замкнутою поверхнею Г, шукають гармонічну функцію $u(x, y, z)$, що задовольняє на межі Г крайовій умові, де n-напрямок зовнішньої нормалі до Г:

$$H\frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma} = u|_{\Gamma - \tilde{u},}$$

де H і ũ-функції, задані на межі Г.

Найбільш важливим є окремий випадок $H = 0$ цієї крайової задачі, що відповідають заданій концентрації речовини на межі тіла: $u|_{\Gamma} = \tilde{u}$. Ця крайова задача називається задачею Діріхле.

Задача Діріхле в просторі формується так:

Знайти функцію $u = (x, y, z)$, яка задовольняє всередині замкненої поверхні Г рівняння Лапласа $\Delta\tilde{u} = 0$ і приймає на межі задані значення :

$$u|_{\Gamma} = \tilde{u}.$$

Те, що задача Діріхле завжди має розв’язок (при деяких загальних припущень щодо Г і ũ), можна вважати очевидним з фізичних міркувань.

Дійсно , для задачі теплопровідності, що є з точки зору математичної моделі аналогічною задачі дифузії, якщо у кожній точці межі тіла постійно підтримується певна температура (яка може бути різною в різних точках межі області),то в кожній точці тіла встановиться врешті певна своя температура , яка і є розв'язком задачі Діріхле для даних крайових значень. Крім того, з тих самих міркувань цей розв’язок буде єдиним.

Задача Діріхле може інтерпретуватися також і в термінах дифузії: його розв’язком є стаціонарна концентрація за умови , що концентрація на межі області відома.

Задача Діріхле може бути поставлена і у двох вимірах. Якщо невідома функція залежить тільки від двох просторових координат, наприклад x і y (або тільки від r і φ в полярній системі координат), то рівняння Лапласа набуває більш простого вигляду:

$$\frac{\partial^2 \mathrm{u}}{\partial \mathrm{x}^2} + \frac{\partial^2 \mathrm{u}}{\partial \mathrm{y}^2} = 0$$

або у полярних координатах

$$\frac{1}{\mathrm{r}} \frac{\partial}{\partial \mathrm{r}} \left(\mathrm{r} \frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{r}} \right) + \frac{1}{\mathrm{r}^2} \frac{\partial^2 \mathrm{u}}{\partial \varphi^2} = 0.$$

Задача Діріхле на площині формулюється наступним чином. Знайти функцію $\mathrm{u} = (\mathrm{x}, \mathrm{y})$, що задовольняє всередині замкненої кривої Г рівняння Лапласа $\Delta \mathrm{u} = 0$ і набуває на межі області Г задані значення:

$$\mathrm{u}|_{\Gamma} = \tilde{\mathrm{u}}.$$

Ця задача також має єдиний розв’язок.

Зауважимо, що задача Діріхле розв’язується дуже просто в одновимірному випадку, тобто коли у відповідній систему координат невідома функція u залежить тільки від однієї з координат.

Для декартових координат одновимірне рівняння Лапласа приймає вигляд $\frac{d^2u}{dx^2}$=0 і його розв’язок є лінійною функцією $u = Ax + B$. Задача Діріхле має в цьому випадку розв'язок

$$u = \frac{u_l - u_0}{l}x + u_0,$$

де $u_0 = u|_{x-0}$, $u_l = u|_{x-l}$.

У випадку задач з осьовою симетрією запишемо рівняння Лапласа в циліндричних координатах. Вважатимемо, що u не залежить від φ і z:

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{du}{dr}\right) = 0.$$

Звідси $r\frac{du}{dr} = A$ і $u = A\ln r + B$, де A,B-довільні сталі. Задача Діріхле з крайовими умовами $u|_{r-a} = u_a u|_{r-b} = u_b$ має розв’язок [3]:

$$u = \frac{1}{\ln a - \ln b}[(u_a - u_b)\ln r + (u_b \ln a - u_a \ln b)] = u_a + (u_b - u_a)\frac{\ln\frac{r}{a}}{\ln\frac{b}{a}}.$$

Ця формула дає розв'язання задачі про стаціонарний розподіл речовини у просторі між двома циліндричними поверхнями із загальною віссю за умови, що на поверхнях циліндрів підтримується стала концентрація речовини. Якщо $u_a = u_b$,то $u \equiv u_a$. Зауважимо, що отримане рішення втрачає сенс при $r = 0$. Якщо гармонічна функція u залежить від відстані точки до початку координат , то скориставшись сферичними координатами, отримаємо рівняння:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{du}{dr}\right)=0$$

звідки $r^2\frac{du}{dr}=A$, $\frac{du}{dr}=\frac{A}{r^2}$ і $u=-\frac{A}{r}+B$.

Поставивши задачу Діріхле $u|_{r-a}=u_a$ і $u|_{r-b}=u_b$, знайдемо стаціонарний розподіл температури у сферичному шарі $a\le r\le b$:

$$u=u_a+(u_b-u_a)\frac{\frac{1}{r}-\frac{1}{a}}{\frac{1}{b}-\frac{1}{a}}$$

(розв'язок не має сенсу при r=0).

Тривимірні та двовимірні задачі Діріхле можуть бути точно розв'язані лише для відносно простих областей (наближені методи вирішення ми не розглядаємо.

1.3 Рівняння дифузії у циліндричних та сферичних координатах

Розглянемо рівняння дифузії у циліндричних та сферичних системах координат. Тривимірне рівняння дифузії

$$\frac{\partial T}{\partial t}=a^2\nabla^2T$$

у циліндричних координатах набуває вигляд

$$\frac{1}{a^2}\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\partial^2T}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2T}{\partial\theta^2}+\frac{\partial^2T}{\partial z^2}. \qquad (1.19)$$

Знайдемо його розв'язок методом поділу змінних. Будемо шукати невідому функції концентрації речовини у вигляді

$$T(r,\theta,z,t) = R(r)\Theta(\theta)Z(z)\varphi(t).$$

Підставляючи цей вираз у рівняння (1.19), отримуємо:

$$\frac{R''}{R} + \frac{1}{r}\frac{R'}{R} + \frac{1}{r^2}\frac{\Theta''}{\Theta} + \frac{Z''}{Z} = \frac{1}{a^2}\frac{\varphi'}{\varphi} = -\lambda^2,$$

де $-\lambda^2$ – параметр розподілу. Тоді маємо:

$$\varphi' + a^2\lambda^2\varphi = 0\ , \tag{1.20}$$

$$\frac{R''}{R} + \frac{1}{r}\frac{R'}{R} + \frac{1}{r^2}\frac{\Theta''}{\Theta} + \lambda^2 = \frac{-Z''}{Z} = -\mu^2.$$

Рівняння відносно функцій Z, R і Θ розпадається на два рівняння:

$$Z'' - \mu^2 Z = 0, \tag{1.21}$$

$$\left(\frac{R''}{R} + \frac{1}{r}\frac{R'}{R} + \lambda^2 + \mu^2\right) r^2 = \frac{-\Theta''}{\Theta} = \Omega^2. \tag{1.22}$$

Отже,

$$\Theta'' + \Omega^2\Theta = 0, \tag{1.23}$$

$$R'' + \frac{1}{r}R' + \left(\lambda^2 + \mu^2 - \frac{\Omega^2}{r^2}\right)R = 0. \tag{1.24}$$

Рівняння (1.20), (1.21) та (1.24) мають розв'язки виду

$$\varphi = e^{-a^2\lambda^2 t},\ Z = Ae^{\mu z} + Be^{-\mu z},\ \Theta = C\cos\Omega\theta + D\sin\Omega\theta.$$

Рівняння (1.22) є рівнянням Беселя порядку Ω, і його загальний розв'язок має вигляд

$$R(r) = C_1 J_\Omega\left(\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}r\right) + C_2 Y_\Omega\left(\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}r\right),$$

де $J_\Omega(r)$ і $Y_\Omega(r)$ – функції Беселя порядку Ω відповідно першого і другого роду.

Функція Y_Ω має особливість при $r = 0$, в той час як фізично змістовий розв'язок рівняння (1.19) має бути двічі неперервно диференційовним при $0 \leq r \leq b$.

Отже, рівняння (1.24) має тільки один обмежений розв'язок, тобто

$$R(r) = J_0\left(\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}r\right).$$

Остаточно, отримуємо, що загальний розв'язок рівняння(1.19) має вигляд

$$T(r, \theta, z, t) = \exp(-a^2\lambda^2 t)\left(Ae^{\mu z} + Be^{-\mu z}\right) \times$$
$$\times (C\cos\Omega\theta + D\sin\Omega\theta) J_\Omega\left(\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}r\right). \qquad (1.25)$$

У сферичних координатах рівняння дифузії

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2\nabla^2 T$$

може бути записано у вигляді

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial T}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 T}{\partial\varphi^2} = \frac{1}{a^2}\frac{\partial T}{\partial t}. \qquad (1.26)$$

Будемо шукати його розв'язок у вигляді

$$T = R(r)H(\theta)\Phi(\varphi)\psi(t). \qquad (1.27)$$

Підставляючи цей вираз у (1.26), маємо:

$$\frac{R''}{R} + \frac{2}{r}\frac{R'}{R} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{1}{H}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dH}{d\theta}\right) + \frac{1}{\Phi r^2 \sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = \frac{1}{a^2}\frac{\psi'}{\psi} = -\lambda^2,$$

де λ^2 – параметр розподілу.

Отже,

$$\frac{d\psi}{dt} + a^2\lambda^2\varphi = 0, \quad \psi = C_1 e^{-a^2\lambda^2 t}. \qquad (1.28)$$

Крім того, маємо:

$$r^2\sin^2\theta\left[\frac{1}{R}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \frac{1}{Hr^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dH}{d\theta}\right) + \lambda^2\right] = -\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = m^2,$$

що дає рівняння

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} + m^2\Phi = 0,$$

з якого знаходимо

$$\Phi = C_1 \cos m\varphi + C_2 sinm\varphi. \qquad (1.29)$$

Рівняння відносно невідомих функції $R(r)$ та $H(\Theta)$ має вигляд

$$\frac{r^2}{R}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \lambda^2 r^2 = \frac{m^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{H\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dH}{d\theta}\right) = n(n+1).$$

Після перегрупування це рівняння зводиться до двох рівнянь:

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left(\lambda^2 - \frac{n(n+1)}{r^2}\right)R = 0\,, \tag{1.30}$$

$$\frac{\partial^2 H}{\partial\theta^2} + \mathrm{ctg}\theta\frac{\partial H}{\partial\theta} + \left(n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)H = 0. \tag{1.31}$$

Нехай $R = (\lambda r)^{-\frac{1}{2}}\beta(r)$, тоді рівняння (1.31) зводиться до

$$B''(r) + \frac{1}{r}\beta'(r) + \left(\lambda^2 - \frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}\right)\beta(r) = 0.$$

Це диференціальне рівняння Бесселя порядку $\left(n+\frac{1}{2}\right)$, його розв'язок має вигляд

$$\beta(r) = AJ_{n+\frac{1}{2}}(\lambda r) + BY_{n+\frac{1}{2}}(\lambda r).$$

Отже,

$$R(r) = (\lambda r)^{-\frac{1}{2}}\left(AJ_{n+\frac{1}{2}}(\lambda r) + BY_{n+\frac{1}{2}}(\lambda r)\right), \tag{1.32}$$

де J_n і Y_n – функції Бесселя відповідно першого і другого роду.

Тепер покладемо $\cos\theta = \mu$, так що

$$\mathrm{ctg}\theta = \frac{\mu}{\sqrt{1-\mu^2}}\,, \qquad \frac{dH}{d\theta} = -\sqrt{1-\mu^2}\frac{dH}{d\mu}, \qquad \frac{d^2H}{d\theta^2} = (1-\mu^2)\frac{d^2H}{d\mu^2} - \mu\frac{dH}{d\mu}.$$

Рівняння (1.31) набуває вигляду:

$$(1-\mu^2)\frac{d^2H}{d\mu^2}-2\mu\frac{dH}{d\mu}+\left(n(n+1)-\frac{m^2}{1-\mu^2}\right)H=0. \quad (1.33)$$

Це диференціальне рівняння приєднаних функцій Лежандра, його розв'язок має вигляд:

$$H(\theta)=CP_n^m(\mu)+DQ_n^m(\mu), \quad (1.34)$$

де $P_n^m(\mu)$ і $Q_n^m(\mu)$ – приєднані функції Лежандра степеня n порядка m відповідно першого і другого роду.

Отже, загальний фізично значущий розв'язок рівняння дифузії у сферичних координатах має вигляд:

$$T(r,\theta,z,t)=\sum_{\lambda,m,n}A_{\lambda mn}(\lambda r)^{-\frac{1}{2}}J_{n+\frac{1}{2}}(\lambda r)P_n^m(\cos\theta)e^{\pm im\varphi-a^2\lambda^2 t}. \quad (1.35)$$

Тут функції $Q_n^m(\mu)$ і $(\lambda r)^{-\frac{1}{2}}Y_{n+\frac{1}{2}}(\lambda r)$ виключені, оскільки вони мають особливості в точках $\mu=\pm1$ і $r=0$ відповідно.

Отже, у першому розділі розглянуто математичні моделі процесу дифузії у різних систем координат. Розглянуто процес отримання рівняння дифузії. Розглянутий основний аналітичний метод розв'язування рівняння дифузії у випадках областей простих форм – метод Фур'є (метод поділу змінних).

2 РОЗВ'ЯЗАННЯ СПЕЦІАЛЬНИХ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ

2.1 Двовимірна вісесиметрична задача дифузії

Розглянемо задачі вісесиметричної дифузії. У цьому випадку математична постановка задачі має наступний вигляд. Потрібно знайти розв'язання диференціального рівняння

$$c_1 = D\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c}{\partial r}\right), \tag{2.1}$$

з крайовими умовами

$$c(a,t) = 0, \qquad \frac{\partial c}{\partial r} = 0 \text{ при } r = b, t \geq 0, \tag{2.2}$$

та початковою умовою

$$c(r,0) = c_0, a < r < b, \tag{2.3}$$

де $D^{(2)}$ – сталий коефіцієнт дифузії , а c(r, t)- концентрація речовини.

Крайові умови (2.2) свідчать, що циліндр r=b представляє собою ідеально ізольовану поверхню, а циліндр $r = a$ – ідеально поглинає дифундуючу речовину. Для розв'язання цієї задачі можна використати класичні методи розв'язання рівнянь з частинними похідними: метод поділу змінних, перетворення Лапласа або за допомогою функції Гріна [6]. У будь-якій задачі дифузії вибір конкретного методу часто визначається специфічними умовами даної задачі. Наприклад, якщо нам потрібно знати концентрацію c(r, t) лише для малих значень або тільки для великих значень часу t у нескінченних областях, то ефективним методом [6], принаймні у

першому випадку, є застосування перетворення Фур'є або Лапласа , тому що при цьому можна скористатися для знаходження оригіналу невідомої функції відомими асимптотичними методами; такі методи обговорюється в роботах [6,7], де розглянуто обчислення інтегралів зворотних перетворень у таких задачах. Якщо розв'язок задачі потрібно знайти для будь якого моменту часу, питання про вибір методу залежить від інших особливостей задачі.

Для розв'язання задачі (2.1)-(2.3) можна використати будь-які з названих вище методів; всі вони пов'язані з складними обчисленнями, але в ідейному плані є досить простими. Вони розглянуті у роботі [8], та , зокрема, детально висвітлено застосування до розв'язання лінійних рівнянь дифузії методу функції Гріна. Зокрема, там цим методом розв'язана задача (2.1)-(2.3). Наведемо отримані там основні результати, які будемо використати у подальшому.

Для розв'язання задачі

$$v_t = D\left[v_{rr} + \frac{1}{r}v_r\right], v(a,t) = \left(\frac{\partial c}{\partial r}\right)_{r=b} = 0,$$

функція Гріна для одиничного джерела частинок речовини, що випускаються в момент часу t=0 у круговому кільці r=r', де a<r'<b, має вигляд [8]:

$$v(r,t,r') = \frac{\pi}{4}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{y_n}{b}\frac{J_1}{F}\frac{(y_n)}{(y_n)}\right]^2 S(r,y_n)S(r',y_n)e^{-\frac{D^{(2)}{y_n}^2}{b^2}}, \qquad (2.4)$$

де y_n-додатні корені рівняння

$$J_o(ky)Y_1(y) - Y_0(ky)J_1(y) = 0, k = a/b. \qquad (2.5)$$

де $J_n, Y_n, n = 0$, 1-функції Бесселя першого і другого роду[6], а

$$F(y_n) = [J_0(ky)]^2 - [J_1(y_n)]^2, \tag{2.6}$$

$$S(r, y_n) = Y_0(y_n r/b)J_0(ky_n) - J_0(y_n r/b)Y_0(ky_n). \tag{2.7}$$

Ця задача відповідає однорідній концентрації частинок з часів, що випускається в момент часу t'=0 у всій області a>r>b; тому її розв'язок c(r, t) виражається інтегралом від функції Гріна $v(r, t; r')$ з () в усій області, тобто має вигляд:

$$c(r, t) = c_0 \int_a^b 2\pi r' v(r, t, r') dr'. \tag{2.8}$$

Оскільки [6]

$$rJ_0(r) = -\frac{d}{dr}[rJ_0(r)] = \frac{d}{dr}[rJ_1(r)]$$

і таке саме співвідношення виконується для $Y_0(r)$, то інтеграл

$$I_n = \int_a^b 2\pi r' S(r', y_n) dr' = 2\pi \int_a^b \{J_0(ky_n) r' Y_0(y_n r'/b) - Y_0 r' J_0(y_n r'/b)\} dr'$$

$$= 2\pi \left(\frac{b}{y_n}\right)^2 \left\{ J_0(ky_n) \left[\frac{r' y_n}{b} Y_1(y_n r'/b)\right]_b^a \right.$$

$$\left. - Y_0(ky_n) \left[\frac{(r' y_n}{b} J_1(y_n (r'/b)\right]_a^b \right\}$$

$$= 2\pi \left(\frac{b}{y_n}\right)^2 \{y_n [J_0(ky_n) Y_1(y_n) - Y_0(ky_n) J_1(y_n)]$$

$$+ ky_n [Y_0(ky_n) Y_1(ky_n)]\} = 4 \left(\frac{b}{y_n}\right)^2, \tag{2.9}$$

де використані формули для циліндричних функцій Бесселя та Неймана [6] і наступне співвідношення:

$$\frac{2}{\pi z} = J_0(z)Y_0'(z) - J_0'(z) = -J_0(z)Y_1(z) + J_1(z)Y_0(z).$$

Підставляючи (2.6) та (2.7) і використовуючи (2.8), отримаємо розв'язок задачі вісесиметричної дифузії у кільці у вигляді

$$c(r,t) = c_0 \frac{\pi}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{y_n}{b} \frac{J_1(y_n)}{F y_n}\right]^2 S(r, y_n) \exp\left\{-\frac{D y_n^2}{b^2}\right\} 4\left(\frac{b}{y_n}\right)^2$$

$$= c_0 \pi \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{J_1(y_n)}{F y_n}\right]^2 S(r, y_n) \exp\left\{-\frac{D y_n^2}{b^2} t\right\} \qquad (2.10)$$

Число частинок p(t), що знаходяться у кільці a<r<b, отримуємо шляхом інтегрування концентрації речовини по цьому кільці, тобто отримуємо інтеграл

$$p(t) = \int_a^b 2\pi r c(r,t) dr,$$

яка після підстановок до неї c(r,t) з формули (2.10) та повторного використання (2.9) дає

$$p(t) = p(t) = p(0) \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-t/\mu_n}. \qquad (2.11)$$

Після застосування до неї формули (2.6) для $F(y_n)$ отримаємо

$$p(0) = c_0\pi(b^2 - a^2, \mu_n = \frac{b^2}{D^{(2)}y_n}, \tag{2.12}$$

$$A_n = \frac{4}{y_n^2(1-k^2)} - \frac{[J_1(y_n)]^2}{[J_0(ky_n)]^2 - [J_1(y_n)]^2}. \tag{2.13}$$

Розглянемо задачу для тривимірної радіально-симетричної дифузії у частині кулі – шарі $a \le r \le b$.

Математична модель цієї задачі має наступний вигляд:

$$c_t = D\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial c}{\partial r}\right), \tag{2.14}$$

$$c(a,t) = 0, \quad \frac{\partial c}{\partial t} = 0, r = b, \quad t \ge 0, \tag{2.15}$$

$$c(r,0) = c_0, \quad a < r < b. \tag{2.16}$$

Для розв'язання цієї задачі, як і для двовимірної задачі, використаємо метод функцій Гріна. Наведемо розв'язок $v(r,t;r')$, отриманий у роботі [7] для одиничного джерела частинок, що випускає потік частинок у момент часу $t = 0$ на сферичній поверхні радіуса r', де $a < r' < b$. У [7] отримано розв'язок цієї задачі у вигляді ряду:

$$v(r,t;r') = \frac{1}{2\pi rr'}\sum_{n=1}^{\infty} R_n(r)R_n(r')\exp\left[-\frac{D^{(3)}x_n^2}{b^2}t\right], \tag{2.17}$$

де x_n – додатні корені трансцендентного рівняння

$$xctg(1-k)x = 1, \quad k = \frac{a}{b}, \tag{2.18}$$

$$R_n(r) = \frac{(1+x_n^2)^{\frac{1}{2}}\sin\left(\frac{r-a}{b}x_n\right)}{b^{\frac{1}{2}}[(1-k)(1+x_n^2)-1]^{\frac{1}{2}}}. \tag{2.19}$$

Цей розв'язок сформульованої задачі відповідає однорідному розподілу речовини $c = c_0$ при $t = 0$ для всіх $a < r < b$, тому його можна записати у вигляді інтегралу

$$c(r,t) = c_0 \int_a^b 4\pi r'^2 v(r,t;r')dr, \tag{2.20}$$

Для підстановки (2.17) у (2.20) використаємо інтеграл [7]

$$I_n = \int_a^b r' R_n(r')dr' = \frac{(1+x_n^2)^{\frac{1}{2}}}{b^{\frac{1}{2}}[(1-k)(1+x_n^2)-1]^{\frac{1}{2}}} \int_a^b \left(\frac{r'-a}{b}x_n\right)dr' =$$

$$= \frac{b^{\frac{3}{2}}[\sin(1-k)\,x_n - x_n\cos(1-k)\,x_n + kx_n]}{x_n^2[(1-k)-(1+x_n^2)^{-1}]^{\frac{1}{2}}}. \tag{2.21}$$

Звідси, підставляючи v з (2.17) у (2.20), отримаємо наступний вираз для концентрації речовини, що дифундує:

$$c(r,t) = 2c_0 \sum_{n=1}^{\infty} I_n \frac{R_n(r)}{r} \exp\left[-\frac{Dx_n^2}{b^2}t\right], \tag{2.22}$$

де I_n і R_n визначаються відповідно рівностями (2.21) та (2.19) відповідно.

Число частинок $p(t)$, що перебувають в області $a < r < b$ в момент часу t, дорівнює

$$p(t) = \int_a^b 4\pi r^2 c(r,t)dr.$$

Після використання співвідношень (2.22) та (2.21) отримуємо

$$p(t) = p(0)\sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-\frac{t}{v_n}}, \tag{2.23}$$

де

$$p(0) = c_0 \frac{4}{3}\pi(b^3 - a^3), \;\; v_n = \frac{b^2}{D^{(3)}x_n^2}, \;\; k = \frac{a}{b}, \tag{2.24}$$

$$A_n = \frac{6I_n^2}{b^3(1-k^3)}.$$

а I_n дано у (2.21).

2.2 Автомодельні розв’язки рівняння дифузії

Ми опишемо тут досить загальну систематичну процедуру відшукання автомодельних розв'язків [8] диференціальних рівнянь з частинними похідними, які можуть бути нелінійними. Загальна процедура може бути застосована до набагато ширшого класу рівнянь. Розглянемо знаходження автомодельного розв’язку лінійного рівняння дифузії

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(x^s \frac{\partial c}{\partial x}\right). \tag{2.25}$$

з крайовими умовами

$$c(\infty, t) = 1, c(0, t), t > 0 \tag{2.26}$$

Від типу крайових умов залежить існування автомодельного розв’язку.

Розглянемо перетворення [8]

$$x \to ax', t \to bt' \tag{2.27}$$

після застосування якого рівняння (2.25) зводиться до вигляду

$$\frac{a^{2-s}}{b}\frac{\partial c}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial x'}\left(x'^{s}\frac{\partial c}{\partial x'}\right), \tag{2.28}$$

а крайові умови (2.26) залишаються незмінними:

$$\mathrm{c}(\infty, t') = 1, c(0, t'), t' > 0. \tag{2.29}$$

Таким чином ,диференціальне рівняння та крайові умови інваріантні щодо перетворень (2.27) $(x, t) \to (x', t')$, якщо

$$b = a^{2-s} \tag{2.30}$$

Тоді і розв'язки задачі (2.25), (2.26) є інваріантними щодо цього перетворення, тобто

$$c(x, t) = c(ax, a^{2-s}t). \tag{2.31}$$

Приймемо тут $a = 1/t^{1/(2-s)}$ при $s \neq 2$, ми бачимо, що розглянутий розв’язок є функцією однієї змінної [8]

$$\eta = \frac{x}{t^{\frac{1}{2-s}}}, \ \ s \neq 2, \tag{2.32}$$

або будь-якого степеню цієї величини η. Підстановка $\mathrm{c}(x, t) = u(\eta)$ з η, що визначається рівністю (2.32) у диференціальне рівняння (2.25) та крайові умови (2.3.2) дозволяє отримати рівність

$$-\frac{1}{2-s}\eta\frac{du}{d\eta}=\frac{d}{d\eta}\eta^2\frac{du}{d\eta},\ \ s\neq 2 \tag{2.33}$$

$$u(\infty)=1,\ \ u(0)=0.$$

Розв'язок задачі (2.33) має вигляд [8]:

$$\mathrm{c}(x,t)=u(\eta)=A\int_0^{\eta}\sigma^{-s}exp\left[-\frac{1}{(2-s)^2}\sigma^{2-s}\right]d\sigma\,. \tag{2.34}$$

Тут значення η івизначається з рівності (2.32) і

$$A=\left\{\int_0^{\infty}\sigma^{-s}\,exp\left[-\frac{1}{(2-s)^2}\sigma^{2-s}\right]d\sigma\right\}^{-1}=\frac{|2-s|^{\frac{s}{2-s}}}{\Gamma\left(\frac{1-s}{2-s}\right)}, \tag{2.35}$$

причому для збіжності інтегралів потрібно, щоб $s<1$ або $s>2$. Розв'язки даного виду, що зазнають при зміні часу перетворення подібності, називаються автомодельними.

Таким чином, ми показали, що для задачі (2.25), (2.26) з обмеженнями на значення параметра s у вигляді $s<1$ або $s>2$ існує автомодельний розв'язок. Можна перевірити, що ці умови на значення параметру s є і необхідними для існування автомодельного розв'язку.

Вирішальною умовою для існування автомодельного розв'язку є тип крайових умов. Вони повинні бути такими, щоб автомодельна змінна була сталою при двох значеннях, що визначаються умовами на змінні x і t. Умови (2.26) не є єдиними, які дозволяють це зробити. Наприклад, припустимо, що $s<1$; тоді умова змінних x,t типу $\mathrm{c}(x,0)=1$ буде придатною, оскільки вона також дає $\eta\to\infty$. Таким чином розв'язки (2.34), (2.35) рівняння (2.25) при $s<1$ задовільняє таким умовам

$$\mathrm{c}(x,0)=1,\ \ x>0,\ \ \mathrm{c}(0,t)=0,\ \ t>0.$$

Автомодельні розв’язки рівняння дифузії утворюють спеціальний клас розв’язків. Необхідність побудови та дослідження таких розв’язків виникають у задачах моделювання дифузії газів у пористих середовищах. Зазначимо, що він є нешироким і у загальному випадку вони не можуть окремо задовольнити класичним крайовим та початковим умовам для рівняння дифузії типу (2.25), а саме двом крайовим умовам по змінній x і одній початковій умові по змінній t.

2.3 Моделювання дифузійних процесів перенесення у динамічному середовищі

Розглянемо математичне моделювання дифузійних процесів в узагальненому сенсі. У цьому випадку до дифузійних процесів перенесення відносяться такі процеси, в яких виникнення потоків енергії або маси не пов'язане з макроскопічним рухом середовища, а обумовлено мікроскопічним рухом частинок(молекул), що беруть участь у деякому хаотичному русі [9]. До таких процесів, зокрема, відносять дифузію, що супроводжується перенесенням маси, та теплопровідність, що обумовлюється переносом енергії. У динамічних середовищах ці процеси слід розглядати з урахуванням конвективного перенесення енергії та маси

В основі математичних моделей дифузійних процесів перенесення лежать фундаментальні закони збереження енергії та маси, які є відносно довільного нерухомого щодо обраної системи координат об’єму V, оточеного замкнутою поверхнею S, можна записати в інтегральній формі:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\iiint\limits_{\mathrm{V}} \mathrm{gdV} = -\oiint\limits_{\mathrm{S}} \vec{\Pi}\,\overrightarrow{\mathrm{dS}} + \iiint\limits_{\mathrm{V}} \mathrm{F(M,t)dV}. \qquad (2.36)$$

Тут g-об’ємна щільність енергії або маси; $\vec{\Pi}$-густина потоку енергії або маси $F(M,t)$-об’ємна густина внутрішніх джерел енергії або маси.

Співвідношення (2.36) у математичній формі показує, що причиною зміни інтегральної енергії(маси) є їх потоки через поверхню S, що оточує об’єм V, а також внутрішні процеси генерації або поглинання енергії(маси) за рахунок джерел всередині обсягу V. Враховуючи незалежність області інтегрування у рівності (2.36) від часу t, можемо занести похідну за часом під знак інтеграла. Крім того, за формулою Остроградського перетворимо поверхневий інтеграл в об’ємний, запишемо потік через поверхню S у вигляді

$$\oiint_S \vec{\Pi}\,\overrightarrow{dS} = \iiint_V \operatorname{div}\vec{\Pi}\,dV.$$

Тоді закон збереження (2.36) приймає вигляд [10]:

$$\iiint_V \left\{\frac{\partial g}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{\Pi} - F(M,t)\right\} dV = 0.$$

Через довільність обраного об’єму V отримуємо закон збереження енергії або маси в диференційній формі:

$$\frac{\partial g}{\partial t} = -\operatorname{div}\vec{\Pi} + F(M,t). \qquad (2.37)$$

Якщо описувати дифузійний процес перенесення маси чи енергії в середовищі , вектор її швидкості $\vec{v}(M, t)$ в кожній точці простору вважати відомим, то щільність потоку енергії (маси) $\vec{\Pi} = \vec{\Pi}_д + \vec{\Pi}_к$буде містити крім дифузної складової $\vec{\Pi}_д$ також і конвективну складову $\vec{\Pi}_к = g\vec{v}$, пов’язану з перенесенням енергії або маси разом з середовищем, що рухається. Тоді з

урахуванням макроскопічного руху середовища рівняння (2.37) набуде вигляду

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \operatorname{div}(g\vec{v}) = -\operatorname{div}\vec{\Pi}_д + F(M,t). \qquad (2.38)$$

Для нестисливого середовища вектор швидкості задовольняє умові $\operatorname{div}\vec{v} = 0$. Тому

$$\operatorname{div}(g\vec{v}) = g\operatorname{div}\vec{v} + \vec{v}\operatorname{grad} g = \vec{v}\operatorname{grad} g,$$

а диференціальний закон збереження енергії чи маси у нестисливому середовищі , що рухається, можна записати у вигляді рівняння [11]

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \vec{v}\operatorname{grad} g = -\operatorname{div}\vec{\Pi}_д + F(M,t). \qquad (2.39)$$

Для процесу теплопровідності маємо наступну інтерпретацію змінних моделі (2.39). Нехай u(M, t) – температура середовища, $g = g(u)$ – об'ємна щільність внутрішньої енергії.

Тоді

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{dg}{du}\frac{\partial u}{\partial t} = č\frac{\partial u}{\partial t} = \rho c\frac{\partial u}{\partial t}$$

і

$$\operatorname{grad} g = \frac{dg}{du}\operatorname{grad} u = č\operatorname{grad} u = \rho c\operatorname{grad} u.$$

Тут č і с-відповідно об'ємна та маса питомої теплоємності середовища; ρ – його густини [11] .

Фізичний закон Фур'є стверджує, що у ізотропного середовища з коефіцієнтом теплопровідності k, тепловий потік пропорційний градієнту температури , тобто [12]

$$\vec{\Pi}_{д} = -\text{kgrad u}.$$

Тоді рівняння (3.4) набуває вигляду

$$\rho c\left(\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{v}\text{grad u}\right) = \text{div}(\text{kgradu}) + F(M,t). \qquad (2.40)$$

Для однорідного середовища з сталими теплофізичними характеристиками ρ, c, k рівняння (3.5) запишемо у вигляді

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{v}\text{gradu} = a^2\Delta u + f(M,t), \qquad (2.41)$$

де $a^2 = k/(\rho c)$-коефіцієнт теплопровідності середовища; Δ- оператор Лапласа, $f(M,t) = (\rho c)^{-1}F(M,t)$.

Рівняння (2.40) та (2.41) називають диференціальними рівняннями нестаціонарної теплопровідності в нестисливих рухомих середовищах [12]. Для нерухомого середовища $\vec{v} = 0$, із (2.41) отримуємо рівняння дифузії у вигляді

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2\Delta u + f(M,t), \qquad (2.42)$$

яке узагальнює рівняння у трьох просторових змінних.

Аналогічна математична модель перенесення речовини має місце для процесу дифузії. Якщо u(M, t) – абсолютна концентрація дифузної речовини,

то g=u, а дифузійний потік маси визначається законом Фіка [9]: $\vec{П}_д = -\mathrm{D}\mathrm{grad}\ \mathrm{u}$, де D – коефіцієнт дифузії.

Тоді із закону збереження маси (2.39) отримаємо нестаціонарне рівняння дифузії у рухомому середовищі:

$$\frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{t}} + \vec{\mathrm{v}}\mathrm{gradu} = \mathrm{div}(\mathrm{Dgradu}) + \mathrm{F}(\mathrm{M},\mathrm{t}). \qquad (2.43)$$

Для сталого коефіцієнта дифузії D=const, рівняння (2.43) має вигляд

$$\frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{t}} + \vec{\mathrm{v}}\mathrm{gradu} = \mathrm{D}\Delta\mathrm{u} + \mathrm{F}(\mathrm{M},\mathrm{t}). \qquad (2.44)$$

Із рівняння (2.44) випливає, що в нерухомому середовищі процес дифузії описується рівнянням

$$\frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{t}} = \mathrm{D}\Delta\mathrm{u} + \mathrm{F}(\mathrm{M},\mathrm{t}), \qquad (2.45)$$

що аналогічне рівнянню (2.42).

2.4 Дифузійний процес у активному середовищі

У багатьох сучасних наукових дослідженнях [10] вивчаються процеси, в яких можлива об’ємна генерація дифузної речовини здійснюються зі швидкістю, пропорційною концентрації речовини. Зокрема, такий процес з розмноженням спостерігається при здійсненні реакції поділу важких ядер на кілька легших ядер з виділенням кількох нових нейтронів та виділенням значної ядерної енергії. За наявності такого процесу кількість нейтронів

збільшуватиметься, і за деяких умов можна очікувати здійснення процесу у вигляді ланцюгової реакції вибухового типу [10].

У дифузійній моделі процес поширення нейтронів в активному середовищі описується рівнянням виду (2.45) в якому u(M, t)-концентрація нейтронів, D-ефективний коефіцієнт дифузії нейтронів, $F = \alpha u - \beta u = \gamma u$,де α- коефіцієнт народження, β- коефіцієнт поглинання, $\gamma = \alpha - \beta$ – коефіцієнт розмноження нейтронів. Якщо γ>0, то процес об'ємної генерації нейтронів переважає над їх поглинанням, і саме в цьому випадку очікується виникнення ланцюгової реакції.

Таким чином, в основі математичної моделі ланцюгової реакції лежить дифузійне рівняння.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + \gamma u, \gamma > 0. \tag{2.46}$$

Використовуючи рівняння (3.11), опишемо процес еволюції нейтронів в активному середовищі ($\gamma \neq 0$), що є кулею радіуса r_0, якщо початковий розподіл нейтронів у цій кулі задано сферично симетричною функцією u(r, t) в будь який момент часу. Отримуємо задачу

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{D}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \gamma u, t > 0, 0 < r < r_0; \\ u(r, 0) = u_0(r), 0 \leq r \leq r_0; \\ u(0, t) = 0), t > 0. \end{cases} \tag{2.47}$$

Крайова умова у задачі (2.47) відповідає припущенню про швидке звільнення нейтронів, що виділяються з поверхні кулі, що дозволяє вважати концентрацію нейтронів на цій поверхні такою, що дорівнює нулю в будь який момент часу. Для розв'язування задачі (2.47) зробимо підстановку.

$$u(r, t) = v(r, t)e^{\gamma t}. \tag{2.48}$$

Тоді, враховуючи, що

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial t} e^{\gamma t} + \gamma v e^{\gamma t},$$

після підстановки (2.48) до рівнянь (2.47) отримаємо крайову задачу для невідомої функції v:

$$\begin{cases} \frac{1}{D}\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial v}{\partial r}, \quad t > 0, 0 < r < r_0, \\ v(r,0) = u_0(r), 0 \le r \le r_0, \\ v(r_0,t) = 0, t > 0. \end{cases} \tag{2.49}$$

Введемо тепер допоміжну функцію $w = ru$. Враховуючи, що [12]

$$\frac{\partial^2 w}{\partial r^2} = \frac{\partial}{\partial r}\left(v + r\frac{\partial u}{\partial r}\right) = r\left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial u}{\partial r}\right),$$

для визначення функції w(r, t) отримуємо наступну задачу:

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} = D\frac{\partial^2 w}{\partial r^2}, t > 0, \qquad 0 < r < r_0; \\ w(r,0) = ru_0(r), \qquad 0 \le r \le r_0; \\ w(0,t) = w(r_0,t), \qquad 0 \le r \le r_0. \end{cases} \tag{2.50}$$

Додаткова крайова умова для функції w в точці $r = 0$ є наслідком обмеженої функції u при $r = 0$.

Розв’язок задачі (2.50) отримано у [5] методом поділу змінних. Наведемо її розв’язок:

$$w(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\left(\frac{n\pi}{r_0}\right)^2 Dt} \sin\frac{n\pi r}{r_0}, \qquad (2.51)$$

де

$$a_n = \frac{2}{r_0}\int_0^{r_0} r u_0(r)\sin\frac{n\pi r}{r_0}. \qquad (2.52)$$

Повертаючись до функції $u(r,t)$ і отримаємо розв'язок вихідної задачі дифузії (2.47) у вигляді

$$u(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{\left[\gamma-\left(\frac{n\pi}{r_0}\right)^2 D\right]t}\frac{\frac{n\pi r}{r_0}}{r}. \qquad (2.53)$$

Як свідчать експериментальні дані [12] , $\gamma < \frac{\pi^2 D}{r_0^2}$, тому за будь-якого початкового розподілу концентрації нейтронів у кулі $u_0(r)$ число нейтронів у будь-якій її точці буде зменшуватися , прямує до нуля при $t \to \infty$. Ланцюгова реакція в цьому випадку не протікає при будь-якому початковому розподілі нейтронів.

Однак для досить великих значень коефіцієнта γ розмноження , коли при цьому $\gamma < \frac{\pi^2 D}{r_0^2}$, хоча один із показників експонент у розвиненні (2.53) стає додатним. Це означає, що концентрація нейтронів починає дуже швидко за експоненційним законом зростати з часом, реалізуючи режим ланцюгової реакції [10].

Отже, для заданих значень D і γ існують критичний радіус кулі та відповідна критична маса активної речовини , які можна розрахувати за формулами [12]

$$r_{кр} = \pi\sqrt{\frac{D}{\gamma}}; m_{кр} = \rho\frac{4}{3}\pi r_{кр}^3. \quad (2.54)$$

У кулі з активного середовища з розмноженням, маса якого менша за критичну, ланцюгова реакція не виникає. Якщо маса активної речовини з розмноженням нейтронів перевищує критичну, мимоволі починає розвиватися процес лавиноподібного зростання концентрації нейтронів і виділяється значна енергія від ділення важких ядер.

У роботі [11] розв'язано задачу про ланцюгову реакцію в загальному випадку , коли активна речовина займає деяку довільну за формою область Ω, обмежену поверхнею Σ. Розв'зок цієї задачі може бути записано у вигляді

$$u(M,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{\{\gamma-\lambda_n D\}t} u_n(M), M\epsilon\overline{\Omega},$$

де λ_nі $u_n(M)$ – відповідно власні значення та власні функції відповідної крайової задачі.

Умова, що визначає перебіг ланцюгової реакції , у цьому випадку має вигляд [11]:

$$\gamma > \lambda_1 D, \quad (2.55)$$

де λ_1 – перше(мінімальне)власне значення, яке визначається формулою і розміром області Ω.

Відповідно до теорії розмірності [11] з умови (2.55) випливає формула для визначення характерного критичного розміру області

$$L_{кр} = \delta\sqrt{D/\gamma}$$

де δ-деякий числовий коефіцієнт, що залежить від форми області Ω.

Таким чином, математичну модель у вигляді рівняння дифузії можна використати не лише для моделювання розповсюдження тепла у середовищі, але й для моделювання ядерних реакцій. Цю модель можна використати і для розв'язування задач екологічного прогнозування.

2.5 Задача екологічного прогнозування

Розрахунок рівняння забруднення навколишнього середовища продуктами діяльності промислових підприємств є важливим завданням охорони навколишнього середовища. Розглянемо задачу екологічного прогнозування, в основі математичної моделі якої лежить рівняння дифузії у рухомому середовищі (2.34).

Нехай в деякій плоскій області ω розташовані джерела речовини, що забруднюють навколишнє середовище. Потужність таких розподілених джерел будемо характеризувати для $M \in \omega$ і $t > 0$ заданою функцією $Q(M, t)$. В окремому випадку N локальних зосереджених джерел, розташованих у точках $M_j = M_j(x_j; y_j), j = 1,2, \dots N$, вони мають загальну потужність [9]

$$Q(M, t) = \sum_{j=1}^{N} \varphi_j(t)\delta_2(M, M_j),$$

де $\varphi_j(t)$ – потужність викиду забруднюючої речовини від j-го джерела задана для $t > 0$ як функція часу; $\delta_2(M, M_j) = \delta(x - x_j)\delta(y - y_j)$ – двовимірна дельта-функція, характеризує вплив зосередженого джерела забруднюючої субстанції.

Будемо вважати, що перенесення речовини у середовищі здійснюється як дифузією, так і конвективним механізмом перенесення [9], пов'язаним із рухом нестискуваного середовища, швидкість якого $\vec{v}\{v_1, v_2\}$ задана і не

залежить від часу і просторових координат, причому $v_1 = v_0 \cos\beta$, а $v_2 = v_0 \sin\beta$.

Нехай область екологічного прогнозування – це множина Ω, точок на координатній площині $\Omega = \{(x, y): 0 < x < L, 0 < y < L\}$, така, що $\omega \subset \Omega$. Будемо при цьому вважати, що розмір L області Ω досить великий, і тому на її межі $\partial\Omega$, віддаленій від джерел забруднення концентрацію забруднюючої речовини можна вважати такою, що дорівнює нулю.

Визначимо нестаціонарний розподіл концентрації $u(M, t)$ забруднюючої речовини знайдемо з розв'язування наступної крайової задачі [11].

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + \vec{v}\,\mathrm{grad}\, u = D\Delta_2 u - pu + Q(M, t), \;\; t > 0, \;\; M \in \Omega; \\ u(M, 0) = 0, \;\; M \in \Omega; \\ u(P, t) = 0, \;\; P \in \partial\Omega, \;\; t \geq 0. \end{cases} \tag{2.56}$$

Тут D – коефіцієнт турбулентної дифузії; $p > 0$ – деяка константа, яка визначає інтенсивність поглинання речовини у процесі її поширення, обумовленого перебігом хімічних реакцій осадженням та перенесенням речовини в інші шари середовища.

Зробимо заміну невідомої функції:

$$u(M, t) = w(M, t) e^{\frac{v_1 x + v_2 y}{2D}}, \tag{2.57}$$

отримаємо для функції $w(M, t)$ задачу

$$\begin{cases} \dfrac{\partial w}{\partial t} = D\Delta_2 w - kw + F(M, t), \;\; t > 0. \;\; M \in \Omega; \\ w(M, 0) = 0, \;\; M \in \Omega; \\ w(P, t) = 0, \;\; P \in \partial\Omega, \;\; t > 0, \end{cases} \tag{2.58}$$

де $k = p + v_0^2/(4D)$; $F(M, t) = Q(M, t) e^{-\frac{v_1 x + v_2 y}{2D}}$.

Тепер за допомогою підстановки [11]

$$\omega(M,t) = g(M,t)e^{-kt} \tag{2.59}$$

приходимо до наступної змішаної задачі відносно нової невідомої функції $g(M,t)$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial g}{\partial t} = D\Delta_2 g + f(M,t), \ \ t > 0, \ \ M \in \Omega; \\ g(M,0) = 0, \ \ M \in \Omega; \\ g(P,t) = 0, \ \ P \in \partial\Omega, \ \ t \geq 0, \end{cases} \tag{2.60}$$

де $f(M,t) = F(M,t)e^{kt}$.

Розв'язок задачі (2.60) будемо шукати у формі розвинення шуканої функції у подвійний тригонометричний ряд Фур'є:

$$g(x,y,t) = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} g_{nm}(t)\sin\frac{n\pi x}{L}\sin\frac{m\pi y}{L}. \tag{2.61}$$

Підставимо (2.61) у рівняння (2.60) і розвинувши функцію $f(M,t)$ у подвійний ряд Фур'є

$$f(x,y,t) = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} f_{nm}(t)\sin\frac{n\pi x}{L}\sin\frac{m\pi y}{L}$$

з коефіцієнтами

$$f_{nm}(t) = \frac{4}{L^2}\int_0^L\int_0^L f(x,y,t)\sin\frac{n\pi x}{L}\sin\frac{m\pi y}{L}\,dxdy,$$

отримуємо рівняння для визначення коефіцієнтів $g_{nm}(t)$:

$$\frac{dg_{nm}}{dt} + \alpha_{nm} g_{nm} = f_{nm}(t), \tag{2.62}$$

де $\alpha_{nm} = \frac{D\pi^2}{L^2}(n^2 + m^2)$.

В окремому випадку одиничного джерела сталої потужності, коли $Q(M,t) = Q_0 \delta_2(M, M_0)$, де $Q_0 = const > 0$, а $M_0 = M_0(x_0, y_0)$, маємо

$$f_{nm}(t) = \frac{4Q_0}{L^2} e^{kt} e^{-\frac{v_1 x_0 + v_2 y_0}{2D}} \sin\frac{n\pi x_0}{L} \sin\frac{m\pi y_0}{L};$$

$$g_{nm}(t) = \frac{4Q_0}{L^2}\left(e^{kt} - e^{-\alpha_{nm} t}\right) e^{-\frac{v_1 x_0 + v_2 y_0}{2D}} \frac{\sin\frac{n\pi x_0}{L} \sin\frac{m\pi y_0}{L}}{\lambda_{nm}},$$

де $\lambda_{nm} = \alpha_{nm} + k = \frac{D\pi^2}{L^2}(n^2 + m^2) + \frac{v_0^2}{4D} + p$.

Тому розподіл концентрації забруднюючої речовини в середовищі, що рухається поблизу такого активно діючого джерела забруднень можна подати у вигляді наступного подвійного тригонометричного ряду Фур'є:

$$u(x,y,t) = \frac{4Q_0}{L^2} e^{\frac{v_1(x-x_0) + v_2(y-y_0)}{2D}} \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}\left(1 - e^{-\lambda_{nm} t}\right) \times$$
$$\times \frac{\sin\frac{n\pi x}{L} \sin\frac{n\pi x_0}{L} \sin\frac{m\pi y}{L} \sin\frac{m\pi y_0}{L}}{\lambda_{nm}}. \tag{2.63}$$

Перейшовши у цій рівності до границі при $t \to \infty$ із формули (2.63) можна знайти стаціонарне поле концентрації поблизу постійно діючого джерела забруднення[11].

Отже, у цьому розділі наведено важливі для практики розв'язки задач дифузії, зокрема, двовимірної задачі математичного моделювання

симетричного дифузійного процесу у різних системах координат. Наведено розв’язання задачі дифузії у динамічному та активному середовищі. Застосовано метод Фур’є для розв’язання двовимірної задачі дифузіїї. Отриманий розв’язок можна використати для прогнозування рівня забруднення навколишнього середовища, тобто для розв’язування задачі екологічного прогнозування.

3 ОПЕРАЦІЙНИЙ МЕТОД РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ

3.1 Сутність операційного методу

Ефективним засобом, що використовується при розв'язанні різноманітних задач математичного аналізу та у практичних науково-технічних дослідженнях, є інтегральне перетворення Лапласа [13,14].

Перетворенням Лапласа функції $f(t)$, $t \in R$, називають комплексну функцію $F(p)$ комплексної змінної p, що визначається рівністю:

$$F(p) = \int_0^{+\infty} f(t) e^{-pt} dt . \tag{3.1}$$

Функцію $F(p)$ називають зображенням функції $f(t)$ при перетворенні Лапласа. Метод розв'язання функціональних рівнянь різноманітних видів за допомогою перетворення Лапласа називають операційним методом [13].

Оригіналом при перетворенні Лапласа називають довільну функцію $f(t)$, що задовольняє наступним умовам:

а) $f(t) = 0$ при $t < 0$;

б) на довільному обмеженому інтервалі $f(t)$ може мати лише скінченне число точок розриву першого роду;

в) $|f(t)|$ зростає не швидше експоненти, тобто існують такі сталі $\alpha \geq 0$ та $M > 0$, що $|f(t)| < M \cdot e^{\alpha t}$. При цьому точну нижню грань α_0 значень α, для яких виконано останню умову, називають показником зростання для $f(t)$.

Всім вимогам функції оригіналу задовольняє функція Хевісайда або одинична функція [13]:

$$\eta(t)=\begin{cases}1, & t\geq 0;\\ 0, & t<0.\end{cases}$$

Її показником зростання є число $\alpha_0=0$.

Якщо функція $f(t)$ є оригіналом з показником зростання α_0, то інтеграл Лапласа $F(p)=\int\limits_0^{+\infty} f(t)e^{-pt}dt$ є абсолютно збіжним у півплощині $\operatorname{Re} p>\alpha_0$ комплексної площини p і визначає зображення $F(p)$, яке є функцією, аналітичною у цій півплощині [14] .

Якщо функція $F(p)$ є зображенням функції $f(t)$ з показником зростання α, то $\lim\limits_{p\to\infty}F(p)=0$.

За формулою (3.1) кожному оригіналу ставиться у відповідність функція $F(p)$. Цю відповідність між оригіналом $f(t)$ та його зображенням $F(p)$ надалі будемо записувати у вигляді: $f(t)\div F(p)$.

Оскільки оригінал дорівнює нулю при $t<0$, то для спрощення записів будь-яку функцію виду $f(t)\cdot\eta(t)$ будемо позначати $f(t)$.

Розглянемо основні властивості перетворення Лапласа [14].

Властивість лінійності полягає у тому, що зображення лінійної комбінації оригіналів зображенням є відповідна лінійна комбінація зображень, тобто якщо $f(t)\div F(p)$, $g(t)\div G(p)$, то зображення лінійної комбінації функцій $f(t)$ та $g(t)$ має вигляд $A\cdot f(t)+B\cdot g(t)\div A\cdot F(p)+B\cdot G(p)$, де A та B – деякі дійсні або комплексні константи.

При знаходженні зображень використовують теореми подібності та зміщення. Згідно з теоремою подібності для $f(t)\div F(p)$та для довільної дійсної сталої $\alpha>0$ $f(\alpha t)\div\frac{1}{\alpha}F\left(\frac{p}{\alpha}\right)$.

При знаходженні оригіналів та зображень використовують теореми зміщення та запізнення [13]. Теорема зміщення стверджує, що, якщо $f(t) \div F(p)$, то $e^{at} f(t) \div F(p-a)$, де a – довільна стала.

Згідно з теоремою запізнення, якщо $f(t) \div F(p)$, то зображення $f(t-\tau) \div e^{-p\tau} \cdot F(p)$, де $\tau > 0$ – довільна стала.

Ця теорема дає можливість знаходити зображення кусково-неперервних функцій, зокрема, функцій, що описують імпульсні процеси [13].

Важливою властивістю для розв'язування задач операційним методом є теорема випередження. Якщо $f(t) \div F(p)$, то для довільної константи $\tau > 0$

$$f(t+\tau) \div e^{p\tau}\left(F(p) - \int_0^{\tau} f(t) e^{-pt} dt\right).$$

Для знаходження оригіналів та зображень використовують теорему диференціювання по параметру [14]. Якщо $f(t,x) \div F(p,x)$ і функція $f(t,x)$ при кожному фіксованому значенні x є оригіналом, а функція $F(p,x)$ має частинну похідну по x, то $\dfrac{\partial f(t,x)}{\partial x} \div \dfrac{\partial F(p,x)}{\partial x}$.

Для розв'язування диференціальних рівнянь операційним методом, зокрема, для знаходження зображення похідних, використовують теорему про диференціювання оригіналу [14]. Згідно з цією теоремою, якщо $f(t) \div F(p)$ і функції $f'(t),\ f''(t),\ldots, f^{(n)}(t)$ є оригіналами, то

$$f'(t) \div pF(p) - f(0),$$

$$f''(t) \div p^2 F(p) - pf(0) - f'(0),$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots,$$

$$f^{(n)}(t) \div p^n F(p) - p^{n-1} f(0) - p^{n-2} f'(0) - \ldots - f^{(n-1)}(0).$$

Якщо для функції $f(t)$ $f(0)=f'(0)=...=f^{(n-1)}(0)=0$, то отримуємо: $f^{(n)}(t)\div p^n F(p)$.

З теореми про диференціювання оригіналу випливають наступні наслідки [13]. Якщо $f'(t)$ є оригіналом, а функція $F(p)$ аналітична при $p\to\infty$, то $\lim\limits_{p\to\infty} pF(p)=f(0)$. Якщо $f'(t)$ є оригіналом і існує границя функції $f(t)$ при $t\to\infty$, то $\lim\limits_{p\to 0} pF(p)=\lim\limits_{t\to\infty} f(t)$.

Для знаходження зображень добутків многочленів на трансцендентні функції можна застосовувати теорему про диференціювання зображення [13]. Якщо $f(t)\div F(p)$, то $F'(p)\div -tf(t)$, $F''(p)\div t^2 f(t)$, …, $F^{(n)}(p)\div(-1)^n t^n f(t)$.

При практичному застосуванні операційного методу для знаходження зображень та оригіналів використаємо теореми про інтегрування оригіналу та зображення. Якщо $f(t)\div F(p)$, то

$$\int_0^t f(\tau)d\tau \div \frac{F(p)}{p}.$$

Якщо $f(t)\div F(p)$ і інтеграл $\int\limits_p^\infty F(q)dq$ збіжний, то $\int\limits_p^\infty F(q)dq \div \frac{f(t)}{t}$.

При розв’язуванні інтегральних рівнянь типу згортки використовують теорему множень зображень [14].

Згорткою неперервних функцій $f(t)$ та $g(t)$, $t\ge 0$, називають інтеграл

$$f * g = \int_0^t f(\tau)g(t-\tau)d\tau .$$

Операція згортки є комутативною: $f * g = g * f$. Крім того, згортка неперервних функцій також є неперервною.

Якщо функції $f(t)$ та $g(t)$ є оригіналами, то їх згортка також є оригіналом. Згідно з теоремою множення зображень, можна знайти зображення згортки функцій [14].

Якщо $f(t) \div F(p)$, а $g(t) \div G(p)$, то $F(p) \cdot G(p) \div f(t) * g(t)$, де $f(t) * g(t) = \int_0^t f(\tau) \cdot g(t-\tau) d\tau$ – згортка функцій $f(t)$ і $g(t)$.

З теореми множення зображення випливає, що, коли $f * g \div F(p) \cdot G(p)$ і $f'(t)$ є оригіналом, то виконується формула Дюамеля [14]:

$$pF(p)G(p) \div \int_0^t f'(\tau) g(t-\tau) d\tau + f(0) g(t).$$

Дійсно, вираз $pF(p)G(p)$ можна записати у вигляді:

$$pF(p)G(p) = \big(pF(p) - f(0)\big)G(p) + f(0)G(p) \div f'(t) * g(t) + f(0) g(t).$$

При розв’язуванні задач операційним методом використовують і наступну форму формули Дюамеля [14]:

$$pF(p)G(p) \div \int_0^t g'(\tau) f(t-\tau) d\tau + g(0) f(t).$$

Формулу Дюамеля застосовують при розв’язанні лінійних неоднорідних диференціальних рівнянь.

Визначення оригіналу при перетворенні Лапласа за відомим зображенням ґрунтується на використанні формули обернення Рімана-Мелліна [13].

Якщо функція $f(t)$ є оригіналом, а $F(p)$ – її зображення, то у кожній точці неперервності функції $f(t)$ справедлива формула обернення Рімана-Мелліна:

$$f(t)=\frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty}F(p)e^{pt}dp, \qquad (3.2)$$

де інтегрування здійснюється по довільній прямій $\operatorname{Re} p=\gamma$, $\gamma>\alpha$ (α – показник зростання функції $f(t)$) і інтеграл розглядається у розумінні головного значення.

На практиці для знаходження оригіналу за відомим його зображенням використовують теореми розвинення [13,14] .

Перша теорема розвинення звичайно застосовується, коли зображення є трансцендентною функцією, розвинення якої у ряд Лорана містить лише головну частину. Згідно з цією теоремою, якщо функція $F(p)$ є аналітичною у околі нескінченно віддаленої точки $p=\infty$ і її розвинення у ряд Лорана має вигляд $F(p)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{c_n}{p^{n+1}}$, то функція $f(t)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n\frac{t^n}{n!}$ є оригіналом для $F(p)$.

При розв’язанні диференціальних та інтегральних рівнянь у багатьох випадках зображенням їх розв’язків є раціональні функції. У таких випадках доцільно застосовувати другу теорему розвинення для знаходження оригіналу. Згідно з нею, якщо функція $F(p)$ є однозначною та має скінченне число особливих точок p_1, p_2,…, p_n, то функція

$$f(t)=\sum_{k=1}^{n}\text{Res}\left(e^{p_k t}F(p_k)\right) \tag{3.3}$$

є оригіналом, що має зображення $F(p)$.

Операційний метод ефективно застосовується для розв'язання не лише звичайних диференціальних рівнянь, але й рівнянь у частинних похідних, в тому числі й рівнянь дифузії. Рівняння дифузії є математичною моделлю для багатьох нестаціонарних задач, що ставляться для перехідних процесів та інших процесів, що змінюється у часі. Розв'язок таких задач суттєво залежить від початкових умов. Для рівняння дифузії початковою умовою є задання початкової концентрації речовини у момент часу $t = 0$, $u(x, 0) = \varphi(x)$.

При розв'язуванні нестаціонарних задач використовують операційний метод. Перетворення Лапласа здійснюється за змінною t часу. Рівняння дифузії є рівнянням параболічного типу. Розглянемо застосування перетворення Лапласа для одновимірного рівняння параболічного типу. Загальний вигляд такого рівняння:

$$A(x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+B(x)\frac{\partial u}{\partial x}+C(x)\frac{\partial u}{\partial t}+D(x)u=0. \tag{3.4}$$

Нестаціонарна задача, що зводиться до рівняння (3.4) формулюють наступним чином. Потрібно визначити розв'язок $u(x,t)$ на відрізку $0 \le x \le l$ для часу $t \ge 0$, що задовольняє початковій умові , $u(x,0)=\varphi(x)$ та крайовим умовам

$$u(0,t)=f(t),\ \ \alpha\frac{\partial u(l,t)}{\partial x}+\beta\frac{\partial u(l,t)}{\partial t}=\gamma u(l,t)\text{є} \tag{3.5}$$

Знайдемо розв'язок цієї задачі операційним методом. Нехай $u(x,t), \frac{\partial u(x,t)}{\partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ як функції часу t є оригіналами для перетворення Лапласа. Тоді зображення невідомої функції $U(x,p)=\int_0^{+\infty}u(x,t)e^{-pt}dt$, тобто

функція $U(x,p)$ є зображенням розв'язку $u(x,t) \div U(x,p)$. Операції диференціювання за змінною x та інтегрування можна переставляти між собою, тому отримуємо:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \div \frac{\partial}{\partial x}\int_0^{+\infty} u(x,t)e^{-pt}dt = \int_0^{+\infty} \frac{\partial u(x,t)}{\partial x}e^{-pt}dt = \frac{dU}{dx}.$$

Аналогічно для зображення другої похідної розв'язку задачі за змінною x отримуємо, що $\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \div \frac{d^2U}{dx^2}$.

За властивістю диференціювання оригіналу маємо:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \div pU(x,p) - u(x,0).$$

Зображення рівняння (3.4) при перетворенні Лапласа є звичайне диференціальне рівняння відносно зображення $U(x,p)$ невідомої функції:

$$A(x)\frac{d^2U}{dx^2} + B(x)\frac{dU}{dx} + C(x)\big(pU - u(x,0)\big) + D(x)U = 0. \qquad (3.6)$$

Додатковими умовами для цього рівняння є крайові умови, які отримаємо, застосувавши перетворення Лапласа до крайових умов (3.5):

$$U(0,p) = F(p), \alpha\frac{dU(l,p)}{dx} + (\beta p - \gamma)U(l,p) - \beta\varphi(l) = 0. \qquad (3.7)$$

Знайшовши розв'язок лінійного диференціального рівняння (3.6) з крайовими умовами (3.7), отримаємо зображення розв'язку нестаціонарної задачі (3.4), (3.5). Після цього за знайденим зображенням $U(x,p)$ знаходимо його оригінал – розв'язок задачі $u(x,t)$.

Застосуємо викладений операційний метод розв'язування рівнянь у частинних похідних до розв'язування задач дифузії.

3.2 Приклади розв'язання задачі дифузії операційним методом

Знайдемо розподіл концентрації речовини $u(x,t)$, що дифундує у у лінійному середовищі $x>0$ при відсутності джерел речовини у цьому середовищі, якщо при $x=0$ підтримується стала концентрація речовини $u(0,t)=u_0$. У початковий момент часу $t=0$ речовина у середовищі відсутня. Для отримання розв'язку цієї задачі потрібно розв'язати однорідне рівняння дифузії

$$\frac{\partial u}{\partial t}=D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

з крайовими умовами $u(0,t)=u_0$, $\lim\limits_{x\to\infty}u(x,t)=0$ та початковою умовою $u(x,0)=0$.

Застосуємо до рівняння дифузії перетворення Лапласа. Зображення невідомого розв'язку $u(x,t)$ позначимо $U(x,p)$. Тоді зображеннями похідних $\frac{\partial u}{\partial t}$, $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ мають вигляд: $\frac{\partial u}{\partial t}\div pU(x,p), \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\div\frac{d^2U}{dx^2}$. Тоді отримаємо відносно зображення $U(x,p)$ звичайне диференціальне лінійне однорідне рівняння зі сталими коефіцієнтами:

$$\frac{d^2U}{dx^2}-\frac{p}{D}U=0. \tag{3.8}$$

Його характеристичне рівняння має вигляд: $k^2-\frac{p}{D}=0$. Його корені мають вигляд $k_{1,2}=\pm\sqrt{\frac{p}{D}}$. Цим кореням відповідає загальний розв'язок

$$U(x,p)=C_1e^{-\frac{x\sqrt{p}}{\sqrt{D}}}+C_2e^{\frac{x\sqrt{p}}{\sqrt{D}}}. \tag{3.9}$$

З умови $\lim_{x\to\infty} u(x,t) = 0$ випливає, що $C_2 = 0$. Крайова умова для зображення має вигляд $U(0,p) = \frac{u_0}{p}$, оскільки $1 \div \frac{1}{p}$, $u_0 = \text{const}$. Використовуючи цю умову, отримаємо, що $C_1 = \frac{u_0}{p}$. Отже, зображення розв'язку задачі має вигляд: $U(x,p) = \frac{u_0}{p}\, e^{-\frac{x\sqrt{p}}{\sqrt{D}}}$. Для знаходження оригіналу використаємо таблицю зображень основних елементарних функцій при перетворенні Лапласа [14], звідси знаходимо, що $\frac{1}{p}e^{-a\sqrt{p}} \div \text{Erf}\left(\frac{a}{\sqrt{t}}\right)$, тому при $a = \frac{x}{\sqrt{D}}$ отримаємо, що : $U(x,p) = \frac{u_0}{p}\, e^{-\frac{x\sqrt{p}}{\sqrt{D}}} \div u_0 \cdot \text{Erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D}\cdot\sqrt{t}}\right)$. Тобто розв'язок задачі – розподіл концентрації речовини у лінійної середовищі має вигляд:

$$u(x,t) = u_0 \cdot \text{Erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D}\cdot\sqrt{t}}\right). \qquad (3.10)$$

Тут функція $\text{Erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_z^{+\infty} e^{-\tau^2} d\tau$. Ця спеціальна функція виражається через інтеграл ймовірностей $\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^z e^{-\tau^2} d\tau$: $\text{Erf}(z) = 1 - \Phi(z)$. Отриманий розв'язок не визначений при $t = 0$. Початкову умову $u(x,0) = 0$ слід розуміти у тому сенсі, що $\lim_{t\to 0} u(x,t) = 0$. Дійсно, перейшовши до границі, отримаємо $\cdot \lim_{t\to 0} \text{Erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D}\cdot\sqrt{t}}\right) = 1 - \Phi(\infty) = 0$. Тому отриманий розв'язок задовольняє початкову умову.

Отримавши розв'язок для крайової умови $u(0,t) = u_0$, застосуємо теорему множення зображень та знайдемо розв'язок задачі при крайовій умові загального вигляду $u(0,t) = \varphi(t)$, при цьому вважаємо, що початкова умова $u(x,0) = 0$ зберіглася. Нехай зображенням функції $\varphi(t)$ є функція $F(p)$. Тоді крайова умова для диференціального рівняння (3.8) відносно зображення $U(x,p)$ матиме вигляд $U(0,p) = F(p)$. Використовуючи цю початкову умову для знаходження сталої інтегрування C_1. При цьому значення

$C_2 = 0$. З умови $U(0,p) = F(p)$ знаходимо, що $C_1 = F(p)$. Отже, отримуємо зображення розв'язку рівняння у зображеннях (3.8) для цієї крайової умови у вигляді $U(x,p) = F(p)\, e^{-\frac{x\sqrt{p}}{\sqrt{D}}}$. Згідно з таблицею зображень при перетворенні Лапласа [14] для зображення $e^{-a\sqrt{p}}$ оригіналом є $\frac{a}{2\sqrt{\pi t^3}} e^{-\frac{a^2}{4t}}$. Замінивши тут a на $\frac{x}{\sqrt{D}}$, отримаємо:

$$e^{-\frac{x\sqrt{p}}{\sqrt{D}}} \div \frac{x e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{2\sqrt{D\pi t^3}}.$$

Для знаходження оригіналу для зображення $F(p)\, e^{-\frac{x\sqrt{p}}{\sqrt{D}}}$ застосуємо теорему добутку зображення, згідно з якою оригінал добутку двох зображень дорівнює згортці оригіналів цих зображень. Тому оригінал для знайденого зображення розв'язку є згортка функцій $\varphi(t)$ та $\frac{x e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{2\sqrt{D\pi t^3}}$. Таким чином, розв'язок даної задачі дифузії є функція

$$u(x,t) = \frac{x}{2\sqrt{D\pi}} \int_0^t \varphi(\tau) \frac{e^{-\frac{x^2}{4D(t-\tau)}}}{(t-\tau)^{3/2}} d\tau.$$

Розглянемо розв'язання рівняння дифузії, коли у лінійному обмеженому середовищі $0 \le x \le l$ наявне джерело речовини, що дифундує з інтенсивністю $f(x,t)$, тобто рівняння дифузії має вигляд

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x,t). \qquad (3.11)$$

Для рівняння (3.11) маємо початкову умову $u(x,0) = \varphi(x)$ та крайовим умовам

$$u(0,t) = \psi_1(t), u(l,t) = \psi_2(t). \quad (3.12)$$

Вважаємо, що функції $u(x,t), \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ задовольняють вимогам до функцій-оригіналам, тобто до рівняння можна застосувати перетворення Лапласа. Позначимо зображення шуканої функції $u(x,t)$ $U(x,p)$. Тоді зображення рівняння (3.11) має вигляд

$$D\frac{d^2U}{dx^2} - pU + \varphi(x) + F(x,p) = 0. \quad (3.13)$$

Якщо зображення крайових умов мають вигляд

$$\psi_1(t) \div \Psi_1(p), \psi_2(t) \div \Psi_2(p), \quad (3.14)$$

То отримали крайову задачу для диференціального лінійного рівняння (3.13) другого порядку зі сталими коефіцієнтами. Сталі інтегрування у його загальному розв'язку визначаються з крайових умов (3.14). Особливі труднощі при розв'язанні рівняння дифузії з неоднорідних крайових умов та початкової умови пов'язані з переходом від зображення до оригіналу. Для розв'язання такого рівняння дифузії доцільно використати на операційний метод, а метод поділу змінних. Тільки попередньо зробити заміну невідомої функції, щоб перейти до задачі з однорідними крайовими умовами [7].

Розглянемо дифузію речовини у складеній трубці. Нехай у напівнескінченній трубці, кінець якої $x=0$ закритий непроникною перегородкою, у точці $x=l$ також знаходиться непроникна перегородка. Ділянка трубки $(0;l)$, що має середовище з коефіцієнтом дифузії $D_1 = 1/a^2$, заповнена речовиною зі сталою концентрацією u_0. У частині трубці $(l;+\infty)$, що має середовище з коефіцієнтом дифузії $D_2 = 1/b^2$, речовина, що дифундує, відсутня. У момент часу $t=0$ непроникну перегородку при $x=l$ прибирають

і розпочинається процес дифузії. Потрібно визначити концентрацію речовини $u(x,t)$ у момент часу t у точці x.

Нехай $D_2 = 1/b^2 = 1$. Запишемо рівняння для концентрації речовини $u(x,t)$ окремо на ділянках $(0;l)$ та $(l;+\infty)$. Нехай на ділянці $x \in (0;l)$ концентрація $u_1(x,t)$ задовольняє рівняння:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = \frac{1}{a^2} \cdot \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}, \tag{3.15}$$

умові $u_1(x,0) = u_0$ та умові

$$\left.\frac{\partial u_1}{\partial x}\right|_{x=0} = 0, \tag{3.16}$$

а функція $u_2(x,t)$ при $l \le x < \infty$ задовольняє рівняння

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} \tag{3.17}$$

та початковій умові $u_2(x,0) = 0$. З фізичних міркувань випливає, що при $x \to \infty$ прямувала до 0 концентрація $u_2(x,t) \to 0$. У точці $x = l$ функції $u_1(x,t)$ та $u_1(x,t)$ задовольняти крайовим умовам «склеювання»:

$$u_1(l,t) = u_2(l,t), \quad \frac{1}{a^2}\frac{\partial u_1(l,t)}{\partial x} = \frac{\partial u_2(l,t)}{\partial x}. \tag{3.18}$$

Допустимо, що шукані функції $u_1(x,t)$ та $u_2(x,t)$ задовольняють умови для функцій-оригіналів при перетворенні Лапласа за змінною t. Введемо

позначення $u_1(x,t) \div U_1(x,p), u_2(x,t) \div U_2(x,p)$. Тут $U_1(x,p)$ та $U_2(x,p)$ – це зображення функцій $u_1(x,t)$ та $u_2(x,t)$. Зображення похідних при перетворенні Лапласа набуває вигляду:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} \div pU_1(x,p) - u_0, \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} \div \frac{\partial^2 U_1(x,p)}{\partial x^2},$$
$$\frac{\partial u_2}{\partial t} \div pU_2(x,p), \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} \div \frac{\partial^2 U_2(x,p)}{\partial x^2}.$$

Від рівнянь (3.15) та (3.17) перейдемо до операторних рівнянь (рівнянь у зображеннях) відносно невідомих функцій-зображень. Враховуючи, що p – комплексний параметр інтегрального перетворення Лапласа, отримуємо лінійні звичайні диференціальні рівняння:

$$pU_1(x,p) = \frac{1}{a^2} \cdot \frac{d^2 U_1(x,p)}{dx^2} + u_0,\ pU_2(x,p) = \frac{d^2 U_2(x,p)}{dx^2}. \qquad (3.19)$$

Розв’язуючи ці лінійні диференціальні рівняння зі сталими коефіцієнтами, отримуємо загальні розв’язки цих рівнянь у вигляді:

$$U_1(x,p) = A\mathrm{ch}ax\sqrt{p} + B\mathrm{sh}ax\sqrt{p} + \frac{u_0}{p},$$
$$U_2(x,p) = Ce^{(x-l)\sqrt{p}} + De^{-(x-l)\sqrt{p}}.$$

З умови (3.16), отримуємо співвідношення для зображення:

$$\left.\frac{dU_1(x,p)}{dx}\right|_{x=0} = 0,$$

з якого випливає рівність

$$Aa\sqrt{p}\,\mathrm{sh}ax\sqrt{p} + Ba\sqrt{p}\,\mathrm{ch}ax\sqrt{p}\Big|_{x=0} = B = 0.$$

Розв'язок $u_2(x,t) \to 0$ при $x \to \infty$, тому зображення $U_2(x,p)$ є обмеженим при $x \to \infty$. Це можливо за умови $C = 0$. Таким чином, розв'язки рівнянь (3.19) набувають вигляд:

$$U_1(x,p) = A\mathrm{ch}ax\sqrt{p} + \frac{u_0}{p},\ U_2(x,p) = De^{-(x-l)\sqrt{p}}$$

Запишемо для цих зображень крайові умови, так звані умови «склеювання»:

$$U_1(l,p) = U_2(l,p),\ \frac{1}{a^2}\frac{dU_1(x,p)}{dx}\Big|_{x=l} = \frac{dU_2(x,p)}{dx}\Big|_{x=l}.$$

З врахування цих умов для знаходження сталих A та D отримаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$A\mathrm{ch}al\sqrt{p} + \frac{a_0}{p} = D,\quad \frac{1}{a^2}Aa\sqrt{p}\,\mathrm{sh}al\sqrt{p} = -D\sqrt{p}$$

Звідси отримуємо значення сталих A та D:

$$A = -\frac{u_0 a}{p\left(\mathrm{sh}al\sqrt{p} + a\mathrm{ch}al\sqrt{p}\right)},\ D = \frac{u_0\mathrm{sh}al\sqrt{p}}{p\left(\mathrm{sh}al\sqrt{p} + a\mathrm{ch}al\sqrt{p}\right)}.$$

Таким чином, розв'язки рівнянь (3.19) – зображення шуканих функцій мають вигляд:

$$U_1(x,p)=\frac{u_0}{p}-\frac{u_0 a\,\mathrm{ch}\left(ax\sqrt{p}\right)}{p\left(\mathrm{sh}al\sqrt{p}+a\,\mathrm{ch}al\sqrt{p}\right)},\ 0\le x\le l,$$

$$U_2(x,p)=\frac{u_0\,\mathrm{sh}al\sqrt{p}}{p\left(\mathrm{sh}al\sqrt{p}+a\,\mathrm{ch}al\sqrt{p}\right)}e^{-(x-l)\sqrt{p}},\ l\le x<\infty.$$

Використовуючи теореми розвинення, за знайденими зображеннями $U_1(x,p)$ та $U_2(x,p)$ знаходимо їх оригінали та отримаємо розв'язок задачі у вигляді:

$$u(x,t)=\begin{cases}u_1(x,t), 0\le x\le l,\\ u_2(x,t), l\le x<\infty.\end{cases}$$

За знайденими зображеннями $U_1(x,p)$ та $U_2(x,p)$ знаходимо їх оригінали $u_1(x,t)$, $u_2(x,t)$. Для цього знайдемо особливі точки цих зображень – корені знаменника зображень $U_1(x,p)$ та $U_2(x,p)$. Позначимо $F(p)=p\left(\mathrm{sh}(al\sqrt{p})+a\,\mathrm{ch}\left(al\sqrt{p}\right)\right)$.

Особливі точки зображень – корені рівняння $F(p)=0$. Особлива точка $p^*=0$ є простим полюсом, решту особливих точок є коренями рівняння

$$sh\left(al\sqrt{p}\right)+ach\left(al\sqrt{p}\right)=0. \qquad (3.20)$$

Замінивши $sh\left(al\sqrt{p}\right)$ та $ch\left(al\sqrt{p}\right)$ через показникові функції

$$sh\left(al\sqrt{p}\right)=\frac{e^{al\sqrt{p}}-e^{-al\sqrt{p}}}{2},\ \ ch\left(al\sqrt{p}\right)=\frac{e^{al\sqrt{p}}+e^{-al\sqrt{p}}}{2}$$

та помноживши обидві частини рівняння (3.20) на $e^{al\sqrt{p}}$, після приведення подібних доданків отримаємо рівняння:

$$e^{2al\sqrt{p}} = \frac{1-a}{1+a}, \quad 2al\sqrt{p} = \operatorname{Ln}\frac{1-a}{1+a}, \sqrt{p} = \frac{1}{2al}\operatorname{Ln}\frac{1-a}{1+a} =$$
$$= \frac{1}{2al}\left(\ln\frac{|1-a|}{1+a} + 2k\pi i\right), k \in \square.$$

Розглянемо випадок, коли $0 < a < 1$. Тоді отримаємо, що

$$\sqrt{p_k} = \frac{1}{2al}\operatorname{Ln}\frac{1-a}{1+a} = \frac{1}{2al}\left(\ln\frac{1-a}{1+a} + 2k\pi i\right), k \in \square.$$

Звідси знаходимо, що особливі точки визначаються виразами:

$$p_k = \frac{1}{4a^2l^2}\left(\ln\frac{1-a}{1+a} + 2k\pi i\right)^2 = \alpha_k + \beta_k i, \qquad (3.21)$$

$$\alpha_k = \frac{1}{4a^2l^2}\left(\ln^2\frac{1-a}{a+1} - 4k^2\pi^2\right), \beta_k = \frac{1}{a^2l^2}\ln\frac{1-a}{1+a}\cdot k\pi. \qquad (3.22)$$

Запишемо зображення $U_1(x,p)$ та $U_2(x,p)$ у вигляді:

$$U_1(x,p) = \frac{u_0}{p} - \frac{G_1(x,p)}{F(p)},\ U_2(x,p) = \frac{G_2(x,p)}{F(p)},$$

$$G_1(x,p) = u_0 a\operatorname{ch}\left(ax\sqrt{p}\right),\ G_2(x,p) = u_0\operatorname{sh}\left(al\sqrt{p}\right)e^{-(x-l)\sqrt{p}}.$$

Оригінал для дробу $\frac{u_0}{p}$, що є доданком у зображенні $U_1(x,p)$, дорівнює u_0. Оригінали для зображень $U_1(x,p)$ та $U_2(x,p)$ знаходимо за другою теоремою розвинення для випадку коли зображення має нескінченну кількість

особливих точок [13], згідно з цією теоремою оригінали визначаються рівностями

$$u_1(x,t) = u_0 + \sum_{k=0}^{\infty} \text{res}[U_1(p_k)e^{p_k t}],\ u_2(x,t) = \sum_{k=0}^{\infty} \text{res}[U_2(p_k)e^{p_k t}]. \quad (3.23)$$

Похідна знаменнику $F(p)$ зображень має вигляд:

$$F'(p) = sh\left(al\sqrt{p}\right)\left(1 + \frac{\sqrt{p}a^2 l}{2}\right) + a\left(1 + \frac{l\sqrt{p}}{2}\right)ch\left(al\sqrt{p}\right).$$

Лишки у формулі (3.23) обчислюємо з врахуванням, того, що особливі точки p_k є простими полюсами. Це випливає з того, що $F'(p_k) \neq 0$ і ці похідні існують і є константами.

$$\text{res}\left[\frac{G_1 e^{pt}}{F}\right] = \frac{G_1(x,p_k)e^{p_k t}}{F\prime(p_k)},\ \text{res}\left[\frac{G_2 e^{pt}}{F}\right] = \frac{G_2(x,p_k)e^{p_k t}}{F\prime(p_k)}.$$

З допомогою системи комп'ютерної математики Maple виконано підстановки у ці вирази особливі точки p_k, перетворення та спрощення отриманих виразів, після підстановки у (3.23) отримали наступні оригінали:

$$u_1(x,t) = u_0\left(1 - \sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{\alpha_k}{a}cos\frac{k\pi}{al} + \beta_k sin\frac{k\pi}{al}\right)e^{-k\frac{\pi}{al}t^2}cos\frac{\beta_k x}{l}\right), \quad (3.24)$$

$$u_2(x,t) = u_0\text{Erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}}\right)\sum_{k=0}^{\infty}\left(\alpha_k^2 sin\frac{k\pi}{al} - \beta_k cos\frac{k\pi}{al}\right)\left(e^{-k\frac{\pi t^2}{al}}cos\frac{\beta_k x}{l}\right). \quad (3.25)$$

Виконавши дослідження для випадку $a > 1$. Отримаємо, що

$$\sqrt{p_k} = \frac{1}{2al}\text{Ln}\frac{1-a}{1+a} = \frac{1}{2al}\left(\ln\frac{a-1}{1+a} + (2k+1)\pi i\right), k \in \square.$$

Тоді особливі точки мають вигляд:

$$p_k = \frac{1}{4a^2l^2}\left(\ln\frac{1-a}{1+a} + (2k+1)\pi i\right)^2 = \alpha_k + \beta_k i, \tag{3.26}$$

$$\alpha_k = \frac{1}{4a^2l^2}\left(\ln^2\frac{1-a}{a+1} - (2k+1)^2\pi^2\right),\ \beta_k = \frac{1}{a^2l^2}\ln\frac{1-a}{1+a}\cdot\frac{2k+1}{2}k\pi. \tag{3.27}$$

Тоді для випадку $a > 1$ у оригіналах (3.24) та (3.25) коефіцієнти α_k та β_k визначаються за формулами (3.27).

Отже, розв'язок задачі має вигляд:

$$u(x,t) = \begin{cases} u_1(x,t), 0 \le x \le l, \\ u_2(x,t), l \le x < \infty. \end{cases}$$

Функції $u_1(x,t)$ та $u_2(x,t)$ визначаються за формулами (3.24) та (3.25).

Ефективність застосування операційного методу суттєво залежить від характеру неоднорідності задачі дифузії: видів функцій у правій частині рівняння, у крайових умовах та початковій умові. Для таких неоднорідних задач зображення розв'язку у більшості випадків виявляється складною трансцендентною функцією, перехід до оригіналу для якої виконати нелегко.

Операційний метод та розглянутий у першому розділі магістерської роботи метод Фур'є розв'язання задачі дифузії часто доповняють один одного з точки зору ефективності застосування. За допомогою методу Фур'є зручно розв'язувати задачу дифузії з однорідними крайовими умовами та довільною початковою умови. Операційний метод краще застосовувати за нульової початкової умови та для довільних крайових умов. Таким чином, операційний метод є ефективним засобом розв'язування крайових задач та задачі Коші для рівняння дифузії та різноманітних нестаціонарних задач.

ВИСНОВКИ

У кваліфікаційній роботі магістра виконано дослідження основних математичних моделей дифузійних процесів та розв’язано важливі задачі дифузії операційним методом.

У першому розділі магістерського дослідження розглянуто отримання лінійного рівняння дифузії, виконано основних існуючих методів розв’язання крайових задач для цього рівняння, а також задачі Коші. Основну увагу тут приділено методу функцій Гріна, що дає можливість розв’язання рівняння дифузії для нестаціонарних крайових умов. Можливість застосування методу Фур1є для розв’язання таких задач пов’язане з попереднім їх зведенням до задач з однорідними крайовими умовами.

Розглянуто розв’язання рівняння дифузії у циліндричних та сферичних координат. Тут використання методу Фур’є пов’язано з застосування спеціальних функцій – циліндричних та сферичних функцій. Математичне моделювання процесу дифузії є ідентичним моделювання процесу теплопровідності з заміною температури на концентрацію речовини, а кількості теплоти – на масу речовини, що дифундує. Для знаходження єдиного розв’язку рівняння дифузії необхідно задати початкову умову та крайові умови.

Другий розділ містить дослідження практично важливих задач дифузії. Тут розглянуто двовимірну вісесиметричну задачу, особливості моделювання дифузійних процесів у динамічних та активних середовищ. В основі математичних моделей дифузійних процесів перенесення лежать фундаментальні закони збереження енергії та маси. Розглянуто методику побудови автомодельних розв’язків рівняння дифузії. Необхідність побудови та дослідження таких розв’язків виникають у задачах моделювання дифузії газів у пористих середовищах.

Математичну модель у вигляді рівняння дифузії можна використати не лише для моделювання розповсюдження речовини та тепла у середовищі, але й для моделювання ядерних реакцій. Цю модель можна використати також для розв'язування задач екологічного прогнозування. Тут розглянуто також важливу задачу екологічного прогнозування на основі використання математичної моделі процесу дифузії.

У третьому розділі магістерської роботи розглянуто сутність операційного методу розв'язання задач математичної фізики, що ґрунтується на застосуванні перетворення Лапласа. Це дозволяє зменшити розмірність задачі. Звичайно перетворення Лапласу виконують за змінною часу і отримуємо замість змішаної задачі крайову задачу для звичайного диференціального рівняння або двовимірну крайову задачу. У третьому розділі розв'язано кілька задач дифузії операційним методом. Операційний метод та метод Фур'є розв'язання задачі дифузії часто доповняють один одного з точки зору ефективності застосування. За допомогою методу Фур'є зручно розв'язувати задачу дифузії з однорідними крайовими умовами та довільною початковою умовою. Операційний метод краще застосовувати за нульової початкової умови та для довільних крайових умов. У цих випадках операційний метод є ефективним засобом розв'язування крайових задач та задачі Коші для рівняння дифузії та різноманітних нестаціонарних задач. Основним ускладнення, що може виникати при застосуванні операційного методу, є розв'язання задачі знаходження функції-оригіналу по знайденому зображенні розв'язку задачі. Якщо зображення є трансцендентною функцією, то оригінал не завжди можна знайти у скінченному вигляді, розв'язок задачі отримуємо у вигляді ряду. У цьому випадку на практиці доцільно застосовувати чисельні методи, зокрема, методи скінченних різниць та скінченних елементів. Подальші дослідження математичного моделювання процесу дифузії пов'язані з розв'язанням нелінійних задач дифузії та уточнення математичних моделей дифузії, що застосовуються у біології, біофізиці та екології.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Сидоренко С. І., Березовська Л. Н., Волошко С. М. Математичне моделювання процесів дифузії. Київ : Наукова думка, 2007. 324 с.

2. Сидоренко С. І., Волошко С. М. Термодинаміка та кінетика дифузії. Київ : КПІ ім. І. Сікорського, 2022. 110 с.

3. Ліх С. С., Попель О. П., Ровенчак А. А., Тальянський І. І. Методи математичної фізики. Львів : ЛНУ ім. І, Франка, 2011. 404 с.

4. Бондаренко В. Г. Рівняння математичної фізики. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. 100 с.

5. Курпа Л. В., Лінник Г. Б. Рівняння математичної фізики. Харків : НТУ «ХПІ», 2011. 312 с.

6. Вірченко Н. О. Основні методи розв’язання задач математичної фізики. Київ : Інтрес. 2006. 332 с.

7. Маркович Б. М. Рівняння математичної фізики. Львів : Видавництво Львівської політехніки, 2010. 384 с.

8. Перестюк М. О., Маринець В. В. Теорія рівнянь у частинних похідних. Київ : Либідь, 2001. 336 с.

9. Вайсфельд Н. Д., Реут В. В. Рівняння математичної фізики. Одеса : ОНУ ім. І. І. Мечникова, 2018. 194 с.

10. Маценко В. Г. Математичне моделювання. Чернівці : Чернівецький національний університет, 2014. 519 с.

11. Pinchover Y., Rubinstein J. An Introduction to Partial differential equations. New York : Cambridge University Press, 2005. 371 p.

12. Drabek P., Holubova G. Elements of Partial Differential Equations. Berlin/Boston : Walter de Grugter GmbU. 2014. 277 p.

13. Гребенюк С. М., Тітова О. О., Клименко М. І., Полюга С. І., Стреляєв Ю. М. Операційне числення. Запоріжжя : ЗНУ, 2015. 94 с.

14. Войцеховський О. А. Операційне числення. Вінниця : ВДТУ, 2000. 148 с.