

О НЕКОТОРОМ ПЕРИОДИЧЕСКОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ
ДИФФУЗИИ

Н. Н. Кочина

(Москва)

При некоторых условиях в электрохимических системах с падающей характеристикой возникают автоколебания [1-3]. Метод нахождения поляризационной кривой $P = P(\Phi)$ (здесь Φ — потенциал электрода, $P = i/c(0, t)$, i — плотность тока, $c(0, t)$ — концентрация вещества на поверхности электрода), если дано распределение по времени плотности тока, предложен в работе [1].

При численном решении этой задачи, которое рассмотрено ниже, встретились значительные вычислительные трудности.

1. В работе [1] в предположении, что величина $\chi(t)$, пропорциональная плотности тока, есть известная периодическая функция времени t с периодом T

$$\chi(t) = \begin{cases} \psi(t) & \text{при } \alpha + kT \leq t \leq \beta + kT \\ \varphi(t) & \text{при } \beta + kT \leq t \leq \gamma + kT \end{cases} \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (1.1)$$

$$(\alpha = 1/2 pT, \beta = -1/2 pT + T, \gamma = 1/2 pT + T, 0 < p < 1, \psi(t) < 0, \varphi(t) > 0)$$

с использованием формулы Дюгамеля [4] были получены сходящиеся ряды для функции $u(x, t)$ — периодического решения уравнения диффузии (D — коэффициент диффузии)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.2)$$

с граничным условием

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = \chi(t) \quad (1.3)$$

в полубесконечной области $x \geq \infty$. Концентрация вещества $c(x, t)$ связана с $u(x, t)$ соотношением

$$u(x, t) = [c(x, t) - c_0 - (c^0 - c_0)x / l]Gl$$

(здесь c_0, c^0, l, G — некоторые константы [1]). При этом функция $\chi(t)$ должна удовлетворять некоторым требованиям [1].

Зная функцию $\chi(t)$, даваемую формулой (1.1), определив таким образом решение (1.2) с условием (1.3), получим

$$u(0, t) = \begin{cases} u_1(0, t) & \text{при } \alpha + kT \leq t \leq \beta + kT \\ u_2(0, t) & \text{при } \beta + kT \leq t \leq \gamma + kT \end{cases} \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (1.4)$$

Теперь легко найти параметрическое представление характеристики $P(\Phi)$, состоящей для значений Φ , соответствующих автоколебательному циклу и охватывающих область максимума характеристики, из двух кусков $P_1(\Phi)$ и $P_2(\Phi)$, а именно [1]:

$$\begin{aligned} P_1 &= \frac{Gl(\psi(t) + A)}{u_1(0, t) + c_0}, & v - \Phi &= Glr(\psi(t) + A) \\ P_2 &= \frac{Gl(\varphi(t) + A)}{u_2(0, t) + c_0}, & v - \Phi &= Glr(\varphi(t) + A) \end{aligned} \quad (v, r, A = \text{const}) \quad (1.5)$$

Ряды $u_1(0, t)$ и $u_2(0, t)$ имеют при этом следующий вид:

$$u_1(0, t) = -\left(\frac{D}{\pi}\right)^{1/2} \left\{ J_1 + \sum_{j=1}^{\infty} (J_{2j} + J_{2j+1}) \right\} \quad (1.6)$$

$$u_2(0, t) = -\left(\frac{D}{\pi}\right)^{1/2} \left\{ I_1 + \sum_{j=1}^{\infty} (I_{2j} + I_{2j+1}) \right\} \quad (1.7)$$

Здесь

$$J_1 = \int_{\alpha}^t \frac{\psi(\sigma) d\sigma}{\sqrt{t-\sigma}}, \quad J_{2j} = \int_{\beta}^{\gamma} \frac{\varphi(\sigma) d\sigma}{\sqrt{t+jT-\sigma}}, \quad J_{2j+1} = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\psi(\sigma) d\sigma}{\sqrt{t+jT-\sigma}} \quad (1.8)$$

$$I_1 = \int_{\beta}^t \frac{\varphi(\sigma) d\sigma}{\sqrt{t-\sigma}}, \quad I_{2j} = \int_{\gamma}^{\beta+T} \frac{\psi(\sigma) d\sigma}{\sqrt{t+jT-\sigma}}, \quad I_{2j+1} = \int_{\beta}^{\gamma} \frac{\varphi(\sigma) d\sigma}{\sqrt{t+jT-\sigma}} \quad (1.9)$$

Формулы (1.6) и (1.9) получены после некоторых преобразований из формул (2.3)–(2.5) статьи [1].

Ясно, что если в формулах (1.8) заменить α на β , β на γ , γ на $\beta+T$, $\psi(\sigma)$ на $\varphi(\sigma)$ и $\varphi(\sigma)$ на $\psi(\sigma)$, то соотношение (1.6) перейдет в (1.7). Таким образом, численный расчет как функции $u_1(0, t)$, так и функции $u_2(0, t)$ можно вести по одной и той же программе, достаточно изменить вводные данные. В связи с этим будем в дальнейшем рассматривать только способ численного нахождения решения (1.6), где использованы обозначения (1.8). Технические трудности возникают только при нахождении решения (1.6), так как после определения $u_1(0, t)$ характеристика $P_1(\vartheta)$ легко рассчитывается по формулам (1.5). Этих трудностей две.

Во-первых, если функции $\psi(t)$ и $\varphi(t)$, входящие в выражения (1.8), имеют сколь угодно сложный вид, то при вычислении интегралов (1.8) нужно пользоваться формулами приближенного интегрирования; непосредственное вычисление этих интегралов часто представляет собой трудоемкий процесс, требующий очень много машинного времени.

Во-вторых, ряд (1.6), где введены обозначения (1.8), сходится очень медленно: это знакопеременный ряд, каждый член его имеет порядок $t^{-1/2}$, и время расчета по формуле (1.6) было бы слишком велико.

Чтобы избежать этих трудностей, преобразуем интегралы (1.8) к новому виду, кроме того, будем их вычислять при больших значениях t , пользуясь асимптотическими формулами.

2. Покажем, как провести расчет для случая, когда функции $\varphi(t)$ и $\psi(t)$ определены зависимостями

$$\varphi(t) = a + b(\gamma - t)^s + g(t - \beta)^{1/2}$$

$$\psi(t) = e + d(\beta - t)^q + f(t - \alpha)^{1/2} \quad (2.1)$$

$$(a > 0, b > 0, g < 0, 1/2 < s < 1, e < 0, d < 0, f > 0, 1/2 < q < 1)$$

Здесь эти константы таковы, что должны выполняться соотношения (4.2)–(4.4) и (2.15)–(2.16) статьи [1].

Положим

$$\varphi(t) = \varphi_1(t) + \varphi_2(t), \quad \psi(t) = \psi_1(t) + \psi_2(t) \quad (2.2)$$

Здесь

$$\varphi_1(t) = a + g(t - \beta)^{1/2}, \quad \psi_1(t) = e + f(t - \alpha)^{1/2} \quad (2.3)$$

$$\varphi_2(t) = b(\gamma - t)^s, \quad \psi_2(t) = d(\beta - t)^q \quad (2.4)$$

Подставляя (2.2) в (1.8), видим, что с учетом обозначений (2.1) и (2.4) каждый из интегралов (1.8) разобьется на две части

$$J_1 = J_{1,1} + J_{1,2}, \quad J_{2j} = J_{2j,1} + J_{2j,2}, \quad J_{2j+1} = J_{2j+1,1} + J_{2j+1,2} \quad (2.5)$$

$$J_{1,i} = \int_{\alpha}^t \frac{\psi_i(\sigma) d\sigma}{\sqrt{t-\sigma}}, \quad J_{2j,i} = \int_{\beta}^{\gamma} \frac{\varphi_i(\sigma) d\sigma}{\sqrt{t+iT-\sigma}}, \quad J_{2j+1,i} = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\psi_i(\sigma) d\sigma}{\sqrt{t+iT-\sigma}} \quad (i=1, 2) \quad (2.6)$$

Из формул (2.3) ясно, что интегралы (2.6), где $i = 1$, берутся в элементарных функциях.

Займемся теперь интегралами (2.6), где $i = 2$.

Рассмотрим сперва выражение $J_{1,2}$. Легко видеть, что

$$J_{1,2}(\alpha) = 0, \quad J_{1,2}(\beta) = \frac{d(\beta - \alpha)^{q+1/2}}{q+1/2} \quad (2.7)$$

Пусть теперь $\alpha < t < \beta$. В этом случае интеграл $J_{1,2}$ не берется в элементарных функциях; он несобственный, но сходящийся, подынтегральная функция обращается в бесконечность при $\sigma = t$.

Интегрируя по частям, найдем

$$J_{1,2} = 2d \left\{ (\beta - \alpha)^q \sqrt{t - \alpha} - q \int_{\alpha}^t (\beta - \sigma)^{q-1} \sqrt{t - \sigma} d\sigma \right\} \quad (2.8)$$

Рассмотрим входящий в (2.8) интеграл

$$J = \int_{\alpha}^t (\beta - \sigma)^{q-1} \sqrt{t - \sigma} d\sigma \quad (2.9)$$

При $\sigma = t$ производная подынтегральной функции обращается в бесконечность.

Способ приближенного вычисления интегралов подобного рода дан в работе [5]. Пусть $\delta > -1$ и не есть целое положительное число. Введем обозначение

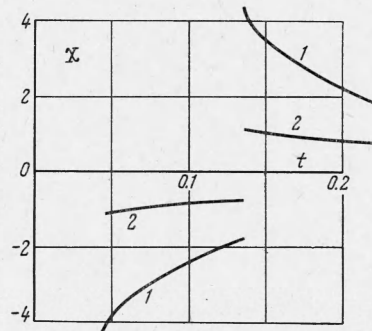
$$I = \int_{\alpha}^b f(\sigma) d\sigma$$

$$(f(\sigma) = (\sigma_1 - \sigma)^{\delta} \kappa(\sigma)) \quad (2.10)$$

Разобьем функцию $f(\sigma)$ согласно [5] на две части

$$f(\sigma) = f_1(\sigma) + f_2(\sigma) \quad (f_i(\sigma) = (\sigma_1 - \sigma)^{\delta} \kappa_i(\sigma), \quad i = 1, 2) \quad (2.11)$$

таким, что функция $f_1(\sigma)$ содержит все особенности функции $f(\sigma)$, но интегрируется в конечном виде, функция же $f_2(\sigma)$ особенностей не имеет, и интеграл от нее может быть найден с помощью одной из формул численного интегрирования (например, формулы Симпсона). Погрешность е формулы Симпсона определяется модулем четвертой производной подынтегральной функции.



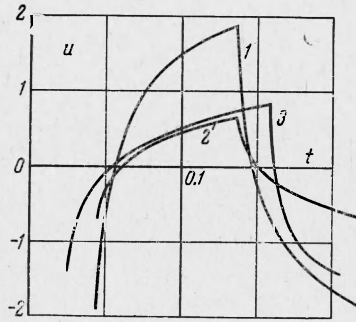
Фиг. 1

тегральной функции

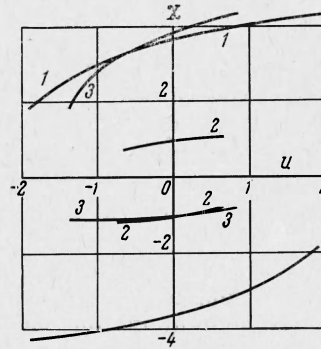
$$\varepsilon \leq \left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \frac{M_4}{90m^4}, \quad M_4 = \max |f^{IV}(\sigma)| \quad (a \leq \sigma \leq b) \quad (2.12)$$

Здесь $2m$ — число частей, на которые разбивается промежуток интегрирования $a \leq \sigma \leq b$.

Поэтому функцию $f(\sigma)$ нужно преобразовать так, чтобы четвертая производная от функции $f_2(\sigma)$ при $\sigma = \sigma_1$ была равна нулю.



Фиг. 2



Фиг. 3

Сравнивая формулу (2.9) с (2.10), видим, что в рассматриваемом нами случае $\delta = 1/2$, $\sigma_1 = t$. Так как $\alpha < t < \beta$, функция $\kappa(\sigma) = (\beta - \sigma)^{q-1}$ не имеет особенностей внутри интервала (α, t) .

Выделяя четыре первых члена разложения функции $\kappa(\sigma)$ в ряд Тейлора около точки $\sigma = t$, получим

$$\kappa_1(\sigma) = \sum_{m=0}^3 \frac{1}{m!} \kappa^{(m)}(t) (\sigma - t)^m, \quad \kappa_2(\sigma) = \kappa(\sigma) - \kappa_1(\sigma) \quad (2.13)$$

Используя (2.9) и (2.13), запишем выражение для функции $f_2(\sigma)$, входящей в формулу (2.11)

$$f_2(\sigma) = \sqrt{t - \sigma} \left\{ (\beta - \sigma)^{q-1} - \sum_{m=0}^3 a_m(q) (\beta - t)^{q-1-m} (\sigma - t)^m \right\} \quad (2.14)$$

$$a_0(q) = 1, \quad a_m(q) = \frac{(-1)^m}{m!} (q - m)(q - m + 1) \dots (q - 1) \quad (m \neq 0)$$

Аналогичным образом преобразуются интегралы $J_{2j,2}$ и $J_{2j+1,2}$.

Выпишем теперь окончательные формулы для интегралов J_1 , J_{2j} и J_{2j+1}

$$J_1 = 2e \sqrt{t - \alpha} + \frac{\pi}{2} f(t - \alpha) + 2d \left\{ (\beta - \alpha)^q \sqrt{t - \alpha} - \right. \\ \left. - 2q(\beta - t)^{q-1} (t - \alpha)^{3/2} \left[\frac{1}{3} + \sum_{m=1}^3 \frac{(q - m)(q - m + 1) \dots (q - 1)}{m! (2m + 3)} \left(\frac{t - \alpha}{\beta - t} \right)^m \right] - \right. \\ \left. - q \int_{\alpha}^t f_2(\sigma) d\sigma \right\} \quad (\alpha < t < \beta) \quad (2.15)$$

$$J_1(\alpha) = 0, \quad J_1(\beta) = 2e \sqrt{\beta - \alpha} + \frac{\pi}{2} f(\beta - \alpha) + \frac{d(\beta - \alpha)^{q+1/2}}{q + 1/2}$$

Здесь $f_2(\sigma)$ дается формулой (2.14)

$$J_{2j} = 2a [\sqrt{\tau - \beta} - \sqrt{\tau - \gamma}] + g \left\{ -\sqrt{(\gamma - \beta)(\tau - \gamma)} + \frac{1}{2}(\tau - \beta) \left[\frac{\pi}{2} - \arcsin \left(\frac{\tau + \beta - 2\gamma}{\tau - \beta} \right) \right] \right\} + b \left\{ \frac{(\gamma - \beta)^{s+1}}{s+1} \frac{1}{\sqrt{\tau - \gamma}} + \sum_{m=2}^4 \frac{(-1)^{m+1} (\gamma - \beta)^{s+m} (2m-3)(2m-5) \dots 1}{2^{m-1} (m-1)! (s+m) (\tau - \gamma)^{m-1/2}} + \int_{\beta}^{\gamma} f_2^{(2j)}(\sigma) d\sigma \right\} \quad (2.16)$$

($\tau = t + jT$, $\tau \neq \alpha + T$)

$$J_2(\alpha) = 2a \sqrt{\gamma - \beta} + \frac{\pi}{2} g (\gamma - \beta) + \frac{b (\gamma - \beta)^{s+1/2}}{s+1/2}$$

$$f_2^{(2j)}(\sigma) = b (\gamma - \sigma)^s \left\{ \frac{1}{\sqrt{\tau - \sigma}} - \frac{1}{\sqrt{\tau - \gamma}} - \sum_{m=1}^3 \frac{(2m-1)(2m-3) \dots 1 (\sigma - \gamma)^m}{m! 2^m (\tau - \gamma)^{m+1/2}} \right\}$$

Выражения для интеграла $J_{2j+1,2}$ и функции $f_2^{(2j+1)}(\sigma)$ получаются из первой и третьей формул (2.16), если в них заменить a на e , g на f , s на q , b на d , β на α и γ на β .

3. При больших значениях j воспользуемся асимптотическими разложениями интегралов J_{2j} и J_{2j+1} , определяемых согласно (1.8).

Вводя обозначение

$$x^2 = (jT)^{-1} \quad (3.1)$$

и разлагая функцию $[1 + x^2(t - \sigma)]^{1/2}$ в ряд Маклорена около значения $x = 0$ с остаточным членом, получим из (1.8)

$$J_{2j} = \sum_{n=0}^l \frac{(-1)^n 1 \cdot 3 \dots (2n-1)}{2^n \cdot n!} x^{2n+1} \int_{\beta}^{\gamma} \varphi(\sigma) (t - \sigma)^n d\sigma + (-1)^{l+1} \frac{1 \cdot 3 \dots (2l+1)}{2^{l+1} (l+1)!} x^{2l+3} \int_{\beta}^{\gamma} \frac{\varphi(\sigma) (t - \sigma)^{l+1} d\sigma}{[1 + \theta(t - \sigma)x^2]^{l+3/2}} \quad (0 < \theta < 1) \quad (3.2)$$

Здесь l — некоторое целое число. Формулу, аналогичную (3.2), можно написать и для интеграла J_{2j+1} , определяемого третьим из соотношений (1.8). Складывая J_{2j} и J_{2j+1} , вычисляя интегралы

$$\int_{\beta}^{\gamma} \varphi(\sigma) (t - \sigma)^n d\sigma, \quad \int_{\alpha}^{\beta} \psi(\sigma) (t - \sigma)^n d\sigma \quad (1 \leq n \leq l) \quad (3.3)$$

учитывая, что, как показано в статье [1],

$$\int_{\alpha}^{\beta} \psi(\sigma) d\sigma + \int_{\beta}^{\gamma} \varphi(\sigma) d\sigma = 0 \quad (3.4)$$

и возвращаясь к прежнему обозначению (3.1), находим из (3.2) и аналогичной формулы для J_{2j+1} следующее выражение:

$$J_{2j} + J_{2j+1} = \sum_{n=1}^l f_{1/2(2n+1)} (jT)^{-(2n+1)/2} + R_{2j} + R_{2j+1} \quad (3.5)$$

Здесь

$$f_{(2n+1)/2} = \sum_{j=1}^n b_j (A_{n+3/2-j} + A_{n+3/2-j}^*) t^{j-1} \quad (n = 1, 2, \dots, l) \quad (3.6)$$

$$b_1 = 1$$

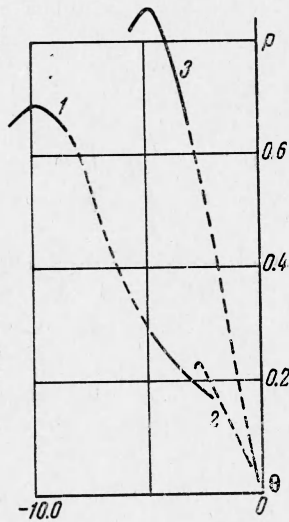
$$b_j = \frac{(-1)^{j+1}}{2^{j-1} (j-1)!} (2n+3-2j)(2n+3-2j+2)(2n+3-2j+4) \dots (2n-1) \quad (j \neq 1)$$

Величина $A_{1/2(2m+1)}$ задается формулой

$$A_{1/2(2m+1)} = \frac{1 \cdot 3 \dots (2m-1)}{2^m} \sum_{j=0}^m \frac{(-1)^j}{(m-j)!} [\gamma^{m-j} \Phi_{j+1}(\gamma) - \beta^{m-j} \Phi_{j+1}(\beta)] \quad (3.7)$$

Функции $\Phi_i(\tau)$, определенные на интервале $\beta \leq \tau \leq \gamma$, даны зависимостями

$$\begin{aligned} \Phi_i(\tau) = & \frac{a\tau^i}{i!} + \\ & + \frac{(-1)^i b}{(s+1)(s+2) \dots (s+i)} (\gamma - \tau)^{s+i} + \\ & + \frac{2^i g}{3 \cdot 5 \dots (1+2i)} (\tau - \beta)^{1/2+i} \quad (i=1, 2, \dots, 7) \quad (3.8) \end{aligned}$$



Фиг. 4

Величина $A_{1/2(2m+1)}^*$ определяется формулой, которая получится, если в выражении (3.7) заменить γ на β , β на α , а функции $\Phi_i(\tau)$ — соответственно функциями $\Phi_i^*(\tau)$, в которые перейдут выражения (3.8), если в них заменить a на e , b на d , s на q , g на f , γ на β и β на α .

В формуле (3.5) $R_{2j} + R_{2j+1}$ — остаточный член, для которого получаем следующую оценку:

$$|R_{2j} + R_{2j+1}| \leq \lambda(l) (jT)^{-l-3/2} \quad (3.9)$$

Здесь

$$\lambda(l) = \frac{1 \cdot 3 \dots (2l+1)}{2^{l+1} (l+2)!} \{ \varphi(\beta) [(\gamma - \alpha)^{l+2} - (\beta - \alpha)^{l+2}] - \psi(\alpha) (\beta - \alpha)^{l+2} \} \quad (3.10)$$

Запишем теперь формулу (1.6) в виде

$$u_1(0, t) = - \sqrt{\frac{D}{\pi}} \left\{ J_1 + \sum_{j=1}^{j_0-1} (J_{2j} + J_{2j+1}) + S_{j_0} + R_{j_0} \right\} \quad (3.11)$$

$$S_{j_0} = \sum_{j=j_0}^{\infty} \sum_{n=1}^l f_{n+1/2} (jT)^{-n-1/2}, \quad R_{j_0} = \sum_{j=j_0}^{\infty} (R_{2j} + R_{2j+1}) \quad (3.12)$$

Здесь j_0 — некоторое целое число, которое определяется ниже.

Введя в рассмотрение дзета-функцию Римана [6], легко вычислить функцию S_{j_0} , даваемую выражением (3.12), и выбрать число j_0 так, чтобы при заданных ε и l остаточный член R_{j_0} не превосходил ε .

$$|R_{j_0}| \leq \frac{\lambda(l)}{T^{l+3/2} (1 - 2^{-l-1/2})} \frac{1}{\left[2E\left(\frac{j_0}{2}\right) \right]^{l+1/2}} \leq \varepsilon \quad (3.13)$$

Здесь $E(x)$ — целая часть числа x .

В работе [7] приведены результаты расчета изложенным здесь методом зависимости $u(0, t)$ для случая прямоугольных колебаний, когда $b = g = d = f \equiv 0$. Параметр p принимает при этом значения: 0.125, 0.25, 0.375, 0.5, 0.625, 0.75, 0.875.

На фиг. 1—4 представлены графики функций $\chi(t)$, $u(0, t)$, $\chi(u)$ и $p(\theta)$, где $p = P/Gl$, $\theta = (\dot{\varphi} - v)/Gl$. Зависимость $\chi(t)$ рассчитана по формуле (2.1), $u(0, t)$ — по формуле (3.11), $p(\theta)$ — по формуле (1.5). При этом кривой 1 соответствуют следующие значения констант, входящих в решение: $p = 0.5$, $a = -e = 3.87000$, $b = -d = 4.69923$, $g = -f = -6.89511$, $s = q = 0.93477$, $A = 6.555$, $c_0 = 14.884$; кривой 2: $p = 0.5$, $a = -e = 0.96333$, $b = -d = 1.56644$, $g = -f = -0.67403$, $s = q = 0.93477$, $A = 1.695$, $c_0 = 11.654$; кривой 3: $p = 0.25$, $a = 3.87000$, $b = 8.98298$, $g = -9.75116$, $e = -0.96333$, $d = -1.07228$, $f = 0.55034$, $s = q = 0.93477$, $A = 1.2$, $c_0 = 6$. Нижняя кривая на фиг. 3 соответствует кривой 1. На фиг. 4 пунктиром проведены те отрезки характеристики $p(\theta)$, которые отвечают не автоколебательному циклу, а окрестности неустойчивого стационарного состояния и, следовательно, не могут быть рассчитаны предложенным здесь методом. Во всех рассмотренных случаях положено $T = 0.182$ сек, $D = 10^{-5}$ см²/сек. Размерности параметров, входящих в решение, следующие:

$$[u] = [c_0] = 10^{-6} \text{ а / см}, [\chi] = [A] = [a] = [e] = 10^{-3} \text{ а / см}^2,$$

$$[b] = 10^{-3} \text{ а / см}^2 \text{ сек}^3, [d] = 10^{-3} \text{ а / см}^2 \text{ сек}^4, [g] = [f] = 10^{-3} \text{ а / см}^2 \text{ сек}^{1/2}$$

величины s и q безразмерные.

Результаты расчетов с использованием этих констант согласуются с экспериментальными данными [3], причем удалось вычислить максимальные значения характеристики $p(\theta)$, что невозможно сделать опытным путем.

Программа расчета составлена и вычисления проведены С. В. Дергачевой.

Поступила I VII 1966

ЛИТЕРАТУРА

1. Кочина Н. Н. Об одном решении нелинейного уравнения диффузии. ПММ, 1961, т. 28, вып. 4.
2. Гохштейн А. Я. К теории автоколебаний в свободных от пассивации электрохимических системах с падающей характеристикой. Докл. АН СССР, 1961, т. 140, № 5.
3. Гохштейн А. Я. О частоте автоколебаний в электролитических системах. Докл. АН СССР, 1963, т. 148, № 1.
4. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. Гостехиздат, 1953.
5. Канторович Л. В. О приближенном вычислении некоторых определенных интегралов и других применениях метода выделения особенностей. Матем. сб., 1934, т. 41, № 2.
6. Титчмарш Е. К. Дзета-функция Римана. Изд-во иностр. литер., 1947.
7. Кочина Н. Н. О периодических режимах некоторых распределенных систем. Докл. АН СССР, 1965, т. 165, № 5.