УДК 517.958:532.72

Іванчук В. В., студент (Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне)

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ У ВИПАДКУ НАЯВНОСТІ НЕВІДОМОГО ДЖЕРЕЛА ЗАБРУДНЕННЯ

В даній роботі вдосконалено алгоритми розрахунків концентрації забруднюючої речовини та коефіцієнта дифузії за наявності додаткових джерел забруднення у випадках, коли коефіцієнт дифузії представлено у вигляді $a = a(t)$, $a = a(x, y)$. Проведені числові розрахунки за отриманими алгоритмами.
Ключові слова: конвекція, дифузія, обернена задача, числово-асимптотичний метод.

В данной работе усовершенствовано алгоритмы расчетов концентрации загрязняющего вещества и коэффициента диффузии при наличии дополнительных источников загрязнения в случаях, когда коэффициент диффузии представлены в виде $a = a(t)$, $a = a(x, y)$. Проведенные численные расчеты по полученным алгоритмам.
Ключевые слова: конвекция, диффузия, обратная задача, численно-асимптотический метод.

In this paper algorithms are improved for calculations of polluted concentration and diffusion coefficient in the presence of additional sources of pollution where the diffusion coefficient is presented in the form $a = a(t)$, $a = a(x, y)$. Numerical calculations are carried out with the help of received algorithms.
Keywords: convection, diffusion, inverse problem, numerical-asymptotic method.

Процеси очищення стічних вод можна описати задачами конвективної дифузії для систем сингулярно-збурених рівнянь. Тому важливим є поширення розробленої методики побудови асимптотичних розкладів на такого роду задачі, а також розробка нових числово-асимптотичних методів їх розв’язання.

Сучасні експериментальні та теоретичні дослідження в галузі моделювання процесів конвекції, дифузії базуються на доробках М.М. Веригіна, В.І. Лаврика, А.П. Власюка, А.Я. Бомби та інших вчених [1,2,3,5,6].

Одним із основних засобів дослідження сингулярно-збурених процесів (крайових задач з малим параметром при старших похідних) є асимптотичний метод Вішика-Люстерника [4] з використанням спеціально розробленої процедури згладжування внутрішніх та зовнішніх примежових функцій, який дає достатньо точне наближення розв'язку. На даний момент розроблено асимптотичні методи розв'язування типових крайових задач для сингулярно-збурених параболічних та еліптичних рівнянь у прямокутних областях з урахуванням різного рівня гладкості початкової та граничних умов, а також їхньої узгодженості у кутових точках.

Відповідні методи було модифіковано стосовно розв'язання задач конвективної дифузії при фільтрації в чотирикутних криволінійних областях, обмежених двома лініями течії та двома еквіпотенціальними лініями, у випадках переважання конвективних складових процесу над дифузійними, що приводить до появи у відповідному параболічному рівнянні малого параметра при старших похідних. Ці ж методи успішно застосовано і до розв'язування таких задач в двозв'язних областях. Проте в зазначених вище алгоритмах коефіцієнти, що входять у відповідні параболічні рівняння, вважались або відомими сталими або наперед заданими функціями. Значний практичний інтерес представляють задачі визначення параметрів процесів масопереносу шляхом математичних розрахунків без проведення фізичних експериментів, що приводить до необхідності розв'язання обернених задач.

Метою даного дослідження – систематизувати та вдосконалити алгоритми розрахунків концентрації забруднюючої речовини та коефіцієнта дифузії за наявності додаткових джерел забруднення у випадках, коли коефіцієнт дифузії представлено у вигляді $a = a(t)$, $a = a(x, y)$. Провести числові розрахунки за отриманими алгоритмами.

Процес розповсюдження шкідливих речовин у однорідних пористих середовищах (грунтах) з врахуванням додаткових джерел забруднення можна описати такою математичною моделлю:

$$\varepsilon a(t)\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right)-v_x(x,y)\frac{\partial c}{\partial x}-v_y(x,y)\frac{\partial c}{\partial y}+\varepsilon s(x,y)=\frac{\partial c}{\partial t}, \tag{1.1}$$

$$c\big|_{L_*}=c_*(M,t),\ c\big|_{L^*}=c^*(M,t),\ c(M,0)=c_0^0(M), \tag{1.2}$$

$$a(t)\int_{L_*}\frac{\partial c(M,t)}{\partial n}dl = c_*^*(t)l,$$

$$c(x,y,T)-\bar{c}(x,y,T)=\varepsilon\Delta h(x,y), \tag{1.3}$$

$$(v_x,v_y)=grad\,\varphi(x,y),\ \Delta\varphi=0,\ \varphi\big|_{L_*}=\varphi_*,\ \varphi\big|_{L^*}=\varphi^*,$$

$$Q=\int_{L^*}-v_y dx+v_x dy, \tag{1.4}$$

де $c(x,y,t)$ – концентрація розчинної речовини у фільтраційній течії у точці (x,y) в момент часу t, $\bar{c}(x,y,t)$ – концентрація розчинної речовини при відсутності функції забруднення ($s(x,y)=0$), M – біжуча точка відповідної кривої, n – зовнішня нормаль до відповідної кривої, $\varepsilon a(t)$ – коефіцієнт дифузії, $a(t)$ – достатньо гладка обмежена функція, $\varepsilon\Delta h(x,y)$ – зміна концентрації за час T, $\Delta h(x,y)$ – функція координат фізичної області (відома), ε ($\varepsilon > 0$) – малий параметр, φ, v_x, v_y – відповідно потенціал та компоненти його швидкості в пористому середовищі G_z

Знаючи розв'язок задачі (1.4) та здійснивши заміну змінних $x = x(\varphi,\psi)$, $y = y(\varphi,\psi)$ у рівнянні (1.1) і умовах (1.2), прийдемо до відповідної "дифузійної задачі" для прямокутної області комплексного потенціалу

$$G_w = \{w = \varphi + i\psi : \varphi_* < \varphi < \varphi^*, Q_* < \psi < Q^*\}:$$

$$\varepsilon a(t) v^2(\varphi,\psi)\left(u_{\varphi\varphi} + u_{\psi\psi}\right) - v^2(\varphi,\psi) u_\varphi + \varepsilon q(\varphi,\psi) = u_t, \tag{1.5}$$

$$u(\varphi,\psi,0) = u_0^0(\varphi,\psi), u(\varphi_*,\psi,t) = u_*(\psi,t), u(\varphi^*,\psi,t) = u^*(\psi,t), \tag{1.6}$$

$$a(t)\int_{Q_*}^{Q^*} u_\varphi(\varphi_*,\psi,t)d\psi = u_*^*(t)Q, \; u(\varphi,\psi,T) - \overline{u}(\varphi,\psi,T) = \varepsilon h(\varphi,\psi), \tag{1.7}$$

тут $u(\varphi,\psi,t) = c(x(\varphi,\psi), y(\varphi,\psi),t)$, $q(\varphi,\psi) = s(x(\varphi,\psi), y(\varphi,\psi))$, і т.д.

Розв'язки задач (1.5) і (1.7) на знаходження невідомих $u(\varphi,\psi,t)$ та $a(t)$ з точністю $O(\varepsilon^2)$ шукаємо у вигляді асимптотичних рядів

$$u(\varphi,\psi,t) = \left(u_0(\varphi,\psi,t) + \varepsilon u_1(\varphi,\psi,t)\right) + \sum_{i=0}^{2} \pi_i(\xi,\psi,t)\varepsilon^i + r(\varphi,\psi,t,\varepsilon), \tag{1.8}$$

$$a(t) = a_0(t) + \varepsilon a_1(t) + r_a(t,\varepsilon), \tag{1.9}$$

де $u_i(\varphi,\psi,t)$, $a_i(t)$ ($i=0,1$) – регулярна частина асимптотики, зокрема $u_0(\varphi,\psi,t)$ – розв'язок відповідної виродженої задачі (конвективного переносу), $u_1(\varphi,\psi,t)$ – поправка, яка враховує "вплив" дифузії всюди в даній області (за виключенням деякої її пригиничної ділянки), $\pi_i(\xi,\psi,t)$ ($i=\overline{0,2}$) – поправки на виході фільтраційного потоку, $\xi = \dfrac{\varphi^* - \varphi}{\varepsilon}$ – відповідне регуляризуюче перетворення, $r(\varphi,\psi,t,\varepsilon), r_a(t,\varepsilon)$ – залишкові члени.

В результаті підстановки (1.8) і (1.9) в (1.5) – (1.7) та виконання стандартної процедури "прирівнювання" коефіцієнтів при однакових степенях малого параметра ε дістанемо такі рівняння для знаходження регулярних членів асимптотики:

$$\left[\begin{array}{l} v^2(\varphi,\psi)\cdot u_{0\varphi}(\varphi,\psi,t)+u_{0t}(\varphi,\psi,t)=0, \\ u_0(\varphi_*,\psi,t)=u_*(\psi,t), u_0(\varphi,\psi,0)=u_0^0(\varphi,\psi), \end{array}\right.$$

$$a_0(t)\int_{Q_*}^{Q^*} u_{0\varphi}(\varphi_*,\psi,t)d\psi=u_*^*(t)Q,$$

$$\left[\begin{array}{l} v^2(\varphi,\psi)\cdot u_{1\varphi}+u_{1t}=a_0(t)v^2(\varphi,\psi)\cdot(u_{0\varphi\varphi}+u_{0\psi\psi})+q(\varphi,\psi), \\ u_k(\varphi,\psi,0)=0, u_k(\varphi_*,\psi,t)=0, \end{array}\right.$$

$$a_1(t)\int_{Q_*}^{Q^*} u_{0\varphi}(\varphi_*,\psi,t)d\psi=-a_0(\mathrm{t})\int_{\mathrm{Q}_*}^{\mathrm{Q}^*} u_{1\varphi}(\varphi_*,\psi,t)d\psi.$$

Розв'язки даних задач запишуться у вигляді:

$$u_0(\varphi,\psi,t)=\left[\begin{array}{ll} u_*\left(\psi,t-f(\varphi,\psi)\right), & t\ge f(\varphi,\psi), \\ u_0^0\left(f^{-1}\left(f(\varphi,\psi)-t,\psi\right),\psi\right), & t< f(\varphi,\psi), \end{array}\right.$$

$$a_0(t)=\frac{u_*^*(t)Q}{\int_{Q_*}^{Q^*} u_{0\varphi}(\varphi_*,\psi,t)d\psi},$$

$$u_1(\varphi,\psi,t)=\left[\begin{array}{l} \int\limits_{\varphi_*}^{\varphi}\frac{g_1\left(\tilde\varphi,\psi,t-f(\varphi,\psi)+f(\tilde\varphi,\psi)\right)+q(\tilde\varphi,\psi)}{v^2(\varphi,\psi)}d\tilde\varphi, t\ge f(\varphi,\psi), \\ \int\limits_0^t(g_1(f^{-1}(f(\varphi,\psi)-t+\tilde t,\psi),\psi,\tilde t)+q(f^{-1}(f(\varphi,\psi)-t+\tilde t,\psi),\psi))d\tilde t, t< f(\varphi,\psi), \end{array}\right.$$

$$a_1(t)=-\frac{a_0(t)\int_{Q_*}^{Q^*} u_{1\varphi}(\varphi_*,\psi,t)d\psi}{\int_{Q_*}^{Q^*} u_{0\varphi}(\varphi_*,\psi,t)d\psi}, t\in[0,T],$$

тут $g_1(\varphi,\psi,t)=a_0(t)v^2(\varphi,\psi)(u_{0\varphi\varphi}+u_{0\psi\psi})$, $f(\varphi,\psi)=\int\limits_{\varphi_*}^{\varphi}\frac{d\tilde\varphi}{v^2(\tilde\varphi,\psi)}$, f^{-1} – функція обернена до f по змінній φ.

Далі наведемо алгоритм знаходження поправок, а також умову для знаходження розв'язку залишкових членів:

1) Робимо заміну змінних $\xi=\varepsilon^{-1}(\varphi^*-\varphi)$, $\sigma_0=\varepsilon^{-1}\psi$.

2) Розкладаємо функцію $v^2(\varphi,\psi)$ в ряд по степенях ε

3) Підставляємо в рівняння для прямокутної області комплексного потенціалу функцію $L^1(\xi,\sigma_0,t)$ та розклад $v^2(\varphi^*-\varepsilon\xi,\varepsilon\sigma_0)$ за степенями малого параметра ε і прирівнюєм коефіцієнти при однакових степенях ε.

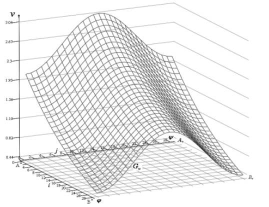
4) Для знаходження r і r_a розв'язуємо систему рівнянь:

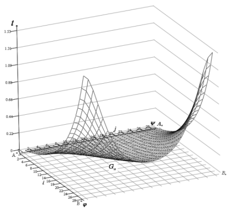
$$\begin{cases} \varepsilon\left(a_0(t)+\varepsilon a_1(t)+r_a\right)v^2(\varphi,\psi)\left[r_{\varphi\varphi}+r_{\psi\psi}\right]-v^2(\varphi,\psi)r_\varphi=r_t+\varepsilon^2 g_1(\varphi,\psi,t), \\ r_a(t,\varepsilon)=-\dfrac{\left(a_0(t)+\varepsilon a_1(t)\right)\int_{Q_*}^{Q^*}r_\varphi(\varphi_*,\psi,t)d\psi+\varepsilon^2 a_1(t)\int_{Q_*}^{Q^*}u_{1_\varphi}(\varphi_*,\psi,t)d\psi}{\int_{Q_*}^{Q^*}(u_{0_\varphi}(\varphi_*,\psi,t)+\varepsilon u_{1_\varphi}(\varphi_*,\psi,t)+r_\varphi(\varphi_*,\psi,t))d\psi}, \\ r(\varphi_*,\psi,t,\varepsilon)=r(\varphi^*,\psi,t,\varepsilon)=r(\varphi,\psi,0,\varepsilon)=r(\varphi,Q_*,t,\varepsilon)=r(\varphi,Q^*,t,\varepsilon)=0, \end{cases}$$

5) На підставі принципу максимуму для параболічних рівнянь маємо, що $|r|\le M$.

На основі отриманих нами розрахункових формул, за допомогою програмного середовища MathCAD, ми здійснили комп'ютерний експеримент, результати яких буду наведені нище [9].

На рис. 1.1.а та рис. 1.1.б зображено величину швидкості фільтрації $v=\left((dz/dw)(\overline{dz/dw})\right)^{-1/2}$, та час проходження між еквіпотенціальними лініями $t=\int\limits_{\varphi_*}^{\varphi}\frac{d\tilde{\varphi}}{v^2(\tilde{\varphi},\psi)}$ у вузлах (φ_i,ψ_j) для області комплексного потенціалу $G_w:\varphi_i=\varphi_*+((\varphi^*-\varphi_*)\cdot i)/28,\psi_j=Q_*+((Q^*-Q_*)\cdot j)/28$, $i=\overline{0,28}$, $j=\overline{0,28}$.



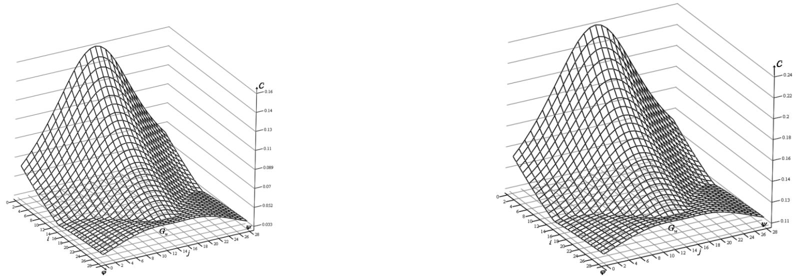


а) *б)*

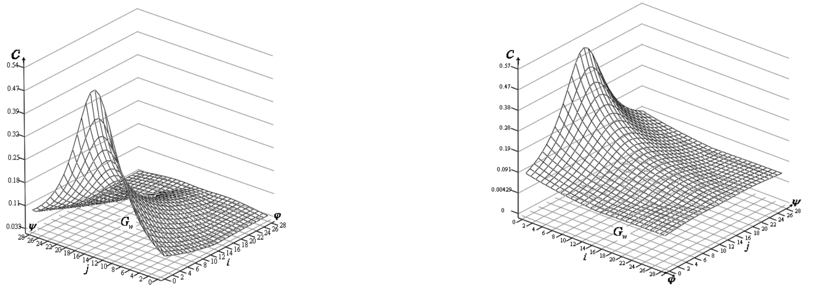
Рис. 1.1. Поле швидкості над належною їй областю комплексного потенціалу G_w (а) та відповідна поверхня часу (б)

Зміна у часі концентрації $u(\varphi,\psi,t)$ розчинної речовини над областю комплексного потенціалу G_w при $\varepsilon=0.015$, проілюстрована на рис. 1.2.

$t = 0.128$ *а)* *б)*



$t = 0.183$ *в)* *г)*



$t = 0.235$ *д)* *е)*

Рис. 1.2. Зміна концентрації забруднюючої речовини в різні моменти часу з врахуванням конвективних, дифузійних поправок (а, в, д) та додаткових джерел забруднення (б, г, е)

На рис. 1.3 показано початковий розподіл концентрації забруднюючої речовини $u_0^0(\varphi,\psi)$.

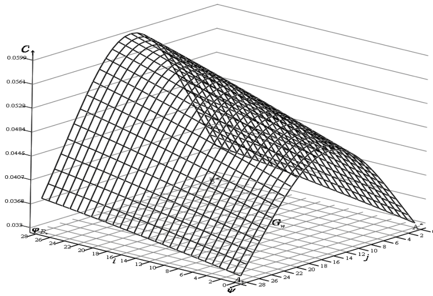


Рис. 1.3. Початковий розподіл забруднення

Основний вплив на зміну розподілу концентрації забруднюючої речовини, очевидно, здійснює конвективний перенос (конвекція). Із меншим впливом на перерозподіл забруднення діють дифузійні поправки (дифузія). Загалом вплив конвекції і дифузії, як механічної і міжмолекулярної дії на розповсюдження забруднення із контура L_* (фактично джерела забруднення із режимом $c_*(M,t)$) в область G_z, стає помітнішим із часом (рис. 1.2.(а,в,д)), і залежить від режиму $c^*(M,t)$ на контурі L^*, що по суті є втоком (точніше буфером, шлюзом), в околі якого концентрація нашої хімічної речовини може швидко відводитись чи пакопичуватись в залежності від конкретно вибраної функції $c^*(x,y,t)$.

Суттєво на зміну концентрації забруднюючої речовини впливають точкові джерела забруднення, що визначаються функцією $q(\varphi,\psi)$. Знаючи конкретний вид забруднення (токсичні речовини, тверді солі, важкі ізотопи радіоактивних металів, та ін.), можна пояснити природу функції $q(\varphi,\psi)$.

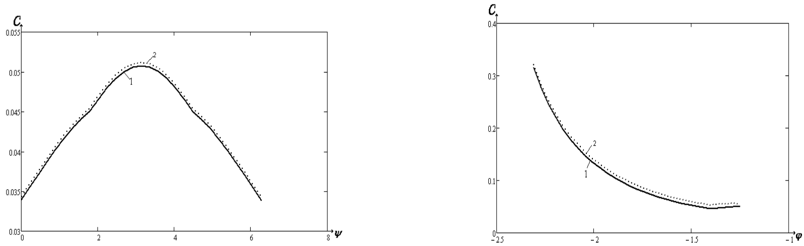
Очевидно, знаходження функції $q(\varphi,\psi)$ і визначення її дії на зміну концентрації забруднення із знайдених компонент (1.8) дозволяє обійти роз'язання складних багатоетапних задач фізики та хімії.

Функція $\varepsilon h(\varphi,\psi)$ являє собою ту граничну зміну концентрації забруднюючої речовини при якій не можливе існування флори і фауни, та при якій виникає загроза життю людей певного соціуму.

Знаючи функцію $q(\varphi,\psi)$ для конкретно заданої $\varepsilon h(\varphi,\psi)$, ми можемо апріорно оцінити ситуацію для розглядуваної екосистеми і вжити необхідні заходи для поліпшення екологічного благополуччя населення.

На розподіл концентрації також впливає вибір параметра ε, оскільки тим самим змінюється коефіцієнт дифузії $\varepsilon a(t)$, а відтак посилюється або послаблюється вплив самої дифузії. Так, на рис. 1.4а показано розподіл концентрації вздовж фіксованої еквіпотенціальної лінії $\varphi = -2.121$ в момент часу

$t = 0.245$ при $\varepsilon_1 = 0.015$ (крива 1), $\varepsilon_2 = 0.02$ (крива 2). На рис. 2.7.б показано розподіл концентрації вздовж фіксованої лінії течії $\psi = 2.02$ в момент часу $t = 0.245$ при $\varepsilon_1 = 0.015$ (крива 1), $\varepsilon_2 = 0.02$ (крива 2).



а) *б)*

Рис. 1.4. Зміна концентрації забруднюючої речовини при виборі малого параметра ε

У роботі розвинуто асимптотичні методи розв’язання обернених сингулярно-збурених задач конвективної дифузії для двозв’язних областей.
Основні результати роботи:

- Знайдено розв'язки поставлених задач. Зокрема, побудовано асимптотичні ряди для знаходження концентрації забруднюючої речовини у випадках, коли $a = a(t)$, $a = a(x, y)$. Також у явному вигляді було знайдено функцію додаткових забруднень $s(x, y)$ із її фізичним та хімічним трактуваннями. При дослідженні дифузійної задачі мною було помічено, що досить цікавим для можливого подальшого дослідження є перенесення здобутих методів і узагальнень на розв'язання подібних задач у неоднорідних анізотропних середовищах для однозв'язних і тризв'язних фізичних областей.
- Розроблені в роботі алгоритми програмно реалізовані, за допомогою програмного середовища MathCAD. На основі чого проведено числовий експеримент та їх аналіз.

Очевидно, розгляд таких обернених задач є корисним з урахуванням того, що на основі їхніх розв'язків ми можемо прогнозувати поширення забруднень в різних водних екосистемах без проведення реальних експериментів, які можуть бути шкідливими чи, в кращому випадку, дуже тривалими у часі та економічно не вигідним.

Отримані результати також можна застосувати для прогнозування конвективно-дифузійного поширення забруднень захоронених ядерних відходів в земляних пластах [7].

1. Бомба А.Я. Сингулярно збурені задачі конвективної дифузії з керуванням у граничних умовах // Міжнародна конференція "Нові підходи до розв'язування диференціальних рівнянь" (1-5 жовтня 2001р., Дрогобич). Тези доповідей.- Дрогобич.- 2001.- С.61. **2.** Бомба А.Я., Пригорницький Д.О. Наближення розв'язків одного класу обернених крайових задач на конформні відображення в багатозв'язних областях з потенціалом керування // Математичні методи та фізико-механічні поля. – 2003. – 46, № 4. – С. 155-162. **3.** Веригин Н.Н., Шержуков Б.С. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах // Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917-1967). - М.: Наука, 1967. - С. 237-313. **4.** Вішик М.И., Люстерник Л.Я. Регулярное вырождение и пограничный слой для линейных дифференциальных уравнений с малым параметром // Успехи математических наук.- 1957.- 12, Вып. 5. - С. 3-122. **5.** Власюк А.П. Некоторые задачи фильтрации и массопереноса растворимых веществ в неоднородных анизотропных пористых средах: Дис. канд. физ.-мат. наук: 01.02.05. - К., 1986. - 166 с. **6.** Лаврик В.И., Никифорович Н.А. Исследования конвективного массопереноса при двумерной фильтрации подземных вод в условиях наличия массообмена: Препр. / АН УССР. Ин-т математики; 82.20. - К.: 1982. - 46 с. **7.** Научно-популярний журнал "Наука и жизнь". ─М.: издательство "пресса", №2, февраль, 1993г. - С. 60-65. **8.** Ляшенко М. Я., Головань М. С. Чисельні методи: Підручник.– К.:Либідь, 1996. – 288 с. **9.** Кирьянов Д. В. Mathcad14. – СПб.: БХВ-Петербург, 2007. ─ 704с.

Рецензент: д.т.н. професор Власюк А. П. (Національний університет водного господарства та природокористування)