

Застосування методу скінченних елементів до розв'язування задач одновимірної гетеродифузії

Галина Щербата

Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Університетська, 1, Львів, 79000, Україна
e-mail: shhelenka@gmail.com

У роботі запропоновано числовий підхід до розв'язування задач гетеродифузії домішкової речовини в одновимірних тілах, характеристики яких залежать від просторової та часової координат. З використанням напівдискретних апроксимацій Гальоркіна та методу скінченних елементів (МСЕ) початково-крайова задача зводиться до задачі Коші для системи звичайних диференціальних рівнянь відносно вузлових значень концентрацій домішки. Наведені результати числових експериментів для задач одновимірної гетеродифузії у шарі ґрунту, коефіцієнти дифузії якого залежать від просторової та часової координат. Проаналізовано вплив параметрів моделі на розподіл концентрації домішкової речовини.

Ключові слова: гетеродифузія, середовище з пастками, варіаційна задача, схема дискретизації Гальоркіна, метод скінченних елементів.

Вступ. У зв'язку із забрудненням ґрунтів радіонуклідами, небезпечними хімічними сполуками та їх перенесення підземними водами, актуальними є проблеми комп'ютерного моделювання процесів дифузії та масоперенесення шкідливих речовин у ґрунтах. При цьому виникає необхідність досліджувати ці процеси в багатокомпонентних неоднорідних середовищах. Побудові та дослідженню моделей процесів дифузії та масоперенесення присвячені роботи [1-7].

Міграцію домішкових речовин у ґрунтах переважно зумовлено дифузією частинок у водних розчинах та макроскопічним рухом приповерхневих і ґрунтових вод. Проте в певних випадках (особливо під час аналізу вертикального перенесення радіонуклідів) для міграції частинок домішкової речовини задіюються інші механізми. Зокрема, частинки дифундують на поверхні мінеральних монокристалів (деформівний пористий скелет ґрунту) та в адсорбованих на скелеті ґрунту шарах води [2, 3, 8]. Це, своєю чергою, призводить до міграції частинок різними шляхами та переходів частинок з одного шляху міграції на інший (явище гетеродифузії у середовищі з пастками).

У монографіях [2-4] процеси гетеродифузного масоперенесення для певних типів середовищ досліджують аналітичними методами. Згідно такого підходу, розв'язки відповідних початково-крайових задач знайдені із застосуванням інтегральних перетворень. При цьому розв'язок подають у вигляді розвинення, наприклад тригонометричного. Якщо коефіцієнти рівняння (зокрема коефіцієнти дифузії) є функції просторової та часової координат, то знаходження розв'язку аналітичними методами є проблематичне. Виникають труднощі із застосування

цього підходу у випадку складної структури функцій, які задають початкові та крайові умови.

У цій роботі МСЕ застосовано до розв'язування задач одновимірної вертикальної гетеродифузії домішкової речовини у середовищі з пастками зі змінними коефіцієнтами. Наведені результати числових експериментів для задач одновимірної гетеродифузії у шарі ґрунту, коефіцієнти дифузії якого залежать від просторової та часової координат. Проаналізовано вплив параметрів моделі на розподіл концентрації домішкової речовини.

1. Математична модель процесу гетеродифузії

Розглянемо багатокомпонентне середовище (наприклад шар ґрунту), яке займає область $\bar{\Omega}_x = [x_0, x_e]$, $x \in \bar{\Omega}_x$. Вважатимемо, що довільно вибраний фізично малий елемент насиченого водою середовища (твердого розчину) містить у собі частинки домішкової речовини, які перебувають у трьох різних станах: поровому розчині, адсорбованій на скелеті середовища воді та скелеті середовища.

Позначимо через $\mathbf{c}(x, t) = [c_1(x, t), \dots, c_s(x, t)]^T$ — концентрацію домішкової речовини в середовищі, яка складена з концентрацій домішкової речовини у відповідних станах середовища (поровому розчині, поверхні та скелеті середовища; s — кількість станів, в яких міститься домішкова речовина, $s \leq 3$). Для опису процесів гетеродифузії домішкової речовини у середовищі з пастками використаємо рівняння математичної моделі, запропонованої в монографії [2]. У матричній формі рівняння моделі можна подати у вигляді

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right) + \mathbf{K} \mathbf{c} + \mathbf{f}, \quad (x, t) \in \Omega = \Omega_x \times \Omega_t, \quad \Omega_x = (x_0, x_e), \quad \Omega_t = (t_0, t_e), \quad (1)$$

де $\mathbf{f} = [f_1(x, t), \dots, f_s(x, t)]^T$ — інтенсивність внутрішніх джерел в кожному із станів середовища. Матриці $\mathbf{D} = [D_{ij}(x, t)]_{i,j=1}^s$, $\mathbf{K} = [k_{ij}(x, t)]_{i,j=1}^s$ складаються з коефіцієнтів дифузії D_{ij} і коефіцієнтів інтенсивності процесів переходу частинок з одного стану в інший k_{ij} , які в загальному випадку є функціями просторової та часової координат.

Рівняння (1) доповнюється початковою умовою

$$\mathbf{c}(x, t_0) = \mathbf{c}_0(x), \quad \mathbf{c}_0(x) = [c_{01}(x), \dots, c_{0s}(x)], \quad x \in \Omega_x, \quad (2)$$

та відповідними крайовими умовами. Розглянемо випадок задання на краях неоднорідних умов на концентрацію й умов змішаного типу

$$\mathbf{c}(x_0, t) = \mathbf{c}_{x_0}(t), \quad \mathbf{c}_{x_0}(t) = [c_{x_01}(t), \dots, c_{x_0s}(t)], \quad t \in \Omega_t, \quad (3)$$

$$D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=x_e} + \alpha(t)c(x_e, t) = \beta(t), \quad t \in \Omega_t,$$

$$\mathbf{a}(t) = \begin{bmatrix} \alpha_1(t) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_2(t) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \alpha_s(t) \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta}(t) = [\beta_1(t), \dots, \beta_s(t)]^T. \quad (4)$$

Результати фізико-хімічних досліджень та аналітичних оцінок показують, що числові значення коефіцієнтів дифузії $D_{i3}, D_{3i}, i = \overline{1,3}$, пов'язані зі скелетом ґрунту, є набагато менші порівняно з іншими коефіцієнтами дифузії. Тому значення цих коефіцієнтів можна покласти рівними нулю. Також знехтуємо взаємовплив перехресних ефектів, зокрема, членами, які містять концентрації частинок у пастках. Використовуючи результати праці [2], подамо матриці \mathbf{D} , \mathbf{K} у вигляді

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_1 & D_3 & 0 \\ D_4 & D_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} -k_1 & k_2 & 0 \\ k_1 & -(k_2 + k_4) & k_3 \\ 0 & k_4 & -k_3 \end{bmatrix}. \quad (5)$$

У цьому випадку матричне рівняння (1) складається з двох скалярних рівнянь параболічного типу й одного звичайного диференціального рівняння. Якщо виконуються умови термодинамічної рівноваги між станами домішки в різних фазах середовища, то шляхом введення ефективних сумарних концентрацій матричне рівняння (1) може складатися з двох рівнянь ($s = 2$) або, навіть, одного рівняння ($s = 1$).

2. Варіаційне формулювання задачі

Для побудови розв'язку початково-крайової задачі (1)-(4) варіаційними методами введемо простір допустимих функцій

$$\mathbf{V} = \left\{ \mathbf{v}(x) = [v_1(x), \dots, v_s(x)]^T : v_i(x) \in W_2^1(\Omega_x), v_i(x_0) = 0, i = \overline{1, s} \right\}.$$

Помножимо транспоноване рівняння (1) і початкову умову (2) на функцію $\mathbf{v} \in \mathbf{V}$ та проінтегруємо по області $\bar{\Omega}_x$. Використовуючи формулу інтегрування по частинах для виразу, який містить дифузійний складник із матрицею \mathbf{D} , та враховуючи крайові умови (4), отримуємо співвідношення

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_e} \left(\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} \right)^T \mathbf{v} dx &= - \int_{x_0}^{x_e} \left(\mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right)^T \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} dx - (\mathbf{a}\mathbf{c}(x_e, t))^T \mathbf{v}(x_e) + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{v}(x_e) + \\ &+ \int_{x_0}^{x_e} (\mathbf{K}\mathbf{c})^T \mathbf{v} dx + \int_{x_0}^{x_e} \mathbf{f}^T \mathbf{v} dx, \\ \int_{x_0}^{x_e} (\mathbf{c}(x, t_0) - \mathbf{c}_0(x))^T \mathbf{v} dx &= 0 \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}. \end{aligned}$$

Уведемо такі білінійні та лінійну форми

$$m(\mathbf{c}, \mathbf{v}) = \int_{x_0}^{x_e} \mathbf{c}^T \mathbf{v} dx,$$

$$a(\mathbf{c}, \mathbf{v}) = \int_{x_0}^{x_e} \left(\mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right)^T \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} dx - \int_{x_0}^{x_e} (\mathbf{Kc})^T \mathbf{v} dx + (\mathbf{a}(t)\mathbf{c}(x_e, t))^T \mathbf{v}(x_e),$$

$$l(\mathbf{v}) = \int_{x_0}^{x_e} \mathbf{f}^T \mathbf{v} dx + \boldsymbol{\beta}(t)^T \mathbf{v}(x_e).$$

У результаті приходимо до варіаційної задачі: знайти функцію $\mathbf{c}(x, t) \in L_2(\Omega_x; \Omega_t)$ (узагальнений розв'язок задачі (1)-(4)), що задовольняє рівняння

$$m(\mathbf{c}', \mathbf{v}) + a(\mathbf{c}, \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}, \quad \mathbf{c}' = \partial \mathbf{c} / \partial t, \quad (6)$$

$$m(\mathbf{c}(x, t_0) - \mathbf{c}_0(x), \mathbf{v}) = 0. \quad (7)$$

3. Наближення узагальненого розв'язку

Для відшукування наближеного розв'язку варіаційної задачі (6), (7) застосуємо схему дискретизації Гальоркіна [9, 10]. Виберемо у просторі допустимих функцій \mathbf{V} послідовність скінченновимірних підпросторів $\mathbf{V}_n \in \mathbf{V}$ з базисами $\boldsymbol{\varphi}_1(x) = [\varphi_{11}(x), \dots, \varphi_{1s}(x)]^T, \dots, \boldsymbol{\varphi}_n(x) = [\varphi_{n1}(x), \dots, \varphi_{ns}(x)]^T$. Подамо наближений розв'язок задачі (6), (7) у вигляді

$$\mathbf{c}(x, t) \approx \tilde{\mathbf{c}}(x, t) = \boldsymbol{\psi}(x, t) + \sum_{j=1}^n \tilde{\boldsymbol{\varphi}}_j(x) \tilde{\mathbf{C}}_j(t), \quad (8)$$

де $\boldsymbol{\psi}(x, t) = [\psi_1(x, t), \dots, \psi_s(x, t)]^T$ — деяка відома функція, $\tilde{\mathbf{C}}_j(t) = [C_{j1}(t), \dots, C_{js}(t)]^T$, $C_{ji}(t) \in C^{(1)}(\Omega_t)$, $j = \overline{1, n}$, $i = \overline{1, s}$ — невідомі функції, $\tilde{\boldsymbol{\varphi}}_j(x)$ — матриця, складена з базисних функцій

$$\tilde{\boldsymbol{\varphi}}_j(x) = \begin{bmatrix} \varphi_{j1}(x) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \varphi_{j2}(x) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \varphi_{js}(x) \end{bmatrix}.$$

Із (3), (8) випливає, що $\boldsymbol{\psi}(x_0, t) = \mathbf{c}_{x_0}(t)$, $\sum_{j=1}^n C_{ji}(t) \boldsymbol{\varphi}_{ji}(x_0) = 0$, $i = \overline{1, s}$, $t \in \Omega_t$.

Згідно методу Гальоркіна, підставимо в рівняння (6), (7) замість \mathbf{c} розв'язку (8), а замість функції \mathbf{v} послідовно базисні функції $\tilde{\Phi}_i$, $i = \overline{1, n}$. У результаті отримаємо таку задачу Коші для системи звичайних диференціальних рівнянь (СЗДР) відносно невідомої функції $\tilde{\mathbf{C}}(t) = [C_{11}(t), \dots, C_{1s}(t), \dots, C_{n1}(t), \dots, C_{ns}(t)]^T$

$$\mathbf{M}\tilde{\mathbf{C}}'(t) + \mathbf{A}\tilde{\mathbf{C}}(t) = \mathbf{F}(t), \quad t \in \Omega_t, \quad (9)$$

$$\mathbf{M}\tilde{\mathbf{C}}(t_0) = \mathbf{P}. \quad (10)$$

Коефіцієнти матриць \mathbf{M} , \mathbf{A} та векторів \mathbf{F} , \mathbf{P} обчислюються за правилами

$$\mathbf{M} = [\mathbf{m}_{ij}]_{i,j=1}^n, \quad \mathbf{A} = [\mathbf{a}_{ij}]_{i,j=1}^n, \quad \mathbf{F} = [\mathbf{f}_i]_{i=1}^n, \quad \mathbf{P} = [\mathbf{p}_i]_{i=1}^n,$$

$$\mathbf{m}_{ij} = m(\tilde{\Phi}_i, \tilde{\Phi}_j), \quad \mathbf{a}_{ij} = [a(\tilde{\Phi}_j, \tilde{\Phi}_i)]^T, \quad \mathbf{f}_i = [l(\tilde{\Phi}_i) - m(\Psi, \tilde{\Phi}_i) - a(\Psi, \tilde{\Phi}_i)]^T,$$

$$\mathbf{p}_i = m(\mathbf{c}_0 - \Psi(x_0, t_0), \tilde{\Phi}_i).$$

Зауважимо, що \mathbf{m}_{ij} , $\mathbf{a}_{ij} \in$ матриці розмірності $s \times s$, а \mathbf{f}_i , \mathbf{p}_i — вектори розмірності $s \times 1$. Кількість вузлових невідомих (розмірність вектора $\tilde{\mathbf{C}}(t)$) дорівнює sn .

4. Дискретизація задачі за просторовою змінною з допомогою МСЕ

Поділимо область $\bar{\Omega}_x$ точками $x_0 < x_1 < \dots < x_N = x_e$ на N скінченних елементів

$$\Omega_{xk} = [x_{k-1}, x_k], k = \overline{1, N}, h_k = x_k - x_{k-1} \text{ — довжина скінченного елемента, } \bar{\Omega}_x = \bigcup_{k=1}^N \Omega_{xk}.$$

Для апроксимації розв'язку використаємо квадратичні базисні функції [9, 10].

Позначимо через $\chi_{k-1}(x) = [\chi_{k-1,1}(x), \dots, \chi_{k-1,s}(x)]^T$, $\chi_{k-1/2}(x) = [\chi_{k-1/2,1}(x), \dots,$

$\chi_{k-1/2,s}(x)]^T$, $\chi_k(x) = [\chi_{k,1}(x), \dots, \chi_{k,s}(x)]^T$ квадратичні базисні функції, задані у

точках x_{k-1} , $x_{k-1/2} = (x_{k-1} + x_k)/2$, x_k елемента Ω_k . На скінченному елементі Ω_k наближений розв'язок $\tilde{\mathbf{c}}(x, t)$ подамо у вигляді

$$\tilde{\mathbf{c}}(x, t) = \bar{\chi}_k(x) \bar{\mathbf{c}}_k(t),$$

де матриця $\bar{\chi}_k(x)$ розміру $s \times 3s$, $\bar{\chi}_k(x) = [\tilde{\chi}_{k-1}(x) \quad \tilde{\chi}_{k-1/2}(x) \quad \tilde{\chi}_k(x)]$,

$$\tilde{\chi}_j(x) = \begin{bmatrix} \chi_{j,1}(x) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \chi_{j,2}(x) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \chi_{j,s}(x) \end{bmatrix}, \quad j = k-1, k-1/2, k.$$

Вектор-функція вузлових невідомих на елементі Ω_{xk} складається з $3s$ компонент

$$\bar{\mathbf{c}}_k(t) = \left[\tilde{\mathbf{c}}_{k-1}^T(t), \tilde{\mathbf{c}}_{k-1/2}^T(t), \tilde{\mathbf{c}}_k^T(t) \right]^T,$$

де $\tilde{\mathbf{c}}_{k-1} = [c_{k-1,1}, \dots, c_{k-1,s}]^T$, $\tilde{\mathbf{c}}_{k-1/2} = [c_{k-1/2,1}, \dots, c_{k-1/2,s}]^T$, $\tilde{\mathbf{c}}_k = [c_{k,1}, \dots, c_{k,s}]^T$ — відповідно значення концентрацій у точках x_{k-1} , $x_{k-1/2}$, x_k елемента Ω_{xk} .

Повернемося до подання наближеного розв'язку (8) і встановимо зв'язок між базисними функціями $\boldsymbol{\varphi}_i(x)$ і $\boldsymbol{\chi}_k(x)$. У випадку квадратичних апроксимацій розмірність підпростору \mathbf{V}_n визначається кількістю скінченних елементів: $n = 2N$. За базис $\boldsymbol{\varphi}_1, \dots, \boldsymbol{\varphi}_n$ підпростору \mathbf{V}_n виберемо множину базисних функцій скінченних елементів $\chi_{1/2}, \chi_1, \chi_{3/2}, \dots, \chi_{N-1}, \chi_{N-1/2}, \chi_N$. Функція $\boldsymbol{\psi}(x, t)$ визначається добутком базисної функції $\boldsymbol{\chi}_0(x)$ і концентрації $\mathbf{c}_{x_0}(t)$, яка задає неоднорідну крайову умову (3), $\boldsymbol{\psi}(x, t) = \boldsymbol{\chi}_0(x)\mathbf{c}_{x_0}(t)$. Шукана функція $\tilde{\mathbf{C}}(t)$ складається з вузлових невідомих функцій скінченних елементів, $\tilde{\mathbf{C}}(t) = [c_{1,1/2}, \dots, c_{s,1/2}, c_{1,1}, \dots, c_{s,1}, \dots, c_{1,N}, \dots, c_{s,N}]^T$.

Матриці та вектори задачі (9), (10) формуються шляхом підсумування відповідних матриць і векторів скінченних елементів

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^N \mathbf{M}_i, \quad \mathbf{A} = \sum_{i=1}^N \mathbf{A}_i, \quad \mathbf{F} = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i, \quad \mathbf{P} = \sum_{i=1}^N \mathbf{P}_i,$$

де індексом i позначено матриці та вектори i -го елемента розмірності $3s \times 3s$, $3s \times 3s$ і $3s \times 1$, $3s \times 1$ відповідно. Крайову умову (3) враховуємо безпосередньо в СЗДР (9), (10), приймаючи, що компоненти $\tilde{\mathbf{c}}_0(t)$ дорівнюють $\mathbf{c}_{x_0}(t)$.

У загальному випадку матриця коефіцієнтів дифузії \mathbf{D} та матриця коефіцієнтів інтенсивності процесів переходу частинок з одного стану в інший \mathbf{K} несиметричні. Тому матриці жорсткості скінченних елементів \mathbf{A}_i та матриця системи рівнянь \mathbf{A} також несиметричні, що приводить до погіршення обчислювальних характеристик методів розв'язування отриманих СЗДР.

Для розв'язування СЗДР (9), (10) використовуємо явні та неявні методи (методи Рунге-Кутта [11]; методи, що базуються на формулах диференціювання назад [11], схема Кранка-Ніколсона [9, 10]) з автоматичним вибором кроку інтегрування.

5. Результати числових досліджень

Наведемо результати деяких числових досліджень процесу перенесення домішкової речовини у шарі ґрунту. Числові розрахунки проводимо в таких безрозмірних змінних [2]: $\tau = k_2 t$, $\xi = (k_2/D_1)^{1/2} x$. Внаслідок такої заміни матриці (5) набудуть вигляду

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 1 & d_1 & 0 \\ d_2 & d & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} -a & 1 & 0 \\ a & -(1+a_2) & a_1 \\ 0 & a_2 & -a_1 \end{bmatrix}.$$

Область $\bar{\Omega}_x$ переходить в $\bar{\Omega}_\xi = [\xi_0, \xi_e]$, $\xi \in \bar{\Omega}_\xi$, а область Ω_t — в $\Omega_\tau = (\tau_0, \tau_e]$, $\tau \in \Omega_\tau$. Безрозмірні кінетичні коефіцієнти дифузії та процесів переходу пов'язані з відповідними коефіцієнтами матриць (5) так

$$d = \frac{D_2}{D_1}, \quad d_1 = \frac{D_3}{D_1}, \quad d_2 = \frac{D_4}{D_1}, \quad a = \frac{k_1}{k_2}, \quad a_1 = \frac{k_3}{k_2}, \quad a_2 = \frac{k_4}{k_2}.$$

Під час обробки експериментальних даних встановлено, що числові значення коефіцієнтів дифузії різних радіонуклідів у ґрунтах є доволі малі величини (порядку 10^{-12} - 10^{-22}) [2, 8]. Коефіцієнти конвективного перенесення також малі (10^{-9} - 10^{-11}). Тому перехід до безрозмірних змінних дозволяє вибирати числові значення відповідних безрозмірних характеристик середовища ближчими до 1 і, таким чином, покращувати характеристики методів розв'язування.

Вважаємо, що на верхній границі шару діє постійне джерело, тобто, на верхній границі задано сумарну концентрацію c_τ : $c_1(\xi_0, \tau) = \alpha c_\tau$, $c_2(\xi_0, \tau) = (1 - \alpha)c_\tau$. Параметр α ($0 \leq \alpha \leq 1$) визначає долю домішкової речовини, яка потрапляє з поверхні ґрунту відповідно у поровий розчин та адсорбований на скелеті ґрунту шар води. На поверхні $\xi = \xi_e$ задані умови масоізоляції: $\left. \frac{\partial c_1}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_e} = \left. \frac{\partial c_2}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_e} = 0$.

У початковий момент часу забруднення в шарі ґрунту відсутнє: $c_1(\xi, \tau_0) = 0$.

Було проведено серію обчислювальних експериментів для різних значень параметрів моделі. Наведемо результати числових досліджень для таких безрозмірних характеристик шару

$$d_2 = 0; \quad a = 10; \quad a_1 = 0,001; \quad a_2 = 0,01; \quad c_\tau = 1; \quad \xi_0 = 0; \quad \xi_e = 10; \quad \tau_0 = 0; \quad \alpha = 0,5.$$

Безрозмірні коефіцієнти дифузії d, d_1 вибираємо у вигляді дробово-раціональних функцій від просторової та часової координат

$$d(\xi, t) = \frac{p_1}{\left[1 + p_2\xi + p_3(\xi_e - \xi)\right]\left[1 + p_4\tau + p_5(\tau_e - \tau)\right]},$$

$$d_1(\xi, t) = \frac{p_6}{\left[1 + p_7\xi + p_8(\xi_e - \xi)\right]\left[1 + p_9\tau + p_{10}(\tau_e - \tau)\right]}.$$

Рис. 1-4 ілюструють поведінку сумарної концентрації домішкової речовини $c_t = c_1 + c_2 + c_3$ для різних значень параметрів p_i , $i = \overline{1,10}$. Вздовж осі абсцис відкладено безрозмірну просторову координату ξ , вздовж осі ординат — сумарну концентрацію $c_t(\xi, \tau)$. На рис. 1 подано графіки розподілу c_t в момент часу

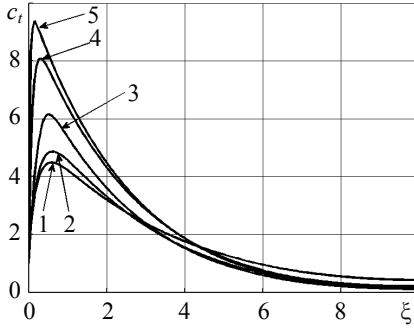


Рис. 1. Розподіл c_i для різних залежностей d від ξ ($\tau = 100$)

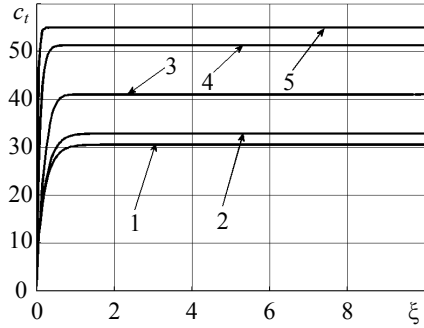


Рис. 2. Розподіл c_i для різних залежностей d від ξ ($\tau \rightarrow \infty$)

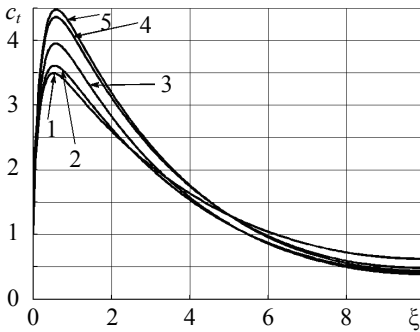


Рис. 3. Розподіл c_i для різних залежностей d_1 від ξ ($\tau = 100$)

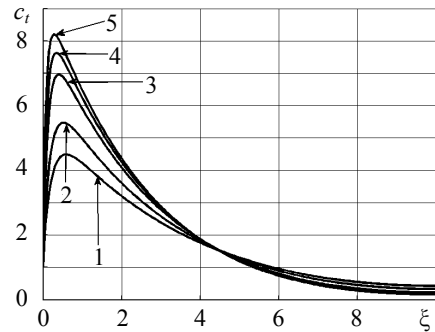


Рис. 4. Розподіл c_i для різних залежностей d від τ ($\tau = 100$)

$\tau = 100$ для $p_1 = 0,1$, $p_i = 0$, $i = \overline{4,10}$ і різних значень p_2, p_3 (d залежить від просторової координати ξ). Кривій 1 відповідають $p_2 = 0, p_3 = 0$; 2 — $p_2 = 1, p_3 = 0$; 3 — $p_2 = 10, p_3 = 0$; 4 — $p_2 = 0, p_3 = 1$; 5 — $p_2 = 0, p_3 = 10$. Криві 2, 3 відповідають випадку спадання коефіцієнта дифузії d вздовж ξ ; криві 4, 5 — випадку зростання.

На рис. 2 зображено розподіл сумарної концентрації c_i для $\tau \rightarrow \infty$ (значення параметрів p_i , $i = \overline{1,10}$, аналогічні, як на рис. 1). Бачимо, що спадання значення коефіцієнта дифузії d призводить до зростання величини сумарної концентрації домішки c_i . Зміна значення коефіцієнта дифузії d біля джерела (край $\xi = 0$) суттєвіше впливає на зміну c_i , порівняно з його зміною поблизу краю $\xi = \xi_e$. З часом відбувається значне накопичення домішки біля джерела. Для великих проміжків часу ($\tau \rightarrow \infty$) концентрація домішки не змінюється, починаючи з невеликої віддалі від поверхні $\xi = 0$ (поверхні, на якій діє джерело).

Розподіл сумарної концентрації домішки c_i в момент часу $\tau = 100$ для $p_1 = 0,1$, $p_6 = 0,1$, $p_i = 0$, $i = \overline{2,5}$, $p_9 = 0$, $p_{10} = 0$ і різних значень p_7, p_8 (d_1 залежить від просторової координати ξ) показано на рис. 3. Кривій 1 відповідають

$p_7 = 0, p_8 = 0$; 2 — $p_7 = 1, p_8 = 0$; 3 — $p_7 = 10, p_8 = 0$; 4 — $p_7 = 0, p_8 = 1$; 5 — $p_7 = 0, p_8 = 10$. Коефіцієнт d_1 впливає на концентрацію домішки c_i аналогічно коефіцієнту дифузії d — його зменшення призводить до збільшення значення сумарної концентрації c_i .

Криві на рис. 4 ілюструють залежність сумарної концентрації домішки c_i для різних залежностей коефіцієнта дифузії d від часової координати τ у момент часу $\tau = 100$. Відповідні графіки отримані для таких значень параметрів p_4, p_5 : 1 — $p_4 = 0, p_5 = 0$ (d постійний у часі); 2 — $p_4 = 1, p_5 = 0$; 3 — $p_4 = 10, p_5 = 0$; 4 — $p_4 = 0, p_5 = 1$; 5 — $p_4 = 0, p_5 = 10$. Значення інших параметрів такі: $p_1 = 0,1, p_2 = p_3 = 0, p_i = 0, i = \overline{6,10}$. Бачимо, що зменшення з плином часу коефіцієнта дифузії d призводить до збільшення значення сумарної концентрації c_i .

Висновки. На основі напівдискретних апроксимацій Гальоркіна та МСЕ розроблені алгоритм і програмне забезпечення для розв'язування задач гетеродифузії домішкової речовини в одновимірних за просторовою змінною середовищах. Для шару ґрунту проведено низку обчислювальних експериментів для різних параметрів моделі та проаналізовано вплив параметрів моделі на розподіл концентрацій домішкової речовини. За незмінних значень характеристик шару ґрунту отримані числові результати добре узгоджуються з відомими результатами, отриманими з допомогою інших підходів [2-4].

Зауважимо, що матриці **D** та **K**, які складаються з коефіцієнтів дифузії та коефіцієнтів переходу є несиметричні. Значення цих коефіцієнтів у реальних задачах відрізняються один від одного на декілька порядків. У результаті числових досліджень показано, що для розв'язування отриманих СЗДР доцільно використовувати неявні схеми з автоматичним вибором кроку інтегрування. З допомогою явних схем для ряду параметрів моделі не вдалось отримати розв'язку.

Література

- [1] Марчук, Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Г. И. Марчук. — Москва: Наука, 1982. — 319 с.
- [2] Чапля, Є. Я. Математичне моделювання гетеродифузного масопереносу / Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха. — Львів: СПОЛІОМ, 2003. — 128 с.
- [3] Бурак, Я. Й. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів / Я. Й. Бурак, Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха. — Київ: Наук. думка, 2006. — 272 с.
- [4] Чапля, Є. Я. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах / Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха. — Київ: Наук. думка, 2009. — 303 с.
- [5] Дейнека, В. С. Модели и методы решения задач в неоднородных средах / В. С. Дейнека, И. В. Сергиенко. — Киев: Наук. думка, 2001. — 606 с.
- [6] Мандзак, Т. І. Математичне моделювання і числовий аналіз адвекції-дифузії у неоднорідних середовищах / Т. І. Мандзак, Я. Г. Савула. — Львів: Сплайн, 2009. — 148 с.
- [7] Власюк, А. П. Математичне моделювання консолідації ґрунтів в процесі фільтрації сольових розчинів / А. П. Власюк, П. М. Мартинюк. — Рівне: Вид-во УДУВГП, 2004. — 211 с.
- [8] Прохоров, В. М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах / В. М. Прохоров. — Москва: Энергоатомиздат, 1981. — 106 с.

- [9] Савула, Я. Г. Числовий аналіз задач математичної фізики варіаційними методами / Я. Г. Савула. — Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2004. — 221 с.
- [10] Zienkiewicz, O. C. The Finite Element Method. Volume 1. The basis / O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor. — Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000. — 689 p.
- [11] Хайпер, Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / Э. Хайпер, С. Нерсетт, Г. Ваннер. — Москва: Мир, 1990. — 512 с.

Application of finite element method for solving of one-dimensional heterodiffusion problems

Halyna Shcherbata

The numerical approach for solution of the problems of heterodiffusion of admixture in a one-dimensional bodies with characteristics, which depend on space and time coordinates, is proposed. Based on a semi-discrete Galerkin approximation and finite element method (FEM) the initial-boundary value problem is reduced to the initial value problem for a system of ordinary differential equations concerning node values of the admixture concentration. The results of numerical experiments for one-dimensional heterodiffusion problems for a layer of soil with diffusion coefficients, depending on space and time coordinates are presented. The influence of model parameters on distribution of the admixture concentration is analyzed.

Применение метода конечных элементов для решения задач одномерной гетеродиффузии

Галина Щербата

В работе предложен численный подход к решению задач гетеродиффузии примесного вещества в одномерных телах из зависимыми от пространственной и временной координат характеристиками. С использованием полудискретных аппроксимаций Галёркина и метода конечных элементов начально-краевая задача приводится к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений относительно узловых значений концентраций примеси. Приведены результаты численных экспериментов для задач одномерной гетеродиффузии в слое почвы с зависимыми от пространственной и временной координат коэффициентами диффузии. Проанализировано влияние параметров модели на распределение концентраций примесного вещества.

Представлено професором Я. Савулою

Отримано 28.05.10