УДК 519.63

РОЗРОБКА ІМІТАЦІЙНОЇ МОДЕЛІ НЕСТАЦІОНАРНОЇ ДИФУЗІЇ

А.Г. Алдакимов[1], Л.О.Хількова[2]

[1]ІХТ СНУ ім. Даля, м. Рубіжне
e-mail: andrey.aldakimov@gmail.com
[2]ІХТ СНУ ім. Даля, м. Рубіжне
e-mail: larisahilkova@gmail.com

Сьогодні імітаційне моделювання займає одну із провідних ролей у житті людства. Величезний комп'ютерний потенціал, досить розвинені обчислювальні методи й математичні моделі, дешевина проведення комп'ютерного експерименту з однієї сторони й дорожнеча й складність проведення натурного експерименту з іншої, роблять імітаційне моделювання одним з популярних направлень в науці. Імітаційні моделі використовують у фізиці й хімії, соціології й економіці.

Однак побудова імітаційних моделей зв’язана з великими теоретичними й технічними труднощами. Цей напрямок вимагає наявність фундаментальних математичних знань і професійного володіння інструментарієм програмної розробки. Велика робота в цьому напрямку ведеться у Львівському Національному університеті ім. Франко під керівництвом проф. Г. Савула, де на основі гетерогенних математичних моделей проводиться чисельне моделювання явищ різної природи.

Нашим завданням було створення імітаційної моделі процесу нестаціонарної дифузії.

Дифузія – це процес взаємного проникнення дотичних речовин в процесі теплового руху їх молекул (більші частки також можуть дифундувати внаслідок броунівського руху). Дифузія відбувається в газах, рідинах і твердих тілах з різними характерними швидкостями.

Математична модель процесу нестаціонарної дифузії описується наступною системою рівнянь в часткових похідних. Нехай $\Omega \in R^3$– обмежена область із межею $\partial\Omega$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + f(t,x), \quad x \in \Omega, \quad t \in (0;+\infty], \\ u(t,x) = v_1(t,x), \quad x \in \partial\Omega, \quad t \in [0;+\infty], \\ u(0,x) = v_2(x), \quad x \in \Omega, \end{cases} \tag{1}$$

де D– коефіцієнт дифузії, $\Delta = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$– оператор Лапласа, $f(t,x)$– задана функція джерел, $v_1(t,x)$– значення функції $u(t,x)$ на межі області $\partial\Omega$,

$v_2(x)$– значення функції $u(t,x)$ в початковий момент часу $t=0$. Шукана функція $u(t,x)$ задає концентрацію речовини що дифундує, у кожній точці області Ω протягом усього розглянутого часового інтервалу.

За розглянуту область Ω ви взяли паралелепіпед, граничні функції $v_1(t,x)=\begin{cases}0 & x\in\partial\Omega\setminus K,\\ 2C_1 & x\in K\end{cases}$, де K – верхня грань паралелепіпеда, $v_2(x)=C_1$ і C_1 – початкова концентрація речовини.

Для чисельного розв'язання системи (1) методом кінцевих різниць [1, с. 585] складемо систему різницевих рівнянь. Введемо τ – інтервал розбиття по t та h_1,h_2,h_3 – інтервали розбиття по x_1,x_2,x_3. Позначимо $u^t_{i,j,k}$ – концентрація речовини в (i,j,k) точці покриття в момент часу t. Частинні похідні заміняємо кінцевими різницями

$$\frac{\partial u}{\partial t}:=\frac{u^{t+1}_{i,j,k}-u^t_{i,j,k}}{\tau},\qquad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}\right):=\Lambda_1 u^t=\frac{u^t_{i-1,j,k}-2u^t_{i,j,k}+u^t_{i,+1j,k}}{h_1^2},$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}\right):=\Lambda_2 u^t=\frac{u^t_{i,j-1,k}-2u^t_{i,j,k}+u^t_{i,j+1,k}}{h_2^2},\quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_3^2}\right):=\Lambda_3 u^t=\frac{u^t_{i,j,k-1}-2u^t_{i,j,k}+u^t_{ii,j,k+1}}{h_3^2},$$

а оператор Лапласа

$$\Delta u:=\Lambda u^t=\Lambda_1 u^t+\Lambda_2 u^t+\Lambda_3 u^t \tag{2}$$

Імітацію дифузії ми виконали по двох схемах: явною й економічною повздовжньо-поперечною схемою [1, с. 638]. Розв'язок різницевих систем лінійних рівнянь виконували методом прогону [1, с. 622].

Перша проблема, пов'язана із чисельним моделюванням процесу пов'язана з великою розмірністю розв'язуваної системи лінійних рівнянь (при розбивці кожного напрямку хоча б на 20 відрізків ми одержуємо систему з 800 лінійних рівнянь), і як наслідок тривалий час розрахунку. Повздовжньо-поперечна схема працює в 6 разів швидше явної схеми й це істотне прискорення. Друга проблема – стійкість методу. Для явної схеми метод стійкий при виборі $\tau\le\frac{h^2}{6}$, для поздовжньої-поперечної схеми при $\tau\le\frac{3h^2}{4}$.

Для системи (1) система різницевих рівнянь явної схеми має вигляд

$$\begin{cases}u^{t+1}_{i,j,k}=u^t_{i,j,k}+\tau\Lambda u^t+\tau f^t_{i,j,k}, i=1,\ldots,n_1-1, j=1,\ldots,n_2-1, k=1,\ldots,n_3-1,\\ u^0_{i,j,k}=C_1, i=1,\ldots,n_1-1, j=1,\ldots,n_2-1, k=1,\ldots,n_3-1,\\ u^t_{0,j,k}=u^t_{n1,j,k}=u^t_{i,0,k}=u^t_{i,n2,k}=u^t_{i,j,n3}=0,\\ u^t_{i,j,0}=2C_1.\end{cases} \tag{3}$$

система різницевих рівнянь повздовжньо-поперечної схеми має наступний вигляд

$$
\begin{cases}
3\dfrac{u_{i,j,k}^{t+1/3}-u_{i,j,k}^{t}}{\tau}=\Lambda_1 u^{t+1/3}+\Lambda_2 u^{t}+\Lambda_3 u^{t}+f_{i,j,k}^{t+1/3}, i=\overline{1,n_1-1}, j=\overline{1,n_2-1}, k=\overline{1,n_3-1},\\
3\dfrac{u_{i,j,k}^{t+2/3}-u_{i,j,k}^{t+1/3}}{\tau}=\Lambda_1 u^{t+1/3}+\Lambda_2 u^{t+2/3}+\Lambda_3 u^{t+1/3}+f_{i,j,k}^{t+2/3}, i=\overline{1,n_1-1}, j=\overline{1,n_2-1}, k=\overline{1,n_3-1},\\
3\dfrac{u_{i,j,k}^{t+1}-u_{i,j,k}^{t+2/3}}{\tau}=\Lambda_1 u^{t+2/3}+\Lambda_2 u^{t+2/3}+\Lambda_3 u^{t+1}+f_{i,j,k}^{t+1}, i=\overline{1,n_1-1}, j=\overline{1,n_2-1}, k=\overline{1,n_3-1},\\
u_{i,j,k}^{0}=C_1, i=1,\ldots,n_1-1, j=1,\ldots,n_2-1, k=1,\ldots,n_3-1,\\
u_{0,j,k}^{t}=u_{n1,j,k}^{t}=u_{i,0,k}^{t}=u_{i,n2,k}^{t}=u_{i,j,n3}^{t}=0,\\
u_{i,j,0}^{t}=2C_1.
\end{cases}
\tag{4}
$$

Для знаходження чисельного розв'язку систем (3) та (4) і його візуалізації була розроблена комп'ютерна програма мовою Delphi [2], яка демонструє процес нестаціонарної дифузії в обмеженій області Ω (рис. 1).

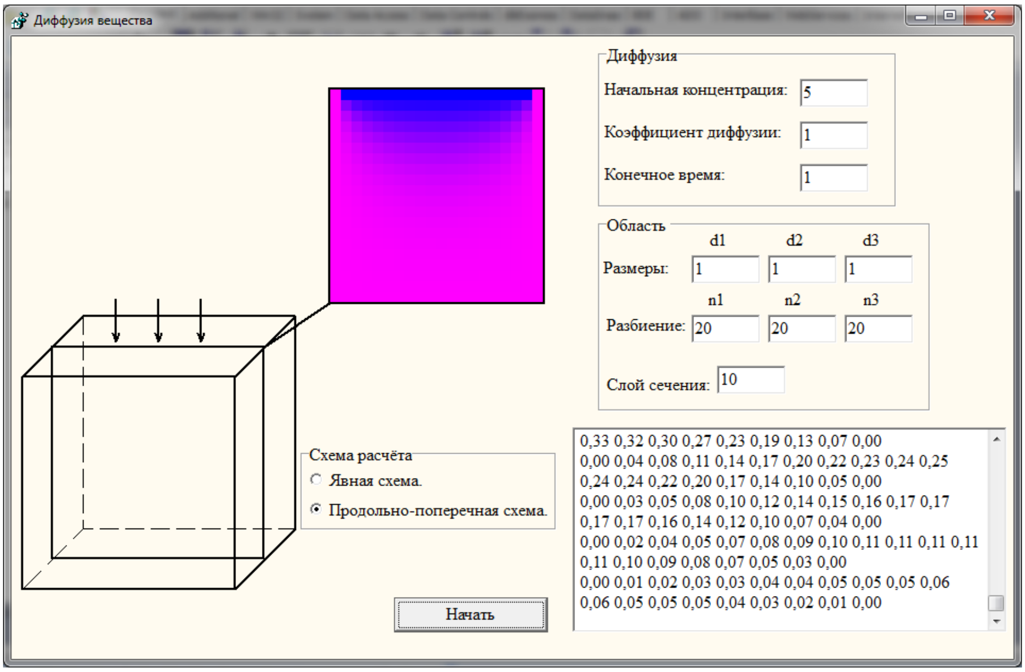

Рис. 1. Приклад роботи програми

Література

1. Тихонов А. Н. Уравнения математической физики: Учеб. пособие. 6 изд., испр. и доп. / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. – М: Издательство МГУ, 1999. – 792 с.

2. Гофман В. Delphi 6./ В. Гофман, А. Хомоненко. – СПб: БХВ-Петербург, 2002. – 1152 с.