

Аналіз чутливості розв'язків задач одновимірної гетеродифузії стосовно змін параметрів середовища

Ярема Савула¹, Галина Щербата²

¹ д. ф.-м. н., професор, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Університетська, 1, Львів, 79000, Україна, e-mail: savula@franko.lviv.ua

² Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Університетська, 1, Львів, 79000, Україна, e-mail: shhelenka@gmail.com

Проаналізовано чутливість розв'язків задач гетеродифузії домішкової речовини в одновимірних тілах стосовно змін параметрів середовища. Із використанням напівдискретних апроксимацій Гальоркіна та методу скінченних елементів початково-крайову задачу гетеродифузії зведено до задачі Коші для системи звичайних диференціальних рівнянь відносно вузлових значень концентрації домішки. Отримано рівняння чутливості в диференціальному, варіаційному та скінченно-елементному формулюваннях. Наведені результати числових експериментів для задач одновимірної гетеродифузії у шарі ґрунту та проаналізовано вплив малих змін параметрів моделі на розподіл концентрації домішкової речовини.

Ключові слова: аналіз чутливості, гетеродифузія, варіаційна задача, схема дискретизації Гальоркіна, метод скінченних елементів.

Вступ. Під час дослідження складних систем важливим є питання визначення впливу зміни їх параметрів (початкового стану, внутрішніх і зовнішніх параметрів) на зміну поведінки та характеристики системи загалом. У широкому розумінні аналіз чутливості (АЧ) полягає в обчисленні зміни вихідних характеристик системи, які викликані малими змінами вхідних параметрів [1-3]. Тобто, АЧ полягає в обчисленні повних похідних від розглядуваних характеристик системи (які отримані на основі розв'язків математичної моделі системи) за параметрами системи. Отримані в результаті АЧ коефіцієнти чутливості (похідні характеристики системи за певним параметром) дають важливу інформацію про вплив параметрів системи на її поведінку. Коефіцієнти чутливості є необхідним складником у задачах оптимального проектування та керування системами, задачах ідентифікації параметрів, аналізі надійності систем. Для АЧ застосовують такі основні методи: метод скінченних різниць, прямий метод диференціювання та метод спряжених змінних [1-6]. Співвідношення АЧ для кожного з цих методів можна отримати в неперервному та дискретному формулюванні.

У цій роботі АЧ застосуємо для визначення зміни розв'язків рівнянь одновимірної гетеродифузії [7, 8], які спричинені малими змінами коефіцієнтів рівнянь: коефіцієнтів дифузії та інтенсивності процесів переходу частинок з одного стану в інший. Ці коефіцієнти задають характеристики середовища. Для обчислення повних похідних від розв'язку за коефіцієнтами рівнянь використовуємо

прямий метод диференціювання (ПМД). Співвідношення АЧ цього підходу отримано в нерерервному та дискретному вигляді.

Наведені результати числових експериментів АЧ для задач одновимірної гетеродифузії у шарі ґрунту та проаналізовано вплив параметрів моделі на розподіл концентрації домішкової речовини.

1. Математична модель процесу гетеродифузії

Розглянемо багатоконпонентне 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 частинки домішкової речовини, які перебувають у трьох різних станах: поровому розчині, адсорбованій на скелеті середовища воді та скелеті середовища.

Позначимо через $\mathbf{c}(x, t) = [c_1(x, t), \dots, c_m(x, t)]^T$ — концентрацію домішкової речовини в середовищі, яка складена з концентрацій домішкової речовини у відповідних станах (поровому розчині, поверхні та скелеті середовища; m — кількість станів, у яких міститься домішкова речовина, $m \leq 3$). Для опису процесів гетеродифузії домішкової речовини у середовищі з пастками використаємо рівняння математичної моделі, запропонованої в монографії [7]. 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 $\mathbf{f} = [f_1(x, t), \dots, f_m(x, t)]^T$ — інтенсивність внутрішніх джерел забруднювача. Матриці $\mathbf{D} = [D_{ij}]_{i,j=1}^m$, $\mathbf{K} = [k_{ij}]_{i,j=1}^m$ складаються з коефіцієнтів дифузії D_{ij} та інтенсивності k_{ij} процесів переходу частинок з одного стану в інший. Вважаємо, що матриці \mathbf{D} , \mathbf{K} є постійні в області Ω . Рівняння (1) доповнюється початковою умовою

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

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

$$\mathbf{c}(x_0, t) = \mathbf{c}_{x_0}(t), \quad \mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \Big|_{x=x_e} + \boldsymbol{\alpha}(t) \mathbf{c}(x_e, t) = \boldsymbol{\beta}(t), \quad t \in \Omega_t, \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\alpha}(t) = \text{diag}(\alpha_1(t), \dots, \alpha_m(t)), \quad \boldsymbol{\beta}(t) = [\beta_1(t), \dots, \beta_m(t)]^T.$$

Результати фізико-хімічних досліджень та аналітичних оцінок показують, що значення пов'язаних зі скелетом ґрунту коефіцієнтів дифузії D_{i3}, D_{3i} , $i = \overline{1, 3}$, є значно менші, порівняно з іншими коефіцієнтами дифузії. Тому ці коефіцієнти можна покласти рівними нулю. Також знехтуємо взаємовпливом перехресних

ефектів, зокрема, членами, які містять концентрації частинок у пастках. Використовуючи результати праць [7, 8], подамо матриці \mathbf{D} , \mathbf{K} у вигляді

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_1 & D_3 & 0 \\ D_4 & D_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} -k_1 & k_2 & 0 \\ k_1 & -(k_2 + k_4) & k_3 \\ 0 & k_4 & -k_3 \end{bmatrix}. \quad (4)$$

У цьому випадку матричне рівняння (1) складається з двох скалярних рівнянь параболічного типу й одного звичайного диференціального рівняння.

Шуканий розв'язок задачі $\mathbf{c}(t)$ залежить від коефіцієнтів матриць дифузії й інтенсивності процесів переходу \mathbf{D} та \mathbf{K} , вектора інтенсивності внутрішніх джерел \mathbf{f} , початкових і крайових умов. Нехай $\mathbf{u} = [u_1, \dots, u_p]^T = [D_1, D_2, D_3, D_4, k_1, k_2, k_3, k_4]^T$ — набір коефіцієнтів дифузії та масоперенесення, вплив яких на розв'язок $\mathbf{c}(t)$ будемо аналізувати. Щоб підкреслити залежність певної величини від вектора \mathbf{u} , надалі відзначатимемо її нижнім індексом \mathbf{u} .

2. Варіаційне формулювання задачі. Напівдискретні апроксимації Гальоркіна та метод скінченних елементів (МСЕ)

Початково-крайова задача (1)-(3) допускає таке варіаційне формулювання [9]: знайти функцію

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

яка задовольняє варіаційне рівняння

$$m \left(\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t}, \mathbf{v} \right) + a_{\mathbf{u}}(\mathbf{c}, \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V} \quad (5)$$

з початковою умовою

$$m(\mathbf{c}(x, t_0) - \mathbf{c}_0(x), \mathbf{v}) = 0. \quad (6)$$

Відповідні білінійні та лінійна форми мають вигляд

$$a_{\mathbf{u}}(\mathbf{c}, \mathbf{v}) = \int_{x_0}^{x_e} \left(\mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right)^T \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} dx - \int_{x_0}^{x_e} (\mathbf{K} \mathbf{c})^T \mathbf{v} dx + (\boldsymbol{\alpha}(t) \mathbf{c}(x_e, t))^T \mathbf{v}(x_e),$$

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

Для відшукування наближеного розв'язку варіаційної задачі (5), (6), як і в роботі [9], застосуємо схему дискретизації Гальоркіна та МСЕ із використанням квадратичних базисних функцій [10, 11]. У підсумку отримаємо таку задачу Коші

для системи звичайних диференціальних рівнянь (СЗДР) відносно невідомої вектор-функції $\tilde{\mathbf{C}}(t)$, яка утворена з невідомих концентрацій $\mathbf{c}(t)$ у вузлах скінченно-елементної сітки [9]

$$\mathbf{M} \frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}(t)}{\partial t} + \mathbf{A}_u \tilde{\mathbf{C}}(t) = \mathbf{F}(t), \quad t \in \Omega_t, \quad (7)$$

$$\mathbf{M} \tilde{\mathbf{C}}(t_0) = \mathbf{P}. \quad (8)$$

3. Аналіз чутливості початково-крайової задачі

Знайдемо чутливість розв'язку $\mathbf{c}(t)$ стосовно зміни коефіцієнтів матриць \mathbf{D} та \mathbf{K} . Подамо отримані рівняння чутливості для випадків запису математичної моделі процесу гетеродифузії у диференціальній, варіаційній і скінченно-елементній формах.

Запишемо рівняння (1) у вигляді

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} = \mathbf{L}_u \mathbf{c} + \mathbf{f}, \quad (x, t) \in \Omega = \Omega_x \times \Omega_t, \quad \mathbf{L}_u \mathbf{c} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right) + \mathbf{K} \mathbf{c}.$$

Надамо вектору \mathbf{u} приріст (варіацію) $\delta \mathbf{u}$, $\mathbf{u}^{(1)} = \mathbf{u} + \delta \mathbf{u}$. Матриці \mathbf{D} та \mathbf{K} отримають варіації $\delta \mathbf{D}$ та $\delta \mathbf{K}$, $\mathbf{D}^{(1)} = \mathbf{D} + \delta \mathbf{D}$, $\mathbf{K}^{(1)} = \mathbf{K} + \delta \mathbf{K}$. Визначимо першу варіацію розв'язку \mathbf{c} і оператора задачі \mathbf{L}_u за напрямом $\delta \mathbf{u}$, використовуючи означення похідної за напрямом

$$\delta \mathbf{c} = \mathbf{c}'_u \delta \mathbf{u} \equiv \left. \frac{d\mathbf{c}(x, t, \mathbf{u} + \tau \delta \mathbf{u})}{d\tau} \right|_{\tau=0}, \quad \mathbf{c}'_u = (\mathbf{c}'_{u_1}, \dots, \mathbf{c}'_{u_p}) = \left(\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial u_1}, \dots, \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial u_p} \right),$$

$$\mathbf{L}'_{\delta \mathbf{u}} \mathbf{c} = \mathbf{L}'_u \mathbf{c} \delta \mathbf{u} \equiv \left. \frac{d\mathbf{L}_{\mathbf{u} + \tau \delta \mathbf{u}} \mathbf{c}}{d\tau} \right|_{\tau=0} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{d\mathbf{D}}{d\mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right) + \left(\frac{d\mathbf{K}}{d\mathbf{u}} \right) \mathbf{c} \right] \delta \mathbf{u},$$

$$\mathbf{L}'_u \mathbf{c} \equiv \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{d\mathbf{D}}{d\mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right) + \frac{d\mathbf{K}}{d\mathbf{u}} \mathbf{c}.$$

Матриця похідних оператора задачі $\mathbf{L}'_u \mathbf{c}$ містить доданки з добутками похідних від матриць \mathbf{D} , \mathbf{K} за вектором \mathbf{u} та векторів $\partial \mathbf{c} / \partial x$, \mathbf{c} . Обчислення цих добутків здійснюємо так

$$\frac{d\mathbf{D}}{d\mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} = \left(\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial u_1} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x}, \dots, \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial u_p} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right), \quad \frac{d\mathbf{K}}{d\mathbf{u}} \mathbf{c} = \left(\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial u_1} \mathbf{c}, \dots, \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial u_p} \mathbf{c} \right).$$

Матриця похідних $\mathbf{L}'_u \mathbf{c}$ складається з p стовпців. Кожен із них отримуємо шляхом диференціювання оператора \mathbf{L}_u за компонентою u_j , $j = \overline{1, p}$, вектора параметрів моделі \mathbf{u}

$$\mathbf{L}'_u \mathbf{c} = (\mathbf{L}'_{u_1} \mathbf{c}, \dots, \mathbf{L}'_{u_p} \mathbf{c}), \quad \mathbf{L}'_{u_j} \mathbf{c} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial u_j} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial u_j} \mathbf{c}, \quad j = \overline{1, p}.$$

Внаслідок диференціювання обох частин рівняння (1), початкової умови (2) і крайових умов (3) за вектором \mathbf{u} та використовуючи правила диференціювання складених функцій для знаходження матриці похідних $\mathbf{c}'_{\mathbf{u}}$ отримуємо таку початково-крайову задачу

$$\frac{\partial \mathbf{c}'_{\mathbf{u}}}{\partial t} = \mathbf{L}_{\mathbf{u}} \mathbf{c}'_{\mathbf{u}} + \mathbf{L}'_{\mathbf{u}} \mathbf{c}, \quad (x, t) \in \Omega, \quad (9)$$

$$\mathbf{c}'_{\mathbf{u}}(x, t_0) = \mathbf{0}, \quad x \in \Omega_x, \quad (10)$$

$$\mathbf{c}'_{\mathbf{u}}(x_0, t) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{c}'_{\mathbf{u}}}{\partial x} \Big|_{x=x_e} + \alpha(t) \mathbf{c}'_{\mathbf{u}}(x_e, t) = - \frac{d\mathbf{D}}{d\mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \Big|_{x=x_e}, \quad t \in \Omega_t. \quad (11)$$

Із (9)-(11) випливає, що кожен із стовпців $\mathbf{c}'_{u_j}, j = \overline{1, p}$ матриці похідних $\mathbf{c}'_{\mathbf{u}}$ є розв'язком початково-крайової задачі

$$\frac{\partial \mathbf{c}'_{u_j}}{\partial t} = \mathbf{L}_{u_j} \mathbf{c}'_{u_j} + \mathbf{L}'_{u_j} \mathbf{c}, \quad (x, t) \in \Omega = \Omega_x \times \Omega_t, \quad (12)$$

$$\mathbf{c}'_{u_j}(x, t_0) = \mathbf{0}, \quad x \in \Omega_x, \quad (13)$$

$$\mathbf{c}'_{u_j}(x_0, t) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{c}'_{u_j}}{\partial x} \Big|_{x=x_e} + \alpha(t) \mathbf{c}'_{u_j}(x_e, t) = - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial u_j} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \Big|_{x=x_e}, \quad t \in \Omega_t. \quad (14)$$

Задачі (12)-(14) за своєю структурою є аналогічні до вихідної задачі (1)-(3). Тому для їх розв'язування можна використати розроблений варіаційний підхід і МСЕ.

4. Варіаційне формулювання задачі аналізу чутливості

Опишемо процедуру отримання рівнянь чутливості для випадку, якщо вихідну задачу записано у варіаційному формулюванні (5), (6). Введемо першу варіацію $a'_{\delta \mathbf{u}}$ білінійної форми

$$a'_{\delta \mathbf{u}}(\mathbf{c}, \mathbf{v}) \equiv \frac{da_{\mathbf{u}+\tau \delta \mathbf{u}}(\mathbf{c}, \mathbf{v})}{d\tau} \Big|_{\tau=0} = \left[\int_{x_0}^{x_e} \left(\frac{d\mathbf{D}}{d\mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right)^T \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} dx - \int_{x_0}^{x_e} \left(\frac{d\mathbf{K}}{d\mathbf{u}} \mathbf{c} \right)^T \mathbf{v} dx \right] \delta \mathbf{u}.$$

Внаслідок диференціювання варіаційного рівняння (5) і початкової умови (6) за вектором \mathbf{u} та використовуючи правила диференціювання складених функцій, отримуємо такі варіаційні задачі для знаходження похідних $\mathbf{c}'_{u_j}, j = \overline{1, p}$

$$m \left(\frac{\partial \mathbf{c}'_{u_j}}{\partial t}, \mathbf{v} \right) + a_{u_j}(\mathbf{c}'_{u_j}, \mathbf{v}) = -a'_{u_j}(\mathbf{c}, \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}, \quad (15)$$

$$a'_{u_j}(\mathbf{c}, \mathbf{v}) = \int_{x_0}^{x_e} \left(\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial u_j} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} \right)^T \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} dx - \int_{x_0}^{x_e} \left(\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial u_j} \mathbf{c} \right)^T \mathbf{v} dx,$$

$$m(\mathbf{c}'_{u_j}(x, t_0), \mathbf{v}) = \mathbf{0}. \quad (16)$$

Рівняння чутливості (9)-(11), (12)-(14) і (15), (16) отримано на основі неперервного підходу. Для розв'язування варіаційних задач (15), (16) можна застосувати процедуру МСЕ, яку використано для розв'язування вихідної варіаційної задачі (5), (6).

5. Аналіз чутливості у випадку напівдискретних апроксимацій Гальоркіна та МСЕ

У випадку дискретного підходу рівняння чутливості отримуємо на основі рівнянь МСЕ (7), (8). Позначимо через $\tilde{\mathbf{C}}'_u$ матрицю похідних функції $\tilde{\mathbf{C}}$ шуканих вузлових концентрацій за вектором параметрів \mathbf{u} . Внаслідок диференціювання за вектором \mathbf{u} рівнянь (7), (8) отримуємо задачу Коші для знаходження матриці похідних $\tilde{\mathbf{C}}'_u$

$$\mathbf{M} \frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}'_u(t)}{\partial t} + \mathbf{A}_u \tilde{\mathbf{C}}'_u(t) = - \frac{d\mathbf{A}_u}{d\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{C}}(t), \quad t \in \Omega_t, \quad (17)$$

$$\mathbf{M} \tilde{\mathbf{C}}'_u(t_0) = \mathbf{0}. \quad (18)$$

Матриця похідних $\tilde{\mathbf{C}}'_u$ складається з p стовпців (p — розмірність вектора параметрів \mathbf{u})

$$\tilde{\mathbf{C}}'_u = \left[\tilde{\mathbf{C}}'_{u_1}, \dots, \tilde{\mathbf{C}}'_{u_p} \right] = \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial u_1}, \dots, \frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}}{\partial u_p} \right].$$

Матрицю похідних $\tilde{\mathbf{C}}'_u$ обчислюємо шляхом розв'язування задачі Коші для кожного зі стовпців

$$\mathbf{M} \frac{\partial \tilde{\mathbf{C}}'_{u_j}(t)}{\partial t} + \mathbf{A}_u \tilde{\mathbf{C}}'_{u_j}(t) = - \frac{\partial \mathbf{A}_u}{\partial u_j} \tilde{\mathbf{C}}(t), \quad j = \overline{1, p}, \quad t \in \Omega_t, \quad (19)$$

$$\mathbf{M} \tilde{\mathbf{C}}'_{u_j}(t_0) = \mathbf{0}. \quad (20)$$

Матриці похідних $\partial \mathbf{A}_u / \partial u_j$ формуємо шляхом підсумовування відповідних матриць похідних скінченних елементів.

Зауважимо, що рівняння чутливості (17)-(20) можна отримати, якщо застосувати відповідні скінченноелементні апроксимації до варіаційної задачі (15), (16). Однак неперервне формулювання АЧ дає можливість здійснити теоретичне обґрунтування існування повних похідних \mathbf{c}'_u . Окрім цього, до рівнянь чутливості, записаних у неперервному вигляді, можна застосовувати інші схеми розв'язування, ніж для вихідної задачі.

6. Результати числових досліджень

Наведемо результати деяких числових досліджень АЧ для процесу перенесення домішкової речовини у шарі ґрунту. Числові розрахунки здійснюємо в таких

безрозмірних змінних [7]: $\tau = k_2 t$, $\xi = (k_2/D_1)^{1/2} x$. Внаслідок такої заміни матриці (4) 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 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 (4) так

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

Позначимо через $\mathbf{u} = [d, d_1, d_2, a, a_1, a_2]^T$ — вектор безрозмірних параметрів моделі, стосовно зміни яких будемо аналізувати чутливість концентрацій c_1, c_2, c_3 .

Вважаємо, що на верхній межі шару $\xi = \xi_0$ діє постійне джерело, тобто на верхній межі задано сумарну концентрацію c_s : $c_1(\xi_0, \tau) = \alpha c_s$, $c_2(\xi_0, \tau) = (1 - \alpha)c_s$. Параметр α ($0 \leq \alpha \leq 1$) визначає частку 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: $c_i(\xi, \tau_0) = 0$, $i = \overline{1,3}$.

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

$$d = 0,1; \quad d_1 = 0,05; \quad d_2 = 0,05; \quad a = 10; \quad a_1 = 0,001; \quad a_2 = 0,01; \\ c_s = 1; \quad \xi_0 = 0; \quad \xi_e = 10; \quad \tau_0 = 0; \quad \alpha = 0,5.$$

Коефіцієнти дифузії та інтенсивності процесів переходу частинок вважаємо постійними для всього шару ґрунту упродовж розглядуваного періоду часу. У роботі [9] опубліковані результати числових досліджень із визначення сумарної концентрації домішкової речовини $C = c_1 + c_2 + c_3$ для різних значень характеристик ґрунту.

У цій роботі на рис. 1-6 подані результати обчислень повних похідних $\partial C / \partial u_i$, $i = \overline{1,6}$, які відображають вплив малих змін характеристик середовища на зміну концентрації забруднювача. Кривими 1-4 зображено розподіл $\partial C / \partial u_i$ у моменти часу $\tau = 100; 500; 1000; 2000$. Кривим 5 відповідає стаціонарний випадок — $\tau \rightarrow \infty$.

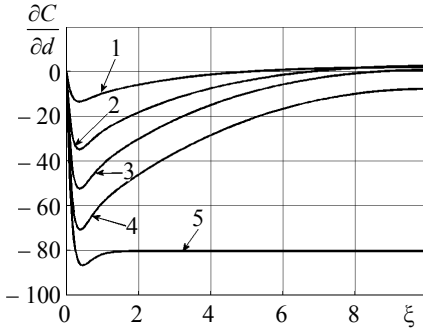


Рис. 1. Розподіл $\partial C/\partial d$ вздовж ξ для різних моментів часу

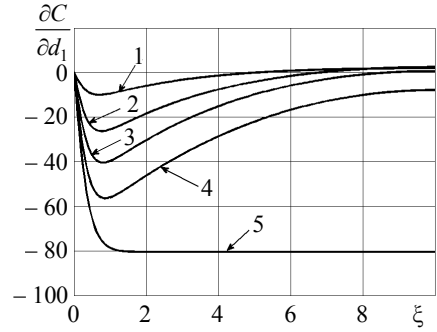


Рис. 2. Розподіл $\partial C/\partial d_1$ вздовж ξ для різних моментів часу

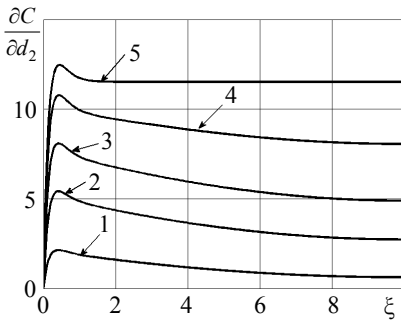


Рис. 3. Розподіл $\partial C/\partial d_2$ вздовж ξ для різних моментів часу

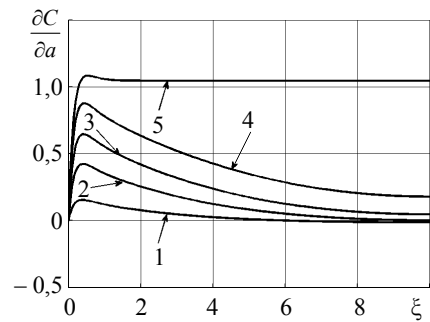


Рис. 4. Розподіл $\partial C/\partial a$ вздовж ξ для різних моментів часу

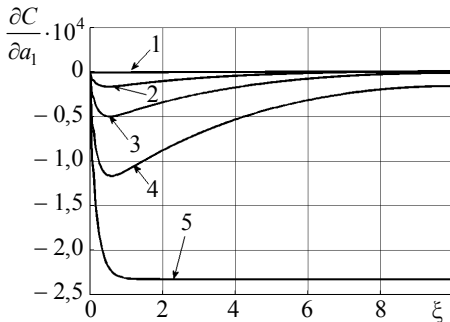


Рис. 5. Розподіл $\partial C/\partial a_1$ вздовж ξ для різних моментів часу

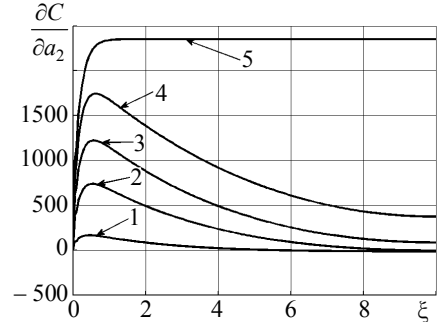


Рис. 6. Розподіл $\partial C/\partial a_2$ вздовж ξ для різних моментів часу

Із рис. 1-6 випливає, що збільшення коефіцієнтів d, d_1, a_1 призводить до зменшення сумарної концентрації C . Зростання значень коефіцієнтів d_2, a, a_2 навпаки призводить до зростання C .

У табл. 1 для стаціонарного випадку ($\tau \rightarrow \infty$) подані максимальні за модулем із врахуванням знаку значення коефіцієнтів чутливості $(\partial C/\partial u_i)_* = \text{sign} \left(\max_{\xi \in \Omega_\xi} |\partial C/\partial u_i| \right) \max_{\xi \in \Omega_\xi} |\partial C/\partial u_i|$. Значення параметрів моделі $u_i, i = \overline{1,6}$, при цьому

Таблиця 1

Аналіз впливу зміни параметрів u_i на величину сумарної концентрації C

	$u_1 = d$	$u_2 = d_1$	$u_3 = d_2$	$u_4 = a$	$u_5 = a_1$	$u_6 = a_2$
u_i	0,100	0,0500	0,0500	10,0000	0,0010	0,0100
$(\partial C / \partial u_i)_*$	-86,847	-80,5000	12,4640	1,0828	-23296	2352,9000
$(\Delta C)_{i*}$	-0,0868	-0,0403	0,0062	0,1083	-0,2330	0,2353
$ (\Delta C)_{i*} / (\Delta C)_{3*} $	14,000	6,5000	1,0000	17,4700	37,5800	37,5800

рівні початковим. На основі цих значень обчислено лінійну частину приросту $(\Delta C)_{i*}$ сумарної концентрації C в точці ξ_{i*} проміжку $\bar{\Omega}_\xi$, у якій $\partial C / \partial u_i$ набуває найбільшого за модулем значення $(\Delta C)_{i*} = (\partial C / \partial u_i)_* \Delta u_i$, $i = \bar{1}, 6$.

Величину приросту Δu_i вибирали рівною $\Delta u_i = 0,01 u_i$ (1 % від вихідного значення параметра). Величини відповідних приростів $(\Delta C)_{i*}$ подані в третьому рядку таблиці. Зауважимо, що найбільший вплив на зміну сумарної концентрації C мають коефіцієнти інтенсивності процесів переходу частинок a_1, a_2 . Найменше впливає на зміну концентрації C перехресний коефіцієнт дифузії d_2 ($i = 3$). В останньому рядку таблиці подані відношення $|(\Delta C)_{i*} / (\Delta C)_{3*}|$, які відображають порівняльний вплив зміни параметрів моделі Δu_i на зміну сумарної концентрації. З останнього рядка таблиці видно, що, наприклад, зміна на 1 % коефіцієнтів a_1, a_2 призводить до збільшення C на величину в 37,58 разів більшу, порівняно зі зміною на 1 % перехресного коефіцієнта дифузії d_2 .

Висновки. У роботі отримано рівняння чутливості розв'язків задач одновимірної гетеродифузії стосовно зміни параметрів середовища з використанням неперервного та дискретного підходів. На основі напівдискретних апроксимацій Гальоркіна та МСЕ розроблені алгоритм і програмне забезпечення для розв'язування задач гетеродифузії домішкової речовини та задач АЧ в одновимірних за просторовою змінною середовищах. Для шару ґрунту здійснено низку обчислювальних експериментів для різних параметрів моделі та проаналізовано вплив малої зміни параметрів моделі на розподіл концентрацій домішкової речовини.

Література

- [1] Keulen, F. Review of options for structural design sensitivity analysis. Part 1. Linear systems / F. van Keulen, R. T. Haftka, N. H. Kim // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. — 2005. — Vol. 194. — P. 3213-3243.
- [2] Peter, J. E. V. Numerical sensitivity analysis for aerodynamic optimization: A survey of approaches / J. E. V. Peter, R. P. Dwight // Computers & Fluids. — 2010. — Vol. 39. — P. 373-391.
- [3] Гаращенко, Ф. Г. Вступ до аналізу чутливості параметричних систем / Ф. Г. Гаращенко, О. Ф. Швець. — Київ: Видавничо-полігр. центр «Київський університет», 2006. — 115 с.
- [4] Choi, K. K. Structural Sensitivity Analysis and Optimization 1. Linear Systems / K. K. Choi, N. H. Kim. — Springer Science+Business Media, Inc., 2005. — 447 p.

- [5] *Marchuk, G. I. Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems / G. I. Marchuk.* — Kluwer: Dordrecht, 1995. — 466 p.
- [6] *Хог, Э. Анализ чувствительности при проектировании конструкций / Э. Хог, К. Чой, В. Комков.* — Москва: Мир, 1988. — 428 с.
- [7] *Чапля, Є. Я. Математичне моделювання гетеродифузного масопереносу / Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха.* — Львів: СПОЛІОМ, 2003. — 128 с.
- [8] *Чапля, Є. Я. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах / Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха.* — Київ: Наук. думка, 2009. — 303 с.
- [9] *Щербата, Г. Застосування методу скінченних елементів до розв'язування задач одновимірної гетеродифузії / Г. Щербата // Фіз.-мат. моделювання та інформ. технології.* — 2010. — Вип. 12. — С. 206-215.
- [10] *Савула, Я. Г. Числовий аналіз задач математичної фізики варіаційними методами / Я. Г. Савула.* — Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2004. — 221 с.
- [11] *Zienkiewicz, O. C. The Finite Element Method. Volume 1. The basis / O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor.* — Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000. — 689 p.

Sensitivity analysis of solutions of one-dimensional heterodiffusion problems with respect to perturbation of medium parameters

Yarema Savula, Halyna Shcherbata

The sensitivity analysis of solutions of the problems of heterodiffusion of admixture in one-dimensional bodies with respect to perturbation of medium parameters is considered. Based on a semi-discrete Galerkin approximation and the finite element method the initial-boundary value problem is reduced to the one-dimensional problem for a system of ordinary differential equations concerning node values of the admixture concentration. The equations of sensitivity in differential, variational and finite-element formulations are obtained. The results of numerical experiments for one-dimensional heterodiffusion problems for a layer of soil are presented and the influence of small changes of model parameters on distribution of the admixture concentration is analyzed.

Анализ чувствительности решений задач одномерной гетеродиффузии относительно изменений параметров среды

Ярема Савула, Галина Щербата

Проанализировано чувствительность решений задач гетеродиффузии примесного вещества в одномерных телах относительно изменениям параметров среды. С использованием полу-дискретных аппроксимаций Галёркина и метода конечных элементов начально-краевую задачу гетеродиффузии сведено к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений относительно узловых значений концентраций примеси. Получены уравнения чувствительности в дифференциальной, вариационной и конечно-элементной постановках. Приведены результаты численных экспериментов для задач одномерной гетеродиффузии в слое почвы и проанализировано влияние малых изменений параметров модели на распределение концентрации примеси.

Отримано 28.09.11