УДК 519.876.5

А.П. ОЛІЙНИК, А.А. МОРОЗ
Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу

ОБЕРНЕНА ЗАДАЧА ДИФУЗІЇ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ ПОШИРЕННЯ ШКІДЛИВИХ РЕЧОВИН НА ОБ'ЄКТАХ НАФТОГАЗОВОГО КОМПЛЕКСУ

Запропоновано математичні моделі дифузійних процесів, що базуються на використанні двовимірних рівнянь дифузії з широким класом граничних та початкових умов. Встановлено, що точні розв'язки не дозволяють вивчити особливості їх поведінки в залежності від типу граничних умов, тому пропонується застосовувати чисельні розв'язки. Внаслідок аварійних ситуацій на об'єктах нафтогазового комплексу виникає задача оцінки фізико-механічних властивостей ґрунтів та впливу цих властивостей на поширення шкідливих речовин. При цьому пропонується використати технологію розв'язання обернених задач для рівняння дифузії. Це викликає необхідність розробки алгоритмів регуляризації для вказаних задач дифузії. Вказаний алгоритм розглядається для двовимірної задачі дифузії, оскільки саме для двовимірних задач дифузії, які аналогічні двовимірним задачам тепло-масообміну розроблено та реалізовано стійкі кінцево – різницеві алгоритми розв'язання прямих задач. Метою роботи є моделювання процесу фільтрації шкідливих речовин в ґрунтах з використанням двовимірних параболічних рівнянь, що дозволяє оцінювати зміну концентрації цих речовин та прогнозувати процес їх поширення. Це дозволяє визначати концентрації цих речовин для реальних об'єктів шляхом побудови функцій, що моделюють різні граничні умови.

Ключові слова: стан довкілля, антропогенні фактори впливу, математична модель, рівняння дифузії.

А.П. ОЛИЙНЫК, А.А. МОРОЗ
Ивано-Франковский национальный технический университет нефти и газа

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ДИФФУЗИИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ОБЪЕКТАХ НЕФТЕГАЗОВОГО КОМПЛЕКСА

Предложены математические модели диффузионных процессов, основанных на использовании двумерных уравнений диффузии с широким классом граничных и начальных условий. Установлено, что точные решения не позволяют изучить особенности их поведения в зависимости от типа граничных условий, поэтому предлагается применять численные решения. Вследствие аварийных ситуаций на объектах нефтегазового комплекса возникает задача оценки физико-механических свойств грунтов и влияния этих свойств на распространение вредных веществ. При этом предлагается использовать технологию решения обратных задач для уравнения диффузии. Это вызывает необходимость разработки алгоритмов регуляризации для указанных задач диффузии. Указанный алгоритм рассматривается для двумерной задачи диффузии, поскольку именно для двумерных задач диффузии, которые аналогичны двумерным задачам тепломассообмена разработаны и реализованы устойчивые конечно - разностные алгоритмы решения прямых задач. Целью работы является моделирование процесса фильтрации вредных веществ в грунтах с использованием двумерных параболических уравнений, что позволяет оценивать изменение концентрации этих веществ и прогнозировать процесс их распространения. Это позволяет определять концентрации этих веществ для реальных объектов путем построения функций, моделирующих различные граничные условия.

Ключевые слова: состояние окружающей среды, антропогенные факторы воздействия, математическая модель, уравнение диффузии.

A.P. OLIJNYK, A.A. MOROZ
Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas

THE INVERSE PROBLEM OF DIFFUSION IN MODELING THE SPREAD OF HARMFUL SUBSTANCES IN THE OIL AND GAS FACILITIES

Mathematical models of diffusion processes based on the use of two-dimensional diffusion equations with a wide class of boundary and initial conditions. Found that exact solutions do not allow study features of their behavior depending on the type of boundary conditions is therefore proposed to apply numerical solutions. As a result of accidents at oil and gas facilities, there is a problem of evaluation of physical and mechanical properties of soils and the influence of these properties on the dissemination of harmful substances. It is proposed to use the technology for solving inverse problems for the diffusion equation. This necessitates the development of algorithms for the regularization of these problems diffusion. The specified algorithm is considered for two-dimensional diffusion problem, because for two-dimensional diffusion problems which are similar two-dimensional problem of heat mass transfer developed and implemented sustainable finite - difference algorithms for solving direct problems. The aim is to simulate the filtration of pollutants in soils using two-dimensional parabolic equations allows to *evaluate the change in concentration of these substances and to predict their distribution process. This allows you to determine the concentrations of these substances for real objects by constructing functions that simulate different boundary conditions.*

Keywords: environment, anthropogenic factors influence, mathematical model, the diffusion equation.

Аналіз досліджень

При вивченні питання про забруднення довкілля внаслідок аварійних ситуацій на об'єктах нафтогазового комплексу виникає задача оцінки фізико-механічних властивостей ґрунтів та впливу цих властивостей на поширення шкідливих речовин.

При цьому пропонується використати технологію розв'язання обернених задач для рівняння дифузії [1]. Обернені задачі, як правило, є некоректно поставленими [2,3], їх розв'язок, як правило, є нестійким та таким, що визначається неоднозначно. Це викликає необхідність розробки алгоритмів регуляризації для вказаних задач дифузії. Вказаний алгоритм розглядається для двовимірної задачі дифузії, оскільки саме для двовимірних задач дифузії, які аналогічні двовимірним задачам тепло-масообміну розроблено та реалізовано стійкі кінцево-різницеві алгоритми розв'язання прямих задач.

Мета дослідження

Метою роботи є моделювання процесу фільтрації шкідливих речовин в ґрунтах з використанням двовимірних параболічних рівнянь, що дозволяє оцінювати зміну концентрації цих речовин та прогнозувати процес їх поширення.

Дослідження будуть проводитись із застосуванням методів математичної фізики, чисельних методів, методів інтерполяції та апроксимації даних, методів розробки та реалізації апаратного забезпечення для контролю параметрів ґрунтів та концентрації речовин, методів створення програмних комплексів для ЕОМ.

В пропонованій роботі здійснюється побудова математичної моделі, яка дозволяє оцінити концентрації речовин у певній області за відомим математичним апаратом з широким класом граничних та початкових умов, зокрема таких, що задаються як неперервними, так і розривними функціями.

Постановка задачі

Розглядається модельна задача дифузії речовини в середовищі з невідомими фізико – механічними властивостями в двовимірній прямокутній області $V = \{(0,y);0 \le x \le L_x;0 \le y \le L_y\}$. Основним рівнянням моделі є двовимірне рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(a(x,y,t)\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(a(x,y,t)\frac{\partial C}{\partial y}\right), \tag{1}$$

де *a(x,y,t)* – коефіцієнт дифузії, *C(x,y,t)* – концентрація шкідливої речовини.

Задача (1) вимагає постановки початкових та граничних умов тобто в початковий момент часу розподіл концентрації по області *V* вважається відомим:

$$C(x,y,t)\big|_{t=0} = C_0(x,y), \tag{2}$$

разом з граничними умовами:

$$C(x,y,t)\big|_{\partial V} = C_1(t). \tag{3}$$

Можна вважати, що на границі області *V* концентрація є відомою.

Нехай для досліджуваної області *V* відомим є розподіл концентрації *C=C(x,y,t)*, одержаний з використанням апаратних засобів. Виникає задача відновлення величини *a(x,y,t)* в досліджуваній області.

При цьому необхідно вирішити наступні задачі:

- Побудова регуляризуючого алгоритму задачі відновлення поля *a(x,y,t)* за відомим розподілом концентрації на множині *V*;
- Побудова регуляризуючого алгоритму для задачі відновлення поля концентрацій, за його значенням на певній множині точок з області *V*.

Основний матеріал дослідження

Використовуючи неявну скінчено-різницеву схему для рівняння дифузії [4] (1) записується:

$$\frac{C_{k,i}^{n+1} - C_{k,i}^{n}}{\tau} = \frac{\left[a_{k+1,i}^{n+1}\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{k+1,i}^{n+1} - a_{k,i}^{n+1}\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{k,i}^{n+1}\right]}{h_x} + \frac{\left[a_{k,i+1}^{n+1}\left(\frac{\partial C}{\partial y}\right)_{k,i+1}^{n+1} - a_{k,i}^{n+1}\left(\frac{\partial C}{\partial y}\right)_{k,i}^{n+1}\right]}{h_y}, \tag{4}$$

де $f_{k,i}^{n} = f(x_k, y_i, t_n), \tau, h_y, h_x$ - кроки по часу, координатах *x* та *y* відповідно,

$$(\frac{\partial C}{\partial x})^n_{k,i} = \frac{C^n_{k+1,i} - C^n_{k,i}}{h_x}, \quad (5)$$

$$(\frac{\partial C}{\partial y})^n_{k,i} = \frac{C^n_{k,i+1} - C^n_{k,i}}{h_y}. \quad (6)$$

Для побудови матриці систем лінійних алгебраїчних рівнянь розглядається частковий випадок, коли в області V є 25 розрахункових точок, при в граничних точках величини $a(x,y,t)$ є заданими. Система (4) задається у вигляді (опускаючи індекс «$n+1$»):

$$\left[\frac{(\frac{\partial C}{\partial y})_{k,i+1}}{h_y}\right] a_{k,i+1} + \left[\frac{(\frac{\partial C}{\partial x})_{k+1,i}}{h_x}\right] a_{k+1,i} - \left[\frac{(\frac{\partial C}{\partial x})_{k,i}}{h_x} + \frac{(\frac{\partial C}{\partial y})_{k,i}}{h_y}\right] a_{k,i} = \frac{C^{n+1}_{k,i} - C^n_{k,i}}{\tau}. \quad (7)$$

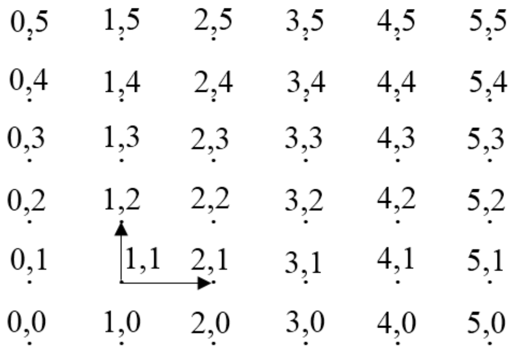

Рисунок 1 – Розрахункова схема для оцінки *a(x,y,t)* – коефіцієнта дифузії

Очевидно, що $a(x,y,t)$ в точках $(0,s)$, $s=0,...,5$, $(k,0)$; $k=1,...,5$ $(5,l)$; $l=1,...,5$ та $(m,5)$ $m=1,...,4$ є відомими величинами. Тому підлягають визначенню значення $a(x,y,t)$ в точках $(i,j), i=1,…,4; j=1,…,4$.

Рівняння системи для визначення $a_{i,j}$ записується у вигляді:

вводячи позначення

$$A_{k,i+1} = \frac{(\frac{\partial C}{\partial y})_{k,i+1}}{h_y},$$

$$A_{k+1,i} = \frac{(\frac{\partial C}{\partial x})_{k+1,i}}{h_x},$$

$$A_{k,i} = \frac{(\frac{\partial C}{\partial x})_{k,i}}{h_x} + \frac{(\frac{\partial C}{\partial y})_{k,i}}{h_y},$$

$$B_{k,i} = \frac{C^{n+1}_{k,i} - C^n_{k,i}}{\tau},$$

одержується $A_{k,i+1}a_{k,i+1}+A_{k+1,i}a_{k+1,i}+A_{k,i}a_{k,i}=B_{k,i}$.

Рівняння системи записується у вигляді:

(1;1)

$$A_{12}a_{12} + A_{21}a_{21} + A_{11}a_{11} = B_{11}, \quad (8)$$

(2;1)

$$A_{22}a_{22} + A_{31}a_{31} + A_{21}a_{21} = B_{21}, \quad (9)$$

(3;1)

$$A_{32}a_{32} + A_{41}a_{41} + A_{31}a_{31} = B_{31}, \quad (10)$$

(4;1)

$$A_{42}a_{42}+A_{51}a_{51}+A_{41}a_{41}=B_{41}, \tag{11}$$

(1;2)

$$A_{13}a_{13}+A_{22}a_{22}+A_{12}a_{12}=B_{12}, \tag{12}$$

(2;2)

$$A_{23}a_{23}+A_{32}a_{32}+A_{22}a_{22}=B_{22}, \tag{13}$$

(3;2)

$$A_{33}a_{33}+A_{42}a_{42}+A_{32}a_{32}=B_{32}, \tag{14}$$

(4;2)

$$A_{43}a_{43}+A_{52}a_{52}+A_{42}a_{42}=B_{42}, \tag{15}$$

(1;3)

$$A_{14}a_{14}+A_{23}a_{23}+A_{13}a_{13}=B_{13}, \tag{16}$$

(2;3)

$$A_{24}a_{24}+A_{33}a_{33}+A_{23}a_{23}=B_{23}, \tag{17}$$

(3;3)

$$A_{34}a_{34}+A_{43}a_{43}+A_{33}a_{33}=B_{33}, \tag{18}$$

(4;3)

$$A_{44}a_{44}+A_{53}a_{53}+A_{43}a_{43}=B_{43}, \tag{19}$$

(1;4)

$$A_{15}a_{15}+A_{24}a_{24}+A_{14}a_{14}=B_{14}, \tag{20}$$

(2;4)

$$A_{25}a_{25}+A_{34}a_{34}+A_{24}a_{24}=B_{24}, \tag{21}$$

(3;4)

$$A_{35}a_{35}+A_{44}a_{44}+A_{34}a_{34}=B_{34}, \tag{22}$$

(4;4)

$$A_{45}a_{45}+A_{54}a_{54}+A_{44}a_{44}=B_{44}, \tag{23}$$

В рівняння (23) невідомою величиною є лише a_{44}, оскільки a_{45} та a_{54} є відомими з граничних умов. В рівняння (22) невідомою є лише a_{34}, інші величини є відомими або з граничних умов або з попереднього рівняння. Фактично для визначення всіх $a_{i,j}$, $i,j=1,\dots,4$ достатньо скористатись формулою, причому це визначення є однозначним:

$$a_{ki}=\frac{B_{ki}-A_{k+1,i}a_{k+1,i}-A_{k,i+1}a_{k,i+1}}{A_{ki}}. \tag{24}$$

Використовуючи співвідношення (24), можна дещо послабити умови на границях області. Поле $a(x,y,t)$ повністю визначається, якщо відомі лише величини $a(x,y,t)$ в точках $(k,5)$; $k=0,...,5$ та $(5,s)$, $s=0,...,4$. Якщо в указаних точках значення $a(x,y,t)$ не задавати, то в системі лінійних алгебраїчних рівнянь кількість невідомих буде більшою за кількість рівнянь. В такому випадку величини $a_{i,j}$ можуть бути знайдені як розв'язок задачі знаходження лінійної додатної визначеної квадратичної форми, складеної із суми квадратів неув'язок рівнянь системи (8) – (23).

Для розв'язання системи (8)–(23) необхідно знати поле концентрацій на досліджуваній області. Концентрація задається як результат апаратних вимірювань на деякому наборі точок:

$$C_{ij}=C(x_i;y_j) \text{ при } \begin{array}{l} i=1,\dots,M, \\ j=1,\dots,N. \end{array} \tag{24}$$

Задача відновлення поля концентрації на області V за даними (24) є некоректною, проте існує багато алгоритмів її регуляризації. Одним з найбільш широко вживаним є метод інтерполяційних бікубічних сплайнів [5], проте в даному випадку цей метод є ускладненим в реалізації через те, що складно визначити та задати крайові умови. Тому в даному випадку доцільним є апроксимація даних (24) бікубічною функцією виду:

$$u(x,y)=Ax^3y^3+Bx^3y^2+Cx^3y+Dx^3+Ex^2y^3+ \\ +Fxy^3+Gy^3+Hx^2y^2+Ix^2y+Jx^2+Kxy^2+Ly^2+ \\ +Mxy+Nx+Py+R. \tag{25}$$

Подання (25) містить 16 невідомих коефіцієнтів, які повинні бути визначені. Якщо кількість точок $(x_i;y_j)$, в яких визначається концентрація, дорівнює 16 (що цілком відповідає реальним апаратним можливостям), то для визначення невідомих коефіцієнтів в (25) можна використати метод колокації, згідно з яким висувається умова точного виконання рівності:

$$C_{ij}=u(x_i;y_j) \tag{26}$$

в 16-ти точках області V. При цьому необхідно розташувати вузли колокацій $(x_i;y_j)$ таким чином, щоб їх густина була б найбільшою в зоні неявних перепадів концентрації. В такому разі (26) є системою лінійних алгебраїчних рівнянь, розв'язуючи її одержуються всі невідомі коефіцієнти в (25). Матриця системи має розмірність (16x16), і може бути розв'язана за методом Гауса [5].

В тому випадку, коли кількість вузлових точок (25) не дорівнює 16, поле концентрацій можна апроксимувати одержаною з (25) гармонічною функцією:

$$u(x,y)=D(x^3-3xy^2)+G(y^3-3x^2y)+J(x^2-y^2)+Mxy+Nx+Py+R, \tag{27}$$

при використанні якої невідомі коефіцієнти в (26) знаходяться за методом найменших квадратів:

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}(C_{ij}-u(x_i,y_j))^2\to min \tag{28}$$

шляхом розв'язку системи, що характеризує необхідні умови екстремуму.

Умова (27) може бути записана у наступному вигляді: перепозначаючи координати вузлових точок $(x_i;y_j)$, а концентрація в цій області $C=C_i$, одержуємо:

$$\sum_{i=1}^{NxM}(C_i-D(x_i^3-3x_iy_i^2)-G(y_i^3-3x_i^2y_i)- \\ -J(x_i^2-y_i^2)-Mx_iy_i-Nx_i-Py_i-R)^2\to min. \tag{29}$$

В такому випадку система для визначення коефіцієнтів *D, G, J, M, N, P, R* записується у вигляді:

$$\begin{cases} D\sum(x_i^3-3x_iy_i^2)^2+G\sum(y_i^3-3x_i^2y_i)(x_i^3-3x_iy_i^2)+ \\ +J\sum(x_i^2-y_i^2)(x_i^3-3x_iy_i^2)+M\sum(x_i^3-3x_iy_i^2)+ \\ +N\sum x_i(x_i^3-3x_iy_i^2)+P\sum y_i(x_i^3-3x_iy_i^2)+R\sum(x_i^3-3x_iy_i^2)=\sum C_i(x_i^3-3x_iy_i^2), \\ D\sum(x_i^3-3x_iy_i^2)(y_i^3-3x_i^2y_i)+G\sum(y_i^3-3x_i^2y_i)^2+ \\ +J\sum(x_i^2-y_i^2)(y_i^3-3x_i^2y_i)+M\sum x_iy_i(y_i^3-3x_i^2y_i)+ \\ +N\sum x_i(y_i^3-3x_i^2y_i)+P\sum y_i(y_i^3-3x_i^2y_i)+R\sum(y_i^3-3x_i^2y_i)=\sum C_i(y_i^3-3x_i^2y_i), \\ D\sum(x_i^3-3x_iy_i^2)(x_i^2-y_i^2)+G\sum(y_i^3-3x_i^2y_i)(x_i^2-y_i^2)+ \\ +J\sum(x_i^2-y_i^2)^2+M\sum x_iy_i(x_i^2-y_i^2)+N\sum x_i(x_i^2-y_i^2)+ \\ +P\sum y_i(x_i^2-y_i^2)+R\sum(x_i^2-y_i^2)=\sum C_i(x_i^2-y_i^2), \\ D\sum(x_i^3-3x_iy_i^2)x_iy_i+G\sum(y_i^3-3x_i^2y_i)x_iy_i+ \\ +J\sum(x_i^2-y_i^2)x_iy_i+M\sum x_i^2y_i^2+N\sum x_ix_iy_i+P\sum y_ix_iy_i+R\sum x_iy_i=\sum C_ix_iy_i, \\ D\sum(x_i^3-3x_iy_i^2)x_i+G\sum(y_i^3-3x_i^2y_i)x_i+J\sum(x_i^2-y_i^2)x_i+ \\ +M\sum x_i^2y_i+N\sum x_i^2+P\sum x_iy_i+R\sum x_i=\sum C_ix_i, \\ D\sum(x_i^3-3x_iy_i^2)y_i+G\sum(y_i^3-3x_i^2y_i)y_i+J\sum(x_i^2-y_i^2)y_i+ \\ +M\sum x_iy_i^2+N\sum x_iy_i+P\sum y_i^2+R\sum y_i=\sum C_iy_i, \\ D\sum(x_i^3-3x_iy_i^2)+G\sum(y_i^3-3x_i^2y_i)+J\sum(x_i^2-y_i^2)+ \\ +M\sum x_iy_i+N\sum x_i+P\sum y_i+(NxM)R=\sum C_i. \end{cases} \tag{30}$$

Вказана система розв'язується за методом Гауса.

Висновки

Напрямками подальших досліджень можуть бути:

- розробка або підбір апаратного забезпечення для оцінки концентрації шкідливих речовин в точках, що належать області *V*;
- розробка алгоритмів відновлення поля концентрації по заданим її значенням в указаних базових точках.

Список використаної літератури

1. Коздоба Л.А. Методы решения нелинейных задач теплопроводности / Л.А. Коздоба – М.: Наука, 1975 – 170с.
2. Тихонов А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин – М.: Наука, 1979 – 285с.
3. Дьяченко В.Ф. Основные понятия вычислительной математики / В.Ф. Дьяченко – М.: Наука, 1977 – 128с.
4. Андерсон Д. Вычислительная гидромеханика и теплообмен / Д. Андерсон, Дж. Теннехил, Р. Плетчер – М.: Мир, 1990 – т.1 – 384с.
5. Маргук Г.И. Методы вычислительной математики / Г.И. Маргук – М.: Наука, 1989 – 608с.