

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Факультет комп'ютерних наук та кібернетики

Кафедра обчислювальної математики

Випускна кваліфікаційна робота магістра

Обернена задача для рівняння конвекції-
дифузії

Студента 2 курсу магістратури
кафедри обчислювальної математики
Кравченка Артема Вікторовича

Науковий керівник
доктор фізико-математичних наук, професор
Клюшин Дмитро Анатолійович

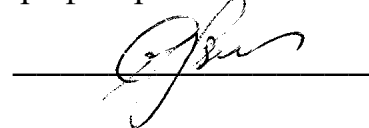


«___» _____ 2023 р.

Роботу розглянуто й допущено до захисту на засіданні кафедри обчислювальної математики «5» травня 2023 р., протокол №7

Завідувач кафедри обчислювальної математики

професор Ляшко С.І.



Київ

2023

Зміст

1	Вступ	3
1.1	Рівняння конвекції-дифузії	3
1.2	Постановка задачі	4
2	Метод розв'язання	6
2.1	Пошук мінімуму функціоналу	6
2.2	Алгоритм розв'язання задачі	9
2.3	Різницеві схеми для рівняння конвекції-дифузії ...	11
3	Моделювання	15
3.1	Огляд програми.....	15
3.2	Вхідні дані	18
3.3	Аналіз роботи програми на вхідних даних, результату оптимізації	18
4	Висновки.....	25
	Джерела	26

1 Вступ

1.1 Рівняння конвекції-дифузії

Рівняння конвекції–дифузії — це рівняння математичної фізики, що враховують водночас процеси дифузії та конвекції (адвекції). Вони застосовуються для моделювання руху частинок, енергії або інших фізичних величин у певній фізичній системі. За основу береться рівняння дифузії (або теплопровідності, вони мають однакову форму), а для врахування адвекції використовуються додаткові члени. Залежно від контексту, одне і те саме рівняння може називатися адвективно-дифузійним рівнянням або скалярним рівнянням перенесення.

В загальній формі рівняння конвекції-дифузії має вигляд:

$$\frac{\partial}{\partial t} C = \nabla \cdot (D \nabla C) - \nabla \cdot (\vec{v} C) + R,$$

де ∇ – градієнт, а " $\nabla \cdot$ " – дивергенція.

C позначає деяке невідоме скалярне поле, залежне від часу. D , в залежності від досліджуваного процесу, може позначати коефіцієнт дифузії у випадку руху частинок або коефіцієнт теплопровідності якщо описується теплообмін. \vec{v} – поле швидкостей, для прикладу це може бути швидкість водного потоку в деякому місці річки. R , якщо присутнє в рівнянні, описує зовнішні джерела, наприклад лампи при дослідженні процесу теплопровідності.

Перший доданок в правій частині рівняння $\nabla \cdot (D \nabla C)$ описує дифузію, і відповідно якщо відкинути інші доданки отримаємо

звичайне рівняння дифузії. Часто коефіцієнт дифузії D є константою, і в такому разі цей доданок виражається оператором Лапласа.

Другий доданок $\nabla \cdot (\vec{v}C)$ відповідає за потік (адвекцію). Якщо моделюється вимірювання солоності води в певному місці річці, і потрібно розглянути ситуацію, коли хтось вище за течією висипає в річку велику кількість солі. Через певний час концентрація солі в спостережуваному місці підніметься за рахунок переносу солі потоком.

Третій доданок R , як вже зазначалося вище, описує зовнішні джерела, в тому числі втрати енергії від тертя, поглинання енергії, або зміну концентрації в середовищі за рахунок розпаду чи утворення нових частинок.

1.2 Постановка задачі

Метою роботи буде розглянути обернену задачу для нестационарного рівняння конвекції-дифузії, що описує процес переносу консервативної домішки в рідині, змодельовати процес і оптимізувати параметри джерел забруднення.

Розглядається рівняння:

$$\frac{\partial}{\partial t} C = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (\vec{v}C) + \sum_{m=1}^p q_m(t) \delta(x - r_m), 0 < x < L, 0 < t < T, (1)$$

де $C(x, t)$ – концентрація, D – коефіцієнт дифузії, \vec{v} – швидкість середи, $q_m(t)$, $0 \leq q_m(t) \leq Q_m$ – потужності відповідних джерел забруднення, $\delta(x - r_m)$ – дельта-функція Дірака в точці розміщення відповідного джерела забруднення.

Рівняння розглядається при крайових

$$C(0, t) = \phi(t), \quad \frac{\partial C(L, t)}{\partial x} = 0, \quad 0 < t \leq T \quad (2)$$

та початковій

$$C(x, 0) = C_0(x), \quad 0 \leq x \leq L \quad (3)$$

умовах.

Вважатимемо що спостереження за концентрацією забруднення проводиться в точці $x = L$ протягом усього проміжку часу T . Необхідно знайти параметри джерел забруднення, при яких концентрація у точці спостереження не перевищуватиме наперед заданого значення протягом усього часу спостереження.

Задача визначення параметрів зводиться до мінімізації функціоналу

$$J(q) = \int_0^T \left(C_q(L, t) - Z(t) \right)^2 dt, \quad (4)$$

де $0 \leq Z(t) \leq Z_0$ – деяка задана функція, а Z_0 – гранична допустима концентрація в точці спостереження. Мінімум знаходиться за умови, що функція $C_q(L, t)$ задовольняє умовам поставленої задачі для заданих потужностей джерел забруднення $q_m(t)$.

2 Метод розв'язання

2.1 Пошук мінімуму функціоналу

Для знаходження мінімуму функціоналу (4) застосовується метод проекції градієнта. Градієнт функціоналу знаходиться розв'язанням задачі, спряженої до задачі (1)-(3). Для цього запишемо приріст функціоналу:

$$\begin{aligned}\Delta J(q) &= J(q + h) - J(q) = \\ &= \int_0^T (C(L, t; q + h) - Z(t))^2 dt - \int_0^T (C(L, t; q) - Z(t))^2 dt = \\ &= \int_0^T (C(L, t; q + h) - C(L, t; q) + C(L, t; q) - Z(t))^2 dt - \\ &\quad - \int_0^T (C(L, t; q) - Z(t))^2 dt = \\ &= 2 \int_0^T \Delta C(x, t) (C(L, t; q + h) - Z(t)) dt + \int_0^T \Delta C(x, t)^2 dt,\end{aligned}$$

де $\Delta C(x, t)$ – приріст функції $C(x, t)$, що відповідає приросту h функції $q(t)$. Функція $\Delta C(x, t)$ задовольняє крайовій задачі

$$\frac{\partial}{\partial t} \Delta C = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial \Delta C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (\vec{v} \Delta C) + \sum_{m=1}^p \Delta q_m(t) \delta(x - r_m), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t < T, \quad (5)$$

з початково-крайовими умовами (6)-(8):

$$\Delta C(0, t) = 0, \quad 0 < t \leq T \quad (6)$$

$$\frac{\partial \Delta C(L, t)}{\partial x} = 0, \quad 0 < t \leq T \quad (7)$$

$$\Delta C(x, 0) = 0, \quad 0 < x < L \quad (8)$$

Запишемо:

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_0^L \frac{\partial \Delta C}{\partial t} \Psi dx dt &= \int_0^T \int_0^L \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial \Delta C}{\partial x} \right) \Psi dx dt - \int_0^T \int_0^L \frac{\partial v \Delta C}{\partial x} \Psi dx dt + \\ &+ \int_0^T \int_0^L h \Psi dx dt \end{aligned}$$

Застосуємо перетворення за допомогою формули Гріна:

$$\int_0^T \int_0^L \frac{\partial \Delta C}{\partial t} \Psi dx dt = \int_0^L \Delta C \Psi \Big|_0^T dx + \int_0^T \int_0^L \Delta C \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx dt$$

Врахуємо умову (8) і покладемо $\Psi(x, T) = 0$. Отримаємо:

$$\begin{aligned} \int_0^L \Delta C \Psi \Big|_0^T dx + \int_0^L \int_0^T \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Delta C dt dx &= \int_0^T D \frac{\partial \Delta C}{\partial x} \Psi \Big|_0^L dt - \\ - \int_0^L \int_0^T D \frac{\partial \Delta C}{\partial x} \frac{\partial \Delta \Psi}{\partial x} \Delta C dt dx - \int_0^L \Delta C \Psi \Big|_0^L dt &+ \int_0^L \int_0^T v \Delta C \frac{\partial \Psi}{\partial x} dt dx + \\ &+ \int_0^L \int_0^T h \Psi dt dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_0^L \Delta C(x, T) \Psi(x, T) dx + \int_0^L \int_0^T \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Delta C dt dx = \int_0^T D \frac{\partial \Delta C}{\partial x} \Psi \Big|_0^L dt - \\
& \quad - \int_0^T D \Delta C \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big|_0^L dt + \int_0^L \int_0^T \Delta C \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dt dx \\
& \quad - \int_0^T v \Delta C(L, t) \Psi(L, t) dt + \int_0^T v \Delta C(0, t) \Psi(0, t) dt + \\
& \int_0^L \int_0^T v \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Delta C dt dx + \int_0^L \int_0^T h \Psi dt dx \pm \int_0^T 2(C_L - C_Z) \Delta C dt = 0 \\
& - \int_0^T D \Delta C \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big|_0^L dt - \int_0^T v \Delta C(L, t) \Psi(L, t) dt - \int_0^T 2(C_L - C_Z) \Delta C dt = 0
\end{aligned}$$

$$D \frac{\partial \Psi}{\partial x} + v \Psi = -2(C_L - C_Z)$$

Спряжену задачу до задачі (5)-(8) запишемо наступним чином:

$$-\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + v \frac{\partial \Psi}{\partial x}, 0 < x < L, 0 < t < T \quad (9)$$

Початково-крайові умови для рівняння (1) перепишемо у вигляді:

$$\Psi(0, t) = 0, \quad 0 < t \leq T \quad (10)$$

$$D \frac{\partial \Psi(L, t)}{\partial x} + v \Psi(L, t) = -2(C(L, t) - Z(t)), 0 < t \leq T \quad (11)$$

$$\Psi(x, T) = 0, \quad 0 \leq x \leq L \quad (12)$$

Тоді градієнт функціоналу визначається через розв'язок спряженої задачі як

$$J'(q) = -\Psi,$$

де $\Psi(t) = (\Psi(r_1, t), \Psi(r_2, t), \dots, \Psi(r_p, t))$ – значення вектор-функції спряженого стану у точках розміщення джерел забруднення. Уточнення значень потужностей $q_m(t)$ здійснюється за формулою

$$q^{s+1}(t) = P_U(q^s(t) - \alpha J'(q^s(t))),$$

де $s = 0, 1, 2, \dots, \alpha > 0$ – множник що обирається з міркувань збіжності.

$$Q = \{q_1(t), q_2(t), \dots, q_p(t)\}$$

2.2 Алгоритм розв'язання задачі

Для розв'язання прямої і спряженої задач будемо використовувати метод скінченних різниць. Ітераційна процедура розв'язання задачі пошуку параметрів джерел забруднення полягає в наступному:

1. Задаються початкові значення $q_m^0(t_k)$, де t_k – вузли сітки при дискретизації задачі по часовій змінній;
2. Знаходиться розв'язок прямої задачі (1)-(3) для заданих потужностей джерел забруднення;
3. Обчислюються значення функції

$$Z^s(t_k) = \begin{cases} C^s(L, t_k), & \text{якщо } C^s(L, t_k) \leq Z_0 \\ Z_0, & \text{якщо } C^s(L, t_k) > Z_0 \end{cases},$$

де $C^s(L, t_k)$ – отримані значення розв’язку прямої задачі в точці L у дискретні моменти часу t_k ;

4. Розв’язується спряжена задача (9)-(12) за обчисленою на попередньому кроці функцією спостережень $Z^s(t_k)$;

5. Уточнюються $q_m^{s+1}(t_k)$ за формулою :

$$q_m^{s+1}(t_k) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } (q_m^s(t_k) - \alpha\Psi^s(r_m, t_k)) < 0 \\ q_m^s(t_k), & \text{якщо } 0 \leq (q_m^s(t_k) - \alpha\Psi^s(r_m, t_k)) \leq Q_m, \\ C_m, & \text{якщо } (q_m^s(t_k) - \alpha\Psi^s(r_m, t_k)) > Q_m \end{cases}$$

де $\Psi^s(r_m, t_k)$ – чисельні розв’язки задачі (9)-(12) у точках розміщення відповідних джерел забруднення у моменти часу t_k в точках розміщення джерел забруднення r_m , які мають співпадати з вузлами просторової різницевої сітки.

Ітераційна процедура повторюється доти, доки не буде виконано умову

$$\max_q |J'(q)| < \varepsilon$$

2.3 Різницеві схеми для рівняння конвекції-дифузії

Як зазначалося раніше, для розв'язання прямої і спряженої крайових задач застосовуватиметься метод скінченних різниць. Для початку запишемо рівняння конвекції-дифузії без доданка, що описує зовнішні джерела, і додамо його пізніше.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2},$$

де константа D – коефіцієнт дифузії, а v – швидкість потоку.

Скінченна різницева апроксимація рівняння у частинних похідних будується з використанням просторової сітки на досліджуваній області. Ми розглядаємо задачу в одновимірному випадку, тому сітка в нашому випадку – рівновіддалені вузли на відрізку $[0, L]$. Розв'язками крайової задачі в такому випадку будуть значення функції C у її вузлах. Далі значення концентрації C у вузлі i позначатимемо C_i .

Запишемо загальну скінченну різницеву апроксимацію для $\frac{\partial C}{\partial x}$ у вузлі i :

$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_i \approx \delta_{2x} C_i \equiv \frac{1}{2\Delta x} (C_{i+1} - C_{i-1})$$

δ_{2x} називають центральним різницеvim оператором (в україномовній літературі частіше зустрічається термін «центральна різниця»).

Також застосовуються односторонні апроксимації, вони знадобляться пізніше, – зворотна різницева апроксимація (ліва різниця)

$$\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_i \approx \delta_x^- C_i \equiv \frac{1}{\Delta x} (C_i - C_{i-1})$$

і пряма різницева апроксимація (права різниця)

$$\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_i \approx \delta_x^+ C_i \equiv \frac{1}{\Delta x} (C_{i+1} - C_i)$$

Дуже поширена скінченна різницева апроксимація для другої похідної:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \approx \delta_x^2 C_i \equiv \frac{1}{\Delta x^2} (C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1})$$

Як і у випадку з апроксимацією першої похідної, в цьому наближенні застосовуються значення в обох $\pm i$ вузлах, тому воно називається центральним різницеvim наближенням другої похідної.

Для апроксимації рівняння конвекції-дифузії можна використовувати різні наближення, застосуємо центральні різницеві апроксимації для обох похідних:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_i \delta_x^2 C_i = D \delta_x^2 C_i.$$

Отримали звичайне диференціальне рівняння для C_i , що пов'язане з значеннями концентрації у сусідніх вузлах $C_{i\pm 1}$. Для того щоб отримати повністю дискретну апроксимацію, лишилося дискретизувати рівняння за часом. Для цього можна, наприклад, застосувати прямий інтеграційний метод Ойлера:

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + v_i^n \delta_x^2 C_i^n = D \delta_x^2 C_i^n (*)$$

В отриманій центральній різницевій схемі $\frac{\partial C}{\partial t}$ у вузлі i залежить від значень у трьох вузлах сітки (включаючи себе). Для ілюстрації цього рівняння (*) перепишемо у вигляді:

$$\frac{dC_i}{dt} = a_{i+1}C_{i+1} + a_iC_i + a_{i-1}C_{i-1}, \quad (2.1)$$

де

$$a_{i-1} = \frac{u_i}{2\Delta x} + \frac{D}{\Delta x^2}$$

$$a_i = -2\frac{D}{\Delta x^2}$$

$$a_{i+1} = -\frac{u_i}{2\Delta x} + \frac{D}{\Delta x^2}$$

Запишемо вектор, що складатиметься з значень концентрації у кожному вузлі просторової сітки:

$$C = (C_1, C_2, \dots, C_{i-1}, C_i, C_{i+1}, \dots, C_{N_x-1}, C_{N_x})^T,$$

де N_x – загальна кількість вузлів просторової сітки. Тоді скінченна різницева апроксимація може бути записана у вигляді:

$$\frac{dC}{dt} = AC + b,$$

де b включатиме крайові умови та вплив зовнішніх джерел, що ми пропустили раніше, а матриця A :

$$A = \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \dots & A_{1,N_x} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \dots & A_{2,N_x} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{N_x,1} & A_{N_x,2} & \dots & A_{N_x,N_x} \end{pmatrix}$$

i -ий рядок цієї матриці містить коефіцієнти вузлових значень для звичайного диференційного рівняння з головним вузлом i . Окрім рядків, що залежать від крайових умов, значення $A_{i,j}$ пов'язані з коефіцієнтами a_{i-1}, a_i, a_{i+1} таким чином:

$$A_{i,i-1} = a_{i-1}, \quad A_{i,i} = a_i, \quad A_{i,i+1} = a_{i+1},$$

а усі інші елементи в рядку – нульові.

Крайовими умовами Діріхле – такі, в яких відомо значення функції на границі. У нашому випадку, маємо таку крайову умову $C(0, t) = C_0$. При застосуванні різницевої схеми, перший вузол по координатній сітці знаходитиметься в нулі, тому запишемо $C_1 = C_{bc}$ (перепозначимо C_0 як C_{bc} щоб уникнути плутанини із індексацією вузлів). Для імплементації цієї крайової умови зафіксуємо що $C_1 = C_{bc}$ і застосуємо скінченну різницеву схему тільки для внутрішності спостережуваної області (не включаючи перший вузол), враховуючи що ми знаємо значення C_1 для будь-якого рядка матриці, що залежатиме від нього. Наприклад, для першого внутрішнього вузла ($i = 2$) центральна різниця записується як

$$\frac{dC_2}{dt} + v_2 \frac{C_3 - C_1}{2\Delta x} = D \frac{C_3 - 2C_2 + C_1}{\Delta x^2}$$

Враховуючи вже відоме значення C_1 , отримаємо

$$\frac{dC_2}{dt} + v_2 \frac{C_3 - C_{bc}}{2\Delta x} = D \frac{C_3 - 2C_2 + C_{bc}}{\Delta x^2} (**)$$

Пригадаємо, що вектор b містить вклади відомих крайових значень, тому групуючи відомі доданки в рівнянні (**), отримаємо

$$b_1 = v_2 \frac{C_{bc}}{2\Delta x} + D \frac{C_{bc}}{\Delta x^2}.$$

За побудовою різницевої схеми, C_{bc} не фігуруватиме в інших рядках матриці, тому всі інші b_i у такому випадку нульові.

3 Моделювання

3.1 Огляд програми

Моделювання виконувалось у Matlab R2022b. Код виконує алгоритм, описаний у розділі 2.2 із використанням різницевих схем з розділу 2.3.

```
Editor - C:\Users\T\Desktop\DiplomFinal.m
untitled.m x DiplomMatlab.m x untitled2.m x DiplomFinal.m x untitled4.m x +
1 clear all;
2 %Задаємо просторову сітку
3 xL = 0;
4 xR = 4;
5 Nx = 41;|
6 x = linspace (xL,xR,Nx);
7 dx = x(2) - x(1);
8
9 %Задаємо швидкість потоку, коефіцієнт дифузії, граничну концентрацію і
10 %максимальну потужність джерел забруднення
11 u = 1;
12 mu = 0.01;
13 Z0 = 0.8;
14 Qm=20;
15
16 %Задаємо alpha та eps з міркувань точності
17 alpha=0.1;
18 eps=0.000001;
19
20 %Задаємо час роботи програми і крок за часом
21 tfinal = 6;
22 dt = 0.005;
23
24 %Ініціалізуємо функції C та Psi нулями в усіх вузлах
25 C = -x.*0;
26 Psi=C;
27
```

```
Editor - C:\Users\T\Desktop\DiplomFinal.m
untitled.m x DiplomMatlab.m x untitled2.m x DiplomFinal.m x untitled4.m x +
28 %Ініціалізуємо вектори, що зберігатимуть значення концентрації в точці L в
29 %кожен момент часу
30 x2 = linspace (xL,xR,tfinal/dt);
31 Zs=x2.*0;
32 Cz=x2.*0;
33
34 %Ініціалізуємо початковий момент часу, крайові умови в нулі і лічильник для
35 %фіксації концентрації забруднення в точці L на кожній ітерації по часу
36 t = 0;
37 CL = 0;
38 PsiL=0;
39 zi=1;
40
41 %ініціалізуємо початкові потужності джерел забруднення
42 q1=6;
43 q2=8;
44 q3=5;
45
46 %Ініціалізуємо вектори, що зберігатимуть значення функції Psi в точках
47 % розміщення джерел забруднення в кожен момент часу
48 Psi1=x2.*0;
49 Psi2=x2.*0;
50 Psi3=x2.*0;
51 Psi1m=3;
52 Psi2m=3;
53 Psi3m=3;
```

```

Editor - C:\Users\1\Desktop\DiplomFinal.m
untitled.m x Diplomatlab.m x untitled2.m x Diplomatlab.m x untitled4.m x +
55 %Ініціалізуємо допоміжні змінні для уточнення параметрів джерел забруднення
56 q1c=0;
57 q2c=0;
58 q3c=0;
59 while(t<tfinal)
60     q1s(zi)=q1;
61     q2s(zi)=q2;
62     q3s(zi)=q3;
63     t = t + dt;
64     zi = zi + 1;
65 end
66
67 %Запускаємо цикл, що працюватиме поки не виконається умова
68 %на мінімум функціоналу
69 while(abs(Psi1m)>eps&&abs(Psi2m)>eps&&abs(Psi3m)>eps)
70     t=0;
71     zi=1;

```

```

Editor - C:\Users\1\Desktop\DiplomFinal.m
untitled.m x Diplomatlab.m x untitled2.m x Diplomatlab.m x untitled4.m x +
67 %Запускаємо цикл, що працюватиме поки не виконається умова
68 %на мінімум функціоналу
69 while(abs(Psi1m)>eps&&abs(Psi2m)>eps&&abs(Psi3m)>eps)
70     t=0;
71     zi=1;
72 %Запускаємо різницеву схему для знаходження концентрації на кроці s
73 while (t < tfinal)
74     C0 = C;
75
76     %Розрахунок концентрації на лівій границі
77     C(1) = CL;
78     for i = 2:Nx-1
79         %Розрахунок концентрації у внутрішніх вузлах за центральними
80         %різницями для першої та другої похідних, в другому рядку впливи
81         %джерел забруднення
82         C(i) = C0(i) + dt*(u*(C0(i-1)-C0(i+1))/(2*dx) + (mu/dx^2)*(C0(i-1)-2*C0(i)+C0(i+1))+ ...
83         q1s(zi)*1.*(i==2).*(t<1.2)+q2s(zi)*1.*(i==12).*(2<=t&&t<4)+q3s(zi)*1.*(i==32).*(0.8<=t&&t<2.5));
84     end
85
86     %Розрахунок концентрації на правій границі, фіксація концентрації в
87     %точці L
88     i = Nx;
89     C(i) = C0(i) - dt*((C0(i)-C0(i-1))/(dx));
90     Cz(zi)=C(i);

```

На 82 рядку використано різницеву схему (2.1) з розділу 2.3. На 83 рядку змодельовано роботу джерел забруднення – добуток потужності джерела в момент t на два індикатори – перший для фіксації положення джерела по координаті x , другий – регулює проміжок часу, протягом якого джерело забруднення працює.

```

Editor - C:\Users\1\Desktop\DiplomFinal.m
untitled.m x DiplomMatlab.m x untitled2.m x DiplomFinal.m x untitled4.m x +
92     %Крок по часу
93     t = t + dt;
94     zi = zi + 1;
95
96     %Побудова графіку концентрації в кожному вузлі просторової сітки в
97     %момент часу t
98     plot(x,C,'*');
99     xlabel('x');ylabel('U');
100    title(sprintf('time = %f\n',t));
101    axis([xL, xR, -1, 3]);
102    grid on;
103    drawnow;
104 end
105
106 %Обчислення функції Z(t) у вузлах
107 for i = 0:tfinal/dt,
108     if(Cz(i+1)>Z0)
109         Zs(i+1)=Z0
110     elseif(Cz(i+1)<0)
111         Zs(i+1)=0
112     else
113         Zs(i+1)=Cz(i+1)
114     end
115 end

```

```

Editor - C:\Users\1\Desktop\DiplomFinal.m
untitled.m x DiplomMatlab.m x untitled2.m x DiplomFinal.m x untitled4.m x +
117 %Аналогічна різницева схема для спряженої задачі
118 t=0;
119 zi=1;
120 while (t < tfinal),
121     Psi0 = Psi;
122     Psi(1) = Psi1;
123     i = Nx;
124     Psi(i) = -(2*(Cz(zi)-Zs(zi))+mu*(Psi0(i)-Psi0(i-1)))/(dx))/u;
125     if(Psi(i)<0)
126         Psi(i)=-Psi(i);
127     end
128     for i = Nx-1:-1:2,
129         Psi(i) = Psi0(i) + dt*(u*(Psi0(i-1)-Psi0(i+1))/(2*dx) + (mu/dx^2)*(Psi0(i-1)-2*Psi0(i)+Psi0(i+1)));
130         if(Psi(i)<0)
131             Psi(i)=-Psi(i);
132         end
133     end
134     %Зберігаємо значення функції Psi у точках розміщення джерел збруднення
135     %для подальшого уточнення параметрів джерел
136     Psi1(zi)=Psi(2);
137     Psi2(zi)=Psi(12);
138     Psi3(zi)=Psi(32);
139

```

```

Editor - C:\Users\1\Desktop\DiplomFinal.m
untitled.m x DiplomMatlab.m x untitled2.m x DiplomFinal.m x untitled4.m x +
139 %Перерахунок мінімуму функціоналу
140 Psi1m=piecewise(abs(Psi1m)>=abs(Psi1(zi)),Psi1m,abs(Psi1(zi))>abs(Psi1m),Psi1(zi));
141 Psi2m=piecewise(abs(Psi2m)>=abs(Psi2(zi)),Psi2m,abs(Psi2(zi))>abs(Psi2m),Psi2(zi));
142 Psi3m=piecewise(abs(Psi3m)>=abs(Psi3(zi)),Psi3m,abs(Psi3(zi))>abs(Psi3m),Psi3(zi));
143 t = t + dt;
144 zi = zi + 1;
145
146 end
147
148 %уточнення параметрів джерел забруднення
149 t=0;
150 zi=1;
151 while (t < tfinal),
152     q1c=q1s(zi)-alpha*Psi1(zi);
153     q2c=q2s(zi)-alpha*Psi2(zi);
154     q3c=q3s(zi)-alpha*Psi3(zi);
155     q1s(zi)=piecewise(q1c<0,0,0<=q1c&&q1c<=Qm,q1c,q1c>Qm,Qm);
156     q2s(zi)=piecewise(q2c<0,0,0<=q2c&&q2c<=Qm,q2c,q2c>Qm,Qm);
157     q3s(zi)=piecewise(q3c<0,0,0<=q3c&&q3c<=Qm,q3c,q3c>Qm,Qm);
158
159 end

```

3.2 Вхідні дані

Моделювання відбувається на проміжку $[0, L]$, $L = 4$, відповідно чи перевищено граничну концентрацію забруднення перевіряємо в точці L . Різницєва сітка по просторовим координатам містить 41 точку – від 0 до 4 включно з кроком 0.1. Крок по часу $dt = 0.005$, $T = 6$. Крок по часу навмисно обрано досить дрібним – це впливає на швидкість виконання програми. Проте при збільшенні dt хоча б на порядок, система стає нестійкою і виникають коливання в кожній точці, починаючи з правих вузлів. Коефіцієнт дифузії D взято рівним 0.01, швидкість потоку $u = 1$. Гранична концентрація забруднень і максимальна потужність джерел забруднення відповідно рівні $Z_0 = 1, i Q_m = 20$.

Початкові параметри джерел забруднення(потужність, положення по x , час роботи):

$$q_1(t) = 6, r_1 = 0.1, t_{1w} = [0; 1.2)$$

$$q_2(t) = 8, r_2 = 1.1, t_{2w} = [2; 4)$$

$$q_3(t) = 5, r_3 = 3.1, t_{3w} = [0.8; 2.5)$$

Оскільки програма протягом одного циклу проходить 1201 ітерацію по часу, в роботу неможливо додати графіки для кожного моменту часу, тому розглянемо приблизні моменти часу, коли джерело починає працювати, працює, і завершує роботу.

3.3 Аналіз роботи програми на вхідних даних, результату оптимізації

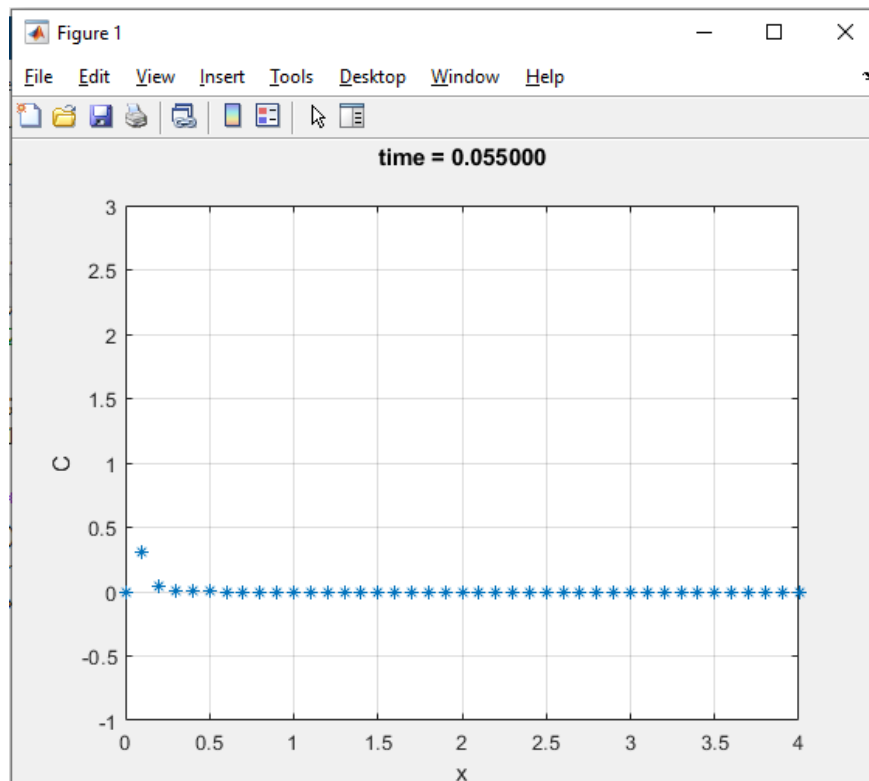


Рис. 1

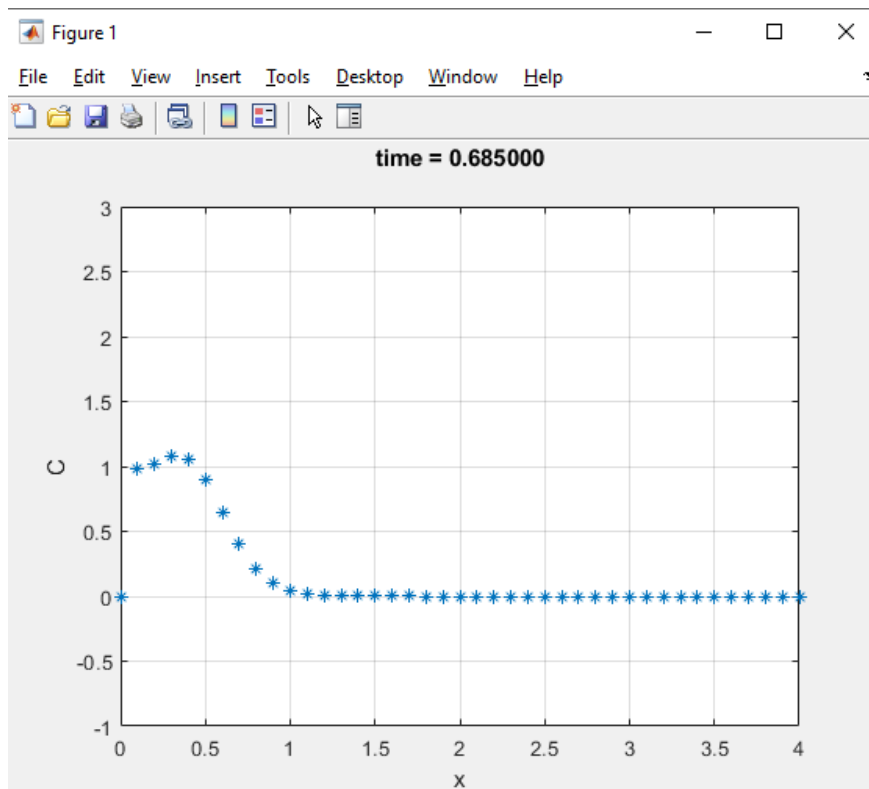


Рис. 2

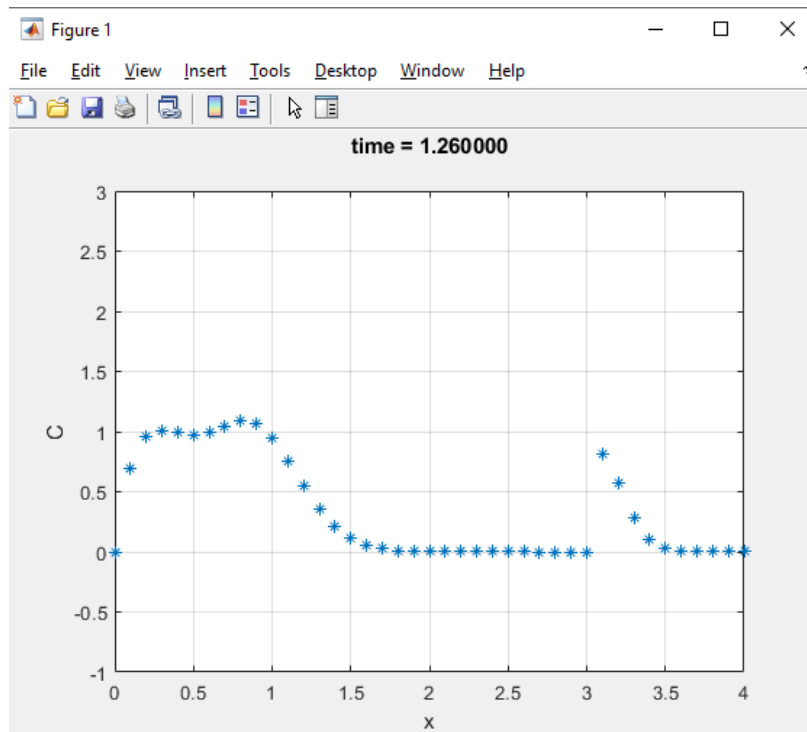


Рис. 3

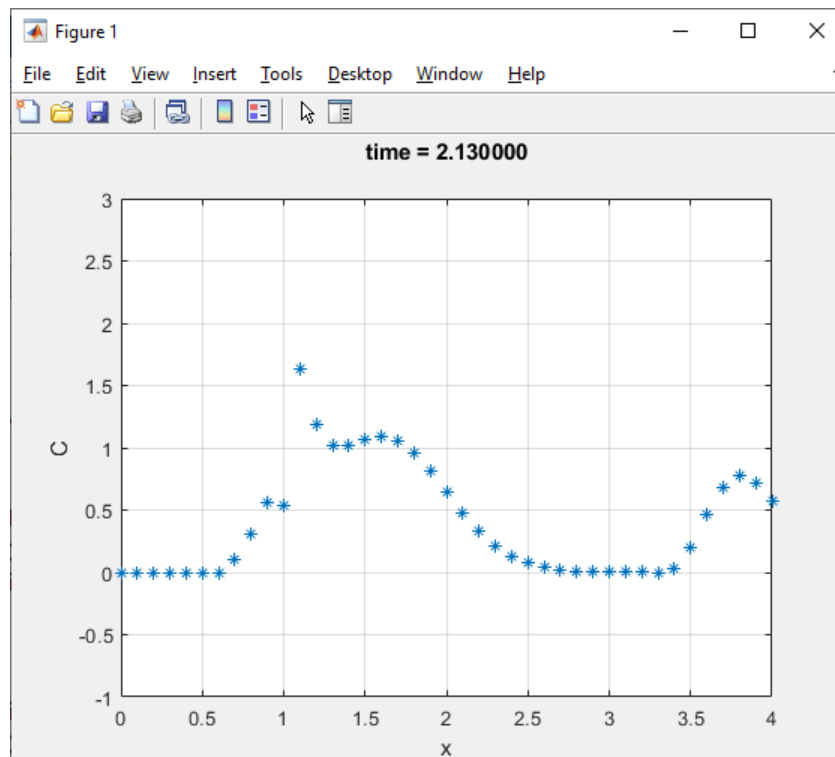


Рис. 4

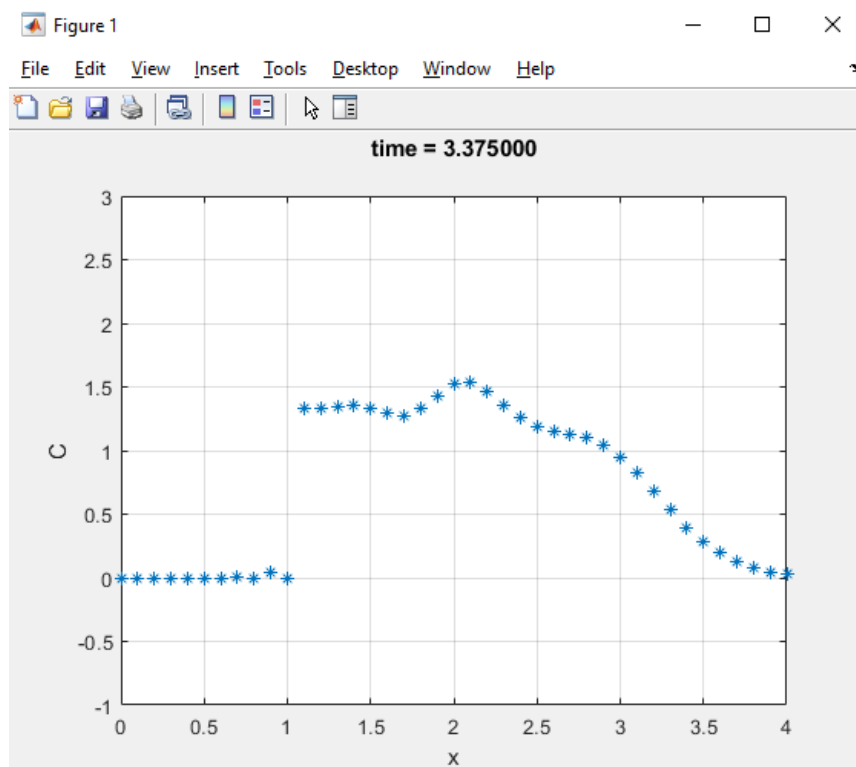


Рис. 5

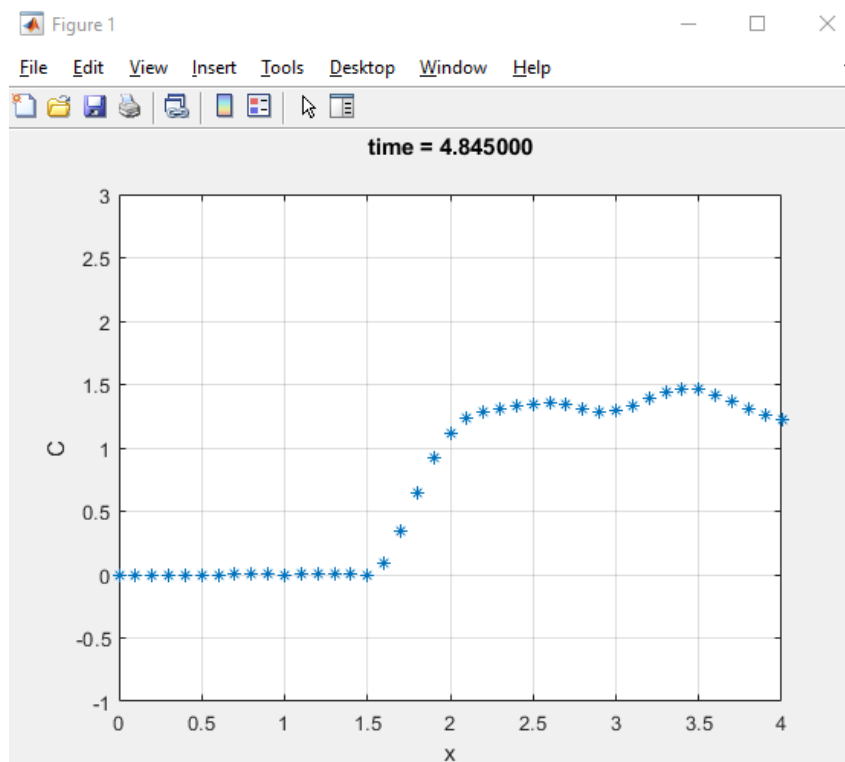


Рис. 6

Початкова концентрація в кожній точці сітки рівна 0, за умовою задачі.

В момент часу $t = 0$ починає працювати джерело в точці $x = 0.1$ (Рис. 1).

На Рис. 2 бачимо як концентрація в точці $x = 0.1$ виходить на плато і починає поширюватись вправо (нагадаємо що потік u задано константою 1, тому концентрація поширюється вправо від точки, куди джерело викидає забруднення, а зліва лишається сталою).

Рис. 3 – джерело в точці $x = 0.1$ перестало працювати в момент $t = 1.2$ і концентрація починає різко падати. В момент $t = 0.8$ запрацювало джерело в точці 3.1, концентрація в точці і поруч починає виходити на плато.

Рис. 4 – концентрація справа від першого джерела продовжує падати до нуля, але в момент $t = 2.0$ вмикається джерело забруднення в точці $x = 1.1$, і концентрація різко зростає, причому концентрація в тій точці вже була ненульовою, оскільки потік приніс забруднення від першого джерела.

Рис. 5 – концентрація в точці $x = 1.1$ вийшла на плато, але забруднення продовжує поширюватись вправо потоком.

Рис. 6 – останнє джерело забруднення перестало працювати в момент $t = 4.0$, в той же час концентрація на правій границі продовжує зростати, бо потік досі несе зміну концентрації від джерела.

На вхідних даних концентрація в точці $x = L = 4$ досить довго перевищувала максимально допустиму. Найбільшого значення, рівного 1.4461 концентрація досягла в два послідовних моменти часу: $t = 5.44$, і $t = 5.445$.

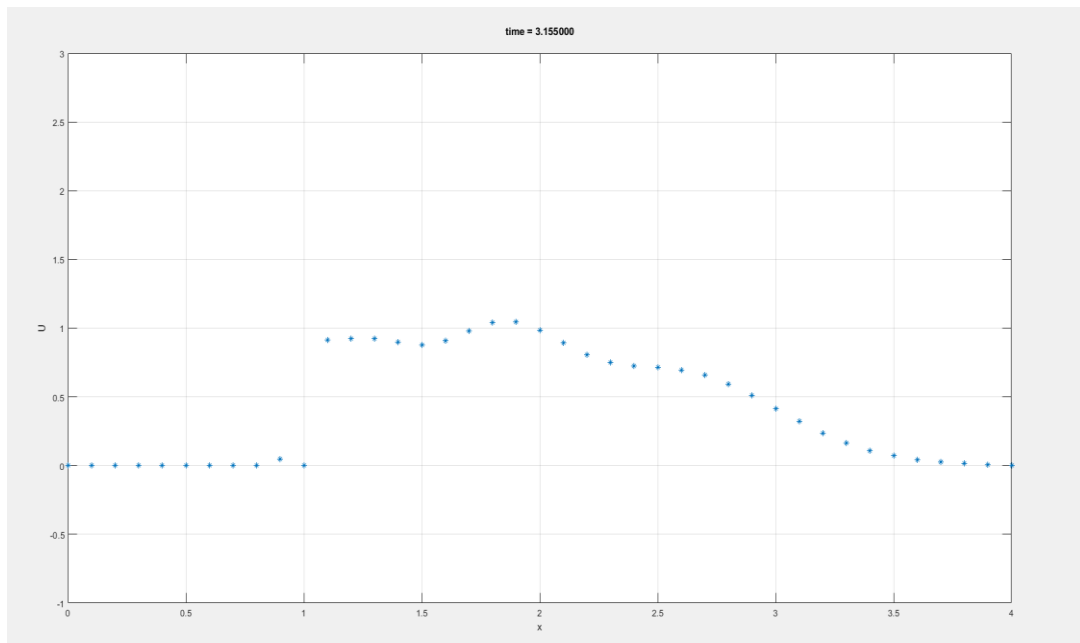
Далі програма згідно алгоритму розраховує функції $\Psi(x, t)$ і $Z(t)$, після чого перераховує потужності джерел забруднення. В результаті роботи отримуємо фінальні потужності джерел:

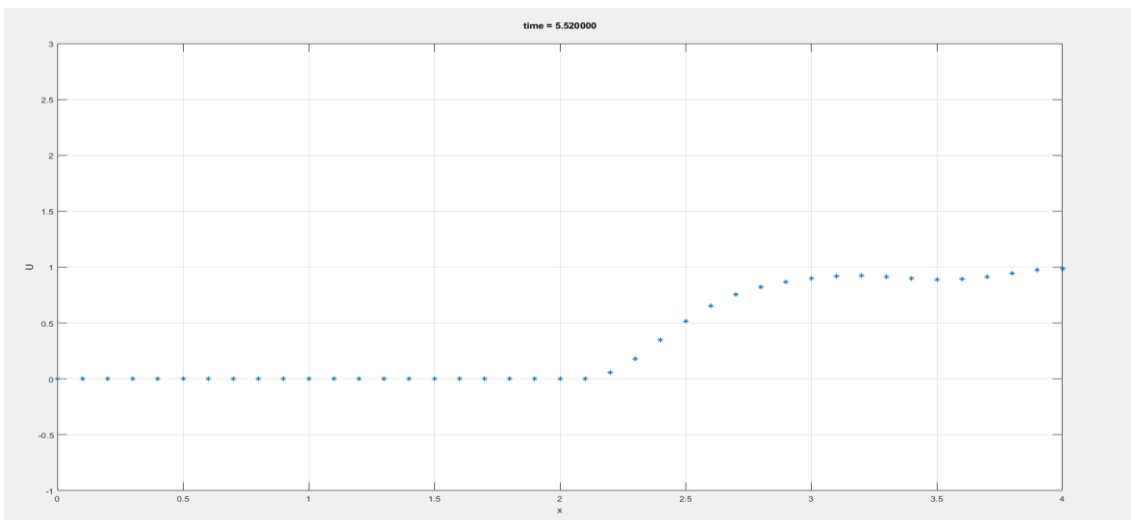
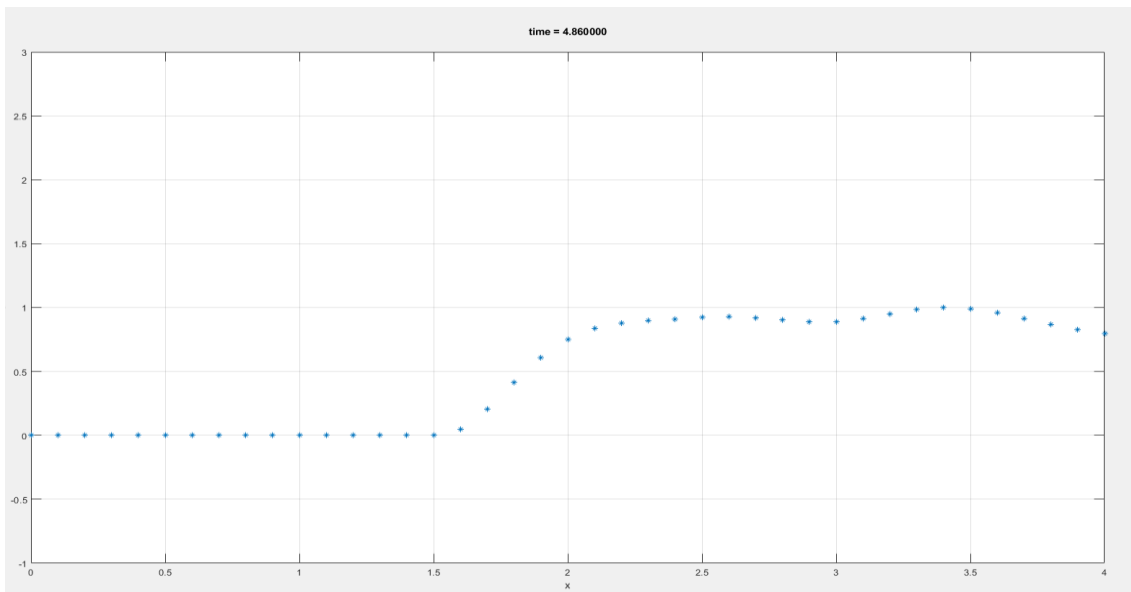
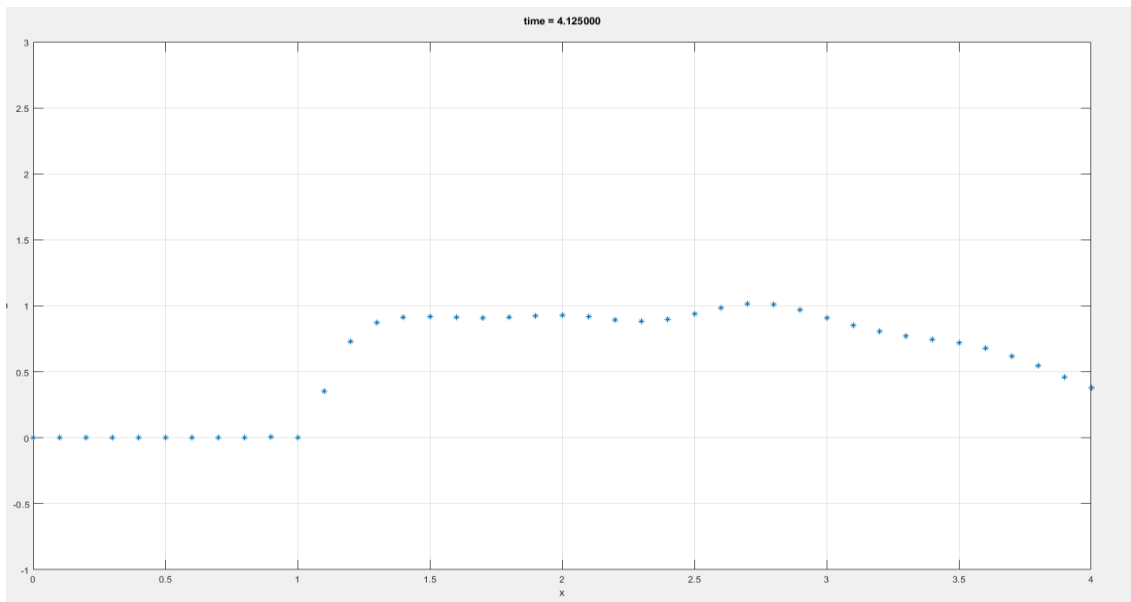
$$q_1(t) = 3.818$$

$$q_2(t) = 5.497$$

$$q_3(t) = 3.446$$

Максимальна концентрація в точці $x = L = 4$ досягла 0.9849, це відбувалося протягом інтервалу часу $t \in [5.465, 5.468]$. Графік концентрації при цьому був досить схожий, і оскільки нас цікавить концентрація тільки на правій границі, наводжу кілька графіків для $t > 3.0$.





4 ВИСНОВКИ

В даній роботі було розглянуто обернену задачу для рівняння конвекції-дифузії, що описує процес переносу консервативної домішки, побудовано графіки для ілюстрації процесу, і виконано оптимізацію параметрів джерел забруднення за допомогою мінімізації функціоналу $J(q)$. Для мінімізації функціоналу розв'язувалася спряжена задача, з розв'язку якої отримувався його градієнт. Для розв'язання прямої і спряженої крайових задач застосовувався метод скінченних різниць. Для внутрішніх вузлів просторової сітки було застосовано центральні різниці для першої і другої похідних. Задачі розв'язувалися за допомогою ПЗ Matlab R2022b. В роботу включено графіки, що відображають концентрацію в певні моменти часу до і після оптимізації джерел забруднення, а також опис коду програми.

Джерела

[1] П. Н. Вабищевич (1994). Монотонные разностные схемы для задач конвекции / диффузии, Дифференц. уравнения, том 30, номер 3, 503–513

[2] D Darmofal (2005). Difference Methods for Convection-Diffusion.

[3] Randall J. LeVeque (2005). Finite Difference Methods for Differential Equations

[4] Стеля О.Б., Ключин Д.А.(2002). Оптимізація хіміотерапії злоякісних пухлин на основі доставки ліків із підсиленою конвекцією // Журнал обчислювальної та прикладної математики, № 1, с. 83-92.