

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Міністерство освіти і науки України
Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Міністерство освіти і науки України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

КОЛЕСНИКОВ ВАЛЕРІЙ АНДРІЙОВИЧ

УДК 519.63

ДИСЕРТАЦІЯ

**РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО КОМПЛЕКСУ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ
МАСОПЕРЕНОСУ В ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ**

Спеціальність 124 Системний аналіз
Галузь знань 12 Інформаційні технології

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

_____ Колесников В.А.

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

Київ - 2024

АНОТАЦІЯ

Колесников В.А. Розробка програмного комплексу для моделювання процесу масопереносу в пористих середовищах. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 124 "Системний аналіз" (12 — Інформаційні технології). — Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, 2024.

Дослідження присвячено моделюванню процесу масопереносу у пористому середовищі в одно-, дво-, тривимірному випадках, а також процесу масопереносу на графі та побудові комп'ютерної програми, що дозволяє конструювати та порівнювати чисельні методи для знаходження наближеного розв'язку вищенаведених задач.

Проблема переносу маси у пористих середовищах залишається актуальною, оскільки даний процес має велику кількість параметрів та додаткових супутніх процесів, які суттєво ускладнюють моделювання та зменшують його точність. Більшість наявних робіт присвячена моделюванню даного процесу з частковим урахуванням фізичних особливостей пористого середовища та зазвичай Використовує чисельні методи для знаходження наближених розв'язків рівняння Річардса-Клюта, яким описують процес масопереносу. Також наявні програмні комплекси, що дозволяють моделювати процес масопереносу, проте найчастіше в них використовується фіксований чисельний метод, а варіативність розв'язуваних задач досягається за рахунок вибору розмірності рівняння Річардса-Клюта та додаткових параметрів самого рівняння. Програма, що надасть можливість моделювати процес масопереносу як у одно-, дво- та тривимірному випадках, так і на графі, а також порівнювати різні чисельні методи для розв'язання відповідних рівнянь Річардса-Клюта, дозволить обирати найкращу комбінацію параметрів чисельного методу для конкретної задачі масопереносу, що підвищить ефективність процесу моделювання.

Метою дисертаційної роботи є:

1. Побудова моделі масопереносу у пористому середовищі на графі за допомогою рівняння Річардса-Клюта.
2. Доведення існування розв'язку поставленої задачі та властивості стійкості розв'язку від початково-крайових умов.
3. Аналіз побудови чисельних методів для знаходження наближених розв'язків рівняння Річардса-Клюта.
4. Побудова програмного комплексу, що дає можливість конструювати чисельні методи для одно-, дво-, тривимірних рівнянь Річардса-Клюта та рівняння Річардса-Клюта на графі, а також порівнювати результати моделювання.
5. Проведення обчислювальних експериментів та порівняльний аналіз чисельних методів, сконструйованих за допомогою різних параметрів.

Об'єктом дослідження є математична модель переносу маси в пористому середовищі в одно-, дво- та тривимірному середовищах, а також переносу маси в пористому середовищі на графі. **Предметом** дослідження є узагальнені розв'язки квазілінійного диференціального рівняння з частковими похідними, узагальнені розв'язки квазілінійного диференціального рівняння з частковими похідними на графі, їх властивості, а також чисельні методи для знаходження наближених розв'язків даних рівнянь.

Методика дослідження: методи теорії узагальнених диференціальних рівнянь у часткових похідних, апарат математичного та функціонального аналізу.

Спочатку за допомогою одновимірного рівняння Річардса-Клюта формується рівняння Річардса-Клюта на вкладеному у тривимірний простір графі. Дане рівняння описує процес масопереносу на графі. На ребрах цього графу процес описується одновимірним рівнянням Річардса-Клюта, в той час як у внутрішніх вершинах графу записується рівняння балансу маси.

Отримане рівняння за допомогою інтегрування частинами перетворюється до рівняння Річардса-Клюта на графі у слабкій формі. Далі наводяться визначення сильного та слабого розв'язків рівняння Річардса-Клюта на графі. Після цього, використовуючи перетворення Кірхгофа та властивості узагальнених функцій на графі, доводиться теорема про існування слабого розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі.

Далі за допомогою апарату математичного аналізу проводиться доведення стійкості розв'язків рівняння Річардса-Клюта на графі в залежності від початково-крайових умов та деяких додаткових обмежень на параметри рівняння.

Для рівняння Річардса-Клюта на графі проведений аналіз структури матриці системи лінійних алгебраїчних рівнянь, що виникає при використанні чисельних методів для знаходження наближеного розв'язку рівняння.

У загальному випадку проведений аналіз чисельних методів та способів їх конструювання для розв'язання рівняння Річардса-Клюта. Додатково був запропонований метод розділення області на насичену та ненасичену зони для підвищення ефективності процесу моделювання та доведена теорема про оцінку підвищення ефективності в залежності від величини частки насиченої зони в досліджуваній області.

На основі отриманих результатів побудований програмний комплекс, що дозволяє моделювати процес масопереносу в одно-, дво- та тривимірному випадках, а також процес масопереносу на графі за допомогою знаходження наближених розв'язків відповідних рівнянь Річардса-Клюта чисельними методами, параметри конструювання яких користувач може обирати сам.

За допомогою запропонованого програмного комплексу були змодельовані процеси масопереносу в одно-, дво- та тривимірному випадках, а також на графі, проаналізовані результати, отримані за допомогою різних чисельних методів та отримані оцінки точності для цих методів. Найефе-

ктивніший метод для рівняння Річардса-Клюта на графі з 28 ребрами дав оцінку балансу маси у 98.82%.

Наукова новизна одержаних результатів полягає у наступному:

Вперше:

- описана задача масопереносу у пористому середовищі на графі за допомогою узагальненого рівняння Річардса-Клюта;
- доведена теорема про існування слабкого розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі;
- доведена оцінка для похибки розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі в залежності від похибок початкових та крайових умов;
- запропонований метод підвищення ефективності моделювання процесу масопереносу за допомогою розділення досліджуваної області на насичену та ненасичену зони;

Удосконалено та детальніше вивчено:

- проведений аналіз конструкції чисельних методів для рівняння Річардса-Клюта за допомогою вибору незалежних параметрів, таких як форма рівняння Річардса-Клюта, метод апроксимації просторової та часової похідних, а також метод розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь для знаходження наближеного розв'язку на наступному кроці по часу для рівняння Річардса-Клюта на графі.

Практична цінність одержаних результатів полягає у побудові програмного комплексу, що дозволяє конструювати чисельні методи для рівняння Річардса-Клюта;

Отже, автором розроблений програмний комплекс для моделювання процесу масопереносу у пористих середовищах в одно-, дво- та тривимірному випадках, а також процесу масопереносу на графі, для якого сформульоване відповідне рівняння Річардса-Клюта.

Математична модель пористого середовища застосовна до реальних ґрунтів, а процеси масопереносу, що описуються рівнянням Річардса-Клюта,

дозволяють моделювати процеси зволоження та осушення, а також розповсюдження корисних чи отруйних речовин в іригаційних системах або при техногенних катастрофах відповідно, чим і визначається практична цінність дослідження.

Ключові слова: рівняння Річардса-Клюта, математичне моделювання, чисельні методи, масоперенос, пористе середовище, графи, програмний комплекс.

ANNOTATION

Kolesnykov V.A. Development of a software complex for modeling mass transfer process in porous media. — Qualifying scientific work on the rights of a manuscript.

Thesis for a scientific degree of Doctor of Philosophy in specialty 124 "System analysis" (12 — Information Technologies). — Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, 2024.

The research is devoted to the modeling of the mass transfer process in a porous medium in one-, two-, and three-dimensional cases, as well as the mass transfer process on a graph and the construction of a computer program which allows to construct and compare numerical methods for finding an approximate solution to the above problems.

The problem of mass transfer in porous media is still topical today due to large number of parameters and additional accompanying processes that significantly complicate the mass transfer process. Most of the existing works are devoted to the modeling of this process with partial consideration of the physical properties of the porous medium and usually use numerical methods for finding approximate solutions of the Richards-Klute equation, which is used for describing the mass transfer process. There are also software complexes that allow simulating the mass transfer process, but most often they use a fixed numerical method, and the variability of the solved problems is achieved by choosing the dimension of the Richards-Klute equation and additional parameters of the equation itself. The program, which will provide an opportunity to simulate the mass transfer process in one-, two-, and three-dimensional cases and on a graph, as well as to compare different numerical methods for solving the corresponding Richards-Klute equations, will allow choosing the best combination of parameters of the numerical methods for a specific mass transfer problem that increases the effectiveness of the modeling process.

The aim of dissertation work is:

1. Construction of mathematical model describing mass transfer process in a porous medium on a graph using the Richards-Klute equation.
2. Proving the existence of a solution to the stated problem and properties of the stability of the solution with respect to the initial and boundary conditions.
3. Analysis of the construction of numerical methods for finding approximate solutions of the Richards-Klute equation.
4. Construction of a software complex that makes it possible to construct numerical methods for one-, two-, and three-dimensional Richards-Klute equations and the Richards-Klute equation on a graph, as well as to compare results of the simulated mass transfer processes.
5. Computational experiments and comparative analysis of various numerical methods constructed using different parameters.

The object of the research is mathematical model of mass transfer process in one-, two- and three-dimensional porous medium and mass transfer process on a graph. **The subject** is generalized solutions of a quasilinear differential equation with partial derivatives, generalized solutions of a quasilinear differential equation with partial derivatives on a graph, their properties, and also numerical methods for finding approximate solutions of these equations.

Research methods: methods of the theory of generalized differential equations with partial derivatives, apparatus of mathematical and functional analysis.

At first, using the one-dimensional Richards-Klute equation, the Richards-Klute equation on a embedded in three-dimensional space graph is formulated. This equation describes the mass transfer process on the graph. On the edges of this graph, the process is described by the one-dimensional Richards-Klute equation, while the mass balance equation is written for the internal vertices of the graph. The resulting equation is transformed into the Richards-Klute equation on the graph in a weak form using integration by parts. Next, the

definitions of classical and weak solutions of the Richards-Klute equation on the graph are given. After that, using the Kirchhoff transformation and the properties of generalized functions on a graph, we prove a theorem of the existence of a weak solution of the Richards-Klute equation on a graph.

Next, using the apparatus of mathematical analysis, the stability of the solutions of the Richards-Klute equation on the graph is proved, depending on the initial boundary conditions and some additional restrictions on the parameters of the equation.

For the Richards-Klute equation on a graph, an analysis of the matrix structure of the system of linear algebraic equations, which occurs while using numerical methods to find an approximate solution to the equation, was performed.

In the general case, an analysis of numerical methods and methods of their construction for solving the Richards-Klute equation was carried out. In addition, a method of dividing the area into saturated and unsaturated zones was proposed to increase the efficiency of the modeling process, and a theorem about the estimation of efficiency increase depending on the value of the proportion of the saturated zone in the researched area was proved .

As a result, using the obtained results, a software complex that allows modeling the mass transfer process in one-, two-, and three-dimensional cases, as well as the mass transfer process on a graph by finding approximate solutions of the corresponding Richards-Klute equations by numerical methods with parameters the user can choose themselves was built.

Using the proposed software complex, mass transfer processes were simulated in one-, two-, and three-dimensional cases, as well as on a graph. The results obtained using various numerical methods and the accuracy estimates for these methods were analyzed.

The most efficient method for the Richards-Klute equation on a graph with 28 edges gave a mass balance estimate of 98.82%.

Scientific novelty of the study is as follows:

For the first time:

- the mass transfer process in a porous medium on a graph was described using the generalized Richards-Klute equation;
- the theorem on the existence of a solution of the Richards-Klute equation on a graph was proved;
- the estimate for the error of solution of the Richards-Klute equation on the graph depending on the errors of the initial and boundary conditions was proved;
- the method of increasing the efficiency of modeling of the mass transfer process by dividing the researched area into saturated and unsaturated zones was proposed;

The following idea was further researched:

- the analysis of the construction of numerical methods for the Richards-Klute equations was carried out using the selection of independent parameters, such as the form of the Richards-Klute equation, the method of approximating the spatial and time derivatives, as well as the method of solving a system of linear algebraic equations to find an approximate solution at the next time step for the Richards-Klute equation on the graph.

Practical value of the study is a software complex that allows to construct numerical methods for the Richards-Klute equation.

So, the author developed a software complex for modeling the mass transfer process in porous media in one-, two-, and three-dimensional cases, as well as the mass transfer process on a graph, for which the corresponding Richards-Klute equation was formulated.

The mathematical model of the porous medium is applicable to modeling real types of soils, and the mass transfer processes described by the Richards-Klute equation allow modeling the processes of wetting and drying, as well as the distribution of useful or poisonous substances in irrigation systems or

during man-made disasters respectively, which define the practical value of the research.

Key words: Richards-Klute equation, mathematical modeling, numerical methods, mass transfer, graphs, software complex.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА:

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Колесников В.А. Рівняння Річардса-Клюта: огляд методів розв'язування. *Журнал обчислювальної та прикладної математики*. 2022. № 1. С. 22–34.
2. Колесников В.А. Аналіз побудови чисельних методів для розв'язання рівняння Річардса-Клюта. *Журнал обчислювальної та прикладної математики*. 2023. № 1. С. 28–38.
3. Колесников В.А. Ефективний чисельний метод для розв'язання рівняння Річардса-Клюта за умов монотонності розв'язку. *Журнал обчислювальної та прикладної математики*. 2023. № 2. С. 42–51.
4. Колесников В.А. Ефективний чисельний метод для розв'язання рівняння Річардса-Клюта з відстеженням зони повного насичення. *Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фізико-математичні науки*. 2023. № 2. С. 206–213.
5. Колесников В.А. Теорема існування для задачі масопереносу на графі. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: фізико-математичні науки*. 2023. № 24. С. 70–80.
6. Колесников В.А., Ляшко С.І. Стійкість розв'язків рівняння Річардса-Клюта. *Доповіді Національної академії наук України*. 2023. № 6. С. 12–18.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. Kolesnykov V.A. Numerical methods for Richards-Klute equation with monotonic solution. *Workshop CDSS: theory, methematical modelling, computing and application*, 2–4 жовтня 2023 р. Київ: 2023. (Форма участі — очна.)
2. Kolesnykov V.A., Klyushin D.A. Full saturated zone tracking numerical method for the Richards-Klute equation. *Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2023*: тези доповідей Вісімнадцятої міжнародної конференції, 13–15 листопада 2023 р. Чернігів: 2023. С. 7–10. (Форма участі — заочна.)
3. Kolesnykov V. Richards-Klute equation on graphs. *Modeling, control and information technologies: Proceedings of VI International scientific and practical conference*, 9–10 листопада 2023 р. Рівне: 2023. (Форма участі — очна.)
4. Колесников В.А. Структура матриць системи лінійних алгебраїчних рівнянь для задачі моделювання масопереносу в пористому середовищі на графі. *2023 2nd International Conference on Innovative Solutions in Software Engineering*, 29–30 листопада 2023 р. Івано-Франківськ: 2023. (Форма участі — очна.)

ЗМІСТ

Вступ	17
Розділ 1. Сучасний стан досліджень	22
1.1. Опис методів дослідження процесу масопереносу в пористому середовищі	22
1.2. Математичні перетворення та аналітичні методи дослідження процесів масопереносу	24
1.3. Застосування чисельних методів для моделювання процесів масопереносу	27
1.4. Короткий огляд існуючих програм для моделювання процесу масопереносу в пористих середовищах	29
1.5. Короткий підсумок	32
Розділ 2. Постановка задачі	34
2.1. Рівняння Річардса-Клюта	34
2.2. Рівняння Річардса-Клюта на графі	36
2.3. Слабка форма рівняння Річардса-Клюта на графі	40
2.4. Існування слабого розв'язку	43
2.5. Стійкість розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі від початково-крайових умов	49
2.6. Структура матриці системи лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі	59
2.7. Метод розділення областей для підвищення ефективності чисельних методів	63
Висновки до розділу 2	69

Розділ 3. Опис програмного комплексу для моделювання процесу масопереносу	71
3.1. Аналіз конструювання чисельних методів для розв'язання рівняння Річардса-Клюта	71
3.2. Особливості та технічні характеристики програмного комплексу	75
3.3. Файли програмного комплексу	76
3.4. Інтерфейс вводу даних	80
3.5. Інтерфейс виводу даних	89
3.6. Рейтинг чисельних методів та процес його модифікації	91
3.7. Додаткова інформація про програмний комплекс	93
Висновки до розділу 3	94
Розділ 4. Результати моделювання	97
4.1. Моделювання процесу масопереносу на графі	97
4.2. Моделювання процесу масопереносу в іригаційній системі	109
4.3. Моделювання процесу масопереносу на графі з негетерогенним середовищем	114
4.4. Моделювання процесу масопереносу в двовимірному випадку	119
4.5. Моделювання процесу масопереносу в тривимірному випадку	120
Висновки до розділу 4	121
Висновки	124
Список використаних джерел	125
Додаток — Список публікацій здобувача	136

Список умовних позначень:

Грецькі літери: α — альфа, β — бета, γ — гама, Γ — гама велике, δ — дельта, ϵ — епсілон, θ — тета, Θ — тета велике, ξ — ксі, ψ — псі, Ψ — псі велике, τ — тау, ϕ — фі, Φ — фі велике, ω — омега, Ω — омега велике.

Константи: e — експонента.

ВСТУП

Актуальність теми. Побудова та аналіз ефективного чисельного методу для розв'язання рівняння Річардса-Клюта і, тим самим, для моделювання процесу масопереносу в пористому середовищі є важливою задачею, оскільки через нелінійність рівняння Річардса-Клюта чисельні методи є основним способом отримання його розв'язків. Побудований програмний комплекс дозволяє конструювати та порівнювати між собою чисельні методи для розв'язання рівняння Річардса-Клюта, тим самим дозволяючи користувачу обрати найефективнішу комбінацію параметрів, з яких складається чисельний метод.

Задача масопереносу у пористому середовищі на графі може бути застосована для прогнозування розповсюдження корисних речовин в іригаційних системах, що складаються з деякої структури з'єднаних між собою капілярних труб. Також вона може знайти застосування у медицині в області розповсюдження речовин у крові системою капілярів.

Мета і завдання. Робота присвячена програмі, що дозволяє моделювати процеси масопереносу в пористих середовищах в одно-, дво- та тривимірних випадках, використовуючи рівняння Річардса-Клюта та чисельні методи для нього. Також метою роботи є дослідження процесу масопереносу на графах. Завданням є розробка даного програмного комплексу та аналіз результатів моделювання при варіації чисельних методів, сконструйованих за допомогою незалежних один від одного параметрів, з подальшим визначенням найефективніших з них.

Методи дослідження. Серед методів, використаних у дисертаційній роботі, можна виділити апарат функціонального аналізу для формулювання рівняння Річардса-Клюта на графі та означення слабкого розв'язку

даного рівняння, а також перетворення Кірхгофа, що використовувалося для перетворення рівняння Річардса-Клюта на графі до більш зручної для доведення основних теоретичних результатів форми.

Іншим методом дослідження була декомпозиція чисельних методів для розв'язання рівняння Річардса-Клюта на незалежні складові частини, такі як форма рівняння, метод дискретизації часу, простору, кількість шарів, що беруть участь під час дискретизації похідної по часу, а також метод розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь для рівняння Річардса-Клюта на графі.

Реалізований у програмному комплексі функціонал конструювання чисельних методів дає можливість вибрати та порівняти між собою більш ніж п'ятдесят чисельних методів для чотирьох варіантів задачі масопереносу у пористому середовищі: одно-, дво-, тривимірною та задачі масопереносу на графі.

Наукова новизна отриманих результатів. На захист виносяться постановка задачі масопереносу на графі, теорема існування слабкого розв'язку для рівняння Річардса-Клюта на графі, теорема про стійкість розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі від початково-крайових умов, теорема про оцінку підвищення ефективності чисельних методів при використанні методу розбиття досліджуваної області на насичену та ненасичені зони, а також програмний комплекс для моделювання процесів масопереносу в пористих середовищах.

Особистий внесок здобувача. Науковому керівнику належить постановка задачі та рекомендації щодо вибору методів розв'язання проміжних задач.

Претендентом опубліковано 8 наукових робіт [1–8]: 2 тези конференцій та 6 наукових статей. Творчий внесок у опубліковані роботи є наступним:

- Статті [3–7] написані без співавторів, постановка задач та рекомендації щодо методів розв'язання отримані від наукового керівника —

Д.А. Ключина. Статті [3, 4] присвячені огляду та аналізу існуючих методів розв'язання рівняння Річардса-Клюта, особливо чисельним методам для отримання наближених розв'язків. Статті [5, 6] присвячені модифікаціям чисельних методів для рівняння Річардса-Клюта з використанням ідеї розбиття досліджуваної області на насичену та ненасичені зони. Стаття [7] присвячена постановці задачі масопереносу на графі та рівняння Річардса-Клюта для опису цього процесу, а також доведенню теореми існування слабкого розв'язку для отриманого рівняння.

- Стаття [8] присвячена результатам стосовно стійкості розв'язків рівняння Річардса-Клюта від початково-крайових умов. Співавтору та науковому керівнику належить постановка задачі. Колесников В.А. сформулював та довів результати стійкості розв'язків рівняння Річардса-Клюта за допомогою переходу до слабкої форми рівняння та оцінці отриманх інтегралів. Вклад у статтю складає 70%.
- Постановка задачі та ідеї досліджень, викладені у тезах конференцій, сформульовано за підтримки наукового керівника, виступи на усіх конференціях автор здійснив самостійно.

Апробація наукових результатів відбулась на чотирьох конференціях:

1. Workshop CDSS: theory, methemathical modelling, computing and application (CDS-2023) — Oct 2–4, 2023 — Kyiv, Ukraine.
2. Математичне та імітаційне моделювання систем (MODS-2023) — 13–15 листопада, 2023 — Чернігів, Україна.
3. VI International scientific and practical conference Modeling, control and information technologies (MCIT-2023) — Nov 9–10, 2023 — Rynve, Ukraine.
4. 2023 2nd International Conference on Innovative Solutions in Software Engineering (ICISSE-2023) — Nov 29–30, 2023 — Ivano-Frankivsk, Ukrai-

не.

Структура та обсяг дисертації Дисертація складається зі вступу та чотирьох розділів та має обсяг 137 сторінок, з них 108 основного тексту.

Перший розділ дисертації містить огляд джерел, які висвітлюють сучасний стан досліджень процесу масопереносу в пористому середовищі, теоретичні основи для методів, що використовувалися у дисертації, та альтернативні ідеї щодо моделювання процесу масопереносу.

Другий розділ присвячено математичній моделі процесу масопереносу в пористому середовищі на графі. В ньому формулюється рівняння Річардса-Клюта на графі, даються означення його розв'язків та доводиться теорема про існування слабкого розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі. Також у розділі доводиться теорема про стійкість розв'язків рівняння Річардса-Клюта на графі від початкових та крайових умов. Ще в даному розділі пропонується метод розбиття досліджуваної області на зони повного та неповного насичення для підвищення ефективності процесу моделювання.

Третій розділ присвячений програмному комплексу, побудованому для моделювання процесів масопереносу у одно-, дво- та тривимірному випадках, а також для моделювання процесів масопереносу на графах. Розділ містить опис інтерфейсу та можливостей програмного комплексу, а також аналіз процесу конструювання чисельних методів для рівняння Річардса-Клюта, функціонал якого також реалізований у програмному комплексі.

Четвертий розділ містить результати обчислень для конкретних задач масопереносу. Розділ містить графічні ілюстрації функцій, що є наближеними розв'язками рівняння Річардса-Клюта, та таблиці з наведеними в них оцінками точності процесу моделювання.

Зв'язок роботи з науковими програмами. Результати, отримані у дисертаційній роботі, мають відношення до проекту "Обчислювальні алгоритми і оптимізація для штучного інтелекту, медицини та оборони" (ДР

0122U002026), підтриманого Міністерством освіти та науки України.

Практичне значення дисертаційної роботи обумовлено тісним зв'язком з дослідженнями вітчизняних та закордонних вчених стосовно задачі переносу солей під час фільтрації, автоматизації процесів зрошення та зсушення, а також задач моделювання розповсюдження забруднень при техногенних катастрофах. Даний підхід може бути розширено та адаптовано на більше класів задач у майбутньому.

РОЗДІЛ 1

СУЧАСНИЙ СТАН ДОСЛІДЖЕНЬ

Даний розділ містить огляд існуючих досліджень, що стосуються теми масопереносу в пористих середовищах, як з точки зору математичного опису процесу та аналітичних результатів, так і з точки зору застосування чисельних методів для розв'язування конкретних задач моделювання.

1.1. Опис методів дослідження процесу масопереносу в пористому середовищі

Задача масопереносу в пористому середовищі з межею насичення залишається актуальною завдяки досить розповсюдженим застосуванням в області сільського господарства (конструювання та прогнозування роботи іригаційних систем, аналіз та моделювання поглинання рослинами корисних речовин з ґрунту) та в області попередження катастроф (моделювання техногенних аварій, що спричиняють потрапляння отруйної речовини в ґрунт, та моделювання подальшого розповсюдження цієї речовини). Також ця задача знаходить застосування в медицині (моделювання розповсюдження ліків в капілярній сітці у шкіряному покриві). Іншою причиною актуальності даної задачі є той факт, що описується вона зазвичай досить складними рівняннями, як, наприклад, рівняння Річардса-Клюта [9, 10], що є одною з основних моделей для опису масопереносу в ненасиченому пористому середовищі, тим самим, дані рівняння мають невелику кількість якісних апріорних оцінок і ще меншу кількість аналітичних розв'язків, а тому їх дослідження представляють собою великий пласт потенційних результатів, які і є темою тих чи інших вітчизняних та світових робіт, що

виходять за даною темою.

Для моделювання масопереносу у пористому середовищі зазвичай використовують або аналітичний підхід, який, як було вказано вище, має суттєві обмеження при застосуванні, що найчастіше полягають в ідеалізації параметрів рівняння, яке описує процес масопереносу, або комп'ютерне моделювання, найчастіше за допомогою чисельних методів. Для конкретних задач з багатьма параметрами та складною структурою пористого середовища для знаходження розв'язків рівняння та моделювання процесу масопереносу частіше використовують саме комп'ютерне моделювання, адже чисельних методів відносно легше підлаштувати під обмеження конкретної задачі, аніж аналітичний апарат.

Завдяки розповсюдженості комп'ютерного моделювання процесів масопереносу з'явилися окремі програмні комплекси, що спеціалізуються саме на моделюванні даних процесів або на чисельному розв'язанні рівняння Річардса-Клюта. Деякі з них мають дуже широкий спектр можливостей стосовно задання параметрів рівняння Річардса-Клюта або моделюванні додаткових впливів на потоки маси в середовищі, як, наприклад, стоки чи джерела. Найчастіше дані програми реалізують процес моделювання за допомогою фіксованого чисельного методу, що, у випадку недосконаліості останнього, може призводити до суттєвих похибок при моделюванні процесу.

Отже, проблема якісного моделювання масопереносу досі є актуальною та досліджується як з аналітичної, так і з обчислювальної точок зору. Проте, так чи інакше, більшість робіт розглядають дещо спрощені постановки задачі (за допомогою зменшення кількості параметрів, розмірності задачі або лінеаризації рівнянь), що не враховують усю складність процесу масопереносу, який вони описують.

Огляд аналітичних підходів до процесу моделювання масопереносу в пористому середовищі та робіт, присвячених цій тематиці, а також огляд

методів комп'ютерного моделювання та огляд програмних комплексів для моделювання масопереносу наведено у наступних пунктах даного розділу.

1.2. Математичні перетворення та аналітичні методи дослідження процесів масопереносу

Через властивість нелінійності рівняння Річардса–Клюта, аналітичні методи аналізу процесів масопереносу акцентують увагу на доведенні тих властивостей розв'язків, які можна отримати без знання аналітичної формули для цього розв'язку, наприклад, теореми існування, єдиності, регулярності та стійкості. Причому зазвичай всі ці результати формулюються саме для слабкої форми рівняння Річардса–Клюта і, відповідно, для слабких розв'язків.

Так, класичні роботи [11–20] містять результати з питань існування, єдиності, регулярності та стійкості слабких розв'язків рівняння Річардса–Клюта, що визначене на одно-, дво- та тривимірних областях з відносно слабкими обмеженнями на параметри як самого рівняння, так і початково-крайових умов. Серед результатів цих статей можна видзначити також варіаційні нерівності для рівняння Річардса–Клюта [11], властивості межі між насиченою та ненасиченою підобластями, які полягають у її неперервності та, за додаткових умов, гладкості, [18, 19], проблему Стефана [11, 21] та теореми існування в'язкісного розв'язку [20].

Окремо виділюються роботи Дегтярьова [22–25] в яких процес масопереносу описується з точки зору насичених-ненасичених підобластей та границі між ними, що змінюється з часом. Так, у роботі [22] розглядається еліптичне рівняння з параметром, на основі якого у роботі [23] для квазілінійного еліптико-параболічного рівняння, яким також є і рівняння Річардса–Клюта, доведені теореми існування гладкого розв'язку та гладкість межі локально за часом. Для доведення цих результатів використовують просто-

ри неперервних за Гьолдером функцій та метод, описаний у роботах [24,25], який є аналогом методу Ньютона розв'язання нелінійних рівнянь.

Розповсюдженою практикою для спрощення рівняння Річардса–Клюта є різноманітні перетворення, які позбавляють рівняння нелінійності. Одним з таких перетворень є перетворення Кірхгофа, його використання можна знайти, наприклад, у роботах [26–29]. Перетворення Кірхгофа застосовується також просто для того, щоб зробити заміну змінних, яка полегшує подальше доведення теоретичних результатів [26, 29]. Також інколи застосовується перетворення Фур'є [30]. Зазвичай рівняння, отримані за допомогою таких перетворень, суттєво легші за попередню форму, проте результати моделювання розв'язків оригінального та перетвореного рівнянь можуть суттєво відрізнитися, як, наприклад, у роботі [58]. Огляд та аналіз різноманітних методів перетворення рівняння Річардса–Клюта можна знайти у роботі [32].

Окремо з-поміж аналітичних підходів виділяється метод, запропонований у роботі [33], що полягає у зведенні за допомогою перетворення Кірхгофа рівняння Річардса–Клюта до задачі оптимального керування потоком маси, після чого дана задача оптимального керування розв'язується відповідними методами. У даній роботі доводиться коректність переходу до задачі керування а також проводяться чисельні експерименти, що підтверджують теоретичні результати.

За рахунок нелінійності рівняння Річардса–Клюта кількість відомих аналітичних розв'язків дуже обмежена. Зазвичай точні розв'язки отримуються для одновимірних задач масопереносу з накладанням додаткових умов, що спрощуються параметри рівняння, інколи навіть лінеаризують його. Інколи додаткові умови бувають настільки сильними, що втрачається зв'язок з фізичною природою задачі та рівняння перестає описувати процес масопереносу, бо банально не існує пористих середовищ, які відповідали б спрощеним параметрам рівняння.

Так, роботи [34–38] містять аналітичні розв’язки рівняння Річардса-Клюта з параметрами, що майже не зустрічаються на практиці. Але дані результати добре підходять для аналізу чисельних методів розв’язання рівняння Річардса-Клюта у якості еталонів. Робота [39] містить каталог точних розв’язків для лінеаризованого рівняння Річардса-Клюта.

Також варто відзначити наступні аналітичних результати: робота [40] містить аналітичний розв’язок рівняння Річардса-Клюта, отриманий за допомогою методу дрейфуючих хвиль; робота [41] містить розв’язок одновимірного рівняння Річардса-Клюта для випадку гетерогенного двошарового ґрунту з параметрами вологості, різними для двох шарів; роботи [42,43] містять побудову аналітичного розв’язку з нестационарними початковою та крайовими умовами; робота [44] містить аналіз процесу поглинання маси коренем рослини; роботи [45,46], на відміну від попередніх робіт, містять аналітичні дво- та тривимірні розв’язки рівняння; і робота [47], в якій вперше наведений аналітичний розв’язок багатовимірного рівняння Річардса-Клюта зі стоками, причому інтенсивність стоків залежить від значення коефіцієнту насиченості середовища нелінійно. Отже, аналітичні розв’язки рівняння Річардса-Клюта найчастіше отримуються за додаткових досить сильних обмежень, що практично унеможливує застосування аналітичних підходів до процесу моделювання конкретних задач масопереносу в пористих середовищах з параметрами, якими описуються реальні ґрунти.

Також варто виділити задачу керування для рівняння Річардса-Клюта, що дозволяє моделювати розповсюдження маси в області із заданим до цього бажаним значенням коефіцієнту насиченості. Роботи [48,49] містять моделі таких процесів з точковими джерелами. Моделювання точкових джерел за допомогою двовимірної дельта-функції у двовимірному випадку рівняння Річардса-Клюта розглянуто у роботі [26] з чисельними експериментами, що показали високу точність розв’язків задачі керування.

Теоретичне обґрунтування поставлених задач керування можна знайти у роботах [50,51]. Основний принцип їх розв'язку полягає в ітеративній оптимізації за допомогою спряженого рівняння.

Оскільки рівняння Річардса-Клюта є еліптико-параболічним, то також варто згадати роботи [52–56], які містять означення еліптико-параболічних рівнянь у банахових просторах та результати стосовно існування та регулярності слабких розв'язків даних рівнянь, отриманих за додаткових умов на параметри рівняння, що у даному випадку замість функцій є операторами.

1.3. Застосування чисельних методів для моделювання процесів масопереносу

За рахунок властивості нелінійності рівняння Річардса-Клюта, комп'ютерне моделювання, а саме чисельні методи, застосовуються набагато частіше для знаходження розв'язків, ніж відповідні аналітичні процедури. Досить детальний огляд чисельних методів для розв'язання рівняння Річардса-Клюта можна знайти у роботах, що були присвячені сторіччю даного рівняння, таких як [57, 58]. Також огляд чисельних методів з аналізом їх конструювання та обчислювальними експериментами містить робота [4]. Проте, знову ж таки, через нелінійність та інші властивості параметрів рівняння Річардса-Клюта, в області чисельного моделювання також виникають складнощі, які пов'язані з проблемою побудови точної і в той же час ефективної схеми для розв'язання рівняння Річардса-Клюта. Роботи по цьому напрямку в основному містять чисельні методи, що базуються на комбінації методів дискретизацій по часу та простору, що описані нижче, причому для підвищення степені точності або ефективності іноді застосовуються вищеописані перетворення рівняння Річардса-Клюта як до еквівалентних форм, так і до спрощених лінеаризованих форм.

Стосовно дискретизації похідної по часу, то для знаходження наближеного розв'язку рівняння Річардса–Клюта найчастіше використовується зворотні методи, оскільки вони мають високу точність. Серед способів же дискретизації частіше обирають метод Ейлера, оскільки у нього є перевага стійкості, якої не вистачає методам Рунге–Кутти та Кранка–Ніколсона, хоч останні і дають більшу точність за метод Ейлера [59, 60].

У більшості робіт використовується рівномірний крок по часу, проте розповсюдженими також є методи побудови адаптивного кроку по часу [61], так як отримані за допомогою них результати моделювання з різкими стрибками значень розв'язків, причиною яких була нелінійність рівняння, були кращими за відповідні результати зі сталим кроком. Але в той же час адаптивний крок по часу показує не дуже точні результати при осцилюючих граничних умовах [62].

З-поміж методів дискретизації просторових похідних найбільшою популярністю користуються метод скінченних елементів [63–67, 69], метод скінченних різниць [68, 70–75] та метод скінченних об'ємів [76, 77]. У вказаних роботах можна знайти оцінки похибок при відповідних методах дискретизації. Як і у випадку дискретизації по часу, також досліджувалися схеми дискретизації простору з адаптивним кроком по простору [4, 78]. Так як наявні схеми переважно є лише умовно стійкими, то для коректної роботи чисельних методів необхідно обирати достатньо малі кроки по часу, що разом з порядком величини кроку по простору призводить до суттєвого збільшення кількості обчислень. Ця проблема є основною у напрямку чисельного моделювання процесів масопереносу та знаходження наближених розв'язків рівняння Річардса–Клюта, особливо у дво- та тривимірних задачах.

Окрім чисельних методів також останнім часом набувають популярності так звані статистичні методи знаходження наближених розв'язків рівняння Річардса–Клюта, що полягають у побудові нейронних мереж, які

розв'язують диференціальні рівняння у часткових похідних [79, 80]. Результати моделювання показали високу точність в порівнянні зі звичайним чисельним методом, що базувався на методі скінченних різниць.

Також варто вказати, яким чином перевіряють коректність наближених розв'язків для рівняння Річардса-Клюта та взагалі визначають ефективність чисельних методів. З-поміж інших для тестування та аналізу чисельних методів віділяються два підходи. Перший полягає в оцінці результатів роботи чисельного методу на рівняннях Річардса-Клюта з параметрами, для яких відомі точні розв'язки. Інший полягає в порівнянні результатів з результатами чисельних експериментів, які є в певному сенсі еталонними для деяких часткових випадків рівняння Річардса-Клюта. У роботах [68, 81–84], наприклад, наведені результати чисельних експериментів з експертно підібраними параметрами, серед яких кроки по часу та простору. У випадках, коли немає ані точних, ані еталонних розв'язків, використовують інші оцінки, серед яких виділяється оцінка балансу маси, що полягає в розрахунку для наближеного розв'язку рівняння величини відношення зміни насиченості в досліджуваній області до величини притоку маси через границю цієї області. Зрозуміло, що перший метод оцінки чисельних методів набагато надійніше за порівняння з, хоч і експертними, проте експериментальними розв'язками рівняння, проте через обмежену кількість точних розв'язків будь-якими додатковими даними не можна нехтувати.

1.4. Короткий огляд існуючих програм для моделювання процесу масопереносу в пористих середовищах

На даний момент існує низка програм, що присвячені моделюванню процесу масопереносу в пористих середовищах і розв'язанню рівняння Річардса-Клюта. Більшість з цих програм інтегрована у програмні комплекси для моделювання процесів, які відбуваються на межі атмосфера-грунт.

Програми, що розв'язують рівняння Річардса-Клюта, бувають як комерційними (HydroGeoSphere, FEFLOW), так і програмами з відкритим кодом (HYDRUS, PFLOTRAN). Існують як програмні пакети для моделювання широкого спектру процесів, пов'язаних з вологопереносом (HYDRUS), так і вузько направлені невеликі програми, які розв'язують конкретну задачу ("Алгоритм оптимізації потужності точкових джерел у двовимірному пористому середовищі"). Моделі та чисельні методи у різних програмах також відрізняються між собою. Існують програми як для розв'язання одновимірних задач (CoupModel), так і для двовимірних (ADH, VS2DI) та тривимірних (HYDRUS, FEFLOW, PEFLOTRAN). Програмні комплекси також можна розділити за критерієм зручності та інтуїтивності при користуванні. Деякі з програм потребують прямого втручання користувача у виконуваних файли, інші ж надають графічний інтерфейс та навіть онлайн-підтримку для користувачів у випадку технічних проблем (CoupModel, HYDRUS).

Переважає більшість програмних комплексів саме для реалізації обчислень використовує код на мовах програмування FORTRAN або C/C++, бо, як було вказано вище, чисельні методи знаходження наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта потребують великої кількості обчислень, пов'язаної з конструюванням та розв'язанням нестационарної системи лінійних алгебраїчних рівнянь, а дані мови програмування мають перевагу у швидкості виконання саме арифметичних операцій. Моделі та чисельні методи, які використовуються у даних програмних комплексах, найчастіше використовують метод скінченних різниць, метод скінченних елементів або метод скінченних об'ємів. Далі наведені характеристики, сильні та слабкі місця деяких програмних комплексів та моделей для моделювання процесу масопереносу в пористих середовищах та для розв'язання рівняння Річардса-Клюта:

CoupModel [85, 86] — безкоштовна програма для моделювання одновимірних процесів масопереносу у ґрунті з урахуванням наявності стоків, які

моделюють рослини, що поглинають речовину, та моделюванням заморозки ґрунту. Базується на методі скінченних різниць. Підтримка користувачів здійснюється за допомогою онлайн-форума.

HYDRUS [63, 87] — багатозадачний програмний комплекс з відкритим кодом, написаний мовою програмування FORTRAN. Реалізовані моделі для випадку одно-, дво- та тривимірних рівнянь Річардса–Клюта за допомогою метода скінченних елементів. Має графічний інтерфейс і документацію. Може розв’язувати задачу для негетерогенного середовища.

HydroGeoSphere [88] — комерційний програмний комплекс для розв’язання тривимірного рівняння Річардса–Клюта за допомогою методу скінченних елементів. Для апроксимації похідної по часу використовує адаптивний крок з автоматичним розрахунком його величини.

PFLOTRAN [89] — багатозадачний програмний комплекс з обчисленнями, реалізованими мовою програмування FORTRAN, та з можливістю паралельних обчислень за допомогою бібліотеки PETSc. Некомерційний, має відкритий код. Використовує чисельні методи на основі методу скінченних об’ємів для тривимірного рівняння Річардса–Клюта.

VS2DI [90, 91] — програма, що розв’язує двовимірне рівняння Річардса–Клюта, записане відносно функції потенціалу тиску за допомогою чисельних методів на основі методу скінченних різниць. Мова реалізації — FORTRAN.

ADH [92] — багатозадачна платформа, що розв’язує одно-, дво- та тривимірне рівняння Річардса–Клюта за допомогою чисельних методів на основі методу скінченних елементів.

CATHY [93] — модель для розв’язування тривимірного рівняння Річардса–Клюта за допомогою чисельних методів на основі методу скінченних елементів.

FEFLOW [94] — комерційна програма для розв’язання тривимірного рівняння Річардса–Клюта за допомогою чисельних методів на основі мето-

ду скінченних скінченних елементів.

”Алгоритм оптимізації потужності точкових джерел у двовимірному пористому середовищі” [26, 95] — програма присвячена задачі масопереносу у пористому середовищі з точковими джерелами та задачі керування для двовимірного квазілінійного рівняння Річардса–Клюта на прямокутній області з сингулярним керуванням. Реалізація обчислень на мові С та візуалізація у пакеті комп’ютерної алгебри Maple.

Варто відзначити, що всі наявні програмні пакети використовують фіксовані чисельні методи, тому процедуру порівняння роботи чисельних методів на тому чи іншому прикладі рівняння Річардса–Клюта неможливо провести в рамках одного програмного комплексу. До того ж, деякі з програм мають куди більший функціонал, а інші спеціалізуються на конкретній задачі.

1.5. Короткий підсумок

Таким чином, можна зробити висновок, що проблема масопереносу в пористому середовищі є актуальною, про що свідчить як велика кількість робіт, присвячених даній темі та суміжній з нею темі рівняння Річардса–Клюта, так і суттєва кількість програм для моделювання процесу масопереносу.

Для моделювання процесу масопереносу та розв’язання рівняння Річардса–Клюта за рахунок великої кількості додаткових параметрів та нелінійності самого рівняння частіше використовують методи комп’ютерного моделювання за допомогою різноманітних чисельних методів та їх модифікацій. Важливу роль грає оцінка якості наближення розв’язку, отриманого за допомогою чисельного методу, для характеристизації як результатів процесу моделювання, так і для самого чисельного методу.

Програми для моделювання процесу масопереносу зазвичай реалізу-

ють один конкретний чисельний метод для розв'язання рівняння Річардса-Клюта та варіативність розв'язуваних задач отримують за рахунок збільшення параметрів самого рівняння. Проте досі немає програми, що дозволяла б конструювати чисельні методи з різних компонент та порівнювати результати їх роботи на одному і тому ж рівнянні Річардса-Клюта. Також програми часто обмежуються одновимірними або простими дво- та тривимірними областями, в яких розглядається процес масопереносу.

Підсумовуючи все вище згадане, тематика дослідження залишається актуальною і сьогодні. Для ефективного моделювання процесу масопереносу важливо знаходити найточніші методи, чи вони будуть аналітичними, чи обчислювальними.

РОЗДІЛ 2

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

2.1. Рівняння Річардса-Клюта

Рівняння Річардса для моделювання масопереносу у пористих середовищах було вперше описане у роботах Річардсона [1] та Річардса [2]. Для його виводу використовується закон Дарсі (експериментально доведений у [3] та теоретично у [4-7]) для потоку рідини через пористе середовище:

$$q = -K(\theta)\nabla H, \quad (2.1)$$

де q — швидкість векторного потоку (м/с), K — водопроникність (м/с) середовища (залежить від насиченості), H — повний потенціал напору (м), сума потенціалу гідравлічного тиску h та гравітаційних сил, причому останні направлені вздовж позитивного напрямку осі z .

Підставляючи (2.1) у фундаментальну формулу балансу для руху рідини

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \cdot q + s, \quad (2.2)$$

де θ — насиченість (безрозмірна), s — інтенсивність джерел (1/с, можуть бути від'ємними у випадку стоків), отримуємо примітивну, або змішану форму рівняння Річардса-Клюта:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot (K\nabla H) + s. \quad (2.3)$$

Проте форма (2.3) не дуже зручна для подальшої дискретизації та чисельного розв'язання рівняння. Якщо ж розглянути у якості основної змінної потенціал тиску h , то можна записати рівняння (2.3) у дещо іншій, так

званій напорній формі:

$$C \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot (K \nabla h) + \frac{\partial K}{\partial z} + s, \quad (2.4)$$

де $C = \partial\theta/\partial h$ — вологоємність середовища (1/м).

Рівняння Річардса є нелінійним виродженим еліптико-параболічним рівнянням у часткових похідних [8].

З іншого боку, рівняння (2.3) можна також переписати відносно змінної θ та отримати наступну його форму.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla \theta) + \frac{\partial K}{\partial z} + s, \quad (2.5)$$

де $D = K/C$ — гідравлічна дифузійність середовища (м²/с), інша фізична величина, яку можна обчислювати експериментально.

Форма рівняння Річардса-Клюта (2.3) також називається h - θ -формою. Форми (2.4), (2.5) називаються h - та θ -формами відповідно.

В подальшому будемо вважати, що функції K та C неперервні та невід'ємні, причому K також диференційована. Нерівність $C > 0$ означає, що функція залежності коефіцієнту насиченості від потенціалу тиску $\theta(h)$ монотонно зростає.

Зазвичай залежність $\theta(h)$ обирають так, щоб $\theta(0) = \theta_{max}$, тоді від'ємні значення потенціалу напору відповідають ненасиченим значенням θ , а додатні — значенню повного насичення θ_{max} .

Рівняння Річардса-Клюта розглядають в деякій обмеженій області Ω з гладкою межею $\Gamma = \partial\Omega$ в одно-, дво- чи тривимірному просторі. для постановки задачі масопереносу в Ω додатково повинні бути вказані початкові та крайові умови для процесу.

Початкова умова задається або для значення потенціалу тиску, або для значення коефіцієнту насиченості на Ω .

$$\begin{aligned} h(\omega, 0) &= h^0(\omega), \\ \theta(\omega, 0) &= \theta^0(\omega). \end{aligned} \tag{2.6}$$

Крайові умови зазвичай бувають першого або другого роду. Для крайової умови першого роду на межі може задаватися як значення потенціалу тиску, так і значення коефіцієнту насиченості, для умови другого роду на межі задається значення нормального потоку маси через межу q .

$$\begin{aligned} h(\gamma, t) &= h^D(t), \gamma \in \Gamma_1, \\ \theta(\gamma, t) &= \theta^D(t), \gamma \in \Gamma_2, \\ q(\gamma, t) &= q^D(t), \gamma \in \Gamma_3, \end{aligned} \tag{2.7}$$

де $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 = \Gamma$ і $\Gamma_i \cap \Gamma_j = \emptyset$ для $i \neq j$.

2.2. Рівняння Річардса-Клюта на графі

Розглянемо іригаційну систему, що складається з системи труб, що з'єднані між собою, як це показано, наприклад, на рис. 2.1.

Деякі з цих труб мають один відкритий кінець, що слугує або для під'єднання до системи подачі води чи корисних речовин (вхід маси), або для виходу цієї речовини для зрошування певної ділянки (вихід маси). Деякі труби обома кінцями під'єднані інших труб та слугують для переносу речовини без її втрати або набуття. Варто зазначити, що в деяких трубах один з кінців може бути закритим і, таким чином, через цей кінець труби потік маси відсутній. Для моделювання процесу розповсюдження речовини цією системою труб використовують тривимірне рівняння Річардса-Клюта, де областю моделювання є внутрішнє середовище системи труб, що є підмножиною тривимірного простору. Розв'язання рівняння Річардса-Клюта в тривимірному випадку вимагає великої кількості обчислень, тим самим займаючи дуже багато часу, тому задля підвищення ефективності проце-

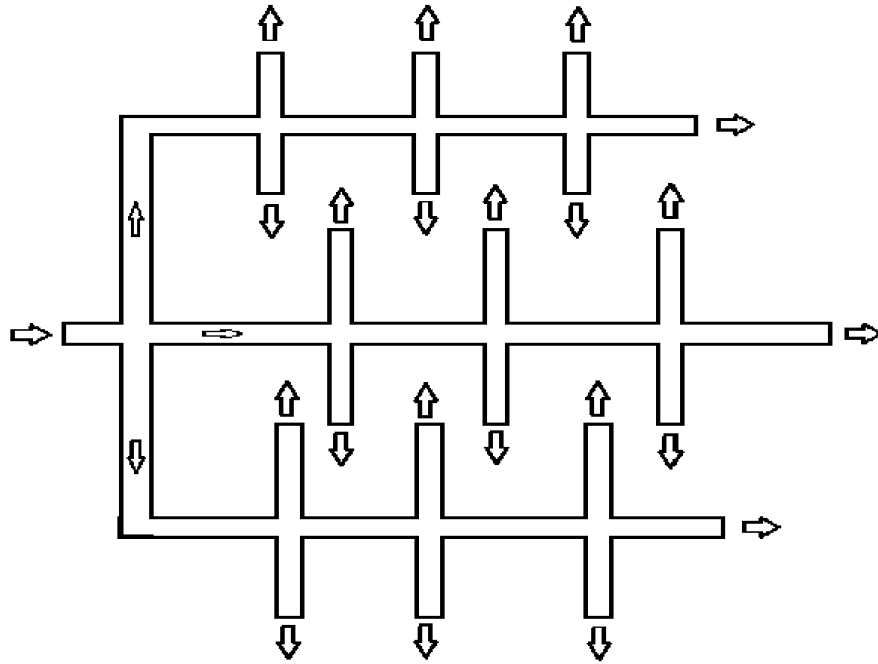


Рис. 2.1: Схема іригаційної системи.

су моделювання розповсюдження маси системою труб ми пропонуємо нову модель для даної системи, що базується на представленні системи труб як графу, що вкладений у дво- або тривимірний простір (рис. 2.2).

Тоді процес масопереносу в трубі можна описувати одновимірним рівнянням Річардса-Клюта, чисельні методи для якого працюють набагато ефективніше. Для того, щоб дана модель коректно представляла процес масопереносу у системі труб, накладемо наступні обмеження на потік та на систему труб:

1. труби мають круговий переріз,
2. діаметри перерізу кожної труби нехтовно малий в порівнянні з її довжиною та рівні між собою для всіх труб,
3. значення розв'язку тривимірного рівняння Річардса-Клюта в будь-якій точці довільної труби не залежить від положення точки на перерізі труби.

Наведені умови дозволяють розглядати труби як відрізки у просторі

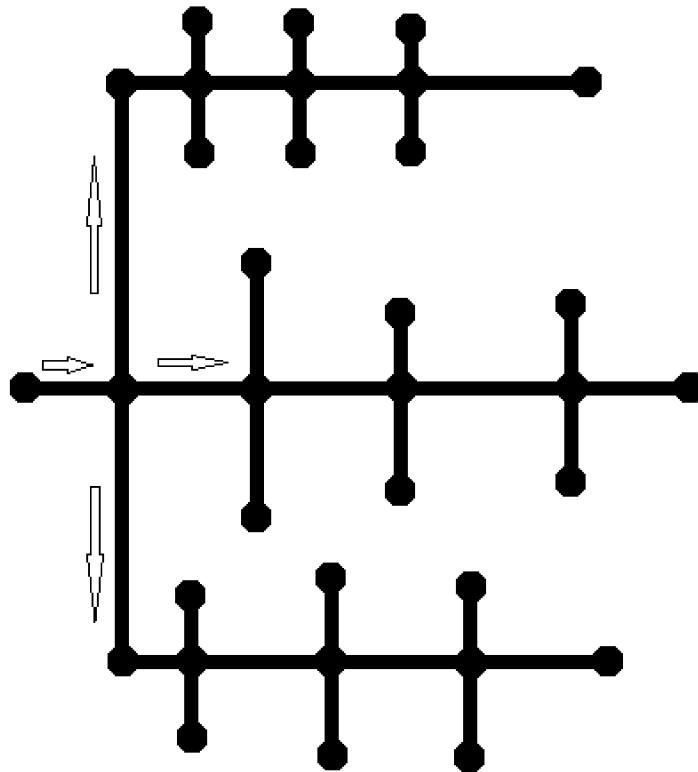


Рис. 2.2: Граф, що моделює іригаційну систему.

\mathbb{R}^3 з одновимірним рівнянням Річардса-Клюта, що задане на них. Таким чином, ми можемо розглянути процес масопереносу на деякому графі, що вкладений в простір \mathbb{R}^3 .

Нехай $G = (V, E)$ — мультиграф без петель, що вкладений у простір \mathbb{R}^3 , тобто кожна $v \in V$ має координати (x_v, y_v, z_v) , а кожне ребро $e = (v_1, v_2) \in E$ є гладкою кривою в просторі \mathbb{R}^3 , що з'єднує вершини v_1 та v_2 .

Нехай $f_e : [0, L_e] \rightarrow \mathbb{R}^3$ — параметричне задання ребра e в тривимірному просторі, L_e — довжина ребра e , $|\nabla f_e(x)| = 1, x \in [0, L_e]$ (тобто f_e зберігає довжини), $f_e(0) = v_1, f_e(L_e) = v_2$. Різні ребра e_1 та e_2 не перетинаються окрім як в кінцевих точках. Будемо вважати, що граф G зв'язний. Тоді рівняння Річардса-Клюта для потоку маси на ребрі e буде мати вигляд

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial e} \cdot (K(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial e} + i_z \right)) + s(\theta), \quad (2.8)$$

де i_z — вертикальний орт, $\frac{\partial}{\partial e}$ — похідна за напрямком уздовж ребра e . Залежності $K(\theta), \theta(h)$ представляють властивості пористого середовища у трубах та вважаються відомими. Будемо також вважати, що вони однакові для всіх ребер e . Розділимо множину вершин V на дві підмножини V_b та V_i , що будуть відповідати крайовим та внутрішнім вершинам графа G відповідно, а саме нехай

$$\begin{aligned} V_b &= \{v \in V : \exists! e \in E(e \in \text{Inc}(v))\}, \\ V_i &= V \setminus V_b, \end{aligned} \tag{2.9}$$

тобто крайовими вершинами назвемо ті вершини, інцидентними до яких є лише одне ребро. На крайових вершинах ми будемо задавати крайові умови для задачі масопереносу. Як і зазвичай, вони будуть задаватися одним з двох способів:

1. $\theta(v) = \theta^D$ або $h(v) = h^D$, $v \in V_b^1$ (умова першого роду),
2. $K(\theta)(\nabla_e h + i_z)|_{(x,y,z)=v} = q^D$, де $e \in \text{Inc}(v)$, $v \in V_b^2$ (умова другого роду),

де $V_b^1 \cup V_b^2 = V_b$, $V_b^1 \cap V_b^2 = \emptyset$.

У внутрішніх вершинах V_i виконується закон збереження маси, що виражається наступною формулою.

$$\sum_{k=1}^{N_1} K(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial e} + i_z \right) |_{\omega=v} = \sum_{k=1}^{N_2} K(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial e} + i_z \right) |_{\omega=v}, \tag{2.10}$$

де N_1, N_2 — кількість ребер e , для яких $f_e(0) = v$ або $f_e(L_e) = v$ відповідно. Окрім цього, повинна виконуватися умова неперервності потенціалу гідравлічного тиску h у внутрішніх вершинах.

Нехай θ^0 — неперервна на G функція. Тоді можна визначити початкову умову

$$\theta(x, y, z, 0) = \theta^0. \tag{2.11}$$

Означення 2.1. Функція $h : G \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ є розв'язком рівняння Річардса-Клюта на графі G , якщо h та визначена за нею $\theta(h)$ є неперервними на $G \times [0, T]$, двічі диференційовними на всіх ребрах $e \in E$, задовольняють рівнянням (2.8) для всіх $e \in E, t \in (0, T)$ та умовам балансу маси (2.10) для всіх $v \in V_i, t \in (0, T)$, а також задовольняють початковій умові (2.11) та крайовим умовам на $v \in V_b$.

2.3. Слабка форма рівняння Річардса-Клюта на графі

Слабка форма. Запишемо тепер рівняння Річардса-Клюта на графі G у слабкій формі та дамо означення слабого розв'язку для нього. Проте спочатку зробимо заміну змінних, що полегшить подальше доведення існування слабого розв'язку. Застосуємо перетворення Кірхгофа та введемо нову змінну.

$$u = \int_0^h K(\theta(s)) ds. \quad (2.12)$$

Тоді рівняння (2.13) та (2.10) будуть мати наступний вигляд.

$$\frac{\partial \theta(u)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial e} \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial e} + K(\theta) i_z \right) + s(\theta), \quad (2.13)$$

$$\sum_{k=1}^{N_1} \left(\frac{\partial u}{\partial e} + K(\theta) i_z \right) |_{\omega=v} = \sum_{k=1}^{N_2} \left(\frac{\partial u}{\partial e} + K(\theta) i_z \right) |_{\omega=v}. \quad (2.14)$$

Введемо до розгляду простори

$$L^r(e) = \{u : e \rightarrow \mathbb{R} | u \circ f_e \in L^r(0, L_e)\}, r \in \{1, 2, \infty\}, \quad (2.15)$$

що будуть представляти простори функцій, визначених на ребрах графу G . Також введемо аналогічні простори для всього графу.

$$L^r(G) = \bigoplus_{e \in E} L^r(e) \quad (2.16)$$

Для довільних суміжних ребер e_1, e_2 за допомогою комбінації функцій f_{e_1}, f_{e_2} побудуємо функцію f_{e_1, e_2} , що неперервно відображає відрізок $[0, L_{e_1} + L_{e_2}]$ в ці два сполучені ребра. Введемо за допомогою f_{e_1, e_2} наступний простір функцій на графі G .

$$H^1(G) = \bigcap_{e_1, e_2: e_1 \in \text{Adj}(e_2)} \{u : G \rightarrow \mathbb{R} \mid u|_{e_1 \cup e_2} \circ f_{e_1, e_2} \in H^1(0, L_{e_1} + L_{e_2}); \\ u|_{e \neq e_1, e_2} \circ f_e \in H^1(0, L_e)\}. \quad (2.17)$$

Нормою u в просторі $H^1(G)$ будемо вважати величину

$$\|u\|_{H^1(G)} = \sqrt{\sum_{e \in E} \|u|_e\|_{H^1(e)}^2} \quad (2.18)$$

Для представлення функцій з крайовою умовою $u(v) = 0, v \in V_b^1$ введемо також простір

$$V_G = \{u \in H^1(G) \mid u(v) = 0, v \in V_b^1\}. \quad (2.19)$$

Введемо до розгляду також наступні простори з відповідними нормами.

$$L^r(0, T; V_G). \quad (2.20)$$

$$W_1^1(0, T; L^r(G)), \quad (2.21)$$

$$L^r((0, T) \times G) \quad (2.22)$$

$$L^r(0, T; H^1(G)) \quad (2.23)$$

$$L^{r_1}(0, T; L^{r_2}(G)) \quad (2.24)$$

де $r_1, r_2, r \in \{1, 2, \infty\}$.

Домножимо тепер рівняння (2.13) на тестову функцію $\eta \in V_G$ та проінтегруємо частинами, сумуючи за всіма ребрами $e \in E$. Тоді, за рахунок рівняння балансу маси (2.14) у внутрішніх вузлах, ми маємо наступну рівність.

$$\sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial \theta(u)}{\partial t} \eta + \sum_{e \in E} \int_e \left(\frac{\partial u}{\partial e} + K(\theta)(i_z, e) \right) \frac{\partial \eta}{\partial e} = \sum_{e \in E} \int_e s \eta, \quad (2.25)$$

де (i_z, e) — скалярний добуток між векторами, що задають вертикальний напрямок та напрямок ребра відповідно.

Означення 2.2. Функція $u \in u^D + L^2(0, T; V_G)$ є слабким розв'язком рівняння Річардса-Клюта на графі G , якщо виконуються наступні умови:

1. $\theta(u) \in L^\infty(0, T; L^1(G)); \frac{\partial \theta(u)}{\partial t} \in L^2(0, T; V_G^*); \frac{\partial u}{\partial e} + K(\theta(u))i_z, s(\theta(u)) \in L^2((0, T) \times G)$,
2. для всіх $\eta \in L^2(0, T; V_G) \cap W_1^1(0, T; L^\infty(G)), \eta(T) = 0$ виконується

$$\int_0^T \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial \theta(u)}{\partial t} \eta + \int_0^T \sum_{e \in E} \int_e (\theta(u) - \theta^0) \frac{\partial \eta}{\partial t} = 0; \quad (2.26)$$

3. для всіх $\eta \in L^2(0, T; V)$ виконується

$$\int_0^T \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial \theta(u)}{\partial t} \eta + \int_0^T \sum_{e \in E} \int_e \left(\frac{\partial u}{\partial e} + K(\theta)(i_z, e) \right) \frac{\partial \eta}{\partial e} = \int_0^T \sum_{e \in E} \int_e s(\theta) \eta; \quad (2.27)$$

Визначимо наступні функції.

$$\Psi(z) = \sup_{\sigma \in R} \int_0^1 (z - \theta(\sigma s)) \sigma ds, \quad (2.28)$$

$$\Theta(z) = \Psi(\theta(z)). \quad (2.29)$$

Нехай для параметрів рівняння Річардса-Клюта виконуються наступні умови:

1. $\theta(u)$ монотонна по u та має опуклу C^1 -первісну Φ ;
2. $K(\theta(u))$ неперервна по u ;
3. $|K(\theta(z))e| + |s(\theta(z))| \leq c(1 + \Theta(z)^{1/2})$.

Нехай також для функцій θ^0 та u^D , що задають початкову та крайові умови, виконуються наступні властивості:

1. $\Psi(\theta^0) \in L^1(G)$ та $\exists u^0 : \theta^0 = \theta(u^0)$;
2. $u_D \in L^2(0, T; H^1(G)) \cap L^\infty((0, T) \times G)$, $\frac{\partial u^D}{\partial t} \in L^1(0, T; L^\infty(G))$.

2.4. Існування слабкого розв'язку

Процедура доведення існування слабкого розв'язку базується на відповідних результатах для звичайних областей в одновимірному випадку, що описані у класичній роботі [11]. Для того, щоб використовувати теорему про існування слабкого розв'язку та допоміжні леми з цієї роботи, ми спочатку визначимо декілька властивостей введених у розділі 2.3 просторів.

По-перше, розглянемо простори $L^r(G)$. Пронумеруємо ребра $e \in E$ та розглянемо відображення $f_G : [0, \sum_{e \in E} L_e] \rightarrow G$, таке що

$$f_G(x) = f_{e_k}(x - \sum_{i < k} L_{e_i}). \quad (2.30)$$

Тоді за допомогою функції f_G можна визначити бієктивне відображення між просторами $L^r(G)$ та $L^r(0, \sum_{e \in E} L_e)$. Оскільки кількість ребер скінченна, то норми в цих просторах є еквівалентними, отже дана бієкція є гомеоморфізмом. Це означає, що простори $L^r(G)$ та $L^r(0, \sum_{e \in E} L_e)$ мають ті ж самі топологічні властивості.

Тепер покажемо деякі властивості простору $H^1(G)$. Як перетин банахових просторів, цей простір також є банаховим, причому, оскільки функції з Соболевського простору $H^1(a, b)$ є неперервними, то функції з $H^1(G)$ є неперервними у внутрішніх вершинах графу G , а звуження функції u з $H^1(G)$ на ребро e є функцією з $H^1(e)$.

Варто відзначити, що, оскільки кількість ребер в графі G скінченна, то, аналогічно просторам $L^r(G)$, норми, що визначаються означеннями просто-

рів

$$H_{e_1, e_2} = \{u : G \rightarrow \mathbb{R} \mid |u|_{e_1 \cup e_2} \circ f_{e_1, e_2} \in H^1(0, L_{e_1} + L_{e_2}); \\ |u|_{e \neq e_1, e_2} \circ f_e \in H^1(0, L_e)\}. \quad (2.31)$$

для довільних суміжних ребер $e_1, e_2 \in E$ є еквівалентними на просторі $\bigoplus_{e \in E} H^1(e)$ та кожна з них еквівалентна нормі (2.18). Таким чином, дані норми задають одну й ту саму топологію на просторі $\bigoplus_{e \in E} H^1(e)$. З цього випливає, що можна побудувати гомеоморфізм між простором $H^1(G)$ та деяким замкненим лінійним підпростором банахового простору $\bigoplus_{e \in E} H^1(e)$.

Введемо поняття міри підмножини графа G наступним чином.

$$\mu(A \subset G) = \sum_{e \in E} \mu_e(A \cap e), \quad (2.32)$$

де μ_e - звичайна міра, що відповідає довжині ребра.

Основним наслідком існування гомеоморфізму між $H^1(G)$ та деяким підпростором $\bigoplus_{e \in E} H^1(e)$ є наступна теорема.

Теорема 2.1. *Якщо послідовність u_i обмежена в $H^1(G)$, то існує елемент u з $H^1(G)$ та підпослідовність $u_{i_j} \in H^1(G)$, такі що u_{i_j} прямує до u майже всюди на G .*

Доведення. Пронумеруємо пари всіх суміжних ребер графу G . Тоді розглянемо для першої пари ребер e_1, e_2 простір H_{e_1, e_2} , що фігурує в означенні простору $H^1(G)$. З означення $H^1(G)$ випливає, що послідовність v_i належить даному простору. Тоді для звужень функцій $v_i = u_i|_{e_1 \cup e_2}$ на два суміжних ребра e_1, e_2 ми можемо знайти підпослідовність v_{i_k} та функцію v з $H^1(e_1 \cup e_2)$, такі що v_{i_k} майже всюди прямує до v в $H^1(e_1 \cup e_2)$. Кожній v_{i_k} відповідає деяка u_{i_k} , що визначена на всьому графі G . Таким чином ми визначаємо послідовність $w_k = u_{i_k}$.

Тоді розглянемо звуження функцій з цієї підпослідовності на ребро e , не рівне e_1, e_2 . Тоді можна знайти підпослідовність w_{k_j} та функцію $w \in H^1(e)$, таку що підпослідовність w_{k_j} прямує до границі w . Проробляючи дану про-

цедуру пошуку підпослідовності для всіх інших ребер, ми отримуємо збіжну у просторі H_{e_1, e_2} підпослідовність v_i послідовності u_i .

Для цієї підпослідовності ми повторимо процедуру пошуку підпослідовностей для кожної пари суміжних ребер e_j, e_k та кожного простору H_{e_j, e_k} , що залишилися. Таким чином ми отримуємо підпослідовність v_i послідовності u_i , що збігається до деякої функції v в просторі $\bigoplus_{e \in E} H^1(e)$.

Оскільки функція v одночасно належить всім просторам H_{e_j, e_k} , то вона належить простору $H^1(G)$. \square

Аналогічний теор. 2.1 є справедливим і для обмежених послідовностей з простору V_G .

Аналогічним чином можна побудувати наступні гомеоморфізми.

$$L^r(0, T; V_G) \simeq L^r(0, T; V), \quad (2.33)$$

$$W_1^1(0, T; L^r(G)) \simeq W_1^1(0, T; L^r(0, L)), \quad (2.34)$$

$$L^r((0, T) \times G) \simeq L^r((0, T) \times [0, L]), \quad (2.35)$$

$$L^r(0, T; H^1(G)) \simeq L^r(0, T; H), \quad (2.36)$$

$$L^{r_1}(0, T; L^{r_2}(G)) \simeq L^{r_1}(0, T; L^{r_2}(0, L)), \quad (2.37)$$

де H — замкнений лінійний підпростір $\bigoplus_{e \in E} H^1(e)$, гомеоморфний $H^1(G)$, V — замкнений лінійний підпростір $\bigoplus_{e \in E} H^1(e)$, гомеоморфний V_G , $r_1, r_2, r \in \{1, 2, \infty\}$.

Розглянемо властивості функцій Ψ та Φ , що випливають з їх означення та з властивостей C .

По-перше, ми маємо для функції Ψ наступне представлення:

$$\Psi(z) = \sup_{\sigma \in \mathbb{R}} \int_0^1 (z - \theta(s\sigma)) \cdot \sigma ds = \sup_{\sigma \in \mathbb{R}} (z \cdot \sigma - \Phi(\sigma) + \Phi(0)). \quad (2.38)$$

З опуклості Φ випливає, що

$$\begin{aligned}\Theta(z) &= \Psi(\theta(z)) = \theta(z) \cdot z - \Phi(z) + \Phi(0) = \\ &= \int_0^1 (\theta(z) - \theta(sz)) \cdot z ds = \int_0^z (\theta(z) - \theta(s)) ds.\end{aligned}\quad (2.39)$$

Також з опуклості Φ випливає нерівність

$$\Theta(z) - \Theta(z_0) \geq (\theta(z) - \theta(z_0)) \cdot z_0 \quad (2.40)$$

для всіх z, z_0 .

Підставляючи у (2.40) вираз $\sigma = \frac{1}{\delta|\theta(z)|}b(z)$, ми отримуємо наступну нерівність.

$$\Theta(z) \geq \int_0^1 (\theta(z) - \theta(s\sigma)) \cdot \sigma ds \geq \frac{1}{\delta} (|\theta(z)| - \sup_{|\sigma'| \leq \frac{1}{\delta}} |\theta(\sigma')|). \quad (2.41)$$

Звідси випливає, що

$$|\theta(z)| \leq \delta\Theta(z) + \sup_{|\sigma| \leq \frac{1}{\delta}} |\theta(\sigma)|. \quad (2.42)$$

Властивості параметрів рівняння Річардса-Клюта разом з властивостями функцій, що задають початково-крайові умови, з пункту 2.3 та властивостями просторів $H^1(G)$ та $L^r(G)$ дозволяють нам довести наступні результати, спираючись на результати, описані в роботі [11].

Лема 2.1. *Нехай крайова умова u^D задовольняє умовам підрозділу 2.3. Тоді, якщо*

$$u \in u^D + L^r(0, T; V) \quad (2.43)$$

задовольняє відповідним умовам з пункту 2.3, то

$$\Theta(u) \in L^\infty(0, T; L^1(\Omega)) \quad (2.44)$$

і майже для всіх t виконується рівність

$$\begin{aligned} \int_G \Theta(u(t)) - \int_G \Theta(u^0) &= \int_0^t \int_G \langle \partial_t \theta(u), u - u^D \rangle + \\ &+ \int_0^t (\theta(u) - \theta(u^0)) \partial_t u^D + \int_G (\theta(u(t)) - \theta(u^0)) u^D(t). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Доведення. Використовуючи гомеоморфізми (2.33)-(2.37), ми можемо використати лему 1.5 з роботи [11] та отримати, що

$$\Theta(u) \in L^\infty(0, T; L^1(\Omega)) \quad (2.46)$$

і майже для всіх t виконується рівність

$$\begin{aligned} \int_0^L \Theta(u(t)) - \int_0^L \Theta(u^0) &= \int_0^t \int_0^L \langle \partial_t \theta(u), u - u^D \rangle + \\ &+ \int_0^t (\theta(u) - \theta(u^0)) \partial_t u^D + \int_0^L (\theta(u(t)) - \theta(u^0)) u^D(t). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Знову використовуючи гомеоморфізми (2.33)-(2.37), ми отримуємо потрібний результат. \square

Лема 2.2. *Якщо дві функції v_1, v_2 з $H^1(G)$ задовольняють оцінкам*

$$\|v_i\|_{H^1(G)} \leq M, \|\Theta(v_i)\|_{L^1(G)} \leq M, i = 1, 2 \quad (2.48)$$

та

$$\sum_{e \in E} \int_e (\theta(v_2) - \theta(v_1))(v_2 - v_1) \leq \delta \quad (2.49)$$

для деяких M, δ , то існує неперервна функція $\omega_M : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, така що $\omega(0) = 0$ та виконується нерівність

$$\sum_{e \in E} \int_e |\theta(v_2) - \theta(v_1)| \leq \omega_M(\delta). \quad (2.50)$$

Доведення. За рахунок гомеоморфізмів (2.33)-(2.37) ми маємо, що для функцій виконуються наступні оцінки

$$\|v_i\|_{H^1(G)} \leq M, \|\Theta(v_i)\|_{L^1(G)} \leq M, i = 1, 2. \quad (2.51)$$

Тоді, використовуючи лему 1.7 з роботи [11], ми отримуємо шуканий результат. □

Лема 2.3. *Нехай послідовність u_n слабо збігається до u у просторі $L^2(0, T; H^1(G))$, причому виконуються оцінки*

$$\frac{1}{h} \int_0^{T-h} \sum_{e \in E} \int_e (\theta(u_n(t+h)) - \theta(u_n(t)))(u_n(t+h) - u_n(t)) de \leq C, \quad (2.52)$$

$$\sum_{e \in E} \int_e \Theta(u_n(t)) \leq C \quad (2.53)$$

для $0 < h < T$.

Тоді

$$\theta(u_n) \rightarrow \theta(u), \quad (2.54)$$

$$\Theta(u_n) \rightarrow \Theta(u), \quad (2.55)$$

причому (2.54) має місце на узвізі у просторі $L^1((0, T) \times G)$, а (2.55) — майже всюди по t .

Доведення. Використовуючи гомеоморфізми (2.33)-(2.37), ми можемо застосувати лему 1.9 з роботи [11]. □

Тоді, маючи відповідні леми, ми можемо довести теорему існування слабого розв'язку для рівняння Річардса-Клюта на графі G .

Теорема 2.2. *Нехай виконуються умови на параметри рівняння Річардса-Клюта на графі за пункту 2.3.*

Тоді слабкий розв'язок рівняння Річардса-Клюта на графі G існує.

Доведення. За рахунок існування гомеоморфізмів (2.33)-(2.37), справедливості лем 2.1-2.3 та теореми 2.1 про підпоследовності, ми можемо використати теорему існування слабкого розв'язку з роботи [11], замінивши простори для рівняння Річардса-Клюта на графі на гомеоморфні їм простори одновимірних функцій, а посилання на леми 1.5 1.7 та 1.9 в роботі [11] на леми 2.1, 2.2 та 2.3. \square

Центральною величиною у доведенні цього результату є так званий інтеграл енергії, що у випадку рівняння Річардса-Клюта на графі G має наступну форму.

$$\int_0^T \sum_{e \in E} \int_e (\Theta(u) + |\nabla u|^2). \quad (2.56)$$

Зауваження 2.1. Ребра графа G не обов'язково мають бути прямими відрізками, в загальному випадку вони можуть задаватися гладкою функцією. Виходячи з цього, (i_z, e) в рівнянні буде неперервною функцією від положення точки на ребрі $e \in E$.

Зауваження 2.2. Площі перерізів труб можуть бути різними. Тоді рівняння (7) для ребер графу залишається незмінним, а рівняння балансу маси набуває нової форми.

$$\sum_{k=1}^{N_1} S_e K(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial e} + i_z \right) \Big|_{n(x,y,z)=v} = \sum_{k=1}^{N_2} S_e K(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial e} + i_z \right) \Big|_{n(x,y,z)=v}, \quad (2.57)$$

де S_e — площа поперечного перерізу труби, що відповідає ребру $e \in E$.

2.5. Стійкість розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі від початково-крайових умов

Розглянемо тепер питання стійкості розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі відносно збурень у початково-крайових умовах.

Нехай ми маємо рівняння Річардса-Клюта на графі G у формі (2.8) та нехай, як і раніше, множина крайових вершин графу V_b розділяється на

дві підмножини, на яких задані крайові умови першого та другого роду відповідно.

Так само, нехай функція θ^0 задає початкову умову для рівняння (2.8).

$$\begin{aligned} h(v) &= h_{1,2}^D(v, t), v \in V_b^1 \\ K \left(\frac{\partial h}{\partial e} + (i_z, e) \right) \Big|_{\omega=v} &= q_{1,2}(v, t), v \in V_b^2. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Нехай θ_1 та θ_2 — розв'язки рівняння Річардса-Клюта на графі G з початковими $\theta_1^0(z), \theta_2^0(z)$ та крайовими h_1^0, h_2^0 та q_1, q_2 умовами відповідно. Тоді однозначно визначені потенціали тиску для розв'язків рівняння $h_1 = h(\theta_1), h_2 = h(\theta_2)$. Також, нехай функція гідравлічної кондуктивності задовольняє наступним нерівностям.

$$|K(h_1) - K(h_2)| \leq A_0 |h_1 - h_2|, K_1 \geq K \geq \epsilon_0 > 0, \quad (2.59)$$

де A_0, ϵ_0, K_1 — константи. Також вважатимемо, що для розв'язків h_1, h_2 в деяких околах вершин $v \in V_b^1$ виконується умова $|\nabla(h_1 - h_2)| \leq C|h_1 - h_2|$ для деякої константи C .

Помножимо тоді рівняння (2.8) на деяку функцію η з простору V_G та проінтегруємо частинами по графу G , застосовуючи рівняння балансу маси (2.10) у внутрішніх вершинах графу. Тоді ми отримаємо наступну рівність.

$$\begin{aligned} & \sum_{e \in E} \int_e \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial e} \left(K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial e} + 1 \right) \right) \right) \eta de = \\ & = \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial \theta}{\partial t} \eta de + \sum_{e \in E} \int_e K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial e} + 1 \right) \frac{\partial \eta}{\partial e} de - \sum_{v \in V_b^2} q \eta(v) = 0. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Підставляючи у (2.60) два різних розв'язки θ_1 та θ_2 та віднімаючи отримані рівності, ми маємо наступну рівність.

$$\sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial (\theta_1 - \theta_2)}{\partial t} \eta de = I_1 - I_2 + Q, \quad (2.61)$$

де

$$I_1 = \sum_{e \in E} \int_e (K(h_2) - K(h_1)) \left(\frac{\partial h_2}{\partial e} + 1 \right) \frac{\partial \eta}{\partial e} de, \quad (2.62)$$

$$I_2 = \sum_{e \in E} \int_e K(h_1) \left(\frac{\partial h_1}{\partial e} - \frac{\partial h_2}{\partial e} \right) \frac{\partial \eta}{\partial e} de, \quad (2.63)$$

$$Q = \sum_{v \in V_b^2} (q_1 - q_2) \eta(v). \quad (2.64)$$

Для того, щоб оцінити (2.61), ми оберемо функцію η спеціальним чином.

Для цього нам знадобляться допоміжні функції. Нехай функція $\mu : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ — неперервна та диференційована, причому для неї виконуються наступні умови:

1. $\mu(x) = 0$ для $x \leq 0$,
2. $\mu(x) = 1$ для $x \geq 1$,
3. для $0 < x < 1$ функція μ монотонно зростає,
4. $\mu'(x) \leq M$ для $x \in \mathbb{R}$.

Нехай $\eta_\varepsilon(\xi) = \mu(\xi/\varepsilon)$ — сімейство функцій з параметром.

Тоді ми маємо

$$\eta_\varepsilon(\xi) \rightarrow \text{sign}(\xi), \quad \varepsilon \rightarrow 0, \quad (2.65)$$

$$f(\varepsilon) = \max_{\xi} (\xi^2 \mu'_\varepsilon(\xi)) \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (2.66)$$

Нехай $\eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, \xi)$ — сімейство функцій з двома параметрами, визначене наступним чином.

$$\eta_{\delta, \varepsilon}(x, \xi) = \begin{cases} \mu(f_e^{-1}(\omega)/\delta) \eta_\varepsilon(\xi), & \omega \in e, e \in \text{Inc}(v), v \in V_b^1, \\ \eta_\varepsilon(\xi), & \text{інакше.} \end{cases} \quad (2.67)$$

Ми вважаємо, що для всіх ребер $e \in \text{Inc}(v)$, таких що $v \in V_b^1$, виконується умова $f_e(0) = v$. Якщо це не так, то можна визначити функцію $g_e : [0, L_e] \rightarrow \mathbb{R}^3$ як

$$g_e(x) = f_e(L_e - x) \quad (2.68)$$

та використовувати g_e замість f_e при параметричному представленні ребра e .

Тоді для функцій $\eta_{\delta,\varepsilon}$ ми маємо

$$0 \leq \eta_{\delta,\varepsilon}(\omega, \xi) \leq 1, \quad (2.69)$$

$$\eta_{\delta,\varepsilon}(\omega, \xi) \leq \eta_\varepsilon(\xi), \quad (2.70)$$

$$\eta_{\delta,\varepsilon}(\omega, \xi) \rightarrow \eta_\varepsilon(\xi), \quad \delta \rightarrow 0. \quad (2.71)$$

Оберемо функцію η в (2.61) як

$$\eta(\omega) = \eta_{\delta,\varepsilon}(\omega, h_1(\omega) - h_2(\omega)). \quad (2.72)$$

Тоді функція η буде непервною на графі G , диференційованою на кожному ребрі e та виконуватиметься крайова умова $\eta(v) = 0, v \in V_b^1$.

I_1 та I_2 містять під інтегралом похідну по ребру $\frac{\partial \eta}{\partial e}$, що виражається як

$$\frac{\partial \eta}{\partial e} = \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta,\varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) + \frac{\partial}{\partial \xi} \eta_{\delta,\varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) \left(\frac{\partial h_1}{\partial e} - \frac{\partial h_2}{\partial e} \right). \quad (2.73)$$

Нехай

$$I_1 = I_{11} + I_{12}, \quad I_2 = I_{12} + I_{22}, \quad (2.74)$$

де

$$I_{11} = \sum_{e \in E} \int_e (K(h_2) - K(h_1)) \left(\frac{\partial h_2}{\partial e} + (i_z, e) \right) \left(\frac{\partial h_1}{\partial e} - \frac{\partial h_2}{\partial e} \right) \times \quad (2.75)$$

$$\times \frac{\partial}{\partial \xi} \eta_{\delta,\varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de,$$

$$I_{12} = \sum_{e \in E} \int_e (K(h_2) - K(h_1)) \left(\frac{\partial h_2}{\partial e} + (i_z, e) \right) \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta,\varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de, \quad (2.76)$$

$$I_{21} = \sum_{e \in E} \int_e K(h_1) \left(\frac{\partial h_1}{\partial e} - \frac{\partial h_2}{\partial e} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \xi} \eta_{\delta,\varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de, \quad (2.77)$$

$$I_{22} = \sum_{e \in E} \int_e K(h_1) \left(\frac{\partial h_1}{\partial e} - \frac{\partial h_2}{\partial e} \right) \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de. \quad (2.78)$$

Тоді рівність (2.61) набуває наступного вигляду.

$$\sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_1 - \theta_2)}{\partial t} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de = (I_{11} - I_{21}) + (I_{12} - I_{22}) + Q. \quad (2.79)$$

Оцінимо праву частину отриманої рівності.

Для I_{11} та I_{21} , використовуючи нерівність Коші-Шварца, ми маємо

$$\begin{aligned} |I_{11}| \leq \sum_{e \in E} \int_e A_0 |h_1 - h_2| \left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right) \left| \frac{\partial h_1}{\partial e} - \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| \times \\ \times \frac{\partial}{\partial \xi} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de \leq \sqrt{I_{21} I_3}, \end{aligned} \quad (2.80)$$

де

$$\begin{aligned} I_3 = \sum_{e \in E} \int_e A_0^2 (h_1 - h_2)^2 \left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right)^2 \times \\ \times \frac{\partial}{\partial \xi} \eta_{\delta, \varepsilon}(z, h_1 - h_2) / K(h_1) de \leq A_0^2 f(\varepsilon) \sum_{e \in E} \int_e \frac{\left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right)^2}{K(h_1)} de. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Комбінуючи I_{21} та I_3 , отримуємо нерівність

$$\sqrt{I_{21} I_3} = \sqrt{2I_{21} \frac{I_3}{2}} \leq \frac{2I_{21} + I_3/2}{2} = I_{21} + I_3/4. \quad (2.82)$$

Тоді для I_{11} та I_{21} ми в результаті маємо

$$\begin{aligned} |I_{11} - I_{21}| \leq \frac{1}{4} A_0^2 f(\varepsilon) \sum_{e \in E} \int_e \frac{\left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right)^2}{K(h_1)} de \leq \\ \leq \frac{1}{4} A_0^2 f(\varepsilon) M_1 |E| = A_1 f(\varepsilon), \end{aligned} \quad (2.83)$$

оскільки функція під інтегралами неперервна і кожен з них може бути обмежений константою M_1 . A_1 — константа.

Оцінімо I_{12} наступним чином.

$$\begin{aligned}
|I_{12}| &\leq A_0 \sum_{e \in E} \int_e |h_1 - h_2| \left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right) \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de \leq \\
&\leq A_0 \sum_{e \in E} \int_e |h_1 - h_2| \left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right) \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de \leq \\
&\leq A_0 \sqrt{\sum_{e \in E} \int_e (h_1 - h_2)^2 \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de} \times \\
&\quad \times \sqrt{\sum_{e \in E} \int_e \left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right)^2 \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de}. \tag{2.84}
\end{aligned}$$

Перший корінь може бути оцінений як

$$\begin{aligned}
&\sqrt{\sum_{e \in E} \int_e (h_1 - h_2)^2 \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de} \leq \\
&\leq \sqrt{\sum_{e \in E'} \int_e (h_1 - h_2)^2 \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de} = \\
&= \sqrt{\sum_{e \in E'} \int_e (h_1 - h_2)^2 \frac{\partial}{\partial e} \mu(f_e^{-1}(\omega)/\delta) de} \leq \tag{2.85} \\
&\leq \sqrt{\sum_{e \in E'} \int_e (h_1 - h_2)^2 \frac{M}{\delta} de} \rightarrow \\
&\rightarrow M \sqrt{\sum_{v \in V_b^1} (h_1^D(v) - h_2^D(v))^2} \leq M_2 \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D(v) - h_2^D(v)|, \quad \delta \rightarrow 0,
\end{aligned}$$

де $E' = \{e \in E | e \in \text{Inc}(v), v \in V_b^2\}$.

Другий корінь оцінюється згідно з наступними нерівностями.

$$\begin{aligned}
& \sqrt{\sum_{e \in E} \int_e \left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right)^2 \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de} \leq \\
& \leq \sqrt{\sum_{e \in E'} \int_e \left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right)^2 \frac{\partial}{\partial e} \mu(f_e^{-1}(\omega)/\delta) de} \leq \\
& \leq \sqrt{\sum_{e \in E'} \int_e \left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right)^2 \frac{M}{\delta} de} \leq M_3 M |E|.
\end{aligned} \tag{2.86}$$

Тоді для I_{12} ми в результаті маємо

$$|I_{12}| \leq A_0 M \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D - h_2^D| M_2 M M_3 |E| = A_2 \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D - h_2^D|, \quad \delta \rightarrow 0, \tag{2.87}$$

де A_2 — константа.

I_{22} оцінюється наступним чином.

$$\begin{aligned}
|I_{22}| & \leq \sum_{e \in E} \int_e K(h_1) \left| \frac{\partial h_1}{\partial e} - \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de \leq \\
& K_1 \sum_{e \in E} \int_e |h_1 - h_2| \left(\left| \frac{\partial h_2}{\partial e} \right| + 1 \right) \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de \leq \\
& \leq CK_1 \sum_{e \in E'} \int_e (h_1 - h_2)^2 \frac{M}{\delta} de \rightarrow A_3 \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D(v) - h_2^D(v)|, \quad \delta \rightarrow 0.
\end{aligned} \tag{2.88}$$

де A_3 — константа.

Для Q ми маємо

$$Q \leq \sum_{v \in V_b^2} |q_1(v) - q_2(v)|. \tag{2.89}$$

Поміняємо місцями розв'язки θ_1 та θ_2 в рівності (2.79) та розглянемо нову рівність

$$\sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_2 - \theta_1)}{\partial t} \eta_{\delta, \varepsilon}(z, h_1 - h_2) de = (I_{11}^r - I_{12}^r) + (I_{21}^r - I_{22}^r) + Q^r, \tag{2.90}$$

де

$$I_{11}^r = \sum_{e \in E} \int_e (K(h_1) - K(h_2)) \left(\frac{\partial h_1}{\partial e} + (i_z, e) \right) \left(\frac{\partial h_2}{\partial e} - \frac{\partial h_1}{\partial e} \right) \times \quad (2.91)$$

$$\times \frac{\partial}{\partial \xi} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de,$$

$$I_{12}^r = \sum_{e \in E} \int_e (K(h_1) - K(h_2)) \left(\frac{\partial h_1}{\partial e} + (i_z, e) \right) \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_2 - h_1) de, \quad (2.92)$$

$$I_{21}^r = \sum_{e \in E} \int_e K(h_2) \left(\frac{\partial h_2}{\partial e} - \frac{\partial h_1}{\partial e} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \xi} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_2 - h_1) de, \quad (2.93)$$

$$I_{22}^r = \sum_{e \in E} \int_e K(h_2) \left(\frac{\partial h_2}{\partial e} - \frac{\partial h_1}{\partial e} \right) \frac{\partial}{\partial e} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_2 - h_1) de, \quad (2.94)$$

$$Q^r = \sum_{v \in V_b^2} (q_2 - q_1) \eta(v). \quad (2.95)$$

$I_{11}^r, I_{12}^r, I_{21}^r, I_{22}^r$ та Q^r можуть бути оцінені так само, як і $I_{11}, I_{12}, I_{21}, I_{22}$ та Q , і для них ми маємо наступні оцінки.

$$|I_{11}^r - I_{21}^r| \leq A_1 f(\varepsilon), \quad (2.96)$$

$$|I_{12}^r| \leq A_2 \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D - h_2^D|, \quad (2.97)$$

$$|I_{22}^r| \leq A_3 \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D(v) - h_2^D(v)|, \quad (2.98)$$

$$Q \leq \sum_{v \in V_b^2} |q_1(v) - q_2(v)|. \quad (2.99)$$

Використовуючи властивості (2.69)-(2.71), з вищенаведених оцінок ми отримуємо

$$\begin{aligned}
& \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_1 - \theta_2)}{\partial t} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_1 - h_2) de + \right. \\
& \left. + \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_2 - \theta_1)}{\partial t} \eta_{\delta, \varepsilon}(\omega, h_2 - h_1) de \right) = \\
& = \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_1 - \theta_2)}{\partial t} \mu \left(\frac{h_1 - h_2}{\varepsilon} \right) de + \\
& + \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_2 - \theta_1)}{\partial t} \mu \left(\frac{h_2 - h_1}{\varepsilon} \right) de \leq \quad (2.100) \\
& \leq 2A_1 f(\varepsilon) + 2A_2 \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D - h_2^D| + \\
& + 2A_3 \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D - h_2^D| + 2 \sum_{v \in V_b^2} |q_1 - q_2| = \\
& = C_0 f(\varepsilon) + C_1 \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D - h_2^D| + C_2 \sum_{v \in V_b^2} |q_1 - q_2|,
\end{aligned}$$

де C_0, C_1, C_2 — нові константи.

З властивостей (2.65)-(2.66) ми отримуємо

$$\begin{aligned}
& \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_1 - \theta_2)}{\partial t} \mu \left(\frac{h_1 - h_2}{\varepsilon} \right) de + \right. \\
& \left. + \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_2 - \theta_1)}{\partial t} \mu \left(\frac{h_2 - h_1}{\varepsilon} \right) de \right) = \\
& = \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_1 - \theta_2)}{\partial t} \text{sign}(h_1 - h_2) de + \\
& + \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_2 - \theta_1)}{\partial t} \text{sign}(h_2 - h_1) de. \quad (2.101)
\end{aligned}$$

В частині множини $G \times [0, T)$, де $\theta_1 = \theta_{max}$ та $\theta_2 = \theta_{max}$, обидва інтеграли дорівнюють 0. В іншій частині множини $G \times [0, T)$ ми маємо рівність $\text{sign}(h_1 - h_2) = \text{sign}(\theta_1 - \theta_2)$, оскільки $\theta(h)$ є монотонною. Тоді ми

можемо підставити цю рівність в інтеграл та, використовуючи рівність $\max(0, \theta_1 - \theta_2) + \max(0, \theta_2 - \theta_1) = |\theta_1 - \theta_2|$, ми отримуємо наступну нерівність.

$$\begin{aligned}
& \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_1 - \theta_2)}{\partial t} \operatorname{sign}(h_1 - h_2) de + \\
& + \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_2 - \theta_1)}{\partial t} \operatorname{sign}(h_2 - h_1) de = \\
& = \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_1 - \theta_2)}{\partial t} \operatorname{sign}(\theta_1 - \theta_2) de + \\
& + \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial(\theta_2 - \theta_1)}{\partial t} \operatorname{sign}(\theta_2 - \theta_1) de = \\
& = \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial \max(0, \theta_1 - \theta_2)}{\partial t} de + \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial \max(0, \theta_2 - \theta_1)}{\partial t} de = \\
& = \sum_{e \in E} \int_e \frac{\partial |\theta_1 - \theta_2|}{\partial t} de \leq C_1 \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D - h_2^D| + C_2 \sum_{v \in V_b^2} |q_1 - q_2|.
\end{aligned} \tag{2.102}$$

Інтегруючи по часу, ми нарешті отримуємо нерівність

$$\begin{aligned}
& \sum_{e \in E} \int_e |\theta_1 - \theta_2| de \leq \sum_{e \in E} \int_e |\theta_1^0 - \theta_2^0| de + \\
& + C_1 \int_0^T \sum_{v \in V_b^1} |h_1^D - h_2^D| dt + C_2 \int_0^T \sum_{v \in V_b^2} |q_1 - q_2| dt.
\end{aligned} \tag{2.103}$$

Дана нерівність дає оцінку для збурень розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі лінійною функцією від збурень початкових та крайових умов першого та другого роду.

Якщо функція $h(\theta)$ задовольняє умовам $|h'(\theta)| \leq \text{const}$ та $\theta(h_1^D) \leq \theta_{\max}$, $\theta(h_2^D) \leq \theta_{\max}$, то ми можемо переписати рівність (32).

$$\begin{aligned}
& \sum_{e \in E} \int_e |\theta_1(\omega, T) - \theta_2(\omega, T)| de \leq \sum_{e \in E} \int_e |\theta_1^0(\omega) - \theta_2^0(\omega)| de + \\
& + C_3 \sum_{v \in V_b^1} |\theta_1^D(v, t) - \theta_2^D(v, t)| dt + C_2 \sum_{v \in V_b^2} |q_1(v, t) - q_2(v, t)| dt,
\end{aligned} \tag{2.104}$$

де C_3 — константа.

Варто відзначити, що запропоноване доведення справедливе і для випадку негомогенного середовища, коли на різних ребрах графу задаються свої функції $K_i(h)$ та $\theta_i(h)$. Тоді, для того щоб перенести доведення на негомгенний випадок, ми маємо тільки обрати константу A_0 , щоб вона задовольняла (2.59). Обрати ми її можемо наступним чином.

$$A_0 = \max_i \left(\max_h K'_i(h) \right). \quad (2.105)$$

Варто відзначити, що якщо граф G має структуру ланцюга або взагалі складаються з одного ребра, що представляється прямим відрізком, то наведений результат стійкості розв'язку можна інтерпретувати як оцінку збурень розв'язку стандартного одновимірного рівняння Річардса-Клюта в залежності від збурень в початкових та крайових умовах. В цьому випадку на одному з кінців відрізка задається умова першого роду, на іншому — другого.

2.6. Структура матриці системи лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі

Звернімося тепер до теми отримання розв'язків рівняння Річардса-Клюта на графі. Оскільки для одновимірного рівняння Річардса-Клюта аналітичні розв'язки відомі лише для обмеженої кількості часткових випадків рівняння зі спрощеними параметрами, і частіше для знаходження розв'язків використовується апроксимація їх наближеними розв'язками, отриманими за допомогою чисельних методів, то, беручи до уваги, що одновимірне рівняння Річардса-Клюта є частковим випадком рівняння Річардса-Клюта на графі, для знаходження розв'язків рівняння Річардса-Клюта на графі будемо використовувати чисельні методи.

Дискретизуємо ребра як звичайні одновимірні відрізки. Тоді на кожному ребрі ми будемо мати різницеве рівняння, яке кожен вузол на ребрі пов'язує з сусідніми та зі значеннями розв'язку на попередньому кроці по часу за допомогою лінійних рівнянь. Матриця цих рівнянь буде тридіагональною, як і у випадку одновимірного рівняння Річардса-Клюта, проте вона не буде повністю визначеною, оскільки на кінцях довільного ребра графу можуть не бути визначені крайові умови.

Тоді нам потрібно поєднати окремі лінійні алгебраїчні рівняння, що формулюються за допомогою дискретизації ребер, виходячи з умови балансу маси (2.10) та неперервності функції потенціалу тиску на графі. Для цього ототожнимо крайові вузли сіток на ребрах, що є інцидентними до однієї й тієї ж внутрішньої вершини в графі G (див. рис. 2.3).

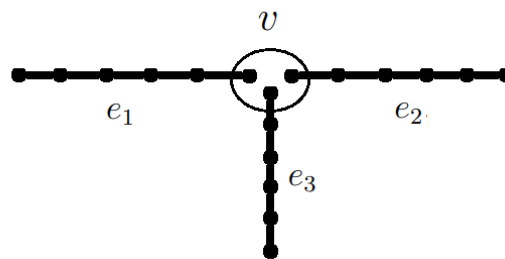


Рис. 2.3: Дискретизація суміжних ребер.

Тоді, якщо пронумерувати вузли сітки на всьому графі наступним чином: спочатку внутрішні вузли ребра e_1 , потім внутрішні вузли e_2 і так далі до e_n , а потім ототожнені крайові вузли ребер, що тепер відповідають внутрішнім вершинам графу G , то матриця системи лінійних алгебраїчних рівнянь буде мати наступну структуру.

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.106)$$

Тут блок A_{11} — тридіагональна матриця, що відповідає внутрішнім вузлам ребер графу G , Блоки A_{12} , A_{21} , A_{22} — ненульові матриці, що пов'язують внутрішні вузли ребер з вузлами, що відповідають вершинам графу G .

Варто відзначити, що при зменшенні просторового кроку пропорційно на кожному з ребер графу загальна кількість вузлів на графі буде збільшуватися, проте в структурі матриці A зміни будуть відбуватися наступним чином:

1. розмірність блоку A_{22} не змінюється, оскільки кількість вершин графу не залежить від кроку просторової сітки,
2. у блоках A_{12} , A_{21} збільшуватиметься кількість рядків та стовпчиків відповідно, проте кількість ненульових елементів в них залишатиметься незмінною, оскільки кількість інцидентних зв'язків між ребрами та вершинами в графі не залежить від щільності розбиття,
3. розмірності блоку A_{11} збільшуватимуться пропорційно, проте даний блок залишатиметься тридіагональним.

З цих властивостей можна зробити наступний висновок: матриця системи лінійних алгебраїчних рівнянь для рівняння Річардса-Клюта на графі матиме сталу кількість ненульових елементів поза трьома головними діагоналями незалежно від щільності розбиття просторової сітки. Позиції цих елементів будуть симетричними відносно головної діагоналі, а їх кількість дорівнюватиме

$$N = 2 \sum_{v \in V} |Inc(v)|, \quad (2.107)$$

де, як і раніше, $Inc(v)$ — множина ребер графа G , інцидентних до вершини v .

Оскільки рівняння для вузлів, що відповідають вершинам графу, скла-

даються з суми рівнянь, скомбінованих за допомогою рівності (2.10) та отриманих з кожного з інцидентних даній вершині ребер, то, беручи до уваги, що дані окремі рівняння є апроксимацією крайової умови другого роду, а при дискретизації одновимірного рівняння рівняння Річардса-Клюта дана умова зазвичай записується симетрично, то матриця A рівняння Річардса-Клюта на графі також є симетричною, тобто $A_{12} = A_{21}^T$.

Аналогічними міркуваннями можна переконатися, що матриця A має діагональну перевагу. Оскільки, як вже було вказано, кількість ненульових елементів матриці A поза трьома головним діагоналями скінченна, то матриця A є розрідженою.

Це означає, що для розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь з цією матрицею можна використовувати ефективні чисельні методи, наприклад модифікований для розріджених матриць метод Зейделя.

Проте, оскільки матриця за своєю структурою дуже схожа на тридіагональну, то, можливо, як і випадку одновимірного рівняння з тридіагональною матрицею, для матриці A точні методи розв'язання будуть ефективнішими. Так, наприклад, для методу Гауса можна оцінити кількість кроків для знаходження розв'язку системи лінійних алгебраїчних рівнянь згори величиною $2(1 + N)|\omega|$, де N — кількість ненульових елементів над головною діагоналлю поза трьома головним діагоналями, $|\omega|$ — загальна кількість вузлів на графі.

Після прямого ходу методу Гауса матриця A матиме наступний вигляд.

$$A = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ 0 & B_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.108)$$

де B_{11} , B_{22} — тридіагональні та верхньотрикутні.

2.7. Метод розділення областей для підвищення ефективності чисельних методів

У цьому пункті ми розглянемо ще один метод підвищення ефективності процесу моделювання масопереносу, що базується на ідеї розділення досліджуваної області на дві підобласті: зону повного насичення, де значення коефіцієнту насиченості рівне максимально можливому θ_{max} та ненасичену зону, де значення коефіцієнту насиченості менше за максимально можливе значення.

Розглянемо наступні умови на параметри рівняння Річардса-Клюта, що описує деякий процес масопереносу в пористому середовищі.

1. $s(t) \geq 0, s'(t) \geq 0$, тобто в досліджуваній області відсутні виходи маси та інтенсивність джерел неспадна;
2. $\partial\theta(\omega, t)/\partial t \geq 0, \omega \in \Gamma_1$, значення коефіцієнту насиченості у крайовій умові першого роду повинне бути неспадним з часом;
3. $\partial q(t)/\partial t \geq 0$, де q — нормальний від'ємний потік маси через частину межі Γ_2 , він також має бути неспадним;
4. $\theta(\omega, 0) = \theta_r$, початкова умова — висушене середовище,
5. $h \leq 0$.

Визначимо насичену та ненасичені зони для розв'язку $\theta(x, y, z, t)$ рівняння Річардса-Клюта в момент t наступним чином.

$$\begin{aligned}\Omega_u(t) &= \{(x, y, z) | \theta(x, y, z, t) < \theta_{max}\}, \\ \Omega_s(t) &= \Omega \setminus \Omega_u(t).\end{aligned}\tag{2.109}$$

Оскільки $s \geq 0$ та оскільки крізь межу досліджуваної області $\partial\Omega$ виходить маса, з фізичної інтерпретації рівняння Річардса-Клюта можна зробити висновок, що $\partial\theta/\partial t \geq 0$ і ми маємо наступну властивість.

$$\Omega_s(t_1) \subseteq \Omega_s(t_2) \text{ для всіх } t_1 < t_2.\tag{2.110}$$

Дане включення означає, що якщо розв'язок θ в точці (x, y, z, t_0) дорівнює θ_{max} , тоді для всіх $t_1 > t_0$ $\theta(x, y, z, t_1) = \theta_{max}$, тима самим, ми можемо виключити точки з максимальним можливим значенням коефіцієнту насиченості із подальшого розгляду.

Для чисельного моделювання це означає, що просторова сітка ω розбивається на дві підсітки ω_u та ω_s на кожному кроці по часу за таким самим принципом, що і Ω розділяється $\Omega_u(t)$ і $\Omega_s(t)$. І для цих підсіток ми маємо наступні різні правила для знаходження значення розв'язку на наступному кроці.

$$\theta_i^{j+1} = \begin{cases} \theta_i^j, & \text{if } \theta_i^j = \theta_{max}, \\ c_i, & \text{інакше,} \end{cases} \quad (2.111)$$

де $c \in R^{|\omega_u|}$ — розв'язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь, що конструювалася на поточному кроці.

Через похибки в обчисленнях під час розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь значення насиченості у вузлах на деякий момент часу t можуть не співпадати з θ_{max} , тому треба вибрати мале число ϵ , щоб при потраплянні значення коефіцієнту насиченості у вузлі в проміжок $[\theta_{max} - \epsilon, \theta_{max}]$ воно замінювалося на θ_{max} . Але параметр ϵ в той же час повинен бути достатньо великим, щоб покривати собою не тільки похибки обчислень, а і нехтувати незначними відхиленнями від θ_{max} , ще підвищуючи ефективність процесу моделювання. Але проста заміна θ до θ_{max} сама може призводити до суттєвих похибок при моделюванні.

Тому постає питання, до якої величини потрібно прирівнювати значення коефіцієнту насиченості у вузлах, які майже досягли межі насичення, не генеруючи значні похибки при цьому.

Розглянемо наступні варіанти можливих значень коефіцієнту насиченості (θ_i^j - значення коефіцієнту насиченості у вузлі i в момент часу j):

1. $\theta_i^{j+1} = \theta_{max}$;

2. $\theta_i^{j+1} = \theta_i^j$, тобто залишати значення насиченості незмінним;
3. $\theta_i^{j+1} = \frac{1}{|\Omega_s|} \sum_{k \in \Omega_s} \theta_k^j$, тобто усереднити значення по всій насиченій області;
4. $\theta_i^{j+1} = \text{LinApprox}(\theta_k^j \in \Omega'_s) \Big|_{z=i}$, де Ω'_s — максимальна зв'язна підмножина Ω_s , що містить θ_i^j , LinApprox — функція, що є лінійною апроксимацією по точкам з Ω'_s .

У більш загальному випадку s та потік маси через $\partial\Omega$ можуть бути такими, що маса покидає досліджувану область, тому умова (2.110) перестає бути справедливою. Тоді для деякого $i \in \omega_s$ може статися ситуація, коли $\theta_i^{j+1} < \theta_i^j$. Очевидно, що формула (2.111) не передбачає таких змін значень розв'язку у вузлах, тому її потрібно замінити для коректності наближення розв'язку.

Для цього розіб'ємо ω на три підсітки:

1. $\omega_u = \{i \in \omega | \theta_i < \theta_{max}\}$ (ненасичені вузли),
2. $\omega_s = \{i \in \omega | \theta_i = \theta_{max}, \rho(i, \omega_u) \geq d\}$ (насичені вузли, віддалені від ненасичених принаймні на відстань d),
3. $\omega_b = \omega \setminus (\omega_u \cup \omega_s)$ (буферні вузли між насиченими та ненасиченими).

Тоді, використовуючи дані підсітки, запишемо наступний алгоритм для знаходження наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта.

Крок 1. Обчислити наближений розв'язок θ_i^{j+1} на наступному кроці по часу, використовуючи наступну формулу.

$$\theta_i^{j+1} = \begin{cases} \theta_i^j, & \text{if } i \in \omega_s, \\ c_i, & \text{if } i \in \omega_u \cup \omega_b, \end{cases} \quad (2.112)$$

де $c \in R^{|\omega_u \cup \omega_b|}$ — розв'язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь поточно-му кроці.

Крок 2. Оновити множини ω_u , ω_b та ω_s згідно з їх визначенням.

В одновимірному випадку процесу масопереносу потрібно знати лише

два вузли для відстеження меж ω_u та ω_b . Проте у двовимірному випадку масопереносу межа може складатися з багатьох вузлів, тому ми об'єднаємо вузли ω в структуру подвійно зв'язаного списку ребер для більш ефективної модифікації підсіток. Вузли ω будуть вершинами, а зв'язки між ними — ребрами у даній структурі. Нехай L — список вузлів з ω_b , такий що будь-який вузол із $\omega_b \setminus L$ залишається зліва при проходженні списку L . Тоді ми назвемо L межею між ω_u та ω_b і крок 2 алгоритму можна переписати наступним чином.

Крок 2. Якщо значення коефіцієнту насиченості θ_i^{j+1} у вузлі $i \in \omega_u$, що є сусіднім до L , досягає максимально можливого значення θ_{max} , то L повинна бути зсунута, щоб вона проходила через i . Ця процедура повинна повторюватися поки не виконається умова $\theta_i^{j+1} < \theta_{max}, i \in \omega_u$. Якщо значення коефіцієнту насиченості θ_i^{j+1} у вузлі $i \in L$ менше за максимально можливе значення θ_{max} , то цей вузол повинен бути обійдений зліва і нова структура межі повинна бути збережена. Ця процедура повинна повторюватися, поки значення коефіцієнту насиченості у всіх вузлах з L не буде дорівнювати максимально можливому θ_{max} .

Проаналізуємо підвищення ефективності підвищення ефективності процесу розв'язання рівняння Річардса-Клюта з використанням запропонованої модифікації.

Чисельні методи складаються з двох кроків: ініціалізація системи лінійних алгебраїчних рівнянь $Ax = f$ та її розв'язання. Кожний рядок матриці A , що відповідає вузлу i , має стільки ненульових елементів, скільки існує вузлів, сусідніх до i . З цього випливає, що ініціалізація A займає час $O(n) = C_{in}n$, де $n = |\omega|$.

Як було вказано в пункті 2.6, матриця даної системи є симетричною, розрідженою та має діагональну перевагу і розв'язок системи може бути знайдений за допомогою модифікованого для розріджених матриць методу Зейделя за час $O(mn)$, де m — число ітерацій методу Зейделя. Припустимо,

що m не залежить від n . Тоді час, необхідний для розв'язання системи та знаходження x , можна оцінити як $O(n) = C_s n$. Варто відзначити, що $C_s \gg C_{in}$.

Запропонована модифікація складається з трьох кроків: ініціалізація системи лінійних алгебраїчних рівнянь, її розв'язання та модифікація межі L . Перші дві процедури аналогічні до описаних вище, але розмірності матриці та вектору розв'язку на кожному кроці j можуть відрізнятися і ми маємо $x, f \in R^{|\omega_u \cup \omega_b|}$. Для часу виконання третьої процедури справедлива наступна лема ([6]).

Лема 2.4. *Якщо Δt достатньо мале, а потік маси через джерела та межу області обмежений за часом на проміжку $[0, T]$, то час, необхідний для модифікації межі L , дорівнює $O(n)$, де n — кількість вузлів у L .*

Нехай $\Omega_u(t)$, як і раніше, позначатиме ненасичену зону для розв'язку рівняння Річардса-Клюта в момент часу $t \in [0, T]$. Визначимо функцію F наступним чином.

$$F(x) = \mu \left\{ t \in [0, T] \mid \frac{|\Omega_u(t)|}{|\Omega|} \leq x \right\} / T. \quad (2.113)$$

F можна представити як функцію розподілу деякої випадкової величини ξ .

$$F(x) = F_\xi(x). \quad (2.114)$$

Тоді щільність $f_\xi(x)$ в точці $x \in [0, 1]$ дорівнює ймовірності того, що $\frac{|\Omega_u(t)|}{|\Omega|} = x$, де t — випадкове число з $[0, T]$.

Визначимо для кожного $n = |\omega|$ розподіл ймовірностей $P_n = (p_0, p_1, \dots, p_n)$, де p_k — ймовірність того, що $|\omega_u(t)| = k$ для наближеного розв'язку на $[0, T]$.

Тоді $F_{P_n} \rightarrow F_\xi$ при $n \rightarrow +\infty$.

Теорема 2.3. *Нехай $\bar{p} = E(\xi)$ — середнє значення по часу частки досліджуваної області, що є ненасиченою зоною, і нехай T_{mod} та T_0 будуть математичними сподіваннями часу, що потрібні на знаходження розв'язку рівняння на наступному кроці по часу з використанням модифікованого та немодифікованого методів відповідно. Тоді*

$$\frac{T_{mod}}{T_0} \rightarrow \bar{p}, n \rightarrow +\infty. \quad (2.115)$$

Доведення. $T_0 = (C_{in} + C_s)n$ для всіх $n > 0$.

В одновимірному випадку або для рівняння Річардса-Клюта на графі межа L — це пара або скінченна, незалежна від кроку розбиття простору кількість вузлів, тому модифікація L займає час $O(1) = o(n)$.

У двовимірному випадку, якщо область, що оточена L , містить $n - k$ вузлів, тоді кількість вузлів на L може бути оцінена як $O(\sqrt{n - k})$. Тоді, за лемою 2.4, час модифікації межі L оцінюється величиною $O(\sqrt{n - k}) = O(\sqrt{n}) = o(n)$.

Тоді час кроку модифікованого чисельного методу оцінюється величиною $(C_{in} + C_s)k + o(n)$ і ми маємо

$$\begin{aligned} \frac{T_{mod}}{T_{st}} &= \frac{\sum_{k=0}^n p_k((C_{in} + C_s)k + o(n))}{(C_{in} + C_s)n} = \\ &= \sum_{k=1}^n p_k \left(\frac{k}{n} + \frac{o(n)}{(C_{in} + C_s)n} \right) = \\ &= EF_{P_n} + o(1) \rightarrow E(\xi) = \bar{p}. \end{aligned} \quad (2.116)$$

□

Теорема 2.3 говорить, що якщо відношення міри ненасиченої області до міри всієї області дорівнює \bar{p} в середньому по часу, тоді швидкість процесу обчислень зростає в середньому в $1/(1 - \bar{p})$ разів.

Зауваження 2.3. За умови, що t залежить від n , час процесу розв'язання

системи лінійних алгебраїчних рівнянь оцінюється як $O(n^{1+\epsilon})$ і (2.116) перетворюється на

$$\begin{aligned} \frac{T_{\text{mod}}}{T_{\text{st}}} &= \frac{\sum_{k=0}^n p_k (C_{in}k + C_s k^{1+\epsilon} + o(n))}{C_{in}n + C_s n^{1+\epsilon}} \approx \\ &\approx \sum_{k=1}^n p_k \frac{k^{1+\epsilon}}{n^{1+\epsilon}} \rightarrow \hat{p} < \bar{p}. \end{aligned} \quad (2.117)$$

Таким чином, оцінка підвищення ефективності, доведена в теор. 2.3, менше реального підвищення ефективності процесу моделювання, тобто є нижньою межею для цієї величини.

Висновки до розділу 2

- Математична модель досліджуваного процесу описується рівнянням Річардса-Клюта. У дисертаційному дослідженні розглядаються крайові умови першого та другого роду.
- Поставлена задача масопереносу у пористому середовищі на графі та записане рівняння Річардса-Клюта, що описує даний процес. Для цього були використані одновимірне рівняння Річардса-Клюта та закон збереження маси.
- Наведені означення просторів функцій на графі, які застосовуються в означенні слабкого розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі.
- Доведений результат стосовно існування слабкого розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі за додаткових умов на параметри рівняння та на функції, що задають початково-крайові умови.
- Доведена оцінка для похибки розв'язку рівняння Річардса-Клюта на графі в залежності від похибок у початково-крайових умовах, тим самим доведена стійкість розв'язків рівняння Річардса-Клюта за деяких додаткових обмежень на параметри рівняння.

- Проаналізована структура матриці системи лінійних алгебраїчних рівнянь, що виникає під час чисельного моделювання процесу масопереносу на графі. Дана матриця має структуру, близьку до тридіагональної з фіксованою кількістю ненульових елементів поза трьома головними діагоналями.
- Запропонований метод модифікації чисельних методів, що базується на відстеженні зони повного насичення за додаткових апріорних умов на значення розв'язку рівняння Річардса-Клюта.
- Доведена оцінка підвищення ефективності моделювання процесу масопереносу з використанням модифікації чисельних методів. Підвищення ефективності залежить від середнього по часу значення частки насиченої зони для розв'язку рівняння Річардса-Клюта.

РОЗДІЛ 3

ОПИС ПРОГРАМНОГО КОМПЛЕКСУ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ МАСОПЕРЕНОСУ

У даному розділі описані параметри, обмеження та функціонал програмного комплексу для моделювання масопереносу в пористих середовищах в одно-, дво- та тривимірних випадках, а також моделювання процесу масопереносу на графі.

3.1. Аналіз конструювання чисельних методів для розв'язання рівняння Річардса-Клюта

У цьому пункті будуть розглянуті параметри побудови чисельних методів для знаходження наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта, які стануть основними параметрами в побудованому програмному комплексі. Основними параметрами є форма рівняння, метод дискретизації часу та метод дискретизації простору.

А) Форма рівняння.

Як описано в пункті 2.1, рівняння Річардса-Клюта містить дві пов'язані між собою змінні θ , h . Кожну з них можна обрати як основну і переписати рівняння Річардса-Клюта відносно неї. Тоді ми отримуємо рівняння Річардса-Клюта відповідно у θ - та h -формах, що описані рівняннями (2.5) та (2.4) відповідно.

Ці дві форми найчастіше використовуються для чисельного розв'язання рівняння Річардса-Клюта. Проте варто відзначити ще одну форму рівняння Річардса-Клюта, від якої можна відштовхуватися для подальшої дискретизації часу та простору, а саме оригінальну змішану, або θ - h -форму

(2.3). Оскільки величини θ і h пов'язані, то для конструювання системи лінійних алгебраїчних рівнянь, що задає наближений розв'язок рівняння Річардса-Клюта, ми маємо виразити одну через іншу, проте вже на етапі дискретизації. Так, наприклад, для неявної схеми по часу, з роботи [61] ми маємо наступну апроксимацію похідної по часу.

$$\theta^{j+1,m+1} = \theta^{j+1,m} + \frac{d\theta^{j+1,m}}{dh}(h^{j+1,m+1} - h^{j+1,m}), \quad (3.1)$$

де j — номер кроку по часу, m — номер ітерації Пікара. В такому випадку система лінійних алгебраїчних рівнянь формується для величин потенціалу тиску $h^{j+1,m+1}$ у вузлах просторової сітки, а при розв'язанні системи зна допомогою цих значень обчислюються відповідні значення коефіцієнту насиченості $\theta^{j+1,m+1}$.

Іноді для спрощення рівняння Річардса-Клюта застосовують перетворення Кірхгофа, отримуючи рівняння відносно нової змінної. Ця процедура може значно оптимізувати подальший процес знаходження наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта.

Отже, ми маємо декілька еквівалентних форм запису рівняння Річардса-Клюта, на основі кожної з яких ми можемо проводити дискретизацію часу та простору для подальшого знаходження наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта.

Б) Дискретизація часу.

Крок по часу Δt в дискретизації рівняння Річардса-Клюта зазвичай обирається сталим, а у якості часової схеми використовують двокроковий неявний метод Ейлера. За рахунок наявності добутку $K\nabla h$ в рівнянні Річардса-Клюта, а також члену $C\frac{\partial h}{\partial t}$ в h -формі рівняння Річардса-Клюта, розв'язок на наступному кроці за часом визначається розв'язком системи нелінійних рівнянь. Для того, щоб перетворити дану систему на лінійну, використовується модифікація методу Ейлера з ітерацією Пікара і тоді

дискретизація рівняння Річардса-Клюта набуває наступного вигляду.

$$C^{j+1,m} \frac{h^{j+1,m+1} - h^j}{\Delta t} - \nabla \cdot K^{j+1,m} \nabla h^{j+1,m+1} - \frac{\partial K^{j+1,m}}{\partial z} = 0, \quad (3.2)$$

де j — номер кроку по часу, m — номер ітерації Пікара.

Також іноді використовують тришарові схеми по часу, наприклад, апроксимацію похідної з роботи [61]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} \approx \frac{3h^{n+1} - 4h^n + h^{n-1}}{2\Delta t}. \quad (3.3)$$

Рідше використовуються чисельні методи з адаптивним кроком по часу. Зазвичай адаптивний крок обирають щільнішим в тих ділянках часу, де більша ймовірність отримати граничні значення функцій та , тобто де вони близькі до нуля.

В) Дискретизація простору.

Серед методів дискретизації простору найчастіше вживаними є метод скінченних різниць (FDM), метод скінченних елементів (FEM) та метод скінченних об'ємів (FVM) зі сталими кроками за простором Δz у випадку одновимірної задачі та прямокутною сіткою для дво- та тривимірних випадків рівняння Річардса-Клюта зі сталими кроками у випадку прямокутної області. Також у випадку дво- або тривимірного рівняння Річардса-Клюта з довільною досліджуваною областю активно використовують методи скінченних елементів та скінченних об'ємів з розбиттям простору, отриманим за допомогою триангуляції досліджуваної області.

Рідше використовуються адаптивні кроки за простором, і так само як і у випадку адаптивного кроку по часу, адаптивний крок частіше обирається з метою ущільнення просторової сітки в ділянках, де функції та наближаються до своїх граничних значень.

Г) Інші параметри.

Параметри А)-В) використовуються для перетворення рівняння Річардса-Клюта до різницевої форми та є основними параметрами чисельного методу. Після того, як різницеве рівняння сконструйоване та повністю визначений процес отримання системи лінійних алгебраїчних рівнянь, для знаходження наближеного розв'язку на наступному кроці по часу, можна обирати додаткові параметри, що будуть характеризувати сам процес розв'язання системи.

Одним з цих параметрів є метод розв'язання системи. Як було вказано в пункті 2.6, матриця системи є симетричною, розрідженою та має діагональну перевагу, тому зазвичай для її розв'язання використовують модифікацію ітеративного методу Зейделя для розріджених матриць. Проте у випадку одновимірного рівняння Річардса-Клюта та рівняння Річардса-Клюта на графі ми маємо структуру матриці системи, як це описано в пункті 2.6 формулою (2.106). Для одновимірного випадку усі елементи матриці, що не лежать на трьох головних діагоналях, дорівнюють нулю, тому для розв'язання системи використовують метод прогонки замість методу Зейделя. У випадку рівняння Річардса-Клюта на графі, за рахунок властивостей матриці системи, описаних у пункті 2.6, для знаходження розв'язку системи можна використовувати точний метод Гауса, модифікований для розріджених матриць.

Іншим параметром, який може пришвидшити процес знаходження наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта на етапі розв'язку системи лінійних алгебраїчних рівнянь, є використання стратегії розбиття досліджуваної області на насичену та ненасичені зони, що було описано в пункті 2.7. Теоремою 2.3 визначається ступінь підвищення ефективності процесу моделювання масопереносу на графі при використанні даної стратегії.

Для перевірки ефективності чисельних методів та коректності результатів моделювання процесу масопереносу часто використовується оцінка балансу маси, що полягає у відношенні зміни загальної кількості маси в

досліджуваній області до кількості маси, що надійшла до досліджуваної області через її межі. Для одновимірного випадку оцінка балансу маси задається наступною формулою.

$$MB(n) = \frac{\sum_{i=1}^{|\omega|} (\theta_i^n - \theta_i^0) \Delta z}{\sum_{j=1}^n \left(K_{|\omega|-1/2}^j \left(\frac{h_{|\omega|}^j - h_{|\omega|-1}^j}{\Delta z} + 1 \right) - K_{1/2}^j \left(\frac{h_1^j - h_0^j}{\Delta z} + 1 \right) \right) \Delta t}, \quad (3.4)$$

де ω — просторова сітка, вузли якої пронумеровані послідовно, n — номер кроку по часу.

Чим ближче значення оцінки балансу маси до 1, тим кращою вважається процедура отримання наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта.

3.2. Особливості та технічні характеристики програмного комплексу

Даний програмний комплекс розроблений для моделювання процесу масопереносу в пористому середовищі в одно-, дво- та тривимірному випадках, а також масопереносу на графі. Процес масопереносу описується за допомогою відповідно одно-, дво- та тривимірних рівнянь Річардса-Клюта, а також рівнянням Річардса-Клюта на графі.

Програмний комплекс був спроектований з метою надати користувачу можливість обирати параметри, що описані в пункті 3.1, для побудови чисельних методів, а також для порівняння цих чисельних методів. Оскільки для переходу між формами (2.4) та (2.5) рівняння Річардса-Клюта потрібно обертати функцію $\theta(h)$, то для автоматизації процесу розв'язання даного рівняння у якості середовища, в якому був написаний програмний комплекс, був обраний пакет комп'ютерної алгебри Maple 18.

Даний програмний комплекс оформлений як виконуваний документ у середовищі Maple 18 та написаний мовою програмування Maple. Також він

використовує інтерактивні елементи для створення графічного інтерфейсу програми, що складається з полів вводу параметрів рівняння Річардса-Клюта та полів виводу наближених розв'язків рівняння.

Програмний комплекс дозволяє знаходити наближений розв'язок одновимірних рівнянь Річардса-Клюта в гомогенних та негомогенних пористих середовищах, двовимірних рівнянь Річардса-Клюта в гомогенних середовищах з прямокутною областю Ω , тривимірних рівнянь Річардса-Клюта в гомогенному середовищі з областю в формі прямокутного паралелепіпеду, а також рівняння Річардса-Клюта на графі в гомогенному та негомогенному пористому середовищі, використовуючи чисельні методи, сконструйовані з допомогою вибору користувачем параметрів А)-Г) з пункту 3.1.

Також програмний комплекс містить рейтинг чисельних методів за декількома критеріями, що використовуються для оцінок точності та ефективності чисельних методів при моделюванні процесу масопереносу. Цей рейтинг сформований за допомогою тестування чисельних методів на низці конкретних випадків рівняння Річардса-Клюта. Користувач має можливість коригувати рейтинг за допомогою окремих полів інтерфейсу.

Опис файлів, інтерфейсу і принципів роботи програмного комплексу описані у наступних унктах цього розділу.

3.3. Файли програмного комплексу

Програмний комплекс складається з наступних файлів:

- main.mw
- graph.txt
- rating.txt
- ethalon.txt
- es.txt

Нижче наведений опис та призначення вищенаведених файлів.

main.mw — головний виконуваний файл програмного комплексу, має розширення Maple Worksheet (.mw). Під час відкриття запускає процедуру ініціалізації параметрів та функцій програмного комплексу, містить інтерфейс вводу даних про параметри рівняння Річардса-Клюта та чисельного методу для його розв'язання та виводу даних про розв'язок рівняння.

graph.txt — текстовий файл, що містить дані про граф, на якому моделюється процес масопереносу, у випадку, коли в програмному комплексі обраний відповідний пункт. Даний файл заповнюється користувачем перед початком процесу моделювання та має містити дані про граф у наступному форматі:

$$\begin{aligned}
 &N \\
 &x_1 \ y_1 \ z_1 \ v_{11} \ \dots \ v_{1k_1} \\
 &x_2 \ y_2 \\
 &\dots \\
 &x_n \ y_n \ z_n \ v_{n1} \ \dots \ v_{nk_n}
 \end{aligned}$$

Тут N — натуральне число, кількість вершин у графі.

Наступні рядки містять для кожної вершини значення її координати в тривимірному просторі (три числа з плаваючою точкою $x_i \ y_i \ z_i$) та список вершин (натуральні числа $v_{i1} \ \dots \ v_{ik_i}$), суміжних з даною вершиною. Номер v_{ij} посилається на вершину, яка задається $(v_{ij} + 1)$ -им рядком в документі *graph.txt*. Ребрами графу вважаються прямі відрізки між двома вершинами.

Рис 3.1 містить приклад коректно заповненого файлу *graph.txt* та графу, що йому відповідає.

rating.txt — файл, що містить значення рейтингу чисельних методів, сконструйованих за допомогою вибору параметрів А)-В) з пункту 3.1. Не призначений для прямого редагування користувачем. Його використання та модифікація виконуються виключно в рамках взаємодії користувача з інтерфейсом програмного комплексу, реалізованим у файлі *main.mw*.

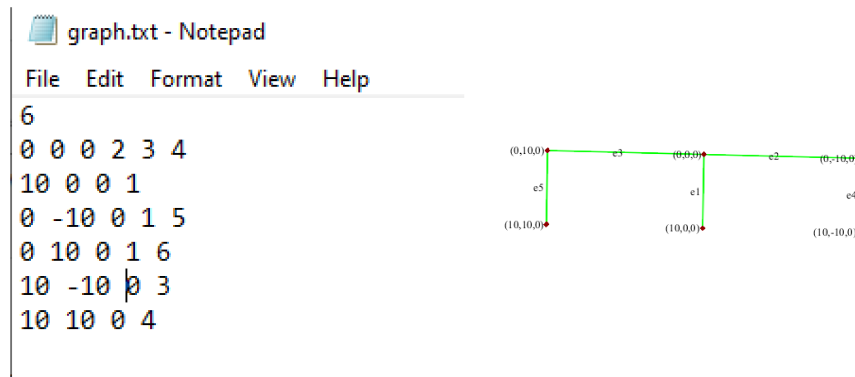


Рис. 3.1: Приклад файлу graph.txt та графу, що йому відповідає.

ethalon.txt — текстовий файл, що призначений для збереження еталонного розв'язку одновимірного розв'язку рівняння Річардса-Клюта у випадку, коли користувач використовує функціонал оновлення рейтингу чисельних методів для моделювання процесу масопереносу, сконструйованих за допомогою вибору параметрів А)-В) з пункту 3.1. Даний файл заповнюється користувачем перед виконанням відповідної процедури оновлення рейтингу та має містити дані про еталонний розв'язок одновимірного рівняння Річардса-Клюта у наступному форматі:

type

$z_0 z_1 z_2 \dots z_n$

$f_0 f_1 f_2 \dots f_n$

Тут $type = 1$ або 2 для випадків, коли еталонний розв'язок задається як функція $h(z)$ та $\theta(z)$ відповідно.

Далі йдуть два рядки з послідовностями чисел з плаваючою точкою z_i та $f_i = f(z_i)$, де $f = h$ або θ при $type = 1$ або $type = 2$ відповідно.

Рис. 3.2 містить приклад коректно заповненого файлу *ethalon.txt*, що задає значення еталонного розв'язку одновимірного рівняння Річардса-Клюта як функцію потенціалу тиску на проміжку $[0, 10]$ з кроком просторової сітки 1.

es.txt — текстовий файл, що містить дані про еталони, на основі яких був сформований рейтинг, так само як і про параметри дискретизації, які

```

ethalon.txt - Notepad
File Edit Format View Help
1
0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
-60 -55 -50 -45 -40 -35 -30 -25 -20 |-15 -10

```

Рис. 3.2: Приклад файлу ethalon.txt.

були використані при тестуванні чисельних методів. Не призначений для модифікації користувачем, проте слугує для ознайомлення користувача з розв'язками часткових випадків одновимірного рівняння Річардса-Клюта, на основі яких і був створений рейтинг. Даний файл оновлюється після виконання функції оновлення рейтингу чисельних методів за допомогою інтерфейсу файлу *main.mw*, в результаті чого до кінця файлу дописується інформація про новий еталон, який використовував користувач для оновлення рейтингу. Має наступний формат.

```

type
K
C
finit
typeup funcup
typedown funcdown
T
Δt
Δz
z0 z1 z2 ... zn
f0 f1 f2 ... fn

```

Тут $type = 1$ або 2 для випадків, коли еталонний розв'язок задається як функція $h(z)$ та $\theta(z)$ відповідно.

K — функція, що задає водопроникність середовища, має формат формули Maple.

C — функція, що задає вологоємність середовища, має формат формули Maple.

f_{init} — функція від z , що задає початкове значення розв'язу рівняння Річардса-Клюта. Має формат формули Maple. Інтерпретується як h при $type = 1$ та θ при $type = 2$.

$type_{up}$, $func_{up}$, $type_{down}$, $func_{down}$ — типи та значення функцій, що задають крайові умови вгорі та внизу відповідно.

T — величина відрізка часу, до якого проводилося тестове моделювання, дійсне невід'ємне число.

Δt — крок по часу, при якому проводилося тестове моделювання, дійсне додатне число.

Δz — крок по простору, при якому проводилося тестове моделювання, дійсне додатне число.

Далі йдуть два рядки з послідовностями чисел з плаваючою точкою z_i та $f_i = f(z_i)$, де $f = h$ або θ при $type = 1$ або $type = 2$ відповідно. Дані величини — значення еталонних розв'язків рівняння Річардса-Клюта з параметрами K , та початковою умовою f_{init} в момент часу T .

3.4. Інтерфейс вводу даних

Файл *main.tw* програмного комплексу має наступний інтерфейс для вводу даних про параметри середовища, в якому буде моделюватися процес масопереносу.

Цифрами на рис. 3.3 позначені наступні елементи інтерфейсу:

1 — кнопка вибору топологічної структури області, в якій розглядається процес масопереносу. На рис. 3.4 наведені варіанти, які можна вибрати. Тим самим програмний комплекс дозволяє моделювати процес масопере-

Type of the mass transfer problem **Graph** 1

Properties of the environment:

graph.txt 2
Read graph file

Select subarea: all 3

Enter space step: $\Delta z =$ 0.4 4

Enter minimum and maximum value of saturation level:

$\theta_{\min} =$ 0.075 5

$\theta_{\max} =$ 0.287

Select how you want to define $K(h)$: Write Choose 6

$K(h) = \text{piecewise} \left(h < 0, \frac{K_{AA}}{AA + (-h)^c}, K \right)$ 7

AA= 1175000 8 K= 0.00944 9 c= 4.74

Select how you want to define $C(h)$: Write Choose 10

$C(h) = \frac{a(\theta_{\max} - \theta_{\min})}{a + (-h)^b} + \theta_{\min}$ 11

a= 1e11000 12 b= 4.9e 13

Select which value you wish to use as initial condition: h theta 14

$h_0(x,y,z) =$ -61.5 15

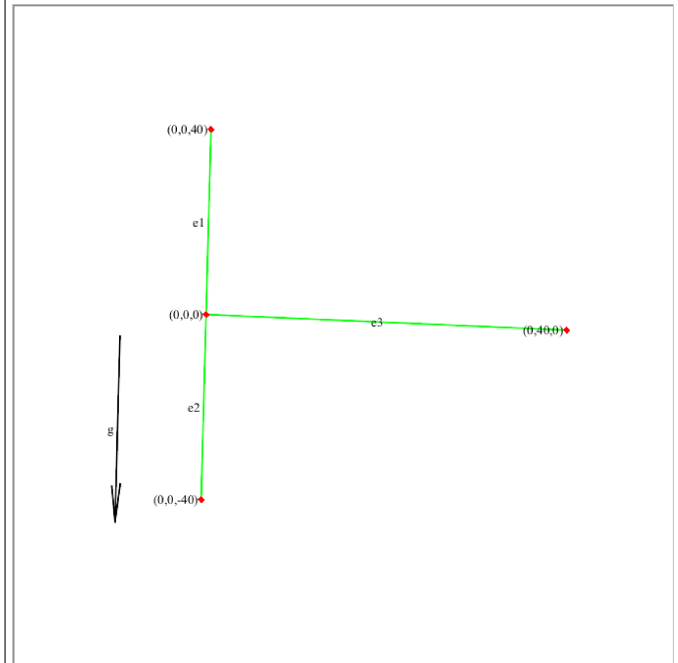
Save properties 16

Choose border: v3 17

Type of boundary condition: h 18

Value of boundary condition: -20 19

Save boundary condition 20



21

Choose length of the time interval: $T =$ 100 22

Time step: $\Delta t =$ 1 23

Choose preferable criteria: Delta_front 24

Rating list for chosen criteria: FEM,theta,three,impl 25

Apply combination of parameters 26

Choose parameter of numerical method:

Space discretization: FDM 27

Time scheme: impl 28

Number of layers in time scheme: three 29

Form of the Richards-Klute equation: mixed 30

SLAE Solving method Numerical 31

Area division method on/off 32

Solve 33

Рис. 3.3: Интерфейс вводу данных.

носу в одно-, дво- та тривимірному випадку, а також масоперенос на графі.

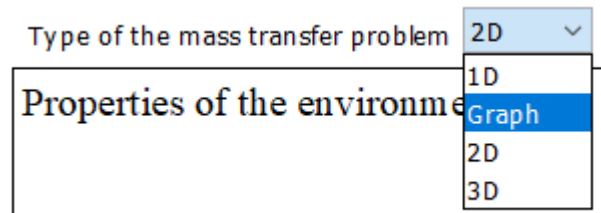


Рис. 3.4: Варіанти структури області.

2 — адреса файлу з даними про граф та кнопка "Read graph file". Адреса має бути коректним шляхом до файла на комп'ютері, що містить дані про граф у форматі, що вказаний для файлу *graph.txt* в пункті 3.3. Кнопка "Read graph file" ініціалізує структуру графу, зчитаного з файлу.

Елементи 3–16 слугують для ініціалізації властивостей пористого середовища.

3 — кнопка вибору ребра в графі або підобласті гомогенності у випадку одновимірної проблеми масопереносу. Використовується для ініціалізації властивостей пористого середовища на окремих ребрах графу у випадку, коли властивості середовища відрізняються в залежності від ребра. Також містить варіант "all", що дає можливість задати властивості пористого середовища одразу на всьому графі. При виборі конкретного ребра або варіанту "all" в полі 21 виводиться графічне зображення графу з назвами і координатами вершин і назвами ребер, в якому, за умови вибору конкретного ребра, дане ребро виділене червоним кольором. Також в полі 21 виводиться стрілка, що показує напрямок гравітаційного поля. На рис. 3.5 наведені варіанти вибору для даної кнопки за умови графа з трьома ребрами.

4 — поле для вводу просторового кроку, що буде використовуватися для дискретизації даного ребра або підобласті.

5 — поля для вводу значення θ_{min} та θ_{max} , що слугує одним з параметрів пористого середовища на даному ребрі.

6 — допоміжні кнопки, що вказують на спосіб задання функції K . Якщо

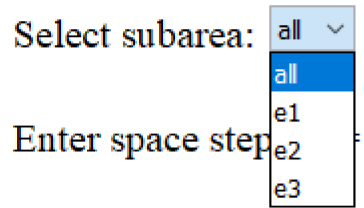


Рис. 3.5: Варіанти вибору підобласті.

ввімкнене значення "Write", то функція K задається шляхом зчитування даних з поля 7. Якщо ввімкнене значення "Choose", то функцію K можна обрати зі списку наявних у програмному комплексі варіантів для функції K за допомогою кнопки 8 та полів 9. Обрана наявна функція виводиться в цьому випадку в полі 7.

7 — поле для зчитування (у випадку, коли ввімкнене значення "Write" кнопки 6) та виводу (у випадку, коли ввімкнене значення "Choose" кнопки 6) функції K , що задається як функція від z за синтаксисом мови програмування Maple.

8 — кнопка для вибору функції K серед наявних варіантів, збережених у програмному комплексі. Не відображається, коли ввімкнене значення "Write" кнопки 6.

9 — поля, в які записуються значення параметрів для обраної зі списку наявних функції K при ввімкненому значенні "Choose" кнопки 6 та обраній конкретній функції K зі списку наявних. Кількість на назви величин, пов'язаних з даними полями, залежать від конкретної функції. Дані поля не відображаються, коли ввімкнене значення "Write" кнопки 6.

10 — допоміжні кнопки, що вказують на спосіб задання функції C . Якщо ввімкнене значення "Write" то функція C задається шляхом зчитування даних з поля 11. Якщо ввімкнене значення "Choose", то функцію C можна обрати зі списку наявних у програмному комплексі варіантів для функції C за допомогою кнопки 12 та полів 13. Обрана наявна функція виводиться в цьому випадку в полі 11.

11 — поле для зчитування (у випадку, коли ввімкнене значення "Write" кнопки 10) та виводу (у випадку, коли ввімкнене значення "Choose" кнопки 10) функції C , що задається як функція від z за синтаксисом мови програмування Maple.

12 — кнопка для вибору функції C серед наявних варіантів, збережених у програмному комплексі. Не відображається, коли ввімкнене значення "Write" кнопки 10.

13 — поля, в які записуються значення параметрів для обраної зі списку наявних функції C при ввімкненому значенні "Choose" кнопки 10 та обраній конкретній функції C зі списку наявних. Кількість на назви величин, пов'язаних з даними полями, залежать від конкретної функції. Дані поля не відображаються, коли ввімкнене значення "Write" кнопки 10.

14 — кнопка, яка задає тип функції, що виконує роль початкової умови для рівняння Річардса-Клюта. Так, у якості початкової умови можна задавати як функцію коефіцієнту насиченості θ , так і потенціалу тиску h .

15 — поле для вводу функції, що задає початкову умову для рівняння Річардса-Клюта. Має містити функцію від просторових координат x, y, z , записану за синтаксисом мови програмування Maple.

16 — кнопка, що зберігає параметри пористого середовища, заповнені у полях 4-15 для ребра, що обране у полі 3, або для всього графу, якщо у полі 3 стоїть значення "all".

Елементи 17-20 слугують для задання крайових умов для рівняння Річардса-Клюта.

17 — кнопка, за допомогою якої робиться вибір вершини, на якій задається крайова умова.

18 — кнопка, за допомогою якої робить вибір типу крайової умови. На рис. 3.6 наведені можливі варіанти типів. Варіант "h" відповідає за крайову умову першого роду, де на граничній вершині задається значення потенціалу тиску. Варіант "theta" відповідає за крайову умову першого роду, де

на граничній вершині задається значення коефіцієнту насиченості. Варіант "q" відповідає за крайову умову другого роду.

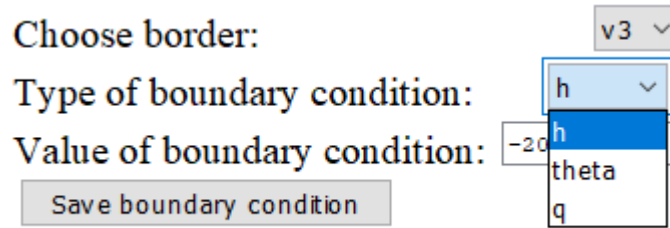


Рис. 3.6: Варіанти вибору крайової вершини.

19 — поле для вводу функції, що задає початкову умову для рівняння Річардса-Клюта. Має містити функцію від часу t , записану за синтаксисом мови програмування Maple.

20 — кнопка, що зберігає параметри крайової умови для вершини, що обрана у полі 17.

21 — поле виводу графіку області, в якій досліджується процес масопереносу. Виводиться разом з поміченою стрілкою, що задає напрямок гравітаційного поля.

22 — поле для запису величини T , до якої буде виконуватися процес моделювання масопереносу.

23 — поле для запису величини кроку по часу Δt , що буде використуватися у чисельних методах.

У випадку, коли в полі 1 вибрана дво- чи тривимірна задача масопереносу, то замість поля 2 відображається поле 2а та кнопка 2в, як це показано на рис. 3.7.

Поле 2а повинне містити параметри прямокутної області, в якій досліджується процес масопереносу, тобто значення висоти та ширини у двовимірному випадку, або висоти, ширини та довжини у тривимірному випадку, записані через кому. Так, якщо у дане поле для двовимірної задачі записані значення " L_1, L_2 ", то областю моделювання буде прямокутник

Properties of the environment:

Parameters of area: **2a**

2b

Рис. 3.7: Інтерфейс вводу параметрів двовимірної області.

$[0, L_1] \times [0, L_2]$. Відповідно у тривимірному випадку для значень " L_1, L_2, L_3 " областю буде прямокутний паралелепіпед $[0, L_1] \times [0, L_2] \times [0, L_3]$.

Кнопка 2b зберігає дані параметри області.

В полі 3 в такому випадку знаходиться лише одне значення "all", при виборі якого в полі 21 виводиться дво- або тривимірний графік області.

Поле 4 повинне містити записані через кому значення кроків просторової сітки по напрямкам всіх координат, узгоджені зі значеннями в полі 2a.

Кнопка 17 замість списку крайових вершин містить список меж досліджуваної області. В поле 19 в такому випадку повинна вводитися функція від змінних y, z, t в двовимірному випадку та x, y, z, t в тривимірному випадку. В будь-якому випадку функція повинна бути записана у форматі мови програмування Maple. В процесі роботи чисельного методу значення цієї функції буде обчислюватися на відповідній межі області.

Для двовимірної області за умови запису в полі 2a " L_1, L_2 " межі "down" буде відповідати сторона прямокутника $[0, L_1] \times [0, L_2]$, що задається умовою $z = 0$, межі "up" — сторона $z = L_2$, межі "left" — сторона $y = 0$ та межі "right" — сторона $y = L_1$.

У тривимірному випадку за умови запису в полі 2a " L_1, L_2, L_3 " межі "down" буде відповідати грань прямокутного паралелепіпеда $[0, L_1] \times [0, L_2] \times [0, L_3]$, що задається умовою $z = 0$, межі "up" — грань $z = L_3$, межі "left" — грань $y = 0$ та межі "right" — грань $y = L_2$, межі "back" — грань

$y = 0$ та межі "front" — грань $y = L_1$.

На рис. 3.8 зображені варіанти вибору частини межі у двовимірному випадку.

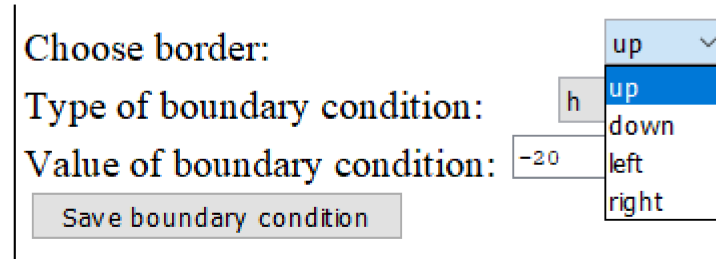


Рис. 3.8: Варіанти вибору межі в двовимірному випадку.

Елементи 5–16 та 18–20 виконують ті ж самі функції.

У випадку, коли в полі 1 вибрана одновимірна задача масопереносу, то замість поля 2 відображається поля 2а, 2в та кнопка 2с, як це показано на рис. 3.9.

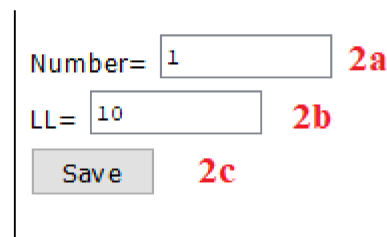


Рис. 3.9: Інтерфейс вводу параметрів області в одновимірному випадку.

Поле 2а має містити кількість підобластей гомогенності одновимірної області. Введене число повинно бути натуральним.

Поле 2в повинне містити міри гомогенних підобластей, записані через кому. Кількість значень повинна співпадати зі значенням, введеним до поля 2а.

Кнопка 2с зберігає дані параметри одновимірної області.

Елементи 3–20 у випадку одновимірної задачі працюють так само, як і у випадку задачі масопереносу на графі.

Наступні елементи призначені для вибору параметрів чисельного методу, що буде використовуватися для знаходження наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта.

Елементи 24–26 слухують для вибору комбінації параметрів чисельного методу в залежності від рейтингу комбінацій параметрів для обраного критерію.

24 — кнопка містить варіанти критеріїв, які характеризують ефективність та точність чисельних методів. Обираючи конкретне значення критерію, в полі 25 формується список комбінацій параметрів чисельного методу, відсортований за рейтингом щодо вибраного критерію. Кожен критерій має свій рейтинг. Чим вище комбінація параметрів у списку, тим кращі значення показує чисельний метод, сконструйований за допомогою цих параметрів, для даного критерія.

Серед критеріїв маємо наступні варіанти:

”Delta” — відносна похибка, що обчислюється для наближеного розв'язку при відомому еталонному розв'язку рівняння Річардса-Клюта.

”Delta_front” — відносна похибка для майже ненасичених областей. Обчислюється так само, як і відносна похибка, проте для функцій, що є звуженнями наближених розв'язків на підобласть, де еталонний розв'язок досягає значень $(\theta_{min}, \theta_{min} + 0.05 \cdot (\theta_{max} - \theta_{min}))$. Даний критерій використовується для аналізу чисельних методів на осциляцію наближених розв'язків поблизу фронту насиченості.

”MB” — баланс маси, що обчислюється за формулою (3.4). Не потребує еталонного розв'язку.

”Time” — швидкодія процесу моделювання. Сортування комбінації параметрів чисельних методів за їх швидкістю.

25 — список, що формується при виборі критерію в пункті 24.

26 — кнопка, що виставляє значення полів 27-30 у відповідності до значення комбінації параметрів з поля 25.

27 — вибір методу просторової дискретизації. Серед наявних варіантів: "FEM", "FVM", "FDM".

28 — вибір явної чи неявної схеми по часу.

29 — вибір дво або тришарової (3.3) схеми по часу.

30 — Вибір форми рівняння Річардса-Клюта (2.3), (2.4) або (2.5).

31 — вибір методу розв'язання системаи лінійних алгебраїчних рівнянь: ітеративний або точний.

32 — кнопка, що модифікує чисельний метод за рахунок розділення досліджуваної області на насичену та ненасичені зони, як це описано в пункті 2.7.

33 — кнопка, що запускає процес моделювання процесу масопереносу, використовуючи чисельний метод, сконструйований за допомогою параметрів з полів 27–32 для області, параметри якої задаються значеннями полів 3–20 з використанням часових параметрів з полів 22–23.

Результати процесу моделювання виводяться в частині документу *main.tw*, що відповідає за інтерфейс виводу даних.

3.5. Інтерфейс виводу даних

Файл *main.tw* програмного комплексу має інтерфейс для виводу розв'язку рівняння Річардса-Клюта, зображений на рис. 3.10.

Цмфрами на рис. 3.10 позначені наступні елементи інтерфейсу виводу.

1 — кнопка для вибору ребра у випадку, коли розглядається задача масопереносу на графі або одновимірна негомогенна задача. Має ті ж значення, що і поле 3 в інтерфейсі вводу даних. При виборі ребра у полі 8 виводиться значення наближеного розв'язку на ребрі як одновимірна функція. У дво- або тривимірному випадку містить одне значення, так само, як і поле 3.

2 — вибір значення, що буде виводитися на графіках у полях 7 та 8. Це

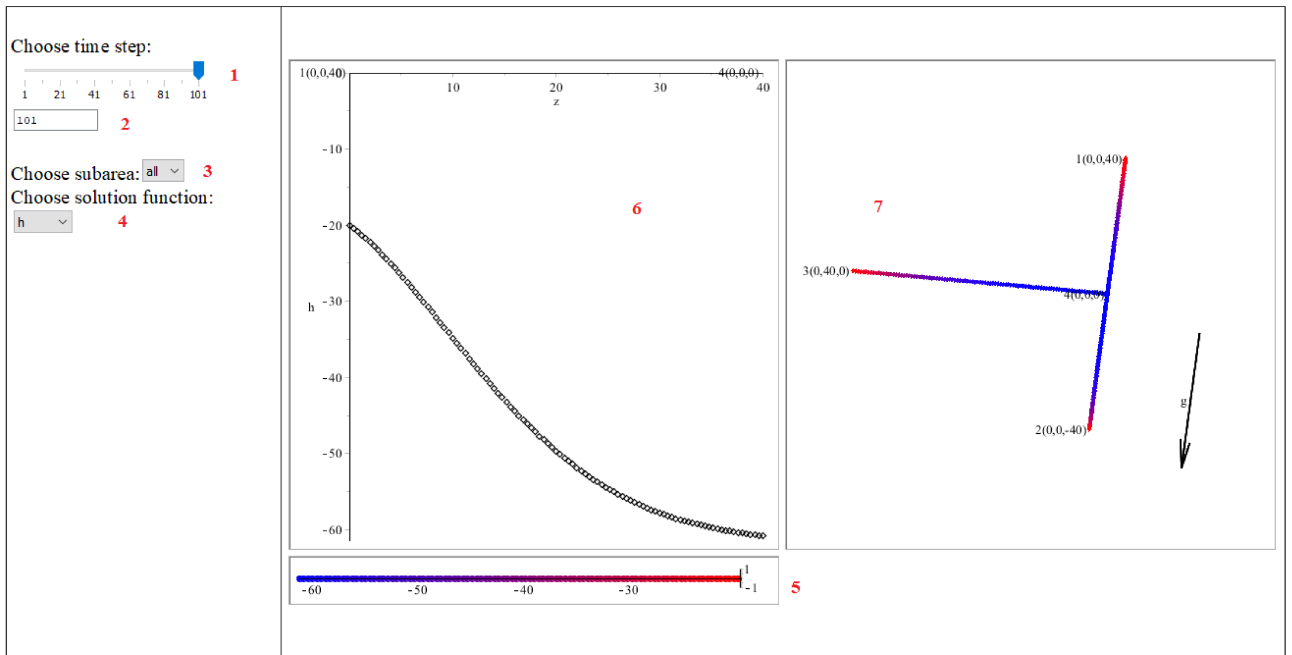


Рис. 3.10: Інтерфейс виводу даних програмного комплексу.

може бути або функція коефіцієнту насиченості θ , або функція потенціалу тиску h .

3 — кольорова шкала значень наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта.

4 — повзунок для вибору кроку по часу, на якому користувач хоче вивести значення наближеного розв'язку.

5 — поле для запису кроку по часу, на якому користувач хоче вивести значення наближеного розв'язку. Дублює функціонал та значення повзунка 4.

6 — значення величини часу, при якому в даний момент виводиться значення наближеного розв'язку.

7 — основне поле для виводу графіку наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта в момент часу, що вказаний в полі 6. Виводиться як множина вузлів просторової сітки, що пофарбовані у кольори, які відповідаються значенням функції-розв'язку, обраної в полі 2, узгоджені з кольоровою шкалою 3.

8 — допоміжне поле для виводу графіку наближеного розв’язку рівняння Річардса-Клюта в момент часу, що вказаний в полі 6 та для ребра, що вказане в полі 1. Виводиться двовимірний графік одновимірної точкової функції-розв’язку, обраної в полі 2.

У тривимірному випадку рівняння Річардса-Клюта для виводу наближеного розв’язку використовуються допоміжні поля 9 та 10, що мають наступні функції.

9 — поле для вибору площини перерізу досліджуваної області. При виборі відповідного значення з можливих, показаних на рис. 3.11, в полі 7 виводиться графік розв’язку у вузлах просторової сітки, що відповідають значенню вільної координати, записаної в полі 10.

10 — поле для задання вільної координати для виводу перерізу наближеного розв’язку тривимірного рівняння. Допустимими є значення, що відповідають області дослідження.

3.6. Рейтинг чисельних методів та процес його модифікації

Коли в якості області дослідження обрана одновимірна область, то поруч з елементами 22-23 відображаються ще два елементи, що відповідають за модифікацію рейтингових списків комбінацій параметрів конструювання чисельних методів, які відображаються в полі 25. На рис 3.12 показані дані два елементи, позначені номерами 33-34.

Вони мають наступні функції.

33 — поле, в яке записується адреса файлу, що містить еталонний розв’язок одновимірного рівняння Річардса-Клюта, з яким будуть порівнюватися наближені розв’язки, отримані за допомогою чисельних методів, сконструйованих за допомогою комбінацій параметрів з пунктів 27-30.

34 — кнопка, що запускає процедуру модифікації рейтингів комбінацій чисельних методів за критеріями з поля 24. Еталонний розв’язок для кри-

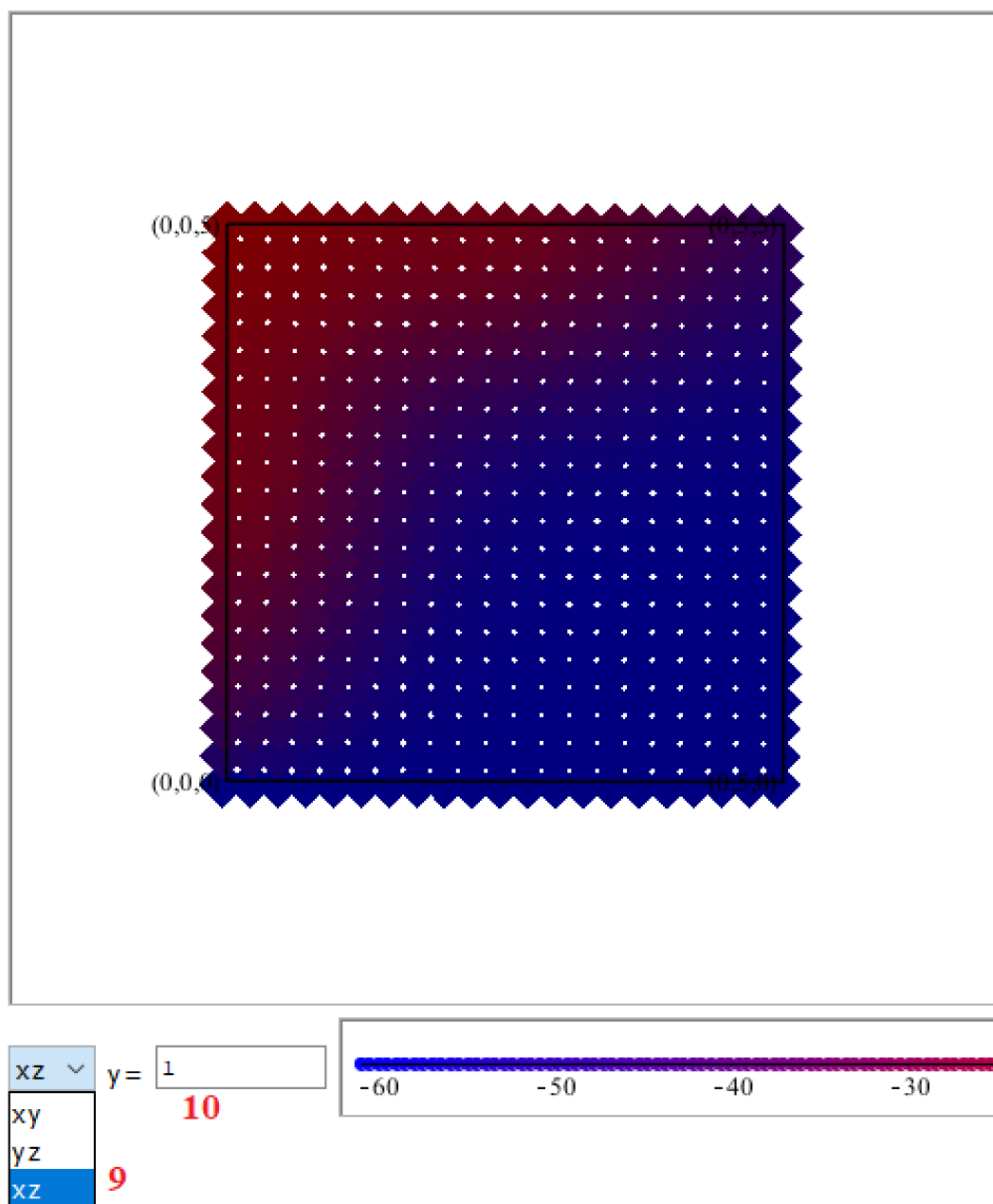


Рис. 3.11: Додаткові поля для виводу графіків розв'язків у тривимірному випадку.

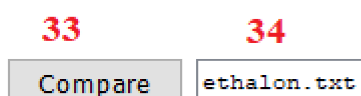


Рис. 3.12: Інтерфейс для оновлення рейтингу.

триїв "Delta" та "Delta_front" береться з файлу, ім'я якого вказане в полі 33. Даний файл має містити дані у форматі, описаному в пункті 3.3 для файлу *ethalon.txt*. За замовчуванням, якщо дане поле порожнє, дані беруться з файлу *ethalon.txt*.

Чисельні методи використовують ті параметри пористого середовища та параметри дискретизації часу і простору, що були вказані в полях 3-23. Після прогонки всіх чисельних методів файл *rating.txt* оновлюється, містячи тепер рейтинг з врахуванням доданого користувачем еталону, а до файлу *es.txt* додаються рядки, що описують параметри еталонної розв'язку, у форматі, що прописаний в пункті 3.3 для файлу *es.txt*.

3.7. Додаткова інформація про програмний комплекс

Як було вказано в пункті 3.3, програмний комплекс дозволяє розв'язувати рівняння Річардса-Клюта, беручи за основу будь-яку з форм рівняння (2.3)-(2.5). Проте, оскільки у випадку одновимірного рівняння Річардса-Клюта або рівняння Річардса-Клюта на графі, можливо також задати негомогенне середовище, то варто вказати деякі обмеження програмного комплексу, що стосуються саме комбінації форми рівняння та негомогенності середовища. А саме, у випадку негомогенного середовища для функції потенціалу тиску ми повинні мати умову неперервності на межі між областями гомогенності, тому для рівняння Річардса-Клюта у змішаній або h -формах дискретизація рівняння на межі полягає у рівності значень у двох крайових вузлах, що знаходяться у сітках, які відповідають різним областям гомогенності, тобто пов'язуюче рівняння є лінійним.

У випадку ж θ -форми рівняння Річардса-Клюта граничні значення θ , можуть не співпадати, а рівняння, що пов'язує дві області гомогенності і задається у наступному вигляді

$$h_1(\theta_i) = h_2(\theta_j), \quad (3.5)$$

де $h_1 = \theta_1^{-1}$, $h_2 = \theta_2^{-1}$ — різні залежності потенціалу тиску від коефіцієнту насиченості в двох областях гомогенності, θ_i, θ_j — значення коефіцієнту насиченості у вузлах, що відповідають тій самій точці на межі між областями гомогенності, не є лінійним, тому система, що утворюватиметься для визначення розв'язку рівняння Річардса-Клюта на наступному кроці по часу, не буде лінійною в цілому.

Для того, щоб уникнути таких обставин, користувачу не рекомендується обирати θ -форму рівняння Річардса-Клюта для моделювання процесу масопереносу в пористому негомогенному середовищі. Відповідно вибір такого параметру може призводити до непередбачуваної поведінки системи та непрогнозованих наслідків.

Аналогічна проблема стосується і процесів масопереносу, які в певний момент часу на певній ділянці досягають зони повного насичення. Оскільки для функції залежності коефіцієнту насиченості від потенціалу тиску ми маємо наступну властивість $\theta([0, +\infty]) = \theta_{max}$, то у випадку θ -форми зі значення розв'язку θ не можна однозначно визначити величину потенціалу тиску h в зоні повного насичення, тому у випадку, коли значення наближеного розв'язку, що отримується в процесі виконання чисельного методу відносно θ -форми рівняння Річардса-Клюта наближається до значення θ_{max} , то програмний комплекс автоматично замінює θ -форму рівняння на змішану форму для подальшого коректного обчислення значення потенціалу тиску.

Висновки до розділу 3

- Проаналізовані параметри побудови чисельних методів для рівняння Річардса-Клюта, серед яких основними є: форма рівняння, метод

дискретизації просторової похідної та метод дискретизації похідної по часу. Серед додаткових параметрів наведені метод розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь та модифікація чисельних методів зі стратегією розділення області на насичену та ненасичену зони.

- Представлений програмний комплекс, що реалізує процедуру знаходження наближеного розв'язку рівняння Річардса-Клюта в одно-, дво- та тривимірному випадках, а також рівняння Річардса-Клюта на графі за допомогою чисельних методів, процес конструювання яких також реалізований у даному програмному комплексі. Описані файли та можливості програмного комплексу.
- Інтерфейс вводу програмного комплексу дозволяє користувачу задавати не тільки тип області, в якій досліджується процес масопереносу, а і характеристики пористого середовища в цій області, а у випадку одновимірного рівняння Річардса-Клюта та рівняння Річардса-Клюта на графі також дозволяє задавати негетерогенні середовища.
- Програмний комплекс дозволяє зчитувати дані про граф, на якому розглядатиметься процес масопереносу, з окремого файлу з вказаним форматом даних. Граф вважається вкладеним у тривимірний простір з ребрами, що є прямими відрізками між вершинами.
- Інтерфейс виводу програмного комплексу дозволяє виводити розв'язки рівняння Річардса-Клюта на графіки для довільного значення часу та обирати функцію розв'язку з-поміж функцій потенціалу тиску та коефіцієнту насиченості.
- Програмний комплекс також зберігає рейтинг чисельних методів, сформованих на базі еталонних розв'язків для чотирьох критеріїв. Користувач також має можливість оновлювати даний рейтинг, зберігаючи свої еталони в файлах програмного комплексу.

- Обмеження програмного комплексу стосуються негомогенних середовищ виключно у випадку рівняння Річардса-Клюта, записаного у формі, де головною змінною є коефіцієнт насиченості середовища. Проблеми, що виникають в даному випадку, пов'язані з апроксимацією нелінійної залежності коефіцієнту насиченості від значення потенціалу тиску. Аналогічна проблема спостерігається для рівняння Річардса-Клюта, записаного у θ -формі, у ділянках досліджуваної області, де відбувається перехід до повністю насиченого середовища. У першому випадку не рекомендується використовувати чисельні методи, що мають таку комбінацію параметрів, у другому програмний комплекс автоматично замінює форму рівняння Річардса-Клюта на змішану для коректності подальшого процесу моделювання.

РОЗДІЛ 4

РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ

Для демонстрації роботи програмного комплексу розглянемо низку задач масопереносу в одно-, дво-, тривимірному випадках та на графі та знайдемо наближені розв'язки для відповідних рівнянь Річардса-Клюта.

4.1. Моделювання процесу масопереносу на графі

Розглянемо процес розповсюдження маси на графі, що заданий як показано рис. 4.1а. Рис. 4.1б містить схему графу.

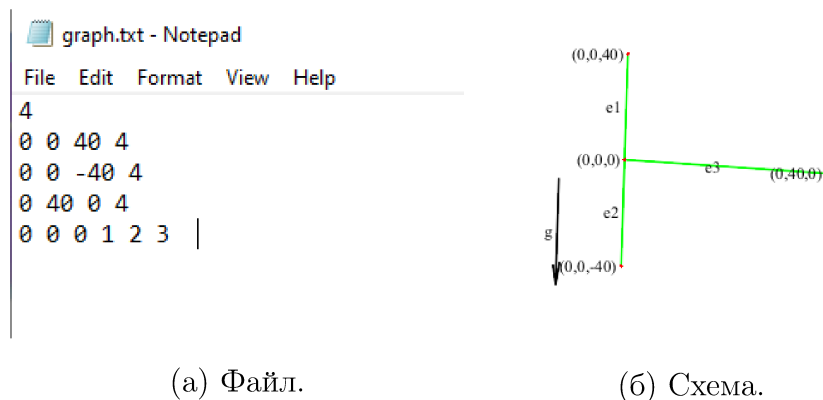


Рис. 4.1: Граф.

Граф G має 4 вершини, 1 з яких внутрішня, та три ребра e_1 , e_2 , e_3 .

Тоді ми маємо відповідно 3 одновимірних рівняння Річардса-Клюта для кожного з ребер та рівняння балансу маси у внутрішній вершині.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{\partial K}{\partial z}, z \in (0, 40), \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{\partial K}{\partial z}, z \in (-40, 0), \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial h}{\partial y} \right), y \in (0, 40), \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} h_{e_1}(0, 0, 0) &= h_{e_2}(0, 0, 0) = h_{e_3}(0, 0, 0), \\ q_{e_1}(0, 0, 0) + q_{e_2}(0, 0, 0) + q_{e_3}(0, 0, 0) &= 0. \end{aligned} \quad (4.4)$$

У якості параметрів пористого середовища на графі G оберемо наступні функції.

$$\begin{aligned} \theta(h) &= \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |h|^\beta} + \theta_r, \\ K(h) &= K_s \frac{A}{A + |h|^\gamma}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

де $\alpha = 1.611 \times 10^6$, $\beta = 4.96$, $\gamma = 4.74$, $\theta_{min} = \theta_r = 0.075$, $\theta_{max} = \theta_s = 0.287$, $A = 1.175 \times 10^6$ та $K_s = 0.00944$.

Початкову умову оберемо наступним чином.

$$h_0(x, y, z) = -61.5. \quad (4.6)$$

Для кожної з трьох крайових вершин графу G у якості крайової умови оберемо крайову умову першого роду із наперед заданою величиною потенціалу тиску, що на всіх трьох вершинах буде мати однакове значення.

$$h(v_1) = h(v_2) = h(v_3) = -20. \quad (4.7)$$

Параметрами дискретизації простору та часу оберемо відповідно $\Delta z = 0.4$ та $\Delta t = 0.5$, причому Δz однакове для всіх трьох ребер графу G .

Розглянемо тепер наближені розв'язки рівняння Річардса-Клюта на графі G , отримані чисельними методами, сконструйованими за допомогою різних параметрів з пункту 3.1. Серед цих параметрів оберемо форму рівняння Річардса-Клюта, метод апроксимації просторової похідної та кількість

шарів, що беруть участь у апроксимації похідної по часу. В усіх випадках реалізується неявна схема за часом. Тришарова схема реалізується за допомогою формули (3.3).

Рис. 4.2 містить графіки наближених розв'язків на ребрі e_1 для методу скінченних елементів для всіх комбінацій інших двох параметрів конструювання чисельних методів. Рис. 4.3 та рис. 4.4 містять аналогічні графіки наближених розв'язків на ребрі e_1 , отримані за допомогою відповідно методу скінченних об'ємів та методу скінченних різниць.

Всі значення були взяті при $T = 100$.

Щоб детальніше оцінити якість отриманих наближених розв'язків, порахуємо для них коефіцієнти балансу маси (3.4). Табл. 4.1 містить значення даної оцінки для усіх розглянутих чисельних методів, де буквами М, F та L позначені відповідно метод апроксимації похідної по простору, форма рівняння Річардса-Клюта та кількість шарів в апроксимації похідної по часу..

Таблиця 4.1

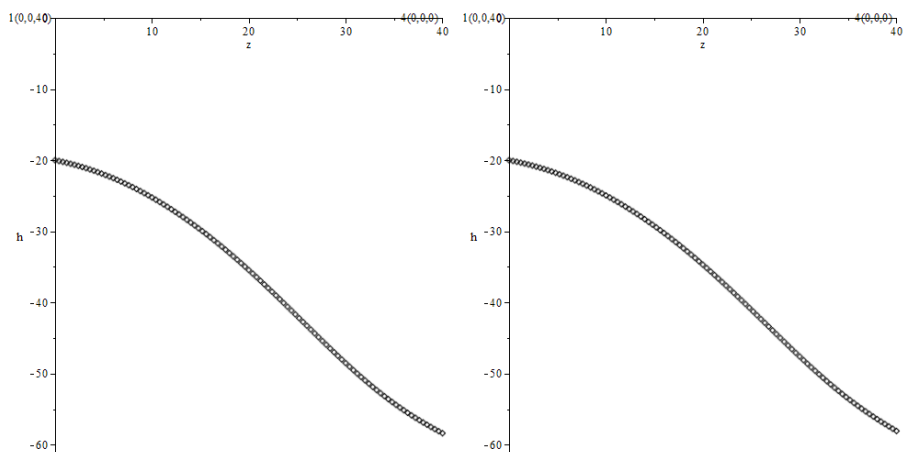
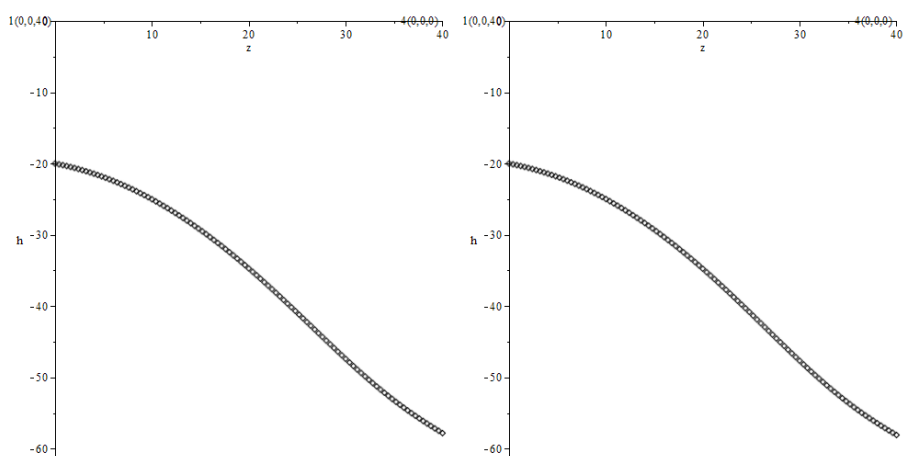
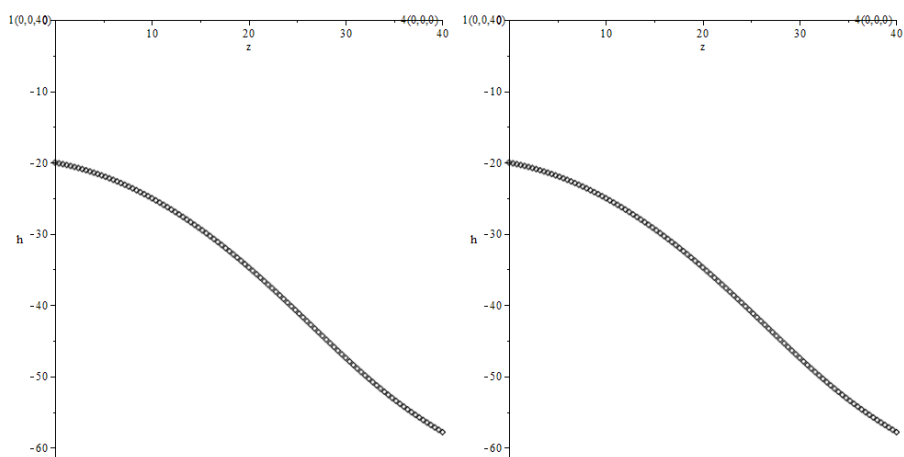
Значення коефіцієнту балансу маси для чисельних методів.

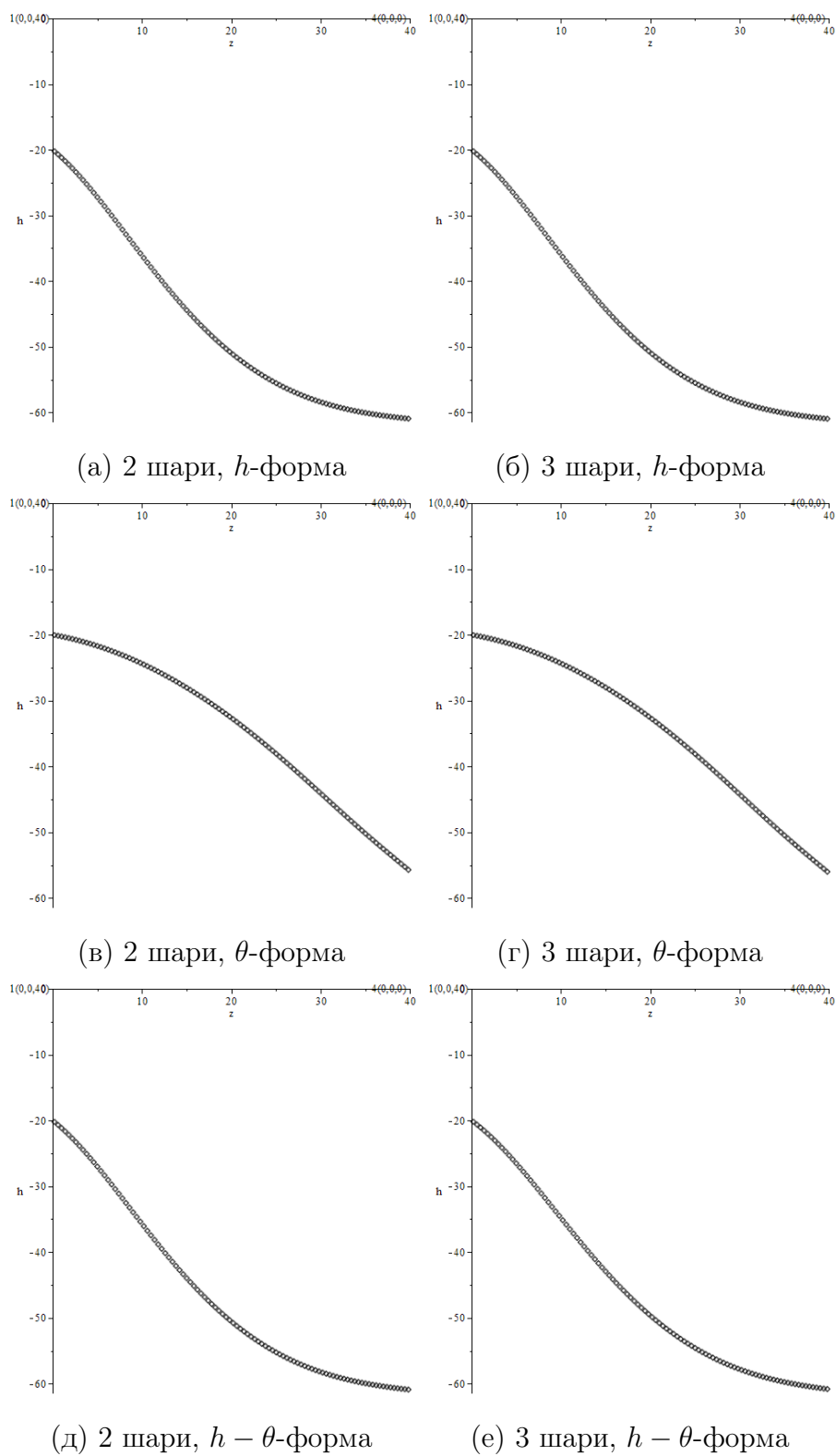
M \ L	FEM		FVM		FDM	
	2	3	2	3	2	3
h	0.7629+	0.9480-	0.1026+	0.1065+	0.0791-	0.0832-
theta	0.9644+	0.9972-	1.2765+	1.3361-	1.1992+	1.2502+
mixed	0.9702-	0.9942+	0.1075-	0.1325-	0.0867+	0.1782+

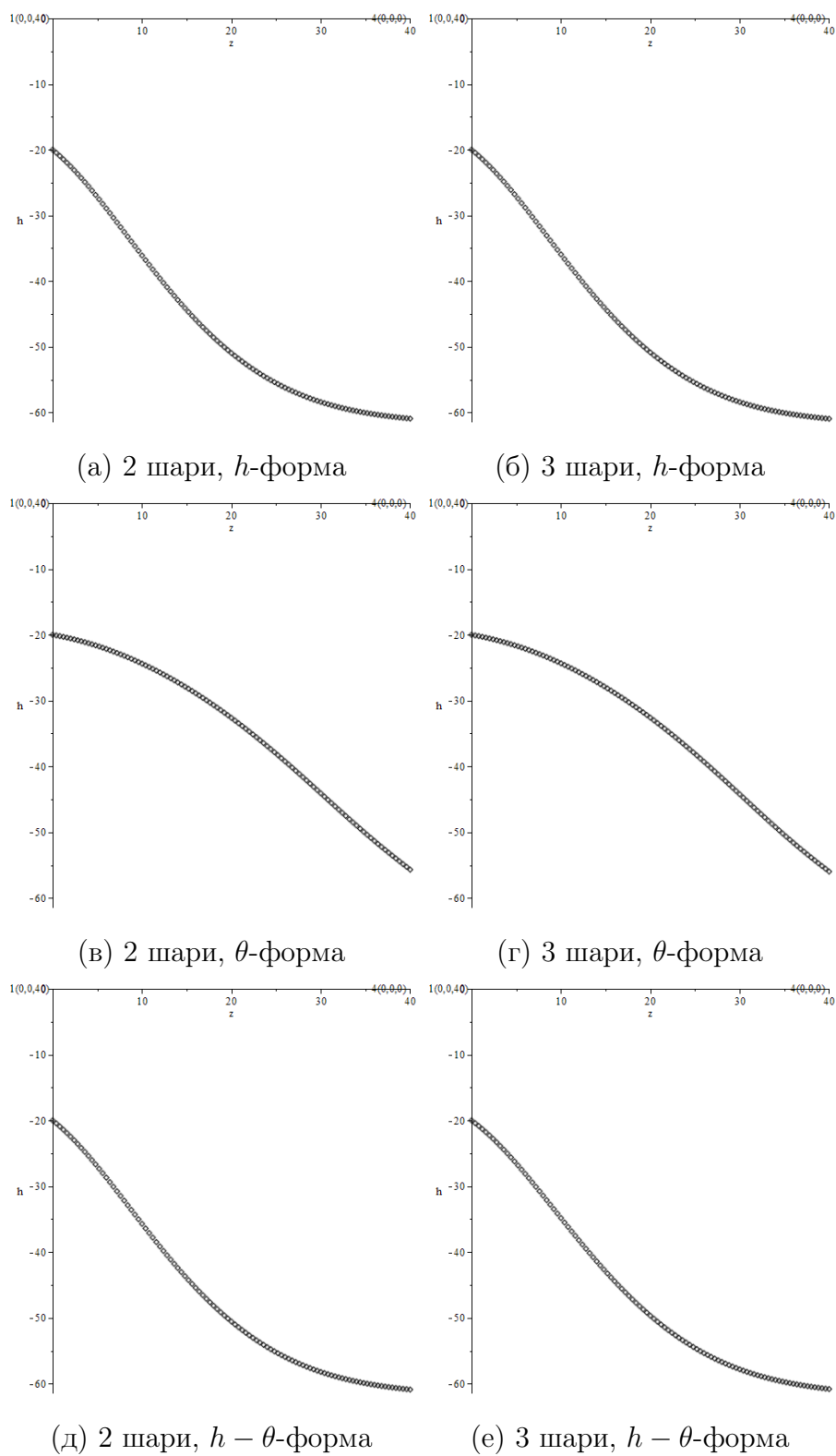
Тут і на далі вважаємо, що знаки + та - після числа означають, що точне значення оцінки було заокруглене вниз та вгору відповідно.

З таблиці можна зробити наступні висновки:

1. використання θ -форми рівняння Річардса-Клюта дає в середньому кращі результати незалежно від того, як обираються інші параме-

(а) 2 шари, h -форма(б) 3 шари, h -форма(в) 2 шари, θ -форма(г) 3 шари, θ -форма(д) 2 шари, $h - \theta$ -форма(е) 3 шари, $h - \theta$ -формаРис. 4.2: FEM, ребро e_1

Рис. 4.3: FVM, ребро e_1

Рис. 4.4: FDM, ребро e_1

- три чисельного методу;
2. використання трьохшарової схеми апроксимації похідної по часу дає в середньому кращі результати, ніж використання двохшарової схеми, проте не завжди підвищення ефективності є суттєвим;
 3. h -форма рівняння Річардса-Клюта дає найгірші результати, незалежно від того, як обираються інші параметри чисельного методу;
 4. метод скінченних елементів показує найкращі результати, незалежно від того, як обираються інші параметри чисельного методу.

Варто відзначити, що розв'язки, отримані методом скінченних елементів, а також всі розв'язки, отримані, відштовхуючись від θ -форми рівняння Річардса-Клюта, якісно відрізняються від інших наближених розв'язків, які, в свою чергу, досить схожі між собою. Тим самим множину наближених розв'язків, отриманими різними чисельними методами, можна умовно розділити на дві підгрупи. Перша з цих підгруп характеризується високим коефіцієнтом баласну маси, друга — аномально низьким. Проте для другої групи цей коефіцієнт має приблизно однакове значення, причому, як видно з графіків, отримані наближені розв'язки з другої групи дуже схожі один на одне, тому дана властивість поганої апроксимації наближених розв'язків не є аномальною для якоїсь конкретної комбінації параметрів і не помилкою реалізації, а скоріш свідчить про фундаментальні відмінності у використаних чисельних методах. Також можна відмитити, що на графіках наближені розв'язки з першої групи відрізняються від наближених розв'язків характером вигнутості отриманих функцій.

Проте дана ситуація не є типовою для рівняння Річардса-Клюта в цілому. В деяких випадках дані комбінації параметрів чисельних методів можуть показувати інші результати. Для підтвердження цього звернімося до даних моделювання процесу масопереносу в одновимірному випадку, що отримані в роботі [4].

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{\partial K}{\partial z}, z \in (0, L), \quad (4.8)$$

Пористе середовище з мірою L в цьому випадку має наступні властивості.

$$\begin{aligned} \theta(h) &= \theta_r + (\theta_s - \theta_r)e^{\alpha h}, \\ K(h) &= K_s e^{\alpha h}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

де $\alpha = 0.1$, $L = 100$, $\theta_{min} = \theta_r = 0.06$, $\theta_{max} = \theta_s = 0.40$ та $K_s = 1$.

Початковою умовою є наступна функція.

$$h(z, 0) = \frac{1}{\alpha} \cdot \ln q_A - (q_A - e^{\alpha h_0})e^{-\alpha z}, \quad (4.10)$$

де $q_A = 0.1$, $h_0 = 0$.

Крайовими умовами є умова першого роду на одному кінці та потік маси на іншому.

$$\begin{aligned} h(0, t) &= h_0, \\ K(h(L, t)) \frac{\partial}{\partial z} (h(L, t) + z) &= q_B, \end{aligned} \quad (4.11)$$

де $q_B = 0.9$.

За таких умов, як показано в [34], для даного рівняння Річардса-Клюта відомий аналітичний розв'язок, що задається наступною формулою

$$K = q_B - (q_B - e^{\alpha h_0})e^{-z} - 4(q_B - q_A)e^{\frac{L-z}{2}} e^{-\frac{z}{4}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(\lambda_n z) \sin(\lambda_n L) e^{-\lambda_n^2 t}}{1 + (L/2) + 2\lambda_n^2 L}, \quad (4.12)$$

де $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$ - розв'язки відповідної задачі Штурма-Ліувіля.

Графік даного розв'язку для деяких значень t наведено на рис. 4.5.

Таблиця 4.2 містить значення відносної похибки в порівнянні з аналітичним розв'язком та значення коефіцієнту балансу маси для низки комбіна-

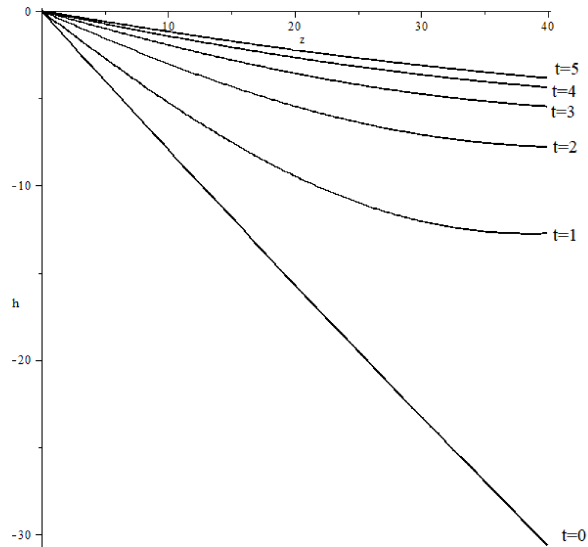


Рис. 4.5: Аналітичний розв'язок рівняння Річардса-Клюета (4.9)-(4.11)

цій параметрів чисельних методів. Параметрами дискретизації часу та простору були відповідно $\Delta t = 0.1$ та $\Delta z = 2$. Оцінки наближених розв'язків обчислювалися при значенні $t = 5$.

З табл. 4.2 видно, що найкращі показники має метод скінченних різниць, в той час як методи скінченних елементів та скінченних об'ємів показують приблизно однакові результати, незалежно від інших параметрів чисельного методу.

Основною відмінністю рівняння Річардса-Клюета (4.1)-(4.7) від рівняння (4.8)-(4.11), окрім різних характеристик пористого середовища, є наявність у рівнянні (4.1)-(4.7) стрибку в крайових умовах. За рахунок нелінійності рівняння Річардса-Клюета, наявність розривів у початково-крайових умовах може, за умови невдалого вибору кроку по простору та часу, призводити до стрибків значень наближеного розв'язку. Особливо часто це спостерігається, коли наближений розв'язок досягає граничних значень коефіцієнту насиченості θ (тобто поблизу зони повного насичення та взагалі ненасиченої зони), де значення функцій та можуть як завгодно близько наближатися до нуля. У випадку рівняння Річардса-Клюета (4.8)-(4.11) не спостерігається стрибків ані в початкових, ані в крайових умовах, тому

Таблиця 4.2

**Оцінки для наближених розв'язків рівняння Річардса-Клюта
(4.9)-(4.11)**

Метод	Форма рівняння	Кількість шарів	δ_h	МВ
FDM	h-форма	2	9.115e-4	0.9875
FEM	h	2	7.451e-3	0.9757
FVM	h	2	7.450e-3	0.9737
FDM	θ -форма	2	6.629e-4	0.9883
FEM	θ	2	4.564e-3	0.9801
FVM	θ	2	4.499e-3	0.9803
FEM	h- θ -форма	2	4.751e-3	0.9793
FEM	h- θ	2	4.593e-3	0.9795
FEM	h	3	3.337e-4	0.9831
FVM	h	3	2.598e-4	0.9769

різні чисельні методи дають більш-менш однаково гарні результати апроксимації зі значенням коефіцієнту балансу маси поблизу 0.98.

Відмінністю результатів моделювання для різних комбінацій параметрів чисельних методів у двох даних випадках рівняння Річардса-Клюта і пояснюється необхідність мати ефективний інструмент порівняння різних чисельних методів, що і реалізований у запропонованому програмному комплексі.

Повертаючись до рівняння Річардса-Клюта на графі (4.1)-(4.7), в даному випадку найкраще показав себе чисельний метод, що використовував метод скінченних елементів з трьохшаровою схемою для рівняння Річардса-Клюта у θ -формі. Значення коефіцієнту балансу маси досягло при використанні даної комбінації параметрів значення 0.9972.

На рис. 4.6 зображена схема всього графу в момент часу $t = 100$ з відображенням значення потенціалу тиску на графі.

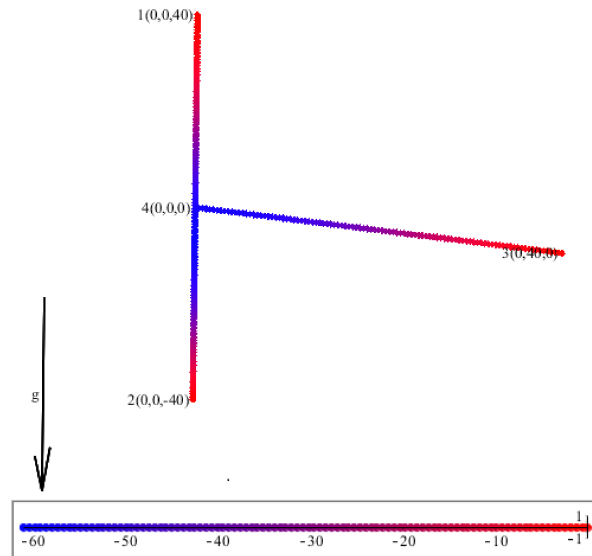


Рис. 4.6: Значення потенціалу тиску на графі.

Рисунок 4.7 містить графіки значення функції потенціалу тиску для всіх ребер графу G у деякі моменти часу. На кожному з графіків просторова координата відраховується в напрямку від крайової вершини до внутрішньої.

З графіків можна оцінити характер та якість впливу гравітаційної сили на потік маси, адже, врахувуючи положення графу G у просторі, ми маємо для ребра e_1 позитивний вплив гравітації, що стимулює розповсюдження маси від крайової вершини до внутрішньої, для ребра e_2 - негативний вплив, що перешкоджає розповсюдженню, і для ребра e_3 - відсутність впливу гравітації, коли маса розповсюджується виключно через різницю в потенціалі тиску.

З графіків також видно, що вклад гравітаційної сили в процес розповсюдження маси в ребрі e_1 достатній для того, щоб, починаючи з $t = 80$, до ребер e_2 та e_3 маса починала надходити не лише з крайових вершин, інцидентних цим ребрам, а й з внутрішньої вершини, до якої вона поступає саме з ребра e_1 .

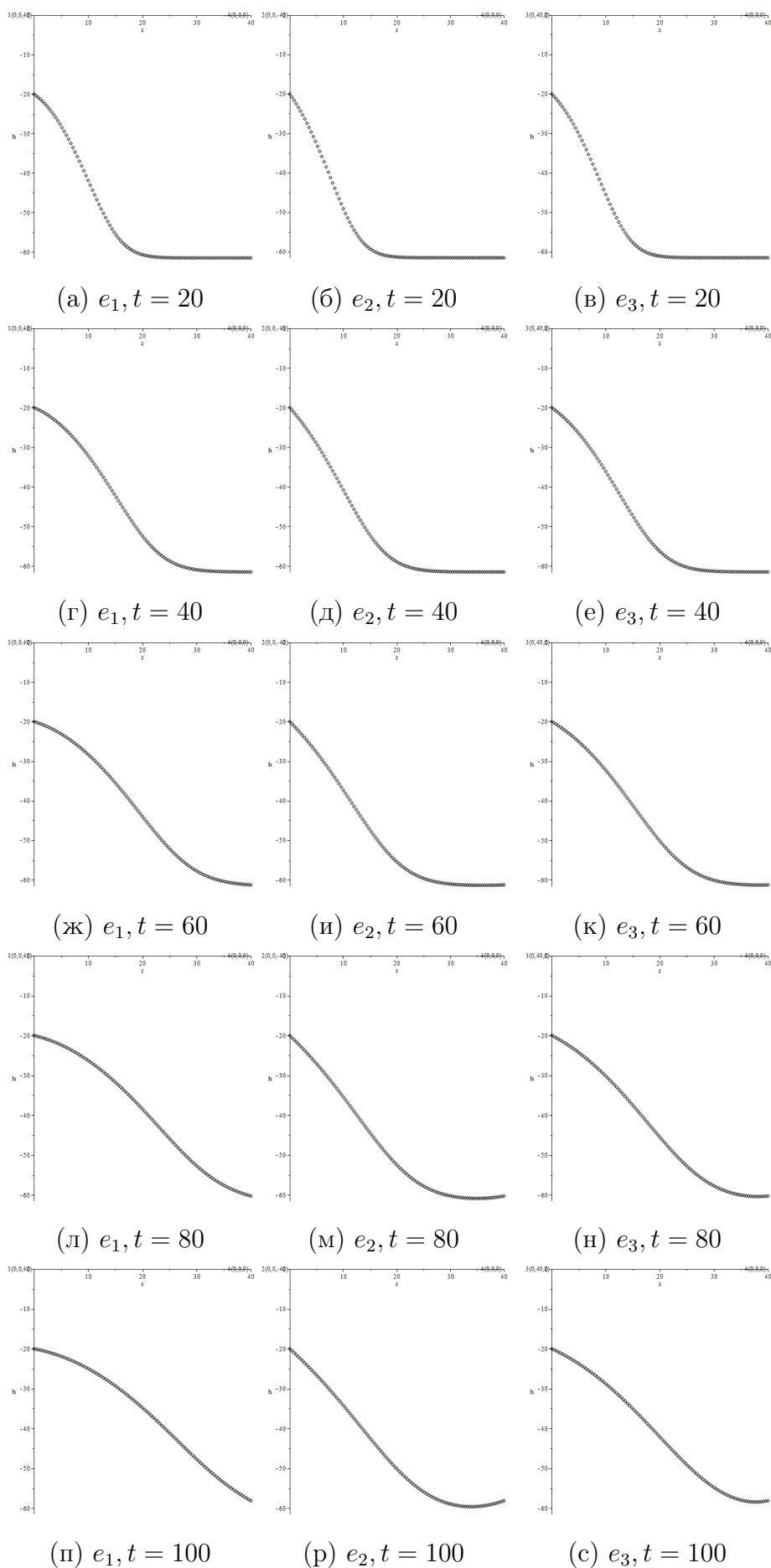
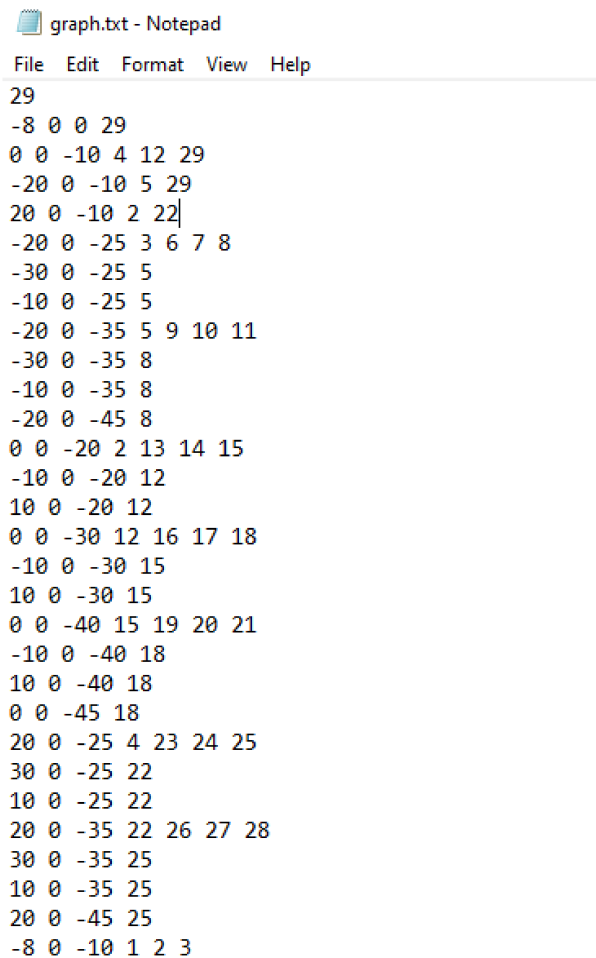


Рис. 4.7: Графіки значень наближеного розв'язку h на ребрах графу.

4.2. Моделювання процесу масопереносу в іригаційній системі

Розглянемо ще одну задачу масопереносу на графі, проте цього разу структуру графу оберемо складнішою та змінимо крайові умови.

На рис. 4.8 зображений файл, в якому записаний граф для зчитування його програмним комплексом.



```

graph.txt - Notepad
File Edit Format View Help
29
-8 0 0 29
0 0 -10 4 12 29
-20 0 -10 5 29
20 0 -10 2 22
-20 0 -25 3 6 7 8
-30 0 -25 5
-10 0 -25 5
-20 0 -35 5 9 10 11
-30 0 -35 8
-10 0 -35 8
-20 0 -45 8
0 0 -20 2 13 14 15
-10 0 -20 12
10 0 -20 12
0 0 -30 12 16 17 18
-10 0 -30 15
10 0 -30 15
0 0 -40 15 19 20 21
-10 0 -40 18
10 0 -40 18
0 0 -45 18
20 0 -25 4 23 24 25
30 0 -25 22
10 0 -25 22
20 0 -35 22 26 27 28
30 0 -35 25
10 0 -35 25
20 0 -45 25
-8 0 -10 1 2 3

```

Рис. 4.8: Файл графу, що моделює іригаційну систему.

Схема графу G після зчитування зображена на рис. 4.9.

У якості параметрів, що характеризують пористе середовище на графі, оберемо функції

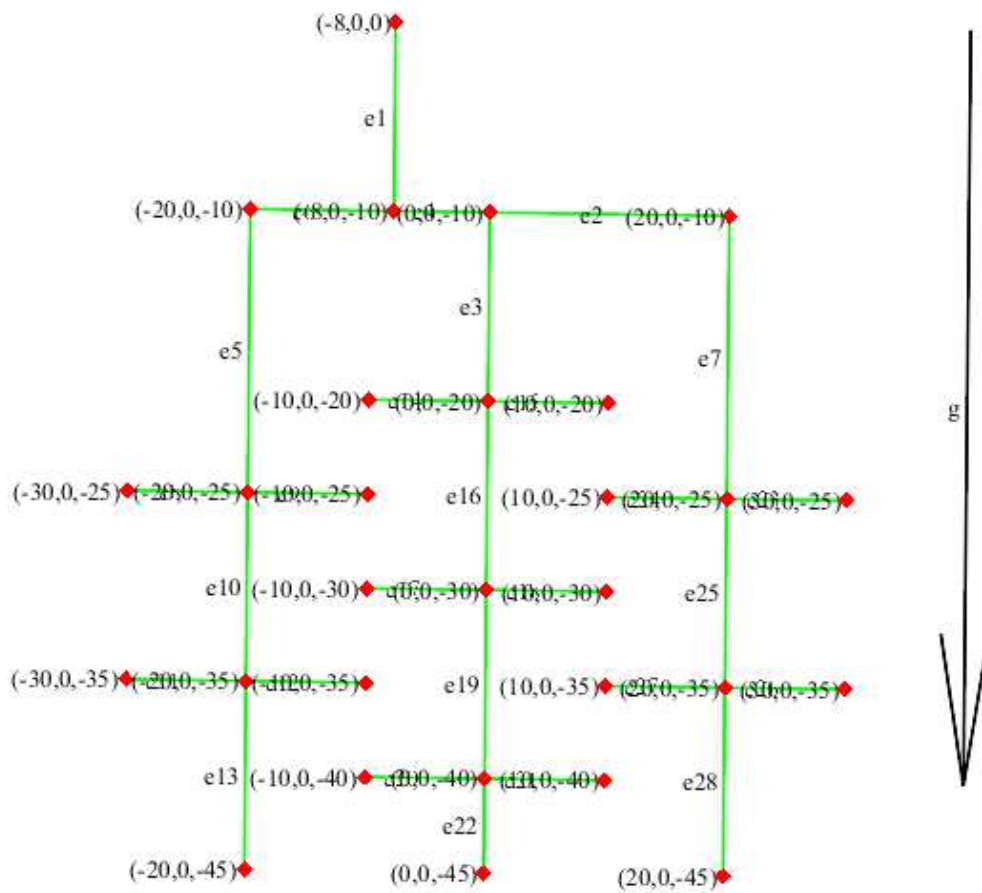


Рис. 4.9: Схема іригаційної системи.

$$\theta(h) = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |h|^\beta} + \theta_r, \quad (4.13)$$

$$K(h) = K_s \frac{A}{A + |h|^\gamma},$$

де $\alpha = 1.611 \times 10^6$, $\beta = 4.96$, $\gamma = 4.74$, $\theta_{min} = \theta_r = 0.075$, $\theta_{max} = \theta_s = 0.287$, $A = 1.175 \times 10^6$ та $K_s = 0.00944$.

Початкову умову оберемо наступним чином.

$$h_0(x, y, z) = -61.5. \quad (4.14)$$

Для вершини з координатами $(-8, 0, 0)$ вкажемо у якості крайової умови заданий відємний потік маси величиною -0.02 . Для інших крайових вершин запишемо у якості крайової умови умову непроникненості, тобто

$$q = 0. \quad (4.15)$$

Для того, щоб матриця системи не була невиродженою, на одній з крайових вершин ініціалізуємо крайову умову першого роду, а саме:

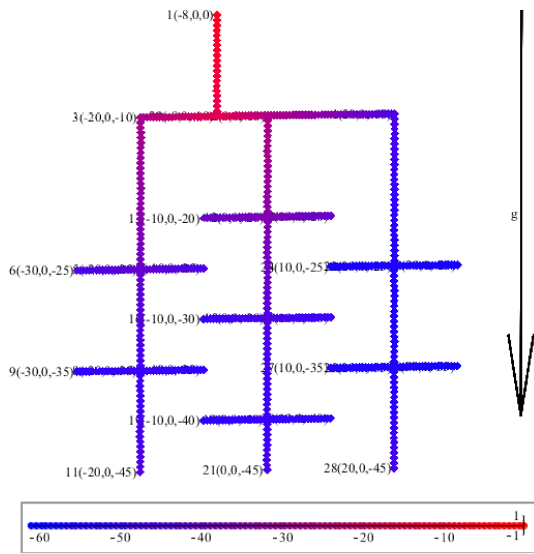
$$h_{26} = h(30, 0, -35) = -61.5. \quad (4.16)$$

Тоді маса з плином часу буде продовжувати надходити до системи через ребро e_1 , розповсюджуючись іншими ребрами, і, оскільки інших виходів для маси немає, значення насиченості повинне рости на всьому графі G .

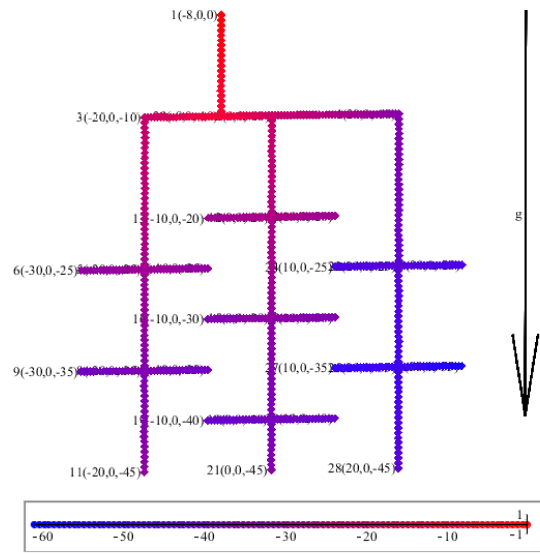
Параметрами дискретизації простору та часу оберемо величини $\Delta z = 0.5$ та $\Delta t = 2$, причому Δz однакова для всіх ребер.

У якості чисельного методу був обраний метод скінченних елементів з двохшаровою неявною схемою по часу, записаний для θ -форми рівняння Річардса-Клюта на графі.

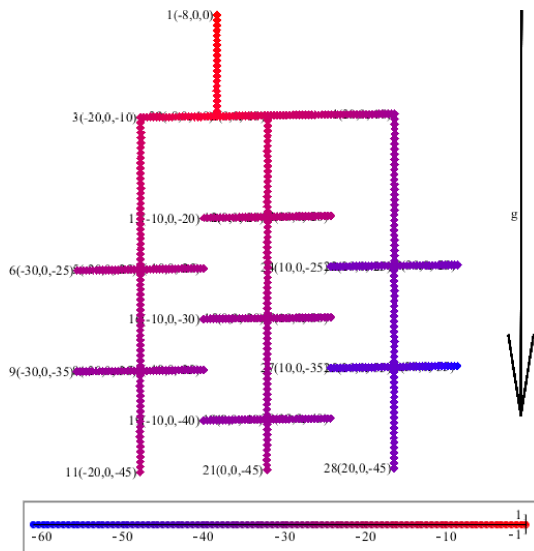
Рис. 4.10 містить схеми графу G у деякі моменти часу з позначеною на графі величиною потенціалу тиску h .



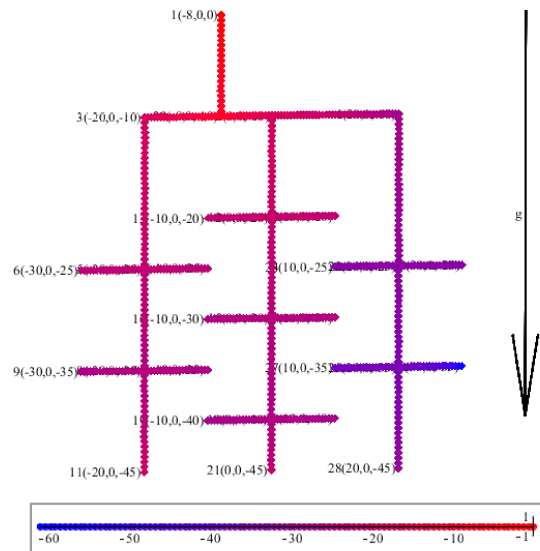
(a) $t = 250$



(б) $t = 500$



(в) $t = 750$



(г) $t = 1000$

Рис. 4.10: Розповсюдження маси іригаційною системою.

З графіків видно, що, як і можна було передбачити з інтуїтивних міркувань, граф поступово заповнюється масою, що надходить з ребра e_1 , причому найправіше вертикальне відгалуження графу G заповнюється останнім та найменш інтенсивно. Також варто відзначити, що, за рахунок того, що в найнижчих вершинах графу реалізована умова непроникненості, а дія гравітації впливає на масу всередині графу навіть, поки до конкретної ділянки не дісталася зміна потенціалу тиску, спричинена потоком маси через вершину 1, то в найнижчих вершинах накопичується певна маса, що спричиняє зміну величини потенціалу тиску на рисунку 4.10а.

Рис. 4.11 містить графік наближеного розв'язку для даного рівняння Річардса-Клюта на графі для ребра e_1 в момент часу $t = 1000$.

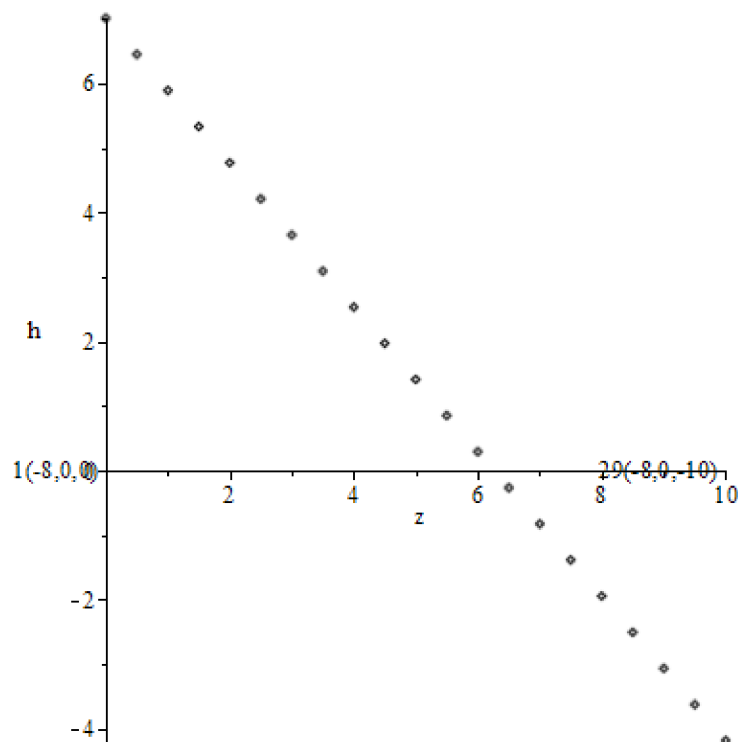


Рис. 4.11: Значення потенціалу тиску на ребрі e_1 в момент часу $t = 1000$.

З рисунку видно, що значення потенціалу тиску до моменту часу $t = 1000$ на частині ребра вийшло в позитивну зону, що означає, що у цій частині ребра утворилася зона повного насичення. Варто відзначити, що, як і описано в пункті 3.7, у момент часу, коли значення коефіцієнту наси-

ченості на ребрі e_1 наближалось до максимально можливого, процедура обчислення наближеного розв'язку автоматично змінила форму рівняння Річардса-Клюта на графі з θ -форми на змішану форму для коректності подальшого процесу моделювання.

В момент $t = 1000$ для даного процесу з даним чисельним методом отримана оцінка балансу маси, що становить 0.9882-.

4.3. Моделювання процесу масопереносу га графі з негомогенним середовищем

Розглянемо тепер процес масопереносу на графі, ребра якого мають різні параметри пористого середовища. Нехай маємо граф, що зображений на рис. 4.1.

Граф G має 4 вершини, 1 з яких внутрішня, та три ребра e_1, e_2, e_3 .

Тоді ми маємо відповідно 3 одновимірних рівняння Річардса-Клюта для кожного з ребер та рівняння балансу маси у внутрішній вершині.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{\partial K}{\partial z}, z \in (0, 40), \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{\partial K}{\partial z}, z \in (-40, 0), \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial h}{\partial y} \right), y \in (0, 40), \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} h_{e_1}(0, 0, 0) &= h_{e_2}(0, 0, 0) = h_{e_3}(0, 0, 0), \\ q_{e_1}(0, 0, 0) + q_{e_2}(0, 0, 0) + q_{e_3}(0, 0, 0) &= 0. \end{aligned} \quad (4.20)$$

У якості параметрів пористого середовища на графі G оберемо наступні функції.

$$\theta(h) = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |h|^\beta} + \theta_r, \quad (4.21)$$

$$K(h) = K_s \frac{A}{A + |h|^\gamma},$$

де параметри даних функцій залежать від ребра графу. Нехай для e_1 вони будуть наступними: $\alpha = 1.611 \times 10^6$, $\beta = 4.96$, $\gamma = 5.74$, $\theta_{min} = \theta_r = 0.075$, $\theta_{max} = \theta_s = 0.287$, $A = 1.175 \times 10^6$ та $K_s = 0.00944$. Нехай для e_2 вони будуть наступними: $\alpha = 1.611 \times 10^6$, $\beta = 4.96$, $\gamma = 4.74$, $\theta_{min} = \theta_r = 0.075$, $\theta_{max} = \theta_s = 0.287$, $A = 1.175 \times 10^6$ та $K_s = 0.00944$. Нехай для e_3 вони будуть наступними: $\alpha = 1.611 \times 10^6$, $\beta = 4.56$, $\gamma = 3.74$, $\theta_{min} = \theta_r = 0.075$, $\theta_{max} = \theta_s = 0.287$, $A = 1.175 \times 10^6$ та $K_s = 0.00944$.

Початкову умову оберемо наступним чином.

$$h_0(x, y, z) = -61.5. \quad (4.22)$$

Для кожної з трьох крайових вершин графу G у якості крайової умови оберемо крайову умову першого роду із наперед заданою величиною потенціалу тиску, що на всіх трьох вершинах буде мати однакове значення.

$$h(v_1) = h(v_2) = h(v_3) = -20. \quad (4.23)$$

Рис. 4.12 та 4.13 містить графіки наближеного розв'язку у деякі моменти часу для всіх трьох ребер графу, отримані за допомогою методу скінченних елементів з двокроковою схемою по часу для рівняння Річардса-Клюта у змішаній формі. Параметрами дискретизації були $\Delta z = 0.4$ та $\Delta t = 1$.

Рис. 4.14 містить графіки значень розв'язку h на графі в деякі моменти часу.

З графіків видно, що за різних параметрів пористих середовищ на графі по-різному відбувається процес розповсюдження маси від крайових вершин до внутрішньої. Тепер, на відміну від випадку гомогенного середовища на

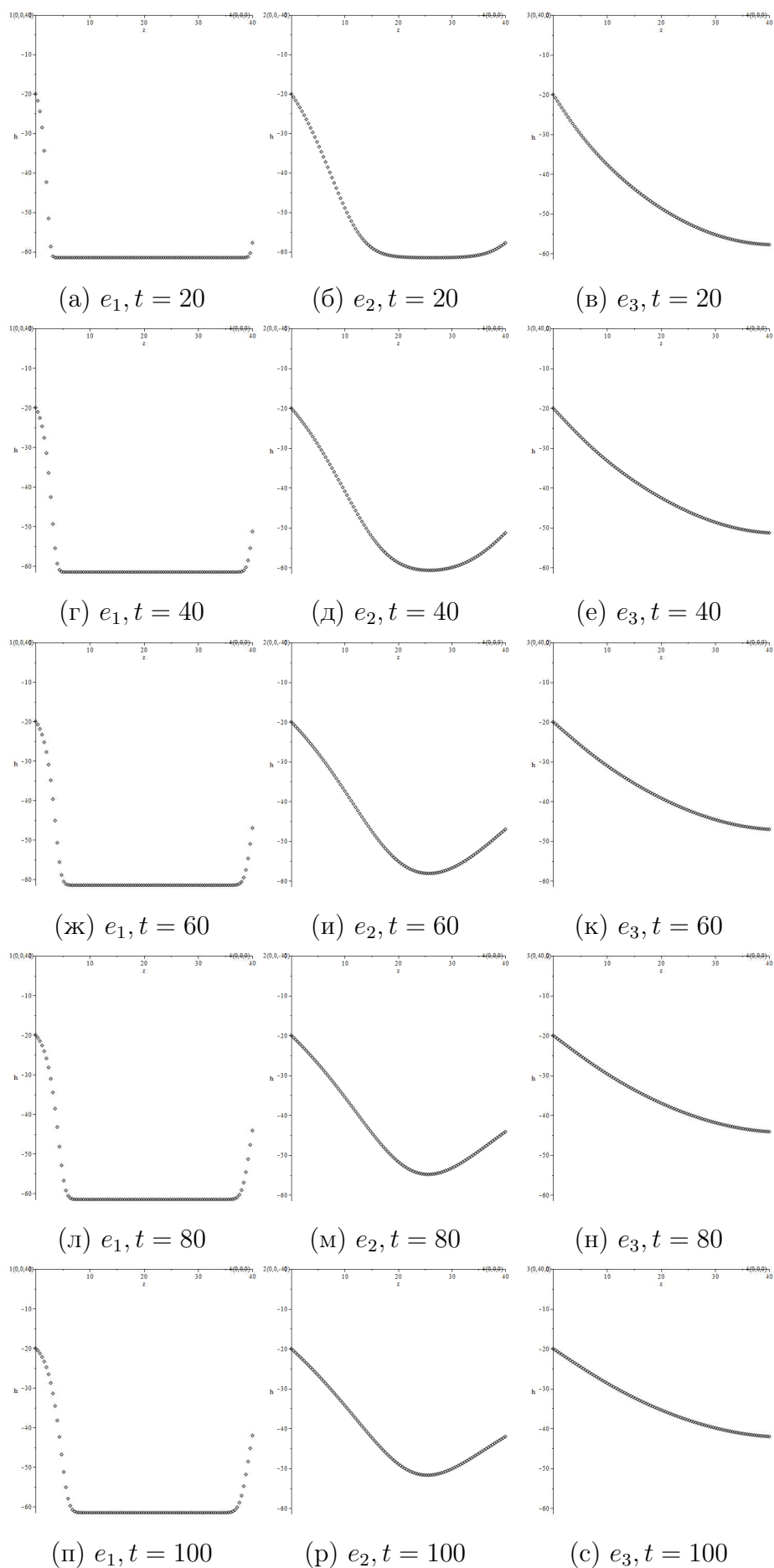


Рис. 4.12: Графіки наближених розв'язків h для ребер графу.

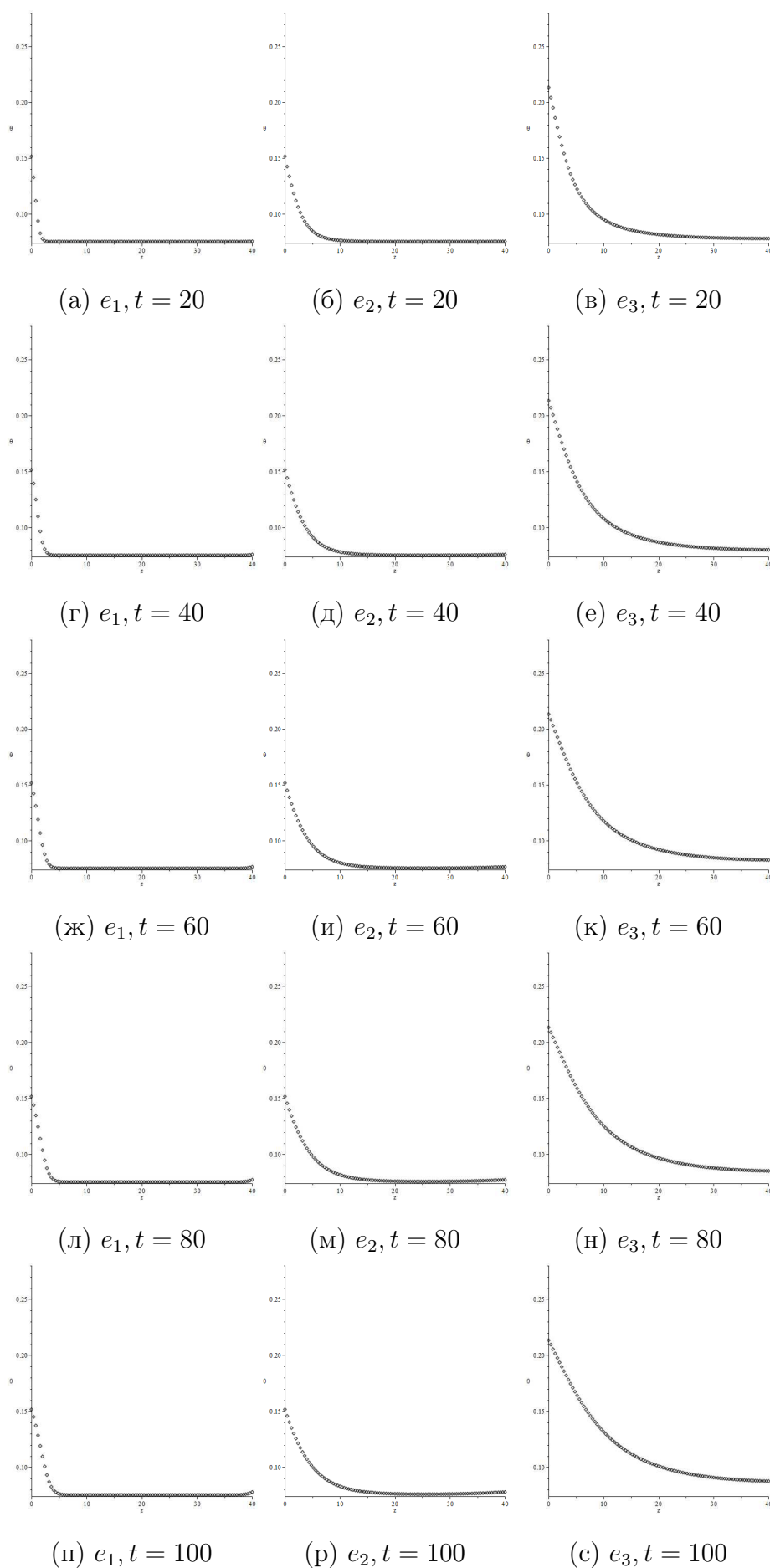
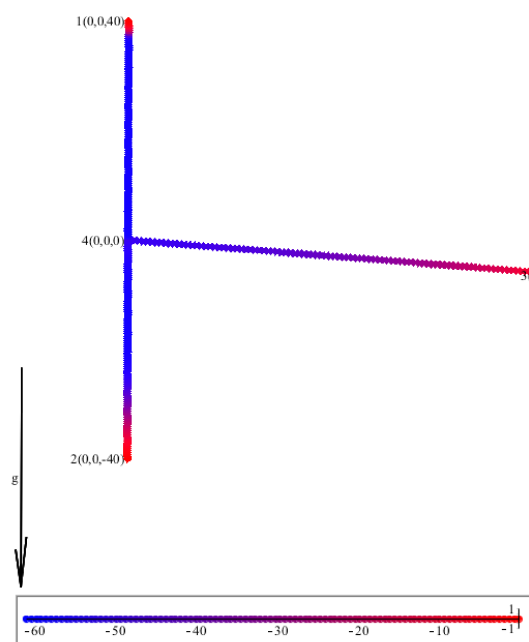
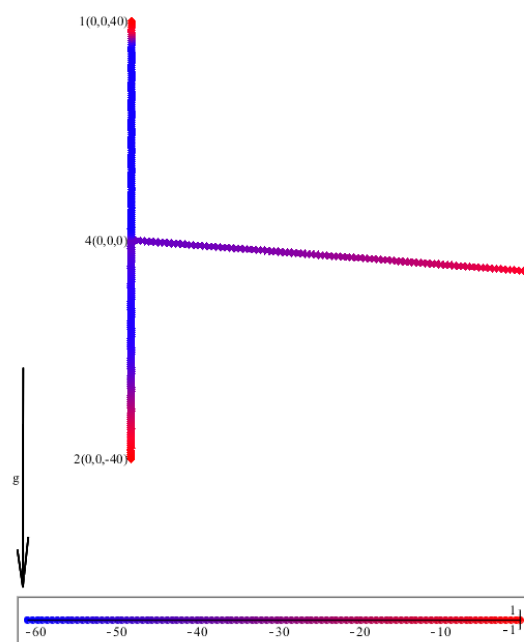
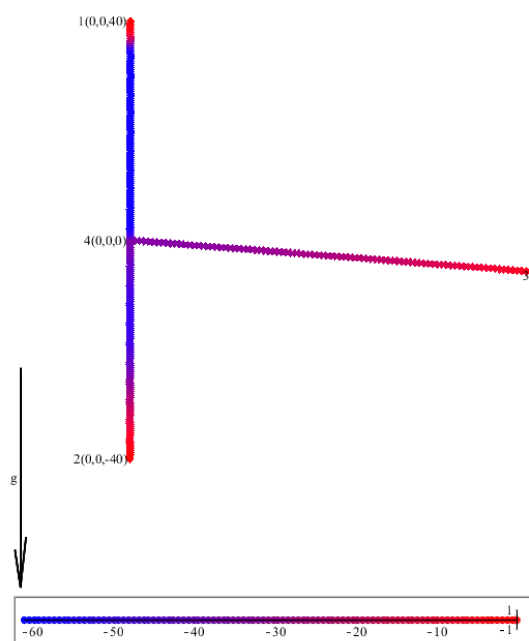
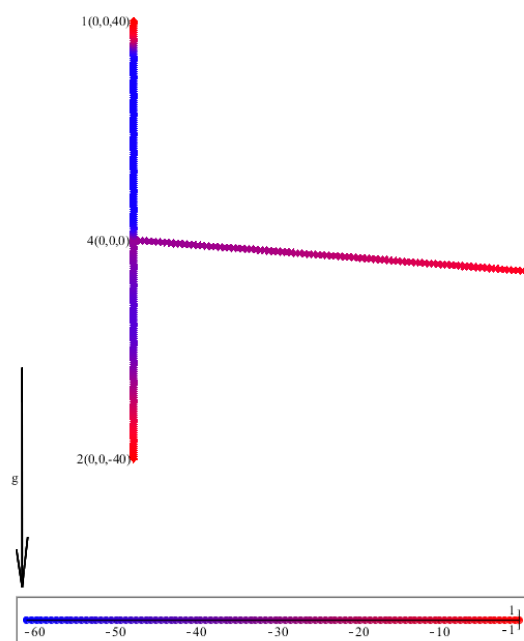


Рис. 4.13: Графіки наближених розв'язків θ для ребер графу.

(a) $t = 25$ (б) $t = 50$ (в) $t = 75$ (г) $t = 100$ Рис. 4.14: Значення розв'язку h на графі.

графі, потік маси через внутрішню вершину йде з напрямку від ребра e_3 до ребер e_1 та e_2 . Варто також відзначити, що, оскільки функція $\theta(h)$ на ребрі e_3 відрізняється від інших, то і на графіках розв'язку θ значення коефіцієнту насиченості за однакових величин потенціалу тиску на крайових та у внутрішній вершині відрізняються на ребрі e_3 від аналогічних значень на ребрах e_1 та e_2 , які, в свою чергу, співпадають між собою.

Даний експеримент показав оцінку балансу маси, що дорівнює $0.9805+$.

4.4. Моделювання процесу масопереносу в двовимірному випадку

Розглянемо двовимірне рівняння Річардса-Клюта з наступними параметрами пористого середовища та крайовими умовами.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial K}{\partial z}, \quad (y, z) \in (0, 5) \times (0, 5), \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} h(y, z, 0) = h(y, 0, t) = -61.5, \quad q(y, 5, t) = -0.002 + 0.0005y, \\ q(0, z, t) = -0.0005z, \quad q(5, z, t) = 0, \end{aligned} \quad (4.25)$$

$$\theta(h) = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |h|^\beta} + \theta_r, \quad (4.26)$$

$$K(h) = K_s \frac{A}{A + |h|^\gamma},$$

де $\alpha = 1.611 \times 10^6$, $\beta = 4.96$, $\gamma = 4.74$, $\theta_{min} = \theta_r = 0.075$, $\theta_{max} = \theta_s = 0.287$, $A = 1.175 \times 10^6$ та $K_s = 0.00944$. Тобто ми маємо квадратну область, де в якості крайових умов знизу визначене значення потенціалу тиску, справа — умова непроникненості, а зверху та зліва до області надходить потік маси з найбільшою інтенсивністю у верхньому лівому куті.

Рис. 4.15 містить графіки для розв'язку h даного рівняння у деякі моменти часу, отримані методом скінченних елементів для змішаної форми

рівняння при використанні трьохшарової неявної схеми. Параметрами дискретизації були $\Delta z = \Delta y = 0.25$, $\Delta t = 0.1$. Оцінка балансу маси в момент $t = 50$ в даному випадку становить 0.9441-.

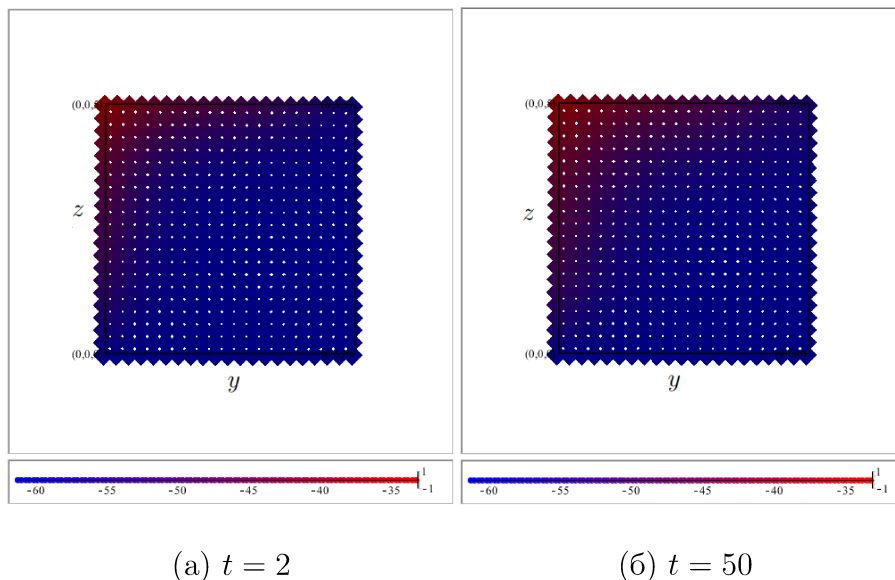


Рис. 4.15: Наближений розв'язок для двовимірного рівняння Річардса-Клюта.

4.5. Моделювання процесу масопереносу в тривимірному випадку

Розглянемо тривимірне рівняння Річардса-Клюта з наступними параметрами пористого середовища та крайовими умовами.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial K}{\partial z}, \quad (x, y, z) \in (0, 5) \times (0, 5) \times (0, 5), \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} h(x, y, z, 0) = h(x, y, 0, t) = q(0, y, z, t) = q(5, y, z, t) = \\ = q(x, 0, z, t) = q(x, 5, z, t) = -61.5, \quad h(x, y, 5, t) = -20 - 3x - 3y, \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\theta(h) = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |h|^\beta} + \theta_r, \quad (4.29)$$

$$K(h) = K_s \frac{A}{A + |h|^\gamma},$$

де $\alpha = 1.611 \times 10^6$, $\beta = 4.96$, $\gamma = 4.74$, $\theta_{min} = \theta_r = 0.075$, $\theta_{max} = \theta_s = 0.287$, $A = 1.175 \times 10^6$ та $K_s = 0.00944$. Тобто ми маємо кубічну область, де в якості крайових умов обрані умови першого роду згори і знизу, а по бокам встановлена умова непроникненості, таким чином, потік маси повинен йти згори донизу.

Рис. 4.15 містить графіки для розв'язку h даного рівняння в момент часу $t = 50$ при деяких фіксованих значеннях z , отримані методом скінченних об'ємів для θ -форми рівняння при використанні двохшарової неявної схеми. Параметрами дискретизації були $\Delta z = \Delta y = \Delta x = 0.5$, $\Delta t = 0.2$.

Висновки до розділу 4

- Для рівняння Річардса-Клюта на графі за допомогою побудованого програмного комплексу були отримані розв'язки для чисельних методів, сконструйованих за трьома параметрами: метод апроксимації похідної по простору, форма рівняння та спосіб апроксимації похідної по часу. Найкращий результат дав оцінку балансу маси, що дорівнює 99.72%. Також були проаналізовані результати інших чисельних методів та передумови у вигляді параметрів рівняння Річардса-Клюта для таких результатів.
- Для графу, що містить 28 ребер та моделює іригаційну систему, був змодельований процес розповсюдження маси з однієї вершини по всьому графу, причому вхідний потік маси був фіксований. Для даного процесу проаналізовані результати розповсюдження маси по системі. В ребрі, що сполучає вершину з вхідним потоком маси з іншою частиною графу, спостерігалось утворення зони повного наси-

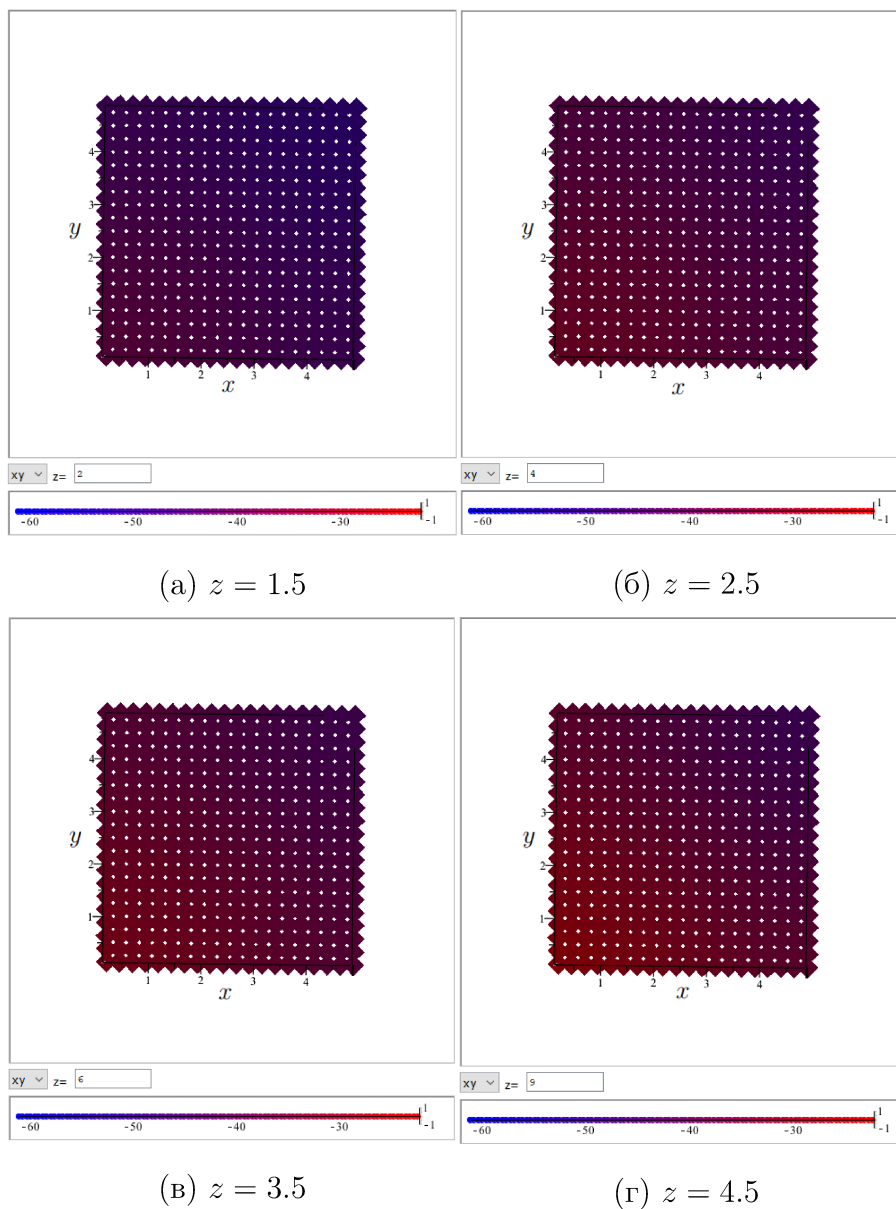


Рис. 4.16: Перерізи наближеного розв'язку для тривимірного рівняння Річардса-Клюта.

чення. В результаті цього програмний комплекс автоматично змінив форму рівняння Річардса-Клюта, яка використовувалася у чисельному методі. Результат моделювання показав оцінку балансу маси, що дорівнює 98.82%.

- Для рівняння Річардса-Клюта на графі з негомогенним пористим середовищем був отриманий наближений розв'язок, що показав оцінку балансу маси, яка дорівнює 98.05%. Були проаналізовані результати моделювання, що полягали у відмінностях стосовно процесу розповсюдження маси в різних ребрах графу залежно від параметрів пористого середовища в них.
- Для двовимірного рівняння Річардса-Клюта з крайовими умовами першого та другого роду був отриманий наближений розв'язок, що показав оцінку балансу маси, яка дорівнює 94.41%.

ВИСНОВКИ

- Вперше розглянуто задачу масопереносу в пористому середовищі на графі, що описувалася одновимірними рівняннями Річардса-Клюта на ребрах за додаткових умов збереження маси у внутрішніх вершинах графу.
- Обґрунтовано існування слабкого розв'язку для рівняння Річардса-Клюта на графі для випадку гомогенного пористого середовища та крайових умов першого та другого роду.
- Доведено результат стосовно стійкості розв'язків рівняння Річардса-Клюта на графі від початково-крайових умов.
- Вперше побудовано програмний комплекс, що дозволяє моделювати процес масопереносу в пористому середовищі в одно-, дво- та тривимірному випадках, а також процес масопереносу в пористому середовищі на графі за допомогою чисельних методів, процес конструювання яких реалізований в самому програмному комплексі. Програмний комплекс також дозволяє користувачу обирати параметри чисельного методу для розв'язання рівняння Річардса-Клюта.
- Запропоновано метод підвищення ефективності процесу моделювання з використанням чисельних методів для рівняння Річардса-Клюта на графі, що полягає в розділенні досліджуваної області на насичену та ненасичені зони.
- Експеримент продемонстрував високу точність процесу моделювання як для рівнянь Річардса-Клюта на графі, так і для дво- та тривимірних випадків. Для графу, що мав 28 ребер, результати моделювання показали оцінку балансу маси, що дорівнює понад 98%.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. V. A. Kolesnykov and D. A. Klyushin, "Full saturated zone tracking numerical method for the Richards-Klute equation," *Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2023: тези доповідей Вісімнадцятої міжнародної конференції*, 13–15 листопада 2023 р. Чернігів, С. 7–10, 2023. ISBN 978-617-7932-57-3
2. В. А. Колесников, "Структура матриць системи лінійних алгебраїчних рівнянь для задачі моделювання масопереносу в пористому середовищі на графі," *2023 2nd International Conference on Innovative Solutions in Software Engineering*, 29–30 листопада 2023 р. Івано-Франківськ, 2023. 10.5281/zenodo.10397356
3. В. А. Колесников, "Рівняння Річардса-Клюта: огляд методів розв'язування," *Журнал обчислювальної та прикладної математики*, № 1, С. 22–34, 2022. <https://doi.org/10.17721/2706-9699.2022.1.02>
4. В. А. Колесников, "Аналіз побудови чисельних методів для розв'язання рівняння Річардса-Клюта," *Журнал обчислювальної та прикладної математики*, № 1, С. 28–38, 2023. <https://doi.org/10.17721/2706-9699.2023.1.03>
5. В. А. Колесников, "Ефективний чисельний метод для розв'язання рівняння Річардса-Клюта за умов монотонності розв'язку," *Журнал обчислювальної та прикладної математики*, № 2, С. 42–51, 2023. <https://doi.org/10.17721/2706-9699.2023.2.03>
6. В. А. Колесников, "Ефективний чисельний метод для розв'язання рівняння Річардса-Клюта з відстеженням зони повного насичення," *Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фізико-математичні науки*, № 2, С. 206–213, 2023.

<https://doi.org/10.17721/1812-5409.2023/2.37>

7. В. А. Колесников, "Теорема існування для задачі масопереносу на графі," *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: фізико-математичні науки.*, 24, С. 70–80, 2023. <https://doi.org/10.32626/2308-5878.2023-24.70-80>
8. В. А. Колесников та С.І. Ляшко, "Стійкість розв'язків рівняння Річардса-Клюта," *Доповіді Національної академії наук України*, № 6, С. 12–18, 2023. <https://doi.org/10.15407/dopovidi2023.06.012>
9. L. F. Richardson, "Weather prediction by numerical process," *University Press (Cambridge)*, p. 262, 1922. <https://doi.org/10.1002/qj.49704820311>
10. L. Richards, "Capillary conduction of liquids through porous mediums," *Physics*, vol. 1, no. 5, pp. 318–333, 1931. <https://doi.org/10.1063/1.1745010>
11. H. W. Alt and S. Luckhaus, "Quasilinear elliptic-parabolic differential equations," *Math.Z.*, vol. 183, no. 1, pp. 311–341, 1983.
12. C. J. Van Duyn and L. A. Peletier, "Nonstationary filtration in partially saturated porous media," *Arch. Rational Mech. Anal.*, vol. 78, no. 2, pp. 173–198, 1982.
13. C. J. Van Duyn, "Nonstationary filtration in partially saturated porous media: continuity of the free boundary." *Arch. Rational Mech. Anal.*, vol. 79, no. 3, pp. 261–265, 1982.
14. C. J. Van Duyn and J. Hulshof, "An elliptic-parabolic with a nonlocal boundary condition," *Arch. Rational Mech. Anal.*, vol. 99, no. 1, pp. 61–73, 1987.
15. M. Bertsch and J. Hulshof, "Regularity results for an elliptic-parabolic free boundary problem," *Trans. Amer. Math. Soc.*, vol. 297, no. 1, pp. 337–350, 1986.
16. E. Di Benedetto and R. Gariepy, "Local behavior of solutions of an elliptic-parabolic equation," *Arch. Rational. Mech. Anal.*, vol. 97, no. 1, pp. 1–17, 1987.

17. J. Hulshof and L. A. Peletier, "An elliptic-parabolic free boundary problem," *Nonlinear Anal: Theory, Method Appl.*, vol. 10, no. 12, pp. 1327–1346, 1986.
18. J. Hulshof, "An elliptic-parabolic free boundary problem: continuity of the interface," *Proc. Royal Soc. Edinburg.*, vol. 106A, no. 3, pp. 327–339, 1987.
19. X. Chen, A. Friedman and T. Kimura, "Nonstationary filtration in partially saturated porous media," *Eur. J. Appl. Math.* vol. 5, no. 3, pp. 405–429, 1994.
20. P. Mannucci and J.L. Vazquez, "Viscosity solutions for elliptic-parabolic problems," *Nonlinear Differ. Equ. Appl.*, vol. 14, no. 1–2, pp. 75–90, 2007.
21. L. I. Rubinstein, "Stefan problem," *Zvaigzne (Riga)*, p. 458, 1967.
22. S. P. Degtyarev, "Elliptic-parabolic equation and the corresponding free boundary problem I: Elliptic problem with a parameter," *Ukr. Math. Vystnyk.*, vol. 11, no. 1, pp. 15–48, 2014.
23. S. P. Degtyarev, "Elliptic-parabolic equation and the corresponding free boundary problem II: smooth solution," *Ukr. Math. Vystnyk.*, vol. 11, no. 4, pp. 447–479, 2014.
24. B. V. Bazaliy and S. P. Degtyarev, "On the classical solvability of the multi-dimensional Stefan problem in the case of convective motion of a viscous incompressible fluid," *Mat. Sbornyk.*, vol. 132(174), no. 1, pp. 3–19, 1987.
25. B. V. Bazaliy and S. P. Degtyarev, "Solvability of a problem with an unknown boundary between the domains of parabolic and elliptic equations," *Ukr. Mat. Zhurnal.*, vol. 41, no. 10, pp. 1343–1349, 1989.
26. A. A. Tymoshenko, "Optimal point control of mass transfer in porous media," PhD Dissertation, Taras Shevchenko National University of Kyiv, p. 149, 2021.
27. H. Berninger, S. Loisel and O. Sander, "The 2-Lagrange multiplier method applied to nonlinear transmission problems for the Richards equation in heterogeneous soil with cross points," *SIAM Journal of Scientific Computing*, vol. 36, no. 5, pp. 2166–2198, 2014.

28. I.S. Pop and B. Schweizer, "Regularization schemes for degenerate Richards equations and outflow conditions," *Mathematical Models and Methods in the Applied Sciences*, vol. 21, no. 8, pp. 1685–1712, 2011.
29. H. Suk and E. Park, "Numerical solution of the Kirchhoff-transformed Richards equation for simulating variably saturated flow in heterogeneous layered porous media," *Journal of Hydrology*, vol. 579, no. 124213, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2019.124213>
30. H. A. Pedrozo, M. R. Rozenberger and C. E. Shevzov, "Stability analysis of the solution of the one-dimensional Richards equation by the finite difference method," *AIP Conference Proceedings*, vol. 1738, no. 480008, 2016. doi:10.1063/1.4952244
31. Y. Zha, L. Shi, M. Ye and J. Yang, "A generalized Ross method for two- and three-dimensional variably saturated flow," *Advances in Water Resources*, vol. 54, no. 4, pp. 67–77, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2013.01.002>
32. G. A. Williams, C. T. Miller and C. T. Kelley, "Transformation approaches for simulating flow in variably saturated porous media," *Water Resources Research*, vol. 36, no. 4, pp. 923–934, 2000. <https://doi.org/10.1029/1999WR900349>
33. E. A. Kostyerina and A. V. Lapin, "Solving the problem of saturated-unsaturated fluid filtration in soil with monitoring of the saturation front," *Isv. Vuzov. Matem.*, vol. 6, pp. 42–50, 1995.
34. R. Srivastava and T.-C. Jim Yeh, "Analytical Solutions for One-Dimensional, Transient Infiltration Toward the Water Table in Homogeneous and Layered Soil," *Water Resources Research*, vol. 27, no. 5, pp. 753–762, 1991. <https://doi.org/10.1029/90WR02772>
35. C. Rogers, M. P. Stallybrass and D. L. Clements, "On two phase filtration under gravity and with boundary infiltration: Application of a Backlund transformation," *Nonlin. Anal. Theory Meth. Appl.*, vol. 7, no. 7, pp. 785–

- 799, 1983. doi:10.1016/0362-546X(83)90034-2
36. P. Broadbridge and I. White, "Modelling solute transport, chemical adsorption and cation exchange," *Int. Hydrology and Water Resources Symp. Nat. Conf. Publ.*, vol. 3, no. 92/19, pp. 924–929, 1988. (Preprints of Papers)
 37. D. A. Barry and G. C. Sander, "Exact solutions for water infiltration with an arbitrary surface flux or nonlinear solute adsorption," *Water Resour. Res.*, vol. 27, pp. 2667–2680, 1991. doi:10.1029/91WR01445
 38. P. J. Ross and J.-Y. Parlange, "Comparing exact and numerical solutions of Richards' equation for one-dimensional infiltration and drainage," *Soil Sci.*, vol. 157, no. 6, pp. 341–344, 1994. doi:10.1097/00010694-199406000-00002
 39. A. Pullan, "The quasilinear approximation for unsaturated porous media flow," *Water Resources Research*, vol. 26, no. 6, pp. 1219–1234, 1990. <https://doi.org/10.1029/WR026i006p01219>
 40. V. A. Zlotnik, T. Wang, J. L. Nieber and J. Simunek, "Verification of numerical solutions of the Richards equation using a traveling wave solution," *Advances in Water Resources*, vol. 30, pp. 1973–1980, 2007. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2007.03.008>
 41. D. L. De Luca and J. M. Cepeda, "Procedure to obtain analytical solutions of one-dimensional Richards' equation for infiltration in two-layered soils," *Journal of Hydrologic Engineering*, vol. 21, no. 7, 2016. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)HE.1943-5584.0001356](https://doi.org/10.1061/(ASCE)HE.1943-5584.0001356)
 42. D. Barry, J. Parlange, G. Sander and M. Sivaplan, "A class of exact solutions for Richards' equation," *Journal of Hydrology*, vol. 142, no. 1–4, pp. 29–46, 1993. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(93\)90003-R](https://doi.org/10.1016/0022-1694(93)90003-R)
 43. M. Menziani, S. Pugnaghi and S. Vincenzi, "Analytical solutions of the linearized Richards equation for discrete arbitrary initial and boundary conditions," *Journal of Hydrology*, vol. 332, no. 1–2, pp. 214–225. 2007. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2006.06.030>

44. F. Yuan and Z. Lu, "Analytical solutions for vertical flow in unsaturated, rooted soils with variable surface fluxes," *Vadose Zone Journal*, vol. 4, pp. 1210–1218, 2005. <https://doi.org/10.2136/vzj2005.0043>
45. F. T. Tracy, "Clean two- and three-dimensional analytical solutions of Richards' equation for testing numerical solvers," *Water Resources Research*, vol. 42, no. 8, pp. 1–11, 2006. <https://doi.org/10.1029/2005WR004638>
46. J. M. Chen, Y. C. Tan and C. H. Chen, "Multidimensional infiltration with arbitrary surface fluxes," *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, vol. 127, no. 6, pp. 370–377, 2001. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9437\(2001\)127:6\(370\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9437(2001)127:6(370))
47. P. Broadbridge, E. Daly and J. Goard, "Exact solutions of the Richards equation with nonlinear plant-root extraction," *Water Resources Research*, vol. 53, pp. 9679–9691, 2017. <https://doi.org/10.1002/2017WR021097>
48. P. N. Vabisshevich, "Numerical solution of the problem of identification of the rightside of the parabolic equation," *Izvestiya vysshyyh uchebnyh zavedeniy. Matematika*, no. 1, pp. 29–37, 2003.
49. S. I. Lyashko, D. A. Klyshin, V. V. Semenov and K. V. Shevchenko, "Lagrange-Euler approach to solving the inverse problem of convective diffusion," *Dopovidi NAN Ukrainy*, no. 10, pp. 38–43, 2007.
50. J.-L. Lions, "Optimal control of systems described by partial differential equations," *MIR (Moscow)*, p. 416, 1972.
51. S. I. Lyashko, "Generalized control of linear systems," *Naukova Dumka (Kyiv)*, p. 470, 1998.
52. F. Paronetto, "Existence results for a class of evolution equations of mixed type," *J. Funct. Anal.*, vol. 212, no. 2, pp. 324–356, 2004.
53. F. Paronetto, "G-convergence of mixed type evolution operators," *J. Math. Pures Appl.*, vol. 9, no. 93, pp. 361–407, 2010.
54. F. Paronetto, "A Harnack's inequality for mixed type evolution equations," *J. Differ. Equ.*, vol. 260, pp. 5259–5355, 2016.

55. F. Paronetto, "Further existence results for elliptic–parabolic and forward–backward parabolic equations," *Calc. Var.*, vol. 59, no. 137, 2020. <https://doi.org/10.1007/s00526-020-01793-7>
56. F. Paronetto, "An inhomogeneous Harnack inequality for parabolic equations and applications to elliptic-parabolic and forward-backward parabolic equations," 2023. Available at: <https://arxiv.org/pdf/2303.15357.pdf>
57. M. W. Farthing and F. L. Ogden, "Numerical solution of Richards' equation: A review of advances and challenges," *Soil Science Society of America Journal*, vol. 81, no. 6, pp. 1257–1269, 2017. <https://doi.org/10.2136/sssaj2017.02.0058>
58. Y. Zha, J. Yang, J. Zeng, C.-H. Tso, W. Zeng and L. Shi, "Review of numerical solution of Richardson–Richards equation for variably saturated flow in soils," *WIREs Water*, vol. 6, p. e1364, 2019. [10.1002/wat2.1364](https://doi.org/10.1002/wat2.1364)
59. H. T. Shahraiyini and B. Ataie-Ashtiani, "Mathematical forms and numerical schemes for the solution of unsaturated flow equations," *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, vol. 138, no. 1, pp. 63–72, 2012. [https://doi.org/10.1061/\(asce\)ir.1943-4774.0000377](https://doi.org/10.1061/(asce)ir.1943-4774.0000377)
60. F. Liu, Y. Fukumoto and X. Zhao, "A multi level linearized Crank–Nicolson scheme for Richards equation under variable flux boundary conditions," *Applicable Analysis*, vol. 102, no. 6, pp. 1601–1617, 2023. <https://doi.org/10.1080/00036811.2021.1992395>
61. M. Celia, E. Bouloutas and R. Zarba, "A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation," *Water Resources Research*, vol. 26, no. 1, pp. 1483–1496, 1990. <https://doi.org/10.1029/WR026i007p01483>
62. Y. Zha, J. Yang, L. Yin, Y. Zhang, W. Zeng and L. Shi, "A modified Picard iteration scheme for overcoming numerical difficulties of simulating infiltration into dry soil," *Journal of Hydrology*, vol. 551, pp. 56–69, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2017.05.053>

63. J. Simunek, M. van Genuchten and M. Sejna, "The HYDRUS software package for simulating the two- and three-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media," *Riverside: University of California Riverside*, 2006.
64. C. Scudeler, M. Putti and C. Paniconi, "Mass-conservative reconstruction of Galerkin velocity fields for transport simulations," *Advances in Water Resources*, vol. 94., pp. 470–485, 2016.
65. P. Mostaghimi et al, "Anisotropic Mesh Adaptivity and Control Volume Finite Element Methods for Numerical Simulation of Multiphase Flow in Porous Media," *Mathematical Geosciences*, vol 47, no. 4, pp. 417–440, 2015.
66. W. Lai and F. L. Ogden, "A mass-conservative finite volume predictor-corrector solution of the 1D Richards' equation," *Journal of Hydrology*, vol. 523, pp. 119–127, 2015.
67. I. S. Pop, F. Radu and P. Knabner, "Mixed finite elements for the Richards' equation: linearization procedure," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 168, pp. 365–373, 2004.
68. A. Dogan and L. H. Motz, "Saturated-unsaturated 3D groundwater model. I: Development," *Journal of Hydrologic Engineering*, vol. 10, no. 6, pp. 492–504, 2005. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)1084-0699\(2005\)10:6\(492\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)1084-0699(2005)10:6(492))
69. J. S. Stokke, K. Mitra, E. Storvik, J. W. Both and F. A. Radu, "An adaptive solution strategy for Richards' equation," 2023. arXiv:2301.02055
70. K. Lipnikov, D. Moulton and D. Svyatskiy, "New preconditioning strategy for Jacobian-free solvers for variably saturated flows with Richards' equation," *Advances in Water Resources*, vol. 94, pp. 11–22, 2016.
71. Y. Zha et al, "Comparison of noniterative algorithms based on different forms of Richards' equation," *Environmental Modelling Assessment*, vol. 21, no. 3, pp. 357–370, 2016.
72. J. Zeng, Y. Zha and J. Yang, "Switching the Richards' equation for modeling soil water movement under unfavorable conditions," *Journal of Hydrology*,

- vol. 563, pp. 942–949, 2018.
73. D. A. Klyushin and V. V. Onotskiy, "Numerical modeling of three-dimensional moisture transfer under microirrigation," *Zhurnal Obchyslyvalnoyi ta Prykladnoyi Matematyky*, no. 1, pp. 54–64, 2016.
 74. G.-J. Machado, R. M. S. Pereira, S. Clain, N. Araújo and S. O. Lopes, "A new stabilized scheme for a Richards' equation with evapotranspiration," *Groundwater for Sustainable Development*, vol. 17, no. 100736, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.gsd.2022.100736>
 75. A. M. Ireson, R. J. Spiteri, M. P. Clark and S. A. Mathias, "A simple, efficient, mass-conservative approach to solving Richards' equation," *Geosci. Model Dev.*, vol. 16, pp. 659–677, 2023. <https://doi.org/10.5194/gmd-16-659-2023>
 76. D. Caviedes-Voullieme, P. Garcia-Navarro and J. Murillo, "Verification, conservation, stability and efficiency of a finite volume method for the 1D Richards equation," *Journal of Hydrology*, vol. 480, pp. 69–84, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2012.12.008>
 77. D. Svyatskiy and K. Lipnikov, "Second-order accurate finite volume schemes with the discrete maximum principle for solving Richards' equation on unstructured meshes," *Advances in Water Resources*, vol. 104, pp. 114–126, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2017.03.015>
 78. C. Miller, C. Abhishek and M. Farthing, "A spatially and temporally adaptive solution of Richards' equation," *Advances in Water Resources*, vol. 29, no. 4, pp. 525–545, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2005.06.008>
 79. W. Gao, X. Lu, Y. Peng and L. Wu, "A Deep Learning Approach Replacing the Finite Difference Method for In situ Stress Prediction," *in IEEE Access*, vol. 8, pp. 44063–44074, 2020. doi: 10.1109/ACCESS.2020.2977880.
 80. A.-K. Salman, A. Pouyaei, Y. Choi, Y. Lops and A. Sayeed, "Deep Learning Solver for Solving Advection-Diffusion Equation in Comparison to Finite Difference Methods,"

Available at SSRN: <https://ssrn.com/abstract=4031408> or <http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4031408>

81. M. Vauclin, D. Khanji and G. Vachaud, "Experimental and numerical study of a transient, two-dimensional unsaturated-saturated water table recharge problem," *Water Resources Research*, vol. 15, no. 5, pp. 1089–1101, 1979. <https://doi.org/10.1029/WR015i005p01089>
82. C. Shen and M. S. Phanikumar, "A process-based, distributed hydrologic-model based on a large-scale method for surface–subsurface coupling," *Advances in Water Resources*, vol. 33, no. 12, pp. 1524–1541, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2010.09.002>
83. N. K. C. Twarakavi, J. Simunek and S. Seo, "Evaluating interactions between groundwater and vadose zone using the HYDRUS-based flow package for MODFLOW," *Vadose Zone Journal*, vol. 7, no. 2, pp. 757–768, 2008. <https://doi.org/10.2136/vzj2007.0082>
84. X. Xu, G. Huang, H. Zhan, Z. Qu and Q. Huang, "Integration of SWAP and MODFLOW-2000 for modeling groundwater dynamics in shallow water table areas," *Journal of Hydrology*, vol. 412–413, pp. 170–181, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2011.07.002>
85. P.-E. Jansson and L. Karlberg, "Coupled Heat and Mass Transfer Model for Soil-Plant-Atmosphere Systems," *Royal Institute of Technology (Stockholm)*, p. 484, 2010.
86. P.-E. Jansson, "CoupModel: Model Use, Calibration, and Validation," *ASABE*, vol. 55, no. 4, pp. 1337–1346, 2012. <https://www.coupmodel.com>
87. M. Sejna, J. Simunek and M. van Genuchten, "The HYDRUS Software Package for Simulating One-, Two- and Three-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Porous Media, User Manual, Version 5.0," *PC Progress, Prague, Czech Republic*, p. 348, 2022.
88. Aquanty Inc., "HGS user manual," Waterloo, ON: *Aquanty Inc.*, 2015.

89. G. E. Hammond, P. C. Lichtner and R. T. Mills, "Evaluating the performance of parallel subsurface simulators: An illustrative example with PFLOTRAN," *Water Resources Research*, vol. 50, no. 1, pp. 208–228, 2014. <https://doi.org/10.1002/2012WR013483>
90. P. A. Hsieh, W. Wingle and R. W. Healy, "VS2DI. A graphical software package for simulating fluid flow and solute or energy transport in variably saturated porous media," *U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 99-4130. Lakewood, CO.*, 2000.
91. R. W. Healy, "Simulating water, solute, and heat transport in the subsurface with the VS2DI software package," *Vadose Zone J.*, vol. 7, pp. 632–639, 2008. doi:10.2136/vzj2007.0075
92. S. E. Howington, R. C. Berger, J. P. Hallberg, J. F. Peters, A. K. Stagg, E. W. Jenkins and C. T. Kelley, "A model to simulate the interaction between groundwater and surface water," *ADA451802. US Army Engineering Research and Development Center, Vicksburg, MS.*, pp. 1–12, 1999.
93. M. Camporese, C. Paniconi, M. Putti and S. Orlandini, "Surface-subsurface flow modeling with path-based runoff routing, boundary condition-based coupling, and assimilation of multisource observation data," *Water Resour. Res.*, vol. 46, 2010. doi:10.1029/2008WR007536.
94. H.-J. G. Dirersch, "FEFLOW 5.1 user's manual," *Berlin, Germany: WASY Institute for Water Resources Planning and Systems Research Ltd.*, 2009.
95. D. A. Klyushin and A. A. Tymoshenko, "Computer program "Algorithm for optimizing the power of point sources in a two-dimensional porous medium": pat. 106332, Ukraine. Registr. Date: 16.07.2021. Publ. Date: 30.09.2021. Bulet. No. 66.

ДОДАТОК — СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА

1. Kolesnykov V.A. Numerical methods for Richards-Klute equation with monotonic solution. *Workshop CDSS: theory, methematical modelling, computing and application*, 2–4 жовтня 2023 р. Київ: 2023.
2. Колесников В.А. Структура матриць системи лінійних алгебраїчних рівнянь для задачі моделювання масопереносу в пористому середовищі на графі. *2023 2nd International Conference on Innovative Solutions in Software Engineering*, 29–30 листопада 2023 р. Івано-Франківськ: 2023.
3. Колесников В.А. Рівняння Річардса-Клюта: огляд методів розв’язування. *Журнал обчислювальної та прикладної математики*. 2022. № 1. С. 22–34.
4. Колесников В.А. Аналіз побудови чисельних методів для розв’язання рівняння Річардса-Клюта. *Журнал обчислювальної та прикладної математики*. 2023. № 1. С. 28–38.
5. Колесников В.А. Ефективний чисельний метод для розв’язання рівняння Річардса-Клюта за умов монотонності розв’язку. *Журнал обчислювальної та прикладної математики*. 2023. № 2. С. 42–51.
6. Колесников В.А. Ефективний чисельний метод для розв’язання рівняння Річардса-Клюта з відстеженням зони повного насичення. *Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фізико-математичні науки*. 2023. № 2. С. 206–213.
7. Колесников В.А. Теорема існування для задачі масопереносу на графі. *Математичне та комп’ютерне моделювання. Серія: фізико-математичні науки*. 2023. 24. С. 70–80.
8. Колесников В.А., Ляшко С.І. Стійкість розв’язків рівняння Річардса-

Клюта. *Доповіді Національної академії наук України*. 2023. № 6.
С. 12–18.