

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

Факультет прикладної математики та інформатики

Кафедра прикладної математики

Дипломна робота

ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ОДНОВИМІРНИХ ЗАДАЧ
РЕАКЦІЇ-АДВЕКЦІЇ-ДИФУЗІЇ

Виконала: студентка групи ПМП-42
спеціальності
113 - прикладна математика

Мазуркевич Л.М

Керівник: Кухарський В.М

Рецензент:

Львів - 2023

Зміст

ВСТУП	3
РОЗДІЛ 1	5
ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ	5
1.1 Постановка задачі для рівняння реакції-адвекції-дифузії	5
1.2 Варіаційне формулювання	6
РОЗДІЛ 2	8
ЧИСЛОВЕ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ	8
2.1. Напівдискретний метод Гальоркіна.....	8
2.2. Базисні функції	9
2.3. Метод скінченних елементів.	11
РОЗДІЛ 3	14
ЧИСЛОВЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ	14
ВИСНОВКИ	22
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	24
ДОДАТОК	25

ВСТУП

Одним з важливих завдань математичного моделювання є чисельне розв'язування різноманітних задач, пов'язаних з фізичними та інженерними процесами. Розв'язання таких задач дозволяє зрозуміти їх поведінку та зробити прогноз їх розвитку, що є важливим у практичній діяльності.

Однією з найбільш поширених задач є задача реакції-адвекції-дифузії, яка зустрічається в різних областях науки та техніки. Ця задача має велике значення у геофізиці, метеорології, хімії, біології, медицині та інших галузях.

Розв'язування таких задач за допомогою аналітичних методів часто є неможливим, тому чисельні методи, зокрема метод скінченних елементів, є дуже потрібними для розв'язування цих задач. До того ж, багато сучасних наукових та технічних проблем вимагають розв'язування більш складних варіантів задач РАД, Тому розробка та вдосконалення методів чисельного розв'язування цих задач є актуальним та важливим напрямом досліджень.

Об'єктом дослідження є чисельне розв'язування одновимірних задач реакції-адвекції-дифузії. Предмет дослідження включає розробку та аналіз чисельних методів, зокрема методу скінченних елементів, для ефективного розв'язування цих задач. Розглядаються варіанти задач з різними параметрами, включаючи різні коефіцієнти реакції, адвекції та дифузії, а також різні початкові та граничні умови. Основна мета дослідження полягає у встановленні ефективних чисельних методів для отримання наближених розв'язків цих задач та аналізі їхньої точності та стійкості.

Метою дипломної роботи на тему "Чисельне розв'язування одновимірних задач реакції-адвекції-дифузії" є дослідження чисельних методів для

розв'язування рівнянь реакції-адвекції-дифузії, а також їх застосування до конкретних задач з цієї області. Зокрема завданням цієї роботи є:

1. Огляд наукової літератури з питань розв'язування рівнянь реакції-адвекції-дифузії в одновимірному середовищі.
2. Розробка та реалізація програмного забезпечення для чисельного розв'язування задач реакції-адвекції-дифузії в одновимірному середовищі.
3. Проведення чисельних експериментів на основі розробленого програмного забезпечення та аналіз отриманих результатів.
4. Вивчення можливостей застосування розроблених методів та програмного забезпечення до практичних задач.

РОЗДІЛ 1

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

1.1. Постановка задачі для рівняння реакції-адвекції-дифузії

Нехай Ω - обмежена зв'язна область евклідового простору \mathbb{R}^3 з неперервною за Ліпшицем границею Γ . Задача полягає у знаходженні c - невідомої концентрації, що буде задовольняти таке рівняння:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (-D\nabla c) + v \cdot \nabla c + dc = R; \quad x \in \Omega, \quad t \in (0, T] \quad (1.1)$$

та початкову умову

$$c(x, t = 0) = c_0(x) \text{ на } \Omega \quad (1.2)$$

де c представляє собою усереднену по глибині концентрацію, а R визначає джерело цієї концентрації, яке може бути дуже сконцентрованим у просторі та змінюватися з часом. Коефіцієнт адвекції позначений як v і зазвичай вважається нестисливим, що дозволяє замінити вираз $v \cdot \nabla c$ на $\nabla \cdot (vc)$. Коефіцієнт дифузії позначений як D , а коефіцієнт реакції позначений як d .

З огляду на те, що градієнт функції c записується як $\nabla c = \left(\frac{\partial c}{\partial x}; \frac{\partial c}{\partial y}; \frac{\partial c}{\partial z} \right)$, а дивергенція функції c розраховується як $\nabla \cdot c = \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial z}$, то можна записати

$$\nabla \cdot \nabla c = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

У випадку одновимірної задачі, ця диференціальна форма рівняння матиме наступний вигляд:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + V \frac{\partial c}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + dc = R \quad (1.3)$$

де D і v є константами. Рівняння реакції-адвекції-дифузії виконується в заданій одновимірній просторовій області $\Omega=[a,b]$, тобто з межами $x=a$ і $x=b$, а також у часовій області $t=[0,T]$. При цьому передбачається, що воно підлягає таким граничним умовам:

1. $c = c^\Gamma$
2. $\frac{\partial c}{\partial x} = q$
3. $\frac{\partial c}{\partial x} = \alpha(c - c_a)$ на $x = a$
 $\frac{\partial c}{\partial x} = \alpha(c - c_b)$ на $x = b$

Крім того, одна початкова умова для c повинна бути задана, наприклад, при $t=0$:

$$c(x, t = 0) = c_0(x) \text{ на } \Omega.$$

1.2. Варіаційне формулювання

Для варіаційного формулювання ми визначимо простір $W = W_2^{(1)}(\Omega, (0, T])$. Домножимо рівняння та початкову умову на довільну функцію $w(x)$, а потім зінтегруємо в області Ω .

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) w d\Omega + \int_{\Omega} v \cdot \nabla c w d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot (-D \nabla c) w d\Omega + d \int_{\Omega} c w d\Omega = \\ = \int_{\Omega} R c d\Omega \quad (2.1) \end{aligned}$$

$$\int_{\Omega} (c(x, 0) - c_0) w d\Omega = 0, \forall w \in W. \quad (2.2)$$

Застосуємо формулу Гріна для третього доданку рівняння:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (-D \nabla c) w d\Omega = D \int_{\Omega} \nabla c \nabla w d\Omega - \int_{\Gamma} n \cdot (D \cdot \nabla c) w d\Gamma \quad (2.3)$$

де $n(n_1, n)$ – вектор зовнішньої нормалі до границі Γ .

Уведемо позначення

$$m(c, w) = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) w d\Omega;$$

$$a(c, w) = \int_{\Omega} V \cdot \nabla c w d\Omega;$$

$$b(c, w) = \int_{\Omega} D \int_{\Omega} \nabla c \nabla w d\Omega - \int_{\Gamma} v \cdot (D \cdot \nabla c) w d\Gamma;$$

$$n(c, w) = d \int_{\Omega} c w d\Omega$$

$$l(c) = \int_{\Omega} R c d\Omega;$$

$$c' = \frac{\partial c}{\partial t}.$$

Представимо варіаційне формулювання задачі реакції-адвекції-дифузії.

Знайти функцію $c(x, t) \in W_2^{(1)}(\Omega, (0, T])$, таку що задовольняє рівняння

$$m(c', w) + a(c, w) + b(c, w) + n(c, w) = l(c), \forall w \in W; \quad (2.4)$$

$$m(c(x, 0) - c_0, w) = 0. \quad (2.5)$$

РОЗДІЛ 2

ЧИСЛОВЕ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ

2.1. Напівдискретний метод Гальоркіна

Виберемо лінійно незалежну та повну послідовність функцій $\{\varphi_j^h\}$ у просторі W . Тут W_h є скінченновимірним підпростором простору W , побудованим на базисі $\varphi_j^h, j = 1, \dots, N$.

Для отримання наближеного розв'язку задачі

$$\begin{aligned} m(c', w) + a(c, w) + b(c, w) + n(c, w) &= l(c), \forall w \in W \\ m(u(x, 0) - u_0, v) &= 0 \end{aligned} \quad (2.1.1)$$

використаємо напівдискретне подання [1,2]

$$c_h(x, t) = \sum_{j=1}^N C_j(t) \varphi_j^h(x) \quad (2.1.2)$$

Застосуємо цю формулу для наближеного розв'язку задачі:

$$\begin{aligned} m(c_h', w_h) + a(c_h, w_h) + b(c_h, w_h) + n(c_h, w_h) &= l(c_h): \forall w_h \in W_h; \\ m(c_h(x, 0) - c, w_h) &= 0. \end{aligned}$$

Цю задачу називатимемо напівдискретизованою за просторовими змінними, а її розв'язок напівдискретною апроксимацією Гальоркіна розв'язку $c(t)$ варіаційної задачі.

Підставимо формулу (3.2) замість розв'язку u_h у рівняння (3.1) та виберемо базисні функції φ_i^h як функції w . Отримаємо задачу Коші [1]

$$\sum_{j=1}^N \{m_{ij}C_j'(t) + a_{ij}C_j(t) + b_{ij}C_j(t) + n_{ij}C_j(t)\} = l_i(t),$$

$$t \in (0, T], i = 1, \dots, N \quad (2.1.3)$$

$$\sum_{j=1}^N m_{ij}C_j(0) = p_i \quad (2.1.4)$$

де

$$m_{ij} = m(\varphi_i^h, \varphi_j^h); a_{ij} = a(\varphi_i^h, \varphi_j^h); b_{ij} = b(\varphi_i^h, \varphi_j^h); n_{ij} = n(\varphi_i^h, \varphi_j^h)$$

$$l_i(t) = l(\varphi_i^h); p_i = m(c_0, \varphi_i^h)$$

Ця задача може бути записана у матричній формі:

$$M = \{m_{ij}\}; A = \{a_{ij}\}; B = \{b_{ij}\}; N = \{n_{ij}\}$$

$$C(t) = \{C_i(t)\}; L(t) = \{l_i(t)\}; P = \{p_i\}$$

(M, A, B - квадратні матриці, C, L, P - матриці-стовпці) задачу (3.3) можна записати у такому вигляді:

$$MC(t) + AC(t) + BC(t) + NC(t) = L(t), t \in (0, T]:$$

$$MC(0) = P.$$

Зазначимо, що як наслідок попереднього матриці M, A, B, N є матрицями з відмінними від нуля визначниками, вони є симетричними та додатньо визначеними.

Твердження. Наведених властивостей достатньо для того, щоб розв'язок задачі Коші існував та був єдиним. [1]

2.2. Базисні функції

Кусково лінійні базисні функції

Нехай маємо проміжок $[a, b]$. Розділимо його на скінченні елементи точками $x_i, i = 0, 1, \dots, n, x_0 = a, x_n = b$. Задамо нашу базисну функцію таким співвідношенням [3]

$$\varphi_j^h = f(x) = \begin{cases} 0, & x_0 \leq x \leq x_{i-1}; \\ \frac{x - x_{i-1}}{h_i}, & x_{i-1} \leq x \leq x_i; \\ -\frac{x - x_{i+1}}{h_{i+1}}, & x_i \leq x \leq x_{i+1}; \\ 0, & x_{i+1} \leq x \leq x_n \end{cases}$$

де $h_i = x_i - x_{i-1}$.

Лінійні базисні функції на основі поліномів Лежандра.

Лінійні базові функції на основі поліномів Лежандра можуть бути сформульовані наступним чином:

Нехай $[a, b]$ - відрізок, на якому визначені лінійні базові функції. Розглянемо деяку розбиту на N підінтервалів область точками x_i на відрізку $[a, b]$, де $i = 1, 2, \dots, N$. Отримаємо скінченні елементи які можна записати у вигляді

$$\Omega_* = \{\xi: -1 < \xi < 1\}$$

За допомогою співвідношення

$$x = \frac{1 - \xi}{2} x_{k-1} + \frac{1 + \xi}{2} x_k, \xi \in \Omega_*$$

Побудуємо послідовність базисних функцій на елементі Ω_*

$$\varphi_1 = \frac{1 - \xi}{2}, \varphi_2 = \frac{1 + \xi}{2}, \varphi_j = \Phi_{j-1}(\xi), j = 3, 4, \dots, p + 1$$

Тут $\Phi_j(\xi)$ визначені через поліноми Лежандра P_{j-1} за формулою [1]

$$\Phi_j(\xi) = \sqrt{\frac{2j-1}{2}} \int_{-1}^{\xi} P_{j-1}(t) dt, j = 2, 3, \dots$$

де

$$P_0 = 1,$$

$$P_1 = t,$$

$$P_2 = \frac{1}{2}(3t^2 - 1),$$

$$(n + 1)P_{n+1}(t) = (2n + 1)tP_n(t) - nP_{n-1}(t).$$

Тоді базисні функції матимуть такий вигляд

$$\varphi_j(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2(2j-1)}} (P_j(\xi) - P_{j-2}(\xi)), j = 3, 4, \dots$$

2.3. Метод скінченних елементів.

Розглянемо стаціонарне рівняння реакції–адвекції– дифузії в одновимірному випадку

$$V \frac{\partial c}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + dc = R, \quad x \in [a, b] \quad (3.4.1)$$

$$c(a) = 0, \quad c(b) = 0 \quad (3.4.2)$$

Припустимо, що на проміжку $[a, b]$ функція V і D – неперервні, причому $V \geq 0$ і $D \geq 0$ і розв'язок задачі (1.1) і (1.2) існує.

Застосуємо апроксимації розв'язку у варіаційну формулу:

$$\int_a^b \left(V \frac{\partial c_h}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c_h}{\partial x^2} - R \right) w_h dx = 0.$$

Підставимо апроксимації розв'язку:

$$\int_a^b \left(V \frac{\partial \left(\sum_{j=1}^N C_j(t) \varphi_j^h(x) \right)}{\partial x} - D \frac{\partial^2 \left(\sum_{j=1}^N C_j(t) \varphi_j^h(x) \right)}{\partial x^2} + d \sum_{j=1}^N C_j(t) \varphi_j^h(x) - R \right) w dx = 0.$$

Розкриваємо похідні та перегрупуємо терміни:

$$\sum_{i=0}^N C_i \int_a^b \left(V \frac{\partial \left(\varphi_i^h(x) \right)}{\partial x} w - D \frac{\partial^2 \varphi_i^h(x)}{\partial x^2} w + d \varphi_i^h(x) w \right) dx - \int_a^b R w dx = 0.$$

Розбиваємо інтервал $[a, b]$ на N підінтервалів, щоб отримати окремий інтеграл для кожного підінтервалу, сума цих інтегралів буде апроксимацією загального інтегралу на інтервалі $[a, b]$:

$$\begin{aligned} & \int_a^b V \frac{\partial \left(\varphi_i^h(x) \right)}{\partial x} w - D \frac{\partial^2 \varphi_i^h(x)}{\partial x^2} w + d \varphi_i^h(x) w dx \\ &= \sum_{j=1}^N \int_{x_{j-1}}^{x_j} V \frac{\partial \varphi_i^h(x)}{\partial x} w - D \frac{\partial^2 \varphi_i^h(x)}{\partial x^2} w + d \varphi_i^h(x) w dx \\ & \int_a^b R w dx = \sum_{j=1}^N \int_{x_{j-1}}^{x_j} R w dx \end{aligned}$$

Для кожної пари базисних функцій $\varphi_j^h(x)$ обчислюємо елементи матриці жорсткості K та вектора навантаження F :

$$K_{ij} = \int_{x_{j-1}}^{x_j} V \frac{\partial \left(\varphi_i^h(x) \right)}{\partial x} w - D \frac{\partial^2 \varphi_i^h(x)}{\partial x^2} w + d \varphi_i^h(x) w dx,$$

$$F_i = \int_{x_{j-1}}^{x_j} R w dx$$

За допомогою отриманих елементів матриці жорсткості та вектора навантаження можна сформулювати систему лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$K * C = F$$

де $C = [C_1, C_2, \dots, C_N]$, K - матриця жорсткості, F - вектор навантаження.

Локальна матриця жорсткості та вектор навантаження для рівняння (3.4.1)(3.4.2) матимуть такий вигляд.

$$K_i = \frac{D}{h} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{hd}{3} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} + V \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix};$$

$$F = R \frac{h}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad i = 0, \dots, n.$$

РОЗДІЛ 3

ЧИСЛОВЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

У цьому розділі розглянемо результати чисельних експериментів задачі (3.4.1)(3.4.2) методом скінченних елементів з кусково-лінійною базисною функцією. Для цього було створено програму на мові Python. Розглянемо проміжок $[0,1]$. Задамо такі коефіцієнти $D = 1, V=1, d=1, R=1$.

Аналітичний розв'язок задачі (3.4.1)-(3.4.2) є відомим

$$c_{\text{exact}}(x) = \frac{f}{\sigma} \left\{ \left(\frac{e^{\alpha_2 b} - 1}{e^{\alpha_1 b} - e^{\alpha_2 b}} \right) e^{\alpha_1 x} + \left(\frac{1 - e^{\alpha_1 b}}{e^{\alpha_1 b} - e^{\alpha_2 b}} \right) e^{\alpha_2 x} + 1 \right\},$$

де

$$\alpha_{1,2} = \frac{-V \pm \sqrt{V^2 + 4K\sigma}}{-2K}$$

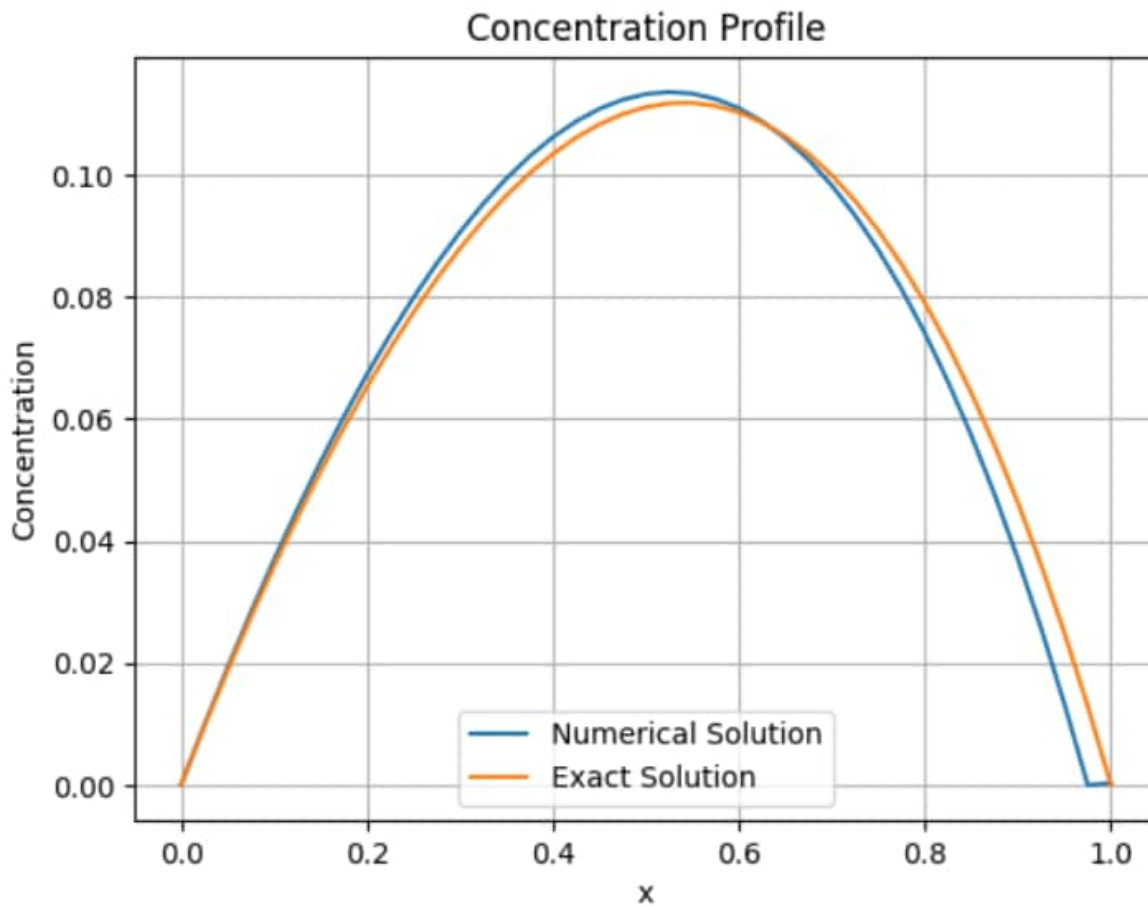


Рис. 3.1.

На Рис. 3.1. зображено графіки аналітичного та наближеного розв'язків коли задані такі коефіцієнти $D = 1$, $V=1$, $d=1$, $R=1$. Кількість скінченних елементів $n=32$.

Збільшимо кількість скінченних елементів до $n=150$ та отримаємо такі результати

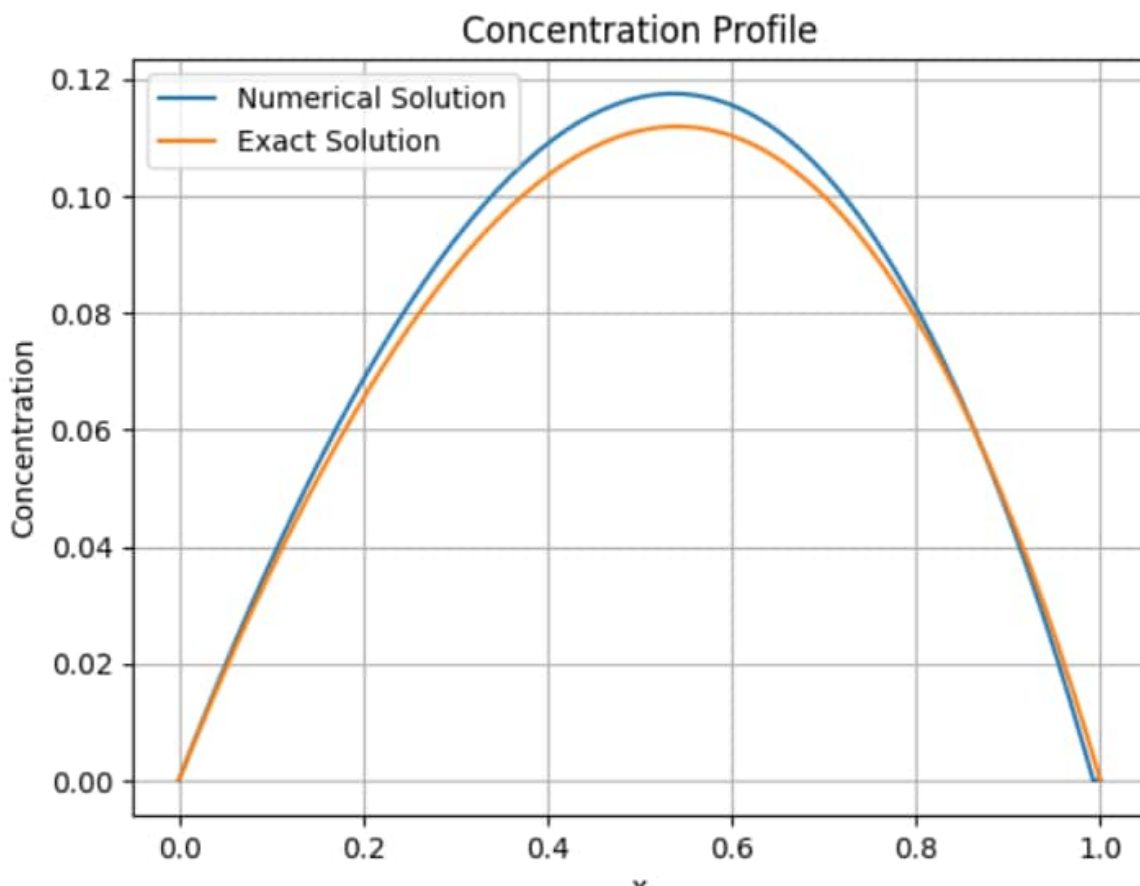


Рис. 3.2.

Нижче подано таблицю залежності значень похибки розв'язку від кількості скінченних елементів.

Таблиця 1.

Кількість скінченних елементів	Відносна похибка
16	16.03%
32	6.98%
64	4.24%
128	4.74%

З результатів можна побачити, що при збільшенні кількості розбиттів на скінченні елементи відносна похибка зменшилась, а отже наближений розв'язок є точнішим.

Тепер розглянемо значення результатів в залежності від коефіцієнта адвекції.

Збільшимо значення адвекції $v=40$, кількість розбиттів $n=64$

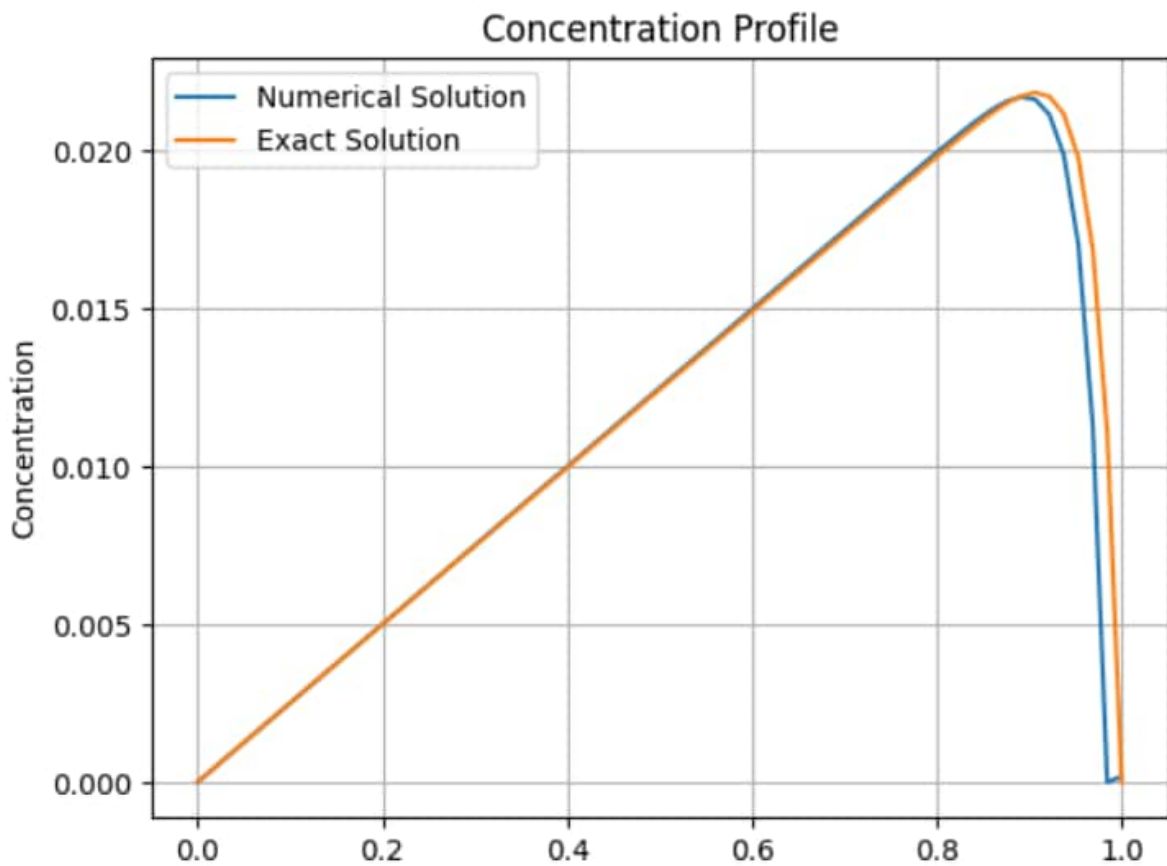


Рис. 3.3.

На Рис. 3.3. зображено графіки аналітичного та наближеного розв'язків з такими коефіцієнтами $D = 1$, $V=40$, $d=1$, $R=1$. Кількість скінченних елементів $n=64$.

Збільшимо значення $v=100$

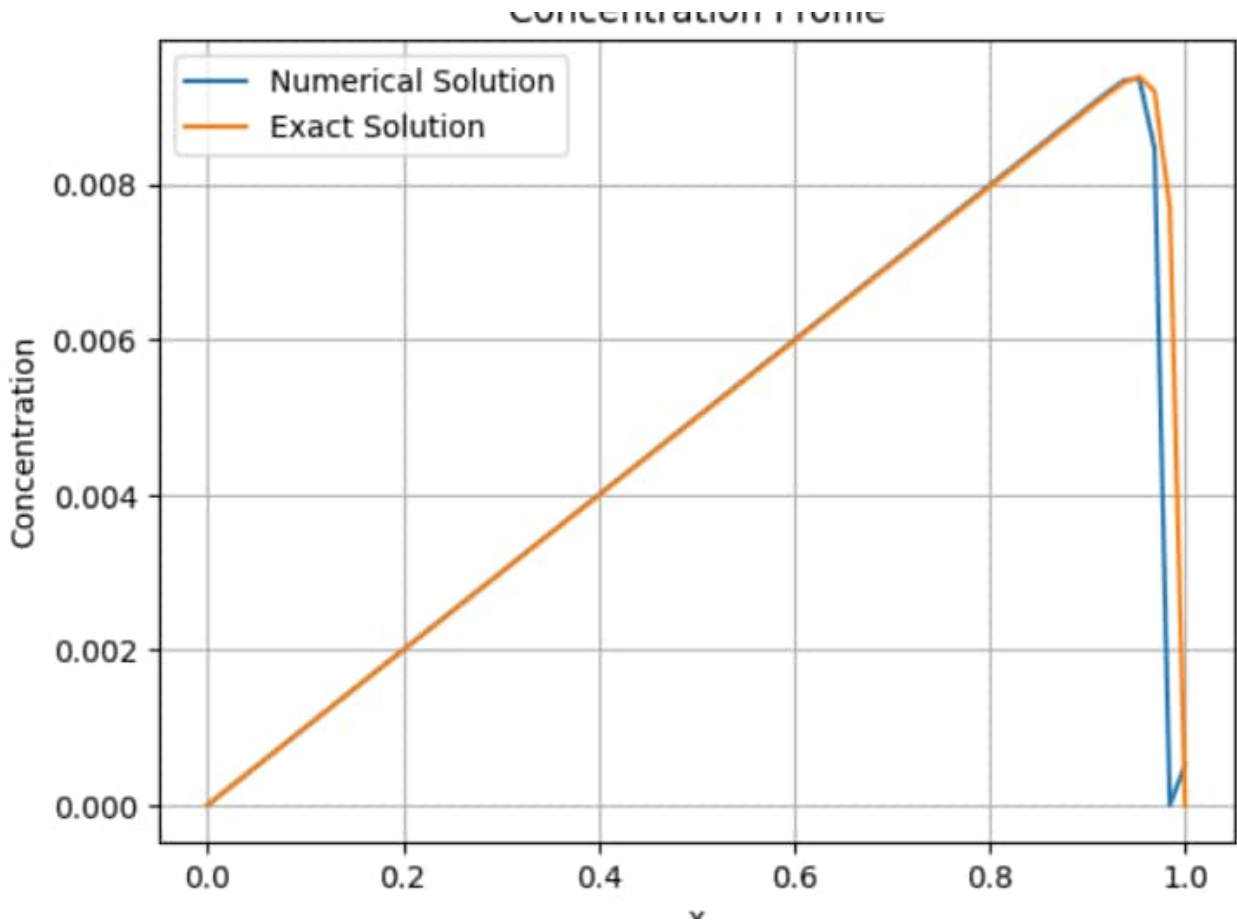


Рис. 3.4.

Нижче подано таблицю залежності значень похибки розв'язку від коефіцієнту адвекції.

Таблиця 2.

Значення коефіцієнта адвекції	Відносна похибка
1	4.24%
20	8.62%
40	11.85%
100	17.26%

З результатів можна побачити що при збільшенні коефіцієнта адвекції наближений розв'язок гірше наближається до аналітичного, це також підтверджує відносна похибка.

Тепер розглянемо значення результатів в залежності від коефіцієнта дифузії.

Збільшимо коефіцієнт дифузії $D = 40$

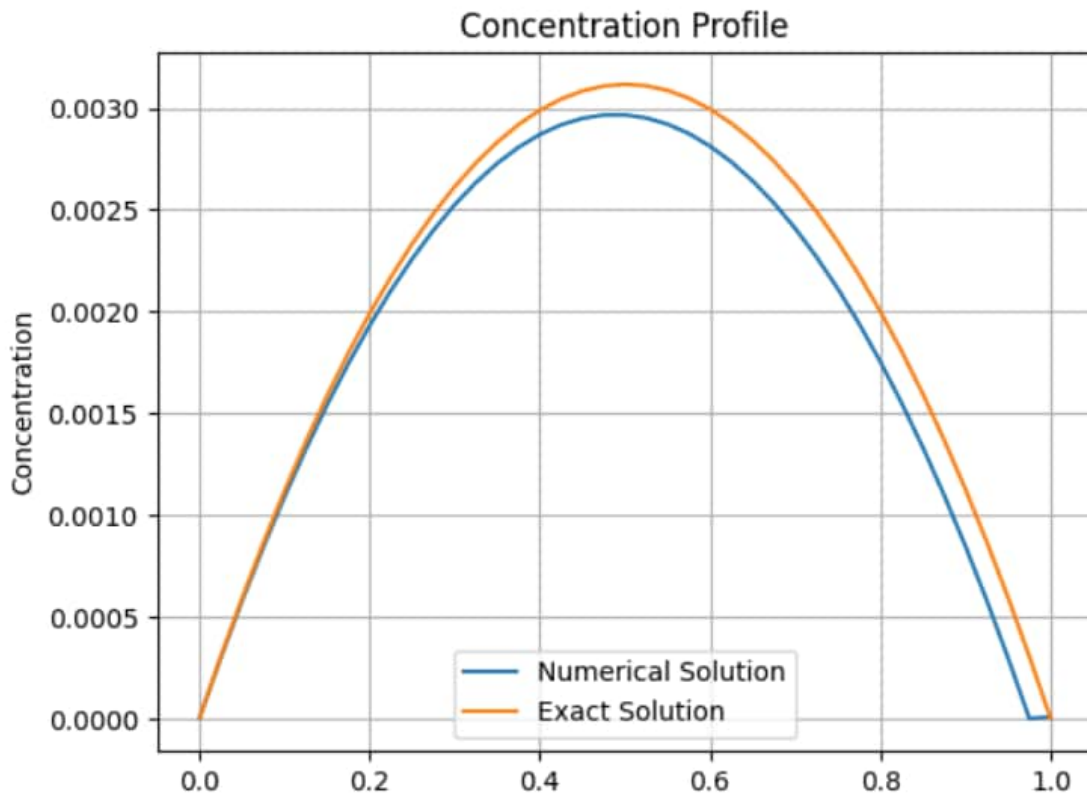


Рис. 3.5.

На Рис. 3.5. зображено графіки аналітичного та наближеного розв'язків з такими коефіцієнтами $D = 40$, $V=1$, $d=1$, $R=1$. Кількість скінченних елементів $n=64$.

Збільшимо коефіцієнт дифузії $D = 100$

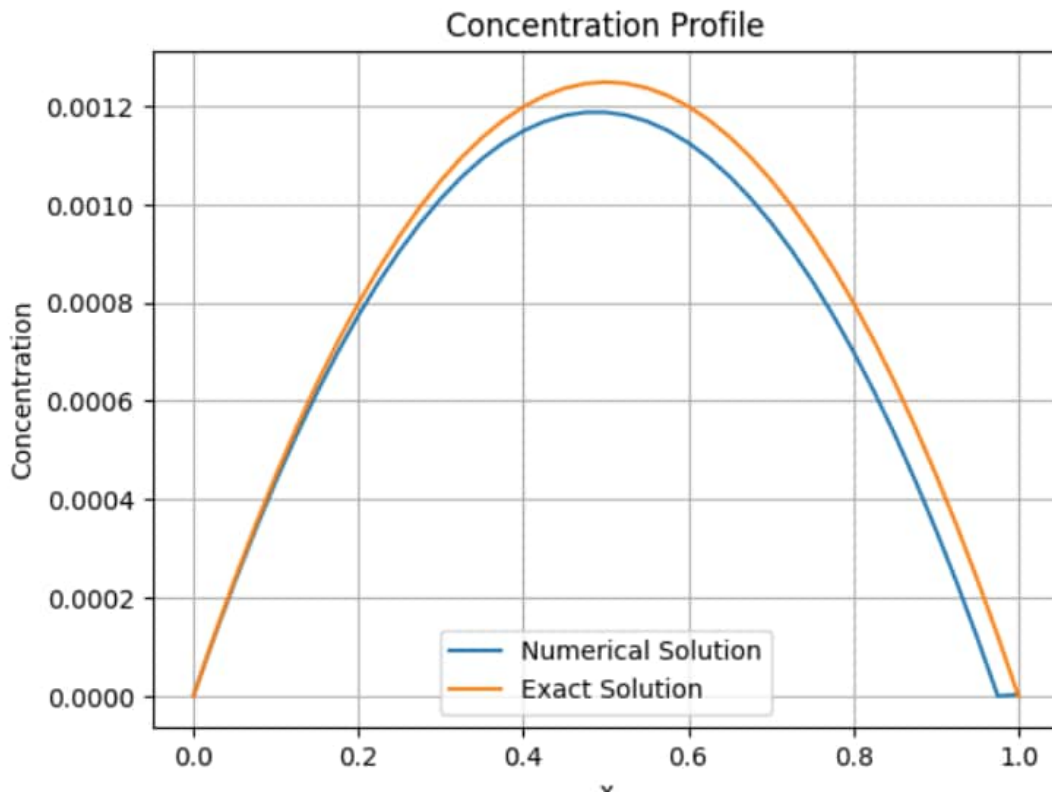


Рис. 3.6.

На Рис. 3.6. зображено графіки аналітичного та наближеного розв'язків з такими коефіцієнтами $D = 100$, $V=1$, $d=1$, $R=1$. Кількість скінченних елементів $n=64$.

Таблиця 3.

Значення коефіцієнта дифузії	Відносна похибка
1	4.24%
20	4.64%
40	4.76%
100	4.83%

Як можна побачити зміна коефіцієнту дифузії не сильно впливає на точність розв'язку.

ВИСНОВКИ

У даній роботі розглянута задача реакції-адвекції-дифузії в обмеженій зв'язній області Ω евклідового простору R з неперервною за Ліпшицем границею Γ .

Для математичного моделювання задачі було сформульоване варіаційне формулювання, в якому шукається функція s , що задовольняє рівняння та граничні умови. Для отримання наближеного розв'язку задачі, було використано напівдискретне представлення, де функція s представляється у вигляді суми по базисних функцій.

Застосування методу Гальоркіна дозволило отримати напівдискретизовану форму задачі, яка була подальше записана у матричному вигляді. Використання матричних позначень дозволило сформулювати задачу Коші, яка включає систему диференціальних рівнянь та початкові умови. Зазначено, що матриці, що виникають у випадку напівдискретизованої задачі, мають відмінні від нуля визначники, є симетричними та позитивно визначеними.

Виконано числові експерименти для наближеного розв'язку задачі та проаналізовано отримані результати. Робота висвітлює важливість математичного моделювання задач реакції-адвекції-дифузії і демонструє застосування варіаційного підходу та методу Гальоркіна для їх чисельного розв'язання.

Результати роботи можуть бути використані для подальших досліджень у галузі математичного моделювання реакційних та транспортних процесів. Загалом, робота сприяє розумінню та аналізу задач реакції-адвекції-дифузії та надає основу для подальшого розвитку методів їх чисельного моделювання та дослідження відповідних фізичних явищ.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] Савула Я. Г. Числовий аналіз задач математичної фізики варіаційними методами / Я.Г. Савула. - Львів: видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2004. 221 с.
- [2] Шинкаренко Г.А. Проекційно-сіткові методи розв'язування початково-крайових задач / Г.А. Шинкаренко. - Київ НМК ВО 1991. 87с.
- [3] Савула Я.Г. Метод скінченних елементів. Львів: Вища школа / Я.Г. Савула, Г.А. Шинкаренко .- 1976. 87с.
- [4] Кухарський В.М. Використання проекційно-сіткових методів до розв'язання задач адвекції-дифузії у тонких криволінійних каналах / Я.Г. Савула, В.М. Кухарський // Вісник Львівського університету. Сер. Мех.-мат. – 1998. – Вип.50. – С. 148–152.
- [5] Савула Я.Г. Числовий аналіз різновимірних крайових задач адвекції-дифузії у середовищах із тонкими включеннями / Я.Г. Савула, Т.І. Мандзак, В.М. Кухарський // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2008. – Вип.8. – С.149-156.
- [6] Кухарський В.М. Модифікований метод залишково-вільних бульбашок для розв'язування задач адвекції-дифузії з великими числами Пекле / В.М. Кухарський, Я.Г. Савула, І. Кривень // Вісник ЛНУ. Серія прикл. матем. та інформатика. –2013. – Вип. 20 – с. 85-94

ДОДАТОК

```
import numpy as np
from scipy.sparse import lil_matrix
from scipy.special import legendre
from scipy.sparse.linalg import spsolve
import matplotlib.pyplot as plt
eps = np.finfo(float).eps

V = 100.0
D = 1.0
R = 1.0 |
f = 1.0

a = 0.0
b = 1.0

N = 200
M = N + 1

x = np.linspace(a, b, M)

K = lil_matrix((M, M))
A = lil_matrix((M, M))
B = lil_matrix((M, M))
F = np.zeros(M)
```

```
for e in range(N):
    x_e = x[e:e+2]

    Ke = np.zeros((2, 2))
    Ae = np.zeros((2, 2))
    Re = np.zeros((2, 2))
    Fe = np.zeros(2)

    h = x_e[1] - x_e[0]
    Ke[0, 0] = D / h
    Ke[0, 1] = -D / h
    Ke[1, 0] = -D / h
    Ke[1, 1] = D / h

    Ae[0, 0] = V / 2
    Ae[0, 1] = V / 2
    Ae[1, 0] = -V / 2
    Ae[1, 1] = -V / 2

    Re[0, 0] = h * R / 3
    Re[0, 1] = -h * R / 6
    Re[1, 0] = -h * R / 6
    Re[1, 1] = h * R / 3

    Fe[0] = f * h / 2
    Fe[1] = f * h / 2
```

```
indices = [e, e+1]
K[np.ix_(indices, indices)] += Ke
A[np.ix_(indices, indices)] += Ae
B[np.ix_(indices, indices)] += Re
F[indices] += Fe
if (x_e[0] - a) < eps:
    K[e, e] = 1e15
if (b - x_e[1]) < eps:
    K[e, e] = 1e15

c_a = 1.0
c_b = 1.0

alpha_a = 1.0
alpha_b = 1.0

K[0, 0] += alpha_a
K[0, 1] -= alpha_a

K[M-1, M-1] += alpha_b
K[M-1, M-2] -= alpha_b

C = spsolve((K + A + B).tocsr(), F)
```

```

# Точний розв'язок
alpha_1 = (-V + np.sqrt(V**2 + 4 * D * R)) / (-2 * D)
alpha_2 = (-V - np.sqrt(V**2 + 4 * D * R)) / (-2 * D)
c_exact = (f / R) * (((np.exp(alpha_2 * b) - 1) / (np.exp(alpha_1 * b) -
np.exp(alpha_2 * b))) * np.exp(alpha_1 * x) + ((1 - np.exp(alpha_1 * b)) /
(np.exp(alpha_1 * b) - np.exp(alpha_2 * b))) * np.exp(alpha_2 * x) + 1)

plt.plot(x, C, label='Numerical Solution')
plt.plot(x, c_exact, label='Exact Solution')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('Concentration')
plt.title('Concentration Profile')
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()

print("Numerical Solution:")

print("Exact Solution:")
print(c_exact)

relative_error = np.linalg.norm(c_exact - C) / np.linalg.norm(c_exact)
print("Relative Error:", relative_error)

```