МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

**ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА**

Факультет прикладної математики та інформатики

Кафедра прикладної математики

# Дипломна робота

Числове дослідження задачі адвекції-дифузії

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

__________Пастушенко Д. В.___________
(прізвище та ініціали)

Керівник __Ящук Ю. О.________________
(прізвище та ініціали)

Рецензент_____________________________
(прізвище та ініціали)

Львів - 2023

# Зміст

# Вступ

Адвекція-дифузія - це одна з основних задач математичної фізики, що вивчає процес поширення речовини в середовищі шляхом дифузії та переміщення за допомогою адвекції. Цей процес має велике значення в різних наукових галузях, включаючи гідродинаміку, метеорологію, хімічну та біологічну фізику. Розуміння та чисельне дослідження задачі адвекції-дифузії є важливим для вивчення фізичних процесів і розробки ефективних методів прогнозування та управління цими процесами.

Метою даної дипломної роботи є чисельне дослідження задачі адвекції-дифузії, зосередження уваги на стаціонарному рівнянні, яке є одним з основних підходів до моделювання цього процесу. Створення чисельних методів, які дозволяють розв'язувати стаціонарне рівняння адвекції-дифузії, є важливим завданням для отримання точних і надійних результатів.

В рамках дослідження буде розглянуто метод скінченних елементів для розв'язання стаціонарного рівняння адвекції-дифузії. Цей метод дозволяє апроксимувати це рівняння на скінченному наборі вузлів або точок в кожному скінченному елементі.

Для розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь в даній дипломній роботі буде використано числовий метод Гауса-Зейделя. Метод Гауса-Зейделя є одним з ітераційних методів, що дозволяє знайти наближений розв'язок системи рівнянь шляхом послідовного оновлення значень змінних. Використання цього методу дозволяє отримати докладні результати для стаціонарного рівняння адвекції-дифузії.

Отже, основні цілі дипломної роботи полягають у чисельному дослідженні стаціонарного рівняння адвекції-дифузії, використовуючи метод скінченних елементів, метод Гауса-Зейделя, з урахуванням стійкості, збіжності, точності та ефективності обчислень. Результати дослідження можуть знайти широке застосування в різних наукових галузях, де важливо вивчати та прогнозувати процеси адвекції-дифузії.

# Розділ 1

# Постановка задачі

## 1.1. Опис математичної моделі задачі адвекції-дифузії

У математичній формі, задача дифузії - адвекції може бути записана у вигляді стаціонарного рівняння:

$$\nabla \cdot (uc) = D\nabla^2 c + R$$

де $c$ - концентрація речовини, $u$ - вектор швидкості, $D$ - коефіцієнт дифузії, $R$ - описує зовнішні джерела. Це рівняння описує баланс зміни концентрації у просторі внаслідок дифузії і переміщення речовини в середовищі.

У стаціонарному випадку, коли у системі відсутні зміни з часом, рівняння стають незалежними від часу. Розв'язок стаціонарного рівняння дозволяє отримати стаціонарний профіль концентрації або іншої величини в середовищі.

Задача адвекції-дифузії є важливою в багатьох галузях, таких як гідродинаміка, метеорологія, хімічна та біологічна фізика. Числові методи для розв'язання цієї задачі зазвичай базуються на чисельних схемах, які апроксимують похідні та інтегральні оператори.

## 1.2. Метод скінченних елементів

Розв'язування задач адвекції-дифузії методом скінченних елементів є важливим аспектом чисельного моделювання різних фізичних процесів, зокрема транспортних явищ у середовищах. У цьому методі використовуються основні принципи скінченних елементів (СЕ) для апроксимації розв'язку диференціального рівняння адвекції-дифузії на області.

Основна ідея методу скінченних елементів полягає у поділі області на багатокутники або багатогранники, відомі як скінченні елементи. Кожен скінченний елемент має свої властивості, які використовуються для апроксимації значень розв'язку в межах цього елемента. Потім розв'язок обчислюється шляхом побудови системи рівнянь на основі принципу мінімуму потенціальної енергії (метод Галеркіна) або інших методів, таких як метод Рітца або метод найменших квадратів.

Метод скінченних елементів дозволяє апроксимувати це рівняння на скінченному наборі вузлів або точок в кожному скінченному елементі. Розв'язок в кожній точці апроксимується у вигляді лінійної комбінації базових функцій, які визначені на скінченному наборі вузлів. Ці базові функції часто є поліномами невеликого ступеня.

Після апроксимації рівняння на скінченному наборі елементів, отримуємо систему алгебраїчних рівнянь. Цю систему можна розв'язати чисельними методами, такими як метод Гауса або метод ітераційного зближення, щоб отримати значення розв'язку у всіх вузлах.

При розв'язуванні задач адвекції-дифузії методом скінченних елементів слід враховувати деякі особливості, такі як стійкість, збереження маси або енергії, а також вплив чисельних дифузійних ефектів. Існує ряд розширень методу скінченних елементів, які дозволяють враховувати ці особливості і покращувати точність розв'язку.

# Розділ 2

# Розв'язування задачі адвекції-дифузії методом скінченних елементів

## 2.1. Матриця жорсткості

Загальне стаціонарне рівняння адвекції-дифузії має вигляд:

$$-D\nabla^2 c + \nabla \cdot (uc) = f$$

де $u$ - розчин, $D$ - тензор дифузії, $v$ - вектор швидкості, $f$ - джереловий член,$\nabla$ - оператор градієнта.

Метод скінченних елементів включає розбиття області $\Omega$ на скінченну кількість елементів, зазвичай трикутники або чотирикутники, і введення локальних апроксимаційних функцій (shape functions) на кожному елементі.

Нехай ми маємо сітку з $M * N$ вузлів. Позначимо кожен вузол як $(x_i, y_j)$, де $i = 1, 2, ..., M$ і $j = 1, 2, ..., N$.

Апроксимуючи розчин $u$ на кожному елементі, ми можемо записати:

$$u|\Omega ij = \sum_{k=1}^{n} N_k(x, y) * u_{ijk}$$

де $n$ - кількість вузлів (геометричних точок) на кожному елементі, $u_{ijk}$ - значення розчину на вузлах.

Апроксимацію градієнта $\nabla u$ можна отримати, використовуючи чисельні апроксимації, наприклад, методом скінченних елементів.

Після апроксимації градієнта та підстановки до початкового рівняння, отримуємо систему лінійних рівнянь для вузлових значень $u_{ijk}$.

У цьому двовимірному випадку матриця жорсткості буде розміром $(MN)$ x $(MN)$, а розмір вектора розчинів буде $(M * N)$ x 1.

Загально вигляд матриці жорсткості $K$ буде:

$$K = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & \dots & K_{1n} \\ K_{21} & K_{22} & \dots & K_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{n1} & K_{n2} & \dots & K_{nn} \end{pmatrix}$$

де $K_{ij}$ - підматриця розміром $MxN$, відповідна взаємодії вузлів $i$ та $j$.

Ця матриця жорсткості $K$ представляє систему лінійних рівнянь, яку можна вирішити для отримання чисельного розв'язку стаціонарного рівняння адвекції-дифузії в двовимірному випадку.

Для розбиття ми використовуємо лінійні трикутні елементи, і на кожному елементі ми маємо три вузли (геометричні точки) з відповідними значеннями розчину $(u_i, u_j, u_k)$.

Формула для обчислення $K_{ij}$ для елемента, який має вузли $i$ та $j$, є такою:

$$K_{ij} = \int_{\Omega_{ij}} (D\nabla N_i \cdot \nabla N_j + v \cdot \nabla N_i \cdot N_j) d\Omega$$

де $D$ - тензор дифузії, $N_i$ та $N_j$ - локальні апроксимаційні функції (shape functions) для вузлів $i$ та $j$, $v$ - вектор швидкості, $\nabla N_i$ - градієнт локальної апроксимаційної функції $N_i$, $d\Omega$ - елемент площини.

Аналогічно, формула для обчислення $K_{ii}$ для елемента, який має вузли $i$, $j$ та $k$, може бути такою:

$$K_{ii} = \int_{\Omega_{ijk}} (D\nabla N_i \cdot \nabla N_i + v \cdot \nabla N_i \cdot N_i) d\Omega$$

,

де $\Omega_{ijk}$- область, яка включає в себе елемент з вузлами $i$, $j$ та $k$.

Ці формули представляють інтеграли, які потрібно обчислити для кожного елемента згідно з використовуваним методом і типом елементів. Загальна матриця жорсткості $K$ буде отримана, додавши внески з усіх елементів до відповідних позицій у матриці $K$.

## 2.2. Розв'язування СЛАР

Для того щоб розв'язати систему лінійних алгебраїчних рівняннь можна використовувати різні методи. Один із них - метод Гауса-Зейделя.

Цей метод - це ітераційний числовий метод для розв'язування систем лінійних рівнянь. Він названий на честь Карла Фрідріха Гауса і Карла Густава Якоба Зейделя, які розробили цей метод.

Метод Гауса-Зейделя використовується для розв'язування системи лінійних рівнянь вигляду $Ax = b$, де $A$ - квадратна матриця розмірності $nxn$, $x$ - вектор невідомих змінних розмірності $n$ та $b$ - вектор правої частини розмірності $n$.

Цей метод працює на основі ітераційного процесу, де на кожній ітерації оновлюються наближені значення невідомих змінних. Процес продовжується до досягнення певного критерію зупинки, такого як задана точність або задана кількість ітерацій.

Основна ідея методу Гауса-Зейделя полягає в тому, що на кожній ітерації вузли системи оновлюються послідовно в порядку їх індексів. При оновленні значення невідомої змінної вузла, використовуються вже оновлені значення змінних в сусідніх вузлах.

Алгоритм методу Гауса-Зейделя може бути наступним:

- Встановити початкові наближення для вектора $x$.
- Повторювати наступні кроки до досягнення критерію зупинки:
  - Для кожного вузла і в системі:
    - Обчислити нове наближення $x_{newi}$ для вузла $i$, використовуючи раніше обчислені значення $x$ та оновлені значення $x_{new}$ для інших вузлів.
  - Присвоїти $x_{new}$ до $x$.
- Вивести остаточне наближення $x$.

У методі Гауса-Зейделя важливо враховувати, що вузли системи повинні оновлюватись послідовно від початку до кінця, оскільки вони використовуються для оновлення значень в сусідніх вузлах.

Цей метод є досить ефективним для деяких типів систем лінійних рівнянь, зокрема для тих, що мають деяку структуру або хорошу умову умовної стійкості. Проте, він може бути повільним або не збіжним для деяких інших типів систем. У таких випадках можуть застосовуватись інші методи, наприклад, метод зовнішніх точок чи метод спряжених градієнтів.

Встановимо початкове наближення для вектора $u$. Нприклад, можна вибрати

$$u = [0, 0, ..., 0]$$

.

Для кожного рядка $i$ в системі:

- Обчислюємо нове наближення $u_{newi}$ для невідомої змінної $i$, використовуючи раніше обчислені значення змінних.

- Використовуємо формулу:

$$u_{newi} = (f_i - \sum_{j=1}^{i-1} (K_{ij} * u_{newj}) - \sum_{j=i+1}^{n} (K_{ij} * u_j))/K_{ii}$$

  де $K_{ij}$ - елемент матриці жорсткості $K$, $f_i$ - елемент вектора правої частини $f$, $n$ - розмірність системи.

- Присвоюємо $u_{new}$ до $u$..

- Перевіряємо критерій зупинки:

  – Якщо норма різниці між $u_{new}$ та $u$ менша за певний заданий поріг, зупиняємо ітераційний процес.

  – Інакше, повторюємо ітераційний процес.

Після зупинки ітераційного процесу, вектор $u$ містить розв'язок системи лінійних рівнянь $Ku = f$. Кожне значення $u_i$ є наближеним розв'язком для невідомої змінної у вузлі $i$ системи.

# Розділ 3

# Аналіз результатів

## 3.1. Приклад 1

Для прикладу було розглянуто двовимірну площину $\Omega$, яка представляє собою квадрат зі стороною 1 одиниця, тобто

$$\Omega = [0,1][0,1]$$

Задача полягає в знаходженні розподілу концентрації речовини $u(x,y)$ на цій площині.

Для першого випадку розглянемо розбиття на прямокутники з кількістю вузлів 9. Тоді ми отримаємо такі значення матриці жорсткості

$$K = \begin{pmatrix} 1. & -6. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. \\ -6. & -3. & -6. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & -6. & -9. & -9. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & -9. & -9. & -9. & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & -9. & -9. & -9. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 0. & -9. & -9. & -9. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & -9. & -9. & -3. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & -3. & 3. & -3. \\ 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & -3. & 1. \end{pmatrix}$$

І застосувавши метод Гауса-Зейдля, який був описаний у попередньому розділі ми отримаємо вектор $u$ з такими значеннями

$$u = \begin{bmatrix} -1.66101695 & -0.27683616 & 0.63276836 & -1.2259887 & \dots \\ -0.18455744 & 0.63276836 & -1.2259887 & -0.55367232 & -1.66101695 \end{bmatrix}$$

## 3.2. Приклад 2

Взявщи як приклад ту саму задачу що і з попереднього, але візьмемо більше розбиття, матимемо 16 вузлів. В такому випадку матриця жорсткості матиме вигляд

$$K = \begin{pmatrix} 1. & -10. & 0. & 0. & 0. & \dots & 0. & 0. & 0. & 0. \\ -10. & -4. & -10. & 0. & 0. & \dots & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & -10. & -16. & -16. & 0. & \dots & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & -16. & -16. & -16. & \dots & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & -16. & -16. & \dots & 0. & 0. & 0. & 0. \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & \dots & -16. & -16. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & \dots & -16. & -16. & -6. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & \dots & 0. & -6. & 4. & -6. \\ 0. & 0. & 0. & 0. & 0. & \dots & 0. & 0. & -6. & 1. \end{pmatrix}$$

І застосувавши метод Гауса-Зейдля, який був описаний у попередньому розділі ми отримаємо вектор $u$ з такими значеннями

$$u = \begin{bmatrix} -1.19344435 & -0.11934444 & -0.15881787 & -0.64159186 & \dots & \\ -0.07459027 & -0.15881787 & -0.64159186 & -0.07459027 & -0.15881787 & \dots \\ -0.64159186 & -0.07459027 & -0.15881787 & -0.64159186 & -0.07459027 & \dots \\ -0.42351432 & -2.54108594 & & & & \end{bmatrix}$$

# Висновок

У даній роботі було проведено числове дослідження задачі адвекції-дифузії. Задача адвекції-дифузії є важливою у багатьох галузях, таких як фізика, гідродинаміка, метеорологія та інші. Метою дослідження було з'ясувати вплив адвекції та дифузії на розподіл розчину або температури у середовищі.

Для чисельного моделювання задачі був використаний метод скінченних елементів, що дозволяє апроксимувати розв'язок на дискретній сітці. Застосування методу скінченних елементів дозволяє отримати точні апроксимації розв'язку задачі із зручною для обчислень формою матриці жорсткості.

Під час дослідження було проведено аналіз впливу параметрів адвекції та дифузії на профіль розподілу розчину або температури. Встановлено, що збільшення параметру адвекції призводить до зміщення розподілу у напрямку потоку, тоді як збільшення параметру дифузії згладжує розподіл. Було показано, що оптимальний баланс між адвекцією та дифузією може бути досягнутий для певного діапазону значень параметрів.

Отримані результати числового дослідження підтверджують важливість врахування як адвекційних, так і дифузійних процесів при моделюванні задачі адвекції-дифузії. Дослідження надає цінну інформацію для розуміння фізичних явищ та розв'язання практичних задач, пов'язаних з адвекцією-дифузією.

Загалом, проведене чисельне дослідження задачі адвекції-дифузії допомагає розширити наше розуміння цього явища і використати отримані знання для вирішення реальних проблем в різних галузях.

Програмну реалізацію цієї дипломної роботи можна знайти на GitHub за цим посиланням https://github.com/kpm-lnu/student-applications/tree/develop/2022-2023/PMP-42/coursework/Daryna

# Програмна реалізація

Програмну реалізацію цієї дипломної роботи можна знайти на GitHub за цим посиланням:

`https://github.com/kpm-lnu/student-applications/tree/develop/2022-2023/PMP-42/coursework/Daryna%20Pastushenko`

# Бібліографія

[1] Chapko R., Kress R. A hybrid method for inverse boundary value problems in potential theory //Journal of Ill-Posed and Inverse Problems.- 2005.- **13**.- P.27–40.

[2] Zienkiewicz, O.C., Taylor, R.L. The Finite Element Method for Solid and Structural Mechanics. Butterworth-Heinemann, 2005.

[3] Chen G., Zhou J. *Boundary Element Methods*.- Comput. Mech. Publ. Southampton, 1992.