posants. Пат.Франції 8805694. Morgovsky G.A.,Pistun E.P.,Tepljukh Z.N.,Sankin Ya. L. 7. Apparatus for preparing gas mixtures from constituents taken in a given proportion. Патент США 4915123. Morgovsky G.A., Pistun E.P., Tepljukh Z.N., Sankin Ya. L. 8. Anordning for beredning av gasblandningar med forutbestamd componentkoncentra-tion. Патент Швеції 8801331-3. Morgovsky G.A., Pistun E.P., Tepljukh Z.N., Sankin Ya. L. 9. Apparatus for preparing gas mixtures from constituents taken in a given proportion. Патент Японії № 63- 88342. Morgovsky G.A., Pistun E.P., Tepljukh Z.N., Sankin Ya. L. 10. Теплюх З.М. Синтезатори газових сумішей для перевірки аналізаторів складу димових газів // Методи та прилади контролю якості, №8, 2002, С. 83-85. 11. Івахів О.В., Теплюх З.М. Підгонка опору дроселів за допомогою газодинамічного моста // Вісник НУ"ЛП" № 475 "Автоматика, вимірювання та керування", 2003, С. 15-21. 12. Бобылев А.В. Требования к чистым газам как исходным компонентам образцовых газовых смесей // Измерительная техника №5, 1986, С. 54-55.

УДК 532.612.3

РОЗВ'ЯЗОК РІВНЯННЯ ДИФУЗІЇ ШЛЯХОМ ЙОГО ЗВЕДЕННЯ ДО РІВНЯННЯ СТАНУ У СТАНДАРТНІЙ ФОРМІ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ ПРОЦЕСІВ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ВКЛЮЧЕНЬ У СЕРЕДОВИЩІ

© Малько О. Г., Кісіль І.С., Дранчук М.М. 2004
Івано – Франківський національний техкічний університет нафти і газу

Запропонований метод чисельного розв'язку рівняння дифузії шляхом його зведення до рівнянням стану у стандартній формі при моделюванні процесів розповсюдження включень з метою методологічного обґрунтування контролю якісного та кількісного складу речовин на основі капілярних методів, а також вирішенні задачі моніторингу і прогнозування розповсюдження шкідливих домішок у водному середовищі

Методологічне обґрунтування ряду задач вимірювання, контролю, моніторингу та прогнозування потребує вирішення питань розповсюдження в часі домішок у середовищах, що потребує моделювання процесів масообміну шляхом розв'язку диференційних рівнянь параболічного типу, інакше рівнянь дифузії[1]. У даному випадку необхідність побудови таких моделей виникла при вирішенні проблеми методологічного обґрунтування контролю якісного та кількісного складу речовин на основі капілярних методів [2], а також проблеми моніторингу і прогнозування розповсюдження шкідливих домішок у водному середовищі [3]. Об'єднання їх у одну групу обумовлене спільністю постановочної частини. Проведені дослідження моделей структур поверхонь розділу фаз проведені у роботі [2] дають основу для визначення квазікрайових умов при моделюванні процесів масопереносу включень з об'ємної фази у поверхневий шар. Розв'язок задачі масопереносу у процесі насичення поверхневого шару дає можливість теоретично обґрунтувати динаміку міжфазного натягу в залежності від кількісного і якісного складу контактуючих фаз. Крім того, деякі параметри структури поверхневого шару мають непрямий вплив на поведінку динамічної характеристики поверхневого натягу, що дає додаткову інформацію для якісного контролю речовин.

Спільною специфікою формулювання таких задач при вирішенні вказаних проблем, є те, що граничні (крайові) умови у свою чергу є функцією не тільки часу, а і значень самого параметру, що визначається. Крім того, тут необхідно враховувати функцію впливу на значення шуканого параметру у просторі і часі. Застосування стандартних чисельних методів (апроксимація різницевими рівняннями) у таких випадках є малоефективним із-за проблем збіжності і стійкості, а також складності постановки задачі. Представлення задачі рівням стану у стандартній формі є набагато інформативнішим, так як тут чітко визначені змінна стану і вхідний вплив. Також значно спрощується алгоритм обчислень – багатократний розв'язок систем лінійних рівнянь в процесі зміни граничних (крайових) умов у часі тут замінено однократним обчисленням перехідної матриці стану, що дає можливість імітаційного моделювання у реальному часі.

В загальному задачу масопереносу можна сформулювати наступним чином. Якщо у деякій просторово-часовій точці (*x*, *y*, *z*, *t*) позначити компоненти вектора швидкості руху рідини $\overline{V}$ по осях

Ox, Oy, Oz через V_x, V_y, *Vz*, а коефіцієнти дифузії у відповідних напрямках через D_x, D_y, D_z, тоді потоки речовини з концентрацією *c*(*x, y, z, t*) визначаються виразами:

$$V_x c - D_x \frac{\partial c}{\partial x},\ V_y c - D_y \frac{\partial c}{\partial y},\ V_z c - D_z \frac{\partial c}{\partial z}. \tag{1}$$

Виходячи з закону збереження маси речовини, рівняння балансу неконсервативної речовини, яка розповсюджується в рідині, можна представити у вигляді диференційного рівнянні в часткових похідних:

$$\begin{aligned}\frac{\partial c}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} - V_x c \right) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial y}\left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} - V_y c \right) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial z}\left(D_z \frac{\partial c}{\partial z} - V_z c \right) + \\ &+ f(x,y,z,t),\end{aligned} \tag{2}$$

де *f*(*x, y, z, t*) – функція зовнішнього впливу.

Після апроксимації різницевими рівняннями по просторовим координатам і приведення до безрозмірної форми згідно [3] рівняння (1) запишеться у вигляді:

$$\begin{aligned}\frac{dc^*_{i,j,k}(t)}{dt^*} &= \left[\begin{pmatrix} c^*_{i-1,j,k} V^*_{i-1,j,k} + \\ + c^*_{i,j-1,k} V^*_{i,j-1,k} + \\ + c^*_{i,j,k-1} V^*_{i,j,k-1} \end{pmatrix} - \\ - \begin{pmatrix} c^*_{i+1,j,k} V^*_{i+1,j,k} + \\ + c^*_{i,j+1,k} V^*_{i,j+1,k} + \\ + c^*_{i,j,k+1} V^*_{i,j,k+1} \end{pmatrix} \right] + \\ &+ \left[\begin{pmatrix} c^*_{i-1,j,k} + \\ + c^*_{i+1,j,k} + \\ + c^*_{i,j-1,k} + \\ + c^*_{i,j+1,k} + \\ + c^*_{i,j,k-1} + \\ + c^*_{i,j,k+1} \end{pmatrix} - 4c^*_{i,j,k} \right] + \\ &+ \frac{a^2}{D\rho} f(i,j,k,t),\end{aligned} \tag{3}$$

де *a* – крок просторової дискретизації; $t^* = t/(a^2/D)$ – безрозмірний час; $c^*(t) = c(t)/\rho$ – безрозмірна концентрація (концентрація, приведена до густини розчинника); $V^* = V/(D/a)$ – безрозмірна швидкість; $f(i,j,k,t)$ – дискретна у просторі функція зовнішнього впливу, що відповідає функції $f(x,y,z,t)$ згідно (2).

Для зменшення об'єму викладок при ілюстрації запропонованого методу доцільно взяти одномірний варіант рівняння (3)

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial t^2} + f(x,t) \tag{4}$$

при таких крайових і початкових умовах:

$$\begin{aligned} &c(0,t) = c_0(t); \\ &c(L,t) = c_L(t); \\ &c(x,t_0) = c(x), \end{aligned} \tag{5}$$

де t_0 – початковий момент часу; $c(x,t)$ – розподіл концентрації у вздовж осі x; D_x – коефіцієнт дифузії у напрямку x; $f(x,t)$ – функція впливу; L – довжина просторового інтервалу. Аналогічно одномірний варіант рівняння (3) буде мати такий вигляд:

$$\begin{aligned}\frac{dc^*_i(t)}{dt^*} &= \left[\begin{pmatrix} c^*_{i-1}(t^*) + \\ + c^*_{i+1}(t^*) \end{pmatrix} - 2c^*_i(t^*) \right] + \\ &+ \frac{a^2}{D\rho} f(i,t), \quad i = 1,2,\ldots,l\end{aligned} \tag{6}$$

де $l = (L/a) - 1$.

Взявши за змінні стану функції концентрації у вузлових точках $c_i(t)$ і позначивши їх сукупність вектором

$$C(t^*) = \left(c^*_1(t^*), c^*_2(t^*), c^*_3(t^*), \cdots c^*_l(t^*) \right)^T, \tag{7}$$

а $N(t) = \dfrac{dC(t^*)}{dt}$, тобто

$$\dot{C}(t) = \begin{pmatrix} \dfrac{dc^*_1(t)}{dt^*}, & \dfrac{dc^*_2(t)}{dt^*}, \\ \dfrac{dc^*_3(t)}{dt^*}, & \ldots, & \dfrac{dc^*_l(t)}{dt^*} \end{pmatrix}^T, \tag{8}$$

рівняння (3) у матричній формі буде мати вигляд:

$$\dot{C}(t) = A \cdot C(t^*) + B \cdot U(t^*), \tag{9}$$

що відповідає рівнянню стану у стандартній формі [4] при початкових умовах:

$$\mathbf{C}(t_0^*) = (c_1^*(t_0^*), c_2^*(t_0^*), c_3^*(t_0^*), \cdots, c_l^*(t_0^*))^T. \tag{10}$$

Крайові умови:

$$c(0,t^*) = c_0(t^*); \quad c(l+1, t^*) = c_L(t^*) \tag{11}$$

у даному випадку можна представити як додатковий вплив у крайніх точках інтервалу L, ввівши їх у вектор вхідного впливу $U(t^*)$. Тут де B - $l \times l$ матриця коефіцієнтів вхідного впливу та крайових умов (у даному випадку одинична матриця), $C(t_0^*)$ – l – вектор початкового стану, $U(t)$ – l – вектор вхідного впливу та крайових умов:

$$U(t^*) = \begin{pmatrix} c_0^*(t^*) + f(1,t^*),\ f(2,t^*), \\ f(3,t^*), \ldots, f(l-1,t^*), \\ c_L^*(t^*) + f(l,t^*) \end{pmatrix}^T, \quad (12)$$

A - трьохдіагональна $l \times l$ матриця виду:

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Алгоритм розв'язку рівняння стану у стандартній формі (9),(10),(11) (знаходження $C(t)$)полягає у наступному [4]:

1) визначається перехідна $l \times l$ матриця стану [5]:

$$\Phi(t,\tau) = exp[A \cdot (t-\tau)], \quad (14)$$

для чого необхідно зробити наступні обчислення:

1.1) знайти власні числа матриці A шляхом розв'язку характеристичного рівняння

$$det(A - \lambda \cdot E), \quad (15)$$

де E – одинична матриця;

1.2) знайти власні вектори $\bar{\xi}_i$ для всіх $\bar{\lambda}_i$, $i = \overline{1,l}$ шляхом розв'язку рівняння

$$(A - \lambda_i \cdot E) \cdot \bar{\xi}_i = 0; \quad (16)$$

1.3) побудувати матрицю власних векторів S таким чином:

$$S = \begin{pmatrix} \bar{\xi}_1 & \cdots & \bar{\xi}_{l-1} & \bar{\xi}_l \\ \downarrow & \cdots & \downarrow & \downarrow \end{pmatrix}; \quad (17)$$

1.4) побудувати перехідну матрицю стану

$$\Phi(t^*) = S \times diag \begin{pmatrix} exp(\lambda_1 t^*), \\ exp(\lambda_2 t^*), \\ \ldots, \\ exp(\lambda_l t^*) \end{pmatrix} \times S^{-1}; \quad (18)$$

2) шукана функція $C(t)$ знаходиться із співвідношення

$$C(t) = \Phi(t,t_0) \times C(t_0) + \\ + \int_{t_0}^{t} \Phi(t,\tau) \times B(\tau) \times U(\tau) d(\tau) \quad (19)$$

у випадку розгляду системи з неперервним часом.

При дискретизації по часу з інтервалом T функція $C(k+1)$, що відповідає моменту часу $(k+1)T$, визначається із співвідношення

$$C(k+1) = F \times C(k) + G \times U(k), \quad (20)$$

де

$$F = exp(A \cdot T), \quad (21)$$

і є дискретною перехідною матрицею стану і знаходиться аналогічно п.п. 1.1) – 1.4), але замість t^* необхідно підставити значення інтервалу дискретизації T; а матриця G визначається так :

$$G = \int_0^T exp(A \cdot \sigma) \times B d\sigma. \quad (22)$$

Слід зауважити, що у випадку з неперервним часом перехідна матриця стану $\Phi(t,\tau)$є функціональною, а у випадку з дискретним часом матриці F і G є числовими, тобто вони обраховуються тільки один раз.

1. Фарлоу С. Уравнения с частными производными для научных работников и инженеров. – М.:, Мир, 1985 – 380 с. 2 Малько О. Г. Визначення динамічних характеристик міжфазного натягу по зміні тиску у висячій краплі сталого об'єму. // Методи та прилади контролю якості.- №10, 2003.- С.45 - 49. 3 Малько О. Г.,Лугова Л. Р Моніторинг і прогнозування розподілу включень поверхнево-активних речовин у закритих водних системах. //Методи та прилади контролю якості.- №11, 2003.- С.30 - 34. 4 Директор С., Рорер Р. Введение в теорию систем. - М.:, Мир, 1974– 464 с. 5 Гантмахер Ф. Р. Теория матриц.– 4-е изд. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит.,1988. – 552с.