УДК 681.513.675

ПРО НАБЛИЖЕНИЙ РОЗВ'ЯЗОК ОДНОСТОРОННІХ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ ТА ТЕПЛОМАСООБМІНУ ІЗ БАГАТОЗНАЧНИМИ ФУНКЦІЯМИ ВІДПОВІДНОСТІ

І.В. ЖДАНОВА

Розглянуто односторонні процеси із моделями у формі варіаційних нерівностей. Односторонні властивості процесів задаються у вигляді негладких функціоналів, які входять у модель та породжують багатозначні функції відповідності. Для задач цих типів виконано наближене розв'язання за допомогою розвитку методу функціональної параметризації.

ВСТУП

Урахування односторонніх властивостей процесів дифузії та тепломасообміну відіграє важливу роль при розв'язанні задач моніторингу оточуючого середовища, нафтовидобувної промисловості та інших сфер людської діяльності. Односторонні процеси якісно змінюють свій характер у випадку досягнення критичних значень. Час та місце цих змін заздалегідь невідомі. В інших випадках вони поводяться як класичні двосторонні процеси. Зазвичай для опису подібних процесів використовуються методи математичної фізики [1]. При цьому односторонні задачі розглядаються у вигляді сукупності двосторонніх. За наявності додаткових умов, характерних для односторонніх процесів, двосторонні моделі розширюються за рахунок співвідношень, які описують ці умови або коректують вихідну модель, причому додаткові співвідношення часто мають емпіричний характер. Такий підхід може призвести до помилок. Більш змістовним з математичної точки зору підходом до розробки моделей односторонніх процесів є врахування впливу додаткових вимог на розв'язок задачі на етапі постановки, що вимагає застосування моделей у вигляді варіаційних нерівностей [2], [3].

Розробка та вдосконалення методів розв'язання односторонніх задач, представлених у вигляді варіаційних нерівностей, залишається актуальною задачею. Для практичної реалізації варіаційних задач зручним та ефективним є метод функціональної параметризації на основі варіаційного підходу [4], теоретичні засади якого наведено у роботі [5]. Метод функціональної параметризації застосовувався до деяких видів односторонніх процесів [4]. Він дозволяє знаходити розв'язок односторонньої задачі, паралельно розв'язуючи задачу знаходження невідомих просторово-часових характеристик функції, що зумовлює односторонню поведінку процесу, та орієнтований на широкий клас задач.

Однак застосування методу функціональної параметризації для класу процесів із багатозначними функціями перешкоди чи пропускної здатності вимагає деяких доповнень. Метою даної роботи є розвиток цього методу, який передбачає побудову критеріїв додаткових даних, що характеризують односторонню поведінку, визначення функцій перешкоди чи пропускної здатності процесу для випадків із багатозначною пропускною здатністю товстої стінки та м'якою багатозначною перешкодою, за умови врахування таких властивостей цих процесів, як відсутність неперервної диференційованості функціоналів відповідності або можливість досягнення цими функціоналами нескінченних значень.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Розглянемо задачу знаходження розв'язку варіаційної нерівності, яка є моделлю одностороннього процесу дифузії та тепломасообміну [2]

$$< \frac{\partial u}{\partial \mathrm{t}}, v - u > + < \mathrm{A}\, u, v - u > + \psi(v) - \psi(u) \geq < f(t), v - u >, \tag{1}$$

$$u(0) = u_0,$$

де A — оператор (може містити компоненти дифузії, переносу та стоку); f — змушуюча функція (діє у деяких підобластях об'єму Ω, в якому розглядається еволюція процесу на протязі відрізку часу $[0, T]$).

Нехай $\Omega \subset R^3$ — обмежена відкрита множина з регулярною границею Γ; $H^1(\Omega) = V$ — гільбертів простір С.Л. Соболєва; $H = L_2(\Omega)$; V^* — спряжений простір до V, причому $V \subset H \subset V^*$. Через $(\cdot,\cdot)$ позначимо скалярний добуток в H ($<\cdot,\cdot>$ — канонічна двоїстість просторів V^*, V). Функціонал: $\psi : V \to R$ будемо називати функціоналом відповідності, який описує односторонні властивості процесу і може визначатися як

$$\psi(v) = \int_\Omega \varphi(u(z)) dz \tag{2}$$

або

$$\psi(v) = \int_\Gamma \varphi(u(s)) ds, \tag{3}$$

де $\varphi(u(z))$ — функція перешкоди; $\varphi(u(s))$ — функція пропускної здатності границі, конкретний вигляд яких визначається у залежності від виду одностороннього процесу. Ці функції будемо називати функціями відповідності. Для (2) функціонал описує односторонню перешкоду в області, для (3) односторонні властивості мають місце на границі (одностороння пропускна здатність границі). У випадку одностороннього процесу в області з функціоналом (2) задачі (1) відповідає задача

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Au + \varphi(u, \xi) = f, \tag{4}$$

$$u(0) = u_0,$$

$$u\big|_\Gamma = 0,$$

де ξ — невідомий параметр перешкоди в області.

Якщо функціонал відповідності має вигляд (3), то задача (1) набуває вигляду

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Au = f\,, \tag{5}$$

$$u(0) = u_0\,,$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial n}\right|_{\Gamma} + \varphi(u,\xi) = 0\,,$$

де ξ — невідомий параметр пропускної здатності границі.

У виразах (4), (5) функція $\varphi(u,\xi) = \dfrac{\partial \psi}{\partial u}$, причому вона діє у невідомих заздалегідь просторово-часових підобластях простору $\Omega \times [0,T]$. Задачу пошуку цих підобластей важко розв'язати, тому, згідно із методом функціональної параметризації, було запропоновано замінити її пошуком параметрів, що повністю характеризують поведінку функції φ, які приймаються невідомими на всьому просторі $\Omega \times [0,T]$. В даній роботі функція φ представляється у лінійно параметризованому вигляді і ξ — невідомі параметри такого представлення.

Для розв'язання задач (4), (5) при наявності невідомих параметрів ξ початкових та граничних умов недостатньо, тому, щоб застосувати метод функціональної параметризації, необхідно додатково використати інформацію про поведінку процесу. Для процесів із багатозначною пропускною здатністю товстої стінки, м'якою багатозначною перешкодою виникають складнощі, пов'язані з тим, що їхні функціонали перешкоди не є неперервно диференційованими, а для процесів із тонкою стінкою та жорсткою перешкодою також можуть приймати нескінченні значення.

РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ

Розв'язання односторонніх задач через їхню нелінійність вимагає додаткової інформації, яка доповнює модель, і формулюється у вигляді деякого критерію, що мінімізується. Першим підходом до конструювання таких критеріїв є інформаційний підхід, який застосовується, коли є можливість отримати інформацію про поведінку процесу із результатів вимірювань. Критерієм, що забезпечує додаткові дані, у цьому випадку може бути вираз, який мінімізує розходження між теоретичними даними та вимірюваннями. Але цей підхід може викликати проблеми, пов'язані із некоректністю задач при використанні точкових вимірювань [6]. Іншим підходом до конструювання критеріїв (застосовується у даній роботі) є фізичний підхід, згідно з яким критерій являє собою штраф за порушення специфічних умов фізики процесу.

Опишемо механізм односторонніх процесів, які розглядаються. М'яка багатозначна перешкода діє у такий спосіб: коли значення стану процесу менше, ніж порогове, процес розвивається за класичною схемою; при перевищенні станом цього максимального значення виникає перешкода, яка деформує стан процесу до максимального стану. В окремих точках області функція перешкоди може приймати нескінченну кількість значень, які належать деякому скінченному діапазону. До процесів такого типу можна віднести часткові випадки процесів розповсюдження газоподібних або дрібнодисперсних домішок в умовах наявності ефекту самоочищення середовища. Аналогією до цього типу односторонніх процесів серед процесів із односторонніми властивостями на границі є процеси із багатозначною пропускною здатністю товстої стінки. За типом дії перешкоди виділяють також процеси із перешкодою зверху або знизу. Вище розглянуто механізм дії перешкоди зверху. У випадку перешкоди знизу процес розвивається за класичною схемою, коли значення стану, що перевищує деяке мінімальне значення, а при значеннях, менших за мінімальне, вмикається механізм перешкоди.

Процеси із тонкою стінкою відбуваються в області, обмеженій «мембраною» нескінченно малої товщини. Така границя пропускає субстанцію всередину області, якщо значення стану процесу на внутрішньому боці «мембрани» менше (або дорівнює) стану ззовні. Але мембрана перешкоджає витіканню субстанції із області у зворотному напрямку. З деяким наближенням локальна реалізація процесу з тонкою стінкою виконується різноманітними клапанами. При цьому пропускна здатність границі може приймати будь-які додатні значення, в тому числі і нескінченність. Аналогією до цього типу односторонньої пропускної здатності границі серед односторонніх процесів із перешкодою всередині області є процеси із жорсткою перешкодою. За напрямком провідності границі виділяють процеси із прямою та зворотною провідністю границі. Приймемо, що границя із прямою провідністю дозволяє субстанції ззовні проникати всередину області, але зворотній рух неможливий. Відповідно, границя із зворотною провідністю допускає лише витікання субстанції із області у зовнішній простір.

Із урахуванням особливостей поведінки процесів потрібно зконструювати критерії, які надають додаткову інформацію, що дозволяє знайти стан процесу u та невідомий параметр типу процесу ξ. Тоді розв'язок задач (4) або (5) буде розв'язком задачі знаходження значень $\{u,\xi\}$, які доставляють мінімум критерію при наявності обмежень (4), (5). Відповідну задачу оптимізації будемо розв'язувати методом Лагранжа.

Розглянемо односторонній процес з м'якою багатозначною перешкодою зверху (4), де функціонал відповідності типу (2) визначається виразом

$$\psi = \begin{cases} 0, u < u_{\max}, \\ \xi(u - u_{\max}), \\ u \ge u_{\max}. \end{cases}$$

Відповідно, функція φ має вигляд

$$\varphi = \begin{cases} 0, & u < u_{\max}, \\ [0,\xi], & u = u_{\max}, \\ \xi, & u > u_{\max}, \end{cases} \tag{6}$$

де ξ — параметр перешкоди.

Фізичний критерій для задачі з товстою стінкою із багатозначною пропускною здатністю повинен забезпечити настройку ξ до нуля і перешкоджати зростанню ξ для $u(x,t) < u_{\max}$. На ділянці $u(x,t) > u_{\max}$ внаслідок односторонніх властивостей процесу, який не допускає перевищення максимально допустимого значення, параметр ξ повинен забезпечувати цю властивість. Також потрібно забезпечити неперервну диференційованість критерію за u та ξ. Критерій, що задовольняє цим вимогам, визначається як

$$J = \int_0^T \int_\Omega \left\{ \begin{matrix} \xi^2 (u - u_{\max})^2, & u < u_{\max}, \\ (u - u_{\max})^2, & u \ge u_{\max} \end{matrix} \right\} dz\,dt\,.$$

Оскільки функція (6) не визначена при $u = u_{\max}$, застосуємо для розв'язання задачі субградієнтний підхід, обґрунтований у роботі [7] для випадку скінченних функціоналів, які не є неперервно диференційованими. Для $u = u_{\max}$ функція $\varphi(u)$ є множиною.

$$M = \left\{ \lim_{u \to u_{\max}} \frac{\psi(u) - \psi(u_{\max})}{u - u_{\max}} \right\}. \tag{7}$$

У даному випадку $\varphi(u)$ називається субдиференціалом ψ у точці $u_{\max}$. Функція $\varphi(u)$ може бути представлена у вигляді сукупності диференційованих функцій-селекторів $\eta(u,\xi)$, $\eta(u,\xi) \in M$. При $u = u_{\max}$ можна розглядати задачу для окремих елементів множини M, які для заданого моменту часу та позиції в просторі є числами з інтервалу $\left[0, \xi^*\right]$, де ξ^* — значення параметру ξ, і можуть бути перебрані із деяким кроком Δ_i.

$$\eta_i = \eta_{i-1} + \Delta\,, \tag{8}$$

$$\Delta = (\sup M - \inf M) / N\,,$$

де N — деяке ціле. Оскільки величина $\sup M$ — значення параметру ξ, вона є невідомою заздалегідь, тому можна обирати Δ_i в процесі моделювання та користуватись виразом

$$\Delta_i = \theta F_L \big|_{\xi = \eta_i}, \quad \eta_i \in M\,, \tag{9}$$

$$F_L = \frac{\partial L}{\partial \xi}\,,$$

де θ — деякий малий параметр; L — лагранжіан.

Перебираючи значення $\eta \in M$, знайдемо ξ, що доставляє мінімум лагранжіану L при $u = u_{\max}$.

Наведемо алгоритм розв'язання задачі із багатозначною м'якою перешкодою.

1. На кроці $j = 0$ градієнтної процедури задаємо початкове значення параметру типу процесу ξ^0.

2. Використовуючи відоме ξ^j, розраховуємо u^j за виразом (5).

2.1. Для $u \ne u_{\max}$ за рівнянням (6) обчислюємо q^j на основі спряженого рівняння вигляду

$$-\frac{\partial q}{\partial t} + A^* q = -\left\{ \begin{matrix} 2\xi^2 (u - u_{\max})^2, & u < u_{\max}, \\ 2(u - u_{\max}), & u \ge u_{\max} \end{matrix} \right\}, \tag{10}$$

$$q\big|_{\Gamma} = 0\,,$$

$$q(T) = 0\,.$$

2.2. Обчислюємо необхідні умови оптимальності

$$F_L = \int_0^T \int_{\Omega} \left(q + \begin{cases} 2\xi(u - u_{\max})^2, & u < u_{\max}, \\ 0, & u \ge u_{\max} \end{cases} \right) dz\,dt\,. \quad (11)$$

Побудова лагранжіану та отримання необхідних умов оптимальності проводяться за схемою, наведеною у роботі [6].

2.3. Для точок, де $u = u_{\max}$, переходимо до п.2.3.1.

2.3.1. Покладаємо $\inf M := 0$, $\sup M := \xi^j$, $\eta_0 = \inf M$.

2.3.2. Обчислюємо значення u на основі (5) для кожного η_i, обчисленого за виразом (8), $i = 0 \ldots N$. В точках, де на етапі 2.3 виконувалося $u = u_{\max}$ як $\varphi(u,\xi)$, при розрахунках використовуємо значення η_i, в інших точках — ξ^j.

2.3.3. На основі u, отриманих у п. 2.3.2, розраховуємо J_i. Знаходимо η_i, для якого критерій J_i приймає найменше значення. Тоді значення параметру процесу для $u = u_{\max}$ дорівнює $\xi(t,z) = \eta_i$.

3. При $u \ne u_{\max}$ розраховуємо для $j+1$ кроку ξ^{j+1}.

Пошук оптимального ξ здійснюється за градієнтним методом (8), де крок розраховується за формулою (9).

4. Обчислюємо значення критерію закінчення пошуку невідомого параметру.

$$\left| J^j - J^{j+1} \right| \Big/ J^{j+1} \le \varepsilon_J\,.$$

Якщо нерівність виконується, переходимо до п.5. Інакше $\xi^j := \xi^{j+1}$ і переходимо до п.2.

5. Закінчення алгоритму.

Розглянемо процес із прямою пропускною здатністю тонкої стінки, якому відповідає рівняння (5). Зазначимо, що функція f тут приймає від'ємні значення. Для процесів цього типу, які можуть мати місце при односторонній провідності границі, функціонал відповідності типу (3) має вигляд

$$\psi = \begin{cases} 0, & u\big|_{\Gamma} > u_{\text{зов}}, \\ [0,\infty), & u\big|_{\Gamma} \le u_{\text{зов}}. \end{cases}$$

Специфіка дії стінки забороняє стани $u\big|_{\Gamma} < u_{\text{зов}}$ внаслідок нескінченно малої товщини, тому вираз для функціоналу пропускної здатності

$$\psi = \begin{cases} 0, & u\big|_{\Gamma} > u_{\text{зов}}, \\ [0,\infty), & u\big|_{\Gamma} = u_{\text{зов}}. \end{cases}$$

Функція пропускної здатності

$$\varphi = \begin{cases} 0, & u\big|_{\Gamma} > u_{\text{зов}}, \\ \xi(u\big|_{\Gamma} - u_{\text{зов}}), & \xi \in [0,\infty),\ u \to u_{\text{зов}}. \end{cases} \qquad (12)$$

Припустимо, що ξ може приймати великі, але скінченні значення. Тоді можна перейти до задачі про товсту стінку, в якій значення параметру ξ не обмежується зверху фізичними умовами. Алгоритм розв'язання подібних задач наведено у роботі [4]. Критерій, що враховує особливості фізичної поведінки процесу, набуває вигляду

$$J(u) = \int_0^T \int_{\Gamma} \begin{Bmatrix} \xi^2 (u\big|_{\Gamma} - u_{\text{зов}})^2, & u\big|_{\Gamma} \geq u_{\text{зов}}, \\ (u\big|_{\Gamma} - u_{\text{зов}})^2, & u\big|_{\Gamma} < u_{\text{зов}} \end{Bmatrix} ds\, dt\,. \qquad (13)$$

Умови оптимальності (11) для цього типу односторонніх процесів

$$F_L = \int_0^T \int_{\Gamma} \left\{ (u\big|_{\Gamma} - u_{\text{зов}})q + \begin{Bmatrix} 2\xi(u\big|_{\Gamma} - u_{\text{зов}})^2, & u\big|_{\Gamma} \geq u_{\text{зов}}, \\ 0, & u\big|_{\Gamma} < u_{\text{зов}} \end{Bmatrix} \right\} ds\, dt\,.$$

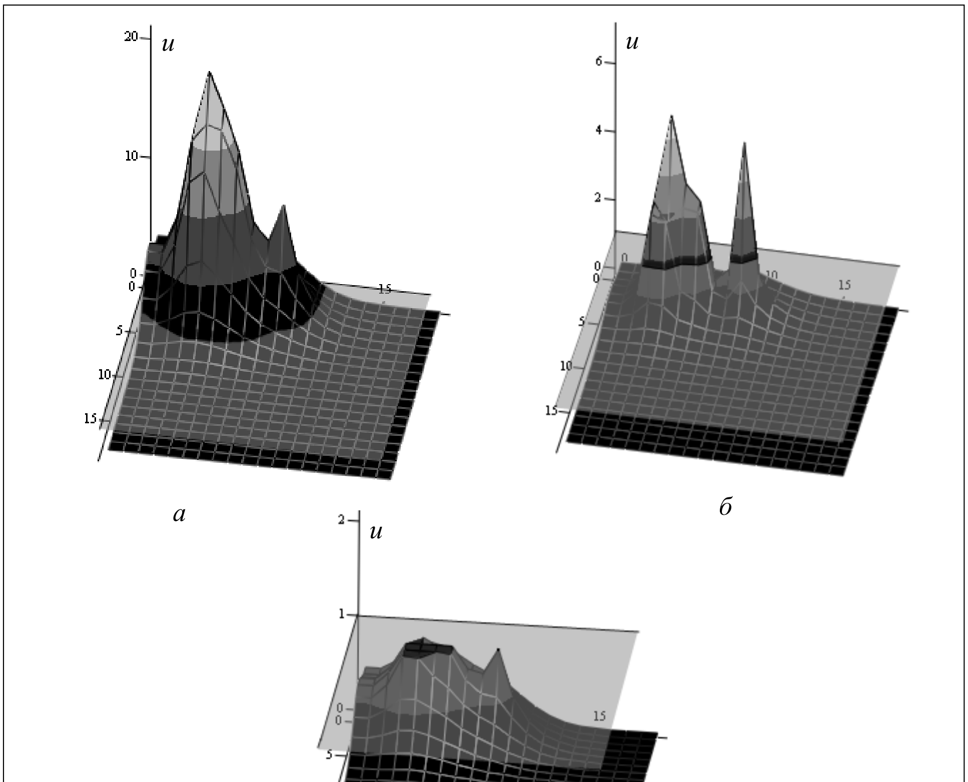

Рис. 1. Стан процесу із багатозначною перешкодою на першому *(а)*, другому *(б)*, останньому *(в)* кроках градієнтної процедури (3 год. 48 хв.)

Основні результати обчислень, які характеризують поведінку процесів із багатозначною перешкодою в області та односторонніх процесів із тонкою стінкою, зображені на рис. 1–3. На рис. 1, 2 вказано значення величин у площині просторового горизонтального перерізу, в якому розташовується джерело збурення. На останньому кроці градієнтної процедури стан процесу в областях, де $u > u_{\max}$, скориговується до максимального значення $u_{\max}$ (напівпрозора площина $u = 1$).

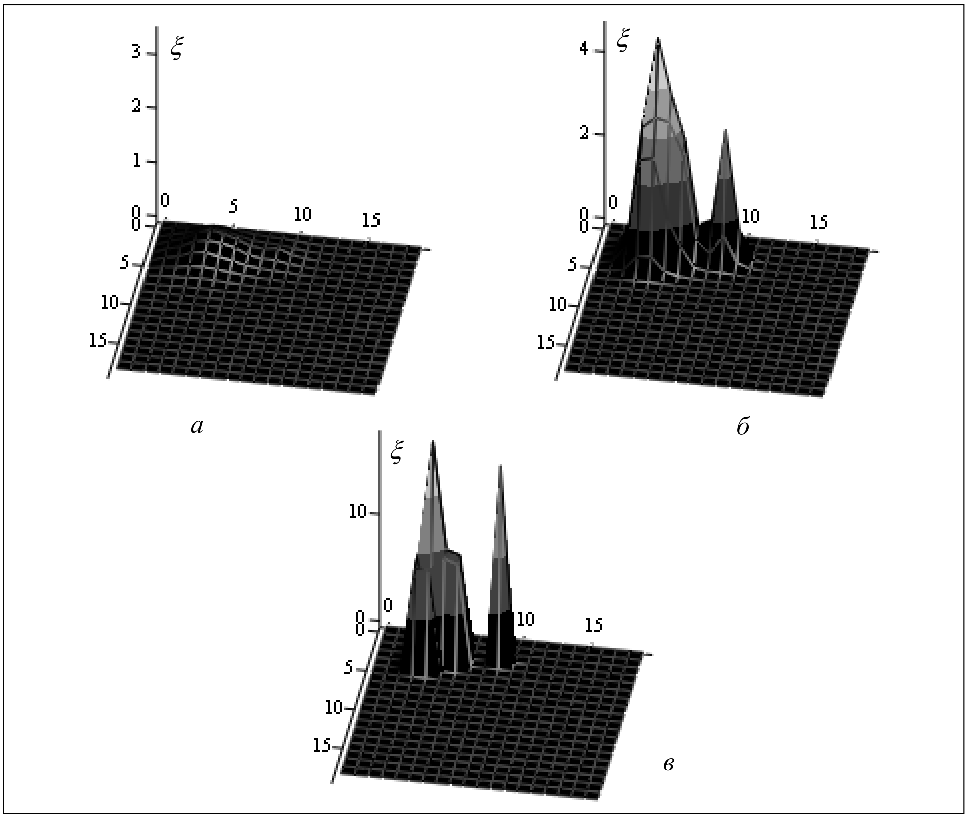

Рис. 2. Значення параметру процесу із багатозначною перешкодою ξ на першому *(а)*, другому *(б)*, останньому *(в)* кроках градієнтної процедури (3 год. 48 хв.)

При розрахунках моделювання задачі з багатозначною перешкодою розповсюдження концентрації деякої речовини, яка утворюється джерелами збурення, початкові умови було прийнято у вигляді $u_0 = 0$ мкг/м^3, $\xi^0 = 0$. Максимальне значення стану процесу — $u_{\max} = 1$ мкг/м^3, коефіцієнт турбулентної дифузії — $k = 100$ м^3/с, розміри просторової області, м — $200 \times 200 \times 200$, крок дискретизації за просторовою координатою — 10 м, позиції джерел збурення, м — (30, 50, 50), (40, 50, 50), (40, 40, 50), (40, 60, 50), (40, 70, 50), (40, 100, 50), (50, 40, 50)*, (50, 50, 50), (50, 60, 50), (50, 70, 50), (60, 40, 50), (60, 50, 50). Величина збурення, яка надається джерелом (*) — 1,6 мкг/хв., іншими джерелами — 0,6 мкг/хв. Проміжок часу, на якому проводиться моделювання — 4 год., крок за часом — 6 хв. Градієнтну процедуру закінчено при значенні критерію 0,00317.

Рис. 3 ілюструє поведінку процесу поблизу верхньої границі для першого та останнього кроків градієнтної процедури настройки параметру ξ. На рис. 3,*а* на верхній границі сформувалася відкрита ділянка, де $u|_{\Gamma} < u_{зов}$, крізь яку відбувається проникнення субстанції ззовні всередину області. Внаслідок цього проникнення стан процесу на границі збільшується, і на рис. 3,*б* на верхній границі встановлюється на рівні зовнішнього, границя замикається. Результати наведено для вертикального зрізу в площині розташування джерела збурення.

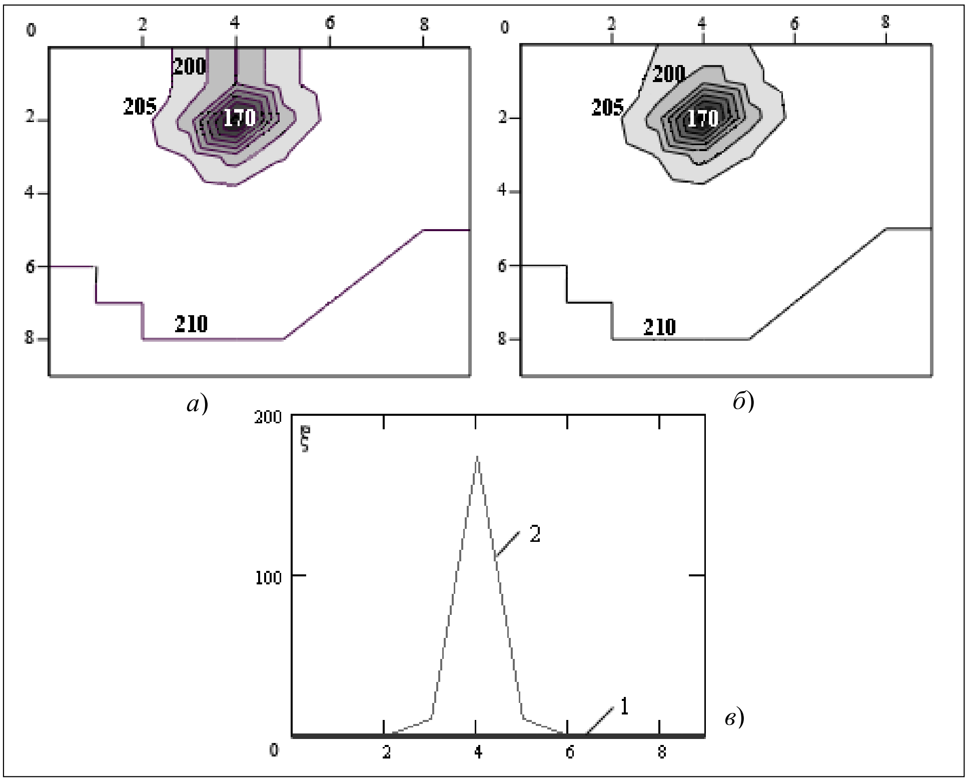

Рис. 3. Стан процесу поблизу границі та її пропускна здатність на першому (*а*) і останньому (*б*) кроках градієнтної процедури, а також значення параметру пропускної здатності границі на першому (*1*) і останньому (*2*) кроках

Оскільки всередині області за постановкою задачі постійно існує збурення, внаслідок дії якого значення стану процесу всередині області і, відповідно, на границі зменшується, для його нейтралізації і встановлення на границі значень, які більше або дорівнюють зовнішнім, значення параметру пропускної здатності тонкої стінки повинні бути ненульовими для ділянки, де на вихідному етапі градієнтної процедури $u|_{\Gamma} < u_{\text{зов}}$. На рис. 3,*в* початкові значення параметру ξ відповідають рис.3,*а*, а його значення в результаті настройки градієнтною процедурою відповідають стану процесу, наведеному на рис.3,*б*.

Вихідні дані, використані при розрахунках задачі із тонкою стінкою: $u_0 = 210$, $\xi^0 = 0$, значення стану процесу ззовні області — $u_{\text{зов}} = 205$ мкг/м^3, $k = 50$ мкг/м^3, крок за просторовою координатою — 10 м, крок за часом — 6 хв., величина збурення — $f = 10,6$ мкг/хв., позиція джерела збурення, м — (30, 50, 50), розміри області за просторовими координатами, м — $100 \times 100 \times 100$. На рис. 3 наведено результати для 2 год.12 хв. Градієнтну процедуру закінчено при значенні $J = 9,92 \cdot 10^{-2}$.

Еволюція процесів розглядалася, починаючи із станів, які відповідають класичному протіканню процесу, в напрямку до «аномальних станів». За аналогією можна навести відповідні вирази та алгоритми для випадків односторонніх процесів із товстою стінкою з багатозначною прямою чи зворотною пропускною здатністю та жорсткою перешкодою зверху чи знизу.

ВИСНОВКИ

Розвинуто метод функціональної параметризації для односторонніх процесів із функціоналами відповідності, що не є неперервно диференційованими або можуть приймати нескінченні значення. При цьому для задачі із м'якою багатозначною перешкодою застосовано субградієнтний підхід. Задачу із тонкою стінкою трансформовано за допомогою граничного переходу до задачі із товстою стінкою, але при відсутності обмежень зверху на параметр функції пропускної здатності. Результати обчислювального експерименту узгоджуються із теоретичними міркуваннями про поведінку односторонніх процесів даних типів.

ЛІТЕРАТУРА

1. *Марчук Г.И.* Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. — М.: Наука, 1982. — 315 с.
2. *Дюво Г., Лионс Ж.-Л.* Неравенства в механике и физике. — М.: Наука, 1980. — 383с.
3. *Гловински Р., Лионс Ж.-Л., Тремольер Р.* Численное исследование вариационных неравенств. — М.:Мир,1979. — 574с.
4. *Згуровский М.З., Новиков А.Н.* Анализ и управление односторонними физическими процессами. — Киев: Наук. думка, 1996. — 326 с.
5. *Иваненко В.И., Мельник В.С.* Вариационные методы в задачах управления для систем с распределенными параметрами. — Киев: Наук. думка, 1988. — 286 с.
6. *Жданова І.В., Новіков О.М.* Регуляризація просторово-розподілених однобічних процесів при знаходженні невідомих характеристик функції перешкоди // Наук. вісті НТУУ «КПІ». — 2003. — № 2. — С.134–140.
7. *Ржевский С.В.* Монотонные методы выпуклого программирования. — Киев: Наук. думка, 1993 — 315 с.

Надійшла 27.05.2004