

**DIFŪZIJAS ROBEŽPROBLĒMAS AR PERIODISKIEM
ROBEŽNOSACĪJUMIEM SKAITLISKĀ UN ANALĪTISKĀ
ATRISINĀJUMA MATEMĀTISKĀ MODELĒŠANA MATLAB UN C++
VIDĒ**

*MATHEMATICAL MODELING OF DIFFUSION BOUNDARY PROBLEMS
WITH PERIODIC BOUNDARY CONDITIONS USING MATLAB AND C++
FOR NUMERICAL AND ANALYTICAL SOLUTIONS*

Autors: **Edmunds LUKAŠEVIČS**, e-pasts: el21105@edu.rta.lv
Zinātniska darba vadītājs: **Ilmārs KANGRO, Mg.math., Dr.paed.**, e- pasts:
ilmars.kangro@rta.lv
Rēzeknes Tehnoloģiju akadēmija
Atbrīvošanas aleja 115, Rēzekne

Abstract. *The article examines a second-order parabolic partial differential equation of a three-dimensional (3D) non-stationary boundary problem with constant diffusion coefficients and periodic boundary conditions in the x and y directions.*

The method for reducing the (3D) non-stationary boundary problem to the corresponding one-dimensional (1D) non-stationary boundary problem using periodic boundary conditions in the x and y directions is discussed. The stationary (analytical) solution of the obtained (1D) stationary boundary problem is also obtained.

The numerical solutions of the 1D boundary problem are obtained using the Matlab package "pdepe" and the C++ programming language.

As a practical application of the developed mathematical model, the article discusses calculating the concentration of heavy metal Ca in a peat layer based on the obtained experimental data (measurements).

Keywords: *3-D initial boundary value problem, periodic boundary conditions, (1D) non-stationary and stationary boundary problem, heavy metal Ca, peat layer, Matlab, C++.*

Ievads

2. kārtas paraboliskā veida parciālo diferenciālvienādojumu (PDV) risināšana ir cieši saistīta ar daudziem praktiskiem pētījumiem matemātiskajā fizikā, vides zinātnē, ķīmijā u.c. – elektrību vadoša nesaspiežama šķidrums plūsmas ātruma aprēķināšana magnētiskā lauka ietekmē, siltuma un mitruma koncentrācijas pārneses problēmu risināšanu daudzslāņu vidē, smago metālu koncentrācijas modelēšana kūdras slāņos.

Šo uzdevumu risināšanai tiek plaši izmantotas gan dažādu programmatūru iespējas, gan arī speciāli matemātiski algoritmi robežproblēmu precīzo atrisinājumu iegūšanai, jo īpaši divdimensiju un trīs dimensiju telpas apgabalos ar periodiskiem robežnosacījumiem. (PBC).

Rakstā tiek apskatīta 2. kārtas paraboliskā veida parciālā diferenciālvienādojuma trīs dimensiju (3-D) nestacionāras robežproblēmas reducēšanu uz tai atbilstošu viendimensiju (1-D) nestacionāro robežproblēmu, izmantojot periodiskos robežnosacījumiem x un y virzienos.

Iegūtā nestacionārā 1-D robežproblēma ļauj aprēķināt meklējamās funkcijas $C(z, t)$ vērtības, piemēram, aprēķināt smago metālu koncentrācijas izmaiņu z -virzienā un arī atkarībā no laika t.

Nosauktās 1-D robežproblēmas skaitlisko atrisinājumu var iegūt, piemēram, ar Matlab paketi "pdepe", sastādot vajadzīgo programmu Matlab programmēšanas valodā (kodos) vai ar C++ palīdzību.

Pieņemot, ka nestacionārās 1-D robežproblēmas skaitliskais atrisinājums $C(z, t)$ nav atkarīga no laika ($t = \text{const}$), tika iegūta tai atbilstošā stacionārā robežproblēma un atrasts tās stacionārais (analītiskais) atrisinājums $C(z)$.

Ar funkcionālās sakarības palīdzību var aprēķināt $C(z)$ skaitliskās vērtības dotajā mainīgā z intervālā. Kā praktiskais pielietojums izveidotajam matemātiskajam modelim, rakstā tiek

aplūkota smagā metāla Ca koncentrācijas aprēķināšana kūdras slānī balstoties uz iegūtajiem eksperimentālajiem datiem (mērījumiem) [1].

Atšķirībā no iepriekš veiktajiem pētījumiem, izmantojot periodiskos robežnosacījumus tikai vienā (x) virzienā, dotajā pētījumā izstrādātais modelis balstās uz periodiskiem robežnosacījumiem divos (x, y) virzienos, kas vairāk atbilst reālai situācijai praksē.

Materiāli un metodes

3-D nestacionāra difūzijas sākuma vērtību un robežvērtību problēma

Difūzijas process tiek definēts 3-D paralēlskaldnī

$$\Omega = \{(x, y, z): 0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y, 0 \leq z \leq L_z\}.$$

Robežproblēmas atrisinājums – meklējamā funkcija ir $c = c(x, y, z, t)$, kuru atrod, atrisinot 3-D nestacionāru difūzijas sākuma vērtību un robežvērtību (SvRv) problēmu (1) 2. kārtas paraboliskā veida parciālajam diferenciālvienādojumam (1-1) [4]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial c}{\partial z} \right), \quad (1-1)$$

$$t \in (0, t_f), x \in (0, L_x), y \in (0, L_y), z \in (0, L_z),$$

$$c(0, y, z, t) = c(L_x, y, z, t), \frac{\partial c(0, y, z, t)}{\partial x} = \frac{\partial c(L_x, y, z, t)}{\partial x}, \quad (1-2) \quad (1)$$

$$c(x, 0, z, t) = c(x, L_y, z, t), \frac{\partial c(x, 0, z, t)}{\partial y} = \frac{\partial c(x, L_y, z, t)}{\partial y}, \quad (1-3)$$

$$c(x, y, L_z, t) - c_{az}(x, y) = 0, D_z \frac{\partial c(x, y, 0, t)}{\partial z} - \alpha(c(x, y, 0, t) - c_{0z}(x, y)) = 0, \quad (1-4)$$

$$c(x, y, z, 0) = c_0(x, y), t \in (0, t_b). \quad (1-5)$$

kur D_x, D_y, D_z konstantie difūzijas koeficienti, bet α ir konstants masas pārnese koeficients pie vērtības $z = 0$, $c_{az}(x, y)$, $c_{0z}(x, y)$, $c_0(x, y)$ ir dotās koncentrācijas uz robežas $z=0$, $z = L_z$ un laikā $t = 0$, t_b ir beigu laiks, un x un y virzienā mums ir periodiskas robežvērtības.

Mēs risinām SvRv problēmu sekojošā formā:

$$c(x, y, z, t) = C(z, t)f_1(x)f_2(y), c_{az} = C_{az}f_1(x)f_2(y), c_{0z} = C_{0z}f_1(x)f_2(y),$$

$$c_0 = C_0f_1(x)f_2(y), L_x = L_y = 1,$$

$$\text{kur } f_1(x) = a_1(\sin(2\pi x) + \cos(2\pi x)), f_2(y) = a_2(\sin(2\pi y) + \cos(2\pi y))$$

1-D Nestacionārā robežvērtību problēma

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{D_z} \frac{\partial C(z, t)}{\partial t} = -a_0^2 C(z, t) + \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2}, z \in (0, L_z), \quad (2-1) \end{array} \right. \quad (2)$$

$$C(L_z, t) - C_{az} = 0, D_z \frac{\partial C(0, t)}{\partial z} - \alpha(C(0, t) - C_{0z}) = 0, t \in (0, t_b), C(z, 0) = C_0, (2.2)$$

$$\text{kur } a_0^2 = \frac{4\pi^2(D_x + D_y)}{D_z}.$$

1-D Nestacionāro robežvērtību (Rv) problēmu (2) dabūjam SvRv problēmas (1).

Funkcijas $c(x, y, z, t)$ otrās kārtas parciālie atvasinājumi ir formā:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = -4\pi^2 \cdot a_1 \cdot a_2 (\sin(2\pi x) + \cos(2\pi x)) \cdot (\sin(2\pi y) + \cos(2\pi y))$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} = -4\pi^2 \cdot a_1 \cdot a_2 (\sin(2\pi x) + \cos(2\pi x)) \cdot (\sin(2\pi y) + \cos(2\pi y))$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} \cdot (-4\pi^2 \cdot a_1 \cdot a_2 (\sin(2\pi x) + \cos(2\pi x)) \cdot (\sin(2\pi y) + \cos(2\pi y))) \cdot$$

$$-4\pi^2 \cdot a_1 \cdot a_2 (\sin(2\pi x) + \cos(2\pi x)) \cdot (\sin(2\pi y) + \cos(2\pi y))$$

Ievieto $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}$, $\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$ sistēmas (1) galvenajā vienādojumā (1-1),

pielieto saskaņotības nosacījumus (1-2), (1-3), dabū sistēmas (2) vienādojumu (2-1). robežnosacījumos z - virzienā ievietojot funkciju $c(x, y, z, t) = C(z, t)f_1(x)f_2(y)$, dabū Rv problēmas (2) robežnosacījumus (2.2)

1-D robežvērtību problēma parastajam 2. kārtas diferenciālvienādojumam.

Ja skaitliskais atrisinājums $C(z, t)$ sistēmā (2) nav atkarīga no laika ($t = \text{const}$), tad $\frac{\partial C(z,t)}{\partial t} = 0$ un no sistēmas (2) seko sistēma (3).

$$\left\{ \begin{array}{l} -a_0^2 C(z) + \frac{d^2 C(z)}{dz^2} = 0, z \in (0, L_z), \\ C(L_z) = C_{az}, D_z \frac{dC(0)}{dz} - \alpha(C(0) - C_{oz}) = 0. \end{array} \right. \quad (3-1) \quad (3)$$

Atrod sistēmas (3) stacionāro atrisinājumu, apskata tās galvenā vienādojuma (3-1)

$$\frac{d^2 C(z)}{dz^2} - a_0^2 \cdot C(z) = 0$$

raksturīgo vienādojumu

$$k^2 - a_0^2 = 0.$$

Tiek meklētas tā saknes – apzīmē $C(z) = e^{k \cdot z}$, funkcijas otrais atvasinājums ir formā

$$\frac{d^2 C(z)}{dz^2} = k^2 \cdot e^{k \cdot z}.$$

Tad galvenais vienādojums (3-1) ir formā

$$k^2 \cdot e^{k \cdot z} - a_0^2 \cdot e^{k \cdot z} = 0.$$

Izdalot vienādojuma abas puses ar $e^{k \cdot z}$, dabū $k^2 - a_0^2 = 0$, kura saknes ir

$k_{1,2} = \pm a_0$, un atrisinājums ir formā

$$C(z) = C_1 \cdot e^{a_0 \cdot z} + C_2 \cdot e^{-a_0 \cdot z}.$$

Pakāpes $e^{a_0 \cdot z}$ un $e^{-a_0 \cdot z}$ izsaka ar $\sinh x$ un $\cosh x$.

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \quad \cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}, \quad \sinh x + \cosh x = \frac{e^x - e^{-x} + e^x + e^{-x}}{2} = e^x$$

$$\sinh x - \cosh x = \frac{e^x - e^{-x} - e^x - e^{-x}}{2} = -e^{-x}$$

$$C(z) = C_1 \cdot (\sinh x + \cosh x) + C_2 \cdot (\cosh x - \sinh x) =$$

$$C_1 \cdot \sinh x + C_1 \cdot \cosh x + C_2 \cdot \cosh x - C_2 \cdot \sinh x,$$

$$x = a_0 \cdot z.$$

Tad atrisinājums ir formā

$$C(z) = A_1 \cdot \sinh a_0 \cdot z + A_2 \cdot \cosh a_0 \cdot z,$$

$$\text{kur } A_1 = C_1 - C_2, A_2 = C_1 + C_2$$

Izmantojot robežnosacījumus (3-2) atrod koeficientus A_1 un A_2 .

$$\text{No robežnosacījuma (3-2) } D_z \cdot \frac{dC(0)}{dz} - \alpha(C(0) - C_{oz}) = 0 \text{ seko}$$

$$\alpha \cdot C(0) = D_z \cdot \frac{dC(0)}{dz} + \alpha C_{oz}$$

Izsaka $\frac{dC(0)}{dz}$ un $C(0)$:

$$\frac{dC(0)}{dz} = (A_1 \cdot \cosh a_0 \cdot z + A_2 \cdot \sin a_0 \cdot z) a_0$$

Pie $z = 0$ iegūstam

$$C(0) = \frac{1}{\alpha} (D_z \cdot (A_1 \cdot \cosh a_0 \cdot 0 + A_2 \cdot \sinh a_0 \cdot 0) a_0 + C_{oz}),$$

$$\cosh a_0 \cdot 0 = 1, \sinh a_0 \cdot 0 = 0,$$

$$C(0) = \frac{1}{\alpha} (D_z \cdot A_1 \cdot a_0 + C_{oz}).$$

Tad viss robežnosacījums ir formā

$$\frac{1}{\alpha} (D_z \cdot A_1 \cdot a_0 + C_{oz}) = A_1 \cdot \sin a_0 \cdot 0 + A_2 \cdot \cos a_0 \cdot 0 \quad \text{vai}$$

$$\frac{1}{\alpha}(D_z \cdot A_1 \cdot a_0 + C_{0z}) = A_1 \cdot 0 + A_2 \cdot 1.$$

Izmanto robežnosacījumu $C(L_z) = C_{az}, z = L_z$

$$C(L_z) = A_1 \cdot \sin a_0 \cdot L_z + A_2 \cdot \cos a_0 \cdot L_z$$

$$C_{az} = A_1 \cdot \sin a_0 \cdot L_z + A_2 \cdot \cos a_0 \cdot L_z$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\alpha}(D_z \cdot A_1 \cdot a_0 + C_{0z}) = A_1 \cdot 0 + A_2 \cdot 1 \quad (4-1) \\ C_{az} = A_1 \cdot \sin a_0 \cdot L_z + A_2 \cdot \cos a_0 \cdot L_z \quad (4-2) \end{array} \right. \quad (4)$$

No nosacījuma $D_z \frac{dC(0)}{dz} - \alpha(C(0) - C_{0z}) = 0$ vai $C(0) = \frac{D_z}{\alpha} \cdot \frac{dC(0)}{dz} + C_{0z}$ dabū:

$C(0) = A_1 \cdot 0 + A_2 \cdot 1$, no kurienes izsaka A_2 :

$$A_2 = \frac{D_z}{\alpha} \cdot A_1 \cdot a_0 + C_{0z}.$$

Ievietot A_2 vienādojumā (4-2), tiek dabūts A_1 :

$$A_1 = \frac{C_{az} - C_{0z} \cosh(a_0 L_z)}{\sinh(a_0 L_z) + \frac{a_0 D_z \cosh(a_0 L_z)}{\alpha}}$$

Rezultāti un to novērtējums

Kopējā kūdras saturošo purvu platība Latvijā ir 698918 ha jeb 10,7% no kopējās teritorijas.

Mikroelementu piesaistei kūdrā ir gan dabiskās izcelsmes avoti – atmosfēras nosēdumi, augsnes putekļi un aerosoli, virszemes noteces ūdeņi, gan arī galvenie antropogēno piesārņojumu avoti – atmosfēras daļiņas, notekūdeņi, kā arī apkārtējās vides apstākļu izmaiņu rezultāti saistībā ar pH līmeņa svārstībām [2].

Lai arī dažiem mikroelementu sastāvā ietilpstošajiem smagajiem metāliem ir būtiska nozīme augu un dzīvnieku pasaulē, tomēr to augstas koncentrācijas kļūst bīstamas jebkurai dzīvības formai [3].

1-D Nestacionārās un Stacionārās robežvērtību problēmas skaitliskā modelēšana

Izmantojot viendabīgu režģi ar režģa punktu skaitu $N_x = N_y = 10, N_z = 20$, mēs varam definēt galīgu diferencu matricu A kā N_z kārtas matricu un atrisināt diskrēto ODE sistēmu un atrisināt 1-D Nestacionāro robežvērtību problēmu (2) izmantojot Matlab paketi "pdepe" (1. attēls).

Skaitliskie rezultāti (2. un 3. attēli) ir iegūti no [1]:

$$t_b = 6[s], C_{az} = 4.63[mg/m^3], C_{0z} = 1.13[mg/m^3], \alpha = 200[m/s],$$

$$D_z = 10^{-3}[m^2/s], L_x = L_y = 1[m], L_z = 3[m], D_x = D_y = 3 \cdot 10^{-4}[m^2/s],$$

$$a_1 = a_2 = 0.1,$$

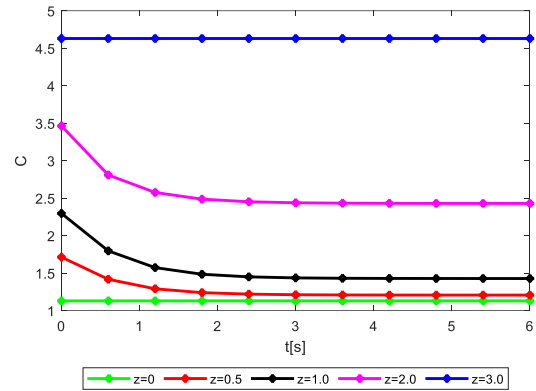
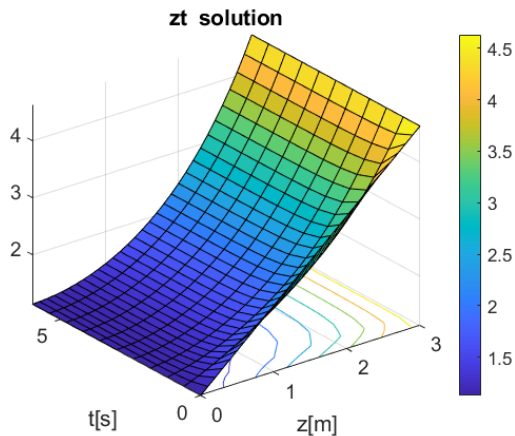
$$C_0 = ((C_{az} - C_{0z}) \cdot z/L_z) + C_{0z}.$$

```

1 function NestacKudra
2 m = 0; L=3.0; Ca0=1.13; Caz=4.63; Dz=10^(-2); Dx=3*10^(-4);
3 Dy=3*10^(-4); alfa=200; a1=0.1; a2=0.1; b1=0.9; b2=0.9;
4 a02=(8.*pi^2*(a1*Dx+a2*Dy))/Dz
5 N=30; tb=6; Nt=10; t=linspace(0,tb,Nt+1); % tb=beigu laiks sek
6 NP=N+1; z=linspace(0,L,NP); %h=L/N % L=xend
7 Lx=1; Ly=1; Nx=10; x=linspace(0,Lx,Nx+1); y=linspace(0,Ly,Nx+1);
8 options=odeset('RelTol', 1e-7);
9 sol = pdepe(m,@pdex1pde,@pdex1ic,@pdex1bc,z,t,options);
10 u = sol(:, :, 1);
11 figure;
12 surf(z,t,u),colorbar;
13 set(gca,'FontSize',14); title('zt solution'); xlabel('z[m]'); ylabel('t[s]');
14 mi1=min(min(u)); ma1=max(max(u)); mli1=linspace(mi1,ma1,8); w1=[mli1,0.5];
15 figure, [C1,h]=contour(z,t,u,w1,'-r','LineWidth',4);
16 clabel(C1,h,'FontSize',13, 'FontWeight','bold');
17 set(gca,'FontSize',13)
18 title('Concentration levels C(z,t)')
19 xlabel('z[m]'),ylabel('t[s]')
20 figure;
21 plot(z,u(1,:), 'm*',z',u(3,:), 'b*',z',u(6,:), 'k*',z',u(11,:), 'r*', 'MarkerSize',8);
22 set(gca,'FontSize',14)
23 legend('0s','1.2s','3s','6s');
24 xlabel('z[m]');
25 ylabel('Concentration, C');
26 Tend = u(end,1), maT=max(u(end,:))
27 figure,
28 plot(z,u(end,:), '-r*', 'MarkerSize',10, 'LineWidth',2)
29 set(gca,'FontSize',10)
30 title('Stationary solution')
31 xlabel('z[m]'),ylabel('C')
32 cx=u(end,:)*(a1*(sin(2*pi*x)+cos(2*pi*x))+b1); cy=u(end,:)*(a2*(sin(2*pi*y)+cos(2*pi*y))+b2);
33 zx=(a1*(sin(2*pi*x)+cos(2*pi*x))+b1)*u(end,:); zy=(a2*(sin(2*pi*y)+cos(2*pi*y))+b2)*u(end,:);
34 |
35 figure; surf(x,z',cx),colorbar; set(gca,'FontSize',14); title('xz solution'); xlabel('x'); ylabel('z');
36 figure; surf(y,z',cy),colorbar; set(gca,'FontSize',14); title('yz solution'); xlabel('y'); ylabel('z');
37 figure; surf(z',x,zx),colorbar; set(gca,'FontSize',14); title('zx solution'); xlabel('z'); ylabel('x');
38 figure; surf(z',y,zy),colorbar; set(gca,'FontSize',14); title('zy solution'); xlabel('z'); ylabel('y');
39 %=====
40 figure,
41 plot(z,u(2,:), '-r*', 'MarkerSize',10, 'LineWidth',2)
42 hold on
43 plot(z,u(6,:), '-k*', 'MarkerSize',10, 'LineWidth',2)
44 hold on
45 plot(z,u(9,:), '-m*', 'MarkerSize',10, 'LineWidth',2)
46 hold on
47 plot(z,u(11,:), '-b*', 'MarkerSize',10, 'LineWidth',2)
48 set(gca,'FontSize',10)
49 %title(sprintf('T of x, Tend=%6.4f',Tend))
50 legend('t=0.6s', 't=3s', 't=4.8s', 't=6s', 'Orientation', 'horizontal', 'Location', 'SouthOutside') %legenda
51 xlabel('z[m]'),ylabel('C')
52 maT=max(u(end,:))
53 figure, plot(t,u(:,1), '-g*', 'MarkerSize',5, 'LineWidth',2);
54 hold on
55 plot(t,u(:,6), '-r*', 'MarkerSize',5, 'LineWidth',2)
56 hold on
57 plot(t,u(:,11), '-k*', 'MarkerSize',5, 'LineWidth',2)
58 hold on
59 plot(t,u(:,21), '-m*', 'MarkerSize',5, 'LineWidth',2)
60 hold on
61 plot(t,u(:,end), '-b*', 'MarkerSize',5, 'LineWidth',2)
62 set(gca,'FontSize',10)
63 %title(sprintf('T of t, Tmax=%6.4f',maT))
64 legend('z=0', 'z=0.5', 'z=1.0', 'z=2.0', 'z=3.0', 'Orientation', 'horizontal', 'Location', 'SouthOutside') %legenda
65 xlabel('t[s]'),ylabel('C')
66 Tab=[u(end,1),u(end,6),u(end,11),u(end,21),u(end,end)]
67 % -----
68 function [c,f,s] = pdex1pde(z,t,u,DuDx)
69 c=1; f= DuDx; s=-a02*u;
70 end
71 % -----
72 function u0 = pdex1ic(z)
73 u0 = (Caz-Ca0)*z/L +Ca0;
74 end
75 % -----
76 function [pl,ql,pr,qr] = pdex1bc(zl,ul,zr,ur,t)
77 pl = -alfa*(ul -Ca0);
78 ql = Dz; % 3.veida BC du/dx=0, ja alfa=0
79 pr =ur-Caz; % uzdots atkaroba
80 qr=0;
81 end
82 end

```

I. attēls. 1-D Nestacionāro robežvērtību problēmu (2) atrisināšana, izmantojot Matlab



2. attēls. Nestacionārais atrisinājums $C(t,z)$

3. attēls. Koncentrācijas atkarība no laika pie dažādām z -vērtībām (dažāda dziļuma kūdras slānī)

Stacionārās robežvērtību problēmas skaitliskai modelēšanai tiek izmantota sistēma (3) un iepriekš nosauktie eksperimentālie dati(4., 5., 6., 7. attēls).[5]

```

1 function Prove
2 Lx=1;Ly=1;Lz=3;ax=0.1;ay=0.1;N=10;N=10;Nz=20; x=linspace(0,Lx,N+1);y=linspace(0,Ly,N+1);
3 z=linspace(0,Lz,Nz+1)';
4 Dz=10^(-2);%Ja Lz=2, tad Dz=10^(-2.5);Ja Lz=1, tad Dz=10^(-3);
5 Dx=3*10^(-4);Dy=3*10^(-4);alfa=200;CL=4.63;c0=1.13;
6 a02=((Dx*ax+Dy*ay)*8*pi^2)/Dz;a0=sqrt(a02);
7 A1=(CL-c0*cosh(a0*Lz))/(sinh(a0*Lz)+a0*cosh(a0*Lz)*Dz/alfa); A2=c0+A1*a0*Dz/alfa;
8 C=A1*sinh(a0*z)+A2*cosh(a0*z);
9 figure, plot(z,C,'ro','MarkerSize',10);C(1)
10 xlabel('z'),ylabel('C(z)')
11 cx=C*(0.1*(sin(2*pi*x)+cos(2*pi*x))+0.9);cy=C*(0.1*(sin(2*pi*y)+cos(2*pi*y))+0.9);
12 zx=(0.1*(sin(2*pi*x)+cos(2*pi*x))+0.9)*C';zy=(0.1*(sin(2*pi*y)+cos(2*pi*y))+0.9)*C';
13 figure; surfc(x,z,cx),colorbar; set(gca,'FontSize',14); xlabel('x'); ylabel('z');
14 figure; surfc(y,z,cy),colorbar; set(gca,'FontSize',14); title('yz solution'); xlabel('y'); ylabel('z');
15 figure; surfc(z,x,zx),colorbar; set(gca,'FontSize',14); title('zx solution'); xlabel('z'); ylabel('x');
16 figure; surfc(z,y,zy),colorbar; set(gca,'FontSize',14); title('zy solution'); xlabel('z'); ylabel('y');
17

```

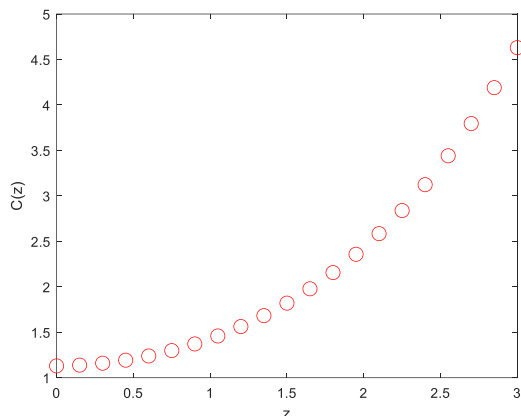
4. attēls. Stacionāras robežvērtību problēmas atrisināšana MATLAB vidē

```

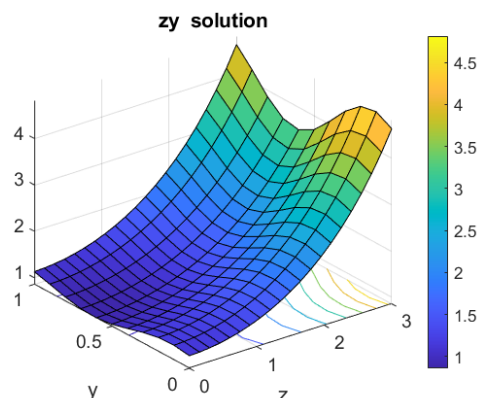
1 | #define _USE_MATH_DEFINES
2 |
3 | #include <iostream>
4 | #include <vector>
5 | #include <cmath>
6 | using namespace std;
7 | double Prove()
8 | {
9 |     int Lx = 1, Ly = 1, Lz = 3, N = 10, Nz = 20, alfa = 200;
10 |     double ax = 0.1, ay = 0.1;
11 |     vector<double> x;
12 |     for (double i = 0; i < Lx; i += Lx * 1.0 / N)
13 |         x.push_back(i);
14 |     cout << "x vektors: ";
15 |     for (int i = 0; i < x.size(); i++)
16 |         cout << x[i] << " ";
17 |
18 |     vector<double> y;
19 |     for (double i = 0; i < Ly; i += Ly * 1.0 / N)
20 |         y.push_back(i);
21 |     cout << "ny vektors: ";
22 |     for (int i = 0; i < y.size(); i++)
23 |         cout << y[i] << " ";
24 |
25 |     vector<double> z;
26 |     for (double i = 0; i < Lz; i = i + Lz * 1.0 / Nz)
27 |         z.push_back(i);
28 |     cout << "nz vektors: ";
29 |     for (int i = 0; i < z.size(); i++)
30 |         cout << z[i] << " ";
31 |
32 |     double Dz, Dx, Dy, a0, a02, A1, A2, C1, c0 = 1.13;
33 |
34 |     Dz = pow(10, -2); Dx = 3 * pow(10, -4); Dy = 3 * pow(10, -4);
35 |     a02 = ((Dx * ax + Dy * ay) * 8 * pow(M_PI, 2)) / Dz;
36 |     a0 = sqrt(a02);
37 |
38 |     A1 = (C1 - c0 * cosh(a0 * Lz)) / (sinh(a0 * Lz) + a0 * cosh(a0 * Lz) * Dz / alfa);
39 |     A2 = c0 + A1 * a0 * Dz / alfa;
40 |
41 |     vector<double> C1;
42 |     for (int i = 0; i < z.size(); i++)
43 |         C1.push_back(A1 * sinh(a0 * z[i]) + A2 * cosh(a0 * z[i]));
44 |
45 |     //cx skaitlošana
46 |     vector<vector<double>> cx;
47 |     for (int i = 0; i < C1.size(); i++)
48 |         cx.push_back(vector<double>());
49 |     for (int i = 0; i < C1.size(); i++)
50 |         for (int j = 0; j < x.size(); j++)
51 |             cx[i].push_back(C1[i] * (0.1 * (sin(2 * M_PI * x[j]) + cos(2 * M_PI * x[j])) + 0.9));
52 |
53 |     //cx izvads
54 |     cout << endl << "cx: ";
55 |     for (int i = 0; i < cx.size(); i++) { ... }
56 |
57 |     //cy skaitlošana
58 |     vector<vector<double>> cy;
59 |     for (int i = 0; i < C1.size(); i++)
60 |         cy.push_back(vector<double>());
61 |     for (int i = 0; i < C1.size(); i++)
62 |         for (int j = 0; j < y.size(); j++)
63 |             cy[i].push_back(C1[i] * (0.1 * (sin(2 * M_PI * y[j]) + cos(2 * M_PI * y[j])) + 0.9));
64 |
65 |     //cy izvads
66 |     cout << endl << "cy: ";
67 |     for (int i = 0; i < cy.size(); i++) { ... }
68 |
69 |     //zx skaitlošana
70 |     vector<vector<double>> zx;
71 |     for (int i = 0; i < x.size(); i++)
72 |         zx.push_back(vector<double>());
73 |     for (int i = 0; i < x.size(); i++)
74 |         for (int j = 0; j < C1.size(); j++)
75 |             zx[i].push_back(cx[j][i]);
76 |
77 |     //zx izvads
78 |     cout << endl << "zx: " << endl;
79 |     for (int i = 0; i < zx.size(); i++) { ... }
80 |
81 |     //zy skaitlošana
82 |     vector<vector<double>> zy;
83 |     for (int i = 0; i < y.size(); i++)
84 |         zy.push_back(vector<double>());
85 |     for (int i = 0; i < y.size(); i++)
86 |         for (int j = 0; j < C1.size(); j++)
87 |             zy[i].push_back(cy[j][i]);
88 |
89 |     //zy izvads
90 |     cout << endl << "zy: " << endl;
91 |     for (int i = 0; i < zy.size(); i++) { ... }
92 |     return 1;
93 | }
94 |
95 | int main() {
96 |     Prove();
97 |     return 0;
98 | }

```

5. attēls. Stacionāras robežvērtību problēmas atrisināšana, izmantojot C++ programmēšanas valodu



6. attēls. Stacionārais atrisinājums C(z)



7. attēls. Stacionārais atrisinājums C(z,y)

2., 3., 6., 7. attēlā ir redzams, ka koncentrāciju izmaiņas ir līdzīgas rakstura ziņā - kalcija koncentrācija ļoti strauji samazinās ar dziļumu no $4.63 \left[\frac{mg}{m^3} \right]$ līdz $1.13 \left[\frac{mg}{m^3} \right]$. Lielākās smago metālu koncentrācijas tiek novērotas kūdras augšējos slāņos.

Izmantojot MATLAB un C++ programmēšanas valodu, var dabūt vienādus skaitliskos rezultātus, bet ja izmanto MATLAB grafikus rezultātiem veidot daudz vieglāk, tāpēc labāk izmantot MATLAB.

Secinājumi

Pētījums parādīja, ka skaitlisko risinājuma atrašanai ļoti piemērota ir MATLAB. Tika izmantota arī C++, bet tas prasīja ilgāku laiku un atsevišķos gadījumos bija pat sarežģītāk. Viena no MATLAB priekšrocībām ir relatīvi viegla diagrammu veidošana, kas ir jāizmanto turpmākajos pētījumos. Skaitlisko risinājumu realizācijas kodi ar MATLAB izrādījās ne pārāk sarežģīti (salīdzinājumā ar C++), tāpēc tie ir izmantojami arī sarežģītāku uzdevumu / problēmu risināšanai.

Izveidotais matemātiskais modelis, izmantojot eksperimentālos mērījumus kūdrā (uz virsmas slāņa un atsevišķos punktos kūdras iekšējos slāņos), ļāva aprēķināt metāla koncentrāciju vairākos nepieciešamos punktos, kur mērījumi netika veikti.

Summary

The present article discusses reducing the second-order parabolic partial differential equation of a three-dimensional (3D) non-stationary boundary problem to the corresponding one-dimensional (1D) non-stationary boundary problem, using periodic boundary conditions in the x and y directions.

The obtained non-stationary 1D boundary problem allows calculating the values of the search function $C(z,t)$, for example, calculating the changes in the concentration of heavy metals in the z-direction and also as a function of time t. The numerical solution of the 1D boundary problem can be obtained, for example, using the Matlab package "pdepe," by writing the necessary program in the Matlab programming language, or with the help of the C++ programming language.

Assuming that the numerical solution of the non-stationary 1D boundary problem $C(z,t)$ is not dependent on time ($t=const$), the corresponding stationary boundary problem was obtained and its stationary (analytical) solution $C(z)$ was found. Using the functional relationship, the numerical values of $C(z)$ in the given z range can be calculated. As a practical application of the mathematical model developed, the article discusses calculating the

concentration of heavy metal Ca in a peat layer based on the obtained experimental data (measurements).

Bibliography

- [1] Kangro I., Kalis H., Gedroics A., Teirumnieka E., Teirumnieks E. On mathematical modelling of Metals Distribution in peat layers. MMA, vol. 19, Nr. 4, 2014, pp. 568-588.
- [2] Orru, H., Orru, M. 2006. Sources and distribution of trace elements in Estonian peat. *Global and Planetary Change*, **53**, pp. 249-258.
- [3] De la Rosa, G., Peralta-Videa, J.R., Gardea-Torresdey, J.L. 2003. Utilization of ICP/OES for the determination of trace metal binding to different humid fractions. *Journal of Hazardous Materials*, B97, pp. 207-218.
- [4] Kalis H., Kangro I. Effective finite difference and Conservative Averaging methods for solving problems of mathematical physics. Monography. Rezekne Academy of Technologies, 2021, 423p. <http://books.rta.lv/index.php/RTA/catalog/book/24>
- [5] C++, vector class. <https://learn.microsoft.com/en-gb/cpp/standard-library/vector-class?view=msvc-170>