

Національна академія наук України
Інститут телекомунікацій і глобального інформаційного простору

ЖУКОВСЬКИЙ ВІКТОР ВОЛОДИМИРОВИЧ



УДК 519.6:544.431.11:544.016.5-022.53

**МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МАСОПЕРЕНОСУ
СОЛЬОВИХ РОЗЧИНІВ В КАТАЛІТИЧНИХ ТА ДИСПЕРСНИХ
СЕРЕДОВИЩАХ ЧАСТИНОК МІКРОПОРИСТОЇ СТРУКТУРИ**

01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

Київ-2018

Дисертацією є рукопис

Робота виконана у Національному університеті водного господарства та природокористування Міністерства освіти і науки України, м. Рівне

Науковий керівник: доктор технічних наук, професор
Власюк Анатолій Павлович,
Національний університет
«Острозька академія», м. Острог,
завідувач кафедри економіко-математичного
моделювання та інформаційних технологій

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор
Калюх Юрій Іванович,
Державне підприємство «Державний науково-
дослідний інститут будівельних конструкцій»,
м. Київ, заступник завідуючого відділу автоматизації
досліджень та сейсмостійкості будівель та споруд

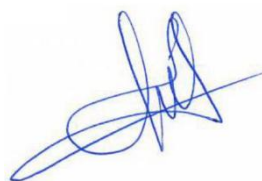
доктор фізико-математичних наук, професор
Костробій Петро Петрович,
Національний університет «Львівська політехніка»,
м. Львів, завідувач кафедри прикладної математики
Інституту прикладної математики та
фундаментальних наук

Захист відбудеться «27» грудня 2018 р. о 13 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.255.01 в Інституті телекомунікацій і глобального інформаційного простору Національної академії наук України за адресою: 03186, м. Київ, Чоколівський бульвар, 13, ауд. 601.

З дисертацією можна ознайомитись в бібліотеці Інституту телекомунікацій і глобального інформаційного простору Національної академії наук України за адресою: 03186, м. Київ, Чоколівський бульвар, 13, ауд. 601.

Автореферат розісланий «26» листопада 2018 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 26.255.01



О. Г. Лебідь

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. В результаті негативного впливу техногенних факторів відбувається забруднення біосфери, зокрема родючих земель різного роду солями та, зокрема, радіоактивними речовинами. Тому запобігання від забруднення підземних та поверхневих вод, сільськогосподарських угідь, регулювання рівнів ґрунтових вод для уникнення підтоплення територій при зміні гідрогеологічних умов та дії техногенних факторів є актуальною задачею на даний час.

Як показали дослідження Власюка А. П., Кузла М. Т., Мартинюка П. М., Остапчук О. П., протікання процесу фільтрації сольових розчинів у ґрунтах відмінне від фільтрації чистої води, оскільки фільтрація сольових розчинів у ґрунті представляє собою рух слабкого електроліту. На основі проведених експериментальних досліджень в гідротехнічній лабораторії Національного університету водного господарства та природокористування (НУВГП) з визначення залежностей фільтраційних характеристик ґрунтів при протіканні в них вологопереносу, фільтрації, тепломасопереносу, встановлені закономірності, що дозволили оновити відомі закони Дарсі, Дарсі-Герсеванова, Фіка на випадок руху сольових розчинів в ґрунтах у неізотермічних умовах.

На основі цього побудовано нові та оновлено існуючі математичні моделі процесів фільтрації сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури, які більш адекватно описують вищевказані процеси. Це дозволило більш точно врахувати вплив різноманітних природних та техногенних факторів на стан сільськогосподарських угідь.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконувалась згідно держбюджетних тематик НУВГП, а саме: «Математичне та комп'ютерне моделювання нелінійних фізико-хімічних процесів гідромеханіки в багатокомпонентних середовищах пористої на нанопористої структури» (№ ДР 0113U004052), «Математичне та комп'ютерне моделювання фізико-хімічних процесів підземної гідромеханіки під впливом природних, техногенних і соціальних факторів» (№ ДР 0110U000816), «Математичне та комп'ютерне моделювання складних фізико-хімічних процесів підземної гідромеханіки природного та техногенного характеру» (№ ДР 0114U001148), «Інформаційне забезпечення розвитку конкурентоспроможного органічного сільського господарства України в умовах євроінтеграції» (№ ДР 0117U001987).

У рамках виконання цих робіт здобувач був виконавцем.

Мета і задачі дослідження. Метою досліджень є підвищення адекватності існуючих та розробка нових математичних моделей процесів фільтрації сольових розчинів, зокрема, радіонуклідів, в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури; розвинення скінченно-різницевих методів для знаходження чисельних розв'язків відповідних нелінійних крайових задач; розв'язання поставлених крайових задач; проведення чисельних експериментів та їх аналіз; побудова оптимального архітектурного рішення для програмного комплексу з використанням паралельних обчислень в хмарному середовищі.

Для досягнення мети необхідно розв'язати наступні завдання:

1. Виконати систематизацію та обґрунтування підходів до математичного та комп'ютерного моделювання тепло- та масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури.

2. Побудувати нові та оновити існуючі математичні моделі масопереносу сольових розчинів при фільтрації підземних вод в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури в одно- та двовимірному випадках в ізо- та неізотермічних умовах з урахуванням міграції забруднених речовин у скелеті ґрунту та ряду нелінійних залежностей згідно сформульованих постановок фізичних задач.

3. Розробити ефективні обчислювальні алгоритми для чисельного розв'язання крайових задач, спроектувати оптимальну архітектуру та побудувати новий кросплатформенний програмний комплекс NanoSurface для комп'ютерного моделювання розглядуваних процесів із застосуванням паралельних обчислень.

4. Провести чисельні експерименти, встановити закономірності та вплив взаємозв'язаних процесів перенесення сольових розчинів в каталітичних дисперсних середовищах частинок мікропористої структури на процеси фільтрації підземних вод.

5. Впровадити результати роботи в діяльність відповідних установ та організацій.

Об'єкт дослідження – процеси тепло- та масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури.

Предмет дослідження – математичні моделі процесів тепломасопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури.

Методи та теоретичні засади дослідження. Для побудови математичних моделей використано підходи механіки пористого середовища, теорії фільтрації, тепло- та масопереносу як в ґрунтових, так і в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури. Для знаходження чисельних розв'язків поставлених крайових задач використовувалися чисельні методи математичної фізики, зокрема монотонна локально-одновимірна та неявна різницева схема для рівнянь параболічного типу, що містять першу похідну, метод прогонки з використанням паралельних обчислень.

Наукова новизна одержаних результатів полягає в наступному:

- Вперше побудовано одновимірні математичні моделі міграції забруднених речовин при фільтрації підземних вод у ґрунтовому середовищі за наявності каталітичних частинок мікропористої структури, що на відміну від існуючих, враховують вплив масопереносу в пористих мікро- та наносорбентах на загальну кінетику процесу. Удосконалено дані математичні моделі з урахуванням неізотермічних умов, нелінійної залежності коефіцієнтів дифузії та фільтрації від концентрації, впливу дифузії у скелеті ґрунту.

- Вперше побудовано нелінійну двовимірну математичну модель міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до системи горизонтальних фільтрів-вловлювачів у каталітичному пористому середовищі, що на відміну від існуючих, враховує внутрішньочастинкову дифузію в мікро- та наносорбентах з метою пришвидшення очищення забруднених ґрунтів.

- Дістав подальшого розвитку метод скінченних різниць та метод прогонки за рахунок розпаралелювання алгоритмів, що дозволяють прискорити його швидкодію завдяки більш ефективному використанню обчислювальних ресурсів комп'ютерних систем зі спільною пам'яттю при розв'язуванні відповідних крайових задач тепломасопереносу.

Практичне значення дисертаційного дослідження полягає в тому, що розроблено інтелектуальний інтерфейс у вигляді кросплатформенного комплексу програмного забезпечення NanoSurface, що дозволяє проводити комп'ютерне моделювання масопереносу сольових розчинів при фільтрації підземних вод в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури (в одно- та двовимірному випадках, в ізо- та неізотермічних умовах, нелінійній постановці, тощо) на різних операційних системах (Windows, Linux, iOS) та хмарному середовищі Azure. Отримано свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 68776 від 25.11.2016 р. на комп'ютерну програму "NanoSurface (моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури)".

В результаті проведеного комп'ютерного моделювання в NanoSurface та аналізу отриманих результатів чисельних експериментів продемонстровано ступінь впливу сорбуючих мікро- та наночастинок, температури, нелінійних залежностей швидкості фільтрації та коефіцієнтів дифузії на процес вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод, що дозволяє використати ці властивості для побудови ефективних стратегій оцінки ризику та прогнозування очищення і подальшого корисного використання ґрунтових масивів.

Результати наукових досліджень впроваджено в роботі Рівненської філії державної установи «Інститут охорони ґрунтів України» для моделювання вертикальної міграції радіонуклідів (поживних речовин, добрив, тощо) в пористому ґрунтовому середовищі та ТзОВ «Волиньсапрофос» при покращенні формули поліпшувача ґрунту та добрива. Також розроблені в дисертаційній роботі математичні моделі були використані в роботі Інституту сільського господарства Західного Полісся для дослідження процесу вапнування із використанням шламів, що були отримані після очистки води, яка використовувалась при охолодженні реакторів Рівненської АЕС. Програмний комплекс NanoSurface використовувався управлінням економіки, інфраструктури та інвестиційної діяльності Рівненської районної державної адміністрації для формування ефективних стратегій оцінки ризику та прогнозування міграції різного роду речовин в ґрунтових масивах при розробленні проектів прогнозів економічного і соціального розвитку області на середньо- та довгостроковий період.

Науково-методичні розробки та результати дисертаційних досліджень використано у навчальному процесі при виконанні кваліфікаційних робіт студентами освітніх програм «Прикладна математика» та «Комп'ютерні науки», а також при підготовці та викладанні ряду тем з наступних дисциплін: «Теорія систем та математичне моделювання», «Математичне і комп'ютерне моделювання природних та техногенних процесів», «Паралельні та розподілені обчислення».

Достовірність результатів забезпечується строгими теоретичними викладками при побудові математичної моделі взаємозв'язаних процесів перенесення солей,

фільтрації та вологоперенесення у насичено-ненасичених ґрунтах, коректністю і строгістю формулювання фізично обґрунтованих постановок задач, застосуванням достатньо обґрунтованих та апробованих підходів теорій фільтрації та дифузії, використанням сучасних чисельних методів і засобів обчислювальної техніки, а також узгодженням окремих результатів з відомими у літературі теоретичними та експериментальними даними.

Особистий внесок здобувача полягає в безпосередній участі у систематизації та обґрунтуванні сучасних наукових підходів до побудови математичних моделей процесів тепломасопереносу в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури, розробці обчислювальних алгоритмів, написанні і тестуванні програмного комплексу “NanoSurface”, самостійному проведенні чисельних експериментів, оформленні проміжних результатів роботи у вигляді публікацій і доповідей, самостійному узагальненню окремих етапів досліджень та дисертаційної роботи в цілому. Всі теоретичні та практичні результати, які складають основний зміст дисертаційної роботи, автором отримано особисто.

У наукових працях, що опубліковані у співавторстві, автору дисертації належать: побудова чисельного розв’язку, проведення чисельних експериментів та аналіз отриманих даних [1; 5; 26–28; 30–32], постановка задачі, побудова та дослідження лінійних, нелінійних математичних моделей в одно- та двовимірному випадках [5; 6; 11; 12; 15–25], оптимізація чисельних методів обрахунків із використанням паралельних обчислень [2; 7; 14], верифікація математичної моделі внутрішньочастинкового масопереносу [3; 29], проектування та розробка програмного комплексу «NanoSurface» [9; 10; 13]. Робота [4] виконувалась без співавторів.

Апробація результатів дослідження. Основні результати дисертаційних досліджень було обговорено, апробовано та викладено в доповідях на: Міжнародній науковій конференції «Мікро- та нано- неоднорідні матеріали: моделі та експеримент» (Львів, 2018); Міжнародній мультидисциплінарній науковій геоконференції SGEM 18 (Софія, Болгарія, 2018); Міжнародній науковій конференції «Engineer of the 21-st Century» (Бельсько-Бяла, Польща, 2016); Міжнародних наукових конференціях ім. академіка М. Кравчука (Київ, 2012, 2014); Міжнародних наукових конференціях «Проблеми прийняття рішень в умовах невизначеності» (PDMU) (Ялта-Форос, 2013; Східниця, 2013; Мукачево, 2014; Чеські Рудолець, Чеська Республіка, 2014; Одеса, 2015; Східниця, 2015, Брно, Чеська Республіка, 2016; Мукачево, 2017; Вільнюс, Литва, 2017); XV Мінському міжнародному форумі по тепло- і масообміну (Мінськ, Білорусь, 2016); Всеукраїнських наукових конференціях «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики» (Львів, 2013, 2014, 2015); Міжнародній науковій конференції «Сучасні проблеми математичного моделювання, прогнозування та оптимізації» (Кам’янець-Подільський, 2014); V Міжнародній науковій конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні та прикладні аспекти кібернетики» (Київ, 2015); Міжнародній науково-практичній конференції «Проблеми розвитку вищої школи та економіки в XXI столітті» (Рівне, 2013); Всеукраїнських наукових конференціях «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів» (Рівне, 2013, 2015); науково-практичних конференціях професорсько-

викладацького складу НУВГП (Рівне, 2011-2018). Також окремі результати дисертаційної роботи представлено на Національному конкурсі IT-проектів з е-демократії EGAP CHALLENGE (Київ, 2017), конкурсі Civic Tech Camp (Київ, 2017) та на Всеукраїнському Хакатоні Аграрних Інновацій (Київ, 2018).

В повному обсязі робота доповідалася на розширеному засіданні кафедри прикладної математики НУВГП; науковому семінарі Інституту телекомунікацій і глобального інформаційного простору, міжкафедральному науковому семінарі факультету прикладної математики та інформатики Львівського національного університету ім. Івана Франка; науковому семінарі кафедри системного аналізу та теорії прийняття рішень Київського національного університету ім. Тараса Шевченка.

Публікації. За темою дисертаційної роботи опубліковано 32 наукові праці, з них: 9 статей (1 – одноосібна, 1 – у журналі, що входить до науково-метричної бази даних Scopus (II кuartиль), 6 – у фахових виданнях України за обраною спеціальністю, 2 – у наукових виданнях іноземних держав), 1 авторське свідоцтво на твір та 22 в інших виданнях, збірниках і матеріалах наукових конференцій.

Структура та обсяг роботи. Дисертація складається зі вступу, п'ятьох розділів, висновків, списку використаних джерел із 282 найменувань на 34 сторінках, додатків на 17 сторінках. Обсяг роботи складає 253 сторінки, в тому числі основного тексту 160 сторінок, 64 рисунки та 9 таблиць.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету та основні задачі дослідження, визначено об'єкт та предмет дослідження, зазначено методи дослідження, наукову новизну та практичне значення отриманих результатів. Також вказано зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами, наведено дані про апробацію результатів та інформацію про особистий внесок здобувача, публікації за темою дослідження, а також структуру й обсяг роботи.

У **першому розділі** дисертаційної роботи згідно літературних джерел проаналізовано стан проблеми.

Теорія тепломасопереносу при фільтрації в пористих середовищах, що розглядалася в роботах В. В. Акіменка, І. В. Бейка, В. О. Богаєнка, А. Я. Бомби, Ф. М. Бочевера, В. М. Булавацького, М. М. Веригіна, А. П. Власюка, В. С. Дейнеки, Л. І. Демченка, Н. А. Жуковської, П. І. Ковальчука, Ю. Г. Кривоноса, В. І. Лаврика, О. В. Ликова, І. І. Ляшка, С. І. Ляшка, П. М. Мартинюка, Ю. А. Михайлова, В. Б. Мокіна, В. М. Ніколаєвського, О. П. Остапчук, О. М. Патрашева, П. Я. Полубаринової-Кочини, Я. Д. П'янила, Я. Г. Савули, А. П. Сафоника, І. В. Сергієнка, В. В. Скопечького, О. М. Степанченко, О. М. Трофимчука, О. Ю. Чернухи, Б. С. Шержукова, Г. А. Шинкаренка та ін. надала математичні описи проблем підземного масопереносу, методи їх розв'язку, а також співставлення результатів з даними спостережень та експериментів.

Наступним етапом було врахування дифузії нуклідів, міграція яких представляє радіологічну цікавість. Відповідні математичні моделі розроблено П. Боссевом (P. Bossew), Я. Й. Бураком, А. П. Власюком, В. Є. Гончаруком, Г. Кірчнером (G. Kirchner), В. М. Прохоровим, М. В. Токарчуком, Є. Я. Чаплею, О. Ю. Чернухою.

Цікавими також є дослідження А. П. Власюка, Н. А. Жуковської, Ю. І. Калюха, Є. І. Катерини, М. Т. Кузла, І. В. Сергієнка, В. В. Скопечького, О. М. Трофимчука, І. А. Філатової, В. А. Флоріна та інших вчених з точки зору впливу гідрогеологічних умов на деформаційні процеси ґрунтових середовищ.

З розвитком технічних засобів людству стали доступні дослідження на мікро- і нанорівні, що призвело до виникнення відповідних наукових шкіл, пов'язаних з математичним моделюванням процесів масопереносу на нижчому рівні.

Перші дослідження нестационарного масопереносу в біпористих сорбентах були представлені роботою П. П. Золотарьова, Н. Н. Дубініна. Надалі цей напрямок було підтримано А. М. Волощуком, В. І. Уліном та ін. Паралельно колектив вчених у складі Е. Руккенштейна (E. Ruckenstein), А. С. Вайдіанатана (A. S. Vaidyanathan) та Г. Р. Янкюста (G. R. Youngquist) опублікував роботу, яка описувала процеси сорбції в біпористих структурах. Порівняльну характеристику двох вищенаведених моделей з докладним описом їх переваг і недоліків провів І. І. Бекман.

Вищеописані моделі заклали основи для подальших досліджень. Зокрема, в роботах В. Коннера (Wm. C. Conner), Ж. Фрессара (J. P. Fraissard) спостерігається перехід до розгляду процесів дифузії в нанопористих матеріалах. Також вчені Дж. Каргер (J. Karger) та Д. Рутвен (D. M. Ruthven) внесли значний вклад в розвиток фундаментального розуміння адсорбції і дифузії в цеолітах, а також їх промислового застосування. Результати цих досліджень активно використовуються рядом вчених (І. В. Сергієнко, М. Р. Петрик, Ж. Фрессар (J. Fraissard), П. П. Костробій, О. М. Хіміч, Д. Кане, А. Я. Бомба, Д. М. Михалик, О. В. Присяжнюк та ін.) і знаходять застосування при розгляді масопереносу в нанопористих каталізаторах різних технологічних застосувань (розділення газів та рідин, глибока очистка і осушка в хімічній і нафтогазовій промисловості, космічних та енергозберігаючих технологіях тощо).

Оскільки математичне моделювання із застосуванням колоїдів-адсорбентів мікропористої структури до процесів очищення є новим, важливого значення набувають нові математичні моделі для отримання фундаментального розуміння різних процесів хімічної і фізичної міграційної поведінки з використанням каталітичних пористих частинок з метою забезпечення розвитку ефективних стратегій оцінки ризику та прогнозування очищення ґрунтових масивів.

У першому розділі також розглянуто основні фізичні закони, що описують фізичні та фізико-хімічні процеси масопереносу при фільтрації сольових розчинів в каталітичних пористих середовищах та проведено огляд основних математичних моделей масопереносу в мікро- та наносередовищах. Зокрема, наведено постановки математичних моделей процесів дифузії в гранулах адсорбента, дифузії в біпористих частинках, дворівневого однокомпонентного адсорбційного масопереносу в каталітичному середовищі частинок мікропористої структури, міграції забруднених речовин в каталітичному пористому середовищі з пастками та міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі в нелінійному випадку та з урахуванням неізотермічних умов.

Здійснено огляд програмних комплексів HYDRUS, NADRA-3D, ORCHESTRA та PFLOTRAN з точки зору їх функціоналу, математичного апарату, архітектури та відкритості програмного коду. Врахувавши позитивні сторони та недоліки вказаних програмних комплексів, розроблено власний програмний продукт NanoSurface для

математичного та комп'ютерного моделювання фізичних процесів масопереносу при фільтрації підземних вод.

У **другому розділі** сформульовано постановки та вдосконалено математичні моделі вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичних пористих середовищах. Зокрема, проведено математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в одновимірному випадку в ізо- та неізотермічних умовах та в середовищах з пастками.

Розглянуто процес очищення горизонтального шару ґрунту від радіонуклідів (наприклад, ^{90}Sr (стронцій-90) або ^{137}Cs (цезій-137)) при їх вертикальній міграції в горизонтальному шарі ґрунту великої протяжності. Міграція радіонуклідів відбувається завдяки переносу їх фільтраційним потоком зі швидкістю v під впливом конвективної дифузії в каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача (рис. 1).

На глибині l в ґрунті розміщений фільтр-вловлювач, наповнений сорбуючим елементом (наприклад, вермикулітом). Відомі п'єзометричні напори на верхній та нижній (підстиляючій) поверхнях ґрунту \tilde{H}_1 та \tilde{H}_2 ($\tilde{H}_1 > \tilde{H}_2$) відповідно. Також відомий розподіл концентрацій радіонуклідів (мігранту) в початковий момент часу $t=0$: $\tilde{C}_1^0(x)$ (для мігранту, що знаходиться в конвективно рухомому поровому розчині), $\tilde{C}_2^0(x)$ (для радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді) та $\tilde{Q}^0(x, r)$ (у частинках радіуса R). На верхній поверхні ґрунту задані концентрації $\tilde{C}_1^1(x)$ та $\tilde{C}_2^1(x)$, а на фільтрі-вловлювачі – $\tilde{C}_1^2(x)$ та $\tilde{C}_2^2(x)$ або відповідні потоки концентрацій $\left. \frac{\partial c_1}{\partial x} \right|_{x=l} = \left. \frac{\partial c_2}{\partial x} \right|_{x=l} = 0$.

Математичну модель поставленої задачі в лінійній постановці в одновимірному випадку можна описати наступною крайовою задачею:

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 - \theta \left. \frac{\partial q}{\partial r} \right|_{r=R}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (3)$$

$$v = -k(c_1) \frac{dh}{dx} + v_c \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad \text{div} \vec{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (4)$$

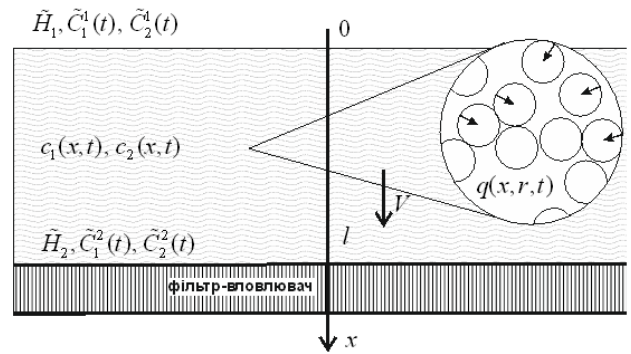


Рис. 1. Вертикальна міграція радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача

$$\left. \frac{\partial q(x, r, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (5)$$

$$q(x, r, t)|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x, t), \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (6)$$

$$l_1 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(l, t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (7)$$

$$l_3 c_2(0, t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l, t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (8)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, \quad h(l) = \tilde{H}_2, \quad (9)$$

$$c_1(x, 0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x, 0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad q(x, r, 0) = \tilde{Q}^0(x, r), \quad (10)$$

де $c_1(x, t)$, D_1 – концентрація та коефіцієнт конвективної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у фільтраційному потоці відповідно; $c_2(x, t)$, D_2 – концентрація та коефіцієнт молекулярної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у воді, яка зв'язана зі скелетом ґрунту відповідно; $q(x, r, t)$, D_0 – концентрація та коефіцієнт дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R , що знаходяться у скелеті ґрунту відповідно; k_e – коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового масопереносу на масоперенос в скелеті ґрунту; v – швидкість фільтрації; k – коефіцієнт фільтрації води з мігрантами; γ_1, γ_2 – коефіцієнти масообміну; σ_1 – пористість ґрунту; x – вертикальна координата, напрямлена вниз; $l_i, i = \overline{1, 4}$ – диференціальні оператори, що задають граничні умови відповідно при $x=0$ та $x=l$; t – час, $0 < t < t_i$; r – радіальна змінна, $0 < r < R$.

Рівняння (1) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (2) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (3) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q , що зв'язана з концентрацією c_2 умовою (6); (4) описує фільтрацію в каталітичному пористому середовищі.

Крайові умови для концентрацій $c_1(x, t)$, $c_2(x, t)$, $q(x, r, t)$ та напору $h(x)$ мають вигляд (7)-(10). В результаті різниці напорів відбувається перенесення розчинених у воді речовин фільтраційним потоком. При цьому процеси фільтрації та масопереносу розчинених у воді речовин підлягають законам Дарсі та Фіка.

Для отримання чисельного розв'язку крайової задачі (1)-(10) використано метод скінченних різниць. Для цього записано неявну різницеву схему для рівняння (2), а для (1) та (3) – монотонну різницеву схему. Значення концентрації солей $c_1(x, t)$, $c_2(x, t)$ та $q(x, r, t)$ на всіх часових кроках знайдено методом прогонки.

Використовуючи власний новостворений програмний комплекс NanoSurface, проведено серію чисельних експериментів та їх аналіз.

Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ та $c_2(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R та з їх урахуванням наведено на рисунку 2. Помітно, що при наявності мікрочастинок радіуса R процес фільтраційного очищення шару родючого ґрунту відбувається швидше і родючий шар ґрунту стає більш придатним до використання за менший проміжок часу. Це

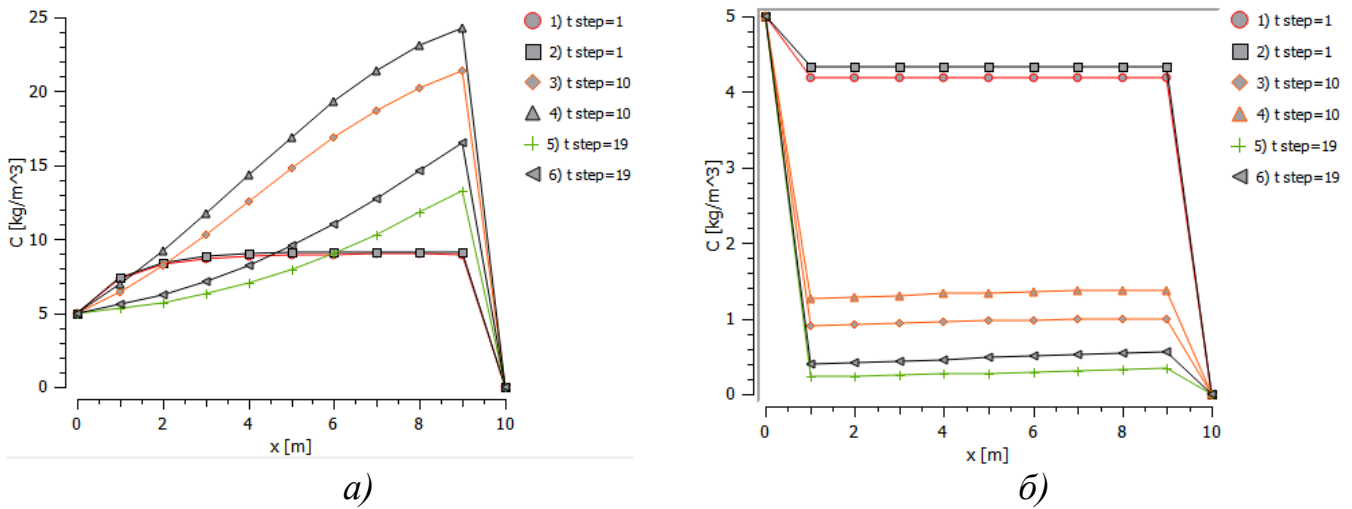


Рис. 2. Порівняльні розподіли концентрацій а) $c_1(x)$ та б) $c_2(x)$ від глибини шару ґрунту x без урахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R (графіки 1, 3 та 5) та з їх урахуванням (графіки 2, 4 та 6) (1 та 2 – $t = 30$ діб (1 міс.), 3 та 4 – $t = 300$ діб (10 міс.), 5 та 6 – $t = 570$ діб (19 міс.))

можна пояснити каталітичними властивостями мікрочастинок та адсорбцією забруднених речовин на їх поверхні.

В другому розділі було удосконалено описану вище математичну модель також на випадок неізотермічних умов. Аналіз отриманих результатів показав, що розподіли концентрації сольових розчинів у часі при $k = k(x, c_1)$ є більш повільними і передбачуваними, а при підвищенні дисперсійного параметра розчин солі більш швидко розподіляється в шарі ґрунту. Порівняльний аналіз результатів чисельного експерименту для ізо- та неізотермічного режимів показав важливість впливу тепла на значення концентрацій. Тому даним ефектом не можна нехтувати. Наступним етапом було дослідження ролі скелету ґрунту, а саме: вплив так званих «пасток» на процеси утримання забруднених речовин. Математичну модель (1)-(10) було доповнено рівняннями, що описують процес дифузії в решітці ґрунту з відповідними крайовими та граничними умовами. Чисельний розв'язок знайдено методом скінченних різниць з використанням монотонної різницевої схеми. Процес обчислень реалізовано у вигляді програмного модуля в NanoSurface, за допомогою якого здійснено ряд чисельних експериментів для дослідження впливу «пасток». Результати показали потенційну затримку очищення ґрунтового масиву внаслідок повільної дифузії у скелеті ґрунту. Також при заданих вихідних параметрах завдяки комп'ютерному моделюванню продемонстровано, що вплив забруднення при використанні сорбуючих наночастинок на 27% зменшується, тобто відбувається поглинання даного забруднення.

У третьому розділі удосконалено зазначені вище математичні моделі в нелінійному випадку. Проведено математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичних пористих середовищах як в ізотермічних, так і в неізотермічних умовах.

Розглядається процес, аналогічний описаному вище, що відбувається в неізотермічних умовах. Тобто, вертикальна міграція радіонуклідів відбувається завдяки їх перенесенню фільтраційним потоком зі швидкістю v як під впливом конвективної дифузії, так і термодифузії одночасно (рис. 3). Відомі значення температури на верхній і нижній поверхнях ґрунту $\tilde{T}_1(t)$ і $\tilde{T}_2(t)$ відповідно.

В результаті різниці напорів відбувається перенос розчинених у воді речовин фільтраційним потоком. При цьому процеси фільтрації і конвективної дифузії підлягають законам Дарсі (Darcy) і Фіка (Fick) відповідно, а процес теплообміну – закону Фур'є (Fourier). Необхідно розрахувати значення концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$ і $q(x,r,t)$ по області фільтрації з часом, що дасть можливість зробити прогноз щодо ступеня очищення ґрунтів і подальшого їх використання.

Крайова задача про вертикальну міграцію радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі в неізотермічних умовах у нелінійному випадку розв'язувалася з використанням математичної моделі, що включає наступні рівняння:

рівняння міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії в фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині)

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{T_1} \frac{\partial T}{\partial x} \right) - v(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, 0 < x < l, t > 0, \quad (11)$$

рівняння міграції радіонуклідів, що знаходяться в зв'язаній зі скелетом ґрунту воді

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{T_2} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 - \theta \left. \frac{\partial q}{\partial r} \right|_{r=R}, 0 < x < l, t > 0, \quad (12)$$

рівняння внутрішньочастинкового масопереносу радіонуклідів з поточною концентрацією q

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right) + D_{T_3} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right), 0 < r < R, t > 0, \quad (13)$$

рівняння конвективного теплопереносу

$$c_T \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \rho c_p v \frac{\partial T}{\partial x}, 0 < x < l, t > 0, \quad (14)$$

узагальнене рівняння фільтрації сольових розчинів у неізотермічних умовах і рівняння нерозривності процесу

$$v = -K(c_1, T) \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} + v_T \frac{\partial T}{\partial x}, \operatorname{div} \vec{v} + \frac{\partial \sigma_1}{\partial t} = 0, 0 < x < l, t > 0, \quad (15)$$

ізотерму адсорбції

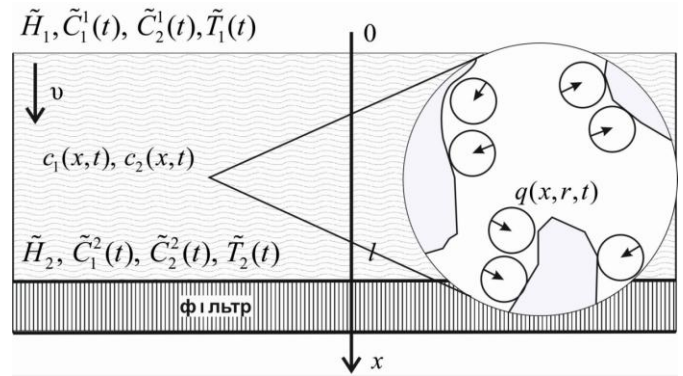


Рис. 3. Вертикальна міграція радіонуклідів до фільтра-вловлювача в неізотермічних умовах

$$q(x,r,t)\Big|_{r=R} = \frac{k_f \cdot c_2(x,t)^\beta}{1 + \eta \cdot c_2(x,t)^\beta}, 0 < x < l, 0 < r < R, t > 0, \quad (16)$$

відповідні крайові умови на поверхнях ґрунту для концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $q(x,r,t)$, температури $T(x,t)$ та напору $h(x)$

$$l_1 c_1(0,t) = \tilde{C}_1^1(t), l_2 c_1(l,t) = \tilde{C}_1^2(t), l_3 c_2(0,t) = \tilde{C}_2^1(t), l_4 c_2(l,t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (17)$$

$$\frac{\partial q(x,r,t)}{\partial r}\Big|_{r=0} = 0, 0 < x < l, 0 < r < R, t > 0, \quad (18)$$

$$l_5 T(0,t) = \tilde{T}_1(t), l_6 T(l,t) = \tilde{T}_2(t), h(0) = \tilde{H}_1, h(l) = \tilde{H}_2, \quad (19)$$

$$c_1(x,0) = \tilde{C}_1^0(x), c_2(x,0) = \tilde{C}_2^0(x), q(r,0) = \tilde{Q}^0(x), T(x,0) = \tilde{T}^0(x), \quad (20)$$

де k_f, β, η – коефіцієнти ізотерм адсорбції, які задають вплив масопереносу в скелеті ґрунту на внутрішньочастинковий масоперенос; v_c, v_T – коефіцієнти хімічного та термічного осмосів.

В рівнянні (13) концентрація q пов'язана з концентрацією $c_2(x,t)$ ізотермою адсорбції (16), яка при $\eta = 0$ стає традиційною ізотермою Фрейдліха (Freundlich), а при $\beta = 1$ – ізотермою Ленгмюра (Langmuir).

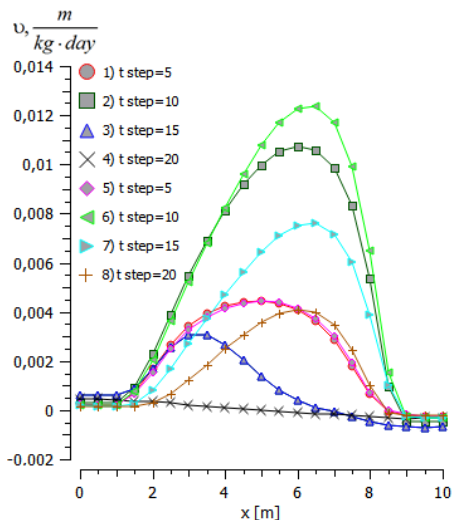


Рис. 4. Порівняльні розподіли швидкості фільтрації $v(x,t)$ при нелінійній залежності коефіцієнта фільтрації $k = k(x, c_1)$ у неізотермічних (графіки 1-4) та ізотермічних (графіки 5-8) умовах при: $t = 150$ діб (5 міс.) (графіки 1 і 5); $t = 300$ діб (10 міс.) (графіки 2 і 6); $t = 450$ діб (15 міс.) (графіки 3 і 7); $t = 600$ діб (20 міс.) (графіки 4 і 8)

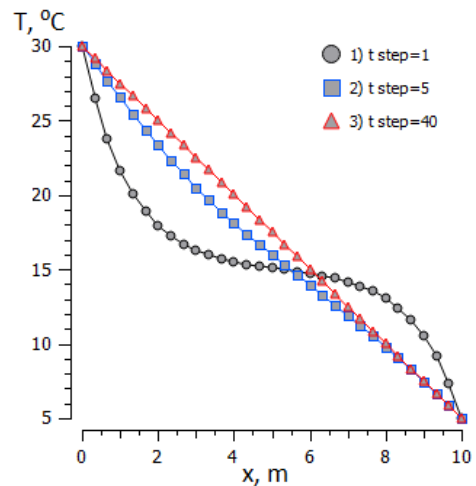


Рис. 5. Розподіл температури $T(x,t)$ по глибині шару ґрунту x при: 1) $t = 30$ діб (1 міс.); 2) $t = 150$ діб (5 міс.); 3) $t = 1200$ діб (40 міс.)

Наближені розв'язки крайової задачі (11)-(20) знайдено методом скінченних різниць з використанням монотонної та неявної різницевої схем. Для аналізу і порівняння математичної моделі вищенаведеної задачі з іншими, раніше описаними моделями, був удосконалений власний програмний комплекс NanoSurface. Провівши серію чисельних експериментів, отримано чисельні значення та графіки

полів швидкостей фільтрації $v(x,t)$ (рис. 4), температури $T(x,t)$ (рис. 5), розподілу концентрацій сольових розчинів $c_1(x,t)$ та $c_2(x,t)$ по області фільтрації в часі. Також проведено порівняльний аналіз впливу температури на процес масопереносу (рис. 6) і наявності каталітичних мікрочастинок (рис. 7). При заданих вхідних параметрах, найбільший вплив продемонстрували мікрочастинки в порівнянні з неізотермічним режимом (рис. 6 і 7). Температура, в свою чергу, впливає на процес адсорбції на поверхні колоїду і коефіцієнти дифузії, що призводить до збільшення швидкості просування радіонуклідів. Важливими також залишаються фізико-хімічні фактори пористого середовища (пористість, дисперсія, тип ґрунту).

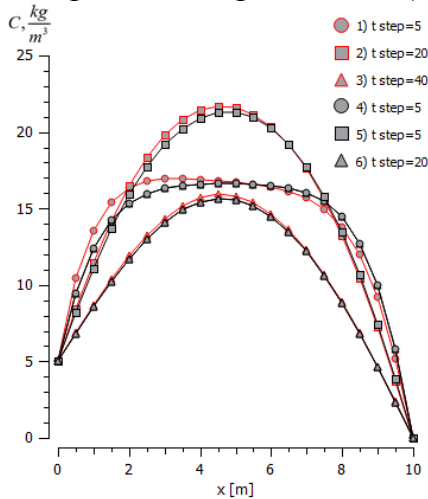


Рис. 6. Порівняльний розподіл концентрацій $c_1(x,t)$ по глибині шару ґрунту x для неізотермічного (графіки 1-3) та ізотермічного (графіки 4-6) випадків при: $t = 150$ діб (5 міс.) (графіки 1 і 4); $t = 600$ діб (20 міс.) (графіки 2 і 5); $t = 1200$ діб (40 міс.) (графіки 3 і 6)

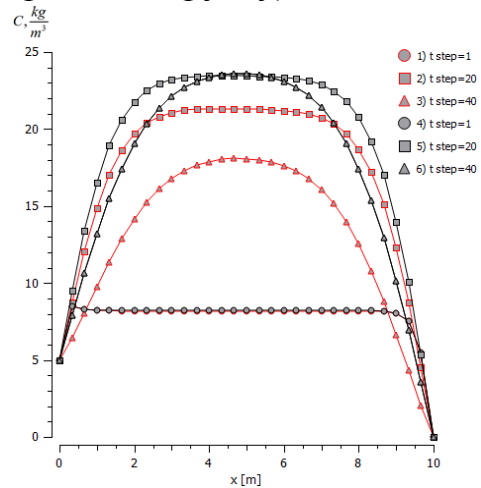


Рис. 7. Порівняльний розподіл концентрацій $c_1(x,t)$ по глибині шару ґрунту x з урахуванням дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R (графіки 1-3) і без урахування (графіки 4-6) при: $t = 30$ діб (1 міс.) (графіки 1 і 4); $t = 600$ діб (20 міс.) (графіки 2 і 5); $t = 1200$ діб (40 міс.) (графіки 3 і 6)

Четвертий розділ присвячено математичному та комп'ютерному моделюванню міграції радіонуклідів у насиченому каталітичному пористому середовищі в двовимірному випадку.

Для ефективного очищення шару ґрунту на практиці застосовують горизонтальні фільтри-вловлювачі, наповнені вермикулітом (рис. 8), які розміщені на деякій відстані один від одного та певній глибині від поверхні ґрунту. В силу симетрії картини фільтрації розглядається фрагмент області фільтрації AB_1B_2BCD . Математична модель міграції забруднюючих речовин (наприклад, радіонуклідів) у двовимірному випадку може бути описана наступною крайовою задачею:

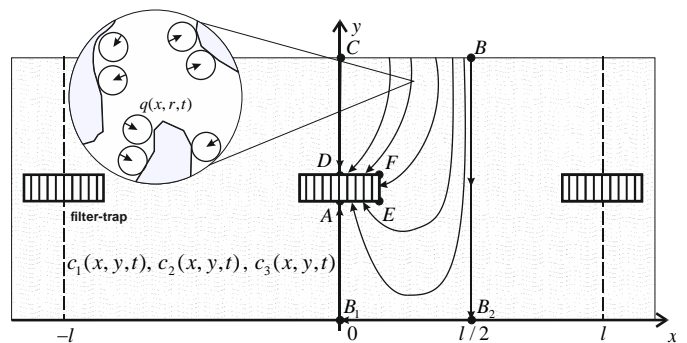


Рис. 8. Міграція забруднюючих речовин у насиченому пористому середовищі до фільтрів-вловлювачів

$$\frac{\partial \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial y} \right)}{\partial y} - v_x \frac{\partial c_1}{\partial x} - v_y \frac{\partial c_1}{\partial y} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2 = \sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (x, y) \in \Omega, t > 0, \quad (21)$$

$$\frac{\partial \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial y} \right)}{\partial y} + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 + \gamma_3 c_3 - \theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R} = \frac{\partial c_2}{\partial t}, \quad (x, y) \in \Omega, t > 0, \quad (22)$$

$$\frac{\partial \left(D_3(c_3) \frac{\partial c_3}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_3(c_3) \frac{\partial c_3}{\partial y} \right)}{\partial y} + \gamma_2 c_2 - \gamma_3 c_3 = \sigma_1 \frac{\partial c_3}{\partial t}, \quad x \in (0, l_1), y \in (0, l_2), t > 0, \quad (23)$$

$$D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial^2 q}{\partial r} \right) = \frac{\partial q}{\partial t}, \quad r \in (0, R), t > 0, \quad (24)$$

$$v_x = -K(c_1) \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad v_y = -K(c_1) \frac{\partial h}{\partial y} + v \frac{\partial c_1}{\partial y}, \quad \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0, \quad (25)$$

$$\frac{\partial q(x, y, r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad q(x, r, t) \Big|_{r=R} = \frac{k_f \cdot c_2^\beta(x, t)}{1 + \eta \cdot c_2^\beta(x, t)}, \quad (x, y) \in \Omega, r \in (0, R), t > 0, \quad (26)$$

$$\frac{\partial h}{\partial n} \Big|_{AB_1 \cup B_1 B_2 \cup B_2 B \cup CD} = 0, \quad h \Big|_{CB} = H_1, \quad h \Big|_{AE \cup EF \cup FD} = H_2, \quad (27)$$

$$l_1 c_1 \Big|_{CB} = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_2 \Big|_{CB} = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_3 c_3 \Big|_{CB} = \tilde{C}_3^1(t), \quad (28)$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = \frac{\partial c_2}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = \frac{\partial c_3}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = 0, \quad \Gamma = BB_2 \cup B_2 B_1 \cup B_1 A \cup AE \cup EF \cup FD \cup DC, \quad (29)$$

$$c_1 \Big|_{t=0} = \tilde{C}_1^0(x, y), \quad c_2 \Big|_{t=0} = \tilde{C}_2^0(x, y), \quad c_3 \Big|_{t=0} = \tilde{C}_3^0(x, y), \quad (30)$$

$$q \Big|_{t=0} = \tilde{Q}^0(x, y, r), \quad (x, y) \in \Omega, r \in (0, R), \quad (31)$$

де $c_3(x, y, t)$, D_3 – концентрація і коефіцієнт дифузії забруднювача в скелеті ґрунту. Значення даного коефіцієнту дифузії відрізняються на порядок від попередніх, тому скелет ґрунту виступає в ролі так званої «пастки»; k_f, β, η – коефіцієнти ізотерми адсорбції; $\vec{v} = \{v_x, v_y\}$ – вектор швидкості фільтрації; $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – коефіцієнти масообміну; $(x, y) \in \Omega$ – точка області Ω ; $l_i, i = \overline{1, 6}$ – диференціальні оператори, які задають граничні умови при $x=0$ і $x=l$; t – час, $t > 0$.

Вищенаведені рівняння описують наступне: (21) – міграцію забруднюючих речовин у фільтраційному потоці з концентрацією c_1 ; (22) – міграцію забруднюючих речовин у воді, зв'язаній зі скелетом ґрунту; (23) – міграцію забруднювача в скелеті ґрунту (наприклад, пастці); (24) – міграція забруднювача з концентрацією q в мікрочастинках, які зв'язані з концентрацією c_2 рівнянням (26); (25) – фільтрацію в каталітичному пористому середовищі. Граничні умови для

концентрацій $c_1(x, y, t)$, $c_2(x, y, t)$, $c_3(x, y, t)$, $q(x, y, r, t)$ і п'єзометричного напору $h(x, y)$ мають вигляд (26)–(31) відповідно.

Побудовано чисельний розв'язок відповідної крайової задачі з використанням локально-одновимірною методу О. А. Самарського та монотонних різницевої схем. Результати порівняльного аналізу результатів чисельних експериментів показали пришвидшення процесу масопереносу за наявності мікрочастинок на 0,9-3,8% у момент часу $t = 360$ діб (1 рік). Очевидно, що зміна крайових умов та характеристик мікрочастинок (коефіцієнт дифузії D_0 , коефіцієнтів ізотерми адсорбції k_f, β, η) ще більше змінять міграційну поведінку. Графік розподілу значень п'єзометричного напору з часом практично не змінюється. Натомість, графіки розподілу компонент швидкості фільтрації $v_x(x, y, t)$ та $v_y(x, y, t)$ мають чітко виражену поверхню, яка демонструє наявність фільтра-вловлювача. Більше того, вплив значень компонент швидкості $v_y(x, y, t)$ призводить до того, що радіонукліди починають накопичуватися у підобласті ґрунту під фільтром-вловлювачем при певних крайових умовах ($c_1|_{CB} = \tilde{C}_1^1(t) \neq 0$). Зокрема, в момент часу $t = 720$ діб (2 роки) значення концентрації в даній області під фільтром-вловлювачем зростають у порівнянні зі значеннями іншого розподілу приблизно в 2 рази.

У п'ятому розділі висвітлено основні проблеми побудови програмних комплексів для математичного моделювання підземних процесів. Враховуючи проведений в розділі 1 аналіз програмних комплексів для дослідження цих процесів, наведено сучасні методології побудови відповідного програмного забезпечення. На прикладі власноруч розробленого кросплатформного програмного комплексу NanoSurface запропоновано підхід до вибору методології розробки, архітектури класів та проектування програмної системи. Також наводяться практичні аспекти застосування шаблонів проектування, організації чисельних обчислень та побудови користувацького інтерфейсу. Порівняльна характеристика якості коду, що була проведена за допомогою спеціалізованих утиліт, свідчить про успішне виконання поставленої задачі. Крім того, здійснено верифікацію програмного забезпечення на основі знаходження та порівняння аналітичного та чисельного розв'язків крайової задачі, що описує внутрішньочастинковий масоперенос речовин у каталітичному пористому середовищі. Доведено, що розбіжність результатів не перевищує 0,5%. З цього можна зробити висновок про коректність постановки задачі та успішну верифікацію програмного комплексу NanoSurface для комп'ютерного моделювання задач внутрішньочастинкового масопереносу.

Встановлено алгоритмічну складність алгоритмів правої, лівої, зустрічної та блочної прогонки. Проведено чисельні експерименти з метою виявлення часових затрат та аналізу ефективності паралельних обчислень для однієї задачі математичного моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі з пастками. Реалізація обчислювальних методів за допомогою засобів паралельного програмування дала суттєвий приріст ефективності. Зокрема, для 120000 кроків розбиття по змінній x час виконання звичайного коду від паралельного алгоритму обчислення збільшується в 3,5 рази (при 8 потоках).

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ РОБОТИ ТА ВИСНОВКИ

Дисертаційна робота є завершеним науковим дослідженням, в якому поставлено та розв'язано актуальне та важливе науково-технічне завдання математичного та комп'ютерного моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури. При цьому отримано такі найбільш вагомі результати та висновки:

1. Сформульовано постановки нових актуальних задач вертикальної міграції забруднених речовин у ґрунтових середовищах при фільтрації підземних вод за наявності каталітичних та дисперсних мікро- та наночастинок в ізо- та неізотермічному випадках на основі аналізу наукових першоджерел.

2. Розроблено нові одновимірні математичні моделі вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтра-вловлювача в каталітичних пористих середовищах частинок мікропористої структури як в ізотермічних, так і в неізотермічних умовах, які враховують нелінійні залежності коефіцієнтів дифузії та фільтрації від концентрації, впливу дифузії у скелеті ґрунту та особливостей внутрішньочастинкового масопереносу мікро- або нанопористих сорбентів та взаємовпливів на загальну кінетику процесів. Розроблено нову двовимірну математичну модель міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до системи горизонтальних фільтрів-вловлювачів у каталітичному пористому середовищі.

3. Розроблено нові ефективні обчислювальні алгоритми для чисельного розв'язування відповідних крайових задач тепло- та масопереносу радіонуклідів при фільтрації підземних вод в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури шляхом побудови нових монотонних скінченно-різницевих схем та отримання їх розв'язку із застосуванням методу прогонки у різних модифікаціях. На основі цього власноруч розроблено програмний комплекс NanoSurface (інтелектуальний інтерфейс) за допомогою кросплатформенного фреймворку Qt та технології ASP.NET MVC з використанням паралельних обчислень для систем із спільною пам'яттю, що дозволило пришвидшити комп'ютерне моделювання в 3,5 рази для деяких задач.

4. На основі проведених чисельних експериментів у розробленому програмному комплексі NanoSurface встановлено вплив каталітичного мікропористого середовища на процес масопереносу радіонуклідів у ґрунтах при фільтрації підземних вод. Зокрема, вплив процесу адсорбції забруднюючих речовин наночастинками на загальний перебіг процесу сягав до 27% в сторону швидшого очищення ґрунту. Також було досліджено роль скелету ґрунту на процеси утримання забруднених речовин. Результати продемонстрували затримку очищення ґрунтового масиву завдяки повільній дифузії у скелеті ґрунту, тобто залишкові концентрації забруднених речовин у «пастках», можуть стати джерелом майбутніх забруднень в той час, коли в конвективно рухомому поровому розчині та у розчині, що зв'язаний зі скелетом ґрунту, концентрація забруднених речовин буде зменшуватися. Порівняльний аналіз результатів чисельного експерименту для ізотермічного та неізотермічного режимів показав значимість впливу неізотермічного режиму на розподіл значень концентрації. Однак, на загальну картину тепломасопереносу більший вплив робить дифузія в мікрочастинках у порівнянні з температурою.

5. Результати дисертаційного дослідження знайшли своє практичне застосування в роботі Рівненської філії державної установи «Інститут охорони ґрунтів України» та в Інституті сільського господарства Західного Полісся при проведенні ряду польових робіт (дослідження процесу вапнування, вертикальної міграції радіонуклідів, поживних речовин, добрив, тощо). Також результати наукових досліджень використано ТЗОВ «Волиньсапрофос» для вдосконалення технології виробництва органічного добрива на основі сапропелю – Saprolife™. Крім того, програмний комплекс NanoSurface використовувався управлінням економіки, інфраструктури та інвестиційної діяльності Рівненської районної державної адміністрації для побудови ефективних стратегій оцінки ризику і прогнозування очищення та подальшого практичного використання ґрунтових масивів на забруднених територіях.

Одержані результати дисертаційних досліджень теоретичного і практичного характеру впроваджені у навчальному процесі при викладанні ряду спецкурсів «Теорія систем та математичне моделювання», «Математичне і комп'ютерне моделювання природних та техногенних процесів», «Паралельні та розподілені обчислення» та виконанні кваліфікаційних робіт студентами освітніх програм «Прикладна математика» та «Комп'ютерні науки» Національного університету водного господарства та природокористування МОН України.

Результати даних досліджень також знайдуть широке застосування при прогнозуванні очищення забруднених родючих ґрунтів, наприклад радіонуклідами, з використанням нагнітання сорбуючих мікро- та наночастинок, застосування новітніх технологій меліорації, зокрема фільтрів-вловлювачів, нетрадиційних добрив, тощо.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Vlasyuk A. P., Zhukovskii V. V. Mathematical Simulation of the Migration of Radionuclides in a Soil Medium Under Nonisothermal Conditions with Account for Catalytic Microparticles and Nonlinear Processes. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2017. 90(6). С. 1386–1398. (Scopus Q2)
2. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V. Optimization of computer methods for mathematical modeling of radionuclides vertical migration in catalytic porous media. *Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук*. 2017. 2. С. 40–46.
3. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V. Mathematical and computer modeling of intraparticle radionuclides mass transfer in catalytic porous media under isothermal conditions. *Mathematical Modeling and Computing*. 2017. 4(2). С. 117–125.
4. Жуковський В. В. Про деякі підходи до створення програмних комплексів комп'ютерного моделювання підземних процесів. *Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського*. 2017. 2(103). С. 64–73.
5. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі у нелінійному випадку.

- Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки: зб. наук. праць.* 2015. 12. С. 161–172.
6. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі. *Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук.* 2015. 1. С. 89–95.
 7. Власюк А. П., Жуковський В. В., Жуковська Н. А. Комп'ютерне моделювання процесу вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі з використанням паралельних обчислень. *Інформаційні технології та комп'ютерна інженерія.* 2017. 2(39). С. 60–69.
 8. Жуковський ВВ, Авторське свідоцтво. Комп'ютерна програма "NanoSurface" (моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури)". № 68776, 15.11.2016.
 9. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V. A modern approach for software construction of tools for mathematical modeling of mass transfer processes in catalytic porous media. *Theoretical & Applied Science.* 2016. 44(12). С. 69–75.
 10. Zhukovskyy V. V., Vlasyuk A. P. Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in catalytic porous media in non-isothermal conditions. *SCIENCE REPORT Project CIII-PL-0007: Research on modern systems for manufacture and measurement of components of machines and devices.* 2016. С. 177–190.
 11. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V., Bondarchuk M. M. Mathematical Modelling of Vertical Migration of Radionuclides in Catalytic Porous Media with Traps in Linear Case. *Theoretical and Applied Aspects of Cybernetics. Proceedings of the 5th International Scientific Conference of Students and Young Scientists.* 2015. С. 208–219.
 12. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V. Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in unsaturated porous media in non-isothermal conditions one-dimensional case. *Abstracts of XXIV International Conference "Problems of decision making under uncertainties".* 2014. С. 110–111.
 13. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V. Nanosurface – a tool for computer modeling of mass transfer process in catalytic porous media. *Abstracts of XXVIII International Conference "Problems of decision making under uncertainties".* 2016. С. 122–124.
 14. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V. Optimization of computer methods for mathematical modeling of radionuclides vertical migration in catalytic porous media. *Abstracts of XXX International Conference "Problems of decision making under uncertainties".* 2017. С. 130–131.
 15. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі : *тези XIV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М. Кравчука.* 2012. С. 111.
 16. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності дрен-вловлювачів в нелінійному випадку : *тези XXII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності".* 2013. С. 62.
 17. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах : *тези Міжнар. науково-*

практичної конф. «Проблеми розвитку вищої школи та економіки в XXI столітті». 2013. С. 77–79.

18. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів у лінійному випадку : *тези XIX Всеукр. наукова конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики»*. 2013. С. 41–42.
19. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів : *тези Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів»*. 2013. С. 42.
20. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах : *тези XXI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*. 2013. С. 105–107.
21. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі до фільтрів-вловлювачів в зоні неповного насичення у лінійному випадку : *тези VI Міжнар. наук. конф. "Сучасні проблеми математичного моделювання, прогнозування та оптимізації"*. 2014. С. 32–33.
22. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому біпористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів : *тези XXIII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*. 2014. С. 75–76.
23. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів у нелінійному випадку : *тези XV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М. Кравчука*. 2014. С. 72.
24. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у насиченому каталітичному пористому середовищі до системи горизонтальних фільтрів-вловлювачів у лінійному випадку : *тези I Міжнар. XX Всеукр. наукова конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики»*. 2014. С. 51–52.
25. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному випадку : *тези Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів»*. 2015. С. 44.
26. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі з пастками у нелінійному випадку. *Збірник наукових праць конференції "Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики"*. 2015. С. 89.
27. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному середовищі з пастками : *тези XXVI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*. 2015. С. 61–63.
28. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному

- нелінійному випадку : *тези XXV Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*. 2015. С. 154–155.
29. Власюк А. П., Жуковський В. В. Верифікація та валідація комп'ютерного моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі : *тези XXIX Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*. 2017. С. 141–143.
30. Власюк А. П., Жуковский В. В. Математическое моделирование миграции радионуклидов в грунтовой почве при неизотермических условиях с учетом каталитических микрочастиц : *тезисы докладов и сообщений XV Минский международный форум по тепло- и массообмену*. 2016. С. 342–345.
31. Vlasyuk A. P., Kochan R. V., Zhukovsky V. V., Zhukovska N. A. Mathematical and computer modeling of contaminant migration to filter trap in two-dimensional nonlinear case. *18th International Multidisciplinary Scientific Geoconference SGEM 2018*. 2018. 18(2.2). С. 293–300.
32. Власюк А. П., Жуковский В. В. Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу сольових розчинів у каталітичних середовищах мікропористої структури : *матеріали Міжнародної наукової конференції "Мікро- та нано-неоднорідні матеріали: моделі та експеримент"*. 2018. С. 20–22.

АНОТАЦІЯ

Жуковський В. В. Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи. – Інститут телекомунікацій і глобального інформаційного простору Національної академії наук України, Київ, 2018.

Дисертаційну роботу присвячено оновленню існуючих та побудові нових нелінійних одно- та двовимірних математичних моделей міграції забруднених речовин у ґрунтовому середовищі при наявності каталітичних частинок мікропористої структури, що на відміну від існуючих, враховують вплив масопереносу в пористих мікро- та наносорбентах на загальну кінетику процесу. Удосконалено дані математичні моделі з урахуванням неізотермічних умов, нелінійної залежності коефіцієнтів дифузії та фільтрації від концентрації, впливу дифузії у скелеті ґрунту.

Розвинено скінченно-різницеві методи для знаходження чисельних розв'язків відповідних нелінійних крайових задач в одно- та двовимірному випадках. На основі розроблених алгоритмів власноруч створено програмний комплекс NanoSurface з використанням паралельних обчислень в хмарному середовищі. Проведено верифікацію програмного коду NanoSurface та його порівняння з іншими програмними комплексами моделювання процесів підземної гідромеханіки.

Проведено серію чисельних експериментів та їх аналіз. Показано вплив сорбуючих мікро- та наночастинок, температури, нелінійних залежностей швидкості

фільтрації та коефіцієнтів дифузії при фільтрації сольових розчинів у насиченому середовищі.

Ключові слова: математичне та комп'ютерне моделювання, математична модель, тепломасоперенос, ґрунтовий масив, вертикальна міграція, наночастинки, програмний комплекс, NanoSurface, метод скінченних різниць, монотонна різницева схема.

ABSTRACT

Zhukovsky V. V. Mathematical and computer modeling of saline solutions mass transfer in catalytic and dispersed particles media of microporous structure. – Manuscript.

Dissertation research for PhD degree on specialty 01.05.02 – Mathematical Modelling and Computational Methods. – Institute of Telecommunications and Global Information Space of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2018.

The dissertation is devoted to the updating of existing and the construction of new nonlinear one- and two-dimensional mathematical models of pollutants migration in the soil mass in the catalytic particles of a microporous structure presence, i.e. taking into account the influence of the mass transfer in porous micro- and nanosorbents to the overall kinetics of the process. The given mathematical models with the account of nonisothermal conditions, nonlinear dependence of diffusion and filtration coefficients on concentration, diffusion influence in the soil skeleton have been improved.

Finite-difference methods for solving numerical solutions of the corresponding nonlinear boundary value problems in one-dimensional and two-dimensional cases have been developed. On the basis of developed algorithms a software complex NanoSurface was created using parallel computing in a cloud environment. Verification of NanoSurface code and its comparison with other software complexes of modeling processes of underground hydromechanics has been carried out.

A series of numerical experiments was conducted and their analysis. The influence of micro and nanoparticles sorbent, temperature, nonlinear dependences of filtration rate and diffusion coefficients on the filtration of saline solutions in saturated media is shown.

Keywords: mathematical and computer modeling, mathematical model, heat and mass transfer, soil solute, vertical migration, nanoparticles, program complex, NanoSurface, finite difference method, monotone difference scheme.

Підписано до друку 23.11.2018 р. Формат 60×90¹/₁₆.
Ум.-друк. арк. 0,9. Тираж 100 прим.
Зам. № 5393.

*Видавець і виготовлювач
Національний університет
водного господарства та природокористування,
вул. Соборна, 11, м. Рівне, 33028.*

*Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до державного
реєстру видавців, виготівників і розповсюджувачів
видавничої продукції РВ № 31 від 26.04.2005 р.*