

Національний університет водного господарства та природокористування
Міністерство освіти і науки України
Інститут телекомунікацій і глобального інформаційного простору
Національна академія наук України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

ЖУКОВСЬКИЙ ВІКТОР ВОЛОДИМИРОВИЧ

УДК 519.6:544.431.11:544.016.5-022.53

ДИСЕРТАЦІЯ

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

01.05.02 – Математичне моделювання та обчислювальні методи

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей,
результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

_____ В.В. Жуковський

Науковий керівник

Власюк Анатолій Павлович

доктор технічних наук, професор

Київ - 2018

АНОТАЦІЯ

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

Зміст дисертації. 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 врахуванням 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 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. Здійснено 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 пористому середовищі.

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. Зокрема, розглянуто теорію тепло- та масопереносу при фільтрації в пористих середовищах, відповідні математичні описи даних задач та методи їх розв'язку. У першому розділі також наведено основні закони, що описують фізичні та фізико-хімічні процеси тепло- та масопереносу при фільтрації сольових розчинів у каталітичних пористих середовищах.

Також в даному розділі проведено огляд основних математичних моделей масопереносу в мікро- та наносередовищах. 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 у каталітичному пористому середовищі в нелінійному випадку та з урахуванням неізотермічних умов.

У **другому розділі** сформульовано постановки, проведено математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в одновимірному випадку в ізо- та неізотермічних умовах, а також у середовищах з пастками в лінійній постановці. Для отримання чисельного розв'язку вказаних крайових задач використано метод скінченних різниць. Для цього записано неявну та монотонну різницеву схему для відповідних рівнянь. Значення концентрації

солей та швидкості фільтрації на всіх часових кроках було знайдено методом прогонки після представлення відповідних різницевоїх схем у прогоночному вигляді. Використовуючи власний новостворений програмний комплекс NanoSurface, проведено серію чисельних експериментів.

Аналіз отриманих результатів показав, що розподіл концентрації сольових розчинів у часі при $k = k(x, c_1)$ є більш повільним і передбачуваним. А при підвищенні дисперсійного параметра, розчин солі більш швидко розподіляється в шарі ґрунту. Також порівняльний аналіз результатів чисельного експерименту для ізотермічного та неізотермічного режимів показав важливість впливу тепла на значення концентрації. Тому даним ефектом не можна нехтувати. При дослідженні ролі скелету ґрунту, а саме впливу так званих «пасток» на процеси утримання забруднених речовин, показано потенційну затримку очищення ґрунтового масиву завдяки повільній дифузії у скелеті ґрунту. Також при заданих вихідних параметрах комп'ютерного моделювання було продемонстровано, що на 27% зменшується вплив забруднення при використанні сорбуючих наночастинок, тобто відбувається поглинання даного забруднення.

У **третьому** розділі удосконалено згадані вище математичні моделі з урахуванням нелінійної постановки. Проведено математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичних пористих середовищах частинок нанопористої структури в ізотермічних умовах у нелінійній постановці, а також і для неізотермічних умов. Аналогічно до попереднього розділу було наведено математичні викладки чисельного розв'язку для відповідних крайових задач, проведено чисельні експерименти та аналіз отриманих результатів у власному програмному комплексі NanoSurface. При заданих вхідних даних показано, що більший вплив на масоперенос дають мікрочастинки в порівнянні з температурою. Температура, у 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).

Четвертий розділ присвячено математичному та комп'ютерному моделюванню міграції радіонуклідів у насиченому каталітичному пористому середовищі у двовимірному випадку. Для ефективного очищення шару ґрунту на практиці застосовують горизонтальні фільтри-вловлювачі, які розміщені на деякій відстані один від одного та певній глибині від поверхні ґрунту. В силу симетрії картини процесу фільтрації записано двовимірну математичну модель міграції забруднюючих речовин (наприклад, радіонуклідів). Побудовано чисельний розв'язок відповідної крайової задачі з використанням локально-одновимірного методу та монотонних різницевих схем. Результати порівняльного аналізу чисельних експериментів показали пришвидшення процесу масопереносу за наявності мікрочастинок. Однак, у зв'язку з непроникистю підстилаючої поверхні помітне поступове накопичення радіонуклідів у зоні під фільтром-вловлювачем. Очевидно, що при зміні крайових умов та характеристик мікрочастинок (коефіцієнт дифузії, коефіцієнти ізотерм адсорбції) міграційна поведінка зміниться.

У **п'ятому** розділі висвітлено основні проблеми побудови програмних комплексів для математичного моделювання підземних процесів. Враховуючи проведений в першому розділі аналіз програмних комплексів для дослідження цих процесів, наведено сучасні методології побудови відповідного програмного забезпечення. На прикладі власного кросплатформенного 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. 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 прогонок. Проведено чисельні експерименти з метою виявлення часових затрат та аналізу ефективності паралельних обчислень для однієї задачі математичного моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у 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).

Ключові слова: комп'ютерне моделювання, математична модель, тепло-масоперенос, ґрунтовий масив, вертикальна міграція, програмний комплекс, NanoSurface, метод скінченних різниць, монотонна різницева схема.

Список опублікованих праць за темою дисертації

Праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. *Vlasyuk A.P.* Mathematical Simulation of the Migration of Radionuclides in a Soil Medium Under Nonisothermal Conditions with Account for Catalytic Microparticles and Nonlinear Processes / *A.P. Vlasyuk, V.V. Zhukovskii* // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. – 2017. – Т.90, №6. – С.1386–1398.
2. *Vlasyuk A.P.* Optimization of computer methods for mathematical modeling of radionuclides vertical migration in catalytic porous media / *A.P. Vlasyuk, V.V.*

- Zhukovskyy* // Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук. – 2017. – Т.2. – С.40–46.
3. *Vlasyuk A.P.* Mathematical and computer modeling of intraparticle radionuclides mass transfer in catalytic porous media under isothermal conditions / *A.P. Vlasyuk, V.V. Zhukovskyy* // *Mathematical Modeling and Computing*. – 2017. – Т.4, №2. – С.117–125.
 4. *Жуковський В.В.* Про деякі підходи до створення програмних комплексів комп'ютерного моделювання підземних процесів / *В.В. Жуковський* // Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського. – 2017. – Т.2, №103. – С.64–73.
 5. *Власюк А.П.* Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі у нелінійному випадку / *А.П. Власюк, В.В. Жуковський* // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки: зб. наук. праць. – 2015. – Т.12. – С.161–172.
 6. *Власюк А.П.* Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі / *А.П. Власюк, В.В. Жуковський* // Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук. – 2015. – Т.1. – С.89–95.
 7. *Власюк А.П.* Комп'ютерне моделювання процесу вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі з використанням паралельних обчислень / *А.П. Власюк, В.В. Жуковський, Н.А. Жуковська* // Інформаційні технології та комп'ютерна інженерія. – 2017. – Т.2, №39. – С.60–69.
 8. *Жуковський В.В.* Авторське свідоцтво. Комп'ютерна програма "NanoSurface" (моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури) / *В.В. Жуковський*, 15.11.2016. – №68776.
 9. *Vlasyuk A.P.* A modern approach for software construction of tools for mathematical modeling of mass transfer processes in catalytic porous media / *A.P. Vlasyuk, V.V. Zhukovskyy* // *Theoretical & Applied Science*. – 2016. – Т.44, №12. – С.69–75.
 10. *Zhukovskyy V.V.* Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in catalytic porous media in non-isothermal conditions / *V.V. Zhukovskyy, A.P. Vlasyuk* // *Research on modern systems for manufacture and measurement of components of machines and devices*. – 2016. – Т. SCIENCE REPORT Project CIII-PL-0007. – С.177–190.

Праці, що засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

11. *Vlasyuk A.P. Mathematical Modelling of Vertical Migration of Radionuclides in Catalytic Porous Media with Traps in Linear Case / A.P. Vlasyuk, V.V. Zhukovskyy, M.M. Bondarchuk // Theoretical and Applied Aspects of Cybernetics. Proceedings of the 5th International Scientific Conference of Students and Young Scientists. – 2015. – P.208–219.*
12. *Vlasyuk A.P. Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in unsaturated porous media in non-isothermal conditions one-dimensional case / A.P. Vlasyuk, V.V. Zhukovskyy // Abstracts of XXIV International Conference “Problems of decision making under uncertainties”. – 2014. – P.110–111.*
13. *Vlasyuk A.P. Nanosurface – a tool for computer modeling of mass transfer process in catalytic porous media / A.P. Vlasyuk, V.V. Zhukovskyy // Abstracts of XXVIII International Conference “Problems of decision making under uncertainties”. – 2016. – С.122–124.*
14. *Vlasyuk A.P. Optimization of computer methods for mathematical modeling of radionuclides vertical migration in catalytic porous media / A.P. Vlasyuk, V.V. Zhukovskyy // Abstracts of XXX International Conference “Problems of decision making under uncertainties”. – 2017. – С.130–131.*
15. *Власюк А.П. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі / А.П. Власюк, В.В. Жуковський // Тез. XIV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука. – 2012. – С.111.*
16. *Власюк А.П. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності дренажувачів в нелінійному випадку / А.П. Власюк, В.В. Жуковський // Тез. XXII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності". – 2013. – С.62.*
17. *Власюк А.П. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-влочувачів в неізотермічних умовах / А.П. Власюк, В.В. Жуковський // Тез. Міжнар. науково-практичної конф. «Проблеми розвитку вищої школи та економіки в ХХІ столітті». – 2013. – С.77–79.*
18. *Власюк А.П. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-влочувачів у лінійному випадку / А.П. Власюк, В.В. Жуковський*

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

«Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів». – 2015. – С.44.

26. *Власюк А.П.* Математичне моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі з пастками у нелінійному випадку / *А.П. Власюк, В.В. Жуковський* // Збірник наукових праць конференції "Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики". – 2015. – С.89.
27. *Власюк А.П.* Математичне моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному середовищі з пастками / *А.П. Власюк, В.В. Жуковський* // Тез. XXVI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності". – 2015. – С.61–63.
28. *Власюк А.П.* Математичне моделювання міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному нелінійному випадку / *А.П. Власюк, В.В. Жуковський* // Тез. XXV Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності". – 2015. – С.154–155.
29. *Власюк А.П.* Верифікація та валідація комп'ютерного моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі / *А.П. Власюк, В.В. Жуковський* // Тез. XXIX Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності". – 2017. – С.141–143.
30. *Vlasyuk A.P.* Mathematical and computer modeling of contaminant migration to filter trap in two-dimensional nonlinear case / *A.P. Vlasyuk, R.V. Kochan, V.V. Zhukovskyy, N.A. Zhukovska* // 18th International Multidisciplinary Scientific Geosconference SGEM 2018. – 2018. – Т.18, №2.2. – С.293–300.
31. *Власюк А.П.* Математическое моделирование миграции радионуклидов в грунтовой почве при неизотермических условиях с учетом каталитических микрочастиц / *А.П. Власюк, В.В. Жуковский* // Тезисы докладов и сообщений XV Минский международный форум по тепло- и массообмену. – 2016. – С.342–345.
32. *Власюк А.П.* Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу сольових розчинів у каталітичних середовищах мікропористої структури / *А.П. Власюк, В.В. Жуковский* // Матеріали Міжнародної наукової конференції "Мікро- та нано- неоднорідні матеріали: моделі та експеримент". – 2018. – С.20–22.

Zhukovskyy 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.

The introduction substantiates the relevance of the dissertation topic, formulates the purpose and main objectives of the research, defines the object and subject of the research, specifies the methods of research, scientific novelty and practical

significance of the obtained results. There is also described a link between work and scientific programs, plans and topics. Testing data of the results and information on the individual contribution of the applicant, publications on the dissertation subject, as well as the structure and scope of the work are given.

The state of the problem in accordance with the literary sources in the **first** section of the dissertation is analyzed. In particular, the theory of heat-mass transfer under filtration in porous media, the corresponding mathematical descriptions of the problems of heat and mass transfer and the methods of their solution are considered. The first chapter also discusses the basic physical laws that describe the physical and physico-chemical processes of mass transfer in the filtration of saline solutions in catalytic porous media.

Also, in this section an overview of the basic mathematical models of mass transfer in the micro and nano-environments has been carried out. The formulation of mathematical models of diffusion processes in adsorbent granules, diffusion in bipolar particles, two-level one-component adsorption mass transfer in the catalytic medium of particles of a microporous structure, migration of contaminated substances in a catalytic porous medium with traps and migration of radionuclides in a catalytic porous medium in a nonlinear case and taking into account non-isothermal conditions are displayed.

In the **second** section, vertical radionuclide migration in one-dimensional case under isothermal conditions, non-isothermal conditions and trap environments in linear formulation was formulated. The method of finite differences was used for the numerical solution of these boundary problems. To do this, an implicit and monotone difference scheme for the corresponding equations was written. The value of the concentration of salts and the rate of filtration in all time steps was found by the sweep method after representing the corresponding difference schemes in the suitable form. A series of numerical experiments was conducted using our own newly created NanoSurface software.

The analysis of the results showed that the saline solutions distribution in time, when $k = k(x, c_1)$ are more slow and predictable. And by increasing the dispersion parameter, the salt solution is more rapidly distributed in the soil layer. Also, a comparative analysis of the numerical experiment results for isothermal and non-isothermal modes showed the importance of the heat effect on the concentration value. Therefore, this effect can not be neglected. The task of investigating the role of the soil skeleton, namely the effect of so-called "traps", showed a potential delay in clearing the soil mass due to slow diffusion in the soil skeleton. Also, with the given initial parameters of computer simulation, it was demonstrated that the impact of pollution on the use of sorbing nanoparticles decreases by 27%.

In the **third** section, the aforementioned mathematical models have been improved taking into account the nonlinear formulation. Mathematical and computer simulation of vertical migration of radionuclides in catalytic porous media of nanoporous structure particles under isothermal conditions in a nonlinear formulation, and subsequently for non-isothermal conditions have been performed. Similarly to the previous section, mathematical calculations of numerical solution for the corresponding boundary value problems were presented. Numerous experiments and analysis of the obtained results were carried out in own NanoSurface software complex. At given input data, the greatest influence was given by microparticles in comparison to temperature. The temperature affects on the process of adsorption on the surface of the colloid and the diffusion coefficients, which leads to an increase in the radionuclide propagation velocity. Physico-chemical factors of the porous medium (porosity, dispersion, type of soil) also remain important.

The **fourth** section is devoted to mathematical and computer modeling of radionuclide migration in saturated catalytic porous medium in a two-dimensional case. Horizontal filters are used in order to effectively clean the soil layer. They located at the equal distance from each other and at a certain depth from the surface of the soil. In view of the symmetry of the filtration process picture, a two-

dimensional mathematical model for the pollutants migration (for example, radionuclides) has been written. A numerical solution of the corresponding boundary value problem using a locally one-dimensional method and monotone difference schemes is constructed. The results of the comparative analysis of numerical experiments showed an acceleration of the process of mass transfer in the presence of microparticles. However, due to the impenetrability of the underlying surface, there is a noticeable gradual accumulation of radionuclides in the zone under the filter-trap. Obviously, changing the boundary conditions and characteristics of microparticles (diffusion coefficient, adsorption isotherms) will further change the migration behavior. Therefore, further research may have a development in the study of the influence of specific sorption micro-or nanoparticles to the overall migration behavior.

The **fifth** section covers the main problems of constructing software complexes for underground processes mathematical modeling. Taking into account the analysis of program complexes conducted in the first section, modern methodologies for constructing the corresponding software are presented. An example of a custom cross-platform software suite NanoSurface offers an approach to choosing a development methodology, class architecture, and software system design. Also, practical aspects of application of design templates, numerical calculations and user interface design are presented. Comparative characteristics of code quality, which was carried out with the help of specialized utilities, testify to the successful accomplishment of the task. Verification of the software was carried out on the basis of finding and comparing the analytical and numerical solution of the boundary value problem describing the intraparticle mass transfer of substances in the catalytic porous medium. It is proved that the difference of results does not exceed 0,5%. From this, we can conclude that the task is well-posed and a successful verification of the NanoSurface software for computer simulation of intraparticle mass transfer problems was performed.

The algorithmic complexity of the right, left, counter and block sweep algorithms is calculated. Numerous experiments have been conducted to detect time expenditures and to analyze the efficiency of parallel computing for one problem of mathematical modeling of vertical radionuclides migration in a catalytic porous medium with traps. The realization of computational methods with the help of parallel programming has yielded a significant increase in efficiency. In particular, for 120,000 steps of split over variable x , the time of execution of the conventional code from the parallel calculation algorithm increases by 3.5 times (for 8 streams).

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

List of publications

- [1] A. P. Vlasyuk and V. V. Zhukovskii, “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*, vol. 90, no. 6, pp. 1386–1398, 2017.
- [2] A. P. Vlasyuk and V. V. Zhukovskyy, “Optimization of computer methods for mathematical modeling of radionuclides vertical migration in catalytic porous media,” (bg), *Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук.*, vol. 2, pp. 40–46, 2017.
- [3] A. P. Vlasyuk and V. V. Zhukovskyy, “Mathematical and computer modeling of intraparticle radionuclides mass transfer in catalytic porous media under isothermal conditions,” *Mathematical Modeling and Computing*, vol. 4, no. 2, pp. 117–125, 2017.
- [4] В. В. Жуковський, “Про деякі підходи до створення програмних комплексів комп’ютерного моделювання підземних процесів,” *Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського*, vol. 2, no. 103, pp. 64–73, 2017.
- [5] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, “Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі у нелінійному випадку,” (bg), *Математичне та комп’ютерне моделювання. Серія: Технічні науки: зб. наук. праць*, vol. 12, pp. 161–172, 2015.

- [6] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, “Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі,” (bg), *Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук.*, vol. 1, pp. 89–95, 2015.
- [7] А. П. Власюк, В. В. Жуковський, and Н. А. Жуковська, “Комп’ютерне моделювання процесу вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі з використанням паралельних обчислень,” *Інформаційні технології та комп’ютерна інженерія*, vol. 2, no. 39, pp. 60–69, 2017.
- [8] В. В. Жуковський, “Комп’ютерна програма "NanoSurface" (моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури),” 68776, Україна.
- [9] А. Р. Vlasyuk and V. V. Zhukovskyu, “A modern approach for software construction of tools for mathematical modeling of mass transfer processes in catalytic porous media,” *Theoretical & Applied Science*, vol. 44, no. 12, pp. 69–75, 2016.
- [10] V. V. Zhukovskyu and A. P. Vlasyuk, “Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in catalytic porous media in non-isothermal conditions,” *Research on modern systems for manufacture and measurement of components of machines and devices*, vol. SCIENCE REPORT Project CIII-PL-0007, pp. 177–190, 2016.
- [11] А. Р. Vlasyuk, V. V. Zhukovskyu, and M. M. Bondarchuk, “Mathematical Modelling of Vertical Migration of Radionuclides in Catalytic Porous Media with Traps in Linear Case,” (en), *Theoretical and Applied Aspects of Cybernetics. Proceedings of the 5th International Scientific Conference of Students and Young Scientists*, pp. 208–219, 2015.
- [12] А. Р. Vlasyuk and V. V. Zhukovskyu, “Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in unsaturated porous media in non-isothermal conditions one-dimensional case,” (en), *Abstracts of XXIV International Conference “Problems of decision making under uncertainties”*, pp. 110–111, 2014.
- [13] А. Р. Vlasyuk and V. V. Zhukovskyu, “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”*, pp. 122–124, 2016.

- [14] A. P. Vlasyuk and V. V. Zhukovskyy, "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"*, pp. 130–131, 2017.
- [15] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, "Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі," (bg), *Тез. XIV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука*, p. 111, 2012.
- [16] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, "Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності дрен-вловлювачів в нелінійному випадку," (bg), *Тез. XXII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*, p. 62, 2013.
- [17] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, "Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах," (bg), *Тез. Міжнар. науково-практичної конф. «Проблеми розвитку вищої школи та економіки в XXI столітті»*, pp. 77–79, 2013.
- [18] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, "Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів у лінійному випадку," (bg), *Тез. XIX Всеукр. наукова конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики»*, pp. 41–42, 2013.
- [19] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, "Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів," (bg), *Тез. Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів»*, p. 42, 2013.
- [20] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, "Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах," (bg), *Тез. XXI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*, pp. 105–107, 2013.
- [21] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, "Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі до фільтрів-вловлювачів в зоні неповного насичення у лінійному випадку," (bg), *Тез. VI Міжнар. наук. конф. "Сучасні проблеми*

математичного моделювання, прогнозування та оптимізації", pp. 32–33, 2014.

- [22] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, “Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому біпористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів,” (bg), *Тез. XXIII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*, pp. 75–76, 2014.
- [23] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, “Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів у нелінійному випадку,” (bg), *Тез. XV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука*, p. 72, 2014.
- [24] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, “Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у насиченому каталітичному пористому середовищі до системи горизонтальних фільтрів-вловлювачів у лінійному випадку,” (bg), *Тез. I Міжнар. XX Всеукр. наукова конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики»*, pp. 51–52, 2014.
- [25] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, “Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному випадку,” (bg), *Тез. Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів»*, p. 44, 2015.
- [26] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, “Математичне моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі з пастками у нелінійному випадку,” (bg), *Збірник наукових праць конференції "Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики"*, p. 89, 2015.
- [27] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, “Математичне моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному середовищі з пастками,” (bg), *Тез. XXVI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*, pp. 61–63, 2015.
- [28] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, “Математичне моделювання міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному нелінійному випадку,” (bg), *Тез. XXV Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*, pp. 154–155, 2015.
- [29] А. П. Власюк and В. В. Жуковський, “Верифікація та валідація комп'ютерного моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі,” (bg), *Тез. XXIX Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"*, pp. 141–143, 2017.

- [30] А. П. Власюк and В. В. Жуковский, “Математическое моделирование миграции радионуклидов в грунтовой почве при неизотермических условиях с учетом каталитических микрочастиц,” (bg), *Тезисы докладов и сообщений XV Минский международный форум по тепло- и массообмену*, pp. 342–345, 2016.
- [31] A. P. Vlasyuk, R. V. Kochan, V. V. Zhukovsky, and N. A. Zhukovska, “Mathematical and computer modeling of contaminant migration to filter trap in two-dimensional nonlinear case,” *18th International Multidisciplinary Scientific Geosconference SGEM 2018*, vol. 18, no. 2.2, pp. 293–300, 2018.
- [32] А. П. Власюк and В. В. Жуковский, “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"*, pp. 20–22, 2018.

ЗМІСТ

ВСТУП

РОЗДІЛ 1. Основні математичні моделі процесу масопереносу при фільтрації сольових розчинів в каталітичних пористих середовищах	33
1.1. Актуальність питання	33
1.2. Огляд наукової літератури з математичного моделювання процесу масопереносу в каталітичних пористих середовищах	38
1.3. Фізичні закони, що описують процеси масопереносу при фільтрації сольових розчинів в каталітичних пористих середовищах	42
1.4. Експериментальні дослідження деяких параметрів фільтрації сольових розчинів	44
1.5. Математичні моделі досліджуваних процесів	47
1.5.1. Вихідні диференціальні рівняння та залежності	47
1.5.2. Початкові та граничні умови	49
1.6. Огляд математичних моделей масопереносу в мікро- та наносередовищах	51
1.6.1. Математична модель дифузії в гранулах адсорбента	51
1.6.2. Математична модель дифузії в біпористих частинках	53
1.6.3. Математична модель дворівневого однокомпонентного адсорбційного масопереносу в каталітичному середовищі частинок мікропористої структури	55
1.6.4. Математична модель міграції забруднених речовин при фільтрації підземних вод в каталітичному пористому середовищі з пастками	58
1.6.5. Математична модель міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод в каталітичному пористому	61

середовищі в нелінійному випадку

1.6.6. Математична модель міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод в каталітичному пористому середовищі в нелінійному випадку та неізотермічних умовах 64

1.7. Аналіз програмних продуктів комп'ютерного моделювання підземних процесів 66

1.8. Висновки до розділу 1 75

РОЗДІЛ 2. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод у каталітичних пористих середовищах в лінійній постановці 78

2.1. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтрувувача у каталітичних пористих середовищах в ізотермічних умовах 78

2.1.1. Постановка задачі та її математична модель 78

2.1.2. Чисельний розв'язок крайової задачі 81

2.1.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз 86

2.2. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтрувувача у каталітичних пористих середовищах в неізотермічних умовах 90

2.2.1. Постановка задачі та її математична модель 90

2.2.2. Чисельний розв'язок крайової задачі 94

2.2.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз 101

2.3. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтрувувача у каталітичних пористих середовищах з пастками 104

2.3.1. Постановка задачі та її математична модель	104
2.3.2. Чисельний розв'язок крайової задачі	107
2.3.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз	108
2.4. Висновки до розділу 2	113

РОЗДІЛ 3. Математичне та комп'ютерне моделювання міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод у каталітичних пористих середовищах в рамках нелінійної одновимірної моделі 116

3.1. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтр-вловлювача у каталітичних пористих середовищах в ізотермічних умовах	116
---	-----

3.1.1. Постановка задачі та її математична модель	116
---	-----

3.1.2. Чисельний розв'язок крайової задачі	118
--	-----

3.1.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз	122
--	-----

3.2. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтр-вловлювача у каталітичних пористих середовищах в неізотермічних умовах	126
---	-----

3.2.1. Постановка задачі та її математична модель	126
---	-----

3.2.2. Методика побудови чисельного розв'язку	129
---	-----

3.2.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз	136
--	-----

3.3. Висновки до розділу 3	142
----------------------------	-----

РОЗДІЛ 4. Математичне та комп'ютерне моделювання двовимірної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до системи горизонтальних фільтрів-вловлювачів у каталітичному пористому середовищі 144

4.1. Постановка задачі та її математична модель	144
---	-----

4.2. Чисельний розв'язок крайової задачі	147
--	-----

4.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз	159
4.4. Висновки до розділу 4	166
РОЗДІЛ 5. Проектування та розробка програмного комплексу NanoSurface	169
5.1. Архітектура розробленого програмного комплексу NanoSurface	169
5.1.1. Ієрархія класів основних математичних моделей NanoSurface	169
5.1.2. Архітектурний патерн для розділення логіки роботи і користувацького інтерфейсу	172
5.1.3. Користувацький інтерфейс програмного комплексу NanoSurface	173
5.1.4. Інструментарій розробника програмного забезпечення для комп'ютерного моделювання	176
5.1.5. Порівняльна характеристика вихідного коду програмних комплексів	178
5.2. Верифікація програмного коду	179
5.2.1. Постановка тестової задачі	180
5.2.2. Математична модель процесу	181
5.2.3. Аналітичний розв'язок	182
5.2.4. Чисельний розв'язок	183
5.2.5. Порівняльні результати комп'ютерного моделювання з аналітичним розв'язком	187
5.3. Застосування паралельних обчислень	188
5.3.1. Актуальність паралельних обчислень	188
5.3.2. Постановка завдання	189
5.3.3. Ефективність паралельних обчислень	190
5.3.4. Особливості реалізації паралельних обчислень та їх аналіз	193

5.4. Висновки до розділу 3	197
ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ	200
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	203
ДОДАТКИ	237
Додаток А. Довідки про впровадження результатів	238
Додаток Б. Список опублікованих праць за темою дисертації	243
Додаток В. Відомості про апробацію результатів дисертації	248
Додаток Г. Результати чисельних експериментів	250

ВСТУП

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 електричного струму. 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 у ґрунтах в неізотермічних умовах.

На основі цього побудовано нові та оновлено існуючі математичні моделі процесів фільтрації сольових розчинів у 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 Національного університету водного господарства та природокористування, а саме:

1. «Математичне та комп'ютерне моделювання нелінійних фізико-хімічних процесів гідромеханіки в багатокomпонентних середовищах пористої на нанопористої структури» (№ ДР 0113U004052);
2. «Математичне та комп'ютерне моделювання фізико-хімічних процесів підземної гідромеханіки під впливом природних, техногенних і соціальних факторів» (№ ДР 0110U000816);
3. «Математичне та комп'ютерне моделювання складних фізико-хімічних процесів підземної гідромеханіки природного та техногенного характеру» (№ ДР 0114U001148);
4. «Інформаційне забезпечення розвитку конкурентоспроможного органічного сільського господарства України в умовах євроінтеграції» (№ ДР 0117U001987).

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 у каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури.

2. Побудувати нові та оновити існуючі математичні моделі масопереносу сольових розчинів при фільтрації підземних вод у 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 тепло- та масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури.

Методи дослідження. Для побудови математичних моделей використано підходи механіки пористого середовища, теорії фільтрації, тепломасопереносу 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 різницеві схеми для рівнянь параболічного типу, що містять першу похідну, метод прогонки з використанням паралельних обчислень.

Наукова новизна одержаних результатів:

- 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 15.11.2016 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 всього 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, 2]; постановка задачі, побудова та дослідження лінійних, нелінійних математичних моделей в одновимірному та двовимірному випадках [2–4]; оптимізація чисельних методів із використанням паралельних обчислень [5, 6]; верифікація математичної моделі внутрішньочастинкового масопереносу [7]; проектування та розробка програмного комплексу NanoSurface [8, 9]. Робота [10] 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 Рудолец, 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 ХХІ столітті» (Рівне, 2013); Всеукраїнських наукових конференціях «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів» (Рівне, 2013, 2015); науково-практичних

конференціях професорсько-викладацького складу Національного університету водного господарства та природокористування (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 Національного університету водного господарства та природокористування; 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, із них: 9 статей (серед яких 1 – одноосібна, 1 – у журналі, що входить до науково-метричної бази даних Scopus і належить до II квартилю (Q2), 6 – у фахових виданнях України за обраною спеціальністю, 2 – у наукових виданнях іноземних держав), 1 авторське свідоцтво на комп'ютерну програму та 22 в інших виданнях, збірниках і матеріалах наукових конференцій.

Структура та обсяг роботи. Дисертація складається зі вступу, п'яти 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 .

РОЗДІЛ 1

ОСНОВНІ МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ПРОЦЕСУ ФІЛЬТРАЦІЇ СОЛЬОВИХ РОЗЧИНІВ В КАТАЛІТИЧНИХ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

1.1. Актуальність питання

Господарська діяльність людини призводить до забруднення підземних ґрунтів та ґрунтових вод органічними та неорганічними забруднюючими речовинами. Це глобальна та надважлива екологічна проблема [11–17]. Забруднення хлорованими органічними забруднювачами (наприклад, трихлоретилен) і важкими металами, такими як свинець і шестивалентний хром є першочерговими проблемами на сайті Superfund: National Priorities List (NPL) [18]. Даний сайт містить список об'єктів небезпечних відходів у Сполучених Штатах Америки, які мають право на фінансування заходів щодо очищення за програмою федерального фінансування. Пов'язані з цим проблеми зі здоров'ям людей призвели до масштабних зусиль щодо виправлення ситуації протягом останніх 30 років. Наприклад, витрати на лікування протягом життя, за оцінками перевищують 2 млрд. доларів США для близько 3000 забруднених територій Міністерства Оборони [19].

Однак відомо, що після Чорнобильської катастрофи ще досі в ґрунтах постраждалих районів України спостерігається забрудненість радіонуклідами. Специфічні природні умови півночі Рівненської області сприяють посиленій міграції радіонуклідів з ґрунту в рослини та по трофічних ланцюгах далі в організм людини. Як наслідок, навіть більше як через 30 років з моменту аварії тут спостерігаються високі рівні забруднення ґрунтів і продуктів харчування. Споживання продукції присадибних господарств, висока доля у раціоні населення ягід і грибів спричиняють високе надходження радіонуклідів в організм людини [20]. З метою прогнозування можливого накопичення радіонуклідів у сільськогосподарських культурах необхідно вивчати їх

міграцію в умовах тривалого зрошення (водонасичений ґрунт), врахувати процеси акумулятивного накопичення радіонуклідів в скелеті ґрунту (так звані пастки), процеси надходження їх в рослини залежно від фізико-хімічних властивостей зрошувальних систем .

Зусилля, націлені на усунення глибокого підземного забруднення (наприклад, викачування і обробка на поверхні), мають обмежений успіх, адже чимало забруднюючих речовин не дуже рухомі в ґрунтах. Багато органічних забруднювачів слабо розчинні у воді і, як правило, залишаються у вигляді окремої рідкої неводної фази (NAPL) під поверхнею землі. Також багато органічних забруднювачів щільніші води (DNAPL) і мігрують вниз у водному горизонті. Важкі метали, такі як Pb (II) або Cr (VI) мають властивість концентруватися в областях поблизу точки їх потрапляння. Часто джерело забруднення буває важко знайти або воно знаходиться дуже глибоко. Тому ані розкопки, ані технологія «pump-and-treat» («викачай-та-очисть») не можуть забезпечити ефективного рішення щодо очистки в плані фінансових та часових затрат [19].

Нанотехнології мають неабиякий потенціал для створення нових та ефективних технологій очистки забруднених зон в підземних водах. Стрімкий прогрес в області нанотехнологій призвів до відкриття нових наночастинок з унікальними фізико-хімічними властивостями [21–24]. Ці властивості можуть бути налаштовані у відповідності до задачі, що вирішується [25]. Наприклад, органічні забруднення стануть активно реагувати з цими частинками задля зменшення утворення небажаних токсичних побічних продуктів. Високоактивні наночастинок, такі як нанорозмірне нуль валентне залізо (NZVI), нанокаталізатори (наприклад, біметалеві наночастинок Au/Pd) або нанорозмірні сорбенти були створені спеціально для усунення органічних та неорганічних забруднень. Їх малий розмір (10-500 нм) дає можливість організувати доставку спеціальних реагентів до місць забруднень, а також

отримати доступ до частинок забруднення, що потрапили в «пастку» решітки ґрунту з малим діаметром пор водоносної матриці. Високомобільні наночастинки з транспортними властивостями можуть рухатися у забрудненій підземній зоні з метою винесення забруднень до спеціальних фільтрів-вловлювачів, тощо [26].

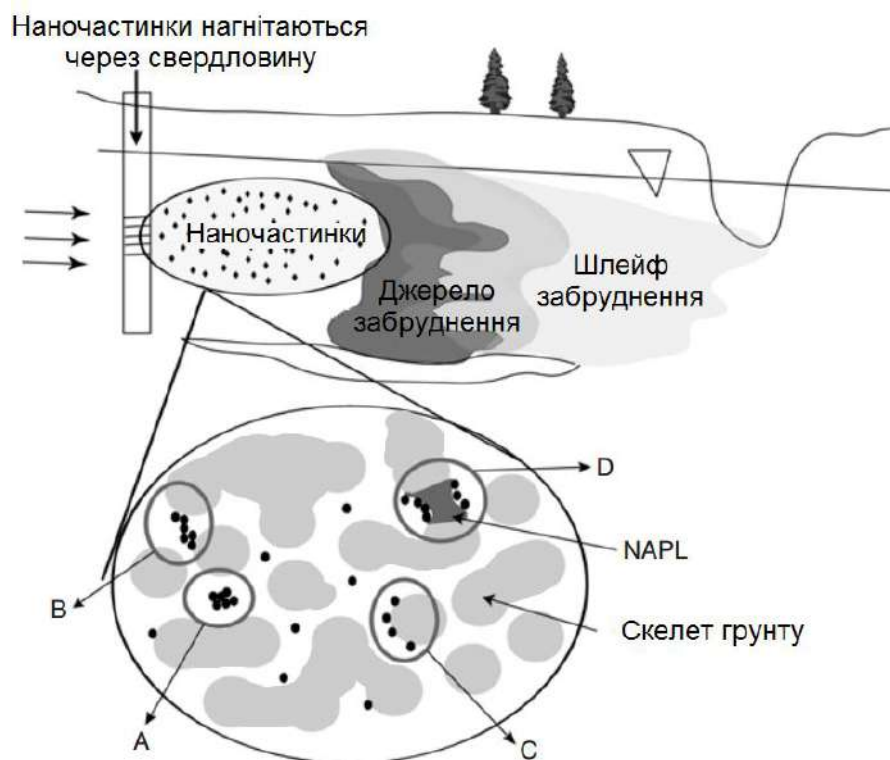


Рис. 1.1. Ілюстрація застосування ін'єкції наночастинок при розповсюдженні DNAPL забруднення: (A) наночастинки можуть об'єднуватися (агломерація) і згодом фільтруватися в скелеті ґрунту (B) або приєднуватися до нього (C), нові методи «полювання» наночастинок на забруднення (D)

За інформацією професора Мельничука В. Г., Рівненщина багата покладами вулканічних туфів: «Вулканічні туфи містять багато мінеральних адсорбентів – смектитів та цеолітів, тому можуть вбирати різні речовини, зокрема, радіоактивно забруднені. У США, до прикладу, безальтернативний проект захоронення їхніх радіоактивних відходів від сотень АЕС – у туфові формації гори Яка (штат Невада) .

Туфи можна також використовувати як молекулярні сита, щоб очищати леткі продукти, стічні води. Вони годяться як добавки до кормів худобі та птиці – сорбують у шлунках шкідливі речовини і тварини швидше набирають вагу. Ці туфи придатні також для виготовлення керамзиту та кераміки. У туфах можна зберігати вологе зерно. Поклади туфів на Рівненщині величезні, але досі не розвідані, на відміну від Хмельниччини, де над ними вже працюють кілька фірм» [27, 28].

Такі природні сорбенти різного мінералогічного та хімічного складу застосовуються для розв'язання різного роду екологічних проблем, зокрема очистки стічних вод, повітря, дезактивації піщаних ґрунтів від радіонуклідів [29–31]. Однією із складних задач вибору сорбентів є їхні змінні фізико-хімічні властивості поверхні. Дослідженням адсорбційно-десорбційних властивостей базальтових туфів Берестовецького родовища присвячені роботи проф. Ракитської Т.Л., в яких описані фізико-хімічні властивості поверхонь твердих речовин, що можуть бути використані для створення каталізаторів екологічного призначення [32–34], а детальний аналіз щодо структури і сорбційних характеристик матеріалів, одержаних на основі природних мінералів та синтетичних неорганічних сорбентів в контексті сорбції радіонуклідів наведено в роботі [31].

Дані каталітичні пористі частинки можуть бути внесені через спеціальну свердловину, що дозволить їм мігрувати завдяки градієнту концентрації від місця ін'єкції до забрудненої зони. Зазвичай це робиться з використанням існуючих свердловин або спеціально пробурених для виконання операцій очищення. Однак, буріння та підготовка навіть невеликої за діаметром (10 см) свердловини достатньо затратна. Тому ударні свердловини створюють пряму альтернативу пробуреним свердловинам і частіше використовуються для процесу очищення, наприклад, із застосуванням наночастинок заліза (рис. 1.2).

Це гідравлічні пристрої, що встановлені на вантажному автомобілі або тракторі. Вони можуть створювати колодязі діаметром від 5 до 20 сантиметрів.

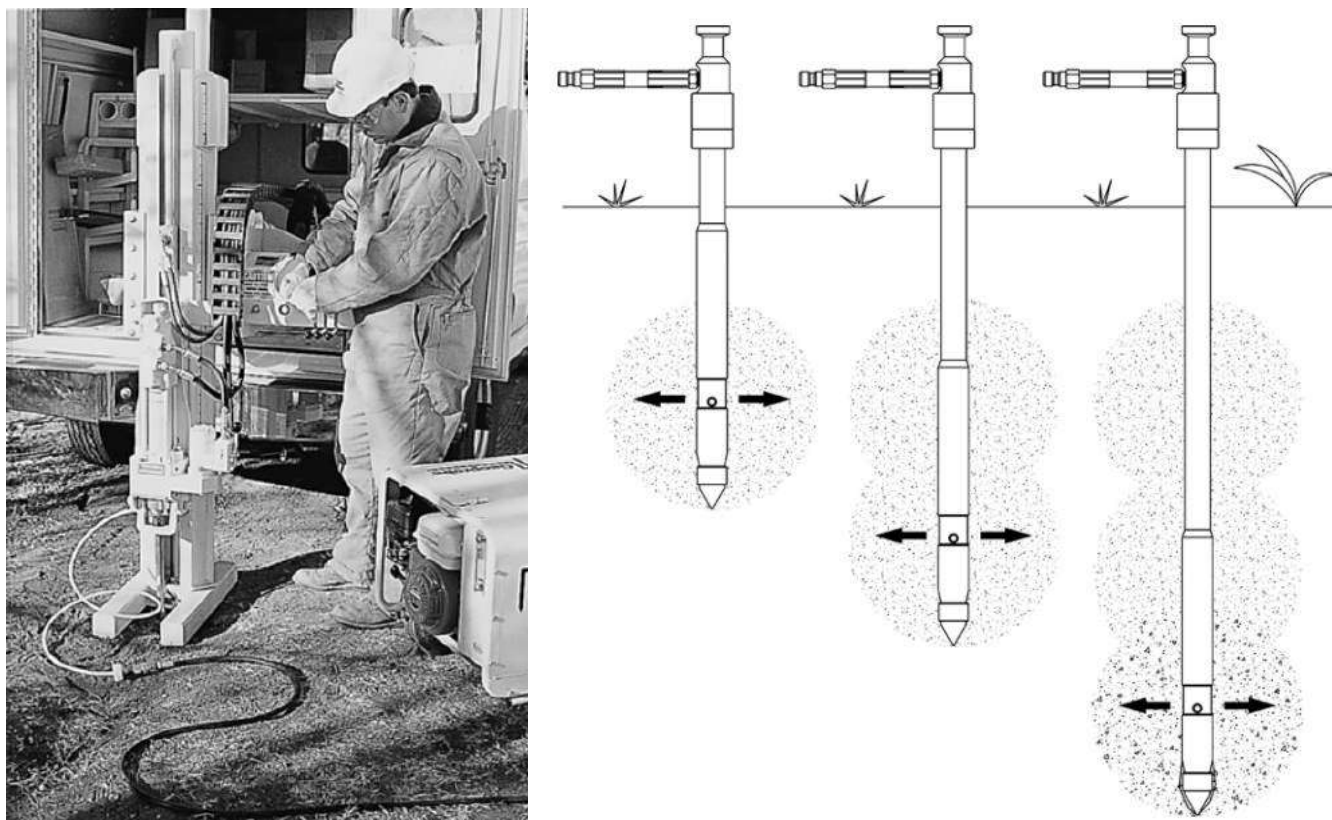


Рис. 1.2. Система внесення наночастинок GeoProbe® Systems, Inc., Salina, Kansas

Разом з тим, меліоративний фонд у гумідній зоні України складає 5,4 млн. га, з яких загальна площа осушених земель становить близько 3,3 млн. га (60%). Значні площі цих земель використовують спеціальні дренажно-модульні системи із вертикальним та горизонтальним дренажем [35]. Такий дренаж представляє собою систему вертикальних або горизонтальних дренажних накопичувачів рідини, розташованих паралельно (рис 1.3). Дані системи можуть бути використані для нагнітання сорбуючих мікро- та наночастинок або як фільтри-вловлювачі вже використаних частинок.

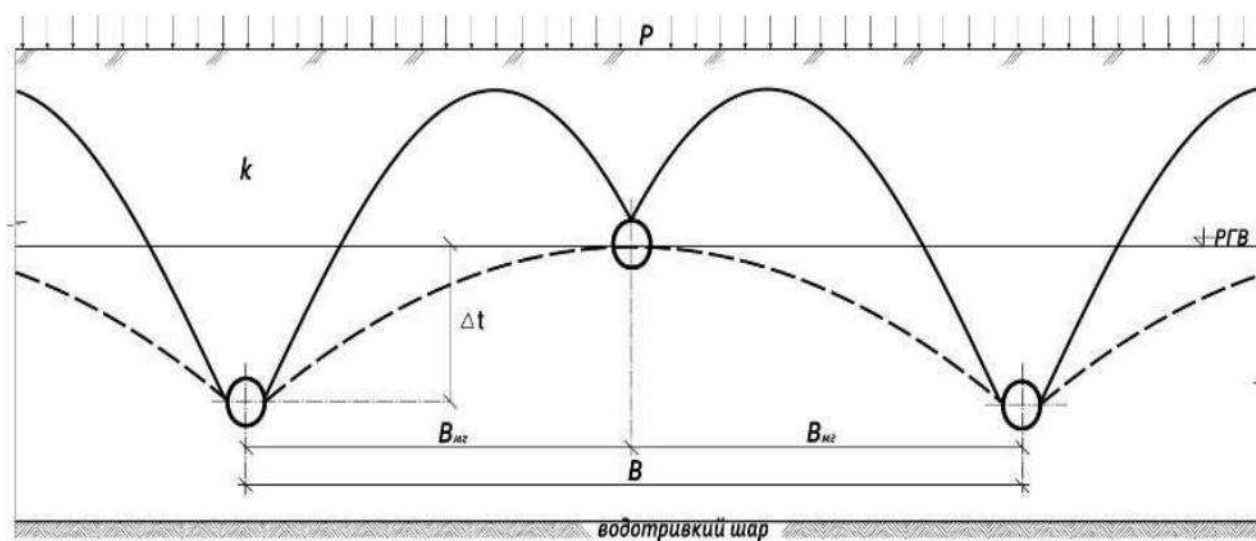


Рис. 1.3. Дренажно-модульна система для регулювання водного режиму

Таким чином, сучасні технології дозволяють пришвидшити процес очищення забруднених територій завдяки застосуванню новітніх технологій меліорації, зокрема фільтрів-вловлювачів, нетрадиційних органічних добрив із сорбуючими мікрочастинками, тощо [36]. Все це призводить до виникнення нового класу задач у сфері математичного та комп'ютерного моделювання техногенних процесів, зокрема, підземної гідромеханіки.

1.2. Огляд наукової літератури з математичного моделювання процесу масопереносу в каталітичних пористих середовищах

Господарська діяльність людини призводить до забруднення біосфери, зокрема родючих земель радіоактивними речовинами. Тому вчені давно шукають механізми для прогнозування впливу на навколишнє середовище радіоактивних осадів та його подальше очищення. Наприклад, повільна міграція радіонуклідів впливає на ріст рослин і це призводить до зовнішнього опромінення [37, 38]. Разом з тим, швидка міграція може призвести до забруднення підземних вод [39]. Тому вивчення даних процесів і їх моделювання є важливим для прогнозування довготермінової поведінки.

Теорія тепломасопереносу при фільтрації в пористих середовищах, що розглядалася в роботах Полубаринової-Кочини П.Я. [40], Веригіна М.М. [41], Сергієнка І.В. [42, 43], Скопецького В.В. [42, 44, 45], Дейнеки В.С. [46, 47], Ляшка І.І. [48], Ляшка С.І. [49], Лаврика В.І. [50, 51], Патрашева О.М. [52], Шержукова Б.С. [41], Ніколаєвського В.М. [53–56], Бочевера Ф.М. [57–61], Кривоноса Ю.Г. [62, 63], Трофимчука О.М. [64–68], Власюка А.П. [69–74], Бомби, А.Я. [51], Булавацького В.М. [75], Мокіна В.Б. [76–80], Савули Я.Г. [81–85], Шинкаренка Г.А. [82], Чернухи О.Ю. [86, 87], Бейка І.В. [88–91], Акіменка В.В. [92–95], Ликова О.В. [96–101], Михайлова Ю. А. [96, 100, 102], Демченка Л.І., Ковальчука П.І. [103], Мартинюка П.М. [104–108], Сафоника А.П. [109–112], Степанченко О.М. [113, 114], Остапчук О.П. [69, 115], Богаєнка В.О. [116–118], Жуковської Н.А. [119, 120] та ін. [121–126], надала математичні описи проблем підземного масопереносу, методи їх розв'язку, а також співставлення результатів з даними спостережень та експериментів [127].

Наступним етапом було врахування дифузії нуклідів, міграція яких представляє радіологічну цікавість. Відповідні математичні моделі розроблені Прохоровим В.М., Токарчуком М.В., Гончаруком В.Є., Власюком А.П., Бураком Я. Й., Чаплею Є.Я., Чернухою О.Ю., Bossew P., Kirchner G. [128–144].

Цікавими також є дослідження Флоріна В.А., Сергієнка І.В., Скопецького В.В., Трофимчука О.М., Калюха А.С., Власюка А.П., Кузла М.Т., Жуковської Н.А., Філатової І.А., Катерини Є.І. та інших вчених з точки зору впливу гідрогеологічних умов на деформаційні процеси ґрунтових середовищ [120, 145–156].

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.

Математичні моделі нестационарного масопереносу в біпористих сорбентах з'явилися в 80-ті роки минулого століття. Перші дослідження були представлені роботою Золотарьова П. П., Дубініна Н. Н. [157]. Надалі цей напрямок було підтримано Волощуком А. М., Уліном В. І. та ін [158]. Паралельно колектив вчених у складі Ruckenstein E., Vaidyanathan A. S, Youngquist G. R опублікував роботу, яка описувала процеси сорбції в біпористих структурах [159]. Порівняльну характеристику двох вищенаведених моделей з докладним описом їх переваг і недоліків провів І. І. Бекман [160].

Ці моделі заклали основи для подальших досліджень. Зокрема, в роботах Conner Wm. C., Fraissard J. P. спостерігається перехід до розгляду процесів дифузії в нанопористих матеріалах [161]. Також вчені Karger J., Ruthven, D. M. внесли значний вклад в розвиток фундаментального розуміння адсорбції і дифузії в цеолітах [162, 163], а також їх промислового застосування. Одним з результатів їхніх 40-річних досліджень була публікація книги «Diffusion in nanoporous materials» [164].

Результати цих досліджень активно культивуються рядом вчених (Сергієнко І.В., Петрик М.Р. Костробій П.П., Хіміч О.М., Кане Д., Бомба А.Я., Михалик Д.М., Присяжнюк О., Фресар Ж та інші) і знаходять застосування при розгляді масопереносу в нанопористих каталізаторах різних технологічних застосувань (розділення газів та рідин, глибока очистка і осушка в хімічній і нафто-газовій промисловості, космічні технології тощо) [165–178]. Методологія моделювання таких систем масопереносу та ідентифікація параметрів в середовищах частинок нанопористої структури, що описується некласичними крайовими задачами з урахуванням взаємовпливів потоків мікро- і макропереносу, структури мікропористих частинок умов та інших визначальних чинників представлена в роботі [169].

Деякі дослідження йдуть ще далі. Вчені розглядають рух колоїдів в мезопористому та мікропористому середовищах, де діаметр пор знаходиться в

діапазоні від 2 до 50 нм та менше 2 нанометрів відповідно [179]. Колоїдами або наночастинками в ґрунті називають природоутворюючі мінеральні фрагменти, гумінові і фульвокислоти, мінеральні осади і мікроорганізми. Їхні розміри лежать в діапазоні від 1 нм до 1000 нм [180]. Транспортні властивості колоїдів у поєднанні з вертикальною міграцією радіонуклідів призводять до різкої зміни міграційної поведінки [181–184]. Такий процес міграції може бути потенційною загрозою для природи і людства у зв'язку з радіо- і хемотоксичністю радіонуклідів.

У неізотермічних колоїдних системах при розгляді процесів сорбції явно виділяють два фактори: температурну залежність процесу адсорбції на поверхні колоїду і залежність коефіцієнта мікродифузії від температури [164, 185, 186]. Також неізотермічні процеси адсорбції та десорбції в нанопористих каталітичних частинках добре описуються ізотермами адсорбції [187]. Надкритичні рідини демонструють яскраво виражену дію закону Арреніуса [188] в мезопорах. Наприклад, на рис. 1.4 показано різку зміну коефіцієнта дифузії в порах при досягненні критичної температури (спрацювала енергія активації). Однак, подальша зміна температури не призводить до кардинальних змін дифузії в порах, в той час як значення дифузії загального потоку стрімко зростають. Це пояснюється тим, що в порах в силу вступає Кнудсенівська дифузія, яка керується розміром пор.

Разом з тим, як вже згадувалося вище, колоїди можуть відігравати роль сорбентів (цеоліти, органічні добрива) [189]. Особливості колоїдів разом з поєднанням сучасних засобів механізації дозволяють пришвидшити процес очищення забруднених територій завдяки застосуванню новітніх технологій меліорації, фільтрів-вловлювачів [190] та інших технологій, що були описані в попередньому підрозділі.

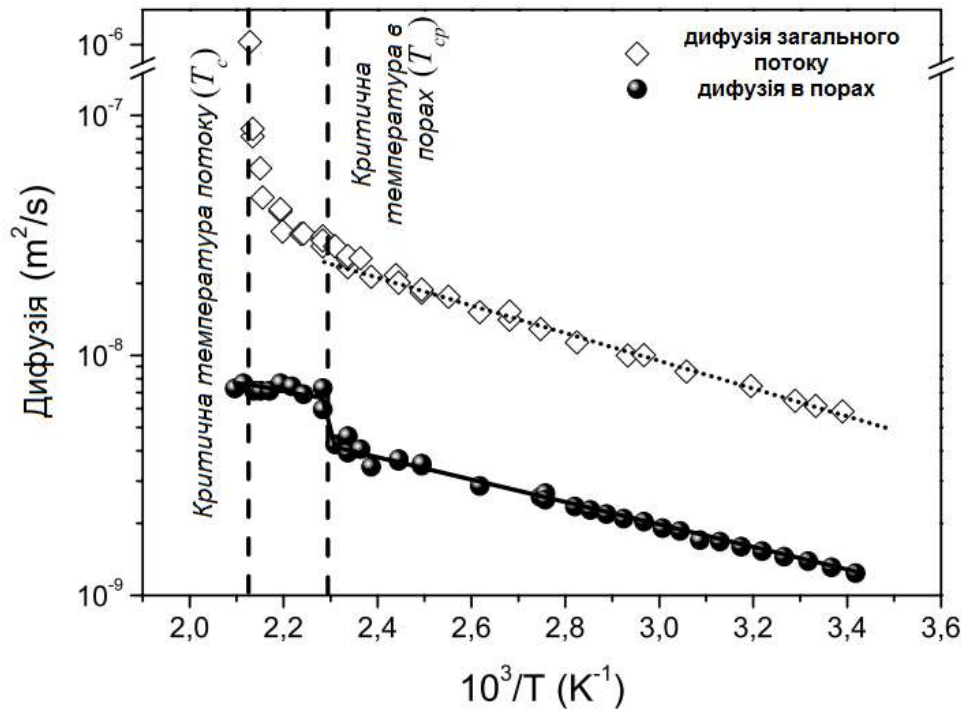


Рис. 1.4. Порівняльна залежність коефіцієнтів дифузії загального потоку та в мезопорах від температури [188]

Оскільки математичне моделювання із застосуванням колоїдів-адсорбентів 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 для забезпечення розвитку ефективних стратегій оцінки ризику та прогнозування очищення ґрунтових масивів.

1.3. Фізичні закони, що описують процеси масопереносу при фільтрації солевих розчинів в каталітичних пористих середовищах

Узагальнений закон Дарсі-Герсеванова на випадок руху солевих розчинів при наявності градієнта температури має вигляд [191]

$$\mathbf{v} - e\mathbf{v} = -\mathbf{K}(c, T)\nabla h + \mathbf{v}_c\nabla c + \mathbf{v}_T\nabla T, \quad (1.1)$$

де e – коефіцієнт пористості ґрунту; \mathbf{K} – коефіцієнт (тензор) фільтрації; h – напір, \mathbf{v}_c , \mathbf{v}_T – коефіцієнти (тензори) хімічного та термічного осмосу відповідно.

В дисертаційній роботі припускається, що швидкість руху твердих частинок ґрунту дорівнює нулю.

Оскільки в неізотермічних умовах має місце явище термодифузії [191] і питомий потік розчинених солей визначається як $\mathbf{q}_c = \mathbf{v}c - \mathbf{D}(c, T)\nabla c - \mathbf{D}_T\nabla T$, рівняння переносу солей в пористому середовищі набуває вигляду (закон Фіка)

$$\nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c) + \nabla \cdot (\mathbf{D}_T\nabla T) - (\mathbf{v}, \nabla c) = n_p \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (1.2)$$

де \mathbf{D} – коефіцієнт (тензор) конвективної дифузії; \mathbf{D}_T – коефіцієнт (тензор) термодифузії; \mathbf{v} – швидкість фільтрації, яка визначається згідно (1.1); n_p – об'єм порового розчину в одиниці об'єму ґрунту; t – час.

Оскільки питомий тепловий потік в ґрунті визначається як [191] $\mathbf{q}_T = \rho c_p \mathbf{v}T - \lambda_T \nabla T$, то рівняння теплоперенесення в пористому середовищі має вигляд (закон Фур'є)

$$\nabla \cdot (\lambda_T \nabla T) - \rho c_p (\mathbf{v}, \nabla T) = c_T \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (1.3)$$

де λ_T – коефіцієнт (тензор) ефективної теплопровідності вологого ґрунту; ρ – густина сольового розчину; c_p – питома теплоємність сольового розчину; c_T – об'ємна теплоємність ґрунту при сталому об'ємі.

Цікавим є той факт, що дифузія в нанопористому середовищі часто є дуже складним процесом на відміну від «звичайної» дифузії згідно закону Фіка в макропросторі. Тому вчені неодноразово звертали на це увагу і піддавали сумніву дію закону Фіка [192]. У зв'язку з тим, що розмір пори сорбуючої наночастинки може наближатися до розміру забруднюючих речовин, то на процес дифузії починають впливати сили взаємодії між стінками пор та

розчиненими речовинами і також Кнудсенівська дифузія. Даний стеричний ефект є важливим і дифузія на нанорівні виступає активаційним процесом, який підтверджується температурною залежністю Арреніуса [161, 188, 193]. Однак все ще залишається багато незрозумілих речей, над якими працюють дослідники зі свого світу.

1.4. Експериментальні дослідження деяких параметрів фільтрації сольових розчинів

В реальних умовах відбувається фільтрація підземних вод, що знаходяться під впливом певних джерел забруднень, зокрема різних солей та ще й під дією температурних факторів.

Детальний огляд робіт з питань експериментальних досліджень залежностей коефіцієнта фільтрації від концентрації солей та температури подано в [191].

Для вивчення фізико-хімічних процесів, що проходять при фільтрації сольових розчинів і встановлення кількісної оцінки їх впливу на проникливість ґрунтів Власюком А. П. та Кузло М. Т. в геотехнічній лабораторії кафедри механіки ґрунтів, основ і фундаментів Національного університету водного господарства та природокористування (НУВГП) було виконано серію експериментів з визначення коефіцієнта фільтрації для піщаних ґрунтів [127, 149]. Фільтруючою рідиною був розчин NaCl з концентрацією від 1,0 до 16 %. Досліди проводились для однорідних кварцових пісків з крупністю фракцій 0,25 мм. Визначення коефіцієнта фільтрації виконувалось на стандартному приладі КФ-00М, а проведення експерименту виконувалось за стандартною методикою у відповідності з ГОСТ 25584-83.

Результати проведених досліджень коефіцієнта фільтрації сольових розчинів в піщаних ґрунтах для одиничного градієнту напору наведено в таблиці 1.1.

Таблиця 1.1. Результати досліджень коефіцієнта фільтрації сольових розчинів в піщаних ґрунтах

$c, \%$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
$K, \text{ м/доба}$	18,4	20,7	25,3	29	30,4	31	23	19,8	18,4
$c, \%$	9	10	11	12	13	14	15	16	
$K, \text{ м/доба}$	17,5	16,1	15,2	13,8	12,9	12,4	11,5	19,2	

Отримані дані експериментів коефіцієнта фільтрації від концентрації сольового розчину оброблені з використанням програмного комплексу для обробки даних експерименту, розробленого на кафедрі прикладної математики НУВГП. Математична обробка результатів експерименту здійснена шляхом поліноміальної апроксимації введених даних з використанням методу найменших квадратів.

В результаті проведених експериментальних досліджень фільтрації сольових розчинів у піщаних ґрунтах отримана наступна залежність коефіцієнта фільтрації від концентрації сольового розчину (рис.1.4):

$$K_1(c) = a_5^1 \cdot c^5 + a_4^1 \cdot c^4 + a_3^1 \cdot c^3 + a_2^1 \cdot c^2 + a_1^1 \cdot c + a_0^1,$$

де $a_5^1 = 5,9404 \cdot 10^{-2}$, $a_4^1 = -1,6703 \cdot 10^{-1}$, $a_3^1 = 1,7051 \cdot 10^{-1}$, $a_2^1 = -7,4311 \cdot 10^{-2}$, $a_1^1 = 1,0563 \cdot 10^{-2}$, $a_0^1 = 1,0054 \cdot 10^{-3}$, $c \in [0,1]$ – безрозмірна величина.

На даний час відомі експериментальні дослідження, в яких вказується на залежність коефіцієнта фільтрації від температури [48, 194].

На рис 1.5. наведені графіки залежностей коефіцієнта фільтрації від температури для каоліну та гумбрину [194]. Як видно, для гумбрину в інтервалі температур від 3^0C до 70^0C коефіцієнт фільтрації зростає на чотири порядки.

Залежність коефіцієнта фільтрації від температури визначалась апроксимацією за методом найменших квадратів результатів експериментів, наведених в [194] для каоліну на нижній межі пластичності

$$K_2(T) = b_5 \cdot T^5 + b_4 \cdot T^4 + b_3 \cdot T^3 + b_2 \cdot T^2 + b_1 \cdot T + b_0,$$

де $b_5 = 1,4154 \cdot 10^{-2}$, $b_4 = -2,6097 \cdot 10^{-2}$, $b_3 = 1,0819 \cdot 10^{-2}$, $b_2 = 1,2844 \cdot 10^{-4}$,
 $b_1 = 1,0404 \cdot 10^{-2}$, $b_0 = 3,0925 \cdot 10^{-3}$, $T \in [0,1]$ – безрозмірна величина.

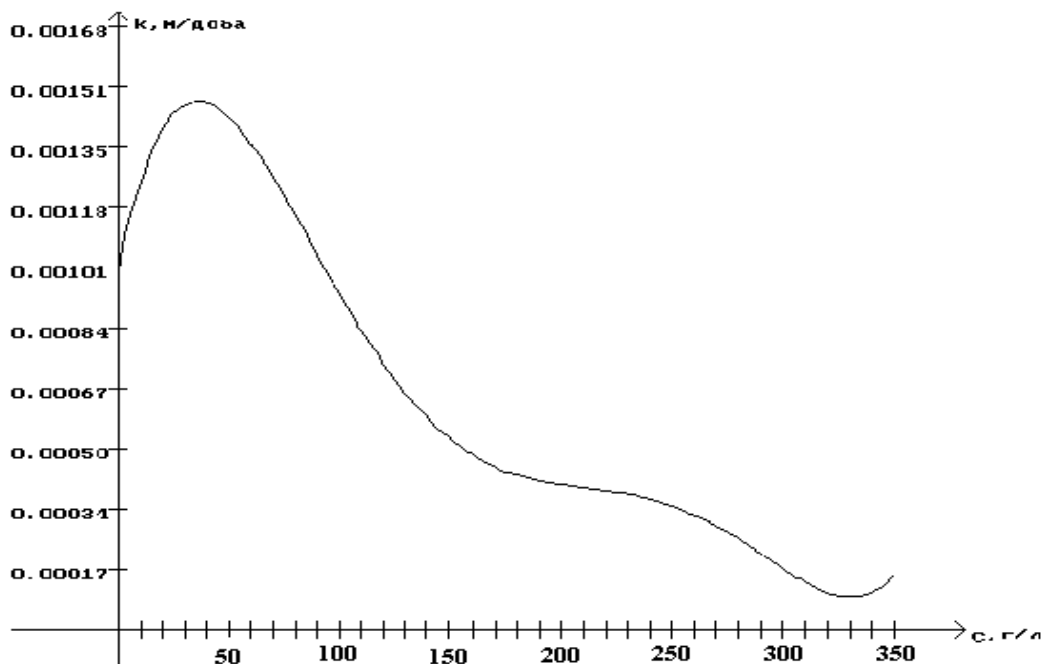


Рис. 1.5. Залежність коефіцієнта фільтрації піщаного ґрунту від концентрації соляного розчину

Оскільки комплексні експериментальні дані щодо одночасної залежності коефіцієнта фільтрації від концентрації соляного розчину та температури відсутні, то можна покласти $K(c, T) = \frac{1}{k_0^2} K_1(c) \cdot K_2(T)$, де k_0 – коефіцієнт фільтрації для чистої води при температурі 20^0C .

Ефективним способом визначення відносної ролі дифузії по макро- або мікропорах є проведення експериментів, в яких варіюються розміри як гранул, так і включень. Змінити розмір гранул при постійному розмірі включень досить просто. Однак, слід дотримуватися обережності при виробництві гранул з мікросферами різних розмірів, оскільки в реальності дифузійні властивості мікросфер залежать від їх розмірів.

Таблиця 1.2. Типові коефіцієнти дифузії і розміри частинок

Дифузія в макропорах, D_a	10^{-2} см ² /сек 10^{-2} - 10^{-7} см ² /сек	Дифузія неадсорбуючих газів Дифузія рідин, дифузія адсорбуючих газів
Дифузія в мікропорах, D_i	10^{-3} см ² /сек 10^{-4} - 10^{-10} см ² /сек 10^{-6} - 10^{-15} см ² /сек	Дифузія неадсорбуючих газів Дифузія та сорбція в газах та рідинах Дифузія в полімерах
Радіус макросфери, R_a	$5 \cdot 10^{-3}$ - $2 \cdot 10^{-1}$ см	Кульки або гранули адсорбенту
Радіус мікросфери, R_i	10^{-4} - 10^{-5} см	Порошки

1.5. Математичні моделі досліджуваних процесів

1.5.1. Вихідні диференціальні рівняння та залежності

Питомий потік розчинених солей з врахуванням термодифузії має вигляд

$$\mathbf{q}_c = \mathbf{v}c_1 - \mathbf{D}(c_1, T)\nabla c_1 - \mathbf{D}_T\nabla T,$$

де $c_1(\mathbf{X}, t)$, $T(\mathbf{X}, t)$ – концентрація та температура сольового розчину відповідно в точці \mathbf{X} в момент часу t ; \mathbf{D} – коефіцієнт (тензор) конвективної дифузії; \mathbf{D}_T – коефіцієнт (тензор) термодифузії; \mathbf{v} – швидкість фільтрації.

Диференціальне рівняння масопереносу в неізотермічних умовах

$$\nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_1) + \nabla \cdot (\mathbf{D}_T \nabla T) - (\mathbf{v}, \nabla c_1) = \sigma \frac{\partial c_1}{\partial t},$$

n_p – об’єм порового розчину в одиниці об’єму ґрунту; t – час.

Питомий тепловий потік в ґрунті

$$\mathbf{q}_T = \rho c_p \mathbf{v} T - \lambda_T \nabla T,$$

де λ_T – коефіцієнт (тензор) ефективною теплопровідності вологого ґрунту; ρ – густина порового сольового розчину; c_p – питома теплоємність порового сольового розчину.

Диференціальне рівняння теплоперенесення має вигляд

$$\nabla \cdot (\lambda_T \nabla T) - \rho c_p (\mathbf{v}, \nabla T) = c_T \frac{\partial T}{\partial t},$$

де c_T – об’ємна теплоємність ґрунту при сталому об’ємі.

Узагальнений закон Дарсі на випадок руху сольових розчинів

$$\mathbf{v} - e \mathbf{v} = -\mathbf{K}(c_1) \nabla h + \mathbf{v}_c \nabla c_1,$$

де e – коефіцієнт пористості ґрунту; \mathbf{K} – коефіцієнт (тензор) фільтрації; h – напір, \mathbf{v}_c – коефіцієнт (тензор) хімічного осмосу.

Рівняння нерозривності для сольового розчину води в пористому середовищі

$$\operatorname{div} \mathbf{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0.$$

В середовищі мікропористої структури питомий потік розчинених солей виражається як

$$\mathbf{Q}_0 = -D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} - D_T \frac{\partial T}{\partial r}.$$

Рівняння балансу маси

$$\frac{\partial Q_0}{\partial x} + \frac{\partial q}{\partial t} = 0.$$

Підставляємо в рівняння балансу значення Q_0 з рівняння потоку

$$\frac{\partial \left(-D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} - D_T \frac{\partial T}{\partial r} \right)}{\partial x} + \frac{\partial q}{\partial t} = 0.$$

Після перетворень отримуємо рівняння в декартовій системі координат

$$\frac{\partial \left(D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_T \frac{\partial T}{\partial r} \right)}{\partial x} = \frac{\partial q}{\partial t}.$$

В полярній системі координат дане рівняння набуде наступного вигляду:

$$D_0(q) \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right) + D_T \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \frac{\partial q}{\partial t}.$$

1.5.2. Початкові та граничні умови

Початкові умови для концентрацій $c_1(\mathbf{X}, t)$, $c_2(\mathbf{X}, t)$, $c_3(\mathbf{X}, t)$, $q(\mathbf{X}, r, t)$ та температури $T(\mathbf{X}, t)$ мають вигляд

$$c_1(\mathbf{X}, 0) = \tilde{C}_1^0(\mathbf{X}), \quad c_2(\mathbf{X}, 0) = \tilde{C}_2^0(\mathbf{X}), \quad c_3(\mathbf{X}, 0) = \tilde{C}_3^0(\mathbf{X}),$$

$$q(\mathbf{X}, r, 0) = \tilde{Q}^0(\mathbf{X}, r), \quad T(\mathbf{X}, 0) = \tilde{T}_0(\mathbf{X}), \quad \mathbf{X} \in \Omega,$$

де $\tilde{C}_1^0(\mathbf{X})$, $\tilde{C}_2^0(\mathbf{X})$, $\tilde{C}_3^0(\mathbf{X})$, $\tilde{Q}^0(\mathbf{X})$, $\tilde{T}_0(\mathbf{X})$ – задані функції.

Граничні умови для напору, концентрації сольового розчину та температури:

Межа (частина межі) області Ω дренована

$$h(\mathbf{X}, t)|_{\mathbf{X} \in \Gamma} = \tilde{H}_1(\mathbf{X}, t), \quad \mathbf{X} \in \Gamma, \quad \text{де } \tilde{H}_1(\mathbf{X}, t) \text{ – задана функція.}$$

1) $c_1(\mathbf{X}, t)|_{\mathbf{X} \in \Gamma} = \tilde{C}_1(\mathbf{X}, t)$, $\mathbf{X} \in \Gamma$, де $\tilde{C}_1(\mathbf{X}, t)$ – задана функція;

2) умова швидкого виносу розчинених солей в неізотермічних умовах

$$(\mathbf{D} \nabla c_1 + \mathbf{D}_T \nabla T, \mathbf{n})|_{\mathbf{X} \in \Gamma} = 0, \quad \mathbf{X} \in \Gamma;$$

3) умова Данквертса в неізотермічних умовах

$$\left[(\mathbf{D}\nabla c_1 + \mathbf{D}_T\nabla T, \mathbf{n}) - (\mathbf{v}, \mathbf{n})(c_1(\mathbf{X}, t) - \tilde{C}_1) \right]_{\mathbf{X} \in \Gamma} = 0, \mathbf{X} \in \Gamma;$$

де \tilde{C}_1 – задана функція, \mathbf{n} – вектор напрямних косинусів зовнішньої нормалі до межі Γ .

Межа (частина межі) Γ області Ω непроникна

$(\mathbf{v}, \mathbf{n})|_{\mathbf{X} \in \Gamma} = 0, \mathbf{X} \in \Gamma$ – гранична умова непроникності для швидкості фільтрації.

$c(\mathbf{X}, t)|_{\mathbf{X} \in \Gamma} = C_m, \mathbf{X} \in \Gamma$ – непроникність зумовлюється заляганням пласту солі.

$$\left[\mathbf{D}(\nabla c, \mathbf{n}) + \left(\frac{D}{\delta} - (\mathbf{v}, \mathbf{n}) \right) \cdot c \right]_{\mathbf{X} \in \Gamma} = -\frac{D \cdot C_m}{\delta}, \mathbf{X} \in \Gamma$$
 – нова балансна гранична

умова.

$(\mathbf{D}\nabla c + \mathbf{D}_T\nabla T, \mathbf{n})|_{\mathbf{X} \in \Gamma} = 0, \mathbf{X} \in \Gamma$ – непроникність зумовлюється заляганням кам'яного пласта або ґрунту з набагато меншим коефіцієнтом фільтрації.

Для концентрації $q(\mathbf{X}, r, t)$ в мікро- і наночастинках може задаватись так:

$$q(\mathbf{X}, r, t)|_{r=R} = k \cdot c(\mathbf{X}, t) - \text{умова рівноваги на поверхні сферичних частинок,}$$

де $k = \frac{q_\infty}{c_\infty}$ – константа адсорбційної рівноваги.

$$q(\mathbf{X}, r, 0)|_{r=R} = Q_0 - \text{початкова умова.}$$

Граничні умови для температури

1) задано температуру на межі (частині межі) Γ області Ω . Тоді для температури задається гранична умова 1-го роду

$$T(\mathbf{X}, t)|_{\mathbf{X} \in \Gamma} = \tilde{T}_1(\mathbf{X}, t), \mathbf{X} \in \Gamma,$$

де $\tilde{T}_1(\mathbf{X}, t)$ – відома функція;

2) межа (частина межі) Γ області Ω є непроникною для фільтраційного потоку і величина теплового потоку є відомою. Тоді маємо граничну умову 2-го роду для температури

$$(\lambda_T \nabla T, \mathbf{n})|_{\mathbf{X} \in \Gamma} = Q_T(\mathbf{X}, t), \quad \mathbf{X} \in \Gamma,$$

де $Q_T(\mathbf{X}, t)$ – величина теплового потоку;

3) відома величина теплового потоку на межі (частині межі) Γ області Ω . Тоді для температури задається гранична умова третього роду

$$(\mathbf{q}_T, \mathbf{n})|_{\mathbf{X} \in \Gamma} = Q_T(\mathbf{X}, t), \quad \mathbf{X} \in \Gamma;$$

4) межа (частина межі) Γ області Ω теплоізольована. В даному випадку задається однорідна гранична умова 3-го роду

$$(\mathbf{q}_T, \mathbf{n})|_{\mathbf{X} \in \Gamma} = 0, \quad \mathbf{X} \in \Gamma.$$

1.6. Огляд математичних моделей масопереносу в міро- та наносередовищах

1.6.1. Математична модель дифузії в гранулах адсорбента

У 80-ті роки минулого століття Золотарьовим П. П. та Дубініним М. М. [157] розроблено одну з базових математичних моделей, що описує процес нестационарної дифузії в каталітичних пористих сорбентах. Згідно неї, феноменологічні рівняння внутрішньої дифузії в гранулах адсорбенту записуються у вигляді

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(D_i, \nabla, c), \quad (1.4)$$

$$a = f(c), \quad (1.5)$$

де c і a – локальні концентрації дифузанта в рухомій і нерухомій (адсорбованій) фазах відповідно; (1.5) – рівняння ізотерми адсорбції, D_i – коефіцієнт внутрішньої дифузії, ∇ – оператор набла (оператор Гамільтона).

В допущенні наявності локальної рівноваги між фазами в кожній макроточці адсорбенту та того факту, що рівність (1.5) справедлива для однопористих адсорбентів (силікагелі, алюмогелі і деякі типи активного вугілля), остаточно математична модель (1.4)-(1.5) після деяких перетворень матиме наступний вигляд.

Будемо вважати, що сферичні гранули адсорбенту з радіусом R містять сферичні мікропористі утворення з радіусом r_0 . Тоді рівняння внутрішньої дифузії для лінійних ізотерм адсорбції записуються у вигляді

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial t} = D_i \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c}{\partial r} \right), \quad (1.6)$$

$$a = k_1 c + \frac{A k_2^*}{\tau} \int_0^t c(r, \sigma) \Psi \left(\frac{t - \sigma}{\tau} \right) d\sigma, \quad (1.7)$$

$$\Psi(\theta) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\pi^2 n^2 \theta). \quad (1.8)$$

Тут: $c(r, t)$ – концентрація дифузанта в рухомій фазі, a – кількість дифузанта в мікророзчиненні з центром в точці r (усереднення ведеться по нескінченно малому об'ємі $\Delta\Omega$ речовини гранули); r – радіальна координата, відраховується від центру гранули; $\tau = \frac{r_0^2}{D_i}$, – характерний час встановлення рівноваги в

мікропористому включенні; k_1 і k_2^* – коефіцієнти Генрі для ізотерм відповідно на стінках вторинних пор і в мікропорах; $A = 4\pi r_0 N$, N – середнє число мікропористих утворень в об'ємі гранули; $A/3 = \varepsilon$; ε – відносний об'єм транспортних пор.

Крайові умови для (1.6)-(1.8) наступні:

при $t=0$ гранула вільна від дифузанта

$$c(r, 0) = 0, a(r, 0) = 0, \quad (1.9)$$

а на границі гранули і мікропори

$$c(R, t) = c_0, r^2 \left(\frac{\partial c}{\partial r} \right)_{r=r_0} = 0. \quad (1.10)$$

1.6.2. Математична модель дифузії в біпористих частинках

В роботі [159] Ruckenstein E., Vaidyanathan A. S, та Youngquist G. R розроблена наступна математична модель, що описує процеси сорбції в біпористих структурах [160].

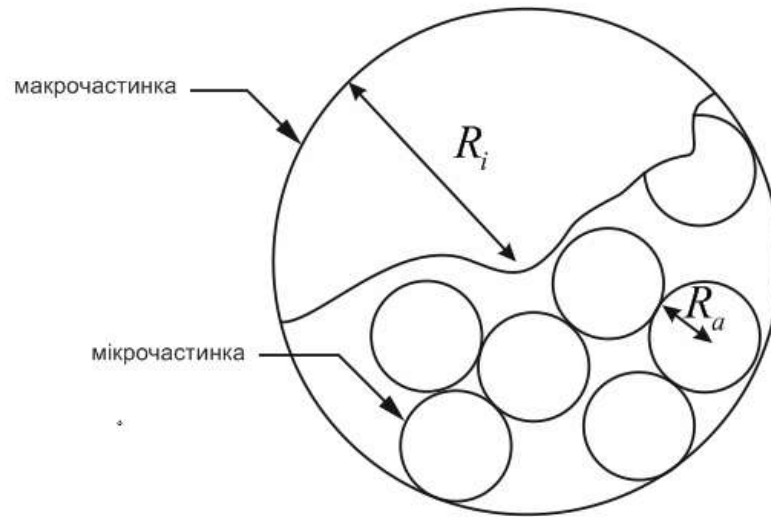


Рис. 1.6. Гранула біпористого сорбента

$$\frac{D_a}{r_a^2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left[r_a^2 \frac{\partial c_a}{\partial r_a} \right] = \left[1 + \frac{\Gamma_a S_a}{\xi_a} \right] \frac{\partial c_a}{\partial t} + \xi D_i \left(\frac{\partial c_i}{\partial r_i} \right)_{r_i=R_i}, \quad (1.11)$$

$$\frac{D_i}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left[r_i^2 \frac{\partial C_i}{\partial r_i} \right] = \left[1 + \frac{\Gamma_i S_i}{\xi_i} \right] \frac{\partial C_i}{\partial t}. \quad (1.12)$$

Початкові і граничні умови мають наступний вигляд:

$$\begin{aligned} c_a(0, r_a) &= C_{a0} = C_{i0} = c_i(0, r_i) = C_{ia} = C_{a0}, \\ c C_a(t, R_a) &= C_{a\infty} = C_{i\infty}, \quad c_i(t, R_i) = c_a(t, r_a), \\ \frac{\partial c_a}{\partial r_a}(t, 0) &= 0, \quad \frac{\partial c_i}{\partial r_i}(t, 0) = 0. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Тут: c_a – концентрація дифузанта в мікропорах, моль/см³; c_{a0} – концентрація дифузанта в макропорах при $t = 0$, моль/см³; $c_{a\infty}$ – концентрація дифузанта в макропорах при рівновазі, моль/см³; c_i – концентрація дифузанта в мікропорах, моль/см³; c_{i0} – концентрація дифузанта в мікропорах при $t = 0$, моль/см³; $c_{i\infty}$ – концентрація дифузанта в мікропорах при рівновазі, моль/см³; c_{sa} – концентрація дифузанта, адсорбованого в макропорах, моль/см³; c_{si} – концентрація дифузанта, адсорбованого в мікропорах, моль/см³; D_a – коефіцієнт дифузії по макропорам, см²/сек; D_i – коефіцієнт дифузії по мікропорах, см²/сек; D_{ka} – ефективний коефіцієнт дифузії;

$$D_a = \frac{D_a}{1 + \frac{\Gamma_a S_a}{\xi_a}} - \text{ефективний коефіцієнт по макропорам, см}^2/\text{сек};$$

$$D_i = \frac{D_a}{1 + \frac{\Gamma_i S_i}{\xi_i}} - \text{ефективний коефіцієнт по мікропорам, см}^2/\text{сек};$$

Γ_a – константа в законі Генрі для адсорбції в макропорах, см³/см²; Γ_i – константа в законі Генрі для адсорбції в мікропорах, см³/см²; M_a – поглинання макропорами до часу t ; $M_{a\infty}$ – поглинання макропорами при рівновазі; M_i – поглинання мікропорами до часу t ; $M_{i\infty}$ – поглинання мікропорами при рівновазі; M_t – загальне поглинання до часу t ; M_∞ – загальне поглинання при рівновазі.

Дана математична модель (1.11)-(1.13) в безрозмірних змінних прийме наступний вигляд:

$$\frac{1}{\eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\eta^2 \frac{\partial \theta_a}{\partial \eta} \right] = \frac{\partial \theta_a}{\partial \tau} + \beta \left(\frac{\partial \theta_i}{\partial \gamma} \right)_{\gamma=1}, \quad (1.14)$$

$$\frac{\alpha}{\gamma^2} \frac{\partial}{\partial \gamma} \left[\gamma^2 \frac{\partial \theta_i}{\partial \gamma} \right] = \frac{\partial \theta_i}{\partial \tau}, \quad (1.15)$$

$$\begin{aligned}\theta_a(0, \eta) = 0, \theta_i(0, \gamma) = 0, \theta_a(\tau, 1) = \theta_a(\tau, \eta), \\ \frac{\partial \theta_a(\tau, 0)}{\partial \eta} = 0, \frac{\partial \theta_i(\tau, 0)}{\partial \gamma} = 0.\end{aligned}\quad (1.16)$$

Тут:

$$\begin{aligned}\theta_a = \frac{c_a - c_{a0}}{c_{a\infty} - c_{a0}}, \theta_i = \frac{c_i - c_a}{c_{i\infty} - c_{i0}}, \eta = \frac{r_0}{R_a}, \gamma = \frac{r_i}{R_i}, \\ \tau = \frac{D_a t}{\left(1 + \frac{S_0 \Gamma_a}{\xi_a}\right) R_a^2} = \frac{t}{T},\end{aligned}\quad (1.17)$$

і параметри

$$\alpha = \frac{R_a^2 D_i \left(1 + \frac{S_a \Gamma_a}{\xi_a}\right)}{R_i^2 D_i \left(1 + \frac{S_i \Gamma_i}{\xi_i}\right)} = \frac{D_{ki} R_a^2}{D_{ka} R_i^2},\quad (1.18)$$

$$\beta = \frac{\delta D_i R_a^2}{R_i D_a} = \frac{3(1 - \varepsilon_a) \varepsilon_i R_a^2 D_i}{\varepsilon_a R_i^2 D_a},\quad (1.19)$$

де D_k – коефіцієнт дифузії при класичному механізмі дифузії.

1.6.3. Математична модель дворівневого однокомпонентного адсорбційного масопереносу в каталітичному середовищі частинок мікропористої структури

Петриком М.Р. та його учнями започатковано та розвинено математичне моделювання дифузійного масопереносу в каталітичних середовищах частинок мікропористої структури. Зокрема, розглянуто задачі моделювання процесів адсорбції в мікропористих цеолітних каталізаторах, що використовуються в технологіях сепарації та очищення газів в хімічній та нафтопереробній галузях, в інженерній екології і т.п. Каталітичне середовище, в якому протікає процес, представляється у вигляді системи мікропористих частинок та системи міжчастинкових порожнин (макропор) і відповідно до цього масоперенос

розглядається як складна система, що враховує взаємозв'язки між внутрішніми градієнтами концентрацій всередині частинок та зовнішніми градієнтами концентрацій міжчастинкового простору [169, 195, 196].

Схема розглядуваного процесу адсорбції наведена на рис. 1.7.

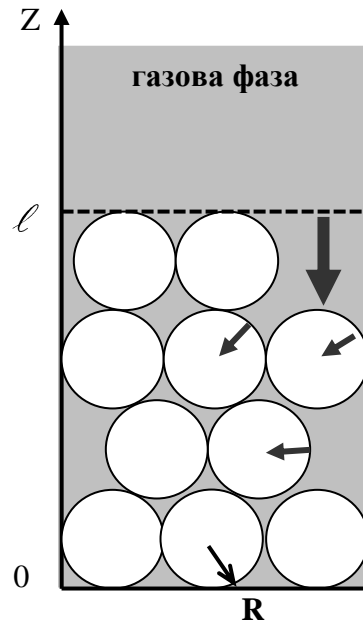


Рис. 1.7. Схема процесу однокомпонентного адсорбційного масопереносу

Математична модель дворівневого однокомпонентного адсорбційного масопереносу в каталітичному середовищі частинок мікропористої структури представляється у вигляді крайової задачі: побудувати розв'язок системи диференціальних рівнянь

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{\text{inter}} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \theta_{\text{intra}} \left(\frac{\partial q}{\partial r} \right)_{r=R}, \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_{\text{intra}} \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad (1.21)$$

в області $\Omega = \{(t, r, z) : t > 0, 0 < r < R, 0 < z < l\}$,

з початковими умовами

$$c(t, z)|_{t=0} = 0, \quad q(t, r, z)|_{t=0} = 0, \quad (1.22)$$

та крайовими умовами

$$c(t, z)|_{z=l} = c_{\infty}, \quad q(t, r, z)|_{r=R} = K \cdot c(t, z), \quad (1.23)$$

$$\left. \frac{\partial c(t, z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial q(t, r, z)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0. \quad (1.24)$$

Тут прийняті такі позначення:

$c(t, z)$ – концентрація адсорбенту в макропорах (молекул/см³); D_{inter} – коефіцієнт дифузії в макропорах (м²/с); D_{intra} – коефіцієнт дифузії в мікропорах (м²/с), $q(t, r, z)$ – концентрація адсорбенту в мікропорах

(молекул/см³); $\theta_{intra} = 3 \frac{(1 - \varepsilon_{inter}) D_{intra}}{\varepsilon_{inter} R}$ – коефіцієнт впливу

внутрішньогчастинкового масопереносу на міжчастинковий; ε_{intra} – коефіцієнт пористості середовища; R – радіус частинки (см); ℓ – довжина пласту середовища (см); K – константа адсорбційної рівноваги.

Рівняння (1.20) моделі описує масоперенос в макропорах (міжчастинковий простір каталітичного середовища) протягом часу t і вздовж координати z товщини шару адсорбенту, а рівняння (1.21) описує масоперенос в мікропорах частинки (внутрішньогчастинковий простір). Взаємозв'язок між масопереносом в мікро- та макропорах визначається компонентою в правій частині диференціального рівняння (1.20), а також рівнянням рівноваги між концентраціями на поверхні частинки та міжчастинкового простору, яка визначається крайовою умовою (1.23).

1.6.4. Математична модель міграції забруднених речовин при фільтрації підземних вод в каталітичному пористому середовищі з пастками

Розглянемо процес очищення горизонтального шару ґрунту від забруднених речовин при фільтрації підземних вод (рис. 1.8).

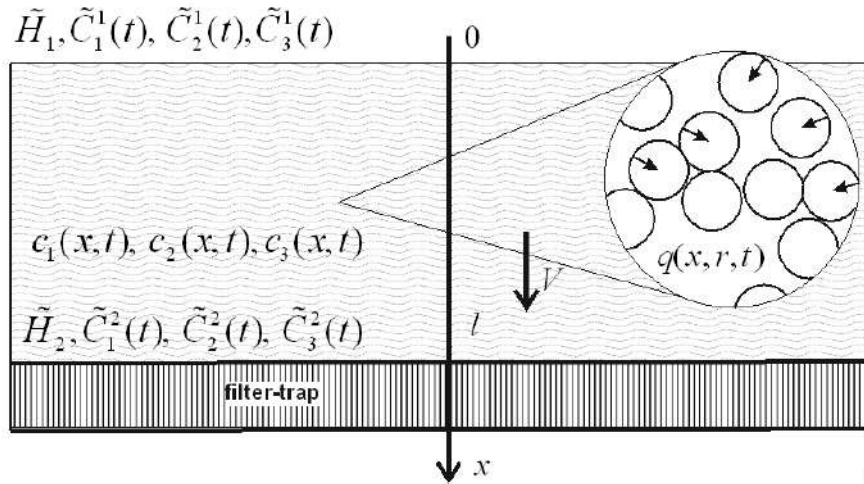


Рис. 1.8. Вертикальна міграція радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача

На глибині l в ґрунті розміщений фільтр-вловлювач, наповнений сорбуючим елементом (наприклад, вермикулітом). Відомі п'єзометричні напори на верхній та нижній (підстилаючій) 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 частинок, що знаходяться в конвективно рухомому поровому розчині), $\tilde{C}_2^0(x)$ (для частинок, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді), $\tilde{C}_3^0(x)$ (для частинок, розташованих в скелеті ґрунту) та $\tilde{Q}^0(x,r)$. На верхній поверхні ґрунту задані концентрації $\tilde{C}_1^1(x)$, $\tilde{C}_2^1(x)$ та $\tilde{C}_3^1(t)$, а на фільтрі-вловлювачі задаються концентрації $\tilde{C}_1^2(x)$, $\tilde{C}_2^2(t)$, $\tilde{C}_3^2(t)$ або відповідні потоки концентрацій

$$\left. \frac{\partial c_1}{\partial x} \right|_{x=l} = \left. \frac{\partial c_2}{\partial x} \right|_{x=l} = \left. \frac{\partial c_3}{\partial x} \right|_{x=l} = 0.$$

Потрібно дослідити розподіл концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $c_3(x,t)$, $q(x,r,t)$ по області фільтрації з часом, що дасть можливість зробити прогноз щодо ступеня очищення ґрунтів та їх подальшого використання.

Математичну модель поставленої задачі у лінійній постановці в одновимірному випадку на основі робіт [128, 129, 197, 198] можна описати наступною крайовою задачею:

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.25)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 + \gamma_3 c_3 - \theta \left. \frac{\partial q}{\partial r} \right|_{r=R}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.26)$$

$$\frac{\partial c_3}{\partial t} = D_3 \frac{\partial^2 c_3}{\partial x^2} + \gamma_2 c_2 - \gamma_3 c_3, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.27)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.28)$$

$$v = -k(c_1) \frac{dh}{dx} + v_c \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad \text{div} \vec{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.29)$$

$$\left. \frac{\partial q(x,r,t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.30)$$

$$q(x,r,t) \Big|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x,t), \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.31)$$

$$l_1 c_1(0,t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(l,t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (1.32)$$

$$l_3 c_2(0,t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l,t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (1.33)$$

$$l_5 c_3(0,t) = \tilde{C}_3^1(t), \quad l_6 c_3(l,t) = \tilde{C}_3^2(t), \quad (1.34)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, \quad h(l) = \tilde{H}_2, \quad (1.35)$$

$$c_1(x,0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x,0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad c_3(x,0) = \tilde{C}_3^0(x), \quad (1.36)$$

$$q(x, r, 0) = \tilde{Q}^0(x, r).$$

Тут: $c_1(x, t)$, D_1 – концентрація та коефіцієнт конвективної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у фільтраційному потоці; $c_2(x, t)$, D_2 – концентрація та коефіцієнт молекулярної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у воді, яка зв'язана зі скелетом ґрунту; $c_3(x, t)$, D_3 – концентрація і коефіцієнт дифузії радіонуклідів в скелеті ґрунту, ця дифузія оцінки є такою малою, що її можна вважати "пасткою" для цих частинок; $q(x, r, t)$, D_0 – концентрація та коефіцієнт дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R , що знаходяться у скелеті ґрунту; k_e – коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового масопереносу на масоперенос в скелеті ґрунту; U – швидкість фільтрації; k – коефіцієнт фільтрації води з мігрантами; $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – коефіцієнти масообміну; σ_1 – пористість ґрунту; x – вертикальна координата, напрямлена вертикально вниз, l_i , $i = \overline{1, 4}$ – диференціальні оператори, що задають граничні умови відповідно при $x = 0$ та $x = l$; t – час.

Рівняння (1.25) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (1.26) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (1.27) описує міграцію радіонуклідів в скелеті ґрунту (з пастками); (1.28) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q , що зв'язана із концентрацією c_2 умовою (1.31), (1.29) описує фільтрацію в каталітичному пористому середовищі. Крайові умови для концентрацій $c_1(x, t)$, $c_2(x, t)$, $c_3(x, t)$, $q(x, r, t)$ та напору $h(x)$ мають вигляд (1.32)-(1.36).

Крайова задача (1.25)-(1.36) поставлена коректно та виконуються умови існування та єдиності її розв'язку [199, 200].

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.

1.6.5. Математична модель міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод в каталітичному пористому середовищі в нелінійному випадку

Розглянемо 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 U під впливом конвективної дифузії з врахуванням каталітичного мікропористого середовища при наявності фільтрів-вловлювачів (рис. 1.9).

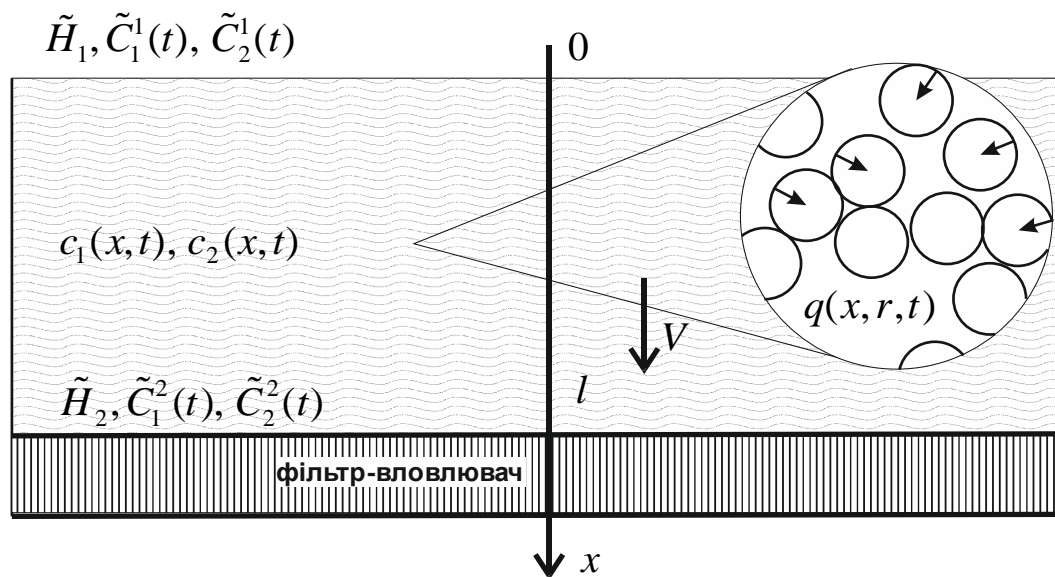


Рис. 1.9. Вертикальна міграція радіонуклідів в пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача в нелінійному випадку

На глибині l в ґрунті розміщений фільтр-вловлювач, наповнений сорбуючим елементом (наприклад, вермикулітом). Відомі п'єзометричні

напори на верхній та нижній (підстилаючій) 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 частинок, що знаходяться в конвективно рухомому поровому розчині), $\tilde{C}_2^0(x)$ (для частинок, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді) та $\tilde{Q}^0(x,r)$. На верхній поверхні ґрунту відомі концентрації $\tilde{C}_1^1(t)$ та $\tilde{C}_2^1(t)$, а на фільтрі-вловлювачі задаються концентрації $\tilde{C}_1^2(t)$, $\tilde{C}_2^2(t)$.

Потрібно дослідити розподіл концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$ та $q(x,r,t)$ по області фільтрації з часом, що дасть можливість зробити прогноз щодо ступеня очищення ґрунтів та їх подальшого використання.

Математичну модель поставленої задачі в одновимірному випадку в кожній з підобластей ґрунтового середовища та фільтрів-вловлювачів можна описати наступною крайовою задачею:

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) - v(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.37)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right) + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 - \theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.38)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.39)$$

$$v = -k(c_1) \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad \text{div} \vec{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.40)$$

$$\frac{\partial q(x,r,t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.41)$$

$$q(x,r,t) \Big|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x,t), \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.42)$$

$$l_1 c_1(0,t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(0,t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (1.43)$$

$$l_3 c_2(0,t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l,t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (1.44)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, \quad h(l) = \tilde{H}_2, \quad (1.45)$$

$$c_1(x,0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x,0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad q(x,r,0) = \tilde{Q}^0(x,r). \quad (1.46)$$

де $c_1(x,t)$, D_1 – концентрація та коефіцієнт конвективної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у фільтраційному потоці; $c_2(x,t)$, D_2 – концентрація та коефіцієнт молекулярної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у воді, яка зв'язана зі скелетом ґрунту; $q(x,r,t)$, D_0 – концентрація та коефіцієнт дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R , що знаходяться у скелеті ґрунту; k_e – коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового масопереносу на масоперенос в скелеті ґрунту; U – швидкість фільтрації; k – коефіцієнт фільтрації води з мігрантами; γ_1, γ_2 – коефіцієнти масообміну; σ_1 – пористість ґрунту; $x \in [0; l]$ – вертикальна координата, напрямлена вертикально вниз, $l_i, i = \overline{1, 4}$ – диференціальні оператори, що задають граничні умови відповідно при $x = 0$ та $x = l$; t – час, $0 < t < t_1$.

Рівняння (1.37) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (1.38) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (1.39) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q , що зв'язана із концентрацією c_2 умовою (1.42); (1.40) 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 (1.43)-(1.46).

Крайова задача (1.37)-(1.46) поставлена коректно та виконуються умови існування та єдиності її розв'язку [199, 200].

В результаті різниці напорів відбувається перенесення розчинених у воді речовин фільтраційним потоком. При цьому процеси фільтрації розчинених у воді речовин підлягають законам Дарсі та Фіка.

1.6.6. Математична модель міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод в каталітичному пористому середовищі в нелінійному випадку та неізотермічних умовах

В загальноприйнятих позначеннях математичну модель даної задачі (рис. 1.10) в одновимірному випадку при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах можна описати наступною крайовою задачею.

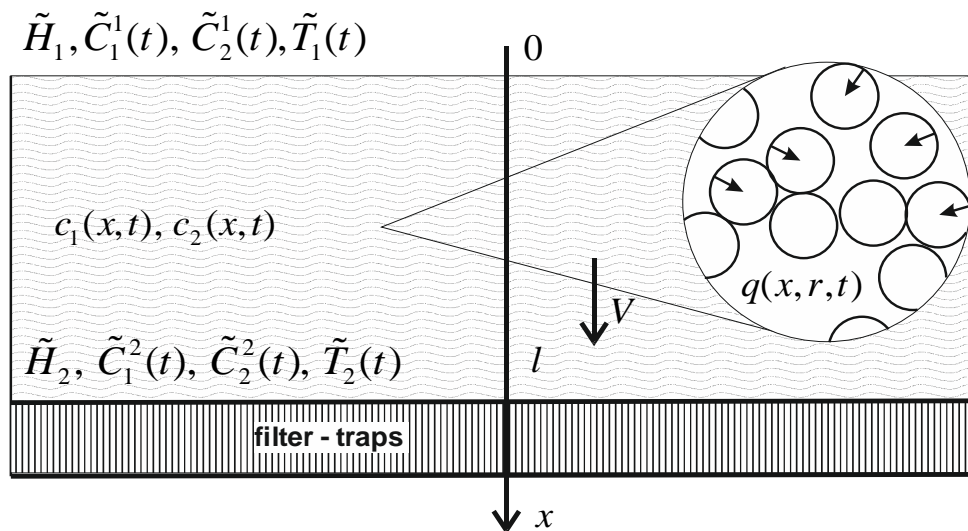


Рис. 1.10. Вертикальна міграція радіонуклідів в пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача в неізотермічному випадку

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{T_1} \frac{\partial T}{\partial x} \right) - v(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.47)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{T_2} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 - \theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.48)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0(q) \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right) + D_{T_3} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.49)$$

$$c_T \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \rho c_\rho v \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (1.50)$$

$$v = -k(c_1, T) \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} + v_T \frac{\partial T}{\partial x}, \quad \text{div} \vec{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.51)$$

$$\left. \frac{\partial q(x, r, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.52)$$

$$q(x, r, t) \Big|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x, t), \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.53)$$

$$l_1 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (1.54)$$

$$l_3 c_2(0, t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l, t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (1.55)$$

$$l_5 T(0, t) = \tilde{T}_1(t), \quad l_6 T(l, t) = \tilde{T}_2(t), \quad (1.56)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, \quad h(l) = \tilde{H}_2, \quad (1.57)$$

$$c_1(x, 0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x, 0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad q(x, r, 0) = \tilde{Q}^0(x, r). \quad (1.58)$$

де $c_1(x, t)$, D_1 , D_{T_1} – концентрація, коефіцієнт конвективної дифузії та термодифузії радіонуклідів, що знаходяться у фільтраційному потоці; $c_2(x, t)$, D_2 , D_{T_2} – концентрація, коефіцієнт молекулярної дифузії та термодифузії радіонуклідів, що знаходяться у воді, яка зв'язана зі скелетом ґрунту; $q(x, r, t)$, D_0 , D_{T_3} – концентрація, коефіцієнт дифузії та термодифузії радіонуклідів у частинках радіуса R , що знаходяться у скелеті ґрунту; $T(x, t)$ – температура; λ_T – коефіцієнт ефективної теплопровідності; c_T – питома теплоємність ґрунту при сталому об'ємі; ρ , c_ρ – густина та питома теплоємність порового розчину; v_c , v_T – коефіцієнти хімічного та термічного осмосів відповідно; k_e – коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового масопереносу на масоперенос в скелеті ґрунту; v – швидкість фільтрації сольових розчинів у неізотермічних умовах; K – коефіцієнт фільтрації води з мігрантами; γ_1 , γ_2 – коефіцієнти масообміну; σ_1 – пористість ґрунту; $x \in [0; l]$ – вертикальна координата,

напрявлена вертикально вниз; $l_i, i = \overline{1, 6}$ – диференціальні оператори, що задають граничні умови відповідно при $x=0$ та $x=l$; t – час, $0 < t < t_1$, r – радіус (радіальна, горизонтальна змінна) $0 < r < R$.

Рівняння (1.47) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (1.48) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (1.49) описує внутрішночастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q в мікро- або наночастинках, що пов'язана з концентрацією c_2 рівнянням (1.53); рівняння (1.50) описує теплових режим ґрунту; (1.51) описує фільтрацію в каталітичному пористому середовищі. Крайові умови для концентрацій $c_1(x, t)$, $c_2(x, t)$, $q(x, r, t)$, температури $T(x, t)$ та напору $h(x)$ мають наступний вигляд (1.54)–(1.58).

Крайова задача (1.47)-(1.58) поставлена коректно та виконуються умови існування та єдиності її розв'язку [199, 200].

В результаті різниці напорів відбувається перенесення розчинених у воді речовин фільтраційним потоком. При цьому процеси фільтрації розчинених у воді речовин підлягають законам Дарсі та Фіка.

1.7. Аналіз програмних продуктів комп'ютерного моделювання підземних процесів

Ряд вчених при моделюванні задач математичної фізики використовують пакети прикладних програм. Зокрема, найпоширенішими є Matlab, Maple, MathCAD. Дані пакети дозволяють здійснити експерименти згідно наперед вибраного чисельного методу. З інтенсивним розвитком математичного та комп'ютерного моделювання з'явилися такі інтегровані середовища, як Comsol, RSOFTE FemSIM, FreeFem+ та ряд інших. Вони дозволяють вирішувати різні

прикладні задачі теорії пружності, електромагнетизму, динаміки рідин і газів, моделювати механічну взаємодію, масоперенос тощо за допомогою як математичної постановки задачі (система рівнянь), так і з фізичної точки зору (вибір фізичної моделі, наприклад модель дифузії). Дані пакети добре адаптовані для інженерів, які хочуть застосувати нескладні математичні моделі до певних умов.

Поряд з тим, для моделювання складних динамічних процесів вчені прагнуть вдосконалити існуючі математичні моделі геофізики, що враховуватимуть ряд певних чинників. Вони представляють цілі колективи науковців, результатами роботи яких є створення власних програмних продуктів (NADRA-3D [201], ORCHESTRA [202], PHREEQC [203], HPx [204], PHT3D [205], OpenGeoSys (OGS) [206], HYTEC [207], HYDRUS [208], TOUGHREACT [209], eSTOMP [210], HYDROGEOCHEM [211], CrunchFlow [212], MIN3P [213], PFLOTRAN [214] та інші). Розробка таких програмних продуктів вимагає додаткових знань з проектування та конструювання програмного забезпечення. Вони є вузькоспеціалізованими і багато в чому переважають вищезгадані.

Загальний опис деяких із зазначених програмних продуктів, їхній історичний розвиток, список застосованих математичних моделей, властивості і порівняння з іншими програмами наведено в наукових статтях та технічній документації [211, 215].

Програмний комплекс HYDRUS було створено спільними зусиллями декількох наукових груп із США, Чеської республіки, Ізраїлю, Бельгії та Нідерландів. Він може аналізувати ряд фізичних та хімічних нерівноважних процесів. HYDRUS широко використовується для дослідження фільтрації сольових розчинів в зоні між поверхнею ґрунту і ґрунтовими водами (в насичено- та ненасичених системах).

HYDRUS містить реалізацію великої кількості математичних моделей, що

дозволяє використовувати їх для вирішення сільськогосподарських, промислових і екологічних проблем, а також надає можливість розв'язку задач в оберненій постановці [208].

До програмного комплексу HYDRUS входять програми HUDRUS-1D (рис.1.11) та HUDRUS (2D/3D) (рис. 1.12), що розв'язують задачі тепло-масопереносу в різнонасичених середовищах в одно- (HUDRUS-1D), дво- та тривимірних постановках (HUDRUS (2D/3D)). Базові версії програм HUDRUS чисельно розв'язують рівняння Річардса для насичено-ненасиченого водного потоку та рівняння адвекційно-дисперсійного типу для тепло- і масопереносу. Також даний комплекс містить ряд додаткових модулів (наприклад, Wetland, HP1/2, UnsatChem, DualPerm, Meteo, C-Ride). Дані модулі розширюють функціонал рівнянням потоку із врахуванням процесу поглинання води корінням рослин; рівнянням перенесення тепла, що розглядає рух за рахунок теплопровідності, а також адвекції з проточною водою.

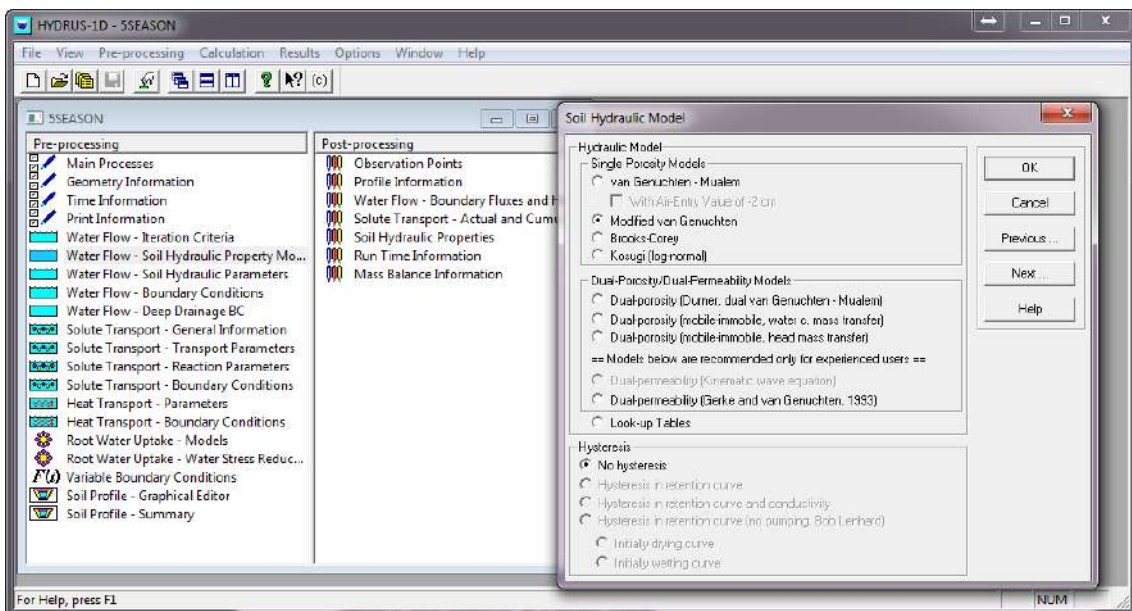


Рис. 1.11. Користувацький інтерфейс програми HYDRUS-1D

Головні адвекційно-дисперсійні рівняння комплексу записані в дуже

загальному вигляді і надають можливість для задання нелінійних нерівноважних процесів між твердою і рідкою фазами, а також лінійних рівноважних реакцій між рідкою і газовою фазами. Моделі масопереносу враховують процеси адвекції та дисперсії в рідкій формі, а також дифузії в газовій формі, дозволяючи моделювати переміщення розчинів одночасно як в рідкому, так і в газоподібному середовищі. В HYDRUS розглядається до 15 розчинів, які можуть бути з'єднані в однонаправлений фільтраційний потік або фільтруватимуться незалежно один від одного.

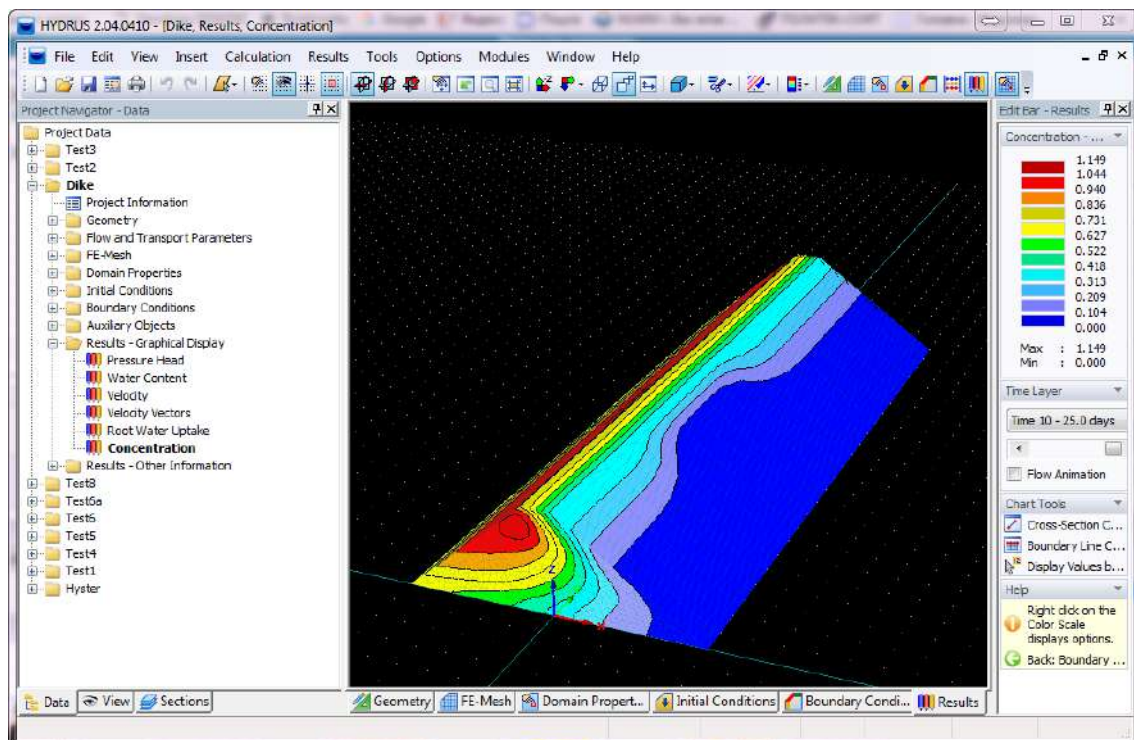


Рис. 1.12. Користувацький інтерфейс програми
HYDRUS (2D/3D)

Математичні моделі в даному програмному комплексі строго запрограмовані без можливості внесення змін користувачами. Вибір тієї чи іншої моделі здійснюється у відповідних модальних вікнах. Останні версії комплексу містять деякі вдосконалення, пов'язані з використанням розподілених обчислень.

Незважаючи на велику кількість публікацій по темі математичного моделювання з використанням комплексу HYDRUS, архітектура програмного комплексу не описана. Натомість є можливість отримати вихідний код HYDRUS-1D мовою FORTRAN станом на 2009 рік та здійснити його аналіз самостійно.

Програмний комплекс NADRA-3D (рис. 1.13) було розроблено в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України. Він призначений для комп'ютерного моделювання процесів фільтрації, дифузії і зміни напружено-деформованого стану в багатокомпонентних тривимірних об'єктах, які можуть містити тонкі включення [216]. Основу математичного апарату складають математичні моделі просторових процесів у вигляді систем диференціальних рівнянь в частинних похідних.

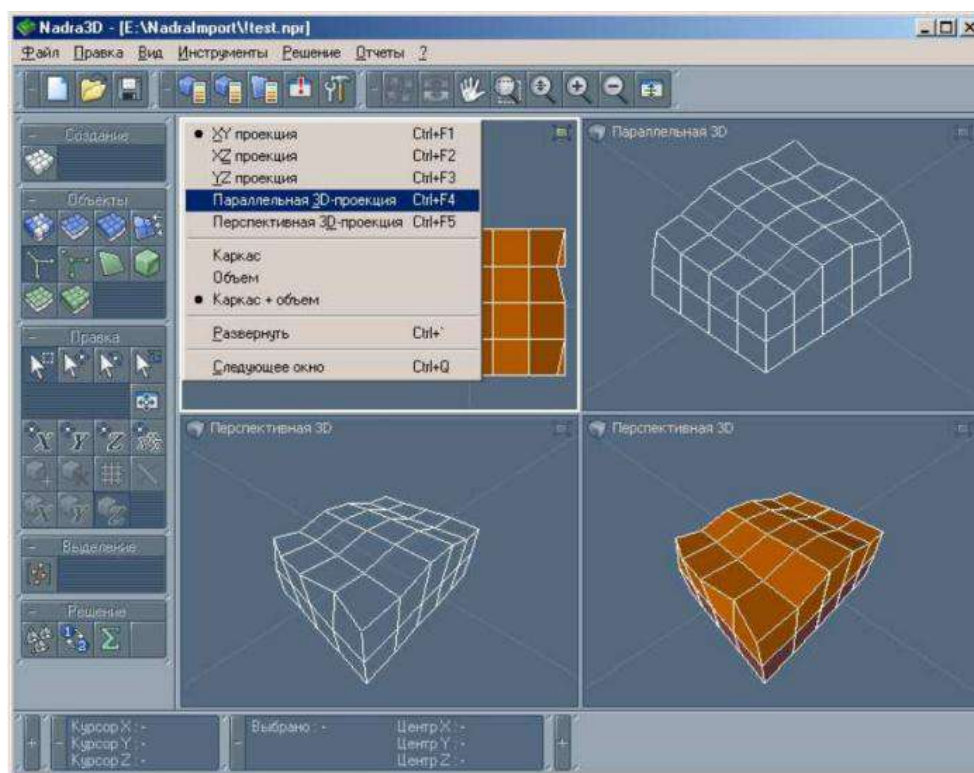


Рис. 1.13. Користувацький інтерфейс NADRA-3D

Основні етапи роботи з даним програмним комплексом полягають у створенні і редагуванні моделі, яка описує геометрію досліджуваної області;

задання фізичних властивостей; розбиття області на скінченні елементи; формування і розв'язок системи алгебраїчних рівнянь методом скінченних елементів; представлення результатів обчислень. Вихідний код не доступний для вільного використання, однак у літературі детально описано використання методології ООП для розв'язування задачі опису складних тривимірних об'єктів, наведена відповідна ієрархія класів, колекцій для геометричних областей та фізичних властивостей моделі [216–218]. Також розглянуто схему взаємодії модулів, діаграму класів, опис файлів даних та алгоритмів розв'язування методом скінченних елементів.

ORCHESTRA (Objects Representing CHEmical Speciation and TRAnsport) являє собою об'єктно-орієнтований фреймворк для моделювання хімічних процесів [219]. На відміну від інших програмних продуктів, що містять рівняння математичних моделей строго запрограмованих в програмі, ORCHESTRA дозволяє легко маніпулювати рівняннями, адже вони розташовані у звичайних текстових файлах. Це робить постановку математичної моделі дуже зручною для користувача і надає можливість її розширювати.

Фреймворк складається з двох окремих частин: (1) модуля обрахунків, який написаний на мові програмування Java; (2) файлу з набором хімічних моделей у текстовій формі.

Об'єктно-орієнтований підхід до задання хімічної моделі надає користувачу змогу створити послідовну та зрозумілу ієрархію класів. В основі даного фреймворку лежить три класи: суб'єкт (entity), реакція (reaction), фаза (phase) (рис. 1.14). Вони є базовими для побудови багатьох моделей хімічного процесу.

Фреймворк ORCHESTRA написаний на мові програмування Java. Ідеї, покладені в його основу, є досить хорошими і знайшли своє продовження в ряді інших фреймворків (наприклад, в PROOST [220]).

Програмний комплекс PHREEQC може моделювати широкий спектр одновимірних геохімічних рівноважних процесів, в яких приймають участь вода,

мінерали, іони, тверді розчини і гази. В комплексі також задані закони кінетики, що дозволяють моделювати нерівноважні процеси, такі як розчинення та кристалізація мінералів, розкладання органічних сполук та інші кінетичні реакції.

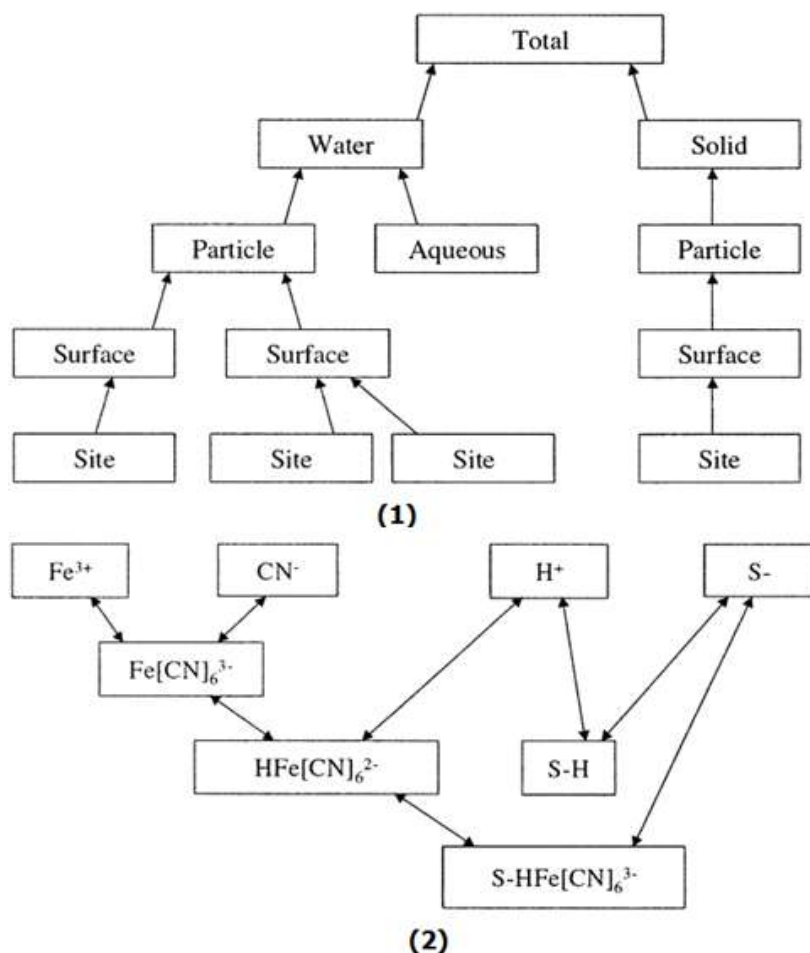


Рис. 1.14. Приклад ієрархії фаз (1) та ієрархії суб'єктів (2) в програмі ORCHESTRA

Інтерфейс вхідних даних комплексу (рис. 1.15) потребує від користувача знань з хімії та теорії взаємодії іонів. Наприклад, математичне моделювання процесів багатокомпонентної дифузії в глині згідно закону Фіка вимагає написання спеціального коду, що аж ніяк не покращує зручність користування [221]. Разом з тим, це свідчить про орієнтацію на вузьких спеціалістів, що зможуть доповнити існуючі математичні моделі описом власних досліджуваних процесів. Таким чином, деяка частина задач моделювання покладена на програмний

комплекс, а інша – на дослідника.

Для аналізу доступні вихідні коди мовою C/C++. Незважаючи на тривалий час розробки (з 1997 року і донині), в кодї програми помітно суміш структурної та об'єктно-орієнтованої методології розробки. Це ускладнює розуміння архітектури іншими програмістами. Тому стає зрозумілою поява COM інтерфесів для інтеграції PHREEQC модулів з іншими системами [222].

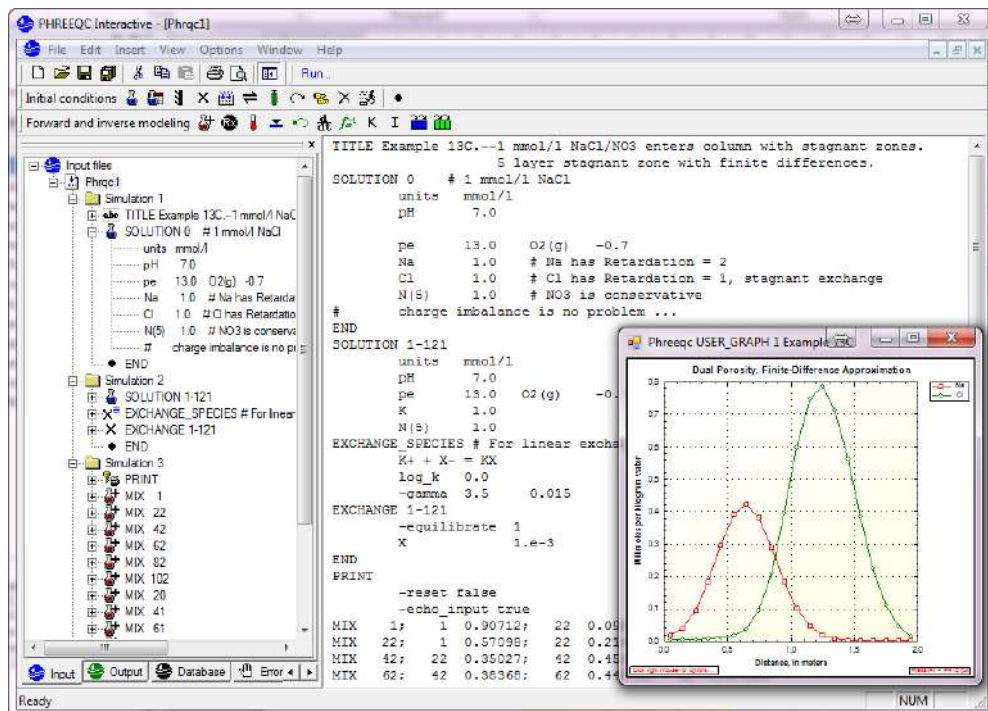


Рис. 1.15. Інтерфейс програми PHREEQC в операційній системі Windows

PFLOTRAN – програмний комплекс з відкритим вихідним кодом, що динамічно розвивається. Він дозволяє розв'язувати системи нелінійних диференціальних рівнянь, що описують ряд фізичних та хімічних процесів. Основні режими роботи, що підтримуються комплексом наступні: розв'язання рівнянь Річардса, робота з багатофазним суперкритичним CO₂, реактивні термо-гідро-хімічні процеси, кристалізація та розчинення мінералів, багатокомпонентні термо- та гідропроеци в пористому середовищі. Процеси тепло- та масопереносу чисельно розв'язуються за допомогою повністю неявного методу Ейлера, що

базується на ітераціях Ньютона-Крилова.

PFLOTRAN написаний з використанням об'єктно-орієнтованої мови Fortran 2003. Вибір мови Fortran над C/C++ насамперед був обумовлений необхідністю залучення і збереження тісної співпраці з досвідченими науковцями, адже саме вони забезпечують математичну основу програмного комплексу. Разом з тим, основний акцент в PFLOTRAN приділено паралельним та розподіленим обчисленням. Розпаралелювання досягається через декомпозицію задачі з використанням PETSc (Portable Extensible Toolkit для наукових розрахунків) бібліотек. Тому програма не містить графічного інтерфейсу і всі вихідні дані для чисельних експериментів отримує зі спеціального текстового файлу, аналогічно до PHREEQC та ORCHESTRA. Це, знову ж таки, вимагає від користувача детального вивчення складного формату вихідного файлу, що задає процес.

Код програми чітко структурований і в ньому легко орієнтуватися. Використовується система контролю версій Mercurial, що дозволяє відслідковувати зміни. Водночас основні класи програми, що формують математичні моделі, переважно аналізують вхідні дані і визначають необхідні коефіцієнти для передачі в об'єкти матричних обчислень. Відсутність підходу наслідування і декомпозиції при описі класів математичних моделей ускладнює розуміння фізичного процесу, адже велика одночасна кількість параметрів є трудомісткою для користувача при додаванні нового класу чи модернізації вже існуючого.

Враховуючи вищенаведений аналіз програмних комплексів нами розроблено підхід до вибору методології розробки, архітектури класів та проектування програмної системи на прикладі власного кросплатформенного програмного комплексу **NanoSurface**. В якості інструментальних комп'ютерних засобів для розробки було використано кросплатформенний фреймворк Qt [223]. Поєднання даного фреймворка і методології об'єктно-орієнтованого програмування дозволило створити інтелектуальний інтерфейс для дослідження

математичного моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури (рис 1.16). Під час роботи даної програми користувач легко маніпулює вихідними даними (коефіцієнтами дифузії, крайовими умовами тощо), виконує необхідні обчислення і отримує 2D/3D графіки та таблиці значень концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $q(x,r,t)$ по області фільтрації з часом. Усі отримані значення легко імпортуються у файли поширених форматів для подальшої обробки.

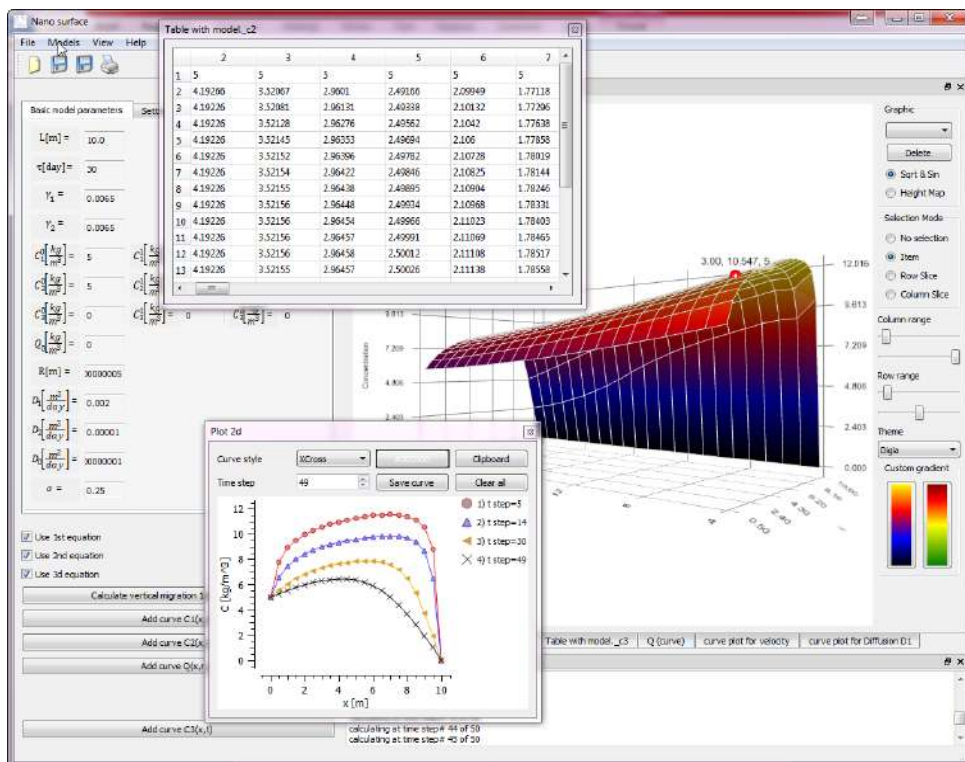


Рис. 1.16. Інтерфейс програмного комплексу «Nanosurface»

1.8. Висновки до розділу 1

В даному розділі було проведено дослідження актуальності появи нового класу задач підземної гідромеханіки згідно відкритих джерел інформації. Очевидно, що сучасні механізовані засоби та технології виготовлення сорбуючих мікро- та наночастинок продукують нову проблематику процесів

масопереносу сольових розчинів у каталітичних пористих середовищах частинок мікропористої структури.

Для ефективного розв'язання поставлених проблем було здійснено огляд наукової літератури на тему моделювання процесу масопереносу в каталітичних пористих середовищах. Базуючись на цих даних, виділено фізичні закони, що описують процеси масопереносу, вихідні математичні моделі досліджуваних процесів та диференціальні рівняння і залежності. Також проведено аналіз експериментальних досліджень параметрів фільтрації, що дозволив встановити залежність коефіцієнта фільтрації від концентрації сольового розчину та від температури.

Ключові математичні моделі провідних наукових шкіл світу висвітлено в п. 1.6. 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 у каталітичному пористому середовищі в нелінійному випадку та з урахуванням неізотермічних умов.

Протягом останніх двох десятиліть спостерігається стрімкий розвиток програмних засобів для математичного моделювання відповідних підземних процесів. Це зумовило появу різноманітних програмних комплексів для чисельного розв'язання задач моделювання фізичних, гідрологічних, біологічних і геохімічних процесів у пористих середовищах вадозної зони. Однак, прогрес не стоїть на місці і вимагає вирішення нових задач, зокрема, пов'язаних з уніфікацією процесу розробки подібних комплексів, узгодження їх один з одним.

В п. 1.7. було проведено короткий огляд програмних комплексів HYDRUS, NADRA-3D, ORCHESTRA та PFLOTRAN з точки зору їх функціоналу,

математичного апарату, архітектури та відкритості програмного коду. Відсутність об'єктно-орієнтованого підходу при проектуванні класів математичних моделей та велика кількість полів класів є однією із проблем. Адже такий стиль програмування протирічить підходам керування складністю. Завдяки такому аналізу було виділено їх позитивні сторони та недоліки. Це дозволило розробити власний продукт під назвою NanoSurface для роботи з рядом нових математичних моделей, який буде описано в розділі 5.

Результати даного розділу опубліковано в роботах [10, 224, 225].

РОЗДІЛ 2
МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
ВЕРТИКАЛЬНОЇ МІГРАЦІЇ РАДІОНУКЛІДІВ ПРИ ФІЛЬТРАЦІЇ
ПІДЗЕМНИХ ВОД У КАТАЛІТИЧНИХ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ В
ЛІНІЙНІЙ ПОСТАНОВЦІ

Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтра-вловлювача у каталітичних пористих середовищах в ізотермічних умовах

2.1.1. Постановка задачі та її математична модель

Розглянемо 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 U під впливом конвективної дифузії в каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача (рис. 2.1).

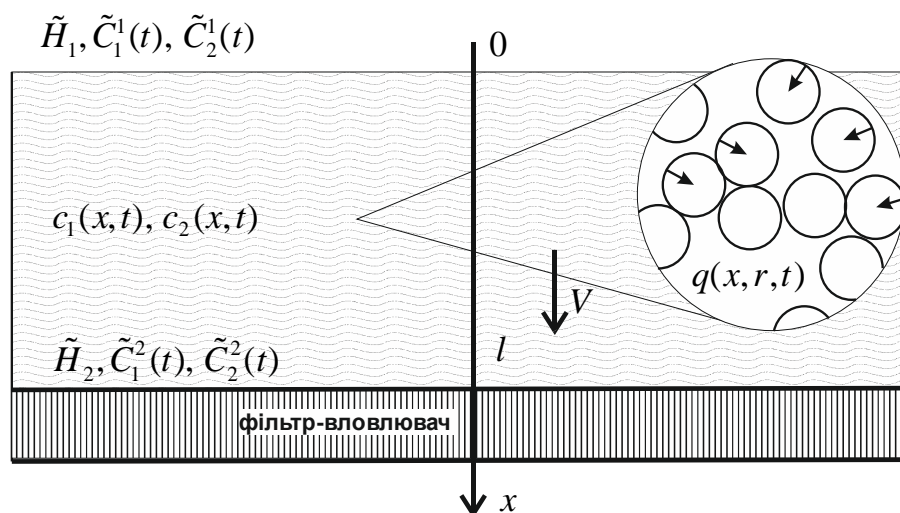


Рис. 2.1. Вертикальна міграція радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача

На глибині l в ґрунті розміщений фільтр-вловлювач, наповнений сорбуючим елементом (наприклад, вермикулітом). Відомі п'єзометричні напори на верхній та нижній (підстилаючій) 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 частинок, що знаходяться в конвективно рухомому поровому розчині), $\tilde{C}_2^0(x)$ (для частинок, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді) та $\tilde{Q}^0(x,r)$. На верхній поверхні ґрунту задані концентрації $\tilde{C}_1^1(x)$ та $\tilde{C}_2^1(x)$, а на фільтрі-вловлювачі задаються концентрації $\tilde{C}_1^2(x)$, $\tilde{C}_2^2(x)$ або відповідні потоки концентрацій

$$\left. \frac{\partial c_1}{\partial x} \right|_{x=l} = \left. \frac{\partial c_2}{\partial x} \right|_{x=l} = 0.$$

Потрібно дослідити розподіл концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $q(x,r,t)$ по області фільтрації з часом, що дасть можливість зробити прогноз щодо ступеня очищення ґрунтів та їх подальшого використання.

Математичну модель поставленої задачі в лінійній постановці в одновимірному випадку на основі робіт [168], [197], [226], [227] можна описати наступною крайовою задачею:

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 - \theta \left. \frac{\partial q}{\partial r} \right|_{r=R}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (2.3)$$

$$v = -k(c_1) \frac{dh}{dx} + v_c \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad \operatorname{div} \bar{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (2.4)$$

$$\left. \frac{\partial q(x,r,t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (2.5)$$

$$q(x,r,t)|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x,t), \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (2.6)$$

$$l_1 c_1(0,t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(l,t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (2.7)$$

$$l_3 c_2(0,t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l,t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (2.8)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, \quad h(l) = \tilde{H}_2, \quad (2.9)$$

$$c_1(x,0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x,0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad q(x,r,0) = \tilde{Q}^0(x,r). \quad (2.10)$$

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

Рівняння (2.1) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (2.2) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (2.3) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q , що зв'язана із концентрацією c_2 умовою (2.6); (2.4) 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 (2.7) – (2.10).

На основі робіт [199, 200] можна стверджувати, що крайова задача (2.1) – (2.10) поставлена коректно.

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.

2.1.2. Чисельний розв'язок крайової задачі

Для знаходження чисельного розв'язку крайової задачі (2.1)-(2.10) використаємо метод скінченних різниць. Для цього запишемо неявну різницеву схему для рівняння (2.2), а для (2.1) та (2.3) використаємо монотонну різницеву схему [228] або [229].

Введемо різницеву сітку $\omega_{h_1 h_2 \tau}$ з кроками h_1 , h_2 і τ по осях Ox , Or та Ot для змінних x , r , t

$$\omega_{h_1 h_2 \tau} = \left\{ (x_i, r_j, t_k) \left| \begin{array}{l} x_i = ih_1, r_j = jh_2, t_k = k\tau, \\ i = \overline{0, n_1}, j = \overline{0, n_2}, k = \overline{0, n_3}, \\ h_1 n_1 = l, r n_2 = R, \tau n_3 = T, \end{array} \right. \right\} \quad (2.11)$$

де n_1 , n_2 , n_3 – кількість кроків по просторових змінних та часу відповідно.

Для дискретизації рівняння (2.1) використаємо монотонну різницеву схему Самарського [228] або вдосконалену монотонну різницеву схему, побудовану і досліджену в роботі [229]. В результаті дискретизації скінченнорізницевої аналог диференціального рівняння (2.1) та відповідних крайових умов матиме наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \sigma'_1 \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k)}}{\tau} &= \chi_i^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - 2c_{1,i}^{(k+1)} + c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} + \\ &+ \frac{(r^+)_i^{(k)} c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{D_1 h_1} + \frac{(r^-)_i^{(k)} c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{D_1 h_1} - \\ &\quad - \gamma'_1 c_{1,i}^{(k+1)} + \gamma'_2 c_{2,i}^{(k+1)}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$c_{1,i}^{(0)} = \tilde{C}_1^0(x_i), \quad c_{1,0}^{(k)} = \tilde{C}_1^1(t_k), \quad c_{1,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_1^2(t_k), \quad (2.13)$$

де $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

Тут введені наступні позначення:

$$\chi_i^{(k)} = \frac{1}{1 + \frac{h_1 |r_i^{(k)}|}{2D_1}} = 1 - \frac{h_1 |r_i^{(k)}|}{2D_1} + O(h_1^2), \quad \sigma'_1 = \frac{\sigma_1}{D_1}, \quad \gamma'_1 = \frac{\gamma_1}{D_1}, \quad \gamma'_2 = \frac{\gamma_2}{D_1},$$

$$r_i^{(k)} = (r^+)_i^{(k)} + (r^-)_i^{(k)}, \quad (r^+)_i^{(k)} = \frac{-v_i^{(k)} + |v_i^{(k)}|}{2} \geq 0, \quad (r^-)_i^{(k)} = \frac{-v_i^{(k)} - |v_i^{(k)}|}{2} \leq 0.$$

Для знаходження концентрації солей $c_1(x, t)$ з різницевого рівняння (2.12) використаємо метод прогонки. Для цього представимо різницеву схему (2.12), (13) у такому вигляді:

$$\begin{cases} a_i^1 c_{1,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^1 c_{1,i}^{(k+1)} + b_i^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} = -c_{1,i}^{(k)} - f_i^{1,(k+1)}, \\ c_{1,0}^{(k+1)} = \mu_1^1 c_{1,1}^{(k+1)} + \mu_2^1, \\ c_{1,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^1 c_{1,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^1, \end{cases} \quad (2.14)$$

де

$$\begin{aligned} a_i^1 &= \frac{\tau}{\sigma'_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1^2} - \frac{(r^-)_i^{(k)}}{h_1 D_1} \right), \quad b_i^1 = \frac{\tau}{\sigma'_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(r^+)_i^{(k)}}{h_1 D_1} \right), \\ \bar{c}_i^1 &= 1 + \frac{\tau}{\sigma'_1} \left(\frac{2\chi_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{1}{h_1 D_1} \left((r^+)_i^{(k)} - (r^-)_i^{(k)} \right) + \gamma'_1 \right), \quad f_i^{1,(k+1)} = \frac{\tau}{\sigma'_1} \gamma'_2 c_{2,i}^{(k+1)}, \quad \mu_1^1 \equiv 0, \quad \mu_2^1 = \tilde{C}_1^1, \\ \mu_3^1 &\equiv 0, \quad \mu_4^1 \equiv \tilde{C}_2^1. \end{aligned}$$

Значення концентрації $c_1(x, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$c_{1,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^1, \quad (2.15)$$

$$\text{де } \alpha_{i+1}^1 = \frac{b_i^1}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}, \quad \beta_{i+1}^1 = \frac{a_i^1 \beta_i^1 + c_{1,i}^{(k)} + f_i^{1,(k+1)}}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad \alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0,$$

$$\beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1.$$

Можна показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^1| > |a_i^1| + |b_i^1|$ виконуються.

Для дискретизації різницевого рівняння (2.2) використаємо неявну різницеву схему. Конвективний член $\theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}$ диференціального рівняння (2.2)

апроксимуємо з точністю до другого порядку [230]. Скінченнорізницевий аналог відповідного диференціального рівняння матиме наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k)}}{\tau} = D_2 \frac{c_{2,i+1}^{(k+1)} - 2c_{2,i}^{(k+1)} + c_{2,i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} + \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \\ - \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$c_{2,i}^{(0)} = \tilde{C}_2^0(x_i), \quad c_{2,0}^{(k)} = \tilde{C}_2^1(t_k), \quad c_{2,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_2^2(t_k), \quad (2.17)$$

де $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

Представимо різницеву схему (2.16), (2.17) у такому вигляді:

$$\begin{cases} a_i^2 c_{2,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^2 c_{2,i}^{(k+1)} + b_i^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} = -f_i^{2,(k+1)}, \\ c_{2,0}^{(k+1)} = \mu_1^2 c_{2,1}^{(k+1)} + \mu_2^2, \\ c_{2,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^2 c_{2,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^2, \end{cases} \quad (2.18)$$

$$\text{де } a_i^2 = \frac{D_2}{h_1^2}, \quad b_i^2 = \frac{D_2}{h_1^2}, \quad \bar{c}_i^2 = \frac{2D_2}{h_1^2} + \frac{1}{\tau} + \gamma_2,$$

$$f_i^{2,(k+1)} = \frac{c_{2,i}^{(k)}}{\tau} + \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right),$$

$$\mu_1^2 \equiv 0, \mu_2^2 = \tilde{C}_2^1, \mu_3^2 \equiv 0, \mu_4^2 \equiv \tilde{C}_2^2.$$

Значення концентрації $c_2(x, t)$ на часовому шарі $(k + 1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$c_{2,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^2, \quad (2.19)$$

$$\text{де } \alpha_{i+1}^2 = \frac{b_i^2}{\bar{c}_i^2 - \alpha_i^2 a_i^2}, \beta_{i+1}^2 = \frac{a_i^2 \beta_i^2 + f_i^{2,(k+1)}}{\bar{c}_i^2 - \alpha_i^2 a_i^2},$$

$$i = \overline{1, n_1 - 1}, k = \overline{1, n_3}, \alpha_1^2 = \mu_1^2 \equiv 0, \beta_1^2 = \mu_2^2 \equiv \tilde{C}_2^1.$$

Неважко показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^2| > |a_i^2| + |b_i^2|$ виконуються.

Монотонна різницева схема для (2.3), (2.5), (2.6) матиме наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau'} &= \bar{\chi}_j^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - 2q_j^{(k+1)} + q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2^2} + \\ &+ \frac{\tilde{r}_+}{D_0} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} + \frac{\tilde{r}_-}{D_0} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$q_j^{(0)} = \tilde{Q}^0(x_i, r_j), \quad q_{n_2}^{(k)} = k_e c_{2,i}^{(k)}, \quad (2.21)$$

$$\bar{\chi}_j^{(k)} = \frac{1}{1 + \frac{h_2 |\tilde{r}_j^{(k)}|}{2D_0}} = 1 - \frac{h_2 |\tilde{r}_j^{(k)}|}{2D_0} + O(h_2^2), \quad \tilde{r} = \frac{2}{r},$$

$$\tau' = D_0 \tau, \quad \tilde{r} = \tilde{r}_+ + \tilde{r}_-, \quad \tilde{r}_+ = \frac{-\tilde{r} + |\tilde{r}|}{2} \geq 0, \quad \tilde{r}_- = \frac{-\tilde{r} - |\tilde{r}|}{2} \leq 0.$$

Запишемо різницеву схему (2.20), (2.21) в такому вигляді:

$$\begin{cases} a_j^3 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^3 q_j^{(k+1)} + b_j^3 q_{j+1}^{(k+1)} = -q_j^{(k)}, \\ q_0^{(k+1)} = \mu_1^3 q_1^{(k+1)} + \mu_2^3, \\ q_{n_2}^{(k+1)} = \mu_3^3 q_{n_2-1}^{(k+1)} + \mu_4^3, \end{cases} \quad (2.22)$$

$$\text{де } a_j^3 = \tau' \left(\frac{\bar{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} - \frac{\tilde{r}_-}{h_2 D_0} \right), \quad b_j^3 = \tau' \left(\frac{\bar{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} + \frac{\tilde{r}_+}{h_2 D_0} \right), \quad \bar{c}_j^3 = 1 + \tau' \left(\frac{2\bar{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} + \frac{1}{h_2 D_0} (\tilde{r}_+ - \tilde{r}_-) \right),$$

$$\mu_1^3 \equiv 1, \mu_2^3 = 0, \mu_3^3 \equiv 0, \mu_4^3 \equiv 0.$$

Чисельний розв'язок різницевої схеми знаходимо методом прогонки

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^3 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^3, \quad (2.23)$$

$$\text{де } \alpha_{j+1}^3 = \frac{b_j^3}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}, \quad \beta_{j+1}^3 = \frac{a_j^3 \beta_j^3 + f_j^{3,(k+1)}}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad \alpha_1^3 = \mu_1^3 \equiv 1,$$

$$\beta_1^3 = \mu_2^3 \equiv 0.$$

Швидкість фільтрації можна обчислити за формулою

$$V(c(x_*, t), t) = \frac{H_1 - H_2 \pm \int_0^l \frac{V(c(x, t))}{k(c(x, t))} \frac{\partial c}{\partial x} dx}{\int_0^l \frac{dx}{k(c(x, t))}}.$$

Тут знак “+” відноситься до нормального осмосу, а знак “-” – до аномального. Для апроксимації інтегралу $I = \int_0^l \frac{dx}{k(C(x, t))}$ використаємо формулу трапеції. Так, як $k \in C([0, +\infty))$, а $c(x, t) \in C^2[0, l]$ і $c(x, t) \geq 0$, $x \in [0, l]$, то

$$k(x, c(x, t)) \in C([0, l]) \text{ і } k(x, c(x, t)) > 0 \quad \forall x \in [0, l], \text{ а } I(C(x, t_k)) = I_h^k + O(h_1^2),$$

$$I_h^k = h \left(\frac{1}{2k(C_0^k)} + k(C_1^k) + k(C_2^k) + \dots + k(C_{n-1}^k) + \frac{1}{2k(C_n^k)} \right).$$

Якщо брати коефіцієнт фільтрації фільтруючого розчину постійним, то значення швидкості фільтрації матиме вигляд

$$V = k \frac{(H_1 - H_2)}{l}.$$

2.1.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз

Як приклад, розглянуто задачу локалізації радіонуклідів та очищення горизонтального шару ґрунту від них протягом 2 років з такими вихідними параметрами:

$$l = 10\text{м}, \tilde{H}_1 = 1\text{м}, \tilde{H}_2 = 0\text{м}, \nu = 2,8 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^3}{\text{кг} \cdot \text{доба}}, \sigma_1 = 0,4, \tau = 30 \text{дiб},$$

$$\gamma_1 = \gamma_2 = 0,0065, k_e = 1, R = 5 \cdot 10^{-5} \text{м}, D_1 = 2 \cdot 10^{-4} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, D_2 = 1 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}},$$

$$D_0 = 2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, \tilde{C}_1^1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_1^2(t) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_2^1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_2^2(t) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},$$

$$\tilde{C}_1^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_2^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{Q}^0(x, r) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}.$$

Для детального дослідження математичної моделі та проведення ряду чисельних експериментів було створено програмний комплекс NanoSurface. Він написаний на мові програмування C/C++ з використанням фреймворку Qt. Це дає змогу скопіювати програму без суттєвої зміни вихідного коду до роботи в таких операційних системах як Windows, Linux, MacOS. Інтуїтивно зрозумілий користувацький інтерфейс програмного комплексу NanoSurface дозволяє зручно керувати вихідними даними, що визначають гідрогеологічні умови та можливу дію техногенних факторів, виконувати необхідні експериментальні обрахунки, будувати порівняльні 2D/3D графіки і таблиці значень концентрацій, швидкості фільтрації, коефіцієнти дифузії тощо.

Використовуючи власний новостворений програмний продукт, було проведено серію чисельних експериментів, результати яких наведено у вигляді графіків. Розподіл концентрації $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R при різних часових кроках наведено на рис. 2.1.

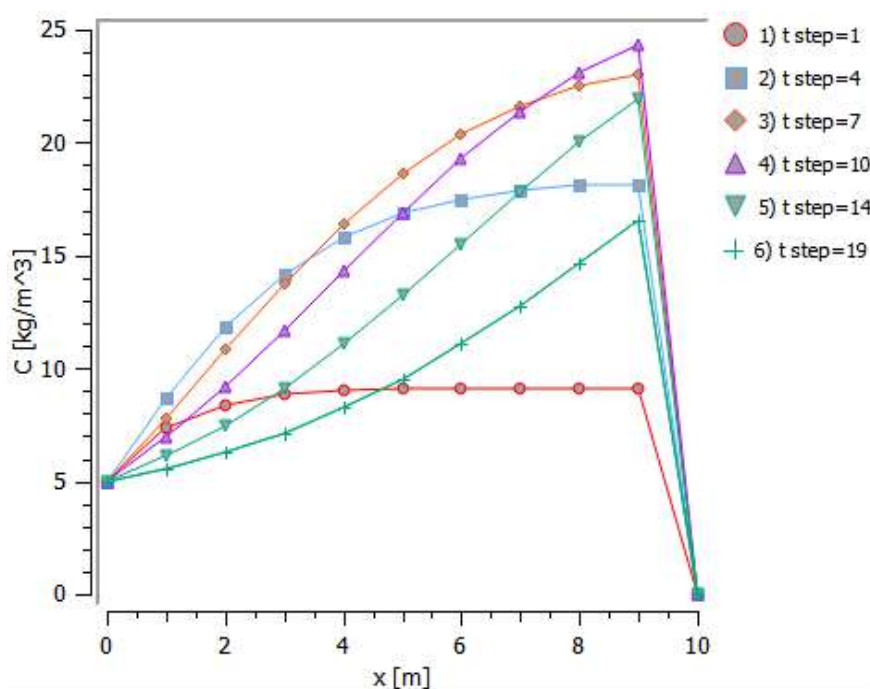


Рис. 2.1. Розподіл концентрації $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R при різних часових кроках:

- 1) $t = 30$ діб, 2) $t = 4$ міс., 3) $t = 7$ міс.,
- 4) $t = 10$ міс., 5) $t = 14$ міс., 6) $t = 19$ міс.

Як видно з графіку (рис. 2.1.), концентрація $c_1(x)$ повільно зростає, досягаючи свого максимального значення на часовому кроці $t = 10$ міс., після чого йде плавне спадання. Незважаючи на те, що початкові значення концентрації $c_1(x)$ були рівномірно розподілені на всій глибині шару ґрунту, помітне поступове накопичення забруднення ближче до фільтра. Це пояснюється постійною наявністю джерела забруднення на верхній поверхні і, як наслідок, постійної міграції забруднених речовин згідно закону фільтрації. Раптова зміна значень на графіку при $x = 10$ м пояснюється особливістю граничної умови на фільтрі (гранична умова першого роду).

Значення розподілу концентрації $c_2(x)$ в ґрунті без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R при різних часових кроках представлено

на рис. 2.2. На відміну від значень концентрації $c_1(x)$, значення концентрації $c_2(x)$ поступово зменшуються, що свідчить про поступове очищення ґрунту.

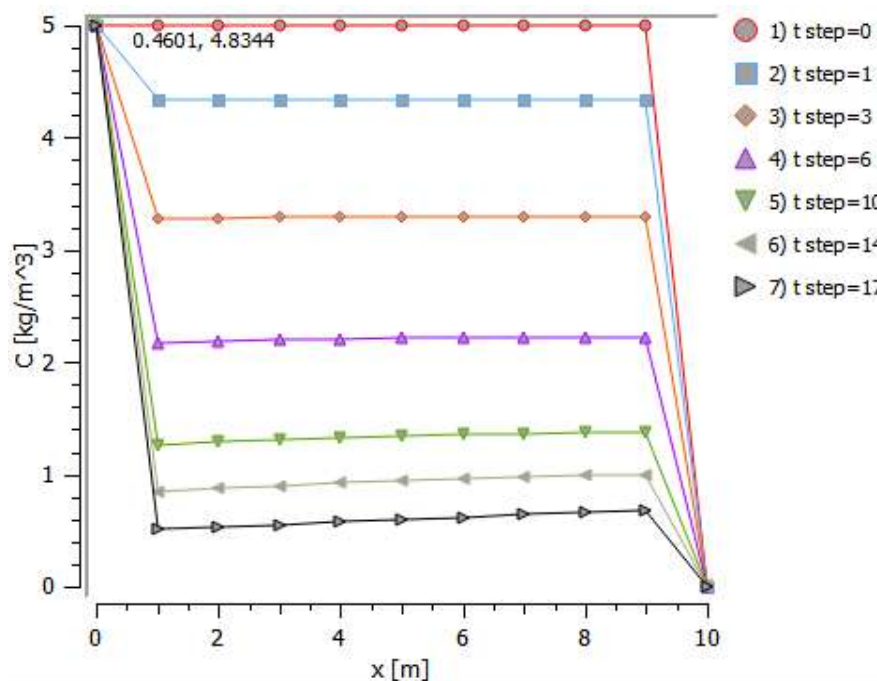


Рис. 2.2. Розподіл концентрації $c_2(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R при різних часових кроках:

- 1) $t = 0$ діб, 2) $t = 1$ міс., 3) $t = 3$ міс.,
- 4) $t = 6$ міс., 5) $t = 10$ міс., 6) $t = 14$ міс., 7) $t = 17$ міс.

Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R та з їх врахуванням наведено на рисунку 2.3. Помітно, що при наявності мікрочастинок радіуса R процес фільтраційного очищення шару родючого ґрунту відбувається швидше і ґрунт стає більш придатним до використання за менший проміжок часу. Це можна пояснити каталітичними властивостями мікрочастинок та адсорбцією забруднених речовин на їх поверхні.

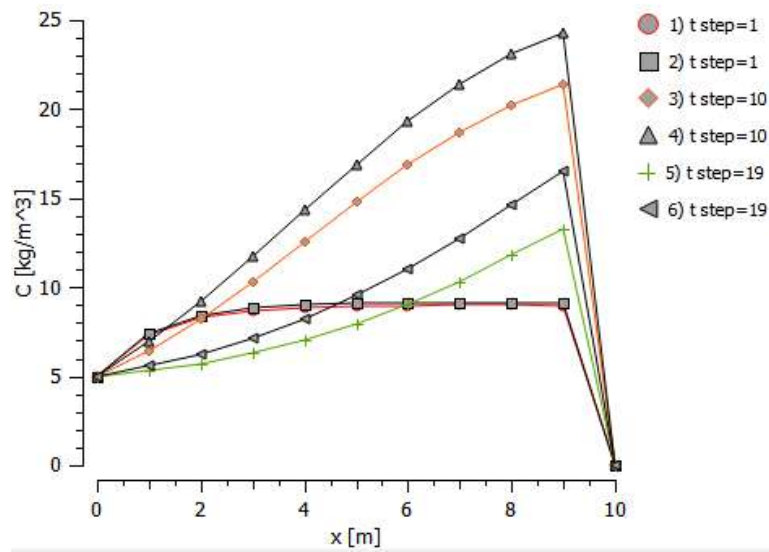


Рис. 2.3. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R (графіки 1, 3 та 5) та з їх врахуванням (графіки 2, 4 та 6) при різних часових кроках:

1) $t = 30$ діб, 2) $t = 30$ діб, 3) $t = 10$ міс.,

4) $t = 10$ міс., 5) $t = 19$ міс., 6) $t = 19$ міс.

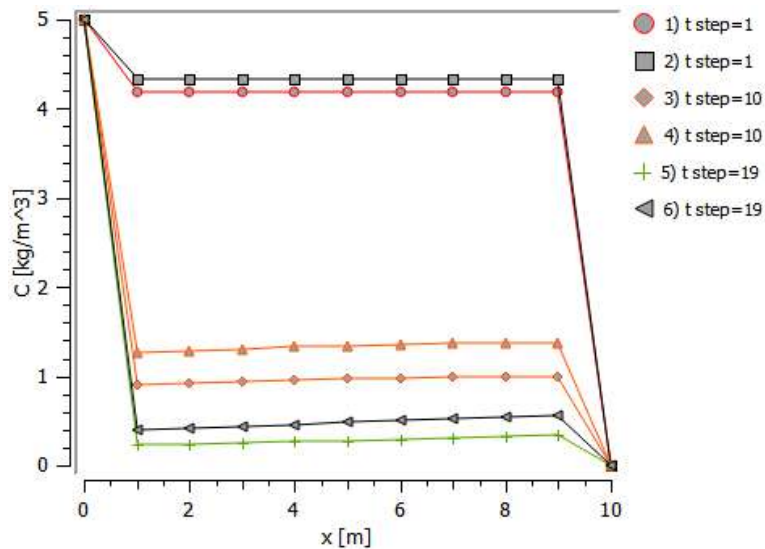


Рис. 2.4. Порівняльні розподіли концентрацій $c_2(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R (графіки 1, 3 та 5) та з їх врахуванням (графіки 2, 4 та 6) при різних часових кроках:

1) $t = 30$ діб, 2) $t = 30$ діб, 3) $t = 10$ міс.,

4) $t = 10$ міс., 5) $t = 19$ міс., 6) $t = 19$ міс.

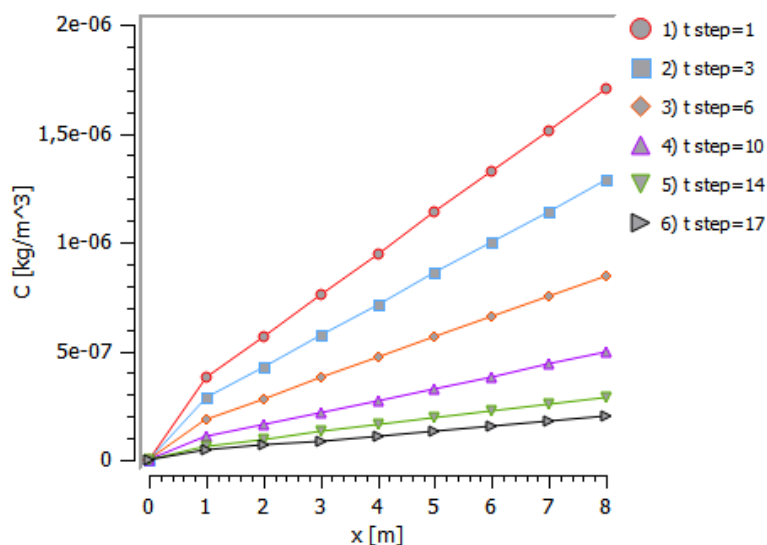


Рис. 2.5. Розподіл концентрації $q(r)$ від радіуса частинки r при $x = 1$ м при різних часових кроках: 1) $t = 1$ міс., 2) $t = 3$ міс., 3) $t = 6$ міс., 4) $t = 10$ міс., 5) $t = 14$ міс., 6) $t = 17$ міс.

Аналогічним чином проведено порівняльний аналіз впливу наявності каталітичних пористих частинок на розподіл концентрації $c_2(x)$ в товщі шару ґрунту. Дані результати представлені на графіку рисунку 2.4 і демонструють збільшення концентрації $c_2(x)$ в межах від 1% до 5% на різних часових кроках.

2.2. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтра-вловлювача у каталітичних пористих середовищах в неізотермічних умовах

2.2.1. Постановка задачі та її математична модель

Розглянемо процес очищення горизонтального шару ґрунту від забруднюючих речовин (наприклад, радіонуклідів) при їх вертикальній міграції в горизонтальному шарі ґрунту великої протяжності. Під впливом градієнтів напору, концентрації солей і температури відбувається перенесення солей, розчинених у воді із зміною температури фільтраційного потоку. Отже, фільтрація розчинів солей і теплообміну здійснюється відповідно до узагальненого закону Дарсі, Фіка та Фур'є. Міграція радіонуклідів відбувається

завдяки переносу їх фільтраційним потоком зі швидкістю \mathcal{U} під впливом конвективної дифузії та термодифузії з врахуванням каталітичного мікропористого середовища при наявності фільтрів-вловлювачів (рис 2.6).

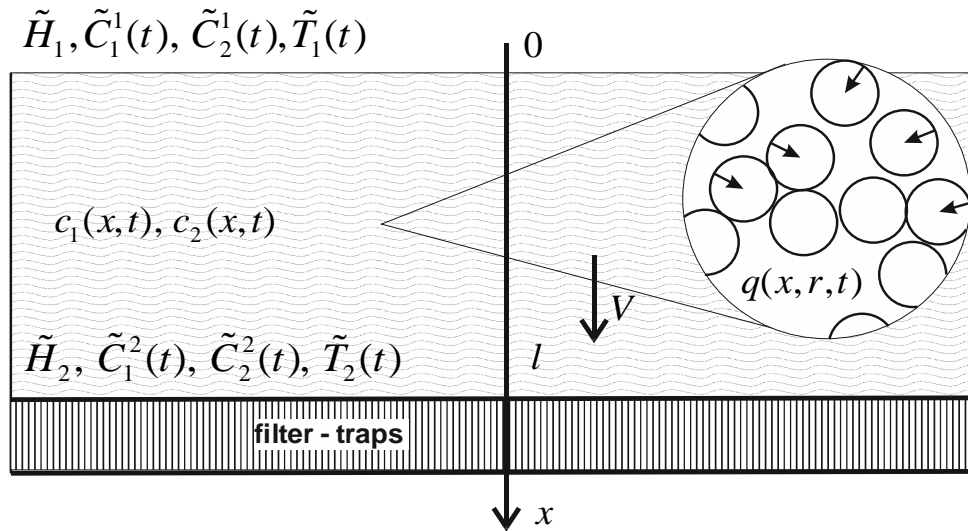


Рис. 2.6. Вертикальна міграція забруднюючих речовин у пористому середовищі при наявності мікрочастинок в неізотермічних умовах

На глибині l в ґрунті розміщений фільтр-вловлювач, наповнений сорбуючим елементом (наприклад, вермикулітом). Відомі п'єзометричні напори на верхній та нижній (підстилаючій) 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 частинок, що знаходяться в конвективно рухомому поровому розчині), $\tilde{C}_2^0(x)$ (для частинок, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді) та $\tilde{Q}^0(x,r)$. На верхній поверхні ґрунту задані концентрації $\tilde{C}_1^1(x)$ та $\tilde{C}_2^1(x)$, а на фільтрі-вловлювачі задаються концентрації $\tilde{C}_1^2(x)$, $\tilde{C}_2^2(x)$. Температури $\tilde{T}_1(t)$ і $\tilde{T}_2(t)$ задаються на верхній та нижній поверхнях ґрунтового шару відповідно.

Потрібно дослідити розподіли концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $q(x,r,t)$ і температури $T(x,t)$ по області фільтрації з часом, що дасть можливість зробити прогноз щодо ступеня очищення ґрунтів та їх подальшого використання.

Математичну модель поставленої задачі в лінійній постановці за наявності фільтрів-вловлювачів в одновимірному випадку можна описати наступною крайовою задачею:

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_1}{\partial x} + D_{T_1} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, 0 < x < l, t > 0, \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + D_{T_2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 - \theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}, 0 < x < l, t > 0, \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right) + D_{T_3} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right), 0 < r < R, t > 0, \quad (2.26)$$

$$\lambda_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \rho c_p v \frac{\partial T}{\partial x} = c_T \frac{\partial T}{\partial t}, 0 < x < l, t > 0, \quad (2.27)$$

$$v = -K(c_1, T) \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial c}{\partial x} + v_T \frac{\partial T}{\partial x}, \operatorname{div} \vec{v} = 0, 0 < x < l, t > 0, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial q(x, r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, 0 < x < l, 0 < r < R, t > 0, \quad (2.29)$$

$$q(x, r, t) \Big|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x, t), 0 < x < l, 0 < r < R, t > 0, \quad (2.30)$$

$$l_1 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^1(t), l_2 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^2(t), l_1 c_1(l, t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad (2.31)$$

$$l_3 c_2(0, t) = \tilde{C}_2^1(t), l_4 c_2(l, t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (2.32)$$

$$l_5 T(0, t) = \tilde{T}_1(t), l_6 T(l, t) = \tilde{T}_2(t), \quad (2.33)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, h(l) = \tilde{H}_2, \quad (2.34)$$

$$T(x, 0) = \tilde{T}_0(x), c_1(x, 0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad (2.35)$$

$$c_2(x, 0) = \tilde{C}_2^0(x), q(x, r, 0) = \tilde{Q}^0(x, r). \quad (2.36)$$

В рівняннях (2.24)-(2.36) використані такі позначення: $c_1(x,t)$, D_1 , D_{T_1} – концентрація, коефіцієнт конвективної дифузії та термодифузії радіонуклідів, що знаходяться у фільтраційному потоці; $c_2(x,t)$, D_2 , D_{T_2} – концентрація, коефіцієнт молекулярної дифузії та термодифузії радіонуклідів, що знаходяться у воді, яка зв'язана зі скелетом ґрунту; $q(x,r,t)$, D_0 , D_{T_3} – концентрація, коефіцієнт дифузії та термодифузії радіонуклідів у частинках радіуса R , що знаходяться у скелеті ґрунту; $T(x,t)$ – температура; λ_T – коефіцієнт ефективної теплопровідності; c_T – питома теплоємність ґрунту при сталому об'ємі; ρ , c_p – густина та питома теплоємність порового розчину; v_c , v_T – коефіцієнти хімічного та термічного осмосів відповідно; k_e – коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового масопереносу на масоперенос в скелеті ґрунту; U – швидкість фільтрації сольових розчинів у неізотермічних умовах; K – коефіцієнт фільтрації води з мігрантами; γ_1 , γ_2 – коефіцієнти масообміну; σ_1 – пористість ґрунту; $x \in [0; l]$ – вертикальна координата, напрямлена вертикально вниз; l_i , $i = \overline{1, 6}$ – диференціальні оператори, що задають граничні умови відповідно при $x=0$ та $x=l$; t – час, $0 < t < t_1$, r – радіус (радіальна, горизонтальна змінна) $0 < r < R$.

Рівняння (2.24) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (2.25) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (2.26) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q в мікро- або наночастинках, що пов'язана з концентрацією c_2 рівнянням (2.30); рівняння (2.27) описує теплових режим ґрунту; (2.28) описує фільтрацію в каталітичному пористому середовищі. Крайові умови для концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$,

$q(x, r, t)$, температури $T(x, t)$ та напору $h(x)$ мають наступний вигляд (2.31)–(2.36).

Крайова задача (2.24) – (2.36) поставлена коректно та виконуються умови існування та єдиності її розв’язку [199, 200].

В результаті різниці напорів відбувається перенесення розчинених у воді речовин та тепла фільтраційним потоком. При цьому процеси фільтрації розчинених у воді речовин та тепла підлягають відповідно законам Дарсі, Фіка та Фур’є.

2.2.2. Чисельний розв’язок крайової задачі

Для знаходження чисельного розв’язку поставленої крайової задачі (2.24) – (2.36) використаємо метод скінченних різниць. Отже, запишемо неявну різницеву схему для рівняння (2.25), а для (2.24), (2.26) і (2.27) – використаємо монотонну різницеву схему О.А. Самарського [228].

Введемо різницеву сітку $\omega_{h_1 h_2 \tau}$ для скінченно-різницевої апроксимації з кроками h_1 , h_2 та τ по осях Ox , Or та Ot для змінних x , r , t відповідно

$$\omega_{h_1 h_2 \tau} = \left\{ (x_i, r_j, t_k) \left| \begin{array}{l} x_i = ih_1, r_j = jh_2, t_k = k\tau, \\ i = \overline{0, n_1}, j = \overline{0, n_2}, k = \overline{0, n_3}, \\ h_1 n_1 = l, r n_2 = R, \tau n_3 = T, \end{array} \right. \right\} \quad (2.37)$$

де n_1 , n_2 , n_3 – кількість кроків по просторових змінних та часу відповідно.

Скінченно-різницевий аналог диференціального рівняння (2.24) набуде наступного вигляду:

$$\begin{aligned}
\sigma'_1 \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k)}}{\tau} &= \chi_i^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - 2c_{1,i}^{(k+1)} + c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} + \\
&+ \frac{(r^+)_i^{(k)} c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{D_1 h_1} + \frac{(r^-)_i^{(k)} c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{D_1 h_1} + \\
&+ D'_{T_1} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} - \gamma'_1 c_{1,i}^{(k+1)} + \gamma'_2 c_{2,i}^{(k+1)},
\end{aligned} \tag{2.38}$$

$$c_{1,i}^{(0)} = \tilde{C}_1^0(ih_1), c_{1,0}^{(k)} = \tilde{C}_1^1(k\tau), c_{1,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_1^2(k\tau), \tag{2.39}$$

де $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

Введемо наступні позначення:

$$\begin{aligned}
\chi_i^{(k)} &= \frac{1}{1 + 0,5h_1|r_i^{(k)}|}, \sigma'_1 = \frac{\sigma_1}{D_1}, D'_T = \frac{D_T}{D_1}, \\
\gamma'_1 &= \frac{\gamma_1}{D_1}, \gamma'_2 = \frac{\gamma_2}{D_1}, r_i^{(k)} = (r^+)_i^{(k)} + (r^-)_i^{(k)}, (r^+)_i^{(k)} = \frac{-v_i^{(k)} + |v_i^{(k)}|}{2} \geq 0, \\
(r^-)_i^{(k)} &= \frac{-v_i^{(k)} - |v_i^{(k)}|}{2} \leq 0.
\end{aligned}$$

Для знаходження концентрації солей $c_1(x, t)$ з різницевого рівняння (2.38) використаємо метод прогонки. Для цього представимо різницеву схему (2.38), (2.39) у такому вигляді:

$$\begin{cases} a_i^1 c_{1,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^1 c_{1,i}^{(k+1)} + b_i^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} = -c_{1,i}^{(k)} - f_i^{1,(k+1)}, \\ c_{1,0}^{(k+1)} = \mu_1^1 c_{1,1}^{(k+1)} + \mu_2^1, \\ c_{1,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^1 c_{1,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^1, \end{cases} \tag{2.40}$$

де

$$\begin{aligned}
a_i^1 &= \frac{\tau}{\sigma'_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1^2} - \frac{(r^-)_i^{(k)}}{h_1 D_1} \right), b_i^1 = \frac{\tau}{\sigma'_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(r^+)_i^{(k)}}{h_1 D_1} \right), \\
\bar{c}_i^1 &= 1 + \frac{\tau}{\sigma'_1} \left(\frac{2\chi_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{1}{h_1 D_1} \left((r^+)_i^{(k)} - (r^-)_i^{(k)} \right) + \gamma'_1 \right), \\
f_i^{1,(k+1)} &= \frac{\tau}{\sigma'_1} \left(\gamma'_2 c_{2,i}^{(k+1)} + D'_{T_1} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} \right), \mu_1^1 \equiv 0, \mu_2^1 = \tilde{C}_1^1, \mu_3^1 \equiv 0, \mu_4^1 \equiv \tilde{C}_2^1.
\end{aligned}$$

Неважко бачити, що умови стійкості прогонки виконуються: $|\bar{c}_i^1| > |a_i^1| + |b_i^1|$.

Значення концентрації на часовому кроці $(k+1)$ знаходимо із наступного співвідношення:

$$c_{1,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^1, \quad (2.41)$$

$$\text{де } \alpha_{i+1}^1 = \frac{b_i^1}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}, \quad \beta_{i+1}^1 = \frac{a_i^1 \beta_i^1 + c_{1,i}^{(k)} + f_i^{1,(k+1)}}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad \alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0,$$

$$\beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1.$$

Для дискретизації різницевого рівняння (2.25) використаємо неявну різницеву схему. Конвективний член $\theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}$ диференціального рівняння (2.25)

апроксимуємо з точністю до другого порядку [230]. Скінченнорізницевий аналог даного диференціального рівняння матиме наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k)}}{\tau} = D_2 \frac{c_{2,i+1}^{(k+1)} - 2c_{2,i}^{(k+1)} + c_{2,i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} + D_{T_2} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} \\ + \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \gamma_2' c_{2,i}^{(k+1)} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$c_{2,i}^{(0)} = \tilde{C}_2^0(ih_1), \quad c_{2,0}^{(k)} = \tilde{C}_2^1(k\tau), \quad c_{2,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_2^2(k\tau), \quad (2.43)$$

де $i = \overline{1, n_1 - 1}, k = \overline{0, n_3}$.

Представимо різницеву схему (2.42) – (2.43) у такому вигляді:

$$\begin{cases} a_i^2 c_{2,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^2 c_{2,i}^{(k+1)} + b_i^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} = -f_i^{2,(k+1)}, \\ c_{2,0}^{(k+1)} = \mu_1^2 c_{2,1}^{(k+1)} + \mu_2^2, \\ c_{2,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^2 c_{2,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^2, \end{cases} \quad (2.44)$$

де

$$\begin{aligned}
a_i^2 &= \frac{D_2}{h_1^2}, \quad b_i^2 = \frac{D_2}{h_1^2}, \quad \bar{c}_i^2 = \frac{2D_2}{h_1^2} + \frac{1}{\tau} + \gamma_2, \\
f_i^{2,(k+1)} &= \frac{c_{2,i}^{(k)}}{\tau} + D_{T_2} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} + \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \\
&\quad - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \quad \mu_1^2 \equiv 0, \mu_2^2 = \tilde{C}_2^1, \mu_3^2 \equiv 0, \mu_4^2 \equiv \tilde{C}_2^2.
\end{aligned}$$

Умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^2| > |a_i^2| + |b_i^2|$ виконуються. Значення концентрації $c_2(x,t)$ на часовому кроці $(k+1)$ знаходимо із наступного співвідношення:

$$c_{2,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^2, \quad (2.45)$$

де

$$\alpha_{i+1}^2 = \frac{b_i^2}{\bar{c}_i^2 - \alpha_i^2 a_i^2}, \quad \beta_{i+1}^2 = \frac{a_i^2 \beta_i^2 + f_i^{2,(k+1)}}{\bar{c}_i^2 - \alpha_i^2 a_i^2}, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad \alpha_1^2 = \mu_1^2 \equiv 0, \quad \beta_1^2 = \mu_2^2 \equiv \tilde{C}_2^1.$$

Скінченно-різницева схема для рівнянь (2.26), (2.29), (2.30) набуде такого вигляду:

$$\begin{aligned}
\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau'} &= \bar{\chi}_j^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - 2q_j^{(k+1)} + q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2^2} + \\
&\quad + \frac{\tilde{r}_+}{D_0} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} + \frac{\tilde{r}_-}{D_0} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2} + D_{T_3} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_2^2},
\end{aligned} \quad (2.46)$$

$$q_j^{(0)} = \tilde{Q}^0(x_i, r_j), \quad q_{n_2}^{(k)} = k_e c_{2,i}^{(k)}, \quad (2.47)$$

$$\text{де } \bar{\chi}_j^{(k)} = \frac{1}{1 + \frac{h_2 |\tilde{r}_j^{(k)}|}{2D_0}} = 1 - \frac{h_2 |\tilde{r}_j^{(k)}|}{2D_0} + O(h_2^2), \quad \tau' = D_0 \tau, \quad \tilde{r} = \tilde{r}_+ + \tilde{r}_-,$$

$$\tilde{r}_+ = \frac{-\tilde{r} + |\tilde{r}|}{2} \geq 0, \quad \tilde{r}_- = \frac{-\tilde{r} - |\tilde{r}|}{2} \leq 0, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{0, n_3}.$$

Для використання методу прогонки представимо різницеву схему (2.46) - (2.47) наступним чином:

$$\begin{cases} a_j^3 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^3 q_j^{(k+1)} + b_j^3 q_{j+1}^{(k+1)} = -f_j^{3,(k+1)}, \\ q_0^{(k+1)} = \mu_1^3 q_1^{(k+1)} + \mu_2^3, \\ q_{n_2}^{(k+1)} = \mu_3^3 q_{n_2-1}^{(k+1)} + \mu_4^3, \end{cases} \quad (2.48)$$

де

$$a_j^3 = \tau' \left(\frac{\bar{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} - \frac{\tilde{r}_-}{h_2 D_0} \right), \quad b_j^3 = \tau' \left(\frac{\bar{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} + \frac{\tilde{r}_+}{h_2 D_0} \right), \quad \bar{c}_j^3 = 1 + \tau' \left(\frac{2\bar{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} + \frac{1}{h_2 D_0} (\tilde{r}_+ - \tilde{r}_-) \right),$$

$$f_i^3 = D_{T_3} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1^2}, \quad \mu_1^3 \equiv 1, \mu_2^3 = 0, \mu_3^3 \equiv 0, \mu_4^3 \equiv 0.$$

Стійкість прогонки забезпечено, адже умова $|\bar{c}_j^3| > |a_j^3| + |b_j^3|$ виконується.

Значення концентрації $q(x, r, t)$ на часовому кроці $(k+1)$ знаходимо за допомогою співвідношення

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^3 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^3, \quad (2.49)$$

$$\text{де } \alpha_{j+1}^3 = \frac{b_j^3}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}, \quad \beta_{j+1}^3 = \frac{a_j^3 \beta_j^3 + f_j^{3,(k+1)}}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad \alpha_1^3 = \mu_1^3 \equiv 1,$$

$$\beta_1^3 = \mu_2^3 \equiv 0.$$

Для знаходження температури $T(x, t)$ з різницевого рівняння (2.27), використаємо метод прогонки. Для цього представимо різницеву схему у такому вигляді:

$$\bar{c}_T \frac{T_i^{(k+1)} - T_i^{(k)}}{\tau} = \mu_i^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} +$$

$$+ \frac{\rho c_p}{\lambda_T} \left((r^+)_i^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - T_i^{(k+1)}}{h_1} + (r^-)_i^{(k)} \frac{T_i^{(k+1)} - T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right), \quad (2.50)$$

$$T_i^{(0)} = \tilde{T}_0(ih_1), \quad T_0^{(k)} = \tilde{T}_1(k\tau), \quad T_{n_1}^{(k)} = \tilde{T}_2(k\tau), \quad (2.51)$$

де $i = \overline{1, n_1 - 1}, k = \overline{0, n_3}$.

Введемо наступні позначення: $\mu_i^{(k)} = \frac{1}{1 + 0,5h_1\rho c_p |r_i^{(k)}|}$, $\bar{c}_T = \frac{c_T}{\lambda_T}$.

Для знаходження значення температури $T(x,t)$ із скінченно-різницевої схеми (2.50)-(2.51) запишемо наступне:

$$\begin{cases} a_i^4 T_{i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^4 T_i^{(k+1)} + b_i^4 T_{i+1}^{(k+1)} = -f_i^{4,(k+1)}, \\ T_0^{(k+1)} = \mu_1^4 T_1^{(k+1)} + \mu_2^4, \\ T_{n_1}^{(k+1)} = \mu_3^4 T_{n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^4, \end{cases} \quad (2.52)$$

$$a_i^4 = \frac{\mu_i^{(k)}}{h_1^2} - \frac{\rho c_p}{\lambda_T} \frac{(r^-)_i^{(k)}}{h_1}, \quad b_i^4 = \frac{\mu_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{\rho c_p}{\lambda_T} \frac{(r^+)_i^{(k)}}{h_1},$$

$$\bar{c}_i^4 = \frac{2\mu_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{\rho c_p}{\lambda_T} \left(\frac{(r^+)_i^{(k)}}{h_1} - \frac{(r^-)_i^{(k)}}{h_1} \right) + \frac{\bar{c}_T}{\tau}, \quad f_i^{4,(k+1)} = \frac{\bar{c}_T}{\tau} T_i^{(k)}, \quad \mu_1^4 = 0, \quad \mu_2^4 = \tilde{T}_1, \quad \mu_3^4 = 0,$$

$$\mu_4^4 = \tilde{T}_2.$$

Можна показати, що умови стійкості методу прогонки $|\bar{c}_i^4| > |a_i^4| + |b_i^4|$ виконуються, тому значення температури на часовому кроці $(k+1)$ знаходимо із наступного співвідношення:

$$T_i^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^4 T_{i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^4,$$

$$\text{де } \alpha_{i+1}^4 = \frac{b_i^4}{\bar{c}_i^4 - \alpha_i^4 a_i^4}, \quad \beta_{i+1}^4 = \frac{a_i^4 \beta_i^4 + f_i^{4,(k+1)}}{\bar{c}_i^4 - \alpha_i^4 a_i^4}, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad \alpha_1^4 = \mu_1^4 = 0,$$

$$\beta_1^4 = \mu_2^4 = \tilde{T}_1.$$

Скінченнорізницевий аналог закону (2.27) для обчислення швидкості фільтрації в неізотермічних умовах має наступний вигляд:

$$v_i^{(k)} = -K_i^{(k)}(c_{1,i}^{(k)}, T_i^{(k)}) \frac{h_{i+1} - h_{i-1}}{2h_1} + (v_c)_i^{(k)}(c_{1,i}^{(k)}) \frac{c_{1,i+1}^{(k)} - c_{1,i-1}^{(k)}}{2h_1} + v_T \frac{T_{i+1}^{(k)} - T_{i-1}^{(k)}}{2h_1}, \quad (2.53)$$

$$i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}.$$

З рівняння нерозривності (2.28) отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{dv}{dx} &= \frac{d\left(-K(c_1, T) \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} + v_T \frac{\partial T}{\partial x}\right)}{dx} = -K(c_1, T) \frac{d^2h}{dx^2} - \\ &-\frac{d(-K(c_1, T))}{dx^2} \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \frac{\partial(v_c(c_1))}{\partial x} \frac{\partial c_1}{\partial x} + v_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0, \end{aligned} \quad (2.54)$$

Для дискретизації рівняння (2.54) використаємо монотонну різницеву схему О. А. Самарського [231]. В результаті отримаємо скінченно-різницевий аналог даного диференціального рівняння:

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_i^{(k)} \frac{h_{i-1} - 2h_i + h_{i+1}}{h_1^2} + (\bar{r}^+)_i^{(k)} \frac{h_{i+1} - h_i}{h_1} + (\bar{r}^-)_i^{(k)} \frac{h_i - h_{i-1}}{h_1} + \\ + (v_c)_i^{(k)} \frac{c_{1,i-1}^{(k)} - 2c_{1,i}^{(k)} + c_{1,i+1}^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(v_c)_{i+1}^{(k)} - (v_c)_{i-1}^{(k)}}{2h_1} \frac{c_{1,i-1}^{(k)} - c_{1,i+1}^{(k)}}{2h_1} + \\ + v_T \frac{T_{i-1}^{(k)} - 2T_i^{(k)} + T_{i+1}^{(k)}}{h_1^2} = 0, \end{aligned} \quad (2.55)$$

$$h_0^{(k)} = \tilde{H}_1, \quad h_{n_1}^{(k)} = \tilde{H}_2, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{0, n_3}, \quad (2.56)$$

$$\text{де } \bar{\mu}_i^{(k)} = \frac{1}{1 + 0,5h_1 |\bar{r}_i^{(k)}|}, \quad \bar{r}_i^{(k)} = \frac{1}{K_i^{(k)}(c_{1,i}^{(k)}, T_i^{(k)})} \cdot \frac{K_{i+1}^{(k)}(c_{1,i+1}^{(k)}, T_{i+1}^{(k)}) - K_{i-1}^{(k)}(c_{1,i-1}^{(k)}, T_{i-1}^{(k)})}{2h_1},$$

$$(\bar{r}^+)_i^{(k)} = \frac{-\bar{r}_i^{(k)} + |\bar{r}_i^{(k)}|}{2} \geq 0, \quad (\bar{r}^-)_i^{(k)} = \frac{-\bar{r}_i^{(k)} - |\bar{r}_i^{(k)}|}{2} \leq 0.$$

Різницєва схема (2.55)-(2.56) прийме наступний вигляд:

$$\begin{cases} a_i^5 h_{i-1} - \bar{c}_i^5 h_i + b_i^5 h_{i+1} = -f_i^{5,(k)}, \\ h_0 = \mu_1^4 h_1 + \mu_2^4, \\ h_{n_1} = \mu_3^4 h_{n_1-1} + \mu_4^4, \end{cases} \quad (2.57)$$

$$\text{де: } a_i^5 = \frac{\bar{\mu}_i^{(k)}}{h_1^2} - \frac{(\bar{r}^-)_i^{(k)}}{h_1}, \quad b_i^5 = \frac{\bar{\mu}_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(\bar{r}^+)_i^{(k)}}{h_1}, \quad \bar{c}_i^5 = \frac{2\bar{\mu}_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(\bar{r}^+)_i^{(k)}}{h_1} - \frac{(\bar{r}^-)_i^{(k)}}{h_1},$$

$$f_i^{5,(k)} = (v_c)_i^{(k)} \frac{c_{1,i-1}^{(k)} - 2c_{1,i}^{(k)} + c_{1,i+1}^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(v_c)_{i+1}^{(k)} - (v_c)_{i-1}^{(k)}}{2h_1} \frac{c_{1,i-1}^{(k)} - c_{1,i+1}^{(k)}}{2h_1} +$$

$$+ v_T \frac{T_{i-1}^{(k)} - 2T_i^{(k)} + T_{i+1}^{(k)}}{h_1^2},$$

$$\mu_1^5 = 0, \mu_2^5 = \tilde{H}_1, \mu_3^5 = 0, \mu_4^5 = \tilde{H}_2.$$

Легко показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^5| > |a_i^5| + |b_i^5|$ виконуються.

Значення напору послідовно знаходимо, використовуючи співвідношення

$$h_i = \alpha_{i+1}^5 h_{i+1} + \beta_{i+1}^5, \quad (2.58)$$

$$\text{де } \alpha_{i+1}^5 = \frac{b_i^5}{\bar{c}_i^5 - \alpha_i^5 a_i^5}, \quad \beta_{i+1}^5 = \frac{a_i^5 \beta_i^5 + h_i + f_i^{5,(k)}}{\bar{c}_i^5 - \alpha_i^5 a_i^5}, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{0, n_3}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

$$\alpha_1^5 = \mu_1^5 = 0, \beta_1^5 = \mu_2^5 = \tilde{H}_1.$$

2.2.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз

Проведено чисельні експерименти з використанням розробленого програмного комплексу NanoSurface з наступними вхідними даними:

$$l = 10 \text{ м}, \tilde{H}_1 = 1 \text{ м}, \tilde{H}_2 = 0,1 \text{ м}, \sigma_1 = 0,4, \tau = 30 \text{ дїб}, \gamma_1 = \gamma_2 = 0,0065, k_e = 1,$$

$$R = 5 \cdot 10^{-5} \text{ м}, D_2 = 1 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, D_0 = 2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}},$$

$$\tilde{C}_1^1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_1^2(t) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_2^1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_2^2(t) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},$$

$$\tilde{C}_1^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_2^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, Q^0(x, r) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},$$

$$c_p = 4,2 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot \text{°C}}, c_T = 2137 \frac{\text{кДж}}{\text{м}^3 \cdot \text{°C}}, \lambda_T = 108 \frac{\text{кДж}}{\text{м} \cdot \text{°C} \cdot \text{доба}},$$

$$\rho = 1100 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{T}_1(t) = 25 \text{ °C}, \tilde{T}_2(t) = 5 \text{ °C}, \tilde{T}_0(x) = 5 \text{ °C}, D_{T1} = 0,005 \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}.$$

В результаті обробки результатів чисельних експериментів було отримано графіки швидкості фільтрації, розподілу концентрацій сольових розчинів при

фільтрації для різних значень коефіцієнта фільтрації та коефіцієнта конвективної дифузії. Також продемонстровано вплив колоїдних частинок на вертикальну міграцію радіонуклідів, що відображено на рис 2.8-2.10.

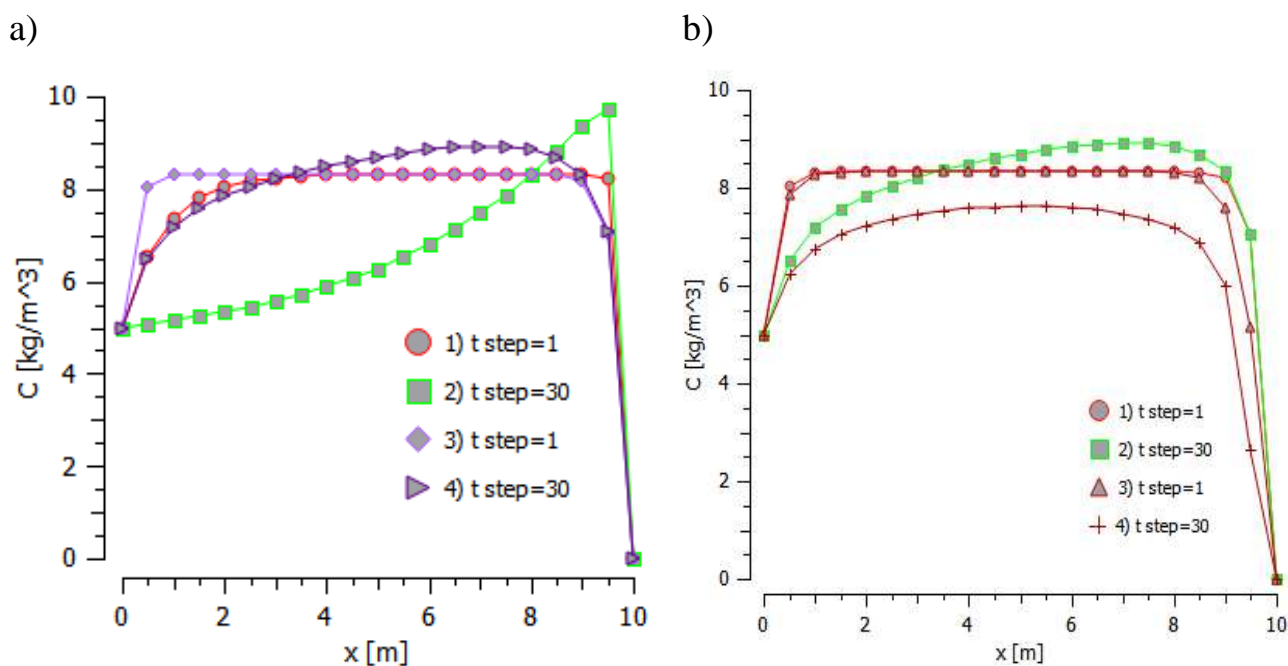


Рис. 2.7. Розподіл значень концентрації $c_1(x)$ в залежності від глибини x : а) для коефіцієнта фільтрації $k = const$ (графіки 1, 2) та $k = k(x, c_1)$ (графіки 3, 4); б) при коефіцієнті дисперсії $\lambda = 1$ (графіки 1, 2) та $\lambda = 8$ (графіки 3, 4) (часові кроки: 1) 1 місяць, 2) 2,5 роки, 3) 1 місяць, 4) 2,5 роки)

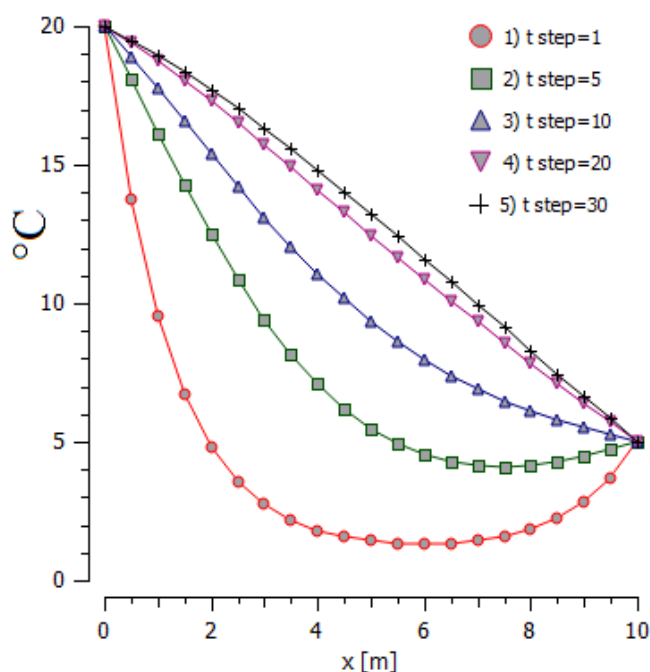


Рис. 2.8. Розподіл значень температури $T(x)$ по товщині шару ґрунту x при різних часових кроках: 1) 1 місяць, 2) 5 місяців, 3) 11 місяців, 4) 20 місяців
5) 2,5 роки.

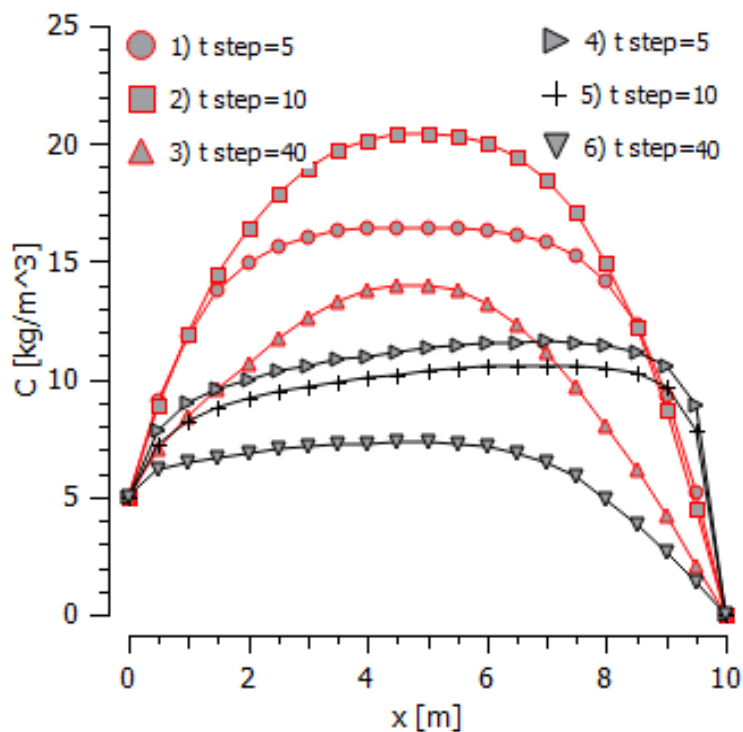


Рис. 2.9. Розподіл концентрації $c_1(x)$ по товщині шару ґрунту x в неізотермічних (графіки № 1, 2 та 3) та ізотермічних умовах (графіки № 4, 5 та 6) при різних часових кроках: 1) і 4) 5 міс., 2) і 5) 10 міс., 3) і 6) 40 міс.

2.3. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтра-вловлювача в каталітичних пористих середовищах з пастками

2.3.1. Постановка задачі

Розглянемо процес переносу забруднюючих частинок, що розчинені у воді в рамках постановки пункту 2.1. При цьому процеси фільтрації та масопереносу розчинених у воді речовин підлягають законам Дарсі та Фіка. Відмінністю цієї моделі від попередніх буде врахування дифузії радіонуклідів в скелеті ґрунту. Оскільки ця дифузія є дуже малою, то її можна вважати "пасткою" для цих частинок [129, 232]. Такими забруднюючими частинками можуть виступати радіонукліди (наприклад, ^{90}Sr (стронцій-90) або ^{137}Cs (цезій-137)), важкі метали (Pb (II) або Cr (VI)), органічні сполуки, тощо. Їх міграція відбувається завдяки переносу фільтраційним потоком зі швидкістю U під впливом конвективної дифузії в каталітичному пористому середовищі до фільтра-вловлювача, що розташований на глибині l (рис. 2.10). Каталітичне пористе середовище представляє собою скелет ґрунту із адсорбованими шарами води, що містять мікро- або наночастинки. Порожнини скелету заповнені водним поровим розчином (т.з. насичене пористе середовище).

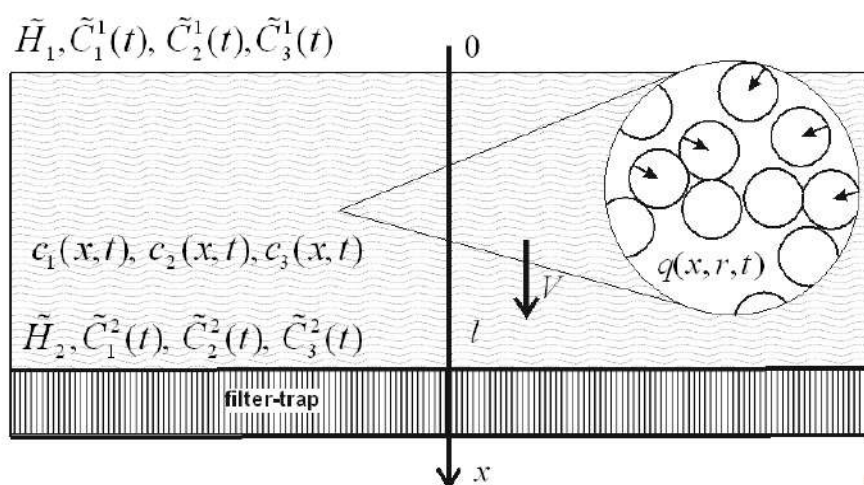


Рис. 2.10. Вертикальна міграція радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача

Відомі п'єзометричні напори на верхній та нижній (підстилаючій) 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 частинок, що знаходяться в конвективно рухомому поровому розчині), $\tilde{C}_2^0(x)$ (для частинок, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді), $\tilde{C}_3^0(x)$ (для частинок, розташованих в скелеті ґрунту) та $\tilde{Q}^0(x,r)$. На верхній поверхні ґрунту задані концентрації $\tilde{C}_1^1(x)$, $\tilde{C}_2^1(x)$ та $\tilde{C}_3^1(t)$, а на фільтрівловлювачі задаються концентрації $\tilde{C}_1^2(x)$, $\tilde{C}_2^2(t)$, $\tilde{C}_3^2(t)$ або відповідні потоки концентрацій

$$\left. \frac{\partial c_1}{\partial x} \right|_{x=l} = \left. \frac{\partial c_2}{\partial x} \right|_{x=l} = \left. \frac{\partial c_3}{\partial x} \right|_{x=l} = 0.$$

Потрібно дослідити розподіли концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $c_3(x,t)$, $q(x,r,t)$ по області фільтрації з часом, що дасть можливість зробити прогноз щодо ступеня очищення ґрунтів та їх подальшого використання.

Математичну модель поставленої задачі у лінійній постановці в одновимірному випадку на основі робіт [128, 129, 197, 198], [227] можна описати наступною крайовою задачею:

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (2.59)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 + \gamma_3 c_3 - \theta \left. \frac{\partial q}{\partial r} \right|_{r=R}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (2.60)$$

$$\frac{\partial c_3}{\partial t} = D_3 \frac{\partial^2 c_3}{\partial x^2} + \gamma_2 c_2 - \gamma_3 c_3, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (2.61)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (2.62)$$

$$v = -k(c_1) \frac{dh}{dx} + v_c \frac{\partial c_1}{\partial x}, \operatorname{div} \vec{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, 0 < x < l, t > 0, \quad (2.63)$$

$$\left. \frac{\partial q(x, r, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, 0 < x < l, t > 0, \quad (2.64)$$

$$q(x, r, t) \Big|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x, t), 0 < x < l, t > 0, \quad (2.65)$$

$$l_1 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^1(t), l_2 c_1(l, t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (2.66)$$

$$l_3 c_2(0, t) = \tilde{C}_2^1(t), l_4 c_2(l, t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (2.67)$$

$$l_5 c_3(0, t) = \tilde{C}_3^1(t), l_6 c_3(l, t) = \tilde{C}_3^2(t), \quad (2.68)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, h(l) = \tilde{H}_2, \quad (2.69)$$

$$c_1(x, 0) = \tilde{C}_1^0(x), c_2(x, 0) = \tilde{C}_2^0(x), c_3(x, 0) = \tilde{C}_3^0(x), \quad (2.70)$$

$$q(x, r, 0) = \tilde{Q}^0(x, r).$$

Тут: $c_1(x, t)$, D_1 – концентрація та коефіцієнт конвективної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у фільтраційному потоці; $c_2(x, t)$, D_2 – концентрація та коефіцієнт молекулярної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у воді, яка зв'язана зі скелетом ґрунту; $c_3(x, t)$, D_3 – концентрація і коефіцієнт дифузії радіонуклідів в скелеті ґрунту, ця дифузія оцінки є такою малою, що її можна вважати "пасткою" для цих частинок; $q(x, r, t)$, D_0 – концентрація та коефіцієнт дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R , що знаходяться у скелеті ґрунту; k_e – коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового масопереносу на масоперенос в скелеті ґрунту; v – швидкість фільтрації; k – коефіцієнт фільтрації води з мігрантами; $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – коефіцієнти масообміну; σ_1 – пористість ґрунту; x – вертикальна координата, напрямлена вертикально вниз, $l_i, i = \overline{1,4}$ – диференціальні оператори, що задають граничні умови відповідно при $x = 0$ та $x = l$; t – час.

Коефіцієнт дифузії D_1 є на декілька порядків більшим ніж D_2 , а в свою чергу D_2 є на декілька порядків більшим ніж в об'ємі елементів скелету ґрунту D_3 . Оскільки даний коефіцієнт D_3 є дуже малим в порівнянні з D_1 , то вважається, що скелет ґрунту є «пастками» для цих частинок [129, 232].

Рівняння (2.59) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (2.60) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (2.61) описує міграцію радіонуклідів в скелеті ґрунту (з пастками); (2.62) описує внутрішночастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q , що зв'язана із концентрацією c_2 умовою (2.65); (2.63) описує фільтрацію в каталітичному пористому середовищі. Крайові умови для концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $c_3(x,t)$, $q(x,r,t)$ та напору $h(x)$ мають вигляд (2.66)-(2.70).

Крайова задача (2.59)-(2.70) поставлена коректно та виконуються умови існування та єдиності її розв'язку [199, 200].

2.3.2. Чисельний розв'язок крайової задачі

Для знаходження чисельного розв'язку крайової задачі (2.59)-(2.70) використаємо метод скінченних різниць. Для цього запишемо неявну різницеву схему для рівняння (2.60), а для (2.59), (2.61), (2.62) та (2.63) використаємо монотонну різницеву схему [228] або [229]. Значення концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $q(x,r,t)$ та швидкості фільтрації знаходяться аналогічним способом, що описаний в п. 2.1.2.

Скінченнорізницевий аналог диференціального рівняння (2.61) матиме наступний вигляд:

$$\frac{c_{3,i}^{(k+1)} - c_{3,i}^{(k)}}{\tau} = D_3 \frac{c_{3,i+1}^{(k+1)} - 2c_{3,i}^{(k+1)} + c_{3,i-1}^{(k+1)}}{h^2} + \gamma_2 c_{2,i}^{(k)} - \gamma_3 c_{3,i}^{(k)}, \quad (2.71)$$

$$c_{3,i}^{(0)} = \tilde{C}_3^0(x_i), \quad c_{3,0}^{(k)} = \tilde{C}_3^1(t_k), \quad c_{3,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_3^2(t_k), \quad (2.72)$$

де $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

Представимо різницеву схему (2.71), (2.72) такому вигляді:

$$\begin{cases} a_i^3 c_{3,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^3 c_{3,i}^{(k+1)} + b_i^3 c_{3,i+1}^{(k+1)} = -f_i^{3,(k+1)}, \\ c_{3,0}^{(k+1)} = \mu_1^3 c_{3,1}^{(k+1)} + \mu_2^3, \\ c_{3,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^3 c_{3,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^3, \end{cases} \quad (2.73)$$

де $a_i^3 = \frac{D_3}{h_1^2}$, $b_i^3 = \frac{D_3}{h_1^2}$, $\bar{c}_i^3 = \frac{2D_3}{h_1^2} + \frac{1}{\tau} + \gamma_3$, $f_i^{3,(k+1)} = \frac{c_{3,i}^{(k)}}{\tau} + \gamma_2 c_{2,i}^{(k)}$,

$$\mu_1^3 \equiv 0, \quad \mu_2^3 = \tilde{C}_3^1, \quad \mu_3^3 \equiv 0, \quad \mu_4^3 \equiv \tilde{C}_3^2.$$

Можна показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^3| > |a_i^3| + |b_i^3|$ виконуються.

Значення концентрації $c_3(x, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки

$$c_{3,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^3 c_{3,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^3, \quad (2.74)$$

де $\alpha_{i+1}^3 = \frac{b_i^3}{\bar{c}_i^3 - \alpha_i^3 a_i^3}$, $\beta_{i+1}^3 = \frac{a_i^3 \beta_i^3 + f_i^{3,(k+1)}}{\bar{c}_i^3 - \alpha_i^3 a_i^3}$,

$$i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad \alpha_1^3 = \mu_1^3 \equiv 0, \quad \beta_1^3 = \mu_2^3 \equiv \tilde{C}_3^1.$$

2.3.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз

Як приклад, розглянуто задачу локалізації забруднених речовин та очищення шару ґрунту з такими вихідними параметрами:

$$l = 10m, \quad \tilde{H}_1 = 1m, \quad \tilde{H}_2 = 0m, \quad \sigma_1 = 0,4, \quad \tau = 30 \text{ дiб}, \quad \gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = 0,0065, \quad k_e = 1,$$

$$D_1 = 2 \cdot 10^{-3} \frac{M^2}{\text{дoбa}}, \quad D_2 = 1 \cdot 10^{-5} \frac{M^2}{\text{дoбa}}, \quad D_3 = 1 \cdot 10^{-6} \frac{M^2}{\text{дoбa}}, \quad D_0 = 1 \cdot 10^{-17} \frac{M^2}{\text{дoбa}},$$

$$\tilde{C}_1^1(t) = 5 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, \quad \tilde{C}_1^2(t) = 0 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, \quad \tilde{C}_2^1(t) = 5 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, \quad \tilde{C}_2^2(t) = 0 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3},$$

$$\tilde{C}_1^0(x) = 5 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, \quad \tilde{C}_2^0(x) = 5 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, \quad Q^0(x, r) = 0 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, \quad R = 5 \cdot 10^{-8} M, \quad \theta = 3 \cdot 10^{-10}.$$

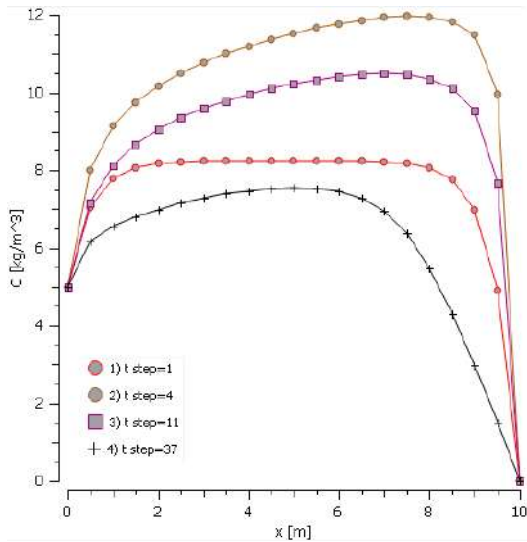


Рис. 2.11. Розподіл концентрації $c_1(x)$ при різних часових кроках:
1) $t = 30$ діб, 2) $t = 4$ міс., 3) $t = 11$ міс.,
4) $t = 37$ міс.

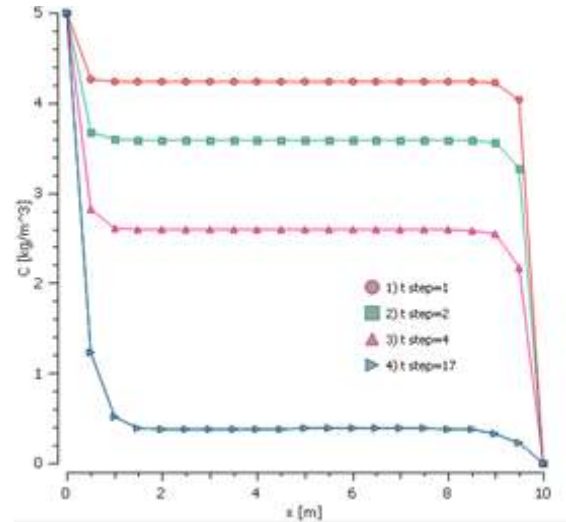


Рис. 2.12. Розподіл концентрації $c_2(x)$ різних часових кроках:
1) $t = 30$ діб, 2) $t = 2$ міс., 3) $t = 4$ міс.,
4) $t = 17$ міс.

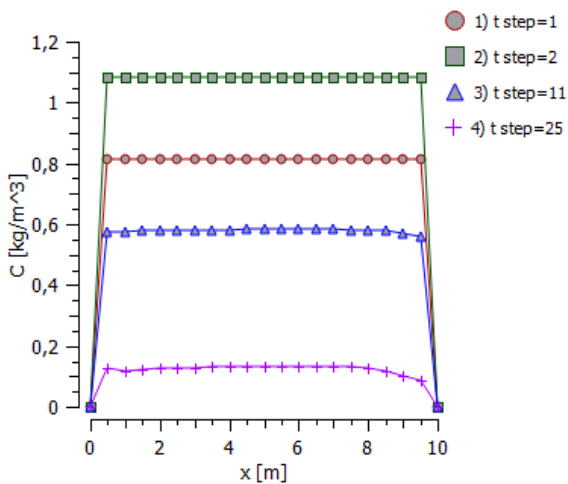


Рис. 2.13. Розподіл концентрації $c_3(x)$ при різних часових кроках:
1) $t = 30$ діб, 2) $t = 2$ міс., 3) $t = 11$ міс.,
4) $t = 25$ міс.

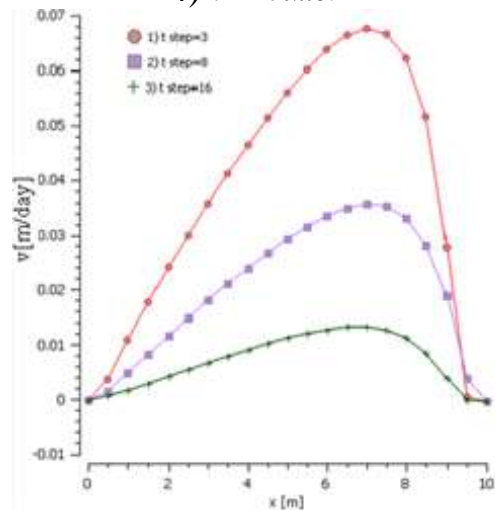


Рис. 2.14. Швидкість фільтрації при різних часових кроках:
1) $t = 3$ міс., 2) $t = 8$ міс.,
3) $t = 16$ міс.

Графіки розподілу концентрацій $c_1(x)$, $c_2(x)$, $c_3(x)$ та швидкості фільтрації при різних часових кроках зображено на рисунках 2.12-2.15. Як помітно з графіків, найбільшого значення набуває концентрація $c_1(x)$ ближче до фільтровловлювача. Це пояснюється великим коефіцієнтом конвективної дифузії та впливом доданку-джерела, що містить $c_2(x)$ з рівняння (2.59).

Вартим уваги є порівняльний розподіл концентрацій $c_2(x)$ та $c_3(x)$ з часом по товщині шару ґрунту (рис 2.16). Значення концентрації $c_2(x)$ поступово зменшується з часом рівномірно на всій глибині шару ґрунту з початкового та граничного $\tilde{C}_2^0(x) = \tilde{C}_2^1(x) = 5 \frac{кг}{м^3}$ до $\tilde{C}_2^2(x) = 0 \frac{кг}{м^3}$. В той час, як концентрація $c_3(x)$ поступово зростає на противагу $c_2(x)$, графіки їхніх розподілів перетинаються на часовому кроці $t = 5 \text{ міс}$. З деякою затримкою концентрація $c_3(x)$ досягнувши свого максимального значення, плавно спадає.

Після того, як значення концентрацій $c_1(x)$ та $c_2(x)$ не вказуватимуть на наявність забруднюючих речовин, вони все ще будуть присутні у скелеті ґрунту у так званих «пастках», тобто наявні будуть з концентрацією $c_3(x)$. Дане явище було підтверджене рядом досліджень. Зокрема, експериментальні дані, що були отримані через 3,5-4 роки після аварії на ЧАЕС підтверджують характерний розподіл концентрації для ґрунтового середовища із пастками [233].

Проведено серію чисельних експериментів з врахуванням та неврахуванням тих чи інших процесів (дифузії в мікро-/наночастинках, скелеті ґрунту, тощо), що описуються рівняннями (2.59)-(2.62). Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ з врахуванням дифузії в наночастинках та без їх врахування наведено на рис. 2.17.

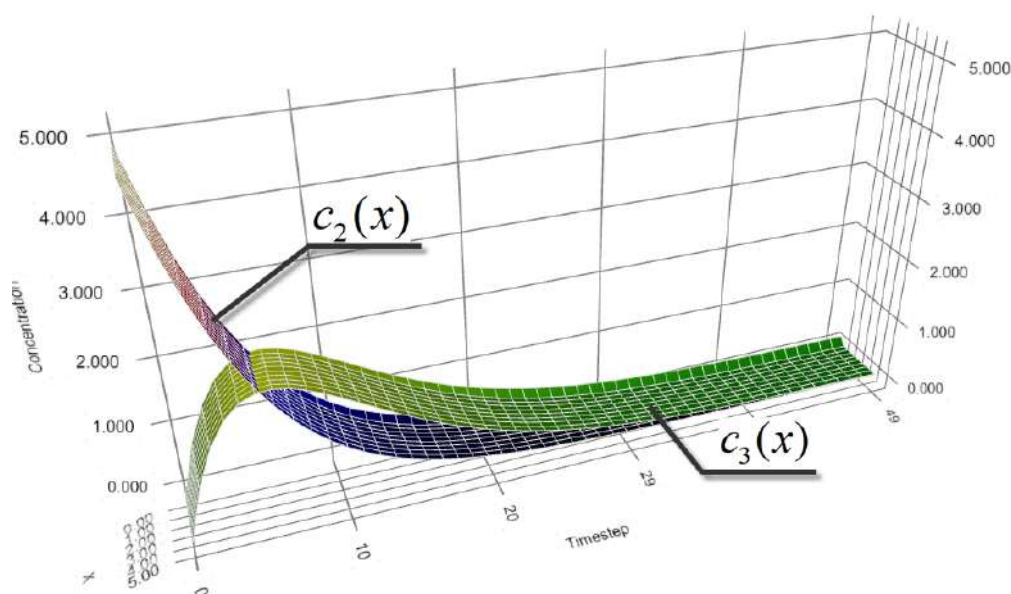


Рис. 2.15. Порівняльний розподіл концентрацій $c_2(x)$ та $c_3(x)$ з часом по товщині шару ґрунту

Вплив процесу адсорбції забруднюючих речовин (у нашому випадку радіонуклідів) наночастинками на загальний перебіг процесу у чисельних розрахунках досягається за допомогою доданку $\theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}$ в рівнянні (2.60).

Вартим уваги є те, що на першому часовому кроці в точці $x = 0 \text{ м}$ дане значення дорівнювало $0,0694 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, а через кожні 3-4 часові ітерації порядок числа

зменшувався (на 3-му часовому кроці $\theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R} = 0,005 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, на 10-му $0,0003 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, на

15-му $9,884 \cdot 10^{-5} \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$). Однак, навіть такі малі значення суттєво зменшили

ступінь забруднення шару ґрунту. Наприклад, через 3 місяці після забруднення (3-й часовий крок) на глибині $x = 7 \text{ м}$, експеримент без врахування дифузії в

наночастинках, показав значення концентрації $11,9 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, а з врахуванням

наночастинок дане значення було рівним $8,57 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$. Таким чином, сорбуючі наночастишки на 27% зменшили вплив забруднення.

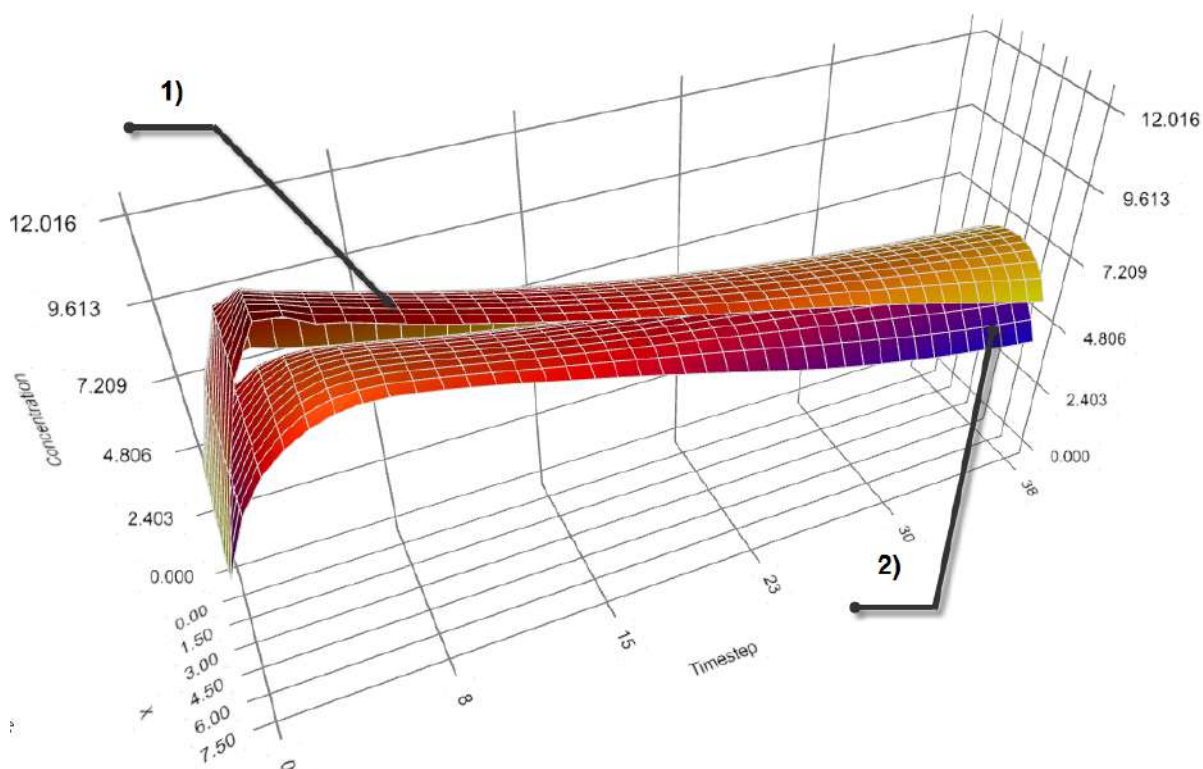


Рис. 2.16. Порівняльний розподіл концентрації $c_1(x)$ з часом без врахування дифузії у частинках радіуса R (графік 1) та з її врахуванням (графік 2)

Аналогічним чином було досліджено вплив дифузії у наночастишках радіуса R на дифузійні процеси в скелеті ґрунту (так званих «пастках»). Як було відмічено раніше, 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 воді, концентрація забруднених речовин буде зменшуватися. Використання сорбуючих наночастинок призводить до зменшення екстремуму розподілу забруднюючої речовини майже вдвічі (рис 2.17). Наприклад, максимальне

значення концентрації $c_3(x)$, згідно чисельного експерименту, без врахування наночастинок було на 6-му часовому кроці – $2,032 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, а при наявності сорбуючих елементів, максимальний розподіл досягався раніше, на 3-му часовому кроці, і був рівний $1,157 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.

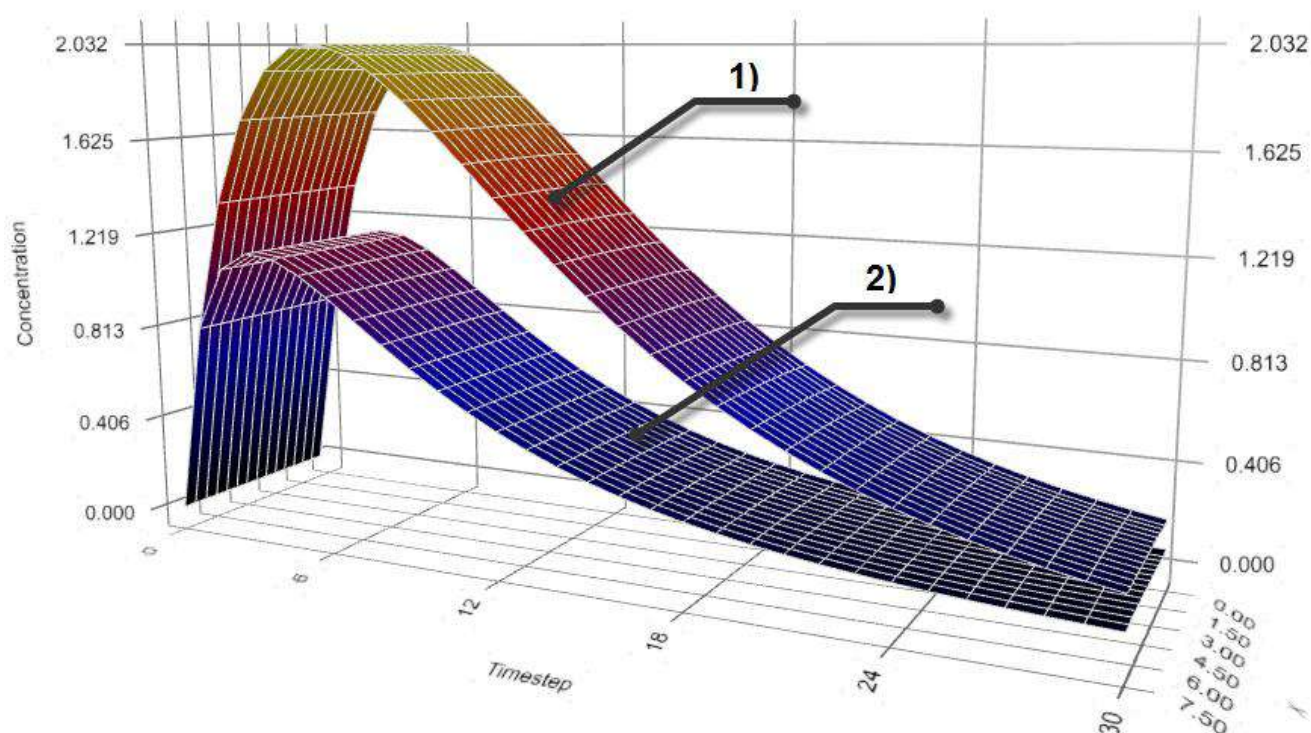


Рис. 2.17. Порівняльний розподіл концентрації $c_3(x)$ з часом без врахування дифузії у частинках радіуса R (графік 1) та з її врахуванням (графік 2)

2.4. Висновки до розділу 2

В п. 2.1 сформульовано постановку та побудовано математичну модель вертикальної міграції радіонуклідів у горизонтальному шарі ґрунту великої протяжності. Шар ґрунту містить сорбуючі мікрочастинки і представляє собою каталітичне пористе середовище при наявності фільтра-вловлювача. Чисельний розв'язок відповідної крайової задачі знайдено методом скінченних різниць з використанням монотонної різницевої схеми. Здійснено програмну реалізацію

поставленої крайової задачі у власному кросплатформенному програмному комплексі NanoSurface. Отримано графіки розподілів концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $q(x,r,t)$.

Аналіз результатів проведених чисельних експериментів показав ефективний вплив мікрочастинок на швидкість міграції радіонуклідів. Зокрема, як видно з рис. 2.4, при наявності мікрочастинок процес фільтраційного очищення шару родючого ґрунту відбувається швидше і родючий шар ґрунту стає більш придатним до використання за менший проміжок часу.

В п. 2.2 було удосконалено розроблену в п.2.1 математичну модель на випадок неізотермічних умов. Для цього програмний комплекс NanoSurface було доповнено новим модулем для здійснення чисельних експериментів. Аналіз отриманих результатів дозволив зробити ряд висновків. Зокрема, виявлено, що розподіли концентрації сольових розчинів у часі, коли $k = k(x, c_1)$ є більш повільними і передбачуваними (рис. 2.8а), а підвищуючи дисперсійний параметр, розчин солі більш швидко розподіляється в шарі ґрунту (рис.2.8б). Здійснено порівняльний аналіз результатів чисельного експерименту для ізотермічного та неізотермічного режимів (рис 2.10), який показав важливість впливу тепла на значення концентрації. Тому даним ефектом не можна нехтувати. Також аналіз результатів показав ефективний вплив каталітичного мікропористого середовища на процес масопереносу.

В п 2.3 досліджено роль скелету ґрунту, а саме вплив так званих «пасток» на процеси утримання забруднених речовин. Математична модель була доповнена відповідними рівняннями, що описують процес дифузії в решітці ґрунту, відповідними крайовими та граничними умови. Чисельний розв'язок знайдено методом скінченних різниць з використанням монотонної різницевої схеми та реалізовано процес обчислення у вигляді програмного модуля комп'ютерного комплексу NanoSurface. Здійснено ряд експериментів для дослідження впливу пасток. Результати показали потенційну затримку

очищення ґрунтового масиву завдяки повільній дифузії у скелеті ґрунту. Також при заданих вихідних параметрах комп'ютерного моделювання було продемонстровано, що на 27% зменшується вплив забруднення при використанні сорбуючих наночастинок, тобто відбувається поглинання даного забруднення.

Результати даного розділу опубліковано в роботах [3, 234–238].

РОЗДІЛ 3
МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МІГРАЦІЇ
РАДІОНУКЛІДІВ ПРИ ФІЛЬТРАЦІЇ ПІДЗЕМНИХ ВОД У
КАТАЛІТИЧНИХ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ В РАМКАХ
НЕЛІНІЙНОЇ ОДНОВИМІРНОЇ МОДЕЛІ

3.1. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтра-вловлювача у каталітичних пористих середовищах в ізотермічних умовах

3.1.1. Постановка задачі та її математична модель

В результаті різниці напорів відбувається перенесення розчинених у воді речовин фільтраційним потоком. При цьому процеси фільтрації розчинених у воді речовин підлягають законам Дарсі та Фіка. Розглянемо процес очищення 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 U під впливом конвективної дифузії з врахуванням каталітичного мікропористого середовища при наявності фільтрів-вловлювачів (рис. 2.2).

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 частинок, що знаходяться в конвективно рухомому поровому розчині), $\tilde{C}_2^0(x)$ (для частинок, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді) та $\tilde{Q}^0(x,r)$. На верхній

поверхні ґрунту відомі концентрації $\tilde{C}_1^1(t)$ та $\tilde{C}_2^1(t)$, а на фільтрі-вловлювачі задаються концентрації $\tilde{C}_1^2(t)$, $\tilde{C}_2^2(t)$.

Потрібно дослідити розподіли концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$ та $q(x,r,t)$ по області фільтрації з часом, що дасть можливість зробити прогноз щодо ступеня очищення ґрунтів та їх подальшого використання.

Математичну модель поставленої задачі в одновимірному випадку для ґрунтового середовища та фільтрів-вловлювачів можна описати наступною крайовою задачею:

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) - v(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right) + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 - \theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (3.3)$$

$$v = -k(c_1) \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad \text{div} \vec{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial q(x,r,t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (3.5)$$

$$q(x,r,t) \Big|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x,t), \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (3.6)$$

$$l_1 c_1(0,t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(0,t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (3.7)$$

$$l_3 c_2(0,t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l,t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (3.8)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, \quad h(l) = \tilde{H}_2, \quad (3.9)$$

$$c_1(x,0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x,0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad q(x,r,0) = \tilde{Q}^0(x,r), \quad (3.10)$$

де $c_1(x,t)$, D_1 – концентрація та коефіцієнт конвективної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у фільтраційному потоці; $c_2(x,t)$, D_2 – концентрація та коефіцієнт молекулярної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у воді, яка

зв'язана зі скелетом ґрунту; $q(x,r,t)$, D_0 – концентрація та коефіцієнт дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R , що знаходяться у скелеті ґрунту; k_e – коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового масопереносу на масоперенос в скелеті ґрунту; \mathcal{U} – швидкість фільтрації; k – коефіцієнт фільтрації води з мігрантами; γ_1, γ_2 – коефіцієнти масообміну; σ_1 – пористість ґрунту; $x \in [0; l]$ – вертикальна координата, напрямлена вертикально вниз, $l_i, i = \overline{1, 4}$ – диференціальні оператори, що задають граничні умови відповідно при $x=0$ та $x=l$; t – час, $0 < t < t_1$.

Рівняння (3.1) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (3.2) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (3.3) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q , що зв'язана із концентрацією c_2 умовою (3.6); (3.4) 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 (3.7)-(3.10).

Крайова задача (3.1)-(3.10) поставлена коректно та виконуються умови існування та єдиності її розв'язку [199, 200].

3.1.2. Чисельний розв'язок крайової задачі

Для знаходження чисельного розв'язку крайової задачі (3.1)-(3.10) використаємо метод скінченних різниць. Для цього запишемо неявну різницеву схему для рівняння (3.2), а для (3.1) та (3.3) побудуємо монотонну різницеву схему О.А. Самарського [228].

Введемо різницеву сітку $\omega_{h_1 h_2 \tau}$ з кроками h_1, h_2 і τ по осях Ox, Or та Ot для змінних x, r, t

$$\omega_{h_1 h_2 \tau} = \left\{ \begin{array}{l} \left(x_i, r_j, t_k \right) \left| \begin{array}{l} x_i = ih_1, r_j = jh_2, t_k = k\tau, \\ i = \overline{0, n_1}, j = \overline{0, n_2}, k = \overline{0, n_3}, \\ h_1 n_1 = l, m_2 = R, \tau n_3 = T, \end{array} \right. \end{array} \right\} \quad (3.11)$$

де n_1, n_2, n_3 – кількість кроків по просторових змінних та часу відповідно.

Для дискретизації рівняння (3.1) застосуємо монотонну різницеву схему О.А. Самарського [228]. В результаті скінченнорізницевої аналог диференціального рівняння (3.1) матиме наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \sigma_1 \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k)}}{\tau} = & \frac{\chi_i^{(k)}}{h_1} \left(d_{1,i+1}^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{h_1} - d_{1,i}^{(k)} \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \\ & + \frac{(r^+)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} d_{1,i+1}^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{h_1} + \frac{(r^-)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} d_{1,i}^{(k)} \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1} - \\ & - \gamma_1 c_{1,i}^{(k+1)} + \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$c_{1,i}^{(0)} = \tilde{C}_1^0(x_i), \quad c_{1,0}^{(k)} = \tilde{C}_1^1(t_k), \quad c_{1,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_1^2(t_k), \quad (3.13)$$

де $i = \overline{1, n_1 - 1}, k = \overline{0, n_3}$.

Тут введені наступні позначення:

$$d_{1,i}^{(k)} = \frac{D_{1,i}^{(k)} + D_{1,i-1}^{(k)}}{2}, \quad D_{1,i}^{(k)} = D_1(c_{1,i}^{(k)}), \quad \chi_i^{(k)} = \frac{1}{1 + \frac{h_1 |r_i^{(k)}|}{2D_{1,i}^{(k)}}} = 1 - \frac{h_1 |r_i^{(k)}|}{2D_{1,i}^{(k)}} + O(h_1^2),$$

$$r_i^{(k)} = (r^+)_i^{(k)} + (r^-)_i^{(k)}, \quad (r^+)_i^{(k)} = \frac{-v_i^{(k)} + |v_i^{(k)}|}{2} \geq 0, \quad (r^-)_i^{(k)} = \frac{-v_i^{(k)} - |v_i^{(k)}|}{2} \leq 0.$$

Для знаходження концентрації солей $c_1(x, t)$ з різницевого рівняння (3.12) використаємо метод прогонки. Для цього представимо різницеву схему (3.12), (3.13) у такому вигляді:

$$\begin{cases} a_i^1 c_{1,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^1 c_{1,i}^{(k+1)} + b_i^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} = -c_{1,i}^{(k)} - f_i^{1,(k+1)}, \\ c_{1,0}^{(k+1)} = \mu_1^1 c_{1,1}^{(k+1)} + \mu_2^1, \\ c_{1,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^1 c_{1,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^1, \end{cases} \quad (3.14)$$

де

$$a_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1} \frac{d_{1,i}^{(k)}}{h_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1} - \frac{(r^-)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} \right), \quad b_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1} \frac{d_{1,i+1}^{(k)}}{h_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1} + \frac{(r^+)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} \right),$$

$$\bar{c}_i^1 = 1 + \frac{\tau}{\sigma_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)} (d_{1,i+1}^{(k)} + d_{1,i}^{(k)})}{h_1^2} + \frac{1}{h_1 D_{1,i}^{(k)}} \left((r^+)_i^{(k)} d_{1,i+1}^{(k)} - (r^-)_i^{(k)} d_{1,i}^{(k)} \right) + \gamma_1 \right),$$

$$f_i^{1,(k+1)} = \frac{\tau}{\sigma_1} \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)}, \quad \mu_1^1 \equiv 0, \quad \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1, \quad \mu_3^1 \equiv 0, \quad \mu_4^1 \equiv \tilde{C}_1^2.$$

Можна показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^1| > |a_i^1| + |b_i^1|$ виконуються. Значення концентрації на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$c_{1,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^1, \quad (3.15)$$

де $\alpha_{i+1}^1 = \frac{b_i^1}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}$, $\beta_{i+1}^1 = \frac{a_i^1 \beta_i^1 + c_{1,i}^{(k)} + f_i^{1,(k+1)}}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}$, $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$, $\alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0$,

$$\beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1.$$

Для дискретизації диференційного рівняння (3.2) використаємо неявну різницеву схему. Конвективний член $\theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}$ диференціального рівняння (3.2) апроксимуємо з точністю до другого порядку [239]. Скінченнорізницевий аналог відповідного диференціального рівняння матиме наступний вигляд:

$$\frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k)}}{\tau} = \frac{1}{h_1} \left(d_{2,i+1}^{(k)} \frac{c_{2,i+1}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k+1)}}{h_1} - d_{2,i}^{(k)} \frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) +$$

$$+ \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \quad (3.16)$$

$$c_{2,i}^{(0)} = \tilde{C}_2^0(x_i), \quad c_{2,0}^{(k)} = \tilde{C}_2^1(t_k), \quad c_{2,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_2^2(t_k), \quad (3.17)$$

де $d_{2,i}^{(k)} = \frac{D_{2,i}^{(k)} + D_{2,i-1}^{(k)}}{2}$, $D_{2,i}^{(k)} = D_2(c_{2,i}^{(k)})$, $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

Представимо (3.16) в такому вигляді

$$\begin{cases} a_i^2 c_{2,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^2 c_{2,i}^{(k+1)} + b_i^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} = -f_i^{2,(k+1)}, \\ c_{2,0}^{(k+1)} = \mu_1^2 c_{2,1}^{(k+1)} + \mu_2^2, \\ c_{2,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^2 c_{2,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^2, \end{cases} \quad (3.18)$$

де
$$a_i^2 = \frac{d_{2,i}^{(k)}}{h_1^2}, \quad b_i^2 = \frac{d_{2,i+1}^{(k)}}{h_1^2}, \quad \bar{c}_i^2 = \frac{d_{2,i+1}^{(k)} + d_{2,i}^{(k)}}{h_1^2} + \frac{1}{\tau} + \gamma_2,$$

$$f_i^{2,(k+1)} = \frac{c_{2,i}^{(k)}}{\tau} + \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \quad \mu_1^2 \equiv 0, \quad \mu_2^2 = \tilde{C}_2^1, \quad \mu_3^2 \equiv 0,$$

$$\mu_4^2 \equiv \tilde{C}_2^2.$$

Неважко показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^2| > |a_i^2| + |b_i^2|$ виконуються. Значення концентрації $c_2(x,t)$ на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$c_{2,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^2, \quad (3.19)$$

де
$$\alpha_{i+1}^2 = \frac{b_i^2}{\bar{c}_i^2 - \alpha_i^2 a_i^2}, \quad \beta_{i+1}^2 = \frac{a_i^2 \beta_i^2 + f_i^{2,(k+1)}}{\bar{c}_i^2 - \alpha_i^2 a_i^2}, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad \alpha_1^2 = \mu_1^2 \equiv 0,$$

$$\beta_1^2 = \mu_2^2 \equiv \tilde{C}_2^1.$$

Різницева схема для (3.3), (3.5) матиме наступний вигляд:

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau} = \frac{1}{r^2 h_2} \left(d_{0,j+1}^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} - d_{0,j}^{(k)} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2} \right), \quad (3.20)$$

$$q_j^{(0)} = \tilde{Q}^0(x_i, r_j), \quad q_{n_2}^{(k)} = k_e c_{2,i}^{(k)}, \quad (3.21)$$

де
$$d_{0,j}^{(k)} = \frac{r^2}{2} (D_{0,j}^{(k)} + D_{0,j-1}^{(k)}), \quad D_{0,j}^{(k)} = D_0(q_j^{(k)}), \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{0, n_3}.$$

Представимо (3.20), (3.21) в наступному вигляді

$$\begin{cases} a_j^3 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^3 q_j^{(k+1)} + b_j^3 q_{j+1}^{(k+1)} = -f_j^{3,(k+1)}, \\ q_0^{(k+1)} = \mu_1^3 q_1^{(k+1)} + \mu_2^3, \\ q_{n_2}^{(k+1)} = \mu_3^1 q_{n_2-1}^{(k+1)} + \mu_4^3, \end{cases} \quad (3.22)$$

$$\text{де } a_j^3 = \frac{d_{0,j}^{(k)}}{r^2 h_2^2}, \quad b_j^3 = \frac{d_{0,j+1}^{(k)}}{r^2 h_2^2}, \quad \bar{c}_j^3 = \frac{d_{0,j+1}^{(k)} + d_{0,j}^{(k)}}{r^2 h_2^2} + \frac{1}{\tau}, \quad f_j^{3,(k+1)} = \frac{q_j^{(k)}}{\tau}, \quad \mu_1^3 \equiv 1, \quad \mu_2^3 = 0, \quad \mu_3^3 \equiv 0,$$

$$\mu_4^3 \equiv 0.$$

Аналогічного попередньому, неважко показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_j^3| > |a_j^3| + |b_j^3|$ виконуються. Значення концентрації $q(x, r, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^3 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^3, \quad (3.23)$$

$$\text{де } \alpha_{j+1}^3 = \frac{b_j^3}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}, \quad \beta_{j+1}^3 = \frac{a_j^3 \beta_j^3 + f_j^{3,(k+1)}}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad \alpha_1^3 = \mu_1^3 \equiv 1,$$

$$\beta_1^3 = \mu_2^3 \equiv 0.$$

Скінченнорізницевий аналог закону (3.4) для обчислення швидкості фільтрації має наступний вигляд:

$$v_i^{(k)} = -k_i^{(k)} (c_{1,i}^{(k)}) \frac{h_{i+1}^{(k)} - h_{i-1}^{(k)}}{2h_1} + (v_c)_i^{(k)} (c_{1,i}^{(k)}) \frac{c_{1,i+1}^{(k)} - c_{1,i-1}^{(k)}}{2h_1}, \quad (3.24)$$

$$\text{де } i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}.$$

3.1.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз

Для аналізу і порівняння лінійної та нелінійної математичних моделей вищенаведеної задачі було використано методологію об'єктно-орієнтованого програмування [240]. Це дозволило в короткі терміни побудувати необхідну ієрархію класів з використанням вже наявних розробок власноствореного програмного комплексу NanoSurface та створити відповідний модуль для

комп'ютерного моделювання. Використавши його, було проведено ряд чисельних експериментів. Зокрема, розглянуто задачу міграції радіонуклідів протягом 5 років з такими вихідними параметрами:

$$l = 10\text{ м}, \quad \tilde{H}_1 = 1\text{ м}, \quad \tilde{H}_2 = 0,1\text{ м}, \quad \sigma_1 = 0,4, \quad \tau = 30\text{ дiб}, \quad \gamma_1 = \gamma_2 = 0,0065, \quad k_e = 1,$$

$$R = 5 \cdot 10^{-5}\text{ м}, \quad D_2 = 1 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, \quad D_0 = 2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, \quad \tilde{C}_1^1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \tilde{C}_1^2(t) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},$$

$$\tilde{C}_2^1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \tilde{C}_2^2(t) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \tilde{C}_1^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \tilde{C}_2^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad Q^0(x, r) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}.$$

Зазвичай в рамках ламінарної фільтрації коефіцієнт конвективної дифузії задають лінійно залежним від швидкості фільтрації [40]:

$$D_{1,i}^{(k)} = D_\mu + \lambda |v_i^{(k)}|, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

де D_μ – коефіцієнт молекулярної дифузії в пористому середовищі, λ – параметр дисперсії.

Для проведення чисельних експериментів прийнято наступну залежність коефіцієнта фільтрації від концентрації сольового розчину [127]:

$$k(c) = a_5^1 \cdot c^5 + a_4^1 \cdot c^4 + a_3^1 \cdot c^3 + a_2^1 \cdot c^2 + a_1^1 \cdot c + a_0^1,$$

де $a_5^1 = 5,9404 \cdot 10^{-2}$, $a_4^1 = -1,6703 \cdot 10^{-1}$, $a_3^1 = 1,7051 \cdot 10^{-1}$, $a_2^1 = -7,4311 \cdot 10^{-2}$, $a_1^1 = 1,0563 \cdot 10^{-2}$, $a_0^1 = 1,0054 \cdot 10^{-3}$.

Після проведення серії чисельних експериментів отримано графіки та таблиці (додаток Г) полів швидкостей фільтрації $v(x, t)$, розподілу концентрації сольових розчинів по області фільтрації для різних значень коефіцієнта фільтрації та коефіцієнта конвективної дифузії D_0 (порівняння лінійної та нелінійної залежностей). Також продемонстровано вплив колоїдних частинок на процес міграції радіонуклідів (рис 3.1-3.6).

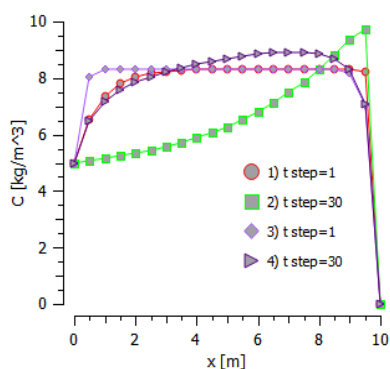


Рис. 3.1. Розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту \mathcal{X} для коефіцієнта фільтрації $k = const$ (графіки 1, 2) і $k = k(x, c_1)$ (графіки 3, 4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 2,5 роки, 3) 30 діб, 4) 2,5 роки

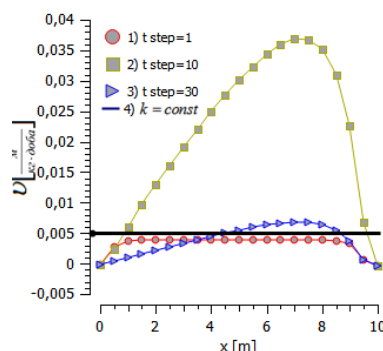


Рис. 3.2. Розподіл швидкості фільтрації $v(x)$ для нелінійної залежності коефіцієнта фільтрації $k = k(x, c_1)$ (графіки 1, 2, 3) і $k = const$ (графік 4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 1 рік, 3) 2,5 роки

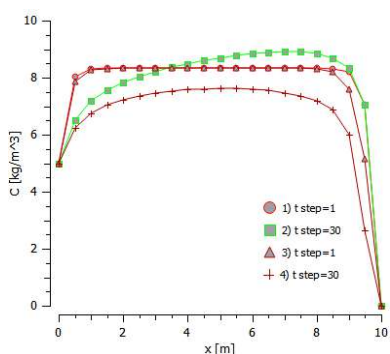


Рис. 3.3. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту \mathcal{X} для коефіцієнта дисперсії $\lambda = 1$ (графіки 1, 2) і $\lambda = 8$ (графіки 3, 4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 2,5 роки, 3) 30 діб, 4) 2,5 роки

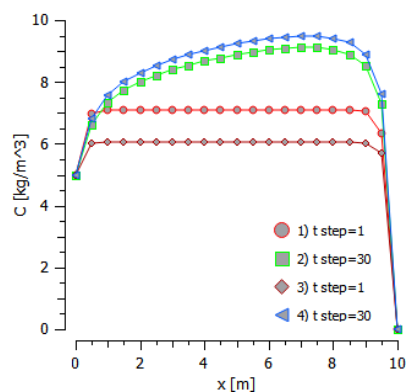


Рис. 3.4. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту \mathcal{X} для щільного піску $\sigma = 0,4$ (графіки 1, 2) і пухкого $\sigma = 0,8$ (графіки 3, 4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 2,5 роки, 3) 30 діб, 4) 2,5 роки

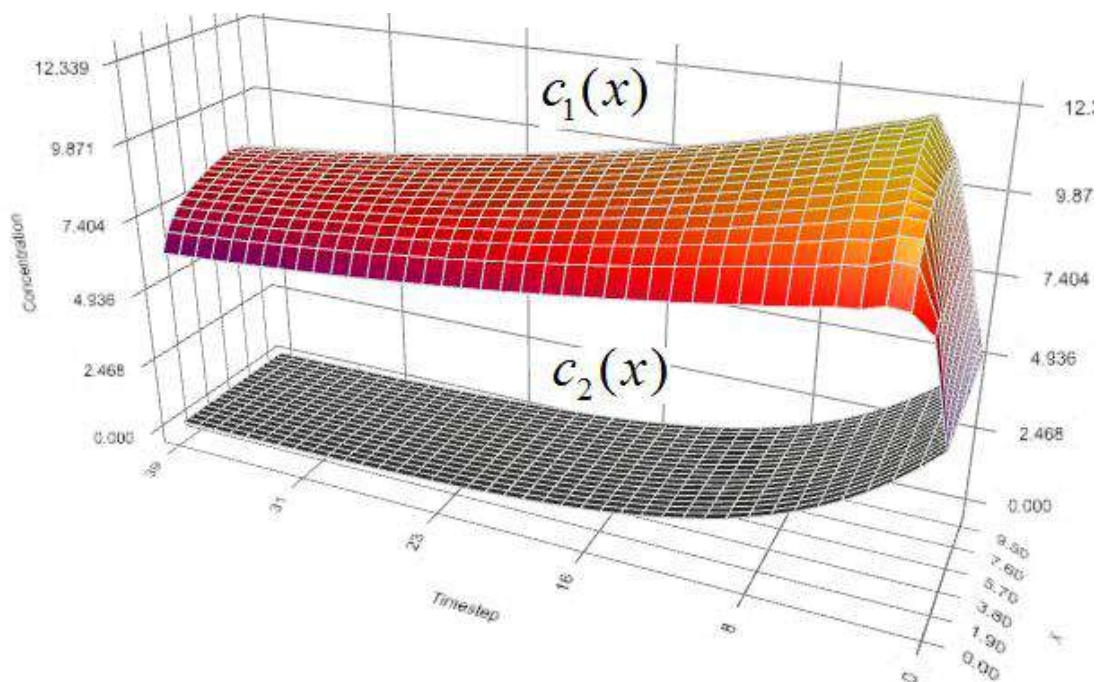


Рис. 3.5. Розподіл концентрацій $c_1(x)$ та $c_2(x)$

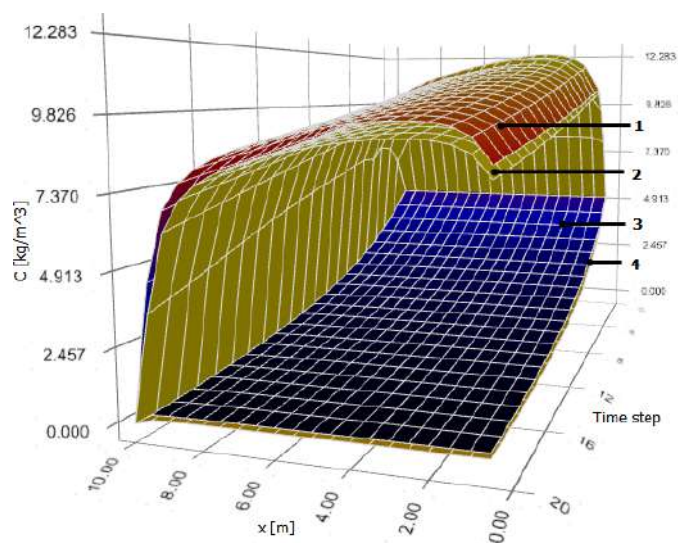


Рис. 3.6. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ та $c_2(x)$ від глибини шару ґрунту x протягом 20 міс. з врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R (графіки 1, 3) та без врахування (графіки 2, 4)

3.2. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтра-вловлювача у каталітичних пористих середовищах в неізотермічних умовах

3.2.1. Постановка задачі та її математична модель

Розглянемо процес, аналогічний описаному в п. 3.1.1, що відбувається в неізотермічних умовах. Тобто, вертикальна міграція радіонуклідів відбувається завдяки їх перенесенню фільтраційним потоком зі швидкістю U як під впливом конвективної дифузії, так і термодифузії одночасно (рис. 3.7).

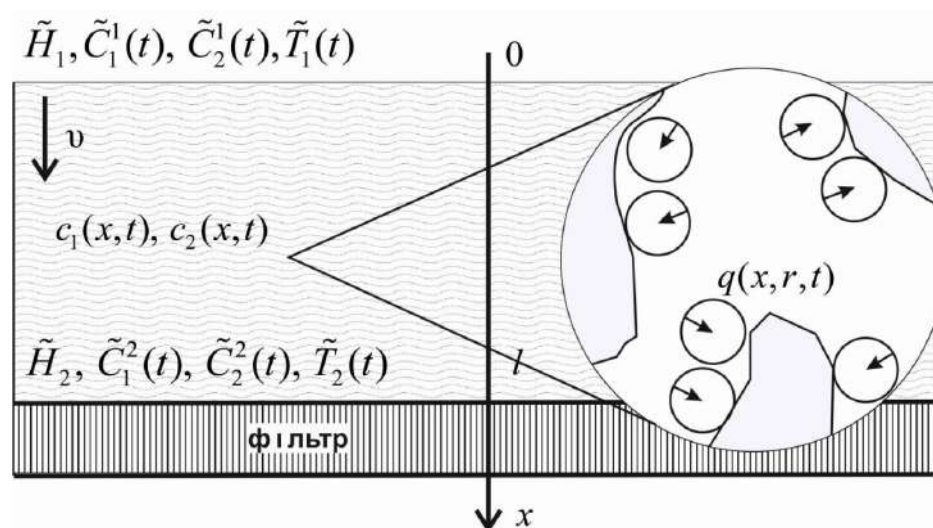


Рис. 3.7. Вертикальна міграція радіонуклідів до фільтра-вловлювача в неізотермічних умовах

На глибині l в ґрунті розміщений фільтр-вловлювач. Задані п'єзометричні напори і температура на верхній і нижній поверхнях ґрунту \tilde{H}_1, \tilde{H}_2 ($\tilde{H}_1 > \tilde{H}_2$) і $\tilde{T}_1(t), \tilde{T}_2(t)$ відповідно. Також відомий розподіл концентрацій радіонуклідів (мігранта) в початковий момент часу: $t=0$: $\tilde{C}_1^0(x)$ (для частинок, що знаходяться в конвективно рухомому поровому розчині), $\tilde{C}_2^0(x)$ (для частинок, що знаходяться із зв'язаній зі скелетом ґрунту воді) і $\tilde{Q}^0(x, r)$ для радіонуклідів, що знаходяться в мікрочастинках. На верхній поверхні ґрунту відомі

концентрації $\tilde{C}_1^1(t)$ і $\tilde{C}_2^1(t)$, а на фільтрі-вловлювачі – $\tilde{C}_1^2(t)$, $\tilde{C}_2^2(t)$ або їх потоки

$$\left. \frac{\partial c_1}{\partial x} \right|_{x=l} = \left. \frac{\partial c_2}{\partial x} \right|_{x=l} = 0 \text{ відповідно.}$$

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), 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 [2, 3, 234, 241], що включає:

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

$$\begin{aligned} \sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{T_1} \frac{\partial T}{\partial x} \right) - v(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} - \\ - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \end{aligned} \quad (3.25)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{T_2} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \\ + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 - \theta \left. \frac{\partial q}{\partial r} \right|_{r=R}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \end{aligned} \quad (3.26)$$

рівняння внутрішньочастинкового масопереносу радіонуклідів з поточною концентрацією q

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right) + D_{T_3} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (3.27)$$

рівняння конвективного теплопереносу

$$c_T \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \rho c_\rho v \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (3.28)$$

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

$$v = -K(c_1, T) \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} + v_T \frac{\partial T}{\partial x}, \quad \text{div} \vec{v} + \frac{\partial \sigma_1}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (3.29)$$

ізотерму адсорбції

$$q(x, r, t) \Big|_{r=R} = \frac{k_f \cdot c_2(x, t)^\beta}{1 + \eta \cdot c_2(x, t)^\beta}, \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (3.30)$$

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 $h(x)$

$$l_1 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (3.31)$$

$$l_3 c_2(0, t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l, t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial q(x, r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (3.33)$$

$$l_5 T(0, t) = \tilde{T}_1(t), \quad l_6 T(l, t) = \tilde{T}_2(t), \quad (3.34)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, \quad h(l) = \tilde{H}_2, \quad (3.35)$$

$$c_1(x, 0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x, 0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad q(r, 0) = \tilde{Q}^0(x), \quad T(x, 0) = \tilde{T}^0(x), \quad (3.36)$$

де $0 < x < l$; $c_1(x, t)$, D_1 – концентрація і коефіцієнт конвективної дифузії радіонуклідів, що знаходяться в фільтраційному потоці; $c_2(x, t)$, D_2 – концентрація і коефіцієнт молекулярної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у воді, пов'язаній зі скелетом ґрунту; $q(x, r, t)$, D_0 – концентрація і коефіцієнт дифузії радіонуклідів в частинках радіуса R ; k_f, β, η – коефіцієнти ізотерм адсорбції, які задають вплив масопереносу в скелеті ґрунту на

внутрішньочастинковий масоперенос; θ – коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового масопереносу на міжчастинковий; U – швидкість фільтрації; v_c, v_T – коефіцієнти хімічного та термічного осмосів; k – коефіцієнт фільтрації води з мігрантами; γ_1, γ_2 – коефіцієнти масообміну; σ_1 – пористість ґрунту; $x \in [0; l]$ – вертикальна координата, спрямована вниз; $l_i, i = \overline{1, 4}$ – диференціальні оператори, що задають граничні умови при $x=0$ та $x=l$ відповідно; t – час, $0 < t < t_1$; r – радіальна змінна, $0 < r < R$.

В рівнянні (3.27) концентрація q пов'язана з концентрацією $c_2(x, t)$ ізотермою адсорбції (3.30), яка при $\eta=0$ стає традиційною ізотермою Фрейндліха (Freundlich), а при $\beta=1$ – ізотермою Ленгмюра (Langmuir) [208].

Крайова задача (3.25)-(3.36) поставлена коректно та виконуються умови існування та єдиності її розв'язку [199, 200].

3.2.2. Методика побудови чисельного розв'язку

Для чисельного розв'язку крайової задачі (3.25)-(3.36) використовуємо метод скінченних різниць [231].

Введемо різницеву сітку $\omega_{h_1 h_2 \tau}$ з кроками h_1, h_2 і τ по осях Ox, Or і Ot для змінних x, r, t

$$\omega_{h_1 h_2 \tau} = \left\{ (x_i, r_j, t_k) \left| \begin{array}{l} x_i = ih_1, r_j = jh_2, t_k = k\tau, \\ i = \overline{0, n_1}, j = \overline{0, n_2}, k = \overline{0, n_3}, \\ h_1 n_1 = l, r n_2 = R, \tau n_3 = T, \end{array} \right. \right\} \quad (3.37)$$

де n_1, n_2, n_3 - кількість кроків по просторових змінних і часу відповідно.

Для дискретизації рівняння (3.25) побудуємо монотонну різницеву схему Самарського [231]. В результаті скінченнорізницевої аналог диференціального рівняння (3.25) з додатковими умовами має такий вигляд:

$$\begin{aligned} \sigma_1 \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k)}}{\tau} &= \frac{\chi_i^{(k)}}{h_1} \left(d_{1,i+1}^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{h_1} - d_{1,i}^{(k)} \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \\ &+ \frac{(r^+)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} d_{1,i+1}^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{h_1} + \frac{(r^-)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} d_{1,i}^{(k)} \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1} - \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$- \gamma_1 c_{1,i}^{(k+1)} + \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)} + \frac{1}{h_1} \left((d_{T_1})_{i+1}^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - T_i^{(k+1)}}{h_1} - (d_{T_1})_i^{(k)} \frac{T_i^{(k+1)} - T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right),$$

$$c_{1,i}^{(0)} = \tilde{C}_1^0(x_i), c_{1,0}^{(k)} = \tilde{C}_1^1(t_k), c_{1,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_1^2(t_k), i = \overline{1, n_1 - 1}, k = \overline{0, n_3}. \quad (3.39)$$

Тут введені позначення:

$$d_{1,i}^{(k)} = \frac{D_{1,i}^{(k)} + D_{1,i-1}^{(k)}}{2}, D_{1,i}^{(k)} = D_1(c_{1,i}^{(k)}, T_i^{(k)}), (d_{T_1})_i^{(k)} = \frac{(D_{T_1})_i^{(k)} + (D_{T_1})_{i-1}^{(k)}}{2},$$

$$\chi_i^{(k)} = \frac{1}{1 + \frac{h_1 |r_i^{(k)}|}{2D_{1,i}^{(k)}}} = 1 - \frac{h_1 |r_i^{(k)}|}{2D_{1,i}^{(k)}} + O(h_1^2), r_i^{(k)} = (r^+)_i^{(k)} + (r^-)_i^{(k)},$$

$$(r^+)_i^{(k)} = \frac{-v_i^{(k)} + |v_i^{(k)}|}{2} \geq 0, (r^-)_i^{(k)} = \frac{-v_i^{(k)} - |v_i^{(k)}|}{2} \leq 0.$$

Для знаходження концентрації солей $c_1(x, t)$ з різницевого рівняння (3.38) використовуємо метод прогонки. Для цього представимо різницеву схему (3.38), (3.39) в наступному вигляді:

$$\begin{cases} a_i^1 c_{1,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^1 c_{1,i}^{(k+1)} + b_i^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} = -c_{1,i}^{(k)} - f_i^{1,(k+1)}, \\ c_{1,0}^{(k+1)} = \mu_1^1 c_{1,1}^{(k+1)} + \mu_2^1, \\ c_{1,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^1 c_{1,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^1, \end{cases} \quad (3.40)$$

де

$$\begin{aligned}
a_i^1 &= \frac{\tau}{\sigma_1} \frac{d_{1,i}^{(k)}}{h_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1} - \frac{(r^-)^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} \right), \quad b_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1} \frac{d_{1,i+1}^{(k)}}{h_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1} + \frac{(r^+)^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} \right), \\
\bar{c}_i^1 &= 1 + \frac{\tau}{\sigma_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)} (d_{1,i+1}^{(k)} + d_{1,i}^{(k)})}{h_1^2} + \frac{1}{h_1 D_{1,i}^{(k)}} ((r^+)^{(k)} d_{1,i+1}^{(k)} - (r^-)^{(k)} d_{1,i}^{(k)}) + \gamma_1 \right), \\
f_i^{1,(k+1)} &= \frac{\tau}{\sigma_1} \left(\gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)} + \frac{1}{h_1} \left((d_{T_1})_{i+1}^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - T_i^{(k+1)}}{h_1} - (d_{T_1})_i^{(k)} \frac{T_i^{(k+1)} - T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) \right), \\
\mu_1^1 &= 0, \quad \mu_2^1 = \tilde{C}_1^1, \quad \mu_3^1 = 0, \quad \mu_4^1 = \tilde{C}_1^2.
\end{aligned}$$

Можна показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^1| > |a_i^1| + |b_i^1|$ виконані. Концентрацію $c_1(x,t)$ на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$c_{1,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^1, \quad (3.41)$$

де $\alpha_{i+1}^1 = \frac{b_i^1}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}$, $\beta_{i+1}^1 = \frac{a_i^1 \beta_i^1 + c_{1,i}^{(k)} + f_i^{1,(k+1)}}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}$, $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$, $\alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0$, $\beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1$.

Для дискретизації різницевого рівняння (3.26) використовуємо неявну різницеву схему. Член $\theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}$ в диференціальному рівнянні (3.26) апроксимуємо з точністю до другого порядку [239]. Скінченнорізницевий аналог відповідного диференціального рівняння має такий вигляд:

$$\begin{aligned}
\frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k)}}{\tau} &= \frac{1}{h_1} \left(d_{2,i+1}^{(k)} \frac{c_{2,i+1}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k+1)}}{h_1} - d_{2,i}^{(k)} \frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \\
&+ \frac{1}{h_1} \left((d_{T_2})_{i+1}^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - T_i^{(k+1)}}{h_1} - (d_{T_2})_i^{(k)} \frac{T_i^{(k+1)} - T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \\
&+ \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right),
\end{aligned} \quad (3.42)$$

$$c_{2,i}^{(0)} = \tilde{C}_2^0(x_i), c_{2,0}^{(k)} = \tilde{C}_2^1(t_k), c_{2,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_2^2(t_k), \quad (3.43)$$

$$\text{де } d_{2,i}^{(k)} = \frac{D_{2,i}^{(k)} + D_{2,i-1}^{(k)}}{2}, \quad D_{2,i}^{(k)} = D_2(c_{2,i}^{(k)}), \quad (d_{T_2})_i^{(k)} = \frac{(D_{T_2})_i^{(k)} + (D_{T_2})_{i-1}^{(k)}}{2},$$

$$i = \overline{1, n_1 - 1}, k = \overline{0, n_3}.$$

Різницеву схему (3.42), (3.43) представимо як

$$\begin{cases} a_i^2 c_{2,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^2 c_{2,i}^{(k+1)} + b_i^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} = -f_i^{2,(k+1)}, \\ c_{2,0}^{(k+1)} = \mu_1^2 c_{2,1}^{(k+1)} + \mu_2^2, \\ c_{2,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^2 c_{2,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^2, \end{cases} \quad (3.44)$$

де

$$\begin{aligned} a_i^2 &= \frac{d_{2,i}^{(k)}}{h_1^2}, \quad b_i^2 = \frac{d_{2,i+1}^{(k)}}{h_1^2}, \quad \bar{c}_i^2 = \frac{1}{\tau} + \frac{d_{2,i+1}^{(k)} + d_{2,i}^{(k)}}{h_1^2} + \gamma_2, \\ f_i^{2,(k+1)} &= \frac{c_{2,i}^{(k)}}{\tau} + \frac{1}{h_1} \left((d_{T_2})_{i+1}^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - T_i^{(k+1)}}{h_1} - (d_{T_2})_i^{(k)} \frac{T_i^{(k+1)} - T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \\ &\quad + \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \\ \mu_1^2 &\equiv 0, \quad \mu_2^2 = \tilde{C}_2^1, \quad \mu_3^2 \equiv 0, \quad \mu_4^2 \equiv \tilde{C}_2^2. \end{aligned}$$

Неважко показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^2| > |a_i^2| + |b_i^2|$ виконані.

Концентрацію $c_2(x, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$c_{2,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^2, \quad (3.45)$$

$$\text{де } \alpha_{i+1}^2 = \frac{b_i^2}{\bar{c}_i^2 - \alpha_i^2 a_i^2}, \quad \beta_{i+1}^2 = \frac{a_i^2 \beta_i^2 + f_i^{2,(k+1)}}{\bar{c}_i^2 - \alpha_i^2 a_i^2}, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad \alpha_1^2 = \mu_1^2 \equiv 0,$$

$$\beta_1^2 = \mu_2^2 \equiv \tilde{C}_2^1.$$

Різницєва схема для (3.27), (3.30), (3.33) наступна:

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau} = \frac{1}{r^2 h_2} \left(d_{0,j+1}^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} - d_{0,j}^{(k)} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2} \right) + D_{T_3} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_2^2}, \quad (3.46)$$

$$q_j^{(0)} = \tilde{Q}^0(x_i, r_j), q_{n_2}^{(k)} = k_e c_{2,i}^{(k)}, \quad (3.47)$$

де $d_{0,j}^{(k)} = \frac{r^2}{2} (D_{0,j}^{(k)} + D_{0,j-1}^{(k)})$, $D_{0,j}^{(k)} = D_0(q_j^{(k)})$, $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $j = \overline{1, n_2 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

Представимо різницеву схему (3.46), (3.47) у вигляді, зручному для проведення прогонки

$$\begin{cases} a_j^3 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^3 q_j^{(k+1)} + b_j^3 q_{j+1}^{(k+1)} = -f_j^{3,(k+1)}, \\ q_0^{(k+1)} = \mu_1^3 q_1^{(k+1)} + \mu_2^3, \\ q_{n_2}^{(k+1)} = \mu_3^1 q_{n_2-1}^{(k+1)} + \mu_4^3, \end{cases} \quad (3.48)$$

де $a_j^3 = \frac{d_{0,j}^{(k)}}{r^2 h_2^2}$, $b_j^3 = \frac{d_{0,j+1}^{(k)}}{r^2 h_2^2}$, $\bar{c}_j^3 = \frac{d_{0,j+1}^{(k)} + d_{0,j}^{(k)}}{r^2 h_2^2} + \frac{1}{\tau}$,

$$f_j^{3,(k+1)} = \frac{q_j^{(k)}}{\tau} + D_{T_3} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1^2}, \quad \mu_1^3 \equiv 1, \mu_2^3 = 0, \mu_4^3 \equiv 0.$$

Неважко показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_j^3| > |a_j^3| + |b_j^3|$ виконані. Тоді концентрацію $q(x, r, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^3 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^3, \quad (3.49)$$

де $\alpha_{j+1}^3 = \frac{b_j^3}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}$, $\beta_{j+1}^3 = \frac{a_j^3 \beta_j^3 + f_j^{3,(k+1)}}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}$, $j = \overline{1, n_2 - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$, $\alpha_1^3 = \mu_1^3 \equiv 1$, $\beta_1^3 = \mu_2^3 \equiv 0$.

Для дискретизації рівняння (3.28) застосуємо монотонну різницеву схему О.А. Самарського [228]. В результаті скінченнорізницевої аналог даного диференціального рівняння з додатковими умовами має такий вигляд:

$$c_T \frac{T_i^{(k+1)} - T_i^{(k)}}{\tau} = \frac{\bar{\eta}_i^{(k)}}{h_1} \left((\bar{\lambda}_T)_{i+1}^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - T_i^{(k+1)}}{h_1} - (\bar{\lambda}_T)_i^{(k)} \frac{T_i^{(k+1)} - T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \rho c_\rho \left(\frac{(r^+)_i^{(k)}}{(\lambda_T)_i^{(k)}} (\bar{\lambda}_T)_{i+1}^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - T_i^{(k+1)}}{h_1} + \frac{(r^-)_i^{(k)}}{(\lambda_T)_i^{(k)}} (\bar{\lambda}_T)_i^{(k)} \frac{T_i^{(k+1)} - T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right), \quad (3.50)$$

$$T_i^{(0)} = \tilde{T}_0(ih_1), T_0^{(k)} = \tilde{T}_1(k\tau), T_{n_1}^{(k)} = \tilde{T}_2(k\tau), \quad (3.51)$$

де $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

Тут наведені такі позначення:

$$(\bar{\lambda}_T)_i^{(k)} = \frac{1}{2} \left((\lambda_T)_i^{(k)} + (\lambda_T)_{i-1}^{(k)} \right), \quad \bar{\eta}_i^{(k)} = \frac{1}{1 + \frac{h_1 \rho c_\rho |r_i^{(k)}|}{2(\lambda_T)_i^{(k)}}} = 1 - \frac{h_1 \rho c_\rho |r_i^{(k)}|}{2(\lambda_T)_i^{(k)}} + O(h_1^2).$$

Значення температури знаходимо методом прогонки з різницевої схеми (3.50), (3.51). У зв'язку з цим представимо різницеву схему (3.50), (3.51) в такому вигляді:

$$\begin{cases} a_i^4 T_{i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^4 T_i^{(k+1)} + b_i^4 T_{i+1}^{(k+1)} = -T_i^{(k)}, \\ T_0^{(k+1)} = \mu_1^4 T_1^{(k+1)} + \mu_2^4, \\ T_{n_1}^{(k+1)} = \mu_3^4 T_{n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^4, \end{cases} \quad (3.52)$$

де
$$a_i^4 = \frac{\tau}{c_T} \frac{(\bar{\lambda}_T)_i^{(k)}}{h_1} \left(\frac{\bar{\eta}_i^{(k)}}{h_1} - \frac{\rho c_\rho (r^-)_i^{(k)}}{(\lambda_T)_i^{(k)}} \right), \quad b_i^4 = \frac{\tau}{c_T} \frac{(\bar{\lambda}_T)_{i+1}^{(k)}}{h_1} \left(\frac{\bar{\eta}_i^{(k)}}{h_1} + \frac{\rho c_\rho (r^+)_i^{(k)}}{(\lambda_T)_i^{(k)}} \right),$$

$$\bar{c}_i^4 = 1 + \frac{\tau}{c_T} \left(\frac{\bar{\eta}_i^{(k)} \left((\bar{\lambda}_T)_{i+1}^{(k)} + (\bar{\lambda}_T)_i^{(k)} \right)}{h_1^2} + \frac{\rho c_\rho}{(\lambda_T)_i^{(k)}} \left((r^+)_i^{(k)} (\bar{\lambda}_T)_{i+1}^{(k)} - (r^-)_i^{(k)} (\bar{\lambda}_T)_i^{(k)} \right) \right),$$

$$\mu_1^4 = 0, \mu_2^4 = \tilde{T}_1, \mu_3^4 = 0, \mu_4^4 = \tilde{T}_2.$$

Можна показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^4| > |a_i^4| + |b_i^4|$ виконані.

Значення температури на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$T_i^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^4 T_{i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^4, \quad (3.53)$$

де $\alpha_{i+1}^4 = \frac{b_i^4}{\bar{c}_i^4 - \alpha_i^4 a_i^4}$, $\beta_{i+1}^4 = \frac{a_i^4 \beta_i^4 + T_i^{(k)}}{\bar{c}_i^4 - \alpha_i^4 a_i^4}$, $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$, $\alpha_1^4 = \mu_1^4 = 0$, $\beta_1^4 = \mu_2^4 = \tilde{T}_1$.

Скінченнорізницевий аналог закону (3.29) для обчислення швидкості фільтрації в неізотермічних умовах має такий вигляд:

$$\begin{aligned} v_i^{(k)} = & -K_i^{(k)}(c_{1,i}^{(k)}, T_i^{(k)}) \frac{h_{i+1} - h_{i-1}}{2h_1} + (v_c)_i^{(k)}(c_{1,i}^{(k)}) \frac{c_{1,i+1}^{(k)} - c_{1,i-1}^{(k)}}{2h_1} + \\ & + v_T \frac{T_{i+1}^{(k)} - T_{i-1}^{(k)}}{2h_1}, i = \overline{1, n_1 - 1}, k = \overline{1, n_3}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

З рівняння нерозривності (3.29) та з врахуванням (3.54) при $\frac{\partial \sigma_1}{\partial t} = 0$ маємо

$$\frac{dv}{dx} = \frac{d\left(-K(c_1, T) \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} + v_T \frac{\partial T}{\partial x}\right)}{dx} = 0,$$

або

$$\begin{aligned} -K(c_1, T) \frac{d^2 h}{dx^2} - \frac{d(-K(c, T))}{dx} \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \\ + \frac{\partial(v_c(c_1))}{\partial x} \frac{\partial c_1}{\partial x} + v_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \end{aligned} \quad (3.55)$$

Для дискретизації рівняння (3.54) застосуємо монотонну різницеву схему О. А. Самарського [228]. В результаті отримаємо скінченнорізницевий аналог даного диференціального рівняння

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\chi}_i^{(k)}}{h_1} \frac{h_{i-1} - 2h_i + h_{i+1}}{h_1} + (\bar{r}^+)_i^{(k)} \frac{h_{i+1} - h_i}{h_1} + (\bar{r}^-)_i^{(k)} \frac{h_i - h_{i-1}}{h_1} + \\ + (v_c)_i^{(k)}(c_{1,i}^{(k)}) \frac{c_{1,i-1}^{(k)} - 2c_{1,i}^{(k)} + c_{1,i+1}^{(k)}}{h_1^2} + \end{aligned} \quad (3.56)$$

$$+ \frac{(v_c)_{i+1}^{(k)}(c_{1,i+1}^{(k)}) - (v_c)_{i-1}^{(k)}(c_{1,i-1}^{(k)})}{2h_1} \frac{c_{1,i-1}^{(k)} - c_{1,i+1}^{(k)}}{2h_1} + v_T \frac{T_{i-1}^{(k)} - 2T_i^{(k)} + T_{i+1}^{(k)}}{h_1^2} = 0,$$

$$h_0^{(k)} = \tilde{H}_1, h_{n_1}^{(k)} = \tilde{H}_2, \quad (3.57)$$

$i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$,

$$\text{де } \bar{\chi}_i^{(k)} = \frac{1}{1 + 0,5h_1|\bar{r}_i^{(k)}|}, \quad \bar{r}_i^{(k)} = \frac{1}{K_i^{(k)}(c_{1,i}^{(k)}, T_i^{(k)})} \cdot \frac{K_{j+1}^{(k)}(c_{1,i+1}^{(k)}, T_{i+1}^{(k)}) - K_{i-1}^{(k)}(c_{1,i-1}^{(k)}, T_{i-1}^{(k)})}{2h_1},$$

$$(\bar{r}^+)_i^{(k)} = \frac{-\bar{r}_i^{(k)} + |\bar{r}_i^{(k)}|}{2} \geq 0, \quad (\bar{r}^-)_i^{(k)} = \frac{-\bar{r}_i^{(k)} - |\bar{r}_i^{(k)}|}{2} \leq 0.$$

Різницева схема (3.56), (3.57) прийме наступний вигляд:

$$\begin{cases} a_i^5 h_{i-1} - \bar{c}_i^5 h_i + b_i^5 h_{i+1} = -f_i^{5,(k)}, \\ h_0 = \mu_1^4 h_1 + \mu_2^4, \\ h_{n_1} = \mu_3^4 h_{n_1-1} + \mu_4^4, \end{cases} \quad (3.58)$$

де

$$a_i^5 = \frac{\bar{\chi}_i^{(k)}}{h_1^2} - \frac{(\bar{r}^-)_i^{(k)}}{h_1}, \quad b_i^5 = \frac{\bar{\chi}_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(\bar{r}^+)_i^{(k)}}{h_1}, \quad \bar{c}_i^5 = \frac{2\bar{\chi}_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(\bar{r}^+)_i^{(k)}}{h_1} - \frac{(\bar{r}^-)_i^{(k)}}{h_1},$$

$$\mu_1^5 = 0, \quad \mu_2^5 = \tilde{H}_1, \quad \mu_3^5 = 0, \quad \mu_4^5 = \tilde{H}_2.$$

Легко показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^5| > |a_i^5| + |b_i^5|$ виконані. Значення напору послідовно знаходимо, використовуючи співвідношення

$$h_i = \alpha_{i+1}^5 h_{i+1} + \beta_{i+1}^5, \quad (3.59)$$

$$\text{де } \alpha_{i+1}^5 = \frac{b_i^5}{\bar{c}_i^5 - \alpha_i^5 a_i^5}, \quad \beta_{i+1}^5 = \frac{a_i^5 \beta_i^5 + f_i^{5,(k)}}{\bar{c}_i^5 - \alpha_i^5 a_i^5}, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{0, n_3}, \quad \alpha_1^5 = \mu_1^5 = 0,$$

$$\beta_1^5 = \mu_2^5 = \tilde{H}_1.$$

Таким чином, побудова чисельного розв'язку для крайової задачі (3.25) - (3.36) алгоритмічно виконана повністю.

3.2.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз

Для аналізу і порівняння математичної моделі вищенаведеної задачі з іншими, раніше описаними моделями [2, 3, 234], був удосконалений власний програмний комплекс NanoSurface. На його базі за допомогою методології об'єктно-орієнтованого програмування запрограмована необхідна ієрархія

класів у вигляді окремого модуля. Інтелектуальний інтерфейс на базі кроссплатформеного фреймворка Qt дозволяє легко керувати вихідними даними (коефіцієнтами дифузії, пористості, дисперсії, крайові умови, ізотерми адсорбції і т.п.), виконувати необхідні обчислення, будувати порівняльні 2D / 3D графіки і таблиці значень концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $q(x,r,t)$, швидкості фільтрації $v(x,t)$, температурні залежності $T(x,t)$ коефіцієнти дифузії $D_0(x,t)$, $D_1(x,t)$, $D_2(x,t)$. Всі отримані значення за допомогою програмного комплексу NanoSurface легко імпортуються в файли найбільш використовуваних форматів для подальшої обробки.

Використовуючи створений програмний комплекс, було проведено серію чисельних експериментів. Зокрема, розглянуто задачу очищення ґрунту від радіонуклідів протягом 3 років з такими вихідними параметрами:

$$l = 10\text{м}, \tilde{H}_1 = 1\text{м}, \tilde{H}_2 = 0,1\text{м}, \sigma_1 = 0,25, \tau = 30\text{дiб}, \gamma_1 = \gamma_2 = 0,00065, k_f = 1,$$

$$R = 1 \cdot 10^{-8}\text{м}, D_2 = 1 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, D_0 = 1 \cdot 10^{-18} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}},$$

$$\tilde{C}_1^1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_1^2(t) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_2^1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_2^2(t) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_1^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},$$

$$\tilde{C}_2^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{Q}^0(x,r) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},$$

$$c_p = 4,2 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot \text{°C}}, c_T = 2137 \frac{\text{кДж}}{\text{м}^3 \cdot \text{°C}}, \lambda_T = 108 \frac{\text{кДж}}{\text{м} \cdot \text{°C} \cdot \text{доба}},$$

$$\rho = 1100 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{T}_1(t) = 20^\circ\text{C}, \tilde{T}_2(t) = 5^\circ\text{C}, \tilde{T}_0(x) = 1^\circ\text{C}, D_{T1} = 1 \cdot 10^{-4} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}.$$

Зазвичай, при ламінарній фільтрації коефіцієнт конвективної дифузії задають лінійно залежним від швидкості фільтрації [40]:

$$D_{1,i}^{(k)} = D_\mu + \lambda |v_i^{(k)}|, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

де D_μ – коефіцієнт молекулярної дифузії в пористому середовищі, λ – параметр дисперсії. Для проведення чисельних експериментів приймаємо наступну

залежність коефіцієнта фільтрації від концентрації сольового розчину і температури для піщаних ґрунтів [127]:

$$K_1(c) = a_5^1 \cdot c^5 + a_4^1 \cdot c^4 + a_3^1 \cdot c^3 + a_2^1 \cdot c^2 + a_1^1 \cdot c + a_0^1,$$

де $a_5^1 = 5,9404 \cdot 10^{-2}$, $a_4^1 = -1,6703 \cdot 10^{-1}$, $a_3^1 = 1,7051 \cdot 10^{-1}$, $a_2^1 = -7,4311 \cdot 10^{-2}$,
 $a_1^1 = 1,0563 \cdot 10^{-2}$, $a_0^1 = 1,0054 \cdot 10^{-3}$.

Залежність коефіцієнта фільтрації від температури задається в наступному вигляді:

$$K_2(T) = b_5 \cdot T^5 + b_4 \cdot T^4 + b_3 \cdot T^3 + b_2 \cdot T^2 + b_1 \cdot T + b_0,$$

де $b_5 = 1,4154 \cdot 10^{-2}$, $b_4 = -2,6097 \cdot 10^{-2}$, $b_3 = 1,0819 \cdot 10^{-2}$, $b_2 = 1,2844 \cdot 10^{-4}$,
 $b_1 = 1,0404 \cdot 10^{-2}$, $b_0 = 3,0925 \cdot 10^{-3}$, $T \in [0,1]$ – безрозмірна величина.

Оскільки комплексні експериментальні дані по одночасній залежності коефіцієнта фільтрації від концентрації солей і температури відсутні, то можна прийняти наступну залежність

$$K(c, T) = \frac{1}{k_0^2} K_1(c) \cdot K_2(T),$$

де k_0 – коефіцієнт фільтрації для чистої води при температурі 20°C .

На підставі проведеної серії чисельних експериментів, отримано графіки полів швидкостей фільтрації $v(x, t)$ (рис. 3.8, 3.9), температури $T(x, t)$ (рис. 3.10), розподілу концентрації солевих розчинів $c_1(x, t)$ та $c_2(x, t)$ по області фільтрації в часі (рис. 3.11). Також проведено порівняльний аналіз впливу температури на процес масопереносу (рис. 3.12) і наявності каталітичних мікрочастинок (рис. 3.13).

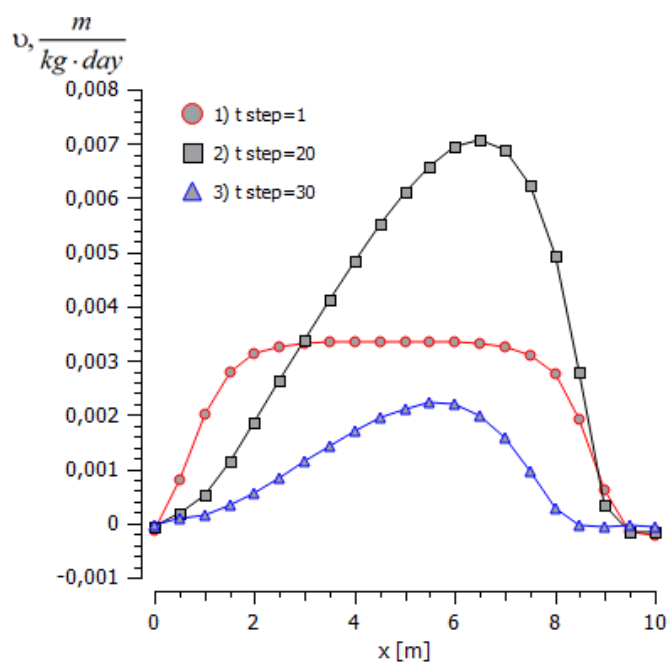


Рис. 3.8. Розподіл швидкості фільтрації $v(x)$ при нелінійній залежності коефіцієнта фільтрації $k = k(x, c_1)$ для різних часових кроків: 1) 30 діб, 2) 20 міс., 3) 30 міс.

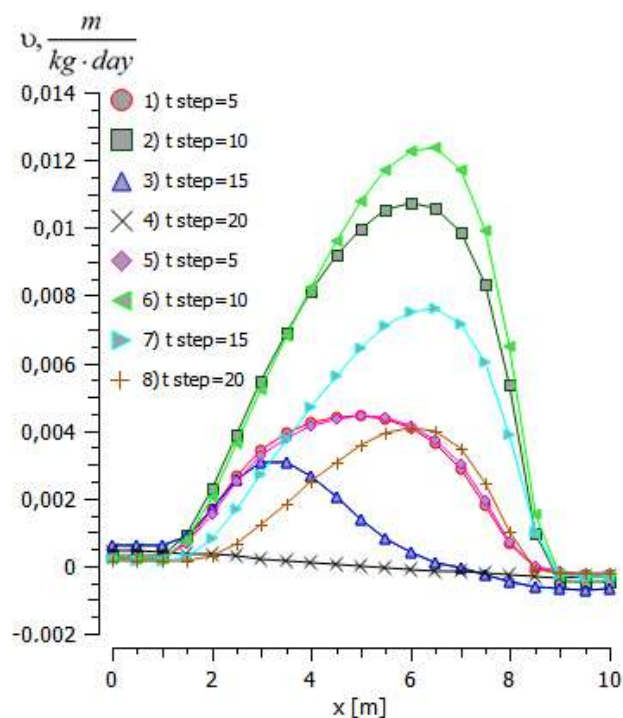


Рис. 3.9. Порівняльні розподіли швидкості фільтрації $v(x)$ при нелінійній залежності коефіцієнта фільтрації $k = k(x, c_1)$ в неізотермічних (графіки 1, 2, 3, 4) та ізотермічних (графіки 5, 6, 7, 8) умовах для різних часових кроків: 1) і 5) 5 міс., 2) і 6) 10 міс., 3) і 7) 15 міс., 4) і 8) 20 міс.

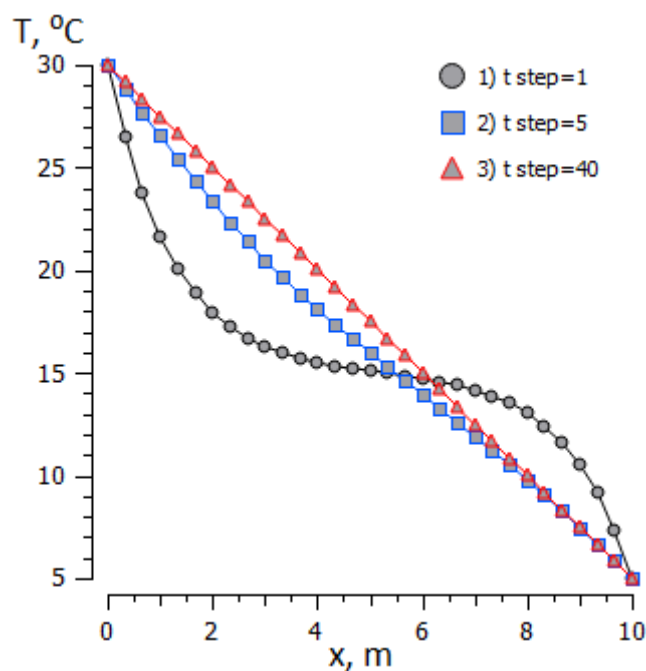


Рис. 3.10. Розподіл температури $T(x)$ по глибині шару ґрунту x для різних часових кроків: 1) 30 діб, 2) 5 міс., 3) 40 міс.

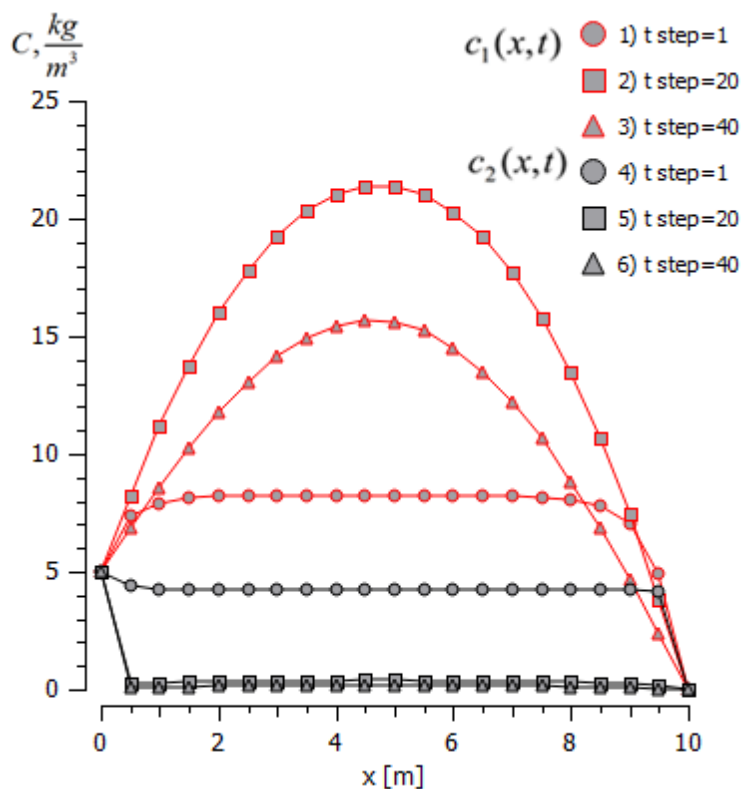


Рис. 3.11. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ (графіки 1, 2, 3) та $c_2(x)$ (графіки 4, 5, 6) по глибині шару ґрунту x для різних часових кроків: 1) і 4) 30 діб, 2) і 5) 20 міс., 3) і 6) 40 міс.

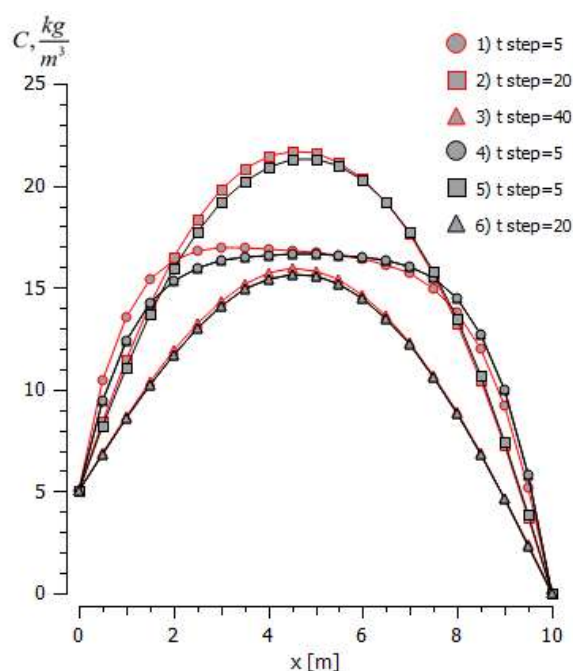


Рис. 3.12. Порівняльний розподіл концентрацій $c_1(x)$ по глибині шару ґрунту x для неізотермічного (графіки 1, 2, 3) та ізотермічного (графіки 4, 5, 6) випадків для різних часових кроків: 1) і 4) 5 міс., 2) і 5) 20 міс., 3) і 6) 40 міс.

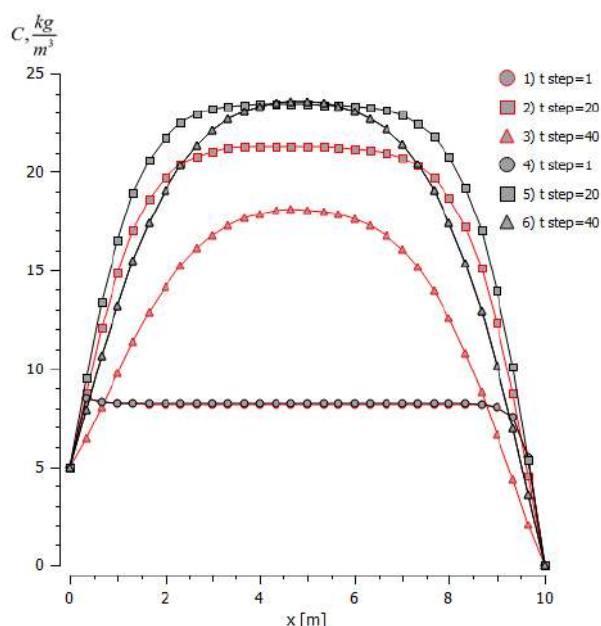


Рис. 3.13. Порівняльний розподіл концентрацій $c_1(x)$ по глибині шару ґрунту x з урахуванням дифузії радіонуклідів в частинках радіуса R (графіки 1, 2, 3) і без урахування (графіки 4, 5, 6) для різних часових кроків: 1) і 4) 30 діб, 2) і 5) 20 міс., 3) і 6) 40 міс.

Як показали проведені чисельні експерименти, при заданих вхідних даних, найбільший вплив давали мікрочастинки в порівнянні з температурою (рис. 3.12 і 3.13). 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). При збільшенні параметра дисперсії λ концентрація сольового розчину значно швидше перерозподіляється в шарі ґрунту. У пухкому піску (коефіцієнт пористості $\sigma = 0,8$) концентрація сольових розчинів набагато інтенсивніше перерозподіляється по області фільтрації.

У зв'язку зі складністю проведення натурних експериментів на мікрорівні дана математична модель з урахуванням каталітичних мікрочастинок мало верифікована. Разом з тим, дані, отримані без урахування мікрочастинок, добре співвідносяться з іншими апробованими математичними моделями міграції радіонуклідів і їх експериментальними значеннями, що говорить про успішну валідацію нашої моделі [69, 132, 242].

3.3. Висновки до розділу 3

В п. 3.1 сформульовано постановку та побудовано математичну модель вертикальної міграції радіонуклідів з врахуванням нелінійного характеру коефіцієнта дифузії. Чисельний розв'язок знайдено методом скінченних різниць. Покращено програмний комплекс NanoSurface для реалізації поставленої крайової задачі та проведено чисельні експерименти. Аналіз отриманих результатів (графіки, таблиці) дозволив зробити ряд висновків. Зокрема, помітно, що розподіл концентрації сольових розчинів з часом при $k = k(x, c_1)$ є більш повільним і прогнозованим (рис 3.1). Дана стабільність досягається за рахунок поступового спадання та насичення в часі швидкості фільтрації (рис 3.2) при залежності коефіцієнта фільтрації від концентрації

сольового розчину. При збільшенні параметра дисперсії λ сольовий розчин значно швидше розподіляється в шарі ґрунту (рис 3.3). При збільшенні пористості (пухкий пісок - $\sigma = 0,8$) концентрація сольових розчинів набагато інтенсивніше розподіляється по області фільтрації. Також стає очевидним вплив мікрочастинок на швидкість міграції радіонуклідів. Зокрема, як видно з рис. 3.6, при врахуванні дифузії радіонуклідів у колоїдах, розглядувані процеси фільтрації відбуваються швидше. Тобто, наявність в ґрунті сорбуючих частинок мікропористої структури прискорює процес очищення шару ґрунту від радіонуклідів.

В п. 3.2 проведено математичне моделювання процесу вертикальної міграції радіонуклідів у насиченому ґрунті при неізотермічних умовах з урахуванням каталітичних мікрочастинок. Побудовано скінченнорізницеві аналоги диференціальних рівнянь та крайових умов відповідної одновимірної нелінійної крайової задачі та знайдено її чисельний розв'язок методом скінченних різниць. Розроблено додатковий модуль у власноствореному програмному комплексі NanoSurface, з використанням якого проведено серію чисельних експериментів. Отримано результати чисельних експериментів і виконано їх аналіз. Показано, що на загальну картину масопереносу більший вплив робить дифузія в мікрочастинках у порівнянні з температурою. Отримані особливості можна успішно використовувати для очищення родючого шару ґрунту і відновлення сільськогосподарської діяльності.

Результати даного розділу опубліковано в роботах [1, 2, 9, 243–246].

РОЗДІЛ 4

МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДВОВИМІРНОЇ МІГРАЦІЇ РАДІОНУКЛІДІВ ПРИ ФІЛЬТРАЦІЇ ПІДЗЕМНИХ ВОД ДО СИСТЕМИ ГОРИЗОНТАЛЬНИХ ФІЛЬТРІВ- ВЛОВЛЮВАЧІВ У КАТАЛІТИЧНОМУ ПОРИСТОМУ СЕРЕДОВИЩІ

4.1. Постановка задачі та її математична модель

Для ефективного очищення шару ґрунту на практиці застосовують горизонтальні фільтри-вловлювачі, наповнені вермикулітом (рис. 4.1), які розміщені на деякій відстані один від одного та певній глибині від поверхні ґрунту. В результаті фільтрації підземних вод відбувається масоперенос забруднених речовин із забрудненої області фільтрації до фільтра-вловлювача.

З метою пришвидшення процесу очищення ґрунту в нього ін'єктовані сорбуючі наночастинки (туфи). Дані частинки можуть бути підібрані у відповідності із заданими сорбуючими вимогами.

Під впливом градієнта напору відбувається перенесення речовин, що розчинені в воді, шляхом фільтраційного потоку. Стаціонарна фільтрація розчину здійснюється відповідно до узагальненого закону Дарсі. Локалізація забруднювача обумовлена перенесенням речовин з певною швидкістю під впливом конвективної дифузії в каталітичному середовищі до фільтрів-вловлювачів (рис. 4.1). Якщо на верхній поверхні ґрунту подавати чисту воду, то відбуватиметься з часом очищення розглядуваної області від забруднень. На глибині l розміщений підстилаючий непроникний шар ґрунту (глина).

Потрібно розрахувати розподіл концентрації забруднень по області фільтрації з часом у конвективно-рухомому поровому розчині, у воді звязаній зі скелетом ґрунту та в самому скелеті ґрунту (твердій фазі).

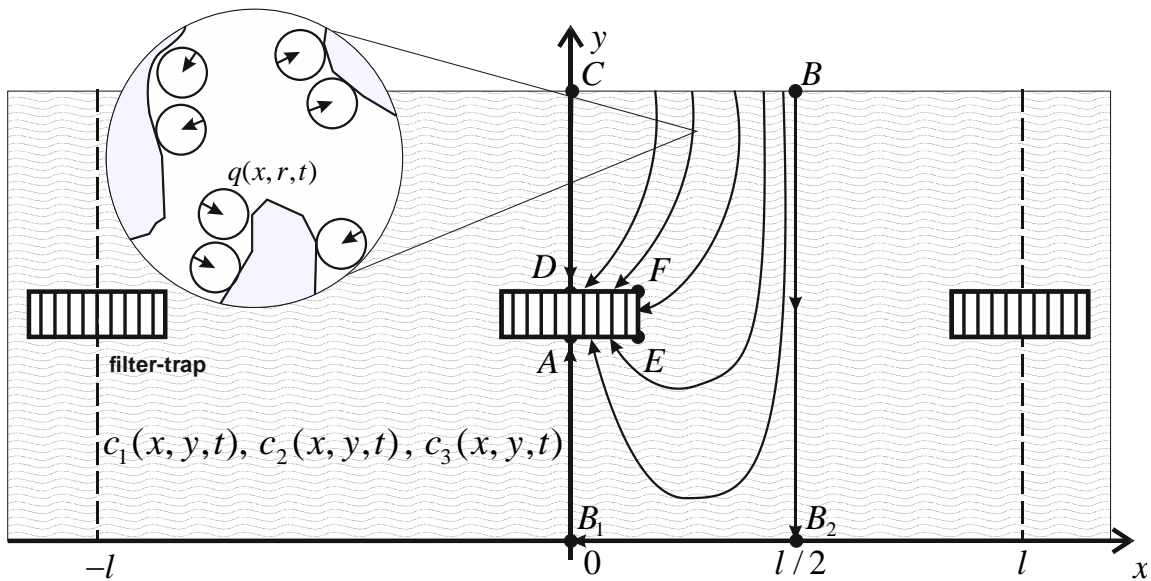


Рис. 4.1. Міграція забруднюючих речовин у насиченому пористому середовищі до фільтрів-вловлювачів

В силу симетрії картини фільтрації розглядається фрагмент області фільтрації AB_1B_2BCD . Двовимірною математичною моделлю міграції забруднюючих речовин (наприклад, радіонуклідів) може бути описана наступною крайовою задачею:

$$\frac{\partial \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial y} \right)}{\partial y} - v_x \frac{\partial c_1}{\partial x} - v_y \frac{\partial c_1}{\partial y} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2 = \sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (x, y) \in \Omega, t > 0, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial y} \right)}{\partial y} + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 + \gamma_3 c_3 - \theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R} = \frac{\partial c_2}{\partial t}, \quad (x, y) \in \Omega, t > 0, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \left(D_3(c_3) \frac{\partial c_3}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_3(c_3) \frac{\partial c_3}{\partial y} \right)}{\partial y} + \gamma_2 c_2 - \gamma_3 c_3 = \sigma_1 \frac{\partial c_3}{\partial t}, \quad (x, y) \in \Omega, t > 0, \quad (4.3)$$

$$D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial^2 q}{\partial r} \right) = \frac{\partial q}{\partial t}, \quad r \in (0, R), \quad t > 0, \quad (4.4)$$

$$v_x = -K(c_1) \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad v_y = -K(c_1) \frac{\partial h}{\partial y} + v \frac{\partial c_1}{\partial y}, \quad \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0, \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial q(x, y, r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad q(x, r, t) \Big|_{r=R} = \frac{k_f \cdot c_2^\beta(x, t)}{1 + \eta \cdot c_2^\beta(x, t)}, \quad (x, y) \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0 \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial h}{\partial n} \Big|_{AB_1 \cup B_1 B_2 \cup B_2 B \cup CD} = 0, \quad h \Big|_{CB} = H_1, \quad h \Big|_{AE \cup EF \cup FD} = H_2, \quad (4.7)$$

$$l_1 c_1 \Big|_{CB} = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_2 \Big|_{CB} = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_3 c_3 \Big|_{CB} = \tilde{C}_3^1(t) \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = \frac{\partial c_2}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = \frac{\partial c_3}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = 0, \quad \Gamma = BB_2 \cup B_2 B_1 \cup B_1 A \cup AE \cup EF \cup FD \cup DC, \quad (4.9)$$

$$c_1 \Big|_{t=0} = \tilde{C}_1^0(x, y), \quad c_2 \Big|_{t=0} = \tilde{C}_2^0(x, y), \quad c_3 \Big|_{t=0} = \tilde{C}_3^0(x, y), \quad (4.10)$$

$$q \Big|_{t=0} = \tilde{Q}^0(x, y, r), \quad (x, y) \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad (4.11)$$

де $c_1(x, y, t)$, D_1 – концентрація та коефіцієнт конвективної дифузії забруднювача в фільтраційному потоці; $c_2(x, y, t)$, D_2 – концентрація і коефіцієнт молекулярної дифузії забруднювача у воді, зв'язаній зі скелетом ґрунту; $c_3(x, y, t)$, D_3 – концентрація і коефіцієнт дифузії забруднювача в самому скелеті ґрунту. (значення даного коефіцієнту дифузії відрізняється на порядок від попередніх, тому скелет ґрунту виступає в ролі так званої «пастки» [129]); $q(x, y, r, t)$, D_0 – коефіцієнт концентрації та коефіцієнт дифузії забруднювача в частинках радіуса R , яка розташована в ґрунтовому скелеті; k_f , β , η – коефіцієнти ізотерми адсорбції; θ – коефіцієнт впливу масопереносу мікро/наночастинок на масоперенос в околі скелета ґрунту; K – коефіцієнт фільтрації; $\vec{v} = \{v_x, v_y\}$ –

вектор швидкості фільтрації; $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – коефіцієнти масообміну; σ_1 – пористість ґрунту; $(x, y) \in \Omega$ – координати досліджуваної області; $l_i, i = \overline{1, 6}$ – диференціальні оператори, які задають граничні умови при $x=0$ і $x=l$; t – час, $0 < t < t_1$, r – радіус (радіальна, горизонтальна змінна), $0 < r < R$.

Вищенаведені рівняння описують наступне: (4.1) – міграцію забруднюючих речовин у фільтраційному потоці з концентрацією c_1 ; (4.2) – міграцію забруднюючих речовин у воді, зв'язаній зі скелетом ґрунту; (4.3) – міграцію забруднювача в скелеті ґрунту (наприклад, пастці); (4.4) – масове перенесення забруднювача з концентрацією q в мікрочастинках, які зв'язані з концентрацією c_2 рівнянням (4.6); (4.5) – 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'езометричного напору $h(x, y)$ мають вигляд (4.6) – (4.11) відповідно.

Крайова задача (4.1) – (4.11) поставлена коректно, оскільки виконуються умови існування та єдиності її розв'язку [199, 200].

4.2. Чисельний розв'язок крайової задачі

Чисельний розв'язок крайової задачі (4.1) – (4.11) знайдено методом скінченних різниць із використанням локально одновимірного методу О. А. Самарського та монотонних різницевих схем [228].

Обчислювальна різницева сітка $\omega_{h_1 h_2 h_3 \tau}$ для скінченно-різницевої апроксимації з кроками h_1, h_2, h_3 і τ по осях Ox, Oy, Or і Ot для змінних x, y, r, t відповідно наступна:

$$\omega_{h_1/h_2/h_2\tau} = \left\{ \begin{array}{l} x_{i_1} = i_1 h_{11}, y_{i_2} = i_2 h_{12}, r_j = j h_2, t_k = k \tau, \\ i_1 = \overline{0, n_{11}}, i_2 = \overline{0, n_{12}}, j = \overline{0, n_2}, k = \overline{0, n_3}, \\ h_{11} n_{11} = l_1, h_{12} n_{12} = l_2, h_2 n_2 = R, \tau n_3 = T, \end{array} \right\}$$

де n_{11}, n_{12}, n_2, n_3 – кількість кроків.

Згідно локально-одновимірного методу О. А. Самарського представимо диференціальне рівняння (4.1) у вигляді системи двох одновимірних рівнянь:

$$D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c_1}{\partial x} - \frac{\gamma_1 c_1}{2} + \frac{\gamma_2 c_2}{2} = \frac{\sigma_1}{2} \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (4.12)$$

$$D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2} - v_y \frac{\partial c_1}{\partial y} - \frac{\gamma_1 c_1}{2} + \frac{\gamma_2 c_2}{2} = \frac{\sigma_1}{2} \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (4.13)$$

$(x, y) \in \Omega, r \in (0, R), t > 0$.

Скінченнорізницеві аналоги рівнянь (4.12), (4.13) приймуть відповідно наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \sigma'_1 \frac{c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)} - c_{1,i_1,i_2}^{(k)}}{\tau} &= (\chi_1)_{i_1,i_2}^{(k)} \frac{c_{1,i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} - 2c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)} + c_{1,i_1-1,i_2}^{(k+0,5)}}{h_{11}^2} + \\ &+ \frac{(r_1^+)_{i_1,i_2}^{(k)}}{D_1} \frac{c_{1,i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} - c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{h_{11}} + \frac{(r_1^-)_{i_1,i_2}^{(k)}}{D_1} \frac{c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)} - c_{1,i_1-1,i_2}^{(k+0,5)}}{h_{11}} - \frac{\gamma'_1 c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2} + \frac{\gamma'_2 c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \sigma'_1 \frac{c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)} - c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} &= (\chi_2)_{i_1,i_2}^{(k)} \frac{c_{1,i_1,i_2+1}^{(k+1)} - 2c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)} + c_{1,i_1,i_2-1}^{(k+1)}}{h_{12}^2} + \frac{(r_2^+)_{i_1,i_2}^{(k)}}{D_1} \frac{c_{1,i_1,i_2+1}^{(k+1)} - c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)}}{h_{12}} + \\ &+ \frac{(r_2^-)_{i_1,i_2}^{(k)}}{D_1} \frac{c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)} - c_{1,i_1,i_2-1}^{(k+1)}}{h_{12}} - \frac{\gamma'_1 c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)}}{2} + \frac{\gamma'_2 c_{2,i_1,i_2}^{(k+1)}}{2}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, k = \overline{0, n_3},$

де

$$\sigma'_1 = \frac{\sigma_1}{D_1}, \quad \gamma'_1 = \frac{\gamma_1}{D_1}, \quad \gamma'_2 = \frac{\gamma_2}{D_1}, \quad (\chi_{i_{13}})_{i_1, i_2}^{(k)} = \frac{1}{1 + \frac{h_{i_{13}} |(r_{i_{13}})_{i_1, i_2}^{(k)}|}{2D_1}} = 1 - \frac{h_{i_{13}} |(r_{i_{13}})_{i_1, i_2}^{(k)}|}{2D_1} + O(h_{i_{13}}^2),$$

$$(r_{i_{13}}^+)_{i_1, i_2}^{(k)} = \frac{-(V_{i_{13}})_{i_1, i_2}^{(k)} + |(V_{i_{13}})_{i_1, i_2}^{(k)}|}{2} \geq 0, \quad (r_{i_{13}}^-)_{i_1, i_2}^{(k)} = \frac{-(V_{i_{13}})_{i_1, i_2}^{(k)} - |(V_{i_{13}})_{i_1, i_2}^{(k)}|}{2} \leq 0,$$

$$(r_{i_{13}})_{i_1, i_2}^{(k)} = (r_{i_{13}}^+)_{i_1, i_2}^{(k)} + (r_{i_{13}}^-)_{i_1, i_2}^{(k)}, \quad i_{13} = 1, 2.$$

Диференціальне рівняння (4.2) відповідно до локально-одновимірного методу О.А. Самарського запишемо у вигляді системи наступних одновимірних рівнянь:

$$D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \frac{\gamma_1 c_1}{2} - \frac{\gamma_2 c_2}{2} + \frac{\gamma_3 c_3}{2} - \frac{\theta}{2} \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R} = \frac{1}{2} \frac{\partial c_2}{\partial t}, \quad (4.16)$$

$$D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial y^2} + \frac{\gamma_1 c_1}{2} - \frac{\gamma_2 c_2}{2} + \frac{\gamma_3 c_3}{2} - \frac{\theta}{2} \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R} = \frac{1}{2} \frac{\partial c_2}{\partial t}, \quad (4.17)$$

$(x, y) \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0.$

Скінченно-різницеий аналог рівнянь (4.16), (4.17) має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{c_{2, i_1, i_2}^{(k+0,5)} - c_{2, i_1, i_2}^{(k)}}{\tau} = D_2 \frac{c_{2, i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} - 2c_{2, i_1, i_2}^{(k+0,5)} + c_{2, i_1-1, i_2}^{(k+0,5)}}{h_{11}^2} + \frac{\gamma_1 c_{1, i_1, i_2}^{(k)}}{2} - \frac{\gamma_2 c_{2, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{2} + \\ + \frac{\gamma_3 c_{3, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{2} - \frac{\theta}{2} \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+0,5)} - 2q_{n_2-1}^{(k+0,5)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+0,5)}}{h_2} \right), \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \frac{c_{2, i_1, i_2}^{(k+1)} - c_{2, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} = D_2 \frac{c_{2, i_1, i_2+1}^{(k+1)} - 2c_{2, i_1, i_2}^{(k+1)} + c_{2, i_1, i_2-1}^{(k+1)}}{h_{12}^2} + \frac{\gamma_1 c_{1, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{2} - \frac{\gamma_2 c_{2, i_1, i_2}^{(k+1)}}{2} + \\ + \frac{\gamma_3 c_{3, i_1, i_2}^{(k+1)}}{2} - \frac{\theta}{2} \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \end{aligned} \quad (4.19)$$

$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad k = \overline{0, n_3}.$

Згідно локально-одновимірного методу О.А. Самарського диференціальне рівняння (4.3) розщеплюється на такі одновимірні рівняння:

$$D_3 \frac{\partial^2 c_3}{\partial x^2} + \frac{\gamma_2 c_2}{2} - \frac{\gamma_3 c_3}{2} = \frac{\sigma_1}{2} \frac{\partial c_3}{\partial t}, \quad (4.20)$$

$$D_3 \frac{\partial^2 c_3}{\partial y^2} + \frac{\gamma_2 c_2}{2} + \frac{\gamma_3 c_3}{2} = \frac{\sigma_1}{2} \frac{\partial c_3}{\partial t}, \quad (4.21)$$

$(x, y) \in \Omega, t > 0$.

Відповідно їх скінченно-різницеві аналоги представимо у вигляді

$$\sigma_1 \frac{c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)} - c_{3,i_1,i_2}^{(k)}}{\tau} = D_3 \frac{c_{3,i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} - 2c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)} + c_{3,i_1-1,i_2}^{(k+0,5)}}{h_{11}^2} + \frac{\gamma_2 c_{2,i_1,i_2}^{(k)}}{2} - \frac{\gamma_3 c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2}, \quad (4.22)$$

$$\sigma_1 \frac{c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)} - c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} = D_3 \frac{c_{3,i_1,i_2+1}^{(k+1)} - 2c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)} + c_{3,i_1,i_2-1}^{(k+1)}}{h_{12}^2} + \frac{\gamma_2 c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2} - \frac{\gamma_3 c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)}}{2}, \quad (4.23)$$

$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, k = \overline{0, n_3}$.

Скінченно-різницевий аналог рівняння (4.4) прийме наступний вигляд:

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau'} = \bar{\chi} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - 2q_j^{(k+1)} + q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2^2} + \frac{\tilde{r}_+}{D_0} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} + \frac{\tilde{r}_-}{D_0} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2}, \quad (4.24)$$

$j = \overline{1, n_2 - 1}, k = \overline{0, n_3}$,

де $\bar{\chi} = \frac{1}{1 + \frac{h_2 |\tilde{r}|}{2D_0}} = 1 - \frac{h_2 |\tilde{r}|}{2D_0} + O(h_2^2)$, $\tilde{r} = \frac{2}{r}$, $\tau' = D_0 \tau$, $\tilde{r}_+ = \frac{-\tilde{r} + |\tilde{r}|}{2} \geq 0$, $\tilde{r}_- = \frac{-\tilde{r} - |\tilde{r}|}{2} \geq 0$,

$\tilde{r} = \tilde{r}_+ + \tilde{r}_-$.

Для компонент швидкості фільтрації (4.5) маємо такі різницеві аналоги:

$$(v_x)_{i_1,i_2}^{(k)} = -(K_1)_{i_1,i_2}^{(k)} \frac{h_{i_1+1,i_2} - h_{i_1-1,i_2}}{2h_{11}} + (v_1)_{i_1,i_2}^{(s)} \frac{c_{1,i_1+1,i_2}^{(k)} - c_{1,i_1-1,i_2}^{(k)}}{2h_{11}}, \quad (4.25)$$

$$(v_y)_{i_1,i_2}^{(k)} = -(K_2)_{i_1,i_2}^{(k)} \frac{h_{i_1,i_2+1} - h_{i_1,i_2-1}}{2h_{12}} + (v_2)_{i_1,i_2}^{(s)} \frac{c_{1,i_1,i_2+1}^{(k)} - c_{1,i_1,i_2-1}^{(k)}}{2h_{12}}, \quad (4.26)$$

$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, k = \overline{0, n_3}$.

Для використання методу прогонки запишемо рівняння (4.14) в наступній формі:

$$\begin{cases} a_i^1 c_{1,i-1,i_2}^{(k+0,5)} - \bar{c}_i^1 c_{1,i,i_2}^{(k+0,5)} + b_i^1 c_{1,i+1,i_2}^{(k+0,5)} = -f_{i,i_2}^{1,(k+0,5)}, \\ c_{1,0,i_2}^{(k+0,5)} = \mu_{11}^1 c_{1,1,i_2}^{(k+0,5)} + \mu_{12}^1, \\ c_{1,n_1,i_2}^{(k+0,5)} = \mu_{13}^1 c_{1,n_1-1,i_2}^{(k+0,5)} + \mu_{14}^1, \end{cases}$$

де

$$a_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{(\chi_1)_{i,i_2}^{(k)}}{h_{11}^2} - \frac{(r_1^-)_{i,i_2}^{(k)}}{h_{11} D_1} \right), \quad b_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{(\chi_1)_{i,i_2}^{(k)}}{h_{11}^2} + \frac{(r_1^+)_{i,i_2}^{(k)}}{h_{11} D_1} \right),$$

$$\bar{c}_i^1 = 1 + \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{2(\chi_1)_{i,i_2}^{(k)}}{h_{11}^2} + \frac{1}{h_{11} D_1} \left((r_1^+)_{i,i_2}^{(k)} - (r_1^-)_{i,i_2}^{(k)} \right) + \frac{\gamma_1'}{2} \right), \quad f_{i,i_2}^{1,(k+0,5)} = c_{1,i,i_2}^{(k)} + \frac{\tau}{\sigma_1'} \frac{\gamma_2' c_{2,i,i_2}^{(k+0,5)}}{2},$$

$$\mu_{11}^1 = 1, \quad \mu_{12}^1 = 0, \quad \mu_{13}^1 = 1, \quad \mu_{14}^1 = 0.$$

Легко показати, що умови стійкості методу прогонки виконуються, оскільки $|\bar{c}_i^1| > |a_i^1| + |b_i^1|$. Отже, значення концентрації $c_1(x, y, t)$ на часових кроках $(k+0,5)$ знаходимо методом прогонки із співвідношення

$$c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)} = \alpha_{i_1+1}^1 c_{1,i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} + \beta_{i_1+1}^1, \quad (4.27)$$

$$\text{де } \alpha_{i_1+1}^1 = \frac{b_{i_1}^1}{\bar{c}_{i_1}^1 - \alpha_{i_1}^1 a_{i_1}^1}, \quad \beta_{i_1+1}^1 = \frac{a_{i_1}^1 \beta_{i_1}^1 + f_{i_1,i_2}^{1,(k+0,5)}}{\bar{c}_{i_1}^1 - \alpha_{i_1}^1 a_{i_1}^1}, \quad i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

$$\alpha_{i_1}^1 = \mu_{11}^1 = 1, \quad \beta_{i_1}^1 = \mu_{12}^1 = 0.$$

Для розв'язування крайової задачі (4.15) з відповідними граничними умовами методом прогонки представимо (4.15) у вигляді

$$\begin{cases} a_{i_2}^1 c_{1,i_1,i_2-1}^{(k+1)} - \bar{c}_{i_2}^1 c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)} + b_{i_2}^1 c_{1,i_1,i_2+1}^{(k+1)} = -f_{i_1,i_2}^{1,(k+1)}, \\ c_{1,i_1,0}^{(k+1)} = \mu_{21}^1 c_{1,i_1,1}^{(k+1)} + \mu_{22}^1, \\ c_{1,i_1,n_{12}}^{(k+1)} = \mu_{23}^1 c_{1,i_1,n_{12}-1}^{(k+1)} + \mu_{24}^1, \end{cases}$$

де

$$a_{i_2}^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{(\chi_2)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{12}^2} - \frac{(r_2^-)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{12} D_1} \right), \quad b_{i_2}^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{(\chi_2)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{12}^2} + \frac{(r_2^+)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{12} D_1} \right),$$

$$\bar{c}_{i_1}^{-1} = 1 + \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{2(\chi_2)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{12}^2} + \frac{1}{h_{12} D_1} \left((r_2^+)_{i_1, i_2}^{(k)} - (r_2^-)_{i_1, i_2}^{(k)} \right) + \frac{\gamma_1'}{2} \right), \quad f_{i_1, i_2}^{1, (k+1)} = c_{1, i_1, i_2}^{(k+0,5)} + \frac{\tau}{\sigma_1'} \frac{\gamma_2' c_{2, i_1, i_2}^{(k+1)}}{2},$$

$$\mu_{21}^1 = 0, \quad \mu_{22}^1 = \tilde{C}_2, \quad \mu_{23}^1 = 1, \quad \mu_{24}^1 = 0.$$

Можна показати, що умови стійкості методу прогонки виконуються, оскільки справедливе співвідношення $|\bar{c}_{i_1}^{-2}| > |a_{i_1}^2| + |b_{i_1}^2|$. Значення концентрації $c_1(x, y, t)$ на часових кроках $(k+1)$ знаходимо із співвідношення

$$c_{1, i_1, i_2}^{(k+1)} = \alpha_{i_2+1}^1 c_{1, i_1, i_2+1}^{(k+1)} + \beta_{i_2+1}^1, \quad (4.28)$$

де $\alpha_{i_2+1}^1 = \frac{b_{i_2}^1}{\bar{c}_{i_2}^{-1} - \alpha_{i_2}^1 a_{i_2}^1}$, $\beta_{i_2+1}^1 = \frac{a_{i_2}^1 \beta_{i_2}^1 + f_{i_1, i_2}^{1, (k+1)}}{\bar{c}_{i_2}^{-1} - \alpha_{i_2}^1 a_{i_2}^1}$, $i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}$, $i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$,

$$\alpha_{i_2}^1 = \mu_{21}^1 = 0, \quad \beta_{i_2}^1 = \mu_{22}^1 = \tilde{C}_2.$$

Для використання методу прогонки при розв'язанні крайової задачі (4.18) з відповідними граничними умовами, отримаємо наступне:

$$\begin{cases} a_{i_1}^2 c_{2, i_1-1, i_2}^{(k+0,5)} - \bar{c}_{i_1}^{-2} c_{2, i_1, i_2}^{(k+0,5)} + b_{i_1}^2 c_{2, i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} = -f_{i_1, i_2}^{2, (k+0,5)}, \\ c_{2, 0, i_2}^{(k+0,5)} = \mu_{11}^2 c_{2, 1, i_2}^{(k+0,5)} + \mu_{12}^2, \\ c_{2, n_{11}, i_2}^{(k+0,5)} = \mu_{13}^2 c_{2, n_{11}-1, i_2}^{(k+0,5)} + \mu_{14}^2, \end{cases}$$

де

$$a_{i_1}^2 = \frac{D_2}{h_{11}^2}, \quad b_{i_1}^2 = \frac{D_2}{h_{11}^2}, \quad \bar{c}_{i_1}^{-2} = \frac{2D_2}{h_{11}^2} + \frac{1}{\tau} + \frac{\gamma_2}{2},$$

$$f_{i_1, i_2}^{2, (k+0,5)} = \frac{c_{2, i_1, i_2}^{(k)}}{\tau} + \frac{\gamma_1 c_{1, i_1, i_2}^{(k)}}{2} + \frac{\gamma_3 c_{3, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{2} - \frac{\theta}{2} \left(\frac{3q_{n_2}^{(k+0,5)} - 2q_{n_2-1}^{(k+0,5)} + \frac{1}{2}q_{n_2-2}^{(k+0,5)}}{h_2} \right),$$

$$\mu_{11}^2 = 1, \quad \mu_{12}^2 = 0, \quad \mu_{13}^2 = 1, \quad \mu_{14}^2 = 0.$$

Очевидно, що умови стійкості прогонки виконуються, оскільки має місце співвідношення $|\bar{c}_i^2| > |a_i^2| + |b_i^2|$. Тому значення концентрації $c_2(x, y, t)$ на часовому кроці $(k + 0,5)$ знаходимо згідно наступного співвідношення:

$$c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)} = \alpha_{i_1+1}^2 c_{2,i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} + \beta_{i_1+1}^2, \quad (4.29)$$

$$\text{де } \alpha_{i_1+1}^2 = \frac{b_{i_1}^2}{\bar{c}_{i_1}^2 - \alpha_{i_1}^2 a_{i_1}^2}, \quad \beta_{i_1+1}^2 = \frac{a_{i_1}^2 \beta_{i_1}^2 + f_{i_1,i_2}^{2,(k+0,5)}}{\bar{c}_{i_1}^2 - \alpha_{i_1}^2 a_{i_1}^2}, \quad i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

$$\alpha_{i_1}^2 = \mu_{11}^2 = 1, \quad \beta_{i_1}^2 = \mu_{12}^2 = 0.$$

Рівняння (4.19) представимо у наступній формі (для можливості використання методу прогонки) при розв'язуванні відповідної крайової підзадачі:

$$\begin{cases} a_{i_2}^2 c_{2,i_1,i_2-1}^{(k+1)} - \bar{c}_{i_2}^2 c_{2,i_1,i_2}^{(k+1)} + b_{i_2}^2 c_{2,i_1,i_2+1}^{(k+1)} = -f_{i_1,i_2}^{2,(k+1)}, \\ c_{2,i_1,0}^{(k+1)} = \mu_{21}^2 c_{2,i_1,1}^{(k+1)} + \mu_{22}^2, \\ c_{2,i_1,n_{12}}^{(k+1)} = \mu_{23}^2 c_{2,i_1,n_{12}-1}^{(k+1)} + \mu_{24}^2, \end{cases}$$

де

$$a_{i_2}^2 = \frac{D_2}{h_{12}^2}, \quad b_{i_2}^2 = \frac{D_2}{h_{12}^2}, \quad \bar{c}_{i_2}^2 = \frac{2D_2}{h_{12}^2} + \frac{1}{\tau} + \frac{\gamma_2}{2},$$

$$f_{i_1,i_2}^{2,(k+1)} = \frac{c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} + \frac{\gamma_1 c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2} + \frac{\gamma_3 c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)}}{2} - \frac{\theta}{2} \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right),$$

$$\mu_{21}^2 = 1, \quad \mu_{22}^2 = 0, \quad \mu_{23}^2 = 1, \quad \mu_{24}^2 = 0.$$

Аналогічно, до вище записаних рівнянь, переконуємось, що умови стійкості прогонки виконуються, оскільки $|\bar{c}_i^2| > |a_i^2| + |b_i^2|$. Тому, значення концентрації $c_2(x, y, t)$ на часових кроках $(k + 1)$ знаходяться із співвідношення

$$c_{2,i_1,i_2}^{(k+1)} = \alpha_{i_2+1}^2 c_{2,i_1,i_2+1}^{(k+1)} + \beta_{i_2+1}^2, \quad (4.30)$$

$$\text{де } \alpha_{i_2+1}^2 = \frac{b_{i_2}^2}{\bar{c}_{i_2}^2 - \alpha_{i_2}^2 a_{i_2}^2}, \quad \beta_{i_2+1}^2 = \frac{a_{i_2}^2 \beta_{i_2}^2 + f_{i_1, i_2}^{2, (k+1)}}{\bar{c}_{i_2}^2 - \alpha_{i_2}^2 a_{i_2}^2}, \quad i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

$$\alpha_{i_2}^2 = \mu_{21}^2 = 0, \quad \beta_{i_2}^2 = \mu_{22}^2 = \tilde{C}_2.$$

Для використання методу прогонки при розв'язуванні крайової задачі (4.22) з відповідними граничними умовами, представимо (4.22) у вигляді

$$\begin{cases} a_i^3 c_{3, i_1-1, i_2}^{(k+0,5)} - \bar{c}_i^3 c_{3, i_1, i_2}^{(k+0,5)} + b_i^3 c_{3, i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} = -f_{i_1, i_2}^{3, (k)}, \\ c_{3, 0, i_2}^{(k+0,5)} = \mu_{11}^3 c_{3, 1, i_2}^{(k+0,5)} + \mu_{12}^3, \\ c_{3, n_{11}, i_2}^{(k+0,5)} = \mu_{13}^3 c_{3, n_{11}-1, i_2}^{(k+0,5)} + \mu_{14}^3, \end{cases}$$

$$\text{де } a_i^3 = \frac{D_3}{h_{11}^2}, \quad b_i^3 = \frac{D_3}{h_{11}^2}, \quad \bar{c}_i^3 = \frac{2D_3}{h_{11}^2} + \frac{\sigma_1}{\tau} + \frac{\gamma_3}{2}, \quad f_{i_1, i_2}^{3, (k)} = \frac{c_{3, i_1, i_2}^{(k)}}{\tau} + \frac{\gamma_2 c_{2, i_1, i_2}^{(k)}}{2}, \quad \mu_{11}^3 = 1, \quad \mu_{12}^3 = 0,$$

$$\mu_{13}^3 = 1, \quad \mu_{14}^3 = 0.$$

Переконаємося, що умови стійкості прогонки виконуються: $|\bar{c}_i^3| > |a_i^3| + |b_i^3|$.

Значення концентрації $c_3(x, y, t)$ на часовому кроці $(k+0,5)$ знаходимо методом прогонки за допомогою співвідношення:

$$c_{3, i_1, i_2}^{(k+0,5)} = \alpha_{i_1+1}^3 c_{3, i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} + \beta_{i_1+1}^3, \quad (4.31)$$

$$\text{де } \alpha_{i_1+1}^3 = \frac{b_{i_1}^3}{\bar{c}_{i_1}^3 - \alpha_{i_1}^3 a_{i_1}^3}, \quad \beta_{i_1+1}^3 = \frac{a_{i_1}^3 \beta_{i_1}^3 + f_{i_1, i_2}^{3, (k)}}{\bar{c}_{i_1}^3 - \alpha_{i_1}^3 a_{i_1}^3}, \quad i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

$$\alpha_{i_1}^3 = \mu_{11}^3 = 1, \quad \beta_{i_1}^3 = \mu_{12}^3 = 0.$$

Представимо рівняння (4.23) відповідної крайової задачі наступним чином:

$$\begin{cases} a_{i_2}^3 c_{3, i_1, i_2-1}^{(k+1)} - \bar{c}_{i_2}^3 c_{3, i_1, i_2}^{(k+1)} + b_{i_2}^3 c_{3, i_1, i_2+1}^{(k+1)} = -f_{i_1, i_2}^{3, (k+0,5)}, \\ c_{3, i_1, 0}^{(k+1)} = \mu_{21}^3 c_{3, i_1, 1}^{(k+1)} + \mu_{22}^3, \\ c_{3, i_1, n_{12}}^{(k+1)} = \mu_{23}^3 c_{3, i_1, n_{12}-1}^{(k+1)} + \mu_{24}^3, \end{cases}$$

$$\text{де } a_{i_2}^3 = \frac{D_3}{h_{12}^2}, \quad b_{i_2}^3 = \frac{D_3}{h_{12}^2}, \quad \bar{c}_{i_2}^3 = \frac{2D_3}{h_{12}^2} + \frac{\sigma_1}{\tau} + \frac{\gamma_3}{2}, \quad f_{i_1, i_2}^{3, (k+0,5)} = \frac{c_{3, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} + \frac{\gamma_2 c_{2, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{2},$$

$$\mu_{21}^3 = 0, \mu_{22}^3 = \tilde{C}_3, \mu_{23}^3 = 1, \mu_{24}^3 = 0.$$

Як і вище, умови стійкості прогонки виконуються: $|\bar{c}_i^3| > |a_i^3| + |b_i^3|$. Значення концентрації $c_3(x, y, t)$ на часовому кроці $(k+1)$ ми знаходимо згідно наступного рівняння:

$$c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)} = \alpha_{i_2+1}^3 c_{3,i_1,i_2+1}^{(k+1)} + \beta_{i_2+1}^3, \quad (4.32)$$

$$\text{де } \alpha_{i_2+1}^3 = \frac{b_{i_2}^3}{\bar{c}_{i_2}^3 - \alpha_{i_2}^3 a_{i_2}^3}, \beta_{i_2+1}^3 = \frac{a_{i_2}^3 \beta_{i_2}^3 + f_{i_1,i_2}^{3,(k+0.5)}}{\bar{c}_{i_2}^3 - \alpha_{i_2}^3 a_{i_2}^3}, i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, k = \overline{1, n_3},$$

$$\alpha_{i_2}^3 = \mu_{21}^3 = 0, \beta_{i_2}^3 = \mu_{22}^3 = \tilde{C}_3.$$

Подамо рівняння (4.24) у наступному вигляді задля подальшого застосування методу прогонки при розв'язуванні крайової задачі (4.24):

$$\begin{cases} a_j^4 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^4 q_j^{(k+1)} + b_j^4 q_{j+1}^{(k+1)} = -q_j^{(k)}, \\ q_0^{(k+1)} = \mu_1^4 q_1^{(k+1)} + \mu_2^4, \\ q_{n_2}^{(k+1)} = \mu_3^4 q_{n_2-1}^{(k+1)} + \mu_4^4, \end{cases}$$

$$\text{де } a_j^4 = \tau' \left(\frac{\bar{\chi}}{h_2^2} - \frac{\tilde{r}_-}{h_2 D_0} \right), b_j^4 = \tau' \left(\frac{\bar{\chi}}{h_2^2} + \frac{\tilde{r}_+}{h_2 D_0} \right), \bar{c}_j^4 = 1 + \tau' \left(\frac{2\bar{\chi}}{h_2^2} + \frac{1}{h_2 D_0} (\tilde{r}_+ - \tilde{r}_-) \right), \mu_1^4 = 1,$$

$$\mu_2^4 = 0, \mu_3^4 = 0, \mu_4^4 = \frac{k_f \cdot c_2^\beta(x, t)}{1 + \eta \cdot c_2^\beta(x, t)}.$$

Аналогічно попередньому, умови стійкості методу прогонки виконуються, оскільки справедлива наступна нерівність $|\bar{c}_j^3| > |a_j^3| + |b_j^3|$. Значення концентрації $q(x, r, t)$ на часовому кроці $(k+1)$ знаходимо із наступного співвідношення:

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^4 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^4, \quad (4.33)$$

$$\text{де } \alpha_{j+1}^4 = \frac{b_j^4}{\bar{c}_j^4 - \alpha_j^4 a_j^4}, \beta_{j+1}^4 = \frac{a_j^4 \beta_j^4 + q_j^{(k)}}{\bar{c}_j^4 - \alpha_j^4 a_j^4}, j = \overline{1, n_2 - 1}, k = \overline{1, n_3}, \alpha_j^4 = \mu_1^4 = 1,$$

$$\beta_j^4 = \mu_2^4 = 0.$$

Для початкових умов (4.11) запишемо наступні скінченно-різницеві рівняння:

$$c_{1,i_1,i_2}^{(0)} = \tilde{C}_1^0(i_1 h_{11}, i_2 h_{12}), \quad c_{2,i_1,i_2}^{(0)} = \tilde{C}_2^0(i_1 h_{11}, i_2 h_{12}), \quad c_{3,i_1,i_2}^{(0)} = \tilde{C}_3^0(i_1 h_{11}, i_2 h_{12}), \quad q_j^{(0)} = \tilde{Q}^0(j h_2),$$

$$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}.$$

Для граничних умов першого роду (4.7), (4.8) отримаємо

$$c_{1,i_1,n_{12}}^{(k)} = \tilde{C}_1^1(i_1 h_{11}, k\tau), \quad c_{2,i_1,n_{12}}^{(k)} = \tilde{C}_2^1(i_1 h_{11}, k\tau), \quad c_{3,i_1,n_{12}}^{(k)} = \tilde{C}_3^1(i_1 h_{11}, k\tau), \quad i_1 = \overline{0, n_{11}}, \quad k = \overline{0, n_3}.$$

Значення п'єзометричного напору в стаціонарному випадку знаходимо із розв'язку задачі фільтрації (4.5). Звідси отримуємо:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-K(c_1) \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-K(c_1) \frac{\partial h}{\partial y} + v \frac{\partial c_1}{\partial y} \right) = 0$$

або

$$K(c_1) \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial K(c_1)}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial K(c_1)}{\partial y} \frac{\partial h}{\partial y} - v \left(\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2} \right) = 0.$$

Після скінченно-різницевої апроксимації часткових похідних, отримаємо:

$$K_{i_1,i_2}^{(k)} \left(\frac{h_{i_1+1,i_2} - 2h_{i_1,i_2} + h_{i_1-1,i_2}}{h_{11}^2} + \frac{h_{i_1,i_2+1} - 2h_{i_1,i_2} + h_{i_1,i_2-1}}{h_{12}^2} \right) + \frac{K_{i_1+1,i_2}^{(k)} - K_{i_1,i_2}^{(k)}}{h_{11}} \frac{h_{i_1+1,i_2} - h_{i_1,i_2}}{h_{11}} +$$

$$+ \frac{K_{i_1,i_2+1}^{(k)} - K_{i_1,i_2}^{(k)}}{h_{12}} \frac{h_{i_1,i_2+1} - h_{i_1,i_2}}{h_{12}} - v \left(\frac{c_{1,i_1+1,i_2}^{(k)} - 2c_{1,i_1,i_2}^{(k)} + c_{1,i_1-1,i_2}^{(k)}}{h_1^2} + \frac{c_{1,i_1,i_2+1}^{(k)} - 2c_{1,i_1,i_2}^{(k)} + c_{1,i_1,i_2-1}^{(k)}}{h_2^2} \right) = 0, \quad (4.34)$$

$$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad k = \overline{0, n_3}.$$

Для знаходження значень напору з різницевого рівняння (4.34) модифікуємо ітераційний метод Гауса-Зейделя. Зведемо дане рівняння до вигляду

$$h_{i_1,i_2}^{(z+1)} = \tilde{A}h_{i_1+1,i_2}^{(z)} + \tilde{B}h_{i_1-1,i_2}^{(z)} + \tilde{C}h_{i_1,i_2+1}^{(z)} + \tilde{D}h_{i_1,i_2-1}^{(z)} + \tilde{f}_{i_1,i_2}^{(k)}, \quad (4.35)$$

де

$$\tilde{A} = \frac{K_{i_1+1,i_2}^{(k)}}{\tilde{\Lambda} h_{11}^2}, \quad \tilde{B} = \frac{K_{i_1,i_2}^{(k)}}{\tilde{\Lambda} h_{11}^2}, \quad \tilde{C} = \frac{K_{i_1,i_2+1}^{(k)}}{\tilde{\Lambda} h_{12}^2}, \quad \tilde{D} = \frac{K_{i_1,i_2}^{(k)}}{\tilde{\Lambda} h_{12}^2}, \quad \tilde{\Lambda} = \frac{K_{i_1+1,i_2}^{(k)} + K_{i_1,i_2}^{(k)}}{h_{11}^2} + \frac{K_{i_1,i_2+1}^{(k)} + K_{i_1,i_2}^{(k)}}{h_{12}^2},$$

$$\tilde{f}_{j_1,j_2}^{(s)} = -\frac{v}{\tilde{\Lambda}} \left(\frac{c_{1,i_1+1,i_2}^{(k)} - 2c_{1,i_1,i_2}^{(k)} + c_{1,i_1-1,i_2}^{(k)}}{h_{11}^2} + \frac{c_{1,i_1,i_2+1}^{(k)} - 2c_{1,i_1,i_2}^{(k)} + c_{1,i_1,i_2-1}^{(k)}}{h_{12}^2} \right).$$

Ітерації за формулою (4.35) проводяться до тих пір, поки різниця значень не стане меншою за деяку задану точність ε

$$\left| h_{i_1,i_2}^{(z+1)} - h_{i_1,i_2}^{(z)} \right| \leq \varepsilon,$$

$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}$, $i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}$, z – номер ітерації.

Значення п'єзометричного напору в нестационарному випадку знаходимо з розв'язку задачі фільтрації (4.5), (4.7). Звідси отримуємо:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K(c_1) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K(c_1) \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(v \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(v \frac{\partial c_1}{\partial y} \right) = a \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (4.36)$$

$x \in (0, l_1)$, $y \in (0, l_2)$, $t > 0$.

Для дискретизації рівняння (4.36) використаємо неявну різницеву схему. Для цього запишемо диференціальне рівняння (4.36) у вигляді системи двох одновимірних рівнянь

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K(c_1) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(v \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) = \frac{a}{2} \frac{\partial h}{\partial t},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(K(c_1) \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(v \frac{\partial c_1}{\partial y} \right) = \frac{a}{2} \frac{\partial h}{\partial t}.$$

Їх скінченно-різницеві аналоги мають вигляд

$$\frac{h_{i_1,i_2}^{(k+0,5)} - h_{i_1,i_2}^{(k)}}{\tau} = \frac{1}{ah_1} \left[\left((a_1)_{i_1+1,i_2}^{(k)} \frac{h_{i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} - h_{i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} - (a_1)_{i_1,i_2}^{(k)} \frac{h_{i_1,i_2}^{(k+0,5)} - h_{i_1-1,i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} \right) - \right. \\ \left. - \left((b_1)_{i_1+1,i_2}^{(k)} \frac{c_{1,i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} - c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} - (b_1)_{i_1,i_2}^{(k)} \frac{c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)} - c_{1,i_1-1,i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} \right) \right], \quad (4.37)$$

$$\frac{h_{i_1, i_2}^{(k+1)} - h_{i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} = \frac{1}{ah_2} \left[\left((a_2)_{i_1, i_2+1}^{(k+1)} \frac{h_{i_1, i_2+1}^{(k+1)} - h_{i_1, i_2}^{(k+1)}}{h_2} - (a_2)_{i_1, i_2}^{(k+1)} \frac{h_{i_1, i_2}^{(k+1)} - h_{i_1, i_2-1}^{(k+1)}}{h_2} \right) - \right. \\ \left. - \left((b_2)_{i_1, i_2+1}^{(k+1)} \frac{c_{1, i_1, i_2+1}^{(k+1)} - c_{1, i_1, i_2}^{(k+1)}}{h_2} - (b_2)_{i_1, i_2}^{(k+1)} \frac{c_{1, i_1, i_2}^{(k+1)} - c_{1, i_1, i_2-1}^{(k+1)}}{h_2} \right) \right], \quad (4.38)$$

$$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad k = \overline{0, n_3},$$

де

$$(a_1)_{i_1, i_2}^{(k)} = \frac{1}{2} \left((K_1)_{i_1, i_2}^{(k)} + (K_1)_{i_1-1, i_2}^{(k)} \right), \quad (a_2)_{i_1, i_2}^{(k)} = \frac{1}{2} \left((K_2)_{i_1, i_2}^{(k)} + (K_2)_{i_1, i_2-1}^{(k)} \right), \\ (b_1)_{i_1, i_2}^{(k)} = \frac{1}{2} \left((v_1)_{i_1, i_2}^{(k)} + (v_1)_{i_1-1, i_2}^{(k)} \right), \quad (b_2)_{i_1, i_2}^{(k)} = \frac{1}{2} \left((v_2)_{i_1, i_2}^{(k)} + (v_2)_{i_1, i_2-1}^{(k)} \right).$$

Для знаходження значення п'єзометричного напору $h(x, y, t)$, потрібно розв'язати скінченно-різницеві рівняння (4.37), (4.38) з відповідними початковими та граничними умовами. Розв'яжемо рівняння (4.37) за допомогою методу прогонки по змінній x . Для цього використаємо наступне співвідношення:

$$a_i h_{i-1, i_2}^{(k+0,5)} - c_i h_{i, i_2}^{(k+0,5)} + b_i h_{i+1, i_2}^{(k+0,5)} = -F_{i, i_2}^{(k)},$$

де

$$a_i = \frac{\tau}{ah_1^2} (a_1)_{i, i_2}^{(k)}, \quad b_i = \frac{\tau}{ah_1^2} (a_1)_{i+1, i_2}^{(k)}, \quad c_i = 1 + \frac{\tau}{ah_1^2} \left((a_1)_{i, i_2}^{(k)} + (a_1)_{i+1, i_2}^{(k)} \right), \\ F_{i, i_2}^{(k)} = h_{i, i_2}^{(k)} - \frac{\tau}{ah_1} \left((b_1)_{i+1, i_2}^{(k)} \frac{c_{1, i+1, i_2}^{(k+0,5)} - c_{1, i, i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} - (b_1)_{i, i_2}^{(k)} \frac{c_{1, i, i_2}^{(k+0,5)} - c_{1, i-1, i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} \right).$$

В даному випадку умови стійкості прогонки виконуються, оскільки $|c_i| > |a_i| + |b_i|$. Значення п'єзометричного напору на часовому кроці $(k+0,5)$ знаходимо за формулою

$$h_{i, i_2}^{(k+0,5)} = \alpha_{i+1} h_{i+1, i_2}^{(k+0,5)} + \beta_{i+1}, \quad (4.39)$$

$$\text{де } \alpha_{i+1} = \frac{b_i}{c_i - a_i \alpha_i}, \beta_{i+1} = \frac{a_i \beta_i + F_{i,i_2}^{(k)}}{c_i - a_i \alpha_i}.$$

Після цього розв'язуємо рівняння (4.38), використовуючи метод прогонки по змінній y із співвідношення:

$$a_{i_2} h_{i_1, i_2-1}^{(k+1)} - c_{i_2} h_{i_1, i_2}^{(k+1)} + b_{i_2} h_{i_1, i_2+1}^{(k+1)} = -F_{i_1, i_2}^{(k+0,5)},$$

де

$$a_{i_2} = \frac{\tau}{ah_2^2} (a_2)_{i_1, i_2}^{(k+1)}, \quad b_{i_2} = \frac{\tau}{ah_2^2} (a_2)_{i_1, i_2+1}^{(k+1)}, \quad c_{i_2} = 1 + \frac{\tau}{ah_2^2} \left((a_2)_{i_1, i_2}^{(k+1)} + (a_2)_{i_1, i_2+1}^{(k+1)} \right),$$

$$F_{i_1, i_2}^{(k+0,5)} = h_{i_1, i_2}^{(k+0,5)} - \frac{\tau}{ah_2} \left((b_2)_{i_1, i_2+1}^{(k+1)} \frac{c_{1, i_1, i_2+1}^{(k+1)} - c_{1, i_1, i_2}^{(k+1)}}{h_2} - (b_2)_{i_1, i_2}^{(k+1)} \frac{c_{1, i_1, i_2}^{(k+1)} - c_{1, i_1, i_2-1}^{(k+1)}}{h_2} \right).$$

Аналогічно вищенаведеному, легко показати, що умови стійкості прогонки виконуються, оскільки справедлива нерівність $|c_{i_2}| > |a_{i_2}| + |b_{i_2}|$. Значення п'єзOMETричного напору на часовому кроці $(k+1)$ знаходиться згідно співвідношення

$$h_{i_1, i_2}^{(k+1)} = \alpha_{i_2+1} h_{i_1, i_2+1}^{(k+1)} + \beta_{i_2+1}, \quad (4.40)$$

$$\text{де } \alpha_{i_2+1} = \frac{b_{i_2}}{c_{i_2} - a_{i_2} \alpha_{i_2}}, \beta_{i_2+1} = \frac{a_{i_2} \beta_{i_2} + F_{i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{c_{i_2} - a_{i_2} \alpha_{i_2}}.$$

Таким чином, крайова задача (4.1)-(4.11) алгоритмічно розв'язана повністю.

4.3. Результати комп'ютерного моделювання

Результати чисельних експериментів отримано для наступних вхідних даних:

$$l = 10 \text{ м}, \quad AE = 1 \text{ м}, \quad AD = 1 \text{ м}, \quad AB_1 = 4 \text{ м}, \quad \tilde{H}_1 = 1 \text{ м}, \quad \tilde{H}_2 = 0,1 \text{ м}, \quad R = 1 \cdot 10^{-8} \text{ м},$$

$$\sigma_1 = 0,4, \quad k_f = 1, \quad \beta = 1, \quad \eta = 0, \quad \gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = 0,0065, \quad \theta = 3 \cdot 10^{-10}, \quad \tau = 30 \text{ діб},$$

$$D_1 = 1 \cdot 10^{-3} \frac{M^2}{\text{доба}}, D_2 = 1 \cdot 10^{-5} \frac{M^2}{\text{доба}}, D_3 = 1 \cdot 10^{-6} \frac{M^2}{\text{доба}}, D_0 = 1 \cdot 10^{-17} \frac{M^2}{\text{доба}},$$

$$\tilde{C}_2^1(t) = 0 \frac{K\mathcal{L}}{M^3}, \tilde{C}_3^1(t) = 0 \frac{K\mathcal{L}}{M^3},$$

$$\tilde{C}_1^0(x) = 5 \frac{K\mathcal{L}}{M^3}, \tilde{C}_2^0(x) = 5 \frac{K\mathcal{L}}{M^3}, \tilde{C}_3^0(x) = 5 \frac{K\mathcal{L}}{M^3}, Q^0(x, r) = 0 \frac{K\mathcal{L}}{M^3}, .$$

Побудований вище обчислювальний алгоритм розв'язування крайової задачі (4.1) – (4.11) реалізовано у Web-додатку розробленого в роботі програмного комплексу NanoSurface. Запропонований підхід дозволяє здійснювати чисельне моделювання у довільному веб-браузері без необхідності встановлення додаткового програмного забезпечення. Більше того, хостинг веб-додатку знаходиться у хмарному сервісі Microsoft Azure, який забезпечує можливість використання паралельних обчислень. Оскільки поставлена двовимірною задачею є нелінійною і моделює процеси різних масштабів, виникає багато ітераційних процесів при чисельних розрахунках. Тому з'являється потреба в оптимізації такого обчислювального процесу.

Згідно обчислювального алгоритму на кожному півкроці по часу (ітерація по часу), спочатку знаходився розподіл значень напору $h(x, y, t)$. Оскільки під впливом градієнту напору відбувається перенесення речовин з верхньої частини ґрунту до фільтра-вловлювача, то розподіл напору на 1-му часовому кроці (30 діб) чітко демонструє присутність фільтра-вловлювача (рис 4.2). З часом, через 1 рік, оскільки напір залежить від концентрації, помітна незначна зміна напору (порядку 5%) у вертикальному масиві ґрунту, що знаходиться як над так і під фільтром-вловлювачем (рис 4.3).

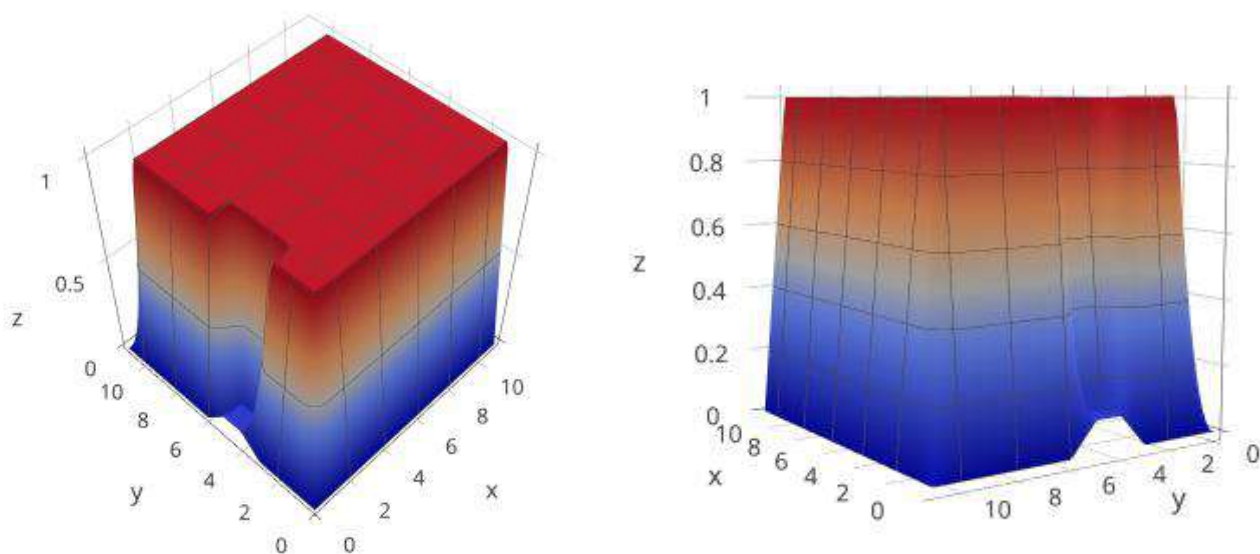


Рис. 4.2. Графіки розподілу п'єзометричних напорів $h(x,y,t)$ в момент часу $t = 30 \text{ днів}$

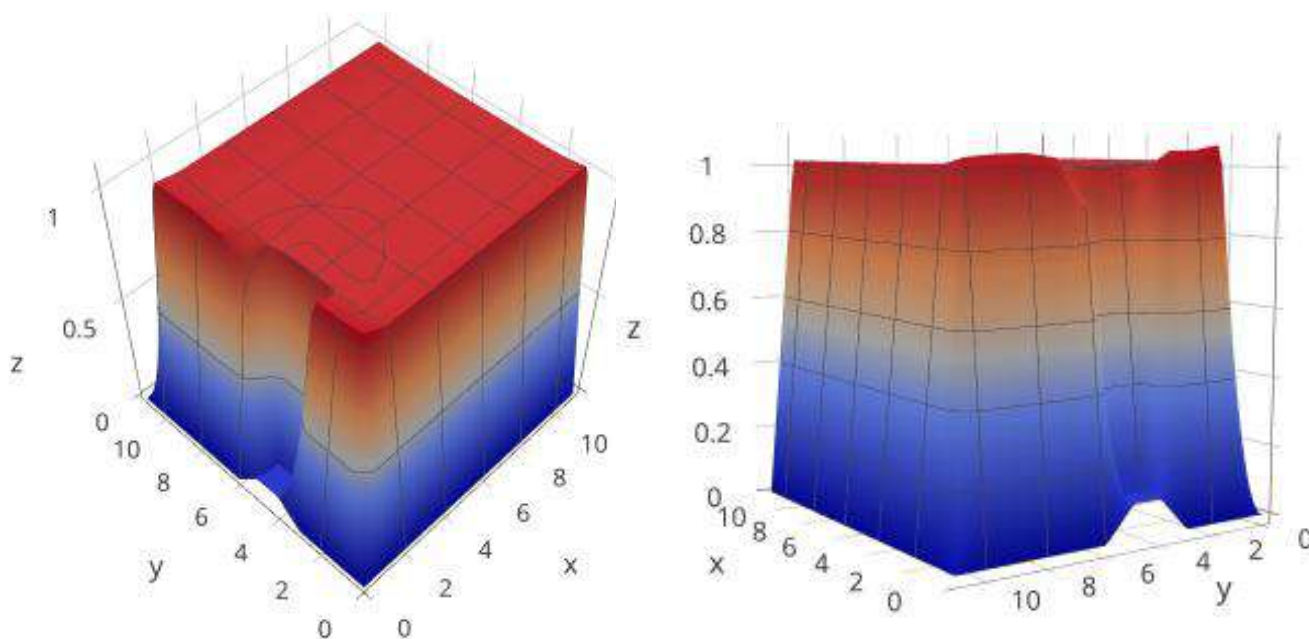


Рис. 4.3. Графіки розподілу п'єзометричних напорів $h(x,y,t)$ в момент часу $t = 1 \text{ рік}$.

Наступним етапом було обчислення компонент швидкості фільтрації $v_x(x,y,t)$ та $v_y(x,y,t)$. Відповідні графіки в момент часу $t = 3,5 \text{ роки}$ представлені на рис 4.4 та рис 4.5.

Як видно з рис. 4.4, 4.5 найбільший перепад значень у компоненти швидкості $v_y(x, y, t)$. Найбільші значення швидкості фільтрації досягаються у вертикальній області під фільтром-вловлювачем.

Подальші кроки алгоритму розв'язку задачі масопереносу полягали у знаходженні розподілів концентрації $q(x, y, r, t)$, $c_3(x, y, t)$, $c_2(x, y, t)$ та $c_1(x, y, t)$ по області з часом. Оскільки коефіцієнт конвективної дифузії D_1 є найбільшим у порівнянні з іншими коефіцієнтами дифузії (D_2 , D_3 , D_0), то графіки розподілу концентрації $c_1(x, y, t)$ представляють найбільшу цікавість з фізичної точки зору (рис 4.6).

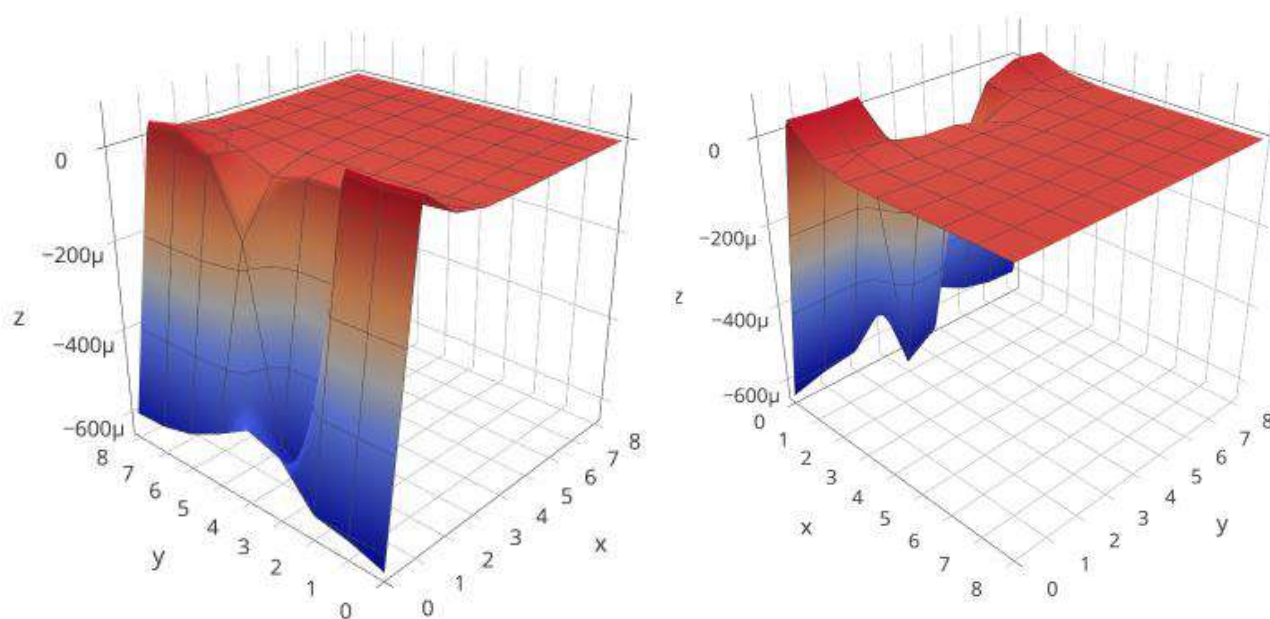


Рис. 4.4. Графіки розподілу компонент швидкості фільтрації $v_x(x, y, t)$ в момент часу $t = 3,5$ роки

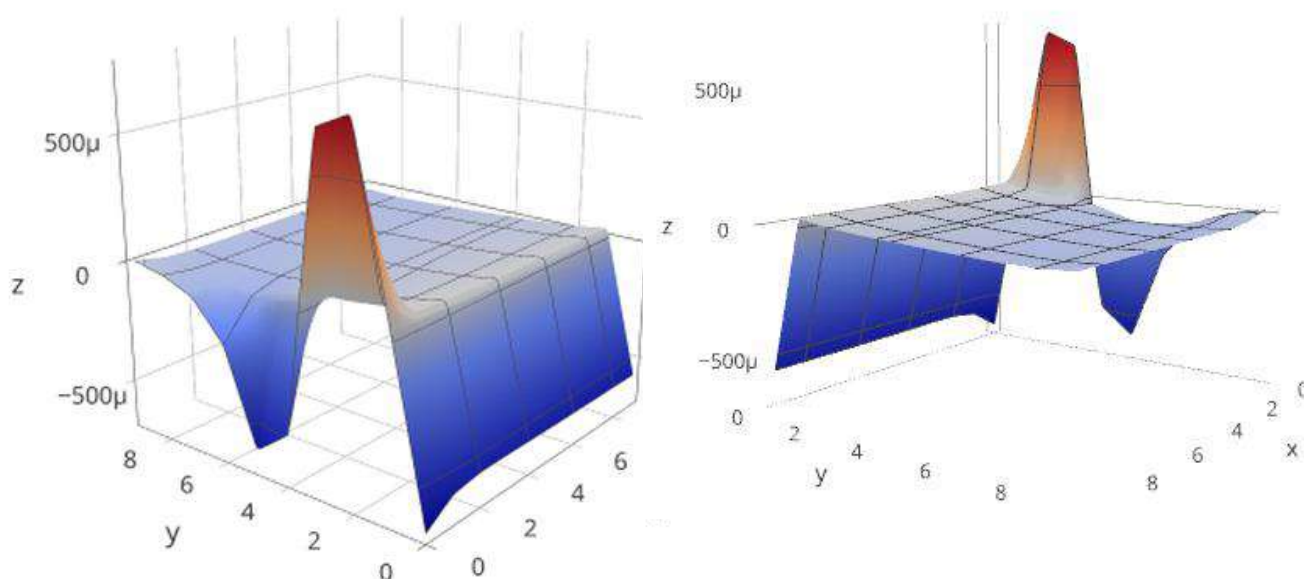


Рис. 4.5. Графіки розподілу компонент швидкості фільтрації $v_y(x, y, t)$ в момент часу $t = 3,5$ роки

Як видно з графіків, що зображені на рис. 4.6, в момент часу $t = 2$ роки значення концентрації $c_1(x, y, t)$ в ґрунті під фільтром-вловлювачем суттєво відрізняється від всього іншого розподілу в два рази. Це пояснюється тим, що межа складається з непроникної ділянки B_1B та ділянок $AB_1 \cup B_2B \cup CD$, на яких виконується умова симетрії, а також наявністю постійного джерела забруднення на верхній частині ґрунту $\tilde{C}_1^1(t)$ (межа СВ).

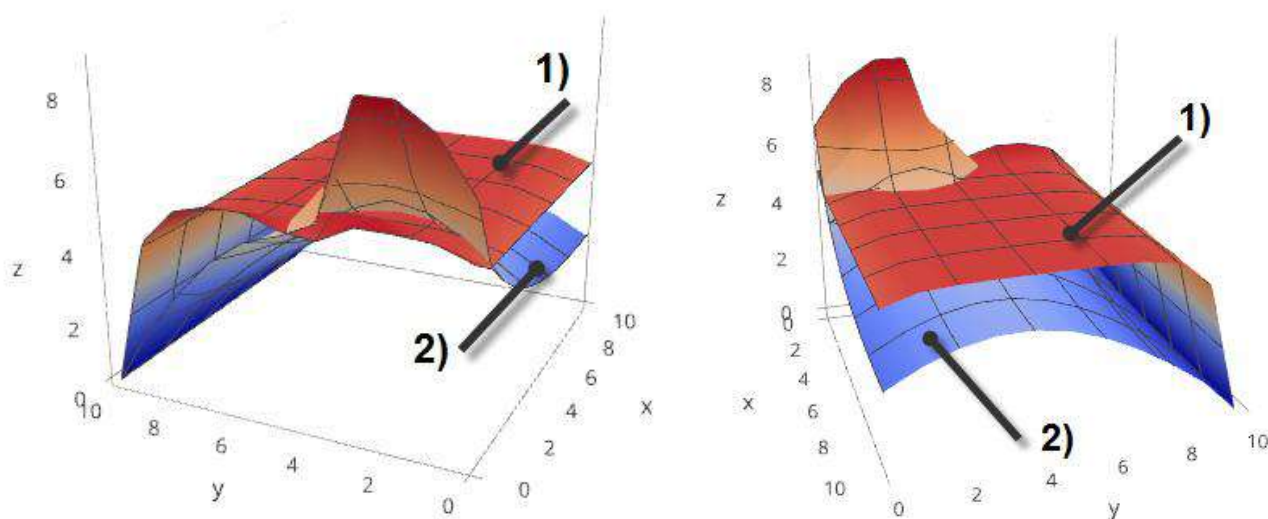


Рис. 4.6. Графіки розподілу значень концентрації $c_1(x, y, t)$ в моменти часу

1) $t = 2$ міс. та 2) $t = 2$ роки

Як наслідок, відбувається накопичення забруднених речовин. Більше того, дане накопичення під фільтром не зменшується з часом (рис 4.7 обведена область). Наприклад, в момент часу $t = 5$ років значення концентрації $c_1(x, y, t)$ на 5-10% має менше значення, ніж в момент часу $t = 2$ роки на всій області за виключення ділянки під фільтром (в ній значення на 5-15% більше). Також, в ході чисельних експериментів при дослідженні та зміні властивостей сорбуючих мікрочастинок, значень п'єзометричних напорів, коефіцієнтів масообміну, тощо, не було зафіксовано ніяких можливостей для очищення області, що знаходиться під фільтром-вловлювачем. Це пояснюється непроникною підстилаючою поверхнею і, як результат, процес накопичення проходить інтенсивніше за процес очищення.

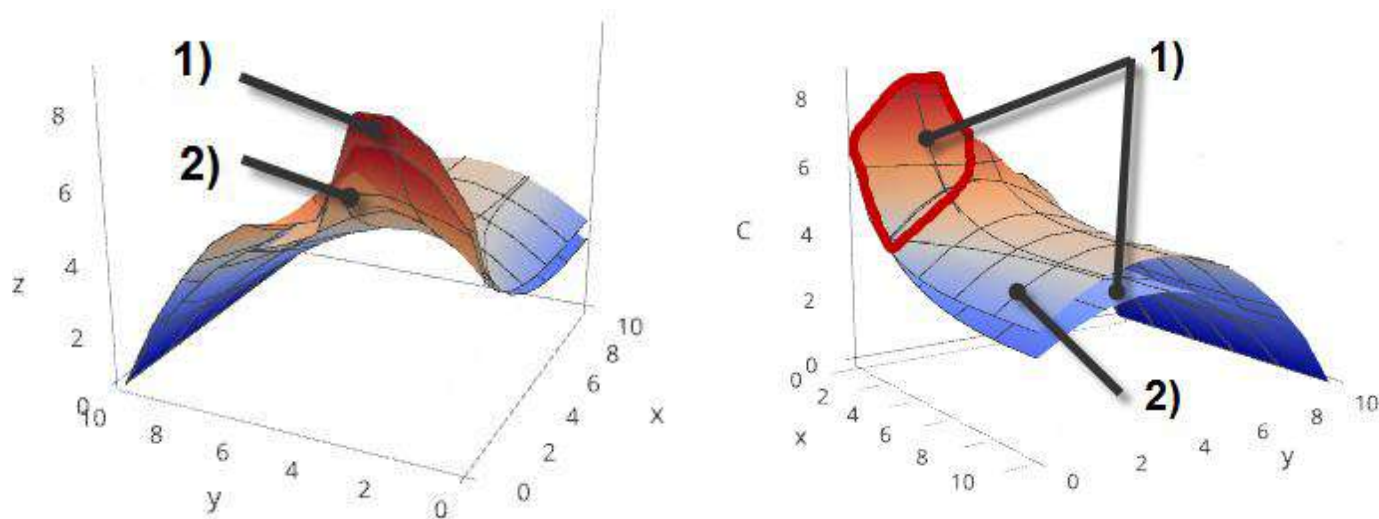


Рис. 4.7. Графіки розподілу значень концентрації $c_1(x, y, t)$ в моменти часу

1) $t = 2$ роки та 2) $t = 5$ років.

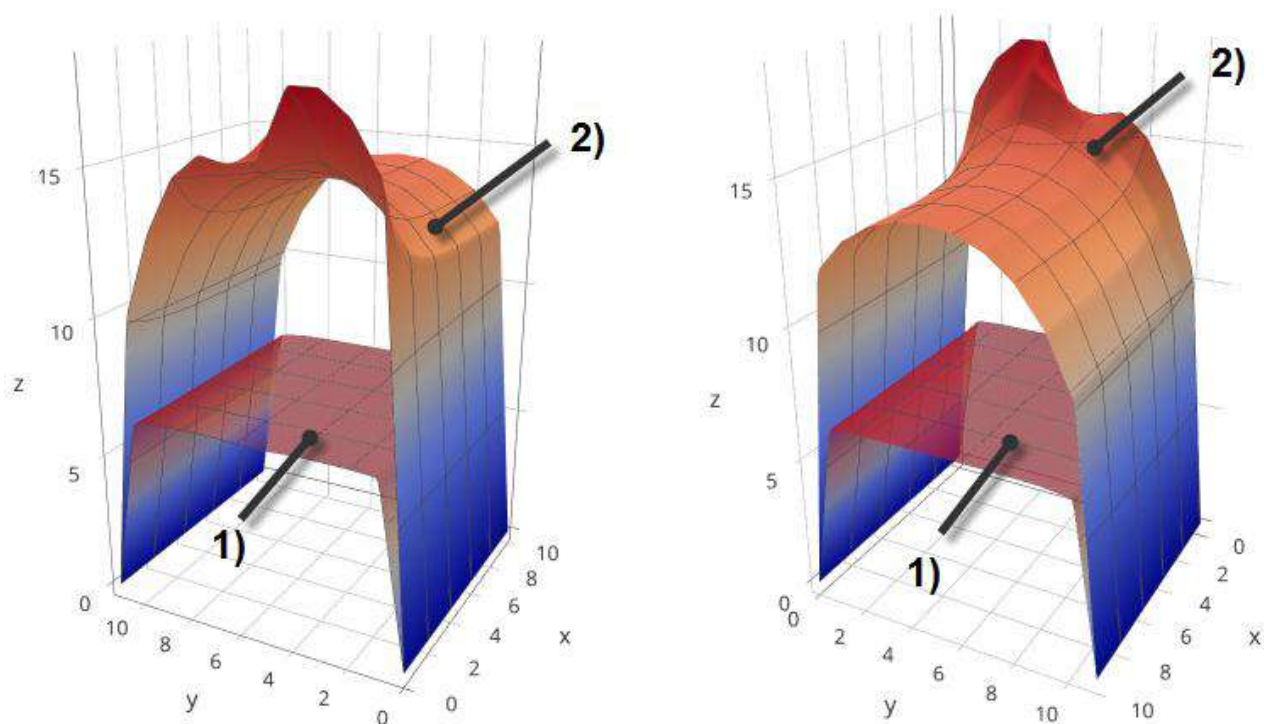


Рис. 4.8. Графіки розподілу значень концентрації $c_2(x, y, t)$ в моменти часу

1) $t = 2$ міс. та 2) $t = 1$ рік

Аналогічним чином (рис. 4.8) відбувається накопичення забруднених речовин і у воді з концентрацією $c_2(x, y, t)$, що пов'язана із скелетом ґрунту під фільтром-вловлювачем.

Вплив дифузії у сорбуючих мікрочастинках із заданими характеристиками пришвидшує процес масопереносу при фільтрації, однак не є дуже суттєвим. Наприклад, через один рік після початку вертикальної міграції забруднених речовин у каталітичному пористому середовищі їх концентрація була на 0,9-3,8% більша у всій товщині шару ґрунту, ніж без врахування дифузії у мікрочастинках (див. таблицю 4.1).

Таблиця 4.1. Вплив дифузії в мікрочастинках

		у									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
х	0	1,0%	0,9%	0,9%	0,9%	1,0%	1,0%	1,1%	1,2%	1,3%	2,4%
	1	1,0%	1,0%	0,9%	1,0%	1,0%	1,1%	1,1%	1,2%	1,7%	2,4%
	2	1,1%	1,0%	1,0%	1,0%	1,1%	1,1%	1,2%	1,3%	1,7%	2,5%
	3	1,2%	1,1%	1,1%	1,1%	1,1%	1,2%	1,2%	1,3%	1,7%	2,5%
	4	1,3%	1,2%	1,2%	1,2%	1,2%	1,2%	1,3%	1,3%	1,8%	2,6%
	5	1,4%	1,3%	1,3%	1,2%	1,2%	1,3%	1,3%	1,4%	1,8%	2,6%
	6	1,4%	1,3%	1,3%	1,3%	1,3%	1,3%	1,3%	1,4%	1,8%	2,7%
	7	1,5%	1,4%	1,3%	1,3%	1,3%	1,3%	1,4%	1,4%	1,7%	2,7%
	8	1,4%	1,3%	1,3%	1,3%	1,3%	1,3%	1,4%	1,5%	1,9%	2,7%
	9	1,4%	1,3%	1,3%	1,3%	1,3%	1,3%	1,4%	1,5%	1,9%	3,8%
	10	1,4%	1,3%	1,3%	1,3%	1,3%	1,3%	1,4%	1,5%	1,9%	3,8%

4.4. Висновки

В даному розділі сформульовано постановку та побудовано математичну модель вертикальної міграції радіонуклідів для двовимірного випадку у ґрунтовому середовищі з фільтром-вловлювачем при наявності каталітичних мікропористих частинок. Побудовано чисельний розв'язок відповідної крайової задачі з використанням локально-одновимірного методу та монотонних різницевих схем. Програмна реалізація обчислювального методу розв'язку відповідної крайової задачі здійснена у веб-додатку розробленого у

дисертаційній роботі програмного комплексу NanoSurface. Веб-додаток створений засобами Visual Studio Community 2017 із застосуванням .Net фреймворку. Веб-додаток розміщений у глобальній мережі Internet на ресурсах хмарного сервісу Microsoft Azure за адресою <http://nanosurface.azurewebsites.net>. Розроблене програмне забезпечення дозволяє здійснювати комп'ютерне моделювання у зручний для користувача спосіб із використанням лише веб-браузера. Оскільки всі обчислення можуть проводитися в хмарному сервісі Microsoft Azure, то персональний комп'ютер користувача може задовільняти мінімальній конфігурації, необхідній для роботи веб-браузера та мати доступ до мережі Internet.

Аналіз результатів, отриманих після проведення серії чисельних експериментів, дозволив зробити ряд важливих висновків. Досліджено вплив каталітичного пористого середовища на загальний перебіг процесу. Результати порівняльного аналізу показали пришвидшення процесу масопереносу на 0,9-3,8% у момент часу $t = 1 \text{ рік}$ при наявності мікрочастинок. Даний ефект пояснюється граничною умовою для $c_1(x, y, t)$: $c_1|_{CB} = \tilde{C}_1^1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$. Тобто, на верхній межі постійно присутнє забруднення. Очевидно, що зміна крайових умов та характеристик мікрочастинок (коефіцієнт дифузії D_0 , коефіцієнтів ізотерми адсорбції k_f, β, η) ще більше змінять міграційну поведінку. Тому подальші дослідження можуть мати розвиток з вивчення впливу конкретних сорбційних мікро- або наночастинок.

Графіки розподілу значень п'єзометричного напору з часом практично не змінюються. 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 компоненти 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 $t = 2$ роки значення концентрації в даній області під фільтром-вловлювачем зростають в порівнянні зі значеннями іншого розподілу приблизно в два рази.

Результати даних досліджень опубліковано в роботах [4, 247–250].

РОЗДІЛ 5

ПРОЕКТУВАННЯ ТА РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО КОМПЛЕКСУ NANOSURFACE

У даному розділі висвітлено основні проблеми побудови програмних комплексів для математичного моделювання підземних процесів. Враховуючи проведений в п. 1.7. аналіз програмних комплексів для дослідження цих процесів, наведено сучасні методології побудови відповідного програмного забезпечення. На прикладі власного кросплатформенного програмного комплексу NanoSurface запропоновано підхід до вибору методології розробки, архітектури класів та проектування програмної системи. Складні взаємозв'язки між рівняннями математичної моделі в NanoSurface реалізовано завдяки механізму віртуальних функцій та патерну *factory method*. Користувацький інтерфейс абстрагувався від конкретної реалізації вибраної користувачем математичної моделі через вказівник на абстрактний клас моделі. Також наводяться практичні аспекти застосування шаблонів проектування, організації чисельних обчислень та побудови користувацького інтерфейсу.

5.1. Архітектура розробленого програмного комплексу NanoSurface

5.1.1. Ієрархія класів основних математичних моделей NanoSurface

Архітектура програмного комплексу. Останнім часом дискутується питання про уніфікацію підходу до створення програмних продуктів, стандартизацію математичних моделей та створення їх єдиного реєстру [251]. Це дозволить об'єднати зусилля багатьох груп науковців до створення більш універсальних комплексів. Проте, разом з тим, не всі поспішають викладати на загал програмний код. Із усіх вищевказаних програм тільки три містять відкритий код (HYDRUS, PFLOTRAN, PHREEQC) [252]. З них лише одна вказала актуальну останню версію (PFLOTRAN). Без розуміння технічної реалізації чисельного моделювання, маючи лише опис математичної моделі, важко реалізувати досконалий

програмний продукт.

Очевидно, що для забезпечення повторного використання коду варто розділяти логіку роботи чисельного моделювання від представлення (введення та виведення) даних. При проектуванні програмних комплексів з використанням високорівневих мов це досягається за допомогою класів та паттернів проектування [240].

Розглянемо ієрархію класів NanoSurface. В першій версії даного програмного комплексу здійснено комп'ютерне моделювання процесу міграції сольових розчинів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів [253]. Для чисельного розв'язання поставленої крайової задачі використано метод скінченних різниць із застосуванням локально-одновимірного методу О. А. Самарського та монотонних різницевих схем. Отримано скінченно-різницеві аналоги відповідних диференціальних рівнянь. Чисельний розв'язок різницевих схем знайдено методом прогонки. Для цього зведено відповідні диференціальні рівняння до прогоночного вигляду. Код програми містить реалізацію методу прогонки, а всі математичні операції, пов'язані з отриманням коефіцієнтів прогонки, здійснено перед початком програмування.

NanoSurface може здійснювати моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі у лінійному та нелінійному випадках [2], з урахуванням взаємодії між рідкою та твердою фазою (скелет ґрунту) [234], неізотермічних умов [254], біпористих частинок [255], насиченого та ненасиченого пористого середовищ [241] та інших факторів.

При цьому для чисельних експериментів важливим є порівняння отриманих результатів із попередніми. Тому на основі початкової моделі [253] було спроектовано базовий клас BasicMigrationModel, а всі наступні класи утворили ієрархію класів (рис. 5.1).

На UML діаграмі (рис. 5.1) наведено частину класів для розуміння загальної структури комплексу. Основна логіка роботи математичної моделі абстрагована у

класі `BasicMigrationModel` із віртуальними методами для задання крайових умов, необхідними полями даних та обчисленнями. Похідні класи для конкретних моделей реалізують відповідні методи і розширюють базовий функціонал. Для вирішення того, який екземпляр класу необхідно створювати, використано шаблон проектування «Параметризований фабричний метод» (Factory Method). Його завдання полягає у прихованні конкретного класу, що має бути створений та повернений під виглядом загальної абстракції. В нашому випадку в класі `ModelFactory` присутній фабричний метод `getModel()`, який в залежності від вибору користувача інстанціює потрібний клас математичної моделі.

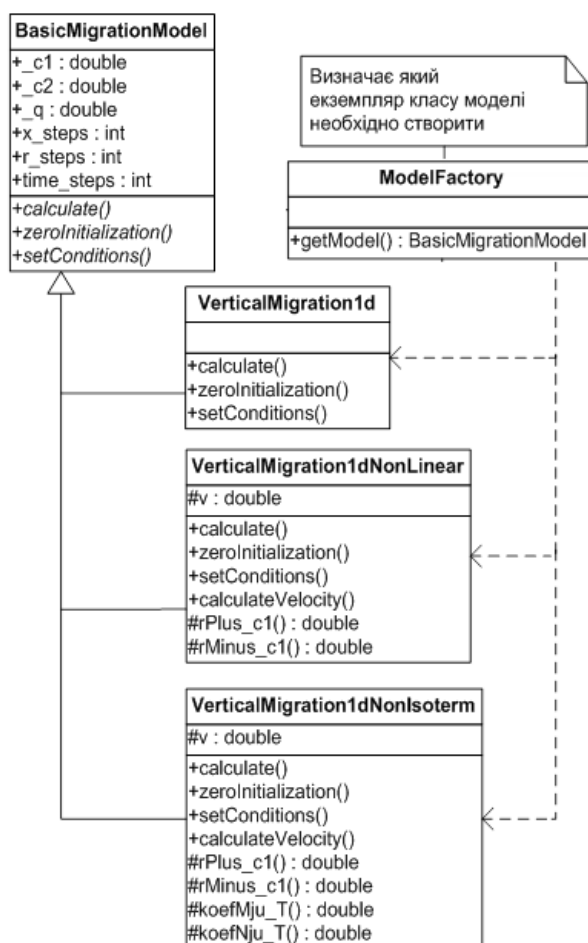


Рис. 5.1. Ієрархія класів основних математичних моделей програмного комплексу NanoSurface

Ієрархію класів користувацького інтерфейсу для задання початкових та

граничних умов запрограмованих математичних моделей організовано схожим чином. Існує батьківський клас із мінімальною кількістю елементів керування, а його дочірні класи розширюють функціонал. При натисканні кнопки початку обрахунку викликається фабричний метод для створення загальної абстракції моделі і подальша робота відбувається з нею.

Таким чином, не потрібно пам'ятати екземпляр якого класу було створено. Всі звертання відбуваються через вказівник на `model` (таблиця 5.1), а виклик методів необхідних класів здійснюється за допомогою віртуальних функцій `setConditions()`, `calculate()` тощо.

Таблиця 5.1. Приклади використання загальної абстракції математичної моделі

```
// Початкова ініціалізація
model->zeroInitialization();
// Задання крайових умов
model->setConditions(...);

// Обрахунок
model->calculate();

//Побудова графіків
graph1 = new GraphWidgetSimple("Concentration c1", model->_c1, ...);
graph2 = new GraphWidgetSimple("Concentration c2", model->_c2, ...);
```

5.1.2. Архітектурний патерн для розділення логіки роботи і користувацького інтерфейсу

Окрему увагу в NanoSurface приділено методу `calculate()`, що відповідає за алгоритм чисельних обчислень. В перших версіях програми даний метод мав вигляд, наведений в таблиці 5.2.

Варто зауважити, що код алгоритму прогонки повторюється при реалізації алгоритму чисельних обрахунків для кожної крайової підзадачі математичної моделі. У зв'язку з цим, його програмну реалізацію винесено в окремий клас з метою вирішення проблеми повторного використання коду. Це також дозволило вибирати та дослідити різні методи прогонки для обчислень (звичайної,

зустрічної, блочної і т.д.). Після відповідного рефакторингу код методу calculate() набув наступного вигляду (таблиця 5.3).

Таблиця 5.2. Код методу calculate(), що реалізує чисельні обчислення в Nanosurface

```
//Основний цикл по часу
for (int k = 0; k < time_steps; k++) {
    // Обчислення швидкості фільтрації
    /* Обчислення для рівняння з q
       Коеф-и прогонки, прямий та зворотній хід*/
    // Обчислення для рівняння з c2
    alfa[1] = 0;      beta[1] = _c2[0][k];
    //Коефіцієнти прогонки
    for (int i = 1; i < x_steps; i++) {
        a[i] = ...;    b[i] = ...;    c[i] = ...;        f[i] = ...;
    }
    //Прямий хід
    for (int i = 1; i < x_steps; i++) {
        alfa[i+1] = b[i] / (c[i] - alfa[i] * a[i] );
        beta[i+1] = (a[i] * beta[i] + f[i]) / (c[i] - alfa[i] * a[i]);
    }
    //Зворотній хід
    for (int i = x_steps - 1; i > 0; i--) {
        _c2[i][k+1] = _c2[i+1][k+1] * alfa[i+1] + beta[i+1];
    }
    // Обчислення для рівняння з c1
    //Коефіцієнти прогонки
    //Прямий хід , зворотній хід
    // ...і т. д. для всіх інших рівнянь
} // закінчення циклу по часу
```

Таблиця 5.3. Код методу calculate() після рефакторингу

```
ThomasBaseAlgo * thomasAlgo = ThomasFactory::getAlgo(algoUserSelected);
//Основний цикл по часу
for (int k = 0; k < time_steps; k++)
{
    // Обчислення швидкості фільтрації
    /* Обчислення для рівняння з q
       Коефіцієнти прогонки
       Використання прогонки, вибраної користувачем
    */
    // Обчислення для рівняння з c2
    //Коефіцієнти прогонки
    for (int i = 1; i < x_steps; i++)
    { a[i] = ...;    b[i] = ...;    c[i] = ...;    f[i] = ...; }
    //Використання прогонки, вибраної користувачем
    thomasAlgo->performSweep(_c2, k, a, b, c, f);
    /* Обчислення для рівняння з c2
       Коефіцієнти прогонки
       Використання прогонки, вибраної користувачем
    */
    // ...і т. д. для всіх інших рівнянь
} // закінчення циклу по часу
```

5.1.3. Користувачський інтерфейс програмного комплексу NanoSurface

Програмний комплекс NanoSurface (рис. 5.2) написаний на мові програмування C/C++ із застосуванням фреймворку Qt і призначений для комп'ютерного моделювання задач масопереносу сольових розчинів у каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури з використанням паралельних обчислень [256]. Вищезазначений фреймворк дає змогу підготувати програму без суттєвої зміни вихідного коду до роботи в таких операційних системах як Windows, Linux, MacOS.

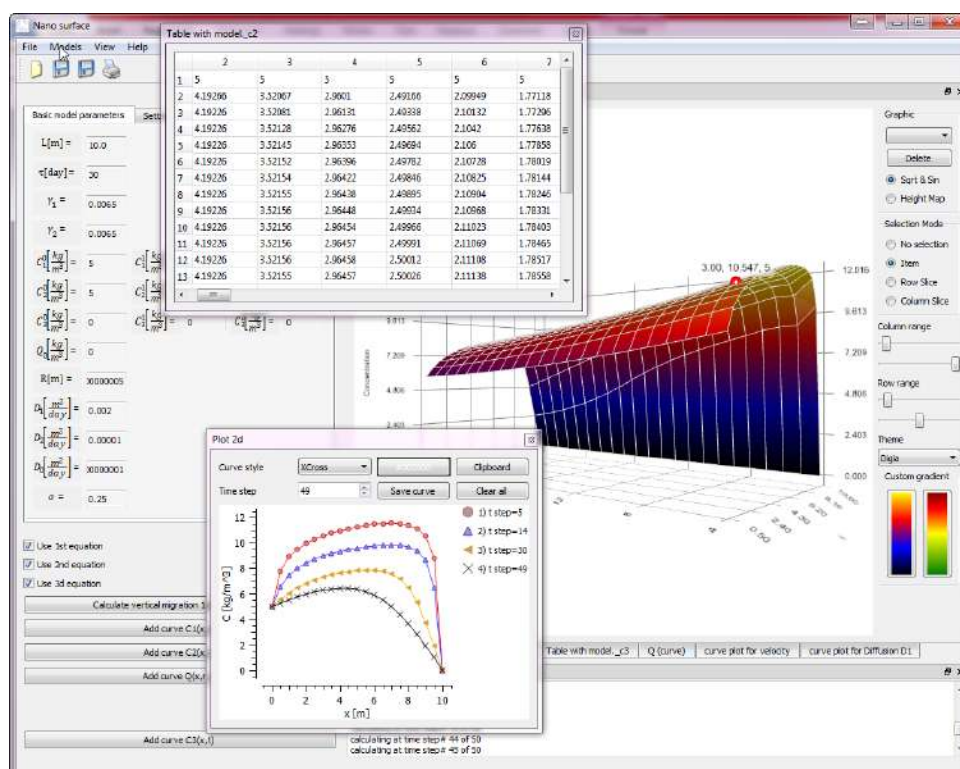


Рис. 5.2. Елементи інтерфейсу програмного комплексу Nanosurface

Важливу роль для зручного комп'ютерного моделювання відіграє інтерфейс користувача [257]. В користувацькому інтерфейсі (рис. 5.3) підписання полів введення здійснюється з використанням бібліотеки «Qwt MathML Renderer». Вона дозволяє використання мови математичної розмітки MathML (Mathematical Markup Language). Це суттєво спрощує розуміння інтерфейсу комплексу, адже забезпечується повна графічна сумісність назв полів із їхніми аналогами в математичній моделі.

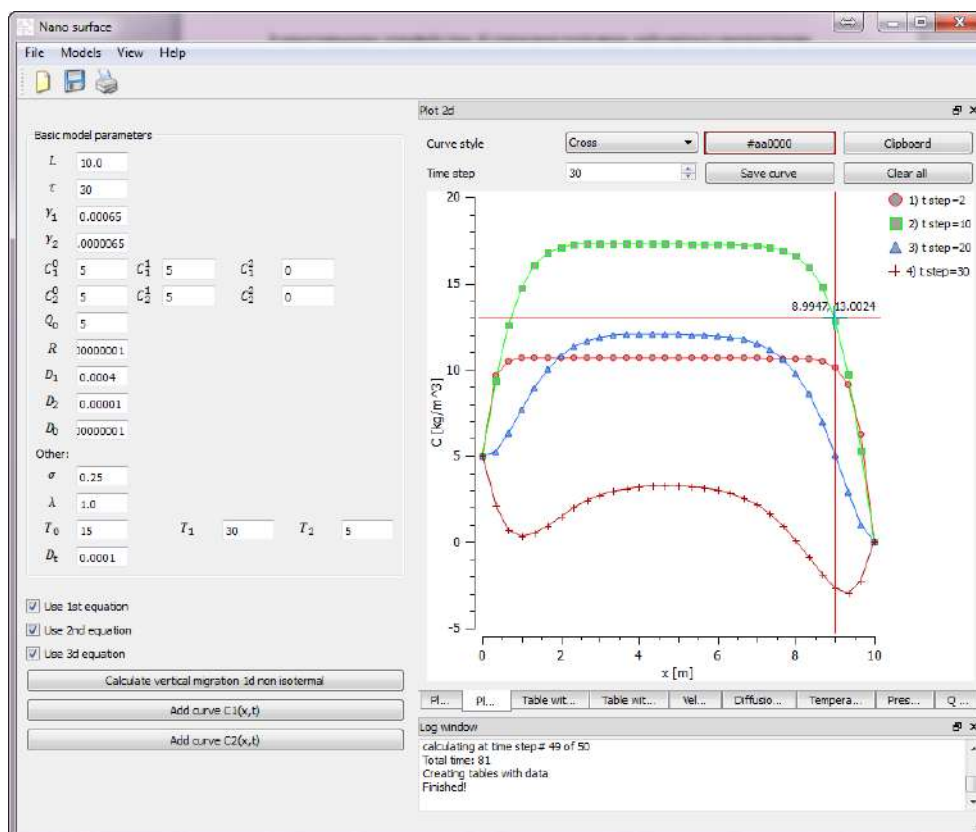


Рис. 5.3. Проведення серії чисельних експериментів за допомогою програмного комплексу NanoSurface

Результати чисельних експериментів можуть бути представлені як у вигляді 2D/3D графіків, так і у вигляді таблиць. Представлення у вигляді таблиць є типовим для Qt і реалізується стандартним класом `QWidget`. В роботі було успадковано даний базовий клас класом `TableWidget` для забезпечення додаткового функціоналу по експорту даних у файл та зручної роботи в табличному вигляді з однотиповими даними для значень концентрацій. Графіки в 2D вигляді представляються у віджеті `GraphWidgetSimple`, що є обгорткою класу `QwtPlot`. Даний клас є складовою одноіменної бібліотеки, яка включає різноманітні графічні елементи (циферблати, компаси, термометри і т. д.) для програм, що потребують графічного представлення. Обгортка NanoSurface забезпечує додатковий функціонал, що полягає у виборі часового кроку, масштабуванні сітки, порівнянні багатьох графіків, виборі стилю відображення

тощо. Аналогічним чином реалізований віджет Graph3DWidgetSimple, що є обгорткою класу Q3DSurface. Даний клас входить до складу модуля Qt Data Visualization, основна мета якого полягає у візуалізації даних у тривимірному просторі, включає в себе побудову 2D перерізів 3D даних, інтерактивну взаємодію за допомогою вказівника миші (зміна масштабу, обертання, виділення потрібних даних), перспективну та ортогональну проекції, застосування OpenGL для рендеренгу, налаштування тем оформлення.

Головне меню програми містить пункти для завантаження та збереження граничних та початкових умов, вибору математичної моделі, перегляду допомоги по роботі з програмою та описом математичних моделей.

5.1.4. Інструментарій розробника програмного забезпечення для комп'ютерного моделювання

Одні з ідей технологічного підходу при автоматизації обрахунків математичного моделювання були запропоновані Сергієнком І.В., Скопечким В.В. та Дейнекою В.С. [42]. В загальному випадку їх можна зобразити у вигляді схеми, зображеної на рис. 5.4.

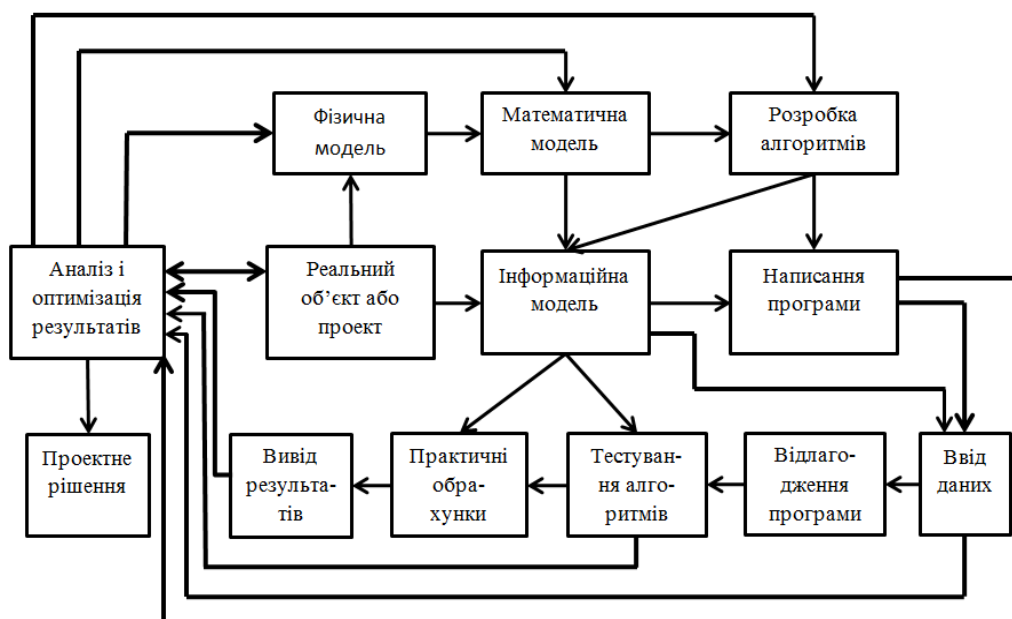


Рис. 5.4. Схема автоматизації процесу конструювання програмного забезпечення

Помітно, що згадані в п. 1.7 програмні комплекси динамічно змінювалися протягом тривалого часу розробки. Це означає, що класична водоспадна модель методології розробки не підходить для даних продуктів через дослідження нових фізичних явищ та постійне вдосконалення існуючих математичних моделей. Тому схему на рис. 5.4 потрібно розглядати в контексті однієї ітерації розвитку продукту. Для даного класу задач добре підходять такі сучасні гнучкі методології розробки, як Agile Scrum, TDD.

У випадку, коли в проєкті задіяна велика команда, виникає необхідність в чіткій структуризації змін, зроблених кожним її членом, контролю над виконанням поставлених завдань, усуненням недоліків. Для цього використовують спеціальні інструменти програмування. Знання і використання таких інструментів дозволяють збільшити продуктивність роботи більш ніж на 50%.

Основним інструментом в розробці програм є інтегроване середовище програмування (IDE). Воно зазвичай включає в себе редактор коду, компілятор та відлагоджувач. Вибір IDE залежить від мови програмування. Найпоширеніші мови програмування для наукових обчислень – це C/C++, Fortran, Python, Java, C#.

Наступним важливим інструментом для командної розробки є система контролю версій, яка надає змогу одночасно працювати над проєктом декільком розробникам і після виправлення помилки точно вказати, в якому саме місці коду вона була. В такому випадку програмісти не схильні до синдрому "працює - не чіпай", тому що можуть безболісно заглиблюватися в найскладніші експерименти зі своєю програмою і в будь-який момент повернутися до "коду, що працював" незалежно від кількості експериментів, що було проведено. Більше того, якщо користувач раптом захоче внести невелику зміну, коли програма знаходиться в багатообіцяючому, але зовсім неробочому стані, то все, що для цього буде потрібно – переключитися на стабільну гілку, внести там необхідні зміни і, задовольнивши запит користувача, перемкнутися назад на головний стовбур

розробки. Серед популярних систем контролю версій виділяють git, svn, mercurial. Дані системи є безкоштовними. Для роботи з ними необхідно мати репозиторій (місце, де буде зберігатися код). Такі послуги можна безкоштовно отримати на сервісах <https://github.com>, <https://bitbucket.org> та ін.

Для постановки завдань, контролю їх виконання та обговорення документації команди програмістів, математиків та тестувальників використовують системи керування проектами. Для невеликих проектів широкою популярністю користується безкоштовна система trello (<https://trello.com>).

5.1.5. Порівняльна характеристика вихідного коду програмних комплексів

Для оцінки якості відкритого коду вищезгаданих програмних продуктів скористаємося спеціалізованими утилитами SourceMonitor, FORCHECK та CppDepend. Зведені результати, що відображають кількість файлів, рядків коду, коментарів, визначень класів, методів, максимальну середню складність (згідно визначення Стіва Макконела [258]), відношення абстрактних класів до звичайних та інші параметри, наведено в таблиці 5.4.

Таблиця 5.4. Порівняльна оцінка якості коду програмних комплексів

	Hudrus	PFLOTRAN	PHREEQC	NanoSurface
Мова	Fortran	F90/C++	C++	C++
Files	10	86	106	121
Lines	1958	20829	110100	59887
Comments %	17	7,2	19,5	22,4
Branches %	15	23,1	26,4	19,0
Class defs	-	44	170	188
Methods/Class	-	18	38	15

Продовження таблиці 5.4

Max Cmplxty	47	200	406	54
Avg Cmplxty	4,21	7,46	8,25	3,11
Abstractness	-	0,08	0,17	0,34
Max Depth	-	8	9+	8
Avg Depth	-	2,59	2,38	1,50
Functions	67	3	162	73

Із аналізу даних таблиці 5.4 випливає, що середня складність програмного комплексу NanoSurface є найнижчою серед усіх розглянутих. Велика кількість оголошених класів в NanoSurface є результатом активного використання патернів проектування та застосування підходів, описаних вище. Разом з тим, кількість коментарів також є високою. Це хороші показники і відповідають вимогам щодо керування складністю [258].

5.2. Верифікація програмного коду

Аналітичні методи досліджень рівнянь масопереносу розвиваються давно, але незважаючи на це, існує обмежена кількість задач, що можуть бути розв'язані аналітично. Однак, велику кількість математичних моделей, що описуються нелінійними рівняннями, реалізувати в аналітичному вигляді не представляється можливим. Коло потенційних задач значно розширилося з розвитком обчислювальної техніки та чисельних методів, які дозволяють отримати розв'язок із заданою точністю. Аналітичний розв'язок зазвичай знаходять для спрощеного варіанту задачі, що дозволяє зрозуміти фізичну суть процесу, а також допомогти відтестувати чисельний алгоритм та провести верифікацію програмного коду.

Верифікація програмного коду включає в себе перевірку дотримання основних правил з конструювання програмних систем: вибору архітектури

системи, мови програмування, методології розробки, користування системами контролю версій, забезпечення якості коду [8, 259, 260]. Більша половина з цих вимог відносяться до стандартних проблем, пов'язаних з розробкою програмного забезпечення [258]. Інша частина правил верифікації пов'язана з науковими обчисленнями, де головною задачею є перевірка точності представлення у вигляді коду потрібної математичної моделі [261]. Математичні моделі представляють собою системи диференціальних рівнянь із відповідними крайовими умовами, чисельний розв'язок яких в даній роботі знаходиться методом прогонки, в якому виконані умови стійкості [2, 3]. Тобто, коректність обчислювального алгоритму забезпечується строгою постановкою крайової задачі та вибору методу обчислень. Однак, назважаючи на це, не можна бути впевненим, що отримані результати не містять недостовірних даних або програма не має логічних «багів».

5.2.1. Постановка тестової задачі

Розглянемо каталітичне пористе середовище, що займає область $\Omega = \{0 < x < l; 0 < r < R\}$ (рис. 5.5), в якому відбувається процес адсорбції забруднених речовин (радіонуклідів).

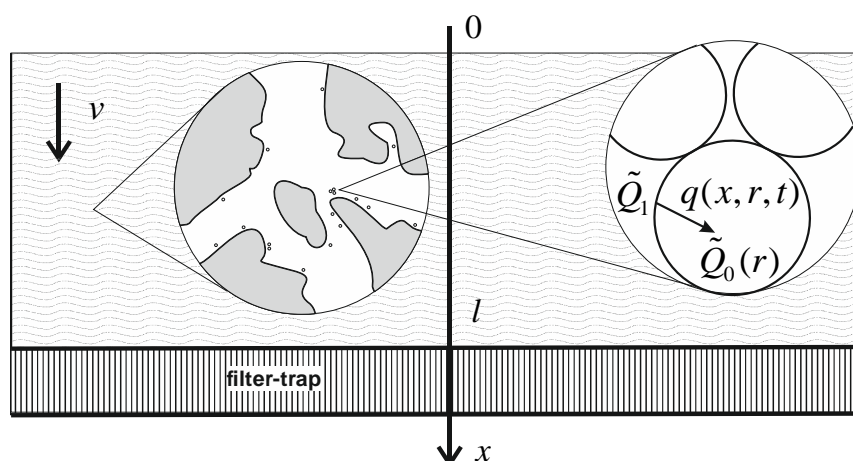


Рис. 5.5. Схема вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі

Необхідно розрахувати значення концентрації $q(x,r,t)$ по області Ω , що дасть можливість зробити прогноз щодо можливості використання спеціалізованих мікро- та нанопористих частинок для очищення ґрунтів з метою їх подальшого сільськогосподарського використання.

5.2.2. Математична модель процесу

Математичну модель процесу для поставленої задачі в одновимірному випадку можна описати наступною крайовою задачею [3, 161, 262]:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0, \quad (5.1)$$

$$q(x, r, 0) = \tilde{Q}_0(r), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad (5.2)$$

$$q(x, R, t) = 0, \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad t > 0. \quad (5.3)$$

Тут використані наступні позначення: $\mathbf{X} = \{x\}$ – точка області Ω , м; r – радіус частинки, м; t – час; $q(x,r,t)$ – концентрація радіонуклідів у частинках радіуса R ; D_0 – коефіцієнт дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R , що знаходяться у скелеті ґрунту.

Рівняння (5.1) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією $q(x,r,t)$; рівняння (5.2) задає значення концентрації q у початковий момент часу; рівняння (5.3) задає значення концентрації q на зовнішній межі частинки при $r = R$.

У випадку, коли $D_0(q) = D_0 = const$, рівняння (5.1) прийме вигляд

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0 \frac{\partial q}{\partial r} \right).$$

Таким чином, отримаємо

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial^2 q}{\partial r} \right), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0. \quad (5.4)$$

5.2.3. Аналітичний розв'язок

Аналітичний розв'язок (5.4) при відповідних крайових умовах (5.2) та (5.3) можна знайти аналітичним способом [263]. Відповідно отримаємо

$$q(x, r, t) = \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n e^{-\frac{n^2 \pi^2 D_0 t}{R^2}} \sin \frac{n \pi r}{R}, \quad (5.5)$$

$$\text{де } \beta_n = \frac{2}{R} \int_0^R r \tilde{Q}_0(r) \sin \frac{n \pi r}{R} dr.$$

Знайдемо аналітичний розв'язок рівняння (5.4) при початковій умові (5.2) для випадку, коли гранична умова (5.3) є неоднорідною, тобто маємо

$$q(x, R, t) = \tilde{Q}_1, \quad (5.6)$$

де $\tilde{Q}_1 = \text{const}$.

Щоб звести неоднорідну граничну умову до однорідної введемо заміну вигляду

$$q(x, r, t) = u(x, r, t) + \tilde{Q}_1, \quad (5.7)$$

де $u(x, r, t)$ – нова поки-що невідома функція.

Тоді маємо

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial t}, \quad \frac{\partial q}{\partial r} = \frac{\partial u}{\partial r}, \quad \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2},$$

$$q(x, R, t) = u(x, R, t) + \tilde{Q}_1 = \tilde{Q}_1,$$

$$q(x, r, 0) = u(x, r, 0) + \tilde{Q}_1 = \tilde{Q}_0(r).$$

Звідси отримаємо

$$u(x, R, t) = 0,$$

$$u(x, r, 0) = \tilde{Q}_0(r) - \tilde{Q}_1.$$

Отже, маємо наступну крайову задачу для функції $u(x, r, t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \right), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0, \quad (5.8)$$

$$u(x, r, 0) = \tilde{Q}_0(r) - \tilde{Q}_1, \mathbf{X} \in \Omega, r \in (0, R), \quad (5.9)$$

$$u(x, R, t) = 0, \mathbf{X} \in \Omega, t > 0. \quad (5.10)$$

Тоді розв'язок (5.8)-(5.10) наступний:

$$u(x, r, t) = \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n e^{-\frac{n^2 \pi^2 D_0 t}{R^2}} \sin \frac{n \pi r}{R}, \quad (5.11)$$

$$\text{де } \beta_n = \frac{2}{R} \int_0^R r (\tilde{Q}_0(r) - \tilde{Q}_1) \sin \frac{n \pi r}{R} dr.$$

Повертаючись до проведеної заміни (5.7), отримаємо аналітичний розв'язок (5.4) з відповідними крайовими умовами (5.2) та (5.6) у вигляді наступної функції:

$$q(x, r, t) = \tilde{Q}_1 + \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n e^{-\frac{n^2 \pi^2 D_0 t}{R^2}} \sin \frac{n \pi r}{R}, \quad (5.12)$$

$$\text{де } \beta_n = \frac{2}{R} \int_0^R r (\tilde{Q}_0(r) - \tilde{Q}_1) \sin \frac{n \pi r}{R} dr.$$

5.2.4. Чисельний розв'язок

Для чисельного розв'язання крайової задачі (5.1)-(5.3) застосуємо метод скінченних різниць з використанням монотонної різницевої схеми [231].

Покриємо область Ω рівномірною сіткою $\omega_{h_1 h_2 \tau}$ з кроками h_1 , h_2 і τ відповідно по осях Ox , Or та часу Ot для змінних x , r , t

$$\omega_{h_1 h_2 \tau} = \left\{ \begin{array}{l} x_{i_1} = \overline{i_1 h_1}, r_j = \overline{j h_2}, t_k = \overline{k \tau}, \\ i_1 = \overline{0, n_1}, j = \overline{0, n_2}, k = \overline{0, n_3}, \\ h_1 n_1 = l_1, h_2 n_2 = R, \tau n_3 = T, \end{array} \right\}$$

де n_1, n_2, n_3 – кількість кроків по просторових змінних та часу відповідно.

Скінченнорізницевий аналог диференціального рівняння (5.4) має наступний вигляд:

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau} = \tilde{\chi} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - 2q_j^{(k+1)} + q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2^2} + \frac{\tilde{r}_+}{D_0} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} + \frac{\tilde{r}_-}{D_0} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2}, \quad (5.13)$$

$$j = \overline{1, n_2 - 1}, k = \overline{0, n_3},$$

де

$$\tilde{\chi} = \frac{1}{1 + \frac{h_2 |\tilde{r}|}{2D_0}} = 1 - \frac{h_2 |\tilde{r}|}{2D_0} + O(h_2^2), \quad \tilde{r} = \frac{2}{r}, \quad \tau' = D_0 \tau,$$

$$\tilde{r}_+ = \frac{-\tilde{r} + |\tilde{r}|}{2} \geq 0, \quad \tilde{r}_- = \frac{-\tilde{r} - |\tilde{r}|}{2} \geq 0, \quad \tilde{r} = \tilde{r}_+ + \tilde{r}_-.$$

Для початкової умови (5.2) отримаємо такий скінченнорізницевий аналог:

$$q_j^{(0)} = \tilde{Q}_0(jh_2), \quad j = \overline{1, n_2 - 1}. \quad (5.14)$$

Для однорідної граничної умови першого роду (5.3) маємо

$$q_{n_2}^{(k)} = 0, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad (5.15)$$

а для неоднорідної граничної умови першого роду (5.6) –

$$q_{n_2}^{(k)} = \tilde{Q}_1, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad (5.16)$$

В зручному для проведення прогонки вигляді крайова задача (5.13), (5.2) і (5.3) запишеться

$$a_j^1 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^1 q_j^{(k+1)} + b_j^1 q_{j+1}^{(k+1)} = -q_j^{(k)},$$

де

$$a_j^1 = \tau' \left(\frac{\bar{\chi}}{h_2^2} - \frac{\tilde{r}_-}{h_2 D_0} \right), \quad b_j^1 = \tau' \left(\frac{\bar{\chi}}{h_2^2} + \frac{\tilde{r}_+}{h_2 D_0} \right), \quad \bar{c}_j^1 = 1 + \tau' \left(\frac{2\bar{\chi}}{h_2^2} + \frac{1}{h_2 D_0} (\tilde{r}_+ - \tilde{r}_-) \right).$$

Легко показати, що умова стійкості прогонки виконується оскільки має місце нерівність $|\bar{c}_j^1| > |a_j^1| + |b_j^1|$. Значення концентрації $q(x, r, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, зі співвідношення

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^1 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^1, \quad (5.17)$$

$$\text{де } \alpha_{j+1}^1 = \frac{b_j^1}{\bar{c}_j^1 - \alpha_j^1 a_j^1}, \quad \beta_{j+1}^1 = \frac{a_j^1 \beta_j^1 + q_j^{(k)}}{\bar{c}_j^1 - \alpha_j^1 a_j^1}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}.$$

Для дискретизації рівняння (5.1) використаємо неявну різницеву схему.

Отримаємо

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau} = \frac{1}{r^2 h_2} \left((d_0)_{j+1}^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} - (d_0)_j^{(k)} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2} \right) \quad (5.18)$$

де $(d_0)_j^{(k)} = \frac{r^2}{2} \left((D_0)_j^{(k)} + (D_0)_{j-1}^{(k)} \right)$, $j = \overline{1, n_2 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

Для знаходження концентрації $q(x, r, t)$ необхідно розв'язати скінченнорізницеве рівняння (5.18) з відповідними початковою та граничною умовами. Для цього зведемо дане рівняння до прогоночного вигляду

$$a_j^2 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^2 q_j^{(k+1)} + b_j^2 q_{j+1}^{(k+1)} = -q_j^{(k)},$$

де

$$a_j^2 = \frac{\tau}{r^2 h_2^2} (d_0)_j^{(k)}, \quad b_j^2 = \frac{\tau}{r^2 h_2^2} (d_0)_{j+1}^{(k)}, \quad \bar{c}_j^2 = 1 + \frac{\tau}{r^2 h_2^2} \left((d_0)_j^{(k)} + (d_0)_{j+1}^{(k)} \right).$$

Неважко показати, що умова стійкості прогонки $|\bar{c}_j^2| > |a_j^2| + |b_j^2|$ виконується.

Значення $q(x, r, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ послідовно обчислюємо, використовуючи співвідношення

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^2 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^2, \quad (5.19)$$

де $\alpha_{j+1}^2 = \frac{b_j^2}{\bar{c}_j^2 - \alpha_j^2 a_j^2}$, $\beta_{j+1}^2 = \frac{a_j^2 \beta_j^2 + q_j^{(k)}}{\bar{c}_j^2 - \alpha_j^2 a_j^2}$, $j = \overline{1, n_2 - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$.

Для дискретизації рівняння (5.1) монотонною різницевою схемою здійснимо наступні перетворення. З рівняння (5.1) слідує

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} r^2 D_0(q) \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0(q) \right) \frac{\partial q}{\partial r},$$

або

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0(q) \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \left(2r D_0(q) + r^2 \frac{\partial D_0(q)}{\partial r} \right) \frac{\partial q}{\partial r}.$$

Тоді

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0(q) \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \left(\frac{D_0(q)}{r} + \frac{\partial D_0(q)}{\partial r} \right) \frac{\partial q}{\partial r}.$$

Таким чином, маємо

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0(q) \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + p(q) \frac{\partial q}{\partial r}, \quad (5.20)$$

$$\text{де } p(q) = \frac{D_0(q)}{r} + \frac{\partial D_0(q)}{\partial r}.$$

Скінченнорізницевий аналог диференціального рівняння (5.20) має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau''} = & \hat{\chi}_j^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - 2q_j^{(k+1)} + q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2^2} + \\ & + (\hat{r}_+)_j^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} + (\hat{r}_-)_j^{(k)} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2}, \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{0, n_3},$$

$$\text{де } \hat{\chi}_j^{(k)} = \frac{1}{1 + 0,5h_1 |\hat{r}_j^{(k)}|}, \quad \hat{r}_j^{(k)} = \frac{p_j^{(k)}}{(D_0)_j^{(k)}}, \quad \tau'' = \tau(D_0)_j^{(k)}, \quad (\hat{r}_+)_j^{(k)} = \frac{-\hat{r}_j^{(k)} + |\hat{r}_j^{(k)}|}{2} \geq 0,$$

$$(\hat{r}_-)_j^{(k)} = \frac{-\hat{r}_j^{(k)} - |\hat{r}_j^{(k)}|}{2} \leq 0, \quad \hat{r}_j^{(k)} = (\hat{r}_+)_j^{(k)} + (\hat{r}_-)_j^{(k)}.$$

В прогончному вигляді рівняння (5.21) запишеться

$$a_j^3 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^3 q_j^{(k+1)} + b_j^3 q_{j+1}^{(k+1)} = -q_j^{(k)},$$

$$\text{де } a_j^3 = \frac{\hat{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} - \frac{(\hat{r}_-)_j^{(k)}}{h_2}, \quad b_j^3 = \frac{\hat{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} + \frac{(\hat{r}_+)_j^{(k)}}{h_2}, \quad \bar{c}_j^3 = \frac{2\hat{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} + \frac{(\hat{r}_+)_j^{(k)}}{h_2} - \frac{(\hat{r}_-)_j^{(k)}}{h_2}.$$

Неважко показати, що умова стійкості прогонки виконується, оскільки має місце $|\bar{c}_j^3| > |a_j^3| + |b_j^3|$. Значення $q(x, r, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ послідовно обчислюємо, використовуючи співвідношення

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^3 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^3 \quad (5.22)$$

$$\text{де } \alpha_{j+1}^3 = \frac{b_j^3}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}, \quad \beta_{j+1}^3 = \frac{a_j^3 \beta_j^3 + q_j^{(k)}}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}.$$

5.2.5. Порівняльні результати комп'ютерного моделювання з аналітичним розв'язком

Програмна реалізація вищенаведених аналітичних та чисельних розв'язків задачі адсорбційного масопереносу в каталітичному пористому середовищі представлена у вигляді нових математичних моделей продукту NanoSurface.

Результати комп'ютерного моделювання внутрішньо-частинкового масопереносу радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі отримані за допомогою як аналітичних розв'язків задачі (5.1)-(5.3), так і з використанням чисельного знаходження значень концентрації.

Чисельні експерименти проводилися з наступними значеннями геометричних та адсорбційних параметрів: $R = 5 \cdot 10^{-8} \text{ м}$, $D_0 = 1 \cdot 10^{-18} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}$.

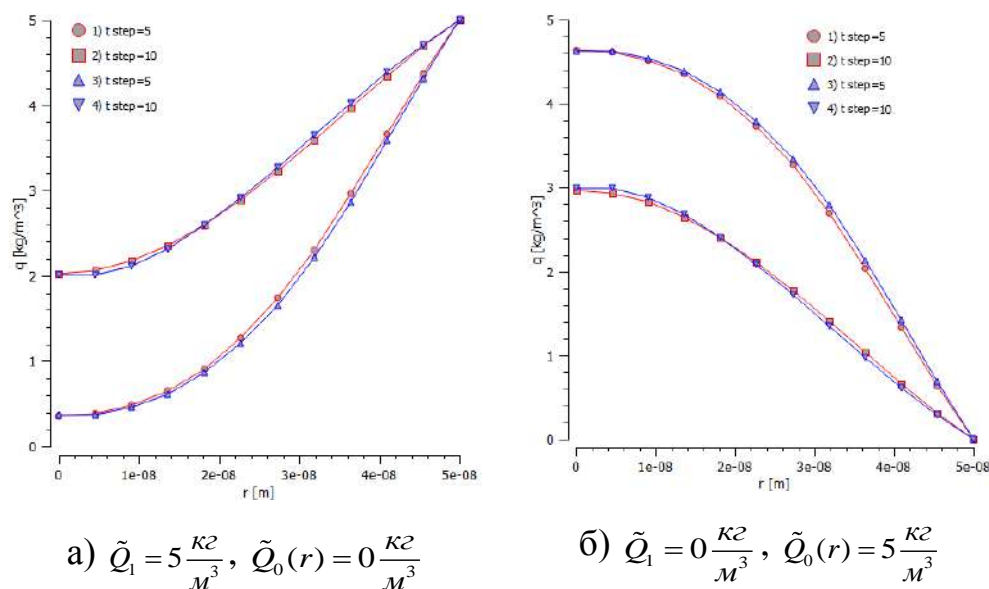


Рис. 5.6. Порівняльні розподіли концентрацій $q(r)$ в залежності від радіуса частинки r згідно аналітичного (графіки 1 та 2) та чисельного (графіки 3 та 4) розв'язків при різних часових кроках: 1) та 3) $t = 5 \text{ мкс}$., 2) та 4) $t = 10 \text{ мкс}$.

На рисунку 5.6 показано порівняльний аналіз результатів отриманих аналітичним та чисельним способом при різних початкових та граничних умовах. Як помітно з рисунку, розбіжність результатів не перевищує 0,5%. З цього можна зробити висновок про коректність постановки задачі та успішну верифікацію програмного рішення.

5.3. Застосування паралельних обчислень

5.3.1. Актуальність паралельних обчислень

Тривалий час спостерігається стрімкий розвиток комп'ютерної та обчислювальної техніки, що зазвичай підтверджується законом Мура [264]. У зв'язку з цим зростає необхідність оптимального використання всіх обчислювальних потужностей сучасної техніки для проведення чисельних експериментів. Протягом останніх років виробники процесорів віддають перевагу багатоядерній архітектурі замість збільшення тактової частоти та забезпечення паралелізму на рівні інструкцій. Тому для отримання максимального ефекту від збільшеної продуктивності програмний код повинен бути адаптований під багатоядерне використання. Це досягається завдяки використанню паралельних обчислень.

Зокрема, в роботах [265–271] розглядаються способи оптимізації обчислювальних процесів з використанням алгоритму паралельної реалізації методів розщеплення при розв'язуванні складних задач математичного моделювання (процес розрахунку фільтраційно-конвективної дифузії забруднень з вонодосних горизонтів, електрокінетичного очищення ґрунту, динаміки ґрунтового масиву, переносу забруднень в атмосфері, тощо).

Наприклад, програмний комплекс Nadra-3D, що призначений для комп'ютерного моделювання процесів фільтрації, дифузії і зміни напружено-деформованого стану в багатокомпонентних тривимірних об'єктах, які можуть містити тонкі включення, так само успішно використовує розподілені обчислення

при розв'язуванні системи алгебраїчних рівнянь методом скінченних елементів [216, 272, 273].

На відміну від розподілених обчислень, паралельні обчислення для систем із спільною пам'яттю не набули широкого розповсюдження. Тому даний підхід до обчислень тільки знаходить своє місце в роботах вчених, що займаються математичним моделюванням. Наприклад, в роботі [274] наведено порівняльний аналіз CPU та GPU алгоритмів чисельного моделювання дробово-диференційної динаміки процесу фільтційно-конвективної дифузії на базі кластеру СКІТ-4 Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова. В [275] також наведено GPU алгоритм для чисельного розв'язку задачі промивання засолених ґрунтових масивів. Однак ці дослідження підтверджують тезу про те, що кожний випадок застосування паралельних обчислень потребує індивідуального підходу та аналізу при розв'язуванні конкретних задач математичної фізики.

5.3.2. Постановка завдання

Розглянемо фізичний процес вертикальної міграції забруднених речовин, що описаний в п. 2.3. Завданням даного комп'ютерного моделювання є підвищення ефективності обчислень шляхом функціональної декомпозиції алгоритму розв'язування задачі математичного моделювання. Оцінку ефективності застосування паралельних обчислень доцільно провести з використанням критерію швидкодії програми або її продуктивності. Ряд факторів формують критерій продуктивності програми: архітектура обчислювальної системи, апаратна платформа (швидкість процесора, оперативної пам'яті тощо), операційна система (методи управління ресурсами, час створення потоків, загальна завантаженість), ефективність паралельного алгоритму та вибраної технології його реалізації, мова програмування та ефективність компілятора.

Практичним результатом роботи, згідно поставленого завдання, буде проектування та розробка нової версії кросплатформного програмного комплексу NanoSurface, що реалізує паралельні обчислення.

5.3.3. Ефективність паралельних обчислень

Програмна реалізація чисельного розв'язку математичної моделі, що описана в п.2.3, є нетривіальною задачею. Це впливає із взаємозв'язків між шуканими концентраціями $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $c_3(x,t)$, $q(x,r,t)$ та швидкістю фільтрації v . Тому кожна математична модель повинна розглядатися індивідуально і універсального рішення для використання паралельних обчислень не існує. Враховуючи це, обчислювальний алгоритм у нашому випадку можна відразу розпаралелити тільки для задання початкових та граничних умов першого роду (2.66)-(2.70), а далі послідовно знаходити швидкість фільтрації v , концентрації $q(x,r,t)$, $c_3(x,t)$, $c_2(x,t)$ та $c_1(x,t)$. Однак, незважаючи на послідовність деяких обчислень, їх можна розпаралелити на нижчому рівні – зокрема на етапі роботи методу прогонки.

В п. 2.3 виведені прогоночні коефіцієнти для методу прогонки, що зазвичай виконується в однопоточному режимі. Для роботи в двох потоках на системах із спільною пам'яттю використовують комбінацію правої та лівої прогонки, тобто так звану зустрічну прогонку.

Оцінимо складність алгоритму методу правої прогонки на прикладі розв'язку однієї крайової задачі конвективного масопереносу (2.59), (2.66), (2.70). Чисельний розв'язок цієї задачі, як і всієї постановки задачі наведено в п. 2.3. Наведемо лише співвідношення для знаходження значення концентрації $c_1(x,t)$ на часовому шарі $(k + 1)$ методом правої прогонки

$$c_{1,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^1, \quad (5.23)$$

$$\alpha_{i+1}^1 = \frac{b_i^1}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}, \beta_{i+1}^1 = \frac{a_i^1 \beta_i^1 + c_{1,i}^{(k)} + f_i^{1,(k+1)}}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}, \quad (5.24)$$

$$i = \overline{1, n_1 - 1}, k = \overline{1, n_3}, \alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0, \beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1,$$

або методом лівої прогонки, використовуючи наступну залежність

$$c_{1,i+1}^{(k+1)} = \xi_{i+1}^1 c_{1,i}^{(k+1)} + \eta_{i+1}^1, \quad (5.25)$$

$$\xi_i^1 = \frac{a_i^1}{\bar{c}_i^1 - \xi_{i+1}^1 b_i^1}, \eta_i^1 = \frac{\eta_{i+1}^1 \beta_i^1 + c_{1,i}^{(k)} + f_i^{1,(k+1)}}{\bar{c}_i^1 - \xi_{i+1}^1 b_i^1}, \quad (5.26)$$

$$i = \overline{n_1 - 1, 1}, k = \overline{1, n_3}, \eta_n^1 = \mu_3^1 \equiv 0, \eta_1^1 = \mu_4^1 \equiv \tilde{C}_1^2.$$

Можна показати, що умови стійкості прогонки виконуються, оскільки $|\bar{c}_i^1| > |a_i^1| + |b_i^1|$.

При виконанні прямого ходу прогонки за формулами (5.24) потрібно $8(N-2)+2$ операцій. Для виконання зворотнього ходу за формулою (5.23) потрібно $2(N-1)+5$ операцій. Таким чином, загальне число операцій можна оцінити величиною

$$T_1 = 10n + O(1), \quad (5.27)$$

а час розв'язку системи методом прогонки при великих N буде визначатися як $T = 10n\tau$, де τ – час виконання однієї операції. Неважко помітити, що алгоритмічна складність лівої прогонки (5.25), (5.26) також становить $10n + O(1)$.

Комбінація методів лівої і правої прогонки дає метод зустрічної прогонки, який допускає розпаралелення процесу обчислень на два потоки. Розділимо систему між двома потоками - перший буде оперувати рівняннями з номерами $1 \leq i \leq p$, другий – рівняннями $p \leq i \leq n$, де $p = \lfloor n/2 \rfloor$.

При реалізації паралельного розв'язку в першому потоці за формулами (5.24) обчислюються прогоночні коефіцієнти α_i і β_i при $1 \leq i \leq p$, а в другому потоці за формулами (5.26) знаходяться ξ_i і η_i при $p \leq i \leq n$. При $i = p$ проводиться спряження рішень у формі (5.23) і (5.25), тобто знаходимо значення x_p з системи рівнянь:

$$\begin{cases} x_p = \alpha_{p+1}x_{p+1} + \beta_{p+1} \\ x_{p+1} = \xi_{p+1}x_p + \eta_{p+1} \end{cases} \quad (5.28)$$

Знайшовши вказане значення, в першому потоці за формулою (5.23) можна знайти всі x_i при $1 \leq i \leq p$, а в другому, за формулою (5.25) – всі x_i при $p \leq i \leq n$.

Час виконання методу зустрічної прогонки можна оцінити як $T_2 = 5nt + \delta$, де δ – час, необхідний на організацію та закриття паралельної секції. Варто зазначити, що розрахунки і при прямому, і при зворотному ходах здійснюються незалежно, тому теоретичне прискорення дорівнює двом.

У системах, де можна задіяти більше двох ядер процесорів для обчислень, використовують блочну прогонку [276].

Оцінимо складність алгоритму паралельного варіанту методу прогонки [276]. Відповідно до введених раніше позначень n є порядок системи лінійних рівнянь (кількість кроків по змінній x), а p , $p < n$, визначає число потоків. Таким чином, матриця коефіцієнтів a_i^1 , b_i^1 , \bar{c}_i^1 , $f_i^{1,(k)}$ має розмір $n \times n$ і, відповідно, $m = n / p$ є розмір смуги матриці на кожному процесорі.

При виконанні прямого ходу алгоритму на кожній ітерації кожен процесор повинен здійснити виключення у межах своєї смуги піддіагональних елементів (що вимагає $8(m-1)$ операцій) і наддіагональних елементів (що вимагає $7m$ операцій).

Потім варто провести збірку допоміжної тридіагональної системи рівнянь в одному потоці і здійснити її розв'язок методом прогонки. Відповідно до оцінки (5.27) витрати на виконання цього послідовного етапу обчислень складуть близько $10p$ операцій.

На наступному етапі алгоритму кожен процесор виконує зворотний хід алгоритму, який вимагатиме $5(m-1)$ операцій. Таким чином, загальну складність паралельного методу прогонки можна оцінити як:

$$T_p = 20m + 10p. \quad (5.29)$$

За результатами виконаного аналізу можемо знайти показники прискорення та ефективності паралельного варіанту методу прогонки [277]. Прискорення (speedup) являє собою відношення послідовного часу виконання задачі до паралельного алгоритму:

$$S_p = \frac{T_1}{T_p} = \frac{10n}{20\frac{n}{p} + 10p} = p \frac{10n}{20n + p^2}. \quad (5.30)$$

Ефективність (efficiency) використання паралельним алгоритмом процесорів (потоків) при розв'язку блочної прогонки, визначається наступним співвідношенням:

$$E_p = \frac{S_p}{p} = \frac{10n}{20n + p^2}. \quad (5.31)$$

Оптимальний випадок досягається при $S_p = p$ та $E_p = 1$, тобто кожний новий процесор збільшує швидкість виконання задачі при 100% їх використанні. Однак, спроби підвищення одного показника (прискорення чи ефективності) можуть привести до погіршення ситуації по іншому показнику. З наведених вище співвідношень видно, що у нашому випадку компроміс між даними показниками досягається при розв'язанні системи рівнянь з великою кількістю невідомих, при якому $p \ll n$ і показники прискорення та ефективності визначаються як:

$$S_p \approx \frac{p}{2}, \quad E_p \approx \frac{1}{2}. \quad (5.32)$$

5.3.4. Особливості реалізації паралельних обчислень та їх аналіз

Реалізація паралельних обчислень здійснена за допомогою технології OpenMP [278]. Стандарт, що описує дану технологію, надає опис директив компілятора, бібліотечних процедур і змінних оточення, які призначені для

програмування багатопотокових додатків на багатопроцесорних системах із спільною пам'яттю [279].

Методи зустрічної та блочної прогонки реалізовано із різними ступенями розпаралелення. В основному використовувались синтаксичні директиви *for* для циклів і початкової ініціалізації; *sections* в зустрічній прогонці; *if (умова)* як певна умова використання розпаралелення.

Дослідження ефективності паралельних обчислень проводились на комп'ютері з наступними характеристиками:

- Процесор: Intel(R) Core(TM) i7-3630QM CPU @ 2.40GHz (8 CPUs)
- Оперативна пам'ять: 8192MB RAM
- Відеокарта: NVIDIA GeForce GT 650M x2
- Операційна система: Windows 10 Pro 64-bit
- Компілятор: MinGW 32/64bits (gcc 5.3.0)

Результати чисельних експериментів для блочної прогонки були отримані шляхом вимірювання часу виконання в секундах по 3 рази для різної кількості кроків по змінній x та отримано середнє арифметичне значення. Підсумкова таблиця 5.5 для різних потоків представлена нижче.

Таблиця 5.5. Результати чисельних експериментів із застосуванням паралельних обчислень

Розмір матриці (x_steps)	Одно-поточний алгоритм	Паралельні обчислення					
		2 потоки		4 потоки		8 потоків	
		Час	Speedup	Час	Speedup	Час	Speedup
100	0.0057	0.0170	0.3340	0.0303	0.1868	0.0400	0.1417
1000	0.0453	0.0293	1.5456	0.0420	1.0793	0.0497	0.9127
10000	0.4613	0.2327	1.9828	0.1813	2.5441	0.1597	2.8894
30000	1.5420	0.7577	2.0352	0.4967	3.1047	0.4507	3.4216
40000	2.1043	1.0383	2.0266	0.6910	3.0453	0.6043	3.4821
60000	3.1770	1.5463	2.0545	1.0220	3.1086	0.9260	3.4309
80000	4.2757	2.0313	2.1049	1.5157	2.8210	1.2060	3.5453
12000	6.4180	3.0597	2.0976	2.0283	3.1642	1.8173	3.5315

Відповідно до чисельних експериментів, було виявлено, що алгоритм зустрічної прогонки для нашої математичної моделі стає ефективним для дискретизації по осі oX при більш ніж 30000 кроків (рис 5.7).

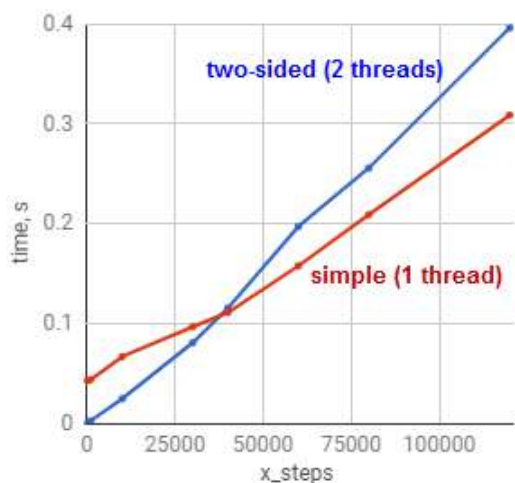


Рис. 5.7. Час виконання обчислень при використанні звичайної та зустрічної прогонки для різних кроків по x

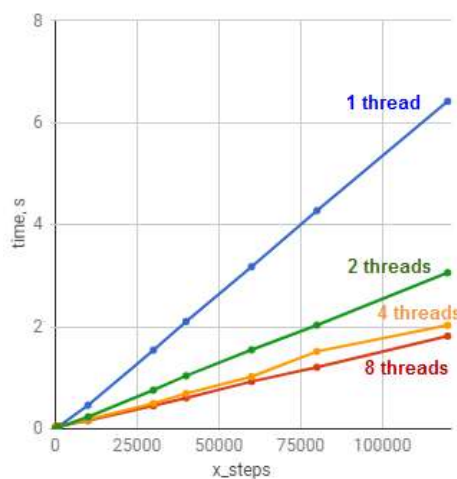


Рис. 5.8. Час виконання обчислень при використанні блочної прогонки для різних кроків по x

Помітно, що використання 2 або 4 потоків є також ефективнішим ніж використання 8 потоків (рис 5.8) у 2.5-3 рази.

Подальший аналіз полягав у дослідженні ефективності розпаралелювання різних частин обчислювального алгоритму при застосуванні 8 потоків.

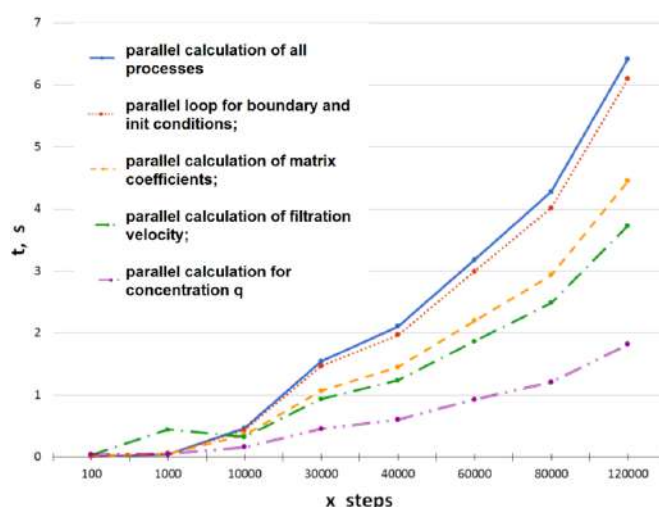


Рис. 5.9. Час роботи обчислювального алгоритму при розпаралеленні різних частин коду для 8 потоків

На рис. 5.9 зображено порівняння графіків часу обчислення для алгоритму без використання паралельних обчислень, з додаванням розпаралелення початкової ініціалізації всіх змінних, з додаванням розпаралелення ініціалізації прогоночних коефіцієнтів a_i , b_i , \bar{c}_i , f_i з додаванням розпаралелення швидкості фільтрації і з додаванням розпаралелення обрахунку концентрації $q(x,r,t)$. З даних графіків видно, що найбільший ефект розпаралелення дає механізм ініціалізації прогоночних коефіцієнтів і обчислення концентрації $q(x,r,t)$.

Продовжуючи аналіз результатів представлених на рис. 5.9, можна побачити, що для 120000 кроків дискретизації по осі oX , час обчислення звичайного коду від паралельного відрізняється в 3.5 разів (при 8 потоках). Це свідчить про достатню оптимізацію коду для систем зі спільною пам'яттю.

Під час написання коду була виявлена певна особливість компілятора: при заданні змінної типу `double` з використанням оператора `new` (наприклад, `double * value = new double*[r_steps + 1]`) при паралельному обчисленні концентрації $q(x,r,t)$, різниці в часі виконання майже немає, а коли використовуємо форму задання змінної типу `double` без використання оператора `new` (наприклад, `double value[r_steps + 1]`), то час виконання при 80000 кроках стає в 6 разів менший (рис. 5.10). Тобто, оголошення масиву змінної довжини (Variable length arrays), що стало можливим згідно стандарту C99 [280], дає суттєвий приріст швидкодії.

Подібні ситуації можуть виникнути під час оголошення та роботи з динамічними двовимірними масивами (коли розмір масиву визначається в процесі виконання програми). Оголошення `double a[n][n]` та `std::array<std::array<double, n>, n>` не працюють, оскільки `new` може приймати тільки перше динамічне значення n під час виконання виразу. Для вирішення даної проблеми можна написати наступний код (таблиця 5.6):

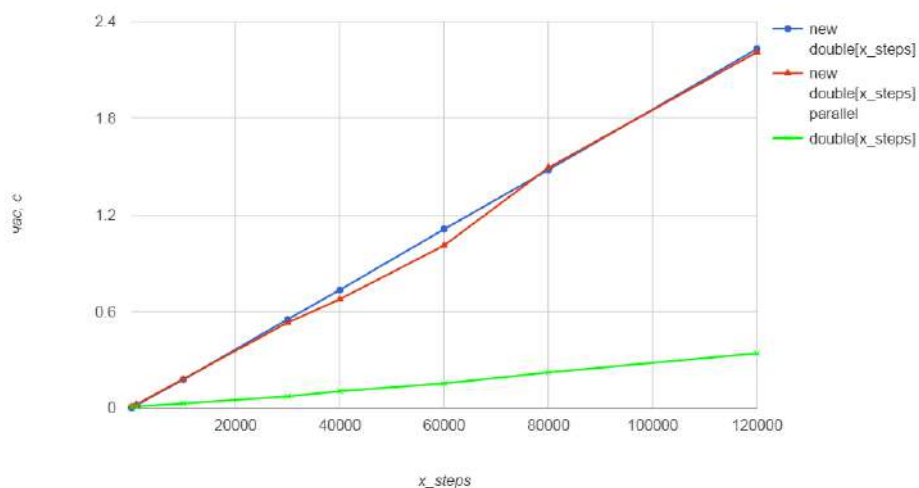


Рис. 5.10. Порівняння швидкості обчислення при різних способах оголошення масивів

Таблиця 5.6. Оголошення динамічних масивів

```
// Array of size n of pointers to double
double **a = new double *[n];
for (int i = 0; i != n; ++i)
{
    a[i] = new double[n];
}
```

У цьому випадку ми можемо просто отримати доступ до необхідного елемента масиву за допомогою $a[i][j]$. Але цей масив a є одновимірним масивом вказівників, а не одним безперервним блоком даних із швидким доступом, що виділяються в пам'яті. Тому доступ до i -го j -го елемента буде повільнішим, ніж це було б, якщо дані були поміщені в один двовимірний масив.

5.4. Висновки до розділу 5

Протягом останніх двох десятиліть спостерігається стрімкий розвиток програмних засобів для математичного моделювання підземних процесів. Це зумовило появу різноманітних програмних комплексів для чисельного розв'язання задач моделювання фізичних, гідрологічних, біологічних і

геохімічних процесів у водонасичених пористих середовищах.

Тому з метою з уніфікацією процесу розробки подібних комплексів, узгодження їх один з одним в п. 5.1 описані основні етапи проектування та конструювання програмного продукту. А саме - вибір інструментальних засобів, побудову архітектури, використання сучасних паттернів конструювання програмного забезпечення та використання актуальних бібліотек.

Складні взаємозв'язки між рівняннями математичної моделі в NanoSurface реалізовано завдяки механізму віртуальних функцій та паттерну *фабричний метод*. Користувацький інтерфейс абстрагується від конкретної реалізації вибраної користувачем математичної моделі через вказівник на абстрактний клас моделі. Це дозволило уніфікувати відображення та аналіз даних незалежно від вибраної математичної моделі.

Порівняльна характеристика якості коду, що була проведена за допомогою спеціалізованих утиліт, свідчить про успішне виконання поставленої задачі.

В п. 5.2 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. Згідно рисунку 5.14 помітно, 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.

В п. 5.3 проаналізовано алгоритмічну складність алгоритмів правої, лівої, зустрічної та блочної прогонок. 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 дає суттєвий

приріст ефективності. Зокрема, як показано на рис. 5.16, для 120000 кроків дискретизації по осі oX , час виконання звичайного коду від паралельного алгоритму обчислення відрізняється в 3,5 рази (при 8 потоках). Рис. 5.17 наочно демонструє зменшення швидкості обчислень у 6 разів для 80000 ітерацій при використанні *variable length arrays* замість динамічного задання масиву за допомогою оператора *new*. Однак, дана можливість доступна лише із застосуванням компіляторів з підтримкою стандарту C99 або вище. Тому це ще раз підкреслює важливість вибору правильного інструментарію розробника при розв'язуванні подібних задач.

Результати даного розділу опубліковано в роботах [5–8, 145, 256, 281, 282].

ЗАГАЛЬНІ 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 вагомні результати та висновки:

1. Сформульовано постановки нових актуальних задач вертикальної міграції забруднених речовин в ґрунтових середовищах при фільтрації підземних вод за наявності каталітичних та дисперсних мікро- та наночастинок у ізотермічному та неізотермічному випадках на основі критичного 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. Також розроблено нову двовимірну математичну модель міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до системи горизонтальних фільтрів-вловлювачів в 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

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 в ґрунтах при фільтрації підземних вод. Зокрема, вплив процесу адсорбції забруднюючих речовин наночастинками на загальний перебіг процесу місцями сягав до 27% в сторону швидшого очищення ґрунтового масиву. 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 у 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 та 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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

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). doi: 10.1007/s10891-017-1697-4
2. 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* **12**, 161–172 (2015)
3. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі. *Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук.* **1**, 89–95 (2015)
4. Vlasyuk, A.P., Zhukovskyy, V.V.: A Two-dimensional Mathematical Model for Linear Vertical Migration of Pollutant in the Catalytic Porous Media. In: Rysiński, J. (ed.) *Inżynier XXI wieku. [VI Międzynarodowa Konferencja Studentów oraz Doktorantów]*, pp. 897–904. Wydawnictwo Naukowe Akademii Techniczno-Humanistycznej, Bielsko-Biała (2016)
5. 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.* **2**, 40–46 (2017)
6. 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* **2(39)**, 60–69 (2017)
7. 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* **4**(2), 117–125 (2017)
8. 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). doi: 10.15863/TAS.2016.12.44.14
 9. 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*, 177–190 (2016)
 10. Жуковський, В.В.: Про деякі підходи до створення програмних комплексів комп'ютерного моделювання підземних процесів. *Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського* **2**(103), 64–73 (2017)
 11. Андрієвський, І.Д., Качинський, А.Б., Коржнев, М.М., Яковлев, Є.О.: Стратегічні напрямки розвитку системи державного управління в сфері вивчення і використання надр. *Стратегічна панорама*(2), 189–197 (2003)
 12. Биченок, М.М., Рогожин, О.Г., Яковлев, Є.О.: Про оцінювання ризиків життєдіяльності і господарювання у природно-техногенній сфері. *Екологія і ресурси*(10), 28–38 (2004)
 13. Долін, В.В., Яковлев, Є.О., Щербак, О.В., Куцка, Я.О. (eds.): Еволюція контурів радіогідрогеохімічної аномалії тритієвого забруднення в зоні впливу приповерхневого сховища радіоактивних відходів (2015)
 14. Лялько, В.І., Азімов, О.Т., Яковлев, Є.О.: Прогнозне оцінювання потенційного забруднення підземної гідросфери у зв'язку з видобутком нетрадиційних вуглеводнів (з використанням дистанційних даних). *Український журнал дистанційного зондування Землі*(14), 12–16 (2017)

15. Рудько, Г.І., Яковлев, Є.О., Рогозін, О.Я.: Моніторинг процесонебезпечних територій та розрахунок ризику техноприродних аварій і катастроф. Рудько ГІ, Яковлев ЄО, Рагозін ОЛ–К.: Знання (1997)
16. Яковлев, Є.О., Скалецький, Ю.М.: Оцінка регіональних еколого-ресурсних та еколого-техногенних загроз національній безпеці України: аналіт. огляд/кер. авт. кол. ЄО Яковлев.–К.: НІСД, 2010.–32 с. Стратегічні пріоритети, 163 (2010)
17. Яковлев, Є.О.: Сучасні фактори національної безпеки України при формуванні мінерально-сировинної бази. Екологія довкілля та безпека життєдіяльності(5), 84–91 (2005)
18. EPA, U.S., OSWER, OSRTI: Superfund: National Priorities List (NPL) | US EPA. <https://www.epa.gov/superfund/superfund-national-priorities-list-npl>. Accessed 8 February 2018
19. Auffan, M., Shipley, H.J., Yean, S., Kan, A.T., Tomson, M., Rose, J., Bottero, J.-Y.: Nanomaterials as adsorbents. Environmental Nanotechnology: Applications and Impacts of Nanomaterials, McGraw-Hill, New York, 371–392 (2007)
20. Клименко, О.М., Клименко, Л.В., Кирильчук, Н.В.: Екологічні проблеми виробництва сільськогосподарської продукції на забруднених радіонуклідами землях. Вісник Національного університету водного господарства та природокористування **Випуск 3 (47)**, 38–46 (2009)
21. Dong, B., Belkhair, S., Zaarour, M., Fisher, L., Verran, J., Tosheva, L., Retoux, R., Gilson, J.-P., Mintova, S.: Silver confined within zeolite EMT nanoparticles: preparation and antibacterial properties. Nanoscale (2014). doi: 10.1039/c4nr03169e
22. Fernandez, M., Kärger, J., Freude, D., Pampel, A., van Baten, J.M., Krishna, R.: Mixture diffusion in zeolites studied by MAS PFG NMR and molecular

- simulation. *Microporous and Mesoporous Materials* (2007). doi: 10.1016/j.micromeso.2007.05.042
23. Valtchev, V., Tosheva, L.: Porous Nanosized Particles: Preparation, Properties, and Applications. *Chem. Rev.* (2013). doi: 10.1021/cr300439k
24. Liu, Y., Majetich, S.A., Tilton, R.D., Sholl, D.S., Lowry, G.V.: TCE Dechlorination Rates, Pathways, and Efficiency of Nanoscale Iron Particles with Different Properties. *Environ. Sci. Technol.* (2005). doi: 10.1021/es049195r
25. Wang, D., Bradford, S.A., Harvey, R.W., Hao, X., Zhou, D.: Transport of ARS-labeled hydroxyapatite nanoparticles in saturated granular media is influenced by surface charge variability even in the presence of humic acid. *Journal of Hazardous Materials* (2012). doi: 10.1016/j.jhazmat.2012.05.089
26. Matei, E., Predescu, A.M., Coman, G., Bălănescu, M., Sohaciu, M., Predescu, C., Favier, L., Niculescu, M.: Magnetic nanoparticles used in environmental engineering for Pb and Zn removal. *Environmental Engineering & Management Journal (EEMJ)* **15**(5) (2016)
27. Садовник Алла: З бурштином покінчать — перейдуть на мідь? Актуально - Рівне Вечірнє. <https://rivnepost.rv.ua/news/z-burshtinom-pokinchat-pereydu-na-mid>. Accessed 10 February 2018
28. Bish, D.L.: Natural Zeolites and Nuclear-Waste Management: The Case of Yucca Mountain, Nevada, USA. In: *Natural Microporous Materials in Environmental Technology*, pp. 177–191. Springer (1999)
29. Ракитская, Т.Л., Длубовский, Р.М., Киосе, Т.А., Труба, А.С., Олексенко, Л.П., Волкова, В.Я.: Адсорбция паров воды природным и химически модифицированным базальтовым туфом. *Хімія, фізика та технологія поверхні* (2011)
30. Токаревський, В.В., Лобач, Г.О., Кріп, І.М., Шимчук, Т.В., Токарчук, М.В.: Фероціанідні сорбенти на глинистій матриці у процесах сорбції радіонуклідів (2008)

31. Кріп, І.М., Шимчук, Т.В., Токарчук, М.В.: Сорбційні матеріали для сорбції радіонуклідів у процесах переробки паливовмісних матеріалів об'єкта "Укриття". Проблеми Чорнобиля.-2002.-Вип **11**, 51–72
32. Ракитская, Т.Л., Киосе, Т.А., Резник, Л.И.: Природные и химически модифицированные базальтовые туфы. Фазовый состав и каталитическая активность поверхностных Cu (II)-Pd (II)- комплексов в реакции окисления монооксида углерода кислородом. Хімія, фізика та технологія поверхні **3(2)**, 215–222 (2012)
33. Ракитська, Т.Л., Труба, А.С., Кіосе, Т.О., Березіна, Л.В., Давтян, А.С., Ракитская, Т.Л., Киосе, Т.А., Березина, Л.В.: Протолітичні властивості природних та модифікованих сорбентів (2012)
34. Rakitskaya, T.L., Truba, A.S., Kiose, T.A., La Raskola: Механізми формування на пористих носіях комплексів d металів та їх каталітична активність в редокс-реакціях. Вісник Одеського національного університету. Хімія **20(2 (54))**, 27–48 (2015)
35. Ткачук, М. М., Кириша, Р. О, Дацишина, І. Б.: Дренажно-модульні системи з вертикальними фільтрами, гідравлічно зв'язаними з дренами. Вісник Національного університету водного господарства та природокористування **Випуск 3 (71)**, 287–292 (2015)
36. Клименко, О.: Машина для внесення меліорантів в рідкому стані. Вісник Рівненського державного технічного університету. Збірник наукових праць. Випуск 1 (3), 161–166 (2000)
37. Клименко, О.М., Клименко, Л.В., Кирильчук, Н.В.: Екологічні проблеми виробництва сільськогосподарської продукції на забруднених радіонуклідами землях. Вісник Національного університету водного господарства та природокористування **Випуск 3 (47)**, 38–46 (2009)
38. Ivanov, Y.A., Lewyckuj, N., Levchuk, S.E., Prister, B.S., Firsakova, S.K., Arkhipov, N.P., Arkhipov, A.N., Kruglov, S.V., Alexakhin, R.M., Sandalls, J.,

- Askbrant, S.: Migration of ^{137}Cs and ^{90}Sr from chernobyl fallout in Ukrainian, Belarussian and Russian soils. *Journal of Environmental Radioactivity* (1997). doi: 10.1016/S0265-931X(96)00036-7
39. Сергеев Е.М. (ed.): 19. Грунтоведение. Изд-во МГУ, Москва (1983)
 40. Ентов, В., Нумеров, С., Полубаринова-Кочина, П., Чарный, И. (eds.): Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917-1967). Наука, Москва (1969)
 41. Веригин, Н.Н., Шержуков, Б.С.: Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах. Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917-1967), 237–313 (1969)
 42. Сергиенко, И.В., Скопецкий, В.В., Дейнека, В.С.: Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах. Наукова думка, Київ (1991)
 43. Сергиенко, И.В., Дейнека, В.С., Вещунов, В.В., Белоус, М.В.: Информационная технология исследования трехмерного влагопереноса-фильтрации жидкостей в многокомпонентных средах на pentium-СКИТ (2006)
 44. Скопецкий, В.В., Стоян, В.А., Зваридчук, В.Б.: Математичне моделювання динаміки розподілених просторово-часових процесів. Київ: Сталь (2008)
 45. Гладкий, А.В., Скопецкий, В.В.: Методи чисельного моделювання екологічних процесів: Навч. посіб (2005)
 46. Дейнека, В.С., Петрик, М.Р., Михалик, Д.М.: Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталитических средах. Проблемы управления и информатики(2), 12–25 (2011)

47. Сергієнко, І.В., Дейнека, В.С.: Інформаційна технологія дослідження процесів в багатокомпонентних ґрунтових середовищах та оптимальне керування їх станами (2005)
48. Ляшко, И.И., Демченко, Л.И., Мистецкий, Г.Е.: Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах. Наук. Думка, Киев (1991)
49. Ляшко, С.И.: Оптимизация и математическое моделирование массопереноса подземных вод. Наук. Думка, Киев (1998)
50. Лаврик, В.І.: Теоретичні дослідження процесів забруднення і засолення підземних вод. Вісник АН УРСР.-К.: Наукова думка.–1979.–Вип(2), 63 (1979)
51. Лаврик, В.И., Бомба, А.Я., Власюк, А.П.: Об асимптотическом приближении решений некоторых задач массопереноса при фильтрации в неоднородной среде. К.: Ин-т математики АН УССР (1985)
52. Нумеров, С.Н., Патрашев, А.Н.: Диффузия растворимых веществ в основаниях гидротехнических сооружений. Тр. Ленинград. политехн. ин-та(4), 165–169 (1947)
53. Николаевский, В.Н.: Механика насыщенных пористых сред. Рипол Классик (2013)
54. Николаевский, В.Н.: Геомеханика и флюидодинамика. Недра М (1996)
55. Николаевский, В.Н.: Механика пористых и трещиноватых сред. Недра **232** (1984)
56. Николаевский, В.Н., Бондарев, Э.А., Миркин, М.И., Степанова, Г.С., Терзи, В.П.: Движение углеводородных смесей в пористой среде. М.: Недра (1968)
57. Бочевер, Ф.М.: Расчеты эксплуатационных запасов подземных вод. М.: Недра (1968)
58. Бочевер, Ф.М.: Теория и практические методы гидрогеологических расчетов эксплуатационных запасов подземных вод. Недра (1968)

59. Бочевер, Ф.М., Гармонов, И.В., Лебедев, А.В., Шестаков, В.М.: Основы гидрогеологических расчетов. Directmedia (2016)
60. Бочевер, Ф.М., Лапшин, Н.Н., Орадовская, А.Е.: Защита подземных вод от загрязнения. Недра (1979)
61. Бочевер, Ф.М., Орадовская, А.Е.: Гидрогеологическое обоснование защиты подземных вод и водозаборов от загрязнений (1972)
62. Булавацький, В.М., Кривонос, Ю.Г., Скопецький, В.В.: Некласичні математичні моделі процесів тепло-та масопереносу. К.: Наук. думка (2005)
63. Скопецький, В.В., Стоян, В.А., Кривонос, Ю.Г.: Математичне моделювання прямих та обернених задач динаміки систем з розподіленими параметрами. К.: Наук. думка (2002)
64. Венгерський, П.С., Трофимчук, О.М.: Аналіз різних підходів для опису математичних моделей фільтрації рідини в насиченій зоні ґрунту. Математичне моделювання в економіці(2), 36–51 (2016)
65. Стефанишина-Гаврилук, Ю.Д., Стефанишин, Д.В., Трофимчук, О.М.: Індуктивне моделювання ризиків збитків від руйнівних повеней в басейні р. Тиса за емпіричними даними з використанням моделей регресійного типу. Математичне моделювання в економіці (2014)
66. Трофимчук, О.М.: Чисельне моделювання руху поверхневих і ґрунтових потоків та їх взаємодія на території водозбору
67. Бідюк, П.І., Савенков, О.І., Трофимчук, О.М.: Моделювання забруднення атмосфери та поверхневих вод в Україні. Екологічна безпека та природокористування (2011)
68. Trofymchuk, O., Kalyukh, Y., Hlebchuk, H.: Mathematical and GIS-Modeling of Landslides in Kharkiv Region of Ukraine. In: Margottini, C. (ed.) Landslide science and practice, pp. 347–352. Springer, Heidelberg, New York (2013)

69. Власюк, А.П., Остапчук, О.П.: Математичне моделювання переносу сольових розчинів при фільтрації підземних вод у ґрунтових масивах. Національний університет водного господарства та природокористування, Рівне (2015)
70. Vlasyuk, A.P., Martynyuk, P.M., Fursovych, O.R.: Numerical solution of a one-dimensional problem of filtration consolidation of saline soils in a nonisothermal regime. *J Math Sci* (2009). doi: 10.1007/s10958-009-9518-8
71. Vlasyuk, A., Tsvetkova, T., Falat, P., Klos-Witkowska, A., Warwas, K.: Mathematical modelling of infiltration effect on process of salts transfer in layered saturated-non-saturated soils. In: IDAACS'2017, pp. 333–338
72. Vlasyuk, A.P., Martynyuk, P.M.: Numerical solution of three-dimensional problems of filtration consolidation with regard for the influence of technogenic factors by the method of radial basis functions. *J Math Sci* (2010). doi: 10.1007/s10958-010-0163-z
73. Власюк, А.П., Остапчук, О.П., Степанченко, О.М.: Монотонна різницева схема для нелінійного одновимірного рівняння параболічного типу, що містить першу похідну. Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. наук. **Вип. 2.**, 217–226 (2005.)
74. Vlasyuk, A.P., Tsvetkova, T.P.: Mathematical Simulation of the Transport of Salt in the Case of Filtration and Moisture Transfer in Saturated–Unsaturated Soils in a Moistening Regime. *J Eng Phys Thermophy* (2015). doi: 10.1007/s10891-015-1285-4
75. Богаєнко, В.А., Булавацький, В.М., Скопецкий, В.В.: Математическое моделирование динамики геохимических процессов загрязнения водных горизонтов. *Управляющие системы и машины* (2009)
76. Мокін, В.Б.: Комп'ютеризовані регіональні системи державного моніторингу поверхневих вод: моделі, алгоритми, програми. Монографія/ВБ Мокін, МП Боцула, ГВ Горячев, ОВ Давиденко, АІ

- Катасонов, АР Яцолт/Під ред. ВБ Мокіна. УНІВЕРСУМ-Вінниця, Вінниця (2005)
77. Мокін, В.Б., Богомолів, Ю.С.: Нові підходи до автоматизованого створення геоінформаційної бази екологічної інформації (2012)
78. Мокін, В.Б., Боцула, М.П., Крижановський, Є.М.: Інформаційна технологія інтегрування математичних моделей у геоінформаційні системи моніторингу поверхневих вод (2011)
79. Mokin, V.B. (ed.): Mokin VI River Water Control of Sewage Disposal Detection (2000)
80. Мокін, В.Б.: Математичні моделі для контролю та управління якістю річкових вод. УНІВЕРСУМ-Вінниця, Вінниця (2005)
81. Савула, Я.Г., Шинкаренко, Г.А., Вовк, В.Н.: Некоторые приложения метода конечных элементов. Львов: Редакционно-издательская группа Львов. ун-та **38** (1981)
82. Савула, Я.Г., Шинкаренко, Г.А.: Метод скінченних елементів. Савула ЯГ, Шинкаренко ГА–Львів (1999)
83. Савула, Я.Г., Дяконюк, Л.М.: Дослідження варіаційної задачі теплопровідності у багатошарових середовищах з тонкими включеннями. Science(3), 123–128 (2000)
84. Савула, Я.Г.: Числовий аналіз задач математичної фізики варіаційними методами. Львів: видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка (2004)
85. Савула, Я.Г., Мандзак, Т.И.: Разномерная задача математической модели адвекции–диффузии в среде с тонким включением. Компьютерная математика(2), 59–70 (2007)
86. Власій, О., Чернуха, О.: Математичне моделювання гетеродифузійних процесів у шарі з випадковим прошарком. Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології(20), 58–68 (2014)

87. Chaplia, Y., Chernukha, O.: Three-dimensional diffusion in a multiphase body with randomly disposed inclusions of a spherical form. *International journal of heat and mass transfer* **46**(17), 3323–3328 (2003)
88. Бейко, І.В., Бейко, М.Ф.: Об одном новом подходе к решению нелинейных краевых задач. *Украинский математический журнал* **20**(06), 723–731 (1968)
89. Бейко, І.В., Бублик, Б.Н., Зинько, П.Н.: *Методи і алгоритми вирішення задач оптимізації*. К.: Вища школа (1983)
90. Бейко, І.В.: Розвиток методів розв'язуючих та асимптотично-розв'язуючих операторів для побудови оптимальних та асимптотично-оптимальних математичних моделей. *Вісник Київського університету. Серія: Кібернетика*.—2002.—Вип **3**, 10–15 (2002)
91. Бейко, І.В., Зинько, П.М.: *Методи високих порядків для розв'язування задач Коші та багатомірних крайових задач за допомогою асимптотично-розв'язуючих операторів. Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки* (2008)
92. Акименко, В.В., Ульшин, В.А.: О построении монотонных разностных схем для уравнений эллиптического и параболического типов методами линейной регуляризации. *Математическое моделирование* **10**(2), 79–88 (1998)
93. Акименко, В.В., Сугоняк, І.І.: Нелинейное моделирование многомерного процесса диффузии инноваций на основе метода расщепления. *Кібернетика и системный анализ*(4), 120–133 (2008)
94. Акименко, В.В., Наконечный, А.Г., Трофимчук, О.Ю.: Моделирование процессов конвекции–диффузии на основе многомерного интегро-дифференциального уравнения с вырождающейся параболичностью. *Кібернетика и системный анализ* (2009)

95. Акименко, В.В., Митрохин, С.А.: Модель оптимального управления нелинейным процессом фильтрации для задачи подтопления территорий. Проблемы управления и информатики(4), 73–89 (2010)
96. Лыков, А.В., Михайлов, Ю.А.: Теория тепло-массопереноса. Госэнергоиздат, Москва (1963)
97. Лыков, А.В.: Методы решения нелинейных уравнений нестационарной теплопроводности. Изв. АН СССР. Энергетика и транспорт(5), 109–150 (1970)
98. Лыков, А.В., Алексащенко, А.А., Алексащенко, В.А.: Сопряженные задачи конвективного теплообмена. Минск: Изд-во БГУ **346**, 3 (1971)
99. Лыков, А.В.: Явления переноса в капиллярно-пористых телах. Течнико-теоретической литературы (1954)
100. Лыков, А.В., Михайлов, Ю.А.: Теория переноса энергии и вещества. Изд-во Академии наук БССР (1959)
101. Лыков, А.В.: Теория теплопроводности (1967)
102. Михайлов, Г.К., Николаевский, В.Н.: Движение жидкостей и газов в пористых средах. Механика в СССР за **50**, 585–648 (1970)
103. Ковальчук, П.І., Демчук, О.С., Коваленко, Р.Ю.: Математичне моделювання поширення забруднення в річках при промивках із водосховищ. Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки (2016)
104. Martynyuk, P.N.: Meshfree and mesh methods for system of non-linear parabolic equations. Sibirskie Èlektronnye Matematicheskie Izvestiya [Siberian Electronic Mathematical Reports] **11**, 476–493 (2014)
105. Martynyuk, P.M.: Existence and uniqueness of a solution of the problem with free boundary in the theory of filtration consolidation of soils with regard for the influence of technogenic factors. J Math Sci (2015). doi: 10.1007/s10958-015-2355-z

106. Martyniuk, P.M., Kuzlo, M.T., Matus, S.K., Tsvietkova, T.P.: Mathematical model of nonisothermal moisture transference in the form of water and vapor in soils in the case of chemical internal erosion. *FJMS* (2017). doi: 10.17654/MS102123211
107. Ivanchuk, N., Martynyuk, P., Tsvetkova, T., Michuta, O.: Mathematical modeling and computer simulation of the filtration processes in earth dams. *EEJET* (2017). doi: 10.15587/1729-4061.2017.98712
108. Herus, V., Martyniuk, P., Michuta, O., Stepanchenko, O.: Two-dimensional problem concerning contact suffusion interplay on the filtration consolidation processes of heterogeneous soils. *Int. J. of Pure and Appl. Math.* (2017). doi: 10.12732/ijpam.v114i2.20
109. Safonyk, A.P.: Modelling the filtration processes of liquids from multicomponent contamination in the conditions of authentication of mass transfer coefficient. *International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* **9**, 189–192 (2015)
110. Бомба, А.Я., Сафоник, А.П.: Математичне моделювання процесу магнітного очищення рідин від багатокомпонентного забруднення. *Проблемы машиностроения* **15**(5-6), 49–55 (2012)
111. Бомба, А.Я., Сафоник, А.П.: Математическое моделирование процессов фильтрования жидкостей от многокомпонентного загрязнения в N-шаровых фильтрах. *Компьютерная математика* (2014)
112. Бомба, А.Я., Сафоник, А.П.: Математическое моделирование процесса аэробной очистки сточных вод в условиях диффузионного и массообменного возмущений. *Инженерно-физический журнал* **91**(2), 338–344 (2018)
113. Власюк, А.П., Степанченко, О.М.: Математичне моделювання процесу корозії бетонного фундаменту гідротехнічної споруди. *Вісник*

- Хмельницького національного університету. Серія: технічні науки. Частина 1, 46–52 (2005)
114. Степанченко, О.М.: Кинематические граничне условия в задачах растворения солевых пластов. Наукові нотатки(51), 186–190 (2015)
115. Власюк, А.П., Остапчук, О.П.: Числове моделювання міграції радіонуклідів при горизонтальній фільтрації підземних вод. Тез. доп. Міжнародної школи-семінару «Прогнозування та прийняття рішень в умовах невизначеності», 180–181 (2006)
116. Богаенко, В.А.: Программный комплекс моделирования класса процессов миграции загрязнений в грунтах на кластерных системах. Управляющие системы и машины(1), 58–65 (2010)
117. Богаенко, В.А., Марченко, О.А., Самойленко, Т.А.: Анализ численного моделирования динамики грунтового массива при неустановившейся напорной фильтрации. Управляющие системы и машины(4), 33–40 (2014)
118. Гладкий, А.В., Богаенко, В.А.: Моделирование переноса загрязнений в атмосфере с использованием параллельных вычислений. Управляющие системы и машины(6), 18–26 (2014)
119. Власюк, А.П., Федорчук, Н.А.: Математичне моделювання одновимірної задачі напружено-деформованого стану грунтового масиву в умовах тепло-масоперенесення при фільтрації сольових розчинів. Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. наук. **Вип. 1**, 131–136 (2012)
120. Федорчук, Н.А.: Математичне моделювання одновимірної задачі напружено-деформованого стану грунтового масиву при фільтрації сольових розчинів в неізотермічних умовах та наявності рівня ґрунтових вод. Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки: зб. наук. праць **Вип. 4**, 204–215 (2010)
121. Ентов, В.М.: Теория фильтрации (1998)

122. Budak, B.M., Samarskii, A.A., Tikhonov, A.N., Sneddon, I.N., Stark, M., Ulam, S.: A Collection of Problems on Mathematical Physics: International Series of Monographs in Pure and Applied Mathematics. Elsevier Science (2013)
123. Shackelford, C.D., Daniel, D.E.: Diffusion in Saturated Soil. I. Background. *J. Geotech. Engrg.* (1991). doi: 10.1061/(ASCE)0733-9410(1991)117:3(467)
124. Šimůnek, J., Jarvis, N.J., van Genuchten, M., Gärdenäs, A.: Review and comparison of models for describing non-equilibrium and preferential flow and transport in the vadose zone. *Journal of Hydrology* (2003). doi: 10.1016/S0022-1694(02)00252-4
125. Marchuk, G.I.: *Methods of Numerical Mathematics*, 2nd edn. Stochastic Modelling and Applied Probability. Springer Verlag, New York, NY (1982)
126. Сінчук, Ю.: Адаптивна схема методу скінченних елементів для сингулярно збурених задач конвекції-дифузії. *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології* (2008)
127. Власюк, А.П., Кузло, М.: Експериментальні дослідження деяких параметрів фільтрації сольових розчинів у піщаних ґрунтах. *Меліорація та водне господарство: міжвідомчий тематич. наук. зб.*(Вип. 87), 43–46 (2000)
128. Бурак, Я.Й., Чапля, Є.Я.: Вихідні положення математичної моделі гетеродифузного переносу радіонуклідів у приповерхневих шарах Землі. *Доп. НАН України* **10**, 59–63 (1993)
129. Чапля, Є.Я., Чернуха, О.Ю., Гончарук, В. Є., Пабірівський, В. В.: Моделювання процесів стаціонарної гетеро дифузії розпадної речовини у середовищі з пастками. *Моделювання та інформаційні технології* **70**, 96–108 (2013)
130. Прохоров, В.М.: Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. (ред. Алексахин Р.М.). Энергоиздат (1981)

131. Власюк, А.П.: Про деякі нові математичні моделі підземної гідромеханіки. Вісник Рівненського державного технічного університету. Збірник наукових праць. Випуск 1 (3) **Випуск 3(5)(2)**, 57–62 (2000)
132. Bossew, P., Kirchner, G.: Modelling the vertical distribution of radionuclides in soil. Part 1: the convection–dispersion equation revisited. *Journal of Environmental Radioactivity* (2004). doi: 10.1016/j.jenvrad.2003.08.006
133. Токарчук, М., Жаліло, А., Чапля, Є., Чернуха, О.: Кінетика переносу радіонуклідів у склоподібних радіоактивно збуджених матеріалах (2005)
134. Chernukha, O.Y.: Physico-mathematical models of heterodiffusion in a layer. *J Math Sci* (1997). doi: 10.1007/BF02356099
135. Остапчук, О.П.: Чисельне моделювання процесу очищення горизонтального шару ґрунту від радіонуклідів при їх вертикальній міграції. Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки (2010)
136. Burak, Y.I., Hachkevych, O.R., Solodyak, M.T.: Mathematical model of the process of electrodiffusion of radionuclides in lavalike fuel-containing materials. *J Math Sci* (2012). doi: 10.1007/s10958-012-0798-z
137. Olondo, C., Legarda, F., Herranz, M., Idoeta, R.: Validating proposed migration equation and parameters' values as a tool to reproduce and predict ¹³⁷Cs vertical migration activity in Spanish soils. *Journal of Environmental Radioactivity* (2017). doi: 10.1016/j.jenvrad.2016.12.013
138. Merk, R.: Numerical modeling of the radionuclide water pathway with HYDRUS and comparison with the IAEA model of SR 44. *Journal of Environmental Radioactivity* (2012). doi: 10.1016/j.jenvrad.2011.10.014
139. Johnson, B.E., Dortch, M.S.: Application of TREECS Modeling System to Strontium-90 for Borschi Watershed near Chernobyl, Ukraine. *Journal of Environmental Radioactivity* (2014). doi: 10.1016/j.jenvrad.2013.10.001

140. Власюк, А.П., Мартинюк, П. М.: Чисельне розв'язування задач консолідації та фільтраційного руйнування ґрунтів в умовах тепло-масопереносу методом радіальних базисних функцій: [монографія]. Національний університет водного господарства та природокористування, Рівне (2010)
141. Литвин, І.А., Панасюк, М.І., Левін, Г.В., Люшня, П.А., Сізов, М.О., Онищенко, І.П.: Розподіл тритію в ґрунтових водах у районі об'єкта "Укриття". Проблеми безпеки атомних електростанцій і Чорнобиля (2017)
142. Yukhnovskii, I.R., Tokarchuk, M.V., Omelyan, I.P., Zhelem, R.I.: Statistical theory for diffusion of radionuclides in ground and subterranean water. *Radiation Physics and Chemistry* **59**(4), 361–375 (2000)
143. Im Krip, Shymchuk, T.V., Hlushak, P.A., Tokarchuk, M.V.: До проблем математичного моделювання міграції радіонуклідів у ґрунтах та ґрунтових водах. *Radiat. Phys. Chem* **59**(4), 361–375 (2000)
144. Гончарук, В.Є., Лянце, Г.Т., Чапля, Є.Я., Чернуха, О.Ю.: Математичні моделі та експериментальні дані про поширення радіонуклідів у ґрунтах. *Растр-7* (2014)
145. Vlasyuk, A.P., Zhukovska, N.A., Zhukovskyu, V.V., Klos-Witkowska, A., Pazdriy, I., Iatskyovska, U. (eds.): Mathematical modelling of three-dimensional problem of soil mass stressed-strained state considering mass and heat transfer. 2017 9th IEEE International Conference on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications (IDAACS). 2017 9th IEEE International Conference on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications (IDAACS) (2017)
146. Філатова, І., Федорчук, Н.А.: Математичне моделювання напружено-деформованого стану ґрунтових масивів в складних гідрогеологічних умовах. *Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. наук.* **Вип. 3**, 2018–2226 (2011)

147. Філатова. І.А.: Математичне моделювання напружено-деформованого стану багатошарового ґрунтового масиву при наявності рівня ґрунтових вод. Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. наук. **Впи. 1**, 161–165 (2008)
148. Власюк, А.П., Федорчук, Н.А.: Чисельне моделювання напружено-деформованого стану основи ґрунтової греблі при наявності тепло-масопереносу. Тез. доп. Міжнар. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 48–49 (2009)
149. Кузлю, М., Філатова. І.А.: Дослідження впливу концентрації сольових розчинів на деформаційні характеристики ґрунтів. Вісник Національного університету водного господарства та природокористування **Випуск 4 (36)(2)**, 209–214 (2006)
150. Vlasyuka, A.P., Zhukovskaya, N.A.: Mathematical Simulation of the Stressed-Strained State of the Foundation of Earth Dams with an Open Surface Under the Influence of Heat and Mass Transfer in the Two-Dimensional Case. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics* (2015). doi: 10.1007/s10891-015-1197-3
151. Shelestovskii, B.G., Grilitskii, D.V.: Thermoelastic problem of a transversal isotropic layer under mixed conditions of heat emission. *Soviet Applied Mechanics* (1972). doi: 10.1007/BF00885913
152. Власюк, А.П., Катерина, Є.І.: Розв'язування одновимірної стаціонарної задачі НДС ґрунтових масивів в умовах масоперенесення. Вісник Львів. ун-ту **Сер. Прикл. матем. та інформ.**(Вип. 1), 55–62 (1999)
153. Коваленко, А.Д.: Термоупругость. Вища школа, Киев (1975)
154. Калюх, Ю., Клименков, О., Берчун, Я.: Прикладна реалізація моделей ґрунтового середовища в геотехніці: від моделі Біо до моделі граничної рівноваги (2016)

155. Трофимчук, А.Н., Калюх, Ю.И., Глебчук, А.С.: Математическое моделирование устойчивости оползневого склона при подъеме уровня грунтовых вод. *Екологія і ресурси*(18), 51–58 (2008)
156. Трофимчук, А.Н., Глебчук, А.С., Калюх, Ю.И.: Математическое моделирование изменения напряженно-деформированного состояния оползневого массива при наличии здания и обустройстве котлована в условиях подтопления. *Будівельні конструкції: міжвідомчий науково-технічний збірник наукових праць (будівництво)*.—2008.—Кн 1, 95–104 (2008)
157. Золотарев, П.П., Дубинин, М.М. (eds.): Об уравнениях, описывающих внутреннюю диффузию в гранулах адсорбента (1973)
158. Zolotarev, P.P., Ulin, V.I.: Internal diffusion in a biporous adsorbent with rectangular adsorption isotherm 4. Integral equations for adsorption wave front movement in spherical and cylindrical grains. *Russ Chem Bull* (1978). doi: 10.1007/BF00946658
159. Ruckenstein, E., Vaidyanathan, A., Youngquist, G.: Sorption by solids with bidisperse pore structures. *Chemical Engineering Science* (1971). doi: 10.1016/0009-2509(71)80051-9
160. Бекман, И.Н.: Теория диффузии в дисперсионных средах, Москва-Нальчик (2008)
161. Conner, W.C., Fraissard, J.P.: Fluid transport in nanoporous materials. NATO science series. II, Mathematics, physics, and chemistry, v. 219. Springer in cooperation with NATO Public Diplomacy Division, Dordrecht, the Netherlands (2006)
162. Binder, T., Hibbe, F., Chmelik, C., Kärger, J., Martinez-Joaristi, A., Gascon, J., Kapteijn, F., Ruthven, D.: Micro-imaging of transient guest profiles in nanoporous host systems of cylindrical symmetry. *J. Chem. Phys.* (2012). doi: 10.1063/1.4762849

163. Kärger, J. (ed.): Diffusion Fundamentals. Leipzig 2005; with paintings "Views of Leipzig" by Taro Ito (Sapporo). Leipziger Universitätsverlag, Leipzig (2005)
164. Kärger, J., Ruthven, D.M., Theodorou, D.N.: Diffusion in nanoporous materials. Wiley-VCH, Weinheim, Germany (2012)
165. Kostrobij, P.P., Markovych, B.M., Viznovych, O.V., Tokarchuk, M.V.: Generalized transport equation with nonlocality of space–time. Zubarev’s NSO method. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications (2019). doi: 10.1016/j.physa.2018.09.051
166. Kostrobij, P., Markovych, B., Viznovych, O., Tokarchuk, M.: Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics. Journal of Mathematical Physics (2016). doi: 10.1063/1.4962159
167. Pavlenko, N., Kostrobij, P.P., Suchorski, Y., Imbihl, R.: Alkali metal effect on catalytic CO oxidation on a transition metal surface. A lattice-gas model. Surface Science (2001). doi: 10.1016/S0039-6028(01)01180-3
168. Петрик, М., Михалик, Д.М.: Математичне моделювання адсорбційного нелінійного масопереносу в каталітичних пористих середовищах. Вісник ТДТУ ім. І. Пулюя **4**, 193–198 (2009)
169. Сергієнко, І.В., Петрик, М.Р., Хіміч, О.М., Михалик, Д.М., Леклерк, Д., Фресар, Ж.: Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури. Видавництво Національної академії наук України (2014)
170. Petryk, M.R., Fraissard, J.: Mathematical Modeling and Visualization of Multilevel Mass Transfer System in Heterogeneous Catalytic Media of Nanoporous Particles. J Automat Inf Scien (2008). doi: 10.1615/JAutomatInfScien.v40.i10.10
171. Petryk, M.R., Fraissard, J., Mykhalyk, D.M.: Modeling and Analysis of Concentration Fields of Nonlinear Competitive Two-Component Diffusion in

- Medium of Nanoporous Particles. *J Automat Inf Scien* (2009). doi: 10.1615/JAutomatInfScien.v41.i8.20
172. Petryk, M., Vorobiev, E.: Numerical and analytical modeling of solid-liquid expression from soft plant materials. *AIChE J.* (2013). doi: 10.1002/aic.14213
173. Sergienko, I.V., Petryk, M.R., Fraissard, J., Leclerc, S.: Highly Efficient Methods of the Identification of Competitive Diffusion Parameters in Inhomogeneous Media of Nanoporous Particles. *Cybernetics and Systems Analysis* (2015). doi: 10.1007/s10559-015-9744-7
174. Бомба, А.Я., Присяжнюк, І.М., Присяжнюк, О.В.: Ідентифікація параметрів сингулярно збурених задач типу конвекція-дифузія-масообмін в наносередовищах. *Вісник Харківського національного університету імені ВН Каразіна. Серія: Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління*(22), 36–44 (2013)
175. Бомба, А.Я., Присяжнюк, І.М., Присяжнюк, О.В., Сівак, В.М.: Математичне моделювання процесів первинної очистки стічних вод із використанням пористих мікрочастинок. *Вісник Національного університету водного господарства та природокористування. Технічні науки*(1), 104–112 (2014)
176. Бомба, А.Я., Присяжнюк, І.М., Сафоник, А.П.: Моделювання процесів очищення стічної води на каркаснозасипних фільтрах з урахуванням зворотного впливу. *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології.*–2007.–Вип 6, 101–108
177. Bomba, A., Klymiuk, Y., Prysiazhniuk, I., Prysiazhniuk, O., Safonyk, A.: Mathematical modeling of wastewater treatment from multicomponent pollution by through microporous filling. In: *APPLICATION OF MATHEMATICS IN TECHNICAL AND NATURAL SCIENCES: 8th International Conference for Promoting the Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences -*

- AMiTaNS'16, Albena, Bulgaria, 22–27 June 2016, p. 40003. Author(s) (2016). doi: 10.1063/1.4964966
178. Kostrobij, P.P., Viznovych, O.V., Markiv, B.B., Tokarchuk, M.V.: Generalized kinetic equations for dense gases and liquids in the Zubarev nonequilibrium statistical operator method and Renyi statistics. *Theor Math Phys* (2015). doi: 10.1007/s11232-015-0314-y
179. Rouquerol, J., Avnir, D., Fairbridge, C.W., Everett, D.H., Haynes, J.M., Pernicone, N., Ramsay, J.D.F., Sing, K.S.W., Unger, K.K.: Recommendations for the characterization of porous solids (Technical Report). *Pure and Applied Chemistry* (1994). doi: 10.1351/pac199466081739
180. Natarajan, N., Suresh Kumar, G.: Radionuclide and colloid co-transport in a coupled fracture-skin-matrix system. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* (2010). doi: 10.1016/j.colsurfa.2010.08.045
181. Bradford, S.A., Simunek, J., Bettahar, M., van Genuchten, M.T., Yates, S.R.: Modeling Colloid Attachment, Straining, and Exclusion in Saturated Porous Media. *Environ. Sci. Technol.* (2003). doi: 10.1021/es025899u
182. Cheng, T., Saiers, J.E.: Colloid-Facilitated Transport of Cesium in Vadose-Zone Sediments: The Importance of Flow Transients. *Environ. Sci. Technol.* (2010). doi: 10.1021/es100391j
183. Bradford, S.A., Torkzaban, S., Simunek, J.: Modeling colloid transport and retention in saturated porous media under unfavorable attachment conditions. *Water Resour. Res.* (2011). doi: 10.1029/2011WR010812
184. Sang, W., Morales, V.L., Zhang, W., Stooft, C.R., Gao, B., Schatz, A.L., Zhang, Y., Steenhuis, T.S.: Quantification of Colloid Retention and Release by Straining and Energy Minima in Variably Saturated Porous Media. *Environ. Sci. Technol.* (2013). doi: 10.1021/es400288c
185. Глобус, А.М.: Физика неизотермического внутрипочвенного влагообмена. Гидрометеоиздат, Ленинград (1983)

186. Чудновский, А.: Влияние переменного характера теплофизических характеристик почв по их профилю на температуру почвы. Инженерно-физический журнал **Т. 3(7)**, 51–59 (1960)
187. Petryk, M., Mykhalyk, D., Petryk, M., Boyko, I., Mudryk, I.: Modeling of Adsorption and Desorption of Hydrocarbons in Nanoporous Catalyst Zeolite using Nonlinear Langmuir's Isotherm
188. Dvoyashkin, M., Valiullin, R., Kärger, J.: Supercritical fluids in mesopores—new insight using NMR. *Adsorption* (2007). doi: 10.1007/s10450-007-9064-y
189. Ding, M., Kelkar, S., Meijer, A.: Surface complexation modeling of americium sorption onto volcanic tuff. *Journal of Environmental Radioactivity* (2014). doi: 10.1016/j.jenvrad.2014.06.007
190. Клименко, О.: Машина для внесення меліорантів в рідкому стані. Вісник Рівненського державного технічного університету. Збірник наукових праць. Випуск 1 (3), 161–166 (2000)
191. Власюк, А.П., Мартинюк, П. М.: Математичне моделювання консолідації ґрунтів при фільтрації сольових розчинів в неізотермічних умовах: [монографія]. Національний університет водного господарства та природокористування (2008)
192. Titze, T., Lauerer, A., Heinke, L., Chmelik, C., Zimmermann, N.E.R., Keil, F.J., Ruthven, D.M., Kärger, J.: Transport in Nanoporous Materials Including MOFs: The Applicability of Fick's Laws. *Angew. Chem. Int. Ed.* (2015). doi: 10.1002/anie.201506954
193. Conner, W.C., Fraissard, J., RUTHVEN, D.M. (eds.): TRANSPORT IN MICROPOROUS SOLIDS: AN HISTORICAL PERSPECTIVE Part I: Fundamental Principles and Sorption Kinetics. *Fluid Transport in Nanoporous Materials*, Dordrecht. Springer Netherlands (2006)
194. Брилинг, И.А.: Влияние давления и температуры на фильтрационные свойства глин. *Связанная вода в дисперсных системах* **4**, 82–89 (1977)

195. Петрик, М., Михалик, Д.М.: Математичне моделювання адсорбційного нелінійного масопереносу в каталітичних пористих середовищах. Вісник ТДТУ ім. І. Пулюя **4**, 193–198 (2009)
196. Petryk, M.R., Mykhalyk, D.M.: Nonlinear Mathematical Model of Two-Level Transfer of the "Filtration-Consolidation" Type. *J Automat Inf Scien* (2010). doi: 10.1615/JAutomatInfScien.v42.i3.50
197. Прохоров, В.М.: Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. (ред. Алексахин Р.М.). Энергоиздат (1981)
198. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі. Тез. XIV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука, 111 (2012)
199. Ладыженская, О.А., Солонников, В.А., Уральцева, Н.Н.: Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа (1967)
200. Мартинюк, П.М., Власюк, А.П.: Дослідження існування та єдиності розв'язку однієї квазілінійної параболічної системи диференціальних рівнянь другого порядку. Препр./НАН України. Ін-т математики (2001)
201. Sergienko, I.V., Deineka, V.S., Veshchunov, V.V.: NADRA 3D information technology for analysis of processes in multicomponent soil media. *Cybern Syst Anal* (2006). doi: 10.1007/s10559-006-0130-3
202. ORCHESTRA - Object Representation of Chemical Speciation and Transport models. A tool for modelling chemical and multidimensional transport processes in soil. <http://www.macaulay.ac.uk/ORCHESTRA/> (2006). Accessed 20 December 2015
203. PHREEQC - A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations. http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/. Accessed 20 December 2015

204. Jacques, D., Simunek, J.: HPx - a tool for simulating interactive biogeochemical processes in soil systems. In: EGU General Assembly Conference Abstracts, vol. 16
205. Henning.Prommer@csiro.au (Henning Prommer): PHT3D Home. <http://www.pht3d.org/> (2012). Accessed 20 December 2015
206. OpenGeoSys - Home. <http://www.opengeosys.org/>. Accessed 20 December 2015
207. van der Lee, J., Windt, L. de, Lagneau, V., Goblet, P.: Module-oriented modeling of reactive transport with HYTEC. *Computers & Geosciences* (2003). doi: 10.1016/S0098-3004(03)00004-9
208. Simunek, J., Jacques, D., Langergraber, G., Bradford, S.A., Šejna, M., van Genuchten, M.T.: Numerical modeling of contaminant transport using HYDRUS and its specialized modules. *Journal of the Indian Institute of Science* **93**(2), 265–284 (2013)
209. TOUGH. Suite of Simulators for Nonisothermal Multiphase Flow and Transport in Fractured Porous Media. <http://esd1.lbl.gov/research/projects/tough/> (2015). Accessed 20 December 2015
210. PNNL STOMP - Home. Subsurface Transport Over Multiple Phases. <http://stomp.pnnl.gov/index.stm>. Accessed 20 December 2015
211. Zhang, F., Yeh, G.-T., C. Parker, J.: *Groundwater Reactive Transport Models*. BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS (2012)
212. WEB Page for CRUNCH. <http://www.csteefel.com/CrunchFlowIntroduction.html> (2015). Accessed 20 December 2015
213. The Reactive Transport Code MIN3P. Multicomponent reactive transport modeling in variably saturated porous media. http://www.eos.ubc.ca/research/hydro/research/min3p/reactive_tran_web.htm (2004). Accessed 20 December 2015

214. Peter C. Lichtner and Glenn E. Hammond and Chuan Lu and Satish Karra and Gautam Bisht and Benjamin Andre and Richard T. Mills and Jitendra Kumar: PFLOTRAN Web page. <http://www.pflotran.org/> (2013). Accessed 20 December 2015
215. Steefel, C.I., Appelo, C., Arora, B., Jacques, D., Kalbacher, T., Kolditz, O., Lagneau, V., Lichtner, P.C., Mayer, K.U., Meeussen, J., Molins, S., Moulton, D., Shao, H., Šimůnek, J., Spycher, N., Yabusaki, S.B., Yeh, G.T.: Reactive transport codes for subsurface environmental simulation. *Computational Geosciences*. *Comput Geosci* (2015). doi: 10.1007/s10596-014-9443-x
216. Белоус, М.В., Дейнека, В.С.: Использование программного комплекса НАДРА-3D для моделирования регионального режима фильтрации воды. *Компьютерная математика*(1), 35–42 (2010)
217. Химич, А.Н., Чистякова, Т.В., Баранов, А.Ю.: Автоматический адаптивный решатель систем линейных алгебраических уравнений для гибридных систем. *Вісник Національного технічного університету України*(54), 139–144 (2011)
218. Баранов, А.Ю., Белоус, М.В., Сергиенко, И.В., Химич, А.Н.: Гибридные алгоритмы решения линейных систем для конечно-элементного моделирования процессов фильтрации. *Кибернетика и системный анализ*(51, № 4), 112–120 (2015)
219. Meeussen, J.C.L.: ORCHESTRA. An Object-Oriented Framework for Implementing Chemical Equilibrium Models. *Environ. Sci. Technol.* (2003). doi: 10.1021/es025597s
220. Gamazo, P., Slooten, L.J., Carrera, J., Saaltink, M.W., Bea, S., Soler, J.: PROOST: object-oriented approach to multiphase reactive transport modeling in porous media. *Journal of Hydroinformatics* (2015). doi: 10.2166/hydro.2015.126

221. Appelo, C., van Loon, L.R., Wersin, P.: Multicomponent diffusion of a suite of tracers (HTO, Cl, Br, I, Na, Sr, Cs) in a single sample of Opalinus Clay. *Geochimica et Cosmochimica Acta* (2010). doi: 10.1016/j.gca.2009.11.013
222. Charlton, S.R., Parkhurst, D.L.: Modules based on the geochemical model PHREEQC for use in scripting and programming languages. *Computers & Geosciences* (2011). doi: 10.1016/j.cageo.2011.02.005
223. Евгеньевич, Ш.: Qt4.8. Профессиональное программирование на C++. БХВ-Петербург, Санкт-Петербург (2012)
224. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності дрен-вловлювачів в нелінійному випадку. Тез. XXII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 62 (2013)
225. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у насиченому каталітичному пористому середовищі до системи горизонтальних фільтрів-вловлювачів у лінійному випадку. Тез. I Міжнар. XX Всеукр. наукова конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики», 51–52 (2014)
226. Бурак, Я.Й., Чапля, Є.Я.: Вихідні положення математичної моделі гетеродифузного переносу радіонуклідів у приповерхневих шарах Землі. Доп. НАН України **10**, 59–63 (1993)
227. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі. Тез. XIV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука, 111 (2012)
228. Самарский, А.А.: Теория разностных схем: Учеб. пособие для вузов по спец. "Прикл. математика". Наука, Москва (1989)
229. Власюк, А.П., Остапчук, О.П., Степанченко, О.М.: Монотонна різницева схема для нелінійного одновимірного рівняння параболічного типу, що

- містить першу похідну. Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. наук. **Вип. 2.**, 188 (2005.)
230. Демидович, Б.П., Марон И. А., Шувалова Э. З.: Численные методы анализа. Наука (1967)
231. Самарский, А., Гулин, А.: Численные методы математической физики: Учеб. пособие по прикл. математике. Науч. мир (2003)
232. Гончарук, В., Чапля, Є., Чернуха, О., Оведик, Я.: Процеси гетеродифузії розпадної речовини двома шляхами у середовищі з пастками. Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології(18), 73–84 (2013)
233. Чернуха, О.Ю., Гончарук, В.Є., Білушак, Ю.І., Чучвара, А.Є.: Математичне моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у приповерхневих шарах насиченого ґрунту. Математичні машини і системи, 82–101 (2017)
234. 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, 208–219 (2015)
235. Zhukovskyy, V.V., Vlasyuk, A.P.: Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in catalytic porous media in non-isothermal conditions. In: Adamczak, S. (ed.) Research on modern systems for manufacture and measurement of components of machines and devices. Science report Project СІІІ-PL-0007 : Monograph, pp. 177–190. Kielce University of Technology, Kielce (op. 2016)
236. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів у лінійному випадку. Тез. ХІХ Всеукр.

- наукова конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики», 41–42 (2013)
237. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному середовищі з пастками. Тез. XXVI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 61–63 (2015)
238. 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. Тез. VI Міжнар. наук. конф. "Сучасні проблеми математичного моделювання, прогнозування та оптимізації", 32–33 (2014)
239. Демидович, Б.П., Марон, И.А., Шувалова, Э.З.: Численные методы анализа. Наука (1967)
240. Gamma, E.: Design patterns. Elements of reusable object-oriented software. Addison-Wesley professional computing series. Addison-Wesley, Reading, Mass (1995)
241. 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", 110–111 (2014)
242. Modelling the migration and accumulation of radionuclides in forest ecosystems. Report. IAEA-BIOMASS-5. International Atomic Energy Agency, Vienna (2002)
243. 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", 89 (2015)
244. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при

- наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах. Тез. Міжнар. науково-практичної конф. «Проблеми розвитку вищої школи та економіки в ХХІ столітті», 77–79 (2013)
245. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів у нелінійному випадку. Тез. XV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука, 72 (2014)
246. 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, 342–345 (2016)
247. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному нелінійному випадку. Тез. XXV Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 154–155 (2015)
248. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному випадку. Тез. Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів», 44 (2015)
249. Vlasyuk, A.P., Kochan, R.V., Zhukovskyy, V.V., Zhukovska, N.A.: Mathematical and computer modeling of contaminant migration to filter trap in two-dimensional nonlinear case. 18th International Multidisciplinary Scientific Geosconference SGEM 2018 **18**(2.2), 293–300 (2018)
250. 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", 20–22 (2018)

251. Vereecken, H., Schnepf, A., Vanderborght, J.: Establishing an International Soil Modelling Consortium **17** (2015)
252. Šimůnek, J., van Genuchten, M.T., Šejna, M.: Development and Applications of the HYDRUS and STANMOD Software Packages and Related Codes. *Vadose Zone Journal* (2008). doi: 10.2136/vzj2007.0077
253. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів. Тез. Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів», 42 (2013)
254. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах. Тез. XXI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 105–107 (2013)
255. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому біпористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів. Тез. XXIII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 75–76 (2014)
256. Vlasyuk, A.P., Zhukovsky, 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”, 122–124 (2016)
257. Хіміч, О.М., Чистякова, Т.В., Баранов, А.Ю.: Принципи створення інтелектуального інтерфейсу для розв’язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь на комп’ютерах гібридної архітектури. Проблеми програмування(2-3), 435–442 (2012)

258. McConnell, S.: Code complete, 2nd edn. Microsoft Press, Redmond, Wash. (2004)
259. Boehm, B., Abts, C., Chulani, S.: Software development cost estimation approaches—A survey. *Annals of software engineering* **10**(1-4), 177–205 (2000)
260. Papajorgji, P.J., Pardalos, P.M.: Software engineering techniques applied to agricultural systems. An object-oriented and UML approach. Springer optimization and its applications, volume 93. Springer, New York, NY (2014)
261. Oberkampf, W.L.: Verification and validation in scientific computing. Cambridge Univ. Press, Cambridge [u.a.] (2013)
262. Petryk, M., Leclerc, S., Canet, D., Sergienko, I., Deineka, V., Fraissard, J.: Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Bed. NMR and Slice Selection Procedure, Modeling, and Parameter Identification. *J. Phys. Chem. C* (2015). doi: 10.1021/acs.jpcc.5b07974
263. Будаєв, Б.М., Самарський, А.А., Тихонов, А.Н.: Сборник задач по математической физике. Государственное издательство технико-теоретической литературы (1956)
264. Moore, G.E. (ed.): No exponential is forever: but "Forever" can be delayed![semiconductor industry]. IEEE (2003)
265. Богаєнко, В.А.: Об оптимизации вычислительного процесса математического моделирования сложных задач. *Управляющие системы и машины*(6), 9–24 (2010)
266. Богаєнко, В.О.: Паралельні алгоритми моделювання процесу фільтраційної консолідації під дією двокомпонентного розчину. Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки (2011)
267. Богаєнко, В.А.: Методика численного моделирования процесса электрокинетической очистки грунтов в неизотермических условиях. *Управляющие системы и машины*(1), 3–10 (2013)

268. Богаенко, В.А., Булавацкий, В.М., Скопецкий, В.В.: Параллельный алгоритм расчета фильтрационно-конвективной диффузии загрязнений из водоносных горизонтов. *Управляющие системы и машины*(5), 18–23 (2008)
269. Gladky, A.V., Blagoveshchenskaya, T.Y., Bohaienko, V.A.: Splitting Methods Parallel Algorithms for Problems of Pollution Transport in Atmosphere. *Journal of Automation and Information Sciences* **46**(10) (2014)
270. Gladky, A.V., Bohaienko, V.A.: Investigation of Parallel Algorithms for Solving Problems of Convection Diffusion on the Basis of Splitting Schemes. *Journal of Automation and Information Sciences* **49**(2) (2017)
271. Wu, Y., Salama, A., Sun, S.: Parallel simulation of wormhole propagation with the Darcy–Brinkman–Forchheimer framework. *Computers and Geotechnics* (2015). doi: 10.1016/j.compgeo.2015.06.021
272. Белоус, М.: Конечно-элементный решатель Надра-3D. *Second International Conference "Cluster Computing"*
273. Белоус, М.В., Дейнека, В.С.: Подсистема триангуляции слоистых тел программного комплекса Надра-3D. *Компьютерная математика*(1), 56–62 (2011)
274. Богаенко, В.А., Булавацкий, В.М.: Численное моделирование дробно-дифференциальной динамики процесса фильтрационно-конвективной диффузии на основе параллельных алгоритмов для кластерных систем. *Доповіді НАН України* (2017)
275. Bogaenko, V.A., Bulavatskiy, V.M., Kryvonos, I.G.: On Mathematical modeling of Fractional-Differential Dynamics of Flushing Process for Saline Soils with Parallel Algorithms Usage. *J Automat Inf Scien* (2016). doi: 10.1615/JAutomatInfScien.v48.i10.10
276. Баркалов К.А.: *Методы параллельных вычислений* (2011)

277. Гергель, В.: Высокопроизводительные вычисления для многопроцессорных многоядерных систем: [учебник для вузов]. Суперкомпьютерное образование : СКО. Физматлит (2010)
278. OpenMP.org. <http://openmp.org/wp/>. Accessed 21 June 2016
279. Dagum, L., Menon, R.: OpenMP: an industry standard API for shared-memory programming. IEEE computational science and engineering **5**(1), 46–55 (1998)
280. ISO/IEC 9899:1999 - Programming languages - C. http://www.iso.org/iso/iso_catalogue/catalogue_ics/catalogue_detail_ics.htm?csnumber=29237 (2011)
281. 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”, 130–131 (2017)
282. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Верифікація та валідація комп'ютерного моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі. Тез. XXIX Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 141–143 (2017)

ДОДАТКИ

Додаток А. Довідки про впровадження результатів



МІНІСТЕРСТВО АГРАРНОЇ ПОЛІТИКИ ТА ПРОДОВОЛЬСТВА УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНА УСТАНОВА

«ІНСТИТУТ ОХОРОНИ ҐРУНТІВ УКРАЇНИ»
РІВНЕНСЬКА ФІЛІЯ ДУ «Держґрунтохорона»

вул. Рівненська, 3, с. Шубків, Рівненський район, Рівненська область, 35325;
тел. факс (0362) 27-35-31, тел. 27-35-06, 27-35-32;
www.iogu.gov.ua, e-mail: rivne@iogu.gov.ua

04.08.2016 №158–16/03/400

На № _____ від _____

Довідка

про впровадження результатів дисертаційної роботи

Жуковського Віктора Володимировича

«Математичне моделювання масоперенесення сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури»

Результати наукових досліджень Жуковського В.В. «Математичне моделювання масоперенесення сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури» впроваджено в роботі Рівненської філії ДУ «Держґрунтохорона» щодо врахування перенесення різного роду розчинних речовин у ґрунтових середовищах.

Розроблено математичну модель вертикальної міграції розчинних речовин у пористому ґрунтовому середовищі. Знайдено чисельний розв'язок поставленої крайової задачі. Для комп'ютерного моделювання розроблено програмний комплекс «NanoSurface». Він дозволяє легко керувати вихідними даними (коефіцієнтами дифузії, дисперсії, фільтрації, вологості, осмосу, пористості, крайовими умовами тощо), виконує необхідні обчислення, будує 2D/3D графіки та таблиці значень концентрацій солей, п'єзометричних напорів ґрунтових вод, швидкості фільтрації, напорів вологи, визначає ступінь засоленості ґрунтів тощо.

Наукові розробки Жуковського В.В. також використано Рівненською філією ДУ «Держґрунтохорона» для моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в пористому ґрунтовому середовищі, перенесення поживних речовин, мінеральних добрив, залишків хімізації сільськогосподарського виробництва у Рівненській області.

Отримані результати є вірогідними і свідчать про високий рівень обґрунтованості та достовірності отриманих математичних рішень, а також ефективності впровадження наукових розробок Жуковського В.В.

Директор Рівненської філії
ДУ «Держґрунтохорона»
кандидат с-г. наук



В.І. Долженчук



НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ АГРАРНИХ НАУК УКРАЇНИ

Інститут сільського господарства Західного Полісся НААН

35325, Рівненська область, Рівненський район, с. Шубківтел. 27-36-74, 26-69-73, e-mail: rivne_apv@ukr.net

Довідка
про використання результатів дисертаційної роботи
старшого викладача кафедри прикладної математики Національного
університету водного господарства та природокористування Жуковського
Віктора Володимировича

Дана довідка засвідчує те, що в Інституті сільського господарства Західного Полісся використано ряд результатів дисертаційної роботи старшого викладача кафедри прикладної математики Національного університету водного господарства та природокористування Жуковського Віктора Володимировича.

Розроблена математична модель міграції розчинених речовин в каталітичному пористому середовищі була адаптована для дослідження процесу вапнування. Зокрема, в якості меліоранта використовувалися шлами, одержані після очистки води, яка йшла на охолодження реакторів Рівненської АЕС. Проведені польові дослідження на демонстраційних ділянках показали високу точність натурних результатів в порівнянні з результатами комп'ютерного моделювання.

Практичною цінністю наукових досліджень Жуковського В.В. є створення програмного комплексу «NanoSurface», який є зручним для проведення чисельних експериментів процесів масоперенесення сольових розчинів в каталітичних пористих середовищах. Даний програмний комплекс використано в роботі Інституту сільського господарства Західного Полісся.

Директор Інституту сільського
 господарства Західного Полісся,
 професор, доктор
 сільськогосподарських наук



Польовий В.М

ТОВАРИСТВО З ОБМЕЖЕНОЮ ВІДПОВІДАЛЬНІСТЮ
« ВОЛИНЬСАПРОФОС »

Україна, вул. Незалежності, 38, с. Шкроби, Старовижівський район, Волинська область, 44432
ЄДРПОУ 32366052, тел. +38044 233-66-04, моб. +38068-564-8098

Вих. N _____ від 20 вересня 2018 року

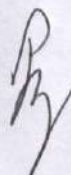
Довідка

про апробацію та використання результатів дисертаційних досліджень
Жуковського Віктора Володимировича
на тему: «Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури»

ТзОВ «Волиньсапрофос» (один із найбільших виробників 100% органічного добрива на основі сапропелю в Європі) засвідчує те, що результати наукових дисертаційних досліджень старшого викладача кафедри прикладної математики Національного університету водного господарства та природокористування Жуковського В.В. на тему: «Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури» використано при покращенні формули поліпшувача ґрунту та добрива, а також для вдосконалення технології виробництва, з метою отримання якісного добрива – SaproLife™.

ТзОВ «Волиньсапрофос» зацікавлено у подальшому проведенні чисельних експериментів в програмному комплексі NanoSurface. В рамках нелінійної постановки вертикальної міграції сольових розчинів в неізотермічних умовах досліджено сорбуючі властивості мікро- та наночастинок поліпшувача ґрунту SaproLife™. Отримані результати математичного та комп'ютерного моделювання будуть використані для процесу деактивації та утилізації токсичних речовин в ґрунті (радіоактивні речовини, нікотин, фенол тощо). Перший етап досліджень підтверджує адекватність розробленої математичної моделі, коректність чисельного розв'язку та валідацію програмного комплексу NanoSurface.

Директор



Е.А. Гончаров



№001-1333
20.09.2018р

Довідка
про використання у навчальному процесі
Національного університету водного господарства та природокористування
результатів досліджень, одержаних при виконанні дисертаційної роботи
Жуковського Віктора Володимировича
на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук

Науково-методичні розробки та результати досліджень старшого викладача кафедри прикладної математики Жуковського Віктора Володимировича, що викладені в його дисертаційній роботі, використано у навчальному процесі при виконанні кваліфікаційних, дипломних та магістерських робіт студентами освітніх програм «Прикладна математика» та «Комп'ютерні науки», а також при підготовці та читанні ряду тем з наступних дисциплін:

- «Теорія систем та математичне моделювання»
Тема 8. Деякі спеціальні математичні моделі фільтрації
Тема 9. Математичні моделі масопереносу в пористих середовищах
- «Математичне і комп'ютерне моделювання природних та техногенних процесів»
Тема 1. Математичне і комп'ютерне моделювання ідентифікації місцеположення джерела забруднення в одновимірних задачах масопереносу
- «Паралельні та розподілені обчислення»
Тема 7. Метод прогонки та варіанти його розпаралелення

Проректор з наукової роботи
та міжнародних зв'язків
д.е.н., професор

Мартинюк Петро Миколайович 0673576248



Н.Б. Савіна



УКРАЇНА

РІВНЕНСЬКА РАЙОННА ДЕРЖАВНА АДМІНІСТРАЦІЯ
РІВНЕНСЬКОЇ ОБЛАСТІ
УПРАВЛІННЯ ЕКОНОМІКИ,
ІНФРАСТРУКТУРИ ТА ІНВЕСТИЦІЙНОЇ ДІЯЛЬНОСТІ

вул. Соборна, 195, м. Рівне, 33001, тел. (036-2) 63-61-42
E-mail: yeiid@ukr.net Код в ЄДРПОУ 40708689

Довідка

про впровадження результатів дисертаційних досліджень

Жуковського Віктора Володимировича**«Математичне моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури»**

Управління економіки, інфраструктури та інвестиційної діяльності Рівненської районної державної адміністрації в рамках виконання завдань щодо державної політики, спрямованої на розвиток агропромислового комплексу та гарантування продовольчої безпеки держави, державної аграрної політики та політики у сфері екології здійснює аналіз статистичних показників діяльності агропромислового комплексу, сприяє організації органічного виробництва сировини та екологічно чистих продуктів харчування, розробляє і вносить пропозиції з питань збереження, відтворення та охорони родючості ґрунтів, консервації деградованих і малопродуктивних земель, а також бере участь у проведенні агрохімічної паспортизації земель сільськогосподарського призначення.

У зв'язку з цим, для виконання деяких завдань управління використовувало програмний комплекс NanoSurface, який було розроблено в результаті наукових досліджень, одержаних при виконанні дисертаційної роботи старшого викладача кафедри прикладної математики Національного університету водного господарства та природокористування Жуковського В.В. на тему: «Математичне моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури». Це дозволило сформулювати ефективні стратегії оцінки ризику та прогнозування міграції різного роду речовин в ґрунтових масивах при розробленні проєктів прогнозів економічного і соціального розвитку області на середньо- та короткостроковий період.

Начальник управління економіки,
інфраструктури та інвестиційної діяльності
Рівненської районної державної адміністрації



В.ЛЕОНОВ

Додаток Б. Список опублікованих праць за темою дисертації

Праці, в яких опубліковані основні наукові результати 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). doi: 10.1007/s10891-017-1697-4
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.* **2**, 40–46 (2017)
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* **4**(2), 117–125 (2017)
4. Жуковський, В.В.: Про деякі підходи до створення програмних комплексів комп'ютерного моделювання підземних процесів. *Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського* **2**(103), 64–73 (2017)
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* **12**, 161–172 (2015)
6. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі. *Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук.* **1**, 89–95 (2015)
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* **2**(39), 60–69 (2017)

8. Жуковський, В.В.: Комп'ютерна програма "NanoSurface" (моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури)" Авторське свідоцтво на твір №68776
9. Vlasyuk, A.P., Zhukovskyu, 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). doi: 10.15863/TAS.2016.12.44.14
10. Zhukovskyu, V.V., Vlasyuk, A.P.: Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in catalytic porous media in non-isothermal conditions. *Research on modern systems for manufacture and measurement of components of machines and devices SCIENCE REPORT Project CIII-PL-0007*, 177–190 (2016)

Праці, що засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

11. Vlasyuk, A.P., Zhukovskyu, 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*, 208–219 (2015)
12. Vlasyuk, A.P., Zhukovskyu, 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”*, 110–111 (2014)
13. Vlasyuk, A.P., Zhukovskyu, 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”*, 122–124 (2016)
14. Vlasyuk, A.P., Zhukovskyu, 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”, 130–131 (2017)

15. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі. Тез. XIV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука, 111 (2012)
16. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності дрен-вловлювачів в нелінійному випадку. Тез. XXII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 62 (2013)
17. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах. Тез. Міжнар. науково-практичної конф. «Проблеми розвитку вищої школи та економіки в XXI столітті», 77–79 (2013)
18. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів у лінійному випадку. Тез. XIX Всеукр. наукова конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики», 41–42 (2013)
19. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів. Тез. Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів», 42 (2013)
20. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах. Тез. XXI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 105–107 (2013)

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. Тез. VI Міжнар. наук. конф. "Сучасні проблеми математичного моделювання, прогнозування та оптимізації", 32–33 (2014)
22. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому біпористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів. Тез. XXIII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 75–76 (2014)
23. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів у нелінійному випадку. Тез. XV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука, 72 (2014)
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. Тез. I Міжнар. XX Всеукр. наукова конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики», 51–52 (2014)
25. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному випадку. Тез. Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів», 44 (2015)
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", 89 (2015)
27. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному середовищі з пастками. Тез. XXVI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 61–63 (2015)

28. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Математичне моделювання міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному нелінійному випадку. Тез. XXV Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 154–155 (2015)
29. Власюк, А.П., Жуковський, В.В.: Верифікація та валідація комп'ютерного моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі. Тез. XXIX Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності", 141–143 (2017)
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, 342–345 (2016)
31. Vlasyuk, A.P., Kochan, R.V., Zhukovskyy, V.V., Zhukovska, N.A.: Mathematical and computer modeling of contaminant migration to filter trap in two-dimensional nonlinear case. 18th International Multidisciplinary Scientific Geosconference SGEM 2018 **18**(2.2), 293–300 (2018)
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", 20–22 (2018)

Додаток В. Відомості про апробацію результатів дисертації

Таблиця В.1

Перелік конференцій, хакатонів та інших заходів щодо апробації результатів дисертації

№ п/п	Назви конференції, конгресу, симпозиуму, семінару, школи	Місце проведення	Дата проведення	Форма участі
1	XIV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука	Київ, Україна	19-21 квітня 2012	очна
2	Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів»	Рівне, Україна	22-23 лютого 2013	очна
3	XXI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"	Східниця, Україна	13-17 травня 2013	заочна
4	XIX Всеукр. наукова конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики»	Львів, Україна	15-17 травня, 2013	очна
5	XXII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"	Ялта-Форос, Україна	23-27 вересня 2013	очна
6	Міжнар. науково-практичної конф. «Проблеми розвитку вищої школи та економіки в XXI столітті»	Рівне, Україна	3-4 жовтня 2013	очна
7	VI Міжнар. наук. конф. "Сучасні проблеми математичного моделювання, прогнозування та оптимізації"	Кам'янець-Подільський, Україна	4-5 квітня 2014	очна
8	XX Всеукр. наукова конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики»	Львів, Україна	7-9 квітня 2014	заочна
9	XXIII Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"	Мукачево, Україна	12-16 травня 2014	очна
10	XV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука	Київ, Україна	14-17 травня, 2014	очна
11	XXIV International Conference "Problems of decision making under uncertainties"	Cesky Rudolec, Czech Republic	1-5 вересня 2014	заочна
12	Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів»	Рівне, Україна	19-22 лютого 2015	очна
13	XXV Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"	Східниця, Україна	11-15 травня 2015	очна

Продовження таблиці В.1

14	XXVI Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"	Одеса, Україна	24-28 серпня 2015	очна
15	XXI Всеукраїнська наукова конференція «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики»	Львів, Україна	24-25 вересня 2015	очна
16	П'ята Міжнародна наукова конференція студентів, аспірантів та молодих вчених "Теоретичні та прикладні аспекти кібернетики" ТААС'2015	Київ, Україна	23-27 листопада 2015	очна
17	XV Минский международный форум по тепло-и массообмену	Мінськ, Білорусь	23-26 травня, 2016	заочна
18	XXVIII International Conference “Problems of decision making under uncertainties”	Brno, Czech Republic	серпень 25-30 2016	заочна
19	XXIX Міжнар. наук. конф. "Прийняття рішень в умовах невизначеності"	Мукачєво, Україна	10-13 травня 2017	очна
20	XXX International Conference “Problems of decision making under uncertainties”	Vilnius, Lithuania	14-19 серпня 2017	заочна
21	America House Civic Tech Camp 2017	Київ, Україна	14-15 грудня 2017	очна
22	Всеукраїнський хакатон аграрних інновацій 2018	Київ, Україна	23-25 лютого 2018	очна
23	18th International Multidisciplinary Scientific Geosconference SGEM 2018	Albena, Bulgaria	02-09 липня 2018	заочна
24	Міжнародна конференція "Мікро- та нано-неоднорідні матеріали: моделі та експеримент"	Львів, Україна	17-18 вересня 2018	очна

Додаток Г. Результати чисельних експериментів

Таблиця Г.1

Результати чисельних експериментів для значень концентрації $c_1(x)$ в залежності від глибини x із врахуванням дифузії у частинках

x	Часові кроки											
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
0	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	0,0000
	5,0000	6,1576	6,5183	6,6063	6,5856	6,5106	6,4109	6,3043	6,2001	6,1029	6,0144	
	5,0000	6,5930	7,2765	7,4938	7,5074	7,4282	7,3079	7,1726	7,0354	6,9027	6,7778	
	5,0000	6,7574	7,6472	7,9851	8,0444	7,9806	7,8638	7,7265	7,5842	7,4443	7,3104	
	5,0000	6,8196	7,8286	8,2764	8,3893	8,3481	8,2408	8,1072	7,9660	7,8257	7,6903	
	5,0000	6,8430	7,9168	8,4569	8,6278	8,6135	8,5180	8,3897	8,2508	8,1114	7,9762	
	5,0000	6,8519	7,9591	8,5703	8,7995	8,8149	8,7329	8,6106	8,4743	8,3360	8,2011	
	5,0000	6,8552	7,9791	8,6411	8,9249	8,9717	8,9044	8,7888	8,6553	8,5181	8,3834	
	5,0000	6,8565	7,9882	8,6843	9,0160	9,0944	9,0429	8,9344	8,8040	8,6678	8,5331	
	5,0000	6,8568	7,9919	8,7090	9,0798	9,1888	9,1536	9,0528	8,9257	8,7906	8,6558	
	5,0000	6,8568	7,9923	8,7202	9,1203	9,2573	9,2387	9,1462	9,0226	8,8885	8,7534	
	5,0000	6,8562	7,9894	8,7190	9,1378	9,2993	9,2975	9,2138	9,0940	8,9610	8,8251	
	5,0000	6,8544	7,9811	8,7022	9,1287	9,3107	9,3258	9,2516	9,1361	9,0038	8,8668	
	5,0000	6,8496	7,9610	8,6607	9,0838	9,2820	9,3145	9,2510	9,1402	9,0086	8,8694	
	5,0000	6,8369	7,9150	8,5749	8,9833	9,1945	9,2460	9,1954	9,0900	8,9586	8,8159	
	5,0000	6,8028	7,8111	8,4053	8,7877	9,0098	9,0845	9,0510	8,9528	8,8208	8,6718	
	5,0000	6,7121	7,5796	8,0689	8,4081	8,6392	8,7462	8,7400	8,6538	8,5204	8,3594	
	5,0000	6,4701	7,0646	7,3717	7,6139	7,8306	7,9819	8,0295	7,9729	7,8408	7,6570	
	5,0000	5,8251	5,9202	5,8936	5,8990	5,9723	6,0872	6,1772	6,1792	6,0762	5,8853	
	5,0000	4,1396	3,6633	3,3797	3,2189	3,1443	3,1214	3,1146	3,1010	3,0503	2,9560	
	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Таблиця Г.2

Результати чисельних експериментів для значень концентрації $c_2(x)$ в залежності від глибини x із врахуванням дифузії у частинках

x	Часові кроки										
	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	0,0000
	5,0000	2,4510	1,5422	1,0631	0,7719	0,5810	0,4497	0,3564	0,2884	0,2380	0,2001
	5,0000	2,4497	1,5404	1,0612	0,7699	0,5788	0,4472	0,3536	0,2853	0,2346	0,1963
	5,0000	2,4497	1,5406	1,0620	0,7712	0,5806	0,4495	0,3563	0,2883	0,2378	0,1997
	5,0000	2,4497	1,5407	1,0623	0,7720	0,5817	0,4510	0,3580	0,2903	0,2399	0,2020
	5,0000	2,4497	1,5408	1,0625	0,7724	0,5824	0,4519	0,3592	0,2916	0,2415	0,2037
	5,0000	2,4497	1,5408	1,0626	0,7726	0,5829	0,4526	0,3600	0,2927	0,2427	0,2050

Таблиця Г.4

Результати чисельних експериментів для значень концентрації $c_1(x)$ в залежності від глибини x без врахування дифузії у частинках

x										9
	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000
	5,0000	6,9977	7,9136	8,1676	7,9395	7,7636	7,6172	7,4642	7,3128	7,1672
	5,0000	7,7495	9,2066	9,3759	9,0758	8,9014	8,7375	8,5622	8,3907	8,2251
	5,0000	8,0335	9,8595	9,9989	9,6925	9,5256	9,3523	9,1691	8,9923	8,8220
	5,0000	8,1408	10,2384	10,4158	10,1194	9,9541	9,7722	9,5834	9,4026	9,2287
	5,0000	8,1813	10,4718	10,7335	10,4494	10,2814	10,0920	9,8988	9,7143	9,5371
	5,0000	8,1967	10,6184	10,9925	10,7193	10,5466	10,3509	10,1539	9,9660	9,7855
	5,0000	8,2024	10,7105	11,2117	10,9477	10,7690	10,5681	10,3678	10,1766	9,9931
	5,0000	8,2046	10,7680	11,4008	11,1451	10,9593	10,7542	10,5509	10,3566	10,1702
	5,0000	8,2053	10,8031	11,5649	11,3176	11,1235	10,9152	10,7092	10,5120	10,3229
	5,0000	8,2053	10,8228	11,7065	11,4690	11,2644	11,0543	10,8460	10,6459	10,4542
	5,0000	8,2046	10,8302	11,8259	11,6008	11,3825	11,1727	10,9621	10,7591	10,5650
	5,0000	8,2025	10,8246	11,9211	11,7133	11,4758	11,2692	11,0563	10,8503	10,6539
	5,0000	8,1968	10,8002	11,9875	11,8043	11,5389	11,3402	11,1248	10,9157	10,7172
	5,0000	8,1815	10,7422	12,0157	11,8695	11,5616	11,3782	11,1598	10,9472	10,7468
	5,0000	8,1408	10,6189	11,9878	11,8996	11,5255	11,3688	11,1467	10,9297	10,7278
	5,0000	8,0322	10,3624	11,8655	11,8766	11,3975	11,2835	11,0576	10,8346	10,6315
	5,0000	7,7426	9,8078	11,5445	11,7599	11,1127	11,0586	10,8323	10,5996	10,3949
	5,0000	6,9707	8,4705	10,5937	11,4083	10,5135	10,5146	10,3032	10,0527	9,8416
	5,0000	4,9536	5,3598	7,0260	9,8697	8,8289	8,7735	8,6194	8,3321	8,0797
	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Таблиця Г.5

Результати чисельних експериментів для значень концентрації $c_2(x)$ в залежності від глибини x без врахування дифузії у частинках

x											
	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	5,0000	0,0000
	5,0000	4,1927	3,5207	2,9601	2,4917	2,0995	1,7712	1,4964	1,2662	1,0735	0,9121
	5,0000	4,1923	3,5208	2,9613	2,4934	2,1013	1,7730	1,4979	1,2674	1,0743	0,9124
	5,0000	4,1923	3,5213	2,9628	2,4956	2,1042	1,7764	1,5018	1,2717	1,0788	0,9172
	5,0000	4,1923	3,5215	2,9635	2,4969	2,1060	1,7786	1,5043	1,2745	1,0818	0,9204
	5,0000	4,1923	3,5215	2,9640	2,4978	2,1073	1,7802	1,5062	1,2765	1,0841	0,9227
	5,0000	4,1923	3,5215	2,9642	2,4985	2,1083	1,7814	1,5076	1,2782	1,0859	0,9246
	5,0000	4,1923	3,5216	2,9644	2,4989	2,1090	1,7825	1,5088	1,2795	1,0874	0,9262
	5,0000	4,1923	3,5216	2,9645	2,4993	2,1097	1,7833	1,5099	1,2807	1,0886	0,9276

