

Міністерство освіти і науки України
Національний університет водного господарства та
природокористування



Національний університет
водного господарства
та природокористування

А. П. Власюк, В. В. Жуковський, Н. А. Жуковська

**Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу
при фільтрації сольових розчинів в середовищах пористої
та нанопористої структури**



Національний університет
водного господарства
Монографія
та природокористування

Рівне 2022

УДК 519.6:544.431.11:544.016.5-022.53

B58

Рецензенти:

Костробій П. П., доктор фіз.-мат. наук, професор, завідувач кафедри прикладної математики Львівського національного університету ім. І. Франка;

Калюх Ю. І., доктор техн. наук, професор, провідний науковий співробітник Інституту телекомунікацій та глобального інформаційного простору НАН України;

Сафоник А. П., доктор техн. наук, професор, професор кафедри автоматизації, електротехнічних та комп'ютерно-інтегрованих технологій Національного університету водного господарства та природокористування, м. Рівне.

*Рекомендовано вченою радою Національного університету
водного господарства та природокористування.*

Протокол № 11 від 18 грудня 2020 р.

Рекомендовано вченою радою

Національного університету «Острозька академія».

Протокол № 11 від 29 квітня 2021 р.

Власюк А. П., Жуковський В. В., Жуковська Н. А.

B58 Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу при фільтрації сольових розчинів в середовищах пористої та нанопористої структури: монографія. – Рівне : НУВГП, 2022. – 178 с.

ISBN 978-966-327-523-9

В монографії досліджено процеси масопереносу при фільтрації сольових розчинів в середовищах пористої та нанопористої структури. Побудовано відповідні математичні моделі даних процесів, які досліджено з використанням чисельних методів. Розроблено відповідне програмне забезпечення, проведено комп'ютерне моделювання та аналіз отриманих результатів.

Для наукових працівників, інженерів, викладачів, аспірантів, магістрів та студентів, які цікавляться математичним моделюванням із використанням каталітичних пористих частинок для забезпечення розвитку ефективних стратегій оцінки стану процесів підземної гідромеханіки.

УДК 519.6:544.431.11:544.016.5-022.53

ISBN 978-966-327-523-9

© А. П. Власюк, В. В. Жуковський,
Н. А. Жуковська, 2022

© Національний університет
водного господарства та
природокористування, 2022

Зміст

ВСТУП	6
РОЗДІЛ 1 ОСНОВНІ МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ПРОЦЕСУ ФІЛЬТРАЦІЇ СОЛЬОВИХ РОЗЧИНІВ В КАТАЛІТИЧНИХ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ.....	7
1.1. Актуальність питання.....	7
1.2. Огляд наукової літератури з математичного моделювання процесу масопереносу в каталітичних пористих середовищах	11
1.3. Фізичні закони, що описують процеси масопереносу при фільтрації сольових розчинів в каталітичних пористих середовищах	15
1.4. Експериментальні дослідження деяких параметрів фільтрації сольових розчинів	16
1.5. Математичні моделі досліджуваних процесів	19
1.5.1. Вихідні диференціальні рівняння та залежності	19
1.5.2. Початкові та граничні умови	20
1.6. Огляд математичних моделей масопереносу в міро- та наносередовищах.....	22
1.6.1. Математична модель дифузії в гранулах адсорбента.....	22
1.6.2. Математична модель дифузії в біпористих частинках.....	23
1.6.3. Математична модель дворівневого однокомпонентного адсорбційного масопереносу в каталітичному середовищі частинок мікропористої структури.....	25
1.6.4. Математична модель міграції забруднених речовин при фільтрації підземних вод в каталітичному пористому середовищі з пастками	27
1.6.5. Математична модель міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод в каталітичному пористому середовищі в нелінійному випадку	30
1.6.6. Математична модель міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод в каталітичному пористому середовищі в нелінійному випадку та неізотермічних умовах	33
1.7. Аналіз програмних продуктів комп'ютерного моделювання підземних процесів.....	35
РОЗДІЛ 2 МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЕРТИКАЛЬНОЇ МІГРАЦІЇ РАДІОНУКЛІДІВ ПРИ ФІЛЬТРАЦІЇ ПІДЗЕМНИХ ВОД У КАТАЛІТИЧНИХ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ В ЛІНІЙНІЙ ПОСТАНОВЦІ	45

2.1.	Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтровловлювача у каталітичних пористих середовищах в ізотермічних умовах.....	45
2.1.1.	Постановка задачі та її математична модель.....	45
2.1.2.	Чисельний розв'язок крайової задачі.....	47
2.1.3.	Результати чисельних експериментів та їх аналіз.....	52
2.2.	Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтровловлювача у каталітичних пористих середовищах в неізотермічних умовах.....	56
2.2.1.	Постановка задачі та її математична модель.....	56
2.2.2.	Чисельний розв'язок крайової задачі.....	59
2.2.3.	Результати чисельних експериментів та їх аналіз.....	66
2.3.	Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтровловлювача в каталітичних пористих середовищах з пастками.....	68
2.3.1.	Постановка задачі.....	68
2.3.2.	Чисельний розв'язок крайової задачі.....	71
2.3.3.	Результати чисельних експериментів та їх аналіз.....	72
РОЗДІЛ 3 МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МІГРАЦІЇ РАДІОНУКЛІДІВ ПРИ ФІЛЬТРАЦІЇ ПІДЗЕМНИХ ВОД У КАТАЛІТИЧНИХ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ В РАМКАХ НЕЛІНІЙНОЇ ОДНОВИМІРНОЇ МОДЕЛІ.....		79
3.1.	Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтровловлювача у каталітичних пористих середовищах в ізотермічних умовах.....	79
3.1.1.	Постановка задачі та її математична модель.....	79
3.1.2.	Чисельний розв'язок крайової задачі.....	81
3.1.3.	Результати чисельних експериментів та їх аналіз.....	85
3.2.	Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтровловлювача у каталітичних пористих середовищах в неізотермічних умовах.....	88
3.2.1.	Постановка задачі та її математична модель.....	88
3.2.2.	Методика побудови чисельного розв'язку.....	91
РОЗДІЛ 4 МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДВОВИМІРНОЇ МІГРАЦІЇ РАДІОНУКЛІДІВ ПРИ ФІЛЬТРАЦІЇ		

ПІДЗЕМНИХ ВОД ДО СИСТЕМИ ГОРИЗОНТАЛЬНИХ ФІЛЬТРІВ-ВЛОВЛЮВАЧІВ У КАТАЛІТИЧНОМУ ПОРИСТОМУ СЕРЕДОВИЩІ103

4.1. Постановка задачі та її математична модель 103

4.2. Чисельний розв'язок крайової задачі106

4.3. Результати комп'ютерного моделювання.....116

РОЗДІЛ 5 ПРОЕКТУВАННЯ ТА РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО

КОМПЛЕКСУ NANOSURFACE.....124

5.1. Архітектура розробленого програмного комплексу124

5.1.1. Ієрархія класів основних математичних моделей124

5.1.2. Архітектурний патерн для розділення логіки роботи і користувачького інтерфейсу127

5.1.3. Користувачький інтерфейс програмного комплексу NanoSurface128

5.1.4. Інструментарій розробника програмного забезпечення для комп'ютерного моделювання.....130

5.1.5. Порівняльна характеристика вихідного коду програмних комплексів132

5.2. Верифікація програмного коду133

5.2.1. Постановка тестової задачі134

5.2.2. Математична модель процесу134

5.2.3. Аналітичний розв'язок135

5.2.4. Чисельний розв'язок136

5.2.5. Порівняльні результати комп'ютерного моделювання з аналітичним розв'язком139

5.3. Застосування паралельних обчислень.....140

5.3.1. Актуальність паралельних обчислень.....140

5.3.2. Постановка завдання141

5.3.3. Ефективність паралельних обчислень142

5.3.4. Особливості реалізації паралельних обчислень та їх аналіз145

Список використаних джерел151

ВСТУП

В результаті негативного впливу техногенних факторів відбувається забруднення біосфери, зокрема родючих земель різного роду солями та, зокрема, радіоактивними речовинами. Наприклад, повільна міграція радіонуклідів впливає на ріст рослин і це призводить до зовнішнього опромінення. Разом з тим, швидка міграція може призвести до забруднення підземних вод. Тому вчені давно шукають механізми для прогнозування впливу на навколишнє середовище радіоактивних осадів та його подальше очищення. Вивчення і моделювання даних процесів є важливим для прогнозування їх довготермінової поведінки.

З розвитком технічних засобів людству стали доступні дослідження на мікро- і нанорівні, що призвело до виникнення відповідних наукових шкіл. 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. Колоїдами або наночастинками в ґрунті називають природоутворюючі мінеральні фрагменти, гумінові і фульвокислоти, мінеральні осади, мікроорганізми і штучні елементи, розміри яких лежать в діапазоні від 1 нм до 1000 нм. Транспортні властивості колоїдів у поєднанні з масопереносом сольових розчинів в пористих та нанопористих середовищах призводять до різкої зміни міграційної поведінки. Разом з тим, колоїди можуть відігравати роль сорбентів (цеоліти, органічні добрива). Таким чином, поєднання особливостей колоїдів із сучасними засобами механізації, дозволяє пришвидшити процес очищення забруднених територій завдяки застосуванню новітніх технологій меліорації, зокрема застосуванню фільтрів-вловлювачів, нетрадиційних органічних добрив із сорбуючими мікрочастинками, тощо.

Оскільки математичне моделювання із застосуванням колоїдів-адсорбентів до процесів очищення є новим, важливого значення набувають побудова та дослідження нових математичних моделей з метою отримання фундаментального розуміння різних процесів хімічної і фізичної міграційної поведінки з використанням каталітичних пористих частинок. Це забезпечить в майбутньому розвиток ефективних стратегій оцінки ризику та прогнозування очищення ґрунтових масивів.

Дану монографію присвячено побудові нових та вдосконаленню існуючих математичних моделей масопереносу при фільтрації сольових розчинів в середовищах пористої та нанопористої структури, розвитку та використанню обчислювальних алгоритмів для чисельного розв'язування відповідних крайових задач та побудові програмних комплексів для проведення комп'ютерного моделювання.

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 [1–7]. 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) [8]. 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 [9].

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 [10]. 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 (рис. 1.1). 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 [9].

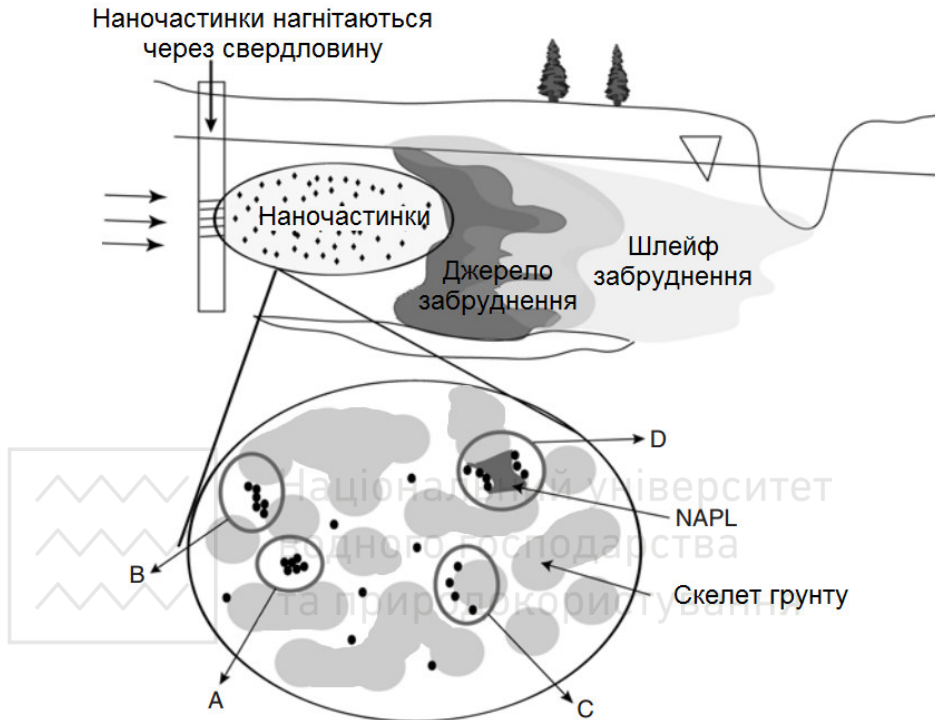


Рис. 1.1. Ілюстрація застосування ін'єкції наночастинок при розповсюдженні DNAPL забруднення: (A) наночастинок можуть об'єднуватися (агломерація) і згодом фільтруватися в скелеті ґрунту (B) або приєднуватися до нього (C), нові методи «полювання» наночастинок на забруднення (D)

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 [11–14]. Ці властивості можуть бути налаштовані у відповідності до задачі, що вирішується [15]. Наприклад, органічні забруднення стануть активно реагувати з цими частинками задля зменшення утворення небажаних

токсичних побічних продуктів. Високоактивні наночастинки, такі як нанорозмірне нуль валентне залізо (NZVI), нанокаталізатори (наприклад, біметалеві наночастинки 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 [16].

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» [17; 18].

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 [19–21]. 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 [22–24], 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 [21].

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 [25]. Такий дренаж представляє собою систему вертикальних або горизонтальних дрен-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.

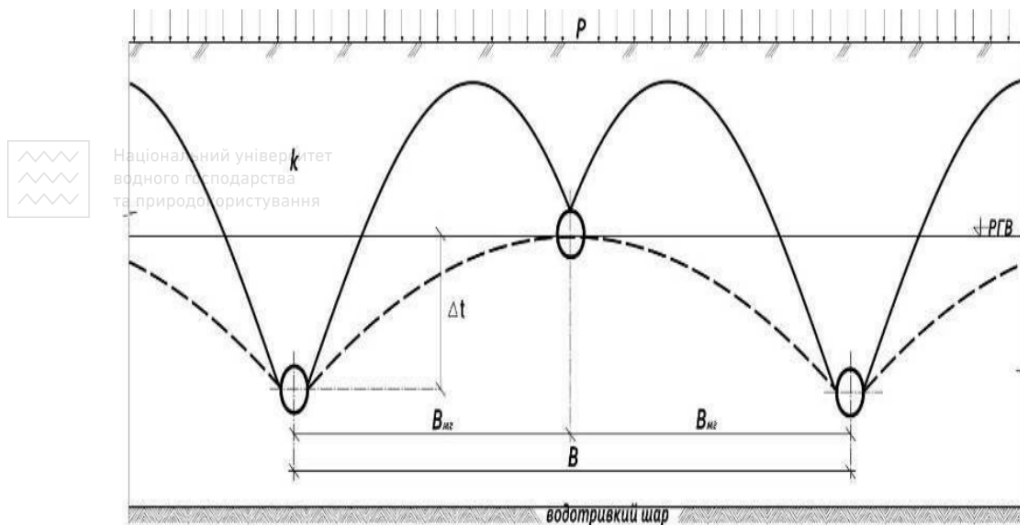


Рис. 1.3. Дренажно-модульна система для регулювання водного режиму

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 [26]. 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 [27; 28]. Разом з тим, швидка міграція може призвести до забруднення підземних вод [29]. 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. [30],

Веригіна М.М. [31], Сергієнка І.В. [32; 33], Скопецького В.В. [32; 34; 35], Дейнеки В.С. [36; 37], Ляшка І.І. [38], Ляшка С.І. [39], Лаврика В.І. [40; 41], Патрашева О.М. [42], Шержукова Б.С. [31], Ніколаєвського В.М. [43–46], Бочевера Ф.М. [47–51], Кривоноса Ю.Г. [52; 53], Трофимчука О.М. [54–58], Власюка А.П. [59–64], Бомби, А.Я. [41], Булавацького В.М. [65], Мокіна В.Б. [66–70], Савули Я.Г. [71–75], Шинкаренка Г.А. [72], Чернухи О.Ю. [76; 77], Бейка І.В. [78–81], Акіменка В.В. [82–85], Ликова О.В. [86–91], Михайлова Ю. А. [86; 90; 92], Демченка Л.І., Ковальчука П.І. [93], Мартинюка П.М. [94–98], Сафоника А.П. [99–102], Степанченко О.М. [103; 104], Остапчук О.П. [59; 105], Богаєнка В.О. [106–108], Жуковської Н.А. [109; 110] та ін. [111–116], надала математичні описи проблем підземного масопереносу, методи їх розв'язку, а також співставлення результатів з даними спостережень та експериментів [117].

Наступним етапом було врахування дифузії нуклідів, міграція яких представляє радіологічну цікавість. Відповідні математичні моделі розроблені Прохоровим В.М., Токарчуком М.В., Гончаруком В.С., Власюком А.П., Бураком Я. Й., Чаплею Є.Я., Чернухою О.Ю., Bossew P., Kirchner G. [118–134].

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 [110; 135–146].

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. [147]. Надалі цей напрямок було підтримано Волощуком А.М., Уліном В.І. та ін [148]. Паралельно колектив вчених у складі Ruckenstein E., Vaidyanathan A.S, Youngquist G.R опублікував роботу, яка описувала процеси сорбції в біпористих структурах [149]. Порівняльну характеристику двох вищенаведених моделей з докладним описом їх переваг і недоліків провів І. І. Бекман [150].

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 [151]. Також вчені Karger J.,

Ruthven D.M., внесли значний вклад в розвиток фундаментального розуміння адсорбції і дифузії в цеолітах [152; 153], а також їх промислового застосування. Одним з результатів їхніх 40-річних досліджень була публікація книги «Diffusion in nanoporous materials» [154].

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) [155–168]. 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 [156].

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 [169]. Колоїдами або наночастинками в ґрунті називають природоутворюючі мінеральні фрагменти, гумінові і фульвокислоти, мінеральні осадки і мікроорганізми. Їхні розміри лежать в діапазоні від 1 нм до 1000 нм [170]. Транспортні властивості колоїдів у поєднанні з вертикальною міграцією радіонуклідів призводять до різкої зміни міграційної поведінки [171–174]. 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 [154; 175; 176]. Також неізотермічні процеси адсорбції та десорбції в нанопористих каталітичних частинках добре описуються ізотермами адсорбції [177]. Надкритичні рідини демонструють яскраво виражену дію закону Арреніуса [178] 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.

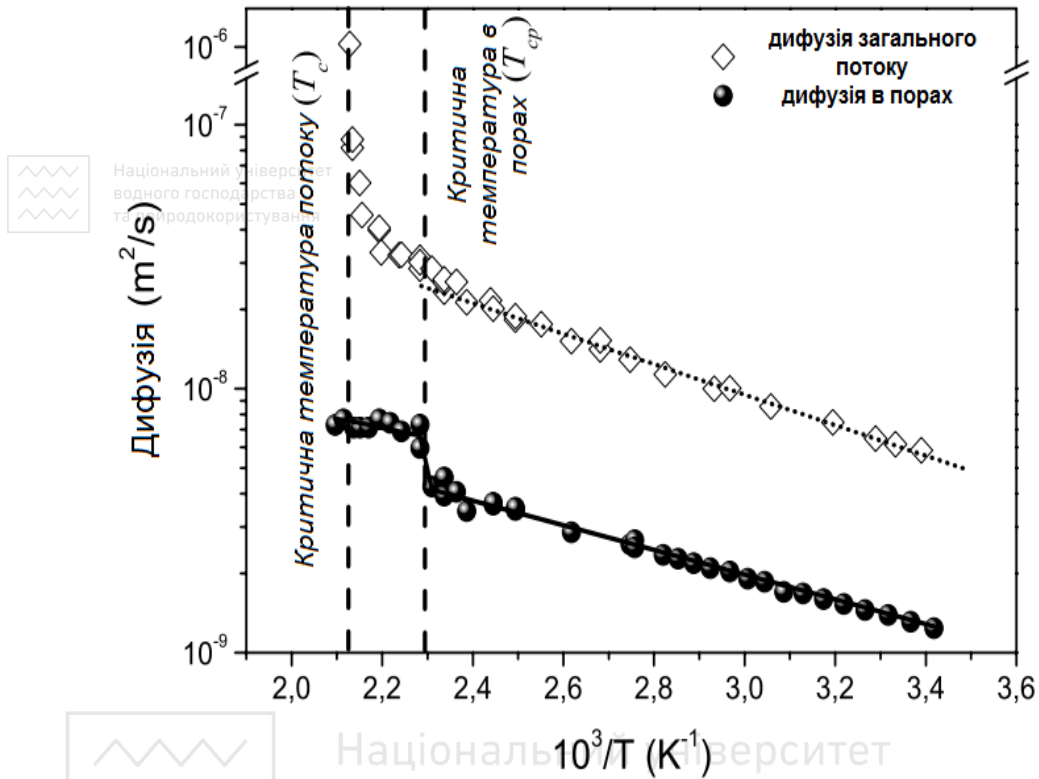


Рис. 1.4. Порівняльна залежність коефіцієнтів дифузії загального потоку та в мезопорах від температури [178]

Разом з тим, як вже згадувалося вище, колоїди можуть відігравати роль сорбентів (цеоліти, органічні добрива) [179]. Особливості колоїдів разом з поєднанням сучасних засобів механізації дозволяють пришвидшити процес очищення забруднених територій завдяки застосуванню новітніх технологій меліорації, фільтрів-вловлювачів [180] та інших технологій, що були описані в попередньому підрозділі.

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 сольових розчинів в каталітичних пористих середовищах

Узагальнений закон Дарсі-Герсеванова на випадок руху сольових розчинів при наявності градієнта температури має вигляд [181]

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

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 [181] 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 [181] $\mathbf{q}_T = \rho c_p \mathbf{v}T - \lambda_T \nabla T$, 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 [182]. 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

Аррениуса [151; 178; 183]. Однак все ще залишається багато незрозумілих речей, над якими працюють дослідники зі свого світу.

1.4. Експериментальні дослідження деяких параметрів фільтрації сольових розчинів



ВОДНОГО ГОСПОДАРСТВА
ТА ПРИРОДОКОРИСТУВАННЯ

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 [181; 184].

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 [117; 139]. 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. 1.5):

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

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 [38; 185].

На рис 1.5 наведені графіки залежностей коефіцієнта фільтрації від температури для каоліну та гумбрину [185]. Як видно, для гумбрину в інтервалі температур від 3° С до 70° С коефіцієнт фільтрації зростає на чотири порядки.

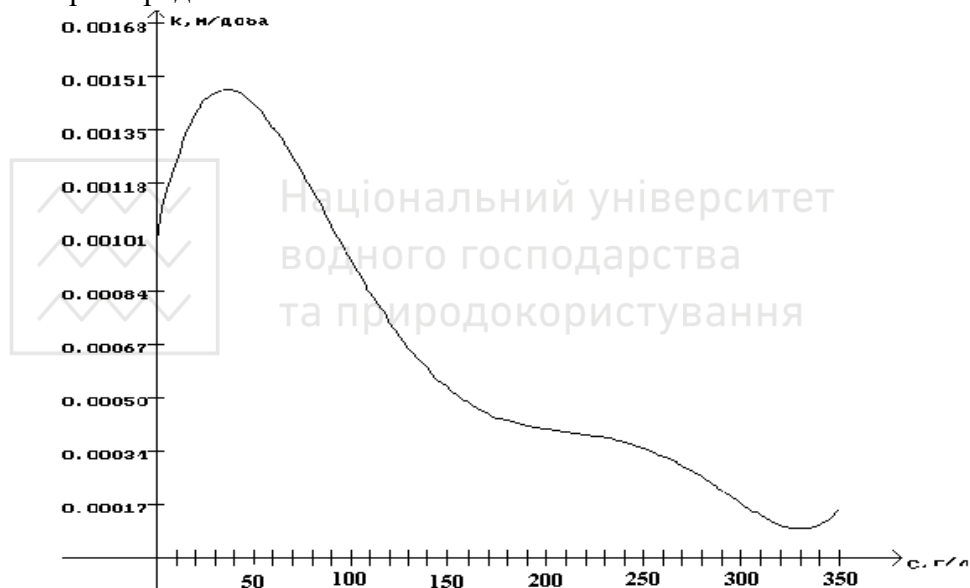


Рис. 1.5. Залежність коефіцієнта фільтрації піщаного ґрунту від концентрації сольового розчину

Залежність коефіцієнта фільтрації від температури визначалась апроксимацією за методом найменших квадратів результатів експериментів, наведених в [185] 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.

Оскільки комплексні експериментальні дані щодо одночасної залежності коефіцієнта фільтрації від концентрації сольового 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°C .

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 (табл. 1.2).

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

Національний університет
водного господарства
та природокористування

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

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) ефективної 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 солевих 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

$$Q_0 = -D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} - D_T \frac{\partial T}{\partial r}.$$

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 отримаємо 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

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

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

Межа (частина межі) Γ області Ω непроникна

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

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

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

гранична умова.

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

$q(\mathbf{X}, r, t)|_{r=R} = k \cdot c(\mathbf{X}, t)$ – умова рівноваги на поверхні сферичних частинок, де $k = \frac{q_\infty}{c_\infty}$ – константа адсорбційної рівноваги.

$$q(\mathbf{X}, r, 0)|_{r=R} = Q_0$$
 – 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

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

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

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

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

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

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. [147] 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 мікрвключенні 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 [149] Ruckenstein E., Vaidyanathan A. S, та Youngquist G. R розроблена наступна математична модель, що описує процеси сорбції в біпористих структурах (рис. 1.6) [150].

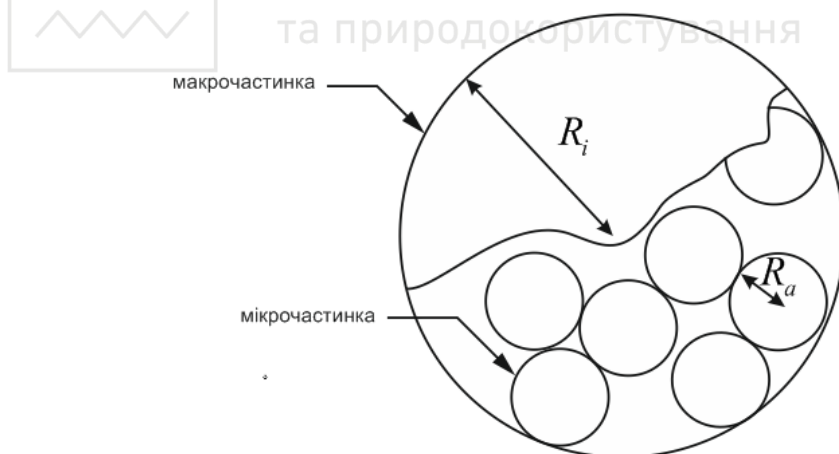


Рис. 1.6. Гранула біпористого сорбента



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

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

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;

$$D_a = \frac{D_a}{1 + \frac{\Gamma_a S_a}{\xi_a}};$$
$$D_i = \frac{D_a}{1 + \frac{\Gamma_i S_i}{\xi_i}},$$

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:



Національний університет
водного господарства
та природокористування

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

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

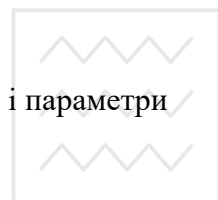
$$\theta_a(0, \eta) = 0, \quad \theta_i(0, \gamma) = 0, \quad \theta_a(\tau, 1) = \theta_a(\tau, \eta), \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial \theta_a(\tau, 0)}{\partial \eta} = 0, \quad \frac{\partial \theta_i(\tau, 0)}{\partial \gamma} = 0.$$

Тут

$$\theta_a = \frac{c_a - c_{a0}}{c_{a\infty} - c_{a0}}, \quad \theta_i = \frac{c_i - c_a}{c_{i\infty} - c_{i0}}, \quad \eta = \frac{r_0}{R_a}, \quad \gamma = \frac{r_i}{R_i}, \quad (1.17)$$

$$\tau = \frac{D_a t}{\left(1 + \frac{S_0 \Gamma_a}{\xi_a}\right) R_a^2} = \frac{t}{T}.$$



Національний університет
водного господарства
та природокористування

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

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

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 [156; 186; 187].

Схема розглядуваного процесу адсорбції наведена на рис. 1.7.

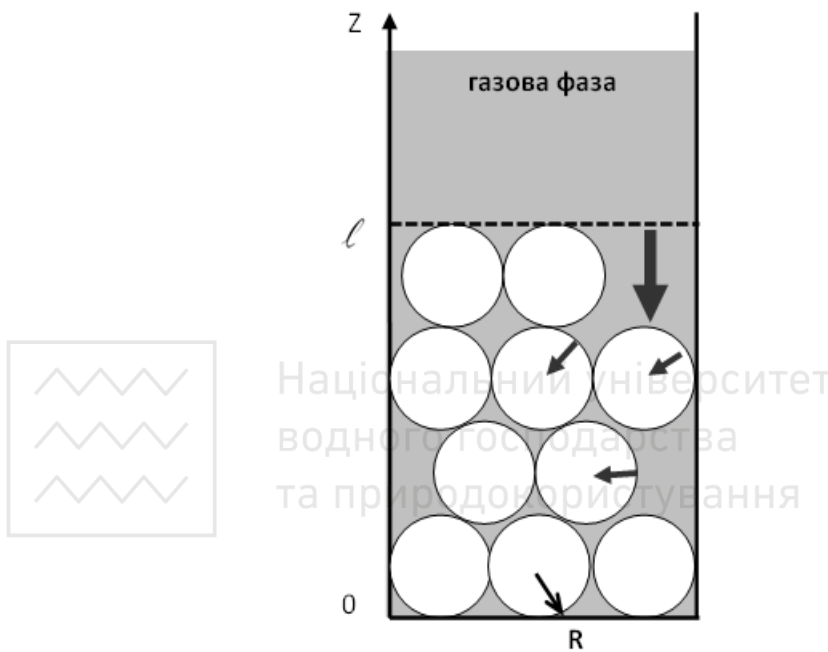


Рис. 1.7. Схема процесу однокомпонентного адсорбційного масопереносу

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

водного господарства
та природокористування

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

та крайовими умовами

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

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

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

внутрішньогочастинкового масопереносу на міжчастинковий; $\varepsilon_{\text{intra}}$ – 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 (внутрішньогочастинковий 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).

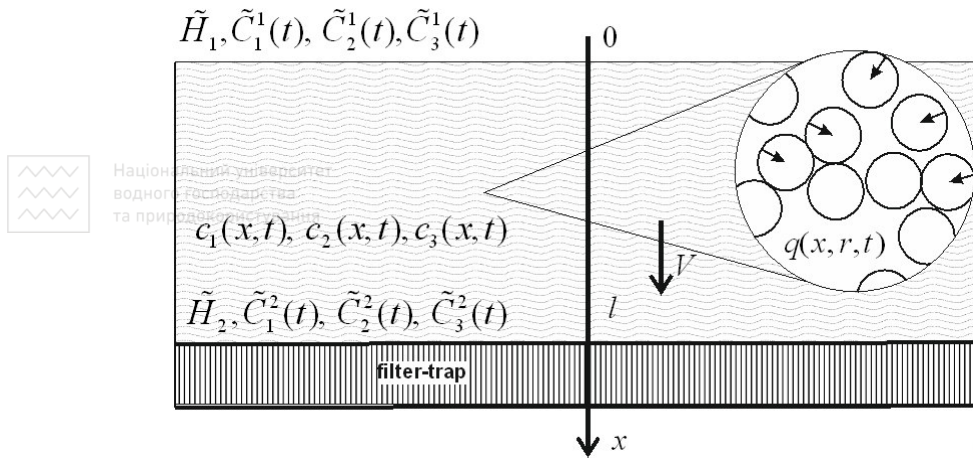


Рис. 1.8. Вертикальна міграція радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача

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 [118; 119; 188; 189] можна описати наступною крайовою задачею:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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, $l_i, i = 1, 4$ – 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 внутрішночастинковий 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 [190; 191].

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

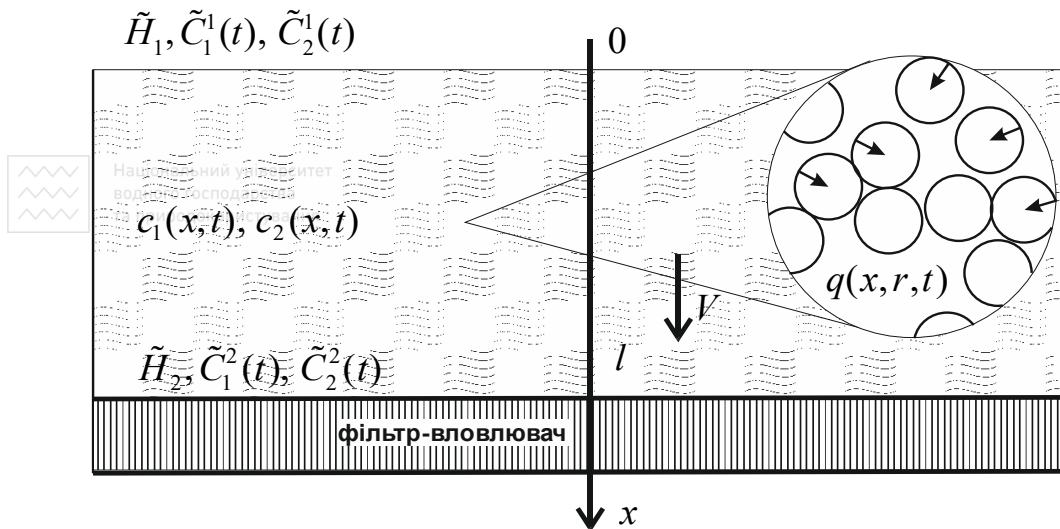


Рис. 1.9. Вертикальна міграція радіонуклідів в пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача в нелінійному випадку

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:

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

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

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.27)$$

$$v = -k(c_1) \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad \text{div} \vec{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.28)$$

$$\frac{\partial q(x, r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.29)$$

$$q(x, r, t) \Big|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x, t), \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.30)$$

$$l_1 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (1.31)$$

$$l_3 c_2(0, t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l, t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (1.32)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, \quad h(l) = \tilde{H}_2, \quad (1.33)$$

$$c_1(x, 0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x, 0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad q(x, r, 0) = \tilde{Q}^0(x, r), \quad (1.34)$$

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; v – 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 (1.25) 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 внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q , що зв'язана із концентрацією c_2 умовою (1.30); (1.28)

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 (1.31)–(1.34).

Крайова задача (1.25)–(1.34) поставлена коректно та виконуються умови існування та єдиності її розв'язку [190; 191].

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.

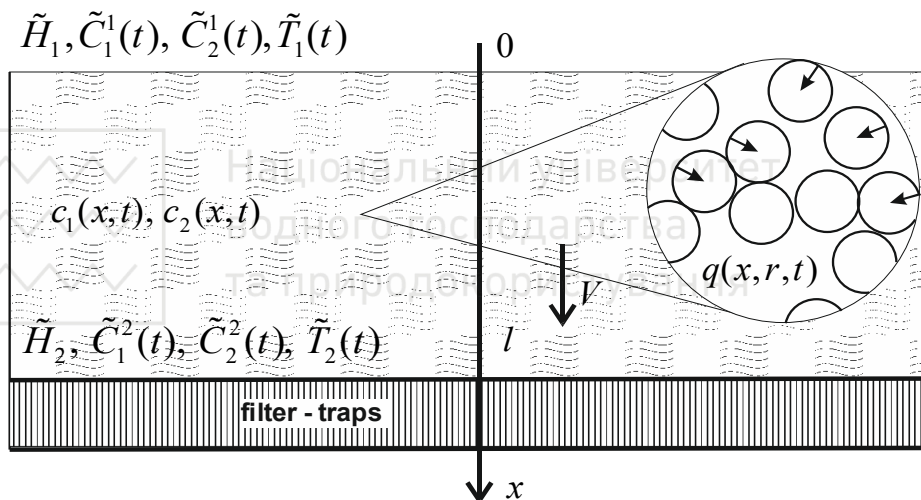



Рис. 1.10. Вертикальна міграція радіонуклідів в пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача в неізотермічному випадку

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_T \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \nu(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2,$$

$$0 < x < l, t > 0,$$
(1.35)

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{T_2} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 - \theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}, \quad 0 < x < l, \\ t > 0, \quad (1.36)$$



$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0(q) \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right) + D_{T_3} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.37)$$

$$c_T \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \rho c_\rho v \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (1.38)$$

$$v = -k(c_1, T) \frac{dh}{dx} + v_c(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} + v_T \frac{\partial T}{\partial x}, \quad \text{div} \vec{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1.39)$$

$$\frac{\partial q(x, r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.40)$$

$$q(x, r, t) \Big|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x, t), \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (1.41)$$

$$l_1 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (1.42)$$

$$l_3 c_2(0, t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l, t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (1.43)$$

$$l_5 T(0, t) = \tilde{T}_1(t), \quad l_6 T(l, t) = \tilde{T}_2(t), \quad (1.44)$$

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

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

де $c_1(x, t)$, D_1 , 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, 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 (1.35) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (1.36) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (1.37) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q в мікро- або наночастинках, що пов'язана з концентрацією c_2 рівнянням (1.41); рівняння (1.38) описує теплових режим ґрунту; (1.39) 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 (1.42)–(1.46).

Крайова задача (1.35)–(1.46) поставлена коректно та виконуються умови існування та єдиності її розв'язку [190; 191].

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, RSOFTEM, 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 [192], ORCHESTRA [193], PHREEQC [194], HPx [195], PHT3D [196], OpenGeoSys (OGS) [197], HYTEC [198], HYDRUS [199], TOUGHREACT [200], eSTOMP [201], HYDROGEOCHEM [202], CrunchFlow [203], MIN3P [204], PFLOTRAN [205] 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 [202; 206].

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 [199].

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.

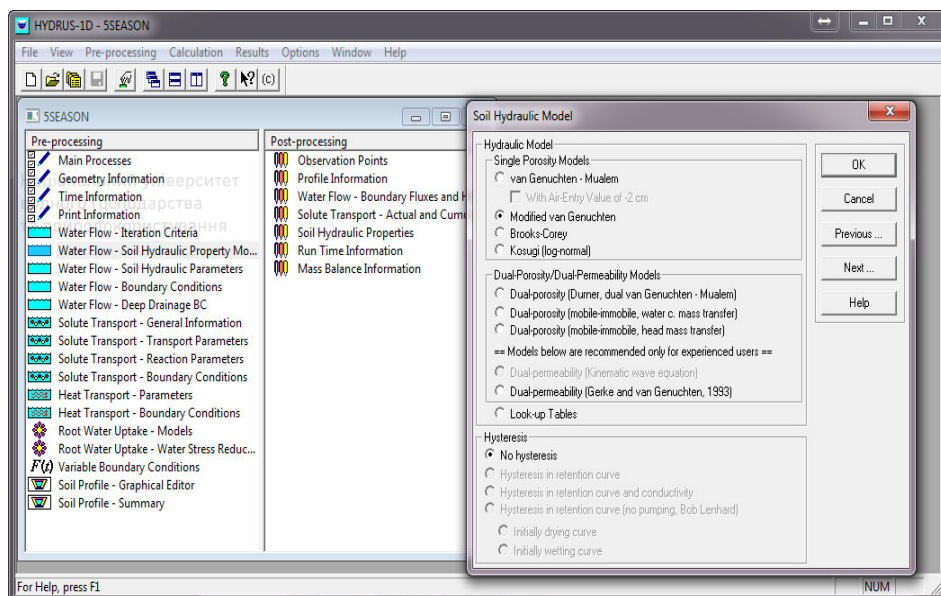


Рис. 1.11. Користувачський інтерфейс програми HYDRUS-1D

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 середовищах. В HYDRUS розглядається до 15 розчинів, які можуть бути з'єднані в однонаправлений фільтраційний потік або фільтруватимуться незалежно один від одного.

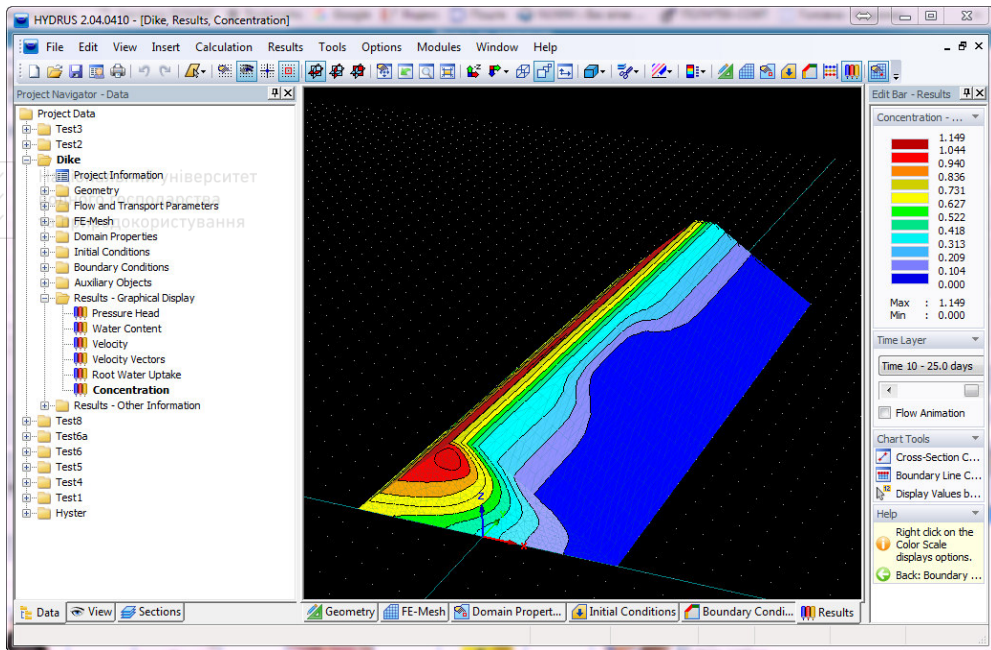


Рис. 1.12. Користувачський інтерфейс програми HYDRUS (2D/3D)

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 [207]. Основу математичного апарату складають математичні моделі просторових процесів у вигляді систем диференційних рівнянь в частинних похідних [208–216].

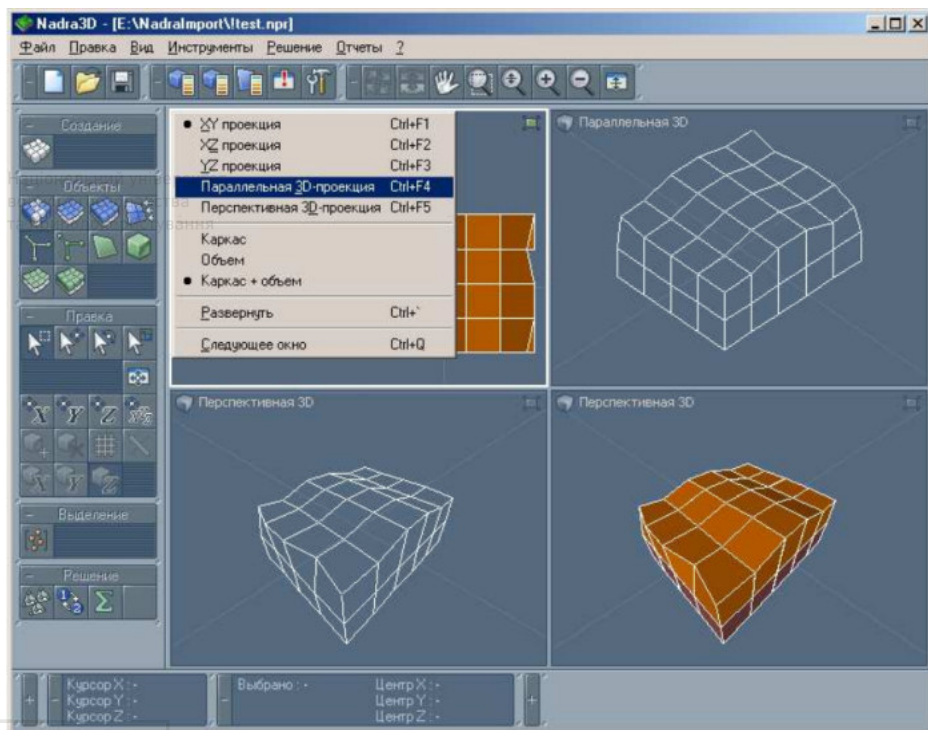


Рис. 1.13. Користувачський інтерфейс NADRA-3D

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 [207; 217; 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.

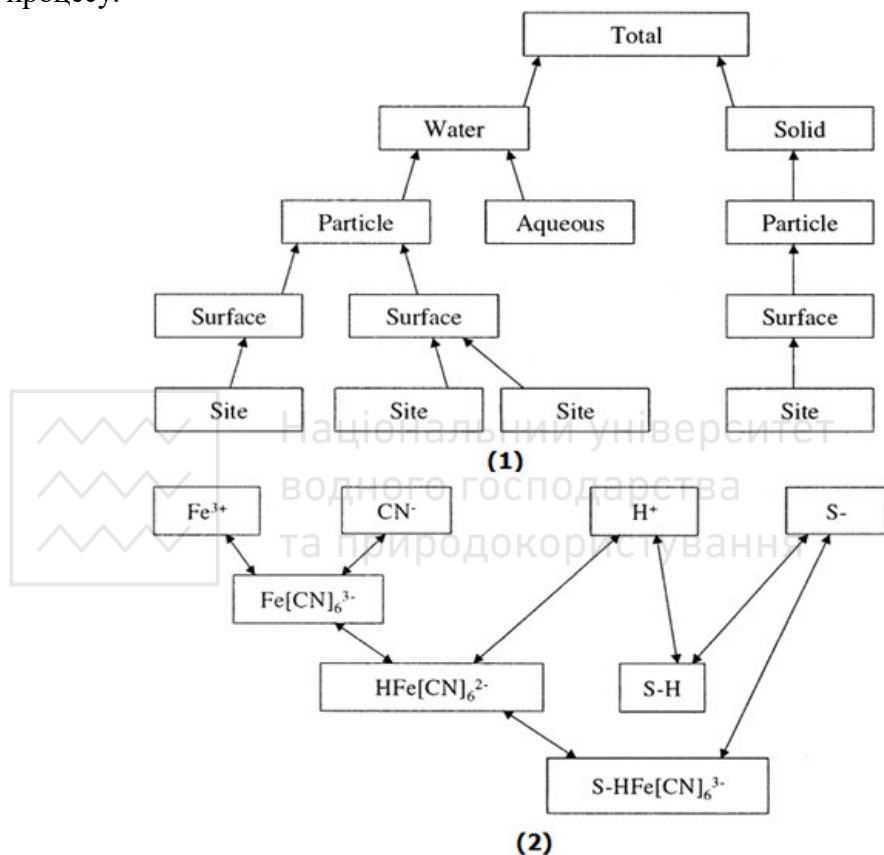


Рис. 1.14. Приклад ієрархії фаз (1) та ієрархії суб'єктів (2) в програмі ORCHESTRA

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.

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.

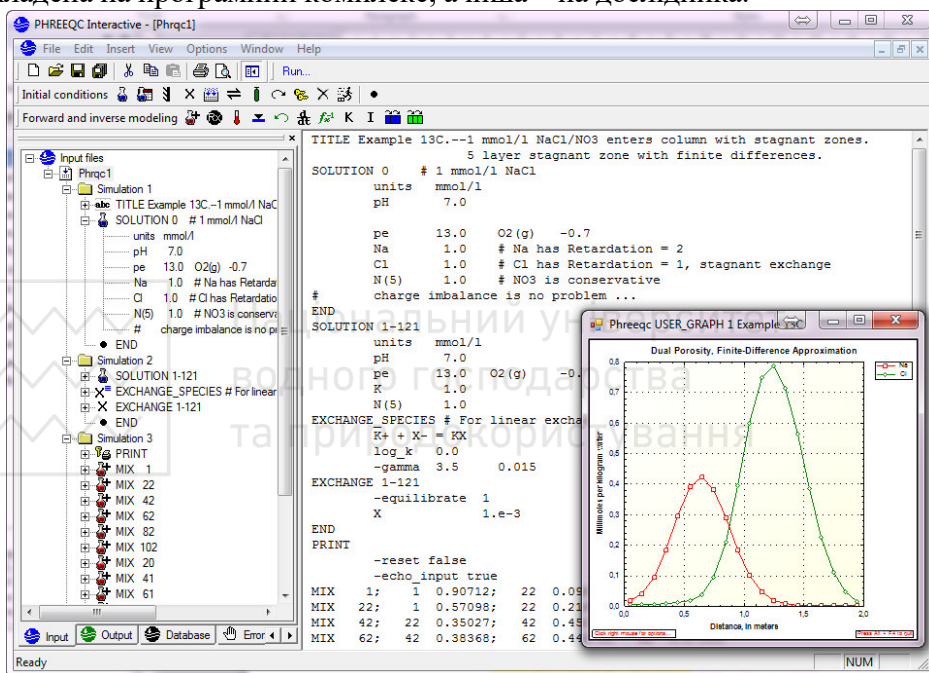


Рис. 1.15. Інтерфейс програми PHREEQC в операційній системі Windows

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].

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 гідропроееси 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.

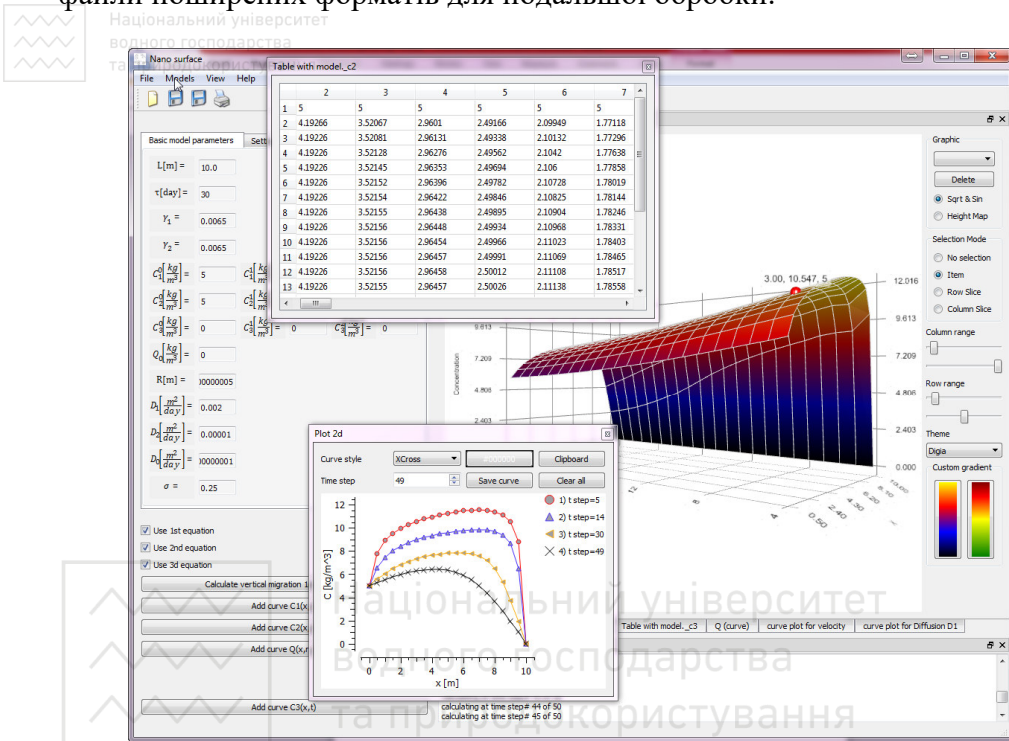


Рис. 1.16. Інтерфейс програмного комплексу «Nanosurface»

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 [224–226].

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.

РОЗДІЛ 2

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



Національний
водного господарства
та природокористування

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

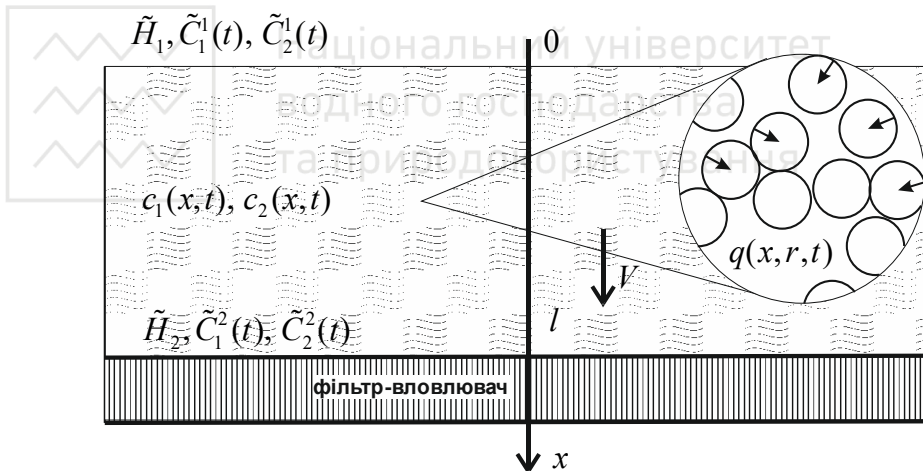


Рис. 2.1. Вертикальна міграція радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача

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 фільтри-вловлювачі задаються концентрації $\tilde{C}_1^2(x)$, $\tilde{C}_2^2(x)$ або відповідні

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

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 [155], [188], [227], [228] можна описати наступною крайовою задачею:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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; v – 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 [190; 191] 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 [229] або [230].

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

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

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 [229] або вдосконалену монотонну різницеву схему, побудовану і досліджену в роботі [230]. В результаті дискретизації скінченнорізницевої аналог диференціального рівняння (2.1) та відповідних крайових умов матиме наступний вигляд:

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

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

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



$$a_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1^2} - \frac{(r^-)_i^{(k)}}{h_1 D_1} \right), \quad b_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(r^+)_i^{(k)}}{h_1 D_1} \right),$$

$$\bar{c}_i^1 = 1 + \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{2\chi_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{1}{h_1 D_1} \left((r^+)_i^{(k)} - (r^-)_i^{(k)} \right) + \gamma_1' \right), \quad f_i^{1,(k+1)} = \frac{\tau}{\sigma_1'} \gamma_2' c_{2,i}^{(k+1)}, \quad \mu_1^1 \equiv 0,$$

$$\mu_2^1 = \tilde{C}_1^1, \quad \mu_3^1 \equiv 0, \quad \mu_4^1 \equiv \tilde{C}_2^1.$$

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

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

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

$$\alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0, \quad \beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1.$$

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 [231]. Скінченнорізницевий аналог відповідного диференціального рівняння матиме наступний вигляд:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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



Національний університет
водного господарства
та природокористування

де

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

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

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

Чисельний розв'язок різницевої схеми знаходимо методом прогонки

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

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

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



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 $k(x, c(x, t)) \in C([0, l])$ і $k(x, c(x, t)) > 0$, $\forall x \in [0, l]$, $I(C(x, t_k)) = I_h^k + O(h^2)$,

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

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



Національний університет

водо- та природокористування

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

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

$$\tau = 30 \text{ днів}, \quad \gamma_1 = \gamma_2 = 0,0065, \quad k_e = 1, \quad R = 5 \cdot 10^{-5} \text{ м}, \quad D_1 = 2 \cdot 10^{-4} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}},$$

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

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

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 скомпілювати 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 обчислення, 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.

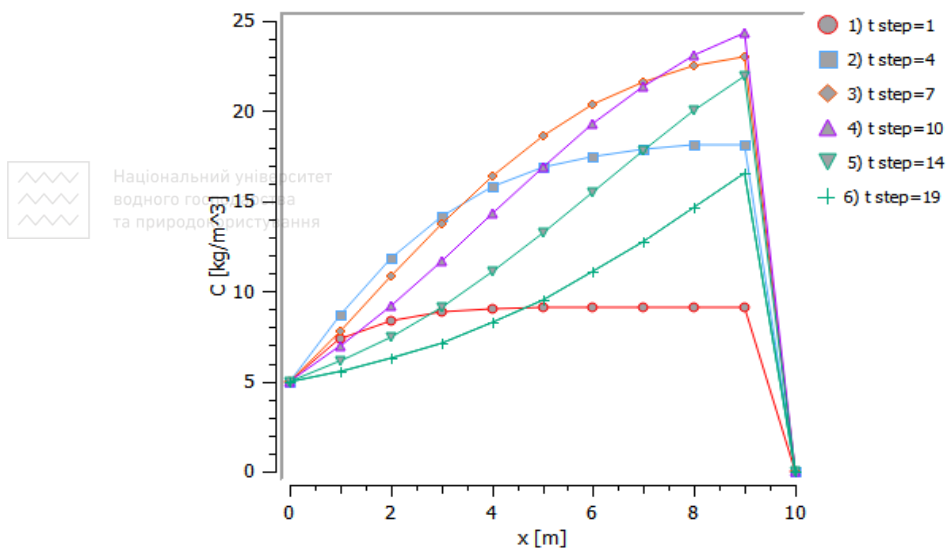


Рис. 2.1. Розподіл концентрації $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R при різних часових кроках:

- 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.

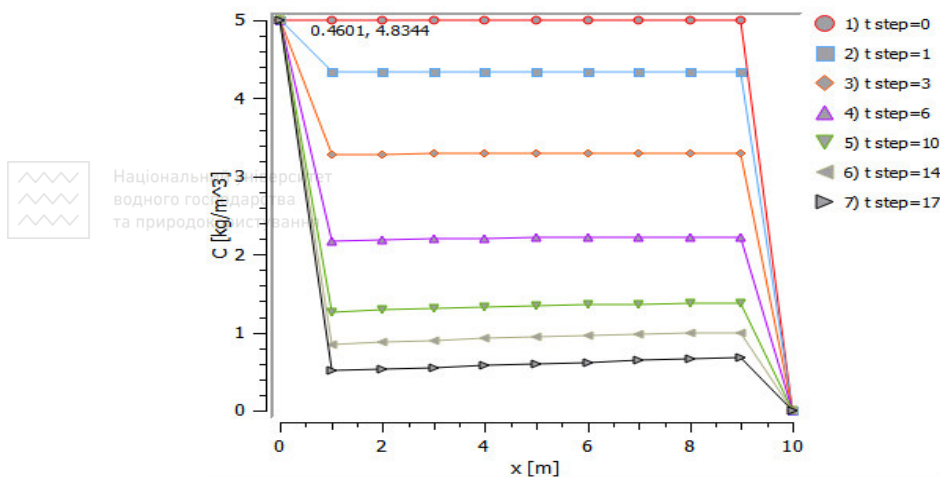


Рис. 2.2. Розподіл концентрації $c_2(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R при різних часових кроках:
 1) $t = 0$ діб, 2) $t = 1$ міс., 3) $t = 3$ міс.,
 4) $t = 6$ міс., 5) $t = 10$ міс., 6) $t = 14$ міс., 7) $t = 17$ міс.

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 рисунках 2.3–2.5. 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.

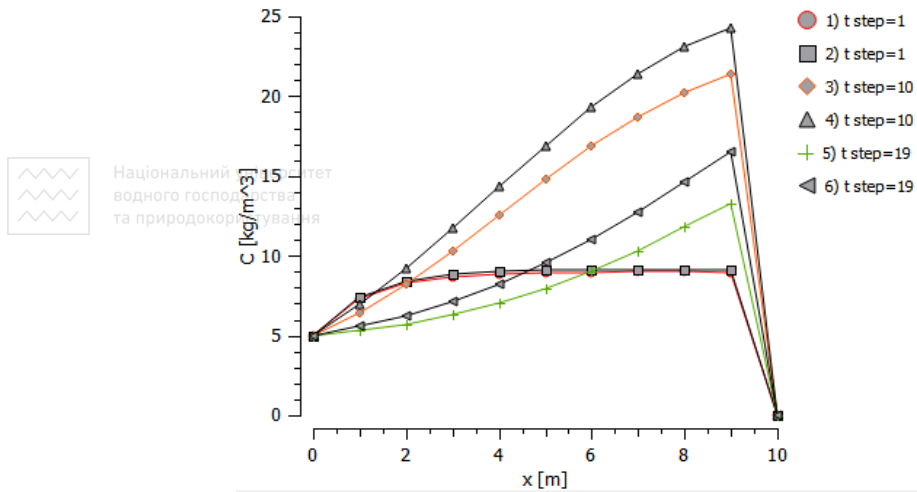


Рис. 2.3. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R (графіки 1, 3 та 5) та з їх врахуванням (графіки 2, 4 та 6) при різних часових кроках:

- 1) $t = 30 \text{ дiб}$, 2) $t = 30 \text{ дiб}$, 3) $t = 10 \text{ мiс.}$,
- 4) $t = 10 \text{ мiс.}$, 5) $t = 19 \text{ мiс.}$, 6) $t = 19 \text{ мiс.}$

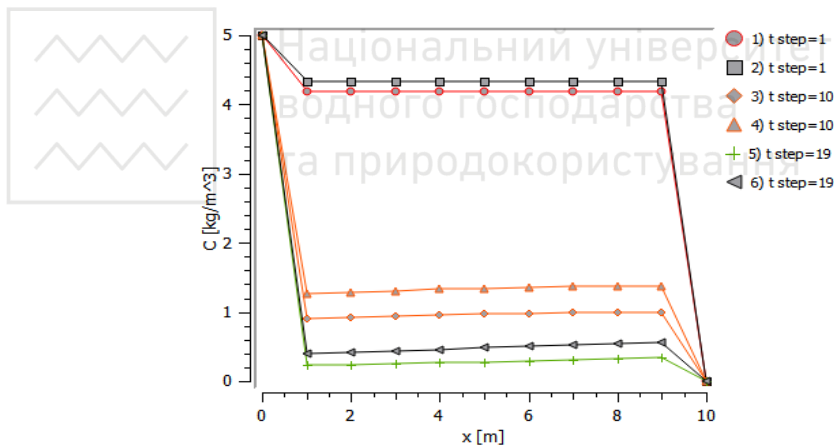


Рис. 2.4. Порівняльні розподіли концентрацій $c_2(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R (графіки 1, 3 та 5) та з їх врахуванням (графіки 2, 4 та 6) при різних часових кроках:

- 1) $t = 30 \text{ дiб}$, 2) $t = 30 \text{ дiб}$, 3) $t = 10 \text{ мiс.}$,
- 4) $t = 10 \text{ мiс.}$, 5) $t = 19 \text{ мiс.}$, 6) $t = 19 \text{ мiс.}$



Національний університет
водного господарства
та природокористування

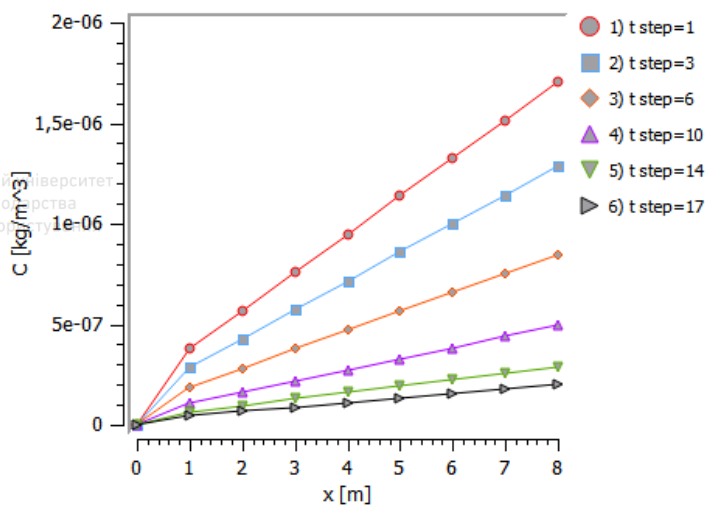


Рис. 2.5. Розподіл концентрації $q(r)$ від радіуса частинки r при $x = 1$ м при різних часових кроках: 1) $t = 1$ міс., 2) $t = 3$ міс., 3) $t = 6$ міс., 4) $t = 10$ міс., 5) $t = 14$ міс., 6) $t = 17$ міс.

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 фільтровловлювача 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 v під впливом конвективної дифузії та термодифузії

з врахуванням каталітичного мікропористого середовища при наявності фільтрів-вловлювачів (рис. 2.6).

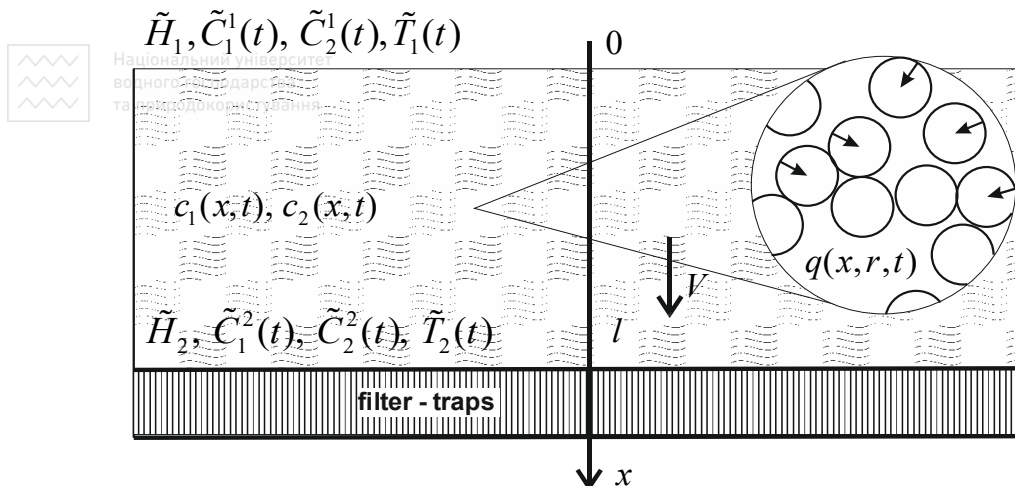


Рис. 2.6. Вертикальна міграція забруднюючих речовин у пористому середовищі при наявності мікрочастинок в неізотермічних умовах

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 поставновці за наявності фільтрів-вловлювачів в одновимірному випадку можна описати наступною крайовою задачею:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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_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, 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 [190; 191].

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 [229].

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



Національний університет
водного господарства
та природокористування

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

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:

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

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

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

Введемо наступні позначення:

$$\chi_i^{(k)} = \frac{1}{1 + 0,5h_1 |r_i^{(k)}|}, \sigma'_1 = \frac{\sigma_1}{D_1}, D'_T = \frac{D_T}{D_1}, \gamma'_1 = \frac{\gamma_1}{D_1}, \gamma'_2 = \frac{\gamma_2}{D_1},$$

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

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:

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

де



Національний університет
водного господарства
та природокористування

$$a_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1^2} - \frac{(r^-)^{(k)}}{h_1 D_1} \right), \quad b_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(r^+)^{(k)}}{h_1 D_1} \right),$$
$$\bar{c}_i^1 = 1 + \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{2\chi_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{1}{h_1 D_1} \left((r^+)^{(k)} - (r^-)^{(k)} \right) + \gamma_1' \right),$$
$$f_i^{1,(k+1)} = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\gamma_2' c_{2,i}^{(k+1)} + D_{T_1}' \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} \right), \quad \mu_1^1 \equiv 0, \quad \mu_2^1 = \tilde{C}_1^1, \quad \mu_3^1 \equiv 0,$$
$$\mu_4^1 \equiv \tilde{C}_2^1.$$

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:

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

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

$$\alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0, \quad \beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1.$$

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 [231]. Скінченнорізницевий аналог даного диференціального рівняння матиме наступний вигляд:

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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



Національний університет водного господарства та природокористування

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

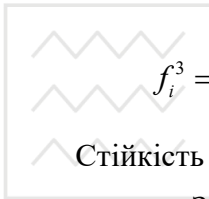
Для використання методу прогонки представимо різницеву схему (2.46)–(2.47) наступним чином:

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

де

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

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



Національний університет водного господарства та природокористування

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

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

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

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:

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

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



Національний університет
водного господарства
та природокористування

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

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

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

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

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

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

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

$$\mu_3^4 = 0, \quad \mu_4^4 = \tilde{T}_2.$$

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

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

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

Для дискретизації рівняння (2.54) використаємо монотонну різницеву схему О. А. Самарського [232]. В результаті отримаємо скінченно-різницеви аналог даного диференціального рівняння:

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

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

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

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

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

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

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

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

2.2.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз

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

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

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

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

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

$$c_\rho = 4,2 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot ^\circ\text{C}}, \quad c_T = 2137 \frac{\text{кДж}}{\text{м}^3 \cdot ^\circ\text{C}}, \quad \lambda_T = 108 \frac{\text{кДж}}{\text{м} \cdot ^\circ\text{C} \cdot \text{доба}},$$

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

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.

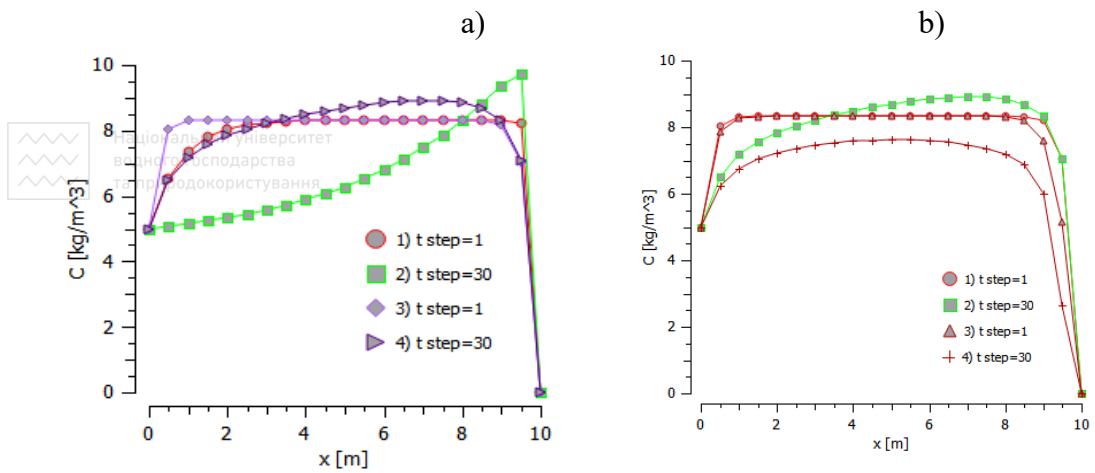


Рис. 2.7. Розподіл значень концентрації $c_1(x)$ в залежності від глибини x : а) для коефіцієнта фільтрації $k = const$ (графіки 1, 2) та $k = k(x, c_1)$ (графіки 3, 4); б) при коефіцієнті дисперсії $\lambda = 1$ (графіки 1, 2) та $\lambda = 8$ (графіки 3, 4) (часові кроки: 1) 1 місяць, 2) 2,5 роки,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

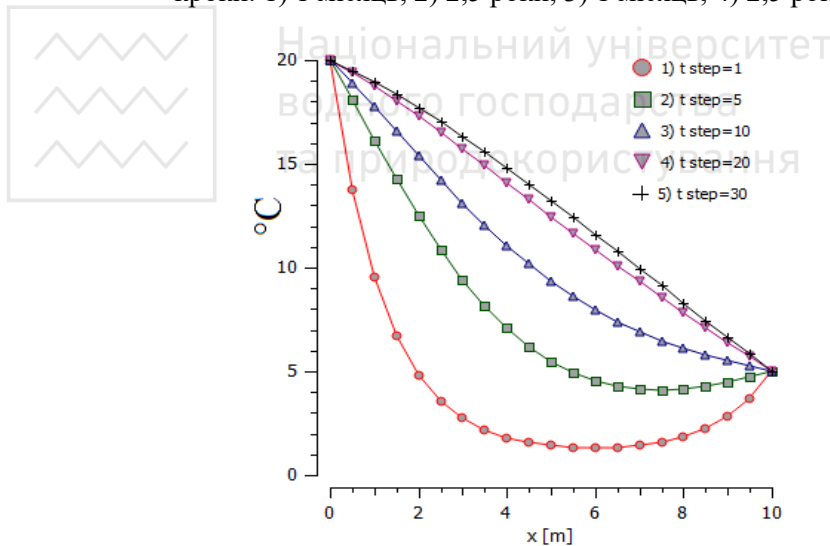


Рис. 2.8. Розподіл значень температури $T(x)$ по товщині шару ґрунту x при різних часових кроках: 1) 1 місяць, 2) 5 місяців, 3) 11 місяців, 4) 20 місяців 5) 2,5 роки



Національний університет
водного господарства
та природокористування

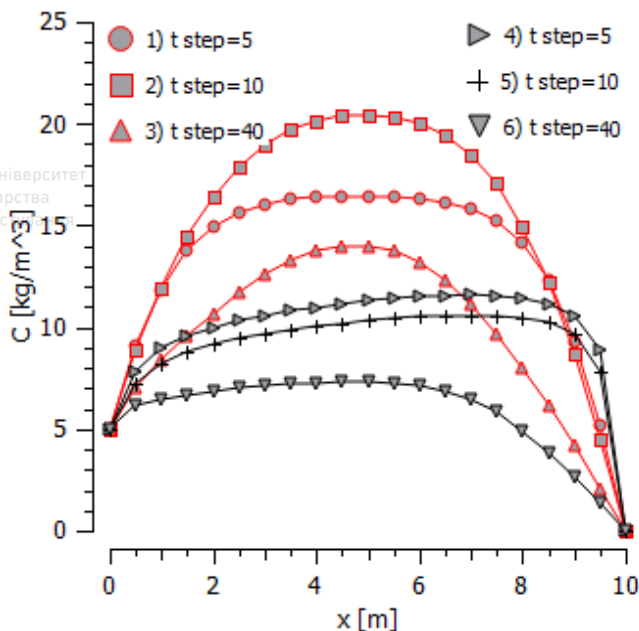


Рис. 2.9. Розподіл концентрації $c_1(x)$ по товщині шару ґрунту x в неізотермічних (графіки № 1, 2 та 3) та ізотермічних умовах (графіки № 4, 5 та 6) при різних часових кроках: 1) і 4) 5 міс., 2) і 5) 10 міс., 3) і 6) 40 міс.

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 [119; 233]. 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 v 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. Порожини скелету заповнені водним поровим розчином (так зване насичене пористе середовище).

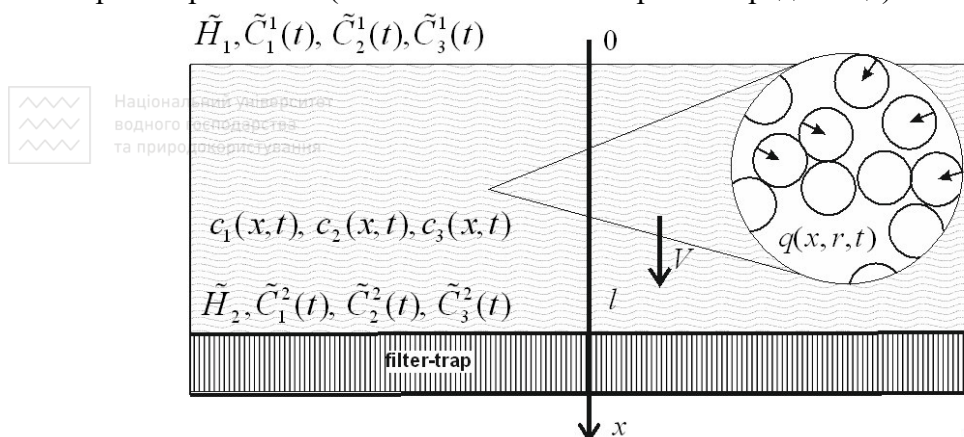


Рис. 2.10. Вертикальна міграція радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача

Відомі п'єзометричні напори на верхній та нижній (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), $\tilde{C}_3^0(x)$ (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 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 [118; 119; 188; 189], [228] можна описати наступною крайовою задачею:

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 [119; 233].

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 [190; 191].

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 [229] або [230]. 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:

$$\frac{c_{3,i}^{(k+1)} - c_{3,i}^{(k)}}{\tau} = D_3 \frac{c_{3,i+1}^{(k+1)} - 2c_{3,i}^{(k+1)} + c_{3,i-1}^{(k+1)}}{h^2} + \\ + \gamma_2 c_{2,i}^{(k)} - \gamma_3 c_{3,i}^{(k+1)}, \\ c_{3,i}^{(0)} = \tilde{C}_3^0(x_i), \quad c_{3,0}^{(k)} = \tilde{C}_3^1(t_k), \quad c_{3,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_3^2(t_k),$$

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

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

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

$$\mu_1^3 \equiv 0, \mu_2^3 = \tilde{C}_3^1, \mu_3^3 \equiv 0, \mu_4^3 \equiv \tilde{C}_2^3.$$

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

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

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

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

2.3.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз

Як приклад, розглянуто задачу локалізації забруднених речовин та очищення шару ґрунту з такими вихідними параметрами (рис. 2.11–2.14):

$$l = 10 \text{ м}, \tilde{H}_1 = 1 \text{ м}, \tilde{H}_2 = 0 \text{ м}, \sigma_1 = 0,4, \tau = 30 \text{ діб}, \gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = 0,0065,$$

$$k_e = 1, D_1 = 2 \cdot 10^{-3} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, D_2 = 1 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}},$$

$$D_3 = 1 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, D_0 = 1 \cdot 10^{-17} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}},$$

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

$$\tilde{C}_1^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{C}_2^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \tilde{Q}^0(x, r) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, R = 5 \cdot 10^{-8} \text{ м}, \theta = 3 \cdot 10^{-10}.$$

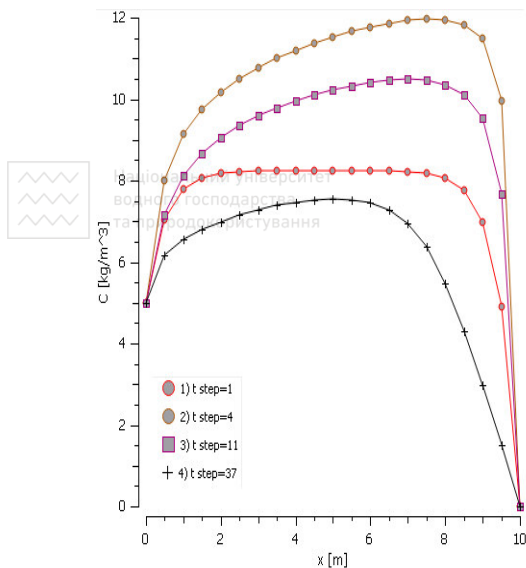


Рис. 2.11. Розподіл концентрації $c_1(x)$ при різних часових кроках:
 1) $t = 30$ діб, 2) $t = 4$ міс.,
 3) $t = 11$ міс.,
 4) $t = 37$ міс.

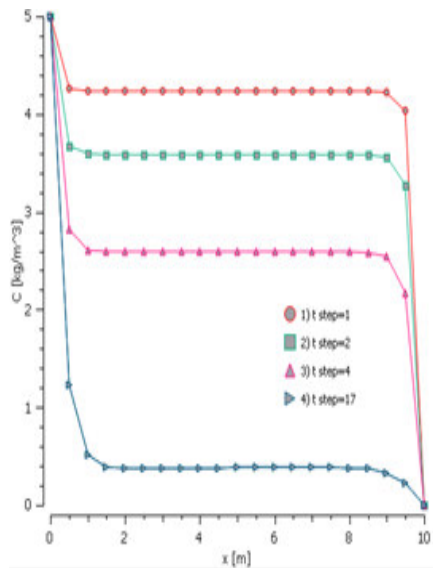


Рис. 2.12. Розподіл концентрації $c_2(x)$ різних часових кроках:
 1) $t = 30$ діб, 2) $t = 2$ міс.,
 3) $t = 4$ міс.,
 4) $t = 17$ міс.

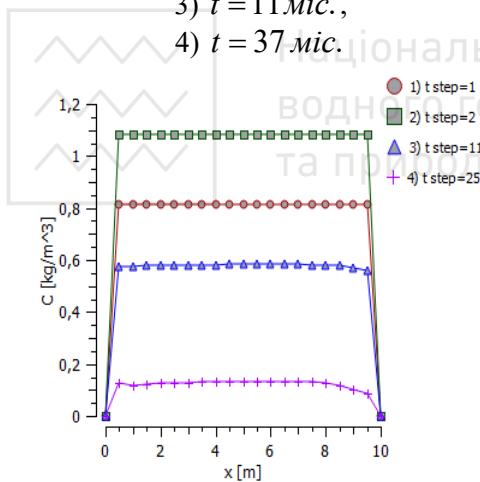


Рис. 2.13. Розподіл концентрації $c_3(x)$ при різних часових кроках:
 1) $t = 30$ діб, 2) $t = 2$ міс., 3)
 $t = 11$ міс.,
 4) $t = 25$ міс.

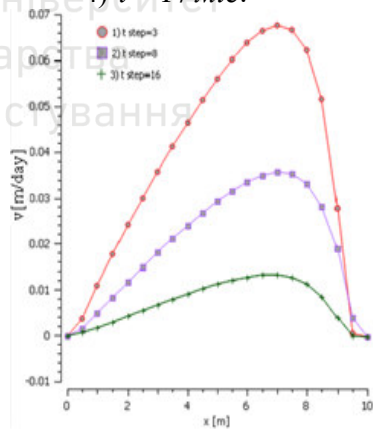


Рис. 2.14. Швидкість фільтрації при різних часових кроках:
 1) $t = 3$ міс., 2) $t = 8$ міс.,
 3) $t = 16$ міс.

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 фільтра-вловлювача. 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 $\tilde{C}_2^0(x) = \tilde{C}_2^1(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ до $\tilde{C}_2^2(x) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$. В той час, як концентрація $c_3(x)$ поступово зростає на противагу $c_2(x)$, графіки їхніх розподілів перетинаються на часовому кроці $t = 5 \text{ мін}$. 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 [234].

Проведено серію чисельних 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. 2.15–2.16.

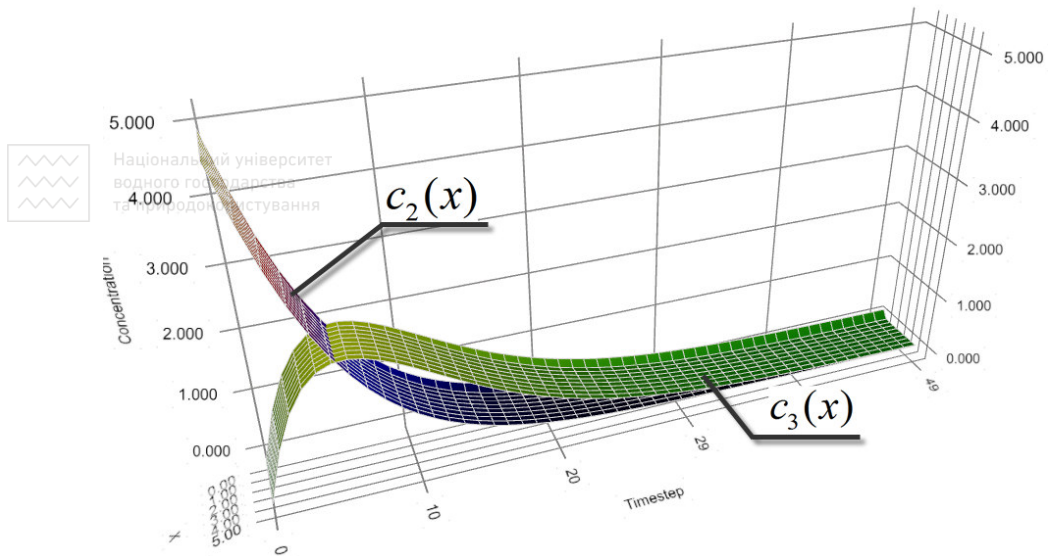


Рис. 2.15. Порівняльний розподіл концентрацій $c_2(x)$ та $c_3(x)$ з часом по товщині шару ґрунту

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 наночастинки на 27% зменшили

вплив забруднення.

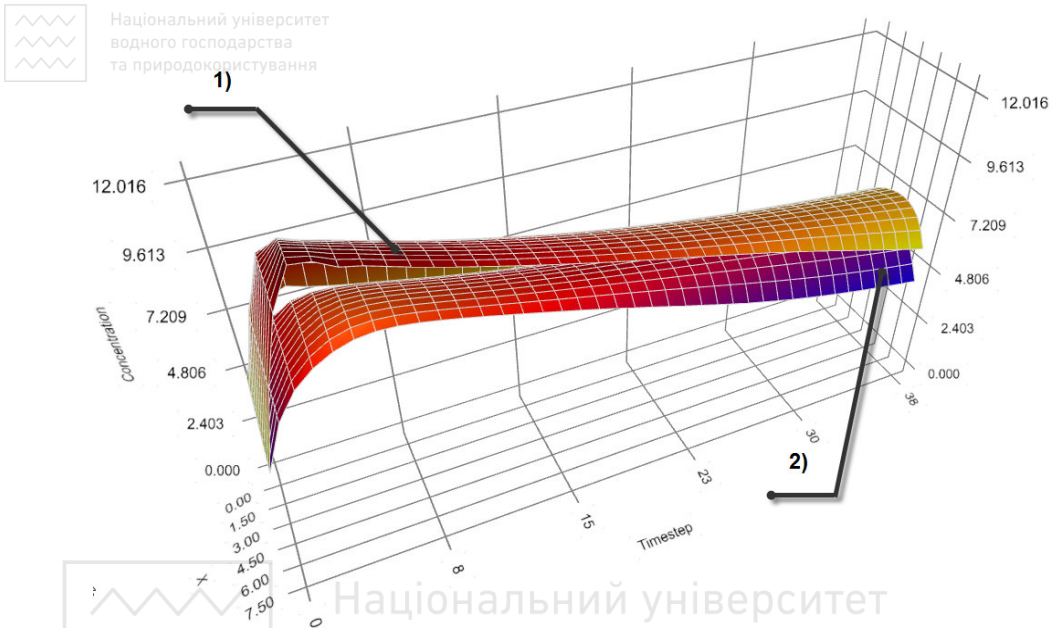


Рис. 2.16. Порівняльний розподіл концентрації $C_1(x)$ з часом без врахування дифузії у частинках радіуса R (графік 1) та з її врахуванням (графік 2)

Аналогічним чином було досліджено вплив дифузії у наночастинках 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 $1,157 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.

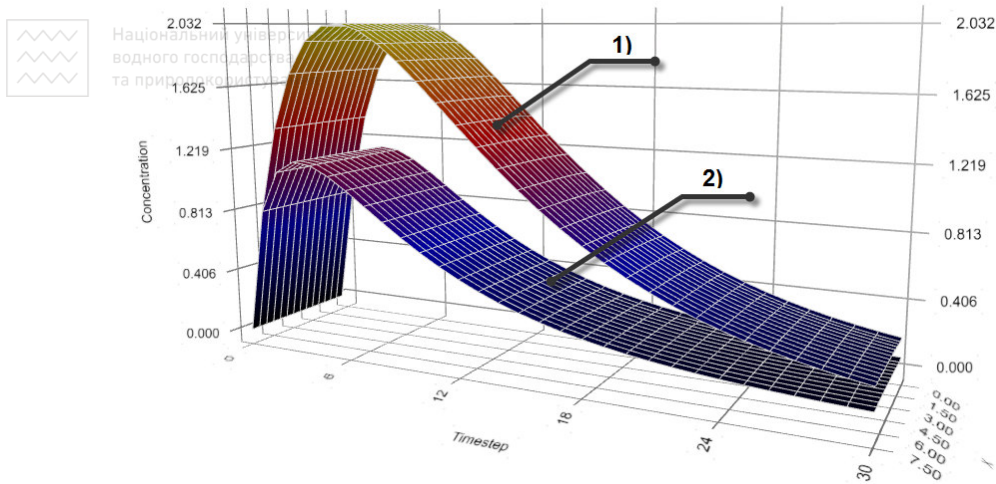


Рис. 2.17. Порівняльний розподіл концентрації $c_3(x)$ з часом без врахування дифузії у частинках радіуса R (графік 1) та з її врахуванням (графік 2)

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 фільтруючого шару. 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. 2.8, а), а підвищуючи дисперсійний параметр, розчин солі більш швидко розподіляється в шарі ґрунту (рис. 2.8, б). 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 умовами. 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 [235–240].

РОЗДІЛ 3

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



Національний університет
водного господарства
та природокористування

3.1. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтр-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 v 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 (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 фільтр-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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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; v – 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 [190; 191].

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 [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

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

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 [229]. В результаті скінченнорізницевої аналог диференціального рівняння (3.1) матиме наступний вигляд:

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

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

Тут введені наступні позначення:

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

$$\alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0, \quad \beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1.$$

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

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

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

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



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

Представимо (3.20), (3.21) в наступному вигляді

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

де $a_j^3 = \frac{d_{0,j}^{(k)}}{r^2 h_2^2}$, $b_j^3 = \frac{d_{0,j+1}^{(k)}}{r^2 h_2^2}$, $\bar{c}_j^3 = \frac{d_{0,j+1}^{(k)} + d_{0,j}^{(k)}}{r^2 h_2^2} + \frac{1}{\tau}$, $f_j^{3,(k+1)} = \frac{q_j^{(k)}}{\tau}$, $\mu_1^3 \equiv 1$, $\mu_2^3 = 0$,
 $\mu_3^3 \equiv 0$, $\mu_4^3 \equiv 0$.

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

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

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

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

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

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

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

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 [242]. 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:

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

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

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

$$\tilde{Q}^0(x, r) = 0 \frac{\text{кЗ}}{\text{м}^3}.$$

Зазвичай в рамках ламінарної фільтрації коефіцієнт конвективної дифузії задають лінійно залежним від швидкості фільтрації [30]:

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

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 [117]:

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

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 полів швидкостей фільтрації $v(x, t)$, розподілу концентрації солевих 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).

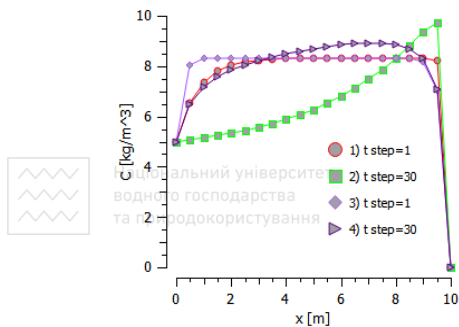


Рис. 3.1. Розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x для коефіцієнта фільтрації $k = const$ (графіки 1, 2) і $k = k(x, c_1)$ (графіки 3, 4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 2,5 роки, 3) 30 діб, 4) 2,5 роки

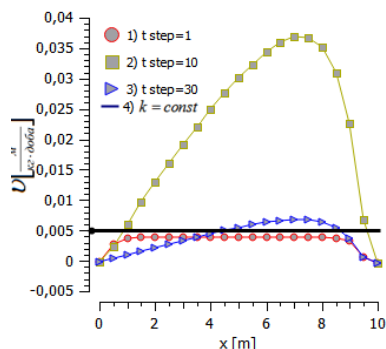


Рис. 3.2. Розподіл швидкості фільтрації $v(x)$ для нелінійної залежності коефіцієнта фільтрації $k = k(x, c_1)$ (графіки 1, 2, 3) і $k = const$ (графік 4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 1 рік, 3) 2,5 роки

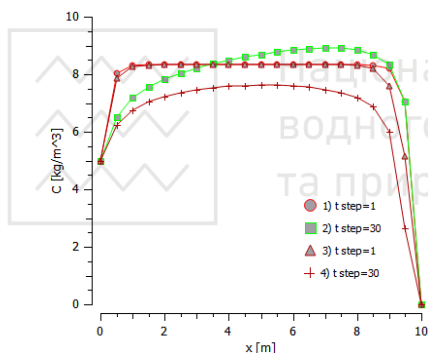


Рис. 3.3. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x для коефіцієнта дисперсії $\lambda = 1$ (графіки 1, 2) і $\lambda = 8$ (графіки 3, 4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 2,5 роки, 3) 30 діб, 4) 2,5 роки

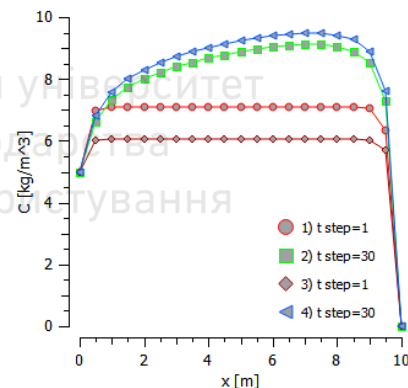


Рис. 3.4. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x для щільного піску $\sigma = 0,4$ (графіки 1, 2) і пухкого $\sigma = 0,8$ (графіки 3, 4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 2,5 роки, 3) 30 діб, 4) 2,5 роки

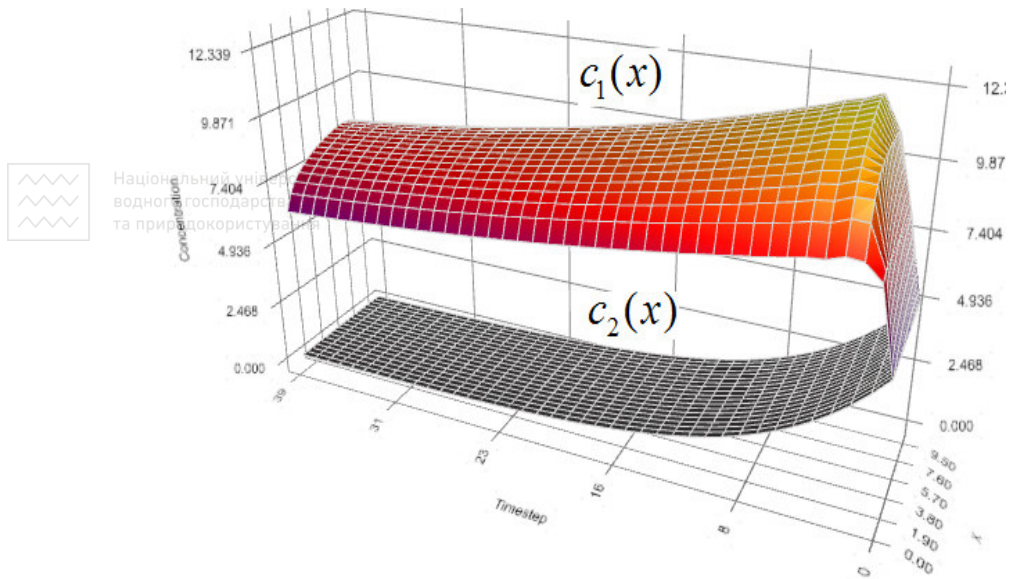


Рис. 3.5. Розподіл концентрацій $c_1(x)$ та $c_2(x)$

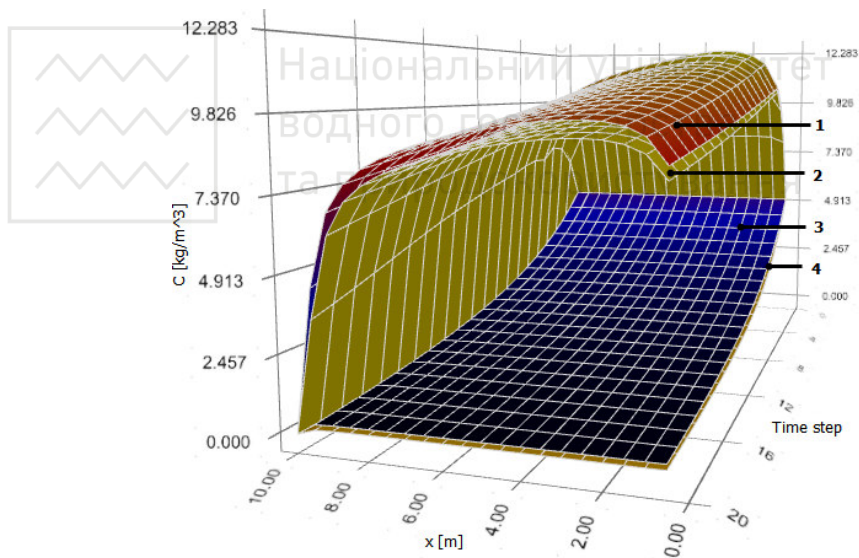


Рис. 3.6. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ та $c_2(x)$ від глибини шару ґрунту x протягом 20 міс. з врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R (графіки 1, 3) та без врахування (графіки 2, 4)

3.2. Математичне та комп'ютерне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів при фільтрації підземних вод до фільтр-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 v як під впливом конвективної дифузії, так і термодифузії одночасно (рис. 3.7).

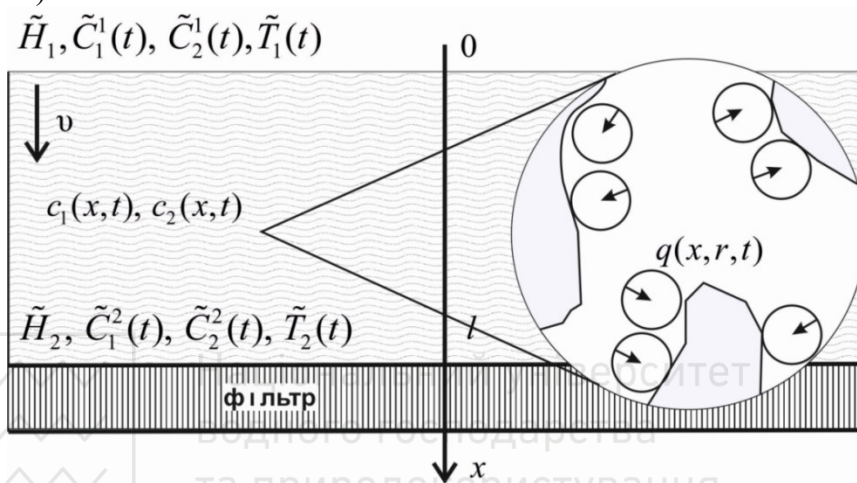


Рис. 3.7. Вертикальна міграція радіонуклідів до фільтр-вловлювача в неізотермічних умовах

На глибині l в ґрунті розміщений фільтр-вловлювач. Задані п'езометричні 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 фільтр-вловлювачі – $\tilde{C}_1^2(t), \tilde{C}_2^2(t)$ або їх потоки $\frac{\partial c_1}{\partial x} \Big|_{x=l} = \frac{\partial c_2}{\partial x} \Big|_{x=l} = 0$ 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 [235; 236; 243; 244], що включає:

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

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

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

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

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

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

ізотерму адсорбції

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

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 $h(x)$

водного господарства
та природокористування

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

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

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

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

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

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

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; v – 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) [199].

Крайова задача (3.25)–(3.36) поставлена коректно та виконуються умови існування та єдиності її розв'язку [190; 191].

3.2.2. Методика побудови чисельного розв'язку

Для чисельного розв'язку крайової задачі (3.25)–(3.36) використовуємо метод скінченних різниць [232].

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 [232]. В результаті скінченнорізницевої аналог диференціального рівняння (3.25) з додатковими умовами має такий вигляд:

$$\begin{aligned} \sigma_1 \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k)}}{\tau} &= \chi_i^{(k)} \left(d_{1,i+1}^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{h_1} - d_{1,i}^{(k)} \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \\ &+ \frac{(r^+)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} d_{1,i+1}^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{h_1} + \frac{(r^-)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} d_{1,i}^{(k)} \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1} - \\ - \gamma_1 c_{1,i}^{(k+1)} + \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)} &+ \frac{1}{h_1} \left((d_{T_1})_{i+1}^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - T_i^{(k+1)}}{h_1} - (d_{T_1})_i^{(k)} \frac{T_i^{(k+1)} - T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right), \end{aligned} \quad (3.38)$$

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

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:



Національний університет
водного господарства
та природокористування

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

де

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

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

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

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

$$\alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0, \quad \beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1.$$

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 [241]. Скінченнорізницевий аналог відповідного диференціального рівняння має такий вигляд:

$$\frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k)}}{\tau} = \frac{1}{h_1} \left(d_{2,i+1}^{(k)} \frac{c_{2,i+1}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k+1)}}{h_1} - d_{2,i}^{(k)} \frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \frac{1}{h_1} \left((d_{T_2})_{i+1}^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - T_i^{(k+1)}}{h_1} - (d_{T_2})_i^{(k)} \frac{T_i^{(k+1)} - T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \quad (3.42)$$

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

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

де $d_{2,i}^{(k)} = \frac{D_{2,i}^{(k)} + D_{2,i-1}^{(k)}}{2}$, $D_{2,i}^{(k)} = D_2(c_{2,i}^{(k)})$, $(d_{T_2})_i^{(k)} = \frac{(D_{T_2})_i^{(k)} + (D_{T_2})_{i-1}^{(k)}}{2}$,
 $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

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

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

$$f_i^{2,(k+1)} = \frac{c_{2,i}^{(k)}}{\tau} + \frac{1}{h_1} \left((d_{T_2})_{i+1}^{(k)} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - T_i^{(k+1)}}{h_1} - (d_{T_2})_i^{(k)} \frac{T_i^{(k+1)} - T_{i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) +$$

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

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

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

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

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



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

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

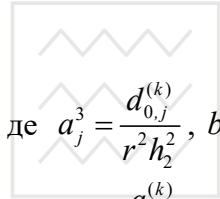
$$+ D_{T_3} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_2^2},$$

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

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

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



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

$$f_j^{3,(k+1)} = \frac{q_j^{(k)}}{\tau} + D_{T_3} \frac{T_{i+1}^{(k+1)} - 2T_i^{(k+1)} + T_{i-1}^{(k+1)}}{h_2^2}, \mu_1^3 \equiv 1, \mu_2^3 = 0, \mu_4^3 \equiv 0.$$

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

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

де

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

Для дискретизації рівняння (3.28) застосуємо монотонну різницєву схему О.А. Самарського [229]. В результаті скінченнорізницєвий 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:

$$(\bar{\lambda}_T)_i^{(k)} = \frac{1}{2} \left((\lambda_T)_i^{(k)} + (\lambda_T)_{i-1}^{(k)} \right),$$

$$\bar{\eta}_i^{(k)} = \frac{1}{1 + \frac{h_1 \rho c_\rho |r_i^{(k)}|}{2(\lambda_T)_i^{(k)}}} = 1 - \frac{h_1 \rho c_\rho |r_i^{(k)}|}{2(\lambda_T)_i^{(k)}} + O(h_1^2).$$

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:

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

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

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

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

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

На 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 [229]. В результаті отримаємо скінченнорізницевий аналог даного диференціального рівняння

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\chi}_i^{(k)}}{h_1} \frac{h_{i-1} - 2h_i + h_{i+1}}{h_1} + (\bar{r}^+)_i^{(k)} \frac{h_{i+1} - h_i}{h_1} + (\bar{r}^-)_i^{(k)} \frac{h_i - h_{i-1}}{h_1} + \\ + (v_c)_i^{(k)}(c_{1,i}^{(k)}) \frac{c_{1,i-1}^{(k)} - 2c_{1,i}^{(k)} + c_{1,i+1}^{(k)}}{h_1^2} + \\ + \frac{(v_c)_{i+1}^{(k)}(c_{1,i+1}^{(k)}) - (v_c)_{i-1}^{(k)}(c_{1,i-1}^{(k)})}{2h_1} \frac{c_{1,i-1}^{(k)} - c_{1,i+1}^{(k)}}{2h_1} + v_T \frac{T_{i-1}^{(k)} - 2T_i^{(k)} + T_{i+1}^{(k)}}{h_1^2} = 0, \\ h_0^{(k)} = \tilde{H}_1, h_{n_1}^{(k)} = \tilde{H}_2, \end{aligned} \quad (3.56)$$

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

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

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

Різнцева 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.

3.1.3. Результати чисельних експериментів та їх аналіз

Для аналізу і порівняння математичної моделі вищенаведеної задачі з іншими, раніше описаними моделями [235; 236; 244], 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:

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

$$k_f = 1, \quad R = 1 \cdot 10^{-8}\text{ м}, \quad D_2 = 1 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, \quad D_0 = 1 \cdot 10^{-18} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, \quad \tilde{C}_1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},$$

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

$$\tilde{Q}^0(x,r) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad c_\rho = 4,2 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot \text{°C}}, \quad c_T = 2137 \frac{\text{кДж}}{\text{м}^3 \cdot \text{°C}}, \quad \lambda_T = 108 \frac{\text{кДж}}{\text{м} \cdot \text{°C} \cdot \text{доба}},$$

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

Зазвичай, при ламінарній фільтрації коефіцієнт конвективної дифузії задають лінійно залежним від швидкості фільтрації [30]:

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

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 [117]:

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

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

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

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 сольових 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).

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.

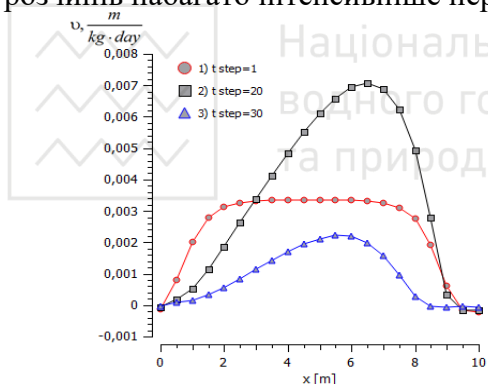


Рис. 3.8. Розподіл швидкості фільтрації $v(x)$ при нелінійній залежності коефіцієнта фільтрації $k = k(x, c_1)$ для різних часових кроків: 1) 30 діб, 2) 20 міс., 3) 30 міс.

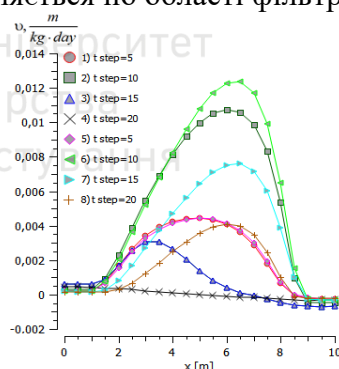


Рис. 3.9. Порівняльні розподіли швидкості фільтрації $v(x)$ при нелінійній залежності коефіцієнта фільтрації $k = k(x, c_1)$ в неізотермічних (графіки 1, 2, 3, 4) та ізотермічних (графіки 5, 6, 7, 8) умовах для різних часових кроків: 1) і 5) 5 міс., 2) і 6) 10 міс., 3) і 7) 15 міс., 4) і 8) 20 міс.

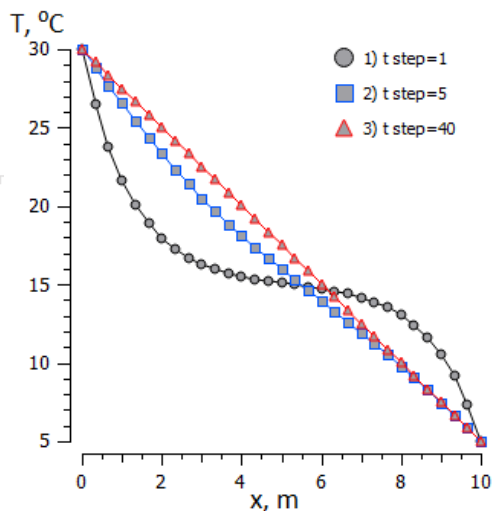


Рис. 3.10. Розподіл температури $T(x)$ по глибині шару ґрунту x для різних часових кроків: 1) 30 діб, 2) 5 міс., 3) 40 міс.

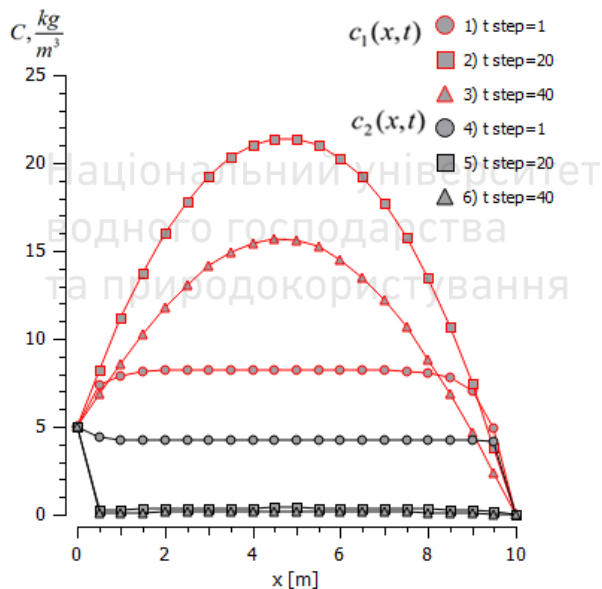


Рис. 3.11. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ (графіки 1, 2, 3) та $c_2(x)$ (графіки 4, 5, 6) по глибині шару ґрунту x для різних часових кроків: 1) і 4) 30 діб, 2) і 5) 20 міс., 3) і 6) 40 міс.

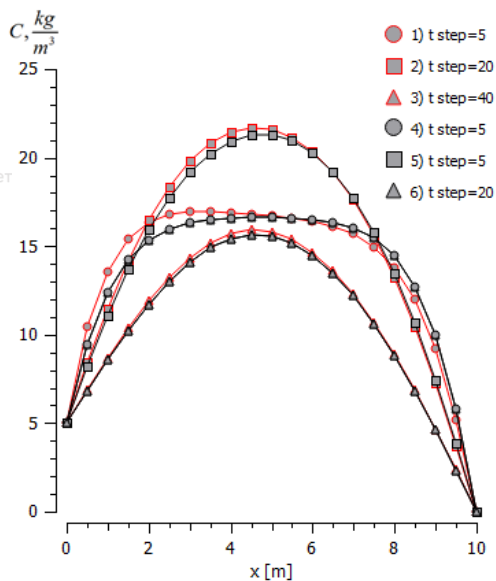


Рис. 3.12. Порівняльний розподіл концентрацій $c_1(x)$ по глибині шару ґрунту x для неізотермічного (графіки 1, 2, 3) та ізотермічного (графіки 4, 5, 6) випадків для різних часових кроків: 1) і 4) 5 міс., 2) і 5) 20 міс., 3) і 6) 40 міс.

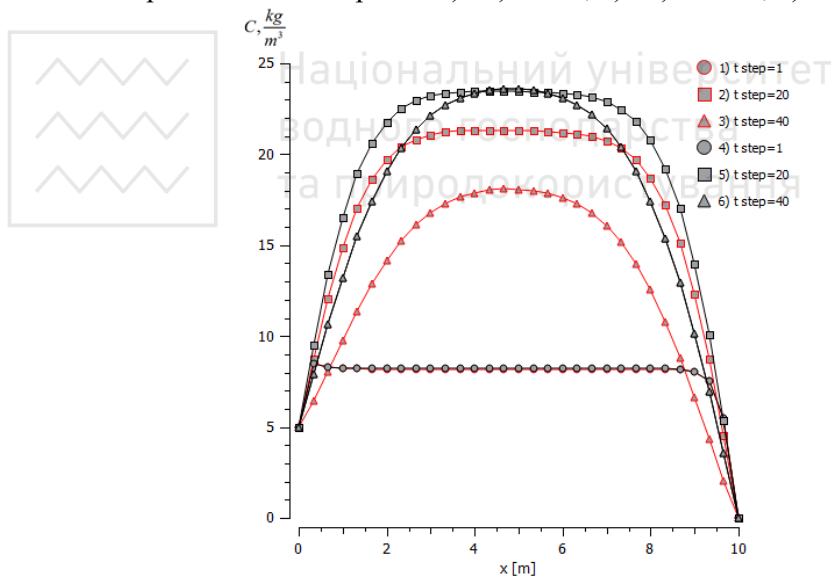


Рис. 3.13. Порівняльний розподіл концентрацій $c_1(x)$ по глибині шару ґрунту x з урахуванням дифузії радіонуклідів в частинках радіуса R (графіки 1, 2, 3) і без врахування (графіки 4, 5, 6) для різних часових кроків: 1) і 4) 30 діб, 2) і 5) 20 міс., 3) і 6) 40 міс.

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 [59; 122; 245].

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 [244; 246–251].

РОЗДІЛ 4

МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДВОВИМІРНОЇ МІГРАЦІЇ РАДІОНУКЛІДІВ ПРИ ФІЛЬТРАЦІЇ ПІДЗЕМНИХ ВОД ДО СИСТЕМИ ГОРИЗОНТАЛЬНИХ ФІЛЬТРІВ- ВЛОВЛЮВАЧІВ У КАТАЛІТИЧНОМУ ПОРИСТОМУ СЕРЕДОВИЩІ



водного
та природокористування

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. Стационарна 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 зв'язаній зі скелетом ґрунту та в самому скелеті ґрунту (твердій фазі).

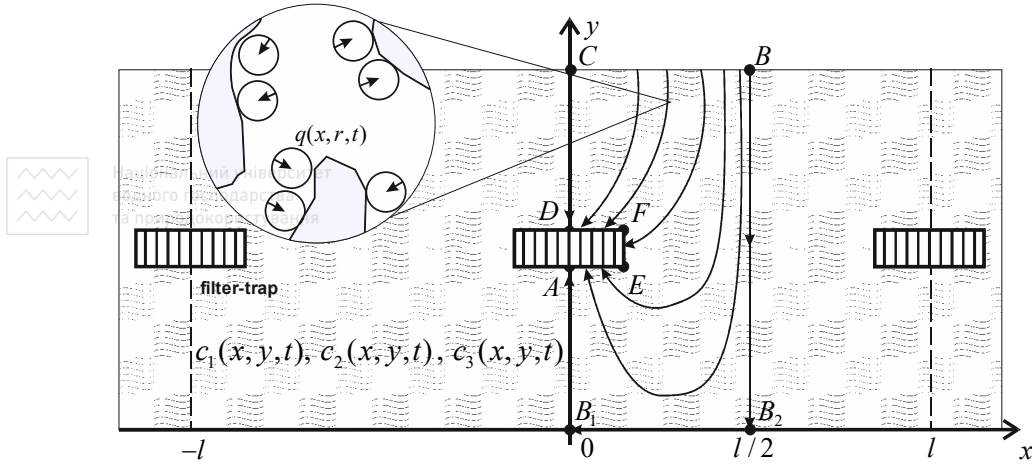


Рис. 4.1. Міграція забруднюючих речовин у насиченому пористому середовищі до фільтрів-вловлювачів

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:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial y} \right)}{\partial y} - v_x \frac{\partial c_1}{\partial x} - v_y \frac{\partial c_1}{\partial y} - \\ - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2 = \sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (x, y) \in \Omega, \quad t > 0, \end{aligned} \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial y} \right)}{\partial y} + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 + \gamma_3 c_3 - \theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R} = \frac{\partial c_2}{\partial t}, \quad (x, y) \in \Omega, \quad t > 0, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \left(D_3(c_3) \frac{\partial c_3}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(D_3(c_3) \frac{\partial c_3}{\partial y} \right)}{\partial y} + \gamma_2 c_2 - \gamma_3 c_3 = \sigma_1 \frac{\partial c_3}{\partial t}, \quad (x, y) \in \Omega, \quad t > 0, \quad (4.3)$$

$$D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right) = \frac{\partial q}{\partial t}, \quad r \in (0, R), \quad t > 0, \quad (4.4)$$

$$v_x = -K(c_1) \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad v_y = -K(c_1) \frac{\partial h}{\partial y} + v \frac{\partial c_1}{\partial y}, \quad \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0, \quad (4.5)$$

$$\left. \frac{\partial q(x, y, r, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad q(x, y, r, t) \Big|_{r=R} = \frac{k_f \cdot c_2^\beta(x, t)}{1 + \eta \cdot c_2^\beta(x, t)}, \quad (x, y) \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0, \quad (4.6)$$



Національний університет
водного господарства
та природокористування

$$\left. \frac{\partial h}{\partial n} \right|_{AB_1 \cup B_1 B_2 \cup B_2 B \cup CD} = 0, \quad h \Big|_{CB} = H_1, \quad h \Big|_{AE \cup EF \cup FD} = H_2, \quad (4.7)$$

$$l_1 c_1 \Big|_{CB} = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_2 \Big|_{CB} = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_3 c_3 \Big|_{CB} = \tilde{C}_3^1(t), \quad (4.8)$$

$$\left. \frac{\partial c_1}{\partial n} \right|_{\Gamma} = \left. \frac{\partial c_2}{\partial n} \right|_{\Gamma} = \left. \frac{\partial c_3}{\partial n} \right|_{\Gamma} = 0, \quad \Gamma = BB_2 \cup B_2 B_1 \cup B_1 A \cup AE \cup EF \cup FD \cup DC, \quad (4.9)$$

$$c_1 \Big|_{t=0} = \tilde{C}_1^0(x, y), \quad c_2 \Big|_{t=0} = \tilde{C}_2^0(x, y), \quad c_3 \Big|_{t=0} = \tilde{C}_3^0(x, y), \quad (4.10)$$

$$q \Big|_{t=0} = \tilde{Q}^0(x, y, r), \quad (x, y) \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad (4.11)$$

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» [119]); $q(x, y, r, t)$, 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; $l_i, i=1,6$ – диференціальні оператори, які задають граничні умови при $x=0$ і $x=l$; t – час, $0 < t < t_i$, 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'єзометричного 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 [190; 191].

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 [229].

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, Oz і Ot для змінних x, y, r, t відповідно наступна:

$$\omega_{h_1, h_2, h_3, \tau} = \left\{ \begin{array}{l} x_i = i_1 h_1, y_{i_2} = i_2 h_2, r_j = j h_3, t_k = k \tau, \\ i_1 = \overline{0, n_1}, i_2 = \overline{0, n_2}, j = \overline{0, n_3}, k = \overline{0, n_4}, \\ h_1 n_1 = l_1, h_2 n_2 = l_2, h_3 n_3 = R, \tau n_4 = T, \end{array} \right\},$$

де n_1, n_2, n_3, n_4 – кількість кроків.

Згідно локально-одновимірного методу О. А. Самарського представимо диференціальне рівняння (4.1) у вигляді системи двох одновимірних рівнянь:

$$D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c_1}{\partial x} - \frac{\gamma_1 c_1}{2} + \frac{\gamma_2 c_2}{2} = \frac{\sigma_1}{2} \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (4.12)$$

$$D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2} - v_y \frac{\partial c_1}{\partial y} - \frac{\gamma_1 c_1}{2} + \frac{\gamma_2 c_2}{2} = \frac{\sigma_1}{2} \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (4.13)$$

де $(x, y) \in \Omega, r \in (0, R), t > 0$.

Скінченно-різницеві аналоги рівнянь (4.12), (4.13) приймуть відповідно наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \sigma'_1 \frac{c_{1, i_1, j_2}^{(k+0,5)} - c_{1, i_1, j_2}^{(k)}}{\tau} &= (\chi_1)_{i_1, j_2}^{(k)} \frac{c_{1, i_1+1, j_2}^{(k+0,5)} - 2c_{1, i_1, j_2}^{(k+0,5)} + c_{1, i_1-1, j_2}^{(k+0,5)}}{h_1^2} + \\ &+ \frac{(r_1^+)^{(k)}_{i_1, j_2} c_{1, i_1+1, j_2}^{(k+0,5)} - c_{1, i_1, j_2}^{(k+0,5)}}{D_1 h_1} + \frac{(r_1^-)^{(k)}_{i_1, j_2} c_{1, i_1, j_2}^{(k+0,5)} - c_{1, i_1-1, j_2}^{(k+0,5)}}{D_1 h_1} - \frac{\gamma'_1 c_{1, i_1, j_2}^{(k+0,5)}}{2} + \frac{\gamma'_2 c_{2, i_1, j_2}^{(k+0,5)}}{2}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\sigma'_1 \frac{c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)} - c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} = (\chi_2)_{i_1,i_2}^{(k)} \frac{c_{1,i_1,i_2+1}^{(k+1)} - 2c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)} + c_{1,i_1,i_2-1}^{(k+1)}}{h_{12}^2} + \frac{(r_2^+)_{i_1,i_2}^{(k)}}{D_1} \frac{c_{1,i_1,i_2+1}^{(k+1)} - c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)}}{h_{12}} +$$

$$+ \frac{(r_2^-)_{i_1,i_2}^{(k)}}{D_1} \frac{c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)} - c_{1,i_1,i_2-1}^{(k+1)}}{h_{12}} - \frac{\gamma'_1 c_{1,i_1,i_2}^{(k+1)}}{2} + \frac{\gamma'_2 c_{2,i_1,i_2}^{(k+1)}}{2},$$

$$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, k = \overline{0, n_3},$$

де

$$\sigma'_1 = \frac{\sigma_1}{D_1}, \gamma'_1 = \frac{\gamma_1}{D_1}, \gamma'_2 = \frac{\gamma_2}{D_1},$$

$$(\chi_{i_3})_{i_1,i_2}^{(k)} = \frac{1}{1 + \frac{h_{i_3} |(r_{i_3})_{i_1,i_2}^{(k)}|}{2D_1}} = 1 - \frac{h_{i_3} |(r_{i_3})_{i_1,i_2}^{(k)}|}{2D_1} + O(h_{i_3}^2),$$

$$(r_{i_3}^+)_{i_1,i_2}^{(k)} = \frac{-(V_{i_3}^-)_{i_1,i_2}^{(k)} + |(V_{i_3})_{i_1,i_2}^{(k)}|}{2} \geq 0, \quad (r_{i_3}^-)_{i_1,i_2}^{(k)} = \frac{-(V_{i_3})_{i_1,i_2}^{(k)} - |(V_{i_3}^-)_{i_1,i_2}^{(k)}|}{2} \leq 0,$$

$$(r_{i_3})_{i_1,i_2}^{(k)} = (r_{i_3}^+)_{i_1,i_2}^{(k)} + (r_{i_3}^-)_{i_1,i_2}^{(k)}, \quad i_3 = 1, 2.$$

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-різницевий аналог рівнянь (4.16), (4.17) має вигляд

$$\frac{c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)} - c_{2,i_1,i_2}^{(k)}}{\tau} = D_2 \frac{c_{2,i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} - 2c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)} + c_{2,i_1-1,i_2}^{(k+0,5)}}{h_{11}^2} + \frac{\gamma_1 c_{1,i_1,i_2}^{(k)}}{2} - \frac{\gamma_2 c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2} +$$

$$+ \frac{\gamma_3 c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2} - \frac{\theta}{2} \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+0,5)} - 2q_{n_2-1}^{(k+0,5)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+0,5)}}{h_2} \right), \quad (4.18)$$

$$\frac{c_{2,i_1,i_2}^{(k+1)} - c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} = D_2 \frac{c_{2,i_1,i_2+1}^{(k+1)} - 2c_{2,i_1,i_2}^{(k+1)} + c_{2,i_1,i_2-1}^{(k+1)}}{h_{12}^2} + \frac{\gamma_1 c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2} - \frac{\gamma_2 c_{2,i_1,i_2}^{(k+1)}}{2} +$$

$$+ \frac{\gamma_3 c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)}}{2} - \frac{\theta}{2} \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \quad (4.19)$$



Національний університет
водного господарства
та природокористування

$$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad k = \overline{0, n_3}.$$

Згідно локально-одновимірного методу О.А. Самарського диференціальне рівняння (4.3) розщеплюється на такі одновимірні рівняння:

$$D_3 \frac{\partial^2 c_3}{\partial x^2} + \frac{\gamma_2 c_2}{2} - \frac{\gamma_3 c_3}{2} = \frac{\sigma_1}{2} \frac{\partial c_3}{\partial t}, \quad (4.20)$$

$$D_3 \frac{\partial^2 c_3}{\partial y^2} + \frac{\gamma_2 c_2}{2} + \frac{\gamma_3 c_3}{2} = \frac{\sigma_1}{2} \frac{\partial c_3}{\partial t}, \quad (4.21)$$

$$(x, y) \in \Omega, \quad t > 0.$$

Відповідно їх скінченно-різницеві аналоги представимо у вигляді

$$\sigma_1 \frac{c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)} - c_{3,i_1,i_2}^{(k)}}{\tau} = D_3 \frac{c_{3,i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} - 2c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)} + c_{3,i_1-1,i_2}^{(k+0,5)}}{h_{11}^2} + \frac{\gamma_2 c_{2,i_1,i_2}^{(k)}}{2} - \frac{\gamma_3 c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2}, \quad (4.22)$$

$$\sigma_1 \frac{c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)} - c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} = D_3 \frac{c_{3,i_1,i_2+1}^{(k+1)} - 2c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)} + c_{3,i_1,i_2-1}^{(k+1)}}{h_{12}^2} + \frac{\gamma_2 c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2} - \frac{\gamma_3 c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)}}{2}, \quad (4.23)$$

$$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad k = \overline{0, n_3}.$$

Скінченно-різницевий аналог рівняння (4.4) прийме наступний вигляд:

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau'} = \bar{\chi} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - 2q_j^{(k+1)} + q_{j-1}^{(k+1)}}{h^2} + \frac{\tilde{r}_+}{D_0} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} + \frac{\tilde{r}_-}{D_0} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2}, \quad (4.24)$$

$$j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{0, n_3},$$

$$\text{де } \bar{\chi} = \frac{1}{1 + \frac{h_2 |\tilde{r}|}{2D_0}} = 1 - \frac{h_2 |\tilde{r}|}{2D_0} + O(h_2^2), \quad \tilde{r} = \frac{2}{r}, \quad \tau' = D_0 \tau, \quad \tilde{r}_+ = \frac{-\tilde{r} + |\tilde{r}|}{2} \geq 0, \quad \tilde{r}_- = \frac{-\tilde{r} - |\tilde{r}|}{2} \geq 0,$$

$$\tilde{r} = \tilde{r}_+ + \tilde{r}_-.$$

Для компонент швидкості фільтрації (4.5) маємо такі різницеві аналоги:

$$(\mathbf{v}_x)_{i_1, i_2}^{(k)} = -(K_1)_{i_1, i_2}^{(k)} \frac{h_{i_1+1, i_2} - h_{i_1-1, i_2}}{2h_{i_1}} + (\mathbf{v}_1)_{i_1, i_2}^{(s)} \frac{c_{1, i_1+1, i_2}^{(k)} - c_{1, i_1-1, i_2}^{(k)}}{2h_{i_1}}, \quad (4.25)$$

$$(\mathbf{v}_y)_{i_1, i_2}^{(k)} = -(K_2)_{i_1, i_2}^{(k)} \frac{h_{i_1, i_2+1} - h_{i_1, i_2-1}}{2h_{i_2}} + (\mathbf{v}_2)_{i_1, i_2}^{(s)} \frac{c_{1, i_1, i_2+1}^{(k)} - c_{1, i_1, i_2-1}^{(k)}}{2h_{i_2}}, \quad (4.26)$$

$$i_1 = \overline{1, n_{11}-1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12}-1}, \quad k = \overline{0, n_3}.$$

Для використання методу прогонки запишемо рівняння (4.14) в наступній формі:

$$\begin{cases} a_i^1 c_{1, i_1-1, i_2}^{(k+0,5)} - \bar{c}_i^1 c_{1, i_1, i_2}^{(k+0,5)} + b_i^1 c_{1, i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} = -f_{i_1, i_2}^{1, (k+0,5)}, \\ c_{1, 0, i_2}^{(k+0,5)} = \mu_{11}^1 c_{1, 1, i_2}^{(k+0,5)} + \mu_{12}^1, \\ c_{1, n_{11}, i_2}^{(k+0,5)} = \mu_{13}^1 c_{1, n_{11}-1, i_2}^{(k+0,5)} + \mu_{14}^1, \end{cases}$$

де

$$a_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{(\chi_1)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{i_1}^2} - \frac{(r_1^-)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{i_1} D_1} \right), \quad b_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{(\chi_1)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{i_1}^2} + \frac{(r_1^+)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{i_1} D_1} \right),$$

$$\bar{c}_i^1 = 1 + \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{2(\chi_1)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{i_1}^2} + \frac{1}{h_{i_1} D_1} \left((r_1^+)_{i_1, i_2}^{(k)} - (r_1^-)_{i_1, i_2}^{(k)} \right) + \frac{\gamma_1'}{2} \right),$$

$$f_{i_1, i_2}^{1, (k+0,5)} = c_{1, i_1, i_2}^{(k)} + \frac{\tau}{\sigma_1'} \frac{\gamma_2' c_{2, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{2},$$

$$\mu_{11}^1 = 1, \quad \mu_{12}^1 = 0, \quad \mu_{13}^1 = 1, \quad \mu_{14}^1 = 0.$$

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

$$c_{1, i_1, i_2}^{(k+0,5)} = \alpha_{i_1+1}^1 c_{1, i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} + \beta_{i_1+1}^1, \quad (4.27)$$

$$\text{де } \alpha_{i_1+1}^1 = \frac{b_{i_1}^1}{\bar{c}_i^1 - \alpha_{i_1}^1 a_{i_1}^1}, \quad \beta_{i_1+1}^1 = \frac{a_{i_1}^1 \beta_{i_1}^1 + f_{i_1, i_2}^{1, (k+0,5)}}{\bar{c}_i^1 - \alpha_{i_1}^1 a_{i_1}^1}, \quad i_1 = \overline{1, n_{11}-1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12}-1}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

$$\alpha_{i_1}^1 = \mu_{11}^1 = 1, \quad \beta_{i_1}^1 = \mu_{12}^1 = 0.$$

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

$$a_{i_2}^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{(\chi_2)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{12}^2} - \frac{(r_2^-)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{12} D_1} \right), \quad b_{i_2}^1 = \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{(\chi_2)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{12}^2} + \frac{(r_2^+)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{12} D_1} \right),$$



Національний університет
водного господарства
та природокористування

$$\bar{c}_{i_1}^1 = 1 + \frac{\tau}{\sigma_1'} \left(\frac{2(\chi_2)_{i_1, i_2}^{(k)}}{h_{12}^2} + \frac{1}{h_{12} D_1} \left((r_2^+)_{i_1, i_2}^{(k)} - (r_2^-)_{i_1, i_2}^{(k)} \right) + \frac{\gamma_1'}{2} \right),$$

$$f_{i_1, i_2}^{1, (k+1)} = c_{1, i_1, i_2}^{(k+0,5)} + \frac{\tau}{\sigma_1'} \frac{\gamma_2' c_{2, i_1, i_2}^{(k+1)}}{2},$$

$$\mu_{21}^1 = 0, \quad \mu_{22}^1 = \tilde{C}_2, \quad \mu_{23}^1 = 1, \quad \mu_{24}^1 = 0.$$

Можна показати, що умови стійкості методу прогонки виконуються, оскільки справедливе співвідношення $|\bar{c}_{i_1}^1| > |a_{i_1}^2| + |b_{i_1}^2|$. 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 $\alpha_{i_2+1}^1 = \frac{b_{i_2}^1}{\bar{c}_{i_1}^1 - \alpha_{i_2}^1 a_{i_2}^1}$, $\beta_{i_2+1}^1 = \frac{a_{i_2}^1 \beta_{i_2}^1 + f_{i_1, i_2}^{1, (k+1)}}{\bar{c}_{i_1}^1 - \alpha_{i_2}^1 a_{i_2}^1}$, $i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}$, $i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$,

$$\alpha_{i_2}^1 = \mu_{21}^1 = 0, \quad \beta_{i_2}^1 = \mu_{22}^1 = \tilde{C}_2.$$

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

$$a_{i_1}^2 = \frac{D_2}{h_{11}^2}, \quad b_{i_1}^2 = \frac{D_2}{h_{11}^2}, \quad \bar{c}_{i_1}^2 = \frac{2D_2}{h_{11}^2} + \frac{1}{\tau} + \frac{\gamma_2}{2},$$

$$f_{i_1, i_2}^{2, (k+0,5)} = \frac{c_{2, i_1, i_2}^{(k)}}{\tau} + \frac{\gamma_1 c_{1, i_1, i_2}^{(k)}}{2} + \frac{\gamma_3 c_{3, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{2} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+0,5)} - 2q_{n_2-1}^{(k+0,5)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+0,5)}}{h_2} \right),$$

$$\mu_{11}^2 = 1, \quad \mu_{12}^2 = 0, \quad \mu_{13}^2 = 1, \quad \mu_{14}^2 = 0.$$

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:

$$c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)} = \alpha_{i_1+1}^2 c_{2,i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} + \beta_{i_1+1}^2, \quad (4.29)$$

де $\alpha_{i_1+1}^2 = \frac{b_{i_1}^2}{\bar{c}_i^2 - \alpha_{i_1}^2 a_{i_1}^2}$, $\beta_{i_1+1}^2 = \frac{a_{i_1}^2 \beta_{i_1}^2 + f_{i_1,i_2}^{2,(k+0,5)}}{\bar{c}_i^2 - \alpha_{i_1}^2 a_{i_1}^2}$, $i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}$, $i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$,

$$\alpha_{i_1}^2 = \mu_{11}^2 = 1, \quad \beta_{i_1}^2 = \mu_{12}^2 = 0.$$

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

$$a_{i_2}^2 = \frac{D_2}{h_{i_2}^2}, \quad b_{i_2}^2 = \frac{D_2}{h_{i_2}^2}, \quad \bar{c}_{i_2}^2 = \frac{2D_2}{h_{i_2}^2} + \frac{1}{\tau} + \frac{\gamma_2}{2},$$

$$f_{i_1,i_2}^{2,(k+1)} = \frac{c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} + \frac{\gamma_1 c_{1,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2} + \frac{\gamma_3 c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)}}{2} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_3}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right),$$

$$\mu_{21}^2 = 1, \quad \mu_{22}^2 = 0, \quad \mu_{23}^2 = 1, \quad \mu_{24}^2 = 0.$$

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

$$c_{2,i_1,i_2}^{(k+1)} = \alpha_{i_2+1}^2 c_{2,i_1,i_2+1}^{(k+1)} + \beta_{i_2+1}^2, \quad (4.30)$$

де $\alpha_{i_2+1}^2 = \frac{b_{i_2}^2}{\bar{c}_i^2 - \alpha_{i_2}^2 a_{i_2}^2}$, $\beta_{i_2+1}^2 = \frac{a_{i_2}^2 \beta_{i_2}^2 + f_{i_1,i_2}^{2,(k+1)}}{\bar{c}_i^2 - \alpha_{i_2}^2 a_{i_2}^2}$, $i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}$, $i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$,

$$\alpha_{i_2}^2 = \mu_{21}^2 = 0, \quad \beta_{i_2}^2 = \mu_{22}^2 = \tilde{C}_2.$$

Для використання методу прогонки при розв'язуванні крайової задачі (4.22) з відповідними граничними умовами, представимо (4.22) у вигляді



$$\begin{cases} a_i^3 c_{3,i-1,i_2}^{(k+0,5)} - \bar{c}_i^3 c_{3,i,i_2}^{(k+0,5)} + b_i^3 c_{3,i+1,i_2}^{(k+0,5)} = -f_{i,i_2}^{3,(k)}, \\ c_{3,0,i_2}^{(k+0,5)} = \mu_{11}^3 c_{3,1,i_2}^{(k+0,5)} + \mu_{12}^3, \\ c_{3,n_{11},i_2}^{(k+0,5)} = \mu_{13}^3 c_{3,n_{11}-1,i_2}^{(k+0,5)} + \mu_{14}^3, \end{cases}$$

де $a_i^3 = \frac{D_3}{h_{11}^2}$, $b_i^3 = \frac{D_3}{h_{11}^2}$, $\bar{c}_i^3 = \frac{2D_3}{h_{11}^2} + \frac{\sigma_1}{\tau} + \frac{\gamma_3}{2}$, $f_{i,i_2}^{3,(k)} = \frac{c_{3,i,i_2}^{(k)}}{\tau} + \frac{\gamma_2 c_{2,i,i_2}^{(k)}}{2}$, $\mu_{11}^3 = 1$, $\mu_{12}^3 = 0$,
 $\mu_{13}^3 = 1$, $\mu_{14}^3 = 0$.

Переконуємося, 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:

$$c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)} = \alpha_{i_1+1}^3 c_{3,i_1+1,i_2}^{(k+0,5)} + \beta_{i_1+1}^3, \quad (4.31)$$

де $\alpha_{i_1+1}^3 = \frac{b_{i_1}^3}{\bar{c}_{i_1}^3 - \alpha_{i_1}^3 a_{i_1}^3}$, $\beta_{i_1+1}^3 = \frac{a_{i_1}^3 \beta_{i_1}^3 + f_{i_1,i_2}^{3,(k)}}{\bar{c}_{i_1}^3 - \alpha_{i_1}^3 a_{i_1}^3}$, $i_1 = \overline{1, n_{11}-1}$, $i_2 = \overline{1, n_{12}-1}$, $k = \overline{1, n_3}$,
 $\alpha_{i_1}^3 = \mu_{11}^3 = 1$, $\beta_{i_1}^3 = \mu_{12}^3 = 0$.

Представимо рівняння (4.23) відповідної крайової задачі наступним чином:

$$\begin{cases} a_{i_2}^3 c_{3,i_1,i_2-1}^{(k+1)} - \bar{c}_{i_2}^3 c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)} + b_{i_2}^3 c_{3,i_1,i_2+1}^{(k+1)} = -f_{i_1,i_2}^{3,(k+0,5)}, \\ c_{3,i_1,0}^{(k+1)} = \mu_{21}^3 c_{3,i_1,1}^{(k+1)} + \mu_{22}^3, \\ c_{3,i_1,n_{12}}^{(k+1)} = \mu_{23}^3 c_{3,i_1,n_{12}-1}^{(k+1)} + \mu_{24}^3, \end{cases}$$

де $a_{i_2}^3 = \frac{D_3}{h_{12}^2}$, $b_{i_2}^3 = \frac{D_3}{h_{12}^2}$, $\bar{c}_{i_2}^3 = \frac{2D_3}{h_{12}^2} + \frac{\sigma_1}{\tau} + \frac{\gamma_3}{2}$, $f_{i_1,i_2}^{3,(k+0,5)} = \frac{c_{3,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} + \frac{\gamma_2 c_{2,i_1,i_2}^{(k+0,5)}}{2}$,
 $\mu_{21}^3 = 0$, $\mu_{22}^3 = \tilde{C}_3$, $\mu_{23}^3 = 1$, $\mu_{24}^3 = 0$.

Як і вище, умови стійкості прогонки виконуються: $|\bar{c}_{i_2}^3| > |a_{i_2}^3| + |b_{i_2}^3|$. Значення концентрації $c_3(x, y, t)$ на часовому кроці $(k+1)$ ми знаходимо згідно наступного рівняння:

$$c_{3,i_1,i_2}^{(k+1)} = \alpha_{i_2+1}^3 c_{3,i_1,i_2+1}^{(k+1)} + \beta_{i_2+1}^3, \quad (4.32)$$

де $\alpha_{i_2+1}^3 = \frac{b_{i_2}^3}{\bar{c}_{i_2}^3 - \alpha_{i_2}^3 a_{i_2}^3}$, $\beta_{i_2+1}^3 = \frac{a_{i_2}^3 \beta_{i_2}^3 + f_{i_1,i_2}^{3,(k+0,5)}}{\bar{c}_{i_2}^3 - \alpha_{i_2}^3 a_{i_2}^3}$, $i_1 = \overline{1, n_{11}-1}$, $i_2 = \overline{1, n_{12}-1}$, $k = \overline{1, n_3}$,
 $\alpha_{i_2}^3 = \mu_{21}^3 = 0$, $\beta_{i_2}^3 = \mu_{22}^3 = \tilde{C}_3$.

Подано рівняння (4.24) у наступному вигляді задля подальшого застосування методу прогонки при розв'язуванні крайової задачі (4.24):

$$\begin{cases} a_j^4 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^4 q_j^{(k+1)} + b_j^4 q_{j+1}^{(k+1)} = -q_j^{(k)}, \\ q_0^{(k+1)} = \mu_1^4 q_1^{(k+1)} + \mu_2^4, \\ q_{n_2}^{(k+1)} = \mu_3^4 q_{n_2-1}^{(k+1)} + \mu_4^4, \end{cases}$$

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 $|\bar{c}_j^4| > |a_j^4| + |b_j^4|$. Значення концентрації $q(x, r, t)$ на часовому кроці $(k+1)$ знаходимо із наступного співвідношення:

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^4 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^4, \quad (4.33)$$

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:

$$c_{1, i_1, i_2}^{(0)} = \tilde{C}_1^0(i_1 h_{11}, i_2 h_{12}), \quad c_{2, i_1, i_2}^{(0)} = \tilde{C}_2^0(i_1 h_{11}, i_2 h_{12}), \quad c_{3, i_1, i_2}^{(0)} = \tilde{C}_3^0(i_1 h_{11}, i_2 h_{12}), \\ q_j^{(0)} = \tilde{Q}^0(j h_2),$$

$$i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}.$$

Для граничних умов першого роду (4.7), (4.8) отримаємо

$$c_{1, i_1, n_{12}}^{(k)} = \tilde{C}_1^1(i_1 h_{11}, k \tau), \quad c_{2, i_1, n_{12}}^{(k)} = \tilde{C}_2^1(i_1 h_{11}, k \tau), \quad c_{3, i_1, n_{12}}^{(k)} = \tilde{C}_3^1(i_1 h_{11}, k \tau), \quad i_1 = \overline{0, n_{11}}, \\ k = \overline{0, n_3}.$$

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-різничевої апроксимації часткових похідних, отримаємо:

$$K_{i_1, j_2}^{(k)} \left(\frac{h_{i_1+1, j_2} - 2h_{i_1, j_2} + h_{i_1-1, j_2}}{h_{11}^2} + \frac{h_{i_1, j_2+1} - 2h_{i_1, j_2} + h_{i_1, j_2-1}}{h_{12}^2} \right) + \frac{K_{i_1+1, j_2}^{(k)} - K_{i_1, j_2}^{(k)}}{h_{11}} \frac{h_{i_1+1, j_2} - h_{i_1, j_2}}{h_{11}} + \frac{K_{i_1, j_2+1}^{(k)} - K_{i_1, j_2}^{(k)}}{h_{12}} \frac{h_{i_1, j_2+1} - h_{i_1, j_2}}{h_{12}} - v \left(\frac{c_{1, i_1+1, j_2}^{(k)} - 2c_{1, i_1, j_2}^{(k)} + c_{1, i_1-1, j_2}^{(k)}}{h_{11}^2} + \frac{c_{1, i_1, j_2+1}^{(k)} - 2c_{1, i_1, j_2}^{(k)} + c_{1, i_1, j_2-1}^{(k)}}{h_{12}^2} \right) = 0, \quad (4.34)$$

$$i_1 = \overline{1, n_{11}-1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12}-1}, \quad k = \overline{0, n_3}.$$

Для знаходження значень напору з різницевого рівняння (4.34) модифікуємо ітераційний метод Гауса-Зейделя. Зведемо дане рівняння до вигляду

$$h_{i_1, j_2}^{(z+1)} = \tilde{A} h_{i_1+1, j_2}^{(z)} + \tilde{B} h_{i_1-1, j_2}^{(z+1)} + \tilde{C} h_{i_1, j_2+1}^{(z)} + \tilde{D} h_{i_1, j_2-1}^{(z+1)} + \tilde{f}_{i_1, j_2}^{(k)}, \quad (4.35)$$

де

$$\tilde{A} = \frac{K_{i_1+1, j_2}^{(k)}}{\tilde{\Lambda} h_{11}^2}, \quad \tilde{B} = \frac{K_{i_1, j_2}^{(k)}}{\tilde{\Lambda} h_{11}^2}, \quad \tilde{C} = \frac{K_{i_1, j_2+1}^{(k)}}{\tilde{\Lambda} h_{12}^2}, \quad \tilde{D} = \frac{K_{i_1, j_2}^{(k)}}{\tilde{\Lambda} h_{12}^2}, \quad \tilde{\Lambda} = \frac{K_{i_1+1, j_2}^{(k)} + K_{i_1, j_2}^{(k)}}{h_{11}^2} + \frac{K_{i_1, j_2+1}^{(k)} + K_{i_1, j_2}^{(k)}}{h_{12}^2},$$

$$\tilde{f}_{i_1, j_2}^{(s)} = -\frac{v}{\tilde{\Lambda}} \left(\frac{c_{1, i_1+1, j_2}^{(k)} - 2c_{1, i_1, j_2}^{(k)} + c_{1, i_1-1, j_2}^{(k)}}{h_{11}^2} + \frac{c_{1, i_1, j_2+1}^{(k)} - 2c_{1, i_1, j_2}^{(k)} + c_{1, i_1, j_2-1}^{(k)}}{h_{12}^2} \right).$$

Ітерації за формулою (4.35) проводяться до тих пір, поки різниця значень не стане меншою за деяку задану точність ε

$$|h_{i_1, j_2}^{(z+1)} - h_{i_1, j_2}^{(z)}| \leq \varepsilon,$$

$$i_1 = \overline{1, n_{11}-1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12}-1}, \quad z - \text{номер ітерації.}$$

Значення п'єзометричного напору в нестационарному випадку знаходимо з розв'язку задачі фільтрації (4.5), (4.7). Звідси отримуємо:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K(c_1) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K(c_1) \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(v \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(v \frac{\partial c_1}{\partial y} \right) = a \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (4.36)$$

$$x \in (0, l_1), \quad y \in (0, l_2), \quad t > 0.$$

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



$$\frac{h_{i_1, i_2}^{(k+0,5)} - h_{i_1, i_2}^{(k)}}{\tau} = \frac{1}{ah_1} \left[\left((a_1)_{i_1+1, i_2}^{(k)} \frac{h_{i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} - h_{i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} - (a_1)_{i_1, i_2}^{(k)} \frac{h_{i_1, i_2}^{(k+0,5)} - h_{i_1-1, i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} \right) - \right. \\ \left. - \left((b_1)_{i_1+1, i_2}^{(k)} \frac{c_{1, i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} - c_{1, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} - (b_1)_{i_1, i_2}^{(k)} \frac{c_{1, i_1, i_2}^{(k+0,5)} - c_{1, i_1-1, i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} \right) \right], \quad (4.37)$$

$$\frac{h_{i_1, i_2}^{(k+1)} - h_{i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{\tau} = \frac{1}{ah_2} \left[\left((a_2)_{i_1, i_2+1}^{(k+1)} \frac{h_{i_1, i_2+1}^{(k+1)} - h_{i_1, i_2}^{(k+1)}}{h_2} - (a_2)_{i_1, i_2}^{(k+1)} \frac{h_{i_1, i_2}^{(k+1)} - h_{i_1, i_2-1}^{(k+1)}}{h_2} \right) - \right. \\ \left. - \left((b_2)_{i_1, i_2+1}^{(k+1)} \frac{c_{1, i_1, i_2+1}^{(k+1)} - c_{1, i_1, i_2}^{(k+1)}}{h_2} - (b_2)_{i_1, i_2}^{(k+1)} \frac{c_{1, i_1, i_2}^{(k+1)} - c_{1, i_1, i_2-1}^{(k+1)}}{h_2} \right) \right], \\ i_1 = \overline{1, n_{11} - 1}, \quad i_2 = \overline{1, n_{12} - 1}, \quad k = \overline{0, n_3},$$

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:

$$a_i h_{i_1-1, i_2}^{(k+0,5)} - c_i h_{i_1, i_2}^{(k+0,5)} + b_i h_{i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} = -F_{i_1, i_2}^{(k)},$$

де

$$a_i = \frac{\tau}{ah_1^2} (a_1)_{i_1, i_2}^{(k)}, \quad b_i = \frac{\tau}{ah_1^2} (a_1)_{i_1+1, i_2}^{(k)}, \quad c_i = 1 + \frac{\tau}{ah_1^2} \left((a_1)_{i_1, i_2}^{(k)} + (a_1)_{i_1+1, i_2}^{(k)} \right), \\ F_{i_1, i_2}^{(k)} = h_{i_1, i_2}^{(k)} - \frac{\tau}{ah_1} \left((b_1)_{i_1+1, i_2}^{(k)} \frac{c_{1, i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} - c_{1, i_1, i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} - (b_1)_{i_1, i_2}^{(k)} \frac{c_{1, i_1, i_2}^{(k+0,5)} - c_{1, i_1-1, i_2}^{(k+0,5)}}{h_1} \right).$$

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

$$h_{i_1, i_2}^{(k+0,5)} = \alpha_{i_1+1} h_{i_1+1, i_2}^{(k+0,5)} + \beta_{i_1+1}, \quad (4.39)$$

$$\text{де } \alpha_{i_1+1} = \frac{b_{i_1}}{c_{i_1} - a_{i_1} \alpha_{i_1}}, \beta_{i_1+1} = \frac{a_{i_1} \beta_{i_1} + F_{i_1, i_2}^{(k)}}{c_{i_1} - a_{i_1} \alpha_{i_1}}.$$

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 вищевказаному, легко показати, що умови стійкості прогонки виконуються, оскільки справедлива нерівність $|c_{i_2}| > |a_{i_2}| + |b_{i_2}|$. Значення п'єзометричного 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:

$$l = 10 \text{ м}, \quad AE = 1 \text{ м}, \quad AD = 1 \text{ м}, \quad AB_1 = 4 \text{ м}, \quad \tilde{H}_1 = 1 \text{ м}, \quad \tilde{H}_2 = 0,1 \text{ м},$$

$$R = 1 \cdot 10^{-8} \text{ м}, \quad \sigma_1 = 0,4, \quad k_f = 1, \quad \beta = 1, \quad \eta = 0, \quad \gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = 0,0065,$$

$$\theta = 3 \cdot 10^{-10}, \quad \tau = 30 \text{ діб},$$

$$D_1 = 1 \cdot 10^{-3} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, \quad D_2 = 1 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, \quad D_3 = 1 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}},$$

$$D_0 = 1 \cdot 10^{-17} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}},$$

$$\tilde{C}_2^1(t) = 0 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, \quad \tilde{C}_3^1(t) = 0 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3},$$

$$\tilde{C}_1^0(x) = 5 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, \quad \tilde{C}_2^0(x) = 5 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, \quad \tilde{C}_3^0(x) = 5 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, \quad \tilde{Q}^0(x, r) = 0 \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}.$$

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 двовимірна задача 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).

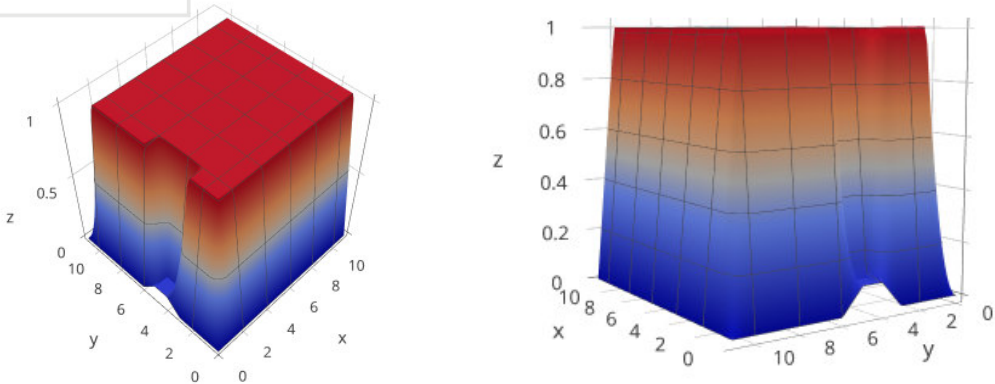


Рис. 4.2. Графіки розподілу п'єзометричних напорів $h(x, y, t)$ в момент часу $t=30$ діб

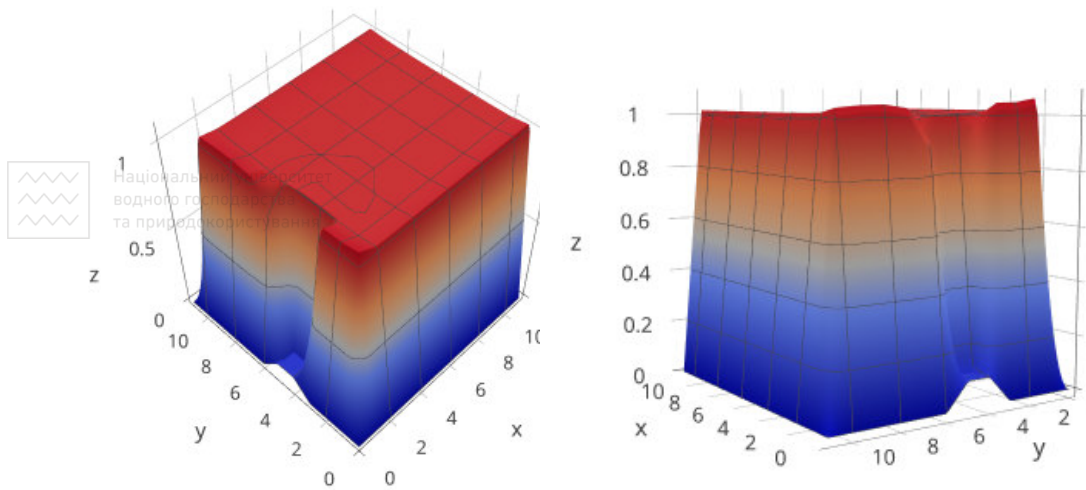


Рис. 4.3. Графіки розподілу п'єзометричних напорів $h(x,y,t)$ в момент часу $t=1$ рік

Наступним етапом було обчислення компонент швидкості фільтрації $v_x(x,y,t)$ та $v_y(x,y,t)$. Відповідні графіки в момент часу $t = 3,5$ 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).

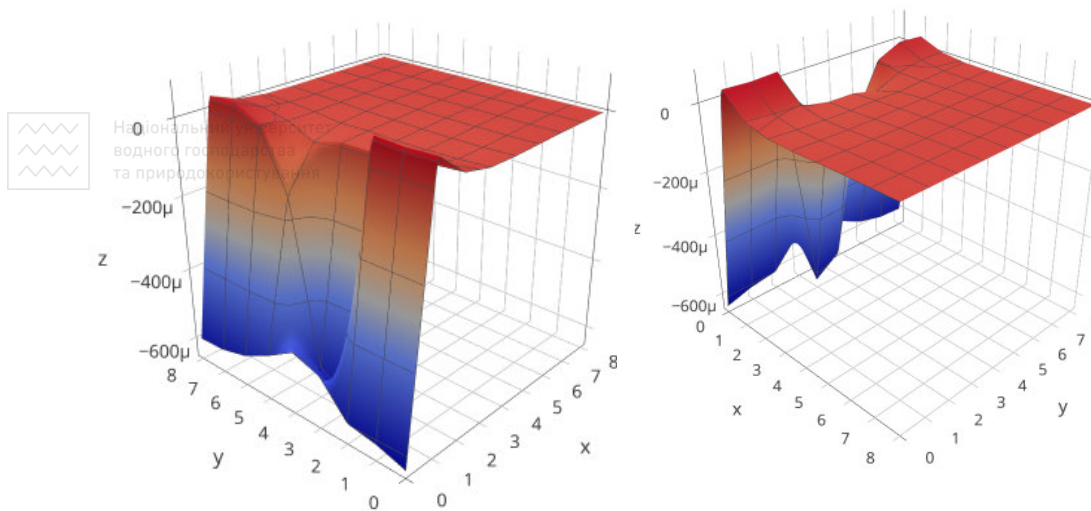


Рис. 4.4. Графіки розподілу компонент швидкості фільтрації $v_x(x, y, t)$ в момент часу $t = 3,5$ роки

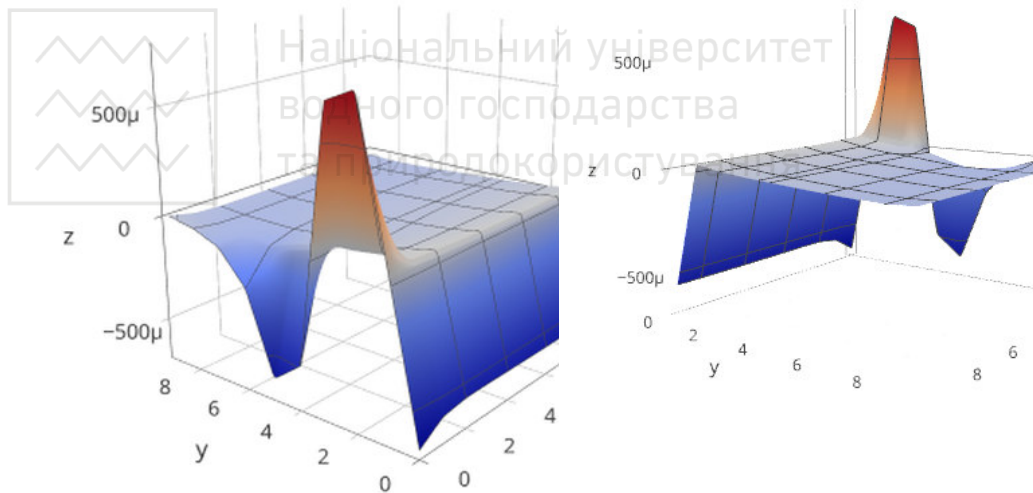


Рис. 4.5. Графіки розподілу компонент швидкості фільтрації $v_y(x, y, t)$ в момент часу $t = 3,5$ роки

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).

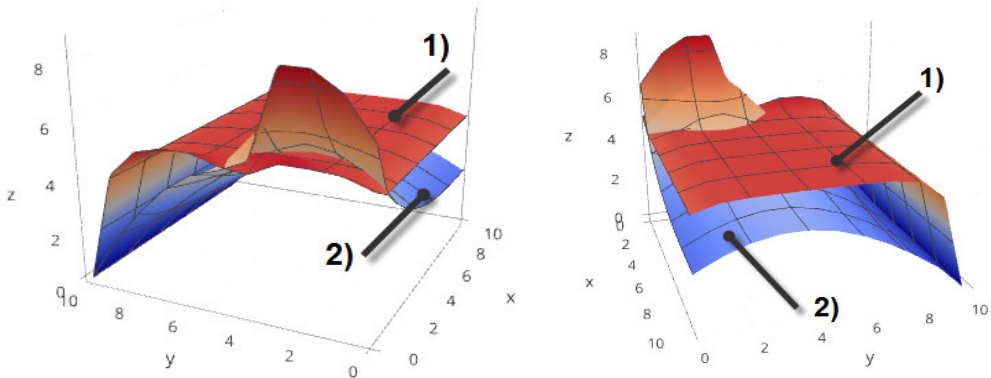


Рис. 4.6. Графіки розподілу значень концентрації $c_1(x, y, t)$ в моменти часу:
1) $t = 2$ місяці та 2) $t = 2$ роки

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 $t=2$ роки 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.

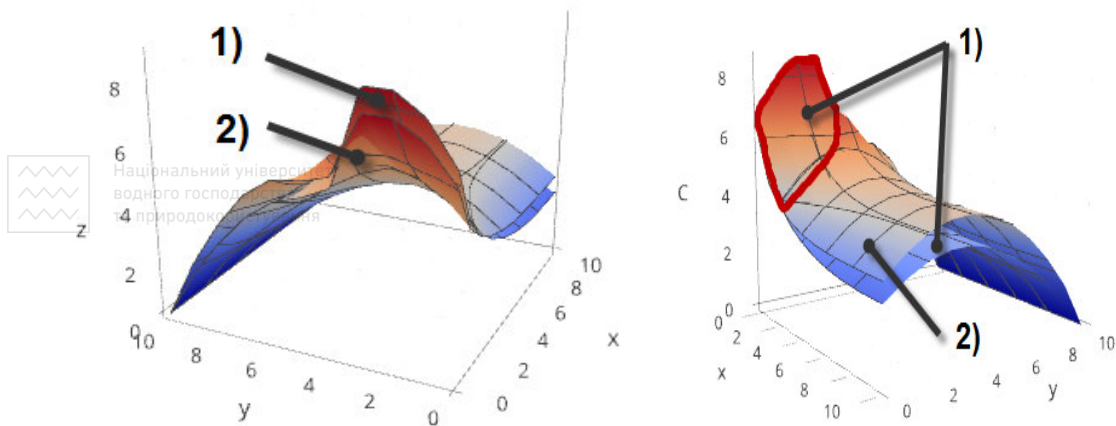


Рис. 4.7. Графіки розподілу значень концентрації $c_1(x, y, t)$ в моменти часу:
 1) $t = 2$ роки та 2) $t = 5$ років

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.

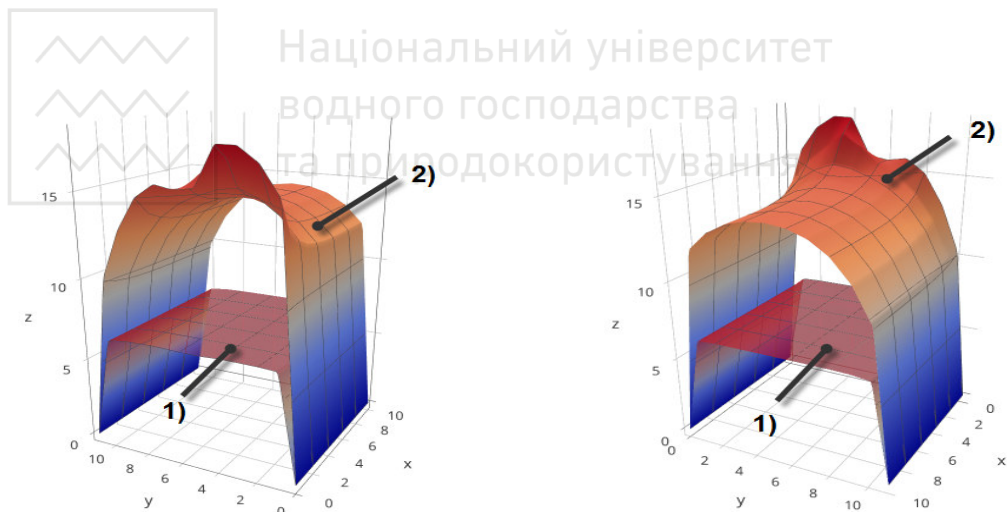


Рис. 4.8. Графіки розподілу значень концентрації $c_2(x, y, t)$ в моменти часу:
 1) $t = 2$ місяці та 2) $t = 1$ рік

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 (табл. 4.1).

Таблиця 4.1

Національний університет водного господарства та природокористування

Вплив дифузії в мікрочастинках

		Y									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x	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%

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 $t = 1$ 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 [252–256].

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 кросплатформного 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

5.1.1. Ієрархія класів основних математичних моделей

Останнім часом дискутується питання про уніфікацію підходу до створення програмних продуктів, стандартизацію математичних моделей та створення їх єдиного реєстру [257]. 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) [258]. 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 патернів проектування [242].

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 [259]. Для чисельного розв'язання

поставленої крайової задачі використано метод скінченних різниць із застосуванням локально-одновимірною методу О.А. Самарського та монотонних різницевоїх схем. Отримано скінченно-різницеві аналоги відповідних диференціальних рівнянь. Чисельний розв'язок різницевоїх схем знайдено методом прогонки. Для цього зведено відповідні диференціальні рівняння до прогнотного 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 [244], з урахуванням взаємодії між рідкою та твердою фазою (скелет ґрунту) [236], неізотермічних умов [260–262], біпористих частинок [263], насиченого та ненасиченого пористого середовищ [243; 264] та інших факторів [265; 266] .

При цьому для чисельних експериментів важливим є порівняння отриманих результатів із попередніми. Тому на основі початкової моделі [259] було спроектовано базовий клас BasicMigrationModel, а всі наступні класи утворили ієрархію класів (рис. 5.1).

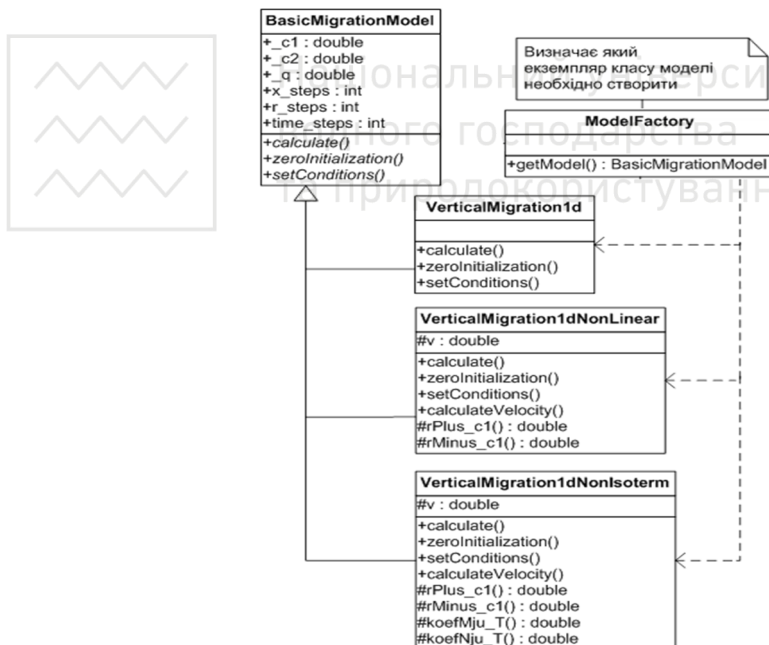


Рис. 5.1. Ієрархія класів основних математичних моделей програмного комплексу NanoSurface

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.

єрархію 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 (табл. 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.

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
```

Варто зауважити, що код алгоритму прогонки повторюється при реалізації алгоритму чисельних обчислень 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 (табл. 5.3).

Таблиця 5.3

Код метод calculate() після ре факторингу

```
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. Користувацький 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 [267]. Вищезазначений фреймворк дає змогу підготувати програму без суттєвої зміни вихідного коду до роботи в таких операційних системах як Windows, Linux, MacOS.



Національний університет
водного господарства та природокористування

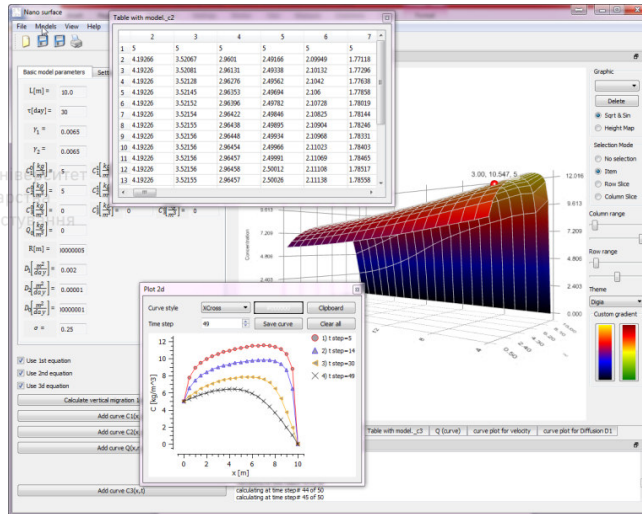


Рис. 5.2. Елементи інтерфейсу програмного комплексу Nanosurface

Важливу роль для зручного комп'ютерного моделювання відіграє інтерфейс користувача [268]. 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.

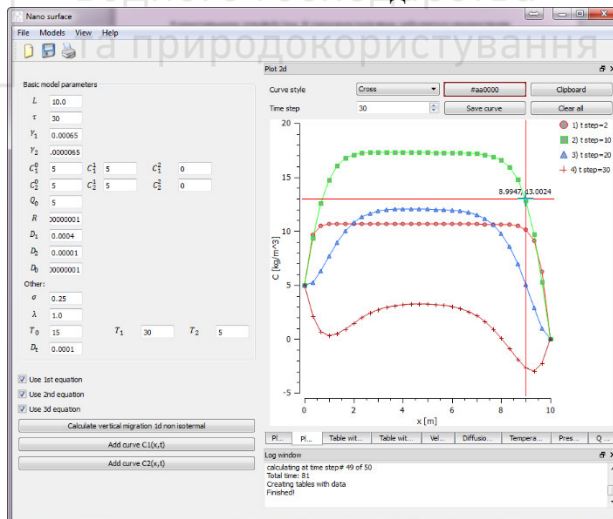


Рис. 5.3. Проведення серії чисельних експериментів за допомогою програмного комплексу NanoSurface

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 `QTableWidget`. 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 Сергіємком І.В., Скопечким В.В. та Дейнекою В.С. [32]. В загальному випадку їх можна зобразити у вигляді схеми, зображеної на рис. 5.4.

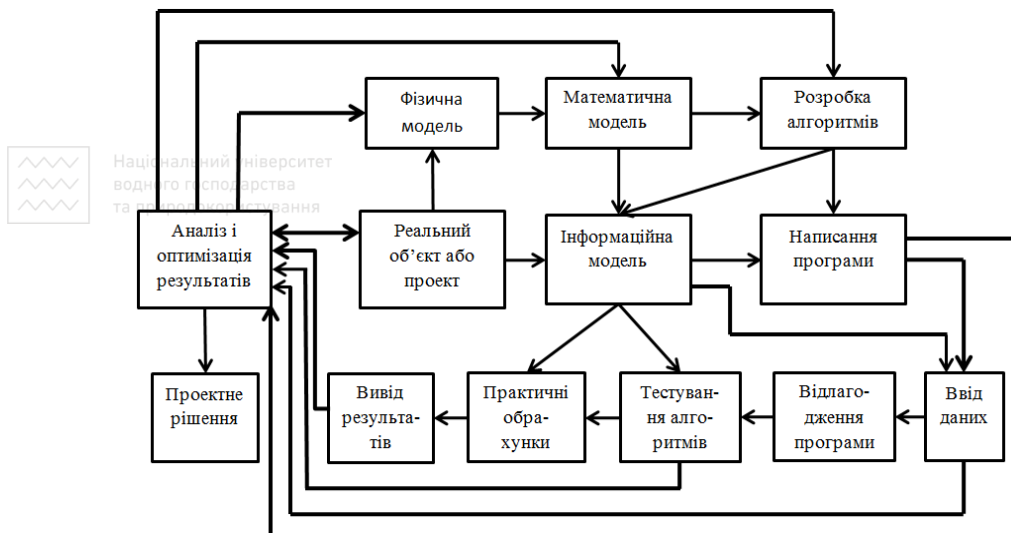


Рис. 5.4. Схема автоматизації процесу конструювання програмного забезпечення

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 проекті 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 проектом 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, перемакнути 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 утилітами SourceMonitor, FORCHECK та CppDepend. Зведені результати, що відображають кількість файлів, рядків коду, коментарів, визначень класів, методів, максимальну середню складність (згідно визначення Стіва Макконела [269]), 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

продовження табл. 5.4

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
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 [269].

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 [270–272]. Більша половина з цих вимог відносяться до стандартних проблем, пов'язаних з розробкою програмного забезпечення [269]. Інша частина правил верифікації пов'язана з науковими обчисленнями, де головною задачею є

перевірка точності представлення у вигляді коду потрібної математичної моделі [273]. 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 [235; 244]. 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).

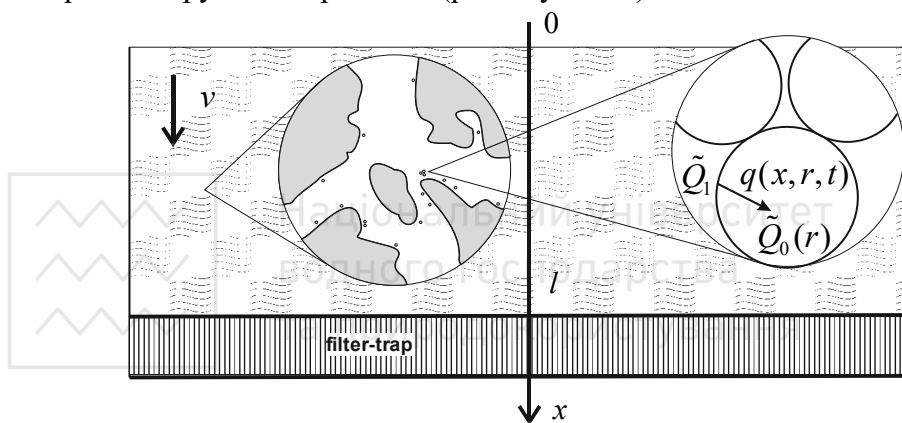


Рис. 5.5. Схема вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі

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 [151; 235; 274]:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0, \quad (5.1)$$

$$q(x, r, 0) = \tilde{Q}_0(r), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad (5.2)$$

$$q(x, R, t) = 0, \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad t > 0. \quad (5.3)$$

Тут використані наступні позначення: $\mathbf{X} = \{x\}$ – точка області Ω , m ; r – радіус частинки, m ; 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

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0. \quad (5.4)$$

5.2.3. Аналітичний розв'язок

Аналітичний розв'язок (5.4) при відповідних крайових умовах (5.2) та (5.3) можна знайти аналітичним способом [275]. 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 $\tilde{Q}_1 = const$.

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 $u(x, r, t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \right), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0, \quad (5.8)$$

$$u(x, r, 0) = \tilde{Q}_0(r) - \tilde{Q}_1, \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad (5.9)$$

$$u(x, R, t) = 0, \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad t > 0. \quad (5.10)$$

Тоді розв'язок (5.8)-(5.10) наступний:

$$u(x, r, t) = \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n e^{-\frac{n^2 \pi^2 D_0 t}{R^2}} \sin \frac{n\pi r}{R}, \quad (5.11)$$

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:

$$q(x, r, t) = \tilde{Q}_1 + \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n e^{-\frac{n^2 \pi^2 D_0 t}{R^2}} \sin \frac{n\pi r}{R}, \quad (5.12)$$

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 [232].

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

$$\omega_{h_1, h_2, h_2 \tau} = \begin{cases} x_{i_1} = i_1 h_1, r_j = j h_2, t_k = k \tau, \\ i_1 = \overline{0, n_1}, j = \overline{0, n_2}, k = \overline{0, n_3}, \\ h_1 n_1 = l_1, h_2 n_2 = R, \tau n_3 = T, \end{cases}$$

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:

$$q_j^{(0)} = \tilde{Q}_0(jh_2), j = \overline{1, n_2 - 1}. \quad (5.14)$$

Для однорідної граничної умови першого роду (5.3) маємо

$$q_{n_2}^{(k)} = 0, k = \overline{1, n_3}, \quad (5.15)$$

а для неоднорідної граничної умови першого роду (5.6) –

$$q_{n_2}^{(k)} = \tilde{Q}_1, k = \overline{1, n_3}, \quad (5.16)$$

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

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^1 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^1, \quad (5.17)$$

де
$$\alpha_{j+1}^1 = \frac{b_j^1}{\bar{c}_j^1 - \alpha_j^1 a_j^1}, \beta_{j+1}^1 = \frac{a_j^1 \beta_j^1 + q_j^{(k)}}{\bar{c}_j^1 - \alpha_j^1 a_j^1}, j = \overline{1, n_2 - 1}, k = \overline{1, n_3}.$$

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
$$(d_0)_j^{(k)} = \frac{r^2}{2} ((D_0)_j^{(k)} + (D_0)_{j-1}^{(k)}), j = \overline{1, n_2 - 1}, k = \overline{0, n_3}.$$

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
$$a_j^2 = \frac{\tau}{r^2 h_2^2} (d_0)_j^{(k)}, b_j^2 = \frac{\tau}{r^2 h_2^2} (d_0)_{j+1}^{(k)}, \bar{c}_j^2 = 1 + \frac{\tau}{r^2 h_2^2} ((d_0)_j^{(k)} + (d_0)_{j+1}^{(k)}).$$

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

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} r^2 D_0(q) \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 D_0(q)) \frac{\partial q}{\partial r},$$

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

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0(q) \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + p(q) \frac{\partial q}{\partial r}, \quad (5.20)$$

де

$$p(q) = \frac{D_0(q)}{r} + \frac{\partial D_0(q)}{\partial r}.$$

Скінченнорізницевий аналог диференціального рівняння (5.20) має вигляд



Національний університет
водного господарства
та природокористування

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau''} = \hat{\chi}_j^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - 2q_j^{(k+1)} + q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2^2} + (\hat{r}_+)_j^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} + (\hat{r}_-)_j^{(k)} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2}, \quad (5.21)$$

$$j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{0, n_3},$$

$$\text{де } \hat{\chi}_j^{(k)} = \frac{1}{1 + 0,5h_1|\hat{r}_j^{(k)}|}, \quad \hat{r}_j^{(k)} = \frac{p_j^{(k)}}{(D_0)_j^{(k)}}, \quad \tau'' = \tau(D_0)_j^{(k)}, \quad (\hat{r}_+)_j^{(k)} = \frac{-\hat{r}_j^{(k)} + |\hat{r}_j^{(k)}|}{2} \geq 0,$$

$$(\hat{r}_-)_j^{(k)} = \frac{-\hat{r}_j^{(k)} - |\hat{r}_j^{(k)}|}{2} \leq 0, \quad \hat{r}_j^{(k)} = (\hat{r}_+)_j^{(k)} + (\hat{r}_-)_j^{(k)}.$$

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

На рисунку 5.6 показано порівняльний аналіз результатів отриманих аналітичним та чисельним способом при різних початкових та граничних умовах.

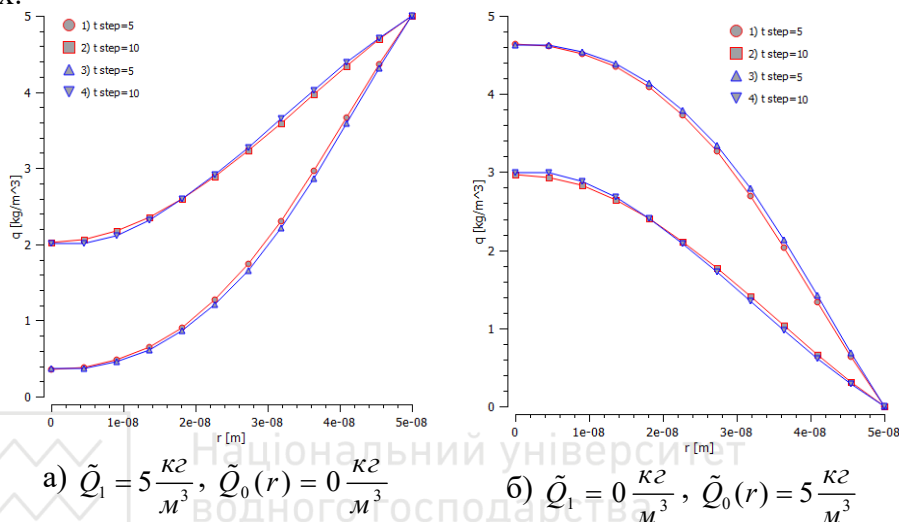


Рис. 5.6. Порівняльні розподіли концентрацій $q(r)$ в залежності від радіуса частинки r згідно аналітичного (графіки 1 та 2) та чисельного (графіки 3 та 4) розв'язків при різних часових кроках: 1) та 3) $t = 5 \text{ мкс}$., 2) та 4) $t = 10 \text{ мкс}$.

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 [276]. 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 [277–283] 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 [207; 284; 285].

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 [286] наведено порівняльний аналіз CPU та GPU алгоритмів чисельного моделювання дробово-диференційної динаміки процесу фільтраційно-конвективної дифузії на базі кластеру СКІТ-4 Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова. В [287] 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 кросплатформенного програмного комплексу NanoSurface, що реалізує паралельні обчислення [288].

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 U . 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, а далі послідовно знаходити швидкість фільтрації U , 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 масо переносу (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

$$c_{1,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^1, \quad (5.23)$$

$$\alpha_{i+1}^1 = \frac{b_i^1}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}, \beta_{i+1}^1 = \frac{a_i^1 \beta_i^1 + c_{1,i}^{(k)} + f_i^{1,(k+1)}}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}, \quad (5.24)$$

де $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$, $\alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0$, $\beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1$,

або методом лівої прогонки, використовуючи наступну залежність

$$c_{1,i+1}^{(k+1)} = \xi_{i+1}^1 c_{1,i}^{(k+1)} + \eta_{i+1}^1, \quad (5.25)$$

$$\xi_i^1 = \frac{a_i^1}{\bar{c}_i^1 - \xi_{i+1}^1 b_i^1}, \eta_i^1 = \frac{\eta_{i+1}^1 \beta_i^1 + c_{1,i}^{(k)} + f_i^{1,(k+1)}}{\bar{c}_i^1 - \xi_{i+1}^1 b_i^1},$$

$$i = \overline{n_1 - 1, 1}, k = \overline{1, n_3}, \eta_n^1 = \mu_3^1 \equiv 0, \eta_1^1 = \mu_4^1 \equiv \tilde{C}_1^2.$$

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

$$T_I = 10n + O(1), \quad (5.27)$$

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 $p = [n/2]$.

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 $T_2 = 5n\tau + \delta$, 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 [289].

Оцінимо складність алгоритму паралельного варіанту методу прогонки [289]. 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 $n \times n$, 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 [290]. 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:

$$S_p \approx \frac{p}{2}, E_p \approx \frac{1}{2}. \quad (5.32)$$

5.3.4. Особливості реалізації паралельних обчислень та їх аналіз

Реалізація паралельних обчислень здійснена за допомогою технології OpenMP [291]. 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 [292].

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
120000	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).

Помітно, що використання 2 або 4 потоків є також ефективнішим ніж використання 8 потоків (рис. 5.8) у 2,5–3 рази.



Рис. 5.7. Час виконання обчислень при використанні звичайної та зустрічної прогонки для різних кроків по x

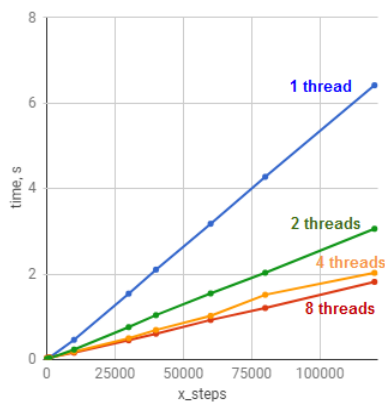


Рис. 5.8. Час виконання обчислень при використанні блочної прогонки для різних кроків по x

Подальший аналіз полягав у дослідженні ефективності розпаралелювання різних частин обчислювального алгоритму при застосуванні 8 потоків.

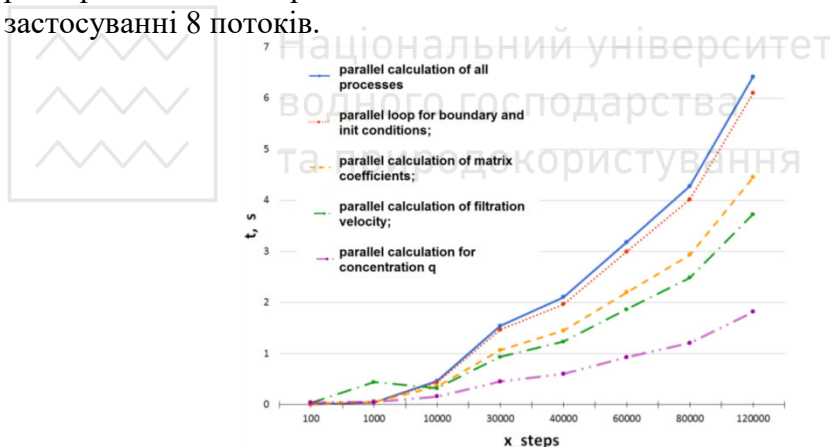


Рис. 5.9. Час роботи обчислювального алгоритму при розпаралеленні різних частин коду для 8 потоків

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 i 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 [293], дає суттєвий приріст швидкодії.

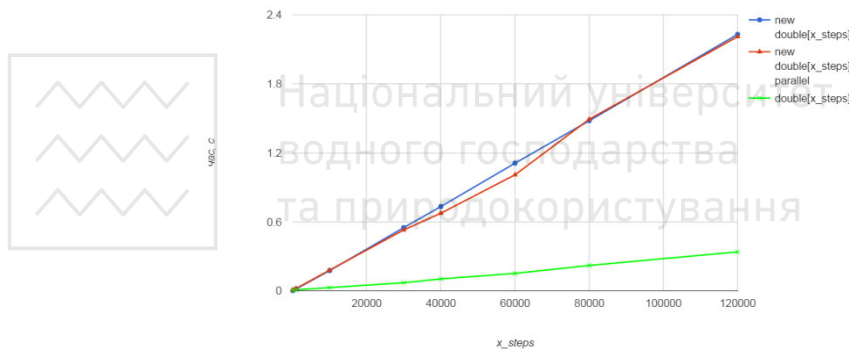


Рис. 5.10. Порівняння швидкості обчислення при різних способах оголошення масивів

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 (табл. 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];
}
```

Національний
водного господарства
та природокористування

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.

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 5.8 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. 5.9, для 120000 кроків дискретизації по осі Ox , час виконання звичайного коду від паралельного алгоритму обчислення відрізняється в 3,5 рази (при 8 потоках). Рис. 5.10 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 [135; 267; 270; 294–298].

Список використаних джерел

1. 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, 2003. № 2. С. 189–197.

2. Биченок М. М., Рогожин О. Г., Яковлев Є. О. Про оцінювання ризиків життєдіяльності і господарювання у природно-техногенній сфері. *Екологія і ресурси*. 2004. № 10. С. 28–38.

3. Еволюція контурів радіогідрогеохімічної аномалії тритієвого забруднення в зоні впливу приповерхневого сховища радіоактивних відходів / за ред. В. В. Долін, Є. О. Яковлев, О. В. Щербак, Я. О. Куцка. 2015.

4. 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*. 2017. № 14. С. 12–16.

5. Рудько Г. І., Яковлев Є. О., Рогозін О. Я. Моніторинг процесонебезпечних територій та розрахунок ризику техноприродних аварій і катастроф. Знання, 1997.

6. Яковлев Є. О., Скалецький Ю. М. Оцінка регіональних еколого-ресурсних та еколого-техногенних загроз національній безпеці України: аналіт. огляд / кер. авт. кол. Є. О. Яковлев. *Стратегічні пріоритети*. 2010. К. : НІСД, 2010. С. 163.

7. Яковлев Є. О. Сучасні фактори національної безпеки України при формуванні мінерально-сировинної бази. *Екологія довкілля та безпека життєдіяльності*. 2005. № 5. С. 84–91.

8. U. S. EPA, OSWER, OSRTI, Superfund: National Priorities List (NPL) | US EPA. URL: <https://www.epa.gov/superfund/superfund-national-priorities-list-npl> (дата звертання: 08.02.2018).

9. Auffan Mélanie, Shipley Heather J., Yean Sujin, Kan Amy T., Tomson Mason, Rose Jerome, Bottero Jean-Yves. Nanomaterials as adsorbents. *Environmental Nanotechnology: Applications and Impacts of Nanomaterials*, McGraw-Hill. New York, 2007. С. 371–392.

10. 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*. 2009. Вип. 3 (47). С. 38–46.

11. 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. T. 6. № 18. С. 10859.

12. Fernandez Moises, Kärger Jörg, Freude Dieter, Pampel André, van Baten J. M., Krishna R. Mixture diffusion in zeolites studied by MAS PFG NMR and molecular simulation. *Microporous and Mesoporous Materials*. 2007. T. 105. № 1–2. С. 124–131.

13. Valtchev Valentin, Tosheva Lubomira. Porous Nanosized Particles: Preparation, Properties, and Applications. *Chemical Reviews*. 2013, T. 113. № 8. С. 6734–6760.

14. Liu Yueqiang, Majetich Sara A., Tilton Robert D., Sholl David S., Lowry Gregory V. TCE Dechlorination Rates, Pathways, and Efficiency of Nanoscale Iron Particles with Different Properties. *Environmental Science & Technology*. 2005. T. 39. № 5. С. 1338–1345.

15. Wang Dengjun, Bradford Scott A., Harvey Ronald W., Hao Xiuzhen, Zhou Dongmei. 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. 229–230. С. 170–176.

16. Matei Ecaterina, Predescu Andra Mihaela, Coman George, Bălănescu Mihaela, Sohaciu Mirela, Predescu Cristian, Favier Lidia, Niculescu Marius. Magnetic nanoparticles used in environmental engineering for Pb and Zn removal. *Environmental Engineering & Management Journal (EEMJ)*. 2016. T. 15. № 5.

17. Садовник А. З бурштином покінчать – перейдуть на мідь? Актуально – Рівне Вечірнє. URL: <https://rivnepost.rv.ua/news/z-burshtinom-pokinchat-pereydut-na-mid> (дата звертання: 10.02.2018).

18. Bish David L. Natural Zeolites and Nuclear-Waste Management: The Case of Yucca Mountain, Nevada, USA. *Natural Microporous Materials in Environmental Technology*. Springer, 1999. С. 177–191.

19. 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. Т. 2. № 1. С. 76–80.

20. Токарєвський В. В., Лобач Г. О., Кріп І. М., Шимчук Т. В., Токарчук М. В. Фероціанідні сорбенти на глинистій матриці у процесах сорбції радіонуклідів. 2008.

21. 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. С. 51–72.

22. 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*. 2012. № 2. Т. 3. С. 215–222.

23. Ракитська Т. Л., Труба А. С., Киосе Т. О., Березина Л. В., Давтян А. С., Ракитская Т. Л., Киосе Т. А., Березина Л. В. Протолітичні властивості природних та модифікованих сорбентів, 2012.

24. 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*. 2015. Вип. 2 (54). Т. 20. С. 27–48.

25. 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. Сер. Технічні науки*. 2015. Вип. 3 (71). С. 287–292.

26. Клименко О. М. Машина для внесення меліорантів в рідкому стані. *Вісник Рівненського державного технічного університету*. 2000. Вип. 1 (3). С. 161–166.

27. 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. Сер. Сільськогосподарські науки*. 2009. Вип. 3 (47). С. 38–46.

28. Ivanov Y. A., Lewyckij 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. № 1. Т. 35. С. 1–21.

29. Грунтоведение / ред. Сергеев Е. М. Москва : Изд-во МГУ, 1983. 390 с.

30. Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917–1967) / за ред.: В. М. Ентов, С. Н. Нумеров, П. Я. Полубаринова-Кочина, И. А. Чарный. Москва : Наука, 1969. 546 с.

31. Веригин Н. Н., Шержуков Б. С. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах. *Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917–1967)*. 1969. С. 237–313.

32. Математическое моделирование и исследование процессов в

неоднородных средах / И. В. Сергиенко, В. В. Скопецкий, В. С. Дейнека. Київ : Наукова думка, 1991. 432 с.

33. 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.

34. Скопецкий В. В., Стоян В. А., Зваридчук В. Б. Математичне моделювання динаміки розподілених просторово-часових процесів. Київ : Сталь, 2008.

35. Гладкий А. В., Скопецкий В. В. Методи чисельного моделювання екологічних процесів : навч. посіб. 2005.

36. Дейнека В. С., Петрик М. Р., Михалик Д. М. Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталитических средах. *Проблемы управления и информатики*. 2011. № 2. С. 12–25.

37. Сергієнко І. В., Дейнека В. С. Інформаційна технологія дослідження процесів в багатокомпонентних ґрунтових середовищах та оптимальне керування їх станами. 2005.

38. Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах / И. И. Ляшко, Л. И. Демченко, Г. Е. Мистецкий. Киев : Наук. Думка, 1991. 264 с.

39. Ляшко С. И. Оптимизация и математическое моделирование массопереноса подземных вод. Киев : Наук. Думка, 1998. 256 с.

40. Лаврик В. І. Теоретичні дослідження процесів забруднення і засолення підземних вод. *Вісник АН УРСР*. К. : Наукова думка, 1979. Вип. 2. С. 63.

41. 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.

42. Нумеров С. Н., Патрашев А. Н. Диффузия растворимых веществ в основаниях гидротехнических сооружений. *Тр. Ленинград. политехн. ин-та*. 1947. № 4. С. 165–169.

43. Николаевский В. Н. Механика насыщенных пористых сред. Рипол Классик, 2013.

44. Николаевский В. Н. Геомеханика и флюидодинамика. М. : Недра, 1996.

45. Николаевский В. Н. Механика пористых и трещиноватых сред. Недра, 1984. Т. 232.

46. В. Н. Николаевский, Э. А. Бондарев, М. И. Миркин,

Г. С. Степанова, В. П. Терзи. Движение углеводородных смесей в пористой среде. М. : Недра, 1968.

47. Бочеве́р Ф. М. Расчеты эксплуатационных запасов подземных вод. М. : Недра, 1968.

48. Бочеве́р Ф. М. Теория и практические методы гидрогеологических расчетов эксплуатационных запасов подземных вод. М. : Недра, 1968.

49. Основы гидрогеологических расчетов / Ф. М. Бочеве́р, И. В. Гармонов, А. В. Лебедев, В. М. Шестаков. Directmedia, 2016.

50. Защита подземных вод от загрязнения / Бочеве́р Ф. М., Лапшин Н. Н., Орадовская А. Е.. М. : Недра, 1979.

51. Бочеве́р Ф. М., Орадовская А. Е. Гидрогеологическое обоснование защиты подземных вод и водозаборов от загрязнений. 1972.

52. Булавацький В. М., Кривонос Ю. Г., Скопецький В. В. Некласичні математичні моделі процесів тепло- та масопереносу. К. : Наук. думка, 2005.

53. Скопецький В. В., Стоян В. А., Кривонос Ю. Г. Математичне моделювання прямих та обернених задач динаміки систем з розподіленими параметрами. К. : Наук. думка, 2002.

54. Венгерський П. С., Трофимчук О. М. Аналіз різних підходів для опису математичних моделей фільтрації рідини в насиченій зоні ґрунту. *Математичне моделювання в економіці*. 2016. № 2. С. 36–51.

55. Стефанишина-Гаврилюк 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.

56. Трофимчук Олександр Миколайович. Чисельне моделювання руху поверхневих і ґрунтових потоків та їх взаємодія на території водозбору.

57. Бідюк П. І., Савенков О. І., Трофимчук О. М. Моделювання забруднення атмосфери та поверхневих вод в Україні. Екологічна безпека та природокористування. 2011.

58. Trofymchuk Oleksandr, Kalyukh Yuriy, Hlebchuk Hanna, Mathematical and GIS-Modeling of Landslides in Kharkiv Region of Ukraine. *Landslide science and practice* / за ред. Claudio Margottini. Heidelberg, New York : Springer, 2013. С. 347–352.

59. Математичне моделювання переносу сольових розчинів при фільтрації підземних вод у ґрунтових масивах / А. П. Власюк, О. П. Остапчук. Рівне : НУВГП, 2015. 214 с.

60. 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. *Journal of Mathematical Sciences*. 2009. № 4. Т. 160. С. 525–535.

61. Vlasyuk Anatoliy, Tsvetkova Tetiana, Falat Pawel, Klos-Witkowska Aleksandra, Warwas Kornel. Mathematical modelling of infiltration effect on process of salts transfer in layered saturated-non-saturated soils. *IDAACS'2017*. С. 333–338.

62. 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. *Journal of Mathematical Sciences*. 2010. № 5. Т. 171. С. 632–648.

63. 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*. 2005. Вип. 2. С. 217–226.

64. 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. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2015. № 5. Т. 88. С. 1062–1073.

65. Богаєнко В. А., Булавацький В. М., Скопєцький В. В. Математическое моделирование динамики геохимических процессов загрязнения водных горизонтов. *Управляющие системы и машины*. 2009.

66. Комп'ютеризовані регіональні системи державного моніторингу поверхневих вод: моделі, алгоритми, програми : монографія / В. Б. Мокін, М. П. Боцула, Г. В. Горячев, О. В. Давиденко, А. І. Катасонов, А. Р. Ящолт / під ред. В. Б. Мокіна. Вінниця : УНІВЕРСУМ-Вінниця, 2005. 310 с.

67. Мокін В. Б., Богомолів Ю. С.. Нові підходи до автоматизованого створення геоінформаційної бази екологічної інформації. 2012.

68. Мокін В. Б., Боцула М. П., Крижановський Є. М. Інформаційна технологія інтегрування математичних моделей у геоінформаційні системи моніторингу поверхневих вод. 2011.

69. Mokin BI River Water Control of Sewage Disposal Detection / ред. V. V. Mokin, 2000. Т. 7. С. 297–301.

70. Мокін В. Б. Математичні моделі для контролю та управління якістю річкових вод. Вінниця : УНІВЕРСУМ-Вінниця, 2005. 171 с.

71. Савула Я. Г., Шинкаренко Г. А., Вовк В. Н. Некоторые приложения метода конечных элементов. Львов : Редакционно-издательская группа Львов. ун-та, 1981. Т. 38.

72. Савула Я. Г., Шинкаренко Г. А. Метод скінченних елементів. Львів, 1999.

73. Савула Я. Г., Дяконюк Л. М. Дослідження варіаційної задачі теплопровідності у багатошарових середовищах з тонкими включеннями. *Science*. 2000. № 3. С. 123–128.

74. Савула Я. Г. Числовий аналіз задач математичної фізики варіаційними методами. Львів : видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2004.

75. Савула Я. Г., Мандзак Т. И. Разномерная задача математической модели адвекции–диффузии в среде с тонким включением. *Компьютерная математика*. 2007. № 2. С. 59–70.

76. Власій Олеся, Чернуха Ольга. Математичне моделювання гетеродифузійних процесів у шарі з випадковим прошарком. *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*. 2014. № 20. С. 58–68.

77. Chaplia Yevgen, Chernukha Olha. Three-dimensional diffusion in a multiphase body with randomly disposed inclusions of a spherical form. *International journal of heat and mass transfer*. 2003. № 17. Т. 46. С. 3323–3328.

78. Бейко І. В., Бейко М. Ф. Об одном новом подходе к решению нелинейных краевых задач. *Украинский математический журнал*. 1968. Т. 20. № 06. С. 723–731.

79. Бейко І. В., Бублик Б. Н., Зінько П. Н. Методи і алгоритми вирішення задач оптимізації. К. : Вища школа, 1983.

80. Бейко І. В. Розвиток методів розв'язуючих та асимптотично-розв'язуючих операторів для побудови оптимальних та асимптотично-оптимальних математичних моделей. *Вісник Київського університету. Сер. Кібернетика*. 2002. Вип. 3. С. 10–15.

81. Бейко І. В., Зінько 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. Сер. Фізико-математичні науки*. 2008.

82. Акименко В. В., Ульшин В. А. О построении монотонных разностных схем для уравнений эллиптического и параболического типов методами линейной регуляризации. *Математическое моделирование*. 1998. № 2. Т. 10. С. 79–88.

83. Акименко В. В., Сугоняк І. І. Нелинейное моделирование многомерного процесса диффузии инноваций на основе метода расщепления. *Кибернетика и системный анализ*. 2008. № 4. С. 120–133.

84. Акименко В. В., Наконечный А. Г., Трофимчук О. Ю. Моделирование процессов конвекции–диффузии на основе многомерного интегро-дифференциального уравнения с вырождающейся параболичностью. *Кибернетика и системный анализ*. 2009.

85. Акименко В. В., Митрохин С. А. Модель оптимального управления нелинейным процессом фильтрации для задачи подтопления территорий. *Проблемы управления и информатики*. 2010. № 4. С. 73–89.

86. Лыков А. В., Михайлов Ю. А. Теория тепло-массопереноса. Москва : Госэнергоиздат, 1963.

87. Лыков А. В., Методы решения нелинейных уравнений нестационарной теплопроводности. *Изв. АН СССР. Энергетика и транспорт*. 1970. № 5. С. 109–150.

88. Лыков А. В., Алексащенко А. А., Алексащенко В. А. Сопряженные задачи конвективного теплообмена. Минск : Изд-во БГУ. 1971. С. 3. Т. 346.

89. Лыков А. В. Явления переноса в капиллярно-пористых телах. Течнико-теоретической литературы, 1954.

90. Лыков А. В., Михайлов Ю. А. Теория переноса энергии и вещества. Изд-во Академии наук БССР, 1959.

91. Лыков А. В. Теория теплопроводности. 1967.

92. Михайлов Г. К., Николаевский В. Н. Движение жидкостей и газов в пористых средах. *Механика в СССР за 1970*. Т. 50. С. 585–648.

93. Ковальчук П. І., Демчук О. С., Коваленко Р. Ю. Математичне моделювання поширення забруднення в річках при промивках із водосховищ. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Сер. Технічні науки*. 2016.

94. Martynyuk Petr Nikolaevich. Meshfree and mesh methods for system of non-linear parabolic equations. *Sibirskie Èlektronnye Matematicheskie Izvestiya [Siberian Electronic Mathematical Reports]*. 2014. Т. 11. С. 476–493.

95. Martynyuk Petro 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. *Journal of Mathematical Sciences*. 2015. Т. 207. № 1. С. 59–73.

96. 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. *Far East Journal of Mathematical Sciences (FJMS)*. 2017. Т. 102. № 12. С. 3211–3221.

97. Ivanchuk Natalia, Martyniuk Petro, Tsvetkova Tatiana, Michuta Olga. Mathematical modeling and computer simulation of the filtration processes in earth dams. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2017. Т. 2. 6 (86). С. 63–69.

98. Herus V., Martyniuk P., Michuta O., Stepanchenko O. Two-dimensional problem concerning contact suffusion interplay on the filtration consolidation processes of heterogeneous soils. *International Journal of Pure and Applied Mathematics*. 2017. Т. 114. № 2.

99. 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*. 2015. Т. 9. С. 189–192.

100. Бомба А. Я., Сафоник А. П. Математичне моделювання процесу магнітного очищення рідин від багатокомпонентного забруднення. *Проблемы машиностроения*. 2012. Т. 15. № 5–6. С. 49–55.

101. Бомба А. Я., Сафоник А. П. Математическое моделирование процессов фильтрования жидкостей от многокомпонентного загрязнения в N-шаровых фильтрах. *Компьютерная математика*. 2014.

102. Бомба А. Я., Сафоник А. П. Математическое моделирование процесса аэробной очистки сточных вод в условиях диффузионного и массообменного возмущений. *Инженерно-физический журнал*. 2018. Т. 91. № 2. С. 338–344.

103. Власюк А. П., Степанченко О. М. Математичне моделювання процесу корозії бетонного фундаменту гідротехнічної споруди. *Вісник Хмельницького національного університету. Сер. Технічні науки*. Ч. 1. 2005. Т. 1. С. 46–52.

104. Степанченко О. М. Кинематические граничные условия в задачах растворения солевых пластов. *Наукові нотатки*. 2015. № 51. С. 186–190.

105. Власюк А. П., Остапчук О. П. Числове моделювання міграції радіонуклідів при горизонтальній фільтрації підземних вод. *Прогнозування та прийняття рішень в умовах невизначеності* : тези доп. Міжнародної школи-семінару. 2006. С. 180–181.

106. Богаенко В. А. Программный комплекс моделирования класса процессов миграции загрязнений в грунтах на кластерных системах. *Управляющие системы и машины*. 2010. № 1. С. 58–65.

107. Богаенко В. А., Марченко О. А., Самойленко Т. А. Анализ численного моделирования динамики грунтового массива при неустановившейся напорной фильтрации. *Управляющие системы и машины*. 2014. № 4. С. 33–40.

108.Гладкий А. В., Богаенко В. А. Моделирование переноса загрязнений в атмосфере с использованием параллельных вычислений. *Управляющие системы и машины*. 2014. № 6. С. 18–26.

109.Власюк А. П., Федорчук Н. А. Математичне моделювання одновимірної задачі напружено-деформованого стану ґрунтового масиву в умовах тепло-масоперенесення при фільтрації сольових розчинів. *Вісник Київського університету. Сер. Фіз.-мат. наук*. 2012. Вип. 1. С. 131–136.

110.Федорчук Н. А. Математичне моделювання одновимірної задачі напружено-деформованого стану ґрунтового масиву при фільтрації сольових розчинів в неізотермічних умовах та наявності рівня ґрунтових вод. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Сер. Технічні науки : зб. наук. праць*. 2010. Вип. 4. С. 204–215.

111.Ентов В. М. Теория фильтрации. 1998.

112.A Collection of Problems on Mathematical Physics: International Series of Monographs in Pure and Applied Mathematics / В. М. Budak, А. А. Samarskii, А. N. Tikhonov, I. N. Sneddon, М. Stark, S. Ulam. Elsevier Science. 2013.

113.Shackelford Charles D., Daniel David E. Diffusion in Saturated Soil. I. *Journal of Geotechnical Engineering*. 1991. Т. 117. № 3. С. 467–484.

114.Šimůnek Jirka, Jarvis Nick J., van Genuchten M.Th., Gärdenäs Annemieke. Review and comparison of models for describing non-equilibrium and preferential flow and transport in the vadose zone. *Journal of Hydrology*. 2003. Т. 272. № 1–4. С. 14–35.

115.Marchuk G. I. Methods of Numerical Mathematics. 2-ге вид. New York, NY : Springer Verlag Stochastic Modelling and Applied Probability, 1982. 510 с.

116.Сінчук Ю. Адаптивна схема методу скінченних елементів для сингулярно збурених задач конвекції-дифузії. *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*. 2008.

117.Власюк А. П., Кузло М. Т. Експериментальні дослідження деяких параметрів фільтрації сольових розчинів у піщаних ґрунтах. *Меліорація та водне господарство : міжвідомчий тематич. наук. зб.* 2000. Вип. 87. С. 43–46.

118.Бурак Я. Й., Чапля Є. Я. Вихідні положення математичної моделі гетеродифузного переносу радіонуклідів у приповерхневих шарах Землі. *Доп. НАН України*. 1993. Т. 10. С. 59–63.

119.Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю., Гончарук В. Є., Пабіривський В. В. Моделювання процесів стаціонарної гетеро дифузії розпадної речовини у середовищі з пастками. *Моделювання та інформаційні технології*. 2013.

Т. 70. С. 96–108.

120. Прохоров В. М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах / под ред. Р. М. Алексахина. М. : Энергоиздат, 1981. 99 с.

121. Власюк А. П. Про деякі нові математичні моделі підземної гідромеханіки. *Вісник Рівненського державного технічного університету : зб. наук. праць*. 2000. Вип. 3(5). № 2. С. 57–62.

122. Bossew P., Kirchner G. Modelling the vertical distribution of radionuclides in soil. Part 1: the convection–dispersion equation revisited. *Journal of Environmental Radioactivity*. 2004. Т. 73. № 2. С. 127–150.

123. Токарчук М., Жаліло А., Чапля Є., Чернуха О. Кінетика переносу радіонуклідів у склоподібних радіоактивно збуджених матеріалах. 2005.

124. Chernukha O. Yu. Physico-mathematical models of heterodiffusion in a layer. *Journal of Mathematical Sciences*. 1997. Т. 86. № 2. С. 2573–2577.

125. Остапчук О. П. Чисельне моделювання процесу очищення горизонтального шару ґрунту від радіонуклідів при їх вертикальній міграції. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Сер. Технічні науки*. 2010.

126. Burak Ya. I., Hachkevych O. R., Solodyak M. T. Mathematical model of the process of electrodiffusion of radionuclides in lavalike fuel-containing materials. *Journal of Mathematical Sciences*. 2012. Т. 183. № 1. С. 65–82.

127. 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. 169–170. С. 40–47.

128. Merk Rainer. Numerical modeling of the radionuclide water pathway with HYDRUS and comparison with the IAEA model of SR 44. *Journal of Environmental Radioactivity*. 2012. Т. 105. С. 60–69.

129. Johnson Billy E., Dortch Mark S., Application of TREECS Modeling System to Strontium-90 for Borschi Watershed near Chernobyl, Ukraine. *Journal of Environmental Radioactivity*. 2014. Т. 131. С. 31–39.

130. Власюк А. П., Мартинюк, П. М. Чисельне розв'язування задач консолідації та фільтраційного руйнування ґрунтів в умовах тепло-масопереносу методом радіальних базисних функцій : монографія. Рівне : Національний університет водного господарства та природокористування, 2010. 277 с.

131. 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.

132. 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*. 2000. Т. 59. № 4. С. 361–375.

133. 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.* 2000. № 4. Т. 59. С. 361–375.

134. 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.

135. Mathematical modelling of three-dimensional problem of soil mass stressed-strained state considering mass and heat transfer / за ред.: А. Р. Vlasyuk, N. A. Zhukovska, V. V. Zhukovskyy, A. Klos-Witkowska, I. Pazdriy, U. Iatsykovska. 2017. Т. 1. 265–269.

136. Філатова І. А., Федорчук Н. А. Математичне моделювання напружено-деформованого стану ґрунтових масивів в складних гідрогеологічних умовах. *Вісник Київського університету. Сер. Фіз.-мат. наук.* 2011. Вип. 3. С. 2018–2226.

137. Філатова І. А. Математичне моделювання напружено-деформованого стану багат шарового ґрунтового масиву при наявності рівня ґрунтових вод. *Вісник Київського університету. Сер. Фіз.-мат. наук.* 2008. Вип. 1. С. 161–165.

138. Власюк А. П., Федорчук Н. А. Чисельне моделювання напружено-деформованого стану основи ґрунтової греблі при наявності тепло-масопереносу. *Прийняття рішень в умовах невизначеності* : тези доп. Міжнар. конф. 2009. С. 48–49.

139. Кузло М. Т., Філатова І. А. Дослідження впливу концентрації сольових розчинів на деформаційні характеристики ґрунтів. *Вісник Національного університету водного господарства та природокористування.* 2006. Вип. 4 (36). Ч. 2. С. 209–214.

140. Vlasyuk 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. Т. 88. № 2. С. 329–341.

141. Shelestovskii B. G., Grilitskii D. V., Thermoelastic problem of a transversal isotropic layer under mixed conditions of heat emission. *Soviet Applied Mechanics.* 1972. Т. 8. № 1. С. 47–51.

142. 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. 1999. Вип. 1. С. 55–62.

143. Коваленко А. Д. Термоупругость. Киев : Вища школа, 1975. 216 с.

144. Калюх Ю. І., Клименков О. А., Берчун Я. О. Прикладна реалізація моделей ґрунтового середовища в геотехніці: від моделі Біо до моделі граничної рівноваги. 2016.

145. Трофимчук А. Н., Калюх Ю. И., Глебчук А. С. Математическое моделирование устойчивости оползневого склона при подъеме уровня грунтовых вод. *Екологія і ресурси*. 2008. № 18. С. 51–58.

146. 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. Т. 1. С. 95–104.

147. Об уравнениях, описывающих внутреннюю диффузию в гранулах адсорбента / за ред.: П. П. Золотарев, М. М. Дубинин. 1973. Т. 210. С. 136–139.

148. 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. *Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR Division of Chemical Science*. 1978. Т. 27. № 11. С. 2189–2193.

149. Ruckenstein E., Vaidyanathan A. S., Youngquist G. R. Sorption by solids with bidisperse pore structures. *Chemical Engineering Science*. 1971. Т. 26. № 9. С. 1305–1318.

150. Бекман И. Н. Теория диффузии в дисперсионных средах. Москва-Нальчик, 2008. 42 с.

151. Fluid transport in nanoporous materials. / Conner W. C., Jacques P. Fraissard. Dordrecht, the Netherlands : Springer in cooperation with NATO. *Public Diplomacy Division NATO science series. II, Mathematics, physics, and chemistry*. 2006. V. 219. 685 с.

152. Binder Tomas, Hibbe Florian, Chmelik Christian, Kärger Jörg, Martinez-Joaristi Alberto, Gascon Jorge, Kapteijn Freek, Ruthven Douglas. Micro-imaging of transient guest profiles in nanoporous host systems of cylindrical symmetry. *The Journal of Chemical Physics*. 2012. Т. 137. № 16. С. 164–704.

153. Diffusion Fundamentals / ред. Jörg Kärger. Leipzig : Leipziger Universitätsverlag, 2005. 615 с.

154. Diffusion in nanoporous materials / Kärger J., Douglas M. Ruthven, Doros Nicolas Theodorou. Weinheim, Germany : Wiley-VCH, 2012. 872 с.

155.Петрик М. Р., Михалик Д. М., Математичне моделювання адсорбційного нелінійного масопереносу в каталітичних пористих середовищах. *Вісник ТДТУ ім. І. Пулюя*. 2009. Т. 4. С. 193–198.

156. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури / І. В. Сергієнко, М. Р. Петрик, О. М. Хіміч, Д. М. Михалик, Д. Леклерк, Ж. Фресар. Видавництво Національної академії наук України, 2014. 209 с.

157.Petryk Mikhail R., Fraissard Jack. Mathematical Modeling and Visualization of Multilevel Mass Transfer System in Heterogeneous Catalytic Media of Nanoporous Particles. *Journal of Automation and Information Sciences*. 2008. Т. 40. № 10. С. 1–21.

158.Petryk Mikhail R., Fraissard Jack, Mykhalyk Dmitriy M. Modeling and Analysis of Concentration Fields of Nonlinear Competitive Two-Component Diffusion in Medium of Nanoporous Particles. *Journal of Automation and Information Sciences*. 2009. Т. 41. № 8. С. 13–23.

159.Petryk Mykhaylo, Vorobiev Eugene. Numerical and analytical modeling of solid-liquid expression from soft plant materials. *AIChE Journal*. 2013. Т. 59. № 12. С. 4762–4771.

160.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. Т. 51. № 4. С. 529–546.

161.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. Сер. Математичне моделювання. *Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління*. 2013. № 22. С. 36–44.

162.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. Сер. Технічні науки*. 2014. № 1. С. 104–112.

163.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. Т. 6. С. 101–108.

164.Bomba A., Klymiuk Yu., Prysiazhniuk I., Prysiazhniuk O., Safonyk A. Mathematical modeling of wastewater treatment from multicomponent pollution by through microporous filling. APPLICATION OF MATHEMATICS

IN TECHNICAL AND NATURAL SCIENCES : 8th International Conference for Promoting the Application of Mathematics in *Technical and Natural Sciences – AMiTaNS'16: AIP Conference Proceedings*. Albena, Bulgaria: Author(s), 22–27 June 2016. C. 40003.

165. 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. *Theoretical and Mathematical Physics*. 2015. T. 184. № 1. C. 1020–1032.

166. Pavlenko N., Kostrobij P. P., Suchorski Yu., Imbihl R. Alkali metal effect on catalytic CO oxidation on a transition metal surface. *Surface Science*. 2001. T. 489. 1–3. C. 29–36.

167. Kostrobij P., Markovych B., Viznovych O., Tokarchuk M. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics. *Journal of Mathematical Physics*. 2016. T. 57. № 9. C. 93301.

168. 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. T. 514. C. 63–70.

169. 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. T. 66. № 8.

170. 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. T. 370. 1–3. C. 49–57.

171. Bradford Scott A., Simunek Jirka, Bettahar Mehdi, van Genuchten Martinus Th., Yates Scott R. Modeling Colloid Attachment, Straining, and Exclusion in Saturated Porous Media. *Environmental Science & Technology*. 2003. T. 37. № 10. C. 2242–2250.

172. Cheng Tao, Saiers James E. Colloid-Facilitated Transport of Cesium in Vadose-Zone Sediments: The Importance of Flow Transients. *Environmental Science & Technology*. 2010. T. 44. № 19. C. 7443–7449.

173. Bradford Scott A., Torkzaban Saeed, Simunek Jiri, Modeling colloid transport and retention in saturated porous media under unfavorable attachment conditions. *Water Resources Research*. 2011. T. 47. № 10. C. n/a.

174. Sang Wenjing, Morales Verónica L., Zhang Wei, Stoof Cathelijne R., Gao Bin, Schatz Anna Lottie, Zhang Yalei, Steenhuis Tammo S. Quantification of Colloid Retention and Release by Straining and Energy Minima in Variably Saturated Porous Media. *Environmental Science & Technology*. 2013.

C. 130724151622003.

175. Глобус А. М. Физика неизотермического внутрпочвенного влагообмена. Ленинград : Гидрометеиздат, 1983. 279 с.

176. Чудновский А. Ф. Влияние переменного характера теплофизических характеристик почв по их профилю на температуру почвы. *Инженерно-физический журнал*. 1960. Т. 3. № 7. С. 51–59.

177. Petryk Mykhaylo, Mykhalyk Dmytro, Petryk Maria, Boyko Igor, Mudryk Ivan. Modeling of Adsorption and Desorption of Hydrocarbons in Nanoporous Catalyst Zeolite using Nonlinear Langmuir's Isotherm.

178. Dvoyashkin Muslim, Valiullin Rustem, Kärger Jörg. Supercritical fluids in mesopores—new insight using NMR. *Adsorption*. 2007. Т. 13. 3–4. С. 197–200.

179. Ding M., Kelkar S., Meijer A. Surface complexation modeling of americium sorption onto volcanic tuff. *Journal of Environmental Radioactivity*. 2014. Т. 136. С. 181–187.

180. Клименко О. М. Машина для внесення меліорантів в рідкому стані. *Вісник Рівненського державного технічного університету* : зб. наук. праць. 2000. Вип. 1 (3). С. 161–166.

181. Власюк А. П., Мартинюк, П. М. Математичне моделювання консолідації ґрунтів при фільтрації сольових розчинів в неизотермічних умовах : монографія. Рівне : НУВГП, 2008. 416 с.

182. Titze Tobias, Lauerer Alexander, Heinke Lars, Chmelik Christian, Zimmermann Nils E. R., Keil Frerich J., Ruthven Douglas M., Kärger Jörg. Transport in Nanoporous Materials Including MOFs: The Applicability of Fick's Laws. *Angewandte Chemie International Edition*. 2015.

183. TRANSPORT IN MICROPOROUS SOLIDS: AN HISTORICAL PERSPECTIVE Part I. *Fundamental Principles and Sorption Kinetics* / за ред.: Wm. Curtis Conner, Jacques Fraissard, D. M. RUTHVEN : Springer Netherlands, 2006. С. 9-39.

184. Kuzlo Mykola, Zhukovska Nataliia, Zhukovskyy Viktor, Tarasyuk Nataliia. Experimental Investigations Of Filtration Coefficient Of Clay Soils Under Anthropogenic Factors Influence. 2020. *IEEE 15th International Conference on Computer Sciences and Information Technologies (CSIT)*. Zbarazh, Ukraine : IEEE, 23.09.2020 – 26.09.2020. С. 1–4.

185. Брилинг И. А. Влияние давления и температуры на фильтрационные свойства глин. *Связанная вода в дисперсных системах*. 1977. Т. 4. С. 82–89.

186. Петрик М. Р., Михалик Д. М. Математичне моделювання адсорбційного нелінійного масопереносу в каталітичних пористих

середовищах. *Вісник ТДТУ ім. І. Пулюя*. 2009. Т. 4. С. 193–198.

187. Petryk Mikhail R., Mykhalyk Dmitriy M. Nonlinear Mathematical Model of Two-Level Transfer of the "Filtration-Consolidation" Type. *Journal of Automation and Information Sciences*. 2010. Т. 42. № 3. С. 58–70.

188. Прохоров В. М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах / ред. Алексахин Р. М. Энергоиздат, 1981. 99 с.

189. Власюк А. П., Жуковский В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі. *Тези XIV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М. Кравчука*. 2012. С. 111.

190. Ладъженская О. А., Солонников В. А., Уральцева Н. Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. 1967.

191. Мартинюк П. М., Власюк А. П. Дослідження існування та єдиності розв'язку однієї квазілінійної параболическої системи диференціальних рівнянь другого порядку. Препр. / НАН України. Ін-т математики, 2001.

192. Sergienko I. V., Deineka V. S., Veshchunov V. V. NADRA 3D information technology for analysis of processes in multicomponent soil media. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2006. Т. 42. № 6. С. 901–916.

193. ORCHESTRA – Object Representation of Chemical Speciation and Transport models. 2006. URL: <http://www.macaulay.ac.uk/ORCHESTRA/> (дата звертання: 20.12.2015).

194. PHREEQC – A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations. URL: http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/ (дата звертання: 20.12.2015).

195. Jacques Diederik, Simunek Jirka, HPx – a tool for simulating interactive biogeochemical processes in soil systems. EGU General Assembly Conference Abstracts.

196. Henning.Prommer@csiro.au (Henning Prommer), PHT3D Home. 2012. URL: <http://www.pht3d.org/> (дата звертання: 20.12.2015).

197. OpenGeoSys – Home. URL: <http://www.opengeosys.org/> (дата звертання: 20.12.2015).

198. Van der Lee Jan, Windt Laurent de, Lagneau Vincent, Goblet Patrick, Module-oriented modeling of reactive transport with HYTEC. *Computers & Geosciences*. 2003. № 3. Т. 29. С. 265–275.

199. Simunek Jirka, Jacques Diederik, Langergraber Günter, Bradford Scott A., Šejna Miroslav, van Genuchten Martinus Th, Numerical modeling of contaminant transport using HYDRUS and its specialized modules. *Journal of*

the Indian Institute of Science. 2013. № 2. Т. 93. С. 265–284.

200. TOUGH. 2015. URL: <http://esd1.lbl.gov/research/projects/tough/> (дата звертання: 20.12.2015).

201. PNNL STOMP – Home. URL: <http://stomp.pnnl.gov/index.stm> (дата звертання: 20.12.2015).

202. Groundwater Reactive Transport Models / Zhang F., Gour-Tsyh Yeh, Jack C. Parker : BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS, 2012.

203. WEB Page for CRUNCH. 2015. URL: <http://www.csteefel.com/CrunchFlowIntroduction.html> (дата звертання: 20.12.2015).

204. The Reactive Transport Code MIN3P. 2004. URL: http://www.eos.ubc.ca/research/hydro/research/min3p/reactive_tran_web.htm (дата звертання: 20.12.2015).

205. 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. 2013. URL: <http://www.pflotran.org/> (дата звертання: 20.12.2015).

206. Steefel C. I., Appelo C. A. J., Arora B., Jacques D., Kalbacher T., Kolditz O., Lagneau V., Lichtner P. C., Mayer K. U., Meeussen J. C. L., Molins S., Moulton D., Shao H., Šimůnek J., Spycher N., Yabusaki S. B., Yeh G. T. Reactive transport codes for subsurface environmental simulation. *Comput Geosc.* 2015. № 3. Т. 19. С. 445–478.

207. Белоус М. В., Дейнека В. С. Использование программного комплекса НАДРА-3D для моделирования регионального режима фильтрации воды. *Компьютерная математика*. 2010. № 1. С. 35–42.

208. Власюк А. П., Жуковська Н. А., Жуковский В. В., Федорчук В. Ю. Математичне та комп'ютерне моделювання впливу тепломасоперенесення на просторовий напружено-деформований стан ґрунтового масиву. *Вчені записки Таврійського національного університету імені В. І. Вернадського*. 2018. № 2. Т. 29 (68). С. 108–115.

209. Жуковский В. В. Комп'ютерна програма "NanoSurface" (моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури)", 15.11.2016.

210. Власюк А. П., Жуковська Н. А., Жуковский В. В., Шендера І. М. Математичне та комп'ютерне моделювання просторових деформаційних процесів ґрунтових масивів з урахуванням тепломасоперенесення та сил зв'язності. *Вчені записки Таврійського національного університету імені*

В. І. Вернадського. Сер. Технічні науки. 2018. 29 (68), № 6 (1). С. 111–115.

211. Vlasyuk Anatoliy, Zhukovska Nataliia, Zhukovskyy Viktor, Hesham Rajab. Mathematical Modelling of Spatial Deformation Process of Soil Massif with Free Surface. *Advances in intelligent systems and computing IV*. 2020. Т. 1080. С. 107–120.

212. Vlasyuk A. P., Zhukovska N. A., Zhukovskyy V. V., Shendera I. M. Mathematical and computer modelling of tree-dimensional deformation processes of soil massif under heat and mass transfer and communication forces effect. *Scientists note of the Taurida National V. I. Vernadsky University. Ser. Technical Sciences*. 2018. № 68. Т. 29. С. 111–115.

213. Vlasyuk A. P., Zhukovska N. A., Zhukovskyy V. V. Mathematic and computer modeling of cohesion effect forces on spatial deformation processes of soil massif. *Mathematical Modeling and Computing*. 2020. Т. 7. № 1. С. 196–205.

214. Vlasyuk A. P., Zhukovska N. A., Zhukovskyy V. V. About Mathematical Modelling Of Spatial Deformation Problem Of Soil Massif With Free Surface. *IEEE 14th International Scientific and Technical Conference on Computer Sciences and Information Technologies (CSIT)*. 2019. Lviv, Ukraine : IEEE, 9/17/2019 –9/20/2019. С. 128–131.

215. Vlasyuk A. P., Borowik B., Zhukovska, N.A., Zhukovskyy V. V., Karpinskiy V. Computer modelling of heat and mass transfer effect on the three-dimensional stressed-strained state of soil massif. *18th International Multidisciplinary Scientific Geoconference SGEM*. 2018. 1.2. Т. 18. С. 153–160.

216. Vlasyuk Anatoly, Kuzlo Mykola, Zhukovska Nataliia, Zhukovskyy Viktor, Tarasyuk Nataliia, Modeling of Soil Basis of Headed Hydrotechnical Structure's Deformations Under Action Of Filtration Water Flow. *10th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT)*. Deggendorf, Germany : IEEE, 16.09.2020–18.09.2020. 2020. С. 18–22.

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*. 2011. № 54. С. 139–144.

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*. 2015. № 4. Т. 51. С. 112–120.

219. Meeussen Johannes C. L. ORCHESTRA. *Environmental Science & Technology*. 2003. № 6. Т. 37. С. 1175–1182.

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. Т. 18. С. 310–328.

221. Appelo C. A. J., 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. № 4. Т. 74. С. 1201–1219.

222. Charlton Scott R., Parkhurst David L. Modules based on the geochemical model PHREEQC for use in scripting and programming languages. *Computers & Geosciences*. 2011. № 10. Т. 37. С. 1653–1663.

223. Qt4.8. Профессиональное программирование на C++ / Евгеньевич Ш. М. Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2012. 894 с.

224. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності дренажних вловлювачів в нелінійному випадку. *Прийняття рішень в умовах невизначеності* : тези XXII Міжнар. наук. конф. 2013. С. 62.

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. *Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики* : тези I Міжнар. XX Всеукр. наукова конф., 2014. С. 51–52.

226. Жуковський В. В., Про деякі підходи до створення програмних комплексів комп'ютерного моделювання підземних процесів. *Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського*. 2017. № 103. Т. 2. С. 64–73.

227. Бурак Я. Й., Чапля Є. Я. Вихідні положення математичної моделі гетеродифузного переносу радіонуклідів у приповерхневих шарах Землі. *Доп. НАН України*. 1993. Т. 10. С. 59–63.

228. Власюк А. П., Жуковський В. В., Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі. *Тези XIV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М. Кравчука*. 2012. С. 111.

229. Теория разностных схем : учеб. пособие для вузов по спец. "Прикл. математика" / Самарский А. А. Москва : Наука, 1989. 616 с.

230. 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*. 2005. Вип. 2. С. 188.

231. Численные методы анализа / Демидович Б. П., Марон И. А., Шувалова Э. З. М. : Наука, 1967. 368 с.

232. Численные методы математической физики : учеб. пособие по прикл. математике / А. А. Самарский, А. В. Гулин : Науч. мир, 2003. 316 с.

233. Гончарук Володимир, Чапля Євген, Чернуха Ольга, Оведик Ян. Процеси гетеродифузії розпадної речовини двома шляхами у середовищі з пастками. *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*. 2013. № 18. С. 73–84.

234. 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*. 2017. С. 82–101.

235. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі. *Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук*. 2015. Т. 1. С. 89–95.

236. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V., Bondarchuk M. M. Mathematical Modelling of Vertical Migration of Radionuclides in Catalytic Porous Media with Traps in Linear Case. *Theoretical and Applied Aspects of Cybernetics. Proceedings of the 5th International Scientific Conference of Students and Young Scientists*. 2015. С. 208–219.

237. Zhukovskyy 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* / за ред. Stanisław Adamczak. Kielce : Kielce University of Technology, op, 2016. С. 177–190.

238. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів у лінійному випадку. *Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики* : тези XIX Всеукр. наукова конф. 2013. С. 41–42.

239. Власюк А. П., Жуковський В. В., Математичне моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному середовищі з пастками. *Прийняття рішень в умовах невизначеності* : тези XXVI Міжнар. наук. конф. 2015. С. 61–63.

240. 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. *Сучасні проблеми математичного моделювання, прогнозування та оптимізації* : тези VI Міжнар. наук. конф., 2014. С. 32–33.

241. Численные методы анализа / Демидович Б. П., И. А. Марон,

Э. 3. Шувалова : Наука, 1967. 368 с.

242. Design patterns / Gamma E. Reading, Mass : Addison-Wesley, 1995. Addison-Wesley professional computing series. XV. 395 с.

243. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V. Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in unsaturated porous media in non-isothermal conditions one-dimensional case. *Problems of decision making under uncertainties* : Abstracts of XXIV International Conference, 2014. С. 110–111.

244. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі у нелінійному випадку. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Сер. Технічні науки* : зб. наук. праць, 2015. Т. 12. С. 161–172.

245. Modelling the migration and accumulation of radionuclides in forest ecosystems. Vienna : International Atomic Energy Agency, 2002. IAEA-BIOMASS-5. [6], 127.

246. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі з пастками у нелінійному випадку. *Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики* : зб. наук. праць конференції, 2015. С. 89.

247. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах. *Проблеми розвитку вищої школи та економіки в XXI столітті* : тези Міжнар. науково-практичної конф. 2013. С. 77–79.

248. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів у нелінійному випадку. *Тези XV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М. Кравчука*. 2014. С. 72.

249. Власюк А. П., Жуковский В. В., Математическое моделирование миграции радионуклидов в грунтовой почве при неизотермических условиях с учетом каталитических микрочастиц. *Тезисы докладов и сообщений XV Минский международный форум по тепло- и массообмену*. 2016. С. 342–345.

250. 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. № 6. Т. 90. С. 1386–1398.

251. Zhukovskyy V. V., Vlasyuk A. P., Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in catalytic porous media in non-isothermal conditions. *SCIENCE REPORT Project CIII-PL-0007: Research on modern*

systems for manufacture and measurement of components of machines and devices. 2016. С. 177–190.

252. Vlasyuk A. P., Zhukovsky V. V. A Two-dimensional Mathematical Model for Linear Vertical Migration of Pollutant in the Catalytic Porous Media.

Inżynier XXI wieku / за ред. Jacek Rysiński. Bielsko-Biała : Wydawnictwo Naukowe Akademii Techniczno-Humanistycznej, 2016. С. 897–904.

253. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному нелінійному випадку. *Прийняття рішень в умовах невизначеності* : тези XXV Міжнар. наук. конф., 2015. С. 154–155.

254. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у ненасиченому пористому середовищі у двохвимірному випадку. *Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів* : тези Всеукр. наук. конф., 2015. С. 44.

255. Vlasyuk A. P., Kochan R. V., Zhukovsky V. V., Zhukovska N. A., Mathematical and computer modeling of contaminant migration to filter trap in two-dimensional nonlinear case. *18th International Multidisciplinary Scientific Geoconference SGEM 2018*. 2018. 2.2. Т. 18. С. 293–300.

256. Власюк А. П., Жуковский В. В. Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу сольових розчинів у каталітичних середовищах мікропористої структури. Мікро- та нано- неоднорідні матеріали: моделі та експеримент : матеріали Міжнародної наукової конференції. 2018. С. 20–22.

257. Harry Vereecken, Andrea Schnepf, Jan Vanderborght, Establishing an International Soil Modelling Consortium. 2015. 3043 с.

258. Šimůnek Jirí, van Genuchten Martinus Th., Šejna Miroslav, Development and Applications of the HYDRUS and STANMOD Software Packages and Related Codes. *Vadose Zone Journal*. 2008. № 2. Т. 7. С. 587.

259. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів. *Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів* : тези Всеукр. наук. конф., 2013. С. 42.

260. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах. *Прийняття рішень в умовах невизначеності* : тези XXI Міжнар. наук. конф. 2013. С. 105–107.

261. Vlasyuk A., Zhukovsky V., Zhukovska N., Pinchuk O., Rajab H.,

Mathematical Modeling of Heat, Mass and Moisture Transfer in Catalytic Porous Media. *WSEAS Transactions on Applied and Theoretical Mechanic*. 2020. Т. 15. С. 52–59.

262. Vlasyuk Anatoly, Zhukovskyy Viktor, Zhukovska Nataliia, Rajab Hesham. One-dimensional Modeling of Contaminant Migration in Unsaturated Porous Media with Dispersed Catalyst Particles. *International Conference on Mathematics and Computers in Science and Engineering (MACISE)*. 2020. Madrid, Spain: IEEE, 14.01.2020–16.01.2020. С. 197–201.

263. Власюк А. П., Жуковський В. В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому біпористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів. Прийняття рішень в умовах невизначеності : тези XXIII Міжнар. наук. конф. 2014. С. 75–76.

264. Vlasyuk Anatoly, Zhukovskyy Viktor, Zhukovska Nataliia, Kraychuk Serhiy. About Two-dimensional Mathematical Model of Contaminant Migration in Unsaturated Catalytic Porous Media with Traps. *Modeling, Control and Information Technologies*. 2020. № 4. С. 25–28.

265. Fedorov S. V., Tolstukha A. S., Fedorov I. V., Zhukovskyy V. V., Unsteady temperature field calculation in the exothermic reaction. *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. № 1. Т. 1791. С. 12072.

266. Safonyk Andrii, Zhukovskyy Viktor, Burduk Anna. Modeling of Biological Wastewater Treatment Process Taking into Account Reverse Effect of Concentration on Diffusion Coefficient. *10th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT)*. 2020. Deggendorf, Germany : IEEE, 16.09.2020–18.09.2020. С. 29–34.

267. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V. Nanosurface – a tool for computer modeling of mass transfer process in catalytic porous media. *Problems of decision making under uncertainties* : Abstracts of XXVIII International Conference, 2016. С. 122–124.

268. 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*. 2012. № 2/3. С. 435–442.

269. Code complete / McConnell S. 2 вид. Redmond, Wash. : Microsoft Press, 2004. 914 с.

270. Vlasyuk Anatoly Pavlovich, Zhukovskyy Viktor Volodymyrovich. A modern approach for software construction of tools for mathematical modeling of mass transfer processes in catalytic porous media. *Theoretical & Applied Science*. 2016. Т. 44. № 12. С. 69–75.

271. Boehm Barry, Abts Chris, Chulani Sunita. Software development cost

estimation approaches – A survey. *Annals of software engineering*. 2000. 1–4. Т. 10. С. 177–205.

272. Papajorgji P. J., Pardalos P. M. Software engineering techniques applied to agricultural systems. *Springer optimization and its applications* : 1 online resource (XVII). New York, NY : Springer, 2014. Vol. 93. 301 s.

273. Verification and validation in scientific computing / Oberkampf W. L. Cambridge u.a. Cambridge Univ. : Press, 2013. 767 с.

274. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Sergienko I., Deineka V., Fraissard J., Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Bed. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2015. № 47. Т. 119. С. 26519–26525.

275. Сборник задач по математической физике / Будак Б. М., Александр Андреевич Самарский, Андрей Николаевич Тихонов. Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1956.

276. No exponential is forever: but "Forever" can be delayed! [semiconductor industry] / ред. Gordon E. Moore : IEEE, 2003. 20–23.

277. Богаенко В. А. Об оптимизации вычислительного процесса математического моделирования сложных задач. *Управляющие системы и машины*. 2010. № 6. С. 9–24.

278. Богаенко В. О. Паралельні алгоритми моделювання процесу фільтраційної консолідації під дією двокомпонентного розчину. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Сер. Фізико-математичні науки*. 2011. С. 3–10.

279. Богаенко В. А., Методика численного моделирования процесса электрокинетической очистки грунтов в неизотермических условиях. *Управляющие системы и машины*. 2013. № 1. С. 3–10.

280. Богаенко В. А., Булавацкий В. М., Скопецкий В. В. Параллельный алгоритм расчета фильтрационно-конвективной диффузии загрязнений из водоносных горизонтов. *Управляющие системы и машины*. 2008. № 5. С. 18–23.

281. Gladky Anatoliy V., Blagoveshchenskaya Tatyana Yu, Bohaienko Vsevolod A. Splitting Methods Parallel Algorithms for Problems of Pollution Transport in Atmosphere. *Journal of Automation and Information Sciences*. 2014. № 10. Т. 46.

282. Gladky Anatoliy V., Bohaienko Vsevolod A. Investigation of Parallel Algorithms for Solving Problems of Convection Diffusion on the Basis of Splitting Schemes. *Journal of Automation and Information Sciences*. 2017. № 2. Т. 49.

283. Wu Yuanqing, Salama Amgad, Sun Shuyu, Parallel simulation of wormhole propagation with the Darcy–Brinkman–Forchheimer framework.

Computers and Geotechnics. 2015. Т. 69. С. 564–577.

284. Белоус Максим. Конечно-элементный решатель Надра-3D. *Cluster Computing : Second International Conference*.

285. Белоус М. В., Дейнека В. С. Подсистема триангуляции слоистых тел программного комплекса Надра-3D. *Компьютерная математика*. 2011. № 1. С. 56–62.

286. Богаенко В. А., Булавацкий В. М. Численное моделирование дробно-дифференциальной динамики процесса фильтрационно-конвективной диффузии на основе параллельных алгоритмов для кластерных систем. *Доповіди НАН України*. 2017.

287. Bogaenko Vsevolod A., Bulavatskiy Vladimir M., Kryvonos Iuriy G. On Mathematical modeling of Fractional-Differential Dynamics of Flushing Process for Saline Soils with Parallel Algorithms Usage. *Journal of Automation and Information Sciences*. 2016. № 10. Т. 48. С. 1–12.

288. Vlasyuk Anatoliy, Zhukovskyy Viktor, Zhukovska Nataliia, Shatnyi Serhii, Parallel Computing optimization of Two- Dimensional Mathematical Modeling of Contaminant Migration in Catalytic Porous Media. *10th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT)*. 2020. Deggendorf, Germany : IEEE, 16.09.2020–18.09.2020. С. 23–28.

289. Баркалов К. А. Методы параллельных вычислений. 2011. 124 с.

290. Гергель В. П. Высокопроизводительные вычисления для многопроцессорных многоядерных систем : учебник для вузов. Физматлит : Суперкомпьютерное образование : СКО, 2010.

291. OpenMP.org. URL: <http://openmp.org/wp/> (дата звертання: 21.06.2016).

292. Dagum Leonardo, Menon Ramesh, OpenMP: an industry standard API for shared-memory programming. *IEEE computational science and engineering*. 1998. № 1. Т. 5. С. 46–55.

293. ISO/IEC 9899:1999. Programming languages. С. 2011. URL: http://www.iso.org/iso/iso_catalogue/catalogue_ics/catalogue_detail_ics.htm?csnumber=29237.

294. Власюк А. П., Жуковський В. В., Жуковська Н. А.. Комп'ютерне моделювання процесу вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі з використанням паралельних обчислень. *Інформаційні технології та комп'ютерна інженерія*. 2017. № 39. Т. 2. С. 60–69.

295. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V. Mathematical and computer modeling of intraparticle radionuclides mass transfer in catalytic porous media under isothermal conditions. *Mathematical Modeling and Computing*. 2017.

№ 2. Т. 4. С. 117–125.

296. Vlasyuk A. P., Zhukovsky V. V. Optimization of computer methods for mathematical modeling of radionuclides vertical migration in catalytic porous media. *Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук.* 2017. Т. 2. С. 40–46.

297. Vlasyuk A. P., Zhukovsky V. V. Optimization of computer methods for mathematical modeling of radionuclides vertical migration in catalytic porous media. *Problems of decision making under uncertainties : Abstracts of XXX International Conference.* 2017. С. 130–131.

298. Власюк А. П., Жуковський В. В. Верифікація та валідація комп'ютерного моделювання міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі. Прийняття рішень в умовах невизначеності : тези XXIX Міжнар. наук. конф. 2017. С. 141–143.



Національний університет
водного господарства
та природокористування

Наукове видання

Власюк Анатолій Павлович
Жуковський Віктор Володимирович
Жуковська Наталія Анатоліївна



Національний університет
водного господарства
та природокористування

**Математичне та комп'ютерне моделювання масопереносу
при фільтрації сольових розчинів в середовищах
пористої та нанопористої структури**

Монографія

Друкується в авторській редакції

Технічний редактор

Г.Ф. Сімчук



Національний університет
водного господарства
та природокористування

Підписано до друку 18.12.2020 р. Формат 60×84^{1/16}.
Ум.-друк. арк. 10,4. Обл.-вид. арк. 11,5.
Тираж 100 прим. Зам. № 5573.

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

*Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до
державного реєстру видавців, виготівників і розповсюджувачів
видавничої продукції РВ № 31 від 20.04.2005 р.*