УДК 519.688 https://doi.org/10.31713/vt1202222

Уляньчук-Мартинюк О. В., аспірант (Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне)

АЛГОРИТМИ ЧИСЛОВОГО УРАХУВАННЯ ІНТЕГРАЛЬНИХ УМОВ СПРЯЖЕННЯ В МОДЕЛЯХ СЕРЕДОВИЩ З ГЕОБАР'ЄРАМИ

В статті, на прикладі задачі вологоперенесення, розглянуто алгоритмічні особливості математичного і комп'ютерного моделювання фізико-хімічних процесів в пористих середовищах із тонкими включеннями (геобар'єрами). Використовуючи модифіковані умови спряження сформовано математичну модель процесу вологоперенесення в масиві ґрунту, який містить одне тонке включення. Наведено схему числового розв'язання відповідної початково-крайової задачі методом скінченних елементів та доведено теореми про точність наближених узагальнених розв'язків. Розглянуто схеми урахування інтегральної умови спряження. Запропоновано три типи алгоритмів. Перший алгоритм ґрунтується на лінійній апроксимації поля напорів всередині включення, використовуючи знайдені граничні значення зліва та справа від його (включення). Другий алгоритм базується на обчисленні інтеграла в інтегральній умові спряження із застосуванням теореми про середнє. В третьому алгоритмі запропоновано всередині включення ввести внутрішній вузол, через скінченнорізницевий метод знайти в ньому значення напорів та апроксимувати їх (напори) шляхом квадратичної інтерполяції. Числові експерименти показали, що значення вологості на включенні при застосуванні першого та другого алгоритмів відрізняються не більше ніж на 1%. Відносні різниці вологості при застосуванні першого та третього алгоритмів, як правило, лежать в межах 3%, але інколи можуть досягати 5.5%.

Ключові слова: **числовий алгоритм; умова спряження; стрибок вологості; геобар'єр.**

Вступ. В роботах [1–9] обґрунтована необхідність, з точки зору фізики процесів в середовищах з тонкими включеннями, модифікації класичних умов спряження неідеального контакту. Така необхідність обумовлена залежністю теплогідропровідності тонких включень від впливу зовнішніх факторів – змінної вологості, температури, концентрації хімічних речовин, пористості. В класичних умовах спряження неідеального контакту цих фактів не враховано [10–12].

В роботі [1] досліджено вплив залежності коефіцієнта вологоперенесення матеріалу тонкого включення від напорів на значення стрибка напорів на самому включенні. На прикладі модельної задачі, в результаті числових експериментів, показано, що відносні різниці в значеннях стрибків напорів при використанні класичної та модифікованої умов спряження неідеального контакту можуть сягати 34.7% (як в сторону збільшення, так і в сторону зменшення).

В роботі [4] досліджено вплив напівпроникних властивостей глин як матеріалів геобар'єрів на значення концентрації забруднень, які проникають крізь нього (глинистий бар'єр). При цьому коефіцієнт ідеальності геобар'єра як напівпроникної мембрани залежить від концентрації забруднень на вході (і це враховано в математичній моделі). Згідно з числовими експериментами, якщо зовсім знехтувати напівпроникними властивостями глинистого геобар'єра, або коефіцієнт ідеальності вважати сталим, то це призводить у відносних змінах концентрації забруднень, що поширюються за геобар'єр, в межах від -5.5% до +8.5% (це при умові застосування модифікованої умови спряження). Більше того, якщо в якості умови спряження неідеального контакту використовувати класичну, то відмінності в прогнозних концентраціях за межами геобар'єра (наприклад, через 2 роки) сягають 4-кратних значень в порівнянні з випадком використання модифікованих умов.

В роботі [6], окрім показника ідеальності геобар'єра, враховано ще й вплив хімічного осмосу. Результати числових експериментів показують, що як напівпроникність включення, так і урахування осмотичних явищ є важливими в прогнозних розрахунках. Наприклад, при нехтуванні показником ідеальності геобар'єра та осмосом рівень забруднення за геобар'єром через три роки вже становить 175 мМ, а перед геобар'єром – 220 мМ і стрибок концентрації забруднень на геобар'єрі – 45 мМ. При одночасному урахуванні ступеня ідеальності (який теж залежить від концентрації забруднень) та осмосу рівень забруднень за геобар'єром становить 29 мМ, а перед – 147 мМ. Враховуючи довготривалість процесу, прогнозована кількість забруднюючих речовин, що виходить за межі сховищ відходів у ґрунтові води, може значно змінюватися в залежності від умов вирішення задачі.

В роботі [5] авторами досліджено вплив біокольматації геобар'єра сховища органічних відходів на значення стрибків напорів. Сформовано математичну модель фільтрації органічних речовин з урахуванням ефекту біокольматації. Математична модель містить рівняння фільтрації в умовах змінної пористості. Також в математичну модель входить рівняння перенесення органічних хімічних речовин в поровій рідині пористого середовища та рівняння динаміки біомаси бактерій в пористому середовищі на основі рівняння Моно. Як відмічено в [5], числові експерименти показали, що наявність мікроорганізмів у порах ґрунту значно впливає на значення напорів зверху та знизу геобар'єра. Зокрема, відносні зміни в стрибках напорів, в порівнянні із випадком нехтуванням впливом мікроорганізмів, можуть сягати 54,8% в сторону збільшення. Такі відмінності, в свою чергу, призводять до змін у прогнозних розрахунках поширення забруднень зі сховищ відходів у ґрунтові води.

В роботі [8] розглянуто поширення органічної хімічної речовини та процес фільтрації в ґрунті, який (ґрунт) містить тонкий геохімічний бар'єр. На відміну від попередньої роботи динаміку зміни мікроорганізмів в пористому середовищі описано дифузійним рівнянням. Умови спряження, як складова частина математичної моделі фільтрації хімічних речовин на випадок неоднорідності пористих середовищ та наявності тонких включень, модифіковано для випадку впливу біокольматації. Числовий розв'язок відповідної нелінійної крайової задачі з модифікованими умовами спряження знайдено методом скінченних елементів. Зазначено умови, за яких існує єдиний узагальнений розв'язок відповідної крайової задачі. Наведено результати щодо теоретичної точності скінченноелементних розв'язків. На тестовому модельному прикладі фільтраційної консолідації ґрунту в основі сховища твердих побутових відходів проаналізовано відмінності в значеннях стрибків напорів на тонкому геохімічному бар'єрі для розглянутого в статті та класичного випадків. Так, для випадку урахування впливу біокольматації надлишкові напори через 600 діб після початку процесу сягають 25% від їх початкового значення. Водночас для тестового випадку без урахування вказаного ефекту – лише 6%. Уповільнене розсіювання надлишкових напорів в околі геобар'єра означає меншу швидкість руху порової рідини через геобар'єр. Такий ефект пояснюється біокольматацією і має свою позитивну сторону – уповільнене поширення забруднень із верхніх шарів ґрунту в нижні. В даному випадку функції геобар'єра як захисної споруди від поширення забруднень підсилюються. Оскільки матеріалом для штучних геобар'єрів, як правило, є глини, то високі надлишкові напори та їх стрибки можуть стати причиною зменшення стійкості та зростання ризику зсувів, формування зсувонебезпечних зон, що особливо актуально для великих сховищ відходів.

Як видно з огляду, в попередніх авторських наукових роботах увага зосереджена на числових дослідженнях впливу модифікації умов спряження для геобар'єра на значення стрибків досліджуваних функцій на ньому. Однак алгоритмічні аспекти методики урахування таких модифікованих умов спряження, які містять інтеграли по товщині включення, в числовому розв'язуванні крайових задач детально не розглядались. Це і становить основну мету цієї статті.

Математична модель задачі вологоперенесення в неоднорідному масиві ґрунту. Для прикладу розглянемо процес вологоперенесення в неоднорідному масиві ґрунту в одновимірному випадку, який (процес) описується наступною крайовою задачею [1; 9]:

$$\beta(h)\frac{\partial h}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(k(h)\frac{\partial h}{\partial x}\right),\quad (x,t)\in Q_T; \tag{1}$$

$$h(x,t)\big|_{x=0}=0,\quad t\in(0;T]; \tag{2}$$

$$u(x,t)\big|_{x=l}=-k(h)\frac{\partial h}{\partial x}\bigg|_{x=l}=0,\quad t\in(0;T]; \tag{3}$$

$$h(x,0)=h_0(x),\quad x\in\overline{\Omega}; \tag{4}$$

$$u^{\pm}\Big|_{x=\xi}=\left(-k(h)\frac{\partial h}{\partial x}\right)^{\pm}\Bigg|_{x=\xi}=-\frac{[h]}{\int\limits_0^d\frac{dx}{k_\omega(h)}}. \tag{5}$$

Тут $Q_T=\Omega\times(0;T]$, $Q_T^1=\Omega_1\times(0;T]$, $Q_T^2=\Omega_2\times(0;T]$, $\Omega=\Omega_1\cup\Omega_2$, $\Omega_1=(0;\xi)$, $\Omega_2=(\xi;l)$, $0<\xi<l$; $h_0(x)$, $\beta(h)$, $k(h)$, k_ω – відомі функції. Функція $h_0(x)$ має бути неперервною на кожному з відрізків $[0;\xi]$, $[\xi;l]$. Відмітимо, що в (1)–(5)

$$k(h)=\begin{cases}k_1(h),\, x\in\Omega_1;\\ k_2(h),\, x\in\Omega_2;\end{cases}\quad \beta(h)=\begin{cases}\beta_1(h),\, x\in\Omega_1;\\ \beta_2(h),\, x\in\Omega_2.\end{cases}$$

Оскільки основна мета статті стосується алгоритмів числового урахування модифікованої умови спряження (5) при наближеному розв'язанні початково-крайової задачі (1)–(5), то відмітимо наступні, не принципові для досягнення мети, спрощення. По перше, в рівнянні (1), як і в швидкості руху вологи $u(x,t)$, знехтувано гравітаційною складовою руху вологи. По друге, граничні умови (2) та (3) прийнято однорідними.

Модифікована умова спряження (5), яка містить інтеграл по товщині включення, виведена в [9] із припущення (в силу тонкості включення), що процеси вологоперенесення в поперечному перерізі даного включення є стаціонарними (або принаймні квазістаціонарними). Таким чином для включення розглядалась наступна задача вологоперенесення:

$$\frac{d}{d\zeta}\left(-k_\omega(h)\frac{dh}{d\zeta}\right)=0,\quad 0<\zeta<d, \tag{6}$$

$$h(0)=h^-,\, h(d)=h^+, \tag{7}$$

де $k_\omega(h)$ – коефіцієнт вологоперенесення тонкого включення, який нелінійно залежить від вологості, а отже – і від напорів.

Припустимо, що функція $h_0(x)$ є неперервною на кожному із замикань $\overline{\Omega}_1$, $\overline{\Omega}_2$. Також стосовно функцій β, k, k_ω припустимо, що

1)

$$0<\beta_{min}\le\beta(s_1)\le\beta_{max}<\infty,$$
$$0<k_{min}\le k(s_1)\le k_{max}<\infty,$$
$$0<k_{\omega,min}\le k_\omega(s_1)\le k_{\omega,max}<\infty,$$

$\forall s_1\in(-\infty;+\infty)$; β_{min}, β_{max}, k_{min}, k_{max}, $k_{\omega,min}$, $k_{\omega,max}$ – додатні константи;

2)

$$|\beta(s_1)-\beta(s_2)|\le\beta_L|s_1-s_2|,\, 0<\beta_L<\infty;$$
$$|k(s_1)-k(s_2)|\le k_L|s_1-s_2|,\, 0<k_L<\infty;$$
$$|k_\omega(s_1)-k_\omega(s_2)|\le k_{\omega,L}|s_1-s_2|,\, 0<k_{\omega,L}<\infty.$$

Також функції $\beta = \beta(h)$, $k = k(h)$ мають бути неперервними на $\overline{\Omega}_1$, $\overline{\Omega}_2$, а $k = k(h)$ ще й неперервно диференційованою на Ω_1, Ω_2.

Означення 1. Класичним розв'язком початково-крайової задачі (1)–(5), який допускає розрив першого роду в точці $x = \xi$, називається функція $h(x,t) \in \Psi$, яка задовольняє $\forall (x,t) \in \overline{Q}_T$ рівнянню (1) та початковій умові (4).

В означенні 1 Ψ – це множина функцій $\psi(x,t)$, які, разом із $\frac{\partial \psi}{\partial x}$, неперервні на кожному із замикань $\overline{Q}_T^1$, $\overline{Q}_T^2$, мають обмежені неперервні частинні похідні $\frac{\partial \psi}{\partial t}$, $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$ на Q_T^1, Q_T^2 та задовольняють умовам (2), (3), (5).

Для подальших викладок відмітимо ще один аспект. В класичну умову спряження неідеального контакту (див. [10, С. 291, формула (7.4)]) $\left(\chi(x,u)\frac{\partial u}{\partial x}\right)\Big|_{x=\xi} = r[u]$ входить деяка відома константа r, причому $0 < r_0 \le r < \infty$. Розглянемо умову (5). При виконанні третьої з умов 1) для коефіцієнта в правій частині умови спряження (5)

$$\left(-k(h)\frac{\partial h}{\partial x}\right)^{\pm}\Bigg|_{x=\xi} = -\frac{[h]}{\int\limits_0^d \frac{dx}{k_\omega(h)}}$$

маємо

$$\frac{d}{k_{\omega,max}} \le \int\limits_0^d \frac{dx}{k_\omega(h)} \le \frac{d}{k_{\omega,min}}.$$

Далі

$$k_{\omega,min}\frac{[h]}{d} \le \frac{[h]}{\int\limits_0^d \frac{dx}{k_\omega(h)}} \le k_{\omega,max}\frac{[h]}{d}.$$

Тобто у випадку модифікованої умови спряження (5) маємо

$$0 < \frac{k_{\omega,min}}{d} \le r \le \frac{k_{\omega,max}}{d} < \infty. \quad (8)$$

Оцінка (8) дозволяє нам узагальнити теореми, доведені в роботах [10–12] для задач з класичною умовою спряження неідеального контакту, на випадок модифікованої умови спряження (5).

Узагальнений розв'язок задачі (1)–(5). Аналогічно [10; 11], нехай H_0 – простір функцій $s(x)$ які на кожній з областей Ω_i належать простору Соболєва $W_2^1(\Omega_i)$, $i=1,2$, причому вони набувають нульових значень на кінцях відрізка $[0;l]$ де для функції $h(x,t)$ задані граничні умови першого роду.

Нехай $h(x,t)\in\Psi$ – класичний розв'язок початково-крайової задачі (1)-(5). Візьмемо $s(x)\in H_0$. Домножимо рівняння (1) та початкову умову (4) на $s(x)$. Інтегруючи їх на відрізку $[0;l]$ та враховуючи умови спряження (5), отримаємо

$$\int_0^l \beta(h)\frac{\partial h}{\partial t}s(x)dx+\int_0^l k(h)\frac{\partial h}{\partial x}\frac{ds}{dx}dx+\frac{[h][s]}{\int_0^d \frac{dx}{k_\omega(h)}}=0, \qquad (9)$$

$$\int_0^l h(x,0)s(x)dx=\int_0^l h_0(x)s(x)dx. \qquad (10)$$

Отже, якщо $h(x,t)\in\Psi$ є класичним розв'язком початково-крайової задачі (1)–(5), то $h(x,t)$ – розв'язок задачі (9), (10) в слабкій постановці.

Нехай H – простір функцій $\upsilon(x,t)$, які інтегровані з квадратом разом зі своїми першими похідними $\frac{\partial\upsilon}{\partial t}$, $\frac{\partial\upsilon}{\partial x}$ на кожному з інтервалів $(0;\xi)$, $(\xi;l)$, $\forall t\in[0;T)$, $T>0$, причому вони задовольняють граничні умови першого роду, що і функція $h(x,t)$.

Означення 2. Функція $h(x,t)\in H$, котра для будь-якої $s(x)\in H_0$ задовольняє інтегральним співвідношенням (9), (10), називається узагальненим розв'язком початково-крайової задачі (1)–(5).

Наближений узагальнений розв'язок початково-крайової задачі (1)–(5) будемо шукати у вигляді

$$\widehat{h}(x,t) = \sum_{i=1}^{N} h_i(t)\varphi_i(x), \tag{11}$$

де $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^{N}$ – базис скінченновимірного підпростору $M_0 \subset H_0$; $h_i(t), i = \overline{1,N}$ – невідомі коефіцієнти, які залежать лише від часу.

Сукупність функцій, які можна подати у вигляді (11), породжують скінченновимірний підпростір $M_1 \subset H_1$.

Означення 3. Наближеним узагальненим розв'язком початково-крайової задачі (1)–(5) називається функція $\widehat{h}(x,t) \in M_1$, яка для довільної функції $S(x) \in M_0$ задовольняє інтегральним співвідношенням

$$\int_0^l \beta\left(\widehat{h}\right)\frac{\partial \widehat{h}}{\partial t} S(x)\,dx + \int_0^l k\left(\widehat{h}\right)\frac{\partial \widehat{h}}{\partial x}\frac{dS}{dx}\,dx + \frac{\left[\widehat{h}\right][S]}{\int_0^d \frac{dx}{k_\omega\left(\widehat{h}\right)}} = 0, \tag{12}$$

$$\int_0^l \widehat{h}(x,0) S(x)\,dx = \int_0^l h_0(x) S(x)\,dx. \tag{13}$$

Далі із слабкого формулювання (12), (13) отримаємо (покладаючи функцію $S(x)$ рівною кожній базисній функції $\varphi_i(x)$, $i = \overline{1,N}$) задачу Коші для системи нелінійних диференціальних рівнянь

$$\mathbf{M}(\mathbf{H})\frac{d\mathbf{H}}{dt} + \mathbf{L}(\mathbf{H})\mathbf{H}(t) = \mathbf{0}, \tag{14}$$

$$\tilde{\mathbf{M}}\mathbf{H}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}} \tag{15}$$

де

$$\tilde{\mathbf{F}} = \left(\tilde{f}_i\right)_{i=1}^{N},\ \tilde{\mathbf{M}} = \left(\tilde{m}_{ij}\right)_{i,j=1}^{N},\ \mathbf{M} = \left(m_{ij}\right)_{i,j=1}^{N},\ \mathbf{L} = \left(l_{ij}\right)_{i,j=1}^{N},$$

$$\mathbf{H} = \left(h_i(t)\right)_{i=1}^{N},\ \mathbf{H}^{(0)} = \left(h_i(0)\right)_{i=1}^{N},\ \tilde{m}_{ij} = \int_0^l \varphi_i\varphi_j\,dx,$$

$$m_{ij} = \int_0^l \beta\left(\widehat{h}\right)\varphi_i\varphi_j\,dx,\ l_{ij} = \int_0^l k\left(\widehat{h}\right)\frac{d\varphi_i}{dx}\frac{d\varphi_j}{dx}\,dx + \frac{[\varphi_i]\left[\varphi_j\right]}{\int_0^d \frac{dx}{k_\omega\left(\widehat{h}\right)}}.$$

При виконанні першої з умов 1) квадратна матриця $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ є симетричною та додатно визначеною. Зважаючи на додатність коефіцієнтів k, k_ω, а також висловлені припущення 1) щодо їх обмеженості, матриця $\mathbf{L}(\mathbf{H})$ також буде симетричною та додатно визначеною [11, стор. 417]. Далі, аналогічно до [11, задача (3.14) глави 8], запишемо систему (14) у вигляді $\frac{d\mathbf{H}}{dt}=\mathbf{\Phi}(\mathbf{H})$, де $\mathbf{\Phi}(\mathbf{H})=-\mathbf{M}^{-1}\mathbf{L}(\mathbf{H})\mathbf{H}(t)$. Функції $\mathbf{\Phi}(\mathbf{H})$, $\partial\mathbf{\Phi}/\partial\mathbf{H}$ є неперервними. Отже, існує єдиний наближений узагальнений розв'язок $\widehat{h}(x,t)\in M_1$ початково-крайової задачі (1)–(5).

Введемо в розгляд наступні норми [11, С. 380]:

$$\|u\|_{L_2}^2=\int_0^l u^2(x,t)\,dx,\ \|u\|_{H_0^1}^2=\left\|\frac{\partial u}{\partial x}\right\|_{L_2}^2,$$

$$\|u\|_{L_2\times L_2}^2=\|u\|_{L_2(Q_T)}^2=\int_0^T\int_0^l u^2(x,t)\,dxdt,$$

$$\|u\|_{H_0^1\times L_2}^2=\int_0^T\|u\|_{H_0^1}^2\,dt=\int_0^T\int_0^l\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2dxdt,\ \|u\|_{L_2\times L_\infty}=\sup_{t\in(0;T]}\|u(\cdot,t)\|_{L_2},$$

$$\|\nabla_x u\|_{L_\infty\times L_\infty}=\sup_{(x,t)\in Q_T}\left|\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\right|,\ \|u\|_{W_2^1\times L_2}^2=\int_0^T\int_0^l\left(u^2+\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\right)dxdt,$$

$$\|[u]\|_{L_2}^2=\int_0^T[u]^2\,dt=\int_0^T\left(u(\xi+0,t)-u(\xi-0,t)\right)^2dt.$$

Аналогічно [11, С. 380, теорема 1] можна довести наступну теорему

Теорема 1. Нехай $h(x,t)$ – класичний розв'язок початково-крайової задачі (1)–(5), а $\widehat{h}(x,t)$ – наближений узагальнений розв'язок цієї задачі з простору M_1. Тоді при виконанні умов 1), 2), накладених на β, k, k_ω, враховуючи (8), існують такі додатні сталі величини c, δ_1, δ_2, що для довільної функції $\tilde{h}(x,t)\in M_1$ виконується нерівність

$$\left\|h-\widehat{h}\right\|_{L_2\times L_\infty}^2+\delta_1\left\|h-\widehat{h}\right\|_{H_0^1\times L_2}^2+\delta_2\left\|\left[h-\widehat{h}\right]\right\|_{L_2}^2\le$$
$$\le c\left\{\left\|h-\tilde{h}\right\|_{L_2\times L_\infty}^2+\left\|h-\tilde{h}\right\|_{H_0^1\times L_2}^2+\left\|\left[h-\tilde{h}\right]\right\|_{L_2}^2+\left\|\frac{\partial\left(h-\tilde{h}\right)}{\partial t}\right\|_{L_2\times L_2}^2\right\}. \quad (16)$$

Залежність (16) використовується при оцінці точності методу скінченних елементів.

Метод скінченних елементів. Покриємо замикання $\overline{\Omega}_1\cup\overline{\Omega}_2$ скінченноелементною сіткою із загальною кількістю вузлів N. Причому в точці $x=\xi$ має бути подвійна нумерація – вузла зліва $x=\xi-0$ та вузла справа $x=\xi+0$. Нехай в (8) $\varphi_i(x)$ – базисні функції методу скінченних елементів, які допускають розрив першого роду в точці $x=\xi$ і є поліномами степеня m. Тоді простір функцій $\widehat{h}(x,t)$ вигляду (11) із зазначеними базисними функціями позначимо через H_m^N.

Теорема 2. Нехай класичний розв'язок $h(x,t)$ початково-крайової задачі (1)–(5) має обмежені на Q_T^i, $i=1,2$, частинні похідні $\dfrac{\partial^{m+1}(\cdot)}{\partial x^{m+1}}$, $\dfrac{\partial^{m+2}(\cdot)}{\partial x^{m+1}\partial t}$. Тоді для наближеного узагальненого розв'язку $\widehat{h}(x,t)\in H_m^N$ має місце оцінка

$$\left\|h-\widehat{h}\right\|_{W_2^1\times L_2}\le c\,h_{max}^m,$$

де m – степінь поліномів МСЕ, $c=const>0$, $h_{max}=\max\limits_{i=\overline{1,N-1}}\left(x_{i+1}-x_i\right)$, $\left[x_i;x_{i+1}\right]$ – скінченні елементи.

Доведення. Справедливість теореми випливає з оцінки (16) при врахуванні оцінок інтерполяції [11, С. 387, теорема 2].

Схеми дискретизації в часі. Задача (14), (15) є задачею Коші для системи нелінійних диференціальних рівнянь першого порядку. Відшукання її розв'язку теж вимагає застосування відповідних схем дискретизації. В [12] обґрунтовано застосування схеми Кранка – Ніколсона

$$\mathbf{M}\left(\frac{1}{2}\left(\mathbf{H}^{(j+1)}+\mathbf{H}^{(j)}\right)\right)\frac{\mathbf{H}^{(j+1)}-\mathbf{H}^{(j)}}{\tau}+\mathbf{L}\left(\frac{1}{2}\left(\mathbf{H}^{(j+1)}+\mathbf{H}^{(j)}\right)\right)\times$$
$$\times\frac{1}{2}\left(\mathbf{H}^{(j+1)}+\mathbf{H}^{(j)}\right)=\mathbf{0},\quad j=0,1,2,\ldots,m_\tau-1. \quad (17)$$

Тут часовий відрізок $[0;T]$ розбитий на m_τ рівних частин з кроком $\tau=\frac{T}{m_\tau}$; $\mathbf{H}^{(j)}$ – наближений розв'язок задачі Коші (14), (15) при $t=j\tau$. Також введемо наступні позначення: h_j – класичний розв'язок початково-крайової задачі (1)–(5) при $t=j\tau$; $\widehat{h}_j$ – наближений узагальнений розв'язок початково-крайової задачі (1)–(5) при $t=j\tau$; $\phi_{j+1/2}=\frac{1}{2}\left(\phi_{j+1}+\phi_j\right)$; $z_j=h_j-\widehat{h}_j$.

Враховуючи (8), аналогічно до теореми 5 [11, розділ 8] справедлива.

Теорема 3. Нехай $h(x,t)$ – класичний розв'язок початково-крайової задачі (1)–(5). Нехай функції $\frac{\partial h}{\partial t}$, $\frac{\partial h}{\partial x}$ двічі неперервно диференційовні по часу на $\overline{Q}_T^i$, $i=1,2$. Також припустимо, що похідні $\frac{\partial^3 h}{\partial t^3}$, $\frac{\partial^3 h}{\partial t^2\partial x}$ рівномірно обмежені по модулю константою c_1, $\forall(x,t)\in\overline{Q}_T$. Якщо виконуються умови 1), 2), тоді існують додатні постійні величини c , δ_1, r_0, τ_0, які залежать від констант з умов 1), 2), а також T , l , такі, що $\forall\,\tau\le\tau_0$ для класичного розв'язку $h(x,t)$, і для наближеного узагальненого розв'язку, отриманого за допомогою схеми Кранка – Ніколсона, $\widehat{h}(x,t)\in M_1$, відповідно задач (1)–(5) та (14), (15) виконується нерівність

$$\left\|z_{m_\tau}\right\|_{L_2}^2+\delta_1\sum_{j=0}^{m_\tau-1}\left\|z_{j+1/2}\right\|_{H_0^1}^2\tau+r_0\sum_{j=0}^{m_\tau-1}\left[z_{j+1/2}\right]^2\tau\le$$

$$\le c\left(\sum_{j=0}^{m_\tau-1}\left\|\left(h-\tilde{h}\right)_{j+1/2}\right\|_{H_0^1}^2\tau+\sum_{j=1}^{m_\tau-1}\left\|\frac{\left(h-\tilde{h}\right)_{j+1/2}-\left(h-\tilde{h}\right)_{j-1/2}}{\tau}\right\|_{L_2}^2\tau+\right.$$

$$+\sum_{j=0}^{m_\tau-1}\left[\left(h-\tilde{h}\right)_{j+1/2}\right]^2\tau+\left\|\left(h-\tilde{h}\right)_0\right\|_{L_2}^2+$$
$$+\left\|\left(h-\tilde{h}\right)_{m_\tau-1/2}\right\|_{L_2}^2+\left\|\left(h-\tilde{h}\right)_{1/2}\right\|_{L_2}^2+O\left(\tau^4\right),\ \forall\tilde{h}\in M_1. \tag{18}$$

Аналогічно до теореми 6 [11, глава 8], враховуючи оцінку (18), справедлива.

Теорема 4. Нехай класичний розв'язок $h(x,t)$ задачі (1)–(5) задовольняє умовам теореми 3. Тоді для похибок z наближеного узагальненого розв'язку $\widehat{h}(x,t)\in H_m^N$ задачі (12), (13), отриманого за допомогою схеми Кранка – Ніколсона, справедлива оцінка

$$\left\|z_{m_\tau}\right\|_{L_2}^2+\delta_1\tau\sum_{j=0}^{m_\tau-1}\left\|z_{j+1/2}(h)\right\|_{H_0^1}^2\le c\left(h_{max}^{2m}+\tau^4\right).$$

Однак практична реалізація схеми Кранка – Ніколсона стосовно нелінійної задачі Коші (14), (15) вимагає застосування ітерацій. Замість схеми Кранка – Ніколсона можна використати схему предиктор-коректор [10], яка для системи рівнянь (14) має наступний вигляд:

$$\begin{gathered}\mathbf{M}\left(\mathbf{H}^{(j)}\right)\frac{\mathbf{W}^{(j+1)}-\mathbf{H}^{(j)}}{\tau}+\mathbf{L}\left(\mathbf{H}^{(j)}\right)\frac{1}{2}\left(\mathbf{W}^{(j+1)}+\mathbf{H}^{(j)}\right)=\mathbf{0},\\ \mathbf{M}\left(\frac{1}{2}\left(\mathbf{W}^{(j+1)}+\mathbf{H}^{(j)}\right)\right)\frac{\mathbf{H}^{(j+1)}-\mathbf{H}^{(j)}}{\tau}+\mathbf{L}\left(\frac{1}{2}\left(\mathbf{W}^{(j+1)}+\mathbf{H}^{(j)}\right)\right)\times\\ \times\frac{1}{2}\left(\mathbf{H}^{(j+1)}+\mathbf{H}^{(j)}\right)=\mathbf{0},\quad j=0,1,2,\ldots,m_\tau-1,\end{gathered} \tag{19}$$

де $\mathbf{W}^{(j+1)}$ – допоміжні вектор-функції.

З точки зору простоти практичної реалізації добре зарекомендувала себе повністю неявна лінеаризована різницева схема [8, 13]. Для системи (14) вона має вигляд

$$\mathbf{M}\left(\mathbf{H}^{(j)}\right)\frac{\mathbf{H}^{(j+1)}-\mathbf{H}^{(j)}}{\tau}+\mathbf{L}\left(\mathbf{H}^{(j)}\right)\mathbf{H}^{(j+1)}=\mathbf{0},\ j=0,1,2,\ldots,m_\tau-1. \tag{20}$$

Схеми урахування модифікованої умови спряження. У визначення елементів l_{ij}, $i,j=\overline{1,N}$ матриці $\mathbf{L}(\mathbf{H})$ задачі Коші (14),

(15) входять $s_{ij} = \dfrac{[\varphi_i][\varphi_j]}{\int\limits_0^d \dfrac{dx}{k_\omega(\widehat{h})}}$. При практичній реалізації відшукання скінченноелементних розв'язків початково-крайової задачі (1)–(5) постає питання про схеми відшукання інтегралів у s_{ij} по товщині тонкого включення. Можна запропонувати кілька схем обчислення

$$I = \int\limits_0^d \frac{dx}{k_\omega(\widehat{h})}. \tag{21}$$

Введемо наступні позначення:

$$\widehat{h}^{-(j)} = \widehat{h}\Big|_{x=\xi-0}^{t=t_j}, \ \widehat{h}^{+(j)} = \widehat{h}\Big|_{x=\xi+0}^{t=t_j}.$$

Спосіб I. Апроксимуємо розподіл напорів по відрізку $[0;d]$ лінійною залежністю

$$\widehat{h}_\omega^{(j)}(\zeta) = \widehat{h}^{-(j)} + \frac{\widehat{h}^{+(j)} - \widehat{h}^{-(j)}}{d}\zeta, \quad \zeta \in [0;d].$$

Тоді при використанні схеми (20), із (21) маємо

$$I^{(j)} = \sum_{p=1}^{m_d} A_p \frac{1}{k_\omega\left(\widehat{h}_\omega^{(j)}\left(\zeta_p\right)\right)}.$$

Тут $\int\limits_0^d f(\zeta)d\zeta = \sum\limits_{p=1}^{m_d} A_p f\left(\zeta_p\right)$ – деяка квадратурна формула при наявності m_d вузлів; A_p, $\zeta_p \in [0;d]$ – коефіцієнти та вузли квадратурної формули.

Спосіб II. Згідно припущень функція $k_\omega = k_\omega(h)$ є неперервною на включенні. Тоді згідно з теоремою про середнє, існує така точка $\zeta_m \in [0;d]$, що $I^{(j)} = \dfrac{d}{k_\omega\left(\widehat{h}_\omega^{(j)}(\zeta_m)\right)}$. Візьмемо точку ζ_m такою, що $\widehat{h}_\omega^{(j)}(\zeta_m) = 0.5\left(\widehat{h}^{+(j)} + \widehat{h}^{-(j)}\right)$. Тоді

$$I^{(j)} = \frac{d}{k_\omega\left(0.5\left(\widehat{h}^{+(j)} + \widehat{h}^{-(j)}\right)\right)}.$$

Спосіб III. Як вже зазначалося раніше, модифікована умова спряження неідеального контакту (5) виведена із крайової задачі (6), (7). Дискретизуємо рівняння (6) за методом скінченних різниць

$$\frac{1}{0.5d}\left(k\left(\widehat{h}^{+(j)}\right)\frac{\widehat{h}^{+(j)}-\widehat{h}^{0(j)}}{0.5d}-k\left(\widehat{h}^{-(j)}\right)\frac{\widehat{h}^{0(j)}-\widehat{h}^{-(j)}}{0.5d}\right)=0. \quad (22)$$

Тут $\widehat{h}^{0(j)}=\widehat{h}\Big|_{\zeta=0.5d}^{t=t_j}$. Далі з (22) маємо

$$\widehat{h}^{0(j)}=\frac{1}{k\left(\widehat{h}^{+(j)}\right)+k\left(\widehat{h}^{-(j)}\right)}\left(k\left(\widehat{h}^{+(j)}\right)\widehat{h}^{+(j)}+k\left(\widehat{h}^{-(j)}\right)\widehat{h}^{-(j)}\right).$$

Якщо значення $\widehat{h}^{0(j)}$ знайдене, то розподіл напорів $\widehat{h}^{(j)}(\zeta)$ на включенні $\zeta\in[0;d]$ апроксимуємо квадратичною залежністю

$$\widehat{h}^{(j)}(\zeta)=\frac{2}{d^2}\times$$
$$\times\left(\widehat{h}^{-(j)}(\zeta-d)(\zeta-0.5d)-\widehat{h}^{0(j)}\zeta(\zeta-d)+\widehat{h}^{+(j)}\zeta(\zeta-0.5d)\right).$$

Результати числових експериментів. Параметри ґрунтів для проведення числових експериментів взято із безкоштовної програми Hydrus-1D [14]. Зокрема, в якості основного ґрунту розглядався піщаний суглинок (Sandy Loam) при: $k_0=1.61\,m/day$, $\theta_{min}=0.065$, $\theta_{max}=0.41$, $n=1.89$, $\alpha=7.5$. В якості ґрунту тонкого включення використовувалась глина (clay) з наступними параметрами: $k_{\omega,0}=0.048\,m/day$, $\theta_{min}=0.068$, $\theta_{max}=0.38$, $n=1.09$, $\alpha=0.8$.

Згідно моделі ван Генухтена маємо [14; 15]

$$\theta(h)=\theta_{min}+\frac{\theta_{max}-\theta_{min}}{\left(1+(-\alpha h)^n\right)^m},\ k(h)=k_0\sqrt{s}\left(1-\left(1-s^{\frac{1}{m}}\right)^m\right)^2,$$

$\theta\in[\theta_{min};\theta_{max}]$, $\theta_{min}>0$, $\theta_{max}\in(\theta_{min};1]$, $n>1$, $m=1-\frac{1}{n}$; $s=\frac{\theta-\theta_{min}}{\theta_{max}-\theta_{min}}$ – відносна вологість; k_0 — коефіцієнт фільтрації (у випадку повного насичення при $s=1$ і $h=0$). Далі

$$\beta(h)=\frac{d\theta}{dh}=\alpha nm(\theta_{max}-\theta_{min})\left(1+(-\alpha h)^n\right)^{-m-1}(-\alpha h)^{n-1}.$$

Для модельної задачі розглянуто шар ґрунту товщиною $l = 2\,m$. Глибина залягання включення $\xi = 1\,m$, а його товщина $d = 0.2\,m$. Крок по змінній x становив $0.01\,m$. Крок по часу $\tau = 0.1\,day$. Початковий розподіл напорів $h_0(x) = -10\,m$. На нижній межі ґрунту задавалась гранична умова першого роду із значенням напорів $-0.1\,m$.

В табл. 1–3 наведено значення вологості зліва (θ^-) та справа (θ^+) від включення в різні моменти часу при числових схемах урахування модифікованої умови спряження згідно з способами I–III.

Таблиця 1

Значення вологості на включенні (Спосіб I)

t, day	θ^-	θ^+
20	0,263522	0,077708
25	0,330338	0,182952
30	0,332120	0,191174
40	0,333319	0,202238
50	0,333923	0,209558
60	0,334350	0,215028
70	0,334684	0,219402
80	0,334957	0,223048
90	0,335188	0,226174
100	0,335389	0,228910
110	0,335565	0,231341
120	0,335724	0,233569
130	0,335903	0,236294
140	0,336159	0,240252

Таблиця 2

Значення вологості на включенні (Спосіб II)

t, day	θ^-	θ^+
20	0,263519 (0,001%)	0,077717 (0,012%)
25	0,330342 (0,001%)	0,184679 (0,944%)

продовження табл. 2

30	0,332091 (0,009%)	0,192295 (0,586%)
40	0,333289 (0,009%)	0,202993 (0,373%)
50	0,333900 (0,007%)	0,210160 (0,287%)
60	0,334333 (0,005%)	0,215539 (0,238%)
70	0,334670 (0,004%)	0,219850 (0,204%)
80	0,334946 (0,003%)	0,223450 (0,180%)
90	0,335179 (0,003%)	0,226539 (0,161%)
100	0,335381 (0,002%)	0,229246 (0,147%)
110	0,335558 (0,001%)	0,231653 (0,135%)
120	0,335719 (0,002%)	0,233880 (0,133%)
130	0,335906 (0,001%)	0,236697 (0,171%)
140	0,336173 (0,004%)	0,240767 (0,214%)

Якщо прийняти значення в табл. 1 за еталонні, то в табл. 2 та табл. 3 в дужках наведені абсолютні значення відносних різниць між поточними та шаблонними значеннями вологості. Як видно із табл. 2, відносні відмінності у значеннях вологості, що отримані згідно з способами I та II, не перевищують 1%. Тобто для попередньої оцінки впливу нелінійних залежностей параметрів включення від фізико-хімічних факторів, достатньо провести обрахунки із модифікованою умовою спряження, де інтеграл замінений значенням підінтегральної функції згідно теореми про середнє. Водночас, як видно з табл. 3, при введенні одного внутрішнього вузла у включенні та апроксимації невідомої функції квадратичною залежністю, відносні відмінності в певний момент часу досягають 5.5%, а в середньому лежать в межах 3%. Теоретично не можливо довести, що якийсь із способів дає точніші результати. Однак на практичному рівні можна припустити, що спосіб III все-таки більш наближений до реальних даних. Тому для попередніх прогнозів досить застосовувати спосіб II. Однак у разі необхідності, для уточнення прогнозів, потрібно все ж розглядати внутрішні вузли всередині включення.

Таблиця 3

Значення вологості на включенні (Спосіб III)

t, day	θ^{-}	θ^{+}
20	0,263501 (0,008%)	0,077767 (0,076%)
25	0,329508 (0,251%)	0,193108 (5,551%)
30	0,331161 (0,289%)	0,199347 (4,275%)
40	0,332553 (0,230)	0,208851 (3,270%)
50	0,333318 (0,181%)	0,215400 (2,788%)
60	0,333849 (0,150%)	0,220354 (2,477%)
70	0,334254 (0,129%)	0,224341 (2,251%)
80	0,334581 (0,112%)	0,227680 (2,077%)
90	0,334853 (0,100%)	0,230554 (1,937%)
100	0,335086 (0,090%)	0,233075 (1,820%)
110	0,335290 (0,082%)	0,235334 (1,726%)
120	0,335502 (0,066%)	0,237907 (1,857%)
130	0,335803 (0,030%)	0,241745 (2,307%)
140	0,336199 (0,012%)	0,246738 (2,700%)

1. Martyniuk P. M., Michuta O. R., Ulianchuk-Martyniuk O. V., Kuzlo M. T. Numerical investigation of pressure head jump values on a thin inclusion in one-dimensional non-linear soil moisture transport problem. *International Journal of Applied Mathematics.* 2018. 31(4). Pp. 649–660. **2.** Chui Y. V., Moshynskyi V. S., Martyniuk P. M., Stepanchenko O. M. On conjugation conditions in the filtration problems upon existence of semipermeable inclusions. *JP Journal of Heat and Mass Transfer*. 2018. Vol. 15. Iss. 3. Pp. 609–619. **3.** Chui Y., Martyniuk P., Kuzlo M., Ulianchuk-Martyniuk O. The conditions of conjugation in the tasks of moisture transfer on a thin clay inclusion taking into account salt salutions and temperature. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics (Bulgaria)*. 2019. 49(1). Pp. 28–38. **4.** Ulianchuk-Martyniuk O. V. Numerical simulation of the effect of semi-permeable properties of clay on the value of concentration jumps of contaminants in a thin geochemical barrier. *Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications*. 2020. 8(1). Pp. 91–104. **5.** Ulyanchuk-Martyniuk O., Michuta O., Ivanchuk N. Biocolmatation and the finite element modeling of its influence on changes in the head drop in a geobarrier. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologiesthis.* 2020. 4(10–106). Pp. 18–26. **6.** Ulianchuk-Martyniuk O. V., Michuta O. R. Numerical Simulation of the Effect of Chemical Osmosis on the Value of the Jumps of Pollution in the Geochemical Barrier. *International Journal of Applied Mathematics*. 2020. 33(6). Pp. 1067–1082. **7.** Ulianchuk-Martyniuk O., Michuta O.

Conjugation conditions in the problem of filtering chemical solutions in the case of structural changes to the material and chemical suffusion in the geobarrier. *JP Journal of Heat and Mass Transfer*. 2020. 19(1). Pp. 141–154. **8.** Ulianchuk-Martyniuk O. V., Michuta O. R., Ivanchuk N. V. Finite element analysis of the diffusion model of the bioclogging of the geobarrier. *Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications*. 2021. Vol. 9. Iss. 4. Pp. 100–114. **9.** Уляньчук-Мартинюк О. В. Моделювання впливу концентрації розчину на значення стрибків вологості в тонкому геохімічному бар'єрі. *Матем. методи та фіз.-мех. поля*. 2021. № 2. Т. 64. С. 145–154. **10.** Сергиенко И. В., Скопецкий В. В., Дейнека В. С. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах. Киев : Наук. думка, 1991. 432 с. **11.** Дейнека В. С., Сергиенко И. В., Скопецкий В. В. Модели и методы решения задач с условиями сопряжения. Киев : Наук. думка, 1998. 614 с. **12.** Sergienko I. V., Deineka V. S. Models with conjugation conditions and high-accuracy methods of their discretization. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2000. Vol. 36. Iss. 1. Pp. 83–101. **13.** Herus V. A., Ivanchuk N. V., Martyniuk P. M. A System Approach to Mathematical and Computer Modeling of Geomigration Processes Using Freefem++ and Parallelization of Computations. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2018. Vol. 54. Iss. 2. Pp. 284–294. **14.** Šimůnek J., van Genuchten M. T., Šejna M. Recent developments and applications of the HYDRUS computer software packages. *Vadose Zone Journal*. 2016. 15. Pp. 1–25. **15.** van Genuchten M. T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 1980. Vol. 44. No. 5. Pp. 892–898.

REFERENCES:

1. Martyniuk P. M., Michuta O. R., Ulianchuk-Martyniuk O. V., Kuzlo M. T. Numerical investigation of pressure head jump values on a thin inclusion in one-dimensional non-linear soil moisture transport problem. *International Journal of Applied Mathematics.* 2018. 31(4). Pp. 649–660. **2.** Chui Y. V., Moshynskyi V. S., Martyniuk P. M., Stepanchenko O. M. On conjugation conditions in the filtration problems upon existence of semipermeable inclusions. *JP Journal of Heat and Mass Transfer*. 2018. Vol. 15. Iss. 3. Pp. 609–619. **3.** Chui Y., Martyniuk P., Kuzlo M., Ulianchuk-Martyniuk O. The conditions of conjugation in the tasks of moisture transfer on a thin clay inclusion taking into account salt salutions and temperature. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics (Bulgaria)*. 2019. 49(1). Pp. 28–38. **4.** Ulianchuk-Martyniuk O. V. Numerical simulation of the effect of semi-permeable properties of clay on the value of concentration jumps of contaminants in a thin geochemical barrier. *Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications*. 2020. 8(1). Pp. 91–104. **5.** Ulyanchuk-Martyniuk O., Michuta O., Ivanchuk N. Biocolmatation and the finite element modeling of its influence on changes in the head drop in a geobarrier. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologiesthis*. 2020. 4(10–106). Pp. 18–26. **6.** Ulianchuk-Martyniuk O. V., Michuta O. R. Numerical Simulation of the Effect of Chemical Osmosis on the Value of the Jumps of Pollution in the Geochemical Barrier. *International Journal of Applied Mathematics*. 2020. 33(6). Pp. 1067–1082. **7.** Ulianchuk-Martyniuk O., Michuta O. Conjugation conditions in the problem of filtering chemical solutions in the case of structural changes to the material and chemical suffusion in the geobarrier. *JP Journal of Heat and Mass Transfer*. 2020. 19(1). Pp. 141–154. **8.** Ulianchuk-Martyniuk O. V., Michuta O. R., Ivanchuk N. V. Finite element analysis of the diffusion model of the bioclogging of the geobarrier. *Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications*. 2021. Vol. 9. Iss. 4. Pp. 100–114. **9.** Ulianchuk-Martyniuk O. V. Modeliuvannia vplyvu kontsentratsii rozchynu na znachennia strybkiv volohosti v tonkomu heokhimichnomu barieri. *Matem. metody ta fiz.-mekh. polia*. 2021. № 2. T. 64. S. 145–154. **10.** Sergienko I. V., Skopetskiy V. V., Deyneka V. S. Matematicheskoe modelirovanie i issledovanie protsessov v neodnorodnyih sredah. Kiev : Nauk. dumka, 1991. 432 s. **11.** Deyneka V. S., Sergienko I. V., Skopetskiy V. V. Modeli i metodyi resheniya zadach s usloviyami sopryajeniya. Kiev : Nauk. dumka, 1998. 614 s. **12.** Sergienko I. V., Deineka V. S. Models with conjugation conditions and high-accuracy methods of their discretization. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2000. Vol. 36. Iss. 1. Pp. 83–101. **13.** Herus V. A., Ivanchuk N. V., Martyniuk P. M. A System Approach to Mathematical and Computer Modeling of Geomigration Processes Using Freefem++ and Parallelization of Computations. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2018. Vol. 54. Iss. 2. Pp. 284–294. **14.** Šimůnek J., van Genuchten M. T., Šejna M. Recent developments and applications of the HYDRUS computer software packages. *Vadose Zone Journal*. 2016. 15. Pp. 1–25. **15.** van Genuchten M. T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 1980. Vol. 44. No. 5. Pp. 892–898.

Ulianchuk-Martyniuk O. V., Post-graduate Student (National University of Water and Environmental Engineering, Rivne)

ALGORITHMS TO NUMERICALLY ACCOUNT FOR INTEGRAL CONJUGATION CONDITIONS IN MODELING ENVIRONMENTS WITH GEOBARRIERS

In this paper, we consider algorithmic aspects of mathematical and computer modeling of physical and chemical processes in porous

media with thin inclusions on the example of unsaturated water flow problem. In case conductivity characteristics (thermal, saturated and unsaturated hydraulic conductivity, diffusion coefficient) of the thin inclusion material depend on effect functions (temperature, moisture, chemicals concentration, porosity), the classical conjugation conditions have to be modified. The presented literature review contains works that implemented such modifications and works that present the possible impact of these modifications on process simulation in porous media. With the use of the modified conjugation conditions, a mathematical model of unsaturated water flow in the soil containing one thin inclusion is formulated. We also present the numerical scheme for solving the corresponding initial-boundary value problem with the finite element method and prove the theorem of the accuracy of the approximate general solutions. The paper is focused on algorithmic aspects of implementing modified conditions in numerical solving schemes of the corresponding nonlinear initial-boundary value problems. We further consider numerical schemes for integral conjugation condition in the pressure head distribution problem under unsaturated conditions. Three types of algorithms are proposed. The first algorithm is based on linear approximation of pressure head field in the thin inclusion, involving the calculated boundary values to its (inclusion's) right and left sides. The second algorithm relies on calculating the integral in the integral conjugation condition with the use of mean value theorem. In the third algorithm, we propose to introduce an internal node, calculate the pressure head value on it using the finite difference method, and approximate the pressure head values with quadratic interpolation. The third algorithm type allows (as generalization) for introduction of an arbitrary number of internal nodes in the inclusion. Numerical experiments show that moisture values on the inclusion while applying either the first or the second algorithm vary by less than 1%. The relative difference of moisture results while applying the first and the second algorithm are generally within 3%, although sometimes can reach 5.5%.

Keywords: **numerical algorithm; conjugation condition; pressure head leap; geobarrier.**