

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ВОДНОГО ГОСПОДАРСТВА ТА
ПРИРОДОКОРИСТУВАННЯ

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ВОДНОГО ГОСПОДАРСТВА ТА
ПРИРОДОКОРИСТУВАННЯ

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

ШОСТАК ЛЮБОВ ВОЛОДИМИРІВНА

УДК 004.415.23

ДИСЕРТАЦІЯ

**ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТА
СТАНІВ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩ З ОРГАНІЧНОЮ СКЛАДОВОЮ**

122 – Комп'ютерні науки

12 – Інформаційні технології

Подається на здобуття ступеня доктора філософії

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

 /Л.В. Шостак/

Науковий керівник:

Мартинюк Петро Миколайович, доктор технічних наук, професор

Рівне-2025

АНОТАЦІЯ

Шостак Л. В. Інформаційні технології для прогнозування процесів та станів пористих середовищ з органічною складовою. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 «Комп'ютерні науки». – Національний університет водного господарства та природокористування, Рівне, 2025.

Зміст анотації. Дисертаційна робота присвячена вирішенню актуального наукового завдання – розробці та вдосконаленню інформаційних технологій для чисельного прогнозування фізико-хімічних процесів і станів у пористих середовищах з органічною складовою. Актуальність дослідження зумовлена потребою у високоточних, адаптивних та масштабованих обчислювальних моделях, які дозволяють оцінити поведінку таких середовищ за умов змін клімату, довготривалого зберігання твердих побутових відходів (ТПВ), а також для аналізу викидів парникових газів і трансформації ґрунтової органіки. Використання таких моделей є критично важливим для мінімізації негативних екологічних наслідків та оптимізації ресурсоефективних практик. Робота інтегрує підходи до розробки інформаційних систем, комп'ютерне і математичне моделювання, методи алгоритмічної реалізації та програмної інженерії, забезпечуючи практичне застосування в екологічному прогнозуванні, управлінні відходами та агровиробництві.

У вступі обґрунтовано актуальність проблематики, її зв'язок із науково-дослідними темами, а також сформульовано мету, завдання, об'єкт і предмет дослідження. Наведено опис застосованих наукових методів, зокрема комп'ютерного моделювання, аналізу граничних умов, побудови методів апроксимації та їх програмної реалізації, варіантів параметризації фізико-хімічних властивостей середовищ та створення інформаційних модулів. Визначено наукову новизну, практичне значення отриманих

результатів, особистий внесок здобувача, а також засвідчено апробацію результатів на конференціях і у фахових виданнях.

У першому розділі «Дослідження інформаційних технологій та математичних моделей для прогнозування процесів та станів у пористих середовищах з органічною складовою» проведено комплексний огляд наукової літератури щодо комп'ютерного та математичного моделювання процесів у пористих середовищах із наявністю органічної складової. Виявлено обмеження існуючих обчислювальних моделей, зокрема відсутність урахування змінної пористості, біохімічної активності та особливостей тонких примежових шарів на рівні їх програмної реалізації. На основі аналізу запропоновано напрямки подальших досліджень: модифікація рівнянь вологоперенесення і консолідації з урахуванням теплогенерації та біодеградації для їх ефективної комп'ютерної реалізації; формалізація нових граничних умов для задач з рухомими межами та примежовими шарами у вигляді, придатному для програмної імплементації. Окрему увагу приділено впливу фізичних характеристик тонких примежових шарів на тепло- та вологообмін у ґрунтах. Зазначено, що запропоновані напрямки дозволяють підвищити точність прогнозів та розширити спектр змодельованих сценаріїв, що є критично важливим для комплексного розуміння динаміки пористих середовищ.

Другий розділ «Математичне забезпечення комп'ютерного моделювання процесів у пористих середовищах з органічною складовою» присвячено побудові математичних моделей, що описують теплові, масообмінні й структурні процеси у середовищах із органічною складовою. Розглянуто системи рівнянь для опису перенесення вологи й тепла, деградації органіки, газогенерації (CH_4 , CO_2), а також зміни геометрії середовища внаслідок ущільнення й втрати маси твердої фази. Вперше виведено модифіковані граничні умови при наявності поверхневих шарів, властивості яких залежать від вологи і температури. Проведено параметризацію теплопровідності, вологомісткості й пористості на

мікрорівні для адекватного відображення складних взаємозв'язаних процесів в рамках створюваних обчислювальних моделей. Це дозволило сформулювати більш реалістичні та деталізовані моделі, які враховують нелінійні взаємозв'язки між фізико-хімічними параметрами.

У третьому розділі «Алгоритмічна та програмна реалізація моделей ущільнення пористих середовищ і виділення газів у сховищах твердих побутових відходів» розроблено методи та програмні засоби (компоненти інформаційних технологій) для чисельного аналізу ущільнення полігонів твердих побутових відходів (ТПВ) і процесів генерації парникових газів. Запропоновано чисельний метод та його програмну реалізацію для розв'язання задачі ненасиченої консолідації як крайової задачі математичної фізики в змінній області. Особливу увагу приділено врахуванню впливу температури та вологості на швидкість біодеградації, що суттєво впливає на строки й масштаб просідання. Проведено серію чисельних експериментів, які показали: зменшення температури знижує швидкість біодеградації, що призводить до меншого обсягу просідання (до 36,6% різниці). Також встановлено, що за температури понад 38 °C активність мікроорганізмів падає, що впливає на інтенсивність газоутворення. Результати показали, що взаємодія теплоперенесення, вологоперенесення й біодеградації має вирішальне значення для уточнення екологічних прогнозів. Запропоновані обчислювальні моделі та розроблене програмне забезпечення дозволяють оцінювати екологічні ризики, пов'язані з можливими аномаліями у розподілах температури, вологи та тиску в газовій і рідкій фазах. Це надає інструменти для превентивного управління екологічними загрозами та оптимізації експлуатації полігонів ТПВ.

У четвертому розділі «Комп'ютерне моделювання виділення парникових газів із ненасичених пористих середовищ з урахуванням тонких примежових шарів» досліджено вплив тонких примежових шарів на динаміку виділення парникових газів. Побудовано комп'ютерно-орієнтовану математичну модель та розроблено її програмну реалізацію, яка враховує

змінну теплопровідність і вологомісткість таких шарів, їхню взаємодію з основним середовищем, а також динаміку їхніх властивостей під впливом зміни кліматичних умов. Продемонстровано, що наявність таких шарів здатна змінити час початку виділення газів, їхній обсяг, а також впливати на стабільність температурного режиму в пористому середовищі. Проведено порівняння ефекту від різних граничних умов на результати моделювання, що дозволяє більш гнучко підходити до моделювання поведінки масивів пористих середовищ з органічною складовою у змінному кліматичному середовищі. Також досліджено вплив тонких ізоляційних або біоактивних шарів (наприклад, шарів мульчі або опалого листя) на динаміку термічного режиму і газообміну в товщі середовища засобами комп'ютерного моделювання.

У п'ятому розділі «Програмний комплекс для моделювання та прогнозування станів пористих середовищ з органічною складовою» представлено розробку програмного комплексу, що реалізує запропоновані моделі та методи. Детально описано архітектуру системи, включаючи модулі обробки вхідних даних з цифрових сервісів, обчислювальне ядро, що реалізує розроблені моделі на основі чисельних методів (зокрема, методу скінченних різниць), та модуль візуалізації. Розроблено користувацький інтерфейс для взаємодії з системою та аналізу результатів симуляції. Даний комплекс є готовим до використання інструментом, що значно спрощує процес моделювання та інтерпретації результатів для фахівців різних галузей.

Результати дисертаційного дослідження, включаючи розроблений програмний комплекс та обчислювальні моделі, можуть бути використані при розробці нових програмних продуктів для екологічного моніторингу, проєктування та оптимізації систем поводження з відходами, оцінці ефективності рекультиваційних заходів на полях, а також у агроекології – для прогнозування змін у ґрунтах з органічною складовою та потенціалу отримання вуглецевих кредитів. Запропоновані інформаційні та математичні рішення можуть становити наукову основу для сценарного моделювання

процесів трансформації біомаси, викидів парникових газів та консолідації техногенних середовищ. Практична цінність роботи полягає у наданні обґрунтованих інструментів інформаційних технологій для прийняття рішень, спрямованих на сталий розвиток та захист довкілля.

Основні наукові результати дисертації опубліковано у 10 працях, зокрема: три статті у наукових фахових періодичних виданнях України; три статті у закордонних фахових періодичних виданнях; чотири публікації у матеріалах міжнародних конференцій. З них три роботи входить до міжнародної наукометричної бази Scopus. Також видано одне свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір.

Ключові слова: інформаційні технології, комп'ютерне моделювання, математичне моделювання, алгоритми, пористі середовища, органічна речовина, біодеградація, парникові гази, теплоперенесення, вологоперенесення, ущільнення середовища, біопокриття, полігони твердих побутових відходів, вуглецеві кредити, модуляризація програмного забезпечення

SUMMARY

Shostak L. V. Information technologies for predicting processes and states of porous media with an organic component. – Qualifying scientific work on the rights of the manuscript.

Dissertation for the degree of Doctor of Philosophy in the specialty 122 «Computer Science». – National university of water and environmental engineering, Rivne, 2025.

Contents of the summary. The dissertation is devoted to solving an urgent scientific problem - the development and improvement of information technologies for numerical prediction of physicochemical processes and states in porous media with an organic component. The relevance of the study is driven by the need for highly accurate, adaptive, and scalable computational models that allow us to assess the behavior of such environments under conditions of climate change, long-term storage of municipal solid waste (MSW), as well as for the analysis of greenhouse gas emissions and soil organic matter transformation. The use of such models is critical to minimizing negative environmental impacts and optimizing resource-efficient practices. The work integrates approaches to information systems development, computer and mathematical modeling, algorithmic implementation and software engineering methods, providing practical applications in environmental forecasting, waste management and agricultural production.

The introduction substantiates the relevance of the problem, its connection with scientific research topics, and formulates the purpose, objectives, object and subject of the study. A description of the scientific methods used is given, including computer modeling, boundary condition analysis, development of approximation methods and their software implementation, options for parameterizing the physical and chemical properties of media, and creation of information modules. The scientific novelty, practical significance of the results obtained, the personal contribution of the applicant, as well as the results of the approbation at conferences and in professional publications are determined.

In the first section "Research of information technologies and mathematical models for predicting processes and states in porous media with an organic component" a comprehensive review of scientific literature on computer and mathematical modeling of processes in porous media with an organic component is conducted. The limitations of existing computational models are revealed, in particular, the lack of consideration of variable porosity, biochemical activity and features of thin boundary layers at the level of their program implementation. On the basis of the analysis, directions for further research are proposed: modification of the equations of moisture transfer and consolidation with regard to heat generation and biodegradation for their effective computer implementation; formalization of new boundary conditions for problems with moving boundaries and boundary layers in a form suitable for software implementation. Particular attention is paid to the influence of physical characteristics of thin boundary layers on heat and moisture exchange in soils. It is noted that the proposed directions allow to improve the accuracy of predictions and expand the range of modeled scenarios, which is critical for a comprehensive understanding of the dynamics of porous media.

The second section "Mathematical support for computer modeling of processes in porous media with an organic component" is devoted to the construction of mathematical models that describe thermal, mass transfer, and structural processes in media with an organic component. Systems of equations are considered to describe moisture and heat transfer, organic degradation, gas generation (CH_4 , CO_2), and changes in the geometry of the medium due to compaction and loss of solid mass. For the first time, modified boundary conditions are derived in the presence of surface layers whose properties depend on moisture and temperature. The parameterization of thermal conductivity, moisture content, and porosity at the micro level was carried out to adequately reflect the complex interrelated processes within the computational models created. This allowed us to create more realistic and detailed models that take into account nonlinear relationships between physical and chemical parameters.

In the third chapter section "Algorithmic and software implementation of models of compaction of porous media and gas emission in solid waste storage facilities" methods and software tools (information technology components) for numerical analysis of the compaction of municipal solid waste landfills and greenhouse gas generation processes are developed. A numerical method and its software implementation are proposed to solve the problem of unsaturated consolidation as a boundary value problem of mathematical physics in a variable domain. Particular attention is paid to taking into account the effect of temperature and humidity on the biodegradation rate, which significantly affects the timing and extent of subsidence. A series of numerical experiments have been conducted, which have shown that a decrease in temperature reduces the rate of biodegradation, which leads to a smaller amount of subsidence (up to 36.6% difference). It was also found that at temperatures above 38 °C, the activity of microorganisms decreases, which affects the intensity of gas formation. The results showed that the interaction of heat transfer, moisture transfer, and biodegradation is crucial for refining environmental predictions. The proposed computational models and the developed software allow us to assess the environmental risks associated with possible anomalies in the distributions of temperature, moisture, and pressure in the gas and liquid phases. It provides tools for preventive management of environmental threats and optimization of landfill operations.

In the fourth section "Computer modeling of greenhouse gas emission from unsaturated porous media with consideration of thin boundary layers" the influence of thin boundary layers on the dynamics of greenhouse gas emission is investigated. A computer-oriented mathematical model was built and its software implementation was developed, which takes into account the variable thermal conductivity and moisture content of such layers, their interaction with the main medium, as well as the dynamics of their properties under the influence of changing climatic conditions. It is demonstrated that the presence of such layers can change the time of the onset of gas release, their volume, and also affect the stability of the temperature regime in a porous medium. The effect of different boundary

conditions on the simulation results is compared, which allows for a more flexible approach to modeling the behavior of porous media arrays with an organic component in a changing climate. The influence of thin insulating or bioactive layers (e.g., mulch or fallen leaves) on the dynamics of thermal regime and gas exchange in the medium thickness was also investigated by means of computer modeling.

In the fifth section "Software complex for modeling and predicting the states of porous media with an organic component" presents the development of a software complex that implements the proposed models and methods. The architecture of the system is described in detail, including modules for processing input data from digital services, a computing core that implements the developed models based on numerical methods (in particular, the finite difference method), and a visualization module. A user interface for interacting with the system and analyzing simulation results was developed. This complex is a ready-to-use tool that greatly simplifies the process of modeling and interpreting results for specialists in various fields.

The results of the dissertation research, including the developed software package and computational models, can be used in the development of new software products for environmental monitoring, design and optimization of waste management systems, evaluation of the effectiveness of reclamation measures in the fields, as well as in agroecology - to predict changes in soils with an organic component and the potential for obtaining carbon credits. The proposed information and mathematical solutions can form the scientific basis for scenario modeling of biomass transformation processes, greenhouse gas emissions, and consolidation of man-made environments. The practical value of the work is to provide sound information technology tools for making decisions aimed at sustainable development and environmental protection.

The main scientific results of the dissertation are published in 10 works, including: three articles in scientific professional periodicals of Ukraine; three articles in foreign professional periodicals; four publications in the proceedings of

international conferences. Three of them are included in the international scientometric database Scopus. One certificate of copyright registration for a work was also issued.

Keywords: information technology, computer modeling, mathematical modeling, algorithms, porous media, organic matter, biodegradation, greenhouse gases, heat transfer, moisture transfer, media compaction, bio-coating, solid waste landfills, carbon credits, software modularization

Список публікацій здобувача за темою дисертації

Публікації у наукових виданнях, що індексуються у наукометричній базі Scopus:

1. Stepanchenko O., Shostak L., Moshynskyi V., Kozhushko O., Martyniuk P. Simulating soil organic carbon turnover with a layered model and improved moisture and temperature impacts. In: Babichev, S., Lytvynenko, V. (eds) *Lecture Notes in Data Engineering, Computational Intelligence, and Decision Making. ISDMCI. Lecture Notes on Data Engineering and Communications Technologies*. 2022. Vol. 149. P. 74-91. https://doi.org/10.1007/978-3-031-16203-9_5. **Scopus** (1.1/0.55 д.а.; авторський внесок—огляд моделей та інформаційних систем кругообігу органічного карбону та супутнього виділення вуглекислого газу, ідея урахування у відповідних моделях змінних факторів вологості та температури, розробка алгоритму та числові експерименти).
2. Stepanchenko O., Martyniuk P., Belozerova O. Shostak L. Balance boundary conditions for thin boundary layers: derivation from the integral conjugation conditions. *International Journal of Applied Mathematics*. 2023. Vol. 36 (1). P. 107-116. <http://dx.doi.org/10.12732/ijam.v36i1.9>. **Scopus** (0.41/0.3 д.а.; авторський внесок—ідея та виведення балансової граничної умови при наявності тонкого верхнього шару на випадок залежності характеристик матеріалу шару від факторів впливу).
3. Shostak L. V., Martyniuk P. M. Mathematical modeling of solid municipal waste landfill surface settlement with regard to organic component biodegradation. *Mathematical Modeling and Computing*. 2024. Vol. 11. No. 4. P. 1106–1117. <https://doi.org/10.23939/mmc2024.04.1106>. **Scopus** (0.945/0.64 д.а.; авторський внесок—формування математичної моделі, числове розв'язання відповідної крайової задачі, проведення числових експериментів).

Статті у фахових наукових виданнях України

4. Shostak L.V., Martyniuk P.M. Numerical modeling of the impact of variable moisture on the subsidence of the municipal solid waste landfill surface and

the generation of greenhouse gases within it. *Вісник Національного університету водного господарства та природокористування. Сер. Технічні науки*. 2024. Вип. 4(108). С. 216-236. <https://doi.org/10.31713/vt4202418> (0.81/0.55 д.а.; авторський внесок–формування математичної моделі, розробка алгоритму та числове розв’язання відповідної крайової задачі, проведення числових експериментів).

5. Shostak L.V. Computer simulation of temperature distribution in the forest soil with regard to the presence of a thin boundary layer of fallen leaves. *Вісник Національного університету водного господарства та природокористування. Сер. Технічні науки*. 2025. Вип. 1(109). С. 153-168. <https://doi.org/10.31713/vt1202514> (0.79/0.79 д.а.).

6. Shostak L.V., Martyniuk P.M. Predictive computer modeling of the surface subsidence of a solid waste storage facility and gas generation under unsaturated consolidation conditions. *Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського*. 2025. Вип. 1(150). С. 212-224. <https://doi.org/10.32782/1995-0519.2025.1.27>. (1.26/0.84 д.а.; авторський внесок–формування математичної моделі, розробка алгоритму та числове розв’язання відповідної крайової задачі, проведення числових експериментів).

Публікації в матеріалах конференцій (тези доповідей)

7. Stepanchenko O., Shostak L., Kozhushko O., Moshynskyi V., Martyniuk P. Modelling soil organic carbon turnover with assimilation of satellite soil moisture data. *Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of V International Scientific and Practical Conference*. 2021. (5). P. 97–99. <https://doi.org/10.31713/MCIT.2021.31>. (0,26/0,13 д.а.).

8. Shostak L., Stepanchenko O., Martyniuk P., Belozeroва O. Mathematical and computer models for predicting greenhouse gas emissions from soil into the atmosphere: review and comparison. *Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of VI International Scientific and Practical Conference*. 2023. (6). P. 92–95. <https://doi.org/10.31713/MCIT.2023.026>. (0,25/0,15 д.а.).

9. Shostak L. Modification of the filtration consolidation equation and kinematic boundary condition into the case of biodegradation processes. *Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of VII International Scientific and Practical Conference*. 2024. (7). P. 270–273. <https://doi.org/10.31713/MCIT.2024.083>. (0,3/0,3 д.а.).

Праці, які додатково відображають наукові результати дисертації:

10. Ivanchuk N., Martyniuk P., Shostak L., Shayniuk K. Computer modeling of water purification in bioplateau taking into account biodegradation processes and greenhouse gas emissions. *Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of International Scientific and Practical Conference*. (7). 2024. P. 258–259. <https://doi.org/10.31713/MCIT.2024.079>. (0,15 / 0,04 д.а.).

11. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір. №115423. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна програма для математичного моделювання стану земель сільськогосподарського призначення». Автори: Шостак Л.В., Мартинюк П.М., Степаненко О.М., Бойко М.В., Белозерова О.Д., Іванчук Н.В. Дата реєстрації 24 жовтня 2022 р.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ.....	19
ВСТУП.....	23
РОЗДІЛ 1. АНАЛІЗ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ТА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТА СТАНІВ У ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ З ОРГАНІЧНОЮ СКЛАДОВОЮ	33
1.1. Інформаційні технології у комп'ютерному прогнозуванні процесів та станів у пористих середовищах із органічною складовою	33
1.1.1 Комп'ютерне моделювання як інструмент реагування на екологічні та кліматичні виклики.....	35
1.1.2 Обчислювальні моделі динаміки агроєкосистем та прогнозування викидів парникових газів	40
1.1.3 Використання інформаційних технологій у прогнозуванні викидів парникових газів із агроєкосистем	42
1.2. Комп'ютерні моделі, програмні платформи та математичні моделі для прогнозування процесів та станів полігонів твердих побутових відходів.....	49
1.3. Урахування тонких примежових шарів у комп'ютерному моделюванні: структура, параметризація, реалізація	60
1.4. Проблеми комп'ютерного моделювання природних процесів: обчислювальна складність, точність, масштабування	65
Висновки до розділу 1.....	69

РОЗДІЛ 2. МАТЕМАТИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ У ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ З ОРГАНІЧНОЮ СКЛАДОВОЮ..... 70

- 2.1. Формалізація кінематичних граничних умов для побудови
комп'ютерних моделей ненасиченої консолідації побутових відходів .. 70
- 2.2. Модифікації рівнянь ненасиченої консолідації з урахуванням
біодеградації органічних компонентів..... 76
- 2.3. Обчислювальна модель вологоперенесення із урахуванням
біодеградаційних процесів 80
- 2.4. Алгоритмічні особливості моделювання теплоперенесення та
вологоперенесення з урахуванням тонких примежових шарів 84
- Висновки до розділу 2..... 91**

РОЗДІЛ 3. АЛГОРИТМІЧНА ТА ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МОДЕЛЕЙ УЩІЛЬНЕННЯ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩ І ВИДІЛЕННЯ ГАЗІВ У СХОВИЩАХ ТВЕРДИХ ПОБУТОВИХ ВІДХОДІВ..... 94

- 3.1. Базова модель ущільнення ненасиченого пористого середовища з
урахуванням біодеградаційних процесів: математичні основи отримання
прогнозних даних 94
- 3.2. Застосування методу скінченних елементів для комп'ютерного
моделювання процесу консолідації в середовищах з органічною
складовою 97
- 3.3. Алгоритми програмної реалізації апроксимації кінематичної
граничної умови для задач ущільнення з урахуванням біодеградаційної
активності..... 101

3.4. Блок-схема алгоритму чисельного розв'язання задачі ненасиченої консолідації з урахуванням факторів впливу біодеградації, теплоутворення та газогенерації	103
3.5. Валідація та тестування алгоритмів отримання прогностичних даних консолідації сховищ твердих побутових відходів	107
Висновки до розділу 3.....	119

РОЗДІЛ 4. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВИДІЛЕННЯ ПАРНИКОВИХ ГАЗІВ ІЗ НЕНАСИЧЕНИХ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩ З УРАХУВАННЯМ ТОНКИХ ПРИМЕЖОВИХ ШАРІВ

121

4.1. Формалізація задачі та побудова комп'ютерно орієнтованої математичної моделі викидів парникових газів в середовищі з примежовим шаром	121
4.2. Програмна реалізація: дискретизація моделі, побудова обчислювального алгоритму та блок-схема програмної реалізації.....	124
4.3. Обчислювальні експерименти, комп'ютерне моделювання та алгоритмічний аналіз динаміки виділення парникових газів.....	140
4.4. Комп'ютерне моделювання та аналіз процесів вологоперенесення, теплогенерації та ущільнення в масиві твердих побутових відходів	148
Висновки до розділу 4.....	156

РОЗДІЛ 5. ПРОГРАМНИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНІВ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩ З ОРГАНІЧНОЮ СКЛАДОВОЮ.....

158

5.1. Цифрові сервіси та джерела даних для екологічного та техногенного моніторингу	158
5.2. Структура та функціональні модулі програмного комплексу	168
5.3. Інтерфейс користувача та візуалізація результатів симуляції	171
5.3.1. Розробка десктопного застосунку	175

5.3.2. Реалізація засобів візуалізації динаміки модельованих параметрів у часі на основі бібліотеки Matplotlib	177
5.4. Алгоритми моделювання динаміки біодеградації та газогенерації	179
5.4.1. Реалізація чисельного методу на базі методу скінченних різниць	184
5.4.2. Урахування граничних умов, тепломасообміну та впливу тонких шарів	187
Висновки до розділу 5.....	189
ВИСНОВКИ	191
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	195
ДОДАТКИ.....	214
Додаток А. Акт впровадження.....	214
Додаток Б. Довідки про впровадження.....	215
Додаток В. Список публікацій здобувача за темою дисертації	218
Додаток Г. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір	218
Додаток І. Порівняльна таблиця інформаційних систем для оцінки викидів парникових газів із агроєкосистем.....	223
Додаток Д. Порівняльна таблиця інформаційних систем для прогнозування процесів на полігонах ТПВ.....	224

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

ТПВ – тверді побутові відходи

МСЕ – метод скінченних елементів

ПГ – парникові гази

ОВГ (SOC) – органічний вуглець ґрунту

Позначення	Визначення
k	коефіцієнт фільтрації пористого середовища, який залежить від пористості та температури (м/доба)
$l(t)$	верхня рухома межа пористого середовища (м)
L	нижня фіксована межа пористого середовища (м)
$\varepsilon_{\delta}(x, t)$	відносна об'ємна деформація пористого середовища внаслідок зміни напружено-деформівного стану (безрозмірна величина)
$\varepsilon_{ws}(x, t)$	відносна об'ємна деформація пористого середовища внаслідок біодеградації (безрозмірна величина)
m	кількість фрагментів об'ємами V_i ($i = \overline{1, m}$) пористого середовища, які покривають вертикальний проміжок $[l(t); L]$ (безрозмірна величина)
$W_i(t)$	відносний об'ємний вміст органічної складової у виділеному фрагменті (безрозмірна величина)
$V_{w,i}(t)$	об'єм порової рідини у відповідному фрагменті пористого середовища (м ³)
$V_{g,i}(t)$	об'єм газу у відповідному фрагменті пористого середовища (м ³)
$\beta \in [0; 1]$	відносний коефіцієнт, який показує який відносний об'єм біодегратованих решток залишається у вигляді пустот (безрозмірна величина)
δ	повне напруження в пористому середовищі (Па)

m_{1k}^g	коефіцієнт зміни об'єму газової фази, який корелює зі зміною чистого напруження $(\delta - u_g)$ (м³/Па)
m_{2k}^g	коефіцієнт зміни об'єму рідкої газової фази, який корелює зі зміною всмоктуючого тиску $(u_g - u_w)$ (м³/Па)
m_{1k}^w	коефіцієнт зміни об'єму водної фази, який корелює зі зміною чистого напруження $(\delta - u_g)$ (м³/Па)
m_{2k}^w	коефіцієнт зміни об'єму рідкої водної фази, який корелює зі зміною всмоктуючого тиску $(u_g - u_w)$ (м³/Па)
ρ_{ws}	густина органічних відходів (кг/м³)
$m_{ws}(x, t)$	маса органічних відходів в одиниці об'єму пористого середовища (кг/м³)
$\mathbf{v}_g$	вектор-функція потоку газу в порах пористого середовища (м/с)
M_g	маса газу (кг)
ρ_g	густина газу (кг/м³)
V_g	об'єм газу (м³)
V_0	початковий об'єм елемента пористого середовища (м³)
f_g	функція джерела газу (кг/(м³·с))
k_g	коефіцієнт «газопровідності» пористого середовища (м²)
u_g	функція надлишкового тиску газу в порах пористого середовища, яка в моделях ущільнення пористого середовища визначається як потенціальна функція руху газу (Па)
u_{atm}	атмосферний тиск (Па)
M	молекулярна маса порового газу (кг/моль)
R	універсальна газова стала (Дж/(моль·К))
T	температура (°C)
T_k	початкова абсолютна температура (°C)

$s \in [0; 1]$	насиченість пористого середовища (безрозмірна величина)
ρ_w	густина порової рідини (кг/м ³)
$\mathbf{v}_w$	вектор-функція потоку порової рідини в порах пористого середовища (м/с)
M_w	маса порової рідини (кг)
k_w	коефіцієнт вологоперенесення, який залежить від пористості, вологості та температури (м/с)
h_w	функція надлишкового напору в поровій рідині в порах пористого середовища, яка в моделях ущільнення пористого середовища визначається як потенціальна функція руху самої рідини (м)
γ_w	питома вага порової рідини (Н/м ³)
g	прискорення вільного падіння (м/с ²)
θ_{min}	залишкова (мінімальна) вологість в пористому середовищі (безрозмірна величина)
s_r	залишкове насичення (безрозмірна величина)
D_p	коефіцієнт дифузії ґрунтової вологи (м/с ²)
ψ	потенціал ґрунтової вологи (м)
$\lambda_\omega(T)$	коефіцієнт теплопровідності в тонкому шарі (Вт/(м·К))
$\lambda(T)$	коефіцієнт теплопровідності матеріалу в області Ω_1 (при $x = 0$) або області Ω_2 (при $x = l$) (Вт/(м·К))
h_a	еквівалент напорів для вологості на верхній межі контакту примежового шару Ω_0 та атмосфери (м)
c	концентрація вуглекислого газу в ґрунті
c_a	концентрація вуглекислого газу на межі контакту примежового шару та атмосфери (моль/м ³)
$D(c, T)$	коефіцієнт дифузії CO ₂ в ґрунті (м ² /с)
$D_\omega(c, T)$	коефіцієнт дифузії CO ₂ в примежовому шарі (м ² /с)

u_w	надлишковий тиск в поровій рідині (Па)
c_T	об'ємна теплоємність пористого середовища (Вт/(м ³ ·К))
ρ_s	густина твердої компоненти сховища відходів (кг/м ³)
c_s	питома теплоємність твердої компоненти сховища відходів (Дж/(кг·К))
c_g	питома теплоємність газоподібної компоненти пористого середовища (Дж/(кг·К))
$p = u_g - u_w$	всмоктуючий тиск (Па)
α	коефіцієнт в моделі ван Генухтена, пов'язаний з повітряним всмоктуванням середовищ (1/Па)
m_{vgt}	параметр ван Генухтена (безрозмірна величина)
s_e	ефективне насичення (безрозмірна величина)
l	коефіцієнт зв'язності пор (безрозмірна величина)
ΔH	ентальпія процесів біодеградації (Дж/моль)
σ	змінна пористість (безрозмірна величина)

ВСТУП

Актуальність теми. Сучасний світ стикається з низкою екологічних викликів, серед яких зміна клімату та глобальне потепління є одними з найбільш критичних проблем. Інтенсивне зростання концентрації парникових газів у атмосфері призводить до підвищення середньої глобальної температури, що своєю чергою спричиняє екстремальні погодні явища, зміну водного балансу та деградацію природних екосистем.

Серед ключових джерел парникових газів особливу увагу слід виділити пористим середовищам з органічною складовою, які включають ґрунти, сільськогосподарські угіддя та полігони ТПВ. У цих середовищах відбуваються складні біогеохімічні процеси, що впливають на інтенсивність та об'єми викидів основних парникових газів, таких як вуглекислий газ (CO_2), метан (CH_4) та оксид азоту (N_2O). Моделювання та прогнозування цих процесів представляють значні обчислювальні виклики через їхню багатофакторність, нелінійність та просторово-часову гетерогенність.

Сільське господарство та його інтенсифікація, зокрема, є вагомим фактором впливу на кліматичні процеси. Використання органічних добрив, розкладання рослинних решток та активність мікроорганізмів суттєво змінюють баланс вуглецевих сполук, що потрапляють в атмосферу. Полігони ТПВ, у свою чергу, виступають потужними джерелами метану через анаеробний розклад органічної фракції відходів.

Дослідження процесів, що мають місце в таких пористих середовищах, є актуальним завданням для оцінки їхнього впливу на клімат та розробки ефективних стратегій зменшення викидів парникових газів. Одним із інструментів досліджень є математичні моделі, які в епоху буму інформаційних технологій, виступають підґрунтям розробки ефективних та масштабованих прогнозних інформаційних систем. Саме розвиток математичних основ та їх алгоритмічної реалізації є джерелом підвищення точності та надійності прогнозів в інформаційних системах, розробки нових

обчислювальних підходів, методів та методологій. Особливо важливим є вдосконалення математичних моделей та відповідних комп'ютерних моделей і алгоритмів, що дозволяють покращити точність описання фільтраційних, теплових та процесів поширення вологи в цих системах з урахуванням біогеохімічних реакцій. Це сприятиме більш точному прогнозуванню змін у довкіллі та розробці методів, алгоритмів та технологій мінімізації негативного впливу людської діяльності. Тому зростає потреба у створенні програмних комплексів, що інтегрують сучасні алгоритми прогнозування, бази даних та засоби візуалізації для аналізу стану пористих середовищ та підтримки прийняття рішень, що є актуальним завданням для комп'ютерних наук, зокрема в галузі програмної інженерії та розробки інформаційних систем.

Програмні комплекси для інтеграції даних із різних джерел, включаючи польові дослідження, супутникові спостереження та лабораторні експерименти наразі активно розвиваються. Це дозволяє створювати більш детальні та адаптивні моделі, що можуть бути використані для оцінки змін у ґрунтах, сільськогосподарських угіддях, полігонах ТПВ та інших об'єктах природного та техногенного походження. Однак для можливості асиміляції даних зовнішніх спостережень в прогнозній моделі вже має бути сформованою базова математична модель, а також розроблені відповідні алгоритми та програмні інтерфейси для ефективної інтеграції даних та оновлення моделей.

Стосовно розробки і вдосконалення математичних моделей, що описують процеси у пористих середовищах, в тому числі – при наявності органічної складової, науковці зосереджують увагу на врахуванні таких факторів, як змінна вологість, температурний режим, кінетика біохімічних реакцій та стійкість до фізичних змін. З точки зору комп'ютерних наук, це вимагає розробки обчислювальних моделей, здатних ефективно обробляти ці складності, забезпечуючи при цьому числову стійкість та точність. Особливо актуальним є включення біогеохімічних процесів до математичних та відповідних комп'ютерних моделей, оскільки вони значною мірою впливають на прогнозування довгострокових змін стану середовищ, а також на динаміку

парникових газів, що ставить завдання розробки спеціалізованих алгоритмів для моделювання цих зв'язаних явищ.

Комп'ютерні та математичні прогнозні моделі використовуються для аналізу впливу антропогенних факторів на довкілля та оцінки можливих сценаріїв зменшення викидів парникових газів. Однією з важливих концепцій у цій сфері є вуглецеві кредити – система оцінки та компенсації викидів парникових газів шляхом запровадження заходів зі зменшення їхньої кількості. Вдосконалення математичних моделей та алгоритмів їх чисельної реалізації дозволяє більш точно розраховувати кількість викидів та оцінювати ефективність заходів із поглинання вуглецю, таких як використання біопокриттів, регенерація ґрунтів або управління відходами. Інтеграція цих підходів у єдині цифрові платформи, що є завданням інформаційних технологій, сприятиме розвитку механізмів регулювання викидів та впровадженню стійких екологічних стратегій.

Наукові здобутки у сфері прогнозування станів пористих середовищ активно розвиваються в рамках численних досліджень вітчизняних та зарубіжних учених. Серед зарубіжних дослідників варто відзначити Shi-Feng Lu, Shi-Jin Feng, Sohoo I., Ritzkowski M., Shao-Jie Wu, Wen-Ding Fu, Qi-Teng Zheng, Xiao-Lei Zhang, Krishna R. Reddy, Girish Kumar, Rajiv K. Giri, а серед вітчизняних – Булавацького В.М., Богаєнка В.О., Білушака Ю. І., Бомбу А. Я., Сафоника А.П., Жуковського В.В., Мошинського В.С., Мартинюка П.М., Степанченко О.М., Жуковську Н.А., Іванчук Н.В., Мічуту О.Р., Ляшка С.І., Петрика М.Р., Чернуху О.Ю.. Також важливу роль у розвитку цього напрямку відіграють дослідження, присвячені застосуванню методів чисельного моделювання та машинного навчання в геоекології та матеріалознавстві. Окремо слід відзначити науковців, які активно досліджують парникові гази, зокрема Густі М.І., Буня Р.А., Турковську О.В., а також Cornelius Oertel, Jörg Matschullat, Kamal Zurba, Frank Zimmermann, Stefan Erasmi, Ying Liu, Haiying Tang, Aamer Muhammad, Guoqin Huang. Однак, незважаючи на значні досягнення, залишається потреба у розробці більш досконалих алгоритмів та

інформаційних технологій, здатних комплексно враховувати взаємозв'язки між фізичними, хімічними та біологічними процесами в пористих середовищах з органічною складовою.

Таким чином, актуальність теми дисертації обумовлена необхідністю вдосконалення обчислювальних моделей, чисельних алгоритмів та інформаційних технологій для прогнозування змін стану пористих середовищ з органічною складовою. Це має важливе значення для екологічного моніторингу, сільського господарства, управління відходами та біотехнологічних досліджень, що, у свою чергу, сприятиме розв'язанню глобальних проблем зміни клімату та зменшенню негативного впливу антропогенних факторів на довкілля через розробку нових та вдосконалення існуючих інструментів комп'ютерного моделювання та аналізу.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дисертаційне дослідження проводилося в межах науково-дослідної роботи Національного університету водного господарства та природокористування та пов'язане з науковими темами: «Математичне та комп'ютерне моделювання процесів та систем» (державний реєстраційний номер НДР №0125U001313), де здобувач запропонував математичні моделі та чисельні методи для опису динаміки складних просторово-часових процесів у пористих середовищах з органічною складовою та «Науково-практичні й теоретичні засади оптимізації процесів очищення стічних вод» (номер державної реєстрації НДР №0124U000395), де здобувачу належить розробка інформаційної технології для числового прогнозування просторово-часової еволюції станів пористих середовищ з органічною складовою.

Мета і завдання дослідження. Метою дисертаційного дослідження є розвинення модельно-алгоритмічного підходу та відповідного програмного забезпечення до отримання прогнозних даних про процеси і стани пористих середовищ з органічною складовою на основі сучасних інформаційних технологій.

Досягнення поставленої мети вимагає виконання таких завдань:

1. Дослідити сучасні інформаційні системи, математичні та комп'ютерні моделі для отримання прогностичних даних, прогнозування та оцінок стану пористих середовищ з органічною складовою.

2. Розробити програмне забезпечення та застосувати у ньому метод отримання прогностичних даних вологості та змінної пористості в результаті біодеградаційних процесів для середовищ з органічною складовою.

3. Застосувати в розроблюваному програмному забезпеченні для отримання прогностичних даних про процеси та стани пористих середовищ з органічною складовою обчислювальні підходи, що базуються на теорії ненасиченої консолідації.

4. Запропонувати комп'ютерні моделі та програмну реалізацію для отримання прогностичних даних осідання поверхні полігонів твердих побутових відходів, об'ємів газогенерації та виділеного тепла.

5. Розробити методи комп'ютерного моделювання та відповідні програмні компоненти для врахування наявності тонких примежових шарів на поверхні пористих середовищ при присутності в них (середовищах) органічної складової, що дозволяють інтегрувати їх наявність (примежові шари) у прогностичні інформаційні системи.

6. Розробити та реалізувати програмний комплекс для інтегрованого моделювання та прогнозування станів пористих середовищ з органічною складовою.

Об'єкт дослідження. Методи комп'ютерного моделювання та чисельні алгоритми аналізу і прогнозування процесів в пористих середовищах з органічною складовою, а також принципи побудови інформаційних технологій для їх реалізації та застосування.

Предмет дослідження. Програмне забезпечення для моніторингу та прогнозування нелінійних взаємопов'язаних процесів (біодеградації, фільтрації та вологоперенесення, теплогенерації, генерації парникових газів) в пористих середовищах з органічною складовою, включаючи архітектуру та алгоритми моделювання.

Наукова новизна одержаних результатів полягає в розвиненні модельно-алгоритмічного підходу та відповідного програмного забезпечення для отримання прогностичних даних про процеси і стани пористих середовищ з органічною складовою на основі сучасних інформаційних технологій.

За результатами дослідження отримано результати, яким характерна наукова новизна:

вперше:

- розроблено комп'ютерні моделі та їх програмну реалізацію для отримання прогностичних даних про стани та процеси в сховищах твердих побутових відходів, як пористих середовищах з органічною складовою, що базуються на застосуванні чисельних схем розв'язання відповідних вдосконалених математичних моделей, як нелінійних крайових задач математичної фізики (деякі – в змінних областях), що дозволило створити нові інструменти для аналізу та прогнозування в даній предметній області;

удосконалено:

- метод отримання прогностичних даних значень вологості пористого середовища з органічною складовою шляхом модельно-алгоритмічного підходу до модифікації рівняння вологоперенесення в пористому середовищі в умовах змінної пористості та теплогенерації, як наслідок біодеградаційних процесів. Це дозволило створити програмний компонент, що враховує вплив біодеградаційних процесів на зміну прогностичних даних про вологість середовища, а також на зміну прогностичних даних його просідання як результат зміни пористості, що розширює функціональні можливості існуючих інформаційних систем прогнозування;

- обчислювальні методи реалізовані у розробленому програмному забезпеченні, для отримання прогностичних даних про надлишкові тиски в рідкій та газовій фазах, а також про зміну положення верхньої межі пористого середовища з органічною складовою. Це досягнуто шляхом вдосконалення на основі математичної моделі консолідації пористих середовищ в умовах неповного насичення та розробки відповідних обчислювальних модулів.

Запропоновані вдосконалення дозволили ефективно врахувати вплив біодеградаційних процесів, теплогенерації та газогенерації на динаміку зміни прогнозних значень надлишкових напорів у поровій рідині та динаміку прогнозів осідання поверхні сховища твердих побутових відходів;

- метод комп'ютерного моделювання та відповідне програмне забезпечення для отримання прогнозних даних вологості та температури стосовно пористих середовищ з органічною складовою шляхом урахування наявності тонких примежових шарів через розробку та інтеграцію в прогнозну модель балансової граничної умови, в якій, на відміну від існуючих підходів до моделювання, передбачений випадок зміни характеристик матеріалу шару в умовах дії змінних полів вологості та температури. Це дає змогу врахувати вплив наявності тонких верхніх шарів в реальних екосистемах на прогнозні дані вологості, температури та емісії парникових газів;

набуло подальшого розвитку:

- застосування інформаційних технологій, комп'ютерного та математичного моделювання до досліджуваних процесів та станів пористих середовищ з органічною складовою для підвищення ефективності отриманих прогнозних даних;

- архітектура, як основа розробленого програмного комплексу, яка забезпечує інтегроване моделювання та прогнозування процесів і станів пористих середовищ з органічною складовою. В програмному комплексі на відміну від існуючих, здійснена системна інтеграція модулів для обробки даних з різноманітних цифрових сервісів та джерел екологічного моніторингу, обчислювального ядра, що реалізує (на основі чисельних методів, зокрема методу скінченних різниць) моделі динаміки біодеградації та газогенерації з урахуванням граничних умов, процесів тепломасообміну та впливу тонких шарів, та модуля інтерактивної візуалізації результатів симуляції.

Практичне значення отриманих результатів. Практичне значення отриманих в дисертаційному дослідженні результатів полягає у розробці нових та вдосконаленні існуючих методів комп'ютерного моделювання та

компонентів інформаційних технологій, які можуть бути безпосередньо імплементовані для створення або покращення програмних продуктів та інформаційних систем призначених для прогнозування процесів та станів пористих середовищ при наявності в них органічної складової. Зокрема запропоновані обчислювальні моделі та програмні рішення можуть бути використані:

- в сучасних інформаційних системах та програмних комплексах для прогнозних оцінок емісії парникових газів зі сховищ твердих побутових відходів, оцінок даних динаміки їх просідання, зміни теплового та вологісного станів, і відповідно, при прийнятті управлінських рішень стосовно технологій захоронення твердих побутових відходів;

- в сучасних інформаційних системах та програмних засобах для кількісного прогнозування даних емісії парникових газів із сільськогосподарських угідь та лісів і можуть стати частиною методологій розрахунку вуглецевих кредитів;

- в інформаційних системах та відповідних програмних модулях для прогнозування даних вологісного та температурного режимів сільськогосподарських угідь в умовах зміни підходів до землекористування (нульовий обробіток ґрунту, мульчування).

Результати дисертаційної роботи впроваджені на підприємстві «Інститут сільського господарства Західного Полісся НААН», що підтверджено актом впровадження. Результати наукових досліджень також використано при виконанні науково-дослідних робіт Національного університету водного господарства та природокористування (довідка №44-25 від 20.03.25), а також впровадженні у Noosphere Engineering School у рамках проєктів «ExhaustedSoils» та «Забруднення атмосфери» (довідка від 29.04.2025). Результати роботи впроваджено у навчальний процес Національного університету водного господарства та природокористування (довідка №011-01 від 17.01.2025).

Особистий внесок здобувача. Усі наукові результати дисертаційної роботи сформульовані та отримані автором самостійно. У наведених працях, опублікованих із співавторами, здобувачеві належать: зокрема у [115] – здійснено огляд моделей та інформаційних систем кругообігу органічного карбону та супутнього виділення вуглекислого газу, запропонована ідея урахування у відповідних моделях змінних факторів вологості та температури, розробка алгоритму та числові експерименти, [80] – запропонована ідея та виведення балансової граничної умови при наявності тонкого верхнього шару на випадок залежності характеристик матеріалу шару від факторів впливу, [94] – здійснено формування математичної моделі, чисельне розв’язання відповідної крайової задачі, проведення чисельних експериментів, [131] – здійснено формування математичної моделі, розробка алгоритму та чисельне розв’язання відповідної крайової задачі, проведення чисельних експериментів, [122] – здійснено формування математичної моделі, розробка алгоритму та чисельне розв’язання відповідної крайової задачі, проведення чисельних експериментів.

З наукових робіт, опублікованих у співавторстві, у дисертаційній роботі використані результати особистих досліджень здобувача.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертаційної роботи доповідались на конференціях: «Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of V International Scientific and Practical Conference» (м. Рівне, Україна, 4-6 листопада 2021); «EcoAirSolutions» (м. Дніпро, Україна, 9-10 грудня 2021) [EcoAirSolutions. Офіційний вебсайт. Доступно за покликанням: <https://cleanair.org.ua/6777/airsolutionsnoosfera/>]; «Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of VI International Scientific and Practical Conference» (м. Рівне, Україна, 9-11 листопада 2023); «Ecotechnology Day R&I» (м. Київ, Україна, 2 квітня 2024), напрям «Агрохарчові технології, Чиста вода, Цифровізація» [Ecotechnology Day R&I. Офіційний вебсайт. Доступно за покликанням: <https://academcity.org.ua/en/events/Ecotechnology-Day-R&I/>]; «Modeling,

Control and Information Technologies: Proceedings of International Scientific and Practical Conference» (м. Рівне, Україна, 7-9 листопада 2024). Також робота повністю доповідалась на науковому семінарі «Математичне моделювання та обчислювальні методи» ННІ КІТІ Національного університету водного господарства та природокористування (02 травня 2025 року).

Публікації. Основні наукові результати дисертації опубліковано у 10 працях, зокрема: три статті у наукових фахових періодичних виданнях України; три статті у закордонних фахових періодичних виданнях; чотири публікацій у матеріалах міжнародних конференцій. З них три роботи входить до міжнародної наукометричної бази Scopus. Також видано одне свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір.

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел із 138 найменувань та додатків. Повний обсяг дисертації складає 213 сторінок, основний зміст викладено на 171 сторінці, де наведено 25 рисунків та 7 таблиць.

РОЗДІЛ 1. АНАЛІЗ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ТА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТА СТАНІВ У ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ З ОРГАНІЧНОЮ СКЛАДОВОЮ

1.1. Інформаційні технології у комп'ютерному прогнозуванні процесів та станів у пористих середовищах із органічною складовою

Розв'язання задач моделювання, прогнозування та аналізу процесів і станів у пористих середовищах з органічною складовою, таких як ґрунти чи сховища твердих побутових відходів (ТПВ), є критично важливим для розуміння та управління різноманітними природними та техногенними явищами, що мають значний вплив на екологічну безпеку та кліматичні зміни. Сучасні комп'ютерні науки надають потужний інструментарій для вирішення цих складних, багатофакторних проблем. Це включає розробку спеціалізованого програмного забезпечення, застосування алгоритмів інтелектуального аналізу даних (Data Mining), методів машинного навчання (Machine Learning) для обробки великих обсягів експериментальних та моніторингових даних (Big Data), а також побудову обчислювально ефективних математичних моделей та їх реалізацію у вигляді цифрових двійників (Digital Twins) досліджуваних систем, що дозволяє проводити симуляції та оптимізаційні розрахунки

Однією з основних причин важливості таких комп'ютерно-орієнтованих підходів до прогнозування є необхідність оцінки та запобігання забрудненню підземних вод. Пористі середовища з органічною складовою можуть діяти як фільтри, стосовно таких забруднювачів, як важкі метали, пестициди та радіонукліди. Розробка предиктивних моделей на основі комп'ютерного моделювання та алгоритмів обробки даних, механізмів перенесення цих речовин через пористі структури дозволяє створювати інформаційні системи підтримки прийняття рішень (ІСППР) для розробки ефективних стратегій захисту водних ресурсів. Наприклад, у дослідженні, присвяченому

математичному моделюванню поширення забруднень у ґрунтах, розглядаються процеси міграції домішок з урахуванням різних шляхів перенесення та сорбційно-десорбційних процесів, що є основою для програмної реалізації відповідних комп'ютерних моделей та розробки алгоритмів для їх чисельного розв'язання [1]. Такі моделі часто характеризуються високою обчислювальною складністю, що актуалізує дослідження в галузі високопродуктивних обчислень (High-Performance Computing), паралельного програмування та використання хмарних платформ для розподілених розрахунків.

Крім того, інструменти комп'ютерних наук, зокрема геоінформаційні системи (ГІС), інтегровані з базами даних та системами аналізу даних дистанційного зондування Землі (ДЗЗ) є важливим для сільського господарства, оскільки дозволяють створювати складні просторово-часові моделі для керування родючістю ґрунтів, ефективного використання добрив та засобів захисту рослин. Розуміння динаміки водного режиму та поведінки органічних речовин у ґрунті, отримане шляхом комп'ютерного моделювання, аналізу часових рядів та застосування методів обробки зображень до даних ДЗЗ, сприяє оптимізації агротехнічних заходів та підвищенню врожайності.

Вміст органічного вуглецю в ґрунті є одним з основних факторів, що впливає на якість та родючість ґрунту. Поряд з кліматом та доступністю води, він є одним з найважливіших факторів, що визначають здоров'я ґрунту [2]. Збір, структурування, зберігання, обробка та аналіз інформації про вміст гумусу з використанням сучасних систем управління базами даних (СУБД), сховищ даних (Data Warehouses) та аналітичних програмних платформ важливі не лише для оцінки стану ґрунтів та планування внесення добрив, але й для підвищення обізнаності про довготривалі наслідки людської діяльності, забезпечення екологічної та продовольчої безпеки. Інтенсивна експлуатація сільськогосподарських земель призводить до виснаження потенціалу продуктивності ґрунтів. Таким чином, забезпечення належного обігу органічного вуглецю ґрунту має вирішальне значення для розробки стратегій

сталого розвитку сільського, лісового та інших видів землекористування, а також вимагає розробки та впровадження інтелектуальних автоматизованих інформаційних систем постійного моніторингу та контролю за кількістю та якістю природних ресурсів, що базуються на інтеграції гетерогенних даних з різних джерел, включаючи IoT-сенсорні мережі (Internet of Things), дані мобільних пристроїв та супутникові знімки [3; 4; 5].

1.1.1 Комп'ютерне моделювання як інструмент реагування на екологічні та кліматичні виклики

Сучасне моделювання агроєкосистем та екологічних процесів загалом нерозривно пов'язане з досягненнями в галузі комп'ютерних наук. Складність природних систем, великі обсяги даних, що генеруються спостереженнями та експериментами, а також потреба в точних прогнозах для прийняття управлінських рішень вимагають застосування передових обчислювальних методів, розробки складних програмних архітектур та ефективних стратегій управління даними.

Захоронення ТПВ стає глобальною проблемою на планеті [6], оскільки пов'язане із емісією парникових газів в атмосферу [7] та генерацією теплової енергії внаслідок біодеградаційних процесів. Стосовно самих сховищ, то є окремою проблемою їх просідання [8], а також, відповідно, проблема стійкості їх схилів [9]. Сучасні підходи до прогнозування цих складних процесів вимагають розробки та впровадження обчислювальних моделей, що інтегрують термодинамічні, гідрологічні, механічні та біохімічні аспекти [10].

Утилізація ТПВ шляхом створення спеціальних полігонів та керування даним процесом є важливою екологічною задачею з багатофакторним впливом. Як зазначається в роботі [8], згідно зі статистикою Світового банку, світовий обсяг утворених ТПВ у 2016 році становив 2,01 млрд тонн, а до 2050 року ця цифра, за прогнозами, досягне 3,4 млрд тонн. Для ефективного управління цим процесом та розробки прогнозів, що враховують такий

значний ріст обсягів, комп'ютерне моделювання та аналіз великих даних стають невід'ємними інструментами для оптимізації стратегій утилізації.

Проблема утилізації ТПВ полягає в двонаправленому забрудненні навколишнього середовища продуктами-наслідками складних фізико-хімічних та біологічних перетворень в таких сховищах: атмосфері – парниковими газами, ґрунтів та ґрунтових вод – хімічними речовинами [11]. В роботі [12] відмічено, що у 2017 році в США було згенеровано майже 268 мільйонів тон ТПВ, із них 139,6 мільйонів тон (52,1%) були вивезені на звалища відходів. В Китаї згідно із статистикою 2018 року ці цифри склали 663 та 117,06 мільйонів тон відповідно. Враховуючи складність фізико-хімічних та біологічних перетворень, що призводять до двонаправленого забруднення, комплексний підхід до утилізації ТПВ вимагає рішень, заснованих на прогнозах із застосування чисельних методів та обчислювальних алгоритмів для моделювання взаємопов'язаних процесів. Це дозволяє не лише прогнозувати, але й візуалізувати вплив полігонів, що має вирішальне значення для розробки ефективних стратегій управління відходами.

Розробка та аналіз складних комп'ютерних моделей для сховищ ТПВ, що розглядаються як пористі середовища, є ключовим напрямком. Ці моделі включають інтеграцію чисельних методів для вирішення диференціальних рівнянь, що описують термо-гідро-біо-механічні процеси. Дослідження взаємопов'язаних процесів в сховищах ТПВ, як пористих середовищах, власне стало окремим напрямком у комп'ютерному та математичному моделюванні [13]. Увага саме такому предмету досліджень, як сховище ТПВ обумовлюється їх впливом на глобальні кліматичні зміни через емісію парникових газів в атмосферу [6], а також намаганням використати побутові відходи як сировину для генерації біогазу [7; 13].

Ґрунтове природне середовище є однією з найважливіших умов існування живих організмів на планеті Земля. У цій екосистемі відбуваються безперервні процеси трансформації органічної речовини. Одним із наслідків

таких процесів є виділення парникових газів в атмосферу. Розуміння та прогнозування цих складних екосистемних процесів вимагає розробки та застосування відповідних комп'ютерних моделей.

У сучасних дослідженнях дедалі більшої уваги набувають удосконалені математичні моделі, які враховують складну динаміку вологості та просторово-часові аспекти перенесення вуглецю в пористих середовищах. Зокрема, у роботі [14] запропоновано модель, що поєднує дробові похідні з рівняннями волого- та теплоперенесення для моделювання динаміки органічного вуглецю в прибережних водно-болотних угіддях. Такий підхід дозволяє точно врахувати ефекти періодичного підтоплення, просторової неоднорідності та впливу вологості на потоки вуглецю. Валідація моделі на прикладі дельти Ебро засвідчила її ефективність у прогнозуванні вуглецевого балансу та потенціалу таких середовищ до секвестрації вуглецю, що особливо актуально в контексті розробки інформаційних систем для моніторингу змін у довкіллі. Ефективність цих обчислювальних рішень є критично важливою для інтеграції в складні інформаційні системи, що забезпечують моніторинг, аналіз та візуалізацію даних для підтримки прийняття рішень.

Сільськогосподарські угіддя як один із прикладів впливу людини на природні середовища є джерелом викидів парникових газів. Прогноз обсягів викидів цих газів необхідна для розробки стратегії підтримки балансу між природним середовищем та сільськогосподарською діяльністю людини. Для розробки ефективних стратегій збалансованої взаємодії між сільськогосподарською діяльністю та природним середовищем, прогнозування обсягів викидів цих газів вимагає використання передових методів комп'ютерного моделювання.

Вуглецеві кредити є ключовим інструментом у глобальних зусиллях щодо зменшення викидів парникових газів, дозволяючи компенсувати викиди шляхом фінансування проєктів, заходи в межах яких знижують або приводять до поглинання CO₂. Сільськогосподарські угіддя відіграють важливу роль у цьому процесі через їхній потенціал для секвестрації вуглецю [15].

В Україні, зокрема, чорноземні ґрунти мають значний потенціал для поглинання вуглецю. Дослідження показують, що деградовані ґрунти можуть стати ефективними поглиначами CO₂ при впровадженні відновлювальних сільськогосподарських практик, таких як зменшення обробітку ґрунту та використання покривних культур. За оцінками, потенціал секвестрації вуглецю українськими ґрунтами становить близько 757,7 млн тонн, що еквівалентно річним викидам вуглецю Німеччини [Доступно за покликанням: https://agsolco.com/prohrama-carbon-credit-ukraine-vuhletsevi-kredyty-efektyvnyi-shliakh-do-reheneratyvnoho-silskoho-hospodarstva/?utm_source=chatgpt.com]

Прогнозування викидів парникових газів із сільськогосподарських угідь є критично важливим для ефективного управління вуглецевими кредитами. Використання інформаційних технологій дозволяє моделювати вуглецевий баланс регіонів та оцінювати вплив різних агротехнічних заходів на емісію парникових газів. Наприклад, інтегровані моделі обміну вуглецем, які включають моделі вуглецевого балансу та потоки вуглецю між регіонами, сприяють точнішому прогнозуванню та розробці стратегій зменшення викидів [16].

Крім того, кліматичні зміни зворотно впливають на емісію парникових газів із ґрунтів агроєкосистем. Дослідження показують, що в «посушливі» роки на початку вегетації емісія CO₂ може бути значно вищою, ніж у «вологі» роки, через зміну вологості ґрунту та температурних режимів. Це підкреслює необхідність адаптації сільськогосподарських практик до змін клімату для мінімізації викидів парникових газів [17] та ставить нові задачі перед математичним і комп'ютерним моделюванням цих взаємопов'язаних процесів. Взаємозв'язок факторів впливу та їх наслідків вказує на складний тип системи і обумовлює нелінійність відповідних моделей. З огляду на складність та нелінійність взаємопов'язаних процесів, що визначають емісію парникових газів з агроєкосистем, розвиток та вдосконалення обчислювальних моделей є критично важливим. Це передбачає застосування

передових чисельних методів для розв'язання систем рівнянь, які враховують динамічні зміни параметрів навколишнього середовища

Економічний аспект також є важливим. Оцінка соціальної вартості органічного вуглецю в ґрунтах України дозволяє порівнювати альтернативні варіанти землекористування та вибирати оптимальні економічні інструменти. Збереження та накопичення органічного вуглецю сприяє підвищенню біологічної продуктивності сільськогосподарських ґрунтів, що позитивно впливає на продовольчу безпеку [15].

Таким чином, впровадження вуглецевих кредитів та прогнозування викидів парникових газів із сільськогосподарських угідь є взаємопов'язаними процесами, які сприяють зменшенню викидів, покращенню якості ґрунтів та забезпеченню сталого розвитку аграрного сектору.

Прогнозування викидів парникових газів із сільськогосподарських угідь є критично важливим для розробки ефективних стратегій зменшення впливу аграрного сектору на зміну клімату. Сільське господарство є значним джерелом парникових газів, зокрема метану (CH_4) та закису азоту (N_2O), які утворюються внаслідок діяльності у тваринництві та рослинництві. Згідно з дослідженням Тимошук О.А. та співавторів, частка сільського господарства у загальних викидах парникових газів в Україні впродовж 1990-2020 років коливалася в межах 9–14% і має тенденцію до поступового зростання [18].

Моделювання динаміки емісії парникових газів дозволяє оцінити вплив різних факторів, таких як температура, вологість ґрунту та агротехнічні заходи, на інтенсивність викидів. Польовий А. та Божко Л. розробили комплексну модель емісії CO_2 та N_2O із ґрунтів агроєкосистем, яка враховує міжсезонні та міжрічні зміни потоків цих газів залежно від погодних умов та вмісту гумусу в ґрунті [19].

Крім того, існує прямий зв'язок між викидами парникових газів та продуктивністю сільськогосподарських угідь. Файчук О. виявив, що зростання вартості виробленої сільськогосподарської продукції на гектар угідь супроводжується збільшенням викидів CO_2 -еквіваленту. Це свідчить про

необхідність балансування між підвищенням продуктивності та екологічною стійкістю аграрного виробництва [20]. Відмітимо, що дані висновки корелюють із висновками стосовно застосувань мульчування в агросекторі (див. параграф 1.3).

Таким чином, прогнозування викидів парникових газів із сільськогосподарських угідь є необхідним для розробки ефективних заходів щодо зменшення негативного впливу аграрного сектору на клімат та забезпечення сталого розвитку сільського господарства.

1.1.2 Обчислювальні моделі динаміки агроєкосистем та прогнозування викидів парникових газів

Агроєкосистеми є суттєвим джерелом парникових газів (ПГ), таких як вуглекислий газ (CO_2), метан (CH_4) та оксид азоту (N_2O). Моделювання та прогнозування цих складних процесів, необхідне для розробки ефективних стратегій зменшення викидів ПГ, становить актуальну задачу для комп'ютерних наук, що полягає у створенні та застосуванні відповідних обчислювальних моделей та інструментів.

У статті [21] проведено порівняльний аналіз процесних моделей оцінки викидів ПГ, що підкреслює важливість точного моделювання для розробки заходів пом'якшення впливу ПГ на кліматичні зміни.

У дослідженні [22] оцінюється вплив використання азотних добрив на баланс парникових газів у ґрунтах Уельсу. Автори підкреслюють важливість впровадження ефективних управлінських практик у сільському господарстві для мінімізації викидів парникових газів, зокрема шляхом оптимізації застосування азотних добрив, що дозволяє значно знизити негативний вплив на навколишнє середовище.

Традиційні методи оцінки викидів ПГ в агроєкосистемах включають:

- метод статичних камер, що дозволяє безпосередньо вимірювати концентрацію газів, але є трудомістким та обмеженим у масштабуванні;

– метод емісійних коефіцієнтів, що базується на емпіричних формулах і дозволяє отримати швидкі оцінки, але має значні обмеження у варіативності параметрів;

– комп'ютерні процесні моделі, найбільш відомими серед яких є APSIM, DNDC, DayCent та STICS (а загалом їх (моделей) в науковому середовищі стосовно оцінок викидів ПГ нараховується більше 60-ти), які забезпечують детальне моделювання біогеохімічних процесів у ґрунтах та рослинах, що дозволяє отримати більш точні та масштабовані результати [21].

Відмітимо, що наразі інтенсивно розвивається «гібридний» підхід до моделювання вказаних процесів, коли процесні математичні моделі поєднуються із даними зовнішніх спостережень в режимі реального часу, а також з машинним навчанням.

Розвиток комп'ютерного моделювання викидів ПГ необхідний для розробки ефективних стратегій зменшення викидів та створення інформаційних систем підтримки прийняття рішень для керування даними процесами. Наприклад, використання покривних культур та змін у зрошенні може суттєво вплинути на рівень викидів CH_4 та N_2O . З точки зору бізнесової сторони – це пов'язане з отриманням фермерськими господарствами карбонових кредитів.

Незважаючи на значний прогрес у розробці моделей оцінки викидів ПГ, існують певні обчислювальні та інформаційні виклики:

- необхідність стандартизації методології для забезпечення порівнюваності результатів між різними регіонами та умовами;
- врахування складних екологічних процесів, таких як вплив екстремальних погодних умов на викиди ПГ, що транслюється у високу обчислювальну складність моделей;
- розробка ефективних алгоритмів для розв'язання систем нелінійних диференціальних рівнянь, що описують дані процеси;

- загалом нелінійність процесів та складність їх математичних моделей, що позначається на складності алгоритмів, калібруванні та власне самій програмній реалізації в працюючу інформаційну систему;

- інтеграція моделей з новими джерелами даних, такими як дистанційне зондування та штучний інтелект, що дозволить підвищити точність прогнозів.

Проте аналіз існуючих моделей і підходів показує, що в них недостатньо враховані деякі ключові фізико-біогенні фактори, які мають суттєвий вплив на точність прогнозування. Зокрема, наявність тонких примежових шарів – включаючи мульчуючі покриття, біоплівки або ущільнені шари ґрунту – часто ігнорується або описується надто спрощено. Це може знизити точність оцінки температурного та вологісного режиму у верхній частині пористого середовища та, відповідно, прогнозів емісії парникових газів.

Крім того, більшість моделей не враховують комплексну взаємодію між процесами біодеградації органічної складової, теплогенерації, газоутворенням, формуванням надлишкового тиску та ущільненням ґрунту чи матеріалу сховищ, що особливо актуально для середовищ із насиченою органічною фазою, таких як полігони твердих побутових відходів.

Ще одним викликом є обмежена інтеграція моделей з цифровими джерелами екологічного моніторингу, що ускладнює застосування таких рішень у режимі близькому до реального часу та їх використання у цифрових системах підтримки прийняття рішень.

1.1.3 Використання інформаційних технологій у прогнозуванні викидів парникових газів із агроєкосистем

Прогнозування викидів ПГ з агроєкосистем є складним науково-технічним завданням, ефективне вирішення якого значною мірою залежить від застосування сучасних інформаційних технологій. Ключовим інструментом у цьому контексті є комп'ютерне моделювання, що реалізується через розробку та використання спеціалізованого програмного забезпечення. Це програмне

забезпечення імплементує математичні моделі, які описують нелінійні взаємопов'язані процеси (біодеградації, фільтрації, вологоперенесення, теплогенерації, генерації ПГ) в пористих середовищах з органічною складовою. Розглянемо низку поширених інформаційних технологій, що використовуються для таких завдань, аналізуючи їх з точки зору модельно-алгоритмічних підходів та архітектурних рішень.

APSIM (Agricultural Production Systems sIMulator) є прикладом комплексної моделювальної програмної платформи, розробленої для імітації розвитку сільськогосподарських культур, обігу поживних речовин у ґрунті та впливу кліматичних умов на врожайність. Її розробка почалася на початку 1990-х років у співпраці кількох австралійських науково-дослідних організацій, зокрема CSIRO, Департаменту первинної промисловості Квінсленду та Університету Квінсленду [23]. Архітектура APSIM дозволяє інтегрувати різні модулі, що описують окремі аспекти агроєкосистеми. Вона являє собою складну інформаційну систему, яка вимагає ефективних алгоритмів для чисельного розв'язання систем рівнянь, що описують динаміку культури та обіг речовин, а також управління даними та модульними компонентами. APSIM широко використовується в аграрних дослідженнях, екологічному моделюванні та прийнятті рішень у сільському господарстві. Офіційний сайт доступний за посиланням (<https://www.apsim.info/>). Приклади розвитку та застосування алгоритмів та програмних модулів APSIM для прогнозування викидів N_2O – це, наприклад, роботи [21], [24], [25].

Модель DAYCENT (Daily Century) є ще одним прикладом реалізації математичної моделі у вигляді програмного продукту, що імплементує чисельні методи для прогнозування динаміки біогеохімічних процесів в екосистемах, включаючи викиди вуглекислого газу з ґрунту. Ця модель розроблена на основі моделі CENTURY з добовим часовим кроком і враховує більш складні процеси, такі як вимивання азоту та наявність ґрунтового вуглецю в різних формах. Модель складається з субмоделей, які оцінюють потоки азоту і вуглецю, продуктивність рослин, розкладання органічних

залишків, динаміку ґрунтових вод і температуру. Це вимагає розробки алгоритмів для управління потоками даних між модулями та забезпечення стійкості чисельних схем. Розробкою та підтримкою моделі займається Лабораторія екології природних ресурсів (Natural Resource Ecology Laboratory) при Університеті штату Колорадо. Офіційний сайт доступний за посиланням (<https://www.soilcarbonsolutionscenter.com/daycent>). Приклади використання вказаної моделі наведено в роботах [26], [27], [28]. В роботі [29] проаналізовано вплив аграрної політики ЄС (CAP 2014–2020) на викиди оксиду азоту (N_2O) з ґрунтів, використовуючи дані дослідження LUCAS та моделювання DayCent.

SWAT позиціонується як інформаційно-аналітична система для оцінки стану ґрунтів і водних ресурсів. SWAT є просторово розподіленою, безперервною гідрологічною моделлю, розробленою Міністерством сільського господарства США – Сільськогосподарською дослідницькою службою [30]. Офіційний сайт доступний за посиланням (<https://swat.tamu.edu/>). Наприклад, робота [31] присвячена модифікації моделі SWAT для покращення моделювання перенесення амонію (NH_4^+) із суші у водойми, зокрема для прибережного водозбору річки Джулун у Китаї, що має значне антропогенне навантаження. Це ілюструє важливість модельно-алгоритмічного підходу, що дозволяє адаптувати та розширювати функціональність існуючого програмного забезпечення.

SWAT-C є модифікацією стандартної моделі SWAT, що демонструє розвиток модельно-алгоритмічного забезпечення шляхом інтеграції нових блоків, наприклад, для детальнішого моделювання циклу вуглецю. Це передбачає розширення програмного коду та структур даних. Офіційний сайт доступний за посиланням (<https://sites.google.com/view/swat-carbon/>). В роботі [32] описано вдосконалення моделі SWAT-C для симуляції довгострокової динаміки неорганічного азоту в ґрунті (SIN) у сільськогосподарських ландшафтах.

DNDC (DeNitrification-DeComposition) це інформаційна система, що базується на математичній моделі, розробленій для оцінки динаміки вуглецю та азоту в агроекосистемах з урахуванням впливу сільськогосподарської діяльності на зміну клімату. Ця модель має кілька модифікацій, які можуть бути використані для оцінки викидів парникових газів в агроекосистемах, гірських і водно-болотних лісових екосистемах, пасовищах і тваринницьких фермах. Вона описує взаємодію між ґрунтом, рослинами та атмосферою і розглядає процеси, пов'язані з викидами таких парникових газів, як вуглекислий газ (CO_2), метан (CH_4), закис азоту (N_2O), оксид азоту (NO), динітроген (N_2) та аміак (NH_3). DNDC запроваджено в 1992 році як модель для прогнозування викидів N_2O у сільському господарстві [33]. Офіційний сайт доступний за посиланням (<https://www.dndc.sr.unh.edu/>). Структура моделі версії 9.5 наведено на рис. 1.1. Наразі випущена модель DNDC v11.0.0.

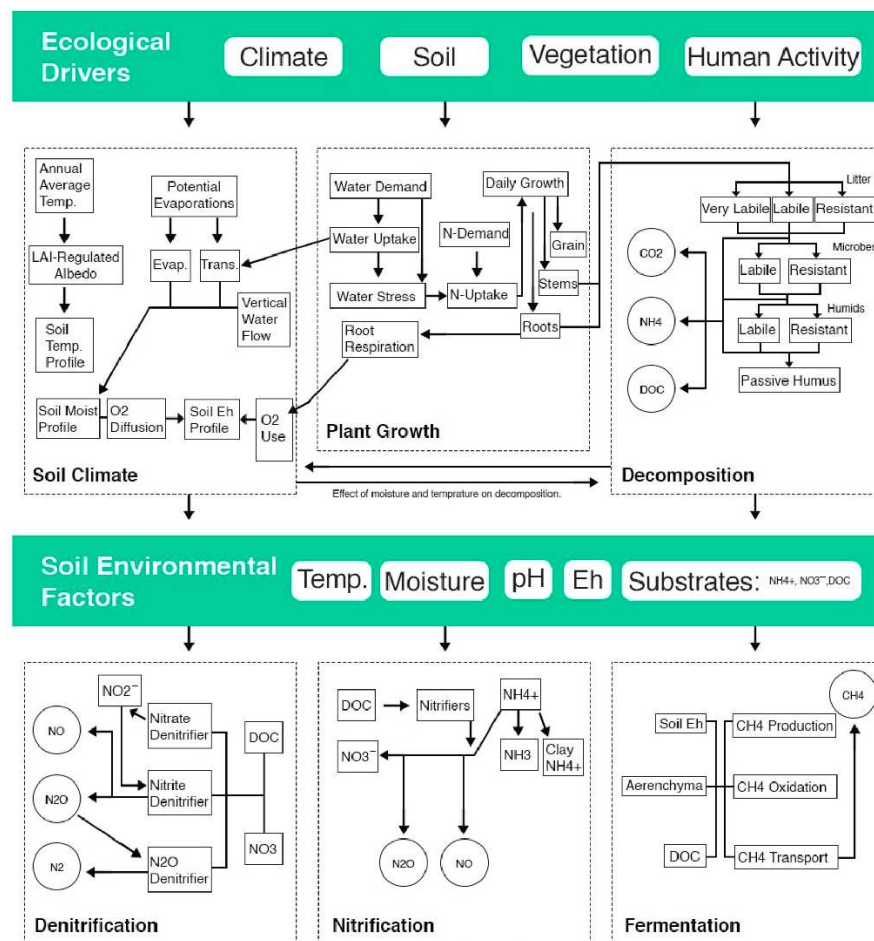


Рис.1.1.Структура моделі DNDC v9.5 [34]

Інформаційна система DNDC також моделює вплив сільськогосподарських практик на поглинання вуглекислого газу, моделює щоденний ріст рослин і врожайність, імітує міграцію поживних речовин у ґрунтового середовищі та їх поглинання рослинами. Для розрахунку викидів парникових газів у моделі DNDC також використовуються дані про тип ґрунту, кліматичні умови та методи землекористування. Схема процесу емісії парникових газів наведена на рис.1.2.

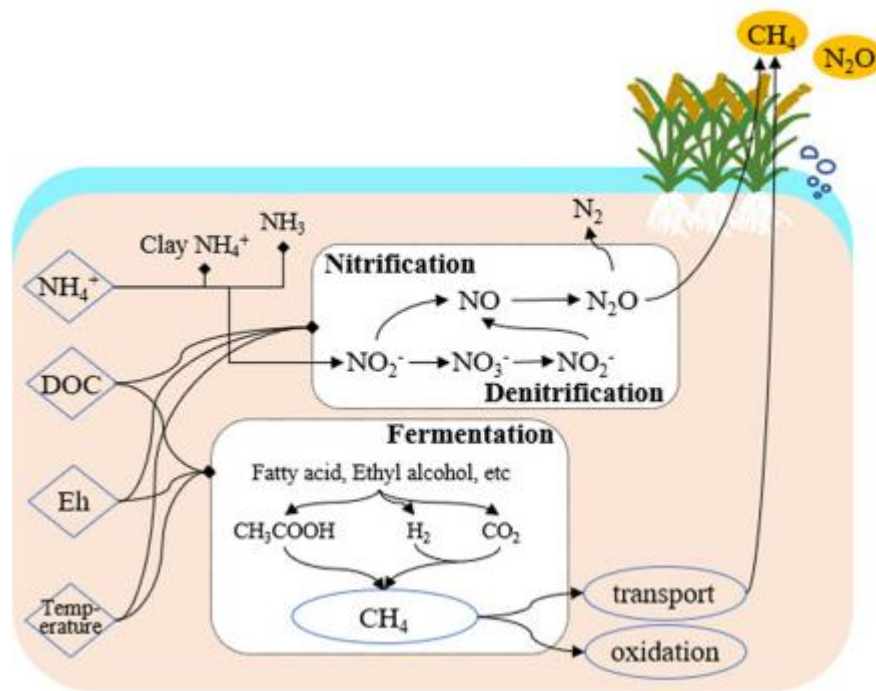


Рис.1.2. Схема процесу емісії парникових газів в моделі DNDC [35, с. 143]

Прикладів застосування моделі DNDC в наукових дослідженнях є велика кількість. Як приклади, це можуть бути – [36], [37], [38].

Окрім зазначених моделей, також можна виділити такі моделі, як DAISY (посилання на сайт: <https://daisy.ku.dk/about-daisy/>), RIVE (посилання на сайт: <https://rive.cnrs.fr/rive-model/#code-implementations>), GDAY (посилання на github: <https://github.com/mdekauwe/GDAY?tab=readme-ov-file#key-references>), DSSAT (посилання на сайт: <https://dssat.net/>), RZWQM2 (посилання на сайт: <https://www.ars.usda.gov/plains-area/fort-collins-co/center-for-agricultural-resources-research/rangeland-resources-systems-research/docs/system/rzwqm/>),

HERMES (посилання на сайт: <https://www.quantitative-plant.org/model/HERMES>) та STICS (посилання на сайт: <https://library.oapen.org/handle/20.500.12657/85111>). Кожна з цих інформаційних систем має власну архітектуру, базується на специфічних чисельних алгоритмах та призначена для вирішення певного класу задач моделювання агроєкосистем. Їх наявність свідчить про різноманітність інформаційних технологій та модельно-алгоритмічних підходів, що застосовуються у цій предметній області та потребують постійного вдосконалення.

Серед сучасних підходів до моделювання динаміки органічного вуглецю в ґрунтах особливу увагу привертає модифікація моделі RothC із використанням похідних дробового порядку, представлена у [14]. У цій роботі запропоновано новий підхід, який враховує дробовий порядок інтегрування для точнішого відображення складних процесів розкладання органічної речовини в пористому середовищі. Це демонструє напрям удосконалення програмного забезпечення шляхом залучення більш складного математичного апарату, що вимагає розробки спеціалізованих чисельних методів та їх ефективної програмної реалізації.

Пошаровий розклад SOC добре описується в моделі RothPC-1. Вона базується на більш ранній моделі RothC-26.3 для верхніх шарів ґрунту, яка ґрунтується на 100-річних дослідженнях ґрунтів. Модель широко використовується для моделювання динаміки SOC, зокрема, в рамках проекту Global Soil Organic Carbon Sequestration Potential Map Глобального ґрунтового партнерства (GSP) та Продовольчої і сільськогосподарської організації ООН (FAO) [39], а також при створенні карт SOC Китаю [40].

Структура пулів і потоків у моделі RothC показана на рис. 1.3. Посилання на сайт моделі <https://www.rothamsted.ac.uk/rothamsted-carbon-model-rothc>

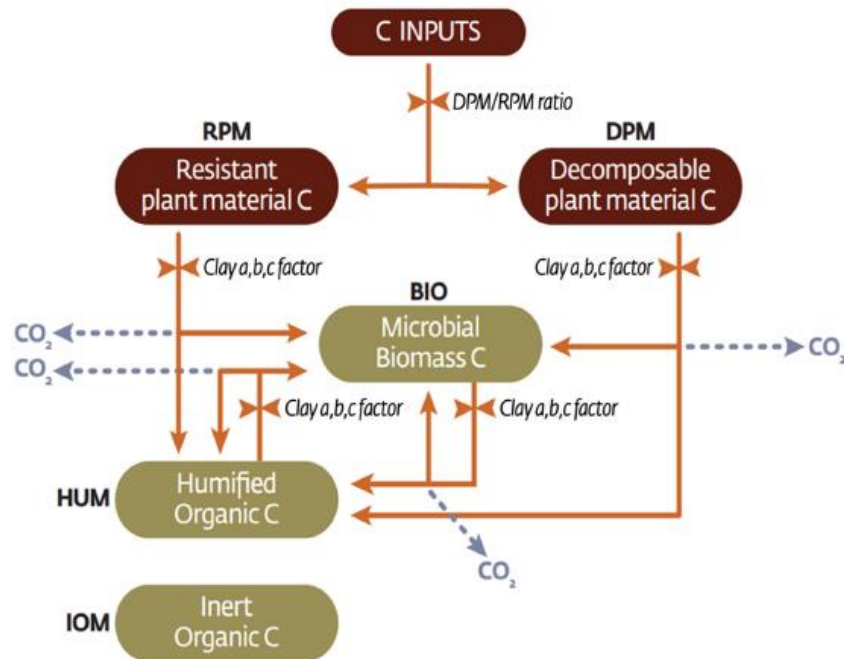


Рис. 1.3. Структура пулів, потоків та основних керуючих факторів моделі RothC

Попри значні досягнення згаданих систем, ними не враховано низку важливих факторів, які можуть мати істотний вплив на достовірність та деталізацію прогнозних даних. Зокрема, в жодній із розглянутих інформаційних систем (APSIM, DAYCENT, SWAT, DNDC, RothC та ін.) не реалізовано механізмів врахування тонких примежових шарів пористого середовища, які відіграють суттєву роль у реальних умовах, зокрема при наявності біопокриттів, мульчування, агрономічних залишків чи лісової підстилки. Відсутність відповідних граничних умов або моделей із змінними характеристиками поверхневих шарів може знизити точність розрахунків температури, вологості та, відповідно, емісії парникових газів.

Окрім того, більшість зазначених моделей не забезпечує можливості інтегрованого врахування одночасної дії біодеградаційних процесів, теплогенерації, генерації газової фази та процесів консолідації, що ускладнює побудову комплексного прогнозу осідання поверхні та динаміки тисків у газорідній фазі сховищ твердих побутових відходів. Наявні моделі здебільшого не орієнтовані на системну інтеграцію екологічних даних з

різномірних цифрових джерел і не містять інтерактивної візуалізації, що обмежує їх придатність для створення повноцінних інформаційно-аналітичних систем екологічного моніторингу та прийняття рішень. Порівняльну таблицю інформаційних систем, призначених для оцінки викидів парникових газів із агроєкосистем, наведено у Додатку Г.

1.2. Комп'ютерні моделі, програмні платформи та математичні моделі для прогнозування процесів та станів полігонів твердих побутових відходів

Сучасне управління ТПВ ґрунтується на застосування інформаційних технологій для моніторингу, аналізу та, що особливо важливо для даного дослідження, прогнозування нелінійних взаємопов'язаних процесів (біодеградації, генерації парникових газів, фільтрації, тепло- та вологоперенесення) у тілі полігону, яке розглядається як складне пористе середовище з органічною складовою. Зокрема, важливим аспектом є контроль за викидами парникових газів, які утворюються під час розкладання органічних компонентів у сміттєзвалищах. Інформаційні системи (ІС) та спеціалізоване програмне забезпечення відіграють ключову роль у зборі, зберіганні, обробці даних, а також у реалізації математичних моделей та чисельних алгоритмів для аналізу динаміки процесів на полігонах ТПВ.

Сучасні ІС для управління відходами складаються з таких компонентів (рис.1.4): пристрої для збору даних про склад газів, вологість, температуру та інші параметри; сховище структурованої інформації про відходи, їхній склад, обсяг і динаміку утворення парникових газів; алгоритми, які ґрунтуються на математичному і комп'ютерному моделюванні для прогнозування впливу полігонів на навколишнє середовище; панелі моніторингу, графіки, теплові карти для аналізу отриманих даних; API (Application Programming Interface, Інтерфейс програмування застосунків) для обміну інформацією з муніципальними службами та науковими установами.



Рис. 1.4. Графічне представлення компонентів сучасної інформаційної системи управління відходами

Впровадження інформаційних систем для сховищ побутових відходів дозволяє: зменшити негативний вплив полігонів на довкілля шляхом контролю викидів ПГ та прийняттю відповідних управлінських рішень; підвищити ефективність розподілу відходів, сприяючи більш глибокому сортуванню та переробці; знизити витрати на експлуатацію полігонів завдяки оптимізації управління ресурсами; забезпечити відповідність міжнародним екологічним стандартам і вимогам щодо моніторингу парникових газів.

Численні дослідження показали ефективність моделі LandGEM як для виробництва енергії, так і для контролю викидів [41]. Модель доступна на офіційному сайті EPA, і для користування не потрібен комерційний ліцензійний пакет. LandGEM (Landfill Gas Emissions Model) – модель, розроблена Агентством з охорони навколишнього середовища США (EPA), яка дозволяє прогнозувати викиди метану та інших газів зі звалищ на основі даних про склад відходів і швидкість їхнього розкладання. Основними газами,

що виділяються в процесі розкладання, є метан, вуглекислий газ і водень. Слід зазначити, що метан становить приблизно 60% газів, що утворюються на полігонах ТПВ, а решта – це переважно вуглекислий газ [42; 43].

Застосування моделі LandGEM та відповідного програмного забезпечення описано в роботах [44; 45]. LandGEM базується на рівнянні біодеградації першого порядку, а калібрування моделі (за замовчуванням) базується на емпіричних даних з полігонів ТПВ у США. Замість моделі за замовчуванням можна також використовувати дані польових випробувань, якщо вони доступні [46].

Департамент громадських робіт округу Лос-Анджелес розробив Інформаційну систему управління твердими побутовими відходами Solid Waste Information Management System (SWIMS). Цей веб-додаток збирає та управляє інформацією про майже 30 000 тонн сміття, що утворюється в окрузі Лос-Анджелес щодня. Зацікавлені сторони, такі як перевізники сміття та оператори звалищ, вводять дані про сміття, включаючи обсяг зібраних матеріалів, придатних для вторинної переробки, сміття, утилізованого на звалищах, та матеріалів, вивезених за межі округу. У 2011 році SWIMS доопрацьовано, додавши дві суттєво нові функції, які є першими у своєму роді в США. Одна з нових функцій дозволяє відвідувачам визначити, чи може власність піддаватися впливу метану на основі її близькості до будь-яких звалищ або нафтових/газових свердловин, ввівши адресу або номер ділянки. Ще одна нова функція дозволяє консультантам подавати заявки на проєкти зі зменшення викидів метану через SWIMS та відстежувати стан перевірки їхніх планів. Загальна економія та уникнення витрат для населення та округу Лос-Анджелес становить близько 120 000 доларів США на рік. Загальна економія робочого часу персоналу становить близько 3600 годин на рік [https://www.naco.org/resources/award-programs/solid-waste-information-management-system-swims].

WasteMAP – цей веб-інструмент з відкритим доступом має на меті забезпечити більшу прозорість даних про викиди метану від твердих

побутових відходів, надаючи органам управління відходами та громадськості практичні поради щодо скорочення викидів метану в їхніх громадах. Його ключовим компонентом є інтерактивна карта, що реалізує алгоритми візуалізації геопросторових даних про викиди метану від твердих побутових відходів. Даний веб-інструмент спрямований на інформаційну підтримку прийняття рішень [<https://rmi.org/introducing-wastemap-a-new-tool-to-track-and-reduce-waste-methane-emissions/>]. Посилання на карту [<https://wastemap.earth/>]

Інструмент оцінки викидів від твердих побутових відходів SWEET (Solid Waste Emissions Estimation Tool) – це інструмент на основі Excel, який дозволяє кількісно оцінити викиди метану, сажі та інших забруднюючих речовин від джерел у секторі поводження з твердими побутовими відходами. SWEET розроблений Агентством з охорони навколишнього середовища США під егідою Глобальної ініціативи з метану та за підтримки Коаліції «Клімат і чисте повітря» [<https://www.ccacoalition.org/resources/solid-waste-emissions-estimation-tool-sweet>]. Для цієї міні-оглядової статті були розроблені оцінки всіх викидів у секторі відходів Лівану за допомогою SWEET з використанням опублікованих даних про обсяги зібраних, утилізованих та перероблених ТПВ, з поправками на непрямі скорочення викидів парникових газів від компостування та анаеробного зброджування [47].

У процесі аналізу наукових джерел та існуючих інформаційних систем, орієнтованих на прогнозування процесів у пористих середовищах з органічною складовою, встановлено, що переважна більшість таких систем характеризуються фрагментарністю підходів і вузькою спеціалізацією: вони здебільшого охоплюють окремі процеси, такі як тепло- або вологоперенесення, біодеградацію, або газогенерацію. Часто реалізуються спрощені математичні моделі, які не враховують зміну структури середовища внаслідок біологічних та фізико-хімічних процесів, не забезпечують моделювання в умовах неповного насичення і не дозволяють точно відобразити динаміку консолідації пористого середовища чи накопичення надлишкових тисків в паровій рідині.

Одним із найбільш критичних обмежень проаналізованих систем є відсутність врахування впливу тонких примежових шарів – таких як біопокриття, мульча або ущільнені поверхневі шари, які відіграють важливу роль у процесах тепло- та вологоперенесення, а також в емісії парникових газів. В існуючих підходах граничні умови часто задаються як статичні, без урахування сезонних, кліматичних чи біологічних змін, що не відповідає умовам реальних середовищ – наприклад, сховищ ТПВ, сільськогосподарських угідь або природних біоценозів.

Більшість моделей не враховує також динаміку зміни характеристик самих граничних шарів під впливом змін температури та вологості, що є особливо важливим у довготривалому моделюванні. Недостатньо представлена й інтеграція з просторовими даними, цифровими сервісами та відкритими джерелами моніторингу, що ускладнює адаптацію моделей до конкретних територій або умов. Порівняльна таблиця інформаційних систем для прогнозування процесів на полігонах твердих побутових відходів наведена у Додатку Д.

Розглянуті комп'ютерні моделі, програмні платформи та інформаційні системи демонструють різноманітність підходів до застосування інформаційних технологій для прогнозування процесів на полігонах ТПВ. Вони варіюються за складністю математичного апарату, архітектурою програмного забезпечення, реалізованими чисельними алгоритмами та функціональними можливостями. Однак, завдання вдосконалення модельно-алгоритмічного підходу та відповідного програмного забезпечення для більш точного та комплексного прогнозування нелінійних взаємопов'язаних процесів у пористих середовищах полігонів (біодеградації, фільтрації, тепло- та вологоперенесення, генерації газів), включаючи розробку та адаптацію чисельних методів і принципів побудови ефективних інформаційних технологій, залишається актуальним.

Прогнозування процесів у пористих середовищах з органічною складовою, зокрема на полігонах ТПВ, становить значний інтерес для

комп'ютерних наук у контексті розробки обчислювальних моделей та алгоритмів для складних нелінійних систем. Основою таких прогнозів можуть бути математичні моделі, які описують взаємопов'язані фізико-хімічні та біологічні явища (біодеградація, фільтрація, теплоперенесення, газогенерація, деформація). Реалізація цих моделей у вигляді ефективного програмного забезпечення вимагає застосування відповідних алгоритмічних підходів.

Наслідком наявності органічної складової в твердих побутових відходах є їх біодеградація [12], яка супроводжується виділенням тепла та парникових газів. Важливість урахування неізотермічних умов при прогнозуванні ущільнення твердих побутових відходів підтверджується експериментами в [48]: «Зокрема, було виявлено, що індекс стискуваності збільшився з 0,71 і 0,77 при 21°C до 0,83 при температурі 50 °C. Рециркуляція фільтрату і підвищення температури прискорили біодеградацію і скоротили час її початку (з 27 до 8 днів). Збільшення активності біодеградації відобразилося на зміні виробництва біогазу, швидкості осідання та об'єму осаду». Так само в роботі [49], відмічено, що тепло є одним з основних побічних продуктів біологічного розкладання ТПВ.

Комплексний огляд рівня теплогенерації різними видами відходів, в тому числі твердими побутовими наведено в роботі [50]. Автори відмічають, що температура в сміттєзвалищах ТПВ може сягати 60-90 °C. Дослідження теплогенерації на полігонах ТПВ наведені також в роботі [51]. Ці дані є важливими вхідними параметрами для алгоритмів розрахунку теплових полів та використовуються для побудови емпіричних функцій, що інтегруються в комп'ютерні моделі. Причому, як відмічають автори, підвищення температури є більшими на випадок аеробної біодеградації аніж анаеробної. На даному факті наголошено в роботі [52]. Причому отримані значення для аеробної та анаеробної швидкості теплоутворення на полігоні 11,3 та 0,38 Вт/м³, відповідно.

В роботі [52] побудована та чисельно досліджено математичну модель температурного стану сховища ТПВ. Як показує вивчення наукової

літератури з питання теплогенерації сховищ ТПВ, вона (стаття) стала основою для багатьох наступних досліджень з даного напрямку. Функція генерації тепла в результаті біодеградаційних процесів визначалась авторами на основі обробки емпіричних даних, що є прикладом використання даних для параметризації алгоритмічних моделей. Як результат в [52] запропоновано функцію теплової генерації, графік якої схематично зображено на рис.1.5.

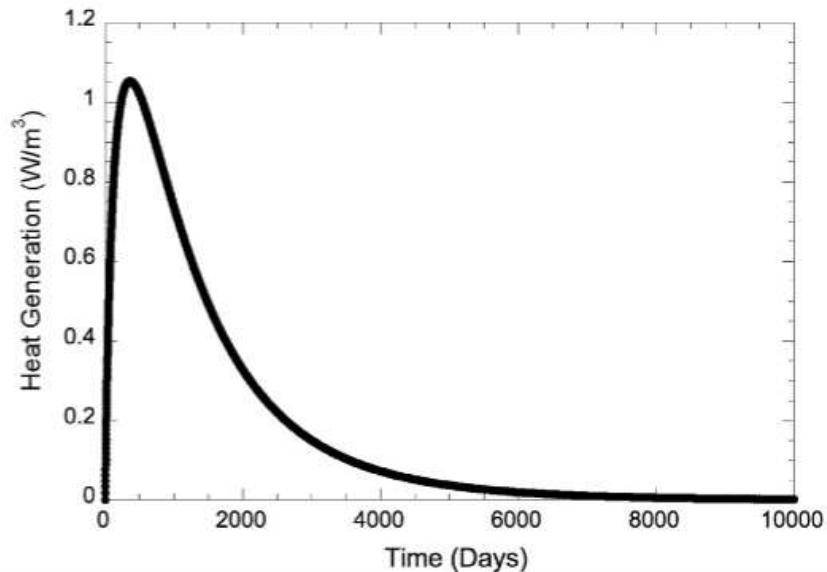


Рис. 1.5. Функція експоненційного зростання та спадання тепловиділення [52]

На рис.1.5 наведено залежність теплогенерації від часу. Однак інтенсивність теплогенерації залежить і від самої температури. Це пояснюється розвитком мікроорганізмів, які активно приймають участь в біодеградаційних процесах, що власне, і є джерелом виділення тепла. Зокрема, пікове тепловиділення спостерігається, коли температура відходів лежить в діапазоні 30-50 °C. Для температур відходів вище (від 50 °C до 80 °C) і нижче (від 30 °C до 0 °C) цього діапазону використовувалася лінійна функція. Починаючи з температури відходів нижче 0 °C і вище 80 °C, було встановлено нульову генерацію тепла. Результатом температурної залежності є функція з подвійною рампою, як показано на рис. 1.6, яка є типовим прикладом нелінійної залежності, що має бути реалізована програмно в чисельних алгоритмах розрахунку теплових потоків та генерації тепла. Функцію

теплогенерації у запропонованій формі, яка відображена на рис. 1.6 в розрахунках використано в [53] та в [54]. В роботі [55] показано, що функція генерації тепла значно залежить від початкових значень вологості та температури.

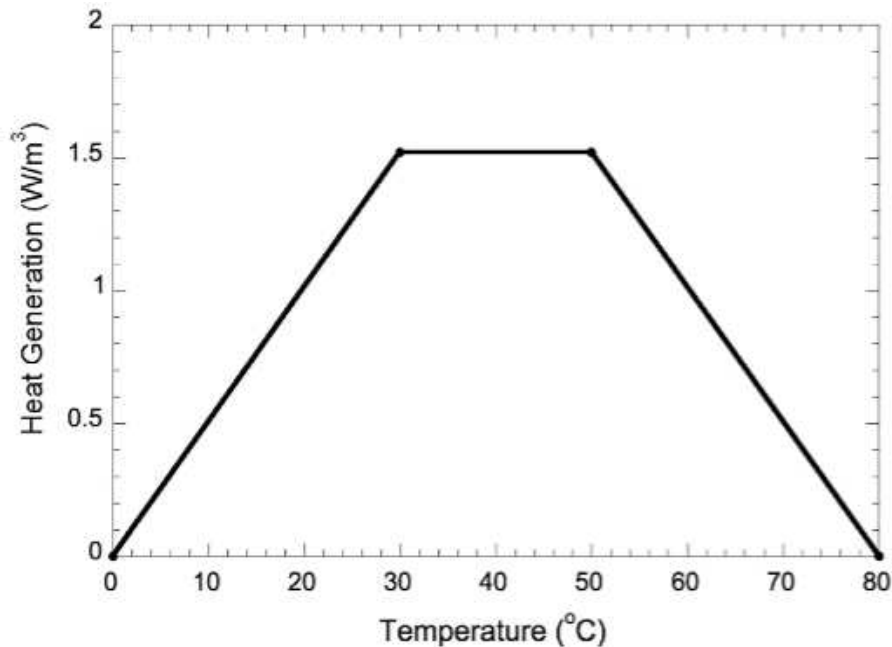


Рис. 1.6. Залежність інтенсивності генерації тепла від температури [52, рис. 3]

Однією із проблем звалищ ТПВ є їх просідання, що впливає на стійкість їх, як масивів пористих середовищ. Прогнозування вказаних процесів є важливим елементом моніторингу стану сховищ ТПВ і має враховувати нелінійність та взаємопов'язаність процесів, їх (процесів) взаємовпливи. В роботі [56] результати показали, що температура та насиченість мають значний вплив на осідання ТПВ і тому повинні бути враховані в моделях прогнозування осідання полігонів ТПВ.

Як відмічають автори [57], газ, згенерований із ТПВ складається із метану (CH_4) та вуглекислого газу (CO_2), а також з незначної кількості інших газів. Залежно від умов, частка метану може складати від 30% до 50%. В той же час в роботі [58] отримано концентрацію метану від 65% до 82% залежно

від умов. Ці дані є важливими для валідації алгоритмів моделювання газогенерації та міграції газів у пористому середовищі.

В роботі [59] наведено огляд підходів до математичного моделювання взаємозв'язаних процесів в ТПВ і відповідних інженерних рішень. В роботі [60] побудовано та досліджено математичну модель взаємозв'язаних процесів «консолідація-біодеградація» в ТПВ. При цьому розглянуто трифазне пористе середовище, що значно ускладнює чисельні розрахунки та вимагає розробки спеціалізованих алгоритмів для багатофазних систем. Аналогічно це стосується і роботи [61]. В роботі [57] представлена модель прогнозування просідань звалищ твердих побутових відходів в основі якої лежать процеси біодеградації. В статті обчислення просідань запропоновано проводити на основі наявних натурних експериментів та міркувань механіки пористих середовищ. В основу моделі біодеградації покладені диференціальні рівняння першого порядку.

В роботі [53] оцінено вплив температури відходів на розподіл вологи, виділення метану та осідання поверхні полігону. Осідання поверхні свідчить про те, що врахування впливу температури відходів на розкладання відходів є важливим для реалістичного прогнозування осідання відходів на полігонах. В цій же роботі в якості функції, яка описує процес генерації тепла, як результат біодеградаційних процесів, використано залежність з роботи [52].

В роботі [62] на основі припущення, що зміна коефіцієнта пористості зумовлена ефективним напруженням, ефектом повзучості та температурою, побудовано одновимірну нелінійну теорію консолідації, яка враховує тепловий ефект. Вплив температури враховано через ефект термічного розширення фаз пористого середовища. Однак в даній роботі не враховано біодеградаційних процесів, що обмежує застосовність її алгоритмів для комплексного моделювання на полігонах ТПВ, де всі процеси є взаємопов'язаними і потребують інтегрованих алгоритмічних рішень.

В біодеградаційній моделі автори [53] використали авторську функцію залежності коефіцієнта біодеградації від температури та вологості. При цьому

залежність від вологості лінійна (зі зростанням вологості біодеградаційні процеси посилюються), а від температури – нелінійна (існує значення температури при якому біодеградаційні процеси досягають свого максимуму). Аналогічно в роботі [54] враховано взаємний вплив генерації тепла на процеси біодеградації (див. рис.1.7). Адже рівень температури впливає на рівень мікробної активності [54]. Відмітимо, що використання залежностей відображених на рис. 1.7 в математичних моделях дозволяє «упустити» складний елемент моделювання мікробної динаміки і врахувати її в неявному вигляді.

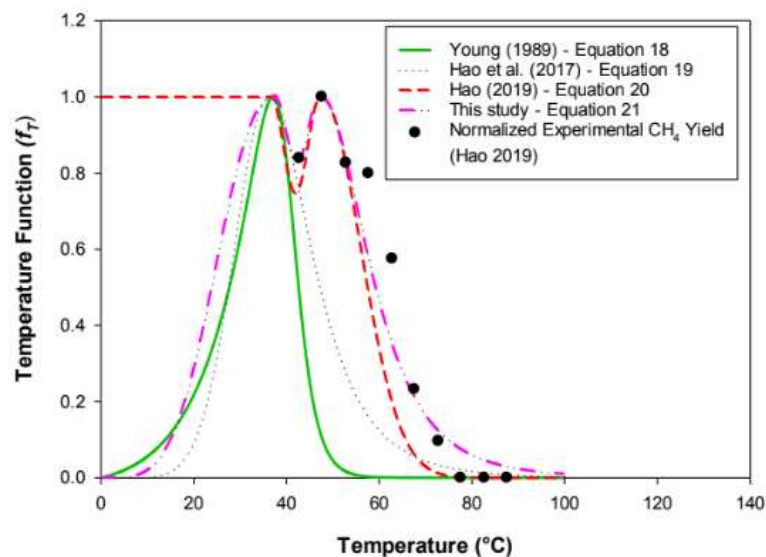


Рис. 1.7. Функції залежності впливу температури на розвиток мікробів в сховищах відходів [54]

В роботі [63] запропоноване вдосконалення моделі просідання звалища відходів в умовах промерзань та дії від’ємних температур. Запропонована авторами [63] модель просідання має явний вигляд, що спрощує її реалізацію в програмному забезпеченні та реалізацію відповідних обчислювальних алгоритмів. Також у формулі просідань врахований вплив біодеградаційних процесів як параметру моделі, що інтегрується в механістичні алгоритми. Подібні залежності використано, наприклад, в роботі [64].

В роботі [65] експериментально досліджено вплив на консолідаційні характеристики як високого вмісту харчових відходів у твердих побутових відходах, так і змінних температур. Загалом, стискуваність відходів залежить від вмісту харчових компонентів, а вплив температури призвів до двократного збільшення загального осідання.

В роботі [66] проведено натурні експерименти стосовно впливу температури на мікробну активність в зразках середовища відходів. Встановлено, що оптимальна температура для генерації метану в процесі біодеградації та діяльності мікробів становить приблизно 57 °C. Ці дані засвідчують важливість дослідження неізотермічності та для можливості керування вказаними процесами на звалищах відходів.

У статті [8] представлено чотири загальні підходи до дослідження осідання полігонів ТПВ, що включають лабораторні експерименти, моніторинг осідання на місці, теоретичний аналіз та чисельне моделювання. Автори статті класифікували існуючі моделі осідання на шість груп: механіки ґрунтів, реологічні, емпіричні, біодеградаційні, конститутивні та моделі багатофазного зв'язку. Порівнюються переваги і недоліки цих різних моделей та їх придатність.

В роботі [67] враховано температуру, як одного факторів безпечної експлуатації полігонів ТПВ. Вплив температури враховано шляхом розгляду температурно-залежних властивостей міцності на зсув. Для даного набору вхідних параметрів підвищена температура на полігоні сама по собі знижувала коефіцієнт запасу міцності максимум на 18%, тоді як під комбінованим впливом сейсмічності, неоднорідності та підвищеної температури він знижувався приблизно на 60%.

В роботі [68] побудовано та досліджено математичну модель теплового режиму сховища твердих побутових відходів. Розроблена модель застосована до об'єкта Газіпур, розташованого в Делі (Індія). Результат показує, що температура на всіх глибинах і в усі пори року виявилася вищою за температуру атмосфери. Максимальна різниця 33 °C спостерігалася в грудні,

а мінімальна – 22 °С у червні. Підвищення температури вище у верхніх шарах відходів, оскільки вони зазнають аеробної деградації.

Наведений аналіз наукових джерел засвідчує значний прогрес в дослідженні взаємопов'язаних процесів в сховищах ТПВ. Однак існують і «точки росту» для розвитку модельно-алгоритмічного підходу з метою його імплементації в інформаційні системи. Зокрема, наприклад відсутні застосування теорії ненасиченої консолідації стосовно сховищ ТПВ, а також залежності для визначення просідань не завжди є частиною відповідної крайової задачі.

1.3. Урахування тонких примежових шарів у комп'ютерному моделюванні: структура, параметризація, реалізація

При комп'ютерному моделюванні процесів у пористих середовищах, таких як полігони ТПВ або ґрунти, часто виникає необхідність урахування впливу тонких шарів матеріалу, що розташовані на межі основної пористої системи або між її різними частинами. Ці шари, незважаючи на малу товщину порівняно з розмірами основної області, можуть суттєво впливати на загальну поведінку системи, змінюючи гідрологічний, термічний, газовий та біохімічний режими. Урахування таких шарів у комп'ютерних моделях ставить специфічні задачі з точки зору представлення їх структури, параметризації властивостей та ефективної реалізації відповідних алгоритмів.

Важливість прогнозного моделювання стану пористих систем при наявності тонких верхніх шарів з інших матеріалів диктується кількома практично важливими аспектами та беззаперечними ефектами впливу таких шарів на процеси в таких пористих середовищах. Зокрема, це: – біофільтри для контролю емісії парникових газів в атмосферу зі сховищ ТПВ; – використання мульчування в агровиробництві; – використання обробітку ґрунту, при якому зверху утворюється шар який містить органічні рештки попереднього врожаю. В природних умовах такі шари наявні як продукт діяльності екосистеми.

Зокрема, якщо брати ліс, то шар опалого листя та хвої створює такий примежовий тонкий шар пористого середовища із термічними властивостями, відмінними від властивостей самого ґрунту та атмосфери. Внаслідок цього відбуваються зміни у теплообміні між ґрунтом та навколишнім середовищем, що може впливати на температурний режим ґрунту, мікробіологічні процеси та гідрологічні характеристики ґрунтового профіля. З точки зору комп'ютерного моделювання, урахування тонких шарів викликає значні обчислювальні труднощі через суттєву різницю в масштабах: товщина шару на порядки менша за характерний розмір основної області досліджень.

Одним із важливих напрямів використання покриттів є їх застосування на звалищах відходів для зменшення викидів метану. В роботі [69] відмічено, що створення систем біопокриття є новою методологією зменшення викидів метану (CH_4) зі звалищ відходів. Вимірювання викидів на експериментальних ділянках показали ефективність скорочення викидів CH_4 від 29 до 72% після впровадження систем біопокриття на трьох полігонах.

В роботі [70] фактично наведено огляд досягнень в системах покриття звалищ твердих побутових відходів. Відмічено, що системи покриття полігонів (ТПВ) еволюціонували від простого ґрунтового покриву до багатокomпонентних, майже непроникних систем, що забезпечують кращий контроль над інфільтрацією та викидами звалищного газу (ЗГ).

В роботі [71] досліджено можливості по окисленню метану (CH_4) і секвестрації залишкового вуглекислого газу (CO_2) у системі біогеохімічного покриття на звалищах відходів.

У сільському господарстві покриття набувають застосування, оскільки мають значний вплив на продуктивність агросистем. Польові експерименти [72] виявили, що залишки пластикової плівки можуть негативно впливати на властивості ґрунту та врожайність. Водночас дослідження [73] продемонструвало, що мульчування пластиковою плівкою та біорозкладною плівкою збільшує врожайність на 35,4% та 28,3% відповідно, а ефективність використання води зростає на 47,1% та 35,8%. Такі технології також мають

вплив на викиди парникових газів: за даними [74], викиди N_2O від вирощування картоплі на голій землі на 12,32%–41,03% перевищували показники ґрунту з плівковим мульчуванням.

В роботі [75] результати польових експериментів на кукурудзяних полях показали, що плівкове мульчування збільшило кумулятивні викиди CO_2 завдяки збільшенню температури та вологості ґрунту. Кумулятивні значення викиди N_2O були зменшені за рахунок мульчування плівкою. Обробка мульчуванням підвищила врожайність кукурудзи і покращили чистий економічний бюджет екосистеми відповідно порівняно з голою землею.

Дослідження [76] свідчить, що пластикове мульчування підвищує врожайність і чистий економічний прибуток, водночас зменшуючи викиди азоту. В роботі [77] досліджено впливи пластикового мульчування на перспективи збереження органічного вуглецю в ґрунті за умов повернення поживних решток від збору врожаю в ґрунт. Однак, впливу таких технологій на рівень викидів парникових газів там не досліджувалось. Такі дослідження, на основі аналізу 150-ти джерел, стосовно впливу мульчування на рівень органічного вуглецю ґрунту (ОВГ) та рівень викидів парникових газів наведено в роботі [78]. Автори відмічають, що вплив мульчування на потоки ОВГ і парникових газів відрізнявся в різних сільськогосподарських системах.

Окрім впливу на врожайність та викиди газів, покриття змінюють температурний режим ґрунту. В роботі [79] привернуто увагу до різниць в температурах повітря і безпосередньо поверхні ґрунту. Саме можливість таких відмінностей врахована в балансовій граничній умові [80].

Цікаве дослідження стосовно важливості температури саме поверхні ґрунту наведено в роботі [81]. Зокрема автори зробили спробу прослідкувати зв'язок між температурою поверхні ґрунту та рівнем ґрунтових вод. У цьому дослідженні проаналізували вплив температури поверхні ґрунту на зміни рівня ґрунтових вод у Бухарській області Узбекистану, використовуючи дані з 1991 по 2020 рік. Результати також свідчать про те, що сила зв'язку між сонячною радіацією та температурою поверхні ґрунту є дуже високою, з

коефіцієнтом кореляції 0,840. Аналіз також показав, що 53,5% змін рівня ґрунтових вод спостерігалися за допомогою регресійної моделі, що вказує на помірну кореляцію між рівнем ґрунтових вод і температурою поверхні ґрунту. Аналогічно в роботі [82] наведено дослідження впливу мульчування на рівень вологості в ґрунті.

В роботі [83] показано, що мульчування чорною та прозорою поліетиленовими плівками суттєво підвищує врожайність ярої кукурудзи (в середньому на 20%) в порівнянні з агротехнологіями «голої» землі. Водночас в роботі [84] відмічено, що мульчування поліетиленовою плівкою значно знизило вміст органічної речовини в ґрунті та значно збільшило викиди двох парникових газів. У результаті мульчування плівкою збільшило загальний потенціал глобального потепління на 12–82% порівняно з відсутністю мульчування, незалежно від змін ґрунту. Однак, при цьому врожайність збільшилась на 8-33% залежно від умов.

Теплопровідність ґрунту є ключовим фактором у визначенні температурного режиму лісових екосистем. Наявність тонкого примежового шару, такого як опале листя, суттєво впливає на процеси теплообміну між атмосферою та ґрунтом. Різні методи та моделі теплопровідності [85] ґрунту враховують його фізичні властивості, такі як вологість, щільність та гранулометричний склад. Дослідження показують, що теплофізичні властивості ґрунтів залежать від гранулометричного складу, вологи [86; 87], щільності, пористості [88] та вмісту органічних речовин.

Наявність тонкого примежового шару створює додатковий опір теплопередачі між атмосферою та ґрунтом. Цей шар діє як теплоізолятор, знижуючи швидкість теплопередачі та впливаючи на температурний режим верхніх шарів ґрунту. Дослідження показують, що лісові насадження знижують температуру поверхні ґрунту та зменшують амплітуду її коливань порівняно з відкритими ділянками. У статті [89] наведено результати досліджень, які показали, що лісові насадження сприяли зниженню температури ґрунту. Зокрема, температура поверхні зменшилася на 2,7 °C та

5,3 °C відповідно, температура на глибині 50 см – на 1,6 та 2,8 °C, а середня температура шару 0-50 см знизилася на 2,5 °C та 4,5 °C відповідно, порівняно із зональним чорноземом південним. Також встановлено, що зональний чорнозем південний характеризується більш різкими коливаннями температури в шарі 0-50 см порівняно з чорноземами під лісовими насадженнями. Крім того, вплив лісових насаджень на чорнозем південний зумовив підвищення теплофізичних характеристик верхніх горизонтів ґрунту у порівнянні із зональним чорноземом південним.

Параметризація властивостей тонких примежових шарів є окремою задачею. Властивості цих шарів (наприклад, теплопровідність, гідравлічна провідність, параметри біохімічних реакцій) можуть сильно відрізнятися від властивостей основного матеріалу і часто залежать від зовнішніх умов (температури, вологості). В рамках програмної реалізації це вимагає розробки алгоритмів для введення, зберігання та використання цих параметрів, можливо, з урахуванням їх просторової або часової мінливості (гетерогенність), що додає складності алгоритмам дискретизації та розв'язання.

Реалізація моделей з урахуванням тонких шарів в програмному забезпеченні включає:

- розробку архітектури даних для представлення геометрії з тонкими шарами та їх властивостей;
- вибір та реалізацію алгоритмів дискретизації, здатних обробляти області з різними масштабами або ефективно застосовувати міжфазні умови;
- імплементацію чисельних методів для розв'язання систем диференціальних рівнянь з коректним урахуванням граничних та міжфазних умов, що моделюють тонкий шар;
- розробку та інтеграцію алгоритмів для розрахунку специфічних процесів у тонкому шарі (наприклад, кінетика окислення метану) у загальну систему рівнянь;

- забезпечення стійкості та ефективності чисельних алгоритмів при наявності сильних градієнтів параметрів або розв'язків в області тонкого шару або на межі;
- розробку інтерфейсів для введення параметрів тонких шарів та візуалізації результатів моделювання.

1.4. Проблеми комп'ютерного моделювання природних процесів: обчислювальна складність, точність, масштабування

Комп'ютерне моделювання природних процесів у пористих середовищах з органічною складовою, зокрема на полігонах ТПВ, є складною науково-прикладною задачею з точки зору комп'ютерних наук. Ефективне прогнозування та моніторинг цих процесів вимагає розробки та реалізації складних модельно-алгоритмічних підходів, які стикаються з низкою фундаментальних проблем, що стосуються обчислювальної складності, точності та масштабування.

Обчислювальна складність моделювання явищ і процесів у сховищах відходів обумовлюється насамперед нелінійною та сильною взаємозалежністю їх параметрів. Зміна температури, власне як і вологості, впливає на інтенсивність біодеградаційних процесів. Важливість вологості стосовно її впливу на процеси біодеградації, а отже – і на процеси газогенерації та інтенсивності виділення парникових газів, досліджено в роботах [53; 90]. В свою чергу, сам процес біодеградації супроводжується виділенням тепла та парникових газів, що також впливає на тепловий та вологісний режими пористого середовища. Більше того – біодеградація впливає на зменшення об'єму твердої фази, а отже – є однією із причин його просідань [91]. Математичні моделі, що описують такі взаємозв'язані процеси, представлені системами нелінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних (ДРЧП). Розв'язання цих систем за допомогою чисельних методів (таких як метод скінченних елементів, метод скінченних різниць) призводить

до необхідності розв'язувати на кожному часовому кроці великі системи нелінійних алгебраїчних рівнянь. Кількість рівнянь у таких системах може сягати кількох тисяч і більше (як у моделях, що включають понад тринадцять змінних, як згадано у роботах [13; 95]). Це вимагає розробки та використання ефективних ітераційних алгоритмів для розв'язання нелінійних систем та оптимізованих методів для роботи з великими розрідженими матрицями, що виникають після лінеаризації та дискретизації. Обчислювальна складність зростає нелінійно зі збільшенням розміру розрахункового домену та деталізації моделі (кількості вузлів сітки).

Точність комп'ютерного моделювання природних процесів залежить від декількох чинників. По-перше, це адекватність самої математичної моделі у відображенні фізичних, хімічних та біологічних процесів. Існуючі математичні моделі, наприклад, для газогенерації [92], мають різні порядки та обмеження. Деякі комплексні моделі, як СТНВМ [95], можуть використовувати емпіричні залежності (наприклад, для зв'язку біодеградації з просіданням), що обмежує їх універсальність та точність за межами умов, для яких вони були калібровані. На противагу цьому, прагнення до більш строгого математичного формулювання, наприклад, на основі теорії ненасиченої консолидації з кінематичними граничними умовами (як задача Стефана) [94], може підвищити універсальність моделі, але вимагає розробки відповідних алгоритмів дискретизації та розв'язання. По-друге, на точність впливають числові похибки, що виникають внаслідок дискретизації по простору та часу, а також похибки збіжності ітераційних алгоритмів. По-третє, суттєвим джерелом неточностей є невизначеність вхідних параметрів моделі, кількість яких може бути великою, а їх теоретичне визначення – неможливим. Як зазначено у [8], різні типи моделей осідання (механіки ґрунтів, реологічні, емпіричні, біодеградаційні) мають свої переваги та обмеження, що також впливає на точність прогнозу. Оцінка та підвищення точності обчислювальних результатів вимагає розробки алгоритмів валідації моделей на основі

експериментальних даних та аналізу чутливості результатів до варіацій параметрів.

Масштабування комп'ютерних моделей є критично важливою проблемою для їх практичного застосування, особливо при переході від лабораторних масштабів до реальних розмірів полігонів ТПВ та при необхідності довгострокового прогнозування або моделювання в режимі реального часу. Збільшення розмірів розрахункової області або вимога більш детального просторового розрізнення (для підвищення точності або урахування локальних неоднорідностей, як-от тонкі шари) призводить до експоненційного зростання обсягу обчислень та вимог до оперативної пам'яті. Моделі з великою кількістю диференціальних рівнянь, що описують складні взаємопов'язані процеси, стають обчислювально дуже дорогими. Для подолання цих обмежень необхідна розробка та реалізація масштабованих алгоритмів, що ефективно використовують ресурси сучасних багатопроцесорних та розподілених обчислювальних систем. Це включає паралелізацію алгоритмів дискретизації, складання систем рівнянь та їх розв'язання, а також оптимізацію обміну даними між обчислювальними вузлами. Можливість масштабування алгоритмів є ключовою для побудови ефективного програмного забезпечення для моніторингу та прогнозування, зокрема інформаційних систем, які можуть працювати в режимі, наближеному до реального часу.

Незважаючи на значний прогрес у створенні моделей прогнозування змін стану пористих середовищ, низка важливих аспектів залишається відкритою. Зокрема, традиційні підходи до моделювання не завжди враховують вплив змінної вологості та температури, складні кінетичні механізми біодеградації органічної складової, а також специфічні граничні умови, що суттєво впливають на точність прогнозування. Оцінка та підвищення точності обчислювальних результатів вимагає розробки алгоритмів валідації моделей на основі експериментальних даних та аналізу чутливості результатів до варіацій параметрів. Це особливо актуально для

модельовання ґрунтових процесів, змін поверхні полігонів ТПВ, викидів парникових газів та динаміки органічного вуглецю.

Ґрунтуючись на аналізі наукових джерел стосовно тонких примежових шарів в агро-екосистемах та сховищах ТПВ відмітимо наступні аспекти. По-перше, дослідження покриттів ТПВ перебувають на стадії матеріалознавства та натурних експериментів. По-друге, впливи використання тонких покриттів в агросекторі є різнонаправленими: відбувається збільшення врожайності, але відбувається і зростання негативного впливу на кліматичні зміни – викиди принаймні двох основних парникових газів (CH_4 та CO_2) зростають. По-третє, в існуючих інформаційних системах прогнозування стану агро-систем, в яких однією із компонент є пористі середовища з органічною складовою, урахування тонких примежових шарів практично відсутнє. Це ставить перед нами актуальну задачу досліджень в даному напрямку, починаючи від математичних основ модельовання.

Ґрунтуючись на аналізі математичних основ сучасних інформаційних систем для управління ТПВ відмітимо наступне. Деякі з пропонованих математичних моделей ґрунтуються на просторових рівняннях напружено-деформівного стану пористих середовищ. Такі моделі є крайовими задачами для систем диференціальних рівнянь в частинних похідних, яких, залежно від деталізації, в цій системі є більше тринадцяти. Однак такі моделі разом з тим містять і велику кількість параметрів, повністю теоретичне визначення яких є неможливим. Інший тип моделей – теоретично-емпіричний. Як правило такі моделі пропонують загальні залежності для рівня газогенерації або ступеня просідання сховища ТПВ, однак виведені дані залежності, а отже – і відкалібровані для конкретних сховищ. Тому говорити про їх (моделей) універсальність в даному випадку не доводиться.

Проблеми обчислювальної складності, точності та масштабування є центральними викликами при розробці комп'ютерних моделей та програмного забезпечення для прогнозування процесів у пористих середовищах з органічною складовою. Їх подолання вимагає вдосконалення модельно-

алгоритмічного підходу, розробки нових або адаптації існуючих чисельних алгоритмів для ефективного розв'язання систем зв'язаних нелінійних диференціальних рівнянь на сучасних обчислювальних платформах.

Висновки до розділу 1

Отже, ґрунтуючись на аналізі наукових джерел та враховуючи аналіз проблемних аспектів, розвиток інформаційних технологій стосовно прогнозування процесів та станів пористих середовищ з органічною складовою ми бачимо у вирішенні наступних завдань:

1. Дослідити сучасні інформаційні системи, математичні та комп'ютерні моделі для отримання прогнозних даних, що використовуються для оцінки процесів і стану пористих середовищ з органічною складовою.

2. Розробити програмне забезпечення та застосувати у ньому метод отримання прогнозних даних вологості та змінної пористості в результаті біодеградаційних процесів для середовищ з органічною складовою.

3. Застосувати в розроблюваному програмному забезпеченні обчислювальні підходи, що базуються на теорії ненасиченої консолідації, для отримання прогнозних даних про процеси та стани пористих середовищ з органічною складовою.

4. Запропонувати комп'ютерні моделі та програмну реалізацію для отримання прогнозних даних осідання поверхні полігонів твердих побутових відходів, об'ємів газогенерації та виділеного тепла.

5. Розробити методи комп'ютерного моделювання та програмні компоненти для врахування впливу тонких примежових шарів у пористих середовищах з органічною складовою, що дозволяють інтегрувати ці ефекти у прогнозні інформаційні системи.

6. Розробити та реалізувати програмний комплекс для інтегрованого моделювання та прогнозування станів пористих середовищ з органічною складовою з урахуванням їх різноманітних типів та умов.

РОЗДІЛ 2. МАТЕМАТИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ У ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ З ОРГАНІЧНОЮ СКЛАДОВОЮ

2.1. Формалізація кінематичних граничних умов для побудови комп'ютерних моделей ненасиченої консолідації побутових відходів

Для ефективної побудови та реалізації цифрових моделей, призначених для прогнозування процесів у пористих середовищах з органічною складовою, критично важливим є адекватна формалізація всіх визначальних рівнянь та граничних умов. У контексті моделювання просідання сховищ побутових відходів, значна зміна положення поверхні, що відбувається внаслідок ущільнення пористого середовища та біодеградації його (середовища) органічної складової, обумовлює необхідність застосування граничної умови для рухомої верхньої межі пористого середовища. Точне математичне описання та подальша обчислювальна формалізація цієї умови є ключовим кроком для розробки надійного програмного забезпечення моніторингу та прогнозування досліджуваних процесів.

Загалом, математична модель, як передумова формування цифрової прогнозної моделі просідання поверхні сховища твердих побутових відходів в умовах ненасиченої консолідації та біодеградації буде містити: – рівняння для надлишкових тисків в поровій рідині враховуючи, що процеси біодеградації супроводжуються зміною пористості; – рівняння для надлишкових тисків в поровому газі враховуючи, що процеси біодеградації супроводжуються виділенням парникових газів; – рівняння біодеградації з урахуванням впливу змінних вологості та температури пористого середовища; – рівняння, яке описує зміну температури пористого середовища, враховуючи, що біодеградаційні процеси є джерелом виділення теплової енергії; – рівняння або залежність з якої визначається вологість пористого середовища; – кінематичну граничну умову, з якої однозначно визначається положення верхньої рухомої межі пористого середовища, яке ущільнюється в умовах біодеградації

органічної складової. Зазначені рівняння та залежності потребують доповнення відповідними початковими та граничними умовами, формалізованими для чисельного розв'язання, виходячи із вимог коректності задач математичної фізики та специфіки обчислювального моделювання.

Робіт, в яких розвинуто теорію консолідації ненасичених пористих середовищ на даний момент є досить багато. Серед них можна виокремити [96; 97; 98; 99; 100; 101]. Загальною характеристикою вищезгаданих робіт є застосування класичної теорії консолідації ненасичених ґрунтів, яка запропонована в працях Д. Г. Фредлунда [102]. Однозначно, що кожна з нових робіт пропонує свій розвиток теорії консолідації ненасичених пористих середовищ. Наприклад, робота [103] сфокусована на дослідженнях одновимірної неізотермічної консолідації ненасиченого ґрунту. В роботі [99] досліджено випадок двошарового ґрунту в умовах ненасиченості-насиченості. Однак, більшість існуючих моделей ненасиченої консолідації не передбачають інтеграції та формалізації впливу біодеградації на зміну об'єму та положення верхньої рухомої межі, а також пов'язаних з нею процесів тепло- та газогенерації. Відсутність комплексного підходу до формалізації цих взаємопов'язаних процесів створює суттєві обмеження для побудови повноцінних цифрових моделей, що дозволяють точно прогнозувати довгострокову поведінку сховищ відходів. Більше того, при калібруванні відповідних математичних моделей, використовуючи їх комп'ютерні дискретизації, вказані параметри, які пов'язані з біодеградацією, теплогенерацією, виділенням газів та просіданнями – будуть також відсутні.

Запропонований в дисертаційному дослідженні підхід до моделювання просідання сховищ відходів, їх теплового стану та процесу генерації парникових газів розпочнемо висвітлювати з кінематичної умови, як інструменту визначення положення верхньої рухомої межі в часі. Не зменшуючи загальності розглянемо одновимірну задачу (рис.2.1), де верхня межа є рухомою і описується рівнянням $x = l(t)$, а нижня – не змінює своє

положення в часі. Тобто, аналогічно [104], припустимо, що просідання відбувається лише у вертикальному напрямку.

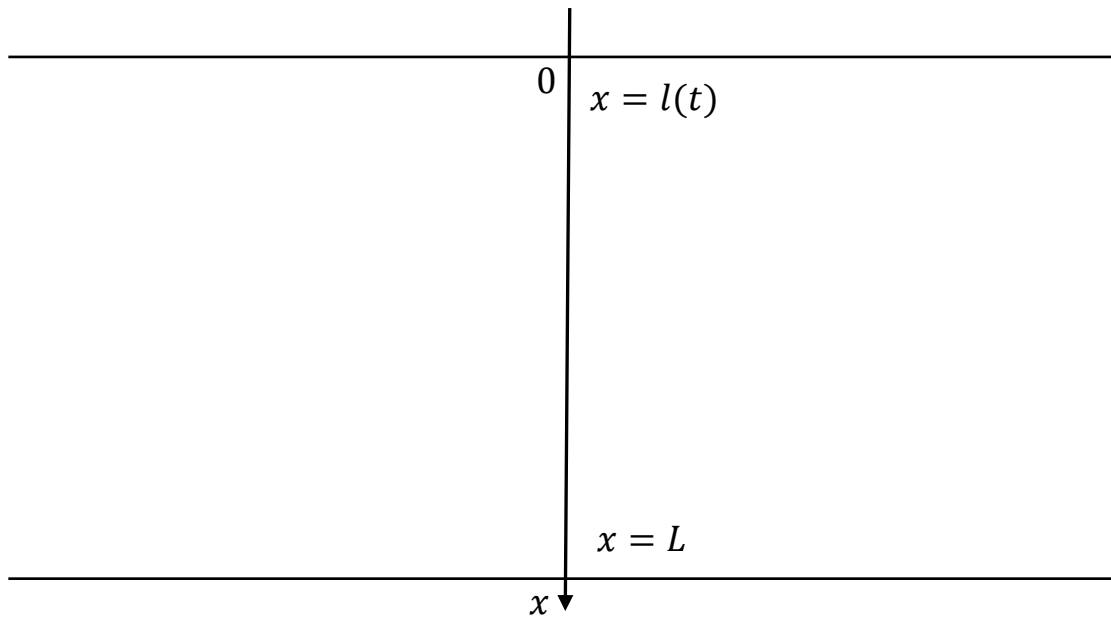


Рис. 2.1. Шар пористого середовища змінної товщини

Для формалізації кінематичної умови просідання зробимо наступні припущення, які є прийнятними для спрощення моделі стосовно її чисельної реалізації.

Припущення 1. Відносні об'ємні деформації матеріалу сховища відходів, як пористого середовища, внаслідок зміни напружено-деформівного стану (НДС) та внаслідок біодеградаційних процесів є незалежними один від одного і сумарно дають загальну об'ємну деформацію.

Припущення 2. Нехтуємо термічними напруженнями та впливом температури на зміну густини фаз пористого середовища.

Тоді, по аналогії з [94] маємо

$$\frac{dl(t)}{dt} = \int_{l(t)}^L \frac{d\varepsilon(z, t)}{dt} dz = \int_{l(t)}^L \left(\frac{d\varepsilon_\delta(z, t)}{dt} + \frac{d\varepsilon_{ws}(z, t)}{dt} \right) dz, \quad (2.1)$$

де інтегрування виконується по вертикальному відрізку $[l(t); L]$, $l(t)$ – верхня межа пористого середовища, L – нижня межа пористого середовища, $\varepsilon_\delta(x, t)$, $\varepsilon_{ws}(x, t)$ – відносні об'ємні деформації пористого середовища

внаслідок зміни напружено-деформівного стану та біодеградації відповідно. Відомо, що умова (2.1) виводиться із інтегральної суми

$$\frac{l(t + \Delta t) - l(t)}{\Delta t} = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\varepsilon_{\delta,i}(t + \Delta t) - \varepsilon_{\delta,i}(t)}{\Delta t} + \frac{\varepsilon_{ws,i}(t + \Delta t) - \varepsilon_{ws,i}(t)}{\Delta t} \right) \Delta z_i,$$

де m – кількість фрагментів об'ємами V_i ($i = \overline{1, m}$) пористого середовища, які покривають вертикальний проміжок $[l(t); L]$.

Далі, приймаючи до уваги Припущення 1, отримаємо

$$\begin{aligned} V_i(t) - V_i(t + \Delta t) = & V_{w,i}(t) - V_{w,i}(t + \Delta t) + V_{g,i}(t) - V_{g,i}(t + \Delta t) + \\ & + (1 - \beta)(W_i(t)V_i(t) - W_i(t + \Delta t)V_i(t + \Delta t)), \end{aligned} \quad (2.2)$$

де $W_i(t)$ – відносний об'ємний вміст органічної складової у виділеному фрагменті (розмірність величини $\frac{m^3}{m^3}$); $V_{w,i}(t)$, $V_{g,i}(t)$ – об'єми порової рідини та газу у відповідному фрагменті пористого середовища; $\beta \in [0; 1]$ – відносний коефіцієнт, який показує який відносний об'єм біодегратованих решток залишається у вигляді пустот (якщо, наприклад, $\beta = 1$, то це означає, що на місці біодегратованих решток залишаються пустоти, їх не займає тверда фаза пористого середовища і це не впливає на зміну об'єму виділеного фрагменту пористого середовища в часі). Враховуючи, що $\Delta V_i = V_i(t) - V_i(t + \Delta t)$, з (2.2) отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{\Delta V_i}{V_i(t)} = & \frac{V_{w,i}(t) - V_{w,i}(t + \Delta t)}{V_i(t)} + \frac{V_{g,i}(t) - V_{g,i}(t + \Delta t)}{V_i(t)} \\ & + (1 - \beta)(W_i(t) - W_i(t + \Delta t)) + (1 - \beta)W_i(t + \Delta t) \frac{\Delta V_i}{V_i(t)}. \end{aligned}$$

Оскільки за визначенням відносної об'ємної деформації пористого середовища $\frac{\Delta V_i}{V_i(t)} = \Delta \varepsilon_i$, то

$$\begin{aligned} \Delta \varepsilon_i = & \frac{V_{w,i}(t) - V_{w,i}(t + \Delta t)}{V_i(t)} + \frac{V_{g,i}(t) - V_{g,i}(t + \Delta t)}{V_i(t)} \\ & + (1 - \beta)(W_i(t) - W_i(t + \Delta t)) + (1 - \beta)W_i(t + \Delta t)\Delta \varepsilon_i, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & (1 - (1 - \beta)W_i(t + \Delta t))\Delta\varepsilon_i = \\ & = - \left(\frac{1}{V_i(t)} \frac{dV_{w,i}(t)}{dt} + \frac{1}{V_i(t)} \frac{dV_{g,i}(t)}{dt} + (1 - \beta) \frac{dW_i(t)}{dt} \right) \Delta t, \end{aligned} \quad (2.3)$$

де у вищенаведеному співвідношенні знехтувано нескінченно малими вищих порядків (при $\Delta t \rightarrow 0$).

Згідно з теорією ненасиченої консолідації Д.Г. Фредлунда [102] ми отримаємо

$$\frac{1}{V_i(t)} \frac{dV_{g,i}(t)}{dt} = m_{1k}^g \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + m_{2k}^g \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t}, \quad (2.4)$$

де δ – повне напруження; m_{1k}^g та m_{2k}^g – коефіцієнти зміни об'єму газової фази, які корелюють зі зміною чистого напруження $(\delta - u_g)$ та всмоктуючого тиску $(u_g - u_w)$ відповідно [103];

$$\frac{1}{V_i(t)} \frac{dV_{w,i}(t)}{dt} = m_{1k}^w \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + m_{2k}^w \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t}, \quad (2.5)$$

де m_{1k}^w та m_{2k}^w – коефіцієнти зміни об'єму водної фази, які корелюють зі зміною чистого напруження $(\delta - u_g)$ та всмоктуючого тиску $(u_g - u_w)$, відповідно.

Враховуючи залежності (2.4), (2.5) із (2.3) отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\varepsilon_i}{\Delta t} = & - \frac{1}{1 - (1 - \beta)W_i(t + \Delta t)} \left(m_{1k}^w \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + m_{2k}^w \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t} + \right. \\ & \left. + m_{1k}^g \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + m_{2k}^g \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t} + (1 - \beta) \frac{dW_i(t)}{dt} \right) \end{aligned}$$

або (при $\Delta t \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon_i}{dt} = & - \frac{1}{1 - (1 - \beta)W_i(t)} \left((m_{1k}^w + m_{1k}^g) \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + \right. \\ & \left. + (m_{2k}^w + m_{2k}^g) \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t} + (1 - \beta) \frac{dW_i(t)}{dt} \right). \end{aligned}$$

Підставляючи вище отриману рівність в (2.1), маємо

$$\begin{aligned} \frac{dl(t)}{dt} = - \int_{l(t)}^L \frac{1}{1 - (1 - \beta)W(z, t)} & \left((m_{1k}^w + m_{1k}^g) \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + \right. \\ & \left. + (m_{2k}^w + m_{2k}^g) \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t} + (1 - \beta) \frac{\partial W(z, t)}{\partial t} \right) dz. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Умова (2.6) являє собою ключовий елемент математичної моделі, що описує швидкість просідання верхньої поверхні сховища з урахуванням як консолідаційних процесів, так і біодеградації. Ця інтегральна форма є вихідною для розробки чисельних алгоритмів, які враховують рух границі при розв'язанні зв'язаної системи рівнянь моделі. Враховуючи, що

$$W(x, t) = \frac{1}{\rho_{ws}} m_{ws}(x, t)$$

з умови (2.6) отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{dl(t)}{dt} = - \int_{l(t)}^L \frac{1}{1 - \frac{(1 - \beta)}{\rho_{ws}} m_{ws}(z, t)} & \left((m_{1k}^w + m_{1k}^g) \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + \right. \\ & \left. + (m_{2k}^w + m_{2k}^g) \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t} + \frac{(1 - \beta)}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}(z, t)}{\partial t} \right) dz. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Тут ρ_{ws} – густина органічних відходів; $m_{ws}(x, t)$ – маса органічних відходів в одиниці об'єму пористого середовища (розмірність та ж сама, що і в густини).

Формалізація у вигляді рівняння (2.7) є обов'язковою умовою для подальшої дискретизації моделі та розробки стійких і ефективних чисельних методів розв'язання, що є центральним завданням при створенні програмного забезпечення для прогнозування. Дана умова забезпечує коректне відстеження положення верхньої межі при змінах об'єму, викликаних як механічними факторами, так і біохімічними процесами.

2.2. Модифікації рівнянь ненасиченої консолідації з урахуванням біодеградації органічних компонентів

Як показано у попередньому розділі, формалізація кінематичної граничної умови (2.7), що описує просідання верхньої межі $l = l(t)$ залежить від зміни в часі надлишкових тисків $u_g = u_g(x, t)$ та $u_w = u_w(x, t)$ в газовій та рідкій фазах пористого середовища, а також зміни маси органічної його (середовища) складової. Для побудови комплексної цифрової моделі, що дозволяє прогнозувати поведінку сховищ побутових відходів, необхідно модифікувати стандартні визначальні рівняння ненасиченої консолідації, включивши до них вплив біодеградаційних процесів. Ці модифіковані рівняння формують математичну основу для подальшої розробки чисельних алгоритмів та програмного забезпечення.

Для виведення рівняння динаміки газової компоненти в пористому середовищі скористаємось підходом, описаним в [103]. Його особливість – використання закону збереження не для об'єму газової компоненти, а для її маси. Тоді маємо

$$\frac{\partial(M_g/V_0)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v}_g) + f_g, \quad (2.8)$$

де $\mathbf{v}_g$ – вектор-функція потоку газу в порах пористого середовища; $M_g = \rho_g V_g$ – маса газу; ρ_g – густина газу; V_g – об'єм газу; V_0 – початковий об'єм елемента ґрунту; f_g – функція джерела газу в пористому середовищі внаслідок біодеградаційних процесів органічної складової, $[f_g] = \frac{\text{кг}}{\text{м}^3 \cdot \text{доба}}$ [105].

Припустимо, що величина потоку газу в пористому середовищі описується відповідно до закону Фіка. Тоді

$$\mathbf{v}_g = -k_g \nabla u_g, \quad (2.9)$$

де k_g – коефіцієнт «газопровідності» пористого середовища (в оригіналі закону Фіка для газів – коефіцієнт дифузії газів в пористому середовищі); u_g – функція надлишкового тиску газу в порах пористого середовища, яка в даних

моделях ущільнення пористого середовища визначається як потенціальна функція руху газу.

Далі, враховуючи (2.9), а також що $M_g = \rho_g V_g$, з (2.8) ми отримаємо

$$\frac{\partial(\rho_g V_g / V_0)}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho_g k_g \nabla u_g) + f_g,$$

$$\frac{V_g}{V_0} \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \rho_g \frac{\partial(V_g / V_0)}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho_g k_g \nabla u_g) + f_g.$$

Враховуючи (2.4), з вищенаведеного рівняння отримаємо

$$\frac{V_g}{V_0} \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \rho_g m_{1k}^g \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + \rho_g m_{2k}^g \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho_g k_g \nabla u_g) + f_g.$$

Аналогічно до [103]

$$\rho_g = \frac{M \cdot \hat{u}_g}{R(T + T_k)},$$

де $\hat{u}_g = u_g + u_{atm}$, u_{atm} – атмосферний тиск; M – молекулярна маса порового газу; R – універсальна газова стала; T – температура; T_k – початкова абсолютна температура. Тоді отримаємо

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} = \frac{M}{R(T + T_k)^2} \left(\frac{\partial u_g}{\partial t} (T + T_k) - \frac{\partial T}{\partial t} \hat{u}_g \right).$$

Далі нам потрібно знайти співвідношення V_g / V_0 . Можна йти двома шляхами. Перший запропонований в [103]. Згідно даної роботи маємо

$$V_g = (1 - s) \sigma V_0,$$

де σ – пористість пористого середовища, $s \in [0; 1]$ – насиченість пористого середовища. Тоді

$$\frac{V_g}{V_0} = (1 - s) \sigma.$$

Для застосування вказаного підходу потрібно знати насиченість пористого середовища та власне саму пористість. Якщо відомо всмоктуючий тиск $p = u_g - u_w$, то, використовуючи, наприклад, модель ван Генухтена [106, формула (20)] для ненасичених пористих середовищ, зможемо знайти його (середовища) вологість. Зміна пористості буде обумовлюватись впливом

біодеградаційних процесів та власне процесів ущільнення. Врахування цих залежностей є важливим аспектом алгоритмічної реалізації.

Інший підхід полягає у застосуванні власне співвідношення

$$\frac{d(V_g/V_0)}{dt} = m_{1k}^g \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + m_{2k}^g \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t}.$$

Знаючи початкове значення відношення V_g/V_0 ми зможемо його знайти в будь-який момент часу із вищенаведеного диференціального рівняння.

В подальших викладках вважаємо $V_g/V_0 = (1 - s)\sigma$.

Отже, отримаємо

$$(1 - s)\sigma \frac{M}{R(T + T_k)^2} \left(\frac{\partial u_g}{\partial t} (T + T_k) - \frac{\partial T}{\partial t} \hat{u}_g \right) + \\ + \rho_g m_{1k}^g \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + \rho_g m_{2k}^g \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho_g k_g \nabla u_g) + f_g.$$

Вважаючи, що загальний напружено-деформований стан пористого середовища не змінюється в часі, тобто $\frac{\partial \sigma}{\partial t} = 0$, остаточно отримаємо

$$\left((1 - s)\sigma \frac{M}{R(T + T_k)^2} - \rho_g m_{1k}^g + \rho_g m_{2k}^g \right) \frac{\partial u_g}{\partial t} - \\ - \rho_g m_{2k}^g \frac{\partial u_w}{\partial t} - (1 - s)\sigma \frac{M \hat{u}_g}{R(T + T_k)^2} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho_g k_g \nabla u_g) + f_g.$$

Для виведення рівняння динаміки рідкої компоненти в пористому середовищі аналогічно скористаємось підходом, описаним в [103]. Однак, знехтуємо явищами термічного розширення фаз пористого середовища. Густина ρ_w порової рідини приймемо сталою. Тоді маємо

$$\frac{\partial(M_w/V_0)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_w \mathbf{v}_w) \quad (2.10)$$

де $\mathbf{v}_w$ – вектор-функція потоку порової рідини в порах пористого середовища; $M_w = \rho_w V_w$ – маса порової рідини; ρ_w – густина порової рідини; V_w – об'єм порової рідини; V_0 – початковий об'єм ґрунтового елемента. Припустимо, що

величина потоку порової рідини в пористому середовищі в ненасиченому випадку описується законом Дарсі-Клюта. Тоді

$$\mathbf{v}_w = -k_w \nabla h_w, \quad (2.11)$$

де k_w – коефіцієнт вологоперенесення, який залежить як від пористості так і від вологості; h_w – функція надлишкового напору в поровій рідині в порах пористого середовища, яка в даних моделях ущільнення пористого середовища визначається як потенціальна функція руху самої рідини і $h_w = \frac{u_w}{\gamma_w}$. Тут $\gamma_w = \rho_w g$ – питома вага порової рідини, g – прискорення вільного падіння.

Далі, враховуючи (2.11), а також що $M_w = \rho_w V_w$, з (2.10) отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_w V_w / V_0)}{\partial t} &= \nabla \cdot \left(\rho_w \frac{k_w}{\gamma_w} \nabla u_w \right), \\ \frac{\partial(V_w / V_0)}{\partial t} &= \nabla \cdot \left(\frac{k_w}{\gamma_w} \nabla u_w \right). \end{aligned}$$

Враховуючи (2.5) з вищенаведеного рівняння отримаємо

$$m_{1k}^w \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + m_{2k}^w \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{k_w}{\gamma_w} \nabla u_w \right).$$

Далі аналогічно вважаючи що загальний напружено-деформований стан пористого середовища не змінюється в часі, тобто $\frac{\partial \sigma}{\partial t} = 0$, остаточно отримаємо

$$(m_{2k}^w - m_{1k}^w) \frac{\partial u_g}{\partial t} - m_{2k}^w \frac{\partial u_w}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{k_w}{\gamma_w} \nabla u_w \right).$$

Отримані рівняння, разом з рівняннями теплоперенесення, кінетики біодеградації та відповідними початковими та граничними умовами (включаючи кінематичну умову для рухомої межі), формують крайову задачу для системи нелінійних рівнянь. Розробка та реалізація чисельних алгоритмів для розв'язання цієї складної, нелінійної та зв'язаної системи є основним викликом та предметом дослідження з точки зору комп'ютерних наук, спрямованого на створення надійного програмного забезпечення для прогнозування.

2.3. Обчислювальна модель вологоперенесення із урахуванням біодеградаційних процесів

Якісне моделювання процесів вологоперенесення є критично важливим елементом прийняття управлінських рішень стосовно експлуатації сховищ побутових відходів, оскільки вологість суттєво впливає на інтенсивність біодеградації, тепловий режим та механічну поведінку пористого середовища.

Для модифікації рівняння вологоперенесення в умовах біодеградації скористаємось результатами роботи [107]. Розглянемо пористе середовище зі змінною пористістю $\sigma(x, t)$. Тут x – просторова змінна, t – час. Тверда фаза містить водонерозчинні частинки та частинки, які піддаються біодеградації. В даному випадку припустимо, що зміна пористості обумовлена лише зміною маси і, відповідно, об'єму органічної складової в результаті біодеградації. З метою врахування змінної пористості за невідому приймемо функцію насичення (інколи – відносна вологість) пористого середовища

$$s(x, t) = \frac{\theta(x, t)}{\sigma(x, t)}.$$

Наявність залишкової (мінімальної) вологості θ_{min} в пористому середовищі буде враховано в подальшому через залишкове насичення s_r .

На відміну від роботи [107] знехтуємо залежністю густини ρ_w порової рідини від концентрації розчинених в ній хімічних елементів, а також від температури. Також знехтуємо явищами хімічного та термічного осмосу, а також термічним розширенням фаз пористого середовища.

Тоді з [107, рівняння (6)] маємо

$$\sigma \frac{\partial s}{\partial t} + s \frac{d\sigma}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_p \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial x} + s \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial k_w}{\partial x},$$

k_w – коефіцієнт вологоперенесення, який в даному випадку залежить від насиченості; $D_p = -k_w \partial \psi / \partial \theta$ – коефіцієнт дифузії ґрунтової вологи; ψ – потенціал ґрунтової вологи.

Враховуючи припущення, що зміна пористості залежить лише від об'ємної концентрації $W = W(x, t)$ органічної складової пористого середовища, у вищенаведеному рівнянні отримаємо

$$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{\partial \sigma}{\partial W} \frac{\partial W}{\partial t}, \quad \frac{\partial \sigma}{\partial x} = \frac{\partial \sigma}{\partial W} \frac{\partial W}{\partial x}.$$

Внаслідок зміни $W = W(x, t)$ змінюється пористість $\sigma = \sigma(x, t)$ пористого середовища. При цьому зменшення $W = W(x, t)$ в часі призводить до збільшення пористості. Тоді, по аналогії з роботою [94], маємо

$$\sigma(x, t + \Delta t) = \sigma(x, t) - \beta \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} \Delta t,$$

де $\beta \in [0; 1]$ – відносний коефіцієнт, який показує який відносний об'єм біодеградованих решток залишається у вигляді пустот (якщо, наприклад, $\beta = 1$, то це означає, що на місці біодеградованих решток залишаються пустоти і їх не займає тверда фаза пористого середовища). Далі

$$\frac{\sigma(x, t + \Delta t) - \sigma(x, t)}{\Delta t} = -\beta \frac{\partial W(x, t)}{\partial t},$$

і (переходячи до границі при $\Delta t \rightarrow 0$) отримуємо

$$\frac{\partial \sigma}{\partial W} = -\beta.$$

Оскільки

$$W(x, t) = \frac{1}{\rho_{ws}} m_{ws}(x, t),$$

то

$$\frac{d\sigma}{dt} = -\frac{\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial t}, \quad \frac{\partial \sigma}{\partial x} = -\frac{\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial x}.$$

Тут ρ_{ws} – густина органічних відходів; $m_{ws}(x, t)$ – маса органічних відходів в одиниці об'єму пористого середовища (розмірність та ж сама, що і в густини). В результаті маємо модифікацію рівняння вологоперенесення на випадок біодеградації органічної речовини

$$\sigma \frac{\partial s}{\partial t} - s \frac{\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_p \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial x} - \frac{s\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial k_w}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x}.$$

Кінематичну граничну умову на верхній рухомій межі виведемо, опираючись на результати параграфа 2.1. По аналогії розглядаємо шар пористого середовища змінної товщини (рис.2.1), вважаючи що виконуються припущення 1 та 2.

Тоді, по аналогії з (2.1) маємо

$$\frac{dl(t)}{dt} = \int_{l(t)}^L \frac{d\varepsilon(z, t)}{dt} dz = \int_{l(t)}^L \left(\frac{d\varepsilon_\sigma(z, t)}{dt} + \frac{d\varepsilon_{ws}(z, t)}{dt} \right) dz, \quad (2.12)$$

де інтегрування проводиться по вертикальному відрітку $[l(t); L]$, $l(t)$ – верхня межа пористого середовища, L – нижня межа пористого середовища, $\varepsilon_\sigma(x, t)$, $\varepsilon_{ws}(x, t)$ – відносні об'ємні деформації пористого середовища внаслідок зміни НДС та біодеградації відповідно. Відомо, що умова (2.12) виводиться із інтегральної суми

$$\frac{l(t + \Delta t) - l(t)}{\Delta t} = - \sum_{i=1}^m \left(\frac{\varepsilon_{\sigma,i}(t + \Delta t) - \varepsilon_{\sigma,i}(t)}{\Delta t} + \frac{\varepsilon_{ws,i}(t + \Delta t) - \varepsilon_{ws,i}(t)}{\Delta t} \right) \Delta z_i,$$

де m – кількість фрагментів об'ємами V_i ($i = \overline{1, m}$) пористого середовища, які покривають вертикальний проміжок $[l(t); L]$.

Далі зробимо, виходячи із мети даної задачі,

Припущення 3. Відносні об'ємні деформації матеріалу сховища відходів відбуваються внаслідок лише біодеградаційних процесів.

Тоді отримаємо

$$V_i(t) - V_i(t + \Delta t) = (1 - \beta)(W_i(t)V_i(t) - W_i(t + \Delta t)V_i(t + \Delta t)), \quad (2.13)$$

де $W_i(t)$ – відносний об'ємний вміст органічної складової (розмірність $\frac{m^3}{m^3}$) у виділеному фрагменті пористого середовища об'ємом $V_i(t)$. Враховуючи, що $\Delta V_i = V_i(t) - V_i(t + \Delta t)$, з (2.13) отримаємо

$$\frac{\Delta V_i}{V_i(t)} = (1 - \beta)(W_i(t) - W_i(t + \Delta t)) + (1 - \beta)W_i(t + \Delta t) \frac{\Delta V_i}{V_i(t)}.$$

Оскільки за визначенням відносної об'ємної деформації пористого середовища $\frac{\Delta V_i}{V_i(t)} = \Delta \varepsilon_i$, то

$$\begin{aligned}\Delta \varepsilon_i &= (1 - \beta)(W_i(t) - W_i(t + \Delta t)) + (1 - \beta)W_i(t + \Delta t)\Delta \varepsilon_i, \\ (1 - (1 - \beta)W_i(t + \Delta t))\Delta \varepsilon_i &= -(1 - \beta)\frac{dW_i(t)}{dt}\Delta t,\end{aligned}\quad (2.14)$$

де у вищенаведеному співвідношенні знехтувано нескінченно малими вищих порядків (при $\Delta t \rightarrow 0$).

Далі з (2.14) отримаємо

$$\frac{\Delta \varepsilon_i}{\Delta t} = -\frac{1 - \beta}{1 - (1 - \beta)W_i(t + \Delta t)}\frac{dW_i(t)}{dt}$$

або (при $\Delta t \rightarrow 0$)

$$\frac{d\varepsilon_i}{dt} = -\frac{1 - \beta}{1 - (1 - \beta)W_i(t)}\frac{dW_i(t)}{dt}.$$

Підставляючи вище отриману рівність в (2.12), маємо

$$\frac{dl(t)}{dt} = -\int_{l(t)}^L \frac{1 - \beta}{1 - (1 - \beta)W(z, t)}\frac{\partial W(z, t)}{\partial t}dz. \quad (2.15)$$

Умова (2.15) власне і є кінематичною граничною умовою, якою описується зміна положення верхньої рухомої межі пористого середовища при урахуванні біодеградаційних процесів. Враховуючи, що

$$W(x, t) = \frac{1}{\rho_{ws}}m_{ws}(x, t)$$

з умови (2.15) отримаємо

$$\frac{dl(t)}{dt} = -\int_{l(t)}^L \frac{1 - \beta}{\rho_{ws} - (1 - \beta)m_{ws}(z, t)}\frac{\partial m_{ws}(z, t)}{\partial t}dz. \quad (2.16)$$

Формалізація рівняння у вигляді вологоперенесення, представленому вище та кінематичної граничної умови у вигляді (2.16), є необхідним кроком для розробки дискретних аналогів та реалізації ефективних розрахункових алгоритмів, що є центральним завданням даного дисертаційного дослідження в частині комп'ютерного моделювання.

2.4. Алгоритмічні особливості моделювання теплоперенесення та вологоперенесення з урахуванням тонких примежових шарів

При дослідженні фізико-хімічних та гідрологічних процесів в природних та штучних системах методами рівнянь математичної фізики виникає необхідність в граничних умовах для невідомих функцій. Це відомий факт. Перехід «реальний процес» – «математична модель» – «крайова задача» – «обчислювальний алгоритм» – «інформаційна система» пов'язаний із рядом припущень стосовно не лише диференціальних рівнянь в частинних похідних, але і стосовно граничних умов. Для розробки ефективного програмного забезпечення, здатного надавати достовірні прогностичні дані, критично важливим є не тільки вибір адекватної математичної моделі, але й розробка відповідних алгоритмів, що враховують специфіку модельованих явищ, зокрема, наявність тонких примежових шарів.

Розглянемо для прикладу взаємодію теплових полів системи «ґрунт-атмосфера» стосовно прогнозування та відтворення температури родючого шару ґрунту, що має важливе значення в агросекторі [108; 109; 110]. На перший погляд з граничною умовою для температури ґрунту на межі контакту з атмосферою все зрозуміло – умова теплообміну згідно закону Ньютона-Ріхмана, або, що ще простіше – припущення, що температура поверхні ґрунту дорівнює відомій із метеоспостережень температурі повітря. Однак при наявності «тонкого» шару посівів (трави) або снігу, який (тонкий шар) характеризується власними характеристиками теплоємності та теплопровідності. застосування таких граничних умов вимагає додаткових обґрунтувань. З точки зору комп'ютерного моделювання, пряме включення таких тонких шарів у дискретну модель (наприклад, методом скінченних елементів або скінченних різниць) може призвести до значного ускладнення сіткової генерації, появи клітинок з високим аспектним відношенням та, як наслідок, до збільшення обчислювальної складності та потенційних проблем з обчислювальною стійкістю. Тому розробка алгоритмів, що дозволяють

ефективно врахувати вплив таких шарів без їх детальної дискретизації, є актуальною задачею комп'ютерних наук у галузі моделювання складних систем.

Наприклад, якщо проводити моделювання в режимі реального часу і враховувати дані метеоспостережень – температура повітря, як правило, вимірюється на висоті 2 метри від поверхні ґрунту, в той час мало враховується наявність поверхневого шару рослинності та його нагрівання за рахунок надходження сонячної радіації [111; 112]. Аналогічні питання стосовно необхідності обґрунтування граничних умов виникають і при відновленні профілю вологості по глибині родючого шару ґрунту на випадок відомих даних опадів та дистанційного зондування землі [113; 114; 115]. Адже інтенсивність випаровування вологи з поверхні ґрунту буде залежати як від товщини шару рослинності, так і від температури. Таким чином, виникає потреба в розробці та алгоритмічній реалізації модифікованих граничних умов, які адекватно описують фізичні процеси на межі з тонкими примежевими шарами, фізичні параметри яких відрізняються від параметрів основної системи, що є ключовим для точності прогнозних моделей та ефективності відповідного програмного забезпечення.

Методику виведення граничних умов при наявності тонких примежових шарів обґрунтуємо через інтегральні умови спряження при наявності геобар'єрів. Такий підхід дозволяє інкапсулювати фізику тонкого шару в саму граничну умову, що значно спрощує чисельну реалізацію та знижує обчислювальні витрати порівняно з прямим моделюванням геобар'єру. Приклади таких модифікацій умов спряження при нелінійних залежностях параметрів геобар'єрів від фізико-хімічних впливів наведено в роботах [116; 117; 118; 119].

Для збереження логіки та цілісності викладок повторимо тут частину відомих фактів, на прикладі умови спряження для температури, наведених в роботах [116; 117; 118; 119; 120].

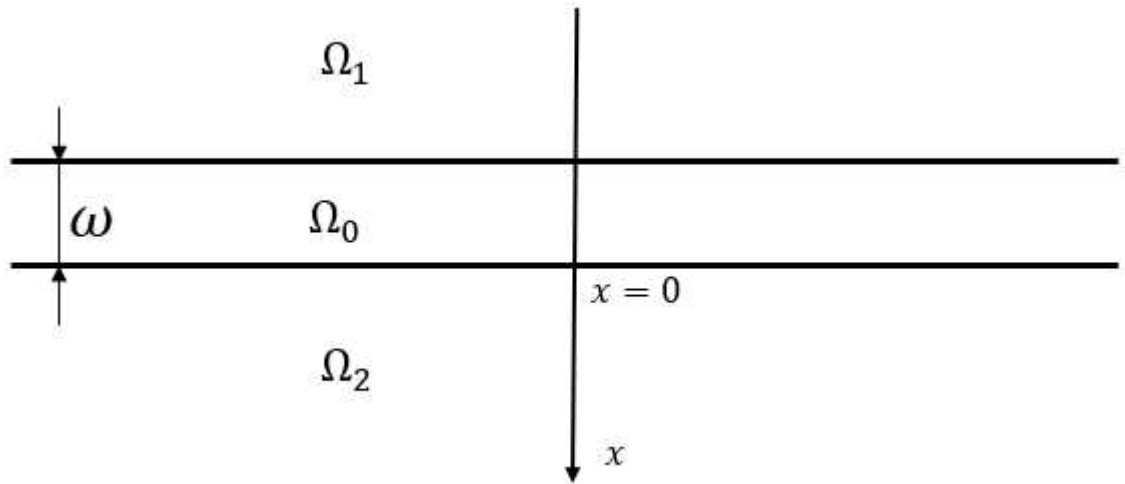


Рис. 2.2. Тонкий геобар'єр Ω_0 на контакті двох областей Ω_1 та Ω_2

На рис.2.2 Ω_1 – це атмосфера; Ω_2 – ґрунт; Ω_0 – тонкий примежовий шар, товщиною ω , який розміщено в точці $x = 0$, і в якому відбуваються перехідні процеси теплоперенесення. Теплофізичні характеристики матеріалів в областях Ω_0 , Ω_1 , Ω_2 відрізняються один від одного, можуть нелінійно залежати від самої температури. Припустимо (в силу тонкості примежового шару), що теплові процеси в поперечному перерізі даного шару є стаціонарними (або, принаймні квазістаціонарними). Таким чином для шару розглянемо наступну задачу теплоперенесення

$$\frac{\partial}{\partial x} = \left(-\lambda_\omega(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0, 0 < x < \omega, \quad (2.17)$$

$$T|_{x=0} = T^-, T|_{x=\omega} = T^+. \quad (2.18)$$

Тут T – температура; $\lambda_\omega(T)$ – коефіцієнт теплопровідності в тонкому шарі, який може нелінійно залежати від температури. Зауважимо, що теплопровідність може залежати і від значень інших полів (вологість, наявність органіки, концентрація хімічних домішок тощо).

З рівняння (2.17) маємо

$$\lambda_\omega(T) \frac{\partial T}{\partial x} = T_1,$$

де $T_1 = \text{const}$ – поки що невідома стала (або функція лише часу t , що не є принциповим, оскільки не змінює логіки виведення умови). Далі

$$T(x) = T_1 \int_0^x \frac{dx}{\lambda_\omega(T)} + T_2, \quad (2.19)$$

де $T_2 = \text{const}$ – теж поки що невідома константа. Тоді з (2.19) та граничних умов (2.18) маємо

$$\begin{cases} T(0) = T_2 = T^-, \\ T(\omega) = T_1 \int_0^\omega \frac{dx}{\lambda_\omega(T)} + T_2 = T^+. \end{cases}$$

Із цієї системи лінійних алгебричних рівнянь отримуємо

$$T_2 = T^-, \quad T_1 = \frac{T^+ - T^-}{\int_0^\omega \frac{dx}{\lambda_\omega(T)}}.$$

Отже, із задачі (2.17), (2.18) отримуємо

$$T(x) = \frac{T^+ - T^-}{\int_0^\omega \frac{dx}{\lambda_\omega(T)}} \int_0^x \frac{dx}{\lambda_\omega(T)} + T^-.$$

В результаті

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T^+ - T^-}{\lambda_\omega(T) \int_0^\omega \frac{dx}{\lambda_\omega(T)}}. \quad (2.20)$$

Далі, умову спряження виведемо на основі закону збереження потоку тепла q

$$q|_{x=0} = q|_{x=\omega} = -\lambda_\omega(T) \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (2.21)$$

Враховуючи, що вісь Ox направлена вниз, з (2.20) та (2.21) маємо остаточну формулу модифікованої умови спряження неідеального контакту для температури на тонкому примежовому шарі

$$\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0, x=\omega} = - \frac{T^+ - T^-}{\int_0^\omega \frac{dx}{\lambda_\omega(T)}}, \quad (2.22)$$

де $\lambda(T)$ – коефіцієнт теплопровідності матеріалу в області Ω_1 (при $x = 0$) або області Ω_2 (при $x = \omega$).

Умова (2.22) є складовою математичної моделі при дослідженні взаємопов'язаних процесів теплоперенесення в областях Ω_1 та Ω_2 при наявності тонкого включення Ω_0 . Якщо ж теплове поле в одній із областей є відомим (наприклад в Ω_1), то тонке включення Ω_0 стає примежовим шаром, а умова (2.22) вимагає модифікацій та набуває статусу граничної.

З точки зору обчислювальної реалізації, умова (2.22) є ключовою. Вона замінює необхідність дискретизації та розв'язання рівняння теплопровідності всередині тонкого шару. Натомість, вона встановлює прямий зв'язок між потоком тепла та значеннями температури по обидва боки від цього шару. При використанні чисельних методів, таких як метод скінченних елементів (МСЕ) або метод скінченних різниць (МСР), ця умова модифікує систему алгебричних рівнянь для вузлів, які потрапляють під час дискретизації на шар. Нижче наведено конкретизацію випадків наявності тонкого примежового шару при дослідженні фізико-хімічних процесів.

- Теплообмін «грунт-атмосфера» при наявності тонкого шару (рослинність, сніг, опале листя та хвоя тощо)

Температура T^- в даному випадку є відомою і дорівнює температурі повітря T_a . Температура T^+ є невідомою температурою T безпосередньо на поверхні ґрунту. Тоді з умови спряження (2.22) маємо наступну граничну умову

$$\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = - \frac{T|_{x=0} - T_a}{\int_0^\omega \frac{dx}{\lambda_\omega(T)}}, \quad (2.23)$$

де $\lambda_\omega(T)$ – коефіцієнт теплопровідності матеріалу (прошарок трави, снігу, опалої органіки) в примежовому шарі.

Якщо $\lambda_\omega(T) = \lambda_\omega = \text{const}$, то з (2.23) отримаємо

$$\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = -\lambda_\omega \frac{T|_{x=0} - T_a}{\omega}. \quad (2.24)$$

- Вологоперенесення «грунт-атмосфера» при наявності тонкого шару

В роботі [119], відповідно до закону Дарсі-Клюта з урахуванням гравітаційної складової руху води [114], виведено наступну умову спряження для вологості (в напорах h)

$$\left(k_w(h) \frac{\partial h}{\partial x} - k_{w\omega}(h) \right) \Big|_{x=0, x=\omega} = -\frac{h^+ - h^-}{\int_0^\omega \frac{dx}{k_{w\omega}(h)}} + \frac{\omega}{\int_0^\omega \frac{dx}{k_{w\omega}(h)}}.$$

Тоді, аналогічно до (2.23), маємо наступну граничну умову

$$\left(k_w(h) \frac{\partial h}{\partial x} - k_{w\omega}(h) \right) \Big|_{x=0} = -\frac{h|_{x=0} - h_a}{\int_0^\omega \frac{dx}{k_{w\omega}(h)}} + \frac{\omega}{\int_0^\omega \frac{dx}{k_{w\omega}(h)}}.$$

Тут $k_w(h)$, $k_{w\omega}(h)$ – коефіцієнти вологоперенесення в Ω_1 та Ω_0 відповідно; h_a – еквівалент напорів для вологості на верхній межі контакту примежового шару Ω_0 та атмосфери. Залежно від невідомих функцій моделі вологоперенесення вищенаведені умови легко трансформуються в умови для вологості або для функції насиченості.

- Балансова гранична умова при дифузії вуглекислого газу з ґрунту в атмосферу при наявності тонкого поверхневого шару

Відповідно до дифузійної моделі поширення CO_2 [121], отримаємо

$$D(c, T) \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = -\frac{c|_{x=0} - c_a}{\int_0^\omega \frac{dx}{D_\omega(c, T)}}.$$

тут c – концентрація вуглекислого газу в ґрунті; c_a – концентрація вуглекислого газу на межі контакту примежового шару та атмосфери; $D(c, T)$, $D_\omega(c, T)$ – коефіцієнти дифузії CO_2 в ґрунті та примежовому шарі відповідно.

Відмітимо, що аналогічні умови, які будуть відрізнятись лише числовими значеннями параметрів, справедливі для процесів поширення парникових газів із поверхні сховищ відходів, покритих геобар'єром, а також процесів поширення парникових газів із пористої засипки біоплато (біоплато-фільтра) при наявності тонкого шару води.

Перевага застосування таких модифікованих граничних умов з алгоритмічної точки зору полягає у значному зменшенні складності моделі та обчислювальних ресурсів. Абстрагуючи фізику тонкого шару в граничну умову, усувається необхідність використовувати дрібномасштабні деталі сітки всередині цих шарів. Це призводить до:

- зменшення кількості ступенів вільності в числовій моделі, що прискорює час обчислень;
- спрощення генерації сітки для основних областей задачі;
- покращення числової стійкості шляхом уникнення проблем, пов'язаних із наприклад, скінченними елементами, з високим співвідношенням сторін або значно відмінними властивостями матеріалів при явному моделюванні тонких шарів.

З точки зору розробки інформаційних технологій для моніторингу та прогнозування стану навколишнього середовища (відповідно до об'єкту дисертаційного дослідження), ці алгоритмічні підходи дозволяють створювати обчислювально ефективні моделі, які можуть бути використані для тривалих симуляційних періодів або в рамках ансамблевого прогнозування чи схем асиміляції даних. Архітектура програмного забезпечення (як зазначено в об'єкті дослідження дисертації) повинна бути спроектована таким чином, щоб гнучко вміщувати такі користувацькі, фізично обґрунтовані граничні умови, дозволяючи легку параметризацію властивостей тонкого шару. Ця модульність є ключовою для застосування симуляційного інструменту до різноманітних сценаріїв, що включають різні типи пористих середовищ та склад примежових шарів.

Висновки до розділу 2

Основними результатами розділу 2 є вдосконалення елементів математичних моделей процесів в пористих середовищах з органічною складовою, які (моделі) є основою прогнозних інформаційних систем. Зокрема:

1. Вдосконалено кінематичну граничну умову на верхній рухомій межі для випадку ненасиченої консолідації сховища ТПВ з урахуванням біодеградації органічної складової

$$\begin{aligned} \frac{dl(t)}{dt} = & - \int_{l(t)}^L \frac{1}{1 - \frac{(1-\beta)}{\rho_{ws}} m_{ws}(z, t)} \left((m_{1k}^w + m_{1k}^g) \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} + \right. \\ & \left. + (m_{2k}^w + m_{2k}^g) \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t} + \frac{(1-\beta)}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}(z, t)}{\partial t} \right) dz. \end{aligned}$$

де інтегрування проводиться по вертикальному відрізку $[l(t); L]$, $l(t)$ – верхня межа пористого середовища, L – нижня межа пористого середовища; δ повне напруження; m_{1k}^g та m_{2k}^g коефіцієнти зміни об'єму газової фази, які корелюють зі зміною чистого напруження $(\delta - u_g)$ та всмоктуючого тиску $(u_g - u_w)$ відповідно; ρ_{ws} – густина органічних відходів; $m_{ws}(x, t)$ – маса органічних відходів в одиниці об'єму пористого середовища (розмірність та ж сама, що і в густини); $\beta \in [0; 1]$ – відносний коефіцієнт, який показує який відносний об'єм біодегратованих решток залишається у вигляді пустот; m_{1k}^w та m_{2k}^w – коефіцієнти зміни об'єму водної фази, які корелюють зі зміною чистого напруження $(\delta - u_g)$ та всмоктуючого тиску $(u_g - u_w)$.

2. Модифіковано рівняння для визначення надлишкових тисків в поровій рідині та поровому газі на випадок біодеградаційних та консолідаційних процесів пористого середовища сховища ТПВ

$$\begin{aligned} & \left((1-s)\sigma \frac{M}{R(T+T_k)} - \rho_g m_{1k}^g + \rho_g m_{2k}^g \right) \frac{\partial u_g}{\partial t} - \\ & - \rho_g m_{2k}^g \frac{\partial u_w}{\partial t} - (1-s)\sigma \frac{M \hat{u}_g}{R(T+T_k)^2} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho_g k_g \nabla u_g) + f_g. \\ & (m_{2k}^w - m_{1k}^w) \frac{\partial u_g}{\partial t} - m_{2k}^w \frac{\partial u_w}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{k_w}{\gamma_w} \nabla u_w \right), \end{aligned}$$

де $s \in [0; 1]$ – насиченість пористого середовища; σ – пористість пористого середовища; M – молекулярна маса порового газу; R – універсальна газова стала; T – температура; T_k – початкова абсолютна температура; $\rho_g = \frac{M \cdot \hat{u}_g}{R(T+T_k)}$, $\hat{u}_g = u_g + u_{atm}$; u_{atm} – атмосферний тиск; u_g – функція надлишкового тиску газу в порах пористого середовища, яка в даних моделях ущільнення пористого середовища визначається як потенціальна функція руху газу; u_w – надлишковий тиск в поровій рідині; m_{1k}^g та m_{2k}^g – коефіцієнти зміни об'єму газової фази, які корелюють зі зміною чистого напруження $(\delta - u_g)$ та всмоктуючого тиску $(u_g - u_w)$ відповідно; k_g – коефіцієнт «газопровідності» пористого середовища (в оригіналі закону Фіка для газів – коефіцієнт дифузії газів в пористому середовищі); f_g – функція джерела газу; m_{1k}^w та m_{2k}^w – коефіцієнти зміни об'єму водної фази, які корелюють зі зміною чистого напруження $(\delta - u_g)$ та всмоктуючого тиску $(u_g - u_w)$, відповідно; k_w – коефіцієнт вологоперенесення, який залежить як від пористості так і від вологості; $\gamma_w = \rho_w g$ – питома вага порової рідини; g – прискорення вільного падіння; ρ_w – густина порової рідини.

3. Модифіковано рівняння вологоперенесення на випадок змінної вологості, як наслідок біодеградаційних процесів та відповідну кінематичну граничну умову:

$$\sigma \frac{\partial s}{\partial t} - s \frac{\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_p \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial x} - \frac{s\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial k_w}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x},$$

$$\frac{dl(t)}{dt} = - \int_{l(t)}^L \frac{1 - \beta}{\rho_{ws} - (1 - \beta)m_{ws}(z, t)} \frac{\partial m_{ws}(z, t)}{\partial t} dz.$$

де σ – змінна пористість, s – насичення пористого середовища, $\beta \in [0; 1]$ – відносний коефіцієнт, який показує який відносний об'єм біодеградованих решток залишається у вигляді пустот, ρ_{ws} – густина органічних відходів; $m_{ws}(x, t)$ – маса органічних відходів в одиниці об'єму пористого середовища; $D_p = -k_p \partial \psi / \partial \theta$ – коефіцієнт дифузії ґрунтової вологи; ψ – потенціал ґрунтової вологи; k_w – коефіцієнт вологоперенесення, який в даному випадку залежить від насиченості; $l(t)$ – верхня межа пористого середовища, L – нижня межа пористого середовища,

4. Виведено балансові граничні умови на тонких примежових шарах, які наявні в агро-системах, для температури, напорів, концентрації вуглекислого газу

$$\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = - \frac{T|_{x=0} - T_a}{\int_0^\omega \frac{dx}{\lambda_\omega(T)}}, \quad D(c, T) \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = - \frac{c|_{x=0} - c_a}{\int_0^\omega \frac{dx}{D_\omega(c, T)}},$$

$$\left(k(h) \frac{\partial h}{\partial x} - k(h) \right) \Big|_{x=0} = - \frac{h|_{x=0} - h_a}{\int_0^\omega \frac{dx}{k_\omega(h)}} + \frac{\omega}{\int_0^\omega \frac{dx}{k_\omega(h)}},$$

де T_a – температура повітря, T – температура безпосередньо на поверхні ґрунту, $\lambda_\omega(T)$ – коефіцієнт теплопровідності матеріалу (прошарок трави, снігу, опалої органіки) в примежовому шарі; c – концентрація вуглекислого газу в ґрунті; c_a – концентрація вуглекислого газу на межі контакту примежового шару та атмосфери; $D(c, T)$, $D_\omega(c, T)$ – коефіцієнти дифузії CO_2 в ґрунті та примежовому шарі відповідно; $k(h)$, $k_\omega(h)$ – коефіцієнти вологоперенесення в Ω_1 та Ω_0 відповідно; h_a – еквівалент напорів для вологості на верхній межі контакту примежового шару Ω_0 та атмосфери.

Основні результати розділу 2 опубліковано в роботах [122], [123].

РОЗДІЛ 3. АЛГОРИТМІЧНА ТА ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МОДЕЛЕЙ УЩІЛЬНЕННЯ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩ І ВИДІЛЕННЯ ГАЗІВ У СХОВИЩАХ ТВЕРДИХ ПОБУТОВИХ ВІДХОДІВ

3.1. Базова модель ущільнення ненасиченого пористого середовища з урахуванням біодеградаційних процесів: математичні основи отримання прогнозних даних

Зважаючи на огляд проблем стосовно звалищ ТПВ, представлений в розділі 1, та загальні завдання дисертаційного дослідження, в даному параграфі основна увага зосереджена на розробці базової математичної моделі для прогнозування ключових показників стану та еволюції тіла полігону ТПВ. Зокрема, ця модель спрямована на обчислювальне забезпечення прогнозів величини просідань поверхні сховища ТПВ, що виникають внаслідок біодеградаційних процесів органічних решток, рівня емісії парникових газів в атмосферу, а також на врахування неізотермічності цих взаємопов'язаних процесів. Побудова такої комплексної моделі є фундаментальним кроком до створення ефективного програмного забезпечення для моніторингу та прогнозування, що є об'єктом даного дослідження.

Розробка математично-алгоритмічної моделі, здатної адекватно описувати неізотермічну ненасичену консолідацію ТПВ з урахуванням біодеградації, вимагає формулювання системи рівнянь, яка відображає ключові фізико-хімічні та механічні процеси. Ця математична основа у подальшому трансформується в чисельні алгоритми, що реалізуються в програмному комплексі.

Математична модель неізотермічної ненасиченої консолідації ТПВ буде включати рівняння для надлишкових тисків в поровій рідині та газі, доповнені кінематичною граничною умовою на верхній рухомій межі $x = l(t)$ масиву пористого середовища. Також в математичну модель мають бути включені рівняння для прогнозування теплового стану пористого середовища та прогнозування зміни масової частки органічної складової в результаті

біодеградаційних процесів. Складність цієї системи, зумовлена взаємозв'язком процесів (механіки, теплоперенесення, масоперенесення, біохімічних реакцій), нелінійністю параметрів та наявністю рухомої межі, ставить серйозні виклики перед комп'ютерним моделюванням та вимагає застосування спеціалізованих обчислювальних підходів. В результаті маємо наступну крайову задачу:

$$\begin{aligned} & \left((1-s)\sigma \frac{M}{R(T+T_k)} - \rho_g m_{1k}^g + \rho_g m_{2k}^g \right) \frac{\partial u_g}{\partial t} - \rho_g m_{2k}^g \frac{\partial u_w}{\partial t} - \\ & - (1-s)\sigma \frac{M \hat{u}_g}{R(T+T_k)^2} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_g k_g \frac{\partial u_g}{\partial x} \right) + \\ & + f_g(u_g, u_w, T, m_{ws}, x, t), x \in \Omega(t) = (l(t); L), t > 0, \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$(m_{2k}^w - m_{1k}^w) \frac{\partial u_g}{\partial t} - m_{2k}^w \frac{\partial u_w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k_w}{\gamma_w} \frac{\partial u_w}{\partial x} \right), x \in \Omega(t) = (l(t); L), t > 0, \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} c_T \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \rho_w c_w v_w \frac{\partial T}{\partial x} + Q(u_g, u_w, T, m_{ws}, x, t), x \in \Omega(t), \\ t &> 0, \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial m_{ws}}{\partial t} = -k_{ws}(u_g, u_w, T) m_{ws}, x \in \overline{\Omega(t)}, t > 0, \quad (3.4)$$

$$u_g(x, t)|_{x=l(t)} = 0, u_w(x, t)|_{x=l(t)} = 0, T(x, t)|_{x=l(t)} = \bar{T}_l(t), t \geq 0, \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} v_g(x, t)|_{x=L} &= \left(-k_g \frac{\partial u_g}{\partial x} \right) \Big|_{x=L} = 0, v_w(x, t)|_{x=L} = \left(-\frac{k_w}{\gamma_w} \frac{\partial u_w}{\partial x} \right) \Big|_{x=L} = 0, \\ & \left(-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{x=L} = 0, t \geq 0, \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$u_g(x, 0) = u_g^0(x), u_w(x, 0) = u_w^0(x), T(x, 0) = T_0(x),$$

$$m_{ws}(x, 0) = m_0(x), x \in \overline{\Omega} = [l_0; L], \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{dl(t)}{dt} &= - \int_{l(t)}^L \frac{1}{1 - \frac{(1-\beta)}{\rho_{ws}} m_{ws}(z, t)} \left((m_{2k}^w + m_{2k}^g - m_{1k}^w - m_{1k}^g) \frac{\partial u_g}{\partial t} \right. \\ & \left. - (m_{2k}^w + m_{2k}^g) \frac{\partial u_w}{\partial t} + \frac{(1-\beta)}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}(z, t)}{\partial t} \right) dz, x \in \overline{\Omega(t)}, \end{aligned}$$

$$l(t)|_{t=0} = l_0 < L, \quad (3.8)$$

$$s = s(u_g, u_w), t \geq 0, x \in \overline{\Omega(t)}. \quad (3.9)$$

Тут: u_g, u_w – надлишкові тиски в поровому газі та поровій рідині; k_g, k_w – коефіцієнти газопровідності та вологоперенесення в пористому середовищі; $m_{ws}(x, t)$ – масова частка органічної складової в одиниці об'єму відходів; σ – змінна пористість середовища; k_{ws} – коефіцієнт біодеградації, який залежить від температури T та насиченості s пористого середовища; $m_0(x), h_0(x), T_0(x), \bar{T}_l(t), u_g^0(x), u_w^0(x)$ – відомі функції; c_T – об'ємна теплоємність пористого середовища; λ – коефіцієнт теплопровідності пористого середовища; ρ_w, c_w – густина та питома теплоємність порової рідини; Q – функція, яка задає теплогенерацію в результаті біодеградації; $l_0 < L$ – задане початкове положення верхньої рухомої межі; γ_w – питома вага порової рідини; f_g – функція, яка задає газогенерацію внаслідок біодеградації; v_g, v_w – функції швидкості газоперенесення та вологоперенесення.

Зазначимо, що згідно класичного визначення об'ємної теплоємності пористого середовища

$$c_T = \rho_w c_w s \sigma + \rho_g c_g (1 - s) \sigma + c_s \rho_s (1 - \sigma),$$

де ρ_s, c_s – густина та питома теплоємність твердої компоненти сховища відходів; ρ_g, c_g – густина та питома теплоємність газоподібної компоненти пористого середовища.

Функція $s = s(u_g, u_w)$ в (3.9) дозволяє визначити насиченість пористого середовища, яка залежить від надлишкових тисків u_g та u_w . Її конкретизація наведена в розділі чисельних експериментів.

Велика кількість параметрів моделі потребує ретельної калібровки та валідації моделі на основі експериментальних даних. В рамках програмного забезпечення необхідно передбачити гнучкі механізми для задання цих параметрів, можливо, включаючи їх залежність від просторових координат або інших змінних стану.

Таким чином, представлена «алгоритмічна модель» – це не просто набір математичних рівнянь, а концептуальна основа для розробки складного чисельного інструментарію. Успішна реалізація такого інструментарію в рамках програмного забезпечення (об'єкт дослідження) дозволить отримувати науково обґрунтовані прогнози щодо довгострокової поведінки полігонів ТПВ, що є ключовим для вирішення екологічних та інженерних завдань у цій сфері та відповідає меті дисертації.

3.2. Застосування методу скінченних елементів для комп'ютерного моделювання процесу консолідації в середовищах з органічною складовою

Для ефективного комп'ютерного моделювання складних, нелінійних та взаємопов'язаних процесів консолідації в пористих середовищах з органічною складовою, описаних системою рівнянь в частинних похідних (3.1)-(3.9), необхідний потужний чисельний метод. Метод скінченних елементів (МСЕ) є одним з найбільш універсальних та широко вживаних підходів для дискретизації таких задач, особливо при роботі зі складними геометриями та неоднорідними властивостями матеріалів, що характерно для об'єктів дослідження, таких як звалища ТПВ. Далі розглянуто ключові аспекти застосування МСЕ для перетворення вихідної системи ДРЧП на систему нелінійних звичайних диференціальних рівнянь, що є першим важливим кроком у розробці обчислювальних алгоритмів для цільового програмного забезпечення.

Оскільки теорія методу скінченних елементів є добре відомою, то ми упустимо деякі теоретичні викладки. Зокрема, схема зведення крайової задачі (3.1)-(3.9) до задачі в слабкій постановці повторює подібні, описані наприклад в [122].

Подібні до задачі (3.1)-(3.9), правда – у фіксованій області, розглянуто та досліджено в роботі [124]. Зокрема теоретично доведена точність

наближеного скінченноелементного розв'язку, а також його єдиність та збіжність. В роботі [125] для встановлення точності скінченноелементних розв'язків подібних крайових задач для систем нелінійних ДРЧП використано чисельні експерименти. Розгляд задач у змінних областях вимагає додаткових досліджень та обґрунтувань стосовно МСЕ.

Згідно з МСЕ, наближений узагальнений розв'язок крайової задачі (3.1)-(3.9) шукається у вигляді

$$\begin{aligned} u_g(x, t) &= \sum_{i=1}^N g_i(t) \varphi_i(x), u_w(x, t) = \sum_{i=1}^N s_i(t) \varphi_i(x), \\ T(x, t) &= \sum_{i=1}^N T_i(t) \varphi_i(x), m_{ws}(x, t) = \sum_{i=1}^N w_i(t) \varphi_i(x), \end{aligned} \quad (3.10)$$

де функції $\varphi_i(x)$, $i = \overline{1, N}$ є поліноміальними базисними функціями зі скінченним носієм. Вибір типу та порядку базисних функцій впливає на точність апроксимації, обчислювальну складність формування елементних матриць та загальну кількість ступенів вільності системи, що є важливими факторами при проєктуванні програмного забезпечення. Невідомі коефіцієнти $g_i(t), s_i(t), T_i(t), w_i(t)$ $i = \overline{1, N}$, які залежать лише від часу, шукаємо із задачі Коші для системи нелінійних диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1(G, S, T, W) \frac{d\mathbf{G}}{dt} + \mathbf{M}_{12} \frac{d\mathbf{S}}{dt} + \mathbf{M}_{13}(G, S, T, W) \frac{d\mathbf{T}}{dt} + \mathbf{L}_1(G, S, T, W) \mathbf{G}(t) = \\ = \mathbf{F}_1(G, S, T, W), \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\mathbf{M}_2 \frac{d\mathbf{S}}{dt} + \mathbf{M}_{21} \frac{d\mathbf{G}}{dt} + \mathbf{L}_2(G, S, T, W) \mathbf{S}(t) = \mathbf{F}_2, \quad (3.12)$$

$$\mathbf{M}_3(G, S, W) \frac{d\mathbf{T}}{dt} + \mathbf{L}_3(G, S, T) \mathbf{T}(t) = \mathbf{F}_3(G, S, T, W), \quad (3.13)$$

$$\mathbf{M}_4 \frac{d\mathbf{W}}{dt} + \mathbf{L}_4(G, S, T) \mathbf{W} = \mathbf{F}_4, \quad (3.14)$$

$$\tilde{\mathbf{M}}_1 \mathbf{G}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}}_1, \tilde{\mathbf{M}}_2 \mathbf{S}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}}_2, \tilde{\mathbf{M}}_3 \mathbf{T}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}}_3, \tilde{\mathbf{M}}_4 \mathbf{W}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}}_4, \quad (3.15)$$

де

$$\tilde{\mathbf{F}}_p = \left(\tilde{f}_i^{(p)} \right)_{i=1}^N, \tilde{\mathbf{M}}_p = \left(\tilde{m}_{ij}^{(p)} \right)_{i,j=1}^N, p = \overline{1, 4},$$

$$\tilde{m}_{ij}^{(p)} = \int_l^L \varphi_i \varphi_j dx, \mathbf{M}_p = \left(m_{ij}^{(p)}\right)_{i,j=1}^N,$$

$$\mathbf{L}_p = \left(l_{ij}^{(p)}\right)_{i,j=1}^N, \mathbf{F}_p = \left(f_i^{(p)}\right)_{i=1}^N, p = \overline{1,4}, \mathbf{Q}_1 = \left(q_{ij}^{(1)}\right)_{i,j=1}^N,$$

$$\mathbf{M}_{12} = \left(m_{ij}^{(12)}\right)_{i,j=1}^N, \mathbf{M}_{13} = \left(m_{ij}^{(13)}\right)_{i,j=1}^N, \mathbf{M}_{21} = \left(m_{ij}^{(21)}\right)_{i,j=1}^N,$$

$$\tilde{f}_i^{(1)} = \int_{l_0}^L u_g^0 \varphi_i dx,$$

$$\tilde{f}_i^{(2)} = \int_{l_0}^L u_w^0 \varphi_i dx, \tilde{f}_i^{(3)} = \int_{l_0}^L T_0 \varphi_i dx, \tilde{f}_i^{(4)} = \int_{l_0}^L m_0 \varphi_i dx,$$

$$\mathbf{G} = \left(g_i(t)\right)_{i=1}^N, \mathbf{G}^{(0)} = \left(g_i(0)\right)_{i=1}^N,$$

$$\mathbf{S} = \left(s_i(t)\right)_{i=1}^N, \mathbf{S}^{(0)} = \left(s_i(0)\right)_{i=1}^N,$$

$$\mathbf{T} = \left(T_i(t)\right)_{i=1}^N, \mathbf{T}^{(0)} = \left(T_i(0)\right)_{i=1}^N,$$

$$\mathbf{W} = \left(w_i(t)\right)_{i=1}^N, \mathbf{W}^{(0)} = \left(w_i(0)\right)_{i=1}^N,$$

$$m_{ij}^{(1)} = \int_{l(t)}^L \left((1-s) \sigma \frac{M}{R(T+T_k)} - \rho_g m_{1k}^g + \rho_g m_{2k}^g \right) \varphi_i \varphi_j dx,$$

$$m_{ij}^{(2)} = - \int_{l(t)}^L m_{2k}^w \varphi_i \varphi_j dx, m_{ij}^{(21)} = \int_{l(t)}^L (m_{2k}^w - m_{1k}^w) \varphi_i \varphi_j dx,$$

$$m_{ij}^{(3)} = \int_{l(t)}^L c_T \varphi_i \varphi_j dx, m_{ij}^{(4)} = \int_{l(t)}^L \varphi_i \varphi_j dx,$$

$$m_{ij}^{(12)} = - \int_{l(t)}^L \rho_g m_{2k}^g \varphi_i \varphi_j dx,$$

$$m_{ij}^{(13)} = - \int_{l(t)}^L (1-s) \sigma \frac{M \hat{u}_g}{R(T+T_k)^2} \varphi_i \varphi_j dx,$$

$$m_{ij}^{(21)} = - \int_{l(t)}^L m_{2k}^w \varphi_i \varphi_j dx, l_{ij}^{(1)} = \int_{l(t)}^L \rho_g k_g \frac{d\varphi_i}{dx} \frac{d\varphi_j}{dx} dx,$$

$$\begin{aligned}
l_{ij}^{(2)} &= \int_{l(t)}^L \frac{k_w}{\gamma_w} \frac{d\varphi_i}{dx} \frac{d\varphi_j}{dx} dx, \\
l_{ij}^{(3)} &= \int_{l(t)}^L \lambda \frac{d\varphi_i}{dx} \frac{d\varphi_j}{dx} dx + \int_{l(t)}^L \rho_w c_w v_w \frac{d\varphi_j}{dx} \varphi_i dx \\
l_{ij}^{(4)} &= \int_{l(t)}^L k_{ws}(u_g, u_w, T) \varphi_i \varphi_j dx, \\
f_i^{(1)} &= \int_{l(t)}^L f_g(u_g, u_w, m_{ws}, T, x, t) \varphi_i(x) dx, \quad f_i^{(2)} = 0, \\
f_i^{(3)} &= \int_{l(t)}^L Q_T(u_g, u_w, m_{ws}, T, x, t) \varphi_i(x) dx, \quad f_i^{(4)} = 0.
\end{aligned}$$

Задача (3.11)-(3.15) є задачею Коші для системи нелінійних диференціальних рівнянь першого порядку. Відшукування її розв'язку теж вимагає застосування відповідних схем дискретизації. З точки зору простоти практичної реалізації та забезпечення числової стійкості добре зарекомендувала себе повністю неявна лінеаризована різницева схема [94]. Наприклад, для системи (3.13) вона має вигляд

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_3(\mathbf{G}^{(j)}, \mathbf{S}^{(j)}, \mathbf{W}^{(j)}) \frac{\mathbf{T}^{(j+1)} - \mathbf{T}^{(j)}}{\tau} + \mathbf{L}_3(\mathbf{G}^{(j)}, \mathbf{S}^{(j)}, \mathbf{T}^{(j)}) \cdot \mathbf{T}^{(j+1)} = \\
= \mathbf{F}_3(\mathbf{G}^{(j)}, \mathbf{S}^{(j)}, \mathbf{T}^{(j)}, \mathbf{W}^{(j)}), j = 0, 1, 2, \dots, m_\tau - 1.
\end{aligned}$$

Тут часовий відрізок $[0, \bar{t}]$ розбитий на m_τ рівних частин з кроком $\tau = \frac{T}{m_\tau}$; $\mathbf{G}^{(j)}, \mathbf{S}^{(j)}, \mathbf{T}^{(j)}, \mathbf{W}^{(j)}$ – наближений розв'язок задачі Коші (3.11)-(3.15) при $t = j\tau$. Також є можливість застосування схеми Кранка-Ніколсона та схеми предиктор-коректор. Оскільки останні дві схеми не були застосовані у чисельних експериментах, наведених у цій роботі, детальніший їх опис подано, зокрема, у [126].

Застосування МСЕ трансформує вихідну неперервну задачу в скінченновимірну алгебраїчну проблему на кожному часовому кроці.

Ефективність цього підходу в контексті комп'ютерного моделювання залежить від ретельного вибору елементів сітки, базисних функцій, методів чисельного інтегрування для формування матриць, стійких та точних схем інтегрування за часом, а також надійних алгоритмів для розв'язання великих розріджених систем лінійних (після лінеаризації) та нелінійних алгебраїчних рівнянь. Всі ці компоненти є важливими складовими архітектури програмного забезпечення, що розроблялось в рамках даної дисертаційної роботи.

3.3. Алгоритми програмної реалізації апроксимації кінематичної граничної умови для задач ущільнення з урахуванням біодеградаційної активності

Даний параграф присвячено викладенню алгоритмічного підходу до чисельної реалізації відстеження положення рухомої верхньої границі шару пористого середовища, що ущільнюється, з урахуванням процесів біодеградації.

В основу алгоритму покладено підхід, описаний в роботі [94]. Застосовуючи до умови (3.8) дискретизацію в часі згідно неявної різницевої схеми, отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{l^{(j+1)} - l^{(j)}}{\tau} = & - \int_{l^{(j)}}^L \frac{1}{1 - (1 - \beta) \frac{m_{ws}^{(j+1)}}{\rho_{ws}}} \left((m_{2k}^w + m_{2k}^g - m_{1k}^w \right. \\ & \left. - m_{1k}^g) \frac{u_g^{(j+1)} - u_g^{(j)}}{\tau} - (m_{2k}^w + m_{2k}^g) \frac{u_w^{(j+1)} - u_w^{(j)}}{\tau} \right. \\ & \left. + \frac{(1 - \beta) m_{ws}^{(j+1)} - m_{ws}^{(j)}}{\rho_{ws} \tau} \right) dz, j = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Звідки

$$\begin{aligned}
l^{(j+1)} = l^{(j)} - \int_{l^{(j)}}^L \frac{1}{1 - (1 - \beta) \frac{m_{ws}^{(j+1)}}{\rho_{ws}}} & \left((m_{2k}^w + m_{2k}^g - m_{1k}^w - m_{1k}^g) (u_g^{(j+1)} \right. \\
& - u_g^{(j)}) - (m_{2k}^w + m_{2k}^g) (u_w^{(j+1)} - u_w^{(j)}) + \frac{(1 - \beta)}{\rho_{ws}} (m_{ws}^{(j+1)} \\
& \left. - m_{ws}^{(j)}) \right) dz, j = 0, 1, 2, \dots
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Тут $l^{(j+1)} = l(t_{j+1})$, $j = 0, 1, 2, \dots$ В (3.16) положення $l^{(j)}$ є відомим, як власне і значення $u_g^{(j+1)}$, $u_w^{(j+1)}$, $m_{ws}^{(j+1)}$, $m_{ws}^{(j)}$ та $u_g^{(j)}$, $u_w^{(j)}$. Значення вказаних функцій, згідно алгоритму, на часовому шарі $(j + 1)$ шукаємо, використовуючи положення верхньої межі $l^{(j)}$. Інтеграл в (3.16) можна знайти, використовуючи формули чисельного інтегрування.

В рамках розробленого програмного комплексу, значення вказаних функцій на часовому шарі $(j + 1)$ визначаються в процесі розв'язання основної системи рівнянь моделі (що описує процеси фільтрації, біодеградації, тепло- та газогенерації) з використанням відомого положення границі $l^{(j)}$ (або, в ітераційних схемах розв'язання нелінійної системи, попередньої оцінки $l^{(j+1)}$). Для обчислення інтеграла в правій частині рівняння (3.16) застосовується чисельне інтегрування. В програмній реалізації можуть бути використані стандартні квадратурні формули, наприклад, складена формула трапецій або Сімпсона, які застосовуються до дискретизованих за змінною x значень підінтегральної функції, отриманих при розв'язанні основної системи рівнянь. Таким чином, визначення $l^{(j+1)}$ є частиною загального ітераційного або послідовного процесу на кожному часовому кроці, де розв'язання основної системи рівнянь та оновлення положення границі взаємопов'язані. Ефективна програмна реалізація цього алгоритму, включаючи вибір оптимальних методів числового інтегрування та інтеграцію в загальну структуру програмного комплексу, є важливим завданням в контексті створення високопродуктивного програмного забезпечення для моделювання складних

фізико-хімічних процесів в пористих середовищах, що відповідає заявленим об'єкту та предмету дослідження.

3.4. Блок-схема алгоритму чисельного розв'язання задачі ненасиченої консолідації з урахуванням факторів впливу біодеградації, теплоутворення та газогенерації

В рамках розробки інформаційних технологій та відповідного програмного забезпечення для моніторингу та прогнозування процесів у пористих середовищах з органічною складовою (відповідно до об'єкта дослідження), центральне місце посідає чисельний алгоритм розв'язання крайової задачі, що моделює ненасичену консолідацію, вологоперенесення, теплоперенесення, біодеградацію та газогенерацію. Цей алгоритм є безпосередньою реалізацією вдосконаленого модельно-алгоритмічного підходу (що відповідає меті дослідження) та базується на сучасних методах комп'ютерного моделювання та чисельних алгоритмах аналізу і прогнозування (предмет дослідження). Структура та логіка роботи даного алгоритму, представлена у вигляді детальної блок-схеми, наведена на рис. 3.1 і докладно описана в даному параграфі.

На рис. 3.1 представлено алгоритм реалізації чисельного моделювання процесів у пористих середовищах з органічною складовою із застосуванням методу скінченних елементів. Першим етапом є розбиття розрахункової області на скінченні елементи, що дозволяє дискретизувати задачу. Далі відбувається конкретизація базисних функцій та задання початкових умов для кожної з невідомих функцій. Після цього формується глобальна система рівнянь, до якої вводяться граничні умови першого роду. На кожному часовому кроці $(j+1)$ виконується чисельне розв'язання цієї системи з подальшим оновленням коефіцієнтів, що можуть залежати від змінних параметрів середовища (наприклад, температури, вологості тощо).

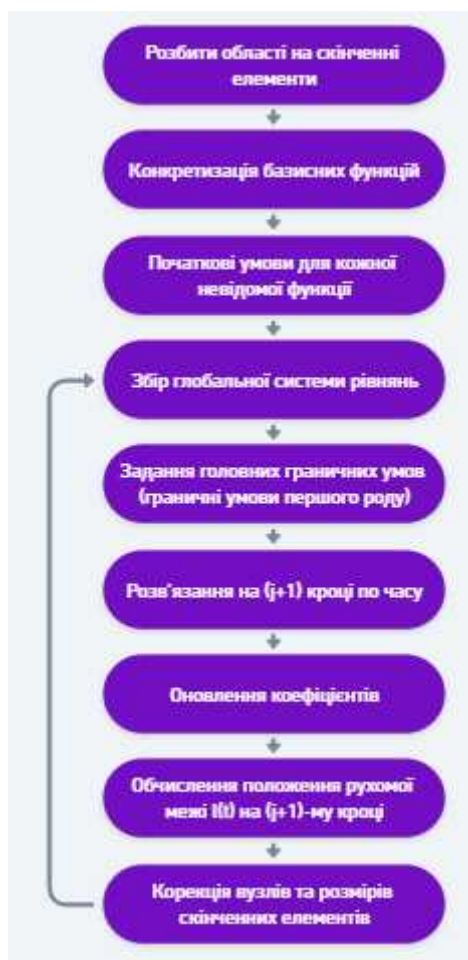


Рис.3.1.Блок-схема розв'язання крайової задачі методом скінченних елементів

Особливістю представленої схеми є врахування рухомої межі, положення якої обчислюється на кожному часовому кроці. Завершальним етапом є корекція вузлів та розмірів скінченних елементів для точнішого опису зміни геометрії області розрахунку. Цей підхід забезпечує гнучке та точне моделювання складних нестационарних процесів у середовищах із змінною структурою.

Розглянута задача є складною та об'єднує кілька нелінійних взаємопов'язаних процесів, визначених як об'єкт дослідження:

- ненасичена консолідація (процес ущільнення та деформації під дією навантажень та зміни порових тисків);
- фільтрація та вологоперенесення (надлишкові тиски в поровій рідині та значення вологості пористого середовища);

- теплоперенесення (розподіл температури з урахуванням теплопровідності, конвекції та теплогенерації в результаті біодеградації);
- біодеградація органічної складової (розкладання органічної речовини з урахуванням змінних полів температури та вологості);
- теплогенерація та газогенерація (утворення тепла та біогазу як продуктів біодеградації).

Взаємозв'язок між цими процесами є визначальним для коректного моделювання. Наприклад, біодеградація залежить від температури та вологості; вона, своєю чергою, генерує тепло та газ, що впливають на температурне поле, газовий тиск та пористість; зміна пористості внаслідок консолідації та біодеградації впливає на гідравлічні та теплові властивості (проникність, теплопровідність); порові тиски впливають на ефективні напруження та процес консолідації.

Для чисельного розв'язання системи пов'язаних нелінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних, що описують ці процеси, застосовується МСЕ. Розроблений алгоритм, представлений у вигляді блок-схеми на рис. 3.1, реалізує послідовний підхід до розв'язання системи, що є одним з методів комп'ютерного моделювання, що становить предмет дослідження.

Блок-схема візуалізує логіку виконання обчислювальних кроків. Алгоритм працює за часовими кроками. На початку кожного кроку завантажуються стан системи з попереднього кроку або виконується початкова ініціалізація.

Типовий цикл обчислень в межах одного кроку часу включає такі основні блоки:

- блок розрахунку вологоперенесення. Виходячи з поточної пористості, насиченості та температурного поля, розв'язується рівняння визначення надлишкових тисків в поровій рідині;
- блок газоперенесення. Розраховуються надлишкові тиски порового газу з урахуванням його генерації та властивостей середовища;

- блок вологості. На основі визначення всмоктуючих тисків визначається вологість (наприклад, за моделлю ван Генухтена);
- блок розрахунку теплоперенесення. З урахуванням потоків рідини/газу, теплових властивостей та швидкості генерації тепла від біодеградації, розраховується оновлене поле температури;
- блок розрахунку біодеградації та газогенерації. Використовуючи поточні значення температури та вологості, розраховується швидкість розкладання органічної речовини, об'єм виділеного газу та кількість згенерованого тепла. Оновлюється локальний вміст органіки;
- блок розрахунку механіки/консолідації. На основі поточних надлишкових тисків (рідини та газу) та властивостей матеріалу визначається положення верхньої рухомої межі масиву пористого середовища;
- блок оновлення властивостей матеріалу. На основі поточного стану системи (пористість, насиченість, температура, вміст органіки, перераховуються та оновлюються всі залежні від стану властивості матеріалу (наприклад, проникність, теплопровідність тощо).

Представлена блок-схема відображає алгоритмічну основу для чисельних методів аналізу і прогнозування процесів у пористих середовищах з органічною складовою, що є предметом дослідження. Ефективна програмна реалізація цього алгоритму дозволяє створити програмне забезпечення для моніторингу та прогнозування, що відповідає об'єкту та меті дисертаційного дослідження. Реалізація алгоритму вимагає ефективних чисельних методів для роботи з нелінійностями, забезпечення стійкості розрахунків та оптимізації обчислювальних ресурсів, що також є важливим аспектом розробки інформаційних технологій для реалізації та застосування даних моделей.

3.5. Валідація та тестування алгоритмів отримання прогностичних даних консолідації сховищ твердих побутових відходів

Валідація та тестування є невід'ємними етапами життєвого циклу розробки програмного забезпечення, особливо для складних обчислювальних систем, призначених для моделювання багатофізичних процесів. У контексті даного дисертаційного дослідження, де розробляється модельно-алгоритмічний підхід та відповідне програмне забезпечення для прогнозування стану пористих середовищ з органічною складовою, забезпечення достовірності чисельних алгоритмів є критично важливим.

Валідація у даному випадку означає процес підтвердження того, що розроблена математична модель, реалізована за допомогою чисельних алгоритмів у програмному забезпеченні, адекватно описує реальні фізичні процеси у сховищах твердих побутових відходів. Тестування алгоритмів включає перевірку коректності їхньої програмної реалізації (верифікація), стабільності, збіжності та здатності обробляти різні вхідні дані та сценарії фізичної поведінки.

Враховуючи складність об'єкта моделювання (нелінійні, взаємопов'язані процеси, що відбуваються у великомасштабному геологічному середовищі) та обмежену доступність детальних натурних експериментальних даних для повноцінної перевірки моделі, у даному розділі процес валідації та тестування алгоритмів базується на проведенні чисельних експериментів. Ці експерименти слугують для:

- верифікації коректності реалізації окремих фізичних ефектів та їх взаємозв'язків в алгоритмі шляхом порівняння результатів різних сценаріїв;
- тестування чутливості алгоритму до зміни ключових параметрів моделі та умов розрахунку;
- демонстрації здатності алгоритму відтворювати якісні закономірності поведінки системи, очікувані з фізичних міркувань та відомі з інших досліджень (часткова валідація);

– оцінки стабільності чисельного розв'язку в різних умовах моделювання.

Нижче наведено конфігурацію чисельних тестових сценаріїв, включаючи параметри моделі та умови розрахунку, які були використані для виконання завдань валідації та тестування алгоритмів.

Налаштування параметрів моделі та умов розрахунку для кожного тестового сценарію здійснювалось на основі аналізу актуальних літературних джерел, що дозволяє забезпечити фізичну релевантність вхідних даних для тестування алгоритмів

Спочатку конкретизуємо значення параметрів та функціональних залежностей, які використовувались в моделі (3.1)-(3.9). Згідно із роботою [9, формула (5)], використовуючи модель ван Генухтена, маємо

$$s_e = \left(\frac{1}{1 + (\alpha p)^{\frac{1}{1-m_{vgt}}}} \right)^{m_{vgt}},$$

де $p = u_g - u_w$ – всмоктуючий тиск, α – коефіцієнт, пов'язаний з повітряним всмоктуванням середовища; ρ_w – густина змочувальної рідини; m_{vgt} – параметр ван Генухтена:

$$s_e = \frac{s - s_r}{1 - s_r},$$

s_r – залишкове насичення, що відповідає рідкій фазі; s_e – ефективне насичення. Згідно вказаної роботи для пористого середовища сховища відходів $s_r = 0,22\sigma$; $\alpha = 2,92 \text{ кПа}^{-1}$; $m_{vgt} = 0,375$; $\sigma_0 = 0,53$. Під насиченістю s ми будемо розуміти функцію $s = \theta/\sigma$, де θ – вологість пористого середовища, а σ – його пористість.

Згідно із роботою [96]: $u_{atm} = 101,3 \cdot 10^3 \text{ Па}$, $\gamma_w = 10^4 \frac{\text{Н}}{\text{м}^3}$, $T_k = 273 \text{ К}$, $M = 0,029 \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$ молекулярна маса повітря; $R = 8,314 \frac{\text{Джоуль}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$.

Початкову насиченість приймали рівною 80%.

Відповідно до статті [96] дослідимо задачу консолідації від власної ваги масиву сховища твердих побутових відходів як пористого середовища. Тоді

$$u_g(x, 0) = R_g(\rho_{ws}gx + q_0),$$

$$u_w(x, 0) = R_w(\rho_{ws}gx + q_0),$$

де R_g та R_w – проміжні параметри для розрахунку початкових умов; q_0 – додаткове навантаження на поверхню пористого середовища. Також в даній роботі наведено методику визначення R_g та R_w

$$R_g = \frac{R_4 - R_2}{R_1 R_4 - R_2 R_3}, R_w = \frac{R_1 - R_3}{R_1 R_4 - R_2 R_3},$$

$$R_1 = \frac{m_{1k}^g - m_{2k}^g - \frac{n}{u_g + u_{atm}}(1 - s + hs)}{m_{1k}^g},$$

$$R_2 = \frac{m_{2k}^g - sn\beta_w(1 - h)}{m_{1k}^g}, R_3 = \frac{m_{1k}^w - m_{2k}^w}{m_{1k}^w},$$

$$R_4 = \frac{m_{2k}^w - sn\beta_w}{m_{1k}^w}.$$

Де h – об'ємний коефіцієнт розчинності повітря у воді за законом Генрі; β_w – стискуваність води. Зважаючи на використані в чисельних експериментах роботи [103] значення розподілів початкових тисків від миттєво прикладеного зовнішнього навантаження, в чисельних експериментах ми використали значення

$$R_g = \frac{1}{3}, R_w = \frac{2}{3}.$$

Граничні умови визначаються фізичними умовами на межах пористого середовища. Верхня межа вважається дренажною, а нижня – непроникною. Тому маємо

$$u_g(x, t)|_{x=l(t)} = 0, u_w(x, t)|_{x=l(t)} = 0, t \geq 0,$$

$$v_g(x, t)|_{x=L} = \left(-k_g \frac{\partial u_g}{\partial x}\right)\bigg|_{x=L} = 0, v_w(x, t)|_{x=L} = \left(-\frac{k_w}{\gamma_w} \frac{\partial u_w}{\partial x}\right)\bigg|_{x=L} = 0, t \geq 0.$$

Згідно з роботою [96]

$$m_1^s = -2,5 \cdot 10^{-7} \frac{1}{Pa}; \quad \frac{m_2^s}{m_1^s} = 0,4; \quad \frac{m_1^w}{m_1^s} = 0,2; \quad \frac{m_2^w}{m_1^s} = 4.$$

Тут

$$m_1^s = m_1^g + m_1^w,$$

$$m_2^s = m_2^g + m_2^w.$$

Аналогічні значення параметрів використовувались в роботі [127].

Згідно з роботою [106, формула (21)]

$$k_w = k_w^{sat} s_e^l \left(1 - \left(1 - s_e^{1/m_{vgt}} \right)^{m_{vgt}} \right)^2$$

де l – коефіцієнт зв'язності пор; k_w^{sat} – коефіцієнт фільтрації для випадку повного насичення. У вказаній роботі запропоновано $l = 0,5$.

Згідно з роботою [128]

$$k_g = k_g^{sat} (1 - s_e)^l \left(1 - s_e^{1/m_{vgt}} \right)^{2m_{vgt}}$$

де k_g^{sat} – коефіцієнт газоперенесення на випадок $s = s_r$.

Як показано в роботі [129] параметри моделі ван Генухтена змінюються залежно від вмісту органічних речовин в пористому середовищі. Тому вони будуть динамічно змінюватись в процесі біодеградації. Зважаючи на складність та недостатню кількість таких експериментів, їх залежність від багатьох факторів, в даному дисертаційному дослідженні ми приймемо їх сталими.

Згідно залежності

$$\frac{d\sigma}{dt} = -(m_{1k}^w + m_{1k}^g) \frac{\partial(\delta - u_g)}{\partial t} - (m_{2k}^w + m_{2k}^g) \frac{\partial(u_g - u_w)}{\partial t} - \frac{\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}(x, t)}{\partial t}$$

отримуємо

$$\frac{d\sigma}{dt} = (m_{1k}^w + m_{1k}^g - m_{2k}^w - m_{2k}^g) \frac{\partial u_g}{\partial t} + (m_{2k}^w + m_{2k}^g) \frac{\partial u_w}{\partial t} - \frac{\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}(x, t)}{\partial t}.$$

Далі

$$\frac{\sigma^{(j+1)} - \sigma^{(j)}}{\tau} = (m_{1k}^w + m_{1k}^g - m_{2k}^w - m_{2k}^g) \frac{u_g^{(j+1)} - u_g^{(j)}}{\tau} +$$

$$\begin{aligned}
& + (m_{2k}^w + m_{2k}^g) \frac{u_w^{(j+1)} - u_w^{(j)}}{\tau} - \frac{\beta}{\rho_{ws}} \frac{m_{ws}^{(j+1)} - m_{ws}^{(j)}}{\tau}, \\
\sigma^{(j+1)} = & \sigma^{(j)} + (m_{1k}^w + m_{1k}^g - m_{2k}^w - m_{2k}^g) (u_g^{(j+1)} - u_g^{(j)}) + \\
& + (m_{2k}^w + m_{2k}^g) (u_w^{(j+1)} - u_w^{(j)}) - \frac{\beta}{\rho_{ws}} (m_{ws}^{(j+1)} - m_{ws}^{(j)}), j = 0, 1, 2, \dots
\end{aligned}$$

Згідно з роботою [53] коефіцієнт біодеградації залежить від температури та вологості. При цьому коефіцієнт біодеградації лінійно залежить від вологості і відношення його максимального значення (при $s = 1$) до його мінімального значення (при $s = s_r$) складає 6. Тоді

$$k_{ws}(s, T) = (ms_e + n)f_T$$

де n та m – лінійні константи, що базуються на нижній і верхній границях k_{ws} , які були прийняті рівними $n = 0,2m$ та $m = 0,67 \cdot 10^{-3} \frac{1}{\text{доба}}$ відповідно. Для врахування впливу температури на процеси біодеградації використано функцію від [54]

$$f_T = 4 \frac{T^6}{(K_T^6 + T^6)} \frac{K_T^7}{(K_T^7 + T^7)}$$

де K_T – константа, що дорівнює 37°C . У цьому випадку максимальне значення коефіцієнта біодеградації становить $0,67 \cdot 10^{-3} \frac{1}{\text{день}}$ і досягається при температурі 37°C . Зауважимо, що оскільки склад відходів усереднений, то процеси біодеградації розглядаються для відходів із середнім рівнем розкладу - паперових продуктів.

Згідно з роботою [12] коефіцієнт фільтрації відходів варіюється в дуже широких межах. В даній роботі ми використали значення

$$k_w^{sat} = 0,03888 \frac{\text{м}}{\text{доба}}.$$

Для модельної задачі розглянуто шар пористого середовища товщиною $l = 10$ м. Крок по змінній x становив $0,01$ м, крок по часу $\tau = 0,5$ доба. В якості базисних функцій МСЕ використовувались кусково-квадратичні.

Функцію теплогенерації, як результат біодеградації, в рівнянні (3.3) згідно з роботою [12] взято у вигляді

$$Q(u_g, u_w, T, m_{ws}, x, t) = \Delta H \frac{\partial m_{ws}}{\partial t},$$

де ΔH – ентальпія процесів біологічного розкладу. Зважаючи на залежність (3.4), ми маємо

$$Q(u_g, u_w, T, m_{ws}, x, t) = -\Delta H k_{ws}(u_g, u_w, T) m_{ws}.$$

Для аеробного процесу ентальпія фазового переходу (для процесів біодеградації) була прийнята рівною $-17,36 \cdot 10^6 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$, а для анаеробного процесу $-16,72 \cdot 10^5 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$.

Згідно з [68]

$$\rho = 1000 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}; c_\rho = 4,184 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot ^\circ\text{C}};$$

$$c_{ws} = 1,00416 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot ^\circ\text{C}};$$

$$\rho_{ws} = 1200 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}.$$

Згідно з [53, Таблиця 1]

$$\lambda = 1,00416 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot ^\circ\text{C}}.$$

Опишемо схему розрахунку генерації газу. Згідно, наприклад [130]

$$\frac{\partial V(x, t)}{\partial t} = k_{ws}(s, T) m_{ws}(x, t) L_0 e^{-k_{ws}t}.$$

Отже, в рівнянні (3.1)

$$f_g(u_g, u_w, T, m_{ws}, x, t) = k_{ws}(s, T) m_{ws}(x, t) L_0 e^{-k_{ws}t}.$$

Розглядаючи рівняння (3.4) з наведеного вище співвідношення, маємо

$$\frac{\partial V(x, t)}{\partial t} = -L_0 \frac{\partial m_{ws}}{\partial t} e^{-k_{ws}t}.$$

Далі, виконавши дискретизацію за часом, отримаємо

$$\frac{V^{(j+1)} - V^{(j)}}{\tau} = -L_0 \frac{m_{ws}^{(j+1)} - m_{ws}^{(j)}}{\tau} e^{-k_{ws}^{(j+1)} t_{j+1}}.$$

або

$$V^{(j+1)} = V^{(j)} - L_0 \left(m_{ws}^{(j+1)} - m_{ws}^{(j)} \right) e^{-k_{ws}^{(j+1)} t_{j+1}}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, m_\tau - 1.$$

Наведена вище формула стосується $\forall x \in [l^{(j)}; L]$. Якщо розглядати $V(t)$ як загальний об'єм газогенерації, що виділяється за час $t \geq 0$ з одиниці площі полігону, то

$$V^{(j+1)} = V^{(j)} - L_0 \int_{l^{(j)}}^L \left(m_{ws}^{(j+1)} - m_{ws}^{(j)} \right) e^{-k_{ws}^{(j+1)} t_{j+1}} dz, \quad j = 0, 1, 2, \dots, m_\tau - 1.$$

Згідно з роботою [130] $L_0 = 0,2 \text{ м}^3/\text{кг}$. Відмітимо, що в оригіналі дане значення складає $0,1 \text{ м}^3/\text{кг}$, однак це значення вказане стосовно суто метану. Приймаючи до уваги, що метан складає приблизно 50% від виділених парникових газів зі сховищ твердих побутових відходів, ми в чисельних експериментах використовували значення $0,2 \text{ м}^3/\text{кг}$.

Для верифікації коректності реалізації окремих взаємозв'язків та тестування поведінки алгоритмів проведено 4 чисельні експерименти.

Чисельний експеримент 3.1

Мета тестування чисельного експерименту 3.1 полягає в перевірці здатності алгоритму розв'язувати повну зв'язану систему рівнянь, включаючи всі змодельовані нелінійні взаємозв'язки. Цей тест є інтеграційним (перевіряє взаємодію різних алгоритмічних блоків) і слугує основою для порівняння зі спрощеними сценаріями.

В даному чисельному експерименті враховано впливи біодеградації, вологості та температури. При цьому коефіцієнт фільтрації у випадку насиченого пористого середовища приймався рівним

$$k_{sat}^w = 0,03888 \text{ м/доба},$$

а коефіцієнт газоперенесення у випадку відсутності вологи

$$k_{sat}^g = 0,1 k_{sat}^w.$$

В якості вхідних даних чисельного експерименту 3.1 використовувались наступні

$$T|_{x=l(t)} = T_{top} = 30^{\circ}\text{C}, T|_{t=0} = T_0 = 15^{\circ}\text{C}, m_{wst}|_{t=0} = 300 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},$$

$$l|_{t=0} = l_0 = 10 \text{ м}, \beta = \frac{1}{2}.$$

Розглядався анаеробний процес із значенням ентальпії $\Delta H = -16,72 \cdot 10^5 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$. Результати наведено в Табл.3.1

Таблиця 3.1

Результати експерименту 3.1 на нижній непроникній межі масиву відходів

t , дні	u_g , Па	u_w , Па	T , °C	m_{wst} , $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	просідання, м	G , м^3	насиченість
20	241,62	16395,26	15,27	299,55	0,6835	2,56	1
50	422,75	4130,31	15,73	298,78	0,7863	10,16	1
100	842,19	735,76	16,74	297,17	0,8435	34,20	0,9426
150	883,07	636,77	18,49	294,97	0,9468	64,96	0,8435
200	821,50	503,73	30,66	285,79	1,0424	99,18	0,7881
250	785,79	427,69	53,51	261,06	1,1115	124,23	0,7607
300	638,87	281,79	59,43	253,86	1,1539	139,34	0,7603
350	548,17	188,21	62,77	249,55	1,1871	150,77	0,7594
400	489,61	125,51	65,05	246,39	1,2152	160,13	0,7567
450	449,09	81,22	66,72	243,84	1,2399	168,12	0,7543
500	419,40	48,84	67,99	241,67	1,2623	175,14	0,7525

Чисельний експеримент 3.2

Мета тестування чисельного експерименту 3.2 полягає в оцінці впливу спрощення моделі біодеградації на загальну динаміку та верифікація того, що алгоритм коректно обробляє сценарій з відключеними залежностями кінетики від температури та вологості, а також демонстрація кількісного впливу цих залежностей на результати.

Всі вхідні параметри – такі ж, як і в Експерименті 3.1. Однак, тут враховано лише процес біодеградації із сталим, осередненим коефіцієнтом. Вплив температури та вологості на біодеградаційні процеси не враховано.

Таблиця 3.2

Результати експерименту 3.2 на нижній непроникній межі масиву відходів

t , дні	u_g , Па	u_w , Па	T , °C	m_{wst} , $\frac{\text{КГ}}{\text{М}^3}$	просідання, м	G , М^3	насиченість
20	600,28	16487,20	15,80	298,68	0,6801	3,17	1
50	604,65	4068,16	16,98	296,70	0,7798	7,87	1
100	1098,80	802,96	19,11	293,44	0,8227	15,57	0,9026
150	703,20	421,37	21,42	290,21	0,8351	23,10	0,8138
200	636,93	325,59	23,85	287,02	0,8517	30,47	0,7926
250	593,30	260,25	26,39	283,87	0,8675	37,67	0,7775
300	560,54	210,87	28,99	280,75	0,8830	44,72	0,7663
350	533,97	171,26	31,58	277,66	0,8981	51,61	0,7576
400	511,37	138,36	34,13	274,61	0,9130	58,36	0,7509
450	491,53	110,42	36,59	271,59	0,9276	64,95	0,7457
500	473,73	86,38	38,96	268,60	0,9420	71,40	0,7418

Чисельний експеримент 3.3

Мета тестування чисельного експерименту 3.3 полягає в дослідженні чутливості розв'язку до зміни параметрів, що впливають на багатозфазну фільтрацію та оцінка стабільності чисельного алгоритму при значній зміні коефіцієнта газоперенесення, що може впливати на умови збіжності ітераційних процесів.

Все теж саме, що і в Експерименті 3.1, окрім того, що $k_{sat}^g = 1,0k_{sat}^w$.

Таблиця 3.3

Результати експерименту 3.3 на нижній непроникній межі масиву відходів

t , дні	u_g , Па	u_w , Па	T , °C	m_{wst} , $\frac{\text{КГ}}{\text{М}^3}$	просідання, м	G , М^3	насиченість
20	24,68	16315,55	15,27	299,55	0,6868	2,56	1
50	47,63	4037,01	15,73	298,78	0,7919	10,16	1
100	134,49	423,68	16,75	297,10	0,8808	36,10	1

Продовження табл. 3.3

150	304,22	111,10	18,49	294,76	0,9612	66,26	0,8815
200	292,27	18,60	30,40	285,32	1,0546	98,18	0,8198
250	205,83	-97,91	53,46	259,52	1,1209	122,47	0,7980
300	183,99	-147,85	59,37	252,08	1,1606	137,44	0,7783
350	172,67	-183,80	62,66	247,71	1,1922	148,82	0,7616
400	175,82	-204,21	64,89	244,55	1,2195	158,30	0,7464
450	72,95	-289,75	66,53	242,02	1,2409	166,48	0,7207
500	65,33	-273,56	67,82	239,85	1,2632	173,65	0,7359

Чисельний експеримент 3.4

Мета тестування чисельного експерименту 3.4 полягає в ізоляції ефектів біодеградації та верифікація коректності функціонування «базових» алгоритмічних блоків, що відповідають за гідромеханічну консолідацію ненасиченого середовища під дією власної ваги та вологоперенесення, при відсутності біохімічних джерел.

Теж саме, що в Експерименті 3.1, але взагалі без урахування впливу біодеградаційних процесів на процеси консолідації та просідання.

Таблиця 3.4

Результати експерименту 3.4 на нижній непроникній межі масиву відходів

t , дні	u_g , Па	u_w , Па	T , °C	m_{wst} , $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	просідання, м	G , м ³	насиченість
20	-32,85	16292,23	15,00	300	0,6826	0	1
50	-8,12	4028,38	15,00	300	0,7716	0	1
100	-0,791	392,49	15,00	300	0,7980	0	1
150	-0,077	38,24	15,03	300	0,8005	0	1
200	-0,008	3,73	15,14	300	0,8008	0	1
250	-0,001	0,363	15,34	300	0,8008	0	1
300	0,000	0,035	15,62	300	0,8008	0	1
500	0,000	0,000	17,18	300	0,8008	0	1

Результати чисельних експериментів, представлені в Табл. 3.1-3.4, дозволяють провести аналіз поведінки розроблених чисельних алгоритмів під впливом різних фізичних сценаріїв. Цей аналіз є ключовим для їхньої верифікації, тестування та демонстрації функціональності.

Як видно з результатів Табл.3.1, температури в околі нижньої непроникної межі сховища відходів на 500-ту добу сягає 67,99 °C, а загальні просідання(зміщення верхньої межі масиву) складають 1,2623 м. Ці суттєві значення в просіданнях є прямим свідченням того, що алгоритм коректно реалізує механізм об'ємних змін, спричинених біодеградацією, і успішно інтегрує його з процесами гідромеханічної консолідації. При цьому, надлишкові тиски в газовій компоненті різко зменшуються в буквально впродовж перших діб від початку процесу консолідації, потім зростають до 150-ї доби, а далі – починають стабільно зменшуватись. Зростання газових тисків є опосередкованим показником інтенсифікації газогенерації під впливом підвищення температури. Однак подальше підвищення температури призводить до зменшення інтенсивності біодеградаційних процесів, і відповідно, газогенерації. В той же час, надлишкові тиски в поровій рідині зменшуються постійно, починаючи від перших моментів консолідації.

Нехтування впливом вологості та температури на коефіцієнт біодеградації (результати в Табл.3.2) досить кардинально впливають на рівень температур (38,96 °C в порівнянні із 67,99 °C Табл.3.1). Також зменшується і рівень просідання верхньої межі пористого середовища – 0,9420 м, що на 25,4% менше в порівнянні з результатами експерименту 3.1. Спостереження цього нелінійного ефекту в результатах моделювання підтверджує, що алгоритм коректно реалізує зв'язані блоки біодеградації та теплогенерації, включаючи складну залежність швидкості реакції від фізичних умов. Це є важливим тестом на функціональність та верифікацію цих інтегрованих частин алгоритму.

Результати таблиці 3.3 показують зміни в розподілах невідомих фізичних полів та величин при зміні значення коефіцієнта перенесення газу в

пористому середовищі. При цьому в певний момент часу тиски в поровій рідині стають від'ємними, що говорить про перехід пористого середовища в переконсолідований стан. Однак відмінності, наприклад, в значеннях температури та просідань є незначними.

Результати таблиці 3.4 дозволяють оцінити процеси взагалі без впливу біодеградаційних процесів. Фактично можна зробити висновки, що в такому випадку на 200-ту добу процес консолідації фактично завершився. При цьому загальні значення просідань дозволяють оцінити, яка частка в просіданнях таблиці 3.1 є результатом зміни напружено-деформівного стану середовища, а яка – наслідком біодеградаційних процесів. Зокрема згідно з таблицею 3.1, просідання в 0,8008 м складає 63,4% від просідання 1,2623 м. Тобто, просідання внаслідок біодеградаційних процесів для даного випадку складають 36,6% від загальних просідань.

Однак, як видно із результатів Табл.3.1, при зростанні максимальної температури (внаслідок виділення тепла при біодеградації) інтенсивність біодеградаційних процесів починає знижуватись, а отже знижується динаміка газогенерації та просідань. Це відповідає суті процесу. Адже при температурі вище 38°C інтенсивність діяльності мікроорганізмів починає знижуватись, а звідси – знижується інтенсивність біодеградації. Це ще раз доводить необхідність урахування взаємозв'язаних процесів тепло-вологоперенесення при моделюванні стану сховищ відходів.

Проведений комплекс чисельних експериментів відіграв ключову роль у процесі валідації та тестування розроблених алгоритмів консолідації сховищ твердих побутових відходів. Шляхом порівняльного аналізу результатів різних тестових сценаріїв успішно продемонстровано здатність алгоритмів розв'язувати складну зв'язану нелінійну задачу, коректно враховувати вплив біодеградації, теплоутворення та газогенерації, а також їх взаємозв'язки з гідромеханічними процесами. Отримані результати слугують вагомим свідченням верифікації програмної реалізації та підтверджують функціональність модельно-алгоритмічного підходу, що є необхідною

умовою для його застосування в розроблюваному програмному забезпеченні та відповідає меті, об'єкту та предмету даного дисертаційного дослідження.

Висновки до розділу 3

Основними результатами розділу 3 є розроблення алгоритмів чисельного моделювання та їх програмна реалізація для опису процесів ущільнення пористих середовищ і газоутворення у сховищах твердих побутових відходів із урахуванням біодеградаційних процесів. Зокрема:

1. Сформовано алгоритм чисельного розв'язання, як крайової задачі математичної фізики, математичної моделі ненасиченої консолидації сховища твердих побутових відходів. При цьому враховано біодеградацію органічної складової, а також зворотний вплив вологості та температури на інтенсивність біодеградаційних процесів. При цьому розміри області консолидації змінюються за рахунок як процесів ущільнення, так і процесу зміни об'єму твердої фази пористого середовища.

2. Проведені чисельні експерименти стосовно ненасиченої консолидації сховища твердих побутових відходів показали наступне. На 500-ту добу моделювання (Табл.3.1) температура поблизу нижньої непроникної межі сховища досягає $67,99^{\circ}\text{C}$, загальні просідання становлять 1,2623 м. Надлишковий тиск у газовій фазі спочатку різко зменшується, зростає до 150-ї доби, після чого стабільно знижується. У рідкій фазі тиск зменшується з самого початку процесу.

При нехтуванні впливом температури й вологості на біодеградацію (Табл.3.2) температура знижується до $38,96^{\circ}\text{C}$, а просідання – до 0,9420 м, що на 25,4% менше, ніж у базовому випадку.

3. Проведено верифікацію та валідацію розроблених алгоритмів чисельного моделювання ненасиченої консолидації з урахуванням біодеградаційних процесів, що дозволило підтвердити коректність їх реалізації та адекватність результатів моделювання реальним фізичним

процесам. Крім того, сформовано блок-схему алгоритму чисельного розв'язання задачі, яка узагальнює послідовність обчислювальних процедур і враховує взаємозв'язані процеси тепло- та вологоперенесення, біодеградації й газогенерації, що забезпечує гнучкість адаптації алгоритму до різних сценаріїв та умов моделювання.

За даними Табл.3.3, при зміні коефіцієнта перенесення газу в певний момент тиск у поровій рідині стає від'ємним, що вказує на переконасолідований стан. Водночас, зміни температури й просідань залишаються незначними.

У випадку повного виключення біодеградації (Табл.3.4), процес консолідації практично завершується на 200-ту добу, а просідання становлять 0,8008 м. Таким чином, вплив біодеградації становить 36,6% від загальних деформацій.

При підвищенні температури вище 38 °C інтенсивність біодеградації знижується, що призводить до зменшення темпів газогенерації та просідання. Це підтверджує необхідність врахування взаємозв'язаних процесів тепло- та вологоперенесення у математичних моделях сховищ ТПВ.

РОЗДІЛ 4. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВИДІЛЕННЯ ПАРНИКОВИХ ГАЗІВ ІЗ НЕНАСИЧЕНИХ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩ З УРАХУВАННЯМ ТОНКИХ ПРИМЕЖОВИХ ШАРІВ

4.1. Формалізація задачі та побудова комп'ютерно орієнтованої математичної моделі викидів парникових газів в середовищі з примежовим шаром

В рамках дисертаційного дослідження, що сфокусоване на розробці модельно-алгоритмічного підходу та відповідного програмного забезпечення для прогнозування процесів у пористих середовищах з органічною складовою, критично важливим етапом є формалізація задачі та побудова математичної моделі. Враховуючи об'єкт дослідження – програмне забезпечення для моніторингу та прогнозування нелінійних взаємопов'язаних процесів, включаючи генерацію парникових газів, та предмет дослідження – методи комп'ютерного моделювання та числові алгоритми, основна увага приділена створенню моделі, придатної для ефективного обчислювального аналізу та реалізації.

Фізична постановка задачі полягає у розгляді динаміки стану пористого середовища, зокрема, шару ґрунту, що містить органічну складову, в контексті процесів, які призводять до генерації парникових газів. Основними взаємопов'язаними процесами є біодеградація органічної речовини, вологоперенесення, теплоперенесення та, як наслідок, генерація та перенесення газів. Розглянемо шар ґрунту Ω (рис. 4.1). Зверху, на контакт з атмосферою, знаходиться тонкий примежовий шар пористого матеріалу Ω_δ , фізичні характеристики якого відрізняються від аналогічних характеристик ґрунту в області Ω [80]. Необхідно побудувати математичну модель, що описує динаміку ключових параметрів, які впливають на інтенсивність біодеградації, волого- та теплообміну, та визначити її структуру для подальшої комп'ютерної реалізації. Це дозволить дослідити вплив різних факторів, включаючи

наявність тонкого примежового шару, на динаміку процесів, що передують або супроводжують генерацію парникових газів.

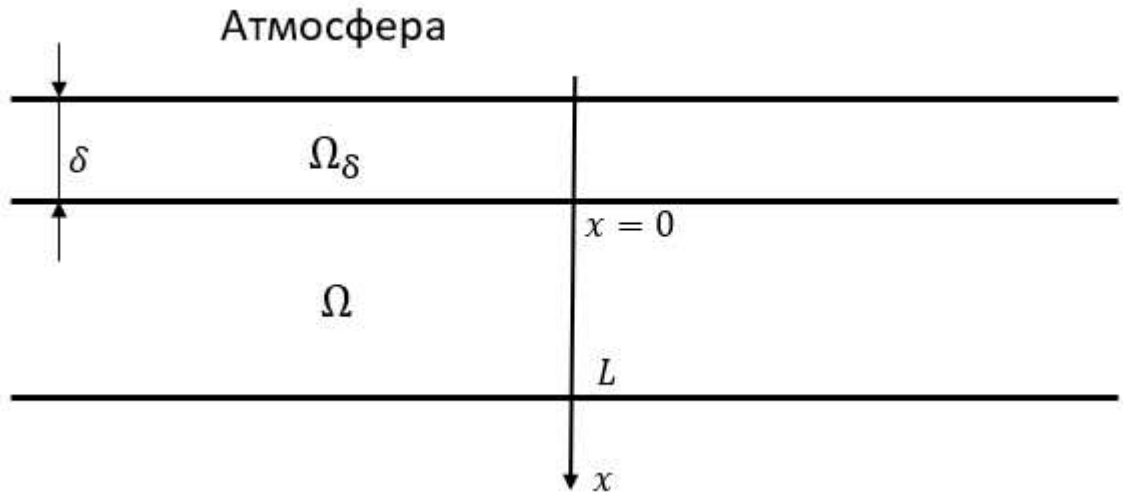


Рис.4.1.Масив ґрунту Ω із тонким верхнім шаром Ω_δ

Для опису динаміки взаємопов'язаних процесів у пористому середовищі, які є ключовими драйверами для генерації парникових газів (наприклад, CO_2 , CH_4 в процесі біодеградації), використовується система нелінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних. Представлений нижче модельний базис фокусується на динаміці вологи та тепла, а також зміні маси органічної складової, які є визначальними для кінетики біодеградації та умов емісії газів. Математична модель описуватиметься наступною крайовою задачею для системи нелінійних рівнянь

$$\sigma \frac{\partial s}{\partial t} + s \frac{\beta k_{ws}(s, T)}{\rho_{ws}} m_{ws} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_p \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial x} - \frac{s\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial k_p}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x},$$

$$x \in \Omega = (0; L), t > 0, \quad (4.1)$$

$$c_T \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \rho c_p u \frac{\partial T}{\partial x} + Q(x, t, s, T), x \in \Omega, t > 0, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial m_{ws}}{\partial t} = -k_{ws}(s, T) m_{ws}, x \in \bar{\Omega}, t > 0, \quad (4.3)$$

$$u(x, t)|_{x=L} = \left(-D_p \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial x} - \frac{s\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial x} \right) - k_p \right) \Big|_{x=L} = 0, t \geq 0, \quad (4.4)$$

$$\left(-\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right)\Big|_{x=L} = 0, t \geq 0, \quad (4.5)$$

$$s(x, 0) = s_0(x), x \in \bar{\Omega} = [0; L], \quad (4.6)$$

$$T(x, 0) = T_0(x), x \in \bar{\Omega} = [0; L], \quad (4.7)$$

$$m_{ws}(x, t)|_{t=0} = m_0(x), x \in \bar{\Omega}, \quad (4.8)$$

$$\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=0} = -\frac{T|_{x=0} - T_a}{\int_0^\delta \frac{dx}{\lambda_\delta(T)}}, \quad (4.9)$$

$$\left(D_p \sigma \frac{\partial s}{\partial x} + k_p\right)\Big|_{x=0} = -\frac{\sigma \cdot s|_{x=0} - \theta_a}{\int_0^\delta \frac{dx}{D_\delta}} - \frac{\delta}{\int_0^\delta \frac{dx}{k_\delta}} \quad (4.10)$$

Тут σ – змінна пористість, s – насиченість пористого середовища, $\beta \in [0; 1]$ – відносний коефіцієнт, який показує який відносний об'єм біодеградованих решток залишається у вигляді пустот, k_{ws} – коефіцієнт біодеградації, який залежить від температури та насиченості, ρ_{ws} – густина органічних відходів; m_{ws} – маса органічних відходів в одиниці об'єму пористого середовища; $D_p = -k_p \partial \psi / \partial \theta$ – коефіцієнт дифузії ґрунтової вологи; ψ – потенціал ґрунтової вологи; k_p – коефіцієнт вологоперенесення, який в даному випадку залежить від насиченості, c_T – об'ємна теплоємність пористого середовища; λ – коефіцієнт теплопровідності пористого середовища; ρ, c_p – густина та питома теплоємність порової рідини, $Q(x, t, s, T)$ – функція, яка задає теплогенерацію в результаті біодеградації, і яка сама залежить від температури та вологості пористого середовища, u – швидкість вологоперенесення, яка визначається згідно закону Дарсі-Клюта на випадок змінної пористості $u = -D_p \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial x} - \frac{s\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial x} \right) - k_p$, $\lambda_\delta(T)$ – коефіцієнт теплопровідності матеріалу примежового шару; T_a – температура атмосферного повітря вище примежового шару, D_δ – коефіцієнт дифузії вологи у примежовому шарі, θ_a – атмосферна вологість, k_δ – коефіцієнт вологоперенесення у примежовому шарі.

Представлена математична модель є комп'ютерно орієнтованою, оскільки її складність, нелінійність та зв'язаний характер рівнянь вимагають

застосування чисельних методів для отримання розв'язку. Процес побудови комп'ютерної моделі передбачає:

- дискретизацію області дослідження та часового інтервалу;
- апроксимацію диференціальних операторів чисельними схемами (наприклад, методом скінченних різниць, скінченних елементів або скінченних об'ємів), що призводить до системи алгебраїчних рівнянь;
- розробку та застосування ефективних чисельних алгоритмів для розв'язання отриманої системи нелінійних алгебричних рівнянь на кожному часовому кроці;
- реалізацію моделі у вигляді програмного коду, що дозволяє виконувати обчислювальні експерименти, симулювати динаміку процесів та отримувати прогнознi дані. Саме цей етап є безпосереднім предметом дослідження в частині розробки програмного забезпечення.

Таким чином, формалізація задачі у вигляді системи рівнянь та умов (4.1)-(4.10), адаптованих для чисельного розв'язання, закладає необхідну теоретичну та обчислювальну основу для реалізації модельно-алгоритмічного підходу та розробки програмного забезпечення для прогнозування стану пористих середовищ та пов'язаної з ним генерації парникових газів.

4.2. Програмна реалізація: дискретизація моделі, побудова обчислювального алгоритму та блок-схема програмної реалізації

Ефективна програмна реалізація побудованої математичної моделі є центральним завданням дисертаційного дослідження, що відповідає його об'єкту та предмету. Оскільки точний розв'язок крайової задачі (4.1)-(4.10) для системи нелінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних не можна подати в аналітичному вигляді, перехід від неперервної математичної моделі до дискретної комп'ютерно орієнтованої форми є необхідним етапом. Цей процес включає дискретизацію розрахункової області та часового інтервалу, апроксимацію диференціальних операторів та граничних умов чисельними

схемами, а також розробку обчислювального алгоритму, що забезпечує стійке та ефективно отримання чисельного розв'язку.

Покриємо область $\bar{Q}_t = [0; l] \times [0; t]$ рівномірною сіткою $\bar{Q}_t^{(n,m)} = [0; nh] \times [0; m\tau]$ з кроками h та τ відповідно по змінній x та часу t , де n – кількість кроків по просторовій змінній, m – кількість кроків по часу.

Для дискретизації рівняння (4.1) використаємо монотонну різницеву схему [23]. В результаті отримаємо наступний скінченнорізницеви аналог диференціального рівняння (4.1)

$$\begin{aligned} & \sigma_i^{(j)} \frac{s_i^{(j+1)} - s_i^{(j)}}{\tau} + s_i^{(j+1)} \frac{\beta(k_{ws})_i^{(j)}}{\rho_{ws}} (m_{ws})_i^{(j)} = \\ & = \frac{\omega_i^{(j)}}{h} \left(\overline{(D_p \sigma)}_{i+1}^{(j)} \frac{s_{i+1}^{(j+1)} - s_i^{(j+1)}}{h} - \overline{(D_p \sigma)}_i^{(j)} \frac{s_i^{(j+1)} - s_{i-1}^{(j+1)}}{h} \right) + \\ & + \frac{(v^+)_i^{(j)}}{(D_p \sigma)_{i+1}^{(j)}} \frac{s_{i+1}^{(j+1)} - s_i^{(j+1)}}{h} + \frac{(v^-)_i^{(j)}}{(D_p \sigma)_i^{(j)}} \frac{s_i^{(j+1)} - s_{i-1}^{(j+1)}}{h}, \\ & i = \overline{1, n-1}, \quad j = \overline{0, m-1}, \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} \overline{(D_p \sigma)}_i^{(j)} &= \frac{1}{2} \cdot \left((D_p \sigma)_i^{(j)} + (D_p \sigma)_{i-1}^{(j)} \right), \quad (v^-)_i^{(j)} = \frac{\left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_i^{(j)} - \left| \left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_i^{(j)} \right|}{2} \geq 0 \\ (v^+)_i^{(j)} &= \frac{\left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_i^{(j)} + \left| \left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_i^{(j)} \right|}{2} \geq 0, \\ \omega_i^{(j)} &= \frac{1}{1 + \frac{h \cdot \left| \left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_i^{(j)} \right|}{2 \cdot (D_p \sigma)_i^{(j)}}} = 1 - \frac{h \cdot \left| \left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_i^{(j)} \right|}{2 \cdot (D_p \sigma)_i^{(j)}} + O(h^2). \end{aligned}$$

У вищенаведених апроксимаціях враховано, що

$$D_p \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial x} - \frac{s \beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial x} \right) = D_p \frac{\partial}{\partial x} (\sigma s).$$

Тоді

$$D_p \frac{\partial}{\partial x} (\delta s) \Big|_{t=t_{j+1}} \approx D_p^{(j)} \sigma^{(j)} \left(\frac{\partial s}{\partial x} \right)^{(j+1)} + O(\tau).$$

Для знаходження $s(x, t)$ з вищенаведеного різницевого рівняння використаємо метод прогонки [23]. Для цього запишемо дане рівняння в прогоночному вигляді

$$a_i \cdot s_{i-1}^{(j+1)} - c_i \cdot s_i^{(j+1)} + b_i \cdot s_{i+1}^{(j+1)} = -s_i^{(j)},$$

де

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{\tau}{\sigma_i^{(j)}} \left(\frac{\omega_i^{(j)} \overline{(D_p \sigma)}_i^{(j)}}{h^2} - \frac{(v^-)_i^{(j)}}{(D_p \sigma)_i^{(j)} h} \right), \\ b_i &= \frac{\tau}{\sigma_i^{(j)}} \left(\frac{\omega_i^{(j)} \overline{(D_p \sigma)}_{i+1}^{(j)}}{h^2} + \frac{(v^+)_i^{(j)}}{(D_p \sigma)_{i+1}^{(j)} h} \right), \\ c_i &= 1 + \frac{\tau}{\sigma_i^{(j)}} \left(\frac{\beta(k_{ws})_i^{(j)}}{\rho_{ws}} (m_{ws})_i^{(j)} + \frac{\omega_i^{(j)}}{h} \left(\frac{\overline{(D_p \sigma)}_{i+1}^{(j)}}{h} + \frac{\overline{(D_p \sigma)}_i^{(j)}}{h} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{(v^+)_i^{(j)}}{(D_p \sigma)_{i+1}^{(j)} h} - \frac{(v^-)_i^{(j)}}{(D_p \sigma)_i^{(j)} h} \right). \end{aligned}$$

Умови $|c_i| > |a_i| + |b_i|$ стійкості прогонки виконуються.

Значення насиченості на часовому шарі $(j + 1)$ послідовно знаходимо, використовуючи співвідношення

$$s_i^{(j+1)} = \alpha_{i+1} \cdot s_{i+1}^{(j+1)} + \beta_{i+1}, \quad (4.11)$$

де

$$\alpha_{i+1} = \frac{b_i}{c_i - a_i \alpha_i}, \quad \beta_{i+1} = \frac{a_i \beta_i + c_i^{(j)} + s_i^{(j+1)}}{c_i - a_i \alpha_i}.$$

Для початкових умов (4.6) отримаємо наступні скінченнорізницеві аналоги:

$$s_i^{(0)} = s_0(ih), \quad i = \overline{0, n}. \quad (4.12)$$

Апроксимуємо граничну умову (4.10). Розглянемо вираз

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \left(D_{p_1}^{(j)} + D_{p_0}^{(j)} \right) \sigma \frac{s_1^{(j+1)} - s_0^{(j+1)}}{h} + \frac{1}{2} \left(k_{p_1}^{(j)} + k_{p_0}^{(j)} \right) = \\
& = \left[D_{p_0}^{(j)} + \frac{1}{2} h \frac{\partial D_p}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + O(h^2) \right] \sigma \left(\frac{\partial s}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + \frac{1}{2} h \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + O(h^2) \right) + \\
& \quad + \left[k_{p_0}^{(j)} + \frac{1}{2} h \frac{\partial k_p}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + O(h^2) \right] = \\
& = D_{p_0}^{(j)} \sigma \frac{\partial s}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + k_{p_0}^{(j)} + 0.5h \frac{\partial}{\partial x} \left(D_p \delta \frac{\partial s}{\partial x} + k_p \right) \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} O(h^2).
\end{aligned}$$

З вищенаведеного виразу отримуємо

$$\begin{aligned}
D_{p_0}^{(j)} \sigma \frac{\partial s}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} &= \overline{D}_{p_1}^{(j)} \sigma \frac{s_1^{(j+1)} - s_0^{(j+1)}}{h} + \overline{k}_{p_1}^{(j)} - \\
&- k_{p_0}^{(j)} - 0.5h \frac{\partial}{\partial x} \left(D_p \delta \frac{\partial s}{\partial x} + k_p \right) \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} O(h^2).
\end{aligned}$$

Далі з рівняння (4.1) маємо

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x} \left(D_p \sigma \left(\frac{\partial s}{\partial x} \right) \right) = \sigma \frac{\partial s}{\partial t} + s \frac{\beta k_{ws}(s, T)}{\rho_{ws}} m_{ws} - \frac{\partial k_p}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x}, \\
& D_{p_0}^{(j)} \sigma \frac{\partial s}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} = \overline{D}_{p_1}^{(j)} \sigma \frac{s_1^{(j+1)} - s_0^{(j+1)}}{h} + \overline{k}_{p_1}^{(j)} - \\
& - k_{p_0}^{(j)} - 0.5h \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial t} + s \frac{\beta k_{ws}(s, T)}{\rho_{ws}} m_{ws} - \frac{\partial k_p}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x} \right) \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} O(h^2). \tag{4.13}
\end{aligned}$$

Далі, використовуючи апроксимацію

$$\left(- \frac{\partial k_p}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x} \right) \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} = (v^+)_0^{(j)} s_{x,0}^{(j+1)} + (v^-)_0^{(j)} s_{\bar{x},0}^{(j+1)} + O(\tau + h)$$

з (4.13) отримаємо

$$\begin{aligned} & \left(D_{p_0}^{(j)} \sigma + 0.5 h s_0^{(j)} \frac{\beta k_{ws}(s, T)}{\rho_{ws}} m_{ws}^{(j)} \right) \frac{\partial s}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} = \\ & \overline{D}_{p_1}^{(j)} \sigma \frac{s_1^{(j+1)} - s_0^{(j+1)}}{h} + \overline{k}_{p_1}^{(j)} + k_{p_0}^{(j)} - 0.5 h \sigma \frac{s_0^{(j+1)} - s_0^{(j)}}{h} + \\ & 0.5 h (v^+)_0^{(j)} \frac{s_1^{(j+1)} - s_0^{(j+1)}}{h} + 0.5 h (v^-)_0^{(j)} \frac{s_0^{(j+1)} - s_{-1}^{(j+1)}}{h} + O(h^2). \end{aligned}$$

Отже, для умови (4.10) отримуємо її апроксимацію з точністю $O(\tau + h^2)$:

$$\begin{aligned} & \left(D_{p_0}^{(j)} \sigma + 0.5 h s_0^{(j)} \frac{\beta k_{ws}(s, T)}{\rho_{ws}} m_{ws}^{(j)} \right) \times \\ & \left(\overline{D}_{p_1}^{(j)} \sigma \frac{s_1^{(j+1)} - s_0^{(j+1)}}{h} + \overline{k}_{p_1}^{(j)} + k_{p_0}^{(j)} - 0.5 h \sigma \frac{s_0^{(j+1)} - s_0^{(j)}}{h} + \right. \\ & \left. 0.5 h (v^+)_0^{(j)} \frac{s_1^{(j+1)} - s_0^{(j+1)}}{h} + 0.5 h (v^-)_0^{(j)} \frac{s_0^{(j+1)} - s_{-1}^{(j+1)}}{h} \right) = \\ & = \frac{\sigma s_0^{(j+1)} - \theta_a}{\int_0^\sigma \frac{dx}{D_\sigma}} - \frac{\sigma}{\int_0^\sigma \frac{dx}{k_\sigma}} + O(\tau + h^2), \end{aligned}$$

або

$$s_0^{(j+1)} = \alpha_1 \cdot s_1^{(j+1)} + \beta_1,$$

де

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{\alpha_{up}}{\alpha}, \beta_1 = \frac{\beta_{up}}{\alpha}, \alpha_{up} = \overline{D}_{p_1}^{(j)} \sigma + 0.5 h (v^+)_0^{(j)}, \\ \beta_{up} &= - \left(\frac{\sigma s_0^{(j+1)} - \theta_a}{\int_0^\sigma \frac{dx}{D_\sigma}} + \frac{\sigma}{\int_0^\sigma \frac{dx}{k_\sigma}} \right) - \overline{k}_{p_1}^{(j)} - k_{p_0}^{(j)} + 0.5 h \sigma \frac{s_0^{(j+1)} - s_0^{(j)}}{h} + \end{aligned}$$

$$0.5h(v^-)_0^{(j)} \frac{s_0^{(j+1)} - s_{-1}^{(j+1)}}{h},$$

$$\alpha = D_{p_0}^{(j)} \sigma + 0.5hs_0^{(j)} \frac{\beta k_{ws}(s, T)}{\rho_{ws}} m_{ws}^{(j)}.$$

Отже, при використанні методу прогонки ми отримали вирази для α_1, β_1 .

Апроксимуємо граничну умову (4.4). Розглянемо вираз

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(D_{p_i}^{(j)} + D_{p_{i-1}}^{(j)} \right) \sigma_i^{(j)} \frac{s_i^{(j+1)} - s_{i-1}^{(j+1)}}{h} &= \frac{1}{2} \left(D_{p_i}^{(j)} - h \frac{\partial D_p}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} + O(h^2) \right) \times \\ &\left(\frac{\partial(\sigma s)}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} - \frac{1}{2} h \frac{\partial^2(\sigma s)}{\partial x^2} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} + O(h^2) \right) = \frac{1}{2} \left(2D_{p_i}^{(j)} - h \frac{\partial D_p}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} + O(h^2) \right) \times \\ &\frac{\partial(\sigma s)}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} - \frac{1}{2} h \frac{\partial^2(\sigma s)}{\partial x^2} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} + O(h^2) = D_{p_i}^{(j)} \frac{\partial(\sigma s)}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} - 0.5 h \frac{\partial D_p}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} \times \\ &\frac{\partial(\sigma s)}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} - 0.5 h D_{p_i}^{(j)} \frac{1}{2} h \frac{\partial^2(\sigma s)}{\partial x^2} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} + O(h^2). \end{aligned}$$

З вищенаведеного виразу отримуємо

$$\begin{aligned} D_{p_i}^{(j)} \frac{\partial(\sigma s)}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} &= D_{p_{i-1}}^{(j)} \sigma_i^{(j)} \frac{s_i^{(j+1)} - s_{i-1}^{(j+1)}}{h} + 0.5 h \frac{\partial D_p}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} \frac{\partial(\sigma s)}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} + \\ &+ O(h^2). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Далі з рівняння (4.1) маємо

$$\frac{\partial(\sigma s)}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} = \frac{1}{D_p} \left[\sigma \frac{\partial s}{\partial t} + s \frac{\beta k_{ws}}{p_{ws}} m_{ws} - \left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right) \frac{\partial s}{\partial x} \right] \Big|_{x_n}^{t^{j+1}}.$$

Підставляючи цей вираз у (4.14), отримаємо

$$D_{p_i}^{(j)} \frac{\partial(\sigma s)}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} = D_{p_{i-1}}^{(j)} \sigma_i^{(j)} \frac{s_i^{(j+1)} - s_{i-1}^{(j+1)}}{h} + 0.5h \left(\sigma \frac{s_i^{(j+1)} - s_i^{(j)}}{h} + s_i^{(j+1)} \times \right. \\ \left. \frac{\beta k_{ws}^{(j)}}{p_{ws}} m_{ws}^{(j)} + \left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_{x_n}^{t^{j+1}} \frac{s_i^{(j+1)} - s_{i-1}^{(j+1)}}{h} \right) + O(h^2). \quad (4.15)$$

Далі, використовуючи апроксимацію

$$\left(-\frac{\partial(\sigma s)}{\partial x} \right) \Big|_{x_n}^{t^{j+1}} = (v^+)_n^{(j)} s_{x,n}^{(j+1)} + (v^-)_n^{(j)} s_{\bar{x},n}^{(j+1)} + O(\tau + h)$$

з (4.15) отримаємо

$$\left(D_{p_i}^{(j)} \sigma_i^{(j)} - 0.5h \left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_i^j \right) \frac{s_i^{(j+1)} - s_{i-1}^{(j+1)}}{h} + 0.5h \sigma \frac{s_i^{(j+1)} - s_i^{(j)}}{\tau} - \\ - 0.5h (v^+)_i^{(j)} s_i^{(j+1)} - 0.5h s_i^{(j+1)} \frac{\beta k_{ws}^{(j)}}{p_{ws}} m_{ws}^{(j)} + O(\tau + h^2). \quad (4.16)$$

Отже, для граничної умови (4.4) отримуємо її апроксимацію з точністю $O(\tau + h^2)$:

$$- \left(D_{p_i}^{(j)} \sigma_i^{(j)} - 0.5h \left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_i^j \right) \frac{s_i^{(j+1)} - s_{i-1}^{(j+1)}}{h} - 0.5h \sigma \frac{s_i^{(j+1)} - s_i^{(j)}}{\tau} + \\ + 0.5h (v^+)_i^{(j)} s_i^{(j+1)} - 0.5h s_i^{(j+1)} \frac{\beta k_{ws}^{(j)}}{p_{ws}} m_{ws}^{(j)} + O(\tau + h^2). \quad (4.17)$$

З (4.17) отримуємо

$$\frac{s_i^{(j+1)} - s_i^{(j)}}{\tau} + \left(\frac{1}{\delta} \frac{D_{p_{i-1}}^{(j)} \sigma_i^{(j)}}{h^2} + \frac{(v^+)_i^{(j)} + \left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_i^j}{2\delta h} + \frac{1}{\delta} \frac{\beta k_{ws}^{(j)}}{p_{ws}} \right) s_i^{(j+1)} - \\ \frac{1}{\delta} \left(\frac{D_{p_{i-1}}^{(j)} \sigma_i^{(j)}}{h^2} + \frac{\left(\frac{\partial k_p}{\partial s} \right)_i^j}{2h} \right) s_{i-1}^{(j+1)}$$

або

$$s_n^{(j+1)} = \eta_2 \cdot s_{n-1}^{(j+1)} + \mu_2, \quad (4.18)$$

де

$$\eta_2 = \frac{\eta_{up}}{\eta}, \quad \mu_2 = \frac{\mu_{up}}{\eta},$$

$$\eta_{up} = \frac{D_{p_{i-1}}^{(j)} \sigma_i^j}{h^2} + \frac{\left(\frac{\partial k_p}{\partial s}\right)_i^j}{2h}, \quad \mu_{up} = \frac{s_i^{(j)}}{\tau},$$

$$\eta = \frac{1}{\tau} + \frac{D_{p_{i-1}}^{(j)} \sigma_i^j}{h^2} + \frac{(v^+)_i^{(j)} + \left(\frac{\partial k_p}{\partial s}\right)_i^j}{2h} + \frac{\beta k_{ws}^{(j)}}{p_{ws}} m_{ws}^{(j)}.$$

Використовуючи співвідношення (4.18) та (4.11) при $i = n - 1$, знаходимо

$$s_n^{(j+1)} = \frac{\eta_2 \cdot \beta_n + \mu_2}{1 - \eta_2 \cdot \alpha_n}.$$

Для дискретизації рівняння (4.2) використаємо монотонну різницеву схему [23]. В результаті отримаємо наступний скінченнорізницевий аналог диференціального рівняння (4.2)

$$c_T \frac{T_i^{(j+1)} - T_i^{(j)}}{\tau} = \frac{\omega_i^{(j)}}{h} \left(\bar{\lambda}_{i+1}^{(j)} \frac{T_{i+1}^{(j+1)} - T_i^{(j+1)}}{h} - \bar{\lambda}_i^{(j)} \frac{T_i^{(j+1)} - T_{i-1}^{(j+1)}}{h} \right) +$$

$$+ \rho c_\rho \frac{(u^+)_i^{(j)}}{\lambda_i^{(j)}} \cdot \bar{\lambda}_{i+1}^{(j)} \frac{T_{i+1}^{(j+1)} - T_i^{(j+1)}}{h} + \rho c_\rho \frac{(u^-)_i^{(j)}}{\lambda_i^{(j)}} \cdot \bar{\lambda}_i^{(j)} \cdot \frac{T_i^{(j+1)} - T_{i-1}^{(j+1)}}{h} + Q_i^j,$$

$$i = \overline{1, n-1}, \quad j = \overline{0, m-1}. \quad (4.19)$$

Тут

$$\bar{\lambda}_i^{(j)} = \frac{1}{2} \cdot (\lambda_i^{(j)} + \lambda_{i-1}^{(j)}), \quad (u^+)_i^{(j)} = \frac{-u_i^{(j)} + |u_i^{(j)}|}{2} \geq 0,$$

$$(u^-)_i^{(j)} = \frac{-u_i^{(j)} - |u_i^{(j)}|}{2} \leq 0, \quad \omega_i^{(j)} = \frac{1}{1 + \rho c_\rho \frac{h \cdot |u_i^{(j)}|}{2 \cdot \lambda_i^{(j)}}} = 1 - \rho c_\rho \frac{h \cdot |u_i^{(j)}|}{2 \cdot \lambda_i^{(j)}} + O(h^2).$$

Аналогічно до [23], можна показати, що диференціальні оператори рівняння (4.2) апроксимуються різницеvim оператором (4.19) в довільній точці $(x_i; t_j) \in Q_t^{(n;m)}$, $i = \overline{1, n-1}$, $j = \overline{0, m-1}$, з точністю $O(\tau + h^2)$ при умові існування неперервних частинних похідних $\frac{\partial(\bullet)}{\partial t}$, $\frac{\partial(\bullet)}{\partial x}$, $\frac{\partial^2(\bullet)}{\partial x^2}$ та кусково-неперервних обмежених похідних $\frac{\partial^2(\bullet)}{\partial t^2}$, $\frac{\partial^3(\bullet)}{\partial x^3}$ функції $T(x, t)$, а також при умові існування неперервних повних похідних $\frac{d(\bullet)}{dx}$ та кусково-неперервних обмежених похідних $\frac{d^2(\bullet)}{dx^2}$ функції λ і похідних $\frac{d(\bullet)}{dt}$ функцій λ , $\frac{d\lambda}{dx}$.

Різницеve рівняння (4.19) є лінійним відносно шуканих значень функції $T(x, t)$.

Для знаходження температури $T(x, t)$ з різницевого рівняння (4.19) використаємо метод прогонки [23]. Для цього запишемо дане рівняння в прогоночному вигляді

$$a_i \cdot T_{i-1}^{(j+1)} - c_i \cdot T_i^{(j+1)} + b_i \cdot T_{i+1}^{(j+1)} = -T_i^{(j)},$$

де

$$a_i = \frac{\tau}{c_T} \cdot \frac{\bar{\lambda}_i^{(j)}}{h} \cdot \left(\frac{\omega_i^{(j)}}{h} - \frac{\rho c_\rho (u^-)_i^{(j)}}{\lambda_i^{(j)}} \right), \quad b_i = \frac{\tau}{c_T} \cdot \frac{\bar{\lambda}_{i+1}^{(j)}}{h} \cdot \left(\frac{\omega_i^{(j)}}{h} + \frac{\rho c_\rho (u^+)_i^{(j)}}{\lambda_i^{(j)}} \right),$$

$$c_i = 1 + \frac{\tau}{c_T} \left(\frac{\omega_i^{(j)} \cdot (\bar{\lambda}_{i+1}^{(j)} + \bar{\lambda}_i^{(j)})}{h^2} + \frac{\rho c_\rho}{h \lambda_i^{(j)}} \cdot ((u^+)_i^{(j)} \cdot \bar{\lambda}_{i+1}^{(j)} - (u^-)_i^{(j)} \cdot \bar{\lambda}_i^{(j)}) \right).$$

Умови $|c_i| > |a_i| + |b_i|$ стійкості прогонки виконуються.

Значення температури на часовому шарі $(j+1)$ послідовно знаходимо, використовуючи співвідношення

$$T_i^{(j+1)} = \alpha_{i+1} \cdot T_{i+1}^{(j+1)} + \beta_{i+1}, \quad (4.20)$$

де

$$\alpha_{i+1} = \frac{b_i}{c_i - a_i \alpha_i}, \quad \beta_{i+1} = \frac{a_i \beta_i + c_i^{(j)} + s_i^{(j+1)}}{c_i - a_i \alpha_i}.$$

Для початкової умови (4.7) отримаємо наступні скінченнорізницеві аналоги:

$$T_i^{(0)} = T_0(ih), \quad i = \overline{0, n}. \quad (4.21)$$

Апроксимуємо граничну умову (4.9). Розглянемо вираз

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\lambda_1^{(j)} + \lambda_0^{(j)}) \frac{T_1^{(j+1)} - T_0^{(j+1)}}{h} &= \frac{1}{2} \left(2\lambda_0^{(j)} + h \frac{\partial \lambda}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + O(h^2) \right) \times \\ &\times \frac{T_0^{(j+1)} + h \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + \frac{1}{2} h^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + O(h^3) - T_0^{(j+1)}}{h} = \\ &= \frac{1}{2} \left(2\lambda_0^{(j)} + h \frac{\partial \lambda}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + O(h^2) \right) \left(\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + \frac{1}{2} h \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + O(h^2) \right) = \\ &= \lambda_0^{(j)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + 0.5h \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + O(h^2). \end{aligned}$$

З вищенаведеного виразу отримуємо

$$\lambda_0^{(j)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} = \bar{\lambda}_1^{(j)} \frac{T_1^{(j+1)} - T_0^{(j+1)}}{h} - 0.5h \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + O(h^2). \quad (4.22)$$

Далі з рівняння (4.2) маємо

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right) = c_T \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \rho c_\rho u \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} - Q.$$

Підставляючи цей вираз у (4.22), отримаємо

$$\begin{aligned} \lambda_0^{(j)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} &= \bar{\lambda}_1^{(j)} \frac{T_1^{(j+1)} - T_0^{(j+1)}}{h} - 0.5h \left(c_T \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_\rho u \frac{\partial T}{\partial x} - Q \right) \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} + \\ &+ O(h^2). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Далі, використовуючи апроксимацію

$$\left(-u \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} = (u^+)_0^{(j)} T_{x,0}^{(j+1)} + (u^-)_0^{(j)} T_{\bar{x},0}^{(j+1)} + O(\tau + h)$$

з (4.23) отримаємо

$$\begin{aligned} \left(\lambda_0^{(j)} - 0.5h\rho c_\rho (u^-)_0^{(j)} \right) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_0}^{t_{j+1}} &= \bar{\lambda}_1^{(j)} \frac{T_1^{(j+1)} - T_0^{(j+1)}}{h} - \\ &- 0.5hc_T \frac{T_0^{(j+1)} - T_0^{(j)}}{\tau} + 0.5h(u^+)_0^{(j)} \frac{T_1^{(j+1)} - T_0^{(j+1)}}{h} + 0.5hQ_0^{(j)} + \\ &+ O(h^2). \end{aligned}$$

Отже, для граничної умови (4.9) отримуємо її апроксимацію з точністю $O(\tau + h^2)$

$$\begin{aligned} - \left(\lambda_0^{(j)} - 0.5h\rho c_\rho (u^-)_0^{(j)} \right) \frac{T_0^{(j+1)} - T_a}{\lambda_0^{(j)} \int_0^\delta \frac{dx}{\lambda_\delta(T^{(j)})}} &= \bar{\lambda}_1^{(j)} \frac{T_1^{(j+1)} - T_0^{(j+1)}}{h} - \\ &- 0.5hc_T \frac{T_0^{(j+1)} - T_0^{(j)}}{\tau} + 0.5h(u^+)_0^{(j)} \frac{T_1^{(j+1)} - T_0^{(j+1)}}{h} + 0.5hQ_0^{(j)} + \\ &+ O(\tau + h^2). \end{aligned}$$

Далі маємо

$$\begin{aligned} &\frac{\left(\lambda_0^{(j)} - 0.5h\rho c_\rho (u^-)_0^{(j)} \right) T_a}{\lambda_0^{(j)} \int_0^\delta \frac{dx}{\lambda_\delta(T^{(j)})}} - 0.5hc_T \frac{T_0^{(j)}}{\tau} + 0.5hQ_0^{(j)} = \\ &= \left(\frac{\lambda_0^{(j)} - 0.5h\rho c_\rho (u^-)_0^{(j)}}{\lambda_0^{(j)} \int_0^\delta \frac{dx}{\lambda_\delta(T^{(j)})}} - \frac{\bar{\lambda}_1^{(j)}}{h} - \frac{0.5hc_T}{\tau} - 0.5(u^+)_0^{(j)} \right) T_0^{(j+1)} + \\ &+ \left(\bar{\lambda}_1^{(j)} \frac{T_1^{(j+1)}}{h} + 0.5h(u^+)_0^{(j)} \frac{T_1^{(j+1)}}{h} \right) T_1^{(j+1)} \end{aligned}$$

або

$$T_0^{(j+1)} = \alpha_1 \cdot T_1^{(j+1)} + \beta_1,$$

де

$$\alpha_1 = \frac{\alpha_{up}}{\alpha}, \beta_1 = \frac{\beta_{up}}{\alpha}, \alpha_{up} = \bar{\lambda}_1^{(j)} \frac{T_1^{(j+1)}}{h} + 0.5h(u^+)_0^{(j)} \frac{T_1^{(j+1)}}{h},$$

$$\beta_{up} = -\frac{(\lambda_0^{(j)} - 0.5h\rho c_\rho(u^-)_0^{(j)})T_a}{\lambda_0^{(j)} \int_0^\delta \frac{dx}{\lambda_\delta(T^{(j)})}} + 0.5hc_T \frac{T_0^{(j)}}{\tau} - 0.5hQ_0,$$

$$\alpha = -\frac{\lambda_0^{(j)} - 0.5h\rho c_\rho(u^-)_0^{(j)}}{\lambda_0^{(j)} \int_0^\delta \frac{dx}{\lambda_\delta(T^{(j)})}} + \frac{\bar{\lambda}_1^{(j)}}{h} + \frac{0.5hc_v}{\tau} + 0.5(u^+)_0^{(j)}.$$

Отже, при використанні методу прогонки ми отримали вирази для α_1, β_1 .

Апроксимуємо граничну умову (4.5). Розглянемо вираз

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\lambda_n^{(j)} + \lambda_{n-1}^{(j)}) \frac{T_n^{(j+1)} - T_{n-1}^{(j+1)}}{h} &= \frac{1}{2} \left(2\lambda_n^{(j)} - h \frac{\partial \lambda}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} + O(h^2) \right) \times \\ &\times \frac{T_n^{(j+1)} - \left(T_n^{(j+1)} - h \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} + \frac{1}{2} h^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} + O(h^3) \right)}{h} = \\ &= \frac{1}{2} \left(2\lambda_n^{(j)} - h \frac{\partial \lambda}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} + O(h^2) \right) \left(\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} - \frac{1}{2} h \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} + O(h^2) \right) = \\ &= \lambda_n^{(j)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} - 0.5h \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} + O(h^2). \end{aligned}$$

З вищенаведеного виразу отримуємо

$$\lambda_n^{(j)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} = \bar{\lambda}_n^{(j)} \frac{T_n^{(j+1)} - T_{n-1}^{(j+1)}}{h} + 0.5h \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} + O(h^2). \quad (4.24)$$

Далі з рівняння (4.2) маємо

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right) = c_T \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \rho c_\rho u \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} - Q(x, t, x, T).$$

Підставляючи цей вираз у (4.24), отримаємо

$$\begin{aligned} \lambda_n^{(j)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} &= \bar{\lambda}_n^{(j)} \frac{T_n^{(j+1)} - T_{n-1}^{(j+1)}}{h} + \\ &+ 0.5h \left(c_T \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_\rho u \frac{\partial T}{\partial x} - Q \right) \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} + O(h^2). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Далі, використовуючи апроксимацію

$$\left(-u \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} = (u^+)_n^{(j)} T_{x,n}^{(j+1)} + (u^-)_n^{(j)} T_{\bar{x},n}^{(j+1)} + O(\tau + h)$$

з (4.25) отримаємо

$$\begin{aligned} \left(\lambda_0^{(j)} + 0.5h\rho c_\rho (u^+)_n^{(j)} \right) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x_n}^{t_{j+1}} &= \bar{\lambda}_n^{(j)} \frac{T_n^{(j+1)} - T_{n-1}^{(j+1)}}{h} + \\ &+ 0.5hc_T \frac{T_n^{(j+1)} - T_n^{(j)}}{\tau} - 0.5h(u^-)_0^{(j)} \frac{T_n^{(j+1)} - T_{n-1}^{(j+1)}}{h} - \\ &- 0.5hQ_n^{(j+1)} + O(\tau + h^2). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Отже, для граничної умови (4.5) отримуємо її апроксимацію з точністю $O(\tau + h^2)$

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}_n^{(j)} \frac{T_n^{(j+1)} - T_{n-1}^{(j+1)}}{h} + 0.5hc_T \frac{T_n^{(j+1)} - T_n^{(j)}}{\tau} - 0.5h(u^-)_n^{(j)} \times \\ \times \frac{T_n^{(j+1)} - T_{n-1}^{(j+1)}}{h} - 0.5hQ_n^{(j+1)} + O(\tau + h^2) = 0. \end{aligned}$$

Далі маємо

$$\begin{aligned} -0.5hc_T \frac{T_n^{(j)}}{\tau} - \left(\frac{\bar{\lambda}_n^{(j)}}{h} - 0.5(u^-)_n^{(j)} \right) T_{n-1}^{(j+1)} + \\ + \left(\frac{\bar{\lambda}_n^{(j)}}{h} + \frac{0.5hc_T}{\tau} - 0.5(u^-)_n^{(j)} \right) T_n^{(j+1)} - 0.5Q_n^{(j+1)} = 0 \end{aligned}$$

або

$$T_n^{(j+1)} = \eta_2 \cdot T_{n-1}^{(j+1)} + \mu_2, \quad (4.27)$$

де

$$\eta_2 = \frac{\eta_{up}}{\eta}, \quad \mu_2 = \frac{\mu_{up}}{\eta},$$

$$\eta_{up} = \frac{\bar{\lambda}_n^{(j)}}{h} - 0.5(u^-)_n^{(j)}, \mu_{up} = 0.5hc_T \frac{T_n^{(j)}}{\tau} - 0.5hQ_n^{(j+1)},$$

$$\eta = \frac{\bar{\lambda}_n^{(j)}}{h} + \frac{0.5hc_T}{\tau} - 0.5(u^-)_n^{(j)}.$$

Використовуючи співвідношення (4.27) та (4.20) при $i = n - 1$, знаходимо

$$T_n^{(j+1)} = \frac{\eta_2 \cdot \beta_n + \mu_2}{1 - \eta_2 \cdot \alpha_n}.$$

На основі проведеної дискретизації за методом скінченних різниць сформованої математичної моделі у вигляді крайової задачі для системи нелінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних, розроблено обчислювальний алгоритм, який є основою програмного забезпечення для симуляції та прогнозування процесів у пористому середовищі. Алгоритм виконується покроково, на кожному часовому кроці виконується наступна послідовність обчислювальних операцій:

1. Ініціалізація часового кроку. Початок з відомих значень шуканих функцій на поточному часовому шарі.

2. Обчислення параметрів та коефіцієнтів. Розраховуються залежні параметри моделі та відповідні коефіцієнти дискретизованих рівнянь та граничних умов на поточному часовому шарі, використовуючи значення невідомих функцій (вологості, температури, маси органічної складової) з попереднього часового кроку.

3. Розв'язання дискретизованого рівняння вологоперенесення. Формується тридіагональна система лінійних алгебраїчних рівнянь. Розв'язання отриманої системи виконується за допомогою методу прогонки.

Цей алгоритм є обчислювально стійким та ефективним, маючи лінійну складність $O(n)$ по кількості просторових вузлів на кожному часовому кроці.

4. Обчислення швидкості вологоперенесення.

5. Розв'язання дискретизованого рівняння теплоперенесення.

Формується тридіагональна система лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення значень температури. Система розв'язується за допомогою методу прогонки з обчислювальною складністю $O(n)$.

6. Обчислення маси органічної складової $(m_{ws})_i^{(j+1)}, i = \overline{0, n};$

$j = \overline{0, m-1}$, згідно дискретизацій рівняння (4.3)

$$\frac{(m_{ws})_i^{(j+1)} - m_i^{(j)}}{\tau} = -k_{ws} \left(s_i^{(j)}, T_i^{(j)} \right) (m_{ws})_i^{(j+1)}, i = \overline{0, n}; j = \overline{0, m-1}.$$

7. Обчислення об'єму емісії парникових газів.

8. Збереження результатів та перехід до обробки наступного часового кроку.

Ця послідовність кроків складає основний цикл симуляції. Загальна обчислювальна складність алгоритму на одному часовому кроці є лінійною відносно кількості вузлів n по змінній x .

Розробка та адаптація математичних моделей здійснювалася з урахуванням вимог щодо їх адекватності реальним процесам та обчислювальної ефективності. Використовувалися системи нелінійних диференціальних рівнянь в частинних похідних для опису процесів перенесення тепла та вологи, а також нелінійного диференціального рівняння для моделювання кінетики біодеградації.

Для візуального представлення архітектури програмного забезпечення та потоку керування обчислювальним алгоритмом розроблено блок-схему (рис. 4.2). Блок-схема ілюструє модульну структуру програмної реалізації, де кожен блок відповідає за виконання певного етапу алгоритму та взаємодіє з іншими блоками шляхом передачі даних.



Рис. 4.2. Блок-схема програмної реалізації обчислювального алгоритму

Основними функціональними модулями, відображеними на блок-схемі, є:

- модуль вводу параметрів. Відповідає за зчитування всіх констант моделі, параметрів сітки та умов (початкових, граничних, атмосферних);
- модуль ініціалізації розрахунку. Встановлює початковий стан всіх масивів шуканих функцій на основі введених початкових умов;
- модуль обчислення коефіцієнтів та залежностей. Виконує розрахунок всіх несталих коефіцієнтів різницевих схем та параметрів моделі, які залежать від поточного стану системи;

- модуль розв'язання рівняння для вологості (або насиченості). Реалізує метод прогонки для дискретизованого рівняння вологоперенесення з відповідними граничними умовами. На вхід отримує необхідні коефіцієнти та стан на попередньому шарі;
- модуль розрахунку швидкості волоперенесення. Розраховує вектор швидкості u , використовуючи вхідні та отримані в попередніх модулях дані;
- модуль розв'язання рівняння тепла. Реалізує метод прогонки для дискретизованого рівняння теплоперенесення;
- модуль розрахунку органіки;
- модуль виводу результатів. Відображає отримані на кожному часовому кроці просторові розподіли.

Описаний обчислювальний алгоритм та його модульна структура, відображена на блок-схемі (рис.4.2), є фундаментом розробленого програмного забезпечення. Така архітектура забезпечує зрозумілість коду, зручність відладки та можливість подальшого розвитку системи, наприклад, шляхом інтеграції модулів для безпосереднього розрахунку транспорту та емісії парникових газів.

4.3. Обчислювальні експерименти, комп'ютерне моделювання та алгоритмічний аналіз динаміки виділення парникових газів

Для оцінки впливу тонкого примежового шару опалого листя на розподіл температури в ґрунті лісу проведено чисельні експерименти з використанням моделі теплопровідності. Вибір моделі ґрунтувався на необхідності врахування теплофізичних властивостей як мінеральної частини ґрунту, так і органічного покриву, що має суттєво відмінні характеристики [133; 134].

Розрахунки виконано для різних сезонних умов та вологості ґрунту з урахуванням зміни температури атмосферного повітря. Початкове значення температури, яке використовувалося в експериментах, становило 20 °С.

На основі отриманих числових експериментів (рис. 4.3 – рис. 4.5) встановлено, що наявність тонкого примежового шару опалого листя значно впливає на температурний режим ґрунту. Для всіх глибин температурні криві з наявністю листя демонструють нижчий темп нагрівання ґрунту в порівнянні з ділянками без листя. Найбільш суттєва різниця спостерігається у верхніх шарах (0,2–0,6 м), де опале листя діє як теплоізолюючий шар, знижуючи швидкість передачі тепла від атмосфери до ґрунту. У більш глибоких шарах (0,8–1,0 м) ефект ізоляції поступово зменшується, однак температура в цих горизонтах все ще є дещо нижчою у випадках із наявністю листя. Це підтверджує гіпотезу про те, що опале листя відіграє ключову роль у регуляції температурного режиму ґрунту в лісових екосистемах

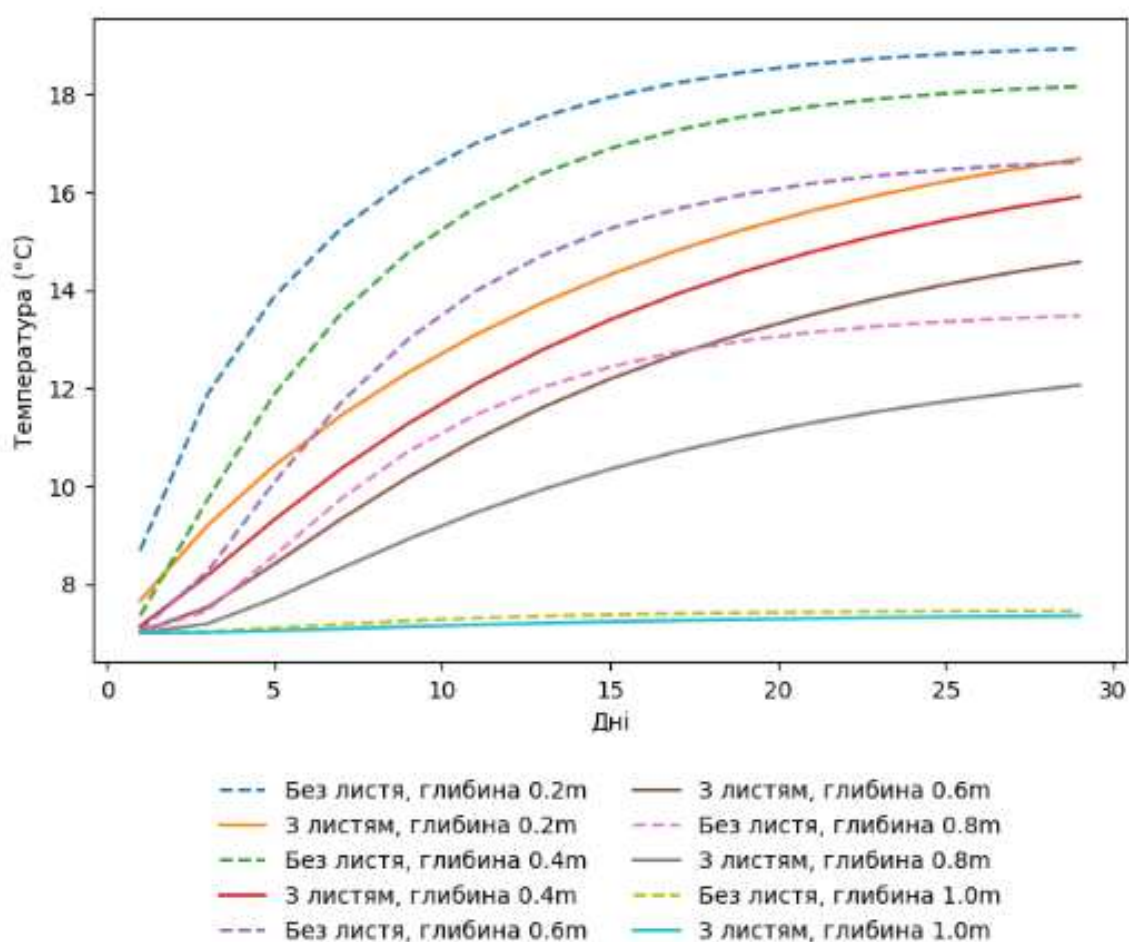


Рис. 4.3. Вплив примежового шару опалого листя у ґрунті loamy sand на зміну температури ґрунту

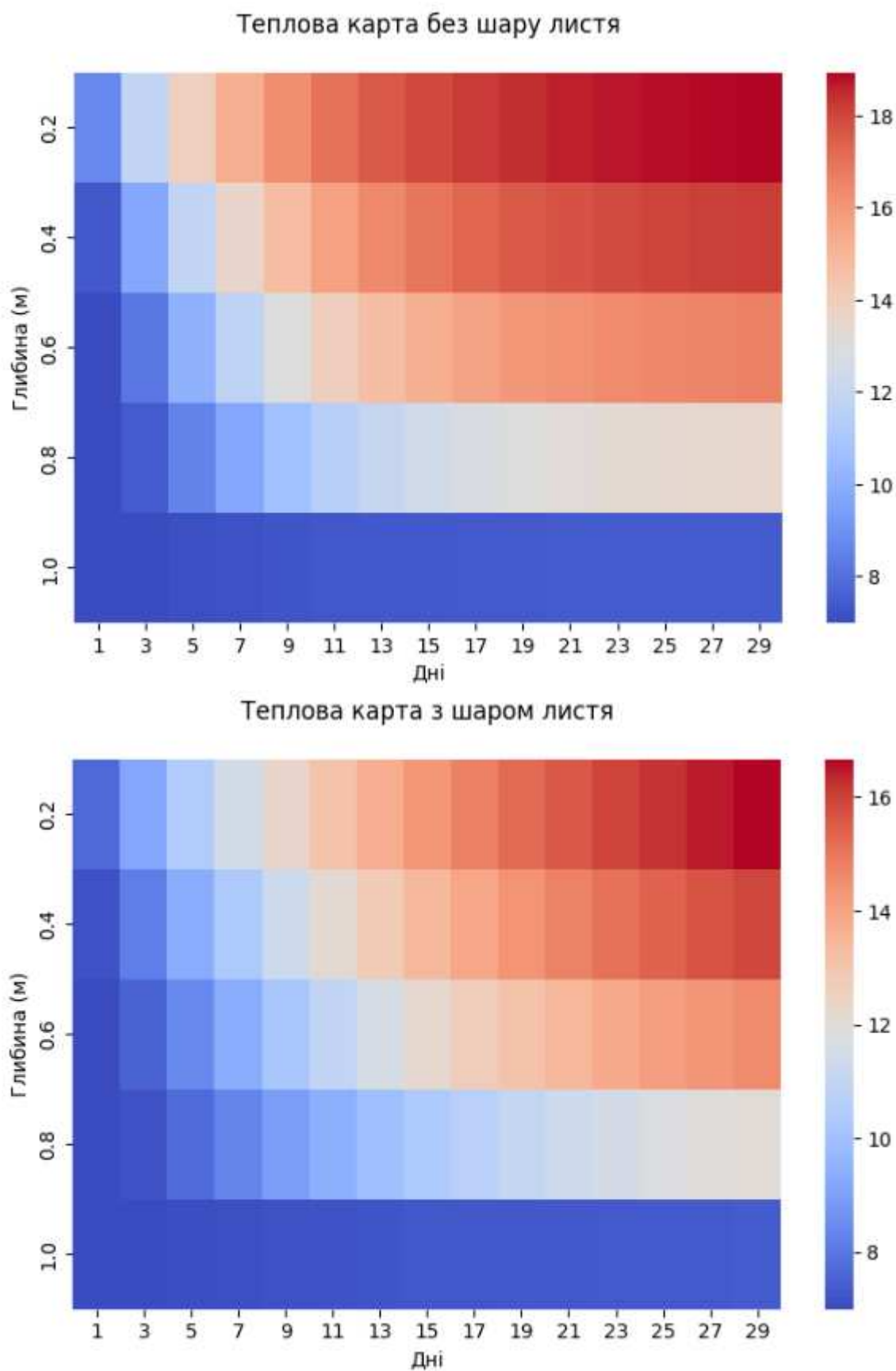


Рис. 4.4. Теплові карти розподілу температури у ґрунті sand з наявністю та без опалого листя

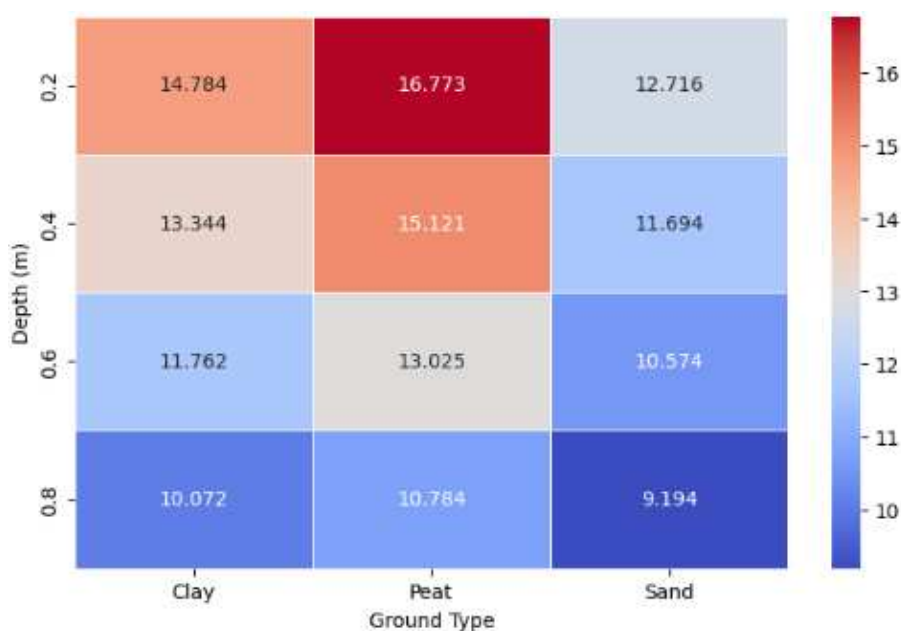


Рис. 4.5. Розподіл температури за різних типів ґрунту на 10-й день моделювання

На рисунках (рис. 4.6, рис. 4.7) представлено результати моделювання зміни температури ґрунту loamy sand залежно від типу та товщини примежового шару опалого листя. Як видно, різні види листя демонструють варіації у теплоізоляційному ефекті, що впливає на температуру верхніх шарів ґрунту. Збільшення товщини шару листя також сприяє зменшенню теплових втрат, що узгоджується з встановленою залежністю між параметрами примежового шару та його ізоляційним впливом.

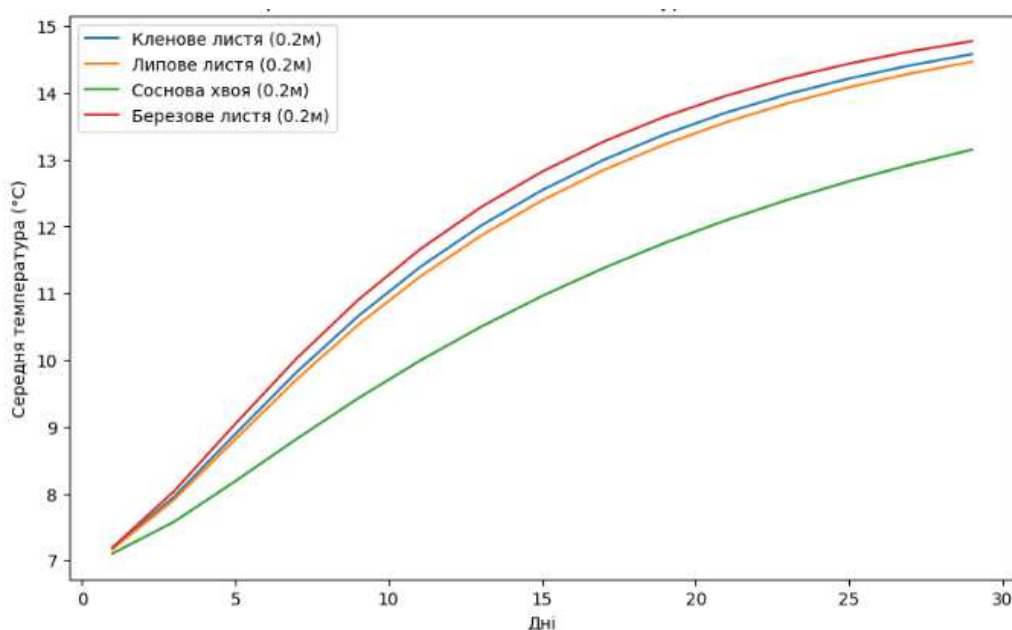


Рис. 4.6. Зміна температури ґрунту loamy sand за різних типів опалого листя

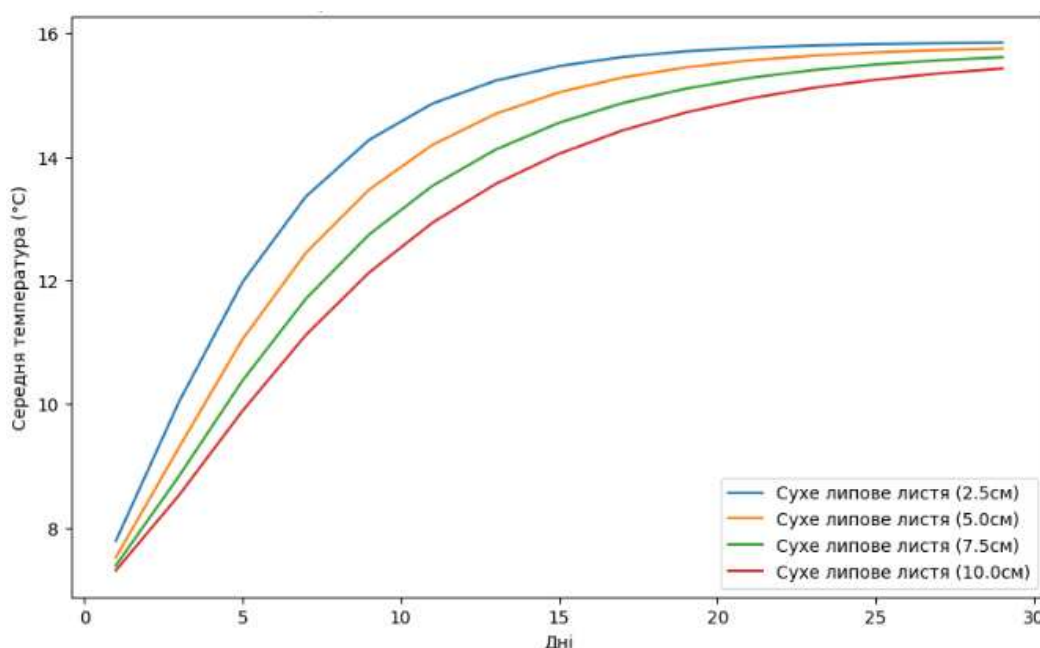


Рис. 4.7. Зміна температури ґрунту loamy sand за різної товщини опалого липового листя

Параметризація моделі включала визначення теплофізичних властивостей для різних типів ґрунту (піщано-суглинистий – loamy sand, пісок – sand) та опалого листя. Значення теплопровідності, теплоємності та густини для ґрунтів базувалися на літературних даних та враховували їх текстуру та вологість. Для органічного шару ці параметри залежали від типу листя (наприклад, дубове) та його вологості, що суттєво впливає на теплоізоляційні властивості. Точність визначення цих вхідних параметрів, особливо теплопровідності та теплоємності, які значно залежать від вологості, є критичною для достовірності результатів моделювання. Зміна вологості органічного шару, як показано далі (рис. 4.8), суттєво впливає на температурний режим, що підкреслює важливість точної параметризації цих залежностей для отримання надійних прогностичних даних.

Початкові та граничні умови були задані наступним чином: початковий розподіл температури по всьому профілю ґрунту приймався рівномірним і становив 20 °C, як зазначено в експериментах. На верхній межі (поверхня ґрунту або листяного покриву) задавалася температура атмосферного повітря, яка могла змінюватися з часом для імітації добових або сезонних коливань. На

нижній межі розрахункової області (глибині 2 м) задавалася умова нульового теплового потоку.

На рис.4.8 показано, як змінюється температура ґрунту на різних глибинах з часом при наявності дубового листа з різним рівнем вологості. Встановлено, що вологіше листя спричиняє підвищення температури ґрунту, оскільки його теплоізоляційні властивості знижуються через збільшення теплопровідності. Вода, заповнюючи пори в листяному шарі, заміщує повітря, яке має значно нижчу теплопровідність. Таким чином, ефективна теплопровідність вологого листя зростає, наближаючи його властивості до властивостей ґрунту і зменшуючи теплоізоляційний ефект. Цей аспект є надзвичайно важливим, оскільки вологість органічного шару є динамічною характеристикою, що змінюється залежно від опадів та випаровування, і, як показують результати, суттєво модулює його вплив на тепловий режим ґрунту. Важливість врахування вологості для теплофізичних властивостей та процесів тепло- і масоперенесення в пористих середовищах. Найменший рівень прогрівання спостерігається під сухим дубовим листям, тоді як під вологим шаром температура наближається до атмосферної. Це підкреслює важливість врахування вологості органічного шару при прогнозуванні температурного режиму лісового ґрунту.

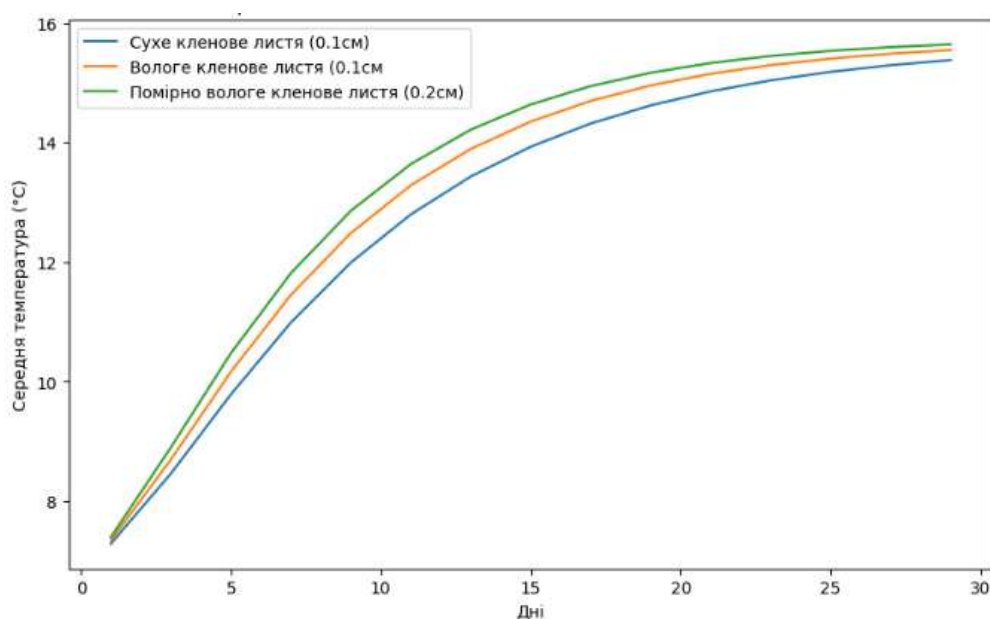


Рис. 4.8. Зміна температури ґрунту loamy sand при різному рівні вологості дубового листа

Отримані результати можуть бути використані для покращення моделей прогнозування температурного режиму лісових екосистем, а також для екологічного планування та управління лісовими ресурсами. Зокрема, точне моделювання температури ґрунту є критично важливим для подальшого прогнозування біогеохімічних процесів, включаючи розкладання органічної речовини та емісію парникових газів, які сильно залежать від температурних умов.

Для оцінки надійності розробленої моделі теплового режиму та виявлення параметрів, що найбільш суттєво впливають на результати моделювання, було проведено алгоритмічний аналіз чутливості. Такий аналіз є невід'ємною частиною валідації будь-якої обчислювальної моделі, особливо в галузі комп'ютерних наук, де розуміння поведінки алгоритмів за зміни вхідних даних є ключовим. Він дозволяє не тільки оцінити стійкість моделі, але й визначити напрямки для подальших досліджень, зокрема, на які параметри слід звернути особливу увагу при експериментальних вимірюваннях або при калібруванні моделі.

Методологія аналізу чутливості базувалася на методі одного фактора за раз (OFAT – One-Factor-At-a-Time). Цей підхід полягає в послідовній зміні одного вхідного параметра моделі в певному діапазоні його можливих значень, тоді як інші параметри залишаються фіксованими на своїх базових (номінальних) рівнях. Для кожного зміненого параметра проводився повний розрахунок температурного поля, і результати порівнювалися з базовим сценарієм. Як критерій чутливості використовувалася зміна температури на контрольних глибинах (0,2 м; 0,5 м; 1,0 м) у певні моменти часу (через 5, 10, 20 днів моделювання). Досліджувалися такі ключові параметри: теплопровідність основного шару ґрунту, теплоємність основного шару ґрунту, товщина шару опалого листя, теплопровідність шару опалого листя, вологість ґрунту, вологість шару опалого листя.

Результати аналізу чутливості показали, що модель є найбільш чутливою до змін теплопровідності та товщини шару опалого листя, особливо

для верхніх горизонтів ґрунту (0-0,5 м). Варіації цих параметрів у межах $\pm 20\%$ від базових значень призводили до змін температури ґрунту, що сягали $\pm 10-25\%$ від початкових температурних значень залежно від сезону та типу поверхневого покритву. Це підтверджує ключову роль органічного покритву як теплоізолятора. Також значний вплив мала теплопровідність самого ґрунту, особливо на швидкість поширення температурних хвиль у глибші шари. Чутливість до теплоємності була дещо меншою, але все ж помітною, впливаючи на інерційність температурних змін. Вологість як ґрунту, так і листяного покритву, через її сильний вплив на теплопровідність, виявилася критичним фактором. Наприклад, збільшення вологості листя з сухого стану до насиченого (як показано на рис. 4.8) може нівелювати значну частину його теплоізоляційного ефекту.

Ідентифікація таких критичних параметрів є надзвичайно важливою. По-перше, це вказує на необхідність їх точного експериментального визначення або надійного оцінювання для конкретних умов моделювання. По-друге, при калібруванні моделі за експериментальними даними саме цим параметрам слід приділити першочергову увагу. Оптимізація параметрів моделі, наприклад, за допомогою методів, подібних до тих, що описані для калібрування моделей ґрунту, може значно підвищити точність прогнозів. Результати аналізу чутливості також підкреслюють, що для адекватного моделювання динаміки виділення парникових газів, яка залежить від температури ґрунту, необхідно мати надійну модель теплового режиму, що правильно враховує вплив найбільш значущих факторів, зокрема властивостей органічного шару.

Програмна реалізація моделей здійснена у вигляді набору взаємопов'язаних модулів у складі розроблюваного програмного комплексу. Кожен модуль відповідає за моделювання окремого процесу або групи процесів. Використання об'єктно-орієнтованого підходу до програмування дозволило створити структурований та легко модифікований код.

Результати обчислювальних експериментів, розроблені комп'ютерні моделі та алгоритми аналізу даних інтегровані в єдиний програмний комплекс, що є об'єктом даного дисертаційного дослідження. Цей комплекс забезпечує наскрізний процес: від підготовки вхідних даних та налаштування параметрів моделі до проведення симуляцій, візуалізації та аналізу результатів.

4.4. Комп'ютерне моделювання та аналіз процесів вологоперенесення, теплогенерації та ущільнення в масиві твердих побутових відходів

В рамках даного дисертаційного дослідження, орієнтованого на вдосконалення модельно-алгоритмічного підходу та програмного забезпечення для прогнозування станів пористих середовищ з органічною складовою, особливу увагу приділено комп'ютерному моделюванню та аналізу взаємопов'язаних фізико-біологічних процесів у ТПВ. Ці процеси, включаючи вологоперенесення, теплогенерацію внаслідок біодеградації органічної речовини, та результуюче ущільнення (осідання) масиву, є складними нелінійними явищами, що вимагають розробки адекватних обчислювальних моделей та ефективних числових методів для їх дослідження та прогнозування.

Математична модель вологоперенесення у пористому сховищі ТПВ з урахуванням ефекту біодеградації буде включати модифіковане рівняння вологоперенесення та кінематичну граничну умову на верхній рухомій межі $x = l(t)$ масиву пористого середовища. Також в математичну модель мають бути включені рівняння для прогнозування теплового стану пористого середовища та прогнозування зміни масової частки органічної складової в результаті біодеградаційних процесів. Формалізація задачі приводить до наступної крайової задачі для чисельного розв'язання:

$$\sigma \frac{\partial s}{\partial t} + s \frac{\beta k_{ws}(s, T)}{\rho_{ws}} m_{ws} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_p \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial x} - \frac{s\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial x} \right) \right) +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\partial k_w}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x}, x \in \Omega(t) = (l(t); L), t > 0, \\
c_T \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \rho c_\rho u \frac{\partial T}{\partial x} + Q(x, t, s, T), x \in \Omega(t), t > 0, \\
\frac{\partial m_{ws}}{\partial t} &= -k_{ws}(s, T) m_{ws}, x \in \overline{\Omega(t)}, t > 0, \\
s(x, t)|_{x=l(t)} &= \bar{s}_l(t), \quad t \geq 0, \\
T(x, t)|_{x=l(t)} &= \bar{T}_l(t), t \geq 0, \\
u(x, t)|_{x=L} &= \left(-D_p \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial x} - \frac{s\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial x} \right) - k_w \right) \Big|_{x=L} = 0, t \geq 0, \\
\left(-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{x=L} &= 0, t \geq 0, \\
s(x, 0) &= s_0(x), x \in \overline{\Omega} = [l_0; L], \\
T(x, 0) &= T_0(x), x \in \overline{\Omega} = [l_0; L], \\
m_{ws}(x, t)|_{t=0} &= m_0(x), x \in \overline{\Omega(t)}, \\
\frac{dl(t)}{dt} &= - \int_{l(t)}^L \frac{1 - \beta}{\rho_{ws} - (1 - \beta)m_{ws}(z, t)} \frac{\partial m_{ws}(z, t)}{\partial t} dz. \\
l(t)|_{t=0} &= l_0 < L.
\end{aligned}$$

Тут s – насиченість пористого середовища; k_w – коефіцієнт вологоперенесення, який в даному випадку залежить від насиченості; $D_p = -k_w \partial \psi / \partial \theta$ – коефіцієнт дифузії ґрунтової вологи; ψ – потенціал ґрунтової вологи; T – температура; $m_{ws}(x, t)$ – масова частка органічної складової в одиниці об'єму відходів; $\sigma(x, t)$, $e = \frac{\sigma(x, t)}{1 - \sigma(x, t)}$ – пористість та коефіцієнт пористості середовища; k_{ws} – коефіцієнт біодеградації, який залежить від температури та насиченості; $m_0(x), s_0(x), \bar{s}_l(t), T_0(x), \bar{T}_l(t)$ – відомі функції; c_T – об'ємна теплоємність пористого середовища; λ – коефіцієнт теплопровідності пористого середовища; ρ, c_ρ – густина та питома теплоємність порової рідини; $Q(x, t, s, T)$ – функція, яка задає теплогенерацію в результаті біодеградації, і яка сама залежить від температури та вологості пористого середовища; $l_0 < L$ – задане початкове положення верхньої рухомої

межі; u – швидкість вологоперенесення, яка визначається згідно закону Дарсі-Клюта на випадок змінної пористості

$$u = -D_p \left(\sigma \frac{\partial s}{\partial x} - \frac{s\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}}{\partial x} \right) - k_w.$$

Зазначимо, що згідно класичного визначення об'ємної теплоємності пористого середовища

$$c_T = \rho c_p \sigma + c_s \rho_s (1 - \sigma),$$

де ρ_s, c_s – густина та питома теплоємність твердої компоненти сховища відходів.

Чисельний розв'язок вищенаведеної складної крайової задачі є ключовим елементом комп'ютерного моделювання. Детальні викладки щодо побудови числової схеми, зокрема застосування МСЕ для просторової дискретизації та відповідних алгоритмів для розв'язання системи нелінійних рівнянь з рухомою межею, наведено в роботі [131]. В рамках даного дослідження здійснено програмну реалізацію цієї чисельної схеми та проведено серію комп'ютерних експериментів для аналізу поведінки системи та валідації моделі.

Для проведення чисельних експериментів та конфігурації комп'ютерної моделі використовувались функціональні залежності та значення параметрів, що базуються на даних з наукових публікацій.

1. Згідно з роботою [106, формула (20)]

$$P = -P_0 \left(s_e^{-1/m_{vgt}} - 1 \right)^{1-m_{vgt}}$$

де P – всмоктуючий тиск в ненасиченому пористому середовищі; $P_0 = \frac{\rho_w g}{\alpha}$, α – коефіцієнт, пов'язаний з повітряним всмоктуванням середовища; ρ_w – густина змочувальної рідини; m_{vgt} – параметр ван Генухтена;

$$s_e = \frac{s - s_r}{1 - s_r},$$

s_r – залишкове насичення, що відповідає рідкій фазі; s_e – ефективне насичення. Тоді отримуємо

$$\begin{aligned}
D_p &= -k_w \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = k_p \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{P}{\rho_w g} \right) = k_w \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{P}{\rho_w g} \right) \frac{\partial s}{\partial \theta} = \\
&= -\frac{k_w}{\rho_w g} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\rho_w g}{\alpha} \left(s_e^{-1/m_{vgt}} - 1 \right)^{1-m_{vgt}} \right) \frac{1}{\sigma} = \\
&= \frac{k_w}{\alpha} \frac{1}{\sigma(1-s_r)} \frac{1-m_{vgt}}{m_{vgt}} \left(s_e^{-1/m_{vgt}} - 1 \right)^{-m_{vgt}} s_e^{-1/m_{vgt}-1}.
\end{aligned}$$

2. Згідно з роботою [106, формула (21)]

$$k_w = k_p s_e^l \left(1 - \left(1 - s_e^{1/m_{vgt}} \right)^{m_{vgt}} \right)^2$$

де l – коефіцієнт зв'язності пор; k_p – коефіцієнт фільтрації. У вказаній роботі запропоновано $l = 0,5$. Тоді

$$\frac{\partial k_w}{\partial s} = \frac{2lk_p}{1-s_r} s_e^{l+1/m_{vgt}-2} \left(1 - \left(1 - s_e^{1/m_{vgt}} \right)^{m_{vgt}} \right) \left(1 - s_e^{1/m_{vgt}} \right)^{m_{vgt}-1}.$$

3. Згідно з роботою [106, Таблиця 2]

$$s_r = 0,22\sigma;$$

$$\alpha = 2,92 \text{ кПа};$$

$$m_{vgt} = 0,375;$$

$$\sigma_0 = 0,53.$$

Згідно залежності

$$\frac{d\sigma}{dt} = -\frac{\beta}{\rho_{ws}} \frac{\partial m_{ws}(x, t)}{\partial t}$$

отримуємо

$$\frac{\sigma^{(j+1)} - \sigma^{(j)}}{\tau} = -\frac{\beta}{\rho_{ws}} \frac{m_{ws}^{(j+1)} - m_{ws}^{(j)}}{\tau},$$

$$\sigma^{(j+1)} = \sigma^{(j)} - \frac{\beta}{\rho_{ws}} \left(m_{ws}^{(j+1)} - m_{ws}^{(j)} \right), j = 0, 1, 2, \dots$$

Згідно з роботою [53] коефіцієнт біодеградації залежить від температури та вологості. При цьому коефіцієнт біодеградації лінійно залежить від

вологості і відношення його максимального значення (при $s = 1$) до його мінімального значення (при $s = s_r$) складає 6. Тоді

$$k_{ws}(s, T) = (ms_e + n)f_T$$

де n та m – лінійні константи, що базуються на нижній і верхній границях k_{ws} , які були прийняті рівними $n = 0,2m$ та $m = 0,67 \cdot 10^{-3} \frac{1}{\text{доба}}$ відповідно. Для врахування впливу температури на процеси біодеградації використано функцію від [54]

$$f_T = 4 \frac{T^6}{(K_T^6 + T^6)} \frac{K_T^7}{(K_T^7 + T^7)}$$

де K_T – константа, що дорівнює 37°C . У цьому випадку максимальне значення коефіцієнта біодеградації становить $0,67 \cdot 10^{-3} \frac{1}{\text{доба}}$ і досягається при температурі 37°C . Зауважимо, що оскільки склад відходів усереднений, то процеси біодеградації розглядаються для відходів із середнім рівнем розкладу - паперових продуктів.

Згідно з роботою [12, пункт 3.2.1] коефіцієнт фільтрації відходів варіюється в дуже широких межах. В даній роботі ми використали значення

$$k_{ws} = 0,3888 \frac{\text{м}}{\text{доба}}.$$

Для модельної задачі розглянуто шар пористого середовища товщиною $l = 10$ м. Крок по змінній x становив $0,01$ м Крок по часу $\tau = 1$ доба. В якості базисних функцій МСЕ використовувались кусково-квадратичні. Алгоритм розрахунку генерації газу інтегрований в загальну обчислювальну схему.

Функцію теплогенерації, як результат біодеградації згідно з роботою [12] взято у вигляді

$$Q(x, t, s, T) = \Delta H \frac{\partial m_{ws}}{\partial t},$$

де ΔH – ентальпія процесів біодеструкції. Беручи до уваги залежність (4.3), маємо

$$Q(x, t, s, T) = -\Delta H k_{ws}(s, T) m_{ws}.$$

Для аеробного процесу ентальпія фазового переходу (для процесів біодеградації) була прийнята рівною $-17,36 \cdot 10^6 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$, а для анаеробного процесу $16,72 \cdot 10^5 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$.

Згідно з [68]

$$\begin{aligned}\rho &= 1000 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}; \\ c_\rho &= 4,184 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot ^\circ\text{C}}; \\ c_{ws} &= 1,00416 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot ^\circ\text{C}}; \\ \rho_{ws} &= 1200 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}.\end{aligned}$$

Згідно з [53, Таблиця 1]

$$\lambda = 1,00416 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot ^\circ\text{C}}.$$

Схема розрахунку генерації газу аналогічна до чисельних експериментів розділу 3.

В якості вхідних даних **чисельного експерименту 4.1** використовувались наступні:

$$\begin{aligned}T|_{x=l(t)} &= T_{top} = 30^\circ\text{C}, \\ s|_{x=l(t)} &= s_{top} = 1, \\ T|_{t=0} &= T_0 = 20^\circ\text{C}, \\ m_{wst}|_{t=0} &= 300 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \\ l|_{t=0} &= l_0 = 10 \text{ м}, \\ \beta &= \frac{1}{2}.\end{aligned}$$

Розглядався анаеробний процес із значенням ентальпії $\Delta H = -16,72 \cdot 10^5 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$. Результати наведено в Табл.4.1 У випадку нехтування впливом

температури та вологості на глибині $x = 5$ м через $t = 360$ днів насиченість склала $s = 0,801$. У випадку урахування впливами – $s = 0,818$.

Таблиця 4.1

Результати чисельного експерименту 4.1

t , дні	Без урахування впливу температури та вологості			З урахуванням впливу температури та вологості		
	просідання, м	T_{max} , °C	Парникові гази ($\times L_0$, м ³)	просідання, м	T_{max} , °C	Парникові гази ($\times L_0$, м ³)
30	0,009	30	23,72	0,009	30	22,77
60	0,019	30	47,12	0,029	33	67,46
90	0,028	30	70,21	0,061	39	134,93
150	0,047	30	115,50	0,144	47	297,50
210	0,065	30	159,59	0,233	51	470,17
270	0,082	30	202,53	0,309	54	610,86
330	0,100	30	244,35	0,361	56.5	705,38
360	0.109	30	264,84	0,383	57	742,87

В якості вхідних даних чисельного експерименту 4.2 використовувались наступні:

$$T|_{x=l(t)} = T_b + \frac{T_t - T_b}{2} + \frac{T_t - T_b}{2} \sin\left(2 \cdot \frac{\pi t}{360}\right), T_b = 8^\circ\text{C}, T_t = 30^\circ\text{C},$$

$$s|_{x=l(t)} = s_r + \frac{1 - s_r}{2} + \frac{1 - s_r}{2} \sin\left(24 \cdot \frac{\pi t}{360}\right),$$

$$T|_{t=0} = T_0 = 20^\circ\text{C},$$

$$m_{wst}|_{t=0} = 300 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},$$

$$l|_{t=0} = l_0 = 10 \text{ м},$$

$$\beta = \frac{1}{2}.$$

Аналогічно, як і в чисельному експерименті 4.1, розглядався анаеробний процес із значенням ентальпії $\Delta H = -16,72 \cdot 10^5 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$. Результати наведено в Табл.4.2. У даному випадку через $t = 360$ днів максимальна температура склала $50,8^\circ\text{C}$, а насиченість склала $s = 0,592$ на глибині $x = 2$ м. Тобто в даному випадку коливання рівня вологості на поверхні пористого середовища – промочування пористого середовища значно уповільнюється.

Таблиця 4.2

Результати числового експерименту 4.2 на випадок урахування впливу температури та вологості на процеси біодеградації

t , дні	Просідання, м	Парникові гази ($\times L_0, \text{м}^3$)
30	0,005	13,39
60	0,014	35,01
90	0,029	69,83
150	0,080	180,73
210	0,156	335,81
270	0,232	481,87
330	0,284	580,88
360	0,307	621,46

В Табл.4.1 наведено результати просідань, газогенерації та максимальної температури в масиві пористого середовища при відсутності коливань вологості та температури на верхній межі пористого середовища. В той же час результати Табл.4.2 відповідають наявності коливань, як вологості так і температури, на верхній межі. В обох випадках урахування впливу температури та вологості призводить до різких змін в просіданнях та об'ємах газогенерації. На випадок експерименту 4.1 просідання на момент часу 360 днів зростають із 0,109 м до 0,383 м, а в експерименті 4.2 – до 0,307 м. Це ж саме стосується і газогенерації. Однак, як видно із результатів Табл.4.1, при зростанні максимальної температури (внаслідок виділення тепла при біодеградації) інтенсивність біодеградаційних процесів починає знижуватись, а отже знижується динаміка газогенерації та просідань. Цей результат комп'ютерного моделювання відповідає фізичній суті процесу

(обмеження активності мікроорганізмів при високих температурах) і слугує підтвердженням адекватності поведінки розробленої моделі. Адже при температурі вище 38°C інтенсивність діяльності мікроорганізмів починає знижуватись, а звідси – знижується інтенсивність біодеградації. Це ще раз доводить необхідність урахування взаємозв'язаних процесів тепло- вологоперенесення при моделюванні стану сховищ відходів. Таким чином, здійснене комп'ютерне моделювання та числовий аналіз дозволили отримати кількісні прогнози та продемонстрували критичну важливість урахування взаємозв'язаних процесів тепло- та вологоперенесення при обчислювальному прогнозуванні стану сховищ відходів.

Висновки до розділу 4

Основними результатами розділу 4 є розроблення та реалізація підходів до комп'ютерного моделювання виділення парникових газів із ненасичених пористих середовищ з урахуванням впливу тонких примежових шарів органічного походження на процеси тепло- та вологоперенесення, біодеградації та газогенерації. Зокрема:

1. Удосконалено чисельно-аналітичний підхід до моделювання температурного та вологісного режимів пористих середовищ з органічною складовою, який вперше дозволяє враховувати наявність тонких примежових шарів зі змінними фізичними характеристиками в рамках єдиного обчислювального процесу.

2. Досліджено вплив тонких шарів органічного походження на тепло- та вологоперенесення у пористому середовищі.

3. Встановлено, що наявність шару опалого листя призводить до зниження швидкості прогрівання ґрунту, особливо у верхніх горизонтах (0,2–0,6 м), де листя виконує роль теплоізолюючого шару. Для глибших горизонтів (0,8–1,0 м) ефект ізоляції зменшується, але все ще зберігається вплив на зниження температурного режиму в порівнянні з ділянками без листя.

4. Вперше чисельно показано, що вологість опалого листя суттєво змінює його теплоізоляційні властивості: із підвищенням вологості зростає теплопровідність шару, що спричиняє наближення температури ґрунту до атмосферної. Таким чином, сухе листя має найвищу ефективність у зниженні теплового потоку в ґрунт.

5. Розроблене програмне забезпечення дало змогу імітувати різні сценарії змін температури та вологості для типових умов лісових екосистем, що дозволило зробити висновок про істотну роль органічних шарів у регуляції температурного режиму і, як наслідок, – у процесах біотрансформації та виділення парникових газів.

6. Отримані результати підтверджують необхідність обов'язкового врахування властивостей тонких поверхневих шарів органічного походження у чисельному моделюванні станів пористого середовища для підвищення точності прогнозів у рамках задач екологічного моніторингу та управління природними процесами.

7. Також досліджено модельну задачу вологоперенесення в масиві пористого середовища з органічною складовою, припускаючи, що на зміну положення верхньої рухомої межі в даному випадку впливають лише біодеградаційні процеси. Чисельні експерименти показали наступні тенденції. Зокрема, у випадку відсутності коливань температури та вологості на верхній межі (Табл.4.1) просідання на 360-ту добу становлять 0,109 м, а при врахуванні впливу температури та вологості зростають до 0,383 м. В аналогічному експерименті з коливаннями на межі (Табл.4.2) просідання досягають 0,307 м. Така ж динаміка спостерігається й щодо газогенерації. У всіх випадках підвищення температури понад 38 °C призводить до зниження активності мікроорганізмів, що зменшує інтенсивність біодеградації, газогенерації та просідань. Це ще раз підтверджує важливість урахування взаємозв'язаних процесів тепло- та вологоперенесення у числовому моделюванні поведінки сховищ твердих побутових відходів.

РОЗДІЛ 5. ПРОГРАМНИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНІВ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩ З ОРГАНІЧНОЮ СКЛАДОВОЮ

5.1. Цифрові сервіси та джерела даних для екологічного та техногенного моніторингу

Сучасний етап розвитку наукових досліджень, спрямованих на моделювання складних екологічних та техногенних процесів, що відбуваються у пористих середовищах, особливо тих, що містять органічну складову, нерозривно пов'язаний з необхідністю інтеграції та аналізу великих обсягів різномірних даних. Прогнозування поведінки таких систем, включаючи процеси біодеградації, фільтрації, вологоперенесення, теплогенерації та генерації парникових газів, вимагає не лише глибокого розуміння фундаментальних закономірностей, але й доступу до актуальної та достовірної інформації про стан довкілля та джерела антропогенного впливу. Стрімкий розвиток цифрових технологій, поява нових онлайн-сервісів, платформ агрегації даних та відкритих джерел інформації створюють безпрецедентні можливості для підвищення точності, оперативності та прогнозної здатності моделей, що розробляються (рис. 5.1).

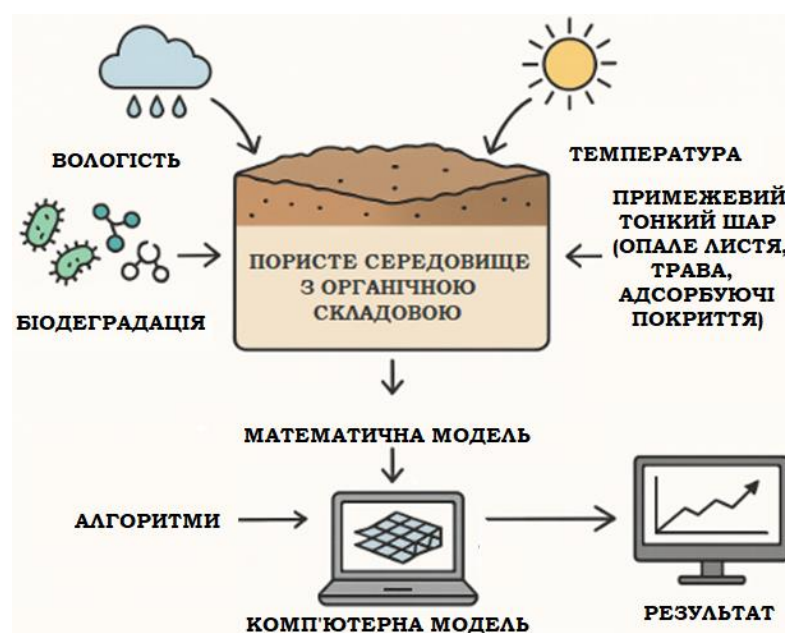


Рис. 5.1. Графічне представлення компонентів моделювання

Сучасний екологічний моніторинг все більше зміщується від простої констатації фактів забруднення до предиктивного аналізу та оцінки екологічних ризиків. Це зміщення акцентів безпосередньо корелює з метою даного дисертаційного дослідження, яке спрямоване на розробку програмного комплексу для прогнозування станів пористих середовищ з органічною складовою. Визначення моніторингу як системи, що включає «прогноз змін» підкреслює його еволюцію від пасивного спостереження до активного інструменту попередження негативних наслідків та прийняття управлінських рішень. Таким чином, дані екологічного моніторингу стають невід'ємною частиною процесу отримання прогнозних даних, слугуючи основою для розробки, калібрування та валідації математичних моделей, що описують складні процеси в пористих середовищах.

Ефективне моделювання стану пористих середовищ вимагає наявності значного масиву початкових даних. Ця інформація необхідна для належної ініціалізації моделі, встановлення її параметрів, а також для подальшого калібрування та перевірки достовірності отриманих результатів. Збір таких даних значною мірою спирається на систематичне спостереження, або моніторинг, за компонентами довкілля та антропогенними впливами. Сучасні цифрові технології пропонують різноманіття сервісів та інформаційних ресурсів, які можуть бути використані для забезпечення цього процесу.

На території України функціонує низка національних інформаційних ресурсів, які консолідують екологічні та геопросторові відомості. Серед відомих платформ для агрегації даних варто відзначити SaveEcoBot [Доступно за покликанням: <https://www.saveecobot.com/>]. Цей ресурс надає доступ до інформації стосовно якості атмосферного повітря (включно з результатами громадського моніторингу), даних дозволів на викиди забруднюючих речовин, інформації з реєстру оцінки впливу на довкілля (ОВД), а також відомостей про ліцензії на діяльність, пов'язану з небезпечними відходами. Платформа має інтерактивну карту забруднення та чат-бот для оперативного отримання інформації. Важливою функціональною можливістю є наявність

API, що дозволяє автоматизовано отримувати частину даних системи. Однак слід звернути увагу, що хоча SaveEcoBot об'єднує дані з багатьох джерел, потенційно релевантних для моделювання (наприклад, Український гідрометеорологічний центр, портал «Екозагроза» Міністерства захисту довкілля та природних ресурсів України), прямий програмний доступ через їх API до специфічних in-situ даних, критично важливих для моделювання підповерхневих процесів (як-от температура та вологість ґрунту на різних глибинах, склад біогазу, детальний вміст органічної речовини), не завжди гарантований і потребує додаткового вивчення.

Державний портал відкритих даних (data.gov.ua) виступає у ролі централізованого сховища державних даних різноманітного характеру. Тут можна знайти екологічні дані, зокрема інформацію з кадастрів територій та об'єктів природно-заповідного фонду, реєстрів утворення, оброблення та утилізації відходів, а також дані про дозволи на викиди та спеціальне водокористування. При цьому, необхідно враховувати, що доступність, повнота та актуальність окремих наборів даних, розміщених на порталі, може мати певні обмеження.

Український державний геопортал дистанційного зондування Землі (ДЗЗ) пропонує доступ до різноманітних продуктів, отриманих в результаті супутникового моніторингу. Доступні, наприклад, карти температури поверхні (LST), індекс NDVI, прогнози щодо пожежонебезпеки та посухи, дані моніторингу снігового покриву. Ці продукти можуть бути цінними для визначення граничних умов у моделях, оцінки стану рослинного покриву або отримання загальної характеристики поверхні досліджуваної території.

Серед перспективних джерел варто згадати анонсований Геопортал відкритих даних (Big Data Україна), який планує надавати доступ до інформації про земельні ділянки, водні ресурси та надра. Національна інфраструктура геопросторових даних (НІГД) також є важливим елементом системи доступу до геопросторової інформації в Україні. Однак, її функціональність та доступність специфічних масивів даних, необхідних для

детального моделювання (наприклад, детальні характеристики ґрунтів, як-от вміст органіки, гранулометричний склад, вологість на глибині), може бути обмеженою, зокрема в поточних умовах воєнного стану, і потребує ретельної перевірки наявності відповідних сервісів та наборів даних.

Щодо даних про стан ґрунтів, значущим документом є агрохімічний паспорт поля (земельної ділянки), який містить інформацію про агрохімічні характеристики ґрунтів (вміст гумусу, елементів живлення, показник рН) та рівень їх забруднення. Проте, отримання цих відомостей зазвичай здійснюється шляхом індивідуального запиту, що створює труднощі для їх автоматизованого використання у моделюванні. Загалом, в Україні спостерігається певний дефіцит систематизованих та легкодоступних цифрових даних щодо вмісту органічного вуглецю в ґрунтах для потреб великомасштабного моделювання. Дані моніторингу вмісту органічної речовини та інших властивостей ґрунтів можуть бути доступні через спеціалізовані науково-дослідні установи, як-от ДУ «Інститут охорони ґрунтів України», у формі публікацій або звітів. Проте, виявлення централізованої цифрової бази даних з відкритим API для цих параметрів наразі не підтверджено. Моніторинг ґрунтових та підземних вод на меліорованих територіях проводиться з певною періодичністю і може слугувати джерелом даних для локальних досліджень.

Міжнародні проєкти та космічні відомства надають величезні масиви даних спостереження Землі, що мають виняткову цінність для екологічного моделювання.

Програма Copernicus Європейського Союзу надає вільний, повний та відкритий доступ до даних та інформації про планету та її довкілля.

Copernicus Land Monitoring Service (CLMS) забезпечує широкий спектр географічної інформації для застосувань, пов'язаних із земною поверхнею. Сюди входять продукти класифікації наземного покриття та землекористування (Land Cover/Land Use), як-от CORINE Land Cover (CLC) з оновленням приблизно кожні 6 років та просторовою роздільною здатністю

100 м (для растрових даних) або мінімальною площею картографування (MMU) 25 га (для векторних), а також новіший, більш деталізований продукт CLC+ Backbone. CLMS також надає дані про стан рослинного покриву (наприклад, вегетаційні індекси), параметри водного циклу, зокрема вологість поверхневого шару ґрунту (Surface Soil Moisture – SSM) та індекс вологості ґрунту (Soil Water Index – SWI). Для Європи дані SWI доступні з роздільною здатністю 1 км та щоденним оновленням, тоді як глобальний SWI має роздільну здатність 12,5 км. Дані про температуру поверхні суходолу (Land Surface Temperature – LST) також є важливим продуктом, отриманим шляхом синергетичного використання даних з різних супутників, який може мати високу просторову роздільну здатність (наприклад, 100 м після процедури зменшення масштабу, тобто даунскейлінгу). Продукти HRL (High Resolution Layers) містять деталізовану інформацію про окремі елементи наземного покриву, зокрема HRL Water & Wetness та HRL Imperviousness. Однак, слід зазначити, що дані щодо вмісту органічного вуглецю в ґрунтах (HRL Soil Organic Carbon) не представлені як стандартний, легкодоступний продукт на основних порталах CLMS, хоча дані супутника Sentinel-2 активно застосовуються у дослідницьких проєктах для оцінки та картування SOC.

Сервіс Copernicus Atmosphere Monitoring Service (CAMS) фокусується на наданні даних та прогнозів щодо складу атмосфери, включаючи концентрації та потоки парникових газів, а також інформацію про аерозолі, озон та інші забруднювачі. CAMS надає глобальні прогнози та реальні дані щодо складу атмосфери та продукти реаналізу, наприклад EAC4 (ECMWF Atmospheric Composition Reanalysis 4) для загального складу атмосфери та EGG4 (ECMWF Greenhouse Gas Reanalysis) спеціально для парникових газів. Ці набори даних реаналізу забезпечують просторово та часово узгоджену інформацію, починаючи з 2003 року, з типовою просторовою роздільною здатністю близько 80 км ($0,75^\circ \times 0,75^\circ$) та часовою дискретністю 3 години.

Європейське агентство з навколишнього середовища (European Environment Agency – EEA) є значущим джерелом екологічних даних, карт та

звітів для європейського регіону. ЕЕА активно використовує дані Copernicus, зокрема продукти CLMS, і часто надає доступ до агрегованих даних або специфічних європейських наборів даних через власні веб-сервіси та API. Дані щодо вмісту органічного вуглецю в ґрунтах або інші специфічні параметри можуть бути доступні через тематичні звіти або інтерактивні карти, розміщені на порталі ЕЕА.

Інші міжнародні платформи, такі як GEOSS (Global Earth Observation System of Systems), EnviDat (портал даних WSL, Швейцарія), а також наукові бібліографічні та повнотекстові бази даних, наприклад, EBSCO Environmental Index/Science Database, можуть слугувати ресурсами для пошуку специфічних наукових наборів даних або агрегованої інформації з різних галузей знань.

Для моделювання впливу людської діяльності на пористі середовища важлива інформація, що характеризує різні види антропогенних впливів: механічні (як-от ущільнення, деформація масиву), гідромеханічні (зміни рельєфу внаслідок роботи гідромеханізмів), гідродинамічні (модифікація режиму підземних вод), термічні, електромагнітні та радіаційні. Джерелами такої інформації можуть бути дані моніторингу промислових підприємств (зокрема, через SaveEcoBot щодо дозволів на викиди та скиди), відомості з містобудівних проєктів, звіти, підготовлені в рамках оцінки впливу на довкілля (ОВД), а також результати спеціалізованих досліджень територій зі значним техногенним навантаженням.

Для формування всебічного уявлення про стан модельованого середовища та підвищення достовірності прогнозів моделі надзвичайно важливим є застосування інтегрованого підходу до використання даних. Це передбачає об'єднання інформації, отриманої з різноманітних джерел: даних дистанційного зондування, результатів польових вимірювань in-situ, даних лабораторних аналізів зразків, показань автоматизованих сенсорних мереж та, за необхідності, результатів попередніх моделювань (Табл.5.1).

Таблиця 5.1

Ключові джерела даних для моніторингу та моделювання стану пористих середовищ

Джерело даних / Платформа	Тип даних / Параметри	Просторова роздільна здатність	Часова роздільна здатність / Оновлення	Формати даних	Метод доступу	Примітки
SaveEcoBot	Якість повітря, дозволи на викиди, реєстр ОВД, громадський моніторинг	Точкові, агреговані	В реальному часі, періодично	JSON (API)	API, веб-портал	Дані про ґрунти/біогаз потребують уточнення
data.gov.ua	Екологічні реєстри, агро-дані	Різна	Різна (деякі застарілі)	CSV, JSON, XML, SHP	Веб-портал, завантаження	Доступність та актуальність варіюється
Геопортал ДЗЗ	LST, NDVI, посуха, сніг	10 м (NDVI), інше - залежить	Кожні 15 днів (NDVI)	Не вказано	Веб-портал	Переважно поверхневі дані
НІГД	Базові геодані, потенційно ґрунти	Різна	Різна	Не вказано	Веб-портал (обмежений доступ)	Потребує перевірки
Агрохімічний паспорт поля	pH, гумус, NPK, забруднення	Рівень поля	Кожні 5 років або за потреби	Паперовий/електронний	За запитом	Централізований API відсутній
Інститут охорони ґрунтів	Моніторинг ґрунтів, органіка	Ділянки/регіон	Періодично	Звіти, публікації	Веб-сайт, за запитом	API неочевидні
Copernicus CLMS	LULC, SSM, SWI, LST, HRL	10 м - 1 км	Щоденно (SSM), 6-річно (CORINE)	GeoTIFF, NetCDF	WEkEO, CLMS портал	HRL SOC - нестандартний продукт
Copernicus CAMS	Газові концентрації, аерозолі	~80 км (глобальний)	3-годинна (реаналіз), щогодинна/щоденна	GRIB, NetCDF	ADS API, GUI	Реаналіз з 2003 року
USGS EarthExplorer	Landsat, DEMs, аерофото	15–60 м	Кожні 8–16 днів	COG, GeoTIFF	Веб-портал, API	Потрібна реєстрація
EEA	Дані по Європі, карти, звіти	Різна	Різна	Різні, часто API	Веб-портал, API	Агрегація в т.ч. Copernicus
GEOSS Portal	Агреговані дані EO	Різна	Різна	Різні	Веб-портал	Брокер доступу до багатьох джерел
EnviDat	Моніторинг, дослідження (WSL)	Різна	Різна	Різні (з DOI)	Веб-портал	Орієнтований на дані WSL/ETH

Моделювання процесів, що відбуваються всередині пористого середовища, таких як біодеградація органіки, утворення та міграція біогазу, перенесення тепла та маси на глибині, зміни пористості та наступне просідання, істотно залежить від знання внутрішніх властивостей та поточного стану цього середовища. Необхідні дані включають початкові умови (наприклад, розподіл температури та вологості по профілю, стартовий вміст органічної речовини) та параметри самого матеріалу (його теплофізичні, гідравлічні, механічні властивості, константи кінетики біодеградації). Доступ до подібних детальних in-situ даних в Україні, особливо у систематизованому цифровому форматі з можливістю автоматизованого отримання, є менш очевидним. Джерела, такі як агрохімічні паспорти ґрунтів, наукові звіти та публікації спеціалізованих установ (наприклад, Інституту охорони ґрунтів України), або результати локального моніторингу конкретних об'єктів (наприклад, полігонів твердих побутових відходів), часто існують як окремі документи, вимагають спеціальних запитів для отримання або не мають стандартизованих API. Додатково, існують свідчення про загальний брак систематизованих даних щодо вмісту та характеристик органічного вуглецю в ґрунтах на території України, що є критично важливим для точного моделювання у більших масштабах.

У рамках розробки програмного комплексу для комп'ютерного моделювання процесів у пористих середовищах з органічною складовою одним із важливих етапів є збір, обробка та використання достовірних просторово-часових вхідних даних. З метою підвищення точності та адекватності результатів моделювання залучені сучасні цифрові сервіси, які забезпечують доступ до відкритих даних про стан довкілля, ґрунтів та атмосферних умов. Серед них ключову роль відіграли глобальний сервіс SoilGrids та платформа Lametsy.

Глобальний сервіс SoilGrids (<https://soilgrids.org/>) розроблений і підтримується Міжнародним інститутом досліджень ґрунтів (ISRIC – World Soil Information). Він надає високоякісні просторово-прив'язані дані про

фізико-хімічні властивості ґрунтів на глобальному рівні з просторовим розділенням 250 м та глибинною стратифікацією (0–5 см, 5–15 см, 15–30 см тощо). Основні параметри, які використовуються у моделюванні, включають: об'ємну вологість ґрунту (soil moisture), вміст органічного вуглецю, гранулометричний склад (вміст піску, мулу, глини) тощо.

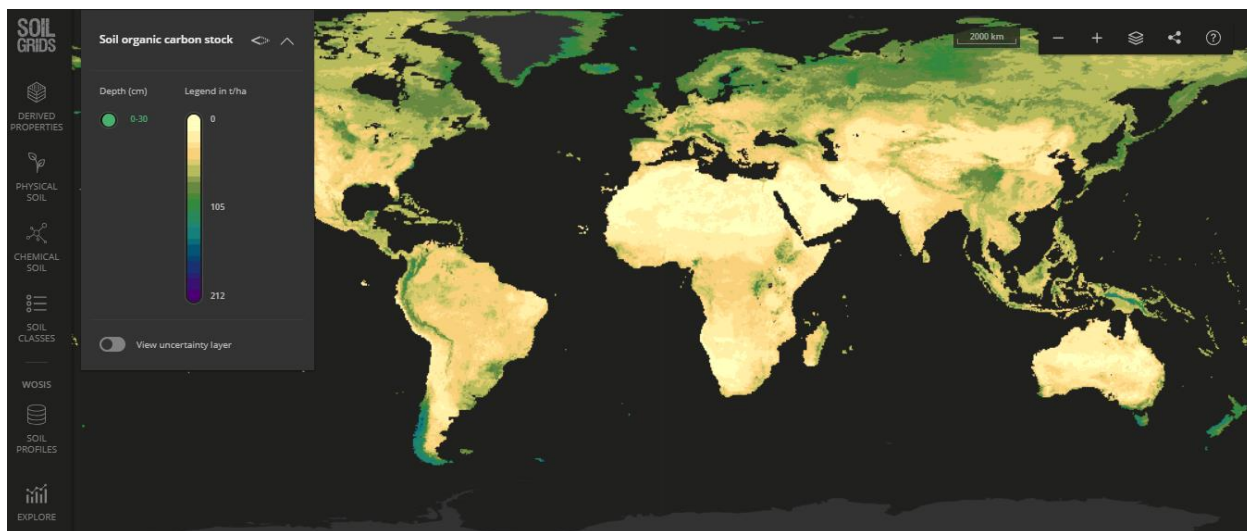


Рис. 5.2. Графічне представлення інтерфейсу сервісу SoilGrids

Отримані з цього сервісу дані були використані для параметризації граничних умов, налаштування початкових умов у моделях вологоперенесення, біодеградації та виділення парникових газів. Дані інтегрувалися у програмний комплекс шляхом попередньої обробки у ГІС-системі (QGIS), конвертації у формат NetCDF та подальшого імпорту у модуль обчислень.

Іншим важливим джерелом інформації є платформа Lametsy (<https://lametsy.com.ua/>), яка спрямована на забезпечення користувачів зручним інструментарієм для роботи з метеоданими та їх аналізу. Основна мета платформи полягає в тому, щоб дозволити користувачам ефективно та швидко працювати з метеорологічними даними, не витрачаючи додатковий час на їх опрацювання. Сервіс акумулює дані з багатьох метеостанцій по всій території України, а також використовує чисельні прогностичні моделі для побудови метеорологічних прогнозів. Сервіс надає доступ до таких даних, як:

температура повітря (середньодобова, мінімальна, максимальна), кількість опадів, відносна вологість повітря, атмосферний тиск, швидкість і напрям вітру, тощо.

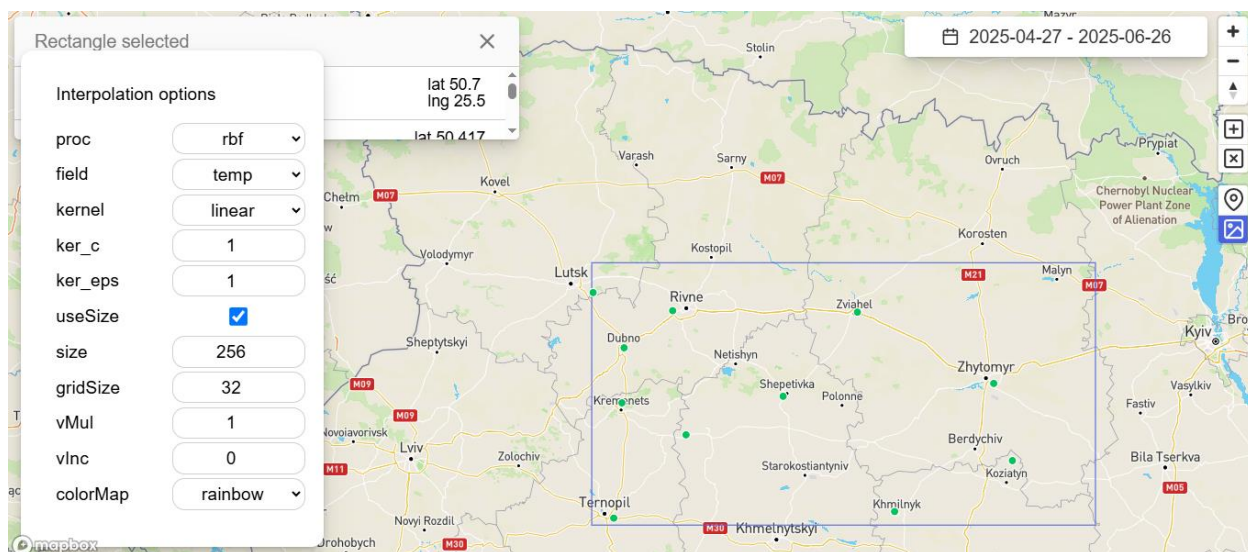


Рис. 5.3. Графічне представлення інтерфейсу сервісу Lametsy

Інформація з Lametsy використовувалася для врахування змін температурно-вологісного режиму у часі в межах конкретних географічних локацій. Це дозволило забезпечити реалізм змін граничних умов, зокрема температури на поверхні полігону, вологості вхідного потоку, зміни коефіцієнтів теплоперенесення. Метеодані також застосовувалися для побудови часових графіків температури та вологості, які передавалися у відповідні обчислювальні модулі програмного комплексу як змінні параметри граничних умов.

Інтеграція зазначених цифрових сервісів у структуру розробленого програмного забезпечення забезпечила:

- адаптацію моделі до конкретних регіональних умов без необхідності збору експериментальних польових даних у кожному випадку;
- підвищення достовірності результатів чисельного моделювання;
- можливість автоматизації підготовки вхідних даних для проведення багатоваріантних симуляцій.

З метою автоматизації процесу створено Python-модуль, що здійснює: пошук найближчої метеостанції за координатами досліджуваної території та запит даних за заданий часовий інтервал. Вихідними даними модуля є таблиця значень основних метеопараметрів, придатна для подальшого моделювання в межах обчислювального ядра комплексу.

На початковому етапі здійснюється формування запиту на пошук метеостанцій, які розташовані в найближчому до заданих координат радіусі. Для цього використовується HTTP-запит до Lametsy:

```
station_request =
f'https://api.lametsy.com.ua/api/gsod/location/nearest?lat={lat}&lon={lon}&count
=10&where=date.end.greater,{start_date}'
```

Після отримання переліку найближчих станцій здійснюється покрокова перевірка наявності погодних даних за обраний часовий проміжок для кожної зі станцій. У разі відсутності даних перевіряється наступна доступна станція.

Наступний блок програми відповідає за отримання погодних параметрів:

```
weather_url =
f'https://api.lametsy.com.ua/api/gsod/stations/{station_uid}?format=json&since={s
tart}&until={end}'
weather_response =
json.loads(requests.get(weather_url).text.encode().decode('utf-8-sig'))
```

Для коректної обробки випадків, коли у даних відсутнє значення того чи іншого параметра, застосовується логіка заповнення на основі сусідніх днів (forward fill).

5.2. Структура та функціональні модулі програмного комплексу

Розробка програмного комплексу (ПК) для моделювання складних, взаємопов'язаних процесів у пористих середовищах з органічною складовою вимагає обґрунтованої архітектури. Вона має забезпечувати гнучкість для

розширення функціоналу, масштабованість для задач різного розміру та спрощувати процеси розробки, тестування й підтримки. З огляду на це, для даного ПК обрано модульну архітектуру.

Модульний дизайн є фундаментальним та широко апробованим підходом в архітектурі програмного забезпечення, особливо в галузі наукового програмування та комп'ютерного моделювання. Цей підхід полягає у декомпозиції складної програмної системи на множину відносно незалежних, логічно відокремлених блоків, що називаються модулями або компонентами. У контексті наукових симуляцій кожен такий модуль, як правило, інкапсулює певну частину математичної моделі (наприклад, розрахунок гідродинамічного потоку, моделювання хімічних реакцій, опис механічних деформацій) або реалізує специфічні допоміжні функції (зокрема, введення та попередня обробка даних, візуалізація результатів, управління обчислювальним процесом).

Переваги модульного дизайну є багатограними і критично важливими для успішної розробки, супроводу та розвитку складних наукових програмних комплексів. По-перше, спрощення розробки та тестування досягається завдяки можливості незалежної роботи над окремими модулями. Це дозволяє командам розробників паралелізувати зусилля та фокусуватися на конкретних аспектах системи. Як наголошено у праці [135] з архітектури програмного забезпечення, чітко визначені інтерфейси між модулями мінімізують залежності та полегшують ізольоване тестування функціональності кожного компонента. Сучасні методології розробки наукового програмного забезпечення також наголошують на важливості модульності для забезпечення якості та відтворюваності досліджень [136].

По-друге, модульність суттєво полегшує модифікацію та розширення функціоналу. Зміни в одному модулі, за умови стабільності його інтерфейсу, мають мінімальний вплив на інші частини системи. Це особливо актуально в наукових дослідженнях, де моделі та алгоритми постійно уточнюються та доповнюються. Дослідження в галузі інженерії наукового програмного

забезпечення підкреслюють, що компонентно-орієнтовані архітектури сприяють гнучкості та адаптивності наукових кодів, особливо у високопродуктивних обчисленнях [137].

По-третє, модульний дизайн активно сприяє повторному використанню коду. Розроблені та ретельно протестовані модулі можуть бути використані в різних частинах поточного проєкту або навіть в інших програмних продуктах зі схожою функціональністю. Це не тільки скорочує час розробки, але й підвищує надійність програмного забезпечення за рахунок використання перевірених рішень. Практики ефективного наукового програмування активно впроваджують модульність як засіб для створення довговічного та багаторазово використовуваного дослідницького інструментарію [138].

Цей підхід відповідає принципам архітектури, реалізованим у багатьох відомих програмних системах для моделювання процесів у пористих середовищах, таких як Trilinos (доступно за покликанням: <https://trilinos.github.io/>), OpenGeoSys (доступно за покликанням: <https://www.opengeosys.org/>), TOUGH (доступно за покликанням: <https://tough.lbl.gov/>) та MIN3P (доступно за покликанням: <https://www.min3p.com/>), HYDRUS (доступно за покликанням: <https://www.pc-progress.com/en/Default.aspx?hydrus>). Наприклад, Trilinos позиціонується як проєкт для створення бібліотек обчислювальних алгоритмів та технологій з чіткою підтримкою модульності і розширюваності. OpenGeoSys має відкрите модульне ядро з підтримкою THMC (термо-гідро-механічно-хімічних) процесів і чітким відокремленням фізичних модулів. Подібно, TOUGH і MIN3P побудовані за принципами компонентного поділу, що забезпечує як повторне використання, так і можливість адаптації до нових сценаріїв.

Програмний комплекс складається з наступних ключових модулів, що взаємодіють для виконання комплексного моделювання:

1. модуль введення та передобробки даних відповідає за завантаження, перевірку, інтерполяцію, агрегацію та приведення вхідних даних з різних джерел до формату та сітки моделі;

2. модуль вологості розраховує рух води у варіативно-насиченому пористому середовищі;
3. модуль газогенерації моделює генерацію газу внаслідок біодеградації;
4. модуль визначення температури розраховує розподіл температури, включаючи генерацію тепла в результаті біодеградаційних процесів;
5. модуль біодеградації – це ядро моделювання трансформації органіки;
6. чисельний розв'язувач – це основний блок, що реалізує чисельний метод для розв'язання системи зв'язаних рівнянь з усіх модулів;
7. модуль візуалізації та виведення результатів відповідає за представлення результатів у вигляді графіків.

Модулі обмінюються даними на кожному кроці, тому вибір стратегії зв'язування (coupling) процесів є критичним. З огляду на складність системи та обраний метод скінченних різниць було обрано використання послідовної ітераційної схеми.

5.3. Інтерфейс користувача та візуалізація результатів симуляції

Ефективність будь-якого програмного комплексу, особливо такого, що призначений для складного моделювання, значною мірою визначається якістю його інтерфейсу користувача (UI) та можливостями візуалізації результатів симуляції. Інтуїтивно зрозумілий та функціональний UI не лише полегшує процес взаємодії користувача з програмою, роблячи його більш продуктивним та менш схильним до помилок, але й відкриває доступ до всього спектру можливостей моделювання без зайвих складнощів. Паралельно, потужні засоби візуалізації перетворюють «сирі» числові дані, отримані в результаті симуляції, на наочні та інформативні графіки, діаграми та просторові розподіли, що значно спрощує їхній аналіз, інтерпретацію та виявлення ключових закономірностей.

Розробка інтерфейсу користувача програмного комплексу для моделювання є критично важливим етапом, що безпосередньо впливає на

ефективність та зручність роботи дослідників. Замість зосередження на загальних принципах розробки UI, у цьому розділі детально представлено запропонований інтерфейс користувача та обґрунтовано архітектурні та дизайнерські рішення, прийняті під час його розробки. Акцент зроблено на те, чому саме такий UI було обрано та які конкретні переваги він надає у контексті вирішення задач дисертаційного дослідження.

На початкових етапах проєктування інтерфейсу проведено ретельний аналіз типових сценаріїв використання програмного комплексу та ідентифіковано ключові завдання, які користувачі виконуватимуть. Це включало визначення необхідних вхідних параметрів для моделювання процесів у пористих середовищах з органічною складовою, а також способів представлення та аналізу вихідних даних. На основі цього аналізу було розроблено концептуальні макети, які відображають загальну структуру вікон, розташування основних елементів керування та логіку навігації.

Запропонований UI (рис.5.2) розроблено з метою максимально спростити взаємодію користувача з програмним комплексом та забезпечити інтуїтивно зрозуміле налаштування параметрів симуляції. Зокрема, реалізовано:

- модульну структуру головного вікна. Інтерфейс поділено на чіткі функціональні блоки: «Файл», «Газоутворення», «Граничні умови», «Інформація», «Про програму» та «Вихід». Такий поділ дозволяє користувачу швидко орієнтуватися в функціоналі програми та зосередитися на конкретних етапах роботи з моделлю;

- чітке розмежування блоків налаштування. Для зручності введення даних, інтерфейс має окремі секції «Налаштування параметрів симуляції теплоперенесення», «Властивості ґрунту» та «Параметри симуляції». Це зменшує когнітивне навантаження та допомагає уникнути плутанини;

- використання радіокнопок для вибору типу введення. У блоках «Властивості ґрунту» та «Параметри симуляції» реалізовано вибір між використанням попередньо визначених параметрів («Вибрати тип ґрунту»,

«Використовувати параметри за замовчуванням») та можливістю введення власних значень («Ввести власні властивості», «Ввести власні параметри»). Це рішення обґрунтовано необхідністю надати гнучкість досвідченим користувачам, зберігаючи при цьому простоту для тих, хто використовує типові сценарії;

– інтуїтивне введення числових значень. Для таких параметрів, як «початкова температура ґрунту», «температура атмосфери» та «об'ємна вологість ґрунту», використовуються поля введення з кнопками-лічильниками. Це забезпечує точність введення та зручність регулювання значень;

– кнопка запуску моделювання. Велика, контрастна кнопка «Запустити моделювання теплоперенесення» чітко вказує на основну дію, яку користувач повинен виконати після налаштування параметрів. Її розташування внизу вікна є типовим та очікуваним, що підвищує загальну юзабіліті.

Рис. 5.4. Графічний інтерфейс програмного комплексу

Дизайн запропонованого інтерфейсу базується на принципах юзабіліті, таких як видимість стану системи (користувач завжди бачить, які параметри він налаштовує), відповідність між системою та реальним світом (використання зрозумілих термінів та одиниць вимірювання, таких як «температура атмосфери», контроль та свобода користувача (можливість як

обирати типові значення, так і вводити власні), консистентність та стандартизація (подібні елементи керування використовуються для подібних завдань). Ці загальновідомі принципи інтегровані в конкретний дизайн, з метою забезпечення оптимальної взаємодії користувача з програмним комплексом для моделювання процесів у пористих середовищах.

Процес розробки UI був ітеративним, включаючи етапи проєктування, прототипування та тестування. Прототипування дозволило швидко оцінити зручність навігації та ергономіку програми. Хоча безпосереднє тестування за участю реальних користувачів було обмеженим на даному етапі, дизайнерські рішення приймалися з урахуванням типових поведінкових патернів.

Одним з ключових елементів UI програмного комплексу для моделювання є область налаштування моделі, представлена на рис. 5.2. Цей компонент забезпечує користувачеві зручний та інтуїтивно зрозумілий спосіб визначення всіх необхідних параметрів моделі, включаючи властивості ґрунту, початкові та граничні умови. Оскільки кількість параметрів у складних моделях може бути значною, важливо забезпечити їхню логічну організацію, використання зрозумілих назв та одиниць вимірювання, а також надання користувачеві візуальних підказок та засобів контролю введених значень.

Візуалізація результатів симуляції є невід'ємною частиною процесу аналізу та інтерпретації отриманих даних. Перетворення числових даних на наочні графічні представлення значно полегшує розуміння складних процесів, виявлення закономірностей та отримання цінних інсайтів. Консоль виведення повідомлень або журнал подій є важливим елементом інтерфейсу, який надає користувачеві інформацію про хід виконання програми, включаючи повідомлення про запуск та завершення симуляції, виникнення помилок або попереджень, а також іншу службову інформацію. Детальний та інформативний журнал подій може бути корисним для діагностики проблем та розуміння внутрішньої роботи програмного комплексу.

Таким чином, розробка якісного інтерфейсу користувача, представленого на рис. 5.2, та надання потужних засобів візуалізації

результатів симуляції є ключовими факторами, що визначають ефективність та зручність використання програмного комплексу для моделювання складних процесів у пористих середовищах з органічною складовою. Інтегрований підхід до цих аспектів, що базується на розумінні потреб користувачів та використанні сучасних підходів до дизайну UI, дозволяє створити програмне забезпечення, яке є потужним інструментом для наукових та інженерних досліджень.

Ефективність застосування розробленого в рамках дисертаційного дослідження модельно-алгоритмічного підходу до отримання прогнозних даних про процеси і стани пористих середовищ з органічною складовою значною мірою визначається якістю та функціональністю розробленого програмного забезпечення. Ключовими аспектами, що забезпечують зручність та продуктивність роботи користувача з програмним комплексом, є інтуїтивно зрозумілий інтерфейс користувача (UI), детально описаний у цьому підрозділі та проілюстрований на рис. 5.2, та наявність потужних засобів для візуалізації результатів симуляції.

5.3.1. Розробка десктопного застосунку

З метою забезпечення зручної та інтуїтивно зрозумілої взаємодії користувача з розробленим програмним комплексом для прогнозування процесів у пористих середовищах з органічною складовою, прийнято рішення про створення графічного інтерфейсу користувача (GUI) на базі кросплатформної бібліотеки PyQt5. Вибір PyQt5 обумовлений її потужними можливостями у створенні складних інтерактивних інтерфейсів, широким набором вбудованих віджетів, підтримкою сучасних принципів дизайну та високою продуктивністю.

Архітектура розробленого GUI ґрунтується на парадигмі головного вікна (QMainWindow), яке слугує центральним контейнером для розміщення основних функціональних елементів програмного комплексу. Головне вікно

включає в себе головне меню, панелі інструментів та центральну віджет-область, де розміщуються віджети для налаштування параметрів моделювання, керування даними та відображення результатів симуляції (рис.5.3). Для організації складних компонентів інтерфейсу використовуються менеджери макетів (layout managers), такі як QVBoxLayout та QHBoxLayout, що забезпечують гнучке та адаптивне розташування віджетів при зміні розмірів вікна.

Налаштування газоутворення:

Додаткові параметри для Сховищ ТПВ

☐ Використовувати параметри за замовчуванням

☒ Ввести власні параметри

ug:	0.1
uw:	0.9
MWS (мг/кг):	16
Температура ТПВ (°C):	35
Вологість ТПВ θ:	0.6

Візуалізувати дані (температура, кількість виділення газів, просідання)

Рис. 5.5. Задання параметрів для моделювання газоутворення

Одним з ключових компонентів інтерфейсу є область налаштування параметрів моделювання. Для забезпечення зручності введення та керування великою кількістю різноманітних параметрів моделі, ця область реалізована з використанням комбінації різних віджетів, включаючи поля введення тексту (QLineEdit), числові спін-бокси (QDoubleSpinBox), випадаючі списки (QComboBox), групи радіокнопок (QRadioButton, QButtonGroup) та контейнери для групування параметрів (QGroupBox, QFrame). Застосування формного макету (QFormLayout) дозволяє організувати параметри у вигляді структурованих пар «назва – значення», що підвищує їхню читабельність та полегшує процес налаштування моделі.

Для забезпечення модульності та зручності навігації між різними аспектами налаштування моделі, використовується віджет-контейнер

QStackedWidget. QStackedWidget дозволяє розміщувати кілька підвіджетів (наприклад, для налаштування геометричних параметрів, властивостей матеріалів, початкових та граничних умов) в одній і тій самій області інтерфейсу, перемикання між якими здійснюється за допомогою навігаційних елементів, таких як випадаючі списки або панель кнопок. Такий підхід дозволяє уникнути перевантаження інтерфейсу великою кількістю одночасно відображуваних елементів керування та забезпечує послідовний та логічний процес налаштування моделі.

Важливу роль у забезпеченні зручності використання відіграє застосування локалізації інтерфейсу. З метою забезпечення широкого кола користувачів, програмний комплекс підтримує україномовний інтерфейс. Для коректного відображення числових значень відповідно до прийнятих в Україні стандартів, здійснюється встановлення відповідної локалі (uk_UA.UTF-8) за допомогою модуля locale. У випадку виникнення помилок при встановленні локалі, передбачено механізм повернення до стандартної локалі ('C'), що забезпечує стабільну роботу програми незалежно від системних налаштувань користувача.

З метою надання користувачеві візуального зворотного зв'язку та інформування про стан програми, в інтерфейсі використовуються елементи QLabel для відображення текстових повідомлень, індикаторів прогресу (наприклад, QProgressBar) для відображення ходу виконання тривалих операцій, а також механізми обробки подій для динамічної зміни стану елементів інтерфейсу у відповідь на дії користувача.

5.3.2. Реалізація засобів візуалізації динаміки модельованих параметрів у часі на основі бібліотеки Matplotlib

Візуалізація результатів симуляції є ключовим етапом аналізу та інтерпретації отриманих прогнозних даних, особливо при дослідженні складних нестационарних процесів, що відбуваються в пористих середовищах

з органічною складовою. Для забезпечення наочного представлення динаміки зміни основних модельованих параметрів у часі, таких як температура, вологість та об'єми згенерованих газів, у розробленому програмному комплексі реалізовано функціональність побудови графіків часових рядів на основі потужної та гнучкої бібліотеки Matplotlib (безкоштовна бібліотека, яка має відкритий вихідний код).

Використання Matplotlib як основного інструменту для візуалізації часових залежностей обумовлено її широкими можливостями у створенні статичних двовимірних графіків публікаційної якості, гнучкістю у налаштуванні всіх елементів візуалізації та глибокою інтеграцією з науково-інженерною екосистемою Python, зокрема з бібліотеками NumPy для ефективної обробки числових масивів, що є результатом симуляційних розрахунків.

Реалізована функціональність дозволяє користувачеві будувати окремі графіки для кожного з ключових модельованих параметрів (температури, вологості, об'ємів газів) в обраних точках або областях модельної області протягом заданого часового інтервалу симуляції.

Процес побудови графіків ініціюється користувачем через відповідні елементи керування в інтерфейсі програмного комплексу. Користувач має можливість гнучкого вибору:

- обирається змінна, динаміку якої необхідно візуалізувати. Перелік доступних параметрів включає температуру (відображення температурних коливань у досліджуваному середовищі), вологість та об'єми згенерованих газів.

- задається діапазон часу симуляції, для якого необхідно побудувати графік. Це дозволяє користувачеві фокусуватися на певних часових проміжках, наприклад, на початковому етапі процесу, стаціонарному режимі або періодах пікової активності.

Після визначення користувачем необхідних параметрів, програмний комплекс здійснює автоматизовану вибірку відповідних часових рядів даних з

масивів результатів симуляції, що зберігаються у внутрішній структурі даних. Вибрані часові ряди передаються до відповідних функцій бібліотеки Matplotlib для побудови графічного представлення. Для забезпечення належної інформативності візуалізації, автоматично генеруються підписи осей (з урахуванням назви параметра та його одиниць вимірювання, отриманих з метаданих результатів симуляції) та заголовок графіка (що чітко ідентифікує відображуваний параметр та обрану просторову локацію).

З метою полегшення детального аналізу відображених часових залежностей, в програмному комплексі реалізовано базові інтерактивні можливості, що надаються бібліотекою Matplotlib, такі як:

- масштабування, яке дозволяє користувачеві збільшувати окремі фрагменти графіка для більш детального дослідження поведінки параметрів на малих часових інтервалах або для точнішого визначення значень в окремих точках;
- панорамування, яке дає можливість переміщувати видиму область графіка вздовж часової осі або осі значень параметрів для перегляду різних часових інтервалів або діапазонів значень.

Таким чином, реалізована функціональність побудови графіків зміни температури, вологості та об'ємів газів у часі є важливим та ефективним інструментом у складі розробленого програмного комплексу, що забезпечує наочне представлення прогнозних даних, сприяє їхньому глибокому аналізу та інтерпретації в контексті досліджуваних складних процесів у пористих середовищах з органічною складовою.

5.4. Алгоритми моделювання динаміки біодеградації та газогенерації

Успішне моделювання складних біохімічних та фізико-хімічних процесів, таких як біодеградація органічних матеріалів та супутня тепло-газогенерація, вимагає не тільки глибокого розуміння механізмів, що лежать в

їх основі, але й ефективних обчислювальних підходів для реалізації відповідних математичних моделей. Цей параграф присвячений розгляду алгоритмічних аспектів моделювання динаміки біодеградації та газогенерації з фокусом на їх програмну реалізацію мовою Python. Враховуючи, що математична постановка задач у вигляді математичних та дискретних моделей розглядається в інших розділах, тут ми зосередимося на тому, як ці математичні моделі перетворюються на працездатні обчислювальні структури та послідовності операцій в середовищі Python.

Основна мета програмної реалізації полягає у створенні обчислювального інструменту, який дозволить симулювати поведінку системи біодеградації у часі та просторі. Це досягається шляхом дискретизації неперервної моделі та ітеративного обчислення стану системи на кожному кроці симуляції. В контексті Python, розробка такого інструменту зазвичай передбачає використання потужних бібліотек для наукових обчислень, таких як NumPy (безкоштовна бібліотека, яка має відкритий вихідний код) для ефективної роботи з числовими масивами та SciPy (безкоштовна бібліотека, яка має відкритий вихідний код), що надає функції для розв'язання систем рівнянь, інтегрування, оптимізації тощо. Ці бібліотеки дозволяють виконувати складні обчислення над великими обсягами даних (що представляють стан системи в дискретних точках простору) швидко та ефективно завдяки використанню векторизованих операцій, які компілюються на нижчому рівні.

Загальний алгоритм симуляції динаміки біодеградації та телогазогенерації може бути представлений як головний часовий цикл, що повторюється впродовж заданого проміжку часу симуляції. На кожній ітерації цього циклу виконуються обчислення, що відображають зміни в системі, спричинені біологічними реакціями, транспортними процесами та граничними умовами. Для кращої організації коду та логічного розподілу обчислень, програмна реалізація моделі структурується за функціональними модулями. Кожен модуль відповідає за моделювання певного аспекту процесу та взаємодіє з іншими модулями через спільні дані про стан системи.

Типова структура програмної реалізації на Python, організована за модульним принципом, включає такі ключові компоненти та послідовність операцій у головному часовому циклі:

- ініціалізація системи. На початку симуляції необхідно визначити початковий стан системи. Це включає встановлення початкових концентрацій всіх компонентів (наприклад, органічних решток) у всіх точках або комірках розрахункової області, початкової температури, тиску, початкової вологості, початкового об'єму пористого середовища та інших релевантних параметрів. У Python це реалізується шляхом створення числових масивів (NumPy arrays), розмірність яких відповідає просторовій дискретизації моделі, та заповнення їх відповідними початковими значеннями. Наприклад, для 2D моделі розподілу температури у шарі ґрунту використовується двовимірний масив `numpy.ndarray`, де кожен елемент `Temperature[i, j]` зберігає значення температури у вузлі сітки з індексами *i* та *j* по змінним *x* та *t*;

- визначення параметрів моделі. Всі константи та параметри моделі, що описують властивості матеріалів (наприклад, пористість ґрунту), кінетичні характеристики мікроорганізмів, параметри перенесення (коефіцієнти дифузії, теплопровідності) та зовнішні умови (наприклад, температура навколишнього повітря), повинні бути задані перед початком симуляції. Зручно зберігати ці параметри у словнику Python або використовувати спеціалізований об'єкт класу параметрів, щоб забезпечити легкий доступ до них з усіх частин програми, де вони використовуються. Є також можливість вказати власні значення параметрів для моделювання. Наприклад:

```
self.land_type_properties = {
    "Піщані": {
        "name": "Sandy Soil", "rho_s": 1600, "c_s": 900,
        "sigma_a": 0.45, "k_dry": 0.25, "k_sat": 2.5 },
    "Супіщані": {
        "name": "Loamy Sand Soil", "rho_s": 1500, "c_s": 1000,
        "sigma_a": 0.4, "k_dry": 0.3, "k_sat": 1.8 },
```

```
"Суглинкові": {
    "name": "Loam Soil", "rho_s": 1400, "c_s": 1100,
    "sigma_a": 0.35, "k_dry": 0.4, "k_sat": 1.5 }
```

– головний часовий цикл симуляції. Це основний цикл, який ітерується від початкового до кінцевого часу симуляції з певним кроком за часом (Δt). На кожній ітерації послідовно викликаються функції або методи відповідних модулів для обчислення змін у системі;

– модуль визначення температури. Даний модуль відповідає за моделювання теплових процесів у системі. Він враховує генерацію тепла внаслідок біодеградації (як джерело тепла), теплопровідність у середовищі, конвективний теплообмін з навколишнім середовищем. Вхідними даними є поточний розподіл температури, швидкість теплогенерації (отримана з модуля біодеградації), а також параметри теплоперенесення та граничні умови. У Python цей модуль обчислює швидкість зміни температури у кожній точці простору, враховуючи вищевказані фактори. Результат – оновлений масив температури на наступному часовому кроці;

– модуль вологості. Модуль моделює динаміку вологості у пористому середовищі. Вхідними даними є поточний розподіл вологості. В Python цей модуль обчислює швидкість зміни вологості та оновлює відповідний масив стану;

– модуль газогенерації. Модуль відповідає за обчислення утворення парникових газів. Він приймає від модуля біодеградації дані про швидкість утворення газів у розчиненій фазі, тобто в розчиненому стані у воді, що заповнює поровий простір. У Python цей модуль працює з масивами концентрацій газів, а результатом є оновлені масиви концентрацій та тисків газів;

– модуль визначення зміни об'єму пористого середовища, що призводить до його просідань. Модуль моделює механічну поведінку пористого матеріалу під впливом процесів біодеградації. Розкладання органічної речовини може призводити до зменшення об'єму твердої фази,

зміни пористості та, як наслідок, до просідання матеріалу під власною вагою або зовнішнім навантаженням. Цей модуль приймає дані про ступінь деградації (наприклад, загальну кількість розкладеного субстрату або зміну біомаси), а також параметри, що описують механічні властивості матеріалу та залежність зміни об'єму від деградації та, можливо, ефективного тиску (який залежить від тиску рідини та газу). У Python цей модуль обчислює локальну зміну об'єму або пористості у кожній точці та інтегрує ці зміни для визначення загального просідання поверхні;

- обробка граничних умов. На кожній ітерації, після обчислення проміжних або оновлених значень змінних, необхідно застосувати граничні умови, коригуючи значення змінних на межах розрахункової області відповідно до заданих. Це критично важливий крок, який забезпечує коректну взаємодію модельованої області з навколишнім середовищем. Програмна реалізація цього залежить від типу граничних умов;

- збереження результатів. Впродовж симуляції (зазвичай з певним інтервалом часу) поточний стан системи (наприклад, загальна кількість утвореного газу, середньодобова температура) зберігаються для подальшого аналізу та візуалізації.

Використання векторизованих операцій NumPy замість явних циклів Python є критично важливим для досягнення прийнятної швидкості виконання, особливо для просторово-розподілених моделей з великою кількістю вузлів сітки. Модульність коду, використання функцій або класів для представлення компонентів моделі або процесів, а також детальне документування коду сприяють його читабельності, модифікації та підтримці. Такий модульний підхід дозволяє незалежно розробляти та тестувати окремі частини моделі, спрощує процес додавання нових факторів або вдосконалення існуючих механізмів. Таким чином, програмна реалізація на Python, побудована на принципах модульності та ефективного використання бібліотек для наукових обчислень, перетворює математичну модель на динамічну симуляцію, що є потужним інструментом для дослідження, аналізу та

прогнозування складних процесів біодеградації та тепло-газогенерації, а також супутніх явищ, таких як просідання середовища.

5.4.1. Реалізація чисельного методу на базі методу скінченних різниць

У програмному середовищі, розробленому для моделювання процесів теплоперенесення й газогенерації у пористих середовищах, числове ядро базується на методі скінченних різниць. Реалізація цього методу здійснюється на мові Python із використанням бібліотек NumPy, Matplotlib та PyQt5 для взаємодії з користувачем, візуалізації результатів і проведення розрахунків (рис.5.4).

Алгоритм моделювання передбачає дискретизацію просторової області (наприклад, товщі ґрунту завтовшки 1 м) на рівновіддалені вузли. У кожному вузлі зберігається значення температури. Оновлення стану системи в часі відбувається через розв'язання системи лінійних рівнянь, як дискретизації відповідної нелінійної крайової задачі.



Рис. 5.6. Графічне представлення даних моделювання сховищ твердих побутових відходів

Параметри симуляції визначаються у вигляді словника `sim_params`, а фізичні властивості середовища – у вигляді `ground_properties`. Користувач може або обрати один з типових типів ґрунтів (наприклад, глинисті, супіщані, торф'яні), або задати власні параметри через графічний інтерфейс. Основні параметри включають: `L` – глибина ґрунтового шару (м); `Nx` – кількість вузлів просторової сітки; `dt` – крок по часу (с); `T0`, `Ta` – початкова температура та температура атмосфери; `theta` – вологість ґрунту; `lambda_sigma`, `delta` – параметри граничних умов.

Із врахуванням вологи й повітря розраховується об'ємна теплоємність середовища `c_v`, що залежить від: густини твердої фази ґрунту (`rho_s`) та її теплоємності (`c_s`); параметрів повітря (`rho_air`, `c_air`); параметрів вологості (`rho_water`, `c_water`). Приклад розрахунку:

$$c_v = (\rho_s * c_s * (1 - \theta - \sigma_a) + \rho_{air} * c_{air} * \sigma_a + \rho_{water} * c_{water} * \theta)$$

Основний чисельний алгоритм реалізовано у функції `simulate_heat_transfer`. В ній застосовується скінченно-різницева апроксимація для моделювання поширення температури в середовищі з урахуванням теплофізичних властивостей та граничних умов.

Ключовий етап – побудова та розв'язання тридіагональної матриці `M`, що відповідає дискретизованій формі рівняння теплоперенесення. Наприклад:

```
a_coeff = current_k * dt / (c_v * dx**2)
A = np.full(Nx - 1, -a_coeff)
B = np.full(Nx, 1 + 2 * a_coeff)
C = np.full(Nx - 1, -a_coeff)
D = T.copy()
```

Залежно від типу середовища користувач може обирати параметри через інтерактивний графічний інтерфейс, що дозволяє змінювати: густину, теплоємність, теплопровідність та об'ємну вологість ґрунту.

Приклад використання для заданих властивостей супіщаного середовища:

```
ground_properties = {
    "rho_s": 1500,
    "c_s": 1000,
    "k_dry": 0.3,
    "k_sat": 1.8,
    "theta": 0.25,
    "sigma_a": 0.4
}
```

Температурні профілі зберігаються на вибраних глибинах (наприклад, 0.2 м, 0.4 м, ...) щодня або кожні декілька діб. Результати виводяться у графічному вигляді за допомогою matplotlib. Приклад:

```
plt.plot(days, temp_at_depths[0.2], label="0.2 м")
plt.plot(days, temp_at_depths[0.6], label="0.6 м")
plt.title("Динаміка температури в ґрунті")
plt.xlabel("Дні")
plt.ylabel("Температура (°C)")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

Використання NumPy та модульної організації коду дозволяє забезпечити: масштабованість до великих сіток; адаптацію до різних типів ґрунтів та умов; розширення з урахуванням біогеохімічних процесів; інтеграцію з іншими моделями (вологості, газоутворення, просідання).

Таким чином, програмна реалізація методу скінченних різниць у Python перетворює математичну модель на повноцінний динамічний симулятор для екологічного та техногенного аналізу пористих середовищ.

5.4.2. Урахування граничних умов, тепломасообміну та впливу тонких шарів

У нашому програмному рішенні граничні умови реалізуються в межах тридіагональної матриці коефіцієнтів, що відповідає схемі скінченних різниць. На верхній межі (поверхня ґрунту) застосовується балансова гранична умова, яка враховує температуру повітря, товщину примежового шару та його теплопровідність. Нижня межа моделі задається умовою Діріхле (фіксована температура).

Балансова гранична умова реалізована через зміну коефіцієнтів у першому рядку матриці. Наприклад, при заданому `lambda_sigma` та товщині шару `delta`, відповідний запис у Python виглядає так:

```
B[0] = current_k / dx + lambda_sigma
```

```
C[0] = -current_k / dx
```

Користувач може змінювати ці параметри через графічний інтерфейс. Це дозволяє гнучко адаптувати модель до різних типів поверхневого покриття (трав'яний шар, опале листя, сніг тощо). Приклад візуалізації впливу балансової граничної умови на розподіл температури показано на рис. 5.5.

На кожному кроці симуляції оновлюються матриці коефіцієнтів `A`, `B`, `C`, `D`. Для верхнього вузла (поверхня) застосовується балансова гранична умова, у яку інкапсулюється ефект тонкого шару. Для нижнього вузла задається фіксована температур. Розв'язується система рівнянь:

```
T = np.linalg.solve(M, D)
```

Температури у вузлах оновлюються.

При моделюванні полігонів ТПВ, лісових ґрунтів чи аграрних ландшафтів, граничні умови можуть бути автоматично налаштовані відповідно до вибраного типу середовища. Наприклад:

```
sim_params = {
    "T0": 7.0,
    "Ta": 20.0,
```

```
"theta": 0.2,
"lambda_sigma": 2.0
}
```

де λ_{σ} залежить від типу тонкого шару:

- для мульчі: 1,5 – 2,5 Вт/(м²·К);
- для трави: 2,0 – 3,0 Вт/(м²·К);
- для снігу: 0,5 – 1,2 Вт/(м²·К).

Приклад візуалізації впливу:

```
plt.plot(days, T_with_cover, label="З покриттям")
plt.plot(days, T_no_cover, label="Без покриття")
plt.xlabel("Час (дні)"); plt.ylabel("Температура (°C)")
plt.title("Вплив тонкого шару на тепловий режим")
plt.legend(); plt.grid(True); plt.show()
```

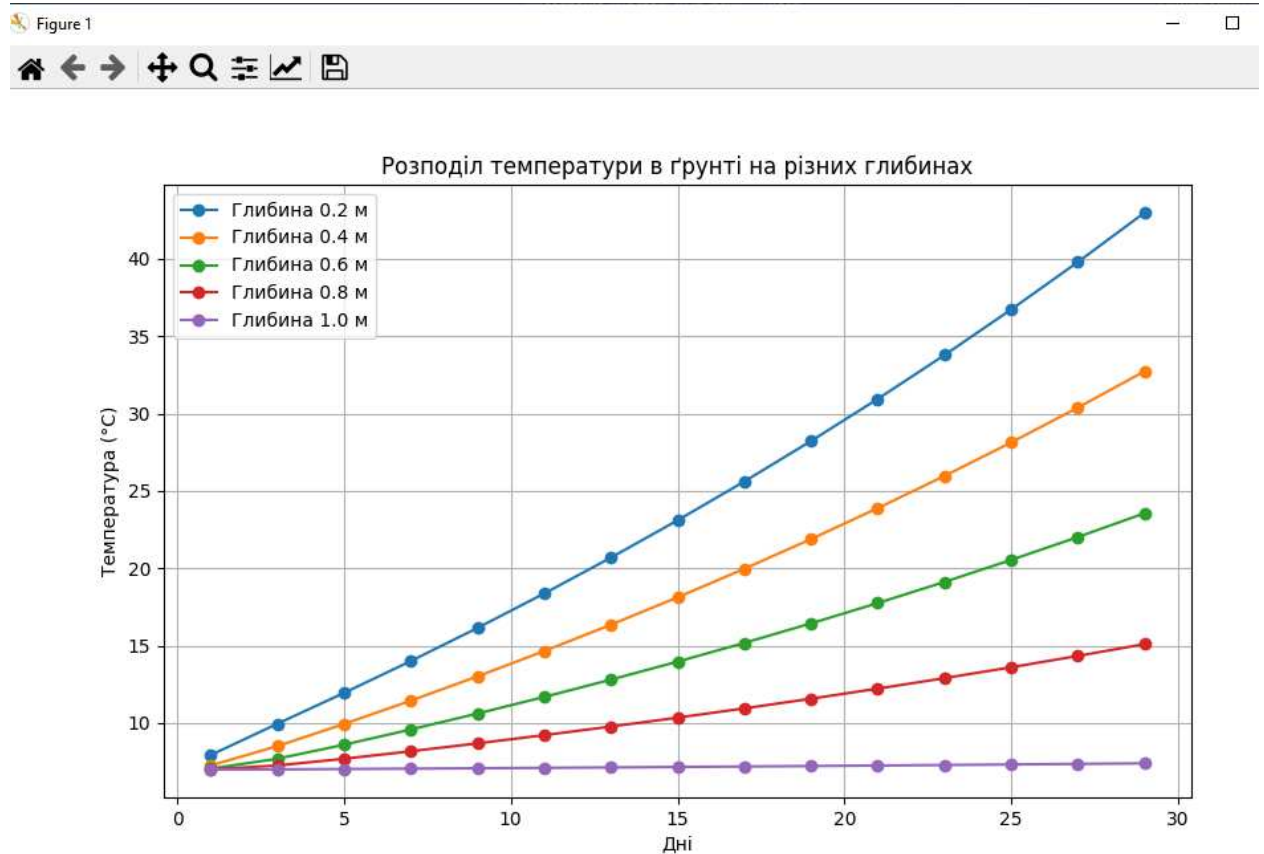


Рис. 5.7. Візуалізація розподілу температури при урахуванні балансової граничної умови

Перевагами запропонованої програмної реалізації є ефективне використання обчислювальних ресурсів завдяки відсутності потреби в додаткових вузлах сітки, висока числова стійкість за рахунок уникнення вузьких комірок із великим аспектним співвідношенням, модульна структура, що забезпечує легку інтеграцію з моделями вологоперенесення та газообміну, а також універсальність, яка дозволяє адаптувати алгоритми для моделювання дифузії CO₂, водного балансу та інших пов'язаних процесів.

Висновки до розділу 5

Основними результатами розділу 5 є розроблення програмного комплексу для моделювання та прогнозування процесів у пористих середовищах з органічною складовою, який забезпечує інтеграцію фізико-математичних моделей, цифрових сервісів моніторингу та зручних засобів аналізу результатів. Зокрема:

1. Розроблено та реалізовано програмний комплекс для інтегрованого моделювання та прогнозування станів пористих середовищ з органічною складовою, який вперше поєднує обчислювальні моделі біодеградації, газогенерації та тепломасообміну з урахуванням тонких поверхневих шарів і граничних умов у єдиному середовищі.

2. Обґрунтовано архітектуру програмного комплексу, що включає:

- модуль інтеграції з цифровими сервісами та джерелами екологічного і техногенного моніторингу;
- обчислювальне ядро на основі методу скінченних різниць для симуляції складних фізико-біохімічних процесів;
- модуль візуалізації результатів, що забезпечує зручне представлення даних у вигляді графіків та аналітичних кривих.

3. Реалізовано користувацький інтерфейс у вигляді десктопного застосунку, який надає користувачеві засоби для введення початкових параметрів, запуску чисельного моделювання та перегляду результатів у

динаміці. Забезпечено можливість побудови графіків змін температури, вологості та об'ємів згенерованих газів у часі.

4. Аналіз можливостей інтеграції з зовнішніми джерелами даних у рамках розробки модуля екологічного та техногенного моніторингу показав, що наявність достатньої кількості відкритих та надійних джерел даних в Україні наразі є проблемним питанням. Це вимагає від користувачів додаткових зусиль для збору та валідації вхідних даних, що може впливати на повноту та точність прогностичних моделей.

5. Розроблений програмний продукт має завершену структуру та функціональність, що забезпечує проведення чисельних експериментів, аналіз чутливості моделей до вхідних параметрів, а також формування прогностичних сценаріїв для різних типів пористих середовищ з органічною складовою.

6. Програмний комплекс є ефективним інструментом для наукових досліджень та підтримки прийняття рішень у сферах екологічного моделювання, поводження з відходами, оцінки ризиків техногенного впливу та сталого природокористування, незважаючи на існуючі виклики щодо доступності первинних даних.

ВИСНОВКИ

Дисертаційна робота є завершеним науковим дослідженням, у якому розв'язано важливу науково-технічну задачу розвинення інформаційних технологій прогнозування процесів та станів пористих середовищ з органічною складовою шляхом вдосконалення відповідних обчислювальних моделей та методів їх програмної реалізації, які враховують біодеградацію органічної компоненти, виділення тепла та парникових газів в умовах нелінійних взаємовпливів факторів, наявності тонких примежових шарів та зміни області досліджень в часі. У результаті виконання роботи:

1. Проаналізовано сучасні інформаційні системи, відповідні математичні та комп'ютерні моделі прогнозування та оцінок стану пористих середовищ з органічною складовою, в тому числі – які дають інструменти прогнозів викидів парникових газів. При аналізі основну увагу зосереджено на принципах побудови та функціонування обчислювальних компонентів комп'ютерних і математичних моделей, а також на технологічних рішеннях, які формують теоретичну основу відповідних інформаційних систем. Як результат аналізу визначено обмеження існуючих підходів до комп'ютерного моделювання та архітектур інформаційних систем, цим самим окресливши можливі напрямки розвитку наукових досліджень та вдосконалення результатів прогнозів засобами інформаційних технологій.

2. Як один із шляхів отримання прогнозних даних запропоновано модельно-алгоритмічний підхід до модифікації рівняння вологоперенесення в умовах змінної пористості внаслідок біодеградаційних процесів. Дане рівняння лежить в основі вдосконаленої прогнозної комп'ютерної моделі вологоперенесення в середовищах з органічною складовою, тим самим забезпечуючи урахування нелінійних взаємовпливів факторів для безпосереднього застосування в прогнозних інформаційних системах.

3. Для розробки програмного забезпечення з метою отримання прогнозних даних про процеси та стани пористих середовищ з органічною

складовою, зокрема – сховищ твердих побутових відходів, запропоновано підхід, базований на класичній теорії ненасиченої консолідації пористих середовищ. В розроблених комп'ютерних моделях враховано біодеградаційні процеси, які супроводжуються виділенням теплової енергії та парникових газів. Спроектовано метод комп'ютерного моделювання для прогнозу зміни положення верхньої межі масиву пористого середовища, яке містить органічну складову і перебуває в процесі ущільнення, використовуючи кінематичну граничну умову. Це дає теоретичні основи отримання відповідних прогнозних даних, що можуть використовуватись у відповідних інформаційних системах, базуватись на добре розробленій теорії задач Стефанівського типу, адаптованій для чисельної реалізації в рамках розроблюваного програмного забезпечення. Розроблені обчислювальні методи забезпечують урахування зміни пористості внаслідок біодеградаційних процесів органічної компоненти, урахування внутрішніх джерел емісії парникових газів та теплогенерації, а також шляхом модифікації відповідної кінематичної граничної умови на верхній рухомій межі пористого середовища.

4. Шляхом комп'ютерного моделювання досліджено практично важливі випадки консолідації ненасиченого пористого середовища сховища твердих побутових відходів. Запропоновані підходи та відповідні програмні реалізації для отримання прогнозних даних вперше використовують, в свою чергу, алгоритми чисельного розв'язання, як крайової задачі математичної фізики, математичної моделі ненасиченої консолідації сховища твердих побутових відходів. При цьому в обчислювальних моделях вперше враховано біодеградацію органічної складової, що супроводжується виділенням газу та тепла, а також враховано зворотний вплив вологості та температури на інтенсивність біодеградаційних процесів. При цьому розміри області консолідації змінюються за рахунок як процесів ущільнення, так і процесу зміни об'єму твердої фази пористого середовища.

Доцільність застосування такої методології отримання прогнозних даних підтверджена проведенням чисельним експериментом стосовно ненасиченої консолідації сховища твердих побутових відходів, який показав наступне. На 500-ту добу моделювання температура поблизу нижньої непроникної межі сховища досягає $67,99^{\circ}\text{C}$, загальні просідання становлять 1,2623 м. При нехтуванні впливом температури й вологості на біодеградацію температура знижується до $38,96^{\circ}\text{C}$, а просідання – до 0,9420 м, що на 25,4% менше, ніж у попередньому випадку. У випадку повного виключення біодеградації, процес консолідації практично завершується на 200-ту добу, а просідання становлять 0,8008 м. Таким чином, вплив біодеградації становить 36,6% від загальних просідань.

Також досліджено зміни в прогнозних даних вологості шляхом розгляду модельної задачі вологоперенесення в пористому середовищі з органічною складовою, припускаючи, що на зміну положення верхньої рухомої межі в даному випадку впливають лише біодеградаційні процеси. Числові експерименти показали наступні тенденції. Зокрема, у випадку відсутності коливань температури та вологості на верхній межі просідання на 360-ту добу становлять 0,109 м, а при врахуванні впливу температури та вологості зростають до 0,383 м. Тобто, збільшення просідань складають 251,38%.

5. Удосконалено метод комп'ютерного моделювання та відповідні програмні компоненти для врахування наявності тонких примежових шарів. Розроблено та інтегровано в прогнозну модель балансову граничну умову у якій передбачений випадок зміни характеристик матеріалу шару в умовах дії змінних полів вологості та температури. За допомогою розроблених обчислювальних інструментів досліджено вплив наявності тонких примежових шарів на динаміку зміни температурного та вологісного режимів пористого середовища і, відповідно, – на динаміку виділення парникових газів. На основі отриманих чисельних експериментів встановлено, що наявність тонкого примежового шару опалого листя значно впливає на температурний режим ґрунту. Для всіх глибин температурні криві з наявністю

листя демонструють нижчий темп нагрівання ґрунту в порівнянні з ділянками без листя. Найбільш суттєва різниця спостерігається у верхніх шарах (0,2–0,6 м), де опале листя діє як теплоізолюючий шар, знижуючи швидкість передачі тепла від атмосфери до ґрунту. У більш глибоких шарах (0,8–1,0 м) ефект ізоляції поступово зменшується, однак температура в цих горизонтах все ще є дещо нижчою у випадках із наявністю листя. Це підтверджує гіпотезу про те, що опале листя відіграє ключову роль у регуляції температурного режиму ґрунту в лісових екосистемах

Встановлено, що вологіше листя спричиняє підвищення температури ґрунту, оскільки його теплоізоляційні властивості знижуються через збільшення теплопровідності. Найменший рівень прогрівання спостерігається під сухим дубовим листям, тоді як під вологим шаром температура наближається до атмосферної. Це підкреслює важливість врахування вологості органічного шару при прогнозуванні температурного режиму лісового ґрунту.

6. Розроблено та реалізовано програмний комплекс для інтегрованого моделювання та прогнозування станів пористих середовищ з органічною складовою. Обґрунтовано та впроваджено його архітектуру, що включає: модуль інтеграції даних з цифрових сервісів та джерел для екологічного і техногенного моніторингу; обчислювальне ядро, в якому на базі методу скінченних різниць програмно реалізовано моделі динаміки біодеградації та газогенерації, з урахуванням граничних умов, процесів тепломасообміну та впливу тонких шарів; модуль візуалізації результатів симуляції. Створено користувацький інтерфейс у вигляді десктопного застосунку для налаштування вхідних параметрів моделювання, запуску симуляцій та аналізу отриманих даних, включаючи побудову графіків зміни температури, вологості та об'ємів газів у часі. Розроблений програмний комплекс є завершеним програмним продуктом, що надає інструментарій для проведення наукових досліджень, отримання обґрунтованих прогнозних даних та підтримки прийняття рішень в даній предметній області.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Гончарук В. Є., Лянце Г. Т., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Математичні моделі та експериментальні дані про поширення радіонуклідів у ґрунтах: монографія. Львів: Растр-7. 2014. 244 с.
2. Yoder D.C., Jagadamma S., Singh S., Nouri A., Xu S., Saha D., Schaeffer S.M., Adotey N., Walker F.R., Lee J., Budipradigdo M. Soil health: meaning, measurement, and value through a critical zone lens. *J. Soil Water Conserv.* 2022. 77(1). С. 88–99. <https://doi.org/10.2489/jswc.2022.00042>
3. Мошинський В.С. Методи управління продуктивністю та екологічною стійкістю осушуваних земель: монографія. Рівне: НУБГП. 2005. 250 с.
4. Kashtan V., Hnatushenko V., Zhir S. Information technology analysis of satellite data for land irrigation monitoring: Invited paper. In: *2021 IEEE International Conference on Information and Telecommunication Technologies and Radio Electronics (UkrMiCo)*. 2021. P. 1–4. <https://doi.org/10.1109/UkrMiCo52950.2021.9716592>
5. Wójcik W., Osypenko V., Osypenko V., Lytvynenko V., Askarova N., Zhasandykyzy M. Hydroecological investigations of water objects located on urban areas. *Environmental Engineering V*. In: *Proceedings of the 5th National Congress of Environmental Engineering*. 2017. P. 155–160.
6. Yatoo A.M., Hamid B., Sheikh T.A., Ali S., Bhat S.A., Ramola S., Ali M.N., Baba Z.A., Kumar S. Global perspective of municipal solid waste and landfill leachate: generation, composition, eco-toxicity, and sustainable management strategies. *Environmental Science and Pollution Research*. 2024. 31. P. 23363–23392. <https://doi.org/10.1007/s11356-024-32669-4>
7. Kumar G., Reddy K.R., Janga J.K. Accelerated stabilization of municipal solid waste in bioreactor landfills. In: *Geotechnical Engineering Challenges to Meet Current and Emerging Needs of Society*. 2024. P. 3060–3065. <https://doi.org/10.1201/9781003431749-600>

8. Ren Y., Zhang Z., Huang M. A review on settlement models of municipal solid waste landfills. *Waste Management*. 2022. 149. P. 79–95. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2022.06.019>
9. Mousavi M.S., Feng Y., Eun J., Nam B.H. Effect of variation of water retention characteristics due to leachate circulation in municipal solid waste on landfill stability. *Geomechanics and Engineering*. 2023. 33(2). P. 141–154. <https://doi.org/10.12989/gae.2023.33.2.141>
10. Mousavi M.S., Eun J. A Predictive Settlement Modeling Framework Employing Thermal-Hydraulic-Mechanical-Biochemical Processes in Municipal Solid Waste Landfills. *International Journal of Geomechanics*. 2023. 23(6). 04023075. <https://doi.org/10.1061/IJGNAI.GMENG-8115>
11. Yaashikaa R., Senthil Kumar P., Cam Nhung T., Hemavathy R.V., Jyotsna Jawahar M., Neshaanthini J.P., Rangasamy G. A review on landfill system for municipal solid wastes: Insight into leachate, gas emissions, environmental and economic analysis. *Chemosphere*. 2022. 309. 136627.
12. Lu S.-F., Feng S.-J. Comprehensive overview of numerical modeling of coupled landfill processes. *Waste Management*. 2020. 118. P. 161–179.
13. Kumar G., Reddy K.R. Comprehensive coupled thermo-hydro-bio-mechanical model for holistic performance assessment of municipal solid waste landfills. *Computers and Geotechnics*. 2021. 132. 103920. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2020.103920>
14. Bohaienko V., Diele F., Difonzo F.V., Marangi C., Martiradonna A., Provenzale A. Vertical modeling of carbon sequestration in coastal wetlands using fractional-order derivatives and moisture dynamics. *Mathematics and Computers in Simulation*. 2025. 233: 369–388. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2025.02.005>
15. Hnatyshyn M. Economics of soil carbon and its specifics in Ukraine. *Scientific Bulletin of Mukachevo State University Series “Economics”*. 2022. 9(4). P. 9–15. [https://doi.org/10.52566/msu-econ.9\(4\).2022.9-15](https://doi.org/10.52566/msu-econ.9(4).2022.9-15)

16. Бунь Р.А., Густі М.І., Дачук В.С., Кужій Л.І., Олексів Б.Я., Стрямець Г.В., Стрямець С.П., Токар О.Є., Цибрівський Я.Б. Інформаційні технології інвентаризації парникових газів та прогнозування вуглецевого балансу України. За ред. Р.А. Буня. *Львів: Українська академія друкарства*. 2004. 376 с.
17. Polevoy A., Mykytiuk A., Bozhko L., Barsukova E. The climate change impact on greenhouse gas emissions (CO₂ and N₂O) from soils at agroecosystems. *Visnyk of V. N. Karazin Kharkiv National University, Series "Geology. Geography. Ecology"*. 2023. 58. P. 202–216. <https://doi.org/10.26565/2410-7360-2023-58-16>
18. Тимощук О.А., Тимощук О.Б., Матвійчук Б.В. Викиди парникових газів від сільськогосподарської діяльності та їх динаміка протягом 1990-2020 років. *Український журнал природничих наук*. 2022. № 1.
19. Польовий А., Божко Л. Modelling dynamics of emission of greenhouse gases (CO₂, N₂O) from soils in agroecosystems. *Visnyk of V. N. Karazin Kharkiv National University, Series "Geology. Geography. Ecology"*. 2021. 54. P. 329–344. <https://doi.org/10.26565/2410-7360-2021-54-25>
20. Faichuk O.M. The relationship between GHG emissions and agricultural land productivity in the EU member states and Ukraine. *Bioeconomics and agrarian business*. 2021. 12(2). P. 48–57. <http://dx.doi.org/10.31548/bioeconomy2021.02.005>
21. Tang Y., Qiao Y., Ma Y., Huang W., Komal K., Miao S. Quantifying Greenhouse Gas Emissions in Agricultural Systems: A Comparative Analysis of Process Models. *Ecological Modelling*. 2024. 490. 110646. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2024.110646>
22. Abdalla M., Richards M., Pogson M., Smith J.U., Smith P. Estimating the effect of nitrogen fertilizer on the greenhouse gas balance of soils in Wales under current and future climate. *Regional Environmental Change*. 2016. 16. P. 2357–2368. <https://doi.org/10.1007/s10113-016-0958-7>

23. Keating B.A. APSIM's origins and the forces shaping its first 30 years of evolution: A review and reflections. *Agronomy for Sustainable Development*. 2024. 44. 24. <https://doi.org/10.1007/s13593-024-00959-3>
24. Li J., Wang L., Luo Z., Wang E., Wang G., Zhou H., Li H., Xu S. Reducing N₂O emissions while maintaining yield in a wheat-maize rotation system modelled by APSIM. *Agricultural Systems*. 2021. 194. 103277. <https://doi.org/10.1016/j.agsy.2021.103277>
25. Dong L., Mu S., Li G. Optimization of an N₂O Emission Flux Model Based on a Variable-Step Drosophila Algorithm. *Agronomy*. 2024. 14(10). 2279. <https://doi.org/10.3390/agronomy14102279>
26. Zhou Z., Liao K., Zhu Q., Lai X., Yang J., Huang J. Determining the hot spots and hot moments of soil N₂O emissions and mineral N leaching in a mixed landscape under subtropical monsoon climatic conditions. *Geoderma*. 2022. 420. 115896. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2022.115896>
27. Jarecki M., Kariyapperuma K., Deen B., Graham J., Bazrgar A.B., Vijayakumar S., Thimmanagari M., Gordon A., Voroney P., Thevathasan N. The potential of switchgrass and miscanthus to enhance soil organic carbon sequestration—Predicted by DayCent model. *Land*. 2020. 9(12):509. <https://doi.org/10.3390/land9120509>
28. Blanc-Betes E., Kantola I.B., Gomez-Casanovas N., Hartman M.D., Parton W.J., Lewis A.L., Beerling D.J., DeLucia E.H. In silico assessment of the potential of basalt amendments to reduce N₂O emissions from bioenergy crops. *Global Change Biology Bioenergy*. 2020. 13. P. 224–241. <https://doi.org/10.1111/gcbb.12757>
29. Lugato E., Paniagua L., Jones A., Van Oost K., Leip A. Complementing the topsoil information of the Land Use/Land Cover Area Frame Survey (LUCAS) with modelled N₂O emissions. *PLoS ONE*. 2017. 12(4): e0176111. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0176111>
30. Shah M.I., Habib E.H., Saad H.A., Miller R.L. Constructing storm hydrographs at ungaged locations in a low-gradient watershed using SWAT

- calibrated to the NWM. *Hydrological Sciences Journal*. 2025. P. 1–16.
<https://doi.org/10.1080/02626667.2024.2438332>
31. Han F., Tian Q., Chen N., Hu Z., Wang Y., Xiong R., Xu P., Liu W., Stehr A., Barra R.O., Zheng Y. Assessing ammonium pollution and mitigation measures through a modified watershed non-point source model. *Water Research*. 2024. 254. 121372. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.121372>
 32. Liang K., Zhang X., Liang X.Z., Jin V.L., Birru G., Schmer M.R., Robertson G.P., McCarty G.W., Moglen G.E. Simulating agroecosystem soil inorganic nitrogen dynamics under long-term management with an improved SWAT-C model. *Science of the Total Environment*. 2023. 879. 162906. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.162906>
 33. Min H., Hwang W., Kim M.-S., Kim J.-G. DeNitrification-DeComposition (DNDC) Improvement through Model Coupling and Sub-model Development Considering Agricultural Land Use and Future Climate Change. *Journal of Environmental Biology*. 2017. 35(1). P. 37–46. <https://doi.org/10.11626/KJEB.2017.35.1.037>
 34. Shaukat M., Hoshide A.K., Muhammad S., Arshad I.A., Mushtaq M., de Abreu D.C. Predicting Soil Carbon Sequestration and Harvestable C-Biomass of Rice and Wheat by DNDC Model. *Crops*. 2023. 3(3): 220–240. <https://doi.org/10.3390/crops3030021>
 35. Yin S., Zhang X., Lyu J., Zhi Y., Chen F., Wang L., Liu C., Zhou S. Carbon sequestration and emissions mitigation in paddy fields based on the DNDC model: A review. *AI Agric*. 2020. 4. P. 140–149.
 36. Cui G., Wang J. Improving the DNDC biogeochemistry model to simulate soil temperature and emissions of nitrous oxide and carbon dioxide in cold regions. *Science of The Total Environment*. 2019. 687. P. 61–70. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.06.054>
 37. Wang Y., Tao F., Yin L., Chen Y. Spatiotemporal changes in greenhouse gas emissions and soil organic carbon sequestration for major cropping systems across China and their drivers over the past two decades. *Science of The Total*

- Environment*. 2022. 833. P. 155087.
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.155087>
38. Ding W., Chang N., Zhang G., Kang J., Yi X., Zhang J., Zhang J., Wang L., Li H. Soil organic carbon changes in China's croplands: A newly estimation based on DNDC model. *Science of The Total Environment*. 2023. 905. 167107.
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.167107>
 39. FAO. Global Soil Organic Carbon Sequestration Potential Map – GSOCseq v.1.1. Technical report. *Rome: Food and Agriculture Organization of the United Nations*. 2022. <https://doi.org/10.4060/cb9002en>
 40. Xie E., Zhang X., Lu F., Peng Y., Chen J., Zhao Y. Integration of a process-based model into the digital soil mapping improves the space-time soil organic carbon modelling in intensively human-impacted area. *Geoderma* 2021. 409, 115599. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2021.115599>
 41. Nematollahi H., Pazoki A., Ghasemzadeh R., Tuysserkani M., Pazoki M. Assessing Greenhouse Gas Emissions and Methane Production During Post-Landfill Maintenance in Kish Island: A LandGEM Simulation Approach. *Jundishapur Journal of Health Sciences*. 2024. 16(3): e145665. <https://doi.org/10.5812/jjhs-145665>
 42. Hatami A.M., Sabour M.R., Haj Babaei M.R., Nematollahi H. Global Trends of VOSviewer Research, Emphasizing Environment and Energy Areas: A Bibliometric Analysis During 2000-2020. *Environmental Energy Economic Res*. 2022. 6(1): 1-11. <https://doi.org/10.22097/EEER.2021.301784.1216>
 43. Maleki Delarestaghi R., Ghasemzadeh R., Mirani M., Yaghoubzadeh P. The Comparison Between Different Waste Management Methods of Tabas City with Life Cycle Assessment. *Journal of Environmental Science Studies*. 2018. 3(3): 782-93.
 44. Oladejo O. S., Oyeleke M. D. Estimation and forecast of methane emission from Solid Waste Generation within LAUTECH, Ogbomoso, using IPCC Model and LANDGEM. *LAUTECH Journal of Engineering and Technology*. 2024. 18(3). P. 144–153. <https://doi.org/10.36108/laujet/4202.81.0351>

45. Jafari A., Nourozi N., Nayeri D. Estimation of biogas production by LandGEM model and energy recovery potential from municipal solid waste landfill of Kermanshah, Iran. 2024. <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-5338111/v1> (preprint)
46. Sukma B., Kristanto G. A., Dahlan A. V. Landfill design based on methane gas emission estimates at Jatibarang Final Disposal Site (TPA) in Semarang City using LandGEM 3.03 and its potential utilization as an energy source. *Indonesian Journal of Multidisciplinary Science*. 2025. 4(5). P. 310–328. <https://doi.org/10.55324/ijoms.v4i5.1092>
47. Stege G. A., Law J. H., Ramola A., Mazo-Nix S. Mini-review of waste sector greenhouse gas and short-lived climate pollutant emissions in Tyre Caza, Lebanon, using the Solid Waste Emissions Estimation Tool ('SWEET'). *Waste Management & Research*. 2022. P. 1–8. <https://doi.org/10.1177/0734242X221076295>
48. Mousavi M.S., Eun J. Effect of increased temperature and leachate recirculation on biogas production and settlement of municipal solid waste. *Waste Management & Research*. 2023. 41(5). P. 1026–1035. <https://doi.org/10.1177/0734242X221144563>
49. Kumar G., Kopp K., Reddy K.R., Hanson J.L., Yeşiller N. Incorporating thermal effects in modeling of MSW landfills. In: Zhan L., Chen Y., Bouazza A. Proceedings of the 8th International Congress on Environmental Geotechnics. ICEG 2018. *Environmental Science and Engineering*. 2019. 2. https://doi.org/10.1007/978-981-13-2224-2_2
50. Yesiller N., Hanson J.L., Yee E.H. Waste heat generation: A comprehensive review. *Waste Management*. 2015. 42. P. 166–179. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2015.04.004>
51. Yeşiller N., Hanson J.L., Liu W.-L. Heat generation in municipal solid waste landfills. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*. 2005. 131(11). P. 1330–1338. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)1090-0241\(2005\)131:11\(1330\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)1090-0241(2005)131:11(1330))

52. Hanson J.L., Yeşiller N., Onnen M.T., Liu W.-L., Oettle N.K., Marinos J.A. Development of numerical model for predicting heat generation and temperatures in MSW landfills. *Waste Management*. 2013. 33(10). P. 1993–2000. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2013.04.003>
53. Kumar G., Kopp K.B., Reddy K.R., Hanson J.L., Yeşiller N. Influence of waste temperatures on long-term landfill performance: Coupled numerical modeling. *Journal of Environmental Engineering*. 2021. 147(3): 04020158. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)EE.1943-7870.0001855](https://doi.org/10.1061/(ASCE)EE.1943-7870.0001855)
54. Kumar G., Reddy K.R., McDougall J. Numerical modeling of coupled biochemical and thermal behavior of municipal solid waste in landfills. *Computers and Geotechnics*. 2020. 128: 103836. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2020.103836>
55. Shu S., Shi J., Yao Z., Li Y., Wu X. Effects of initial temperature and moisture content on heat generation during degradation of municipal solid waste. *Waste Management*. 2023. 172: 80–89. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2023.08.043>
56. Mousavi M. S., Eun J. A Predictive Settlement Modeling Framework Employing Thermal–Hydraulic–Mechanical–Biochemical Processes in Municipal Solid Waste Landfills. *International Journal of Geomechanics*. 2023. 23(6): 04023075. <https://doi.org/10.1061/IJGNAI.GMENG-8115>
57. Xie Y., Xue J., Deane A. Numerical modelling of settlement of municipal solid waste in landfills coupled with effects of biodegradation. *Waste Management*. 2023. 163. P. 108–121. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2023.03.025>
58. Sohoo I., Ritzkowski M., Guo J., Sohoo K., Kuchta K. Municipal Solid Waste Management through Sustainable Landfilling: In View of the Situation in Karachi, Pakistan. *International Journal of Environmental Research and Public Health*. 2022. 19. P. 773. <https://doi.org/10.3390/ijerph19020773>
59. Reddy K.R., Kumar G., Giri R.K. Modeling Coupled Processes in Municipal Solid Waste Landfills: An Overview with Key Engineering Challenges.

International Journal of Geosynthetics and Ground Engineering. 2017. 3. P. 6.
<https://doi.org/10.1007/s40891-016-0082-2>

60. Chen Y.M., Xu W.J., Ling D.S., Zhan L.T., Gao W. A degradation–consolidation model for the stabilization behavior of landfilled municipal solid waste. *Computers and Geotechnics*. 2020. 118. P. 103341.
61. Lu Shi-Feng, Feng Shi-Jin. Coupled bio-hydro-thermo-mechanical interactions of landfilled MSW based on a multi-phase, multi-component numerical model. *Computers and Geotechnics*. 2022. 144. P. 104659.
62. Liu Quan, Deng Yue-Bao, Wang Tian-Yuan. One-dimensional nonlinear consolidation theory for soft ground considering secondary consolidation and the thermal effect. *Computers and Geotechnics*. 2018. 104. P. 22–28.
63. Berquist C.S., Van Geel P.J. Simulating temperature-dependent biodegradation-induced settlement at a landfill with waste lifts placed under frozen conditions. *Waste Management*. 2020. 104. P. 74–81.
<https://doi.org/10.1016/j.wasman.2020.01.002>
64. Shi J., Qian X., Liu X., Sun L., Liao Z. The behavior of compression and degradation for municipal solid waste and combined settlement calculation method. *Waste Management*. 2016. 55. P. 154–164.
<https://doi.org/10.1016/j.wasman.2015.09.035>
65. Portelinha F.H.M., Correia N.S., Daciolo L.V.P. Impact of temperature on immediate and secondary compression of MSW with high and low food contents. *Waste Management*. 2020. 118. P. 258–269.
<https://doi.org/10.1016/j.wasman.2020.08.044>
66. De la Cruz F.B., Cheng Q., Call D.F., Barlaz M.A. Evidence of thermophilic waste decomposition at a landfill exhibiting elevated temperature regions. *Waste Management*. 2021. 124. P. 26–35.
<https://doi.org/10.1016/j.wasman.2021.01.014>
67. Annapareddy V.S.R., Pain A., Sufian A., Godas S., Scheuermann A. Influence of heterogeneity and elevated temperatures on the seismic translational stability

- of engineered landfills. *Waste Management*. 2023. 158. P. 1–12.
<https://doi.org/10.1016/j.wasman.2023.01.004>
68. Bhagwat A., Ojha C.S.P. Distributed mathematical model for simulating temperature profile in landfill. *Waste Management*. 2023. 167. P. 64–73.
<https://doi.org/10.1016/j.wasman.2023.05.024>
69. Duan Z., Scheutz C., Kjeldsen P. Mitigation of methane emissions from three Danish landfills using different biocover systems. *Waste Management*. 2022. 149. P. 156–167. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2022.05.022>
70. Chetri J.K., Reddy K.R. Advancements in municipal solid waste landfill cover system: a review. *Journal of the Indian Institute of Science*. 2021. 101. P. 557–588. <https://doi.org/10.1007/s41745-021-00229-1>
71. Verma G., Chetri J.K., Reddy K.R. Spatial variation of methane oxidation and carbon dioxide sequestration in landfill biogeochemical cover. *Environmental Technology*. 2024. <https://doi.org/10.1080/09593330.2024.2372052>
72. Uzamurera A. G., Zhao Z.-Y., Wang P.-Y., Wei Y.-X., Mo F., Zhou R., Wang W.-L., Ullah F., Khan A., Xiong X.-B., Li M.-Y., Wesly K., Wang W.-Y., Tao H.-Y., Xiong Y.-C. Thickness effects of polyethylene and biodegradable film residuals on soil properties and dryland maize productivity. *Chemosphere*. 2023. 329. 138602.
<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.138602>
73. Chen N., Li X., Shi H., Yan J., Hu Q., Zhang Y. Assessment and modeling of maize evapotranspiration and yield with plastic and biodegradable film mulch. *Agricultural and Forest Meteorology*. 2021. 307. 108474.
<https://doi.org/10.1016/j.agrformet.2021.108474>
74. Wang W., Han L., Zhang X., Wei K. Plastic film mulching affects N₂O emission and ammonia oxidizers in drip-irrigated potato soil in northwest China. *Science of The Total Environment*. 2021. 754. 142113.
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.142113>
75. Zhang W., Gu J., Zhang Y., Chen Z., Zhu Z., Liu Y., Sun S. Effects of PBAT/PLA biodegradable film mulching on greenhouse gas emissions in rain-

- fed maize farmland of Northeast China. *Science of The Total Environment*. 2024. 957. 177725. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.177725>
76. Wang L., Coulter J.A., Li L., Luo Z., Chen Y., Deng X., Xie J. Plastic mulching reduces nitrogen footprint of food crops in China: a meta-analysis. *Science of The Total Environment*. 2020. 748. 141479. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.141479>
 77. Quan H., Wang B., Wu L., Feng H., Wu L., Wu L., Liu D.L., Siddique K.H.M. Impact of plastic mulching and residue return on maize yield and soil organic carbon storage in irrigated dryland areas under climate change. *Agriculture, Ecosystems & Environment*. 2024. 362. 108838. <https://doi.org/10.1016/j.agee.2023.108838>
 78. Yu Y., Zhang Y., Xiao M., Zhao C., Yao H. A meta-analysis of film mulching cultivation effects on soil organic carbon and soil greenhouse gas fluxes. *CATENA*. 2021. 206. 105483. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2021.105483>
 79. Molnar P. Differences between soil and air temperatures: Implications for geological reconstructions of past climate. *Geosphere*. 2022. 18. Issue 2. Pp. 800–824. <https://doi.org/10.1130/GES02448.1>
 80. Stepanchenko O., Martyniuk P., Belozerova O., Shostak L. Balance boundary conditions for thin boundary layers: derivation from the integral conjugation conditions. *International Journal of Applied Mathematics*. 2023. 36. Issue 1. P. 107–116. <https://doi.org/10.12732/ijam.v36i1.9>
 81. Khamidov M., Ishchanov J., Hamidov A., Shermatov E., Gafurov Z. Impact of soil surface temperature on changes in the groundwater level. *Water*. 2023. 15. Issue 21. P. 3865. <https://doi.org/10.3390/w15213865>
 82. Jia Q., Shi H., Li R., Miao Q., Feng Y., Wang N., Li J. Evaporation of maize crop under mulch film and soil covered drip irrigation: field assessment and modelling on West Liaohe Plain, China. *Agricultural Water Management*. 2021. 253. 106894. <https://doi.org/10.1016/j.agwat.2021.106894>
 83. Li C., Wang Q., Wang N., Luo X., Li Y., Zhang T., Feng H., Dong Q. Effects of different plastic film mulching on soil hydrothermal conditions and grain-

- filling process in an arid irrigation district. *Science of The Total Environment*. 2021. 795. 148886. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.148886>
84. Cuello J.P., Hwang H.Y., Gutierrez J., Kim S.Y., Kim P.J. Impact of plastic film mulching on increasing greenhouse gas emissions in temperate upland soil during maize cultivation. *Applied Soil Ecology*. 2015. 91. P. 48–57. <https://doi.org/10.1016/j.apsoil.2015.02.007>
 85. Dai Y., Wei N., Yuan H., Zhang S., Shangguan W., Liu S., Lu X., Xin Y. Evaluation of soil thermal conductivity schemes for use in land surface modeling. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*. 2019. <https://doi.org/10.1029/2019MS001723>
 86. Lunt P.H., Fuller K., Fox M., Goodhew S., Murphy T.R. Comparing the thermal conductivity of three artificial soils under differing moisture and density conditions for use in green infrastructure. *Soil Use and Management*. 2022. 39. Issue 1. P. 260–269. <https://doi.org/10.1111/sum.12841>
 87. Zhu X., Gao Z., Chen T., Wang W., Lu C., Zhang Q. Study on the thermophysical properties and influencing factors of regional surface shallow rock and soil in China. *Frontiers in Earth Science*. 2022. Volume 10. 864548. <https://doi.org/10.3389/feart.2022.864548>
 88. Petcu C., Dobrescu C.F., Dragomir C.S., Ciobanu A.A., Lăzărescu A.V., Hegyi A. Thermophysical Characteristics of Clay for Efficient Rammed Earth Wall Construction. *Materials*. 2023. 16. Issue 17. 6015. <https://doi.org/10.3390/ma16176015>
 89. Gorban V.A., Bilova N.A. Forest plantations influence on the thermophysical properties of southern chernozems. *Visnyk of V. N. Karazin Kharkiv National University. Series Ecology*. 2024. 30. <https://doi.org/10.26565/1992-4259-2024-30-02>
 90. Karimi S., Bareither C. B. The influence of moisture enhancement on solid waste biodegradation. *Waste Management*. 2021. 123. P. 131-141. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2021.01.022>

91. Alghazali W., Van Geel P. J., Kenny S. A comprehensive study of settlement during the filling and post-closure phases at a landfill in Québec, Canada: Field data and TMB modelling. 2024. *Waste Management*. Volume 178. P. 85-96. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2024.02.019>
92. Rajesh, S., Roy, S., Khan, V. Methane Emission from Municipal Solid Waste Landfills—Estimation and Control. In: Gupta, T., Singh, S., Rajput, P., Agarwal, A. (eds) *Measurement, Analysis and Remediation of Environmental Pollutants. Energy, Environment, and Sustainability*. Springer, Singapore. 2020. https://doi.org/10.1007/978-981-15-0540-9_18
93. Rodrigo-Illarri, J., Rodrigo-Clavero, M.-E., Cassiraga, E. BIOLEACH: A New Decision Support Model for the Real-Time Management of Municipal Solid Waste Bioreactor Landfills. *International Journal of Environmental Research and Public Health*. 2020. 17, 1675. <https://doi.org/10.3390/ijerph17051675>
94. Shostak L. V., Martyniuk P. M. Mathematical modeling of solid municipal waste landfill surface settlement with regard to organic component biodegradation. *Mathematical Modeling and Computing*. 2024. 11(4). Pp. 1106–1117. <https://doi.org/10.23939/mmc2024.04.1106>
95. Kumar G., Reddy K.R., Janga J.K. Accelerated stabilization of municipal solid waste in bioreactor landfills. In: *Geotechnical Engineering Challenges to Meet Current and Emerging Needs of Society*. Taylor & Francis. 2024. P. 3060–3065. <https://doi.org/10.1201/9781003431749-600>
96. Wang L., Zhou A., Xu Y., Xia X. One-dimensional consolidation of unsaturated soils considering self-weight: Semi-analytical solutions. *Soils and Foundations*. 2021. 61(6). P. 1543–1554. <https://doi.org/10.1016/j.sandf.2021.09.003>
97. Lo W.C., Chang J.C., Borja R.I., Deng J.H., Lee J.W. Mathematical modeling of consolidation in unsaturated poroelastic soils under fluid flux boundary conditions. *Journal of Hydrology*. 2021. 595. 125671. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.125671>

98. Huang M.-h., Lv C., Zhou Z.-l. A General Analytical Solution for Axisymmetric Consolidation of Unsaturated Soil with Impeded Drainage Boundaries. *Geofluids*. 2021. 4610882. 10 pages. <https://doi.org/10.1155/2021/4610882>
99. Zhou T., Yan X., Wang L., Zhou A., Sun D. Semi-analytical solution for one-dimensional consolidation of a two-layered unsaturated-saturated soil system ground with a horizontal drainage layer. *Computers and Geotechnics*. 2024. 169. 106196. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2024.106196>
100. Zhou T., Li T., Wang L., Wen M., Chen Y. Analytical solution for the consolidation of unsaturated vertical drain foundation under depth-dependent initial conditions. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*. 2022. 46. P. 2754–2769. <https://doi.org/10.1002/nag.3425>
101. Ling D., Zh S., Shan Z., Niu J., Zhao T. Analytical solutions for consolidation of unsaturated soil with time-dependent boundary conditions. *International Journal of Geomechanics*. 2021. 21(9). Article 04021175. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)GM.1943-5622.0002141](https://doi.org/10.1061/(ASCE)GM.1943-5622.0002141)
102. Fredlund D. G., Hasan J. U. One-dimensional consolidation theory: unsaturated soils. *Canadian Geotechnical Journal*. 1979. 16(3). P. 521–531
103. Meng H., Qin A., Jiang L., Liu H. Thermal consolidation modeling of unsaturated soil with semi-permeable boundary: Semi-analytical and numerical investigation. *Annals of Nuclear Energy*. 2024. 200. 110376. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2024.110376>
104. Liu X., Shi J., Qian X., Hu Y., Peng G. One-dimensional model for municipal solid waste (MSW) settlement considering coupled mechanical-hydraulic-gaseous effect and concise calculation. *Waste Management*. 2011. 31(12). P. 2473–2483
105. Chen Y. M., Xu X. B., Zhan L. T. Analysis of solid-liquid-gas interactions in landfilled municipal solid waste by a bio-hydro-mechanical coupled model. *Science China Technological Sciences*. 2012. 55. P. 81–89. <https://doi.org/10.1007/s11431-011-4667-7>

106. Reddy K. R., Kumar G., Giri R. K. Modeling Coupled Hydro-Bio-Mechanical Processes in Bioreactor Landfills: Framework and Validation. *International Journal of Geomechanics*. 2018. 18(9). 04018102. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)GM.1943-5622.0001164](https://doi.org/10.1061/(ASCE)GM.1943-5622.0001164)
107. Kutya T. V., Gerus V. A., Martynyuk P. M. Modeling of the Moisture Transfer in Soils with Regard for Thermal and Chemical Factors. *Journal of Mathematical Sciences*. 2020. 240. P. 208–219. <https://doi.org/10.1007/s10958-019-04348-0>
108. Cherlinka V. Models of soil fertility as means of estimating soil quality. *Geographia Cassoviensis*. 2016. 10. P. 131–147.
109. Al-Kaisi M. M., Lal R., Olson K. R., Lowery B. Fundamentals and functions of soil environment. In: *Soil Health and Intensification of Agroecosystems*. Academic Press. 2017. P. 1–23.
110. Heinze J., Gensch S., Weber E., Joshi J. Soil temperature modifies effects of soil-biota on plant growth. *Journal of Plant Ecology*. 2016. rtw097. P. 1–14.
111. Colaizzi P., Evett S., Agam N., Schwartz R., Kustas W. Soil heat flux calculation for sunlit and shaded surfaces under row crops: 1. Model development and sensitivity analysis. *Agricultural and Forest Meteorology*. 2016. 216. P. 115–128.
112. Haghighi E., Kirchner J.W. Near-surface turbulence as a missing link in modeling evapotranspiration-soil moisture relationships. *Water Resources Research*. 2017. 53. P. 5320–5344.
113. Kozhushko O.D., Boiko M.V., Kovbasa M.Yu., Martyniuk P.M., Stepanchenko O.M., Uvarov N.V. Evaluating predictions of the soil moisture model with data assimilation by the triple collocation method. *Computer Science and Applied Mathematics*. 2021. 2. P. 25–35.
114. Kozhushko O.D., Boiko M.V., Kovbasa M.Yu., Martyniuk P.M., Stepanchenko O.M., Uvarov N.V. Field scale computer modeling of soil moisture with dynamic nudging assimilation algorithm. *Mathematical Modeling and Computing*. 2022. 9. 203–216.

115. Stepanchenko O., Shostak L., Moshynskiy V., Kozhushko O., Martyniuk P. Simulating soil organic carbon turnover with a layered model and improved moisture and temperature impacts. In: Babichev, S., Lytvynenko, V. (eds) *Lecture Notes in Data Engineering, Computational Intelligence, and Decision Making. ISDMCI. Lecture Notes on Data Engineering and Communications Technologies*. Volume 149. 2022. P. 74-91. https://doi.org/10.1007/978-3-031-16203-9_5
116. Chui Y.V., Moshynskiy 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. 15. P. 609–619.
117. 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. 9. P. 100–114.
118. Ulianchuk-Martyniuk O., Michuta O., Ivanchuk N. Biocolmatation and the finite element modeling of its influence on changes in the head drop in a geobarrier. *Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications*. 2020. 4. P. 18–26.
119. 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). P. 649–660. <https://doi.org/10.12732/ijam.v31i4.10>
120. 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 solutions and temperature. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*. 2019. 49. P. 28–38.
121. Ryan E.M., Ogle K., Kropp H., Samuels-Crow K.E., Carrillo Y., Pendall E. Modeling soil CO₂ production and transport with dynamic source and diffusion

- terms: testing the steady-state assumption using DETECT v1.0. *Geoscientific Model Development*. 2018. 11. P. 1909–1928.
122. Shostak L.V., Martyniuk P.M. Predictive computer modeling of the surface subsidence of a solid waste storage facility and gas generation under unsaturated consolidation conditions. *Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського*. Випуск 1(150). 2025. С. 212–224. <https://doi.org/10.32782/1995-0519.2025.1.27>
 123. Shostak L. Modification of the filtration consolidation equation and kinematic boundary condition into the case of biodegradation processes. *Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of VII International Scientific and Practical Conference*. (7). 2024. P. 270–273. <https://doi.org/10.31713/MCIT.2024.083>
 124. Martyniuk P.M., Ulianchuk-Martyniuk O.V. Model of non-isothermal consolidation in the presence of geobarriers and the total approximation properties of its finite element solutions. *Journal of Optimization Differential Equations and their Applications*. 31(1). 2023. <https://doi.org/10.15421/142304>
 125. 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*. 8(1). 2020. P. 91–104. <https://doi.org/10.32523/2306-6172-2020-8-1-91-104>
 126. Ulianchuk-Martyniuk O.V., 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). P. 141–154. <https://doi.org/10.17654/HM019010141>
 127. Moradi M., Keshavarz A., Fazeli A. One-dimensional consolidation of multi-layered unsaturated soil under partially permeable boundary conditions and time-dependent loading. *Computers and Geotechnics*. 2019. 107. P. 45–54. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2018.11.020>

128. Reddy K.R., Giri R.K., Kulkarni H.S. Modeling coupled hydromechanical behavior of landfilled waste in bioreactor landfills: Numerical formulation and validation. *Journal of Hazardous, Toxic, and Radioactive Waste*. 2017. 21(1). Article ID: D4015004. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)HZ.2153-5515.0000289](https://doi.org/10.1061/(ASCE)HZ.2153-5515.0000289)
129. Dubey A.A., Borthakur A., Ravi K. Investigation of soil suction characteristics induced by the degradation of organic matter. *Geotechnical and Geological Engineering*. 2022. 40. P. 2371–2378. <https://doi.org/10.1007/s10706-021-01986-7>
130. Rafei A., Siddiqui F.Z. Modelling and simulation of landfill methane model. *Clean Energy Systems*. 2023. 5, 100076. <https://doi.org/10.1016/j.cles.2023.100076>
131. Shostak L.V., Martyniuk P.M. Numerical modeling of the impact of variable moisture on the subsidence of the municipal solid waste landfill surface and the generation of greenhouse gases within it. *Вісник Національного університету водного господарства та природокористування. Сер. Технічні науки*. 2024. Вип. 4(108), С. 216-236. <https://doi.org/10.31713/vt4202418>
132. Faour A.A., Reinhart D.R., You H. First-order kinetic gas generation model parameters for wet landfills. *Waste Management*. 2007. 27(7), 946–953. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2006.05.007>
133. Nikiforova T., Savitskyi M., Limam K., Bosschaerts W., Belarbi R. Methods and results of experimental researches of thermal conductivity of soils. *Energy Procedia*. 2013. 42. P. 775–783. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.12.034>
134. Sadeghi M., Ghanbarian B., Horton R. Derivation of an explicit form of the percolation-based effective-medium approximation for thermal conductivity of partially saturated soils. *Water Resources Research*. 2018. 54. P. 1389–1399. <https://doi.org/10.1002/2017WR021714>
135. Bass L., Clements P., Kazman R. Software Architecture in Practice. 4th ed. Addison-Wesley Professional. 2021.

136. Islam S. Ten Simple Rules for Designing and Building a FAIR Research Infrastructure. *Proceedings of the Conference on Research Data Infrastructure*. 2023. 1. <https://doi.org/10.52825/cordi.v1i.309>
137. Arvanitou E. M., Ampatzoglou A., Chatzigeorgiou A., Carver J. C. Software engineering practices for scientific software development: a systematic mapping study. *Journal of Systems and Software*. 2021. 172 (2). <https://doi.org/10.1016/j.jss.2020.110848>
138. Wilson G., Bryan J., Cranston K., Kitzes J., Nederbragt L., Teal T.K. Good enough practices in scientific computing. *PLoS Computational Biology*. 2017. <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1005510>

ДОДАТКИ

Додаток А. Акт впровадження

ІНСТИТУТУ СІЛЬСЬКОГО ГОСПОДАРСТВА
ЗАХІДНОГО ПОЛІССЯ НААН
ЄДПОУ 00729600

АКТ впровадження результатів науково-дослідної роботи

Даним актом стверджується, що при оцінці теплового та вологісного стану чорнозему опідзоленого Лісосостепової частини Рівненської області застосована удосконалена методика розрахунків, яка полягає у запровадженні у відповідних прогностичних моделях тепло-вологоперенесення вдосконаленої граничної умови при наявності верхнього тонкого шару (мульча).

Дана гранична умова запропонована та апробована в наукових роботах Шостак Любові Володимирівни і становить частину її дисертаційного дослідження.

Впровадження результатів наукової роботи проведено на площі 62 га, в якості мульчі використана солома пшениці озимої.

Застосована методика дозволила більш точно спрогнозувати динаміку зміни температур та вологості родючого шару чорнозему опідзоленого та врахувати отримані параметри при вирощуванні наступної культури в сівозміні, попередником якої була пшениця озима.

Заступник директора з наукової роботи
Інституту сільського господарства
Західного Полісся, к.с.-г.н., ст.н.сп.



Олена ШИЖОК

Додаток Б. Довідки про впровадження



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ВОДНОГО ГОСПОДАРСТВА ТА
ПРИРОДОКОРИСТУВАННЯ
(НУВГП)

вул. Соборна, 11, м. Рівне, 33028, тел. (0362) 63 30 98, факс (0362) 63 32 09,
 e-mail: mail@nuwm.edu.ua, web: https://nuwm.edu.ua
 код ЄДРПОУ 02071116

Від 17.01.2025 № ОН-01 На № _____ від _____

ДОВІДКА

про використання у навчальному процесі

Національного університету водного господарства та природокористування
 результатів досліджень і розробок, одержаних при виконанні дисертаційної роботи

Шостак Любові Володимирівни

на здобуття ступеня доктора філософії
 зі спеціальності 122 Комп'ютерні науки

Використання у навчальному процесі науково-методичних розробок та результатів досліджень здобувача вищої освіти третього (освітньо-наукового) рівня Шостак Л. В., що викладені в її дисертації, забезпечують набуття здобувачами вищої освіти теоретичних знань та практичних навичок побудови та дослідження математичних і комп'ютерних моделей в сферах, що відповідають Цілям сталого розвитку, ухваленим на Саміті ООН у 2015 році. У навчальному процесі Національного університету водного господарства та природокористування під час викладання відповідних освітніх компонент апробовано та впроваджено такі рекомендації:

- при викладанні навчальної дисципліни «Математичне та комп'ютерне моделювання» для здобувачів вищої освіти першого (бакалаврського) рівня, які навчаються за ОПП «Комп'ютерні науки» (спеціальність 122 «Комп'ютерні науки») та за ОПП «Прикладна математика» (спеціальність 113 «Прикладна математика»), запроваджено використання сучасних підходів до викладання, які ґрунтуються на case-методі, на прикладі задачі розробки інформаційної системи дослідження та прогнозування процесів в сховищах твердих побутових відходів. Шляхом впровадження даного інноваційного підходу до викладання підвищено інтерес та мотивацію здобувачів освіти на основі практично-орієнтованих задач до вивчення теоретичних основ процесів фільтрації, вологоперенесення, поширення забруднень та зміни теплового стану пористих середовищ, в тому числі в областях з рухомими межами (задачі Стефанівського типу);

- під час викладання навчальної дисципліни «Дослідження еко-інформаційних процесів методами математичного та комп'ютерного моделювання» для здобувачів вищої освіти другого (магістерського) рівня, які навчаються за ОПП «Прикладна інформатика» (спеціальність 122 «Комп'ютерні науки»), запроваджено викладання тем стосовно математичних та комп'ютерних моделей мікробної динаміки, факторів їх розвитку та їх впливу на динаміку емісії парникових газів, що дозволило покращити практичну орієнтованість всієї навчальної дисципліни та пояснити значення вивчення вказаних процесів для реальних проблем розвитку суспільства.

Проректор з наукової роботи та міжнародних зв'язків Національного університету водного господарства та природокористування
 д.е.н., професор

Виконавець: Юрій Турбал +380980841880



Наталія САВІНА



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ВОДНОГО ГОСПОДАРСТВА ТА
ПРИРОДОКОРИСТУВАННЯ

вул. Соборна, 11, м. Рівне, 33028, тел. (0362) 63-30-98, факс (0362) 63-32-09, mail@nuwm.edu.ua

Від 20.03.25 № 44-25
 На № _____ від _____

ДОВІДКА

про використання досліджень, отриманих при виконанні дисертаційної роботи
Шостак Любові Володимирівни
 на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю
 122 – комп'ютерні науки,
 в науково-дослідних роботах, виконаних у науково-дослідній частині
 Національного університету водного господарства та природокористування

Видана **Шостак Любові Володимирівни** з підтвердженням того, що результати досліджень, викладених в дисертаційній роботі на тему: **«Інформаційні технології для прогнозування процесів та станів пористих середовищ з органічною складовою»**, використовувались при виконанні держбюджетної наукової теми в науково-дослідній частині Національного університету водного господарства та природокористування **«Науково-практичні й теоретичні засади оптимізації процесів очищення стічних вод»** (номер державної реєстрації 0124U000395), де автором розроблено інформаційні технології для чисельного прогнозування просторово-часової еволюції станів пористих середовищ з органічною складовою. Побудовано математичну модель біодеградації органічної складової та виділення парникових газів, яка була застосована до дослідження процесів очищення стічних вод у біоплато-фільтрах при наявності органічних забруднень. Запропоновано математичний підхід, що враховує вплив просторової неоднорідності та низької дифузійної здатності активних чинників. Реалізовано обчислювальну технологію для моделювання цих процесів на основі розв'язання відповідних крайових задач.

Крім того, результати досліджень використовувались при виконанні науково-дослідної кафедральної теми, яка виконується в науково-дослідній частині Національного університету водного господарства та природокористування, а саме: **«Математичне та комп'ютерне моделювання процесів та систем»** (номер державної реєстрації 0125U001313), автором запропоновано математичні моделі та чисельні методи для опису динаміки складних просторово-часових процесів у пористих середовищах з органічною складовою. Особливу увагу приділено моделюванню процесів у сховищах твердих побутових відходів, зокрема консолідації відходів, просіданню верхньої межі та виділенню парникових газів у результаті біохімічної трансформації органічної складової. Розроблено алгоритми комп'ютерної реалізації цих моделей, орієнтовані на підвищення точності та ефективності прогнозування змін фізико-хімічного стану систем. Досліджено вплив тонкого прилежого шару на перебіг процесів переносу маси та енергії в умовах просторової неоднорідності середовища.

Проректор з наукової роботи
 та міжнародних зв'язків
 д.е.н., професор

Сергій Куницький 0967375013



Наталія САВІНА

ДОВІДКА**про впровадження результатів дисертаційного дослідження
«Інформаційні технології для прогнозування процесів та станів пористих
середовищ з органічною складовою»****Шостак Любові Володимирівни**

Результати дисертаційної роботи, присвяченої розробці інформаційних технологій для прогнозування процесів та станів пористих середовищ з органічною складовою, впроваджені Шостак Л. В. у рамках проекту «ExhaustedSoils» та менторства над проектом «Забруднення атмосфери».

Зокрема, в рамках проекту «ExhaustedSoils» напрацьовані математичні моделі та алгоритми прогнозування змін фізико-хімічних параметрів пористих середовищ використані для аналізу стану виснажених ґрунтів, розробки рекомендацій щодо їхнього відновлення та створення системи моніторингу. Використання інформаційних технологій дозволило автоматизувати проведення оцінки стану ґрунтів та розробити сценарії їхнього відновлення шляхом комп'ютерного моделювання процесів, пов'язаних з органічним вуглецем.

У межах менторства над проектом «Забруднення атмосфери» застосовані підходи до обробки даних, моніторингу та моделювання розповсюдження забруднюючих речовин в атмосфері, в тому числі – парникових газів. Використані алгоритми та програмні засоби, розроблені в рамках дисертаційної дослідження, дозволили в прогнозних моделях атмосферних процесів врахувати джерела емісії вуглекислого газу та метану із пористих середовищ з органічною складовою – ґрунтів та сховищ твердих побутових відходів.

Результати роботи Шостак Л. В. знайшли практичне застосування не лише в самих наукових проектах Noosphere Engineering School, але і сприяли науково-технічній підготовці студентів-учасників відповідних проектів в рамках освітніх ініціатив.

Керівник Noosphere Engineering School
Сергій Веретюк

29.04.2025



Додаток В. Список публікацій здобувача за темою дисертації

Публікації у наукових виданнях, що індексуються у наукометричній базі Scopus:

1. Stepanchenko O., Shostak L., Moshynskyi V., Kozhushko O., Martyniuk P. Simulating soil organic carbon turnover with a layered model and improved moisture and temperature impacts. In: Babichev, S., Lytvynenko, V. (eds) *Lecture Notes in Data Engineering, Computational Intelligence, and Decision Making. ISDMCI. Lecture Notes on Data Engineering and Communications Technologies*. 2022. Vol. 149. P. 74-91. https://doi.org/10.1007/978-3-031-16203-9_5. **Scopus** (1.1/0.55 д.а.; авторський внесок—огляд моделей та інформаційних систем кругообігу органічного карбону та супутнього виділення вуглекислого газу, ідея урахування у відповідних моделях змінних факторів вологості та температури, розробка алгоритму та числові експерименти).
2. Stepanchenko O., Martyniuk P., Belozerova O. Shostak L. Balance boundary conditions for thin boundary layers: derivation from the integral conjugation conditions. *International Journal of Applied Mathematics*. 2023. Vol. 36 (1). P. 107-116. <http://dx.doi.org/10.12732/ijam.v36i1.9>. **Scopus** (0.41/0.3 д.а.; авторський внесок—ідея та виведення балансової граничної умови при наявності тонкого верхнього шару на випадок залежності характеристик матеріалу шару від факторів впливу).
3. Shostak L. V., Martyniuk P. M. Mathematical modeling of solid municipal waste landfill surface settlement with regard to organic component biodegradation. *Mathematical Modeling and Computing*. 2024. Vol. 11. No. 4. P. 1106–1117. <https://doi.org/10.23939/mmc2024.04.1106>. **Scopus** (0.945/0.64 д.а.; авторський внесок—формування математичної моделі, числове розв'язання відповідної крайової задачі, проведення числових експериментів).

Статті у фахових наукових виданнях України

4. Shostak L.V., Martyniuk P.M. Numerical modeling of the impact of variable moisture on the subsidence of the municipal solid waste landfill surface and

the generation of greenhouse gases within it. *Вісник Національного університету водного господарства та природокористування. Сер. Технічні науки*. 2024. Вип. 4(108). С. 216-236. <https://doi.org/10.31713/vt4202418> (0.81/0.55 д.а.; авторський внесок–формування математичної моделі, розробка алгоритму та числове розв'язання відповідної крайової задачі, проведення числових експериментів).

5. Shostak L.V. Computer simulation of temperature distribution in the forest soil with regard to the presence of a thin boundary layer of fallen leaves. *Вісник Національного університету водного господарства та природокористування. Сер. Технічні науки*. 2025. Вип. 1(109). С. 153-168. <https://doi.org/10.31713/vt1202514> (0.79/0.79 д.а.).

6. Shostak L.V., Martyniuk P.M. Predictive computer modeling of the surface subsidence of a solid waste storage facility and gas generation under unsaturated consolidation conditions. *Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського*. 2025. Вип. 1(150). С. 212-224. <https://doi.org/10.32782/1995-0519.2025.1.27>. (1.26/0.84 д.а.; авторський внесок–формування математичної моделі, розробка алгоритму та числове розв'язання відповідної крайової задачі, проведення числових експериментів).

Публікації в матеріалах конференцій (тези доповідей)

7. Stepanchenko O., Shostak L., Kozhushko O., Moshynskyi V., Martyniuk P. Modelling soil organic carbon turnover with assimilation of satellite soil moisture data. *Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of V International Scientific and Practical Conference*. 2021. (5). P. 97–99. <https://doi.org/10.31713/MCIT.2021.31>. (0,26/0,13 д.а.).

8. Shostak L., Stepanchenko O., Martyniuk P., Belozeroва O. Mathematical and computer models for predicting greenhouse gas emissions from soil into the atmosphere: review and comparison. *Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of VI International Scientific and Practical Conference*. 2023. (6). P. 92–95. <https://doi.org/10.31713/MCIT.2023.026>. (0,25/0,15 д.а.).

9. Shostak L. Modification of the filtration consolidation equation and kinematic boundary condition into the case of biodegradation processes. *Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of VII International Scientific and Practical Conference*. 2024. (7). P. 270–273. <https://doi.org/10.31713/MCIT.2024.083>. (0,3/0,3 д.а.).

Праці, які додатково відображають наукові результати дисертації:

10. Ivanchuk N., Martyniuk P., Shostak L., Shayniuk K. Computer modeling of water purification in bioplateau taking into account biodegradation processes and greenhouse gas emissions. *Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of International Scientific and Practical Conference*. (7). 2024. P. 258–259. <https://doi.org/10.31713/MCIT.2024.079>. (0,15 / 0,04 д.а.).

11. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір. №115423. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна програма для математичного моделювання стану земель сільськогосподарського призначення». Автори: Шостак Л.В., Мартинюк П.М., Степаненко О.М., Бойко М.В., Белозерова О.Д., Іванчук Н.В. Дата реєстрації 24 жовтня 2022 р.

Додаток Г. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір

УКРАЇНА



СВІДОЦТВО

про реєстрацію авторського права на твір

№ 115423

Комп'ютерна програма «Комп'ютерна програма для математичного моделювання стану земель сільськогосподарського призначення»

(вид, назва твору)

Автор(и) Шостак Любов Володимирівна, Мартинюк Петро Миколайович, Степаненко Ольга Миколаївна, Бойко Михайло Віталійович, Белозерова Олена Дмитрівна, Іванчук Наталія Віталіївна

(повне ім'я, псевдонім (за наявності))

Дата реєстрації 24 жовтня 2022 р.

В.о. Генерального директора
Державного підприємства
«Український інститут
інтелектуальної власності»



Маргарита ОКСЕНЮК



**НАЦІОНАЛЬНИЙ ОРГАН ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ ВЛАСНОСТІ
ДЕРЖАВНЕ ПІДПРИЄМСТВО
«УКРАЇНСЬКИЙ ІНСТИТУТ ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ ВЛАСНОСТІ»
(УКРПАТЕНТ)**

Оригіналом цього документа є електронний документ з ідентифікатором:

CR0151241022

Для отримання оригіналу документа необхідно:

1. Перейти за посиланням: <https://sis.ukrpatent.org>
2. Обрати пункт меню «СЕРВІСИ» «Отримати оригінал документу».
3. Вказати ідентифікатор документу та натиснути на кнопку «Завантажити».

Цей ідентифікатор є конфіденційною інформацією,
не повідомляйте його нікому

Заявка № с202204309
Вик. Підгурська Л. М.
Тел. +38(044)494-0664

УКРПАТЕНТ

Додаток Г. Порівняльна таблиця інформаційних систем для оцінки викидів парникових газів із агроєкосистем

Критерій / Система	APSIM	DAYCENT	SWAT	DNDC	RothC / RothPC	Розроблена система
Виділення парникових газів	✓	✓	✓	✓	частково	✓ моделюється кількісно
Тонкі поверхневі шари (мульча)	✓	частково	частково	частково	—	✓ повна підтримка
Тепловий режим середовища	✓	✓	✓	✓	—	✓ з урахуванням біогенних джерел тепла
Інтеграція з цифровими сервісами	частково	—	✓	частково	—	✓ підключення до відкритих екологічних API
Чисельні методи для складних задач	—	—	частково	✓	—	✓ модульне чисельне ядро
Адаптивність / універсальність	агро	агро	вода+агро	агро	агро	✓ агро + техногенні об'єкти
Обмеження	велика кількість параметрів	спрощені алгоритми	не охоплює ґрунтову динаміку	обмежене просторове моделювання	лише С-баланс	потрібна обчислювальна потужність, залежність від точних даних

Додаток Д. Порівняльна таблиця інформаційних систем для прогнозування процесів на полігонах ТПВ

Критерій / Система	LandGEM	SWIMS	WasteMAP	SWEET	Розроблена система
Основне призначення	прогноз викидів ПГ на основі емпіричних моделей	управління потоками ТПВ, геолокація ризиків	інтерактивна карта викидів метану	оцінка викидів ТПВ через Excel-таблиці	прогнозування взаємопов'язаних процесів у пористому середовищі з урахуванням біодеградації, тепло- та вологоперенесення, тиску, осідання
Тип моделі	біодеградація 1-го порядку	бази даних, без моделей	візуалізація без глибоких моделей	розрахунок за шаблоном Excel	чисельне розв'язання нелінійних рівнянь із змінною геометрією та властивостями середовища
Динамічність граничних умов	✗ статичні	✗	✗	✗	✓ адаптивні граничні умови з урахуванням біопокриття, пористості, вологості та температури
Просторове моделювання	✗ лише сумарні обсяги	✗	✓ геовізуалізація	✗	✓ 2D розрахунки на сітці, врахування локальних умов полігону або поля
Урахування тепло- та вологоперенесення	✗	✗	✗	✗	✓ моделювання тепло- та вологоперенесення з теплогенерацією
Осідання середовища та тиск	✗	✗	✗	✗	✓ облік змін структури середовища в часі та тиску у поровому просторі
Джерела даних (інтеграція з API/сенсорами/ГІС)	✗ не передбачено	✓ дані від операторів полігонів	✓ карта, прив'язана до відкритих даних	✗ Excel-таблиці	✓ можливість інтеграції з ГІС, сенсорними пристроями, відкритими API та супутниковими даними

Продовження таблиці (додаток Д)

Ліцензія / Доступність	відкрита	комерційна/у рядова	відкрита	відкрита	доступна, з можливістю адаптації під локальні умови, навчання персоналу
Придатність для наукового моделювання складних процесів	×	×	×	×	☒ повноцінне середовище моделювання з підтримкою математичного апарату