

ПРИКЛАДНА МАТЕМАТИКА

УДК 519.6:544.431.11:[502.521:539.16]

Власюк А. П., д.т.н., професор (Міжнародний економіко-гуманітарний університет ім. акад. Степана Дем'янчука),
Жуковський В. В., ст. викладач (Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне)

ПРО ОДНУ ЗАДАЧУ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ВНУТРІШНЬОЧАСТИНКОВОГО МАСОПЕРЕНОСУ РАДІОНУКЛІДІВ У КАТАЛІТИЧНОМУ ПОРИСТОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Розглянуто постановку та проведено математичне моделювання одновимірної задачі адсорбційного масопереносу радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі. Знайдено аналітичний та чисельний розв'язок відповідної крайової задачі. Здійснено порівняння отриманих результатів. Удосконалено програмний комплекс комп'ютерного моделювання NanoSurface та проведено його верифікацію.

Ключові слова: каталітичне пористе середовище, радіонукліди, внутрішньочастинковий масоперенос, метод скінчених різниць.

Господарська діяльність людини призводить до забруднення біосфери, зокрема родючих земель, радіоактивними речовинами. Після Чорнобильської катастрофи ще досі в ґрунтах постраждалих районів спостерігається забрудненість радіонуклідами. Специфічні природні умови півночі Рівненщини сприяють посиленій міграції радіонуклідів з ґрунту в рослини та трофічними ланцюгами далі в організм людини. Однак, сучасні засоби механізації дозволяють пришвидшити процес очищення забруднених територій завдяки застосуванню новітніх технологій меліорації [1], зокрема фільтрів-вловлювачів, нетрадиційних органічних добрив з сорбуючими мікро-частинками [2] тощо.

Математичне моделювання із застосуванням колоїдів-адсорбентів до процесів очищення ґрунтових масивів є новим. Тому в даній роботі нами буде розглянуто математичну модель лише внутрішньочастинкового масопереносу радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі, що може бути використана в складніших постановках задач моделювання підземних процесів [3; 4].

Метою даної роботи є знаходження аналітичного та чисельного розв'язку крайової задачі, що описує внутрішньочастинковий масо-перенос речовин у каталітичному пористому середовищі, порівняння отриманих результатів та здійснення верифікації програмного забезпечення.

Розглянемо каталітичне пористе середовище, що займає область $\Omega = \{0 < x < l; 0 < r < R\}$ (рис. 1), в якому відбувається процес адсорбції забруднених речовин (радіонуклідів).

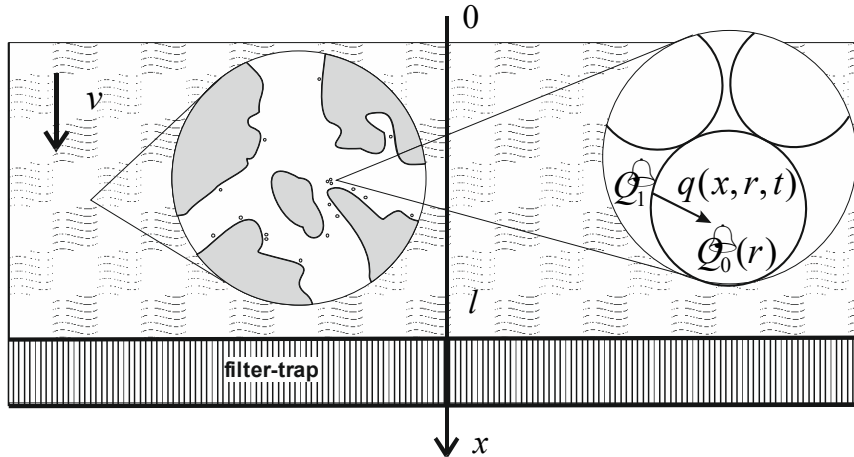


Рис. 1. Схема вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі

Необхідно розрахувати значення концентрації $q(x, r, t)$ по області Ω , що дасть можливість зробити прогноз щодо можливості використання спеціалізованих мікро- та нанопористих частинок для очищення ґрунтів з метою їх подальшого сільськогосподарського використання.

Математичну модель поставленої задачі в одновимірному випадку можна описати наступною крайовою задачею [5–7]:

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

$$q(x, r, 0) = \tilde{Q}_0(r), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad (2)$$

$$q(x, R, t) = 0, \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad t > 0. \quad (3)$$

Тут використані наступні позначення: $\mathbf{X} = \{x\}$ – точка області Ω , м; r – радіус частинки, м; t – час; $q(x, r, t)$ – концентрація радіонуклідів у частинках радіуса R ; D_0 – коефіцієнт дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R , що знаходяться у скелеті ґрунту.

Рівняння (1) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією $q(x, r, t)$; (2) – значення концентрації q у початковий момент часу; (3) – значення концентрації q на межі частинки при $r = R$.

У випадку, коли $D_0(q) = D_0 = const$, рівняння (1) прийме вигляд

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0 \frac{\partial q}{\partial r} \right).$$

Таким чином, отримаємо

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial^2 q}{\partial r} \right), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0. \quad (4)$$

Розв'язок (4) при відповідних крайових умовах (2) та (3) можна знайти аналітичним способом [8]. Відповідно отримаємо:

$$q(x, r, t) = \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n e^{-\frac{n^2 \pi^2 D_0 t}{R^2}} \sin \frac{n \pi r}{R}, \quad (5)$$

де $\beta_n = \frac{2}{R} \int_0^R r \tilde{Q}_0(r) \sin \frac{n \pi r}{R} dr$.

Знайдемо аналітичний розв'язок рівняння (4) при початковій умові (2) для випадку, коли гранична умова (3) є неоднорідною, тобто маємо:

$$q(x, R, t) = \tilde{Q}_1, \quad (6)$$

де $\tilde{Q}_1 = const$.

Щоб звести неоднорідну граничну умову до однорідної введемо заміну вигляду

$$q(x, r, t) = u(x, r, t) + \tilde{Q}_1, \quad (7)$$

де $u(x, r, t)$ – нова невідома функція.

Тоді маємо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} &= \frac{\partial u}{\partial t}, \quad \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2}, \quad \frac{\partial q}{\partial r} = \frac{\partial u}{\partial r}, \\ q(x, R, t) &= u(x, R, t) + \tilde{Q}_1 = \tilde{Q}_1, \\ q(x, r, 0) &= u(x, r, 0) + \tilde{Q}_1 = \tilde{Q}_0(r). \end{aligned}$$

Звідси отримаємо:

$$\begin{aligned} u(x, R, t) &= 0, \\ u(x, r, 0) &= \tilde{Q}_0(r) - \tilde{Q}_1. \end{aligned}$$

Отже, маємо наступну крайову задачу для функції $u(x, r, t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \right), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad t > 0, \quad (8)$$

$$u(x, r, 0) = \tilde{Q}_0(r) - \tilde{Q}_1, \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad r \in (0, R), \quad (9)$$

$$u(x, R, t) = 0, \quad \mathbf{X} \in \Omega, \quad t > 0. \quad (10)$$

Тоді розв'язок (8)-(10) наступний:

$$u(x, r, t) = \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n e^{-\frac{n^2 \pi^2 D_0 t}{R^2}} \sin \frac{n \pi r}{R}, \quad (11)$$

$$\text{де } \beta_n = \frac{2}{R} \int_0^R r (\tilde{Q}_0(r) - \tilde{Q}_1) \sin \frac{n \pi r}{R} dr.$$

Повертаючись до проведеної заміни (7), отримаємо аналітичний розв'язок (4) з відповідними крайовими умовами (2) та (6) у вигляді наступної функції:

$$q(x, r, t) = \tilde{Q}_1 + \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n e^{-\frac{n^2 \pi^2 D_0 t}{R^2}} \sin \frac{n \pi r}{R}, \quad (12)$$

$$\text{де } \beta_n = \frac{2}{R} \int_0^R r (\tilde{Q}_0(r) - \tilde{Q}_1) \sin \frac{n \pi r}{R} dr.$$

Для чисельного розв'язання крайової задачі (1)-(3) використаємо метод скінченних різниць з використанням монотонної різницевої схеми [9].

Покриємо область Ω рівномірною сіткою $\omega_{h_1 h_2 \tau}$ з кроками h_1 , h_2 і τ відповідно по осях Ox , Or та часу Ot для змінних x , r , t

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

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

Скінченнорізницевий аналог диференціального рівняння (4) має наступний вигляд:

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau'} = \chi_0^{\circ} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - 2q_j^{(k+1)} + q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2^2} + \frac{\chi_+^{\circ} q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{D_0 h_2} + \frac{\chi_-^{\circ} q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{D_0 h_2}, \quad (13)$$

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

де

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

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

Для початкової умови (2) отримаємо наступний скінченнорізницьвий аналог:

$$q_j^{(0)} = \tilde{Q}_0(jh_2), \quad j = \overline{1, n_2 - 1}. \quad (14)$$

Для однорідної граничної умови першого роду (3) маємо:

$$q_{n_2}^{(k)} = 0, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad (15)$$

а для неоднорідної граничної умови першого роду (6)

$$q_{n_2}^{(k)} = \tilde{Q}_1, \quad k = \overline{1, n_3}, \quad (16)$$

В прогоночному вигляді рівняння (13) запишеться

$$a_j^1 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^1 q_j^{(k+1)} + b_j^1 q_{j+1}^{(k+1)} = -q_j^{(k)},$$

де

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

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

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

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^1 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^1, \quad (17)$$

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

Для дискретизації рівняння (1) використаємо неявну різницеву схему. Отримаємо:

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau} = \frac{1}{r^2 h_2} \left((d_0)_{j+1}^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} - (d_0)_j^{(k)} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2} \right), \quad (18)$$

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

Для знаходження концентрації $q(x, r, t)$ необхідно розв'язати скінченнорізницеве рівняння (18) з відповідними початковою та граничною умовами. Для цього зведемо дане рівняння до прогоночного вигляду

$$a_j^2 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^2 q_j^{(k+1)} + b_j^2 q_{j+1}^{(k+1)} = -q_j^{(k)},$$

де

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

Неважко показати, що умова стійкості прогонки $|\bar{c}_j^2| > |a_j^2| + |b_j^2|$ виконується. Значення $q(x, r, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ послідовно обчислюємо, використовуючи співвідношення

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^2 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^2, \quad (19)$$

$$\text{де } \alpha_{j+1}^2 = \frac{b_j^2}{\bar{c}_j^2 - \alpha_j^2 a_j^2}, \quad \beta_{j+1}^2 = \frac{a_j^2 \beta_j^2 + q_j^{(k)}}{\bar{c}_j^2 - \alpha_j^2 a_j^2}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}.$$

Для дискретизації рівняння (1) монотонною різницевою схемою здійснимо наступні перетворення. З рівняння (1) слідує:

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

або

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

Тоді

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

Таким чином, маємо:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0(q) \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + p(q) \frac{\partial q}{\partial r}, \quad (20)$$

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

Скінченнорізницевий аналог диференціального рівняння (20) має вигляд:

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

$$+(\hat{r}_+)_j^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} + (\hat{r}_-)_j^{(k)} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2},$$

$$j = \overline{1, n_2 - 1}, k = \overline{0, n_3},$$
(21)

де

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

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

В прогоничному вигляді рівняння (21) запишемо:

$$a_j^3 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^3 q_j^{(k+1)} + b_j^3 q_{j+1}^{(k+1)} = -q_j^{(k)},$$

де

$$a_j^3 = \frac{\hat{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} - \frac{(\hat{r}_-)_j^{(k)}}{h_2}, \quad b_j^3 = \frac{\hat{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} + \frac{(\hat{r}_+)_j^{(k)}}{h_2}, \quad \bar{c}_j^3 = \frac{2\hat{\chi}_j^{(k)}}{h_2^2} + \frac{(\hat{r}_+)_j^{(k)}}{h_2} - \frac{(\hat{r}_-)_j^{(k)}}{h_2}.$$

Неважко показати, що умова стійкості прогонки $|\bar{c}_j^3| > |a_j^3| + |b_j^3|$ виконується. Значення $q(x, r, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ послідовно обчислюємо, використовуючи співвідношення

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^3 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^3, \quad (22)$$

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

Програмна реалізація вищенаведених аналітичних та чисельних розв'язків задачі адсорбційного масопереносу в каталітичному пористому середовищі представлена у вигляді нових математичних моделей продукту «NanoSurface» (рис. 2). Даний кросплатформенний продукт написаний на мові програмування C/C++ із застосуванням фреймворку Qt і призначений для комп'ютерного моделювання задач масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури з використанням паралельних обчислень [10].

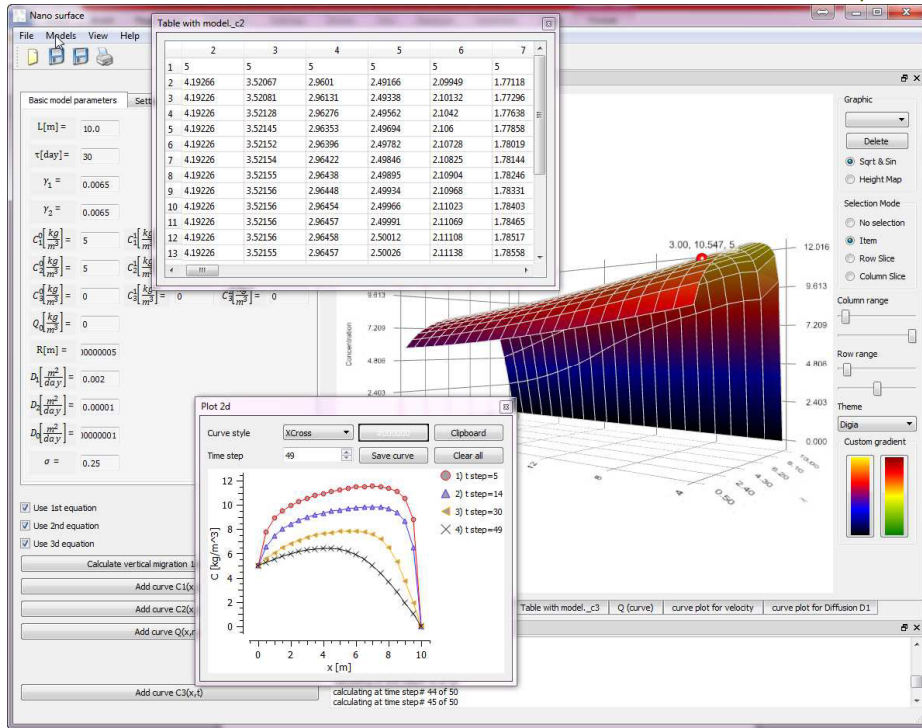


Рис. 2. Інтерфейс програмного комплексу «Nanosurface»

Результати комп'ютерного моделювання внутрішньочастинкового масопереносу радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі отримані за допомогою як аналітичних розв'язків задачі (1)–(3), так і з використанням чисельного знаходження значень концентрації.

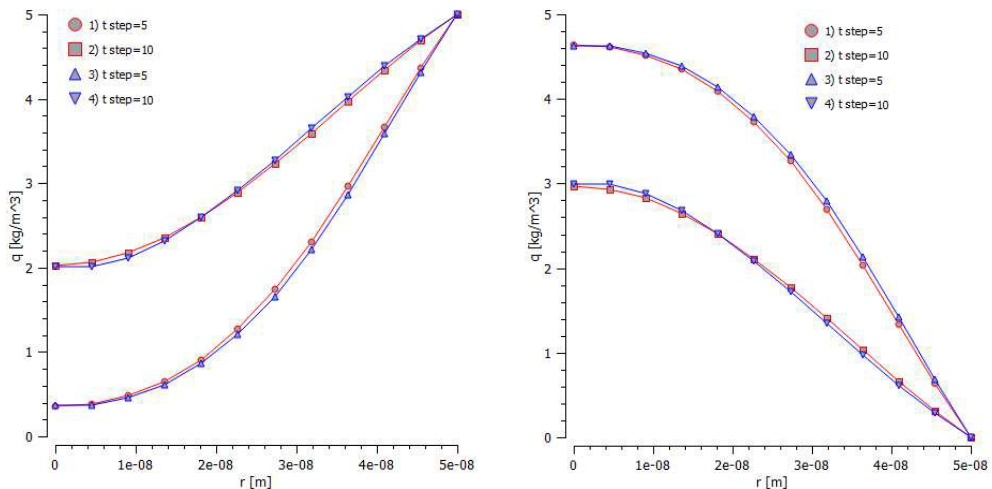
Аналітичні методи досліджень рівнянь масопереносу розвиваються давно, але незважаючи на це існує обмежена кількість задач, що можуть бути розв'язані аналітично. Коло потенційних задач значно розширилося із розвитком обчислювальної техніки та чисельних методів, які дозволяють отримати розв'язок із заданою точністю. Аналітичний розв'язок зазвичай знаходять для спрощеного варіанту задачі, що дозволяє зрозуміти фізичну суть процесу, а також допомогти відтестувати чисельний алгоритм та провести верифікацію програмного коду.

Верифікація програмного коду включає в себе перевірку дотримання основних правил з конструювання програмних систем: вибору архітектури системи, мови програмування, методології розробки, користування системами контролю версій, забезпечення якості коду [11]. Більша половина з цих вимог відносяться до стандартних проблем, пов'язаних з розробкою програмного забезпечення [12].

Інша частина правил верифікації пов'язана з науковими обчисленнями, де головною задачею є перевірка точності представлення у вигляді коду потрібної математичної моделі [13]. Математичні моделі представляють собою системи диференціальних рівнянь із відповідними крайовими умовами, чисельний розв'язок яких знаходиться методом прогонки, в якому виконані умови стійкості [6; 14]. Тобто, коректність обчислювального алгоритму забезпечується чіткою постановкою крайової задачі та вибору методу обчислень. Однак, незважаючи на це не можна бути впевненим, що отримані результати не містять помилок або програма логічних «багів».

Чисельні експерименти проводилися з наступними геометричними та адсорбційними параметрами: $R = 5 \cdot 10^{-8} \text{ м}$, $D_0 = 1 \cdot 10^{-18} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}$.

На рисунку 3 показано порівняльний аналіз результатів отриманих аналітичним та чисельним способом при різних початкових та граничних умовах. Як помітно з рисунку, розбіжність результатів не перевищує 0,5%. З цього можна зробити висновок про коректність постановки задачі та успішну верифікацію програмного рішення.



а) $Q_1^0 = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, $Q_0^0(r) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$

б) $Q_1^0 = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, $Q_0^0(r) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$

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

1. Клименко О. Машина для внесення меліорантів в рідкому стані / О. Клименко // Вісник Рівненського державного технічного університету. Збірник наукових праць. Випуск 1 (3). – 2000. – С. 161–166.
2. Nanomaterials as adsorbents / M. Auffan, H. J. Shipley, S. Yean, A. T. Kan, M. Tomson, J. Rose, J.-Y. Bottero // *Environmental Nanotechnology: Applications and Impacts of Nanomaterials*, McGraw-Hill, New York. – 2007. – С. 371–392.
3. Zhukovskyy V. V. Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in catalytic porous media in non-isothermal conditions / V. V. Zhukovskyy, A. P. Vlasyuk // *Research on modern systems for manufacture and measurement of components of machines and devices*. – 2016. – T.SCIENCE REPORT Project CIII-PL-0007. – С. 177–190.
4. Safonyk A. P. Modelling the filtration processes of liquids from multicomponent contamination in the conditions of authentication of mass transfer coefficient / A. P. Safonyk // *International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*. – 2015. – Т. 9. – С. 189–192.
5. Conner W. C. Fluid transport in nanoporous materials / W. C. Conner, J. P. Fraissard. – Dordrecht, the Netherlands: Springer in cooperation with NATO Public Diplomacy Division, 2006. – 685 с.
6. Власюк А. П. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі / А. П. Власюк, В.В. Жуковський // Вісник Київського національного університету. Сер. фіз.-мат. наук. – 2015. – Т. 1. – С. 89–95.
7. Petryk M. Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Bed / M. Petryk, S. Leclerc, D. Canet, I. Sergienko, V. Deineka, J. Fraissard // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2015. – Т. 119, № 47. – С. 26519–26525.
8. Будаков Б. М. Сборник задач по математической физике / Б. М. Будаков, А. А. Самарский, А. Н. Тихонов. – Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1956.
9. Самарский А. Численные методы математической физики: Учеб. пособие по прикл. математике / А. Самарский, А. Гулин. – Науч. мир, 2003. – 316 с.
10. Vlasyuk A. P. Nanosurface – a tool for computer modeling of mass transfer process in catalytic porous media / A. P. Vlasyuk, V. V. Zhukovskyy // *Abstracts of XXVIII International Conference “Problems of decision making under uncertainties”*. – 2016. – С. 122–124.
11. Vlasyuk A. P. A modern approach for software construction of tools for mathematical modeling of mass transfer processes in catalytic porous media / A. P. Vlasyuk, V. V. Zhukovskyy // *Theoretical & Applied Science*. – 2016. – Т. 44, № 12. – С. 69–75.
12. McConnell S. Code complete / S. McConnell. – Redmond, Wash.: Microsoft Press, 2004. – 914 с.
13. Oberkampf W. L. Verification and validation in scientific computing / W. L. Oberkampf. – Cambridge [u.a.]: Cambridge Univ. Press, 2013. – 767 с.
14. Власюк А. П. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі у нелінійному випадку / А. П. Власюк, В. В. Жуковський // Математичне та комп’ютерне моделювання. Серія: Технічні науки: зб. наук. праць. – 2015. – Т. 12. – С. 161–172.

Рецензент: д.т.н., проф. Мартинюк П. М. (НУВГП)

Vlasiuk A. P., Doctor of Engineering, Professor (International University of Economics and Humanities Named After Academician Stepan Demianchuk), **Zhukovskiy V. V., Senior Lecturer** (National University of Water and Environmental Engineering, Rivne)

ABOUT ONE MATHEMATICAL MODEL OF INTRAPARTICLE RADIONUCLIDES MASS TRANSFER IN CATHALITYC POROUS MEDIA

The formulation and the mathematical modeling of one-dimensional radionuclides purification process in a catalytic porous media is considered. The analytical and numerical solution of the corresponding boundary value problem is found. Comparison of the results is obtained. The NanoSurface computer simulation software complex has been improved and verified.

Keywords: catalytic porous media, radionuclides, intraparticle mass transfer, finite difference method.

Власюк А. П., д.т.н., профессор (Международный экономико-гуманитарный университет им. акад. Степана Демьянчука), **Жуковский В. В., ст. преподаватель** (Национальный университет водного хозяйства и природопользования, г. Ровно)

ОБ ОДНОЙ ЗАДАЧЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВНУТРИЧАСТИЧНОГО МАССОПЕРЕНОСА РАДИОНУКЛИДОВ В КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПОРИСТЫХ СРЕДАХ

Рассмотрена постановка и проведено математическое моделирование одномерной задачи очистки от радионуклидов в каталитической пористой среде. Найдено аналитическое и численное решение соответствующей краевой задачи. Проведено сравнение полученных результатов. Усовершенствован программный комплекс компьютерного моделирования NanoSurface и проведена его верификацию.

Ключевые слова: каталитическая пористая среда, радионуклиды, внутричастичный массоперенос, метод конечных разностей.
