

УДК 532.72:519.63:533.15:631.4

Власюк А.П.¹, д.т.н., проф.,
Жуковський В.В.², аспірант

Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі

¹ Міжнародний економіко-гуманітарний університет ім. акад. С. Дем'янчука, 33000, м. Рівне, вул. акад. С. Дем'янчука, 4, e-mail: A.P.Vlasyuk.rv@gmail.com

² Національний університет водного господарства та природокористування, 33000, м. Рівне, вул. Соборна, 11, e-mail: ZeonET@gmail.com

A.P. Vlasyuk¹, doctor of engineering, prof.,
V.V.Zhukovskyy², graduate student

Mathematical modelling of radionuclides vertical migration in catalytic porous media

¹ International University of Economics and Humanities Named After Academician Stepan Demianchuk, acad. S.Dem'janchuk street, 4, Rivne, 33000, Ukraine

e-mail: A.P.Vlasyuk.rv@gmail.com
² National University of Water Management and Nature Resources Use, Soborna, 11, Rivne, 33000, Ukraine
e-mail: ZeonET@gmail.com

В статті сформульовано постановку та проведено математичне моделювання процесу вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі в лінійній постановці.

Отримано чисельний розв'язок відповідної одновимірної крайової задачі методом скінченних різниць. Проведено серію чисельних експериментів та здійснено їх аналіз.

Ключові слова: масоперенесення, очищення, радіонукліди, частинки мікропористої структури, каталітичне пористе середовище, метод скінченних різниць.

An important national economic task now is to clean the fertile lands of various kinds of pollution e.g. radioactive. Modern mechanization allows faster purification of contaminated areas through the usage of advanced irrigation technologies, including filter traps, alternative organic fertilizers with sorbent porous microparticles.

In this paper we used mathematical model for mass transfer in saturated media to special filter trap. Our objective here was to formulate the statement and carry out the mathematical modelling of radionuclides vertical migration process in catalytic porous media in linearly mode.

It was obtained the numerical solution of respective one-dimensional boundary value problem by the method of finite differences. We used implicit and monotone difference schemas for diffusion-convection problems. Appropriate coefficients for Tomas Algorithm were brought. At the same time we prove numerical stability.

Using created software a series of numerical experiments and their analysis were conducted. Brief overviews of these experiments were included in this manuscript. We demonstrated the microporous particles impact to mass process filtration based on our results.

Key words: mass transfer, refinement, microporous particles, catalytic porous media, method of finite differences.

Статтю представив д.т.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

1. Вступ. Важливою народно-господарською задачею в даний час є очищення плодородних земель від різного роду забруднень, в тому числі і радіоактивних. Основною метою є прогнозування впливу радіоактивних осадів на навколишнє середовище. Наприклад, повільна міграція радіонуклідів впливає на ріст рослин і це призводить до зовнішнього опромінення [1].

Разом з тим, швидка міграція може призвести до забруднення підземних вод. Тому вивчення даних процесів і їх моделювання є важливим для прогнозування довготермінової поведінки.

Питання підземного масоперенесення при фільтрації в пористих середовищах вивчалось в роботах Веригіна М.М., Сергієнка І.В., Скопечького В.В., Дейнеки В.С., Ляшка І.І.,

Ляшка С.І., Лаврика В.І., Власюка А.П., Бомби А.А., Булавацького В.М., Савули Я.Г. та ін. [2- 6]. Дослідження процесів дифузії нуклідів, міграція яких представляє найбільшу радіологічну цікавість, виявилось вдалим для вирішення комплексу задач, що пов'язані з радіаційним контролем. Відповідні математичні моделі розроблені Прохоровим В.М., Власюком А.П., Бураком Я. Й., Чаплею Є.Я., Чернухою О.Ю. [7, 8].

Однак, сучасні засоби механізації дозволяють пришвидшити процес очищення забруднених територій завдяки застосуванню новітніх технологій меліорації, зокрема фільтрів-вловлювачів, нетрадиційних органічних добрив з сорбуючими мікрочастинками [9]. І тут постають питання дослідження дифузії в біпористих сорбентах [10]. Вплив мікропористих частинок на технологічні процеси дифузійного масопереносу досліджувались Фрессардом Ж. [11], Петриком М.Р. [12]. Проте застосування цих ідей до процесів очищення радіонуклідів є новим. Тому важливого значення набувають нові математичні моделі для отримання фундаментального розуміння різних процесів хімічної і фізичної міграційної поведінки для забезпечення розвитку ефективних стратегій оцінки ризику.

2. Постановка задачі. Розглянемо процес очищення горизонтального шару ґрунту від радіонуклідів (наприклад, ^{90}Sr (стронцій-90) або ^{137}Cs (цезій-137)) при їх вертикальній міграції в горизонтальному шарі ґрунту великої протяжності. Міграція радіонуклідів відбувається завдяки переносу їх фільтраційним потоком зі швидкістю v під впливом конвективної дифузії в каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача (рис. 1).

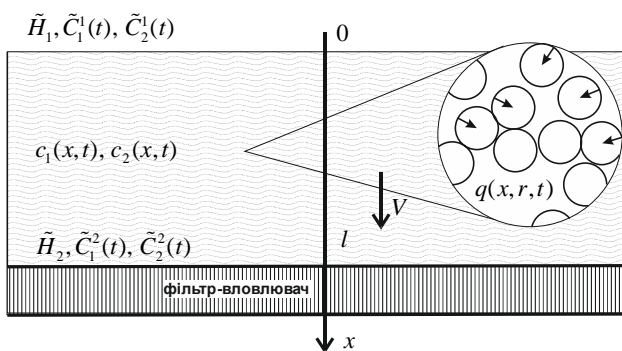


Рис.1. Вертикальна міграція радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача

На глибині l в ґрунті розміщений фільтр-вловлювач, наповнений сорбуючим елементом (наприклад, вермикулітом). Відомі п'єзометричні напори на верхній та нижній (підстилаючій) поверхнях ґрунту \tilde{H}_1 та \tilde{H}_2 ($\tilde{H}_1 > \tilde{H}_2$) відповідно. Також відомий розподіл концентрацій радіонуклідів (мігранту) в початковий момент часу $t=0$: $\tilde{C}_1^0(x)$ (для частинок, що знаходяться в конвективно рухомому поровому розчині), $\tilde{C}_2^0(x)$ (для частинок, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді) та $\tilde{Q}^0(x,r)$. На верхній поверхні ґрунту задані концентрації $\tilde{C}_1^1(x)$ та $\tilde{C}_2^1(x)$, а на фільтрі-вловлювачі задаються концентрації $\tilde{C}_1^2(x)$, $\tilde{C}_2^2(x)$ або відповідні потоки концентрацій $\left. \frac{\partial c_1}{\partial x} \right|_{x=l} = \left. \frac{\partial c_2}{\partial x} \right|_{x=l} = 0$.

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

3. Математична модель задачі.

Математичну модель поставленої задачі в лінійній постановці в одновимірному випадку на основі робіт [7, 8, 12, 13] можна описати наступною крайовою задачею:

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1)$$

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

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (3)$$

$$v = -k(c_1) \frac{dh}{dx} + v_c \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad \text{div} \vec{v} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial q(x,r,t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (5)$$

$$q(x,r,t) \Big|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x,t), \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (6)$$

$$l_1 c_1(0,t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(l,t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (7)$$

$$l_3 c_2(0,t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l,t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (8)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, \quad h(l) = \tilde{H}_2, \quad (9)$$

$$c_1(x,0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x,0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad q(x,r,0) = \tilde{Q}^0(x,r). \quad (10)$$

Тут: $c_1(x,t)$, D_1 – концентрація та коефіцієнт конвективної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у фільтраційному потоці; $c_2(x,t)$,

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

Рівняння (1) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (2) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (3) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q , що зв'язана із концентрацією c_2 умовою (6), (4) описує фільтрацію в каталітичному пористому середовищі. Крайові умови для концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $q(x,r,t)$ та напору $h(x)$ мають вигляд (7)–(10).

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

4. Чисельний розв'язок крайової задачі.

Для знаходження чисельного розв'язку крайової задачі (1)–(10) використаємо метод скінченних різниць. Для цього запишемо неявну різницеву схему для рівняння (2), а для (1) та (3) використаємо монотонну різницеву схему [14] або [15].

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

$$\omega_{h_1 h_2 \tau} = \left\{ \left(x_i, r_j, t_k \right) \left| \begin{array}{l} x_i = ih_1, r_j = jh_2, t_k = k\tau, \\ i = \overline{0, n_1}, j = \overline{0, n_2}, k = \overline{0, n_3}, \\ h_1 n_1 = l, r n_2 = R, t n_3 = T, \end{array} \right. \right\} \quad (11)$$

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

Для дискретизації рівняння (1) використаємо монотонну різницеву схему Самарського [14] або

монотонну різницеву схему, побудовану в роботі [15]. В результаті дискретизації скінченнорізницевої аналог диференціального рівняння (1) та відповідних крайових умов матиме наступний вигляд:

$$\sigma'_1 \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k)}}{\tau} = \chi_i^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - 2c_{1,i}^{(k+1)} + c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} + \frac{(r^+)_i^{(k)} c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{D_1 h_1} + \frac{(r^-)_i^{(k)} c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{D_1 h_1} - \gamma'_1 c_{1,i}^{(k+1)} + \gamma'_2 c_{2,i}^{(k+1)}, \quad (12)$$

$$c_{1,i}^{(0)} = \tilde{C}_1^0(x_i), c_{1,0}^{(k)} = \tilde{C}_1^k(t_k), c_{1,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_1^k(t_k), \quad (13)$$

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

Тут введені наступні позначення:

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

$$\gamma'_1 = \frac{\gamma_1}{D_1}, \quad \gamma'_2 = \frac{\gamma_2}{D_1}, \quad r_i^{(k)} = (r^+)_i^{(k)} + (r^-)_i^{(k)},$$

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

Для знаходження концентрації солей $c_1(x,t)$ з різницевого рівняння (12) використаємо метод прогонки. Для цього представимо різницеву схему (12), (13) у такому вигляді:

$$\begin{cases} a_i^1 c_{1,i-1}^{(k+1)} - \tilde{c}_i^1 c_{1,i}^{(k+1)} + b_i^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} = -c_{1,i}^{(k)} - f_i^{1,(k+1)}, \\ c_{1,0}^{(k+1)} = \mu_1^1 c_{1,1}^{(k+1)} + \mu_2^1, \\ c_{1,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^1 c_{1,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^1, \end{cases} \quad (14)$$

де

$$a_i^1 = \frac{\tau}{\sigma'_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1^2} - \frac{(r^-)_i^{(k)}}{h_1 D_1} \right), \quad b_i^1 = \frac{\tau}{\sigma'_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{(r^+)_i^{(k)}}{h_1 D_1} \right),$$

$$\tilde{c}_i^1 = 1 + \frac{\tau}{\sigma'_1} \left(\frac{2\chi_i^{(k)}}{h_1^2} + \frac{1}{h_1 D_1} \left((r^+)_i^{(k)} - (r^-)_i^{(k)} \right) + \gamma'_1 \right),$$

$$f_i^{1,(k+1)} = \frac{\tau}{\sigma'_1} \gamma'_2 c_{2,i}^{(k+1)}, \quad \mu_1^1 \equiv 0, \quad \mu_2^1 = \tilde{C}_1^1, \quad \mu_3^1 \equiv 0,$$

$$\mu_4^1 \equiv \tilde{C}_2^1.$$

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

$$c_{1,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^1, \quad (15)$$

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

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

Для дискретизації різницевого рівняння (2) використаємо неявну різницеву схему.

Конвективний член $\theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}$ диференціального рівняння (2) апроксимуємо з точністю до другого порядку [16]. Скінченнорізницевий аналог відповідного диференціального рівняння матиме наступний вигляд:

$$\frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k)}}{\tau} = D_2 \frac{c_{2,i+1}^{(k+1)} - 2c_{2,i}^{(k+1)} + c_{2,i-1}^{(k+1)}}{h_1^2} + \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \quad (16)$$

$$c_{2,i}^{(0)} = \tilde{C}_2^0(x_i), \quad c_{2,0}^{(k)} = \tilde{C}_2^1(t_k), \quad c_{2,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_2^2(t_k), \quad (17)$$

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

Представимо різницеву схему (16), (17) у такому вигляді:

$$\begin{cases} a_i^2 c_{2,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^2 c_{2,i}^{(k+1)} + b_i^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} = -f_i^{2,(k+1)}, \\ c_{2,0}^{(k+1)} = \mu_1^2 c_{2,1}^{(k+1)} + \mu_2^2, \\ c_{2,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^2 c_{2,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^2, \end{cases} \quad (18)$$

де

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

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

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

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

$$c_{2,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^2, \quad (19)$$

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

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

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

Монотонна різницєва схема для (3), (5), (6) матиме наступний вигляд:

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau'} = \bar{\chi}_j^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - 2q_j^{(k+1)} + q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2^2} + \frac{\tilde{r}_+ q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{D_0 h_2} + \frac{\tilde{r}_- q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{D_0 h_2}, \quad (20)$$

$$q_j^{(0)} = \tilde{Q}^0(x_i, r_j), \quad q_{n_2}^{(k)} = k_e c_{2,i}^{(k)}, \quad (21)$$

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

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

$$\tilde{r}_- = \frac{-\tilde{r} - |\tilde{r}|}{2} \leq 0.$$

Запишемо різницєву схему (20), (21) в такому вигляді:

$$\begin{cases} a_j^3 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^3 q_j^{(k+1)} + b_j^3 q_{j+1}^{(k+1)} = -q_j^{(k)}, \\ q_0^{(k+1)} = \mu_1^3 q_1^{(k+1)} + \mu_2^3, \\ q_{n_2}^{(k+1)} = \mu_3^3 q_{n_2-1}^{(k+1)} + \mu_4^3, \end{cases} \quad (22)$$

де

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

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

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

Чисельний розв'язок різницевої схеми знаходимо методом прогонки

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^3 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^3, \quad (23)$$

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

$j = \overline{1, n_2 - 1}$, $k = \overline{1, n_3}$, $\alpha_1^3 = \mu_1^3 \equiv 1$, $\beta_1^3 = \mu_2^3 \equiv 0$.

Скінченнорізницевий аналог закону (4) для обчислення швидкості фільтрації має наступний вигляд:

$$v_i^{(k)} = -k_i^{(k)} (c_{1,i}^{(k)}) \frac{h_{i+1}^{(k)} - h_{i-1}^{(k)}}{2h_1} + (v_c)_i^{(k)} (c_{1,i}^{(k)}) \frac{c_{1,i+1}^{(k)} - c_{1,i-1}^{(k)}}{2h_1}, \quad (24)$$

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

5. Програмна реалізація. В якості інструментальних комп'ютерних засобів для дослідження вищенаведеної математичної моделі і проведення комп'ютерного моделювання було використано кросплатформенний фреймворк Qt

[17]. Поєднання даного фреймворка і методології об'єктно-орієнтованого програмування дозволило ворити інтелектуальний інтерфейс для чисельного моделювання процесу вертикальної міграції радіонуклідів. Під час роботи даної програми користувач легко маніпулює вихідними даними (коефіцієнтами дифузії, крайовими умовами тощо), виконує необхідні обчислення і отримує 2D/3D графіки та таблиці значень концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $q(x,r,t)$ по області фільтрації з часом. Усі отримані значення легко імпортуються у файли поширених форматів для подальшої обробки.

6. Результати чисельних експериментів.

Як приклад, розглянуто задачу локалізації радіонуклідів протягом 2 років з такими вихідними параметрами:

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

$$\sigma_1 = 0,4, \tau = 30 \text{ діб}, \gamma_1 = \gamma_2 = 0,0065, k_e = 1,$$

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

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

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

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

Проведено серію чисельних експериментів, результати яких наведені у вигляді графіків.

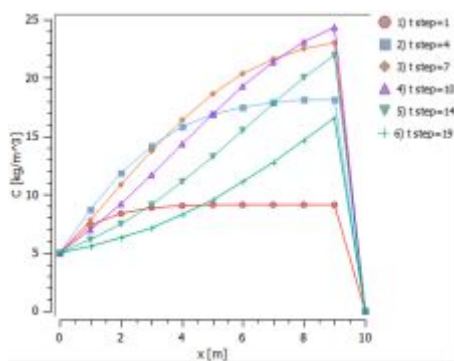


Рис.2. Розподіл концентрації $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіусу R при різних часових кроках:

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

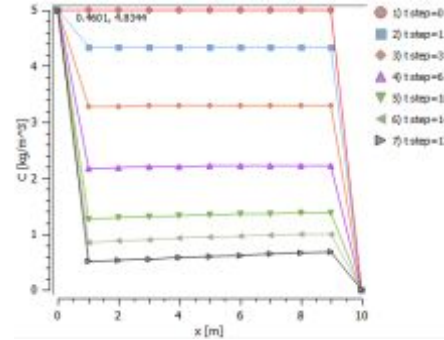


Рис.3 Розподіл концентрації $c_2(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіусу R при різних часових кроках:

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

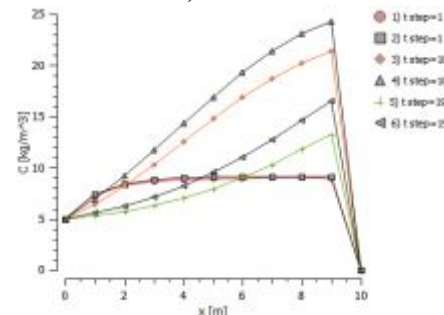


Рис.4. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіусу R (графіки 1, 3 та 5) та з їх врахуванням (графіки 2, 4 та 6) при різних часових кроках:

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

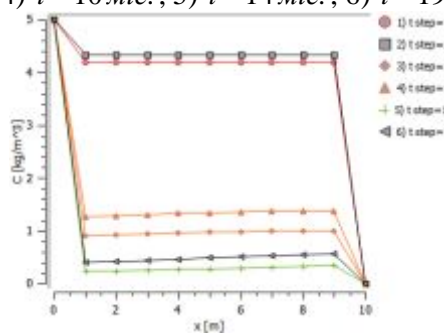


Рис.5. Порівняльні розподіли концентрацій $c_2(x)$ від глибини шару ґрунту x без врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіусу R (графіки 1, 3 та 5) та з їх врахуванням (графіки 2, 4 та 6) при різних часових кроках:

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

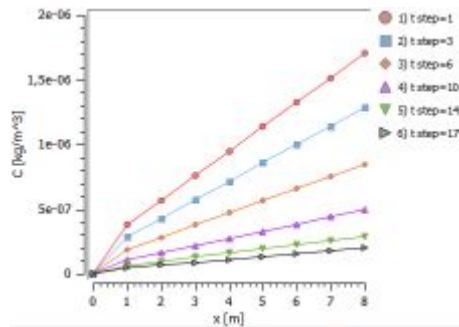


Рис.6. Розподіл концентрації $q(r)$ від радіуса частинки r при $x=1\text{ м}$ при різних часових кроках: 1) $t=0\text{ дїб}$, 2) $t=1\text{ мїс.}$, 3) $t=3\text{ мїс.}$, 4) $t=6\text{ мїс.}$, 5) $t=10\text{ мїс.}$, 6) $t=14\text{ мїс.}$, 7) $t=17\text{ мїс.}$

7. Висновки. В роботі сформульовано постановку та побудовано математичну модель вертикальної міграції радіонуклідів в горизонтальному шарі ґрунту великої

протяжності. Шар ґрунту містить частинки біпористої структури і представляє собою каталітичне пористе середовище при наявності фільтрів-вловлювачів. Чисельний розв'язок знайдено методом скінченних різниць. Здійснено програмну реалізацію поставленої крайової задачі. Отримано графіки розподілів концентрацій $c_1(x,t)$, $c_2(x,t)$, $q(x,r,t)$.

Провівши чисельні експерименти та проаналізувавши отримані графіки, стає очевидним ефективний вплив мікрочастинок на швидкість міграції радіонуклідів. Зокрема, як видно з рис. 4, при наявності мікрочастинок процес фільтраційного очищення шару родючого ґрунту відбувається швидше і родючий шар ґрунту стає більш придатним до використання за менший проміжок часу.

Список використаних джерел

1. Клименко О.М. Екологічні проблеми виробництва сільськогосподарської продукції на забруднених радіонуклідами землях / О.М. Клименко, Л.В. Клименко, Н.В. Кирильчук // Вісник Національного університету водного господарства та природокористування. – 2009. – Випуск 3 (47). – С.38–46.
2. Веригин Н.Н. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах / Н.Н. Веригин, Б.С. Шержуков // Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917-1967). – 1969. – С.237–313.
3. Сергиенко И.В. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах / И.В. Сергиенко, В.В. Скопецкий, В.С. Дейнека. – Київ: Наукова думка, 1991. – 432 с.
4. Ляшко И.И. Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах / И.И. Ляшко, Л.И. Демченко, Г.Е. Мистецкий. – Київ: Наук. Думка, 1991. – 264 с.
5. Ляшко С.И. Оптимизация и математическое моделирование массопереноса подземных вод / С.И. Ляшко. – Київ: Наук. Думка, 1998. – 256 с.
6. Власюк А.П. Числове моделювання міграції радіонуклідів при горизонтальній фільтрації підземних вод / А.П. Власюк, О.П. Остапчук // Тез. доп. Міжнародної школи-семінару «Прогнозування та прийняття рішень в умовах невизначеності». – 2006. – С.180–181.

References

1. KLYMENKO, O.M., L.V. KLYMENKO, and N.V. KYRYLCHUK (2009) *Ekolohichni problemy vyrobnytstva silskohospodarskoi produktsii na zabrudnennykh radionuklidamy zemliakh*. Visnyk Natsionalnoho universytetu vodnoho hospodarstva ta pryrodokorystuvannia. Vypusk 3 (47), p.38-46.
2. VERIGIN, N. N., and B. S. SHERZHUKOV (1969) *Diffuziya i massoobmen pri filtratsii zhidkostey v poristyih sredah*. Razvitie issledovaniy po teorii filtratsii v SSSR (1917-1967). p.237-313.
3. SERGIENKO, I. V., SKOPETSKIY V. V., and DEYNEKA V. S. (1991) *Matematicheskoe modelirovanie i issledovanie protsessov v neodnorodnyih sredah*. Kiev: Naukova dumka.
4. LYASHKO, I.I, L.I. DEMCHENKO, and G.E. MISTETSKIY, eds. (1991) *Chislennoe reshenie zadach teplo- i massoperenosa v poristyih sredah*. Kiev: Naukova dumka.
5. LYASHKO S.I. (1998) *Optimizatsiya i matematicheskoe modelirovanie massoperenosa podzemnyih vod*. Kiev: Naukova dumka.
6. VLASIUK, A. P., and O. P. OSTAPCHUK (2006) *Chyslove modeliuвання mihratsii radionuklidiv pry horyzontalnii filtratsii pidzemnykh vod*. Tez. dop. Mizhнародnoi shkoly-seminaru «Prohnozuvannya ta pryiniattia rishen v umovakh nevyznachenosti», p.180-181.

7. Прохоров В.М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. (ред. Алексахин Р.М.) / В.М. Прохоров: Энергоиздат, 1981. – 99 с.
8. Бурак Я.І. Вихідні положення математичної моделі гетеродифузного переносу радіонуклідів у приповерхневих шарах Землі / Я.І. Бурак, Є.Я. Чапля // Доп. НАН України. – 1993. – Т.10. – С.59–63.
9. 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.
10. Ruckenstein E. Sorption by solids with bidisperse pore structures / E. Ruckenstein, A. Vaidyanathan, G. Youngquist // Chemical Engineering Science. – 1971. – Т.26, №9. – С.1305–1318.
11. 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.
12. Петрик М. Математичне моделювання адсорбційного нелінійного масопереносу в каталітичних пористих середовищах / М. Петрик, Д.М. Михалик // Вісник ТДТУ ім. І. Пулюя. – 2009. – Т.4. – С.193–198.
13. Власюк А.П. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі / А.П. Власюк, В.В. Жуковський // Тез. XIV Міжнар. наук. конф. ім. академіка М.Кравчука. – 2012. – С.111.
14. Самарский А.А. Теория разностных схем: Учеб. пособие для вузов по спец. "Прикл. математика" / А.А. Самарский. – Москва: Наука, 1989. – 616 с.
15. Власюк А.П. Монотонна різницева схема для нелінійного одновимірного рівняння параболічного типу, що містить першу похідну / А.П. Власюк, О.П. Остапчук, О.М. Степанченко // Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. наук. – 2005. – Вип. 2. – С.188.
16. Демидович Б.П. Численные методы анализа / Б.П. Демидович, И.А. Марон, Э.З. Шувалова: Наука, 1967. – 368 с.
17. Евгеньевич Ш. Qt4.8. Профессиональное программирование на C++ / Ш. Евгеньевич. – Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2012. – 894 с.
7. PROHOROV, V. M. (1981) *Migracija radioaktivnih zagrizanjenij v pochvah.* (red. Aleksahin R.M.): Jenergoizdat.
8. BURAK, Ia. I., and Ie. Ia. CHAPLIA (1993) *Vykhidni polozhennia matematychnoi modeli heterodyfuznoho perenosu radionuklidiv u prypoverkhnevyykh sharakh Zemli.* Dop. NAN Ukrainy, 10, p.59-63.
9. KLYMENKO, O.M. (2000) *Mashyna dlia vnesennia meliorantiv v ridkomu stani.* Visnyk Rivnenskoho derzhavnoho tekhnichnoho universytetu. Zbirnyk naukovykh prats. Vypusk 1 (3), p.161-166.
10. RUCKENSTEIN, E., A.S. VAIDYANATHAN, and G.R. YOUNGQUIST (1971) *Sorption by solids with bidisperse pore structures.* Chemical Engineering Science, 26(9), p.1305-1318.
11. CONNER, Wm. Curtis and Jacques P. FRAISSARD (2006) *Fluid transport in nanoporous materials.* Dordrecht, the Netherlands: Springer in cooperation with NATO Public Diplomacy Division. NATO science series. II, Mathematics, physics, and chemistry. v. 219. 1-4020-4380-5.
12. PETRYK, M.R., and D. M. MYKHALYK (2009) *Matematychnie modeliuвання adsorbtsiinoho nelineinoho masoperenosu v katalitychnyykh porystykh seredovyshchakh.* Visnyk TDTU im. I. Puliuia, 4, p.193-198.
13. VLASIUK, A. P., and V. V. ZHUKOVSKIY (2012) *Matematychnie modeliuвання vertykalnoi mihratsii radionuklidiv u katalitychnomu porystomu seredovyshchi.* Tez. XIV Mizhnar. nauk. konf. im. akademika M.Kravchuka, p.111.
14. SAMARSKIY, A. A. (1989) *Teoriya raznostnykh shem: Ucheb. posobie dlja vuzov po spec. "Prikl. matematika".* Moskva: Nauka. 9785020145764.
15. VLASIUK, A. P., O. P. OSTAPCHUK, and O. M. STEPANCHENKO (2005) *Monotonna riznytseva skhema dlia nelineinoho odnovymirnoho rivniannia parabolichnoho typu, shcho mistyt pershu pokhidnu.* Visnyk Kyivskoho universytetu. Ser. fiz.-mat. nauk., Vyp. 2., p.188.
16. DEMIDOVICH, B. P., MARON I. A., and SHUVALOVA Je. Z. (1967) *Chislennyye metody analiza:* Nauka.
17. EVGEN'EVICH, Sh.M. (2012) *Qt4.8. Professional'noe programmirovanie na C++.* Sankt-Peterburg: BHV-Peterburg. 9785977507363.

Надійшла до редколегії 30.10.2014