

<https://doi.org/10.15407/fmmit2026.42.145>

Задача адвекції-дифузії-абсорбції мікрочастинок у пористому шарі за дискретними граничними даними

Богдан Гера¹, Ольга Чернуха², Анастасія Чучвара³, Юрій Білушак⁴

¹д. т. н., професор, ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Наукова, 36, Львів, 79005, Україна, e-mail: gera-zen@ukr.net

²д. т. н., професор, ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Наукова, 36, Львів, 79005; Національний університет “Львівська політехніка, вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна, e-mail: cher@cmm.lviv.ua

³к. т. н., ст. досл., ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Наукова, 36, Львів, 79005, Україна, e-mail: dav@cmm.lviv.ua

⁴д. т. н., ст. досл., ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Наукова, 36, Львів, 79005; Національний університет “Львівська політехніка, вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна, e-mail: bil@cmm.lviv.ua

У роботі розглянуто задачу адвекції-дифузії-абсорбції мікрочастинок у пористому шарі за умов, коли на одній з поверхонь задано лише дискретні в часі значення концентрації. Такі дані є недостатніми для безпосередньої постановки коректної крайової задачі. Для реконструкції неперервної граничної умови запропоновано параметричне сімейство апроксимаційних функцій, побудоване на основі виразів типу розв'язків рівнянь адвекції-дифузії. Отримано аналітичний розв'язок одновимірної задачі адвекції-дифузії-абсорбції у шарі сталої товщини. Визначено просторово-часовий розподіл концентрації та густини абсорбованих мікрочастинок, а також сумарну масу накопичених домішок у шарі. Запропоновано підхід до оцінювання часу досягнення граничного рівня абсорбції, після якого модель з постійними коефіцієнтами може втрачати адекватність опису процесу. Проведено числовий аналіз похибок апроксимації та збіжності побудованого розв'язку.

Ключові слова: концентрація, мікрочастинка, пористе тіло, дифузія, адвекція, абсорбція, неповні дані, метод оптимізації

Вступ. Аналітичні розв'язки задач адвективно-дифузійного масоперенесення й надалі становлять значний науковий інтерес, оскільки дають змогу досліджувати властивості детермінованих і ймовірнісних взаємопов'язаних процесів перенесення мікрочастинок, а також визначати зумовлені ними характеристики пористого тіла, зокрема величину сорбції частинок, що проникають у нього. Таким чином, вони корисні для оцінювання та аналізу сценаріїв забруднення, дослідження впливу різних параметрів і процесів на перенесення домішкових та забруднювальних компонентів.

Формулювання та аналітичні й чисельні розв'язки задач, що описують процеси дифузії-адвекції з урахуванням сорбції, наведено в багатьох працях [1-3]. Більшість існуючих аналітичних розв'язків задач адвекції-дифузії, зокрема з урахуван-

ням процесів утворення та розпаду речовини (з джерелами та стоками речовини), стосуються напівнескінченних або нескінченних областей, тоді як розв'язки для скінченних областей переважно обмежуються одновимірними задачами.

Розв'язки одновимірних і двовимірних задач з адвективним перенесенням мікрочастинок в однорідних та неоднорідних чи складених областях отримані у багатьох роботах. Огляд ранніх робіт, дотичних до цього напрямку, наведено в [4]. У [5] використано перетворення Лапласа для отримання аналітичного розв'язку рівняння перенесення з реакцією розпадної речовини, де виникають члени ланцюга реакції розпаду першого порядку, і крім того додатково враховано одночасний рух різних взаємодіючих форм азоту, тобто описано адвективно-дисперсійне переміщення чотирьох видів компонент, що беруть участь у такій послідовній ланцюговій реакції.

У роботі [6] отримано формальний точний розв'язок лінійного рівняння адвекції-дифузії з постійними коефіцієнтами як для перехідних, так і для стаціонарних режимів. Запропонована методологія використовує заміну змінних у поєднанні з класичною версією методу узагальненого інтегрального перетворення.

У статті [7] представлено загальний метод розв'язування зв'язаних багатовимірних рівнянь перенесення, що супроводжуються реакціями, де речовини мають різні коефіцієнти затримки (такими як послідовні ланцюги розпаду або паралельні мережі). Запропонований метод може бути використаний для розв'язання задач з кінетичною взаємодією та різними факторами затримки. Метод використовує перетворення Лапласа та етапи лінійного перетворення. Методика апробована отриманням явного аналітичного розв'язку задачі перенесення з перетвореннями домішкових частинок, для ілюстрації розв'язані як одновимірні, так і двовимірні задачі.

Якщо дифузія і адвекція супроводжуються абсорбцією, осіданням мікрочастинок в тілі, його фізичні властивості можуть суттєво змінитися в окремих частинах чи й у всьому тілі, що впливає на проходження процесу і відображається в його моделюванні. Це також приводить до обмежень на застосування тієї чи іншої моделі опису залежно від загальної кількості абсорбованих мікрочастинок.

У роботі [8] сформульовано постановку задачі конвективної дифузії при фільтрації води в пористому середовищі за умов обмеженої сорбції. У рівнянні дифузії-конвекції сорбція описана нелінійними джерелами. Отримано розв'язок задачі з використанням функцій Гріна та проведено аналіз концентрації домішкових мікрочастинок, зокрема при досягненні граничних значень сорбції в окремих підобластях тіла.

Врахування залежності характеристик середовища від величини концентрації здійснюють шляхом введення змінних коефіцієнтів у відповідні рівняння та отримання розв'язків задач чисельними методами [9, 10].

Відповідні постановки задач адвекції-дифузії потребують конкретизації початкових і граничних умов. Проте наявні дані можуть бути неповними, наприклад задаватися лише на частині поверхні, тоді як на решті поверхні вони відсутні, або бути різномасштабними чи інтегральними в частині області тіла або

на його поверхні, тобто подаватися у вигляді, що не відповідає безпосередньо запису умов задачі [11-13]. У таких випадках формування даних для задання початкових і граничних умов відповідних задач математичної фізики може викликати труднощі. Унаслідок цього задачі можуть виявитися некоректними в сенсі неоднозначності розв'язку [11-13]. Для отримання єдиного розв'язку в таких випадках застосовують методи регуляризації та відповідні критерії вибору серед множини допустимих функцій [12, 13].

У роботі [14] представлено метод реконструкції граничної умови одновимірного рівняння адвекції-дифузії-реакції за допомогою спряженого рівняння. Підхід передбачає також автоматичний вибір оптимальної довжини кроку в методі градієнтного спуску. Отримані результати показали, що запропонована методика дає змогу ефективно відновлювати граничну умову та відповідну цільову функцію за порівняно невеликих обчислювальних витрат. При цьому збіжність алгоритму суттєво залежить від гладкості шуканої граничної умови: зі збільшенням її розривності задача реконструкції ускладнюється [14, 15].

Для відновлення невідомих граничних умов у задачах адвекції-дифузії широко застосовують методи оптимізації, в яких шукану функцію визначають як мінімізатор функціонала нев'язки між розрахунковими та експериментальними даними з урахуванням регуляризаційних доданків. Для розв'язування таких задач використовують методи градієнтного спуску, спряжених градієнтів, квазіньютонівські алгоритми та інші чисельні процедури оптимізації [14-16].

Вхідні дані можуть задаватися з певною точністю, тобто містити похибки. Крім того, забезпечення даними для запису граничних і початкових умов відповідних задач математичної фізики може викликати певні труднощі.

У даній роботі записана постановка задачі адвекції-дифузії мікрочастинок у пористому шарі, що потрапляють у нього через одну з поверхонь, а на іншій поверхні маємо лише дані в окремі моменти часу. Припускається, що абсорбція пропорційна концентрації мікрочастинок і приводить до їх поступового накопичення. Для постановки коректної задачі дискретні в часі дані апроксимовано з використанням параметричного сімейства функцій, що мають вигляд аналітичних розв'язків деяких рівнянь виду адвекції-дифузії. Побудовано наближений розв'язок поставленої задачі. Побудований наближений розв'язок використано для визначення густини абсорбованих мікрочастинок, а також для встановлення часу, коли їх загальна маса досягає заданої величини.

1. Формулювання задачі масоперенесення і абсорбції мікрочастинок та її зведення до початково-крайової

Розглянемо процес переміщення мікрочастинок, що з деякого моменту часу проникають через поверхню у початково вільний від цих частинок провідний шар постійної товщини з відомими характеристиками дифузії, адвекції та абсорбції. На протилежній поверхні шару маємо дискретні в часі значення концентрації мікрочастинок, що пройшли крізь шар і досягли цієї поверхні. Наявних даних недостатньо для постановки коректної початково-крайової задачі

Богдан Гера, Ольга Чернуха, Анастасія Чучвара, Юрій Білуцак
Задача адвекції-дифузії-абсорбції мікрочастинок у пористому шарі за дискретними граничними даними

адвекції-дифузії тому далі йдеться про постановку і отримання розв'язку, що відповідає наближенню функції концентрації мікрочастинок у шарі.

Рівняння для функції концентрації мікрочастинок у шарі запишемо у вигляді [4, 6]

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} - u \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} - \kappa C(x,t), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t < T, \quad (1)$$

тут позначено $C(x,t)$ залежну від координати x і часу t функцію масової концентрації мікрочастинок у середовищі їх перенесення, D – коефіцієнт дифузії, u – швидкість адвективного руху частинок, κ – коефіцієнт абсорбції. Через L позначена товщина шару, а T – час, протягом якого процеси можемо описувати рівнянням (1) без значної втрати властивостей шару.

На поверхні шару $x = 0$ маємо задану постійну концентрацію частинок

$$C(0,t) = C_0, \quad 0 < t < T, \quad (2)$$

а на поверхні $x = L$ задані значення концентрації в окремі моменти часу

$$C(L,t_i) = C_i, \quad i = \overline{1;I}. \quad (3)$$

У початковий момент часу $t = 0$ мігруючі частинки в тілі відсутні і записуємо однорідну початкову умову

$$C(x,0) = 0, \quad 0 < x < L. \quad (4)$$

Для постановки задачі визначення концентрації мікрочастинок $C(x,t)$, з використанням дискретних умов (3), спочатку отримаємо на поверхні $x = L$ наближення функції $C(L,t) = F(t)$. Для цього застосуємо апроксимацію $F(t)$, з використанням параметричного сімейства функцій [14, 16]

$$\Psi(t, \alpha) = \alpha_1 \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha_3}{\sqrt{t}} - \alpha_4 \sqrt{t}\right) + \alpha_2 \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha_3}{\sqrt{t}} + \alpha_4 \sqrt{t}\right) \quad (5)$$

з невідомими параметрами $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$. Параметри α_j ($j = 1, 2, 3, 4$) визначаємо такими, щоб наблизитися до заданих значень $c_i = C_i / C_0$ ($i = \overline{1;M}$) в сенсі мінімуму середньоквадратичного відхилення

$$S(\alpha) = \sum_{i=1}^I (c_i - \Psi(t_i, \alpha))^2 \quad (6)$$

за умов $\alpha_j > 0$. Тоді, прийнятна за таких припущень, функція $F(t)$ має вигляд

$$F(t) = C_0 \left[\tilde{\alpha}_1 \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{\tilde{\alpha}_3}{\sqrt{t}} - \tilde{\alpha}_4 \sqrt{t} \right) + \tilde{\alpha}_2 \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{\tilde{\alpha}_3}{\sqrt{t}} + \tilde{\alpha}_4 \sqrt{t} \right) \right], \quad (7)$$

де $\tilde{\alpha}_j$ визначені з умови

$$S(\tilde{\alpha}) = \min_{\alpha} \sum_{i=1}^I (c_i - \Psi(t_i, \alpha))^2. \quad (8)$$

Вибір параметричного сімейства функцій $\Psi(t, \alpha)$, котрі мають вигляд розв'язків рівняння адвекції-дифузії, дає можливість використовувати функцію $F(t)$, як на інтервалі часу де задаються $C(L, t_i)$, так і надалі до часу T . Тоді на границі $x = L$ замість (3) приймаємо умову

$$C(L, t) = F(t), \quad 0 < t < T \quad (F(0) = 0). \quad (9)$$

Таким чином отримали задачу визначення функції концентрації мікро-частинок у шарі з рівняння (1) за умов (2), (4), (9).

2. Розв'язок лінійної початково-крайової задачі визначення концентрації мікрочастинок в шарі

Застосуємо заміну функції $C(x, t)$ у рівнянні (1) та умовах (2),(4),(9) у вигляді [17]:

$$C(x, t) = \Theta(x, t) \exp \left(\frac{ux}{2D} \right). \quad (10)$$

Отримаємо рівняння для $\Theta(x, t)$ і запишемо наступну допоміжну задачу на визначення функції $\Theta(x, t)$:

$$\frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \Theta(x, t)}{\partial x^2} - \left(\frac{u^2}{4D} + \kappa \right) \Theta(x, t), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t < T, \quad (11)$$

$$\Theta(0, t) = C_0, \quad (t > 0), \quad (12)$$

$$\Theta(L, t) = F(t) \exp \left(-\frac{uL}{2D} \right), \quad (t > 0), \quad (13)$$

$$\Theta(x, 0) = 0, \quad (0 < x < L). \quad (14)$$

У рівнянні (11) відсутня перша похідна по x від $\Theta(x, t)$, що спрощує її розв'язання. Спочатку позначимо

$$\Theta(x, t) = \Phi(x, t) + C_0 \left(1 - \frac{x}{L} \right) + \frac{x}{L} F(t) \exp \left(-\frac{uL}{2D} \right). \quad (15)$$

Богдан Гера, Ольга Чернуха, Анастасія Чучвара, Юрій Білушак
Задача адвекції-дифузії-абсорбції мікрочастинок у пористому шарі за дискретними граничними даними

З умов (12), (13) випливає, що присутня тут функція $\Phi(x, t)$ на поверхнях $x = 0$ та $x = L$ приймає нульові значення. Підстановка $\Theta(x, t)$ у (11)-(14) дає еквівалентну до цієї задачу, але з однорідними граничними умовами. Функцію $\Phi(x, t)$ можемо визначити з рівняння

$$\frac{\partial \Phi(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \Phi(x, t)}{\partial x^2} - \left(\frac{u^2}{4D} + \kappa \right) \Phi(x, t) - \frac{x}{L} \frac{dF(t)}{dt} \exp\left(-\frac{uL}{2D}\right) - \left(\frac{u^2}{4D} + \kappa \right) \left(C_0 \left(1 - \frac{x}{L} \right) + \frac{x}{L} F(t) \exp\left(-\frac{uL}{2D}\right) \right), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t < T, \quad (16)$$

за умов

$$\Phi(0, t) = 0, \quad \Phi(L, t) = 0, \quad t > 0; \quad (17)$$

$$\Phi(x, 0) = -C_0 \left(1 - \frac{x}{L} \right), \quad 0 < x < L. \quad (18)$$

Умови (17) будуть виконані, якщо $\Phi(x, t)$ подамо у вигляді

$$\Phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(t) \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right). \quad (19)$$

Підставимо (19) у рівняння (16) і умову (18), розкладемо лінійну функцію $y = x/L$, що знаходиться у правій частині (16) і (18) на інтервалі $0 < x < L$ в ряд по $\sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right)$. Прирівняємо коефіцієнти при однакових n у лівій і правій частинах отриманих виразів. Після перетворень отримуємо для $A_n(t)$ звичайне диференціальне рівняння

$$\frac{dA_n(t)}{dt} = -s_n A_n(t) + a_n + \left(\frac{u^2}{4D} + \kappa \right) b_n F(t) + b_n \frac{dF(t)}{dt} \quad (20)$$

і початкову умову

$$A_n(0) = -\frac{2}{n\pi} C_0. \quad (21)$$

Тут уведені позначення

$$s_n = D \left(\frac{n\pi}{x_0} \right)^2 + \frac{u^2}{4D} + \kappa, \quad a_n = \frac{2}{n\pi} \left(\frac{u^2}{4D} + \kappa \right) C_0, \quad b_n = (-1)^n \frac{2}{n\pi} \exp\left(-\frac{uL}{2D}\right).$$

Розв'язок задачі (20), (21) запишемо у вигляді

$$A_n(t) = -\frac{2C_0}{n\pi} \exp(-s_n t) + \frac{a_n}{s_n} (1 - \exp(-s_n t)) + \left(\frac{u^2}{4D} + \kappa \right) b_n \int_0^t F(\tau) \exp(-s_n(t-\tau)) d\tau + b_n \int_0^t \frac{dF(\tau)}{d\tau} \exp(-s_n(t-\tau)) d\tau. \quad (22)$$

Враховуючи формули (10), (15), (19), (22) отримаємо формулу для функції $C(x, t)$ у наступному вигляді

$$C(x, t) = \exp\left(\frac{ux}{2D}\right) \left[\sum_{n=1}^{\infty} A_n(t) \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right) + C_0 \left(1 - \frac{x}{L}\right) + \frac{x}{L} F(t) \exp\left(-\frac{uL}{2D}\right) \right]. \quad (23)$$

Зауважимо, що присутня в (22), (23) функція $F(t)$ отримана при апроксимації дискретних значень C_i ($i = \overline{1; I}$) з умови (3). Похибки вхідних даних C_i частково компенсуються їх згладжуванням при апроксимації, але при цьому також присутні похибки самої апроксимації внаслідок застосування сімейства параметричних функцій (5). Це впливає на відповідність функції $F(t)$ розглядуваним процесам і формула (23) дає лише наближення шуканої функції концентрації мікрочастинок.

3. Визначення абсорбції мікрочастинок

Аналітичний розв'язок задачі про визначення функції концентрації мікрочастинок у пористому тілі можемо використати для визначення зміни в часі густини абсорбованих компонент. У прийнятій тут моделі процесу абсорбція пропорційна концентрації з коефіцієнтом κ . Тому накопичення з часом мікрочастинок в області шару визначаємо за формулою [8, 9]

$$\rho(x, t) = \kappa \int_0^t C(x, \tau) d\tau, \quad 0 < x < L, \quad 0 < t < T. \quad (24)$$

Підставимо $C(x, t)$ у (24) і отримаємо, що формула для функції густини абсорбованих частинок $\rho(x, t)$ має вигляд:

$$\rho(x, t) = \kappa \exp\left(\frac{ux}{2D}\right) \left[\sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t A_n(\tau) d\tau \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + C_0 t \left(1 - \frac{x}{L}\right) + \frac{x}{L} \exp\left(-\frac{uL}{2D}\right) \int_0^t F(\tau) d\tau \right]. \quad (25)$$

Враховуючи формулу (22) запишемо присутній тут інтеграл за часом від $A_n(\tau)$ у вигляді

$$\int_0^t A_n(\tau) d\tau = \frac{a_n}{s_n} t + \left(\frac{a_n}{s_n} + C_0 \frac{2}{n\pi} \right) \frac{1}{s_n} (\exp(-s_n t) - 1) + b_n \int_0^t F(\tau) d\tau +$$

$$+ b_n \left(\frac{u^2}{4D} + \kappa - s_n \right) \int_0^t \int_0^\tau F(\theta) \exp(-s_n(\tau - \theta)) d\theta d\tau, \quad (26)$$

що дає можливість обчислювати $\rho(x, t)$ за формулою (25).

За прийнятих припущень про пропорційне до концентрації накопичення домішок у шарі цей процес може тривати лише обмежений час, позначений раніше як T . У даному випадку вважаємо, що відомо, яка загальна маса домішок може бути засвоєна і при цьому процеси перенесення та абсорбції ще описуються рівнянням (1). Зміна в часі загальної їх маси, позначена $M(t)$, в усьому шарі $(0; L)$ визначається як

$$M(t) = \int_0^L \rho(x, t) dx, \quad (27)$$

що після підстановки $\rho(x, t)$ та інтегрування по x можемо записати у вигляді

$$M(t) = \kappa \frac{2D}{u} \left[C_0 t \left(\exp\left(\frac{uL}{2D}\right) - 1 \right) - \right.$$

$$\left. - \frac{2D}{uL} \left[\left(\frac{uL}{2D} - 1 \right) \exp\left(\frac{uL}{2D}\right) + 1 \right] \left[C_0 t - \exp\left(-\frac{uL}{2D}\right) \int_0^t F(\tau) d\tau \right] \right] +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n\pi}{L} \frac{\kappa}{\left(\frac{u}{2D}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2} \left(1 - (-1)^n \exp\left(\frac{uL}{2D}\right) \right) \int_0^t A_n(\tau) d\tau \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad (28)$$

Гранично допустиму величину домішок позначимо через M_* . Оскільки можливість абсорбції частинок у шарі без втрати його властивостей обмежена, то потрібно зважати на виконання для часу процесу абсорбції умову $M(t) \leq M_*$, де M_* вважається заданою величиною. Час T , коли $M(t)$ досягне граничного значення, знаходимо з розв'язку нелінійного рівняння

$$M(t) = M_* \quad (29)$$

Далі при $t > T$ прийнята в роботі модель, що приводить до рівняння з постійними коефіцієнтами, може виявитися не відповідною процесу адвекції та абсорбції мікрочастинок і у такому випадку незастосовна.

4. Наближення функцій концентрації мікрочастинок для обчислень

При проведенні обчислень повільно збіжного безмежного ряду у правій частині (23) маємо його замінити скінченним рядом. Таким чином для проведення обчислень функцію $C(x, t)$ заміняємо її наближенням

$$C_N(x, t) = \exp\left(\frac{ux}{2D}\right) \left[\sum_{n=1}^N A_n(t) \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right) + C_0 \left(1 - \frac{x}{L}\right) + \frac{x}{L} F(t) \exp\left(-\frac{uL}{2D}\right) \right] \quad (30)$$

зі скінченною кількістю доданків N замість безмежного ряду у (23). Вибір числа N залежатиме від умов та даних задачі і потребує обґрунтування. Для цього встановимо чи наближення розв'язку (30) задовольняє рівняння і умови задачі (1)-(4) із заданою точністю. Зауважимо, функція $C_N(x, t)$ задовольняє граничну умову (2), а умови (3) на границі $x = L$ можуть виконуються неточно, оскільки C_i не обов'язково дорівнює $F(t_i)$ і маємо їх відхилення $\delta_i = |C_i - F(t_i)|$, ($i = \overline{1; T}$). Величина δ_i показує різницю між апроксимаційною функцією $F(t)$ і заданими значеннями концентрації в окремі моменти часу і значення N на це не впливає. Величина N впливатиме на точність виконання рівняння (1) і початкової умови (4).

Для заданого N похибка виконання рівняння (1) у точках шару $(0; L)$ на часовому інтервалі $(0; T)$ оцінюється як

$$\Delta(x, t) = \left| \frac{\partial C_N(x, t)}{\partial t} - D \frac{\partial^2 C_N(x, t)}{\partial x^2} + u \frac{\partial C_N(x, t)}{\partial x} + \kappa C_N(x, t) \right|, \quad (31)$$

а для початкової умови (4)

$$\delta(x) = |C_N(x, 0)|. \quad (32)$$

Тоді можемо визначити при яких значеннях N максимальні похибки

$$\Delta_N = \max_{x, t} \Delta(x, t) \text{ при } 0 < x < L, \quad 0 < t < T. \quad (33)$$

та

$$\delta_N = \max_x \delta(x) \text{ при } 0 < x < L \quad (34)$$

не перевищують бажаних значень і використаємо його для $C_N(x, t)$.

5. Розрахунковий приклад

Для проведення тестових обчислень приймемо значення коефіцієнтів у рівнянні (1) $D = 0.09$, $u = 0.5$, $\kappa = 0.25$ при одиницях вимірювань для x – [м], для t – [год]. Товщина шару $L = 1$. Значення функції концентрації при $x = 0$ візьмемо $C_0 = 1$, а при $x = L$ - умовні значення $c_i = C_i / C_0$ у моменти часу t_i ($i = \overline{1; T}$)

Богдан Гера, Ольга Чернуха, Анастасія Чучвара, Юрій Білушак
Задача адвекції-дифузії-абсорбції мікрочастинок у пористому шарі за дискретними граничними даними

приведені у таблиці 1. Тут значення параметрів c_i задавались такими, щоб частинки поступали у шар через поверхню $x = 0$ і виходили з нього через поверхню $x = 1$, а не навпаки. Їх використаємо для обчислення апроксимаційних параметрів $\tilde{\alpha}_j$ у формулі (8). Отримали наступні значення $\tilde{\alpha}_1 = 0.316$, $\tilde{\alpha}_2 = 6.045$, $\tilde{\alpha}_3 = 1.449$, $\tilde{\alpha}_4 = 0.549$.

Тоді за формулою (7) отримаємо функцію зміни концентрації в часі $F(t)$ (рис. 1), котру використовуємо для визначення функції $C_N(x, t)$.

Таблиця 1

t_i (год)	c_i (кг/м ³)
0	0
0.30	0.01
0.50	0.02
1.00	0.06
1.30	0.15
1.50	0.24
2.00	0.30
2.80	0.40
3.50	0.45
3.90	0.48
4.10	0.52
4.60	0.55
5.00	0.57

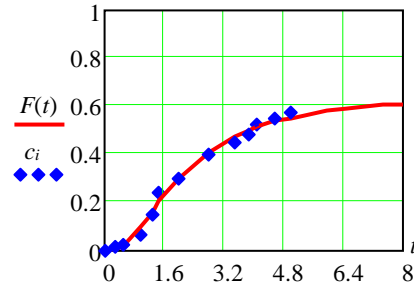


Рис. 1. Функція $F(t)$ в граничній умові (9). Координати синіх маркерів відповідають даним таблиці 1

Проведемо оцінку прийнятної для розрахунків величини N зважаючи на похибки виконання рівняння і початкової умови. У таблиці 2 для окремих значень суми ряду $N = 2^k$ ($k = \overline{4;8}$) приведено отримані згідно формул (33),(34) значення Δ_N та δ_N для прийнятих вище вхідних даних при $t = 5$ і в припущенні, що $t < T$.

Таблиця 2

N	Δ_N	δ_N
16	0.07508	0.10734
32	0.03843	0.05502
64	0.01944	0.02786
128	0.00952	0.01365
256	0.00482	0.00693

Згідно з таблицею 2 спостерігається, що при збільшенні вдвічі кількості доданків ряду N похибки виконання рівняння і початкової умови зменшуються практично також вдвічі. Для оцінки значення N у даному випадку не обов'язково обчислювати усю таблицю, а скористатися оціночними значеннями похибок і співставити їх допустимими.

Прийmemo, що $N=64$ задовольняє наші вимоги і надалі вважатимемо, що в усіх формулах де присутня функція $C(x,t)$ вона замінюється на $C_N(x,t)$ і обчислення проводяться для скінченної кількості членів ряду. Проведемо обчислення $\rho(x,t)$ з N членами ряду у формулі (25). Обчислення інтегралів, що входять у (25) і включають функцію $F(t)$, проводимо чисельно (зокрема, з використанням формули Сімсона [18]).

На рис. 2 криві зміни функції $\rho(x,t)$ відповідають окремим значенням $x = (0.2, 0.5, 0.8)$. Густина домішок зростає при наближенні до поверхні $x = 0$. Саме тут з часом вона може досягнути значення ρ_* , коли почнеться насичення домішками і абсорбція у цій області припиниться. Такі рівні густини домішкових частинок тут не розглядаємо, хоча можна оцінити час, коли $\rho(0,t) = \rho_*$.

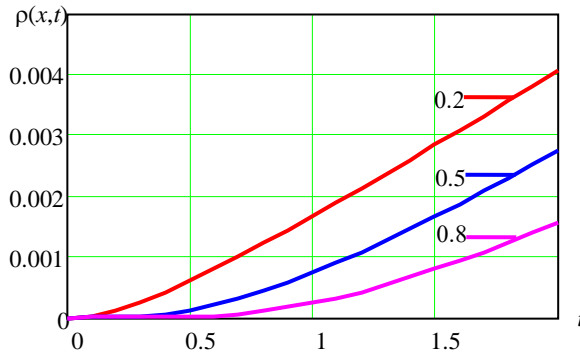


Рис. 2. Графіки функції густини розподілу сорбованих частинок обчислені за формулою (25) Криві позначені відповідно $x = 0.2, 0.5, 0.8$

На рис. 3 наведено графік функції $M(t)$, обчисленої за формулою (28) з $N=64$ членами ряду.



Рис. 3. Зміна в часі загальної величини сорбованих частинок в області шару обчислена за формулою (28)

Графік $M(t)$ показує кількісне накопичення частинок у шарі. Тут можемо передбачити, чи досягнуто граничне значення маси домішки.

Для прикладу візьмемо, що граничне допустиме значення $M_* = 0.1$. На графіку значення $M(t)$ менші цієї величини. У межах проміжку часу, на якому задані умови (3), функція не досягла граничного рівня. Проте час, коли вона досягне $M_* = 0.1$ знайдемо з розв'язку рівняння (29), тобто з рівняння $M_N(t) = 0.1$. У даному випадку отримаємо, що $T = 43.92683$ год. Це значення можемо приймати до уваги, якщо вірне припущення, що апроксимаційна функція $F(t)$ прийнятна для граничної умови (9) до моменту часу T .

Висновки. Параметричне сімейство функцій застосоване для апроксимації дискретних часових даних на поверхні шару дозволяє отримувати функцію концентрації мікрочастинок частинки у пористому шарі із задачі адвекції-дифузії не лише на інтервалі часу вимірювань, а і далі поза цим інтервалом. Це дає можливість отримати замкнутий розв'язок задачі з використанням відновленої функції концентрації мікрочастинок на поверхні, який можна використати для аналізу їх абсорбції в матрицю тіла, оцінювати час тривалості процесу до досягнення насичення.

Запропонований підхід може бути використаний у задачах масоперенесення за неповних або дискретних експериментальних даних. Отримані результати створюють основу для подальшого узагальнення моделей на випадок змінних коефіцієнтів перенесення та нелінійної абсорбції.

Література

- [1] *Jha B.K., Yusuf T.S., Singh J.* Analytical solutions of advection-dispersion-reaction equation with time-dependent boundary conditions // *MethodsX*. – 2021. – Vol. 8. – Article 101489. – 12 p. DOI: 10.1016/j.mex.2021.101489.
- [2] *Chen J.-S., Liu C.-W., Liang C.-P.* Effects of the injection radius and varying velocity on solute transport in a finite porous medium with radial geometry // *Journal of Hydrology*. – 2022. – Vol. 610. – Article 127873. – 14 p. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2022.127873.
- [3] *Ali M.R., Islam M.S., Akter S.* Solving one- and two-dimensional advection-diffusion type initial boundary value problems with a wavelet hybrid scheme // *Boundary Value Problems*. – 2025. – Vol. 2025. – Article 23. – 27 p. DOI: 10.1186/s13661-025-02023-9.
- [4] *van Genuchten M.Th., Alves W.J.* Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation. – U.S. Department of Agriculture, Technical Bulletin No. 1661, 1982. – 151 p.
- [5] *van Genuchten M.Th.* Convective-dispersive transport of solutes involved in sequential first-order decay reactions // *Comput. Geosci*. – 1985. – Vol. 11, No. 2. – P. 129-147.
- [6] *Pérez Guerrero J.S., Pimentel L.C.G., Skaggs T.H., van Genuchten M.Th.* Analytical solution of the advection-diffusion transport equation using a change-of-variable and integral transform technique // *Int. Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2009. – Vol. 52. – P. 3297-3304.
- [7] *Quezada C.R., Clement T.P., Lee K.-K.* Generalized solution to multi-dimensional multi-species transport equations coupled with a first-order reaction network involving distinct retardation factors // *Advances in Water Resources*. – 2004. – Vol. 27, No. 5. – P. 507-520.
- [8] *Chaplya Y., Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A. et al.* Advanced approach to mathematical modeling of the impurities diffusion in the process of water softening with limited particles sorption // *Sci. Rep*. – 2025. – Vol. 15. – Article 5269. – DOI: 10.1038/s41598-025-88735-5.

- [9] Erfani H., Karadimitriou N., Nissan A., Walczak M.S., An S., Berkowitz B., Niasar V. Process-Dependent Solute Transport in Porous Media // *Transport in Porous Media*. – 2021. – Vol. 140, No. 2. – P. 421–435. DOI: 10.1007/s11242-021-01655-6.
- [10] Gouze P., Puycuiraud A., Porcher T., Dentz M. Modeling Longitudinal Dispersion in Variable Porosity Porous Media: Control of Velocity Distribution and Microstructures // *Frontiers in Water*. – 2021. – Vol. 3. – Article 766338. DOI: 10.3389/frwa.2021.766338.
- [11] Burman E., Nechita M., Oksanen L. A stabilized finite element method for inverse problems subject to the convection–diffusion equation. II: Convection-dominated regime // *Numerische Mathematik*. – 2022. – Vol. 150, No. 4. – P. 769–801. DOI: 10.1007/s00211-022-01268-1.
- [12] Mondal S., Nair M. Thamban. On Regularization of a Source Identification Problem in a Parabolic PDE and Its Finite Dimensional Analysis // *Journal of Partial Differential Equations*. – 2021. – Vol. 34, No. 3. – P. 240–257. DOI: 10.4208/jpde.v34.n3.3.
- [13] Yang F., Wang Q.-C., Li X.-X. Unknown source identification problem for space-time fractional diffusion equation: Optimal error bound analysis and regularization method // *Inverse Problems in Science and Engineering*. – 2021. – Vol. 29, No. 12. – P. 2040–2084. DOI: 10.1080/17415977.2021.1900841.
- [14] Troya C., Gordillo G., Vivas A. Reconstruction of the Boundary Condition of the Convection–Diffusion–Reaction Equation with Automatic Selection of the Step Length // *Emerging Research in Intelligent Systems: Proceedings of the CIT 2023, Volume 1*. – Springer, 2024. – P. 91–104. DOI: 10.1007/978-3-031-58521-3_7.
- [15] Yang F., Wang Q.-C., Li X.-X. Unknown Source Identification Problem for Space-Time Fractional Diffusion Equation: Optimal Error Bound Analysis and Regularization Method // *Inverse Problems in Science and Engineering*. – 2021. – Vol. 29, No. 12. – P. 2040–2084. DOI: 10.1080/17415977.2021.1900841.
- [16] Jin B., Lu X., Zhou Z. An optimization-based approach for inverse problems governed by partial differential equations // *Inverse Problems*. – 2022. – Vol. 38, No. 11. – Article 115008. DOI: 10.1088/1361-6420/ac8d52.
- [17] Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. – Львів: СПОЛЮМ, 2003. – 128 с.
- [18] Kunz S. *Numerical Analysis*. – London: McGraw-Hill Book Company, 1957. – 381 p.

Advection–diffusion–absorption problem for microparticles in a porous layer with discrete boundary data

Bohdan Gera, Olha Chernukha, Anastasiia Chuchvara, Yurii Bilushchak

The paper considers an advection–diffusion–absorption problem for microparticles in a porous layer under conditions where only discrete-in-time concentration values are specified on one of its boundaries. Such data are insufficient for the direct formulation of a well-posed initial-boundary value problem. To reconstruct a continuous boundary condition, a parametric family of approximation functions based on expressions typical of analytical solutions to advection–diffusion equations is proposed. An analytical solution of the one-dimensional advection–diffusion–absorption problem in a layer of constant thickness is obtained. The spatial-temporal distributions of microparticle concentration and their absorbed density, as well as the total accumulated mass of absorbed particles in the layer, are determined. An approach for estimating the time required to reach a critical absorption level, after which the constant-coefficient model may lose adequacy for describing the process, is proposed. Numerical analysis of approximation errors and convergence of the constructed solution is carried out.

Отримано 07.05.26