

## ЕКОЛОГІЧНІ ПРОБЛЕМИ ЯК МОДЕЛІ КВАЗІОДНОВИМІРНИХ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ

*Аварії під час морських перевезень та незаплановані викиди токсичних речовин традиційно перебувають у центрі уваги екологів та власників торгових суден. Катастрофи з розливом нафтопродуктів завдають значної шкоди довкіллю та вносять довгостроковий негативний фактор у розвиток біоти. Також відомо, що відпрацьовану токсичну речовину захоронюють у контейнерах підвищеної міцності на морському дні. Та все ж великий час їх перебування в морському середовищі (50–70 років) призводить до окислення та руйнування оболонки, спричиняючи виникнення тріщин, через які речовина просочується у воду. В роботі здійснена комп'ютерна симуляція поширення викидів речовин у морській воді, розглянуто відповідні моделі як квазіодновимірні задачі дифузії. Використавши центральну точкову симетрію, функція концентрації речовини редукувалась до залежності від однієї просторової змінної, що дало змогу звести розглядувану задачу до вирішення просторово одновимірного диференціального рівняння в частинних похідних з відповідним оператором Лапласа в правій частині. Базовий спосіб розгляду задач – метод скінченних різниць другого порядку точності, засіб розрахунків – відкрита система комп'ютерної алгебри CAS Maxima. В першій задачі розглядається викид токсичної речовини із затопленого контейнера на дні моря, що змодельовано крайовою задачею Робіна (третья крайова задача). Наявність постійного джерела дифундуючої домішки на початку проміжку числового інтегрування дала змогу використати прямий двокроковий метод розрахунку; результатом обчислень є часовий розподіл концентрації на поверхні води над контейнером та в її околі протягом однієї доби. В другій задачі розглянуто вилив рідкої речовини поблизу мілкого берега півкруглої форми, що змодельовано крайовою задачею Неймана (друга крайова задача). Нульовий потік домішки на обох краях проміжка інтегрування обумовив методом розв'язання модифіковану непряму схему Кранка-Ніколсона; результатом обчислень є просторовий розподіл граничної концентрації домішки вздовж берегової лінії протягом однієї доби.*

*Ключові слова: екологічні проблеми, числовий розрахунок, метод скінченних різниць, крайова задача, задача Робіна, задача Неймана, CAS Maxima.*

## ECOLOGICAL DISASTERS AS A QUASI-ONE-DIMENSIONAL DIFFUSION PROBLEM

*Accidents during maritime transportation and unplanned emissions of toxic substances have traditionally been the focus of ecologists and merchant ship owners. Oil spill disasters cause significant damage to the environment and have a long-term negative impact on the development of biota. It is also known that the spent toxic substance is buried in high-strength containers on the seabed. However, their long stay in the marine environment (50–70 years) leads to thinning and destruction of the shell, causing cracks through which the substance seeps into the water. In this paper, we have investigated a computer simulation of the substance emissions propagation in seawater, by considering the corresponding models as quasi-one-dimensional diffusion problems. Using central point symmetry, the substance concentration function was reduced to dependence on a single spatial variable, which allowed us to reduce the problem under consideration the solution of one-dimensional partial differential equation with the corresponding Laplace operator on the right-hand side. The basic method for solving problems is the method of finite differences by the second order accuracy, and the calculation tool is open computer algebra system CAS Maxima. The first problem considers the release of a toxic substance from a flooded container at the bottom of the sea, which is modeled by Robin boundary value problem (boundary problem of 3d kind). The presence of a constant source of diffusing impurity at the beginning of numerical integration interval made it possible to use a direct two-step calculation method; the result of the calculations is the time distribution of the concentration on the water surface above the container and in its vicinity for 24 hours. In the second problem considers a liquid substance spill near a shallow bank with a semi-circle form, which is modeled by the Neumann boundary value problem (boundary problem of 2nd kind). Zero impurity flux at both edges of the integration interval led to pick as solution the modified indirect Crank-Nicholson scheme; the result of the calculations is the spatial distribution of the maximum concentration of impurity along the coastline during 24 hours.*

*Key words: ecological disasters, numerical calculation, finite difference method, boundary value problem, Robin's problem, Neumann's problem, CAS Maxima.*

### Постановка проблеми

Морські перевезення рідких речовин у контейнерах завжди супроводжувались посиленними заходами безпеки для уникнення аварій, причому перш за все увага приділяється збереженню природного середовища. Фактично всі транспортовані речовини є токсичними та згубними для біологічних організмів, зокрема нафта та нафтопродукти (пальне, фарби, розчинники тощо). Тому розрахунку наслідків екологічних катастроф приділяється значний інтерес для всіх учасників цього ринку, що обумовлює актуальність вибраного напрямку досліджень.

### Аналіз останніх досліджень та публікацій

У роботах [2–4] авторами моделюються катастрофи найбільших нафтових виливів в різних точках планети: аварія на танкері British Petroleum у Мексиканській затоці в квітні 2010 року та катастрофа танкера Hebei Spirit у Жовтому морі в грудні 2007 року. В результаті виливу нафти відбулося забруднення значної площі океанської поверхні. У другому випадку нафтову пляму вітром та приливними течіями віднесло до берега, що спричинило ще більші ушкодження біоценозу. Розрахунки здійснювались у середовищі MATLAB вбудованим засобом числових методів `pdepe`.

Робота [5] присвячена спорідненій до дифузійних процесів задачі – числовому розрахунку поширення тепла у сферичних координатах під час моделювання нагрівання круглих деталей вітрогенераторів. Використовувалось п'ятиточкове наближення у розкладі оператора Лапласа з четвертим порядком точності.

### Мета дослідження

Ми змодельуємо деякі екологічні проблеми, розглянувши їх як крайові задачі математичної фізики. Задачі з центральною симетрією традиційно можна звести до одновимірних випадків, виключивши з розгляду кутові компоненти, що значно спрощує розрахунок. При цьому з програмної точки зору оперувати необхідно або з одновимірними списками (для крайових умов першого та третього родів), або з двовимірними масивами (крайові умови другого роду).

Розрахунки будемо провадити у системі комп'ютерної алгебри CAS `Mathima`, оскільки вона надає зручний та потужний інструментарій для моделювання фізичних процесів [6]. Додатковою метою дослідження є демонстрація можливостей цього програмного середовища, які в певних задачах не поступаються таким відомим розрахунковим пакетам, як `MATLAB` чи `Maple`, залишаючись при цьому вільним, кросплатформним та безкоштовним застосунком.

### Виклад основного матеріалу дослідження

Повне рівняння дифузії має такий вигляд

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = \operatorname{div}(D(\vec{r}) \cdot \operatorname{grad} u(\vec{r}, t)) + G(\vec{r}, t),$$

де  $u(\vec{r}, t)$  – значення концентрації дифундуючої речовини в даній точці середовища в заданий момент часу;  $D(\vec{r})$  – коефіцієнт дифузії;  $G(\vec{r}, t)$  – зміна концентрації домішки, викликана зовнішніми джерелами. Будемо вважати середовище вільним від зовнішніх джерел, тому приймаємо  $G(\vec{r}, t) = 0$ . Загалом  $D(\vec{r})$  може залежати від точки простору внаслідок неоднорідності структури середовища, однак для стабільних умов (перш за все сталості температури та густини) його можна вважати незмінним.

В одновимірному випадку за сталості  $D$  рівняння набуває такого вигляду:

$$u_t(r, t) = D \nabla^2 u(r, t).$$

Для його однозначного вирішення необхідно задати початкові та крайові умови, які для кожної задачі матимуть окремий вигляд. За числового розв’язання ми користатимемось методом скінченних різниць, розбивши відповідні часові та просторові проміжки інтегрування на дискретні відрізки довжини  $s$  для часу та довжини  $h$  для простору. При цьому похідні у дискретизованому рівнянні заміняться на різницеві відношення [1]:

$$u_t(r_i, t_k) = \frac{1}{s}(u_{i,k+1} - u_{i,k});$$

$$u_r = \frac{1}{h}(u_{i+1,k} - u_{i,k}); u_{rr}(r_i, t_k) = \frac{1}{h^2}(u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}).$$

Тут  $u_{i,k} = u(r_i, t_k)$  тощо, індекс  $i$  відповідає за просторову змінну, індекс  $k$  за часову.

**Задача 1.** На дно моря глибиною  $R = 50$  м скинули контейнер розміром  $r_0 = 2.5$  м з відпрацьованою речовиною. Згодом внаслідок процесів окислення агресивним солоним середовищем з контейнера стався викид токсичної речовини. Коефіцієнт дифузії речовини у воді  $D = 0,4 \text{ м}^2 / \text{хв}$ . Розрахувати еволюцію розподілу концентрації домішки у воді протягом першої доби. Визначити час, протягом якого концентрація домішки буде становити 0,1% на морській поверхні.

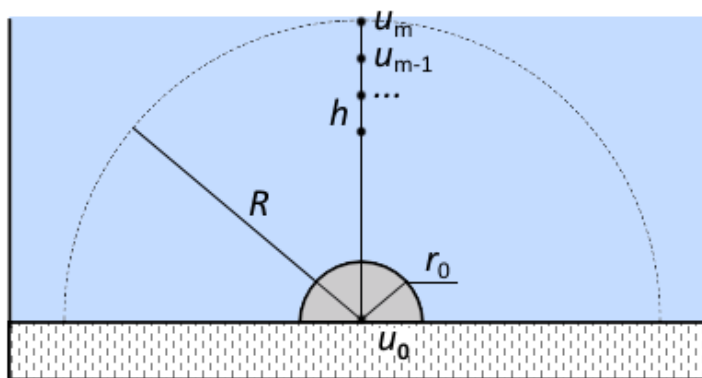


Рис. 1. Геометрична модель Задачі 1

### Математична модель

Морська товща створює доволі вдале ізотропне середовище: відсутність підводних течій та сталість температури обумовлюють можливість моделювання задачі як поширення речовини у верхній півпростір з центральносиметричною симетрією. Коефіцієнт дифузії достатньо сильно залежить від температури (згідно з експериментальними даними  $D \sim T^{1.53}$  [7]), тому та обставина, що від сонця нагрівається приблизно 2 м верхнього прошарку, дає змогу вважати  $D$  сталим на всьому відрізку інтегрування.

Будемо вважати контейнер півсферичним з радіусом  $r_0$  для збереження симетрії. Звідси маємо, що за  $r \leq r_0$  концентрація домішки завжди дорівнює  $A_0 = 100\%$ , оскільки приймається, що за час розгляду задачі (1 доба) речовина постійно виходить із контейнера. Обговоримо крайові умови. На початку проміжку інтегрування у центрі координат  $r = 0$  отримаємо  $u = 100\%$ . Кінцем проміжку ми виберемо глибину занурення  $R$ . Оскільки перш за все нас буде цікавити концентрація речовини над контейнером, а молекули домішки не можуть вийти зовні водного шару, кінцевою умовою буде нульовий потік функції  $u$  за  $r = R$ .

Отже, маємо задачу Робіна (крайова задача третього роду) для ДРЧП: розв’язати рівняння дифузії:

$$u_t(r, t) = D \nabla^2 u(r, t)$$

з початковими та крайовими умовами:

$$u(r, 0) = F(r) = \begin{cases} 100, \text{ при } 0 \leq r \leq r_0 \\ 0, \text{ при } r_0 < r \leq R \end{cases}; u(r, t)|_{r=0} = 100; \left. \frac{\partial u(r, t)}{\partial r} \right|_{r=R} = 0.$$

Задання значення функції на початку проміжку інтегрування дає змогу використати прямий двокроковий метод, котрий полягає у встановленні величини функції  $u$  в наступний момент часу  $k + 1$  через її значення в попередній момент  $k$ . Розіб'ємо інтервали  $R = 50$  м та  $S = 1440$  хв на  $m$  та  $n$  частин відповідно. Тоді довжина просторового відрізу буде  $h = R / m$ , кількість вузлів –  $m + 1$ ; довжина часового відрізу буде  $s = S / n$ , кількість вузлів –  $n + 1$ .

Радіальна частина оператора Лапласа в сферичних координатах:  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}$ . Оскільки перша похідна пов'язує вузли  $i + 1$  та  $i$ , для  $r$  біля цієї похідної ми виберемо середнє значення між цими вузлами:

$$r = \frac{r_{i+1} + r_i}{2}, \text{ звідки } \frac{1}{r} = \frac{2}{r_{i+1} + r_i}.$$

Отже, можемо записати дискретизоване рівняння дифузії:

$$\frac{1}{s} (u_{i,k+1} - u_{i,k}) = D \left( \frac{1}{h^2} (u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}) + \frac{4}{r_{i+1} + r_i} \frac{1}{h} (u_{i+1,k} - u_{i,k}) \right).$$

Звідси, позначивши  $\lambda = \frac{Ds}{h^2}$ , отримаємо базове співвідношення для  $u_{i,k+1}$ :

$$u_{i,k+1} = \lambda \left( u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k} + \frac{4h}{r_{i+1} + r_i} (u_{i+1,k} - u_{i,k}) \right) + u_{i,k}.$$

Початкова та крайові умови в дискретизованому вигляді:

$$u_{i,0} = F_i; u_{0,k} = 100; u_{m,k} = u_{m-1,k}.$$

Для збереження стійкості необхідне виконання умови  $\lambda < 0.5$ . Така обставина обумовлює відносну стійкість цієї схеми і накладає обмеження на число вузлових точок: вибравши значення  $m$ , для  $n$  вже неможливо вибрати кількість, більшу за певне значення.

### Результат роботи програми

Запрограмуємо задачу у CAS Maxima. Вносимо початкові дані, вибравши  $m = 100, n = 5000$ ; перевіряємо умову стійкості для  $\lambda$  та знаходимо  $m_0$  – кількість проміжків, що припадають на контейнер.

```
(%i5)R:50$ S:1440$ D:0.4$ r0:2.5$ A0:100$
(%i7)m:100$ n:5000$
(%i11)h:R/m$ s:S/n$ m0:floor(r0/h);
(m0) 5
```

```
(%i12)λ:D*s/h^2,numer;
(λ)0.4608
```

Записуємо кускову функцію початкового розподілу.

```
(%i15) F(r):=if r<=r0 then A0 else 0$
```

Створюємо масиви вузлових точок  $R1[i]$  і  $T[k]$  та основний масив  $u[i,k]$  шуканої функції.

```
%i16) for i:1 thru m do
arraymake(R1, [i]), R1[0]:0,
R1[i]:R1[i-1]+h);
(%o16)done
(%i17)for k:1 thru n do
(arraymake(T, [k]), T[0]:0,
T[k]:T[k-1]+s);
(%o17)done
%i18)for i:0 thru m do
for k:0 thru n do
(arraymake(u, [i,k]));
(%o18)done
```

Вносимо у створені масиви початкову та крайову умову лівої межі проміжка.

```
(%i19)for i:0 thru m do
(u[i,0]:F(R1[i]), u[i,1]:F(R1[i]));
(%o19)done
(%i20)for k:0 thru n do
for j:0 thru m0 do
(u[j,k]:A0);
(%o20)done
```

Записуємо базове рівняння, додавши до нього праву крайову умову  $u_{m,k} = u_{m-1,k}$ , та запускаємо цикл на виконання.

```
(%i21)for k:1 thru n do
for i:m0+1 thru m-1 do
(u[i,k+1]:λ*(u[i+1,k]-2*u[i,k]+u[i-1,k])+
(4*h/(R1[i+1]+R1[i]))*(u[i+1,k]-u[i,k]))+u[i,k],
u[m,k]:u[m-1,k]);
(%o21)done
```

Обчислення завершені. Відповідні значення концентрації для вузла  $(i,k)$ , які відіграють роль координат, містяться у масиві  $u[i,k]$ . Для його графічного опрацювання перетворимо масив на функцію округленням змінних до цілого та побудуємо її графік (рис. 2).

```
(%i22)G(r,t):=float(u[round(r),round(t)])$
(%i23)plot3d(G(r,t),[r,0,m],[t,0,n],
[zlabel,"u"],[grid,50,50],
[gnuplot_preamble,"reset session, replot"])$
```

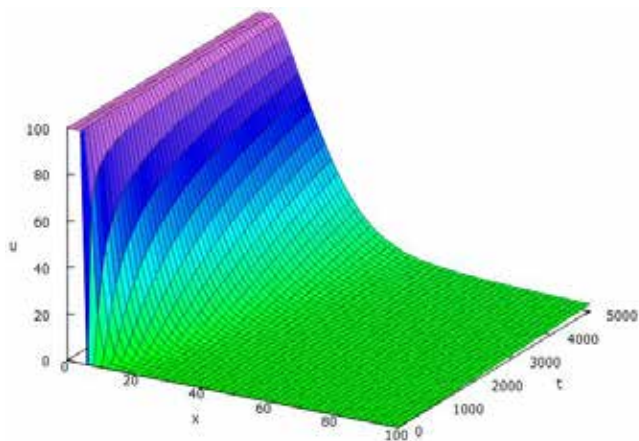


Рис. 2. Просторово-часова поверхня розподілу концентрації

Графік можна обертати, наближуючи будь-які його частини. Як видно, перші 5 вузлових проміжків набувають значення 100%, це концентрація домішки у контейнері. На кінцевих вузлових точках чітко видно підняття поверхні концентрації від нульового значення, отже, на поверхні води буде відмінна від нуля домішка. Висота підняття залежатиме від коефіцієнта дифузії  $D$  та часу, вибраного для симуляції. Отримана поверхня є розподілом речовини в напівсфері радіуса  $R$ , і кінцеві її значення достовірно моделюють поверхневу концентрацію у верхній точці над контейнером та її околі.

Розглянемо питання граничної концентрації на поверхні води. Щоб дослідити часову еволюцію розповсюдження домішки, побудуємо лінії рівнів поверхні концентрації для кількох значень  $u(r,t)$  (рис. 3а). Особливо нас будуть цікавити значення 0–1% на кінцевих точках біля поверхні води, тому побудуємо лінії рівнів цих значень окремо (рис. 3б).

```
(%i25)plot2d([contour,G(r,t)],
[r,0,m],[t,0,n],[style,[lines,1.5]],
[levels,100,75,50,25,10,3,1,0.5],
[gnuplot_preamble, "reset session, replot"]);
```

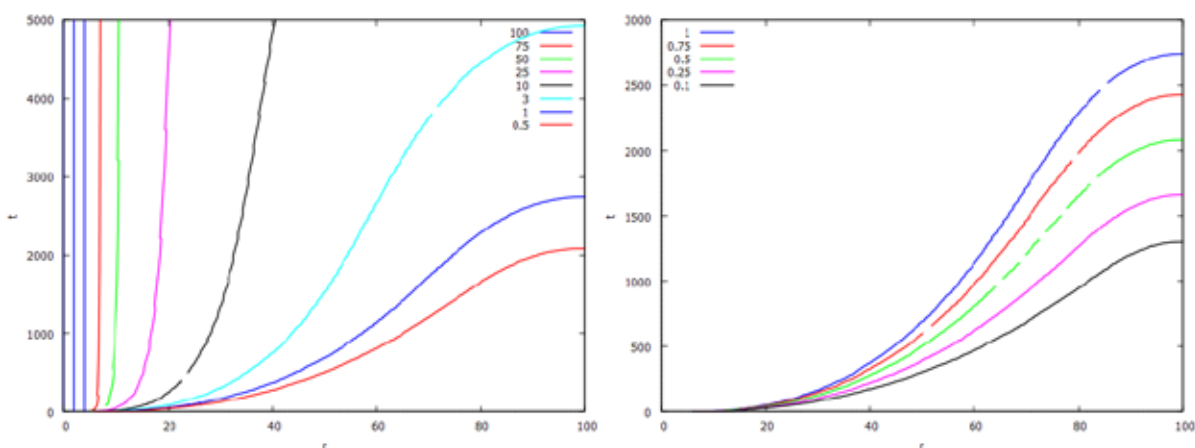


Рис. 3. Лінії рівнів поверхні концентрації для значень 0-100% (а) та значень 0–1% (б)

З побудованих графіків можна відзначити: на поверхні води гранична концентрація 0,1% досягнеться в момент часу  $t = 1300 \cdot s = 374.4 \text{ хв} \approx 6 \text{ год } 15 \text{ хв}$  після початку викиду. Загалом на

поверхні води через одну добу концентрація речовини в околі затоплення контейнера буде становити 2–3%.

**Задача 2.** Неподалік берега, що має півкруглу форму, на міліні на відстані  $R = 100$  м відбувся вилів речовини з контейнера радіусом  $r_0 = 4$  м, коефіцієнт дифузії речовини  $D = 0.2 \text{ м}^2 / \text{хв}$ . Розрахувати еволюцію розподілу концентрації домішки поблизу берега протягом доби. Вважаючи гранично допустиму концентрацію домішки 0,1%, визначити безпечні ділянки водойми.

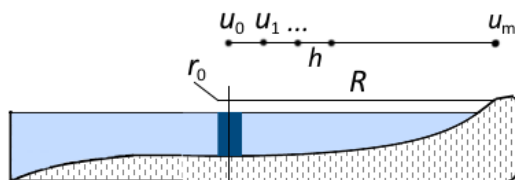


Рис. 4. Геометрична модель Задачі 2

### Математична модель

Мілкість водойми означає, що її глибина менша за розміри контейнера. За виконання цієї вимоги молекули речовини будуть розповсюджуватись у двох вимірах вздовж радіальних напрямів, тож, враховуючи ізотропність середовища та запровадивши полярну систему координат, можна вважати функцію концентрації  $u(r, t)$  залежною від однієї просторової координати. Зауважимо, що модель буде описувати поширення речовини в півплощині поблизу берега, тоді як в іншій півплощині, де глибина зростає, потрібно буде враховувати тривимірність задачі.

З'ясуємо початкові та крайові умови задачі. В нульовий момент часу концентрація дорівнює 100% за  $0 \leq r \leq r_0$  та 0% за  $r_0 < r \leq R$ . Молекули речовини не можуть вийти за берегову лінію, отже, потік функції за  $r = R$  рівний нулю. У центрі координат постійне джерело речовини відсутнє, адже вся вона вже вилилась, отже, потік функції за  $r = 0$  теж рівний нулю. Як бачимо, цією умовою Задача 2 відрізняється від умов Задачі 1, де було наявне стале джерело домішки.

Маємо задачу Неймана (крайова задача другого роду) для ДРЧП: розв'язати рівняння дифузії:

$$u_t(r, t) = D \nabla^2 u(r, t)$$

з початковими та крайовими умовами:

$$u(r, 0) = F(r) = \begin{cases} 100, \text{ при } 0 \leq r \leq r_0, \\ 0, \text{ при } r_0 < r \leq R \end{cases}; \left. \frac{\partial u(r, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0; \left. \frac{\partial u(r, t)}{\partial r} \right|_{r=R} = 0.$$

Задання на обох краях інтервалу інтегрування потоку функції замість самої функції унеможливорює застосування прямого методу обчислення, застосованого раніше. В дискретизованому вигляді задачу Неймана можна вирішити лише за допомогою розв'язання системи рівнянь, котра записується для кожного часового вузла. Тобто необхідно розв'язати  $n$  рівнянь для  $m + 1$  змінних (перше рівняння вже розв'язане:  $u(r, 0) = F(r)$ ).

Будемо здійснювати розгляд задачі за допомогою модифікованої схеми Кранка-Ніколсона [6]. Здійснимо дискретизацію інтервалів інтегрування, розбивши часовий відрізок на  $n$  відрізків, а просторовий – на  $m$  відрізків. Тоді вузлових точок буде  $n + 1$  та  $m + 1$  відповідно, а кроки інтегрування:  $s = S / n$ ,  $h = R / m$ , де  $R = 100$  м,  $S = 1440$  хв. Оскільки ліва частина рівняння





Компоненти матриць  $A$  та  $B$  для внутрішніх вузлів з номерами  $1, 2, \dots, m-1$  виписуються з базового співвідношення, однак для номерів  $0$  та  $m$  їх необхідно шукати окремо, використовуючи задані крайові умови.

Розглянемо вузол  $i = 0$ . Тоді, запровадивши фіктивний вузол  $i = -1$ , можемо записати:

$$u_r(0, t) = \frac{1}{h}(u_{0,k} - u_{-1,k}) = 0; u_{0,k} = u_{-1,k}; u_{0,k+1} = u_{-1,k+1}.$$

Звідси під час підстановки у базове рівняння, маємо:

$$-\lambda \left(1 + \frac{2h}{r_1 + r_0}\right) u_{1,k+1} + \left(2 + \lambda + \frac{2\lambda h}{r_1 + r_0}\right) u_{0,k+1} = \lambda \left(1 + \frac{2h}{r_1 + r_0}\right) u_{1,k} + \left(2 - \lambda - \frac{2\lambda h}{r_1 + r_0}\right) u_{0,k}$$

Отримані множники при  $u$  є послідовно виразами для  $c_0, b_0, f_0, e_0$ .

Тепер розглянемо вузол  $i = m$ . Тоді, запровадивши фіктивний вузол  $i = m+1$ , маємо:

$$u_r(R, t) = \frac{1}{h}(u_{m+1,k} - u_{m,k}) = 0; u_{m+1,k} = u_{m,k}; u_{m+1,k+1} = u_{m,k+1}.$$

Звідси під час підстановки у базове рівняння:

$$(2 + \lambda)u_{m,k+1} - \lambda u_{m-1,k+1} = (2 - \lambda)u_{m,k} + \lambda u_{m-1,k}.$$

Отримані множники при  $u$  є послідовно виразами для  $b_m, a_m, e_m, d_m$ .

### Результат роботи програми

Ми здійснили усю підготовчу теоретичну роботу, тому можна переходити до безпосередніх обчислень. Зробимо ще наступне зауваження. Для цієї задачі у CAS Maxima ми будемо оперувати здебільшого матрицями та списками, які не можуть містити індексу  $0$ . Тому всі номери вузлових точок зміщуються на  $1$ , і діапазони їх будуть  $1 \dots m+1$  для просторових та  $1 \dots n+1$  для часових.

Вносимо початкові дані задачі.

```
(%i2)ratprint:false$ fpprintprec:3$
(%i7)R:100$ S:1440$ D:0.2$ r0:4$ A0:100$
```

Виберемо  $m = 75, n = 100$ . Знайдемо числове значення величин  $\lambda$  та  $m_0$  (кількість проміжків, які припадають на контейнер з речовиною). На відміну від Задачі 1, значення  $\lambda$  не впливає на стійкість розв'язку.

```
(%i13)m:75$ n:100$ h:R/m$ s:S/n$ λ:D*s/h^2; m0:floor(r0/h);
(λ)1.62
(m0) 3
```

Створюємо масив просторових вузлових точок R1.

```
(%i14)for i:1 thru m+1 do
(arraymake(R1, [i]), R1[0]:0,
```

```
R1[i]:R1[i-1]+h);
(%o14)done
```

Формуємо матриці  $A$  та  $B$ , окремо вносячи значення перших та останніх рядків кожної, котрі були отримані нами з крайових умов.

```
(%i15)A:zeromatrix(m+1,m+1)$
(%i16)for i:2 thru m do
for j:1 thru m+1 do
(if j=i then A[i,j]: 2+2*λ+2*λ*h/(R1[i+1]+R1[i])
else if j=i+1 then A[i,j]: -λ*(1+2*h/(R1[i+1]+R1[i]))
else if j=i-1 then A[i,j]: -λ
else 0)$
(%i20)A[1,1]:2+λ+2*λ*h/(R1[1]+R1[0])$ A[1,2]:-λ*(1+2*h/(R1[1]+R1[0]))$
A[m+1,m+1]:2+λ$ A[m+1,m]:-λ$
(%i21)B:zeromatrix(m+1,m+1)$
(%i22)for i:2 thru m do
for j:1 thru m+1 do
(if j=i then B[i,j]: 2-2*λ-2*λ*h/(R1[i+1]+R1[i])
else if j=i+1 then B[i,j]: λ*(1+2*h/(R1[i+1]+R1[i]))
else if j=i-1 then B[i,j]: λ
else 0)$
(%i26)B[1,1]:2-λ-2*λ*h/(R1[1]+R1[0])$ B[1,2]:λ*(1+2*h/(R1[1]+R1[0]))$
B[m+1,m+1]:2-λ$ B[m+1,m]:λ$
```

Записуємо вираз для ступінчастої функції  $F(r)$ . Створюємо список із  $n + 1$  матриць-стовпчиків та у першу вносимо дискретизований розподіл функції  $F$ .

```
(%i27)F(r):=if r<=r0 then A0 else 0$
(%i28)U:makelist(zeromatrix(m+1,1),k,1,n+1)$
(%i29)for j:1 thru m+1 do
U[1][j,1]:F(R1[j]);
(%o29)done
```

Тепер запускаємо на виконання цикл послідовного обрахування основного рівняння для всіх матриць-стовпчиків зі списку  $U$ .

```
(%i30)for k:1 thru n do
U[k+1]:(invert(A).B).U[k]$
```

Обчислення завершені. Кожен вектор-стовпчик  $U[k]$  із списку несе у собі інформацію розподілу концентрації для відповідної часової вузлової точки. Відображаючи на дисплей кожну матрицю, можна дізнаватися цілком точні значення концентрації домішки у просторових вузлових точках нашого розрахунку, і на кінцевих вузлах вона становить  $\sim 10^{-7}$ .

Для графічного представлення створимо масив  $u[j,k]$ , заповнивши його елементами списку  $U$ . Кожен елемент масиву  $u[j,k]$  дає величину концентрації для пари «координат»  $(j, k)$ , які є цілими числами, тож перетворимо цей масив на звичайну функцію округленням змінних та побудуємо її графік (рис. 5).

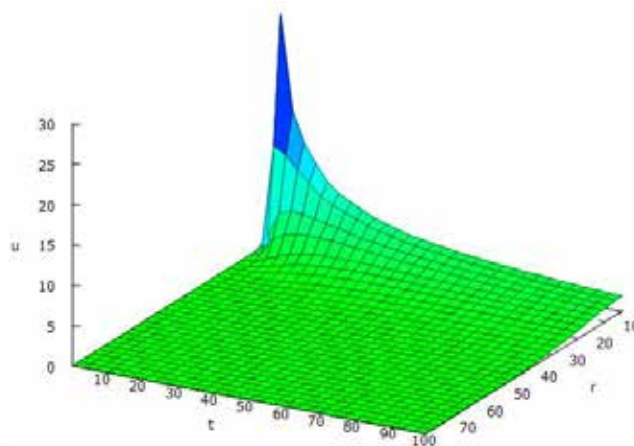


Рис. 5. Просторово-часовий розподіл концентрації домішки

Під час побудови графіка ми вибрали початок просторового проміжку з точки  $m_0 + 1$ , оскільки попередні точки дають тривіальні значення 100%. Як бачимо, розподіл концентрації дуже різко падає з плином часу, і це безпосередній наслідок двовимірності нашої системи: молекули домішки за радіального розширення початкової маси розсіюються за законом обернених квадратів. На відміну від одновимірного випадку, об'єм під кривою для кожного часового вузла не зберігається.

Здійснимо ще наступний крок для наочності зображення залежності  $u(r, t)$ . Для кожного часового вузла можна зробити відображення кривої розподілу у циліндричну систему координат командою `make_transform`. Це дасть змогу створити поверхню концентрації, накладену на полярну систему нашої задачі. Кілька створених таким чином поверхонь зображені на рис. 6.

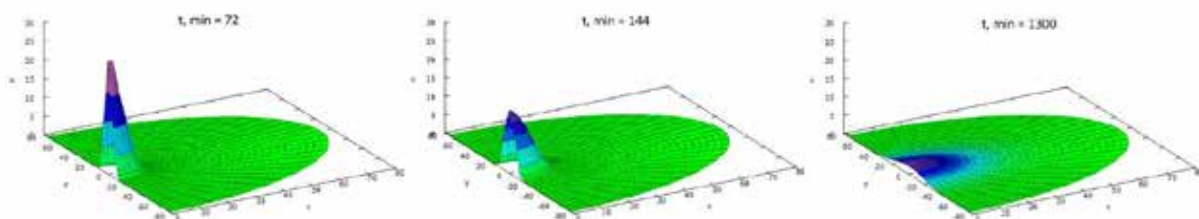


Рис. 6. Обчислені поверхні концентрації домішки за різного часу

Розглянемо тепер питання визначення межі граничної концентрації. Передусім нас будуть цікавити просторові вузли поблизу берега, тому відобразимо рівень  $u$  в інтервалі  $(2m/5, m+1)$ . Зробимо анімацію зростання кривої концентрації, виділивши лінію 0,1% графічно. Для цього використаємо пакет `draw`.

```
(%i36) U_list: makelist( gr2d(
title = concat("t, год = ",(k*14.4/60)),
font="Consolas",font_size = 16,color = red, label(["0.1 %",70,0.105]),
color = red, line_width = 2, explicit(0.1, x,2*m/5,m+1),
point_type = filled_circle, color = navy,
point_size = 1, points_joined = true, line_width = 2,
points(U[k]), xrange = [2*m/5,m+1], yrange = [0,0.2]), k,1,n)$
(%i37)draw( file_name = "Oil_plot_1",
dimensions = [600, 600],
```

```
terminal = animated_gif,  
delay = 10,  
U_list )$
```

Результат у вигляді gif-файлу буде міститися у папці, де збережена поточна сесія Maxima. Кілька кадрів анімації відображені на рис. 7. Можна спостерігти, що гранична концентрація досягне 30-го вузла ( $45 \cdot h = 60$  м від берега) приблизно через 8 год, а рівно через добу вона досягне 45 вузла ( $30 \cdot h = 40$  м від берега).

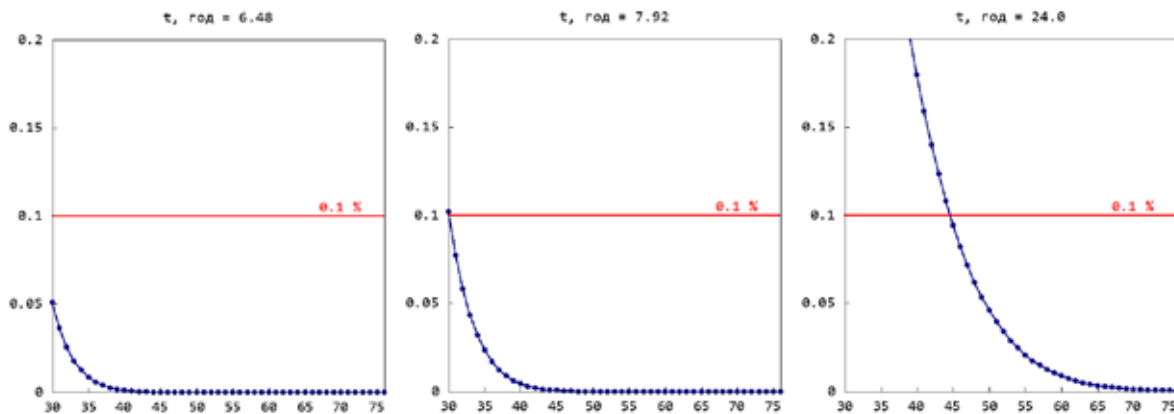


Рис. 7. Кілька кадрів анімації для визначення поширення граничної концентрації домішки

З порівняння розв’язків двох задач відразу можна відзначити разючу відмінність у кількості часових вузлових точок: у Задачі 1 їх 5000, у Задачі 2 їх 100, причому кількість просторових вузлів приблизно рівна. Це пов’язано перш за все з об’єктами оперування: в першому випадку це одновимірні списки, тоді як у другому – двовимірні масиви-матриці, відповідно, складність обробки вхідних даних зростає як  $O(n)$  та  $O(n^2)$ . Така відмінність є характерною ознакою прямих та непрямих методів обчислень [8]. З іншого боку, кількість вузлів сітки у непрямій схемі може бути будь-якою для обох координатних осей, тоді як для прямої схеми довжини просторових та часових проміжків пов’язані між собою за посередництвом  $D$ .

### Висновки

У роботі ми проаналізували та здійснили числовий розрахунок випадків центральносиметричного поширення дифундуючої домішки. Запрограмувавши симуляцію розчинення речовини, отримали просторово-часовий розподіл відсоткового складу домішки у воді; визначили часові значення розподілу домішки на поверхні води та просторовий розподіл критичного значення речовини поблизу напівкруглого мілкого берега.

Поширення речовини під час дифузії у напівпростір (2- або 3-вимірний) можна обрахувати аналітично, хоч і отримавши в результаті інтегральні вирази з ядром, що містить спеціальні функції Бесселя. Однак додавання ще одного близького джерела домішки відразу переводить задачу у аналітично нерозв’язну. Переваги нашої схеми розрахунку полягають у можливості застосування її і в такому випадку. Маючи вісь симетрії, можна виключити із залежності одну кутову змінну та розглядати задачу вже як просторово двовимірну. Тоді, застосувавши крім радіальної дискретної сітки додатково кутову, отримуємо принципову змогу для числового розрахунку такої ситуації.

**Список використаної літератури**

1. Iyengar S.R.K., Jain R.K. Numerical Methods. New Age International Limited, Publisher, 2009. 326 p.
2. Woochang Jeong, Taemin Ha. Numerical Simulation of Oil Spill in Ocean. *Journal of Applied Mathematics*. 2012. May. Special Issue 1. P. 1–5. DOI: 10.1155/2012/681585.
3. Eilleen Ao-Ieong, Anna Chang, Steven Gu. Modeling the BP Oil Spill of 2010: A Simplified Model of Oil Diffusion in Water. *UC San Diego Integrated Systems Neuroengineering Laboratory*. BENG 221, Fall 2012. 14. DOI: 10.1080/10934528709375362.
4. Donaldo Augusto Juvinao Barrios. Numerical simulation of oil spills: application to a coastal zone. *Universidad Politécnica de Madrid*. 2016. 63 p. [Master's thesis].
5. Leticia Helena Paulino de Assis, Estaner Claro Romao. Numerical Simulation of 1D Heat Conduction in Spherical and Cylindrical Coordinates by Fourth-Order Finite Difference Method. *International Journal of Mathematics Trends and Technology (IJMTT)*. 2017. Vol 46. No. 3. P. 125–128. DOI: <https://doi.org/10.14445/22315373/IJMTT-V46P521>.
6. Шваліковський Д. Моделювання процесів та систем у середовищі CAS Maxima. Луцьк: ВНУ імені Лесі Українки, 2024. 252 с.
7. Frank P. Lees, Parviz Sarram. Diffusion coefficient of water in some organic liquids. *Journal of Chemical and Engineering Data*. 1971. Vol. 16. No. 1. P. 41–44.
8. Kharab A., Guenther R.B. An Introduction to Numerical Methods. Taylor & Francis Group, 2019. 615 p.

**References**

1. Iyengar, S.R.K., & Jain, R.K. (2009). Numerical Methods. New Age International Limited, Publisher [in English].
2. Woochang, Jeong, & Taemin, Ha. (2012). Numerical Simulation of Oil Spill in Ocean. *Journal of Applied Mathematics*, May 2012, Special Issue 1. 1–15. DOI: 10.1155/2012/681585 [in English].
3. Ao-Ieong, E., Chang, A., & Gu, S. (2012). Modeling the BP Oil Spill of 2010: A Simplified Model of Oil Diffusion in Water. *UC San Diego Integrated Systems Neuroengineering Laboratory*, BENG 221, Fall 2012. 14. DOI: 10.1080/10934528709375362 [in English].
4. Barrios, D.A.J. (2016). Numerical simulation of oil spills: application to a coastal zone. Universidad Politécnica de Madrid. [Master's thesis] [in English].
5. Leticia, Helena Paulino de Assis, & Estaner, Claro Romao. (2017). Numerical Simulation of 1D Heat Conduction in Spherical and Cylindrical Coordinates by Fourth-Order Finite Difference Method. *International Journal of Mathematics Trends and Technology (IJMTT)*, 46 (3), 125–128. DOI: <https://doi.org/10.14445/22315373/IJMTT-V46P521> [in English].
6. Shvalikovskiy, D. (2024). Simulation of Processes and Systems in the CAS Maxima Environment. Lutsk: Lesya Ukrainka Volyn National University. [in Ukrainian].
7. Frank, P. Lees, & Parviz, Sarram. (1971). Diffusion coefficient of water in some organic liquids. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 16 (1), 41–44 [in English].
8. Kharab, A., & Guenther, R.B. (2019). An Introduction to Numerical Methods. Taylor & Francis Group [in English].

Шваліковський Дмитро Миколайович – інженер лабораторії комп'ютерної фізики кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А.В. Свідзинського Волинського національного університету імені Лесі Українки. E-mail: [shvaliko@gmail.com](mailto:shvaliko@gmail.com), ORCID: 0009-0009-8860-0329.

Shvalikovskiy Dmytro Mykolaiovych – Engineer of Computer Physics Laboratory at the Department of Theoretical and Computer Physics of the Lesya Uktainka Volyn National University. E-mail: [shvaliko@gmail.com](mailto:shvaliko@gmail.com), ORCID: 0009-0009-8860-0329.