

В.А. Богаенко

Программный комплекс моделирования класса процессов миграции загрязнений в грунтах на кластерных системах

Рассмотрена задача моделирования распространения загрязнений в грунтах с учетом протекающих при этом химических реакций. Предложено расширение математической модели на случай многих реакций и параллельные алгоритмы решения задач относительно этой модели. Описан расширяемый программный комплекс, в рамках которого реализованы предложенные алгоритмы. Приведены результаты вычислительных экспериментов.

A problem of modeling the soil pollution with account taken of chemical reactions which are passing at the same time is considered. A mathematical model extension to a case of multiple reactions and parallel algorithms for solving the problems relative to this model is suggested. An extendable software within the framework of which the suggested algorithms are realized is described. The results of the numerical experiments are presented.

Розглянуто задачу моделювання розповсюдження забруднень у грунтах з урахування хімічних реакцій, що відбуваються при цьому. Пропонується розширення математичної моделі на випадок багатьох реакцій та паралельні алгоритми розв'язання задач щодо цієї моделі. Розглядається розширюваний програмний комплекс у рамках якого реалізовані запропоновані алгоритми, приводяться результати обчислювальних експериментів.

Введение. Производственная деятельность сопровождается выбросами во внешнюю среду большого количества загрязняющих веществ. Часть из них выбрасывается в атмосферу, после чего твердые частицы оседают на поверхность земли, часть хранится в растворимой форме в поверхностных накопителях. Фильтрация этих веществ приводит к загрязнению грунтов и водоносных горизонтов, а распространение химически активных веществ, таких как кислоты и щелочи, могут привести к изменению химического состава грунтов. С другой стороны, внесение в грунт, в частности, солевых растворов, используется для его очистки от кислотных загрязнений.

В статье рассматривается важный вопрос математического моделирования и исследования таких процессов. Предлагаются эффективные параллельные алгоритмы решения широкого класса задач экологии грунтовых массивов. Описывается программный комплекс, в рамках которого реализовывается постановка вычислительных экспериментов по моделированию и исследованию описанных процессов.

Модель миграции загрязнений в поле скоростей установившейся плановой напорной фильтрации

Рассмотрим следующую математическую модель [1] диффузионных и химических процессов в пористых средах, построенную на базе следующих допущениях:

- Скорость реакции высвобождения активного компонента пропорциональна его концентрации в массиве и концентрации реагента [2].

- В математической модели массообменные процессы учитываются следующим образом: одновременно с химической реакцией происходит адсорбция высвобожденного активного компонента твердой фазой, уравнение кинетики которой записывается в виде [3]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta(\sigma C - \alpha N),$$

где C , N – концентрация загрязнений соответственно в жидкой и твердой фазах, α , β – кинетические коэффициенты, σ – активная пористость среды.

- Процесс миграции загрязнений происходит в поле скоростей установившейся плановой напорной фильтрации.

Система уравнений математической модели процесса имеет следующий вид [1]:

$$\begin{aligned} \sigma \frac{\partial C_1}{\partial t} &= D_1 \left(\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial y^2} \right) - \\ &- v_x \frac{\partial C_1}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_1}{\partial y} - \mu_1 C_m C_1, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \sigma \frac{\partial C_2}{\partial t} &= D_2 \left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial y^2} \right) - \\ &- v_x \frac{\partial C_2}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_2}{\partial y} + \mu_2 C_m C_1 - \frac{\partial N}{\partial t}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = -\beta\sigma C_m C_1, \quad (3)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta_*(\sigma C_2 - \alpha_* N), \quad (4)$$

где C_1 , C_2 – соответственно концентрации реагента и высвобожденного (активного) компонента в жидкой фазе; C_m – концентрация активного компонента в твердой фазе; N – концентрация адсорбированного вещества в твердой фазе; $\mu_1 = v_1\beta\sigma$, $\mu_2 = v_2\beta\sigma$; β – константа скорости химической реакции; σ – пористость среды; $v_1 = \frac{v_r R}{v_m M}$, $v_2 = \frac{v_p P}{v_m M}$, M – грамм-молекула активного компонента (минерала) в твердой фазе; R , P – грамм-молекула реагента и активного компонента в жидкой фазе; v_r , v_p , v_m – стехиометрические коэффициенты; $\vec{v} = \{v_x, v_y\}$ – вектор скорости фильтрации; D_1 , D_2 – коэффициенты конвективной диффузии для реагента и активного компонента; β_* – коэффициент скорости адсорбции; α_* – коэффициент равновесного адсорбционного распределения [3].

Краевые условия для системы (1)–(4) имеют вид

$$C_1|_{G_1} = \tilde{C}_1(t), \quad \frac{\partial C_1}{\partial \vec{n}} \Big|_{G-G_1} = 0, \quad C_1(x, y, 0) = 0, \quad (5)$$

$$C_2|_{G_1} = 0, \quad \frac{\partial C_2}{\partial \vec{n}} \Big|_{G-G_1} = 0, \quad C_2(x, y, 0) = 0, \quad (6)$$

$$C_m(x, y, 0) = C_m^{(0)}(x, y), \quad N(x, y, 0) = N^{(0)}(x, y), \quad (7)$$

где G – граница области моделирования, G_1 – граница попадания реагента в грунт, \vec{n} – вектор нормали к границе области; \tilde{C}_1 , $C_m^{(0)}$, $N^{(0)}$ – заданные функции.

В случае когда краевая задача (1)–(7) определена в неканонической области, эффективный способ ее решения – переход к области комплексного потенциала течения и нахождения аналитического решения задачи плановой напорной фильтрации.

После этого решение самой задачи (1)–(7) эффективно находится в два этапа: решается краевая задача (1), (3), (5), (7), затем – краевая задача (2), (4), (6), (7). Конечно-разностные последовательные и параллельные алгоритмы решения указанных краевых задач, основывающихся на применении локально-одномерного метода А.А. Самарского [4], построены в [5].

Расширенная модель

Расширим модель (1)–(7) учитывая следующее:

- количество реакций, происходящих в грунте под действием кислого раствора, достаточно велика, и модель должна описывать произвольное их количество;
- результатами реакций кислого раствора с компонентами грунта могут быть как растворимые, так и нерастворимые вещества.

С учетом этих факторов, уравнения математической модели запишем следующим образом:

$$\sigma \frac{\partial C_1}{\partial t} = D_1 \left(\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial y^2} \right) - v_x \frac{\partial C_1}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_1}{\partial y} - \sum_{i=1}^{N_s+N_{ns}} \mu_{1i} C_{mi} C_1, \quad (8)$$

$$\frac{\partial C_{mi}}{\partial t} = -\beta_i \sigma C_{mi} C_1, \quad i = \overline{1..N_s + N_{ns}}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial N_{0i}}{\partial t} = \beta'_i \sigma C_{m,i+N_s} C_1, \quad i = \overline{1..N_{ns}}, \quad (10)$$

$$\sigma \frac{\partial C_{2i}}{\partial t} = D_{2i} \left(\frac{\partial^2 C_{2i}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_{2i}}{\partial y^2} \right) - v_x \frac{\partial C_{2i}}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_{2i}}{\partial y} + \mu_{2i} C_{mi} C_1 - \frac{\partial N_i}{\partial t}, \quad i = \overline{1..N_s}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = \beta_{*i} (\sigma C_{2i} - \alpha_{*i} N_i), \quad i = \overline{1..N_s}. \quad (12)$$

N_s – количество реакций, результатом которых являются растворимые вещества; N_{ns} – количество реакций, результат – нерастворимые вещества; C_{mi} – концентрации активных компонентов реакций в твердой фазе; C_1 – концентрация реагента в жидкой фазе; N_{0i} – кон-

центрации нерастворимых веществ – результатов реакций; C_{2i} – концентрации растворимых веществ – результатов реакций в жидкой фазе; N_i – концентрации адсорбированных веществ в твердой фазе.

Обозначения других коэффициентов отвечают обозначениям в модели (1)–(7).

Краевые условия приобретают следующий вид:

$$C_1|_{G_1} = \tilde{C}_1(t), \quad \frac{\partial C_1}{\partial \bar{n}} \Big|_{G-G_1} = 0, \quad C_1(x, y, 0) = 0, \quad (13)$$

$$C_{2i}|_{G_1} = 0, \quad \frac{\partial C_{2i}}{\partial \bar{n}} \Big|_{G-G_1} = 0, \quad (14)$$

$$C_{2i}(x, y, 0) = 0, \quad i = \overline{1 \dots N_s},$$

$$C_{mi}(x, y, 0) = C_{mi}^{(0)}(x, y), \quad i = \overline{1 \dots N_s + N_{ns}}$$

$$N_i(x, y, 0) = N_i^{(0)}(x, y), \quad i = \overline{1 \dots N_s} \quad (15)$$

$$N_{0i}(x, y, 0) = 0, \quad i = \overline{1 \dots N_{ns}}.$$

Численное решение системы (8)–(17) осуществляется аналогично решению системы (1)–(7): на каждом шаге решается сначала разностная аппроксимация задачи (8)–(10), (13), (15), а затем разностная аппроксимация задач (11), (12), (14), (15).

Расчетная схема с численным определением скоростей фильтрации

Для модели (8)–(15) задача определения поля скоростей решалась путем перехода к области комплексного потенциала течения [6]. Хотя такой подход достаточно точен и вычислительно эффективен, он не применим к областям произвольной формы.

Для использования модели (8)–(15) в случае областей произвольной формы дополним её уравнением установившейся напорной фильтрации [4]

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial H}{\partial y} \right) = 0, \quad (16)$$

$$v_x = \frac{\partial H}{\partial x}, \quad v_y = \frac{\partial H}{\partial y}$$

с краевыми условиями

$$H|_{G_1} = H_1, \quad H|_{G_2} = 0, \quad \frac{\partial H}{\partial \bar{n}} \Big|_{G-G_1-G_2} = 0, \quad (17)$$

где G_2 – граница водозабора.

Задачу (16), (17) решим до решения системы (8)–(15) методом итераций, эквивалентным отысканию решения параболического уравнения,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial \tilde{H}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial \tilde{H}}{\partial y} \right) = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tau}, \quad H = \tilde{H}(\tau \rightarrow \infty) \quad (18)$$

по фиктивной переменной τ .

Задача (17), (18) может также, как и компоненты задачи (8)–(15), решаться по локально-одномерным разностным схемам [4].

Таким образом, алгоритм решения двумерной усредненной задачи распространения загрязнений в грунте с учетом протекающих при этом химических реакций и фильтрационной диффузии результатов этих реакций имеет следующий вид:

- нахождение поля скоростей фильтрации (задача (17)–(18));
- решение задачи (8)–(15), в частности, с использованием параллельных алгоритмов.

Программная реализация

Модель (8)–(17) описывает большое количество фильтрационных процессов, протекающих в грунтах, в частности, распространение загрязнений от водоотстойников, загрязнение подземных вод, процессы ликвидации загрязнения грунта, возникшего вследствие аварийной ситуации, влияние кислотных дождей на грунты и подземные воды.

Программный комплекс, реализующий такую модель, дает возможность, с одной стороны, пользователю варьировать постановки задач, с другой стороны, программисту расширять его возможности при решении задач моделирования процессов массообмена или задач плановой фильтрации методом конформных отображений. Расширяемость комплекса не должна зависеть от того, используются последовательные или параллельные алгоритмы.

Созданный программный комплекс учитывает вышеописанные требования следующим образом.

Постановка задачи осуществляется по сценарию, написанному на языке, схожем с язы-

ком *C*. Составляющие постановки задачи следующие:

– метод решения задачи плановой фильтрации (конечно-разностный или конформных отображений);

– количество моделируемых химических процессов;

– коэффициенты уравнений:

фильтрации,

диффузии,

химической кинетики и т.д.;

– начальные условия;

– последовательность решения задачи.

При создании сценария решения программист манипулирует такими объектами:

– числовыми параметрами (класс *Dparameter*);

– матричными параметрами (класс *Mparameter*);

– массивами параметров (класс *Marray*);

– уравнениями или системами уравнений (класс *equation*, включающий в себя реализацию алгоритмов решения);

– зависимостями по данным между уравнениями;

– задачей – класс *task*, который инкапсулирует все вышеописанные объекты.

Такая система абстракций позволяет использовать и комбинировать разные алгоритмы решения отдельных подзадач (уравнений или систем уравнений), а также создавать комплексные системы для моделирования связанных между собой процессов в атмосфере, грунтах и водоемах, например, процесса долгосрочного влияния на окружающую среду кислотных выбросов.

Решение задачи происходит по следующей схеме:

– создание объекта класса задачи;

– создание объектов, описывающих параметры задачи; объектов в которых будет храниться решение задачи; задание параметров задачи;

– задание схемы решения задачи – уравнений или систем уравнений, алгоритмов их решения, связей между ними;

– связывание параметров задачи с параметрами уравнений;

– проверка всех необходимых параметров на полноту заданности и связанности;

– пошаговое по времени решение задачи (в случае использования последовательных алгоритмов – с визуализацией в режиме реального времени);

– сохранение и постобработка результатов расчетов.

Распределенные параметры, такие как описание области фильтрации или начальные условия, задаются в графическом файле формата *BMP* или *JPG*. Границы, области и значения обозначаются в нем цветом следующим образом:

– границы области фильтрации и границы водозаборов, на которых ставятся краевые условия вида $\frac{\partial H}{\partial \vec{n}}, \frac{\partial C}{\partial \vec{n}}, \frac{\partial C_i}{\partial \vec{n}} = 0$, должны быть закрашены зеленым ([0,255,0] в *RGB*-представлении) цветом;

– область вытекания загрязнений обозначается красным цветом ($x,0,0$), интенсивность x которого определяет концентрацию загрязнений;

– фоновый цвет изображения – черный.

Прогноз миграции загрязнений из водоотстойников

Рассмотрим задачу моделирования распространения солевых растворов в окрестности водоотстойников [7].

Математическая постановка задачи состоит из уравнения для поля скоростей фильтрационного течения

$$k \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + k \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} = 0, v_x = \frac{\partial H}{\partial x}, v_y = \frac{\partial H}{\partial y}$$

и уравнения, моделирующего распространение загрязняющего вещества:

$$\sigma \frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y}.$$

Для этих уравнений на границах водоотстойников и водоёмов (рис. 1) задаются краевые условия вида $H, C = \text{const}$, а на границах расчетной области – условия вида $\frac{\partial H}{\partial \vec{n}} \Big|_G = 0$,

$\frac{\partial C}{\partial \vec{n}} \Big|_G = 0$.

Фильтрационные параметры заданы равными $k=0,5$, $\sigma=1$, $D=0,05$, шаг по времени $\tau=10^{-4}$. Начальные условия – $C=0$.

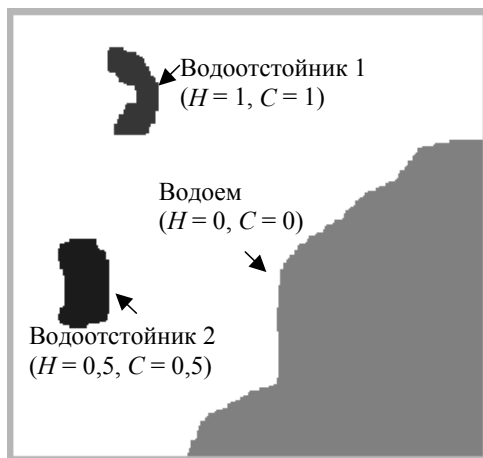
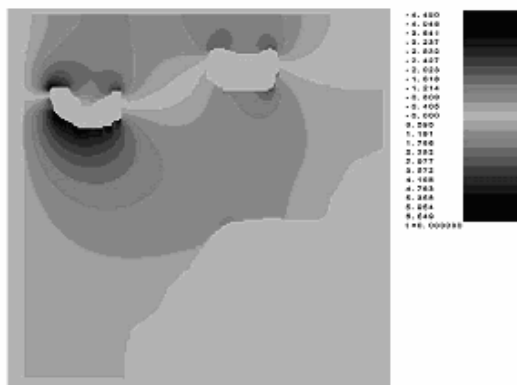


Рис. 1. Расчетная область

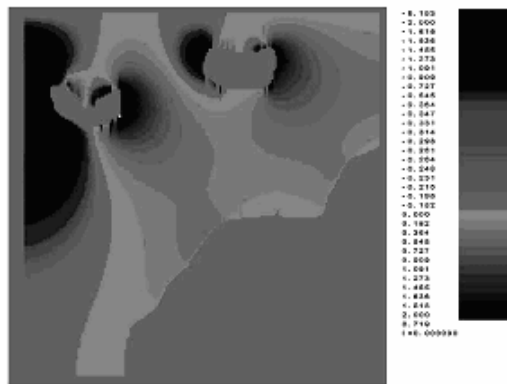
Задача решалась на сетке размерности 200×200 ячеек. Решение (поле скоростей и поле концентрации солевого раствора) при безразмерном времени $t=0,14$, полученное за 1400 шагов, представлено в графическом виде на рис. 2–3. Количество шагов решения уравнения установившейся напорной фильтрации – 500.

Моделирование процесса нейтрализации загрязнений путем напорной промывки грунта

Один из подходов к ликвидации загрязненности грунта – метод подачи в грунт под давлением воды или раствора нейтрализатора, выталкивающего загрязняющие компоненты в коллектор, проводя тем самым промывку [7].



a



b

Рис. 2. Поле скоростей: a – V_y -составляющая; б – V_x -составляющая

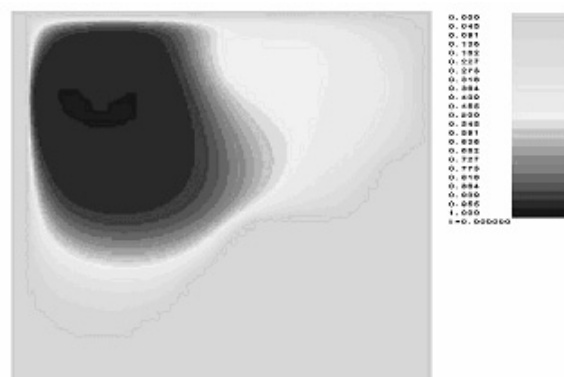


Рис. 3. Концентрация загрязнений

Математическая постановка задачи состоит из следующих уравнений:

– уравнение поля скоростей фильтрации

$$k \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + k \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} = 0, \quad v_x = \frac{\partial H}{\partial x}, \quad v_y = \frac{\partial H}{\partial y};$$

– уравнений, описывающих движение раствора нейтрализатора и его реакцию с загрязняющим веществом:

$$\sigma \frac{\partial C_1}{\partial t} = D_1 \left(\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial y^2} \right) - v_x \frac{\partial C_1}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_1}{\partial y} - \mu_1 C_m C_1,$$

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = -\beta_1 \sigma C_m C_1;$$

– уравнения, описывающего миграцию растворимых результатов реакции:

$$\sigma \frac{\partial C_2}{\partial t} = D_2 \left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial y^2} \right) - v_x \frac{\partial C_2}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_2}{\partial y} + \mu_2 C_m C_1.$$

К этим уравнениям на границе скважины, в которую закачивают раствор, поставим краевые условия вида $H, C_1 = \text{const}, C_2 = 0$, на границах коллекторов и на уровне грунтовых вод – $H, C_1, C_2 = 0$, на остальных границах области – условия вида $\frac{\partial H}{\partial \bar{n}} \Big|_G = 0, \frac{\partial C_{1,2}}{\partial \bar{n}} \Big|_G = 0$. Начальная

концентрация загрязняющего вещества задается условием $C_m(\bar{x}, 0) = C_{m0}(\bar{x})$. Расчетная область задачи представлена на рис. 4. Белым цветом обозначена начальная концентрация загрязнений.

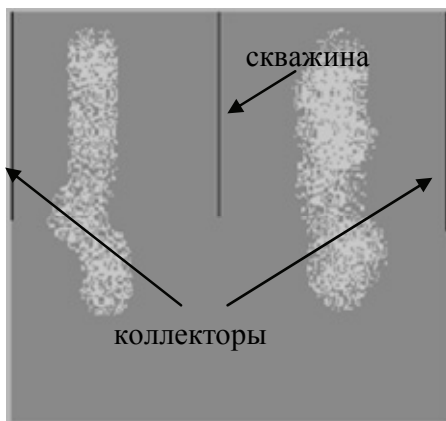
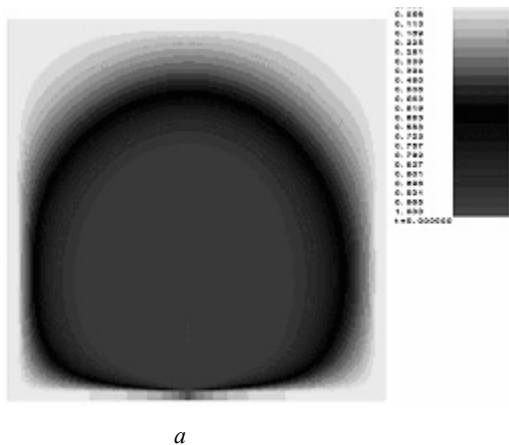
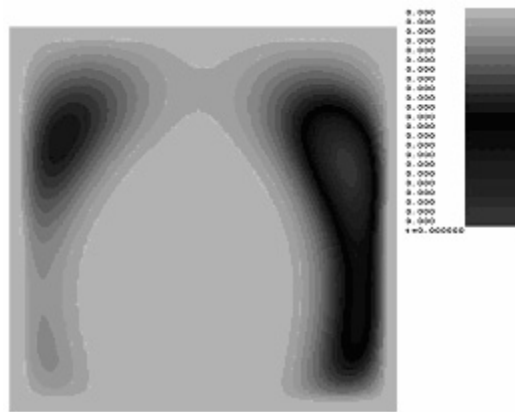


Рис. 4. Расчетная область задачи

Задача решалась на сетке размерностью 200×200 ячеек. Решение (поле концентрации нейтрализатора и растворимого вещества – результата реакции; загрязняющее вещество на этот момент полностью нейтрализовано) при безразмерном времени $t = 0,14$, полученное за 1400 шагов, представлено в графическом виде на рис. 5.



а



б

Рис. 5. Поля концентраций: а – раствора нейтрализатора; б – растворимого результата реакции

Эффективность параллельных алгоритмов

Задача моделирования процесса нейтрализации загрязнений путём напорной промывки грунта на сетке размерностью 1000×1000 и 3000×3000 ячеек решалась в параллельном режиме на кластере СКІТ-3 Института кибернетики НАН Украины. Каждое уравнение решалось с использованием схемы с красно-черным распределением данных по процессорам. При переходе к решению следующего уравнения обменов данными не проводилось, так как алгоритмы используют одну и ту же схему распределения данных.

Время решения задач и ускорение в зависимости от количества задействованных процессоров показано на рис. 6 и 7.

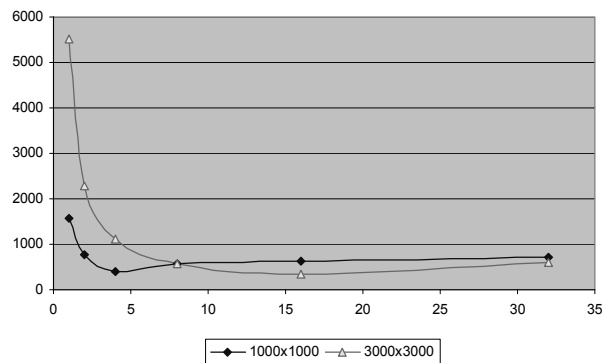


Рис. 6. Время решения, мс.

Максимум ускорения на этих задачах достигается на 16-ти процессорах для задачи размерностью 3000×3000 и лишь на четырех для задачи размерности 1000×1000 , что связано с

наличием глобальных (рассылка данных и сбор результатов вычислений) и локальных (в количестве, пропорциональном количеству процессоров) обменов.

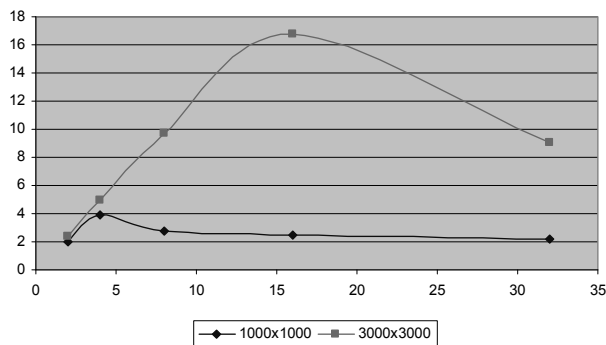


Рис. 7. Ускорение

Параллельный алгоритм решения задач, моделирующих несколько химических реакций

Реализованные параллельные алгоритмы обеспечивают ускорение, близкое к линейному, на количестве задействованных процессоров, небольшом по сравнению с размером современных кластерных систем, таких как кластер СКИТ-3. В связи с этим возникает необходимость более эффективного использования ресурсов кластера при решении сложных задач.

Уравнения (11),(12),(14),(15), моделирующие диффузию и массообмен веществ – растворимых результатов реакций, описывают независимые процессы относительно разных веществ. В случае решения задачи, моделирующей несколько химических реакций, на каждом шаге есть возможность решать эти уравнения параллельно. Реализация этого допускает несколько вариантов алгоритмов:

1) все подзадачи решаются на макроуровне последовательно на N процессорах;

2) подзадача (8)–(10), (13), (15) решается на N процессорах, после чего происходит перераспределение данных и подзадачи (11), (12), (14), (15) решаются независимо друг от друга, каждая на группе из N/N_s процессоров;

3) все подзадачи решаются на группах из N/N_s процессоров, причем подзадачи (11), (12), (14), (15) решаются независимо, а решение под-

задачи (8)–(10), (13), (15) дублируется на каждой группе.

Оценим время выполнения этих алгоритмов. Пусть локально-одномерная схема А.А. Самарского распараллеливается согласно [5]. Тогда время решения подзадач (8)–(10),(13),(15) и (11), (12), (14), (15) можно оценить как

$$T(N, k) = \frac{nm}{N} kt_* + \frac{2}{N} (N-1)(n+m)t_s,$$

где n, m – размерности сетки, N – количество процессоров, k – коэффициент сложности решения по методу прогонки, t_* , t_s – время выполнения операций умножения и обмена данными. Значение коэффициента k зависит от сложности вычисления прогоночных коэффициентов и составляет $4(N_s + N_{ns}) + 1$ для разностного аналога уравнения (8) и для разностного аналога уравнения (11) – два.

Тогда время выполнения алгоритма 1 можно оценить как

$$T_1(N) = T(N, 4(N_s + N_{ns}) + 1) + N_s T(N, 2),$$

алгоритма 2 как $T_2(N) = T(N, 4(N_s + N_{ns}) + 1) + T(\frac{N}{N_s}, 2) + \frac{2N_s}{N} nmt_s$, алгоритма 3 как $T_3(N) = T(\frac{N}{N_s}, 4(N_s + N_{ns}) + 1) + T(\frac{N}{N_s}, 2)$.

$$\text{Решая неравенства } s_{2/3}(N) = 1 - \frac{T_{2/3}(N)}{T_1(N)} > 0,$$

получаем, что алгоритм 3 быстрее, чем алгоритм 1, при

$$N > \frac{1}{2} \frac{nm}{n+m} (4(N_s + N_{ns}) + 1) \frac{t_*}{t_s} - 1, \quad (19)$$

а алгоритм 2 быстрее, чем алгоритм 1, при $N > \frac{nm}{n+m} \frac{N_s}{N_s - 1}$.

Учитывая то, что коэффициент $\frac{t_*}{t_s}$ имеет

значение порядка 10^{-3} , алгоритм 3 при исполнении условия (19) – самый быстрый из рассматриваемых.

Полученные экспериментальные данные относительно эффективности и быстродействия алгоритма 3 приведены на рис. 8–10. Тестиро-

вание проводилось на двух задачах, моделирующих процессы с двумя и десятью реакциями соответственно.

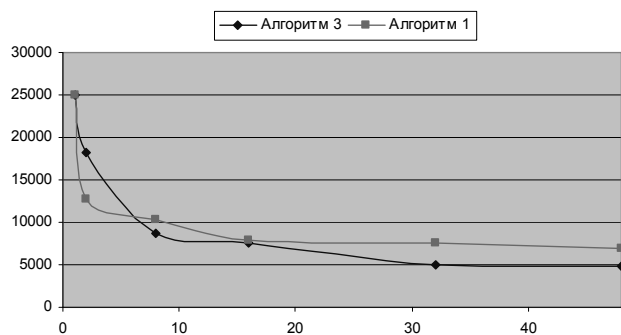


Рис. 8. Время исполнения алгоритмов 1 и 3 при решении тестовой задачи, моделирующей процесс с двумя реакциями

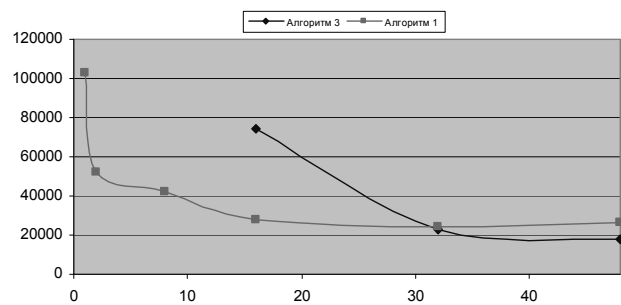


Рис. 9. Время исполнения алгоритмов 1 и 3 при решении тестовой задачи, моделирующей процесс с десятью реакциями

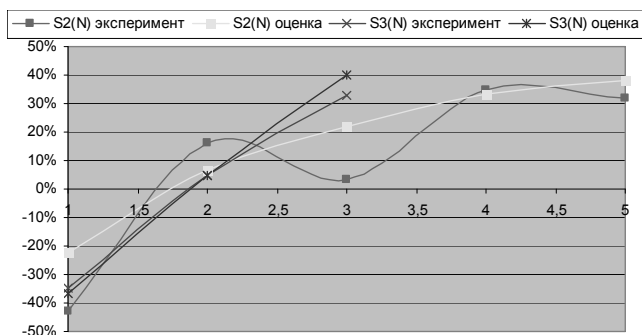


Рис. 10. Эффективность алгоритма 3

Полученные данные близки к теоретическим оценкам и показывают, что для тестовых задач использование алгоритма 3 позволяет ускорить решение на ~30%.

Заключение. Предлагаемые расширения математических моделей и параллельных алгоритмов вместе с разработанной программной

архитектурой позволили создать программный комплекс, эффективно решающий широкий круг задач моделирования миграции загрязнений в грунтах.

Отметим, что комплекс имеет определенные ограничения, в частности, использованные математические модели – двухмерны. Однако его архитектура позволяет без существенного переоборудования подключать модули решения и трехмерных задач, а также комбинировать двух- и трехмерные модели, используя по необходимости более или менее точные модели или алгоритмы.

Одно из направлений дальнейшего развития рассматриваемой системы – расширение ее в сторону возможности решения задач в нескольких средах, объединяя, например, задачу дальнего переноса загрязнений по воздуху с задачей миграции в грунтах осевших твердых частиц или веществ, выпадающих с кислотными дождями.

1. *Богаенко В.А., Булавацкий В.М., Скопецкий В.В.* Математическое моделирование динамики геохимических процессов загрязнения водоносных горизонтов // УСиМ – 2009. – № 4. – С. 60–66.
2. *Шибанов А.В.* О подземном растворении и извлечении веществ из руд в условиях плановой фильтрации // Фильтрационные расчеты водозаборных и дренажных систем. – М.: ВОДГЕО, 1981. – С. 119–126.
3. *Веригин Н.Н., Шержуков Б.С.* Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах // Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917–1967). – М.: Наука, 1967. – С. 237–313.
4. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
5. *Богаенко В.А., Булавацкий В.М., Скопецкий В.В.* Параллельный алгоритм расчета фильтрационно-конвективной диффузии загрязнений из водоносных горизонтов // УСиМ – 2008. – № 5. – С. 18–23.
6. *Полубаринова-Кочина П.Я.* Теория движения грунтовых вод. – М.: Наука, 1977. – 664 с.
7. *Численное моделирование распространения загрязнений в окружающей среде / М.З. Згуровский, В.В. Скопецкий, В.К. Хрущ и др.* – Киев: Наук. думка. – 1997. – 368 с.

Поступила 24.11.2009
Тел. для справок: (044) 526-4167 (Киев)
E-mail: sevab@ukr.net
© В.А. Богаенко, 2010