

УДК 532.546

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА ДЕГРАДИРУЮЩЕГОСЯ ВЕЩЕСТВА В ДВУХЗОННОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

^{1,2*} *Хужаёров Б.Х.*, ¹ *Файзиев Б.М.*, ³ *Сагдуллаев О.К.***b.khuzhayorov@mail.ru*¹Самаркандский государственный университет,
140100, Узбекистан, Самарканд, ул. Университетский бульвар, 15;²Институт математики им. В.И. Романовского АН РУз,
100174, Узбекистан, Ташкент, ул. Университетская, 9;³Каттакурганский филиал Самаркандского государственного университета,
Узбекистан, Каттакурган, ул. А.Темур, 27.

В работе поставлена и численно решена задача переноса вещества в пористой среде, состоящей из активных и пассивных зон, с учетом многоступенчатости кинетики адсорбции. Составлена математическая модель процесса на основе общих законов сохранения массы и дополнительных феноменологических предположений. Анализировано влияние начальных и граничных условий на характеристики переноса веществ и адсорбции. Представлены результаты численного моделирования, показывающие влияние параметров системы на динамику концентрации вещества в активных и пассивных зонах. Полученные результаты могут быть использованы при прогнозировании распространения загрязняющих веществ в подземных резервуарах и разработке стратегий его контроля.

Ключевые слова: адсорбция, конечные разности, математическая модель, многоступенчатая кинетика, пористая среда.

Цитирование: *Хужаёров Б.Х., Файзиев Б.М., Сагдуллаев О.К.* Математическая модель переноса деградирующего вещества в двухзонной пористой среде // Проблемы вычислительной и прикладной математики. – 2025. – № 2(64). – С. 5-16.

DOI: https://doi.org/10.71310/pcam.2_64.2025.01.

1 Введение

Перенос деградирующего вещества в пористых средах является широко распространенным процессом, который играет важную роль в различных областях, включая экологию, гидрологию и химическую технологию [1–5]. Понимание механизмов того, как растворенные вещества разлагаются и мигрируют через пористые среды при загрязнении грунтовых вод, заводнении нефтяных пластов водой с различными химическими добавками и др., имеет важное значение для прогнозирования и управления воздействием на окружающую среду. При учете взаимодействия жидкости с твердой матрицей, через которую она протекает, деградации вещества и др., процесс математического моделирования этих процессов существенно усложняется.

Перенос вещества в пористых средах регулируется несколькими факторами, такими как адвекция, дисперсия, диффузия, адсорбция и химическая реакция, включая разложение [6–10]. Разложение приводит к зависящему от времени снижению концентрации растворенного вещества. При рассмотрении реальных приложений важно учитывать тот факт, что процессы разложения и свойства переноса часто зависят от различных параметров и начальных условий системы.

Различные начальные условия, такие как меняющаяся со временем концентрация вещества на входе, могут привести к изменению в динамике переноса и деградации [11, 12]. Эти условия существенно влияют на то, как растворенное вещество перемещается и насколько быстро оно деградирует в пористой среде.

В данной работе сформулирована и численно решена задача переноса растворенного вещества в двухзонной пористой среде с многостадийной кинетикой адсорбции. Основное внимание уделяется переносу разлагаемого вещества в пористой среде при различных краевых условиях. Оценено изменение этих условий на динамику переноса и пространственное распределение вещества с течением времени. Понимание механизмов изменения основных характеристик переноса растворенных веществ в пористых средах важно особенно для приложений в области охраны и оздоровления окружающей среды и экологически обоснованных освоений природных ресурсов.

2 Математическая модель

Рассматривается двухзонная пористая среда с активной и пассивной зонами. Адсорбция в поровом пространстве имеет две формы – обратимую и необратимую. Соответственно, зоны фильтрации называются активными и пассивными. Активные зоны омываются потоком жидкости и происходит обратимая адсорбция, а пассивные зоны остаются неподвижными для жидкости и происходит необратимая адсорбция.

Уравнение переноса в пористой среде в одномерном случае с учетом адсорбции и деградации вещества записываем в виде [5]

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{1}{\theta} \frac{\partial c_a}{\partial t} - \frac{1}{\theta} \frac{\partial c_p}{\partial t} - \lambda_e c, \quad (1)$$

где c – концентрация вещества в жидкости, c_a – концентрация адсорбированного вещества в активной зоне, c_p – концентрация адсорбированного вещества в пассивной зоне, θ – пористость, λ_e коэффициент распада (разложения) первого порядка, v – компонента физической скорости жидкости, D – коэффициент диффузии.

Для концентрации адсорбированного вещества в активной зоне используем кинетическое уравнение, основанное на следующей физической идее [13–16]. Первоначально перенос растворенного вещества происходит в чистом фильтре, свободном от адсорбированного вещества. На начальном этапе адсорбции увеличивается удельная поверхность и, соответственно, увеличиваются кинетические коэффициенты. Влияние этого эффекта, называемого загрузкой фильтра, существенно на начальных этапах фильтрации [13]. Зарядка продолжается до тех пор, пока поверхность зерен в среде не покроется монослоем адсорбированных частиц растворенного вещества. Как только частицы начинают взаимодействовать, прежде всего, с ранее адсорбированным слоем, цикл адсорбции переходит в следующую стадию. Процессы адсорбции и десорбции происходят параллельно. Переход адсорбции из необратимой в обратимую стадию происходит, когда концентрация адсорбированного вещества достигает заданного значения c_{ar} . Объем растворенного вещества, который может быть захвачен в активной зоне фильтра, конечен. На конечном этапе адсорбция вещества достигает максимально возможного значения c_{a0} ; т. е. активная зона фильтра полностью насыщена адсорбированным веществом, и в дальнейшем концентрация адсорбированного вещества не изменяется со временем.

В указанных условиях кинетика адсорбции в активной зоне описывается следующим уравнением [13–16]

$$\frac{\partial c_a}{\partial t} = \begin{cases} \beta_{ar}c - \lambda_{ea}c_a, & \text{если } 0 < c_a \leq c_{ar}, \\ \beta_{aa}c - \beta_{ad}c_a - \lambda_{ea}c_a, & \text{если } c_{ar} < c_a < c_{a0}, \\ 0, & \text{если } c_a = c_{a0}, \end{cases} \quad (2)$$

где β_a – коэффициент, характеризующий интенсивность осаждения вещества в активной зоне, λ_{ea} – коэффициент разложения осажденного вещества в активной зоне, $\beta_{ar}, \beta_{aa}, \beta_{ad}$ – кинетические параметры.

Кинетика осаждения в пассивной зоне принимается в виде [13–16]

$$\frac{\partial c_p}{\partial t} = \begin{cases} \beta_{a0}c - \lambda_{ep}c_p, & \text{если } 0 < c_p \leq c_{p1}, \\ \frac{\beta_{p0}c_{p1}c}{c_p} - \lambda_{ep}c_p, & \text{если } c_{p1} < c_p < c_{p0}, \\ 0, & \text{если } c_p = c_{p0}, \end{cases} \quad (3)$$

где β_{p0} – кинетический параметр, c_{p1} – предельная концентрация, при которой начинается эффект уплотнения, λ_{ep} – коэффициент распада (разложения) осажденного вещества в пассивной зоне. Здесь, в начале адсорбции интенсивность адсорбции не зависит от c_p и пропорциональна c . Начиная с некоторой концентрации c_{p1} , интенсивность адсорбции становится меньше первой ступени, а далее она уменьшается обратно пропорционально величине концентрации адсорбированного вещества c_p . Наконец, когда адсорбированная концентрация близка к насыщению, она уменьшается еще интенсивнее. Этот участок аппроксимируется ступенчатой функцией (по аналогии с аппроксимацией сильно выпуклой изотермы прямоугольной кривой в динамике сорбции) [13].

В уравнениях коэффициенты распада вещества $\lambda_e, \lambda_{ea}, \lambda_{ep}$ в общем случае различны. Коэффициент λ_e существенно может отличаться от λ_{ep} [7, 8]. В случае, когда вещества радиоактивное, эти параметры можно принимать равными, т.е. $\lambda_e = \lambda_{ea} = \lambda_{ep}$. Во всех уравнениях c, c_a, c_p являются объемными концентрациями с размерностью $\frac{M^3}{M^3}$.

Задача заключается в решении и системы уравнений (1) – (3) с условиями

$$c(0, x) = 0, \quad c_a(0, x) = 0, \quad c_p(0, x) = 0, \quad (4)$$

$$c(t, 0) = c_0, \quad c(t, \infty) = 0, \quad (5)$$

где $c_0 = \text{const}$.

Кроме условий (5) отдельно рассмотрим

$$c(t, 0) = c_0 [1 - e^{-\varphi t}], \quad \varphi > 0, \quad c(t, \infty) = 0, \quad \varphi = \text{const}, \quad (6)$$

$$c(t, 0) = c_0 [1 + \sin(\omega t)], \quad \omega > 0, \quad c(t, \infty) = 0, \quad \omega = \text{const}. \quad (7)$$

3 Алгоритм численного решения задачи

Для решения задачи (1) – (5) применим метод конечных разностей [17]. В области $D = \{0 \leq x < \infty, 0 \leq t \leq T\}$ вводим сетку, где T – максимальное время, в течение

которого исследуется процесс. Для этого интервал $[0, \infty)$ разбиваем с шагом h , а $[0, T]$ разбиваем на J частей с шагом τ . В результате имеем сетку

$$\omega_{h\tau} = \{(x_i, t_j), x_i = ih, i = 0, 1, \dots, t_j = j\tau, j = 0, 1, \dots, J, \quad \tau = T/J\}.$$

Вместо функций $c(t, x), c_a(t, x), c_p(t, x)$ будем рассматривать сеточные функции, значения которых в узлах (x_i, t_j) соответственно обозначим через $c_i^j, c_{a,i}^j, c_{p,i}^j$.

Уравнения (1) аппроксимируется на сетке $\omega_{h\tau}$ в следующем виде

$$\begin{aligned} & \frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\tau} + v_x \frac{c_i^{j+1} - c_{i-1}^{j+1}}{h} = \\ & = D \frac{c_{i+1}^{j+1} - 2c_i^{j+1} + c_{i-1}^{j+1}}{h^2} - \frac{1}{\theta} \frac{c_{a,i}^{j+1} - c_{a,i}^j}{\tau} - \frac{1}{\theta} \frac{c_{p,i}^{j+1} - c_{p,i}^j}{\tau} - \lambda_e c_i^{j+1}. \end{aligned} \quad (8)$$

Разностная схема для уравнения (2) будет иметь вид:

$$\frac{c_{a,i}^{j+1} - c_{a,i}^j}{\tau} = \begin{cases} \beta_{ar} c_i^j - \lambda_{ea} c_{a,i}^j, & 0 < c_{a,i}^j \leq c_{ar}, \\ \beta_{aa} c_i^j - \beta_{ad} c_{a,i}^j - \lambda_{ea} c_{a,i}^j, & c_{ar} < c_{a,i}^j < c_{a0}, \\ 0, & c_{a,i}^j = c_{a0}. \end{cases} \quad (9)$$

Разностная схема уравнения (3):

$$\frac{c_{p,i}^{j+1} - c_{p,i}^j}{\tau} = \begin{cases} \beta_{p0} c_i^j - \lambda_{ep} c_{p,i}^j, & 0 < c_{p,i}^j \leq c_{p1}, \\ \frac{\beta_{p0} c_{p1} c_i^j}{c_{p,i}^j} - \lambda_{ep} c_{p,i}^j, & c_{p1} < c_{p,i}^j < c_{p0}, \\ 0, & c_{p,i}^j = c_{p0}. \end{cases} \quad (10)$$

Начальные условия (4) также представляются в сеточном виде

$$c_i^0 = 0, \quad c_{a,i}^0 = 0, \quad c_{p,i}^0 = 0, \quad i = \overline{0, I}. \quad (11)$$

Граничные условия (5) также представляются в сеточном виде

$$c_0^j = c_0, \quad c_I^j = 0, \quad j = \overline{0, J}, \quad (12)$$

где I – достаточно большое число, для которого приблизительно выполняется $c_I^j = 0$.

Переобразуя разностные схемы (9) - (10) получаем

$$c_{a,i}^{j+1} = \begin{cases} c_{a,i}^j + \tau (\beta_{ar} c_i^j - \lambda_{ea} c_{a,i}^j), & 0 < c_{a,i}^j \leq c_{ar}, \\ c_{a,i}^j + \tau (\beta_{aa} c_i^j - \beta_{ad} c_{a,i}^j - \lambda_{ea} c_{a,i}^j), & c_{ar} < c_{a,i}^j < c_{a0}, \\ c_{a,i}^j, & c_{a,i}^j = c_{a0}. \end{cases} \quad (13)$$

Разностная схема уравнения (3):

$$c_{p,i}^{j+1} = \begin{cases} c_{p,i}^j + \tau (\beta_{p0} c_i^j - \lambda_{ep} c_{p,i}^j), & 0 < c_{p,i}^j \leq c_{p1}, \\ c_{p,i}^j + \tau \left(\frac{\beta_{p0} c_{p1} c_i^j}{c_{p,i}^j} - \lambda_{ep} c_{p,i}^j \right), & c_{p1} < c_{p,i}^j < c_{p0}, \\ c_{p,i}^j, & c_{p,i}^j = c_{p0}. \end{cases} \quad (14)$$

Переобразуем схему (8) и получаем следующую систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$Ac_{i-1}^{j+1} - Bc_i^{j+1} + Ec_{i+1}^{j+1} = -F_i^j, \quad i = \overline{1, I-1}, \quad j = \overline{0, J-1}, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} A &= h\tau v_x + D\tau, \quad B = h^2 + v_x h\tau + 2D\tau, \quad E = D\tau, \\ F &= (h^2 - \lambda_e) c_i^j - \frac{1}{\theta} \frac{c_{a,i}^{j+1} - c_{a,i}^j}{\tau} - \frac{1}{\theta} \frac{c_{p,i}^{j+1} - c_{p,i}^j}{\tau}. \end{aligned}$$

Данную систему (15) решаем методом прогонки при известных $c_{a,i}^{j+1}$ и $c_{p,i}^{j+1}$:

$$c_i^{j+1} = \alpha_{i+1} c_{i+1}^{j+1} + \beta_{i+1}, \quad i = \overline{1, I-1}, \quad j = \overline{0, J-1}, \quad (16)$$

где

$$\alpha_{i+1} = \frac{C}{B - A\alpha_i}, \quad \beta_{i+1} = \frac{A\beta_i + F_i^j}{B - A\alpha_i}. \quad (17)$$

Из граничного условия (12) имеем $c_0^{j+1} = \alpha_1 c_1^{j+1} + \beta_1 = c_0$, откуда

$$\alpha_1 = 0, \quad \beta_1 = c_0. \quad (18)$$

Систему (8) - (10) решаем при известных начальных и граничных условиях (11), (12). Вычисления проводятся в следующей последовательности. Согласно (13) и (14) определяются значения $c_{a,i}^{j+1}$ и $c_{p,i}^{j+1}$. Потом из рекуррентных формул (17) найдем все значения α_i, β_i . Учитывая (12) по формуле (16) найдем все значения c_i^{j+1} в обратном порядке изменения индекса i .

В случае, когда вместо (5) используем (6), β_1 в (18) будет иметь вид

$$\beta_1 = c_0 [1 - e^{-\varphi t_{j+1}}]. \quad (19)$$

А в случае, когда вместо (5) используем (7), β_1 определяется как

$$\beta_1 = c_0 [1 + \sin(\omega t_{j+1})]. \quad (20)$$

4 Основные результаты численных расчетов

В качестве исходных параметров используем следующие числовые величины: $\theta = 0,3$, $v = 10^{-4}$ м/с, $c_{00} = 0,01$, $D = 10^{-6}$ м²/с, $c_{a0} = 4 \cdot 10^{-3}$, $c_{p0} = 8 \cdot 10^{-3}$, $c_{ar} = 2 \cdot 10^{-4}$, $c_{p1} = 3 \cdot 10^{-3}$, $\beta_{p0} = 3 \cdot 10^{-4}$ с⁻¹, $\beta_{ar} = 1,2 \cdot 10^{-4}$ с⁻¹, $\beta_{aa} = 1 \cdot 10^{-4}$ с⁻¹, $\beta_{ad} = 1,2 \cdot 10^{-4}$ с⁻¹, $\lambda_e = 10^{-5}$ с⁻¹, $\lambda_{ea} = 2 \cdot 10^{-5}$ с⁻¹, $\lambda_{ep} = 2 \cdot 10^{-5}$ с⁻¹.

Приведем некоторые результаты численных расчетов.

На Рис.1 показаны три поля концентрации c, c_a, c_p . Из рисунка видно, что с течением времени все три поля концентрации перемещаются внутрь пористой среды. Здесь перенос растворенного вещества происходит быстрее, чем адсорбция. Изменение концентрации адсорбированного вещества в активной и пассивной зонах происходит с небольшой задержкой по сравнению с переносом растворенного вещества.

При $t = 1000$ с концентрация c достигает приблизительно точки $x \approx 0,22$ м, при этом концентрация c_a достигает $x \approx 0,14$ м, а c_p достигает $x \approx 0,15$ м. При $t = 6000$ с концентрация c_p достигает своего максимального значения не только в точке $x = 0$, но и в точках, близких к этой точке, однако c_a достигает своего максимума только в точке $x = 0$. Это можно объяснить тем, что интенсивность адсорбции в пассивной зоне больше, чем в активной зоне, и в пассивной зоне отсутствует десорбция, которая возможна в активной зоне. При $t = 7500$ с видно, что концентрация c_p достигает максимального значения в пассивной зоне до расстояния около $x = 0,1$ м, тогда как концентрация c_a достигает равновесия только в точках, очень близких к точке $x = 0$.

На Рис.2 представлена динамика c , c_a , c_p при выбранных значениях x . На рисунке 2a можно наблюдать, что в начале процесса c резко увеличивается, а затем скорость увеличения c существенно уменьшается около точки $x = 0,01$ при $t \approx 200$ с, $x = 0,03$ при $t \approx 510$ с и $x = 0,06$ при $t \approx 900$ с. Это объясняется малой скоростью адсорбции в обеих зонах при начальных значениях времени. На рисунке 2с видно, что динамика изменения c_p происходит с тремя различными скоростями. Это объясняется многостадийностью кинетического уравнения для c_p . Такую же ситуацию можно наблюдать и в динамике изменения c_a . Только здесь, поскольку c_{ar} в 20 раз меньше c_{a0} , то на графиках 1-й стадии это практически незаметно (рис. 2с).

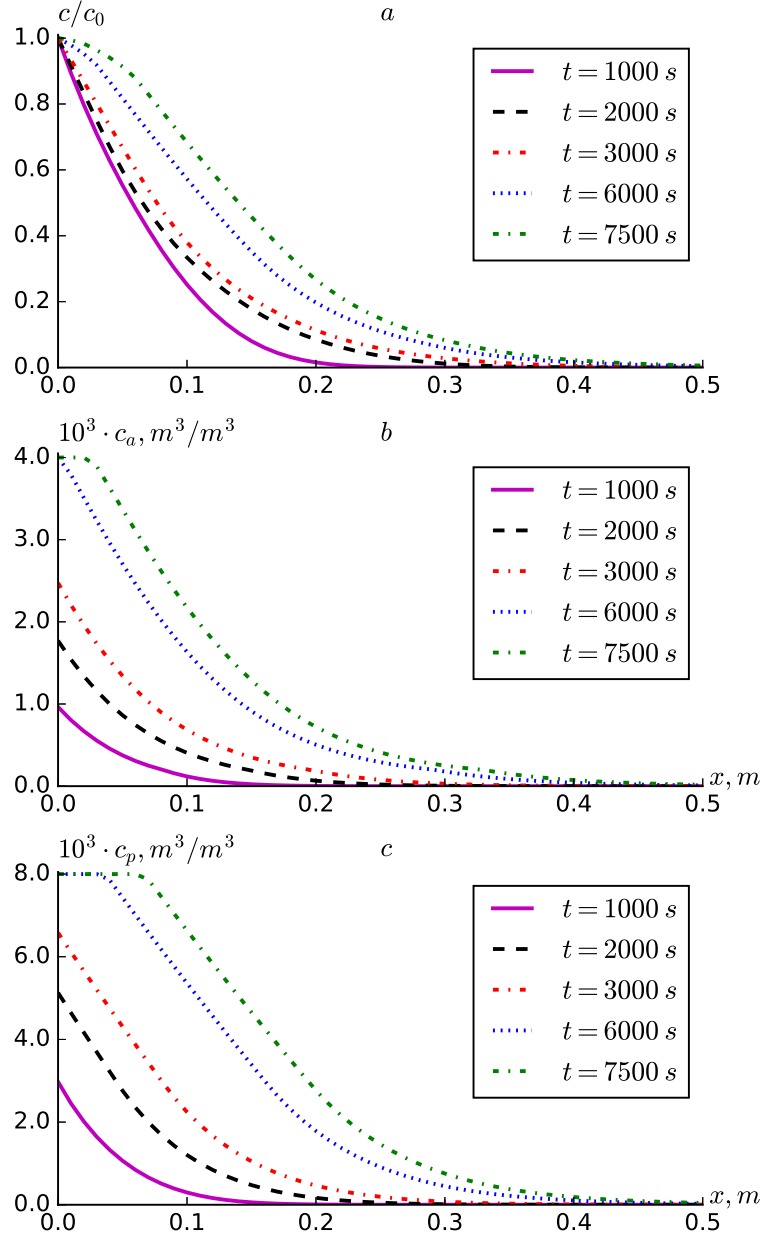


Рис. 1 Профили изменения c/c_0 (a), c_a (b), c_p (c) с граничным условием (5) .

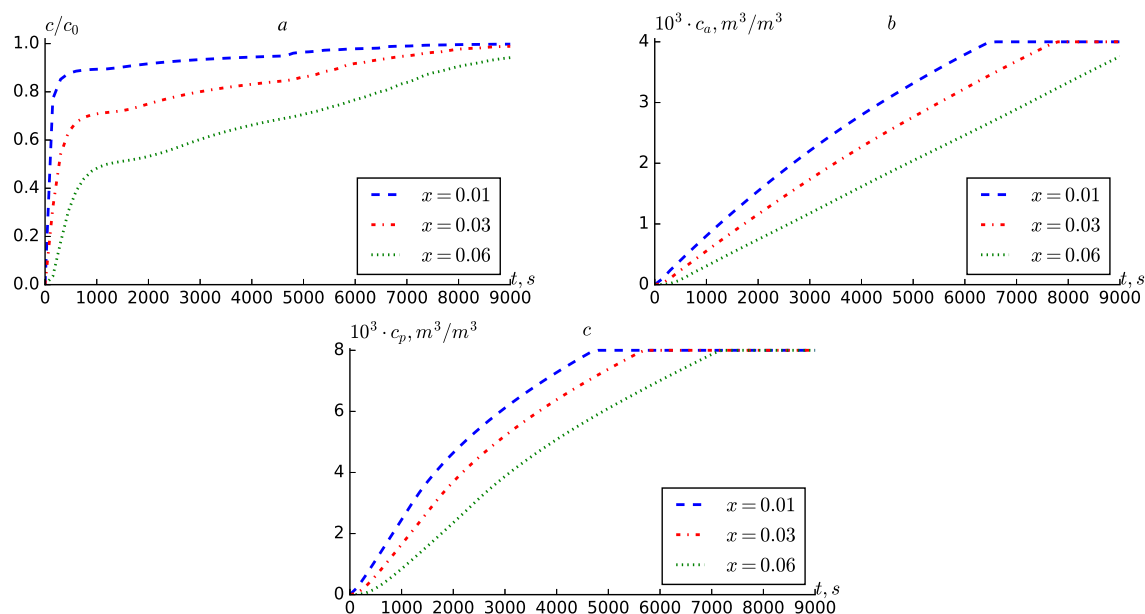


Рис. 2 Динамика изменения c/c_0 (a), c_a (b), c_p (c) с граничным условием (5) в различных точках x .

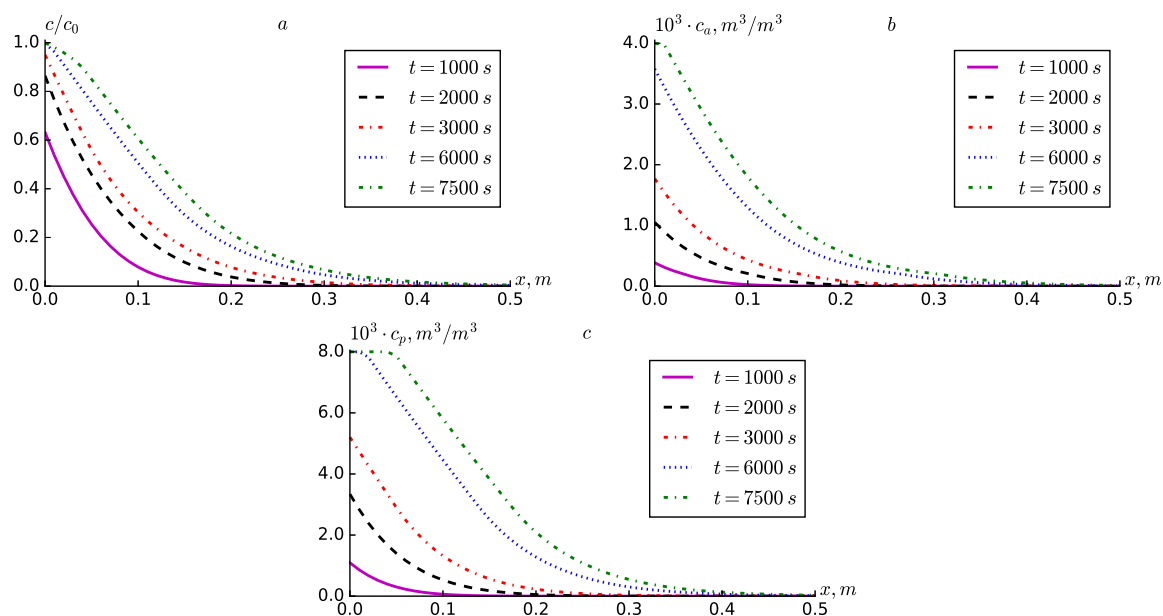


Рис. 3 Профили изменения c/c_0 (a), c_a (b), c_p (c) с граничным условием (6) и $\varphi = 0,001$.

На рис. 3 - 5 приведены результаты с использованием граничного условия (6) вместо (5). Сравнивая рис. 3с рис. 1, можно увидеть, что все три поля концентраций уменьшаются. Например, при $t = 1000$ с на рис 3а, в точки $x = 0$, $c/c_0 = 0,6$ м, а на рис 1а, $c/c_0 = 1$. Аналогично в то же время и в той же точке на рис 3с, $c_a \approx 0,4$, $c_p \approx 1,1$ а в рис 1с $c_a \approx 1$, $c_p \approx 2,8$.

Сравнивая рис. 2 и 4, можно еще раз убедиться в правильности сделанных выше выводов. В частности, на рис 2 видно, что в точки $x = 0.01$ концентрация c_p достигает своё максимальное значене примерно при $t = 4700$, c_a при $t = 6500$, а c/c_0 при $t = 8000$ с. На рисунке 3 видно, что c_p достигает максимального значения при $t = 6000$, c_a при $t = 7500$, а c/c_p при $t = 8000$ с.

На рис. 5 представлены результаты для различных значений параметра φ в условии (6). Видно, что при увеличении значения φ от 0,001 до 0,01 поле c, c_a, c_p уменьшаются незначительно, а при увеличении до 1 — существенно.

На рис. 6 - 8 показаны результаты решения задачи с использованием условия (7) вместо (5). Поскольку левое граничное условие в условии (7) имеет пульсирующий характер, можно заметить, что на рисунке 6a при разных значениях t вблизи точки $x = 0$ получим резко отличающиеся результаты.

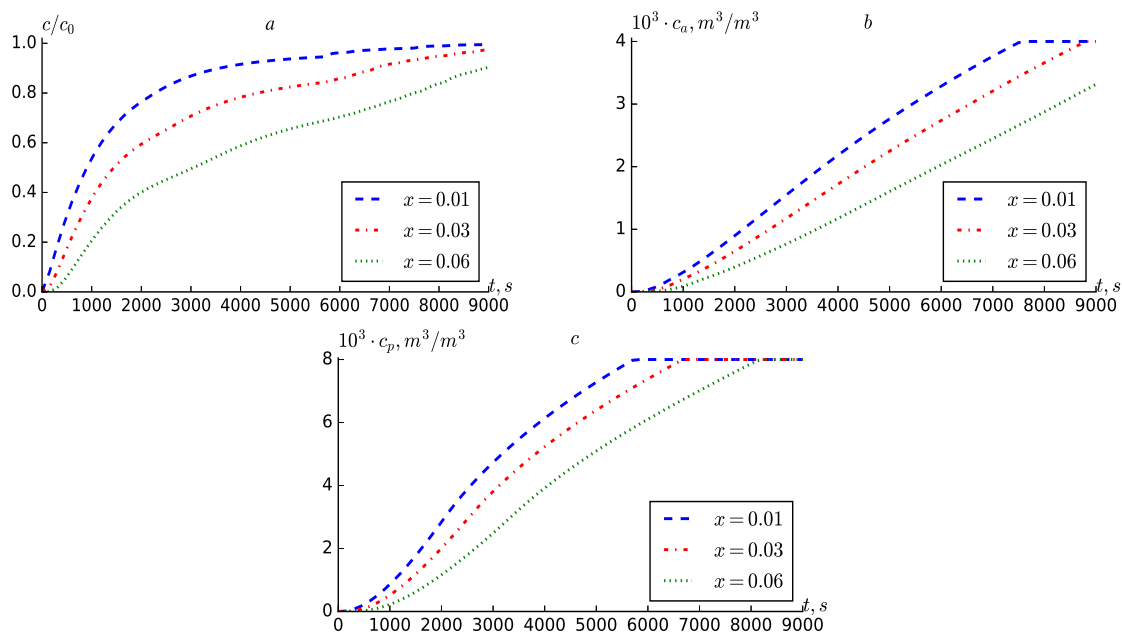


Рис. 4 Динамика изменения c/c_0 (a), c_a (b), c_p (c) с граничным условием (6) в различных точках x , $\varphi = 0,001$.

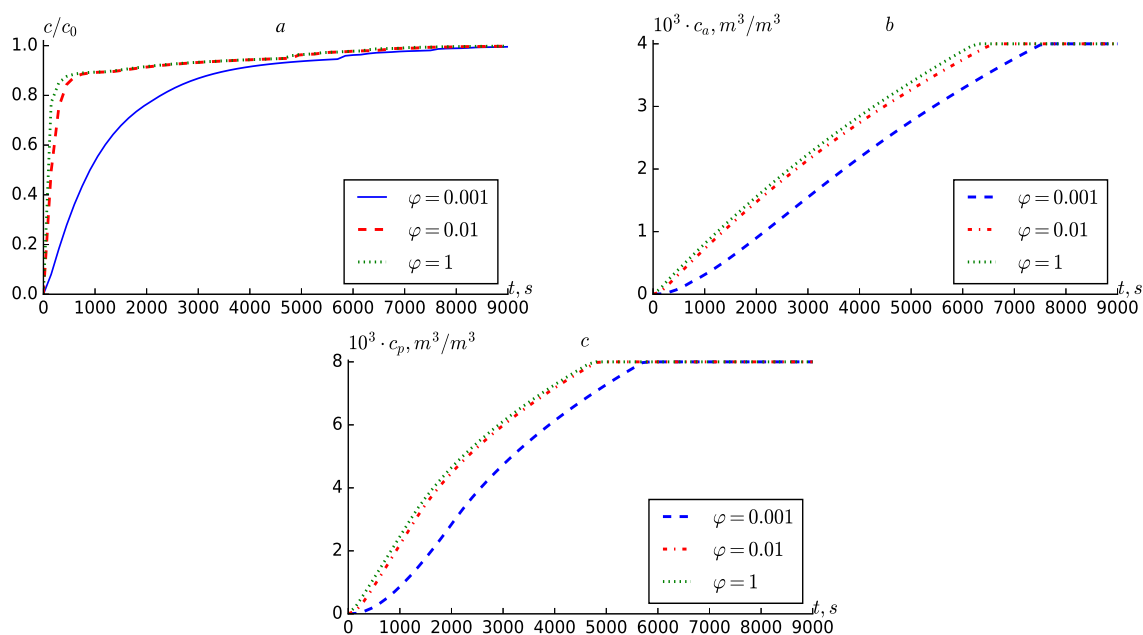


Рис. 5 Динамика изменения c/c_0 (a), c_a (b), c_p (c) с граничным условием (6) для различных значений φ .

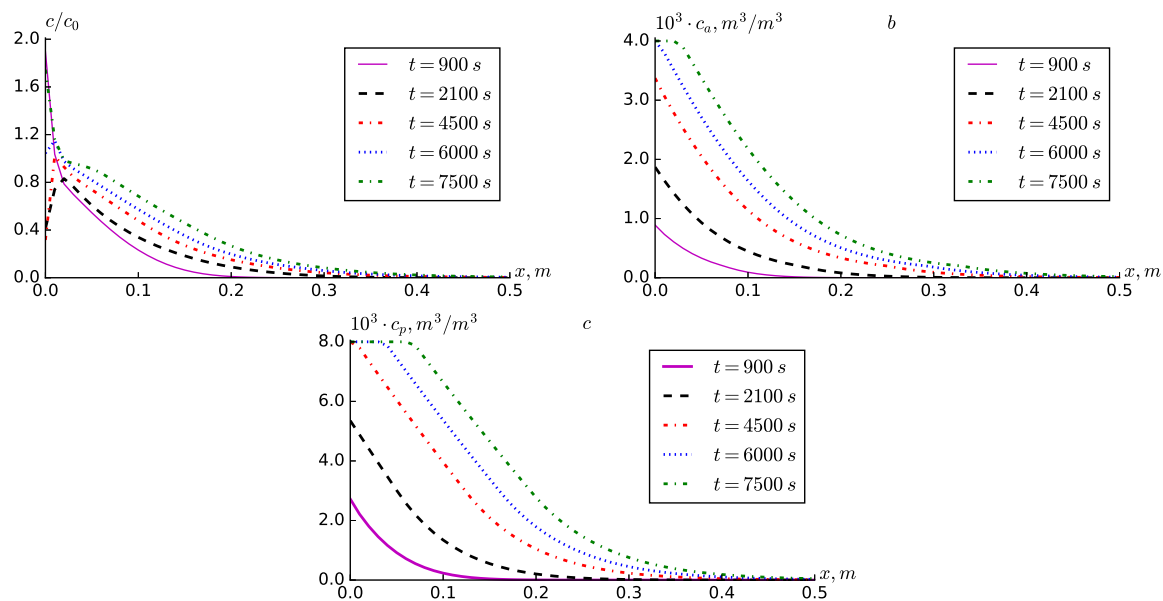


Рис. 6 Профили изменения c/c_0 (a), c_a (b), c_p (c) с граничным условием (7), $\omega = 1$.

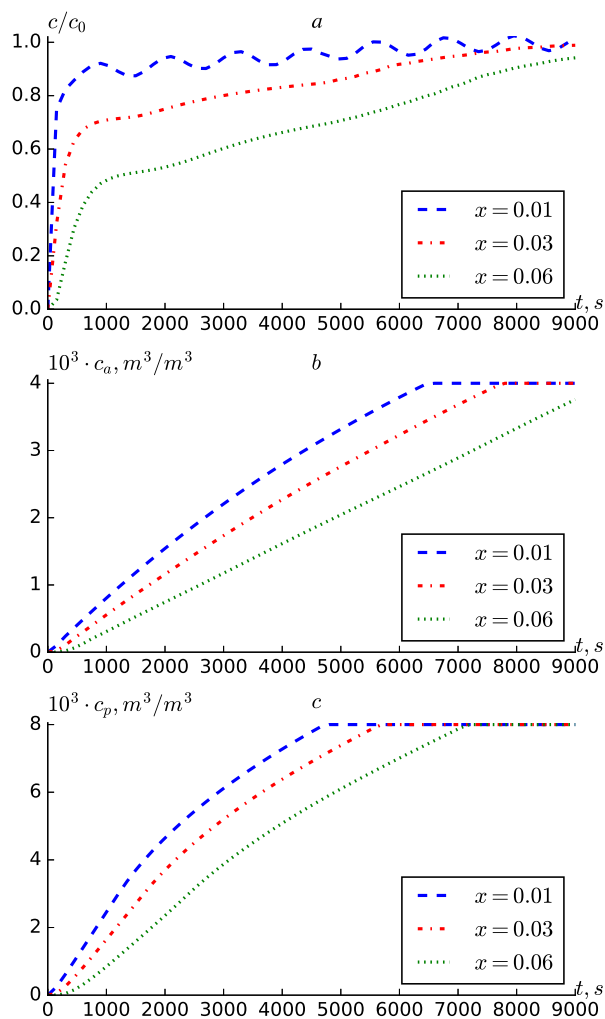


Рис. 7 Динамика изменения c/c_0 (a), c_a (b), c_p (c) с граничным условием (7) в различных точках x , $\omega = 1$.

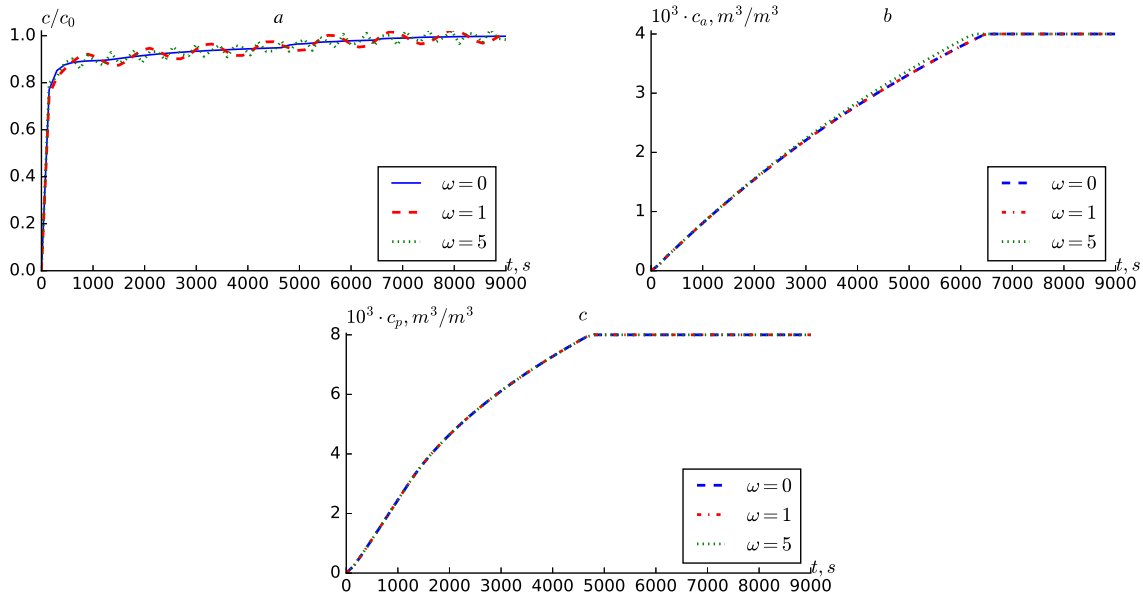


Рис. 8 Динамика изменения c/c_0 (a), c_a (b), c_p (c) с граничным условием (7) для различных значений ω .

5 Заключение

В данной работе исследована математическая модель переноса деградирующего вещества в двухзонной пористой среде. На основе численных расчетов установлено, что начальные условия и параметры системы оказывают существенное влияние на динамику концентрации растворенного и адсорбированного вещества. Различные скорости адсорбции в активной и пассивной зонах существенно влияют на характер распределения вещества в среде. Проведенный анализ позволяет сделать вывод о необходимости учета многоступенчатости кинетики адсорбции при моделировании подобных процессов.

Анализ показывает, что в начале процесса концентрация растворенного вещества резко возрастает, а затем скорость увеличения существенно уменьшается вблизи точки входа. Это объясняется низкой скоростью адсорбции в обеих зонах при малых значениях времени. Также показано, что динамика изменения адсорбированного вещества в пассивной зоне происходит с тремя различными скоростями. Это объясняется многостадийным кинетическим уравнением для c_p , такую же ситуацию можно наблюдать и в динамике изменения адсорбированного растворенного вещества в активной зоне.

В случае использования граничного условия с экспоненциально возрастающей концентрацией на входе результаты показывают, что все три поля концентрации уменьшаются. В случае использования пульсирующего граничного условия распределение концентрации также имеет пульсирующий характер, что особенно заметно вблизи точки входа.

В работе рассмотрена задача о продолжении решения уравнения Гельмгольца. С целью подготовки исходных данных для постановки задачи Коши сначала поставлена и численно решена прямая задача в области $\bar{\Omega} = \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$. Зная решение задачи и его производную по y на некотором сечении y_* поставлена задача Коши о продолжении решения на оставшуюся часть области $\bar{\Omega}_* = \{0 \leq x \leq 1, y_* \leq y \leq 1\}$. На основе численного решения задачи показано, что с увеличением дистанции продолжения решения его устойчивость теряется.

Показано, что вблизи резонансных значений k неустойчивость решения проявляется при меньших дистанциях продолжения решения. Оценены равномерные и среднеквадратичные нормы разности погрешности продолженного решения от решения соответствующей прямой задачи. С увеличением дистанции продолжения решения нормы разности решений увеличиваются, особенно вблизи резонансных значений волнового числа. Анализирован характер матрицы коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений, получаемой при дискретизации задачи Коши о продолжении решения. Показано, что матрица плохо обусловлена, чем и определяется неустойчивость решения.

Литература

- [1] Zeng L., Yuan C., Xiang T., Guan X., Dai L., Xu D., Yang D., Li L., Tian C. Research on the Migration and Adsorption Mechanism Applied to Microplastics in Porous Media: A Review Nanomaterials, – 2024. Vol. 14(12):1060. doi: <http://dx.doi.org/10.3390/nano14121060>.
- [2] Fetter C.W. Contaminant hydrogeology, — Long Grove, Ill: Waveland Press, – 2018.
- [3] Bear J. Theory and applications of transport in Porous Media 5. modeling and applications of transport phenomena in Porous Media — Dordrecht; Boston; London: Kluwer, – 1991.
- [4] Tien C., Ramarao B.V. Granular Filtration of Aerosols and Hydrosols, 2nd ed. — Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, – 2007.
- [5] van Genuchten M.Th., Wagenet R.J. Two – Site / Two – Region Models for Pesticide Transport and Degradation: Theoretical Development and Analytical Solutions Soil Science Society of America Journal, – 1989. Vol.53(5): – P. 1303–1310. doi: <http://dx.doi.org/10.2136/sssaj1989.03615995005300050001x>.
- [6] Berkowitz B., Ishaï D., Scott K.H., Harvey S. Measurements and Models of Reactive Transport in Geological Media, Reviews of Geophysics, – 2016. Vol. 54., no. 4 – P. 930–986. doi: <http://dx.doi.org/10.1002/2016rg000524>
- [7] Ogram A.V., Jessup R.E., Ou L.T., Rao P.S. Effects of sorption on biological degradation rates of (2,4-dichlorophenoxy) acetic acid in soils, Applied and Environmental Microbiology, – 1985. Vol.49(3), – P. 582–587. doi: <http://dx.doi.org/10.1128/AEM.49.3.582-587.1985>
- [8] Mover J.R., Hance R.J., McKone C.E. The effect of adsorbents on the rate of degradation of herbicides incubated with soil, Soil Biology and Biochemistry, – 1972. – Vol. 4. – P. 307–311. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0038-0717\(72\)90026-0](http://dx.doi.org/10.1016/0038-0717(72)90026-0).
- [9] Brusseau M.L., Xie L.H., Li L. Biodegradation during contaminant transport in porous media: 1. mathematical analysis of controlling factors, Journal of Contaminant Hydrology, – 1999. Vol. 37. – P. 269–293. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0169-7722\(99\)00005-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0169-7722(99)00005-4)
- [10] Kammouri S.A., El Hatri M., Crolet J.M. Modeling Contaminant Transport and Biodegradation in a Saturated Porous Media, In: Crolet, J.M. (eds) Computational Methods for Flow and Transport in Porous Media. Theory and Applications of Transport in Porous Media, – 2000. doi: http://dx.doi.org/10.1007/978-94-017-1114-2_16.
- [11] Chamkha A.J., Al-Humoud J. Deep bed filtration with time-dependent input conditions, Special Topics and Reviews in Porous Media: An International Journal, – 2015. Vol. 6. – P. 343–352. doi: <http://dx.doi.org/10.1615/SpecialTopicsRevPorousMedia.v6.i4.30>.
- [12] Ma E., Ouahbi T., Wang H., Ahfir N.D., Alem A., Hammadi A. Modeling of retention and re-entrainment of mono- and poly-disperse particles: Effects of hydrodynamics, particle size and interplay of different-sized particles retention Sci. Total Environ. 596-597: – 2017. – P. 222–229. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.03.254>.

- [13] Веницианов Е.В., Рубинштейн Р.Н. Динамика сорбции из жидких сред Москва: Наука, – 1983.
- [14] Gitis V., Rubinstein I., Livshits M., Ziskind M. Deep – bed filtration model with multistage deposition kinetics, Chemical Engineering Journal, – 2010. Vol. 163. – P. 78–85.
- [15] Fayziev B., Ibragimov G., Khuzhayorov B., Alias IA. 2020. Numerical study of suspension filtration model in porous medium with modified deposition kinetics Symmetry 12 No. 5, 696. doi: <http://dx.doi.org/10.3390/sym12050696>.
- [16] Khuzhayorov B.K., Makhmudov J.M., Fayziev B.M., Begmatov T.I. Some Model of a Suspension Filtration in a Porous Media That Accounts for the Two-Zone and Multistage Character of Deposition Kinetics Journal of Applied and Industrial Mathematics, – 2020. Vol. 14 No. 3, – P. 513–523. doi: <http://dx.doi.org/10.1134/S1990478920030102>.
- [17] Samarskii A.A. The Theory of Difference Schemes CRC Press: New York, NY, USA, – 2001.

Поступила в редакцию 08.04.2025

UDC 532.546

MATHEMATICAL MODEL OF TRANSPORT OF DEGRADING SUBSTANCE IN A TWO-ZONE POROUS MEDIUM

^{1,2*} *Khuzhayorov B.Kh., ¹Fayziev B.M., ²Sagdullaev O.K.*

*b.khuzhayorov@mail.ru

¹Samarkand State University, Samarkand city 140104, Uzbekistan;

²V.I. Romanovskiy Institute of Mathematics, UzAS,
9, University street, Tashkent, 100174 Uzbekistan;

³Kattakurgan branch of the Samarkand State University,
Kattakurgan city, Uzbekistan.

In the paper developed and numerically solved the problem of solute transport in a porous medium consisting of active and passive zones, taking into account the multi-stage nature of adsorption kinetics. A mathematical model of the process is compiled based on general conservation laws and additional phenomenological assumptions. The influence of initial conditions on the characteristics of transfer and adsorption is analyzed. The results of numerical modeling are presented, confirming the influence of system parameters on the concentration dynamics in the active and passive zones. The obtained results can be used to predict the spread of pollutants in underground reservoirs and develop strategies for its control.

Keywords: adsorption, finite differences, mathematical model, multistage kinetics, porous medium.

Citation: Khuzhayorov B.Kh., Fayziev B.M. 2025. Mathematical model of transport of degrading substance in a two-zone porous medium. *Problems of Computational and Applied Mathematics*. 2(64): 5-16.

DOI: https://doi.org/10.71310/pcam.2_64.2025.01.

ПРОБЛЕМЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ

№ 2(64) 2025

Журнал основан в 2015 году.

Издается 6 раз в год.

Учредитель:

Научно-исследовательский институт развития цифровых технологий и
искусственного интеллекта.

Главный редактор:

Равшанов Н.

Заместители главного редактора:

Азамов А.А., Арипов М.М., Шадиметов Х.М.

Ответственный секретарь:

Ахмедов Д.Д.

Редакционный совет:

Алоев Р.Д., Амиргалиев Е.Н. (Казахстан), Арушанов М.Л., Бурнашев В.Ф.,
Загребина С.А. (Россия), Задорин А.И. (Россия), Игнатьев Н.А.,
Ильин В.П. (Россия), Иманкулов Т.С. (Казахстан), Исмагилов И.И. (Россия),
Кабанихин С.И. (Россия), Карачик В.В. (Россия), Курбонов Н.М., Маматов Н.С.,
Мирзаев Н.М., Мухамадиев А.Ш., Назирова Э.Ш., Нормуродов Ч.Б.,
Нуралиев Ф.М., Опанасенко В.Н. (Украина), Расулмухамедов М.М., Расулов А.С.,
Садуллаева Ш.А., Старовойтов В.В. (Беларусь), Хаётов А.Р., Халджигитов А.,
Хамдамов Р.Х., Хужаев И.К., Хужаеров Б.Х., Чье Ен Ун (Россия),
Шабозов М.Ш. (Таджикистан), Dimov I. (Болгария), Li Y. (США),
Mascagni M. (США), Min A. (Германия), Singh D. (Южная Корея),
Singh M. (Южная Корея).

Журнал зарегистрирован в Агентстве информации и массовых коммуникаций при
Администрации Президента Республики Узбекистан.

Регистрационное свидетельство №0856 от 5 августа 2015 года.

ISSN 2181-8460, eISSN 2181-046X

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

За точность фактов и достоверность информации ответственность несут авторы.

Адрес редакции:

100125, г. Ташкент, м-в. Буз-2, 17А.

Тел.: +(998) 712-319-253, 712-319-249.

Э-почта: journals@airi.uz.

Веб-сайт: <https://journals.airi.uz>.

Дизайн и вёрстка:

Шарилов Х.Д.

Отпечатано в типографии НИИ РЦТТИ.

Подписано в печать 25.04.2025 г.

Формат 60x84 1/8. Заказ №2. Тираж 100 экз.

PROBLEMS OF COMPUTATIONAL AND APPLIED MATHEMATICS

No. 2(64) 2025

The journal was established in 2015.
6 issues are published per year.

Founder:

Digital Technologies and Artificial Intelligence Development Research Institute.

Editor-in-Chief:

Ravshanov N.

Deputy Editors:

Azamov A.A., Aripov M.M., Shadimetov Kh.M.

Executive Secretary:

Akhmedov D.D.

Editorial Council:

Aloev R.D., Amirgaliev E.N. (Kazakhstan), Arushanov M.L., Burnashev V.F.,
Zagrebina S.A. (Russia), Zadorin A.I. (Russia), Ignatiev N.A., Ilyin V.P. (Russia),
Imankulov T.S. (Kazakhstan), Ismagilov I.I. (Russia), Kabanikhin S.I. (Russia),
Karachik V.V. (Russia), Kurbonov N.M., Mamatov N.S.,
Mirzaev N.M., Mukhamadiev A.Sh., Nazirova E.Sh., Normurodov Ch.B., Nuraliev F.M.,
Opanasenko V.N. (Ukraine), Rasulov A.S., Sadullaeva Sh.A., Starovoitov V.V. (Belarus),
Khayotov A.R., Khaldjigitov A., Khamdamov R.Kh., Khujaev I.K., Khujayorov B.Kh.,
Chye En Un (Russia), Shabozov M.Sh. (Tajikistan), Dimov I. (Bulgaria), Li Y. (USA),
Mascagni M. (USA), Min A. (Germany), Singh D. (South Korea), Singh M. (South
Korea).

The journal is registered by Agency of Information and Mass Communications under the
Administration of the President of the Republic of Uzbekistan.

The registration certificate No. 0856 of 5 August 2015.

ISSN 2181-8460, eISSN 2181-046X

At a reprint of materials the reference to the journal is obligatory.
Authors are responsible for the accuracy of the facts and reliability of the information.

Address:

100125, Tashkent, Buz-2, 17A.

Tel.: +(998) 712-319-253, 712-319-249.

E-mail: journals@airi.uz.

Web-site: <https://journals.airi.uz>.

Layout design:

Sharipov Kh.D.

DTAIDRI printing office.

Signed for print 25.04.2025

Format 60x84 1/8. Order No. 2. Print run of 100 copies.

Содержание

<i>Хужаёров Б.Х., Файзиев Б.М., Сагдуллаев О.К.</i> Математическая модель переноса деградирующего вещества в двухзонной пористой среде	5
<i>Салимова А.И., Паровик Р.И.</i> Программный комплекс ABMVAFracSim для исследования дробного осциллятора Ван дер Поля-Эйри	17
<i>Равшанов Н., Шадманов И.У., Адизова З.М.</i> Разработка математической модели для контроля и прогнозирования процессов тепло- и влагообмена в процессе хранения зерновых продуктов с учетом воздействия вредителей	30
<i>Рустамов Н., Амиртаев К.</i> Эвристическая модель оценки психического свойства лидера	46
<i>Нормуродов Ч.Б., Муродов С.К., Шакаева Э.Э.</i> Спектрально-сеточная аппроксимация обыкновенного дифференциального уравнения с малым параметром при старшей производной	54
<i>Хайётов А.Р., Бердимуродова У., А.</i> Оптимальная квадратурная формула с производными для произвольно фиксированных узлов в пространстве Соболева	64
<i>Нормуродов Ч.Б., Шакаева Э.Э., Зиякулова Ш.А.</i> Дискретный вариант метода предварительного интегрирования и его применение к численному решению сингулярно возмущенного уравнения	74
<i>Адылова Ф.Т.</i> Почему квантовые вычисления – это будущее искусственного интеллекта? .	87
<i>Мухамедиева Д.Т., Раупова М.Х.</i> Квадратичное программирование в модели распределения ресурсов в сельском хозяйстве на основе квантового алгоритма	101
<i>Шарипов Д.К., Саидов А.Д.</i> Модифицированный метод SHAP для интерпретируемого прогнозирования осложнений сердечно-сосудистых заболеваний	114

Contents

<i>Khuzhayorov B.Kh., Fayziev B.M.</i>	
Mathematical model of transport of degrading substance in a two-zone porous medium	5
<i>Salimova A.I., Parovik R.I.</i>	
ABMVAFracSim software package for studying the fractional van der Pol-Airy oscillator	17
<i>Ravshanov N., Shadmanov I.U., Adizova Z.M.</i>	
Development of a mathematical model for monitoring and forecasting heat and moisture exchange processes during grain storage considering pest impact	30
<i>Rustamov N., Amirtayev K.</i>	
A heuristic model for evaluating the mental qualities of a leader	46
<i>Normurodov Ch.B., Murodov S.K., Shakaeva E.E.</i>	
Spectral-grid approximation of an ordinary differential equation with a small parameter at the highest derivative	54
<i>Hayotov A.R., Berdimuradova U.A.</i>	
An optimal quadrature formula with derivatives for arbitrarily fixed nodes in the Sobolev space	64
<i>Normurodov Ch.B., Shakaeva E.E., Ziyakulova Sh.A.</i>	
A discrete variant of the method pre-integration and its application to the numerical solution of a singularly perturbed equation	74
<i>Adilova F.T.</i>	
Why are quantum computing technologies the future of artificial intelligence? . .	87
<i>Mukhamediyeva D.T., Raupova M.H.</i>	
Quadratic programming in the resource allocation model in agriculture based on the quantum algorithm	101
<i>Sharipov D.K., Saidov A.D.</i>	
Modified SHAP approach for interpretable prediction of cardiovascular complications	114

HISOBLASH VA AMALIY МАТЕМАТИКА MUAMMOLARI

ПРОБЛЕМЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
PROBLEMS OF COMPUTATIONAL
AND APPLIED MATHEMATICS

