

УДК 631.9:004.94

Альона Дяденчук, кандидат технічних наук, доцент,
доцент кафедри вищої математики і фізики,
Євгеній Філіпович, здобувач другого (магістерського)
рівня вищої освіти,
Таврійський державний агротехнологічний університет
імені Дмитра Моторного, м. Запоріжжя, Україна

МОДЕЛЮВАННЯ ВЕРТИКАЛЬНОГО ПЕРЕНОСУ ЗАБРУДНЮВАЧА В ГРУНТОВОМУ ПРОФІЛІ ДЛЯ ЗАДАЧ АГРОЕКОЛОГІЇ

Анотація. У роботі розроблено цифрову модель вертикального переносу забруднювача в ґрунтовому профілі на основі нестационарного конвективно-дифузійного рівняння з урахуванням гідродинамічної дисперсії, адвекції, лінійної рівноважної сорбції та першопорядкової біологічної деградації. Для чисельного розв'язання застосовано явну схему скінченних різниць на рівномірній просторово-часовій сітці. Проведено аналіз чутливості моделі до коефіцієнта сорбції K_d , який показав його визначальний вплив на глибину проникнення фронту забруднення. Реалізацію здійснено в середовищі Matlab. Отримані результати можуть бути використані для прогнозування міграції нітратів, пестицидів і важких металів в агроecosистемах, нормування агрохімічного навантаження та планування екологічного моніторингу.

Ключові слова: ґрунт, забруднення, дифузія, математичне моделювання, Matlab, агроecологія.

Abstract. The paper develops a digital model of vertical transport of a pollutant in a soil profile based on a non-stationary convective-diffusion equation taking into account hydrodynamic dispersion, advection, linear equilibrium sorption and first-order biological degradation. For numerical solution, an explicit finite difference scheme on a uniform spatiotemporal grid is used. The sensitivity of the model to the sorption coefficient K_d is analyzed, which showed its determining influence on the depth of penetration of the pollution front. The implementation was carried out in the Matlab environment. The results obtained can be used to predict the migration of nitrates, pesticides and heavy metals in agroecosystems, standardization of agrochemical load and planning of environmental monitoring.

Keywords: soil, pollution, diffusion, mathematical modeling, Matlab, agroecology.

Інтенсифікація сільськогосподарського виробництва, масштабне застосування мінеральних добрив, пестицидів та важких металів у складі

агрохімікатів призводять до поступового забруднення ґрунтового профілю [1-2]. Вертикальний розподіл забруднювачів у ґрунтовому профілі є одним із ключових показників екологічного стану агроєкосистем. Нітрати, пестициди, важкі метали та інші речовини здатні проникати у глибші горизонти ґрунту, впливаючи на якість підземних вод і біологічну активність.

Традиційний моніторинг (польовий відбір зразків і лабораторний аналіз) є дорогим і не дає змоги прогнозувати динаміку процесу в часі. Для оцінювання таких процесів широко застосовуються математичні моделі, що дозволяють прогнозувати поведінку забруднювачів за різних умов, оцінити ризики забруднення горизонтів ґрунтових вод та обґрунтувати заходи рекультивації [3]. Попри існування комерційних пакетів, таких як HYDRUS-1D, HydroGeoSphere та інші [4, 5], питання прозорого, верифікованого та доступного інструментарію для умов українських ґрунтів залишається відкритим.

Метою даного дослідження є розробка та верифікація цифрової моделі вертикального профілю забруднення ґрунту на основі конвективно-дифузійного рівняння з урахуванням сорбції та деградації, а також її реалізація в середовищі Matlab.

Одновимірний перенос забруднювача у ґрунтовому профілі описується конвективно-дисперсійним рівнянням:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} - \lambda C,$$

де $C(z, t)$ – питома концентрація забруднювача у ґрунті, мг/кг сухого ґрунту; z – глибина, м; t – час, доби; D – коефіцієнт гідродинамічної дисперсії, м²/добу; v – швидкість руху порового розчину, м/добу; λ – константа першопорядкової деградації, 1/добу. Коефіцієнт ретардації R визначає затримування забруднювача внаслідок сорбції на твердій фазі ґрунту:

$$R = 1 + \frac{\rho}{\theta} K_d,$$

де ρ – об’ємна щільність ґрунту, кг/м³; θ – об’ємна вологість; K_d – коефіцієнт сорбції, м³/кг.

Для верифікації числового розв’язку використовується аналітичне рішення Огата-Бенкса [6]:

$$C(z, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{(Rz - vt)}{2\sqrt{DRt}} + \exp\left(\frac{vz}{D}\right) \operatorname{erfc} \left(\frac{Rz + vt}{2\sqrt{DRt}} \right) \right],$$

де C_0 – концентрація забруднювача на поверхні ґрунту.

Для чисельного розв’язання рівняння застосовується явна схема скінченних різниць на рівномірній просторово-часовій сітці з кроками Δz та Δt . Стійкість схеми визначається умовою

$$\alpha = \frac{D\Delta t}{R\Delta z^2} \leq 0.5,$$

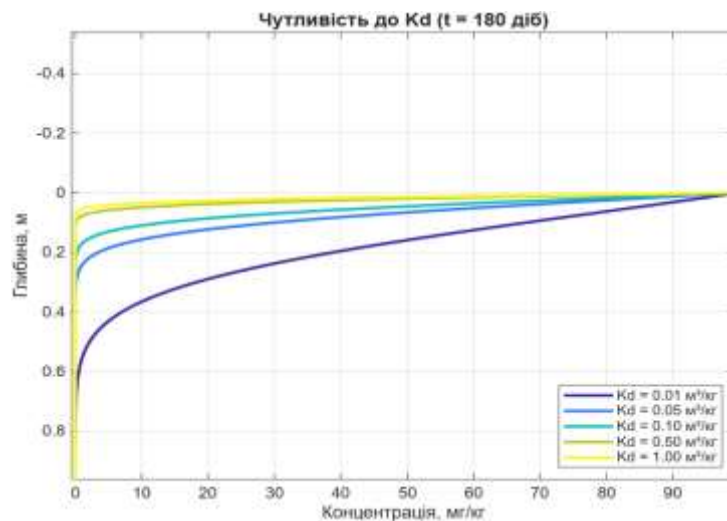
що обмежує вибір часових кроків для забезпечення коректності чисельного розв’язку. Початкова умова задає відсутність забруднення в ґрунтовому профілі $C(z, 0) = 0$. На верхній межі $z = 0$ встановлюється постійна концентрація забруднювача $C(0, t) = C_0 = 100$ мг/кг, що моделює тривале поверхнєве надходження.

На нижній межі $z = L$ використовується умова нульового градієнта $\partial C / \partial z|_{z=L} = 0$, яка є коректною за умови, що фронт забруднення не досягає глибини L протягом часу моделювання, для малих значень $K_d \leq 0,05$ м³/кг доцільно збільшувати L до 2,5 м і більше.

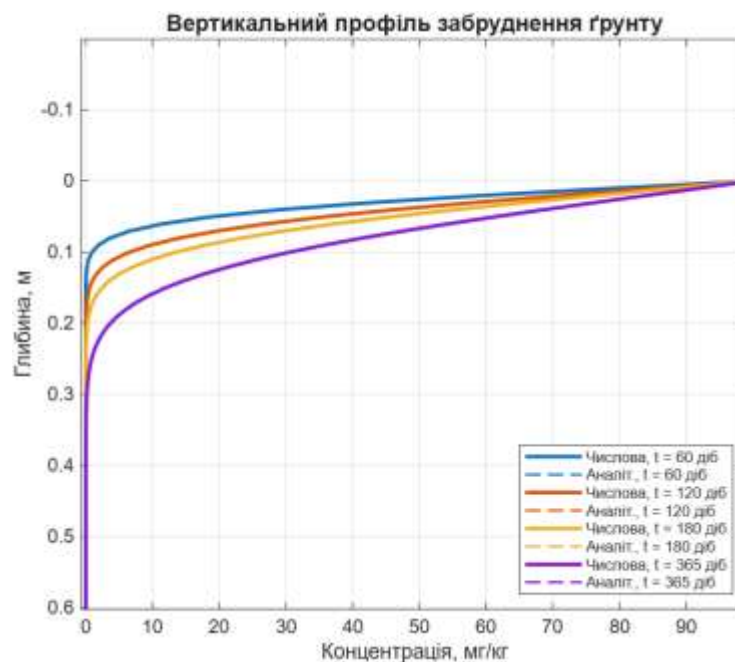
Порівняння числового розв’язку з аналітичним рішенням Огата-Бенкса показало, що максимальне відхилення не перевищує 3-5%, що підтверджує коректність реалізованої схеми. Аналіз чутливості (рис. 1, а) засвідчив визначальний вплив коефіцієнта сорбції K_d на швидкість міграції: при $K_d = 0,01$ м³/кг фронт забруднення за 180 діб досягає глибини близько 80 см, тоді як при $K_d = 1,0$ м³/кг – лише 10-12 см. Для важких металів із високим K_d (свинець,

мідь) ризик забруднення ґрунтових вод є мінімальним, тоді як для нітратів і деяких пестицидів із низьким K_d – потенційно критичним.

На рис. 1, б представлено динаміку профілю в часі, згідно якої видно, що за перші 60 діб забруднювач проникає на глибину близько 15-20 см. До кінця року (365 діб) фронт міграції досягає 50-60 см, що відповідає зоні кореневмісного шару більшості польових культур. Деградація знижує максимальні концентрації у нижніх горизонтах приблизно на 20-30% порівняно з консервативним сценарієм.



а)



б)

Рис. 1. Результати числового моделювання вертикального профілю концентрації забруднювача в ґрунті (вісь X – концентрація, мг/кг; вісь Y – глибина, м): а) вплив коефіцієнта сорбції K_d на глибину міграції ($t = 180$ діб); б) динаміка профілю за період 60-365 діб ($K_d = 0,1$ м³/кг)

Отримана модель може бути використана для розрахунку гранично допустимих норм внесення агрохімікатів, прогнозування часу досягнення забруднювачем горизонту ґрунтових вод та планування мережі моніторингових свердловин.

Таким чином, у роботі розроблено цифрову модель вертикального переносу забруднювача на основі нестационарного конвективно-дифузійного рівняння. Чисельний розв'язок, отриманий явною схемою скінченних різниць і верифікований аналітичним рішенням Огата-Бенкса ($\lambda = 0$), демонструє розбіжність не більше 3-5%. Чутливий аналіз підтвердив ключову роль коефіцієнта сорбції K_d : його зростання від 0,01 до 1,0 м³/кг зменшує глибину проникнення фронту за 180 діб з приблизно 80 до 10-12 см, що вказує на високий ризик міграції слабкосорбованих речовин до ґрунтових вод. Модель реалізовано в Matlab як параметризований модуль, придатний для прогнозування міграції агрохімікатів і планування моніторингу.

Список використаних джерел

1. Цицюра Я. Г., Шкатула Ю. М., Забарна Т. А., Пелех Л. В. Інноваційні підходи до фіторе mediaції та фіторекультивациі у сучасних системах землеробства. Вінниця : ТОВ «Друк», 2022. 1200 с.
2. Прокопенко Н., Браславська О., Грицик О. Вплив сучасних методів землекористування на деградацію ґрунтів. *Містобудування та територіальне планування*. 2025. № 88. С. 375-389.
3. Наземцева Я. О., Лазненко Д. О. Моделювання міграції пестицидів у ґрунтах від джерел постійного забруднення. *Східно-Європейський журнал передових технологій*. 2013. Вип. 4, № 10 (64). С. 12-15.
4. Саприкін В. Ю., Бугай Д. О., Скальський О. С. Модельні оцінки інфільтраційних потоків вологи крізь ґрунтові екрани хвостосховищ промислових відходів

Придніпровського хімічного заводу (м. Кам'янське). *Збірник наукових праць Інституту геологічних наук НАН України*. 2019. Т. 12. С. 84-94.

5. Кізілова Н. М., Ричак Н. Л. Інформаційне супроводження системи менеджменту водними ресурсами на урбанізованих територіях. *Системи обробки інформації*. 2020. № 4(163). С. 37-47.

6. Ogata A., Banks R. B. A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. *U.S. Geological Survey Professional Paper*. 1961. № 411-A. P. A1-A7.