Харківський національний університет радіоелектроніки

Міністерство освіти і науки України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

КОВТУН АРТЕМ ДМИТРОВИЧ

УДК 519.63 : 519.65

ДИСЕРТАЦІЯ

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗАБРУДНЕННЯ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА З ВИКОРИСТАННЯМ ІНТЕРЛІНАЦІЇ ФУНКЦІЙ

113 Прикладна математика
11 Математика та статистика

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело
_____ А. Д. Ковтун

Науковий керівник:
Литвин Олег Миколайович, доктор фізико-математичних наук, професор
Першина Юлія Ігорівна, доктор фізико-математичних наук, професор

Харків – 2026

АНОТАЦІЯ

Ковтун А. Д. Математичне моделювання забруднення навколишнього середовища з використанням інтерлінації функцій. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 113 Прикладна математика. – Харківський національний університет радіоелектроніки, Харків, 2026.

Метою дисертаційної роботи є розробка та обґрунтування математичних моделей і чисельних методів їх аналізу при дослідженні процесів поширення забруднювачів у повітряному середовищі та реконструкції просторових полів забруднення ґрунту за неповними даними спостережень.

Об’єктом дослідження є процеси формування, перенесення та просторового розподілу забруднювальних речовин у повітряному середовищі та ґрунті.

Предметом дослідження є математичні моделі дифузійно-реакційного та конвективно-дифузійно-реакційного перенесення забруднювачів з локалізованими джерелами, чисельні методи їх аналізу, моделі та методи реконструкції просторових полів забруднення ґрунту.

У дисертаційній роботі розглянуто задачі математичного моделювання забруднення навколишнього середовища та реконструкції просторових полів екологічних характеристик за неповними даними спостережень. Дослідження поєднує два взаємопов’язані напрями. Перший напрям присвячений побудові й дослідженню математичної моделі поширення газоподібних забруднювачів у повітряному середовищі від локалізованих трубчастих джерел. Другий напрям стосується відновлення просторових полів забруднення ґрунту за дискретними вимірюваннями із застосуванням методів інтерлінації та узагальненої інтерполяції.

У першій частині роботи побудовано систему рівнянь для опису перенесення двох компонентів забруднення в атмосферному середовищі. Як модельні компоненти розглянуто вуглекислий газ (перша компонента) та триоксид сірки (друга

компонента). Вихідна постановка враховує дифузійне перенесення, можливий конвективний внесок, реакційно-кінетичні перетворення між компонентами, а також точкові джерела викидів, що моделюються за допомогою дельта-функцій Дірака. Для опису обміну із зовнішнім середовищем використовуються крайові умови Робіна. Показано, що повна конвективно-дифузійно-реакційна модель у загальному випадку несамоспряженою, тому для побудови варіаційної постановки та використання принципу Рітца доцільно переходити до редукованої дифузійно-реакційної схеми, у якій домінує дифузійний механізм перенесення.

На основі концепції локального потенціалу Гландсдорфа-Пригожина сформульовано редукований функціонал дифузійно-реакційної задачі. Для чисельного розв’язання застосовано метод скінченних елементів у одномірній постановці з кусково-лінійними базисними функціями. Побудовано двоступеневу обчислювальну схему. На першому етапі визначається друга компонента, для якої виникає нелінійна дифузійно-реакційна задача; її розв’язання здійснюється модифікованим методом Ньютона з регуляризацією, демпфуванням і контролем збіжності. На другому етапі, після знаходження профілю другої компоненти, розв’язується лінійна скінченно-елементна система для першої компоненти, де вплив другої компоненти враховується через зв’язувальний реакційний член. Така схема дозволяє узгодити фізичну модель з варіаційною постановкою і водночас спростити чисельну реалізацію.

Окрему увагу приділено постобробці скінченно-елементного розв’язку. Для відновлення вузлових значень похідних концентрацій та побудови дифузійних потоків використано середньоквадратичну проєкцію похідної у той самий скінченно-елементний простір. Це дало змогу побудувати допоміжну лінійну систему для вузлових похідних та обчислити вузлові значення потоків для кожної компоненти. Запропонований підхід узгоджується з основною схемою методу скінченних елементів і є зручним для подальшого аналізу, візуалізації та застосування в оптимізаційних процедурах.

Другий напрям дослідження пов’язаний із реконструкцією просторових полів забруднення ґрунту за дискретними даними спостережень. У роботі вико-

ристано апарат інтерлінації функцій багатьох змінних, який дозволяє відновлювати невідомі функції за їх значеннями на системах точок, ліній або профілів. Такий підхід є особливо важливим в екологічних задачах, оскільки реальні моніторингові дані, як правило, є неповними, нерегулярно розміщеними та не покривають усю досліджувану область. Тому задача полягає у побудові наближеного просторового поля, яке узгоджується з експериментальними даними та зберігає основні риси просторового розподілу забруднення.

Як приклад досліджено реконструкцію тривимірних полів концентрацій важких металів у ґрунті. Розглянуто концентрації важких та потенційно токсичних металів або металоїдів, які характеризують техногенне навантаження на ґрунтове середовище. Для побудови наближених полів застосовано інтерлінаційні оператори, узагальнені інтерполяційні схеми та метод Шепарда для випадку нерегулярно розміщених точок спостереження. Проаналізовано можливості використання різних схем відновлення в залежності від структури вхідних даних. Побудовані тривимірні поверхні, контурні карти та просторові профілі концентрацій дозволили виявити локальні зони підвищеного забруднення, оцінити характер просторової неоднорідності й порівняти результати різних підходів до реконструкції.

Отже, у дисертації одержані нові наукові результати, які полягають в тому, що:

– вперше для задачі поширення двокомпонентної суміші забруднювачів у повітряному середовищі від локалізованих трубчастих джерел запропоновано узгоджене розділення повної конвективно-дифузійно-реакційної моделі та редукованої самоспряженої дифузійно-реакційної постановки;

– вперше обґрунтовано, що повна конвективно-дифузійно-реакційна модель має розглядатися у слабкій постановці Гальоркіна, тоді як метод Рітца коректно застосовується до її редукованої самоспряженої дифузійно-реакційної частини;

– вперше побудовано двоступеневу редуковану скінченно-елементну схему, у якій нелінійна задача для другої компоненти забруднювачів розв’язується модифікованим методом Ньютона, а концентрація першої компоненти визначається з лінійної системи скінченно-елементних рівнянь за вже знайденим профілем концентрації другої компоненти;

– дістали подальший розвиток методи інтерлінації функцій багатьох змінних та відповідні чисельні схеми в частині їх застосування до задач реконструкції просторових полів забруднення ґрунту за неповними даними спостережень;

– удосконалено метод інтерлінації функцій багатьох змінних шляхом поєднання локальних інтерлінаційних операторів із триангуляцією області та барицентричним зважуванням, що забезпечує реконструкцію просторових полів забруднення ґрунту за нерегулярно розміщеними й неповними даними спостережень з урахуванням локальної геометрії їх розташування; це дало змогу зменшити середню похибку реконструкції порівняно з традиційними схемами інтерполяції та підвищити стійкість відновлення за нерегулярного розміщення точок спостереження.

Практичне значення роботи полягає у можливості використання одержаних моделей, алгоритмів і обчислювальних схем для аналізу стану повітряного та ґрунтового середовищ. Розроблена модель поширення двох компонентної суміші забруднення може застосовуватися для прогнозування профілів концентрацій, оцінювання впливу локалізованих промислових джерел, аналізу ролі реакційних параметрів і побудови дифузійних потоків. Методи реконструкції просторових полів можуть бути використані для обробки екологічних даних моніторингу, побудови карт забруднення ґрунтів, виявлення локальних аномалій та підтримки прийняття рішень у природоохоронних і моніторингових задачах.

Ключові слова: математичне моделювання, метод скінченних елементів, інтерлінація, розподіл забруднень, прикладна математика, чисельні методи, неруйнівний контроль, крайова задача, нелінійні диференціальні рівняння, модифікований метод Ньютона, розриви, метод Рітца, метод Гальоркіна, точкове джерело, багатокомпонентне неоднорідне середовище.

Список публікацій здобувача

Наукові публікації, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації

1. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднюючих речовин у повітрі від промислового забруднення. *Математичне*

та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки. 2025. Вип. 27. С. 53–68. DOI: 10.32626/2308-5878.2025-27.53-68 [Наукове фахове видання України категорії Б; входить до міжнародної наукометричної бази Google Scholar.]

2. Kovtun A., Pershyna I., Mezhuev V. Mathematical Model of the Process of Air Pollutant Distribution for Multiple Point Sources of Industrial Pollution. *International Conference on Reliable Systems Engineering (ICoRSE) – 2025. Lecture Notes in Networks and Systems*. Vol. 1592. Springer, Cham, 2025. P. 409–420. DOI: 10.1007/978-3-032-02508-1_35 [Входить до міжнародної наукометричної бази Scopus.]

3. Pershyna I., Ptashny O., Kovtun A. Restoration of the Internal Structure of Three Dimensional Discontinuous Objects Using Discontinuous Constructions. *3rd International Conference on Smart Technologies in Urban Engineering – 2024. Lecture Notes in Networks and Systems*. Vol. 1658. Springer, Cham, 2026. P. 279–287. DOI: 10.1007/978-3-032-06829-3_25 [Входить до міжнародної наукометричної бази Scopus.]

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації

4. Литвин О. М., Литвин О. О., Ковтун А. Д. Математична модель засміченості деякої поверхні на основі аерокосмічних даних. *The Influence of Society on the Development of Science and the Invention of New Methods: proceedings of the XXIII International Scientific and Practical Conference*. Prague, Czech Republic, June 13–16, 2023. International Science Group, 2023. P. 312. DOI: 10.46299/ISG.2023.1.23.

5. Ковтун А. Д. Метод оптимізації розподілу забруднень у повітрі для випадку декількох джерел. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті: матеріали 28-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп'ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання»*, Харків, Україна, 16–18 квітня 2024 р. Харків : ХНУРЕ, 2024. С. 216–218.

6. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу ба-

гатокомпонентного забруднення у повітрі. *Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я. MicroCAD-2024*. Харків : НТУ «ХПІ», 2024. С. 1300.

7. Ковтун А. Д. Відновлення тривимірних розривних об'єктів за допомогою розривних сплайн-інтерполянтів. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті: матеріали 29-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп'ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання»*, Харків, Україна, 16–19 квітня 2025 р. Харків : ХНУРЕ, 2025. С. 251–253.

8. Ковтун А. Д., Першина Ю. І. Метод оптимізації розподілу забруднень у повітрі для випадку декількох джерел. *Innovative technologies for training and educating young people: proceedings of the 2nd International scientific and practical conference*. Boston, USA, January 14–17, 2025. International Science Group, 2025. P. 259–263.

9. Ковтун А. Д., Першина Ю. І. Відновлення тривимірних розривних об'єктів за допомогою розривних сплайн-інтерполянтів. *Молоді вчені 2025 — від теорії до практики: матеріали XV Всеукраїнської науково-практичної конференції здобувачів вищої освіти і молодих учених*. Дніпро : Журфонд, 2025. С. 300–304.

10. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднення важкими металами за допомогою інтерлінації функцій трьох змінних. *Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXXIII Міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2025*, Харків, Україна, 14–17 травня 2025 р. Харків : НТУ «ХПІ», 2025. С. 1524.

11. Pershyna Y. I., Kovtun A. D. Interlineation method of 3D functions for the problem of detecting soil pollution with heavy metals. *Актуальні тенденції розвитку освіти, науки та технологій: матеріали VIII Міжнародної науково-практичної конференції*, Харків, Україна, 23 травня 2025 р. Харків : БННППІ Каразінського університету, 2025. Ч. 2. С. 16–18.

12. Першина Ю. І., Ковтун А. В. Чисельна реалізація методу інтерлінації для 3D реконструкції полів концентрацій тяжких металів: модель, валідація та

порівняння з методами Шепарда. *Комп'ютерно-інтегровані технології автоматизації технологічних процесів на транспорті та у виробництві: матеріали Всеукраїнської науково-практичної конференції здобувачів вищої освіти і молодих учених (КІТ-2025)*. Харків : ХНАДУ, 2025. С. 30.

13. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математична модель просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методами поліноміальної інтерлінації функцій. *Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXXIV Міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2026*, Харків, Україна, 13–16 травня 2026 р. Харків : НТУ «ХПІ», 2026. С. 568.

14. Ковтун А. Д. Метод виявлення вмісту важких металів у ґрунті за допомогою інтерлінації функції. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті: матеріали 30-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп'ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання»*, Харків, Україна, 22–24 квітня 2026 р. Харків : ХНУРЕ, 2026. С. 303–304.

Наукові праці, які додатково відображають
наукові результати дисертації

15. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднення важкими металами методами неруйнівного контролю за допомогою інтерлінації функцій трьох змінних. *Прикладні проблеми комп'ютерних наук, безпеки та математики*. 2025. № 5. С. 24–31.

SUMMARY

Kovtun A. D. Mathematical Modeling of Environmental Pollution Using Function Interlination. – Qualification scientific study with manuscript copyright.

A thesis submitted in fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy in specialty 113 Applied Mathematics. – Kharkiv National University of Radio Electronics, Kharkiv, 2026.

The aim of the dissertation is to develop and substantiate mathematical models and numerical methods for their analysis in studying the processes of pollutant dispersion in the air environment and reconstructing spatial fields of soil contamination from incomplete observational data.

The object of the study is the processes of formation, transport, and spatial distribution of pollutants in the air environment and soil.

The subject of the study includes mathematical models of diffusion-reaction and convection-diffusion-reaction transport of pollutants with localized sources, numerical methods for their analysis, as well as models and methods for reconstructing spatial fields of soil contamination.

The dissertation addresses problems of mathematical modeling of environmental pollution and reconstruction of spatial fields of ecological characteristics from incomplete observational data. The research combines two interrelated directions. The first direction is devoted to the construction and analysis of a mathematical model of gaseous pollutant dispersion in the air from localized tubular sources. The second direction concerns the reconstruction of spatial fields of soil contamination from discrete measurements using interlineation methods and generalized interpolation.

In the first part of the work, a system of equations is constructed to describe the transport of two pollutant components in the atmosphere. Carbon dioxide (the first component) and sulfur trioxide (the second component) are considered as model substances. The formulation accounts for diffusion transport, a possible convective contribution, reaction-kinetic transformations between components, and point emission

sources modeled by Dirac delta functions. Robin boundary conditions are used to describe exchange with the external environment. It is shown that the full convection-diffusion–reaction model is generally non-self-adjoint; therefore, for constructing a variational formulation and applying the Ritz method, it is reasonable to consider a reduced diffusion-reaction scheme in which the diffusion mechanism dominates.

Based on the Glansdorff-Prigogine local potential concept, a reduced functional for the diffusion–reaction problem is formulated. For numerical solution, the finite element method is applied in a one-dimensional setting with piecewise linear basis functions. A two-stage computational scheme is developed. At the first stage, the second component is determined by solving a nonlinear diffusion–reaction problem using a modified Newton method with regularization, damping, and convergence control. At the second stage, after obtaining the profile of the second component, a linear finite element system is solved for the first component, where the influence of the second component is incorporated through a coupling reaction term. This scheme ensures consistency between the physical model and the variational formulation while simplifying numerical implementation.

Special attention is paid to post-processing of the finite element solution. To recover nodal values of concentration derivatives and construct diffusion fluxes, a least-squares projection of the derivative onto the same finite element space is used. This leads to an auxiliary linear system for nodal derivatives and enables computation of nodal flux values for each component. The proposed approach is consistent with the main finite element scheme and is convenient for further analysis, visualization, and application in optimization procedures.

The second research direction is related to reconstructing spatial fields of soil contamination from discrete observational data. The work employs the theory of interlineation of multivariate functions, which allows reconstructing unknown functions from their values on sets of points, lines, or profiles. This approach is particularly important in environmental problems, as real monitoring data are usually incomplete, irregularly distributed, and do not cover the entire domain. Therefore, the problem consists in constructing an approximate spatial field consistent with experimental data

while preserving the main features of pollutant distribution.

As an example, reconstruction of three-dimensional fields of heavy metal concentrations in soil is investigated. Concentrations of heavy and potentially toxic metals or metalloids characterizing anthropogenic impact on soil are considered. Interlineation operators, generalized interpolation schemes, and Shepard's method for irregularly distributed observation points are used to construct approximate fields. The capabilities of different reconstruction schemes depending on the structure of input data are analyzed. Constructed three-dimensional surfaces, contour maps, and spatial profiles of concentrations allow identifying local zones of increased pollution, assessing spatial heterogeneity, and comparing different reconstruction approaches.

Thus, the dissertation presents new scientific results, namely:

– for the first time, for the problem of dispersion of a two-component mixture of pollutants in the air from localized tubular sources, a consistent separation of the full convection–diffusion–reaction model and a reduced self-adjoint diffusion–reaction formulation is proposed;

– for the first time, it is substantiated that the full convection–diffusion–reaction model should be considered in the Galerkin weak formulation, whereas the Ritz method is correctly applied to its reduced self-adjoint diffusion–reaction part;

– for the first time, a two-stage reduced finite element scheme is constructed, in which the nonlinear problem for the second pollutant component is solved by a modified Newton method, while the concentration of the first component is determined from a linear finite element system using the already obtained profile of the second component;

– methods of interlineation of multivariate functions and corresponding numerical schemes are further developed in terms of their application to reconstruction problems of spatial soil contamination fields from incomplete observational data;

– the method of interlineation of multivariate functions is improved by combining local interlineation operators with domain triangulation and barycentric weighting, which ensures reconstruction of spatial soil contamination fields from irregular and incomplete observational data while accounting for local geometric fea-

tures; this reduces the average reconstruction error compared to traditional interpolation schemes and improves stability under irregular data distribution.

The practical significance of the work lies in the possibility of applying the developed models, algorithms, and computational schemes for analyzing the state of air and soil environments. The proposed model of two-component pollutant dispersion can be used for predicting concentration profiles, assessing the impact of localized industrial sources, analyzing the role of reaction parameters, and constructing diffusion fluxes. Methods for reconstructing spatial fields can be applied to environmental monitoring data processing, soil contamination mapping, detection of local anomalies, and decision support in environmental protection and monitoring tasks.

Keywords: mathematical modeling, finite element method, interlineation, pollution distribution, applied mathematics, numerical methods, nondestructive testing, boundary-value problem, nonlinear differential equations, modified Newton method, discontinuities, Ritz method, Galerkin method, point source, multicomponent heterogeneous medium.

List of applicant's published works

Scientific publications containing the main scientific results of the dissertation

1. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднюючих речовин у повітрі від промислового забруднення. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки*. 2025. Вип. 27. С. 53–68. DOI: 10.32626/2308-5878.2025-27.53-68 [Наукове фахове видання України категорії Б; входить до міжнародної наукометричної бази Google Scholar.]

2. Kovtun A., Pershyna I., Mezhuev V. Mathematical Model of the Process of Air Pollutant Distribution for Multiple Point Sources of Industrial Pollution. *International Conference on Reliable Systems Engineering (ICoRSE) – 2025. Lecture Notes in Networks and Systems*. Vol. 1592. Springer, Cham, 2025. P. 409–420. DOI: 10.1007/978-3-032-02508-1_35 [Входить до міжнародної наукометричної бази

Scopus.]

3. Pershyna I., Ptashny O., Kovtun A. Restoration of the Internal Structure of Three Dimensional Discontinuous Objects Using Discontinuous Constructions. *3rd International Conference on Smart Technologies in Urban Engineering – 2024. Lecture Notes in Networks and Systems*. Vol. 1658. Springer, Cham, 2026. P. 279–287. DOI: 10.1007/978-3-032-06829-3_25 [Входить до міжнародної наукометричної бази Scopus.]

Scientific papers validating the testing of the materials presented in the dissertation

4. Литвин О. М., Литвин О. О., Ковтун А. Д. Математична модель засміченості деякої поверхні на основі аерокосмічних даних. *The Influence of Society on the Development of Science and the Invention of New Methods: proceedings of the XXIII International Scientific and Practical Conference*. Prague, Czech Republic, June 13–16, 2023. International Science Group, 2023. P. 312. DOI: 10.46299/ISG.2023.1.23.

5. Ковтун А. Д. Метод оптимізації розподілу забруднень у повітрі для випадку декількох джерел. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті: матеріали 28-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп'ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання»*, Харків, Україна, 16–18 квітня 2024 р. Харків : ХНУРЕ, 2024. С. 216–218.

6. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу багатокомпонентного забруднення у повітрі. *Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я. MicroCAD-2024*. Харків : НТУ «ХПІ», 2024. С. 1300.

7. Ковтун А. Д. Відновлення тривимірних розривних об'єктів за допомогою розривних сплайн-інтерполянтів. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті: матеріали 29-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп'ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання»*, Харків, Україна, 16–19 квітня 2025 р. Харків : ХНУРЕ, 2025. С. 251–253.

8. Ковтун А. Д., Першина Ю. І. Метод оптимізації розподілу забруднень у повітрі для випадку декількох джерел. *Innovative technologies for training and educating young people: proceedings of the 2nd International scientific and practical conference*. Boston, USA, January 14–17, 2025. International Science Group, 2025. P. 259–263.

9. Ковтун А. Д., Першина Ю. І. Відновлення тривимірних розривних об'єктів за допомогою розривних сплайн-інтерполянтів. *Молоді вчені 2025 — від теорії до практики: матеріали XV Всеукраїнської науково-практичної конференції здобувачів вищої освіти і молодих учених*. Дніпро : Журфонд, 2025. С. 300–304.

10. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднення важкими металами за допомогою інтерлінації функцій трьох змінних. *Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXXIII Міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2025*, Харків, Україна, 14–17 травня 2025 р. Харків : НТУ «ХПІ», 2025. С. 1524.

11. Pershyna Y. I., Kovtun A. D. Interlineation method of 3D functions for the problem of detecting soil pollution with heavy metals. *Актуальні тенденції розвитку освіти, науки та технологій: матеріали VIII Міжнародної науково-практичної конференції*, Харків, Україна, 23 травня 2025 р. Харків : БННППІ Каразінського університету, 2025. Ч. 2. С. 16–18.

12. Першина Ю. І., Ковтун А. В. Чисельна реалізація методу інтерлінації для 3D реконструкції полів концентрацій тяжких металів: модель, валідація та порівняння з методами Шепарда. *Комп'ютерно-інтегровані технології автоматизації технологічних процесів на транспорті та у виробництві: матеріали Всеукраїнської науково-практичної конференції здобувачів вищої освіти і молодих учених (КІТ-2025)*. Харків : ХНАДУ, 2025. С. 30.

13. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математична модель просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методами поліноміальної інтерлінації функцій. *Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXXIV Міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2026*,

Харків, Україна, 13–16 травня 2026 р. Харків : НТУ «ХПІ», 2026. С. 568.

14. Ковтун А. Д. Метод виявлення вмісту важких металів у ґрунті за допомогою інтерлінації функції. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті: матеріали 30-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп'ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання»*, Харків, Україна, 22–24 квітня 2026 р. Харків : ХНУРЕ, 2026. С. 303–304.

Scientific papers that additionally reflect the scientific results of the dissertation

15. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднення важкими металами методами неруйнівного контролю за допомогою інтерлінації функцій трьох змінних. *Прикладні проблеми комп'ютерних наук, безпеки та математики*. 2025. № 5. С. 24–31.

ЗМІСТ

С.

Вступ 19

1 Існуючі методи математичного моделювання просторово-часового розподілу забруднювачів в навколишньому середовищі за даними спостережень та вимірювань 29

1.1 Підходи до математичного опису забруднення повітря 29

1.2 Моделювання забруднення ґрунтів і пористих середовищ: перенесення, сорбція, деградація 35

1.3 Реконструкція просторових полів за обмеженими вимірюваннями: інтерполяція, геостатистика, інтерлінація 37

1.4 Аналіз практичних підходів до просторової реконструкції полів забруднення ґрунту і супровідних індикаторів якості ґрунту 39

1.5 Вибір типу просторової моделі для опису забруднення 47

...1.6 Побудова графічної моделі 53

...1.7 ГІС і дистанційне зондування Землі як джерело даних та аналітична оболонка для моделей 60

1.8 Обернені задачі, оцінювання параметрів та оптимізація: зв’язок моделі з даними 62

Висновки до розділу 1 64

2 Математична модель перенесення забруднювачів у повітрі та скінченно-елементна реалізація на основі методу Гальоркіна та методу Рітца 66

2.1 Побудова математичної моделі розподілу забруднення у повітрі .. 66

2.2 Повна слабка постановка та редукована варіаційна модель (розмежування повної слабкої постановки Гальоркіна та редукованої варіаційної моделі Рітца) 80

2.3 Варіаційна постановка задачі на основі локального потенціалу 88

2.4 Двоступенева редукована FEM-схема та модифікований метод Ньютона 91
2.4.1 Нелінійна стадія для другої компоненти C_2 92
2.4.2 Лінійна стадія для першої компоненти C_1 94
2.5 Вузлова похідна як L^2-проєкція у постобробці FEM-розв'язку 97
2.6 Псевдокод двоступеневого редукованого алгоритму МСЕ/Ньютона 101
Висновки за розділом 2 106
3 Відновлення тривимірного поля забруднення ґрунту методами інтерлінації та Шепарда 108
3.1 Означення інтерлінації та інтерфлетації функцій 108
3.2 Математичне моделювання просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методами поліноміальної інтерлінації функцій на системі прямих (ліній) спостережень – пунктів відбору проб ґрунту, розміщених регулярно 118
3.3 Математичне моделювання просторового розподілу забруднення ґрунтів методами сплайн-інтерполяції на системі профілів (пунктів відбору проб ґрунту), розміщених регулярно 122
3.3.1 Поліноміальні сплайни 122
3.3.2 Математичне моделювання просторового розподілу забруднення ґрунту методом сплайн-інтерлінації функцій трьох змінних на системі ліній спостережень (профілів) 131
3.4 Математичне моделювання просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методом сплайн-інтерлінації на системі нерегулярно розміщених прямих спостережень 133
3.5 Математичне моделювання просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методом узагальненої глобальної інтерполяційної формули Дональда Шепарда 138
3.6 Математичне моделювання просторового розподілу забруднювачів

у ґрунті методом узагальненої глобальної інтерполяційної формули О. М. Литвина 149
Висновки за розділом 3 153
4 Обчислювальна реалізація та аналіз результатів запропонованих математичних моделей 155
4.1 Обчислювальна схема перевірки запропонованих моделей 155
4.2 Результати скінченно-елементного моделювання перенесення забруднювачів у повітрі 157
4.3 Результати реконструкції тривимірного поля забруднення ґрунту 165
Висновки за розділом 4 172
Висновки 175
Список використаних джерел 182
Додаток А Список публікацій здобувача і відомості про апробацію результатів дисертації 195
А.1 Список публікацій здобувача 195
А.2 Відомості про апробацію результатів дисертації 198
Додаток Б Програмна реалізація алгоритмів реконструкції поля забруднення ґрунту 200
Додаток В Варіаційне виведення редукованої дифузійно-реакційної постановки 214
Додаток Г Обчислення нелінійного реакційного вектору за двоточковою квадратурою Гаусса 219
Додаток Д Локальні матриці P_1-елементів, джерельні та граничні внески 222

ВСТУП

Актуальність теми. Задачі оцінювання, прогнозування та реконструкції полів забруднення у природних середовищах за обмежених і нерегулярно розміщених даних спостережень визначають необхідність розроблення узгоджених математичних і чисельних підходів до їх розв'язання. Математичне моделювання забруднення ґрунту важкими металами та іншими антропогенними хімічними забруднювачами (нафтопродукти, залишки пестицидів і агрохімікатів, поверхнево-активні речовини, феноли, надлишкові нітрати тощо) є одним із ключових напрямів сучасної екологічної безпеки та раціонального природокористування. У промислово розвинених регіонах України значні площі територій зазнають тривалого техногенного навантаження внаслідок роботи металургійних, хімічних, нафто- та газопереробних підприємств, енергетики, транспорту, а також інтенсивного застосування мінеральних добрив і засобів захисту рослин. Це зумовлює необхідність кількісної оцінки стану середовища та прогнозу просторово-часового розподілу забруднювачів.

У системі забезпечення продовольчої та екологічної безпеки ґрунтовий покрив є базовим ресурсом, від якого залежать врожайність, якість сільськогосподарської продукції та стійкість екосистем. Накопичення у ґрунті важких металів – свинцю (Pb), кадмію (Cd), ртуті (Hg), миш'яку (As), хрому (Cr), міді (Cu), цинку (Zn) – а також стійких органічних забруднювачів (залишки пестицидів, поліциклічні ароматичні вуглеводні, нафтопродукти, фенольні сполуки) і надлишкових сполук азоту (NO_3^-, NO_2^-) призводить до їх переходу в рослини, потрапляння в корм тварин і, зрештою, в харчовий ланцюг людини. Навіть за малих концентрацій ці домішки є токсичними: вони можуть уражати нирки, печінку, нервову й серцево-судинну системи, спричиняти анемію, алергічні реакції, затримку розвитку у дітей та підвищувати ризик онкологічних захворювань. Частина металів і органічних забруднювачів здатна акумулюватися в організмі протягом десятиліть.

З екологічної та аграрної точок зору тривале забруднення ґрунтів важкими металами та хімічними забруднювачами призводить до деградації земельних ресурсів. Токсичні елементи й органічні сполуки порушують діяльність ґрунтової мікрофлори, погіршують агрофізичні властивості ґрунту, знижують його родючість та врожайність культур. Одночасно страждає біорізноманіття, зменшується здатність ґрунту до самовідновлення. У ряді випадків процеси деградації набувають практично незворотного характеру й мають довгострокові негативні наслідки для сільського господарства та довкілля в цілому.

Безпосереднє дослідження процесів розповсюдження забруднення є зазвичай складним або навіть і неможливим через низку причин (довготривалість процесу забруднення, небезпечність його для здоров'я людини та стану навколишнього середовища, дороговизну апаратного забезпечення процесу вимірювання рівня забруднення тощо), тому при аналізі зазначених процесів на перший план виходить застосування методів математичного моделювання.

Методи математичного моделювання процесів формування, перенесення та просторового розподілу забруднювальних речовин у повітряному середовищі та ґрунті включають в себе чисельний аналіз (наприклад, методом скінченних елементів – МСЕ (англ. finite element method – FEM)) крайових задач для рівняння конвективно-дифузійно-реакційного перенесення, а також відновлення функцій багатьох змінних (профілів концентрації забруднювачів) за їх слідами на системі заданих ліній (для цього використовується апарат теорії інтерполяції або її узагальнення – інтерлінація та інтерфлетація). Незважаючи на значні успіхи в цій сфері, складність та різноманітність постановок зазначених крайових задач викликає протиріччя, пов'язане з відсутністю систематичного дослідження скінченно-елементних схем для рівняння конвективно-дифузійно-реакційного перенесення у загальному формулюванні.

Отже, актуальною науковою задачею є розробка нових та вдосконалення існуючих методів математичного моделювання процесів конвективно-дифузійно-реакційного перенесення та методів відновлення функцій, що характеризують рівень забруднення.

У останні десятиріччя значний внесок у математичне моделювання процесів забруднення навколишнього середовища зробили вітчизняні вчені А. Я. Бомба, І. В. Сергієнко, В. В. Скопецький, В. С. Дейнека, В. І. Бєляєв, Н. В. Кондуфорова, С. І. Кіфоренко, А. В. Шавріна, а також зарубіжні дослідники Donald Shepard, Brian J. Alloway, Peter Goovaerts, Tomislav Hengl, Alex B. McBratney, Richard Webster, Margaret A. Oliver, V. L. Mulder, S. de Bruin, Michael E. Schaepman, Thomas R. Mayr, Alexander Tarantola, George Farin, Zeev Ditzian, Vilmos Totik, а розвиток методів відновлення функції багатьох змінних за їх слідами на системі заданих ліній, поверхонь тощо пов'язаний з роботами О.М. Литвина, О.О. Литвина, Ю.І. Першиної, О.П. Нечуйвітер, О.В. Славіка.

Мета і завдання дослідження. *Метою* дисертаційної роботи є розробка та обґрунтування математичних моделей і чисельних методів їх аналізу при дослідженні процесів поширення забруднювачів у повітряному середовищі та реконструкції просторових полів забруднення ґрунту за неповними даними спостережень.

Для досягнення поставленої мети необхідно виконати такі завдання:

– проаналізувати сучасні математичні моделі перенесення забруднювачів у природних середовищах, методи скінченних елементів, варіаційні постановки, слабкі форми Гальоркіна, метод Рітца, методи інтерлінації та узагальненої інтерполяції для розв'язання задач реконструкції просторових полів;

– побудувати математичну модель стаціонарного перенесення двокомпонентної суміші забруднювачів CO_2 / SO_3 у повітряному середовищі від локалізованих трубчастих джерел з урахуванням дифузії, можливого конвективного внеску, реакційно-кінетичних перетворень та точкових джерел, заданих за допомогою дельта-функції Дірака;

– сформулювати повну конвективно-дифузійно-реакційну постановку задачі та обґрунтувати її слабку форму Гальоркіна з урахуванням несамоспряженого характеру конвективного оператора;

– виділити редуковану самоспряжену дифузійно-реакційну частину моделі та побудувати для неї варіаційну постановку на основі методу Рітца і концепції локального потенціалу;

– побудувати скінченно-елементну апроксимацію редукованої задачі на основі кусково-лінійних P_1-базисних функцій;

– розробити двоступеневу схему на основі МСЕ та методу Ньютона, у якій спочатку розв'язується нелінійна задача для компоненти SO_3, а потім при вже знайденому її профілі визначається компонента CO_2 з лінійної скінченно-елементної системи;

– розробити процедуру постобробки скінченно-елементного розв'язку на основі L^2-проєкції вузлової похідної для відновлення градієнтів концентрацій і дифузійних потоків;

– дослідити методи реконструкції просторових полів забруднення ґрунту за дискретними, лінійно заданими та нерегулярно розміщеними даними спостережень;

– застосувати інтерлінаційні оператори, узагальнені інтерполяційні схеми та метод Шепарда для відновлення тривимірних полів концентрацій важких металів у ґрунті;

– виконати чисельні експерименти, побудувати графічні профілі, поверхні та карти концентрацій, порівняти різні підходи до реконструкції просторових полів і проаналізувати отримані результати.

Об'єктом дослідження є процеси формування, перенесення та просторового розподілу забруднювальних речовин у повітряному середовищі та ґрунті.

Предметом дослідження є математичні моделі дифузійно-реакційного та конвективно-дифузійно-реакційного перенесення забруднювачів з локалізованими джерелами, чисельні методи їх аналізу, моделі та методи реконструкції просторових полів забруднення ґрунту.

Методи дослідження. У роботі використовуються методи математичного моделювання процесів перенесення домішок у природних середовищах; методи теорії дифузійно-реакційних і конвективно-дифузійно-реакційних рівнянь; слабкі форми Гальоркіна; варіаційний метод Рітца; концепція локального потенціалу; метод скінченних елементів із кусково-лінійними P_1-базисними функціями; мо-

дифікований метод Ньютона для розв'язання нелінійних алгебраїчних систем; методи регуляризації та демпфування ітераційного процесу; L^2-проєкція для відновлення вузлових похідних; методи інтерлінації функцій багатьох змінних; узагальнені інтерполяційні схеми; метод Шепарда для нерегулярно розміщених даних; чисельне моделювання та комп'ютерна візуалізація результатів.

Наукова новизна отриманих результатів. У результаті виконання дисертаційного дослідження розроблено й обґрунтовано математичні моделі та чисельні схеми для аналізу забруднення повітряного та ґрунтового середовищ. При цьому отримано такі нові наукові результати:

– вперше для задачі поширення двокомпонентної суміші забруднювачів у повітряному середовищі від локалізованих трубчастих джерел запропоновано узгоджене розділення повної конвективно-дифузійно-реакційної моделі та редукованої самоспряженої дифузійно-реакційної постановки;

– вперше обґрунтовано, що повна конвективно-дифузійно-реакційна модель має розглядатися у слабкій постановці Гальоркіна, тоді як метод Рітца коректно застосовується до її редукованої самоспряженої дифузійно-реакційної частини;

– вперше побудовано двоступеневу редуковану скінченно-елементну схему, у якій нелінійна задача для другої компоненти забруднювачів розв'язується модифікованим методом Ньютона, а концентрація першої компоненти визначається з лінійної системи скінченно-елементних рівнянь за вже знайденим профілем концентрації другої компоненти;

– дістали подальший розвиток методи інтерлінації функцій багатьох змінних та відповідні чисельні схеми в частині їх застосування до задач реконструкції просторових полів забруднення ґрунту за неповними даними спостережень;

– удосконалено метод інтерлінації функцій багатьох змінних шляхом поєднання локальних інтерлінаційних операторів із триангуляцією області та барицентричним зважуванням, що забезпечує реконструкцію просторових полів забруднення ґрунту за нерегулярно розміщеними й неповними даними спостережень з урахуванням локальної геометрії їх розташування; це дало змогу зменшити середню похибку реконструкції порівняно з традиційними схемами ін-

терполяції та підвищити стійкість відновлення за нерегулярного розміщення точок спостереження.

Обґрунтованість і достовірність отриманих результатів дисертаційної роботи доведено коректністю математичних постановок, використанням класичних методів варіаційного числення, слабких форм Гальоркіна, методу скінченних елементів, модифікованого методу Ньютона, операторів інтерлінації та узагальненої інтерполяції; узгодженістю отриманих результатів із фізичною інтерпретацією процесів дифузії, реакції, локалізованого джерельного впливу та просторового розподілу забруднювачів; чисельними експериментами, візуалізацією профілів і полів концентрацій, а також порівнянням результатів реконструкції, отриманих різними інтерполяційними підходами.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконувалася в період з 2022 р. по 2026 р. відповідно до плану науково-дослідних робіт кафедри прикладної математики Харківського національного університету радіоелектроніки. Тематика роботи пов'язана з розвитком методів математичного моделювання процесів перенесення забруднювачів у природних середовищах, чисельного розв'язання крайових задач, реконструкції просторових полів за неповними даними та застосування операторів інтерлінації функцій у задачах екологічного моніторингу.

Теоретичне та практичне значення одержаних результатів. Одержані в дисертації результати можуть бути використані для дослідження методом математичного моделювання процесів поширення забруднювачів у повітряному середовищі, зокрема для побудови профілів концентрацій CO_2 та SO_3 від локалізованих трубчастих джерел. Запропонована схема методу скінченних елементів, побудована на основі методу Гальоркіна, забезпечує врахування дифузійного перенесення, реакційно-кінетичної взаємодії компонентів, точкових джерел і граничних умов Робіна.

Практичне значення також мають результати, пов'язані з реконструкцією просторових полів забруднення ґрунту. Розроблені та застосовані у роботі методи інтерлінації, узагальненої інтерполяції та метод Шепарда можуть бути ви-

користані для відновлення тривимірних полів концентрацій важких металів за обмеженими, нерегулярними або лінійно заданими даними спостережень. Це дозволяє будувати карти забруднення, виявляти локальні зони підвищеної концентрації, порівнювати різні схеми реконструкції та використовувати результати для задач екологічного аналізу і моніторингу. Результати чисельних експериментів демонструють можливість практичного використання побудованих моделей і алгоритмів для аналізу профілів концентрацій, візуалізації просторових полів, порівняння реконструкцій, отриманих різними методами, та оцінювання впливу структури вхідних даних на якість відновлення поля забруднення.

Особистий внесок здобувача. Основні результати дисертаційної роботи отримані здобувачем і опубліковані в роботах [1 – 11, 134 – 137]. Роботи [1 – 11, 137] опубліковані у співавторстві.

У роботі [2] здобувачем були розроблені алгоритми чисельного розв’язання нелінійної крайової задачі, створене програмне забезпечення, проведене чисельне моделювання розсіювання двох компонентів забруднювачів та здійснено аналіз отриманих результатів, співавтору Першиній Ю. І. належить формулювання математичної постановки задачі та загальна ідея застосованого методу. У роботі [1] здобувач виконав одновимірну формалізацію крайової задачі масоперенесення домішок та розробив схему її дискретизації методом скінченних елементів з використанням кусково-лінійних базисних функцій, реалізував двоетапну процедуру розв’язання нелінійної та несамоспряженої системи рівнянь, повністю розробив програмний комплекс і провів чисельні експерименти, співавтору Першиній Ю. І. належить визначення методологічних засад застосування теорії локального потенціалу Гленсдорфа-Пригожина до варіаційної постановки задачі дифузійно-реакційного переносу домішок, а співавтору Межуєву В. І. належить проведення аналітичного огляду сучасних закордонних підходів до моделювання атмосферного дифузійно-реакційного переносу. У роботі [3] здобувач виконав тривимірну формалізацію розривного сплайн-інтерполянта на прямокутній сітці елементів-паралелепіпедів, здійснив математичне доведення леми та двох теорем, реалізував чисельний експеримент, співавтору Першиній

Ю. І. належить загальна наукова концепція та методологічні засади застосування розривних конструкцій для задач відновлення тривимірних функцій, що мають розриви першого роду, а співавтору Пташному О. Д. належить детальний аналітичний огляд існуючих підходів до відновлення розривних функцій та виявлення їхніх обмежень щодо виникнення осциляцій та обґрунтування потенційних сфер практичного впровадження розробленого оператора. У статті [4] здобувачу належить проведення математичного моделювання просторового розподілу забруднення за допомогою побудови тривимірного оператора інтерлінації, доведення теорем про його властивості, інтегральне зображення залишку та оцінку похибки, а також здійснення теоретичного аналізу поведінки моделі при нерегулярному розміщенні експериментальних даних, а співавтору Першиній Ю. І. належить визначення загальної науково-методологічної концепції дослідження щодо застосування операторів інтерлінації для інтерпретації нерівномірно розподілених даних дистанційного моніторингу.

У роботах [5, 9, 135], присвячених математичному моделюванню поширення забруднювачів у повітрі, здобувачем виконано побудову чисельної реалізації моделі, проведено FEM-апроксимацію, реалізовано модифікований метод Ньютона, виконано розрахунки профілів концентрацій CO_2 та SO_3, побудовано графіки й проведено аналіз отриманих результатів. Співавтору Першиній Ю. І. належить постановка загальної наукової задачі, формулювання теоретичних засад, обговорення результатів та участь в інтерпретації отриманих даних.

У роботах [7, 8, 10, 11, 137], пов’язаних із реконструкцією просторових полів забруднення ґрунту, здобувачем реалізовано алгоритми інтерлінації функцій трьох змінних, проведено чисельні експерименти для відновлення полів концентрацій важких металів, виконано порівняння з методом Шепарда, побудовано тривимірні візуалізації, контурні карти та профілі концентрацій. Співавторам Першиній Ю. І., Литвину О. М. та Литвину О.О. належить постановка загальної наукової задачі, формулювання теоретичних засад, наукове керівництво, обговорення результатів та участь в інтерпретації отриманих даних. Роботи [134 – 136] опубліковано без співавторів.

Апробація результатів дисертації. Основні результати дисертаційної роботи доповідалися та обговорювалися на:

– XXIII Міжнародній науково-практичній конференції “The Influence of Society on the Development of Science and the Invention of New Methods” (м. Прага, Чеська Республіка, 2023 р.);

– 28-му Міжнародному молодіжному форумі “Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті” (м. Харків, Україна, 2024 р.);

– XXXII Міжнародній науково-практичній конференції MicroCAD-2024 «Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров’я» (м. Харків, Україна, 2024 р.);

– International Conference on Reliable Systems Engineering, ICoRSE-2025 (м. Харків, Україна, 2024 р.);

– International Conference on Smart Technologies in Urban Engineering, 2024 (м. Бухарест, Румунія, 2025 р.);

– 2nd International Scientific and Practical Conference “Innovative Technologies for Training and Educating Young People” (м. Бостон, США, 2025 р.);

– XV Всеукраїнській науково-практичній конференції здобувачів вищої освіти і молодих учених “Молоді вчені 2025 – від теорії до практики” (м. Дніпро, Україна, 2025 р.);

– XXXIII Міжнародній науково-практичній конференції MicroCAD-2025 “Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров’я” (м. Харків, Україна, 2025 р.);

– XXXIV Міжнародній науково-практичній конференції MicroCAD-2026 “Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров’я” (м. Харків, Україна, 2026 р.);

– VIII Міжнародній науково-практичній конференції “Актуальні тенденції розвитку освіти, науки та технологій” (м. Харків, Україна, 2025 р.);

– Всеукраїнській науково-практичній конференції здобувачів вищої освіти і молодих учених “Комп’ютерно-інтегровані технології автоматизації технологічних процесів на транспорті та у виробництві”, КІТ-2025 (м. Харків, Україна, 2025);

– 29-му Міжнародному молодіжному форумі “Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті” (м. Харків, Україна, 2025 р.);

– 30-му Міжнародному молодіжному форумі “Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті” (м. Харків, Україна, 2026);

– науковому семінарі кафедри прикладної математики Харківського національного університету радіоелектроніки (м. Харків, 2024, 2025, 2026 рр.).

Публікації. Матеріали дисертації викладені у 15 наукових роботах: 4 роботи, з яких 1 стаття опублікована у виданні, зазначеному в переліку наукових фахових видань України (категорія Б) за спеціальністю 113 Прикладна математика, 2 роботи опубліковані у закордонних виданнях, що включені до міжнародної наукометричної бази Scopus, 1 стаття опублікована у науковому виданні, що додатково відображає результати дослідження, та 11 тез доповідей, опублікованих у матеріалах міжнародних наукових конференцій.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота є рукописом і складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел з 137 найменувань на 13 сторінках та п’яти додатків на 35 сторінках, а також містить 17 рисунків та 16 таблиць. Загальний обсяг роботи складає 229 сторінок, включаючи 163 сторінки основного тексту.

1 ІСНУЮЧІ МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОСТОРОВО-ЧАСОВОГО РОЗПОДІЛУ ЗАБРУДНЮВАЧІВ В НАВКОЛИШНЬОМУ СЕРЕДОВИЩІ ЗА ДАННИМИ СПОСТЕРЕЖЕНЬ ТА ВИМІРЮВАНЬ

1.1 Підходи до математичного опису забруднення повітря

Екологічний моніторинг у сучасних умовах передбачає не лише фіксацію окремих концентрацій домішок, а й відновлення узгоджених просторових полів забруднення з урахуванням їх просторово-часової мінливості. Для промислових зон, урбанізованих територій та транспортних коридорів характерні багатоджерельність і багатокомпонентність забруднення, що потребує математичних моделей, здатних описувати дифузію, перенесення, реакційні перетворення та локальні джерела [13, 16].

Практична проблема полягає в тому, що експериментальна інформація майже завжди є неповною: вимірювання виконуються на обмеженій кількості точок або лінійних трас, для ґрунтів – у свердловинах і за результатами відбору проб, для атмосфери – на постах спостереження, а дистанційні дані містять непрямі індикатори стану середовища [13, 51 – 56]. Це формує потребу в методах реконструкції полів та поєднанні фізичних моделей на основі диференціальних рівнянь з частинними похідними (PDE-моделей) із алгоритмами відновлення за обмеженими даними.

У підрозділі систематизовано ключові напрями досліджень, що формують та аналізують моделі перенесення домішок у повітрі та ґрунтових середовищах; чисельні методи дискретизації, зокрема метод скінченних елементів; реконструкція просторових полів за обмеженими даними спостережень; інтерполяційні, геостатистичні та інтерлінаційні підходи; використання даних геоінформаційних систем і дистанційного зондування Землі; а також обернені задачі та оцінювання параметрів. Основні групи методів у цьому огляді підтримуються джерелами з

математичного моделювання перенесення, інтерлінації, інтерполяції, геостатистики та ГІС/ДЗЗ-аналізу [13, 16, 18, 19, 21 – 23, 32, 52, 55, 56, 89, 90].

У цьому підрозділі розглядається порівняння різних класів методів аналізу забруднення повітря та ґрунту: процесних моделей перенесення, статистичних і геостатистичних процедур, ГІС/ДЗЗ-підходів (ГІС – геоінформаційні системи, а ДЗЗ – дистанційне зондування Землі), інтерполяційних та операторних методів реконструкції.

Математичне моделювання забруднення довкілля у сучасних умовах переходить від описових оцінок до кількісних моделей, які дозволяють прогнозувати концентрації домішок, відновлювати просторові поля за обмеженими вимірюваннями, оцінювати ризики та виявляти можливі джерела забруднення. Такий підхід є особливо важливим для промислових територій, зон інтенсивного транспорту, урбанізованих районів і регіонів із підвищеним антропогенним навантаженням.

Сучасний тренд полягає в інтеграції просторового аналізу, обчислювального моделювання, геоінформаційних технологій і дистанційного зондування для отримання узгодженої картини забруднення на різних масштабах. Практичні дослідження показують, що комбінування різних джерел даних, зокрема польових вимірювань, супутникових індикаторів, геостатистичних методів і алгоритмів машинного навчання, може підвищувати точність оцінювання важких металів у ґрунтах та деталізувати їх просторовий розподіл [13, 55, 56].

Окрему увагу в екологічному моніторингу приділяють важким металам як стійким забруднювачам із кумулятивним ефектом. У сучасних дослідженнях наголошується, що такі компоненти мають виражену токсичність, здатність до накопичення й міграції та потребують системного моніторингу, у якому просторові моделі, дистанційні дані та реконструкційні методи відіграють важливу роль [13, 16].

Для задач атмосферного забруднення типовими є ситуації, коли локалізовані джерела викидів формують поля концентрацій зі складною просторовою структурою: градієнтами, шлейфами та зонами локальних максимумів. У межах

такого класу задач особливого значення набувають моделі, які дозволяють працювати з кількома джерелами та аналізувати їх сумарний вплив.

Для коректного опису атмосферних процесів необхідним є узгодження математичної постановки з фізичним змістом: характером джерел, масштабуванням інтенсивностей, крайовими умовами, реакційно-кінетичними перетвореннями та стабільністю чисельного алгоритму. Методичною основою для таких моделей є класичні підходи математичного моделювання, теорія рівнянь перенесення та чисельні методи дискретизації [18, 19, 78].

Розмежовуються кілька альтернативних класів моделей, які використовуються в екологічному моніторингу та регуляторній практиці. Перший клас становлять інженерні моделі гаусового факела або гаусової хмари. Їх перевага полягає у простій параметризації джерела, метеорологічних умов і рецепторних точок; зокрема AERMOD – модель дисперсії забруднювачів Агентства з охорони довкілля США – застосовується для оцінювання поширення викидів від поверхневих і піднятих джерел у простій та складній місцевості [130]. Обмеження цього класу полягає в тому, що гаусові моделі спираються на усереднені параметри турбулентності, стаціонарні або квазістаціонарні припущення та не завжди зручно описують нелінійну реакційну взаємодію компонентів у вигляді локальної слабкої постановки.

Другий клас утворюють ейлерові хімічно-транспортні моделі на просторовій сітці. До них належать CMAQ – багатомасштабна система моделювання якості повітря та CHIMERE – хімічно-транспортна модель для регіонального аналізу перенесення, хімічних перетворень, аерозольних процесів і депозиції, які використовують агентства з охорони довкілля США. CMAQ використовується для моделювання озону, аерозолів, токсичних домішок і депозиції [131], а CHIMERE реалізує сучасну сіткову постановку з урахуванням метеорологічних та аерозольних зв’язків [132]. Такі системи є потужними для регіонального прогнозування, але потребують великих масивів метеорологічних і емісійних даних, складного калібрування та значних обчислювальних ресурсів.

Третій клас становлять лагранжеві частинкові та хмарні моделі перенесен-

ня. Наприклад, FLEXPART – лагранжева модель дисперсії частинок – застосовується для мезомасштабного й далекого перенесення небезпечних речовин від точкових джерел для газів, аерозолів, вулканічного попелу, чорного вуглецю та оберненого моделювання зв'язків «джерело-рецептор» [133]. Такі моделі корисні для трасування повітряних мас і встановлення можливих джерел за даними рецепторів, однак вони зазвичай залежать від зовнішніх метеорологічних полів і не дають безпосередньо варіаційного функціонала або скінченно-елементної матричної системи для локальної реакційно-дифузійної частини задачі.

Окремо слід виділити підходи обчислювальної гідродинаміки (CFD), зокрема моделювання на основі усереднених за Рейнольдсом рівнянь Нав'є-Стокса (RANS) та моделювання великих вихорів (LES). Такі моделі детальніше описують мікромасштабне перенесення в міській забудові, вплив будівель, вулиць і перешкод, але вимагають детальної геометрії, побудови сітки та вибору моделі турбулентного замикання. Статистичні моделі та методи машинного навчання можуть давати високу прогностичну точність на навчальній вибірці, проте без додаткових фізичних обмежень не гарантують виконання законів балансу, крайових умов, невід'ємності концентрацій і коректної реакційної інтерпретації [13, 55, 56, 78].

Отже, альтернативні підходи відрізняються не лише точністю, а й типом вхідних даних, масштабом області, обсягом калібрування, можливістю фізичної інтерпретації та вимогами до обчислювальних ресурсів.

В екологічних задачах дані вимірювань часто є неповними: замість суцільного поля спостерігаються значення у точках, на профілях, трасах, у свердловинах або на мережі постів моніторингу. Тому важливою стає задача відновлення дво- або тривимірного поля за неповною інформацією.

У межах цього класу задач інтерлінація виступає як спеціалізований підхід до реконструкції багатовимірних функцій у випадку, коли інформація задана на системі ліній, профілів або напрямів. Базові засади інтерлінації викладені в монографічних джерелах [21 – 23], де розглянуто теоретичні властивості та прикладні аспекти використання інтерлінаційних операторів.

Інтерлінація розглядається як частина ширшого напряму операторної апроксимації. Зокрема, інтерлінаційні оператори лагранжевого типу та узагальнені поліноміальні конструкції на системі прямих дозволяють побудувати зв’язок між класичною теорією наближення та прикладними задачами реконструкції [97, 98]. Корисною для доказових фрагментів також є лінія робіт, де аналізується узагальнення формули Тейлора та її застосування до побудови операторів апроксимації [33, 60]. Ці результати використовуються для обґрунтування локальних наближень та оцінок точності при переході від даних на лініях до відновлення поля в об’ємі.

Опишемо тепер альтернативні підходи: інтерполяцію нерегулярних даних, геостатистики та порівняльний аналіз. Для обґрунтування доцільності застосування інтерлінації необхідно порівняти її з іншими поширеними методами реконструкції просторових полів. У практиці екологічного картографування широко використовуються класичні інтерполяційні методи для нерегулярних даних, зокрема метод Шепарда, а також радіальні базисні функції, сплайнові схеми та геостатистичні методи [32, 50].

Геостатистичні підходи, зокрема крігінг, кореляційні карти та аналіз локальних аномалій, є ефективними для задач просторового картографування забруднювачів. Наприклад, у прикладних дослідженнях для промислових територій застосовуються геостатистичне картографування та кореляційний аналіз, що дозволяє виділити зони підвищених концентрацій і встановити можливі зв’язки між джерелами та просторовим розподілом забруднення [43].

Окрему увагу заслуговують сучасні гібридні підходи, що поєднують геостатистику, машинне навчання та просторові моделі [51, 53]. У межах цієї дисертації такі методи розглядаються як перспективний напрям розвитку, тоді як основна увага приділяється інтерлінаційним операторам, методу Шепарда та чисельній перевірці якості реконструкції.

Окрему групу методів складають чисельні моделі перенесення, дифузії та узгодження з підходами на основі диференціальних рівнянь з частинними похідними. Екологічні задачі забруднення часто описуються моделями типу «перене-

сення – дифузія – реакція – джерела», які належать до класу моделей на основі диференціальних рівнянь з частинними похідними. Для таких задач використовуються скінченно-різницеві, скінченно-об’ємні та скінченно-елементні схеми, а також слабкі або варіаційні постановки, що дають змогу коректно враховувати крайові умови, локальні джерела та неоднорідність коефіцієнтів [18, 19, 78].

Методологічно близькими є моделі підземного потоку та адвективного перенесення в пористих середовищах, де також виникають питання крайових умов, масштабу процесів, ідентифікації параметрів і дискретизації поля [34, 35]. У задачах із різкими фронтами, градієнтами або локальними максимумами концентрацій важливими є також чисельні підходи, що забезпечують стабільність розрахунків у зонах значних змін розв’язку [14].

Розглянемо обернені задачі та оцінювання параметрів. Практичні екологічні задачі часто мають компонент оберненої постановки: необхідно оцінити невідомі параметри моделі, зокрема інтенсивності джерел, коефіцієнти дифузії або характеристики фону, за даними спостережень. Для цього використовуються методи регуляризації, ідентифікації параметрів і статистичної обробки вимірювань [26, 28, 41].

Реальні екологічні середовища часто мають структурні неоднорідності: локальні плями забруднення, межі зон підвищених концентрацій, різкі переходи між фоновими та аномальними значеннями. Тому для задач реконструкції важливими є підходи, здатні працювати не лише з гладкими, а й з кусково-гладкими або локально неоднорідними полями.

У цьому контексті методи відновлення внутрішньої структури тривимірних об’єктів та дискретні конструкції розривного типу є методологічно близькими до задач екологічної реконструкції [34, 35, 39]. Вони можуть розглядатися як теоретична й алгоритмічна основа для подальшого розвитку реконструкційних моделей, орієнтованих на поля з локальними аномаліями та просторовими неоднорідностями.

При моделюванні забруднення важливим є коректний опис геометрії області: промислових зон, нерегулярних меж, рельєфу, транспортних коридорів

або зон локального впливу. Одним із підходів до формалізації складної геометрії є апарат *R*-функцій і напіваналітичних геометричних побудов [20].

1.2 Моделювання забруднення ґрунтів і пористих середовищ: перенесення, сорбція, деградація

На відміну від атмосферного середовища, ґрунти та пористі середовища характеризуються складнішою фізичною структурою, що включає тверду, рідку та газову фази, просторову неоднорідність, пористість, фільтраційні потоки та взаємодію домішок із матрицею ґрунту. У таких середовищах перенесення забруднювачів визначається не лише адвективним або фільтраційним рухом рідини, а й процесами молекулярної дифузії, гідродинамічної дисперсії, сорбції, десорбції, хімічних перетворень, деградації або біодеструкції. Саме ці процеси можуть зумовлювати уповільнення міграції домішок, їх накопичення в окремих шарах ґрунту та формування локальних зон підвищеної концентрації [34, 35, 18, 19].

Для опису таких процесів широко використовуються моделі адвективно-дисперсійного перенесення з урахуванням сорбції та реакційних втрат. Вони дозволяють описувати міграцію розчинених домішок у водонасичених або частково водонасичених шарах, взаємодію забруднювачів із поровим розчином і твердою фазою, а також зв’язок із водоносними горизонтами [34, 35]. У багатокомпонентних системах додатково можуть враховуватися взаємодії між компонентами, конкуренція за сорбційні центри, утворення вторинних сполук і трансформація забруднювачів унаслідок хімічних або біологічних процесів [18, 19].

Незважаючи на фізичні відмінності між атмосферою та пористими середовищами, математична структура багатьох моделей перенесення має спільну основу і може бути описана узагальненим класом рівнянь типу «перенесення – дифузія/дисперсія – реакція – джерела». Це забезпечує можливість використання подібних математичних підходів до формулювання задачі, переходу до слабкої постановки, аналізу крайових умов та подальшої чисельної реалізації методами дискретизації, зокрема методом скінченних елементів [19, 78].

Разом із тим у практичних задачах ґрунтового моніторингу повна фізико-хімічна модель міграції забруднювачів часто є складною для застосування через нестачу даних про фільтраційні властивості, сорбційні параметри, неоднорідність ґрунтового профілю, хімічну взаємодію компонентів і часову зміну вологості. Тому поряд із моделями на основі диференціальних рівнянь з частинними похідними потрібні методи відновлення просторових полів за обмеженими вимірюваннями, зокрема інтерполяційні, геостатистичні та операторні методи реконструкції [17 – 19, 34, 35, 89, 90].

Для ґрунтового середовища альтернативні методи доцільно розглядати окремо від атмосферних моделей. Найпростішою практичною базою є пряме польове вимірювання та лабораторне визначення концентрацій у відібраних пробах. Такий підхід дає найбільш інтерпретовані дані, але через високу вартість і трудомісткість зазвичай формує розріджену мережу точок або профілів, а не суцільне тривимірне поле [89, 90, 113].

Друга група альтернативних методів – ручне або напівавтоматичне картографування за результатами замірів: побудова ізоліній, карт перевищення нормативів, таблиць індексів забруднення та зон ризику. Цей підхід зручний для практичного екологічного звіту, однак залежить від щільності точок, суб’єктивних рішень щодо згладжування та не завжди відновлює поведінку поля між профілями або за глибиною [56, 89, 90].

Третю групу становлять інтерполяційні методи для нерегулярних даних: метод обернених відстаней (IDW), класичний метод Шепарда, радіальні базисні функції (RBF) та сплайни. Вони добре підходять для побудови двовимірних карт або згладжених поверхонь за точковими вимірюваннями, але у стандартному вигляді не враховують, що дані ґрунтового моніторингу часто задані не випадковою хмарою точок, а системою вертикальних профілів або свердловин [32, 50, 107].

До четвертої групи відносяться геостатистичні методи: крігінг, варіограмний аналіз, кореляційні карти та локальні індикатори аномалій. Їхня перевага полягає в статистичному описі просторової залежності та можливості оцінюва-

ти невизначеність прогнозу; обмеженням є потреба в достатній кількості спостережень і в прийнятних припущеннях щодо стаціонарності або кореляційної структури поля [43, 50, 53].

П’ята група – геоінформаційні системи (ГІС), дистанційне зондування Землі (ДЗЗ) та методи машинного навчання. Тут і далі: ГІС – геоінформаційні системи, тобто програмно-дані комплекси для зберігання, аналізу й візуалізації просторової інформації; ДЗЗ – дистанційне зондування Землі, тобто отримання інформації про поверхню та стан середовища за супутниковими, авіаційними або іншими дистанційними спостереженнями. Вони використовують спектральні індекси, рельєф, землекористування, супутникові знімки, польові вимірювання та додаткові просторові шари. Такі підходи ефективні для регіонального картографування і виділення зон потенційного ризику, однак для оцінювання концентрацій у ґрунті потребують наземного калібрування, а для тривимірного профілю за глибиною – додаткової реконструкційної моделі [13, 52, 55, 56, 117].

Нарешті, процесні моделі міграції в пористих середовищах описують адвекцію, дисперсію, сорбцію, реакції та джерела забруднення. Вони фізично змістовні, але для практичного застосування потребують даних про гідрогеологічні параметри, фільтраційні властивості, сорбційні коефіцієнти та часову історію надходження домішок [17, 18, 19, 34, 35].

1.3 Реконструкція просторових полів за обмеженими вимірюваннями: інтерполяція, геостатистика, інтерлінація

У прикладних екологічних задачах вимірювання практично завжди є розрідженими та нерівномірно розміщеними. Для ґрунтів це зумовлено трудомісткістю відбору проб, для атмосфери – обмеженою кількістю постів спостереження, а дистанційні дані зазвичай є непрямими й містять похибки інтерпретації. Тому реконструкція поля концентрації є невід’ємною складовою екологічного аналізу та моніторингу [13, 51 – 56].

Найпоширенішими класичними підходами до відновлення просторових

полів є методи інтерполяції нерегулярних даних: зважені середні, метод обернених відстаней, метод Шепарда, радіальні базисні функції, сплайни та їх модифікації [32]. Такі методи добре працюють у задачах двовимірного картографування, однак можуть втрачати точність у тривимірній постановці за обмеженої кількості зрізів, профілів або свердловин, а також у випадку різко неоднорідних полів концентрацій.

Геостатистичні підходи, зокрема крігінг, варіограмний аналіз і просторові кореляційні моделі, забезпечують статистично обґрунтовані оцінки за умови виконання певних припущень щодо стаціонарності та кореляційної структури поля. В екологічних дослідженнях такі методи застосовують для виділення зон підвищених концентрацій, аналізу локальних аномалій і побудови карт забруднення [43]. Окремим сучасним напрямом є поєднання геостатистики з методами машинного навчання для прогнозування просторового розподілу важких металів [53].

Інтерлінація розглядається як спеціалізований підхід до відновлення багатовимірних функцій у випадку, коли інформація задається не лише в окремих точках, а на системі ліній, профілів, напрямів або зрізів. Така структура даних добре відповідає експериментальній природі екологічних вимірювань, зокрема даним свердловин, вертикальних профілів, трас спостереження або розрізів. Теоретичні засади інтерлінації та операторної апроксимації викладені в [21 – 23].

Ключова перевага інтерлінації полягає в тому, що вона враховує структуру інформаційних носіїв, тобто дані на лініях, профілях або зрізах, і дозволяє будувати узгоджене наближення просторового поля. Це особливо важливо для задач, у яких кількість вимірювань обмежена, але доступна інформація має певну геометричну організацію. У такому випадку інтерлінація може виступати як окремий реконструкційний модуль для відновлення дво- або тривимірного поля за неповними даними спостережень. Ця властивість безпосередньо пов’язана з теорією інтерлінаційних операторів і профільною структурою даних моніторингу [4, 10, 21 – 23].

1.4 Аналіз практичних підходів до просторової реконструкції полів забруднення ґрунту і супровідних індикаторів якості ґрунту

У цьому підрозділі розглянемо ключові підходи, логіку побудови та практичні прийоми просторової реконструкції й картографічного відтворення параметрів, що характеризують забруднення ґрунтового середовища. Насамперед ідеться про концентрації важких металів та інших забруднювачів, індикатори сумарного забруднення, перевищення гранично допустимих концентрацій, а також, за наявності вертикальних профілів або даних свердловин, про глибину поширення забрудненого шару [55, 56, 83, 86, 89, 90]. Значна частина наведених принципів є універсальною і може бути використана також для моделювання інших показників стану природних середовищ у задачах екологічного моніторингу.

Сучасне екологічне управління територіями потребує точного та детального опису параметрів забруднення для оцінювання ризиків, планування рекультивації, обґрунтування обмежень землекористування та формування природоохоронних рішень. Це зумовлює необхідність системної реконструкції просторових закономірностей забруднення та застосування методів просторового аналізу, картографічного відтворення і тривимірної реконструкції полів концентрацій. Практична потреба у таких даних підтверджується роботами з картографування, польового контролю та ГІС-аналізу забруднених територій [52, 56, 89, 90].

Під просторовою реконструкцією в цьому підрозділі будемо розуміти побудову наближеного просторового поля концентрації або інтегрального показника забруднення за обмеженими даними спостережень. Таке поле дозволяє визначати розміщення зон забруднення, їх орієнтовні геометричні межі, локальні максимуми, просторову неоднорідність, а за наявності вертикальних вимірювань – також глибину або товщину забрудненого шару. Додатково можуть враховуватися характеристики середовища, що впливають на міграцію домішок: гранулометричний склад, вологість, кислотність, сорбційні властивості та інші параметри, якщо вони доступні в межах постановки задачі.

У практичних розрахунках важливо явно враховувати вплив похибок вихідних вимірювань. Зокрема, корекцію за глибиною відбору проб або просторовою прив’язкою доцільно вводити лише тоді, коли її величина є суттєвою порівняно з кроком вертикальної дискретизації, точністю геоприв’язки або масштабом досліджуваної області. Аналогічно поправки за концентрацією доцільно враховувати тоді, коли відхилення перевищує рівень типової аналітичної невизначеності лабораторних або польових вимірювань.

Існує низка базових методичних схем реконструкції просторових полів, спільних для різних прикладних напрямів. До них належать побудова поверхонь, ізоліній, карт забруднення, вертикальних і горизонтальних зрізів, а також відновлення тривимірних полів концентрацій за нерівномірно розміщеними вимірюваннями. У задачах екологічного моніторингу такі підходи можуть поєднуватися з геостатистичними методами, класичними інтерполяційними процедурами, методом Шепарда, інтерлінацією та інтерфлетацією функцій багатьох змінних. Для таких порівнянь доцільно одночасно враховувати інтерполяційні методи [32, 50], геостатистику [43, 53], ГІС/ДЗЗ-підходи [52 – 55, 56], а також інтерлінаційні оператори [21 – 23].

У подальшому основну увагу буде зосереджено на відтворенні просторової структури забруднення ґрунтового середовища за обмеженими даними спостережень. Це пов’язано з тим, що на практиці моніторингові або польові програми часто містять лише точкові вимірювання, дані окремих профілів чи свердловин і не забезпечують повної просторової картини. У таких умовах геометричні межі зон ризику, розподіл концентрацій за глибиною та деталізація змін по площі залишаються неповними або визначаються лише наближено. Саме тому виникає потреба у спеціальних методах реконструкції, здатних відновлювати просторове поле концентрацій за неповною системою даних.

Будь-які польові та лабораторні визначення виконуються з певною невизначеністю [89, 90]. Це повною мірою стосується й екологічних вимірювань у задачах оцінювання забруднення ґрунтів: похибки можуть виникати як на етапі відбору проб, так і під час підготовки зразків, їх транспортування, зберігання та

аналітичного визначення концентрацій важких металів або інших забруднювачів.

Відносно опорними для моделювання зазвичай вважають результати, отримані за коректної методики та з належним контролем якості: повторними вимірюваннями, дублікованими пробами, контрольними зразками та стандартними референтними матеріалами. Для таких даних аналітична невизначеність часто перебуває в межах кількох відсотків або орієнтовно 4 – 10 %, залежно від речовини, методу аналізу та лабораторної процедури. Тому в багатьох практичних випадках вона не є домінуючим чинником порівняно з реальною просторовою мінливістю забруднення.

Натомість суттєві відхилення можуть виникати тоді, коли порушується репрезентативність вимірювань. До таких чинників належать неоднорідність ґрунту, змішування шарів, неточне задання глибини або інтервалу відбору проб, наприклад, 0–0,5–1,0–1,5–2,0 м, перехресне забруднення, а також помилки просторової прив’язки точки за координатами або глибиною. Саме тому оцінювання й документування похибок повинні передувати побудові просторової моделі: вони задають верхню межу досяжної точності реконструкції та впливають на вибір методу відновлення поля, ступінь згладжування, вагові коефіцієнти та критерії відбраковування даних.

Внесок вимірювальної похибки у результат просторової реконструкції залежить також від конфігурації мережі спостережень. У точках, розташованих близько до місць відбору проб, модель сильніше успадковує локальні помилки окремих вимірювань. На віддаленні від пунктів спостереження прогноз зазвичай спирається на кілька сусідніх значень, тому випадкові похибки можуть частково взаємно компенсуватися, якщо вони не мають систематичного характеру.

Водночас зі збільшенням відстані від найближчих точок спостереження швидко зростає інша складова невизначеності – похибка інтерполяції або екстраполяції, пов’язана вже не стільки з точністю лабораторного аналізу, скільки з браком інформації про реальну просторову структуру поля. У підсумку сумарна невизначеність прогнозу, як правило, зростає при віддаленні від місць відбору проб, навіть якщо лабораторні похибки залишаються відносно невеликими.

Практичний підхід до оцінювання точності даних, отриманих під час відбору проб ґрунту та лабораторного визначення концентрацій забруднювачів, ґрунтується на зіставленні результатів первинного обстеження з контрольними або повторними вимірюваннями. Такі вимірювання бажано виконувати за більш жорсткою процедурою контролю якості: із застосуванням дублікатів, повторного відбору, контрольних зразків та перевірки стабільності аналітичної методики.

Однак слід ураховувати, що в польових умовах майже неможливо виконати повторне вимірювання в абсолютно тій самій точці та з ідентичного об’єму ґрунту, особливо коли відбір здійснюється пошаровими інтервалами. Через це реальне зіставлення часто виконується між значеннями, отриманими у близьких, але не тотожних точках або інтервалах. У таких випадках різниця між вимірюваннями відображає не лише аналітичну похибку, а й локальну просторову неоднорідність ґрунтового середовища.

Крім того, зони підвищеного забруднення часто мають локальний характер і різкі просторові градієнти, тому значення показника можуть змінюватися нерівномірно, з “хвильовими” або плямистими флуктуаціями по площі й за глибиною (рис. 1.1). Це означає, що між точкою первинного відбору та точкою контрольного вимірювання існує певна відстань l. При збільшенні l пряме співставлення вже не є коректним, оскільки різниця в показниках зумовлюється не стільки похибкою аналізу, скільки реальною просторовою мінливістю поля концентрацій.

З практичної точки зору виділяється діапазон відстаней $l \in [0, l_2]$, за якого порівняння ще має сенс. При цьому можливе таке, що для різних значень, які лежать в інтервалі між 0 і l_2, будуть отримані різні значення досліджуваного показника – навіть за незмінної методики аналізу. Вплив випадкової (неструктурованої дрібномасштабної) компоненти змінюваності концентрацій на якість просторової моделі за своїм ефектом подібний до впливу власне вимірювальних похибок. Саме тому в прикладних задачах просторової реконструкції ці два чинники зазвичай не розділяють жорстко, а обов’язково враховують трендову складову зміни показника, пов’язану з віддаллю між точками співставлення.

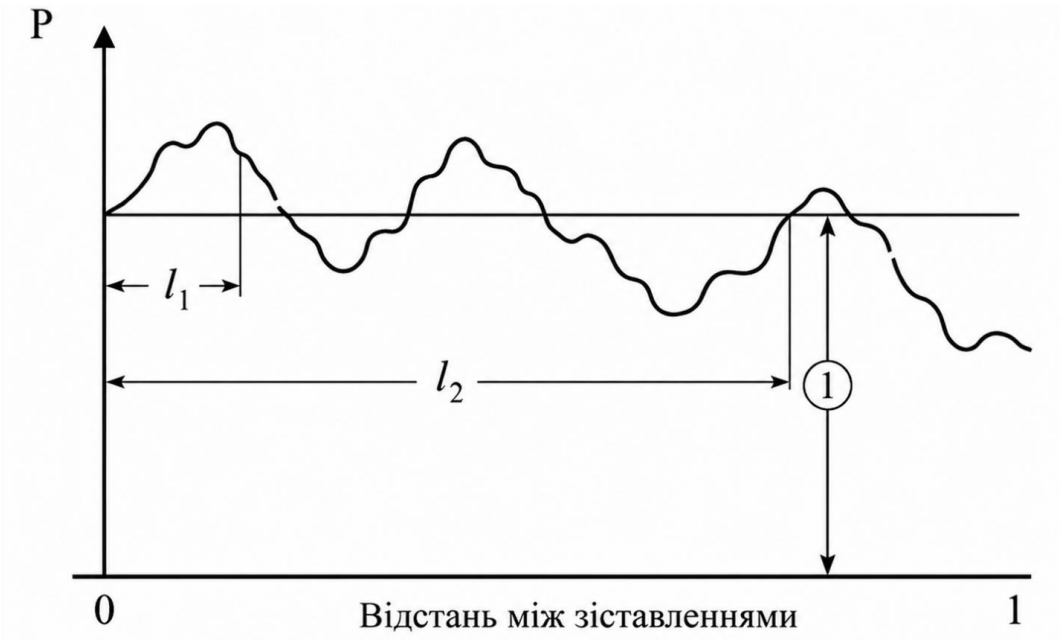

Рисунок 1.1 – Хвилеподібний характер зміни значень показника забруднення P (наприклад, концентрації C або індексу забруднення) залежно від відстані l

Тому як основу методики співставлення результатів первинного та контрольного обстежень (або двох кампаній відбору проб) деякі автори [89, 90] рекомендують використовувати таке подання залежності розбіжностей від відстані між точками порівняння:

$$\Delta^2(l) \approx m^2 + a^2 l^2, \tag{1.1}$$

де $\Delta(l)$ – різниця між значеннями показника забруднення, очищена від систематичної складової (тобто після усунення можливого “зсуву” між серіями вимірювань, спричиненого методикою, лабораторією, калібруванням тощо) і у нашому випадку показником може бути концентрація важкого металу C (мг/кг) або індекс забруднення;

l – відстань між точками (або інтервалами) співставлення;

m – середньоквадратична похибка вимірювання (сукупна невизначеність відбору + аналізу) для відповідного показника в умовах стандартної процедури;

a – коефіцієнт, що описує внесок закономірної складової просторової змі-

нюваності у результати співставлення; фактично він відображає, як швидко “природна”/реальна зміна концентрації в просторі збільшує розкид між двома точками при зростанні l;

$a^2 l^2$ – описує зростання розбіжностей із просторовим лагом l.

Такі моделі широко застосовуються в геостатистичному аналізі просторових даних [89], [90].

У межах малих відстаней l_1 порівняння є найбільш коректним, тоді як при відстаней до l_2 розбіжності істотно зростають через просторову неоднорідність поля, і внесок трендової складової стає визначальним.

Тут l_1 і l_2 зберігаємо як “пороги придатності порівняння”: l_1 – зона майже еквівалентних точок (максимально коректне співставлення), l_2 – межа, після якої пряме співставлення вже малозмістовне для оцінки саме похибок (бо домінує просторова мінливість).

Таким чином, різниця між даними польового екологічного моніторингу, лабораторного аналізу проб ґрунту та профільних вимірювань складається з похибки вимірювань і просторово-трендової складової змінюваності, яка залежить від відстані між точками або профілями спостережень.

За наявності достатнього набору співставлень (рекомендовано не менше 20) можна сформувати систему рівнянь типу (1.1), оцінити її параметри методом найменших квадратів і таким чином визначити невідомі a та m, які характеризують відповідно трендовий внесок просторової змінюваності та середньоквадратичну похибку вимірювань.

Для переходу до величин, очищених від систематичного зсуву між двома серіями вимірювань (наприклад, первинна кампанія відбору проб та контрольна/повторна кампанія, або результати двох лабораторій), використовують співставні різниці:

$$\Delta_i = P_{ci} - P_{ri} - C, \tag{1.2}$$

де P_{ci} – значення досліджуваного показника забруднення (наприклад, концент-

рації важкого металу C у мг/кг або індексу забруднення), отримане у першому наборі даних при *i*-му співставленні;

P_{ri} – відповідне значення показника, отримане у другому наборі даних при тому ж *i*-му співставленні (повторний відбір/контроль/інша лабораторія);

C – систематична складова (зсув), що відображає сталу різницю між двома серіями вимірювань (наприклад, через відмінності методики підготовки проб, калібрування, межі визначення тощо).

Систематичний зсув C для всього масиву співставлень оцінюють як середнє значення різниць:

$$C = \frac{[P_c] - [P_r]}{n}, \tag{1.3}$$

де n – число співставлень;

$[P_{c,j}] = \sum_{i=1}^{n} P_{c,j,i}$, $P_{c,j}$ – ознака з номером j.

Розв'язуючи методом найменших квадратів систему співставлень $\Delta_i^2 = m^2 + a^2 l_i^2$, $i = \overline{1,n}$, отримуємо аналітичні формули для оцінок параметрів a і m:

$$a^2 = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \Delta_i^2 - \frac{\sum_{i=1}^{n} \Delta_i^2 l_i^2}{\sum_{i=1}^{n} l_i^2} \right) / \left(\frac{\sum_{i=1}^{n} l_i^2}{n} - \frac{\sum_{i=1}^{n} l_i^4}{\sum_{i=1}^{n} l_i^2} \right), \tag{1.4}$$

$$m^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} \Delta_i^2 - a^2 \sum_{i=1}^{n} l_i^2}{n}. \tag{1.5}$$

У задачах просторової реконструкції забруднення ґрунтів відстань доцільно задавати в метрах. Вона може трактуватися як:

– горизонтальна відстань між двома місцями відбору проб (по плану);

– вертикальне зміщення за глибиною (наприклад, при кроці 0,5 м: $l = 0;05;1,0;1,5;2,0$ м).

Тоді параметр a автоматично “підлаштовується” під вибрані одиниці (має відповідну розмірність), а сама схема оцінювання лишається коректною.

Рекомендується [89, 90] вважати результати співставлення вірогідними, якщо виконується нерівність.

$$m \geq 2\left|a \cdot l_{сер}\right|, \tag{1.6}$$

де $l_{сер} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} l_i$ – середньо-арифметична відстані між точками (або інтервалами) порівняння;

n – кількість співставлень.

Оцінювання точності на практиці зручно виконувати у три етапи:

Етап 1. За масивом співставлень обчислити a і m за формулами (1.3), (1.4).

Етап 2. Виявити ненадійні співставлення (наприклад, за графіком залежності Δ_i^2 від l_i^2, а також за контрольними ознаками якості проб) (рис. 1.2).

Етап 3. Обчислення a і m виконують лише за перевіреними співставленнями. Формуючи пари для порівняння, можна зіставляти значення, отримані в одному й тому самому пункті спостереження (або в одній локації) з кількома контрольними замірами/повторними відборами за умови, що кількість таких пар є приблизно однаковою для кожного пункту. Це потрібно, щоб оцінка не “перекосилася” у бік тієї точки, де виконано більше повторів і, відповідно, сильніше проявляється специфічна локальна похибка або особливості відбору саме в цій локації.

Існує також інший спосіб оцінювання точності вимірювань [89, 90]. Його суть полягає в тому, що за матеріалами детальних спостережень будують ізолінії (або поверхні) фактичного розподілу досліджуваного показника на ділянці, де виконують співставлення. Спираючись на таку модель, яка зазвичай добре відтворює реальну картину, визначають “еталонні” значення $P_{r,i}$ у точках, що відповідають місцям відбору проб (або контрольним пунктам). Далі обчислюють систематичний зсув за формулою (1.2), а за формулою (1.3) знаходять різниці Δ_i, очищені від цієї складової.

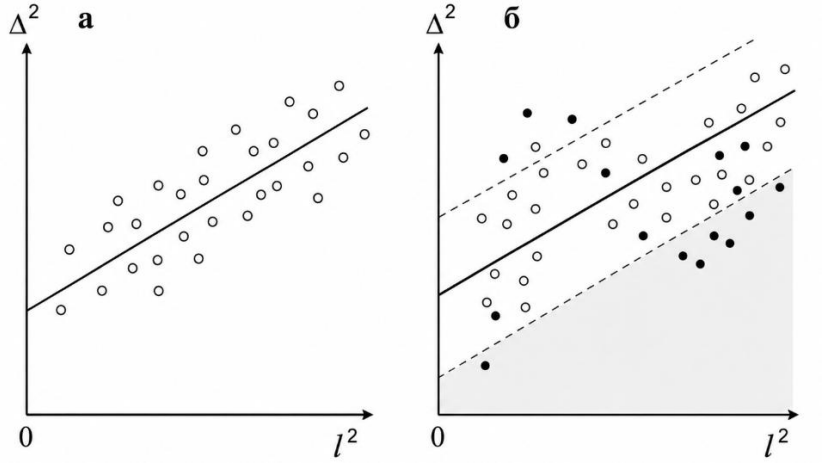

Рисунок 1.2 – Виявлення ненадійних пар співставлень

У такому підході середньоквадратичну похибку вимірювань оцінюють як

$$m = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\Delta_i^2}\ . \tag{1.7}$$

Разом з тим застосування методу може бути складним через специфіку збору даних: на практиці мережа спостережень не завжди планується з прицілом на побудову подібних “наближених до реальності” моделей, а отже, підхід часто потребує спеціально організованих і тривалих серій вимірювань.

1.5 Вибір типу просторової моделі для опису забруднення

Згідно з роботами [49, 52, 56, 89, 90] для просторового відтворення показників забруднення (концентрацій важких металів, індексів сумарного забруднення тощо) зазвичай застосовують три базові класи моделей:

– графічна – поле показника подається у вигляді ізоліній/ізоповерхонь (карти ізо-концентрацій, контурні зони перевищення порогів тощо);

– цифрова – значення показника обчислюються у вузлах регулярної або нерегулярної сітки (часто прямокутної), накладеної на досліджувану територію, з подальшим формуванням растру/сіточного поля;

– аналітична – просторовий розподіл описується функціонально (аналіти-

чним виразом), який залежить від координат і, за потреби, від глибини.

Окрім цих підходів, у складних умовах (неоднорідний рельєф, різка локальна плямистість забруднення, поєднання кількох джерел) доцільно використовувати гібридні графічно-цифрові схеми [52, 56, 89, 90], коли первинна інтерпретація виконується на карті/профілях, а далі вона переводиться у числове поле для розрахунків і порівнянь.

Найчастіше в екологічних звітах і моніторингових матеріалах зустрічаються саме графічні представлення, оскільки вони наочно відображають просторову структуру зон ризику. Чисто цифрові моделі в прикладній роботі формуються переважно тоді, коли необхідні кількісні процедури: оцінка площ/об’ємів забруднення, інтегральні показники по ділянках, сценарний аналіз або підготовка даних для автоматизованих розрахунків. Нерідко такі сіткові поля будують на основі вже отриманих ізоліній (або первинних точкових даних) шляхом інтерполяції.

Важливо зазначити, що наявність формалізованих (цифрових або гібридних) моделей спрощує їх подальшу інтеграцію у бази даних, ГІС та системи підтримки рішень. У перспективі це дає змогу накопичувати історію спостережень, автоматизувати оновлення карт забруднення та організувати централізоване управління наборами моніторингових даних відповідними підрозділами.

У джерелах [49, 52, 56, 89, 90] зазначається, що аналітичне відтворення просторового розподілу значень показника не завжди є найкращим вибором, оскільки питання добору адекватної апроксимуючої функції для реальних полів (особливо за нерівномірної мережі спостережень) часто лишається відкритим.

Разом із тим у практичних задачах екологічного моніторингу інколи успішно застосовується один з найпростіших аналітичних підходів, який не потребує складної побудови та задається співвідношенням

$$P = b = const\,, \tag{1.8}$$

де P – значення досліджуваного показника забруднення (наприклад, концент-

рації певного важкого металу або інтегрального індексу) у довільній точці ділянки (та/або на фіксованій глибині);

b – середнє значення цього показника, обчислене як середньоарифметичне за надійними результатами вимірювань.

Побудова моделі типу (1.8) зазвичай не викликає ускладнень, а в окремих ситуаціях її точності може бути достатньо для попередньої оцінки рівня забруднення або для швидкого узагальнення даних. Такі моделі можна формувати як для всієї території спостережень, так і для її частин (наприклад, за зонами, кварталами, функціональними ділянками), що фактично приводить до блочно-аналітичного опису: кожному блоку відповідає власне середнє b.

По суті, подібний підхід використовується тоді, коли потрібно отримати грубу, але інтерпретовану характеристику ділянки – наприклад, для зведених звітів, порівняння територій між собою або формування базового рівня, від якого надалі оцінюють відхилення.

Водночас моделі, що базуються на інтенсивному згладжуванні або на надто спрощених припущеннях, у задачах детальної геометризації забруднення застосовують обережно: вони можуть “розмити” локальні піки концентрацій, які є принципово важливими для виділення зон ризику та планування природоохоронних заходів.

Результати просторової реконструкції забруднення дають змогу відповісти на низку практичних запитань, тому перед вибором підходу важливо чітко визначити, які саме відповіді потрібні і з якою деталізацією. Наприклад, якщо метою є отримати узагальнену оцінку середнього рівня забруднення на території (скажімо, для довгострокового звіту або порівняння ділянок між собою), то інколи достатньо найпростішої моделі типу (1.3). Якщо ж потрібно приймати рішення на коротких горизонтах (наприклад, протягом найближчих місяців) або виділяти конкретні локальні осередки ризику, тоді вже потрібні просторово деталізовані представлення – картограми ізо-концентрацій, профілі за глибиною, тощо.

На вибір типу моделі істотно впливає обсяг і якість наявних даних. За недостатньої інформації навіть “красиво намальована” карта не обов’язково буде

точнішою за модель вигляду (1.7). Зупинимось на причинах, які нині вважаються загальноприйнятими [56, 89, 90]:

1) недостатня щільність мережі спостережень та невдале розташування точок відбору проб можуть не забезпечувати надійної інтерполяції (якщо відстані між пунктами вимірювань занадто великі, то відновлені між ними значення можуть суттєво відрізнятися від реальної картини і формально графічну модель у такій ситуації побудувати можна, однак вона здатна спотворювати просторову структуру поля концентрацій і, як наслідок, вводити в оману щодо меж і "форми" зон забруднення);

2) розкид значень показника може бути малим і за величиною співставним із похибкою відбору/аналізу, а також не демонструвати виразних просторових закономірностей і у цьому випадку виграш у точності від графічної або цифрової моделі буде мінімальним порівняно з простим усередненням (1.7), тоді як трудомісткість побудови детального просторового поля є принципово більшою.

У сучасній практиці оцінювання репрезентативності даних екологічного моніторингу ґрунтів важливою є вимога, щоб у межах різних ділянок спостережень була порівнюваною щільність мережі відбору проб та частка "проблемних" (нетипових або методично сумнівних) результатів, які вилучаються з аналізу. Щільність мережі зазвичай оцінюють як відношення кількості виконаних відборів/вимірювань до площі відповідної ділянки (наприклад, у км^2), а для профільних досліджень – також з урахуванням кількості інтервалів по глибині.

Такий підхід можна інтерпретувати як метод еталонної ділянки: для кожної характерної зони (за типом ґрунту, джерелом забруднення або режимом землекористування) доцільно виділяти свою "еталонну" територію з типовими значеннями змінюваності показника, густотою відбору та відсотком відбракувань. Водночас слід розуміти, що перенесення висновків, отриманих для однієї ділянки, на іншу завжди містить очевидний ризик: просторові закономірності забруднення можуть суттєво відрізнятися навіть за близьких умов.

Саме тому доцільно періодично повторювати оцінку придатності обраної моделі у міру накопичення нових даних і розширення контуру обстеження (на-

приклад, коли площа охопленої території стає у 3 – 4 рази більшою за площу еталонної ділянки). Це дозволяє вчасно виявити, що початкові припущення вже не відповідають реальній картині, і скоригувати методику просторової реконструкції.

“Еталонний” варіант перевірки доцільності моделі на контрольній ділянці полягає в тому, що якщо у попередні періоди для еталонної території була побудована певна модель, і її адекватність підтвердилася повторними обстеженнями/контрольними вимірюваннями, то є підстави й надалі використовувати аналогічний підхід. Простота такого правила зробила його популярним на практиці, однак воно не повинно підміняти собою аналіз – зокрема, перевірку того, наскільки отримані висновки справді можна коректно поширювати на інші ділянки з іншими умовами.

Метод еталонної ділянки можна застосовувати навіть тоді, коли відсутні тривалі ряди контрольних спостережень або немає “історично перевірених” моделей. Для цього виділяють територію з вищою щільністю відбору проб порівняно з іншими частинами досліджуваної зони. Далі на цій еталонній ділянці штучно “вирівнюють” густоту даних: частину пунктів (або інтервалів/проб) тимчасово виключають так, щоб підсумкова щільність мережі відповідала щільності спостережень на інших ділянках.

Після цього за даними, що залишилися, будують просторову (графічну) модель розподілу показника забруднення. За допомогою цієї моделі обчислюють прогнозні значення $P_{c,i}$ у точках вилучених пунктів відбору, для яких відомі фактичні виміряні значення $P_{\text{г},i}$. Таким чином отримують контрольну вибірку “прогноз-спостереження”, на основі якої оцінюють точність.

Далі за формулами

$$m_{\text{г}} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(P_{c,i} - P_{\text{г},i})^2}\,, \tag{1.9}$$

$$m_a = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(P_{\text{г},i} - b)^2} \tag{1.10}$$

проводять оцінювання похибок відповідно просторової (графічної) моделі (1.9) та спрощеної аналітичної моделі типу (1.10), де b – середнє значення показника за прийнятими як надійні вимірюваннями.

Обчислення $m_{\text{г}}$ і m_a, як і в попередньому підході, доцільно виконувати декілька разів (щонайменше двічі) для різних варіантів вибору вилучених пунктів/проб, а також при зміщенні (перенесенні) вузлів накладеної сітки. Таке зміщення виконують так, щоб вузли нової сітки були максимально "відсунуті" від попереднього положення, зменшуючи випадковий вплив локальних згущень даних. Якщо отримано кілька значень похибки $m_{\text{г},\,p}$, $p=\overline{1,\,s}$, то як підсумкову оцінку похибки беруть їх середньоквадратичне значення

$$m_{\text{г}}=\sqrt{\frac{1}{s}\sum_{p=1}^{s}m_{\text{г},p}^{2}}\ .$$

Якщо виявляється, що $m_{\text{г}}\geq m_a$, то побудова детальної просторової (геометричної або цифрової) моделі фактично не дає виграшу: її похибка не менша, ніж у найпростішого аналітичного наближення, тому додаткові витрати на деталізацію можуть бути необґрунтованими. Якщо ж $m_{\text{г}}<m_a$, тоді оцінюють, наскільки різниця $m_a-m_{\text{г}}$ є суттєвою з огляду на прикладні цілі – наприклад, планування рекультивації, виділення зон ризику, ранжування територій, вибір пріоритетних місць для додаткового відбору проб або контроль ефективності природоохоронних заходів.

Слід підкреслити, що висновки, отримані на опрацьованій (еталонній) території, не можна автоматично переносити на інші частини ділянки без перевірки: просторовий характер забруднення може змінюватися через інші ґрунтові умови, джерела викидів, рельєф, водний режим тощо. Для обґрунтування такого перенесення на практиці використовують критерії порівняння змінюваності показника на еталонній і на недостатньо дослідженій територіях. У роботах [89, 90, 49] для зіставлення коефіцієнтів варіації рекомендується застосовувати формулу

$$V = \frac{100}{S}\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(P_i - S)^2} \ (\%), \qquad (1.11)$$

де $S = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} P_i$ – середнє значення показника P (наприклад, концентрації забруднювачів або інтегрального індексу забруднення).

Якщо виділити еталонну ділянку не вдається (наприклад, мережа нерівномірна або дані розподілені фрагментарно), застосовують підхід “розрідження” по всій зоні дослідження. У цьому випадку виконують багатоваріантне розрідження мережі шляхом виключення приблизно 15 – 20% пунктів/проб і далі повторюють описані вище процедури отримання похибок $m_{\text{г}}$ та m_a. Після цього з набору, що залишився, додатково вилучають ще 10 – 15% пунктів і знову визначають похибки m'_r та m'_a.

Висновки, зроблені на основі порівняння $m_{\text{г}}$ та m_a, можна вважати достатньо надійними лише за умови, що додаткові оцінки не погіршують попередні результати, тобто виконується $m'_{\text{г}} \geq m_{\text{г}}$ і $m'_a \geq m_a$.

При цьому слід враховувати, що оцінки похибок, отримані лише за матеріалами польового відбору проб та лабораторних аналізів, можуть мати досить наближений характер. Тому доцільно орієнтуватися насамперед на відносні співвідношення таких оцінок, а висновки, зроблені тільки на підставі обмеженої вибірки, зазвичай є менш стійкими, ніж результати, підтверджені незалежними контрольними даними (повторними обстеженнями, дублетними пробами, між-лабораторними порівняннями або іншими джерелами верифікації).

Зауважимо також, що окрім описаних вище підходів до перевірки коректності інтерполяції між вимірами, існують і альтернативні методики, які спираються переважно на дані моніторингу та/або спеціальні процедури контролю якості даних.

1.6 Побудова графічної моделі

Далі наведемо базові принципи формування графічної моделі.

Створення графічного представлення починають із підготовки картографічної (графічної) основи, на яку наносять:

– пункти відбору проб або точки вимірювань;

– зафіксовані значення показника забруднення (концентрації, індекси, факт перевищення порогів/норм тощо);

– ключові елементи просторової структури ділянки, що можуть впливати на міграцію домішок: межі функціональних зон, гідрографічну мережу й напрямки стоку, дренажні канали, перепади рельєфу, дороги та інженерні комунікації, можливі джерела надходження забруднювачів;

– контур території дослідження та межі під-ділянок (якщо вони задаються).

Вибір площини відображення має відповідати тому, як надалі планується аналіз і подання результатів: у більшості випадків побудову виконують на горизонтальній проєкції (план), а для врахування глибини – додатково формують вертикальні профілі/розрізи (наприклад, 0 – 2 м із кроком 0,5 м). У складних умовах (сильна неоднорідність, поєднання декількох джерел, виражена роль рельєфу) допустимо застосовувати різні проєкції для різних фрагментів території, щоб не втратити важливі особливості просторового розподілу (аналогічно до ситуацій, коли для різних ділянок потрібні різні типи розрізів) (рис. 1.3).

Розглянемо, як доцільно підбирати крок (переріз) та рівні ізоліній при побудові графічних моделей. Під час просторового аналізу забруднення часто виникає потреба відображати поле показника у вигляді ізоліній – наприклад, ліній однакових концентрацій важкого металу, контурів перевищення нормативного порога (у т.ч. гранично допустимих концентрацій – ГДК), ізоліній інтегрального індексу забруднення, а також меж зон ризику.

Вибір перерізу має забезпечити достатню деталізацію, щоб між лініями можна було коректно виконувати подальшу інтерполяцію і при цьому уникати зайвої “дрібноти”, яка ускладнює читання карти.

Згідно з комендаціями, наведеними у [49, 52, 56], доцільно підбирати рівні так, щоб середня відстань між сусідніми ізолініями на плані становила орієнтовно 5 – 10 мм (конкретне значення залежить від складності просторового рисунка,

а не від масштабу креслення). Така густота контурів, як правило, дає достатньо точне відтворення форми зон забруднення, але не перевантажує графіку.

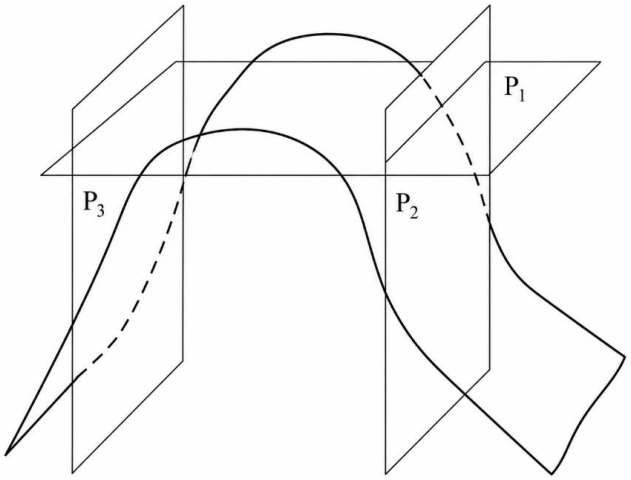

Рисунок 1.3 – Система проєкційних площин для графічного відтворення просторового розподілу забруднення

Найпростіший практичний спосіб налаштування перерізу можна описати так. Спочатку беруть досить “грубий” крок, щоб на карті сформувалося лише 2 – 3 ізолінії, і виконують побудову. Далі переріз зменшують удвічі та знову проводять трасування ізоліній. Операцію повторюють циклічно до того моменту, коли нові контури починають проходити приблизно посередині між уже наявними, забезпечуючи рівномірне ущільнення та стабільну інтерполяційну основу.

Наприклад, рівні ізо-концентрацій будувалися послідовно з кроками 20, 10 та 5 мг/кг (або, якщо зручніше для індексу, з кроками 8, 4 та 2 умовні одиниці). У результаті контури, отримані при кроці 5 мг/кг, природно “ущільнюють” картину й переважно розташовуються між лініями, побудованими для кроку 10 мг/кг. Отже, для більшості задач візуалізації (планування робіт, попереднє зонування ризиків, пояснювальні матеріали) достатньо відображати ізолінії з кроком 10 мг/кг, не перевантажуючи карту зайвими деталями. Водночас цей підхід, хоч і зручний, може приводити до надлишкових перерахунків, коли на виході з’являються “некомфортні” значення кроку (наприклад, 12; 6; 3; 1,5 мг/кг або 7,5; 3,75; 1,875 для умовних шкал). Тоді доводиться виконувати округлення в менший бік і повторювати трасування ізоліній уже з оновленим перерізом.

Далі опишемо побудову ізоліній методом багатогранників (полігональних елементів), який зручно застосовувати для відтворення просторових полів концентрацій забруднювачів у ґрунті та для картографування меж зон перевищення порогів.

Наведемо алгоритм поетапно.

Крок 1. Виявляють і окреслюють усі області, де положення потрібної ізолінії визначається неоднозначно (приклад таких ситуацій наведено на рис. 1.4 а). Неоднозначність виникає, коли в межах одного локального контуру вимірювань значення показника “перетинає” заданий рівень так, що можливі різні геометрично коректні варіанти проходження лінії.

Крок 2. Усередині виділених зон неоднозначності виконують побудову ізоліній показника (наприклад, для рівня $C = 50$ мг/кг або для порога перевищення нормативу) з урахуванням того, що існує кілька допустимих конфігурацій.

Крок 3. Поза межами зон неоднозначності ізолінії проводять стандартним способом, оскільки там траєкторія контуру визначається однозначно за локальними даними.

Як видно з рис. 1.4 а), щоб проілюструвати зміст кроку 1, розглянемо типову ситуацію. Припустімо, що в межах чотирьох точок спостереження маємо концентрації 48; 62; 55; 41 мг/кг. Для рівня 50 мг/кг ізолінію можна провести двома логічно допустимими способами (наприклад, обійти одну з “високих” точок ближче або далі), і обидва варіанти будуть формально узгодженими з даними. Натомість у іншому контурі, скажімо для значень 35; 52; 68; 60 мг/кг, той самий рівень 50 мг/кг фіксується набагато жорсткіше, і варіант проходження контуру фактично єдиний. Саме тому доцільно спочатку відокремлювати ділянки з неоднозначністю – ще до фінальної побудови карти.

Крок 4. Остаточне положення ізоліній уточнюють лінійною інтерполяцією (по ребрах полігонів/трикутників чи інших елементів сітки). Поза зонами неоднозначності можна застосовувати звичні процедури трасування; особливості побудови саме в “проблемних” областях описані в [89, 90, 49].

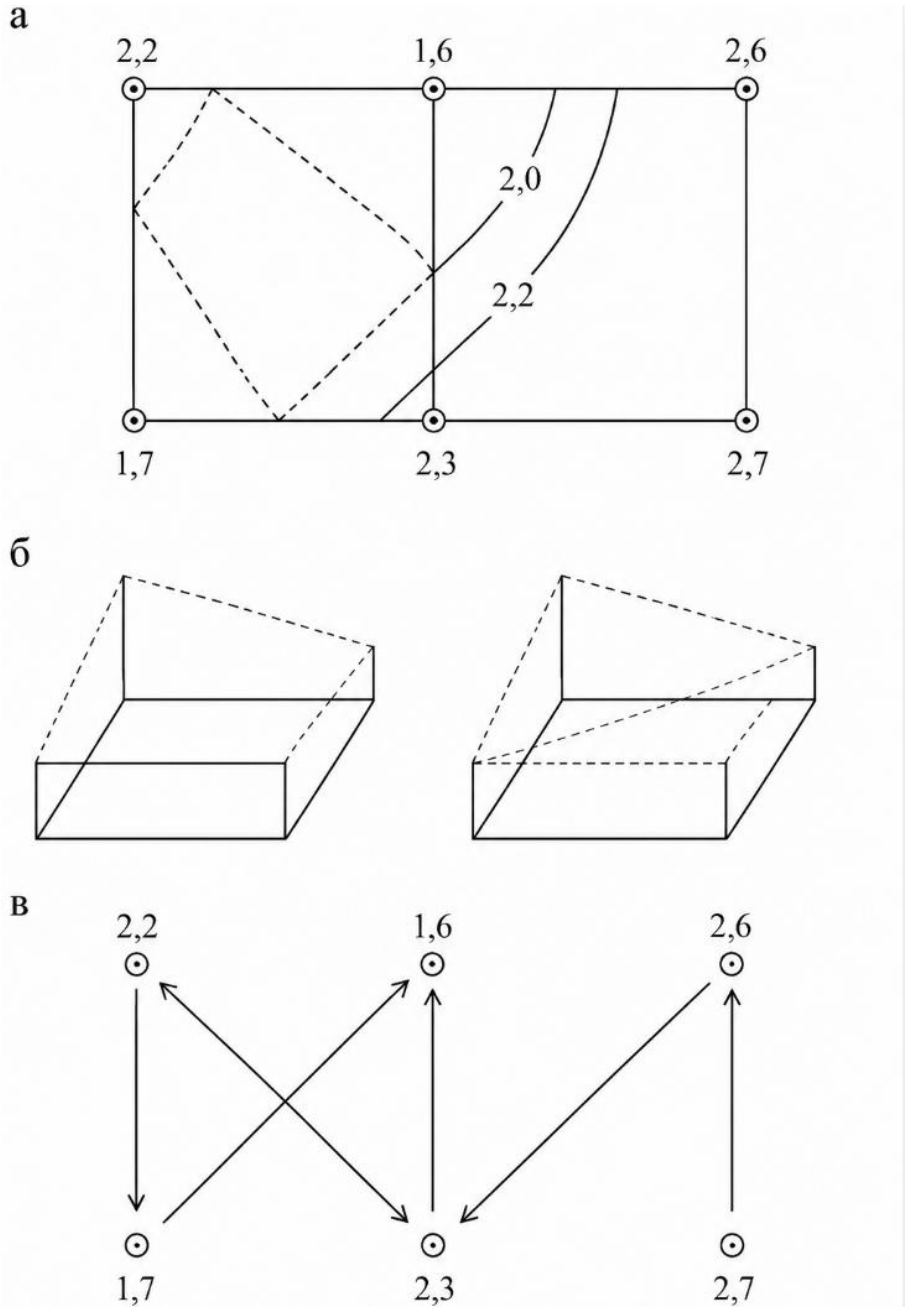

Рисунок 1.4 – Виділення дільниць невизначеності в розміщенні ізоліній

Під час просторової реконструкції забруднення також доцільно окремо виявляти та враховувати аномальні/нетипові вимірювання – тобто такі, в околі яких звичайна лінійна інтерполяція стає некоректною (через явні методичні збої, локальні викиди, невідповідність умов відбору проб або помилки лабораторного аналізу). Такі точки слід або перевіряти повторно, або маркувати як сумнівні й не включати в побудову без додаткового обґрунтування.

Аномальним вимірюванням доцільно вважати таке, навколо якого формуються (замикаються) дві або більше ізолінії рівня показника з обґрунтованим

кроком побудови. Виявлення таких “викидів” у даних та коригування траєкторій ізоліній у їхній близькості розглянуто в [49, 89, 90].

Іноді кількість точок спостережень на перерізі є недостатньою, тому виникає потреба визначати положення точок із заданими рівнями показника не через інтерполяцію, а шляхом екстраполяції. Такий підхід може застосовуватися під час побудови прогнозних оцінок меж поширення забрудненого шару (верхньої/нижньої межі) або прогнозу зміни концентрацій важких металів та інших забруднювачів у ґрунті за межами наявної мережі пробовідбору.

На рис. 1.5 $K_{ex} > 1$ відповідає перевищенню нормативного рівня, а значення $K_{ex} = 2,0$ означає двократне перевищення гранично допустимої концентрації.

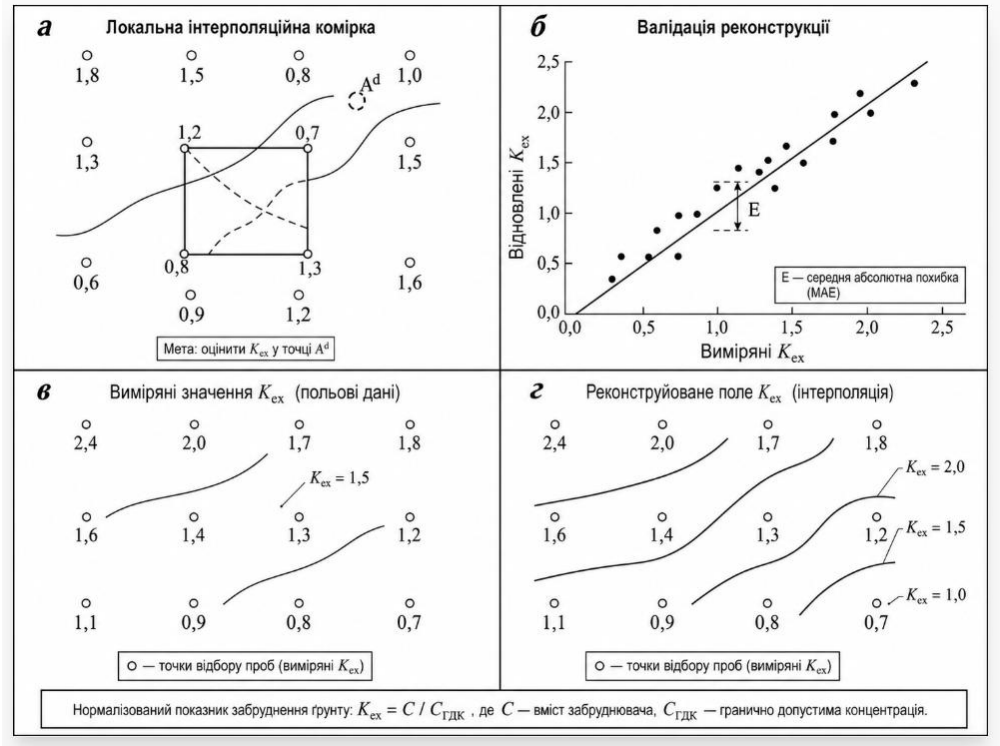

Рисунок 1.5 – Побудова ізоліній під час просторової реконструкції забруднення ґрунту

Схематичне відтворення просторової реконструкції поля забруднення за обмеженими вимірюваннями, наведене на рис. 1.5: а) побудова ізоліній нормованого показника забруднення $K_{ex} = C / C_{ГДК}$; б) просторові фрагменти реконструйованої поверхні; в) схема зв’язків між опорними точками спостережень.

На рис. 1.5 а) показано локальну зону невизначеності, у якій ізолінію заданого рівня можна провести двома близькими способами; на рис. 1.5 б) наведено схему оцінювання розбіжності E між виміряним і реконструйованим значеннями; на рис. 1.5 в) показано приклад поля з вищими значеннями концентрації; на рис. 1.5 г) наведено випадок, коли положення ізолінії визначається однозначно.

Для наочного подання результатів просторової реконструкції доцільно використовувати не лише абсолютні концентрації окремого забруднювача, а й нормований показник перевищення гранично допустимої концентрації, де C – виміряна або реконструйована концентрація забруднювача, а $C_{ГДК}$ – гранично допустима концентрація для відповідної речовини. Такий запис дозволяє порівнювати різні ділянки та різні забруднювачі в єдиній безрозмірній шкалі: значення $K_{ex} < 1$ відповідають рівню нижче нормативного, $K_{ex} = 1$ – межі допустимого рівня, а $K_{ex} > 1$ – перевищенню нормативу.

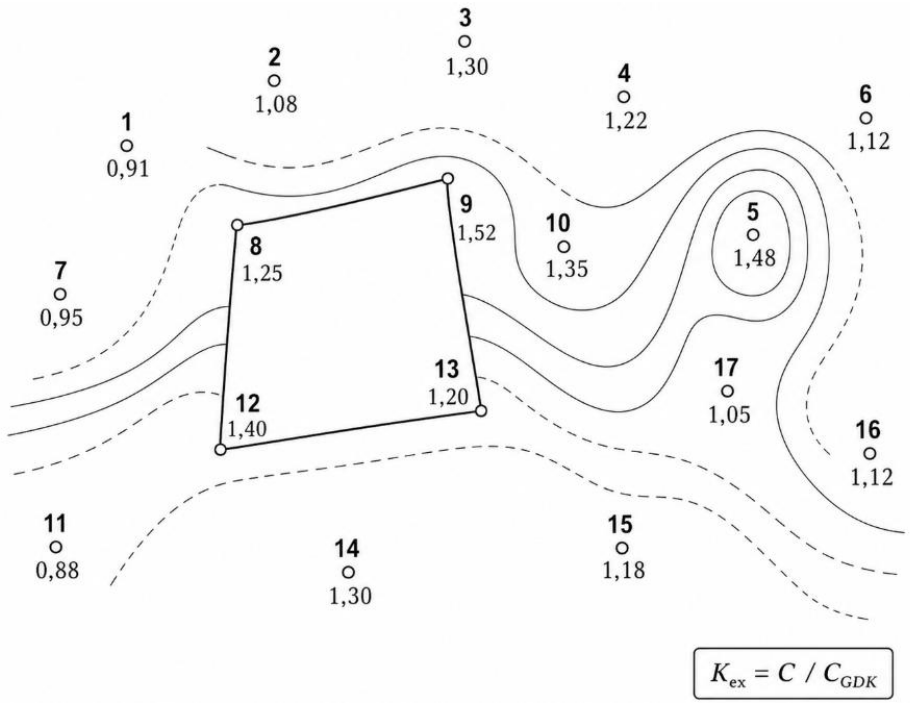

Рисунок 1.6 – Приклад побудови ізоліній ознаки зовні дільниць невизначеності

На рис. 1.6 наведено схематичний приклад побудови ізоліній нормованого показника забруднення ґрунту за результатами точкових вимірювань. Числа

біля точок відповідають значенням K_{ex} у пунктах відбору проб, а криві показують ізолінії однакового рівня забруднення. Наявність значень як нижче, так і вище одиниці дозволяє виділити зони допустимого стану, ділянки помірного перевищення та локальні області підвищеного ризику.

Отже, рис. 1.6 є прикладом побудови ізоліній нормованого показника забруднення ґрунту $K_{ex} = \frac{C}{C_{ГДК}}$ за даними точкових вимірювань. Числа біля точок відповідають значенням K_{ex} у пунктах відбору проб, а криві позначають ізолінії однакового рівня забруднення. Значення $K_{ex} > 1$ відповідають перевищенню гранично допустимої концентрації.

Побудова таких ізоліній дає змогу перейти від набору окремих вимірювань до узгодженого просторового уявлення про поле забруднення. При цьому області, де ізолінії проходять поблизу групи точок із близькими значеннями, можуть вважатися більш надійно відновленими. Натомість у ділянках із малою кількістю спостережень або різкою зміною значень K_{ex} положення ізоліній є більш невизначеним і потребує додаткового контролю, уточнення сітки вимірювань або застосування спеціальних методів реконструкції, зокрема інтерлінації, інтерфлетації чи методу Шепарда.

1.7 ГІС і дистанційне зондування Землі як джерело даних та аналітична оболонка для моделей

Геоінформаційні системи (ГІС) та дистанційне зондування Землі (ДЗЗ) забезпечують інтеграцію просторових даних різної природи в єдиному координатно-часовому поданні. До таких даних належать результати наземних вимірювань, координати пунктів відбору проб, супутникові індекси, шари землекористування, топографічні характеристики, метеорологічні поля, транспортна інфраструктура та розміщення потенційних джерел забруднення. Це створює основу для узгодженого аналізу забруднення, коли реконструкція просторових полів і математичне

моделювання виконуються з урахуванням територіальних обмежень, просторової неоднорідності та додаткових інформаційних шарів [52, 55, 56].

У задачах ґрунтового забруднення дані ДЗЗ, зокрема спектральні ознаки та похідні індекси, можуть використовуватися як непрямі індикатори стану поверхні та як додаткові предиктори для оцінювання просторових закономірностей. За наявності калібрувальних наземних вимірювань такі дані можуть допомагати встановлювати наближені залежності між спектральними характеристиками, властивостями ґрунтового покриву та концентраціями забруднювачів. У сучасних прикладних дослідженнях це часто реалізується із залученням статистичних методів або алгоритмів машинного навчання, наприклад, Random Forest, що дозволяє отримувати попередню оцінку просторового розподілу показників забруднення або допоміжну інформацію для інверсійних постановок [55].

Водночас слід підкреслити, що супутникові індекси не є прямим вимірюванням концентрацій важких металів або інших забруднювачів у ґрунті. Вони потребують калібрування, порівняння з польовими даними та обережної інтерпретації. Тому в межах даної дисертаційної роботи ГІС/ДЗЗ-дані розглядаються не як заміна наземних спостережень, а як додаткове джерело просторової інформації, яке може використовуватися для уточнення контексту, валідації реконструйованих полів та подальшого розвитку моделей екологічного моніторингу [55].

У задачах атмосферного забруднення ДЗЗ-дані можуть застосовуватися для оцінювання оптичної товщини аерозолю, виявлення димових шлейфів, теплових аномалій та інших просторових ознак, що корелюють із наявністю або інтенсивністю викидів. У поєднанні з ГІС це дозволяє формалізувати зв’язок між потенційними джерелами забруднення, зокрема промисловими об’єктами, транспортними магістралями чи зонами інтенсивного антропогенного навантаження та просторовими шаблонами забруднення. Такий підхід є важливим для аналізу ризиків, планування моніторингових вимірювань і підтримки управлінських рішень [52, 56].

У межах методології дисертаційної роботи ГІС/ДЗЗ виконують кілька допоміжних, але важливих функцій. По-перше, вони забезпечують просторову

прив’язку даних спостережень, джерел забруднення, меж досліджуваної території та допоміжних факторів середовища. По-друге, вони можуть використовуватися для параметризації неоднорідностей моделі, зокрема через зонування території, виділення просторових масок, уточнення умов моделювання або задання додаткових предикторів. По-третє, ГІС/ДЗЗ-дані надають інструментарій для валідації та візуального узгодження результатів реконструкції й чисельного моделювання шляхом зіставлення відновлених полів із незалежними просторовими шарами, картами ризику, супутниковими індикаторами або наземними вимірюваннями [52, 55, 56].

1.8 Обернені задачі, оцінювання параметрів та оптимізація: зв’язок моделі з даними

У реальних задачах екологічного моніторингу параметри математичної моделі зазвичай не відомі точно та мають бути оцінені за обмеженими експериментальними даними. До таких параметрів належать інтенсивності та координати джерел забруднення, коефіцієнти дифузії або дисперсії, параметри конвективного перенесення, фонові концентрації, а також кінетичні константи, що визначають інтенсивність реакційних перетворень, осадження, деградації або іншої взаємодії домішок із середовищем. Тому поряд із прямими задачами, у яких за заданими параметрами обчислюється поле концентрацій, природно виникають обернені задачі, де за відомими або частково відомими спостереженнями необхідно відновити невідомі характеристики моделі [26, 41].

Обернені задачі екологічного моделювання, як правило, є некоректними або погано обумовленими. Це пов’язано з тим, що вихідні дані містять похибки вимірювань, кількість спостережень є обмеженою, а різні набори параметрів можуть давати близькі за виглядом поля концентрацій. Крім того, у задачах забруднення ґрунту або атмосфери дані часто мають нерівномірну просторову структуру: вони можуть бути задані лише в окремих точках, на профілях, у свердловинах або на мережі постів спостереження. У таких умовах для стабілізації

розв’язку необхідно використовувати регуляризацію, апріорні обмеження, фізичну інтерпретацію параметрів та критерії узгодження моделі з даними.

Типовим підходом до оцінювання параметрів є мінімізація функціонала нев’язки між модельними та експериментальними значеннями. У найпростішому випадку такий функціонал можна подати у вигляді

$$\Phi(p) = \sum_{j=1}^{N_{obs}} w_j (C^h(x_j; p) - C^{obs}(x_j))^2 + \lambda \mathcal{R}(p),$$

де p – вектор невідомих параметрів моделі;

$C^h(x_j; p)$ – чисельно отримане значення концентрації в точці спостереження x_j;

$C^{obs}(x_j)$ – експериментальне значення;

w_j – ваговий коефіцієнт вимірювання;

$\mathcal{R}(p)$ – регуляризуючий доданок;

λ – параметр регуляризації.

Регуляризуючий член може відображати вимогу обмеженості параметрів, гладкості розподілу, близькості до апріорних значень або фізичної допустимості розв’язку.

Після дискретизації така постановка зазвичай приводить до нелінійної задачі оптимізації або до системи нелінійних алгебраїчних рівнянь. Для її розв’язання можуть використовуватися методи Ньютона, квазі-Ньютона, Гаусса-Ньютона, градієнтні методи, регуляризовані ітераційні схеми та алгоритми з контролем збіжності [19, 26]. У задачах із погано обумовленими матрицями або нестійкою залежністю розв’язку від параметрів важливим є вибір початкового наближення, масштабування параметрів, обмеження області допустимих значень і контроль фізичної невід’ємності концентрацій.

Окремим різновидом оптимізаційної постановки є задача вибору розміщення або інтенсивності джерел за критерієм мінімізації інтегрального показника забруднення. У такій задачі можна розглядати функціонал ризику або сумарної полюції, який залежить від положень джерел, їх інтенсивностей і пара-

метрів перенесення. Такий підхід дозволяє перейти від описового моделювання до задач підтримки прийняття рішень: зменшення екологічного впливу, вибору зон додаткового контролю, планування моніторингової мережі або аналізу сценаріїв зміни параметрів системи [38].

Висновки до розділу 1

1. Виконано всебічний аналіз сучасних підходів до математичного моделювання атмосферного та ґрунтового забруднення, а також методів реконструкції просторових полів за неповними експериментальними даними. Це дозволило сформувати концептуальну основу дисертаційного дослідження, у якій фізично обґрунтоване моделювання процесів перенесення поєднується з операторними методами відновлення просторових полів.

2. Систематизовано методи реконструкції просторових полів за обмеженими спостереженнями, зокрема для даних, заданих у точках, на профілях, лініях, зрізах або у свердловинах. Виділено інтерлінацію як природний апарат відновлення багатовимірних функцій за даними на лінійних носіях інформації. Для порівняння з класичними підходами розглянуто метод Шепарда та інші інтерполяційні процедури для нерегулярно розміщених даних.

3. Показано, що геоінформаційні системи та дистанційне зондування Землі можуть виконувати роль додаткового інформаційного шару для просторового аналізу, візуалізації, валідації та інтерпретації результатів реконструкції. У межах дисертаційної методології ГІС/ДЗЗ не замінюють наземні вимірювання та математичні моделі, але створюють аналітичну оболонку для узгодження результатів із реальними територіальними даними. Для задач дистанційного моніторингу та інтерпретації важких металів доцільно також враховувати джерела.

4. Розглянуто альтернативні підходи до аналізу ґрунтового забруднення: прямі польові та лабораторні вимірювання, ручне або напівавтоматичне картографування, інтерполяційні методи, геостатистику, геоінформаційні системи, дистанційне зондування Землі, методи машинного навчання, а також процесні

моделі міграції в пористих середовищах. Показано, що ці підходи не взаємовиключні: прямі вимірювання формують емпіричну основу, ГІС і ДЗЗ розширюють просторовий контекст, геостатистика оцінює просторову залежність і невизначеність, а інтерлінаційні та інтерполяційні оператори відновлюють поле за неповними даними спостережень.

Список джерел, які використано у даному розділі, наведено у повному списку використаних джерел [1, 2, 4 – 8, 10, 11, 13, 14, 16 – 21, 23 , 26, 28, 31 – 35, 37–39, 41, 43, 49–53, 55, 56, 60, 78, 83, 86, 89, 90, 97, 98, 106, 107, 113, 117, 130 – 133].

2 МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПЕРЕНЕСЕННЯ ЗАБРУДНЮВАЧІВ У ПОВІТРІ ТА СКІНЧЕННО-ЕЛЕМЕНТНА РЕАЛІЗАЦІЯ НА ОСНОВІ МЕТОДУ ГАЛЬОРКІНА ТА МЕТОДУ РІТЦА

2.1 Побудова математичної моделі розподілу забруднення у повітрі

Розглядається стаціонарний процес перенесення та перетворення багатокомпонентної суміші забруднювачів у повітряному середовищі. Тут $x \in [0, L]$ – поздовжня координата вздовж напряму переважаючого перенесення (потоку/вітру) на розглянутій ділянці. Таке 1D-узагальнення використовується як модель першого наближення для опису профілю концентрацій уздовж напряму домінуючого перенесення. Розглядається система для двох компонент: $C_1(x)$ – концентрація CO_2, $C_2(x)$ – концентрація SO_3.

Математичний опис технологічного процесу в багатокомпонентній суміші включає рівняння матеріального балансу для кожної реагуючої компоненти. Рівняння матеріального балансу записуються у вигляді рівнянь дифузії з врахуванням джерел речовини [78, 31, 101, 102]

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \nabla \cdot (D_i \nabla C_i) - \nabla \cdot (\vec{u} C_i) + F_i,\ i = \overline{1, m}, \tag{2.1}$$

де C_i – концентрація i-ї компоненти;

$\vec{u}$ – вектор швидкості матеріального потоку суміші;

D_i – коефіцієнт сумарної дифузії;

F_i – функція, що визначає інтенсивність джерела i-ї компоненти;

m – кількість реагуючих компонент;

$\nabla \cdot (D_i \nabla C_i)$ – оператор дифузії (записаний через дивергенцію);

$\nabla \cdot (\vec{u} C_i)$ – конвекційний член.

Далі розглядаємо концентрацію кожної компоненти над деякою поверх-

нею як функцію лише поздовжньої координати x, а рівняння (2.1) розглядаємо в одновимірній постановці.

Дифузійне перенесення оцінюється коефіцієнтом поздовжнього перемішування: при $D_L \to \infty$ здійснюється режим ідеального змішування, а при $D_L \to 0$ – режим ідеального витиснення, де $D_L(x) = \mathrm{diag}(D_1(x), \ldots, D_m(x))$ – коефіцієнт поздовжнього перемішування або ефективної дифузії, який характеризує інтенсивність вирівнювання концентрації вздовж координати x. У загальному багатокомпонентному випадку $D_L(x)$ може розглядатися як скалярний коефіцієнт або як діагональна матриця коефіцієнтів для окремих компонент суміші. З фізичної точки зору збільшення D_L відповідає посиленню дифузійного або турбулентного перемішування, тоді як малі значення D_L означають слабке поздовжнє згладжування профілю концентрації.

Утворення нової речовини внаслідок взаємодії між компонентами суміші забруднення може відбуватися локально – поблизу окремих поверхонь або компактних областей. У межах моделі такі локалізовані внески зручно описувати як зосереджені, тобто точкові, джерела. Ці джерела речовини забруднення називаються точковими. Математично точкове джерело можна описати за допомогою одиничної імпульсної функції Дірака [31, 77, 78]:

$$q_{ik}\delta(x - x_{ik}),$$

де x_{ik} – координата k-го джерела i-ї компоненти забруднення;

q_{ik} – його інтенсивність, $k = \overline{1, p_i}$, $i = \overline{1, m}$.

Якщо $q_{ik} > 0$, то відповідний член описує джерело надходження речовини, а якщо $q_{ik} < 0$, то він може трактуватися як локальний стік або поглинання компоненти.

При FEM-дискретизації слабкої форми Гальоркіна редукованої дифузійно-реакційної задачі джерельний член $f_i(x)$ діє на тестову або базисну функцію $h_m(x)$ через інтеграл по розрахунковій області. З урахуванням властивості дель-

та-функції Дірака одержуємо

$$\int_0^L h_m(x) f_i(x) dx = \sum_{k=1}^{p_i} q_{ik} h_m(x_{ik}),$$

якщо джерело попало всередину елемента, його вклад розподіляється між двома сусідніми вузлами через значення P1-базисних функцій. За властивістю дельта-функції Дірака маємо:

$$b_m^{(i)} = \sum_{k=1}^{p_i} q_{ik} h_m(x_{ik}).$$

Надалі $b_m^{(i)}$ використовуємо у FEM дискретизації.

Зауваження 1.1. Про функціональний простір слабкої постановки.

У редукованій одновимірній дифузійно-реакційній постановці природним простором для концентрацій є простір Соболєва $H^1(0,L)$. Він забезпечує існування слабких похідних першого порядку та коректність інтегралів, що входять до слабкої форми Гальоркіна. Крім того, у 1D функції з $H^1(0,L)$ мають коректно визначені значення на межі, що дозволяє записувати умови Робіна [34, 35, 77, 78].

Математична модель процесу в багатокомпонентній суміші забрудненого повітря для стаціонарних умов має вигляд наступної краойової задачі:

$$\frac{d}{dx}\left(D_L(x) \frac{d\vec{C}(x)}{dx} \right) - \frac{d}{dx}(u(x)\vec{C}(x)) + K(\vec{C}(x), x)\vec{C}(x) + \vec{f}(x) = 0,\ x \in (0, L), \quad (2.2)$$

$$D_L(0) \frac{d\vec{C}(0)}{dx} = u(0)(\vec{C}(0) - \vec{C}_0), \quad (2.3)$$

$$D_L(L) \frac{d\vec{C}(L)}{dx} = 0, \quad (2.4)$$

де $\vec{C}(x) = \left(C_1(x), C_2(x), ..., C_m(x)\right)^T$;

$u(x)$ – поздовжня швидкість матеріального потоку забруднення;

$K(\vec{C}(x), x)\vec{C}(x)$ – матриця, яка описує кінетику взаємодії між різними компонентами суміші;

$\vec{C}_0 = \left(C_{10}, C_{20}, ..., C_{m0}\right)^T$ – це задана зовнішня/вхідна/фонова концентрація на межі або на виході з джерела;

C_{i0} – величина концентрації i -ї компоненти забруднення в суміші на виході з джерела;

$D_L(x) = \mathrm{diag}(D_1(x), \ldots, D_m(x))$ – матриця коефіцієнтів сумарної дифузії;

$\vec{f}(x) = \left(f_1(x), f_2(x), ..., f_m(x)\right)^T$ – вектор джерельних членів для компонент суміші;

$f_i(x) = \sum_{k=1}^{p_i} q_{ik}\delta(x - x_{ik})$ – джерельний член i-ї компоненти, поданий у вигляді суми точкових джерел через дельта-функцію Дірака;

p_i – кількість точкових джерел i -ї компоненти;

L – довжина деякої поверхні.

Задача (2.2) – (2.4) у повному конвективно-дифузійно-реакційному вигляді загалом є нелінійною та несамоспряженою. Тому нижче варіаційна постановка використовується лише для самоспряженої редукції або локально-потенціальної частини моделі, тоді як повна конвективна задача надалі розглядається через слабку форму Гальоркіна. Крайова умова (2.3) має зміст умови Робіна і поєднує дифузійний потік із конвективним надходженням речовини на вході до області. Умова (2.4) задає відсутність дифузійного потоку на правій межі, що відповідає природному виходу суміші з розрахункової області.

Для повної конвективно-дифузійно-реакційної моделі цей функціонал не використовується як функціонал глобальної мінімізації; повна модель надалі розглядається у слабкій формі Гальоркіна. Для редукованої або лінеаризованої постановки, у якій конвективний та реакційний внески фіксуються відносно опорного стану, вводимо допоміжний стаціонарний функціонал

$$I(\vec{C}(x)) = \int_0^L \left\{ \frac{1}{2} \frac{d\vec{C}^T(x)}{dx} D_L(x) \frac{d\vec{C}(x)}{dx} + u(x)\vec{C}^T(x) \frac{d\vec{C}^{ref}(x)}{dx} + \right.$$

$$+ \frac{1}{2} \vec{C}^T(x)\vec{C}(x) \frac{du(x)}{dx} - 2\sum_{t=1}^{m} \int_0^{C_i(x)} \left(\sum_{j=1}^{m} K_{ij}(\vec{C}^{ref}(x), x) C_j(x) \Big|_{C_i^{ref}(x)=t} \right) dt -$$

$$\left. - \vec{f}^T(x)\vec{C}(x) \right\} dx + \frac{1}{2} u(0)\vec{C}^T(0)(\vec{C}(0) - 2\vec{C}_0), \qquad (2.5)$$

де накладаємо такі обмеження:

$K(\vec{C}(x), x)\vec{C}(x)$ – реакційний член допускає потенціал чи фіксується щодо $\vec{C}^{ref}(x)$;

$I(\vec{C}(x))$ – функціонал використовується для редукованої/симетризованої постановки, але повна модель все одно аналізується через слабку форму Гальоркіна;

$u(x)$ – заданий заздалегідь або використовується у лінеаризованому вигляді;

$\vec{C}^{ref}(x)$ – використовується для опису заданого опорного профілю концентрацій і є попередньо заданою функцією координати x, відносно якої виконується лінеаризація, симетризація або локальне наближення нелінійних членів моделі, тобто інакше кажучи, $\vec{C}^{,ref}(x) = (C_1^{ref}(x), C_2^{ref}(x), \ldots, C_m^{ref}(x))^T$ вказує на те, що цей профіль береться як початковий або опорний.

Таке позначення виникає тоді, коли повна нелінійна або несамоспряжена модель не може бути безпосередньо записана як задача мінімізації одного функціонала Рітца. У цьому випадку окремі складні члени, наприклад, реакційна матриця або конвективний внесок, фіксуються відносно відомого профілю $\vec{C}^{ref}(x)$. Це дозволяє побудувати допоміжний функціонал для редукованої, лінеаризованої або симетризованої постановки.

Наприклад, якщо реакційний член залежить від шуканого вектору концентрацій нелінійно, тобто має вигляд $K(\vec{C}(x), x)\vec{C}(x)$, то для побудови допоміжного варіаційного подання можна зафіксувати матрицю реакційних взаємодій на опорному профілі: $K(\vec{C}^{ref}(x), x)$. У такому разі $\vec{C}^{ref}(x)$ задає стан, поблизу якого

аналізується поведінка системи, а шуканою величиною залишається $\vec{C}(x)$.

Теорема 2.1. Якщо $\vec{C}^{ref}(x)$ – допустимі варіації $I(\vec{C}(x))$ по $C_i(x)$ задовольняють відповідні допоміжні умови $\vec{C}^{ref}(x) \equiv C_i(x)$, то функції $C_i(x)$, $i = \overline{1,m}$, задовольняють систему рівнянь (2.2) і крайові умові (2.3), (2.4). Тоді стаціонарна точка функціонала задає слабку форму редукованої самоспряженої задачі та її природні крайові умови (2.3), (2.4). Для повної системи (2.2) з конвективним членом твердження про глобальну мінімізацію не використовується.

Зауважмо, що крайова умова (2.4) (і (2.3) при $\vec{C}_0 = 0$) є природною для функціоналу (2.5), тобто її можна не задовольняти при побудові наближеного розв'язку.

Метод Рітца ґрунтується на мінімізації варіаційного функціонала і природно застосовується до самоспряжених задач. Метод Гальоркіна виходить безпосередньо зі слабкої форми диференціального рівняння та може застосовуватись також до несиметричних і несамоспряжених операторів, зокрема до конвективно-дифузійних моделей. У самоспряженому випадку обидва підходи приводять до еквівалентних дискретних систем. Конвективний член $-\frac{d}{dx}(u(x)\vec{C}(x))$ описує перенесення речовини матеріальним потоком середовища. На відміну від чисто дифузійного перенесення, який вирівнює концентрацію за рахунок градієнтів, конвекція задає спрямоване перенесення домішок уздовж потоку.

Наявність цього члена робить оператор задачі загалом несиметричним і несамоспряженим, унаслідок чого глобальна варіаційна постановка у вигляді задачі мінімізації функціонала може бути відсутньою або втрачати фізичний зміст енергетичної мінімізації. Саме тому для повної конвективно-дифузійно-реакційної моделі використовується слабка форма Гальоркіна.

У низці практичних випадків конвективне перенесення може бути значно меншим за дифузійне або локально відсутнім. Тоді приймається редукція $u(x) = 0$, унаслідок чого задача переходить до дифузійно-реакційної постановки, для якої можна застосовувати варіаційний підхід і функціонал Рітца.

Занулення конвективного члена може бути обґрунтоване у таких випадках:

а) слабкий або відсутній макроскопічний потік середовища;

б) локально-стаціонарний режим поблизу джерел;

в) домінування дифузійного перенесення над адвективним;

г) мале число Пекле $Pe_i = \frac{UL_C}{D_i} \ll 1,\ i = 1, ..., m$, що відповідає дифузійно-домінованому режиму, коли вплив конвекції є незначним порівняно з дифузійним вирівнюванням концентрації (тут U – характерна швидкість конвективного перенесення, L – характерний розмір області або локальної ділянки, D_i – коефіцієнт дифузії i-ї компоненти, коли вплив конвекції є незначним порівняно з дифузією);

д) побудова локально-потенціальної або симетризованої редукції моделі для застосування варіаційних методів.

Якщо ж Pe_i не є малим або конвективне перенесення суттєво впливає на розподіл концентрацій, повну конвективно-дифузійно-реакційну модель слід розглядати через слабку форму Гальоркіна без твердження про глобальну мінімізацію одного функціонала Рітца.

Доведення базується на стандартному варіаційному підході, який можна знайти в літературі (наприклад, у монографії Шехтера [38]). Ключовою ідеєю є побудова функціоналу $I(\vec{C})$, стаціонарне (екстремальне) значення якого відповідає розв'язку крайової задачі. Цей підхід ґрунтується на концепції локального термодинамічного потенціалу [39], який гарантує, що варіація дасть правильні реактивні (кінетичні) члени моделі. Опишемо доведення поетапно, вказуючи джерела, на які спиралися на кожному етапі, та де в літературі можна знайти подібні виведення.

Подальший варіаційний розгляд слід читати як обґрунтування для редукованої самоспряженої або локально-потенціальної частини задачі. Стаціонарність функціонала відповідає слабкій постановці редукованої самоспряженої крайової задачі; для повного конвективно-дифузійного оператора використовується слабка форма Гальоркіна без твердження про глобальний мінімум.

У подальшому конвективний член може зберігатися у формальному записі оператора, однак варіаційно-мінімізаційна інтерпретація використовується лише після редукції до випадку $u(x) = 0$ або в локально-потенціальному наближенні.

Крок 1: Вибір варіації. Розглянемо довільну допустиму варіацію векторного поля концентрації $\vec{C}(x)$:

$$\vec{C}_\varepsilon(x) = \vec{C}(x) + \varepsilon\vec{\eta}(x), \quad \vec{\eta}(x) \in [H^1(0, L)]^m, \quad \varepsilon \in \mathbb{R}, \ |\varepsilon| \ll 1,$$

де ε є невеликим параметром і $\vec{\eta}(x)$ є довільною тестовою (варіаційною) функцією. Стаціонарність функціоналу I за цієї варіації означає, що перша варіація дорівнює нулю:

$$\frac{d}{d\varepsilon} I(\vec{C}_\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=0} = 0.$$

Ця умова є характерною ознакою екстремуму в варіаційному численні і приводить до рівнянь Ейлера-Лагранжа. Використання таких варіаційних методів для отримання основних рівнянь є класичним і детально описано в стандартних довідниках (наприклад, див. [38]).

Крок 2: Варіація дифузійного члена. Розглянемо дифузійну частину функціонала, яка відповідає просторовій зміні концентрацій і містить матрицю коефіцієнтів поздовжньої дифузії $D_L(x)$. Цей внесок характеризує енергетичний ефект, пов'язаний із градієнтом концентрацій: чим швидше змінюється концентрація вздовж координати x, тим більшим є відповідний дифузійний внесок, а надрядковий індекс T позначає транспоновану матрицю. Перша варіація цієї дифузійної частини є

$$\delta I_D = \int_0^L \frac{d\vec{C}^T}{dx} D_L(x) \frac{d\vec{\eta}}{dx} dx.$$

Інтегруючи цей вираз частинами і припускаючи, що крайові члени будуть оброблятися окремо, отримуємо:

$$\delta I_D = \left[D_L(x) \frac{d\vec{C}^T}{dx} \vec{\eta}(x) \right]_0^L - \int_0^L \frac{d}{dx} \left(D_L(x) \frac{d\vec{C}}{dx} \right)^T \vec{\eta}(x) dx \,.$$

На цьому кроці використовується стандартна формула інтегрування частинами, і отриманий об'ємний член тепер містить $\frac{d}{dx}\left(D_L \frac{d\vec{C}}{dx} \right)$, що дасть дифузійний член в рівнянні Ейлера-Лагранжа (аналогічні виведення можна знайти в багатьох текстах з варіаційного числення та методів скінченних елементів – див. [38]).

Крок 3: Обчислення конвективного члена у повній моделі. У редукованому функціоналі конвективний член не використовується як частина мінімізованого функціонала I. Для повної конвективно-дифузійної постановки його внесок записується безпосередньо у слабкій формі Гальоркіна, тобто після множення рівняння на тестову функцію та інтегрування за областю. Конвективний внесок

$$I_u = \int_0^L \left(u(x) \vec{C}^T(x) \frac{d\vec{C}(x)}{dx} + \frac{1}{2} \vec{C}^T(x) \vec{C}(x) \frac{du(x)}{dx} \right) dx$$

використовується лише як формальне операторне подання конвективної частини. Він не трактується як частина глобального мінімізованого функціонала Рітца для повної задачі, оскільки конвективний оператор загалом є несамоспряженим. У повній конвективно-дифузійній моделі цей внесок враховується через слабку форму Гальоркіна, а при редукції $u(x) = 0$ член I_u зникає, і модель переходить до самоспряженої дифузійно-реакційної постановки.

Тут $u(x)$ є ефективною поздовжньою швидкістю перенесення, $u_x = \frac{du(x)}{dx}$, а тестова функція належить відповідному скінченно-елементному простору. Такий запис не потребує побудови окремого мінімізованого функціо-

нала для несамоспряженого конвективного оператора. (Далі підставляємо замість $\vec{C}$ варіацію $\vec{C}+\varepsilon\vec{\eta}$ у відповідний конвективний член, беремо похідну за параметром ε і покладаємо $\varepsilon=0$. У результаті одержуємо вираз для першої варіації конвективного внеску:

$$\delta I_u = \int_0^L \left[u(x) \left(\vec{\eta}^T(x) \frac{d\vec{C}(x)}{dx} + \vec{C}^T(x) \frac{d\vec{\eta}}{dx} \right) + u_x(x) \vec{C}^T(x) \vec{\eta}(x) \right] dx .$$

Після інтегрування частинами конвективний оператор переходить до слабкої форми Гальоркіна:

$$a_u(\vec{C},\vec{\eta}) = -\left[u(x) \vec{C}^T(x) \vec{\eta}(x) \right]_0^L + \int_0^L (u(x)\vec{C}(x))^T \frac{d\vec{\eta}(x)}{dx} dx .$$

Таким чином, у повній моделі конвективний внесок враховується через слабку форму Гальоркіна, а не через мінімізацію функціонала Рітца. При редукції $u(x)=0$ маємо $I_u=0$ та $\delta I_u=0$ і модель переходить до самоспряженої дифузійно-реакційної постановки. Тоді маємо $a_u(\vec{C},\vec{\eta})=0$ і модель переходить до самоспряженої дифузійно-реакційної постановки, для якої може використовуватись варіаційний функціонал Рітца.

У слабкій формі за потреби застосовується інтегрування $\frac{d\vec{\eta}}{dx}$ частинами до дифузійного або потокового внеску, щоб узгодити обрані крайові умови та скінченно-елементний простір:

$$\int_0^L u(x)\vec{C}^T(x)\frac{d\vec{\eta}(x)}{dx}dx = u(x)\vec{C}^T(x)\vec{\eta}(x)\Big|_0^L - \int_0^L \frac{d}{dx}(u(x)\vec{C}(x))^T \vec{\eta}(x)dx .$$

Після цього внесок повної моделі записується у компактній слабкій формі, яка використовується для дискретизації методом Гальоркіна:

$$\delta I_u = \left[u(x)\vec{C}^T(x)\vec{\eta}(x)\right]_0^L - \int_0^L \left(\frac{d}{dx}\left[u(x)\,\vec{C}(x)\right]\right)^T \vec{\eta}(x)dx.$$

Отже, конвективний внесок $-\frac{d}{dx}(u(x)\vec{C}(x))$ у повній моделі трактується як член слабкої форми, а не як наслідок мінімізації редукованого функціонала. Це узгоджує формальне виведення з подальшою дискретизацією методом Гальоркіна/МСЕ та з розділенням повної і редукованої моделей (як це видно у варіаційних виведеннях рівнянь перенесення [38]).

Крок 4: Варіація реактивних і джерельних членів. Реакційна (кінетична) частина функціоналу в I побудована як інтеграл, що включає матрицю кінетичного потенціалу $K_{ij}(\vec{C}_0(x),x)\vec{C}(x)$ (див. рівняння (2.12) в контексті SO_3 в моделі). У локальній теорії потенціалу Гландсдорфа-Прігожина [39] функціонал розроблений таким чином, що зміна цієї частини дає бажаний оператор реакції системи. Позначаючи $\vec{R}(\vec{C}(x)) = K(\vec{C}(x),x)\,\vec{C}(x)$ вектор членів реакції зміна кінетичної частини дає:

$$\delta I_{\text{kin}} = -\int_0^L \vec{R}(\vec{C}(x))^T \vec{\eta}(x)dx\text{, або } \delta I_{\text{kin}} = -\int_0^L (K(\vec{C}(x),x)\vec{C}(x))^T \vec{\eta}(x)dx,$$

що дійсно дає очікувані члени реакції в рівняннях Ейлера-Лагранжа. Аналогічно, джерельні (або стокові) члени в моделі вносять свій внесок у частину

$$I_f = -\int_0^L \vec{f}^T(x)\vec{C}(x)dx\,.$$

Оскільки $\vec{f}(x)$ є заданим вектором і не залежить від $\vec{C}(x)$, її варіація джерельного члена є лінійною за тестовою функцією $\vec{\eta}(x)$:

$$\delta I_f = -\int_0^L \vec{f}^T(x)\,\vec{\eta}(x)dx\,.$$

Отже, реакційний і джерельний внески у першій варіації функціонала мають вигляд

$$\delta I_{\text{kin}} + \delta I_f = -\int_0^L [\vec{R}(\vec{C}(x), x) + \vec{f}(x)]^T\,\vec{\eta}(x)dx\,,$$

або

$$\delta I_{\text{kin}} + \delta I_f = -\int_0^L [K(\vec{C}(x), x)\vec{C}(x) + \vec{f}(x)]^T\,\vec{\eta}(x)dx\,.$$

Тут $\vec{f}(x)$ є заданим вектором джерельного члена (він не залежить від $\vec{C}(x)$, тому входить у варіацію лінійно). Обидві ці варіації показують, що реакція та джерельний внесок присутній у δI та джерельний член $f(x)$ – у рівнянні, як передбачено конструкцією функціоналу [39].

Крок 5: Зміна крайового члена при $x = 0$. Останній член у функціоналі I (див. формулу (2.15)) був введений спеціально для отримання крайової умови типу Робіна на лівій межі $x = 0$. Нехай ліва крайова умова в моделі буде типу Робіна (як у (2.13) у постановки задачі). Позначимо $\vec{C}_0$ як заданий вектор концентрації на вході при $x = 0$, функціонал містить крайовий член вигляду

$$I_0 = \frac{1}{2}u(0)\left\|\vec{C}(0) - \vec{C}_0\right\|^2,$$

або еквівалентна формула, яка при варіації дає умову Робіна. Варіація цього крайового члена є такою:

$$\delta I_0 = u(0)(\vec{C}(0) - \vec{C}_0)^T\,\vec{\eta}(0).$$

Цей результат отримується шляхом диференціювання крайового члена за малим параметром ε (відзначаючи, що $\vec{\eta}(x)$ є відхиленням від $\vec{C}$ на межі). Ми бачимо, що δI_0 утворює член, пропорційний $\vec{\eta}(0)$, що створить крайову умову Робіна в точці $x=0$, коли $\delta I=0$. Фактично, крайовий член у функціоналі був обраний таким чином, щоб природна крайова умова при $x=0$ була точно бажаною умовою Робіна типу (2.13). Ця техніка включення крайових умов у функціонал добре відома у варіаційному численні [38]: шляхом включення відповідних крайовий членів одна або обидві крайові умови стають «природними» (тобто вони випливають із варіаційного принципу і не потребують застосування як обмеження) [38]. Зокрема, умова при $x=0$ тут отримується природним чином з δI_0 (а не нав'язується ззовні), що є підходом, який також обговорюється в [34, 35].

Крок 6: Збираємо варіації та отримуємо рівняння Ейлера-Лагранжа. Тепер підсумовуємо всі внески до першої варіації δI з кроків 2 – 5. Додавши попередні рівняння, ми окремо збираємо члени об'єму (внутрішні) і члени межі $\partial\Omega=\{0, L\}$. Загальна перша варіація може бути записана як:

$$\delta I_{red}=-\int_0^L\left[\frac{d}{dx}\left(D_L\frac{d\vec{C}}{dx}\right)+\vec{R}(x)(\vec{C}(x))+\vec{f}(x)\right]^T\vec{\eta}(x)dx+\delta I_{\partial\Omega}.$$

Для повної моделі окремо слід додати конвективний внесок Гальоркіна:

$$a_u(\vec{C},\vec{\eta})=\int_0^L\left[\frac{d}{dx}(u(x)\vec{C}(x))\right]^T\vec{\eta}(x)dx.$$

Тоді повна слабка форма набуде вигляду:

$$\delta I_{red}+a_u(\vec{C},\vec{\eta})=0.$$

І вже з цього випливає повне рівняння. Диференціальні рівняння для вну-

трішньої частини області $(0,L)$ має вигляд:

$$\frac{d}{dx}\left(D_L(x)\frac{d\vec{C}}{dx}\right)-\frac{d}{dx}(u(x)\vec{C}(x))+\vec{R}(\vec{C}(x),x)+\vec{f}(x)=0,$$

що є системою модельних рівнянь у сильній формі. Для редукованої самоспряженої частини стаціонарність функціонала $I(\vec{C})$ відновлює відповідні внутрішні рівняння моделі, тоді як конвективний член у повній постановці враховується через слабку форму Гальоркіна.

У подальшому використовується розділення між варіаційною та слабкою операторною постановками задачі. Варіаційний принцип Рітца застосовується лише до редукованої самоспряженої дифузійно-реакційної частини моделі, для якої існує коректний енергетичний функціонал. Повна конвективно-дифузійно-реакційна система, що містить несамоспряжений конвективний оператор, розглядається у слабкій формі Гальоркіна без припущення про існування глобального мінімізованого функціонала. Такий підхід забезпечує узгоджене поєднання варіаційної інтерпретації дифузійно-реакційної підсистеми з подальшою дискретизацією методом Гальоркіна/МСЕ повної моделі перенесення.

В крайових умовах $\delta I_{\partial\Omega}$ також повинен зникнути для $\delta I=0$. З виразу (2.12) або (2.14) отримуємо природні крайові умови. При $x=0$ член, що містить $\vec{\eta}(0)$ дає умову типу Робіна

$$u(0)(\vec{C}(0)-\vec{C}_0)+\left[D_L\frac{d\vec{C}}{dx}\right]_{x=0}=0,$$

або

$$\left[D_L\frac{d\vec{C}}{dx}\right]_{x=0}=-u(0)(\vec{C}(0)-\vec{C}_0).$$

що точно відповідає формі (2.13) у задачі (умова Робіна, що поєднує конвективний потік і дифузійний потік, дорівнює нульовому чистому потоку відхилення від концентрації на вході). У правому кінці $x = L$ ми не маємо явно доданого крайового члена. У повній моделі конвективний перенос зберігається і враховується через слабку форму Гальоркіна. Якщо описується відкритий вихід без додатково накладеного повного потоку, можна записати умову нульового сумарного потоку.

$$\left[D_L(x) \frac{d\vec{C}(x)}{dx} + u(x)\vec{C}(x) \right]_{x=L} = 0.$$

Ще один варіант. Редукована самоспряжена постановка. При переході до редукованої моделі конвективний член не враховується, тобто $u(x) = 0$. У цьому випадку природна крайова умова на правій межі задає відсутність дифузійного потоку:

$$\left[D_L(x) \frac{d\vec{C}(x)}{dx} \right]_{x=L} = 0.$$

У нашому виведенні ми дійсно отримуємо цю умову як природну крайову умову, яку ми конкретно інтерпретуємо як відсутність будь-якого накладеного потоку при $x = L$ (це відповідає типовому фізичному припущенню і обговорюється, наприклад, в [34, 37, 101]). Теорему доведено.

2.2 Повна слабка постановка та редукована варіаційна модель (розмежування повної слабкої постановки Гальоркіна та редукованої варіаційної моделі Рітца)

Результат наведеної вище теореми встановлює варіаційне обґрунтування для редукованої самоспряженої дифузійно-реакційної частини задачі. У цьому випадку розв’язання відповідної крайової задачі еквівалентне знаходженню

стаціонарної точки функціонала $I(\bar{C})$, а за додаткових умов додатності та опуклості – його мінімуму. Саме така постановка створює математичну основу для застосування методу скінченних елементів (FEM) до редукованої задачі на відрізку $[0, L]$ [4, 34, 103].

Водночас повну систему (2.11) – (2.15) не слід трактувати як задачу глобальної мінімізації одного функціонала Рітца. Повна модель містить конвективний член, тому загалом є несамоспряженою. У цьому випадку коректною базовою формою є слабка форма Гальоркіна, яка широко використовується у FEM-дискретизації задач перенесення, гідродинаміки та реакційно-дифузійних процесів [34, 35, 37, 38]. У літературі з FEM та варіаційних методів такий підхід розглядається як стандартний при переході від диференціальної постановки до скінченно-елементної дискретизації [31, 77, 78].

Отже, у подальшому використовується таке розділення. Повна конвективно-дифузійно-реакційна система (2.11) – (2.15) розглядається як фізична модель перенесення забруднювачів у повітрі та, за потреби, дискретизується через слабку форму Гальоркіна. Натомість мінімізаційний функціонал (2.16) застосовується до редукованої самоспряженої дифузійно-реакційної постановки, у якій конвективний член не входить до функціонала Рітца. Така редукція відповідає переходу до випадку $u(x) = 0$ або до локально-потенціальної частини моделі.

Таким чином, результат теореми не доводить глобальну мінімізаційну еквівалентність для всієї повної конвективно-дифузійної системи, а обґрунтовує FEM/Ritz-дискретизацію редукованої самоспряженої постановки. Повна модель при цьому зберігається як вихідна фізична постановка, а її конвективний внесок може враховуватися окремо через слабку форму Гальоркіна.

Надалі мінімізується функціонал редукованої дифузійно-реакційної постановки, а не повна конвективна модель у сильній формі. Тому FEM-апроксимація нижче використовується для побудови алгебраїчної системи редукованої задачі, узгодженої з подальшим функціоналом (2.16).

Задачу мінімізації функціоналу (2.16) будемо розв’язувати методом скін-

ченних елементів [34 – 39]. Інтервал $[0, L]$ розіб'ємо на N_e частин послідовністю точок $0 = x_1 < x_2 < x_3 < ... < x_{N_e} = L$. Наближений розв'язок i-ї компоненти шукаємо у вигляді

$$C_i^h(x) = \sum_{n=0}^{N_e} C_{i,n} h_n(x), \quad i = \overline{1,m},\ n = \overline{1,N+1}, \tag{2.6}$$

де $C_{i,n}$ – величина концентрації i-ї компоненти забруднення у вузлі x_n в n-й точці розділення;

функції $h_n(x)$ – відповідна кусково-лінійна P_1-базисна функція.

Функції $h_n(x)$ мають локальний носій і задаються стандартними формулами [34, 35].

У редукованій FEM-постановці алгебраїчна система отримується зі стаціонарності відповідного функціонала за вузловими коефіцієнтами наближеного розв'язку. Умова частинних похідних функціонала за всіма невідомими вузловими коефіцієнтами представлена наступною формулою:

$$\frac{\delta I_{red}(\vec{C}^h(x))}{\delta C_{i,n}} = 0, \quad i = \overline{1,m},\ n = \overline{1,N+1}. \tag{2.8}$$

Для зв'язку редукованої FEM-схеми з початковою фізичною постановкою розглянемо двокомпонентну суміш забруднювачів у повітрі, зокрема SO_3 та CO_2, для якої повна задача (2.2) – (2.4) задає конвективно-дифузійно-реакційну модель з локалізованими джерелами. Надалі повна модель використовується як фізичне обґрунтування, тоді як наведена нижче FEM-схема застосовується до узгодженої редукованої дифузійно-реакційної постановки.

Тут $\vec{C}^h(x)$ – вектор FEM-наближень усіх компонент. Формула (2.8) означає, що стаціонарність функціонала перевіряється не за окремою концентрацією як неперервною функцією, а за всіма вузловими коефіцієнтами $C_{i,n}$, які є

невідомими алгебраїчної FEM-системи.

На рис. 2.1 зображені результати застосування алгоритму. Порівняння експериментальних і розрахункових профілів CO_2 та SO_3 у задачі перенесення забруднювачів у повітрі. Цей рисунок використовується як якісна ілюстрація форми концентраційних профілів; числові результати контрольного редукованого FEM/Newton-сценарію наведено окремо в розділі 4 та додатках.

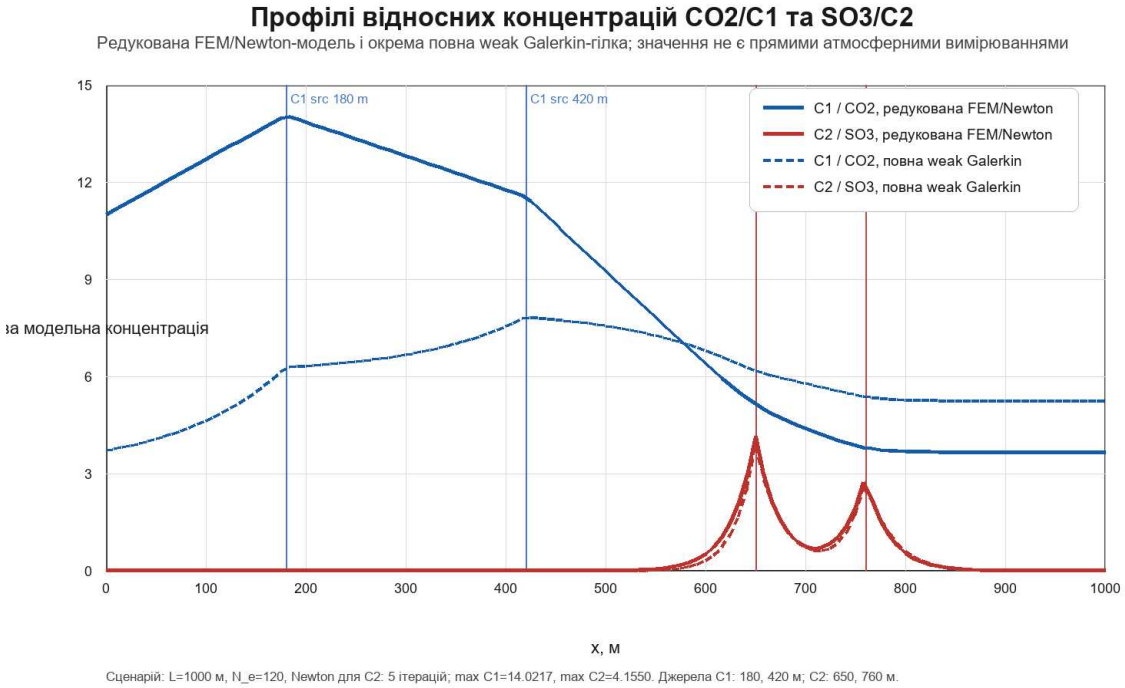

Рисунок 2.1 – Ілюстративне порівняння експериментальних і розрахункових профілів CO_2 та SO_3 у задачі перенесення забруднювачів у повітрі

Здійснюваний у повітрі процес є послідовністю хімічних реакцій, кінетика яких описується наступною матрицею [39, 40, 102, 103], причому для CO_2 передбачається лише його дифузія без хімічних реакцій, а для SO_3 враховуються реакції з водяною парою та киснем O_2.

Уточнення до формули (2.9): у подальшому матриця $K(\vec{C}(x),x)$ трактується як реакційно-кінетичний блок, що описує лише хімічні перетворення та взаємодію компонент. Дифузійні та конвективні оператори не включаються до $K(\vec{C}(x),x)$, а залишаються окремими членами рівняння перенесення та відпові-

дної дискретизацією методом Гальоркіна та методом скінченних елементів. Для двокомпонентної моделі покладемо

$$\vec{C} = (C_1(x), C_2(x))^T,$$

де $C_1(x)$ – концентрація забруднень вуглекислого газу CO_2;

$C_2(x)$ – концентрація триоксиду сірки SO_3.

Реакційний оператор записуємо у вигляді

$$\vec{R}(\vec{C}(x)) = K(\vec{C}(x), x)\vec{C}(x).$$

Тоді реакційно-кінетичну матрицю можна подати у вигляді

$$K(\vec{C}(x), x) = \begin{pmatrix} 0 & \beta k_D \\ 0 & \dfrac{k_r}{K_m + C_2(x)} + k_D + k_{SO_3} C_{H_2O} + \lambda_{SO_3} C_{O_2} \end{pmatrix}. \qquad (2.9)$$

Звідси

$$\vec{R}(\vec{C}(x), x) = K(\vec{C}(x), x)\vec{C}(x) = \begin{pmatrix} \beta k_D C_2(x) \\ \dfrac{k_r C_2(x)}{K_m + C_2(x)} + k_D C_2(x) + k_{SO_3} C_{H_2O} C_2(x) + \lambda_{SO_3} C_{O_2} C_2(x) \end{pmatrix}.$$

Отже, для другої компоненти використовується єдиний реакційний закон

$$g(C_2) = \frac{k_r C_2(x)}{K_m + C_2(x)} + k_D C_2(x) + k_{SO_3} C_{H_2O} C_2(x) + \lambda_{SO_3} C_{O_2} C_2(x),$$

де $C_1(x)$ – концентрація забруднень вуглекислого газу CO_2 у повітрі на відстані x від джерела;

$C_2(x)$ – концентрація забруднень триоксиду сірки SO_3 у повітрі на відстані x від джерела;

k_r – максимальна швидкість хімічної реакції SO_3 (наприклад, перетворення $SO_3 + H_2O \to H_2SO_4$), яка описується рівнянням Міхаеліса-Ментен [102, 103];

K_m – константа насичення (Міхаеліса) [102, 103] для SO_3, яка визначає концентрацію, за якої швидкість реакції досягає половини від k_r;

k_D – швидкість гідратації або осадження SO_3 у зовнішньому середовищі (у присутності пари);

D_{CO_2} – коефіцієнт дифузії для CO_2, що визначає швидкість просторового переносу забруднень у повітрі (наприклад, через турбулентність або молекулярну дифузію);

β – феноменологічний коефіцієнт, який використовується для врахування впливу концентрації SO_3 на динаміку CO_2 (наприклад, при спільному транспортуванні чи вторинних ефектах у моделі, якщо такий зв'язок не враховується, можна покласти $\beta = 0$);

λ_{SO_3} – коефіцієнт взаємодії SO_3 з киснем O_2, що є феноменологічним параметром, що може моделювати вторинні окисні процеси або стабілізацію частинок у повітрі;

C_{O_2} – концентрація кисню (атмосферна константа, стабільна ≈ 0.21);

C_{H_2O} – концентрація водяної пари (описує вологість повітря – умовно стала величина).

Дамо деякі уточнення до наведеного вище переліку параметрів.

Матриця $K(\vec{C}(x), x)$ або скалярний закон $g(C_2(x))$ описують реакційно-кінетичну частину, а не лапласіан чи інший дифузійний оператор.

Коефіцієнти дифузії D_{CO_2} та D_{SO_3} не входять до матриці $K(\vec{C}(x), x)$. Вони залишаються у дифузійному операторі $\frac{d}{dx}\left(D_i \frac{C_i(x)}{dx}\right)$, а конвективне перенесення описується окремим членом $\frac{d}{dx}(u(x)C_i(x))$.

Таким чином, матриця $K(\vec{C}(x),x)$ описує лише реакційно-кінетичну взаємодію компонент, тоді як дифузійне перенесення формується оператором $\frac{d}{dx}\left(D_i \frac{C_i(x)}{dx}\right)$, а конвективне перенесення – оператором $\frac{d}{dx}(u(x)C_i(x))$.

Площа перерізу джерел викидів значно менша, ніж масштаб повітряного середовища, де розпилюються викиди, тому їх можна розглядати як точкові джерела концентрації забруднень з інтенсивністю, яка визначається співвідношенням:

$$q_k = \frac{C_k \cdot A_k \cdot u}{A}, \text{ або } q_k = \frac{C_k \cdot Q_k}{A}, \; Q_k = A_k \cdot u, \tag{2.10}$$

де C_k – концентрація забруднюючих речовин від *k*-го джерела в потоці труби (наприклад SO_3 або CO_2) у вихідному газі (мг/м^3);

A_k – площа перерізу вихідного патрубка (м^2);

u – швидкість повітряного потоку поблизу джерела (м/с);

q_k – інтенсивність викиду k-го джерела;

A – площа всієї області моделювання повітряного простору ($м^2$).

Додавання A в рівняння дозволяє адекватно порівнювати внесок джерел у випадках, коли область значно більша за самі джерела.

Фізично це відповідає миттєвому локалізованому викиду з труби в обмежену зону атмосфери.

З урахуванням наведеного вище, математична модель розповсюдження забруднень у повітряному середовищі від трубоподібних джерел (викидів) у стаціонарному режимі можна подати у вигляді наступної крайової задачі: система диференціальних рівнянь

$$\frac{d}{dx}\left(D_{CO_2} \frac{dC_1(x)}{dx}\right) - u(x)\frac{dC_1(x)}{dx} + \beta k_D C_2(x) + \sum_{k=1}^{p_1} q_{1k}\delta(x - x_k) = 0, \tag{2.11}$$

$$\frac{d}{dx}\left(D_{SO_3} \frac{dC_2(x)}{dx} \right) - u(x)\frac{dC_2(x)}{dx} + g(C_2(x)) + \sum_{k=1}^{p_2} q_{2k}\delta(x - x_k) = 0, \qquad (2.12)$$

$$x \in (0, L),$$

де $g(C_2) = \frac{k_r C_2(x)}{K_m + C_2(x)} + k_D C_2(x) + \kappa_{SO_3} C_2(x) C_{H_2O} + \lambda_{SO_3} C_2(x) C_{O_2}$, з крайовими умовами Робіна [40, 34, 35]

$$D_i \frac{dC_i(x)}{dx}\bigg|_{x=0} = u(C_i(0) - C_{i0}), \quad i = 1,2, \qquad (2.13)$$

$$\frac{dC_i(x)}{dx}\bigg|_{x=L} = 0, \quad i = 1,2. \qquad (2.14)$$

Умови (2.13), (2.14) слід трактувати як крайові умови повної конвективно-дифузійно-реакційної моделі. При $x = 0$ задається вхідний/робінівський зв'язок із фоновою концентрацією, а при $x = L$, де L є правою межею розрахункової області, використовується природна або відкрита вихідна умова $\frac{dC_i}{dx} = 0$, $i = 1, 2$, тобто відсутній додатковий накладений потік через межу.

У початковій області повітряного простору перед трубчастими джерелами може існувати фоновий рівень забруднюючих речовин, зокрема CO_2, або нульовий рівень SO_3. При надходженні потоку повітря в зону викидів відбувається інтенсивне локальне зростання концентрацій забруднювачів у результаті впливу точкових джерел (труб). Цей процес можна розглянути як миттєву зміну профілю концентрацій, яка виникає на вхідній межі області моделювання та має переважний ефект у початковий момент.

Фізично це відповідає крайовому переходу від фонової (атмосферної) концентрації до зони локального забруднення, що забезпечується конвективним надходженням повітря з певним початковим складом.

У цьому контексті крайову умову при $x = 0,$ можна записати у вигляді:

$$D_i \frac{dC_i(x)}{dx} = u(C(0)_i - (1-k_C)C_{i0}),\ i = 1, 2, \qquad (2.15)$$

де C_{i0} – фонові концентрації SO_3 та CO_2 у повітрі (до викидів);

$k_C \in [0,1]$ – коефіцієнт, що описує частку фонової концентрації, яка зберігається в момент входу (наприклад, через турбулентне розсіювання або фонову вентиляцію);

u – швидкість повітряного потоку;

D_i – коефіцієнти дифузії відповідно для SO_3 та CO_2.

Така інтерпретація дозволяє врахувати вплив фонових умов на розподіл забруднювачів у повній фізичній постановці. Для редукованої МСЕ/Ньютона-схеми ці умови використовуються лише після явного переходу до дифузійно-реакційної постановки та відповідної слабкої форми.

2.3 Варіаційна постановка задачі на основі локального потенціалу

Важливо розрізняти дві постановки. Повна модель (2.11) – (2.15) описує конвективно-дифузійно-реакційне перенесення з локалізованими джерелами та крайовими умовами. Варіаційний функціонал і подальший МСЕ/Ньютон-алгоритм у підрозділах 2.3 – 2.5 застосовуються до редукованої стаціонарної одновимірної дифузійно-реакційної моделі, у якій конвективний член вважається винесеним на рівень крайових умов або нехтується на цьому етапі чисельного аналізу. Для повної конвективно-дифузійної системи коректною базовою формою є слабка форма Гальоркіна, а мінімізаційна постановка нижче використовується саме для самоспряженої редукованої задачі.

Задача розповсюдження забруднювачів у повітрі від трубчастих точкових джерел описується системою диференціальних рівнянь з реакційними та джерельними дельта-членами. У повному конвективно-дифузійно-реакційному вигляді вона загалом є нелінійною та несамоспряженою, тому нижче концепція локального потенціалу використовується лише для самоспряженої редукованої

або реакційно-потенціальної частини постановки, а не як глобальний мінімізаційний принцип для всієї повної моделі.

Формулюємо відповідний варіаційний функціонал [39]:

$$J_2(C_2(x)) = \int_0^L \left[\frac{1}{2} D_{SO_3} \left(\frac{dC_2(x)}{dx} \right)^2 - \Phi(C_2(x)) \right] dx - \sum_{k=1}^{p_2} q_{2k} C_2(x_{2k}), \qquad (2.16)$$

де потенціал реакційної частини

$$\Phi(C_2(x)) = \int_0^{C_2(x)} g(s) ds .$$

Саме знак «мінус» перед $\Phi(C_2(x))$ та джерельним внеском забезпечує появу в рівнянні Ейлера-Лагранжа членів $+g(C_2(x))$ та $+q_{2k}\delta(x - x_{2k})$ у прийнятій сильній формі. Після знаходження C_2 перша компонента C_1 визначається з лінійного рівняння

$$\frac{d}{dx}\left(D_{CO_2} \frac{dC_1(x)}{dx} \right) + \beta k_D C_2(x) + \sum_{k=1}^{p_1} q_{1k} \delta(x - x_{1k}) = 0,$$

у редукованому випадку $u(x) = 0$, або з відповідної слабкої форми Гальоркіна для повної конвективної постановки.

Також можемо ввести функціонал для C_1, але після фіксації C_2:

$$J_1(C_1 \mid C_2) = \int_0^L \left[\frac{1}{2} D_{CO_2} \left(\frac{dC_1(x)}{dx} \right)^2 - \beta k_D C_2(x) C_1(x) \right] dx - \sum_{k=1}^{p_1} q_{1k} C_1(x_{1k}) .$$

Тоді його варіація за C_1 дає рівняння для першої компоненти. Це умовний функціонал, бо C_2 у ньому вже вважається відомою функцією.

Отже, у подальшому для чисельної реалізації використовується двоступенева

редукована МСЕ-схема. Її доцільність зумовлена тим, що нелінійний реакційний закон входить насамперед до рівняння для другої компоненти C_2, тоді як рівняння для першої компоненти C_1 після знаходження C_2 набуває лінійного вигляду.

На першому етапі формується функціонал $J_2(C_2(x))$ редукованої дифузійно-реакційної задачі для другої компоненти.

Стаціонарність цього функціонала після P_1-МСЕ-апроксимації приводить до нелінійної системи алгебраїчних рівнянь відносно вузлових значень $C_{2,m}$. Ця система розв'язується модифікованим методом Ньютона/МСЕ.

Після знаходження вузлового профілю C_2 друга компонента вважається відомою функцією у рівнянні для першої компоненти. На другому етапі будується умовний функціонал $J_1(C_1 \mid C_2)$ або відповідна слабка МСЕ-форма для C_1 при фіксованому C_2. У цьому випадку невідомими залишаються лише вузлові значення $C_{1,m}$, а члени, що містять C_2, переходять у праву частину або у відомий зв'язувальний внесок. Тому задача для C_1 зводиться до лінійної МСЕ-системи.

Відрізок $[0, L]$ поділяється на M скінчених елементів: $\pi = \{x_0 = 0 < x_1 < \ldots < x_M = L\}$. Концентрації функцій апроксимуються у просторі кусково-лінійних P_1-базисних функцій:

$$C_1^{\,h}(x) \approx \sum_{m=0}^{M} C_{1,m} h_m(x), \quad C_2^{\,h}(x) \approx \sum_{m=0}^{M} C_{2,m} h_m(x),$$

де $C_{i,m}$ – значення концентрації i-ї компоненти у вузлах x_m;

$h_m(x)$ – кусково-лінійні базисні функції (МСЕ), визначені як:

$$h_m(x) = \begin{cases} \dfrac{x - x_{m-1}}{x_m - x_{m-1}}, & x \in [x_{m-1}, x_m]; \\ \dfrac{x_{m+1} - x}{x_{m+1} - x_m}, & x \in [x_m, x_{m+1}]; \\ 0, & x \notin [x_{m-1}, x_{m+1}]. \end{cases}$$

Для крайових вузлів x_0 та x_M відповідні базисні функції задаються односторонньо на першому та останньому елементах.

Властивість 2.1. Локальна підтримка P_1-базису для внутрішнього вузла x_m, $m = 1, \ldots, M-1$, базисна функція $h_m(x)$ відмінна від нуля лише на двох сусідніх елементах $[x_{m-1}, x_m] \cup [x_m, x_{m+1}]$. Тому кожне вузлове рівняння МСЕ-системи містить внески лише від сусідніх вузлів. Саме це пояснює тридіагональну структуру матриць у 1D P_1-МСЕ.

У подальшій редукованій МСЕ / схемі Ньютона спочатку використовується апроксимація $C_2{}^h(x)$ для побудови нелінійної алгебраїчної системи, що відповідає функціоналу $J_2(C_2(x))$. Після знаходження вузлових значень $C_{2,m}$ апроксимація $C_2{}^h(x)$ використовується для розв'язання лінійної МСЕ-системи для першої компоненти C_1, де профіль C_2 уже вважається відомим.

2.4 Двоступенева редукована FEM-схема та модифікований метод Ньютона

Подальша мінімізація стосується функціонала редукованої дифузійно-реакційної задачі, а не повної конвективно-дифузійної моделі. Формули (2.13) – (2.15) слід розглядати як крайові та вхідні умови, що задають крайові внески й фізичну інтерпретацію потоку.

Наведемо двоступеневу редуковану МСЕ-схему. На першому етапі формується нелінійна система для другої компоненти C_2, оскільки саме вона містить нелінійний реакційний закон $g(C_2(x))$. Після знаходження C_2 перша компонента C_1 визначається з лінійної МСЕ-системи, у якій профіль C_2 уже вважається відомим.

Позначимо вектор вузлових значень другої компоненти через

$$\vec{C}_2 = (C_{2,0}, C_{2,1}, \ldots, C_{2,M})^T.$$

Для нього після P_1-FEM-апроксимації отримуємо нелінійну систему $F_2(\vec{C}_2)=0$, яка розв'язується модифікованим методом Ньютона. Після цього для першої компоненти вводиться вектор $\vec{C}_1=(C_{1,0},C_{1,1},\ldots,C_{1,M})^T$ і будується лінійна FEM-система $K_1\vec{C}_1=f_1(\vec{C}_2)$.

Тут права частина містить точкові джерела першої компоненти та відомий зв'язувальний внесок, що залежить від уже знайденого профілю C_2.

2.4.1 Нелінійна стадія для другої компоненти C_2

Мінімізація (або, точніше, пошук стаціонарної точки функціонала) на першому етапі стосується функціонала $J_2(C_2(x))$ редукованої дифузійно-реакційної задачі. Для другої компоненти використовується реакційний закон $g(C_2(x))$.

Після підстановки P_1-МСЕ-апроксимації та варіювання за вузловими коефіцієнтами $C_{2,m}$ одержуємо слабке рівняння: для кожної базисної функції $h_m(x)$, $m=0,\ldots,M$,

$$\int_0^L D_{SO_3}\frac{dC_2{}^h(x)}{dx}\frac{dh_m(x)}{dx}dx-\int_0^L g(C_2{}^h)h_m(x)\,dx-\sum_{k=1}^{p_2}q_{2k}h_m(x_{2k})=0.$$

Цей запис узгоджується з сильною формою редукованого рівняння

$$\frac{d}{dx}\left(D_{SO_3}\frac{dC_2(x)}{dx}\right)+g(C_2(x))+\sum_{k=1}^{p_2}q_{2k}\delta(x-x_{2k})=0,$$

оскільки після множення на тестову функцію та інтегрування дифузійного члена частинами отримується дифузійна форма з інтегралом

$$\int_0^L D_{SO_3}\frac{dC_2(x)}{dx}\frac{dh_m(x)}{dx}dx.$$

Джерельний член використовується у вигляді

$$\int_0^L h_m(x)\sum_{k=1}^{p_2} q_{2k}\delta(x-x_{2k})\,dx = \sum_{k=1}^{p_2} q_{2k}h_m(x_{2k}).$$

Тому в дискретній формі нелінійна нев'язка для другої компоненти може бути записана як

$$F_{2,m}(C_2(x)) = \int_0^L D_{SO_3}\frac{dC_2^h(x)}{dx}\frac{dh_m(x)}{dx}dx - \int_0^L g(C_2^h(x))h_m(x)dx - \sum_{k=1}^{p_2} q_{2k}h_m(x_{2k}),$$

де $m = 0,\ldots,M$. Нелінійна система має вигляд $F_{2,m}(C_2) = 0$, $m = 0,\ldots,M$.

У модифікованому методі Ньютона використовується похідна реакційного закону

$$g'(C_2(x)) = \frac{k_r K_m}{(K_m + C_2(x))^2} + k_D + k_{SO_3}C_{H_2O} + \lambda_{SO_3}C_{O_2}.$$

Відповідні елементи матриці Якобі мають вигляд

$$J_{2,m\ell}(C_2) = \int_0^L D_{SO_3}\frac{dh_\ell(x)}{dx}\frac{dh_m(x)}{dx}dx - \int_0^L g'(C_2^h(x))h_\ell(x)h_m(x)dx.$$

Після цього ітераційний процес Ньютона можна записати у стандартному вигляді

$$\vec{C}_2^{s+1} = \vec{C}_2^s - J_2^{-1}(\vec{C}_2^s)F_2(\vec{C}_2^s),$$

або

$$J_2(\vec{C}_2^s)\Delta\vec{C}_2^s = -F_2(\vec{C}_2^s), \quad \vec{C}_2^{s+1} = \vec{C}_2^s + \Delta\vec{C}_2^s.$$

Це є лінійною системою на кожній ітерації методу Ньютона. Її будемо

розв'язувати методом Гаусса або його модифікаціями. Основний окремий "лінійний етап" алгоритму – система $K_1\vec{C}_1 = \vec{f}_1$ – розглянута в наступному підрозділі.

Для підвищення стійкості до діагоналі матриці Якобі може додаватися малий регуляризуючий член $J_2(\vec{C}_2^{\,s}) + \delta_{reg} I$, $\delta_{reg} \sim 10^{-8}$.

Застосування методу Ньютона гарантує локальну квадратичну збіжність при гарному початковому наближенні, але може вимагати зменшення кроку або демпфування для глобальної збіжності. Регуляризація $\delta_{reg} I$ підвищує стійкість ітерацій, зменшуючи ймовірність виродження системи. Реалізація в MATLAB є відносно простою: оскільки кожна точка простору (вузол) містить невелику кількість невідомих (наприклад, дві концентрації SO_3 та CO_2), можна розв'язувати аналогічні системи незалежно для кожної комірки. Це означає, що матриця Якобі системи реакцій є блочно-діагональною (незалежні 2×2-блоки) і її легко обробляти векторизовано. MATLAB дозволяє ефективно організувати цикли по вузлах чи паралельне розв'язування, а також використовувати побудовані лінійні розв'язувачі. Завдяки цьому алгоритм стабільний і виконується швидко навіть для великої кількості вузлів. У списку літератури наводяться ключові джерела з методів Ньютона, варіаційних методів та скінченних елементів, зокрема [35, 38, 101, 102]. Зокрема, цікавими для порівняння є роботи Шехтера (варіаційні методи) та стандартні підручники з скінченних елементів (Quarteroni et al., Zienkiewicz, Reddy, Johnson).

2.4.2 Лінійна стадія для першої компоненти C_1

Після знаходження профілю $C_2^h(x)$ перша компонента C_1, яка відповідає концентрації CO_2, визначається з лінійної МСЕ-системи. У редукованій постановці її рівняння має вигляд

$$\frac{d}{dx}\left(D_{CO_2} \frac{dC_1(x)}{dx} \right) + \beta k_D C_2(x) + \sum_{k=1}^{p_1} q_{1k}\,\delta(x - x_{1k}) = 0\,.$$

Після множення на базисну функцію $h_m(x)$ та інтегрування за областю отримуємо слабке рівняння

$$\int_0^L D_{CO_2} \frac{dC_1(x)}{dx} \frac{dh_m(x)}{dx} dx - \int_0^L \beta k_D C_2^h h_m(x) dx - \sum_{k=1}^{p_1} q_{1k} h_m(x_{1k}) = 0 .$$

Тут $C_2^h(x)$ вже є відомою функцією, знайденою на першому етапі. Тому рівняння для C_1 є лінійним відносно вузлових невідомих $C_{1,m}$.

Матриця дифузійної частини для першої компоненти задається елементами

$$K_{1,m\ell} = \int_0^L D_{CO_2} \frac{dh_\ell(x)}{dx} \frac{dh_m(x)}{dx} dx.$$

Права частина містить зв'язувальний внесок через знайдене C_2^h та точкові джерела першої компоненти:

$$f_{1,m} = \int_0^L \beta k_D C_2^h(x) h_m(x) dx + \sum_{k=1}^{p_1} q_{1k} h_m(x_{1k}).$$

Отже, лінійна МСЕ-система для першої компоненти має вигляд

$$K_1 \vec{C}_1 = \vec{f}_1,$$

де $\vec{C}_1 = (C_{1,0}, C_{1,1}, \ldots, C_{1,M})^T$, а на другому етапі розв'язується система (M+1) лінійних алгебраїчних рівнянь. Її можна розв'язувати методом Гаусса, оскільки після фіксації профілю C_2^h система для C_1 є лінійною. У практичній реалізації також можуть використовуватися еквівалентні чисельні процедури для розріджених або тридіагональних матриць, однак за змістом цей етап відповідає класичному розв'язанню лінійної МСЕ-системи методом Гаусса.

У такій формі нелінійна реакційна частина, пов'язана з SO_3, розв'язується на першому етапі, а профіль CO_2 обчислюється на другому етапі

з урахуванням уже знайденого профілю SO_3. Це узгоджується з редукованою самоспряженою постановкою та не вимагає введення одного глобального мінімізованого функціонала для повної конвективно-дифузійної моделі.

Після завершення нелінійної стадії для C_2 та лінійного розрахунку C_1 отримуються вузлові значення концентрацій

$$\vec{C}_1 = (C_{1,0}, C_{1,1}, \ldots, C_{1,M})^T, \quad \vec{C}_2 = (C_{2,0}, C_{2,1}, \ldots, C_{2,M})^T.$$

і виникає потреба обчислити похідні $\frac{dC_1}{dx}$, $\frac{dC_2}{dx}$ у дискретному вигляді. Це необхідно для відновлення градієнтів концентрацій, обчислення дифузійних потоків $-D_i \frac{dC_i(x)}{dx}$, оцінювання похідних при оптимізації параметрів, а також для подальшого аналізу й візуалізації результатів чисельного моделювання [35, 101, 102].

Оскільки у роботі використовуються лінійні P_1-елементи, МСЕ-наближення має вигляд

$$C_i^h(x) = \sum_{m=0}^{M} C_{i,m} h_m(x), \; i = 1, 2.$$

На кожному елементі $[x_m, x_{m+1}]$ це наближення є лінійною функцією.

Для подальшої постобробки FEM-розв'язку необхідно обчислити похідні концентрацій. Оскільки використовуються лінійні P_1-елементи, похідна на кожному елементі є сталою. Тому для $x \in x_m, x_{m+1}$ маємо

$$\left.\frac{dC_i^h}{dx}\right|_{[x_m,\, x_{m+1}]} = \frac{C_{i,m+1} - C_{i,m}}{x_{m+1} - x_m}, \; m = 0, \ldots, M-1, \; i = 1, 2. \qquad (2.17)$$

Позначивши $\Delta x_m = x_{m+1} - x_m$, одержуємо еквівалентний поелементний запис

$$\left.\frac{dC_i^h}{dx}\right|_{[x_m,\,x_{m+1}]} = \frac{C_{i,m+1} - C_{i,m}}{\Delta x_m}.$$

Ці похідні використовуються для відновлення градієнтів концентрацій, обчислення дифузійних потоків $-D_i \dfrac{dC_i^h(x)}{dx}$, а також для подальшої візуалізації та аналізу результатів чисельного моделювання.

Остання формула є стандартною для кусково-лінійних скінченно-елементних апроксимацій і безпосередньо випливає з того, що $C_i^h(x)$ є лінійною функцією на кожному елементі [35, 101, 102]. У контексті задач перенесення з локалізованими джерелами та можливими особливостями правої частини така поелементна форма похідної є зручною для подальшої постобробки МСЕ-розв'язку та обчислення потокових характеристик.

Тут не вводиться нова реакційна нелінійна система: нев'язка $F_2(C_2)$ і матриця Якобі $J_2(C_2)$ вже визначені на першій стадії МСЕ-дискретизації та ітераційного розв'язання методом Ньютона. Далі виконується лише подальша обробка результатів отриманого МСЕ-розв'язку.

2.5 Вузлова похідна як L^2-проєкція у постобробці МСЕ-розв'язку

Після завершення двоступеневої редукованої МСЕ-схеми, коли на першому етапі знайдено вузлові значення другої компоненти C_2, а на другому етапі з лінійної FEM-системи визначено вузлові значення першої компоненти C_1, виникає потреба відновити похідні концентрацій у вузлах сітки.

Для P_1-МСЕ апроксимації похідна на кожному елементі є сталою величиною. Проте для подальшої постобробки, побудови графіків, оцінювання потоків і використання похідних в оптимізаційних процедурах зручно мати саме вузлові значення похідної. Тому вводиться допоміжна функція $G_i^h(x)$, яка апрокси-

має похідну $\frac{dC_i^h(x)}{dx}$ у скінченноелементному просторі $V_h = \text{span}\{h_m\}_{m=0}^M$. Шукаємо її у вигляді

$$G_i^h(x) = \sum_{m=0}^{M} G_{i,m} h_m(x), \quad i = 1,2.$$

Далі визначимо G_i^h як найкраще наближення похідної $\frac{dC_i^h(x)}{dx}$ у сенсі L^2-проєкції. Для цього вимагаємо

$$\int_0^L G_i^h(x) h_\ell(x)\,dx = \int_0^L \frac{dC_i^h(x)}{dx} h_\ell(x)\,dx, \quad \ell = 0,\ldots,M. \tag{2.18}$$

Ліва частина дає стандартну матрицю мас

$$\sum_{m=0}^{M} G_{i,m} \int_0^L h_m(x) h_\ell(x)dx = \sum_{m=0}^{M} M_{\ell m} G_{i,m},$$

де

$$M_{\ell m} = \int_0^L h_m(x) h_\ell(x)dx. \tag{2.19}$$

Права частина після підстановки

$$C_i^h(x) = \sum_{m=0}^{M} C_{i,m} h_m(x)$$

набуває вигляду

$$\int_0^L \frac{dC_i^h(x)}{dx} h_\ell(x)\,dx = \sum_{m=0}^{M} C_{i,m} \int_0^L h_m'(x) h_\ell(x)dx = \sum_{m=0}^{M} S_{\ell m} C_{i,m}, \tag{2.20}$$

де

$$S_{\ell m} = \int_0^L h'_m(x) h_\ell(x)\, dx. \tag{2.21}$$

Матриця $\mathbf{S}= S_{\ell m}$ є матрицею зв'язку між вузловими значеннями концентрації та слабким поданням її похідної. Вона не є новою матрицею жорсткості для фізичної задачі перенесення, а виникає лише на етапі постобробки при побудові L^2-проєкції похідної. За прийнятим означенням індекс m відповідає базисній функції, яка диференціюється, а індекс ℓ – тестовій функції. Для рівномірної P_1-сітки ця матриця має розріджену стрічкову структуру; її явний вигляд наведено у Додатку Д.

Отже, для вузлових значень похідної отримуємо лінійну систему

$$\mathbf{M}\vec{G}_i = \mathbf{S}\vec{C}_i,\ i = 1, 2, \tag{2.22}$$

де

$$\vec{G}_i = (G_{i,0}, G_{i,1}, \ldots, G_{i,M})^T,\ \ \vec{C}_i = (C_{i,0}, C_{i,1}, \ldots, C_{i,M})^T.$$

Система (2.22) має розмір $(M+1)\times(M+1)$. Вона є допоміжною лінійною системою постобробки FEM-розв'язку і не вводить нової реакційної або дифузійно-реакційної задачі. Її розв'язання дозволяє отримати вузлові значення похідної, після чого вузловий дифузійний потік можна записати як

$$\vec{J}_i = -D_i \vec{G}_i,\ i = 1, 2.$$

Для P_1-елементів матриця мас $\mathbf{M}$ є симетричною, додатно визначеною та має стрічкову, зокрема тридіагональну, структуру. Тому систему (2.22) зручно розв'язувати методом Гаусса для стрічкових матриць або спеціалізованим тридіагональним алгоритмом. У цій роботі цей крок розглядається як друга допо-

міжна лінійна процедура постобробки після знаходження концентрацій C_1 та C_2. Систему

$$\mathbf{M}\vec{G}_i = \mathbf{S}\vec{C}_i,\ i = 1,2,$$

доцільно розуміти як матрично-векторне рівняння, у якому $\mathbf{M}$ – матриця мас, $\mathbf{S}$ – матриця, що відповідає оператору похідної, $\vec{G}_i$ – вектор-стовпець вузлових значень апроксимованої похідної, $\vec{C}_i$ – вектор-стовпець вузлових значень концентрації i-ї компоненти.

У розгорнутому вигляді це рівняння записується так:

$$\begin{pmatrix} M_{00} & M_{01} & \cdots & M_{0M} \\ M_{10} & M_{11} & \cdots & M_{1M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{M0} & M_{M1} & \cdots & M_{MM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{i,0} \\ G_{i,1} \\ \vdots \\ G_{i,M} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{00} & S_{01} & \cdots & S_{0M} \\ S_{10} & S_{11} & \cdots & S_{1M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{M0} & S_{M1} & \cdots & S_{MM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{i,0} \\ C_{i,1} \\ \vdots \\ C_{i,M} \end{pmatrix}$$

Тут

$$\vec{G}_i = \begin{pmatrix} G_{i,0} \\ G_{i,1} \\ \vdots \\ G_{i,M} \end{pmatrix}, \quad \vec{C}_i = \begin{pmatrix} C_{i,0} \\ C_{i,1} \\ \vdots \\ C_{i,M} \end{pmatrix}.$$

Покомпонентний запис:

$$\sum_{m=0}^{M} M_{\ell m} G_{i,m} = \sum_{m=0}^{M} S_{\ell m} C_{i,m}, \quad \ell = 0,1,\ldots,M.$$

Тобто для кожного вузла ℓ маємо окреме рівняння:

$$M_{\ell 0} G_{i,0} + M_{\ell 1} G_{i,1} + \cdots + M_{\ell M} G_{i,M} = S_{\ell 0} C_{i,0} + S_{\ell 1} C_{i,1} + \cdots + S_{\ell M} C_{i,M}.$$

Отже, матриця **M** множиться на вектор невідомих вузлових похідних $\vec{G}_i$, а права частина формується множенням матриці **S** на відомий після МСЕ-розв'язку вектор вузлових концентрацій $\vec{C}_i$.

2.6 Псевдокод двоступеневого редукованого алгоритму МСЕ/Ньютона

Нижче подано узгоджений псевдокод чисельного алгоритму для редукованої одновимірної P_1-МСЕ моделі поширення CO_2 / SO_3. Алгоритм відповідає двоступеневій схемі: спочатку розв'язується нелінійна задача для другої компоненти $C_2 \equiv SO_3$, а після цього перша компонента $C_1 \equiv CO_2$ визначається з лінійної МСЕ-системи при вже знайденому профілі C_2. Додатково після знаходження концентрацій виконується подальша обробка результатів МСЕ – розв'язку для відновлення вузлових похідних і дифузійних потоків.

Вхідні дані: довжина області L, кількість скінченних елементів M, крок сітки $h = L / M$, коефіцієнти дифузії D_1, D_2, параметри крайових умов Робіна κ_1, κ_2, параметри реакційного закону $g(C_2)$, зокрема k_r, K_m, k_D, k_{SO_3}, C_{H_2O}, λ_{SO_3}, C_{O_2}, коефіцієнт зв'язку β, координати та інтенсивності джерел $(x_{ik} \mid q_{ik})$, вхідні концентрації C_1^{in}, C_2^{in}, точність ε, регуляризаційний параметр δ_{reg}, максимальна кількість ітерацій $N_{\max}$.

Вихідні дані: вузлові вектори концентрацій

$$\vec{C}_1 = (C_{1,0}, C_{1,1}, \ldots, C_{1,M})^T, \qquad \vec{C}_2 = (C_{2,0}, C_{2,1}, \ldots, C_{2,M})^T.$$

Алгоритм.

Крок 1. Побудувати рівномірну сітку

$$x_m = mh,\ m = 0, \ldots, M.$$

та відповідні кусково-лінійні P_1-базисні функції $h_m(x)$.

Крок 2. Зібрати дифузійні МСЕ-матриці для двох компонент:

$$K^{(1)}_{m\ell} = \int_0^L D_1 \frac{dh_\ell}{dx}\frac{dh_m}{dx}dx,\ K^{(2)}_{m\ell} = \int_0^L D_2 \frac{dh_\ell}{dx}\frac{dh_m}{dx}dx,$$

де $m,\ell = 0,\ldots,M$. За потреби до цих матриць додаються крайові внески, що відповідають умовам Робіна.

Формули задають елементи вже зібраних глобальних дифузійних МСЕ-матриць. Локальні (2x2)-матриці P_1-елементів та правила їх складання, а також урахування крайових внесків Робіна наведено у наведено у Додатку Г.

Крок 3. Сформувати вектори джерельних внесків

$$b^{(i)}_m = \sum_{k=1}^{p} q_{i,k}\, h_m(x_k), \quad i = 1,2.$$

Якщо точкове джерело x_{ik} попадає всередину елемента, його внесок розподіляється між сусідніми вузлами через значення відповідних базисних функцій $h_m(x_{ik})$. До нульового вузла також додаються крайові внески, пов'язані з вхідними концентраціями C_i^{in}.

Крок 4. Ініціалізувати початкове наближення для другої компоненти:

$$\vec{C}_2^{(0)} = (C_2^{\text{in}}, C_2^{\text{in}}, \ldots, C_2^{\text{in}})^T$$

або, для забезпечення невід'ємності,

$$C^{(0)}_{2,m} = \max(C_2^{\text{in}}, \eta),\ \ \eta > 0.$$

Крок 5. Для $n = 0,1,2,\ldots,N_{\max}$ виконувати нелінійну Ньютона/МСЕ-стадію для C_2. Обчислити реакційний вектор

$$G_{2,m}(\vec{C}_2^{(n)}) = \int_0^L g(C_2^{h,(n)}) h_m(x) dx.$$

У практичній реалізації інтеграли реакційного вектору обчислюються поелементно, наприклад, за двоточковою квадратурою Гаусса. Детальне виведення наведено у Додатку В.

Крок 6. Сформувати нелінійну нев'язку для другої компоненти:

$$F_{2,m}(\vec{C}_2^{(n)}) = \sum_{\ell=0}^{M} K_{m\ell}^{(2)} C_{2,\ell}^{(n)} - G_{2,m}(\vec{C}_2^{(n)}) - b_m^{(2)}.$$

У векторній формі:

$$F_2(\vec{C}_2^{\,n}) = K^2 \vec{C}_2^{\,n} - G_2(\vec{C}_2^{\,n}) - \vec{b}^{\,2}.$$

Тоді якобіан:

$$J_2(\vec{C}_2^{(n)}) = K^{(2)} - J_G(\vec{C}_2^{(n)}).$$

Цей запис відповідає слабкій формі редукованого рівняння для другої компоненти, у якій дифузійна частина входить через матрицю K^2, реакційний внесок – через нелінійний вектор G_2, а точкові джерела – через вектор $\vec{b}^{\,2}$.

Крок 7. Побудувати матрицю Якобі для нелінійної стадії:

$$J_{2,m\ell}(\vec{C}_2^{(n)}) = K_{m\ell}^{(2)} - \int_0^L g'(C_2^{h,(n)}) h_\ell(x) h_m(x) dx.$$

Для підвищення стійкості використовується регуляризована матриця

$$J_{2,\delta} = J_2 + \delta_{reg} I, \qquad \delta_{reg} \sim 10^{-8}.$$

Крок 8. Знайти поправку Ньютона з лінійної системи

$$J_{2,\delta}(\vec{C}_2^{(n)})\Delta\vec{C}_2^{(n)} = -F_2(\vec{C}_2^{(n)}).$$

За потреби застосувати демпфування: вибрати $\alpha \in (0,1]$ так, щоб норма нев'язки зменшувалася, і оновити

$$\vec{C}_2^{(n+1)} = \vec{C}_2^{(n)} + \alpha\Delta\vec{C}_2^{(n)}.$$

Для збереження фізичної невід'ємності концентрації можна виконати проєкцію $C_{2,m}^{(n+1)} \leftarrow \max(C_{2,m}^{(n+1)}, 0)$.

Крок 9. Перевірити критерій зупинки:

$$\| \Delta\vec{C}_2^{\,n} \|_\infty \le \varepsilon \text{ або } \| F_2(\vec{C}_2^{\,n}) \|_\infty \le \varepsilon_F.$$

Якщо критерій виконується, прийняти

$$\vec{C}_2 = \vec{C}_2^{(n+1)}.$$

Крок 10. Після знаходження $\vec{C}_2$ перейти до лінійної стадії для першої компоненти C_1. Оскільки $C_2^h(x)$ уже відома, сформувати праву частину

$$f_{1,m} = \int_0^L \beta k_D C_2^h(x) h_m(x) dx + b_m^{(1)}.$$

$C_2^h(x)$ є вже знайденим МСЕ-наближенням другої компоненти. Тут перший доданок враховує відомий внесок від другої компоненти, а $b_m^{(1)}$ містить точкові джерела першої компоненти та відповідні крайові внески.

Крок 11. Розв'язати лінійну FEM-систему для першої компоненти:

$$\mathbf{K}^{(1)}\vec{C}_1 = \vec{f}_1.$$

Ця система має розмір $(M+1)\times(M+1)$ і може бути розв'язана методом Гаусса або спеціалізованим алгоритмом для стрічкових чи тридіагональних матриць. Саме на цьому етапі перша компонента $C_1 \equiv CO_2$ визначається при вже знайденому профілі $C_2 \equiv SO_3$.

Крок 12. Виконати постобробку FEM-розв'язку. Для відновлення вузлових похідних побудувати матрицю мас $\mathbf{M}$ та матрицю $\mathbf{S}$:

$$M_{\ell m} = \int_0^L h_m(x) h_\ell(x)\,dx, \quad S_{\ell m} = \int_0^L h_m'(x) h_\ell(x)\,dx.$$

Для кожної компоненти розв'язати систему L^2-проєкції

$$\mathbf{M}\vec{G}_i = \mathbf{S}\vec{C}_i, \quad i = 1,2.$$

Тут $\vec{G}_i$ – вектор вузлових значень апроксимованої похідної, а $\vec{C}_i$ – уже знайдений вектор вузлових концентрацій.

Після цього обчислити вузлові дифузійні потоки

$$\vec{J}_i = -D_i \vec{G}_i, \quad i = 1,2.$$

Якщо коефіцієнт дифузії є змінним, тобто $D_i = D_i(x)$, то потік доцільно обчислювати поелементно або через окрему проєкцію добутку $D_i(x)G_i^h(x)$.

Явний вигляд матриць **M** та **S**, внутрішніх і крайових рівнянь системи L^2-проєкції, а також контроль узгодженості з крайовими потоками наведено у Додатку Д. У межах алгоритму ця система використовується лише як подальша обробка результатів МСЕ-розв'язку.

Крок 13. Повернути вузлові концентрації $\vec{C}_1, \vec{C}_2$, вузлові похідні $\vec{G}_1, \vec{G}_2$ та, за потреби, дифузійні потоки $\vec{J}_1, \vec{J}_2$.

Таким чином, алгоритм складається з трьох послідовних частин: нелінійн-

ного Ньютона/МСЕ-розв'язання для C_2, лінійного МСЕ-розв'язання для C_1 при вже відомому C_2, а також допоміжної постобробки для відновлення вузлових похідних і потоків. Така схема узгоджується з редукованою дифузійно-реакційною постановкою і не потребує введення одного глобального мінімізованого функціонала для повної конвективно-дифузійної моделі.

Висновки до розділу 2

1. Сформовано математичну та чисельну основу моделювання поширення забруднювальних компонент у повітряному середовищі від трубоподібних локалізованих джерел. Розглянуто двокомпонентну модель для CO_2 та SO_3, у якій враховано дифузійне перенесення, можливий конвективний внесок, реакційно-кінетичні процеси та точкові джерела забруднення.

2. Показано, що повна конвективно-дифузійно-реакційна модель загалом є несамоспряженою, тому для неї коректною є слабка форма Гальоркіна. Водночас для побудови варіаційного функціонала і застосування методу Рітца виділено редуковану самоспряжену дифузійно-реакційну постановку. Таке розділення дозволяє узгодити фізичну модель перенесення з математично коректною МСЕ-схемою.

3. Уточнено, що реакційно-кінетичний блок описує лише хімічні перетворення та взаємодію компонент, тоді як дифузійні й конвективні члени залишаються окремими операторами рівняння переносу. Для компоненти SO_3 задано нелінійний реакційний закон, який використовується при формуванні нелінійної МСЕ-системи та матриці Якобі в модифікованому методі Ньютона.

4. Побудовано скінченно-елементну апроксимацію редукованої задачі на основі кусково-лінійних P_1-базисних функцій. Запропоновано двоступеневу редуковану МСЕ-схему: спочатку розв'язується нелінійна задача для другої компоненти C_2, а після її знаходження перша компонента C_1 визначається з лінійної МСЕ-системи. Такий підхід дозволяє уникнути некоректного введення одного

глобального мінімізованого функціонала для всієї повної конвективної моделі.

5. Окремо розглянуто постобробку МСЕ-розв'язку. Для відновлення вузлових похідних і дифузійних потоків використано допоміжну лінійну систему L_2-проєкції. Цей етап не вводить нової фізичної задачі, а лише забезпечує зручне обчислення градієнтів, потоків та величин, необхідних для подальшого аналізу результатів.

Отже, у розділі 2 побудовано узгоджену математичну, варіаційну та чисельну схему моделювання поширення CO_2 і SO_3 у повітряному середовищі. Отримана схема є основою для подальшої програмної реалізації, чисельного експерименту, аналізу профілів концентрацій та оцінювання впливу параметрів моделі на розподіл забруднювачів.

Основні результати другого розділу опубліковані у роботах автора, присвячених побудові математичної моделі перенесення багатокомпонентних забруднювачів у повітряному середовищі, формулюванню дифузійно-реакційної та конвективно-дифузійно-реакційної постановок, варіаційному обґрунтуванню редукованої моделі, слабкому формулюванню повної задачі та застосуванню методу скінченних елементів для чисельного аналізу концентраційних полів [1, 2, 5, 9, 135].

Список джерел, які використано у даному розділі, наведено у повному списку використаних джерел [1, 2, 5, 6, 9, 19, 31, 34, 38, 41, 77, 78, 103].

3 ВІДНОВЛЕННЯ ТРИВИМІРНОГО ПОЛЯ ЗАБРУДНЕННЯ ҐРУНТУ МЕТОДАМИ ІНТЕРЛІНАЦІЇ ТА ШЕПАРДА

У цьому розділі позначення $f(x,y,z)$ використовується для теоретичного запису довільної функції трьох змінних, а в прикладній постановці задачі – це концентраційне поле забруднення. Вертикальні лінії Γ_k, $k=1,\ldots,M$, (пункти відбору проб ґрунту) далі трактуються як профілі ґрунтового моніторингу пунктів відбору проб, на яких задано експериментальні профілі вимірювань $\gamma_k(z)$, де $\gamma_k(z)=f(x_k,y_k,z)$.

3.1 Означення інтерлінації та інтерфлетації функцій

У теорії наближення функцій двох і більше змінних $f(x)=f(x_1,\ldots,x_n)$, $n\ge 2$, в останні десятиліття інтенсивно розвивається розділ, присвячений побудові, дослідженню і деяким застосуванням операторів, які відновлюють (можливо, наближено) функції $f(x)$ за відомими їх слідами та слідами їх частинних похідних до фіксованого порядку N на M, де $M\ge 2$, m-вимірних $(0\le m<n)$ поверхнях в $\mathbb{R}^n$ (з метою уніфікації тверджень будемо вважати точки нульвимірними поверхнями, а лінії – одновимірними поверхнями) [10, 11, 21, 22, 33, 57 – 62]. У випадку $m=0$, $n\ge 1$ інформація про функцію $f(x)$ задається в M точках (вузлах) і такі оператори наближення називаються операторами *інтерполяції* (*inter* – між, *pol* – полюс, точка). У випадку $m=1$, $n\ge 2$ інформація про функцію $f(x)$ задається слідами цієї функції та слідами її частинних похідних $\dfrac{\partial^{|s|}f(x)}{\partial x_1^{s_1}\ldots\partial x_n^{s_n}}$, $|s|=s_1+\ldots+s_n$, $1\le|s|\le N$, на M лініях і такі оператори будемо називати *операторами інтерлінації* (*inter* – між, *line* – лінія).

У випадку $2\le m\le n-1$, $n\ge 3$ інформація про функцію $f(x)$ задається її

слідами і слідами її похідних $\dfrac{\partial^{|s|} f(x)}{\partial x_1^{s_1} \ldots \partial x_n^{s_n}}$, $|s| = s_1 + \ldots + s_n$, $1 \le |s| \le N$, на M по-

верхнях в $\mathbb{R}^n$, і такі оператори наближення будемо називати *операторами інтерфлетації* (*inter* – між, *flat* – площина).

У зарубіжній літературі для операторів інтерлінації та інтерфлетації використовується декілька назв. Найпоширенішою є назва «blending function interpolation» – «мішана інтерполяція функцій».

Враховуючи, що інтерлінація та інтерфлетація є природними узагальненнями інтерполяції, в теорії інтерлінації, інтерфлетації використовуємо термінологію з теорії інтерполяції (інтерполююча функція – інтерлінуюча функція – інтерфлетуюча функція, вузли інтерполяції – лінії інтерлінації – поверхні інтерфлетації тощо).

Дамо означення інтерфлетації функцій у загальному випадку операторів $B_\alpha f(x)$, $\alpha = 0, \ldots, m-1$.

Нехай Γ_k, $k = 1, \ldots, M$, – система ν-вимірних поверхонь, $0 \le \nu \le n-1$, в $\mathbb{R}^n$, $n \ge 3$. Функцію $f(x)$, $x = (x_1, \ldots, x_n)$, будемо вважати визначеною разом із системою операторів (диференціальних, інтегральних, інтегродиференціальних) $B_{k,\alpha} f(x)$, $\alpha = 0, \ldots, m-1$, у точках Γ_k, $k = 1, \ldots, M$.

Означення 3.1 [21, 23]. Оператор з властивостями

$$B_{k,\alpha} L_{n,\nu,M}(f; \{\Gamma_q\}; x)\big|_{\Gamma_k} = B_{k,\alpha} f(x)\big|_{\Gamma_k} = g_{k,\alpha}(x)\big|_{\Gamma_k}, \qquad (3.1)$$
$$k = 1, \ldots, M,\ \alpha = 0, \ldots, m-1,$$

будемо називати оператором інтерфлетації (інтерполяції – при $\nu = 0$, інтерлінації – при $\nu = 1$) функції f зі слідами операторів $B_{k,\alpha} f(x)$, $\alpha = 0, \ldots, m-1$, на системі ν-вимірних поверхонь Γ_k, $k = 1, \ldots, M$.

Нехай $B_{k,\alpha} f(x)\big|_{\Gamma_q} = g_{k,\alpha}(x)\big|_{\Gamma_k}$, $k = 1, \ldots, M$, $\alpha = 0, \ldots, m-1$, і оператор інтерфлетації має вигляд

$$L(f;\{\Gamma_k\};\{B_{k,\alpha}\};\{g_{k,\alpha}\};x)=\sum_{i=1}^{M}\sum_{\beta=0}^{m-1}P_{i,\beta}(f;\{\Gamma_k\};\{B_{k,\alpha}\};\{g_{k,\alpha}\};x)\psi_{i,\beta}(x),$$

де $\psi_{i,\beta}(x)$ – деяка система допоміжних функцій, побудова яких залежить від параметрів поверхонь $\{\Gamma_k\}$ і операторів $B_{k,\alpha}$ і не залежить від функції $f(x)$, а $P_{i,\beta}(f;\{\Gamma_k\};\{B_{k,\alpha}\};\{g_{k,\alpha}\};x)$ – деяка система лінійних операторів (диференціальних, інтегральних або інтегрально-диференціальних тощо).

Означення 3.2. Оператор інтерфлетації, побудований на основі допоміжних функцій певного класу, будемо називати відповідно оператором поліноміальної, сплайн-, тригонометричної, раціональної або *R*-функціональної інтерфлетації.

Якщо допоміжні функції є алгебраїчними поліномами, то маємо поліноміальну інтерфлетацію; якщо сплайнами – сплайн-інтерфлетацію; якщо тригонометричними поліномами – тригонометричну інтерфлетацію; якщо раціональними функціями – раціональну інтерфлетацію. У випадку використання функцій, побудованих за допомогою апарату *R*-функцій, відповідний оператор будемо називати оператором *R*-функціональної інтерфлетації.

Це означення повністю поширюється на випадок довільної системи поверхонь в $\mathbb{R}^n$ різної розмірності ν. У межах задачі реконструкції забруднення ґрунту такими носіями можуть виступати вертикальні профілі моніторингу, пунктів відбору проб ґрунту або інші експериментально задані траєкторії відбору проб.

Теорема 3.1. Якщо $f_k(z)\in C(\mathbb{R}),\ k=\overline{1,N}$, то оператор

$$Lf(x,y,z)=\sum_{n=1}^{N}f_n(z)O_n(x,y), \tag{3.2}$$

$$O_n(x,y)=\prod_{\substack{i=1\\ i\neq n}}^{N}\frac{\rho(P,P_i)^q}{\rho(P_n,P_i)^q}, \tag{3.3}$$

$P=(x,y),\ P_i=(X_i,Y_i)$ – вузли сітки профілів у площині Oxy, $i=\overline{1,N}$, а $P_i\neq P_j$, при $i\neq j$,

$$\rho(P,P_i)=\sqrt{(x-X_i)^2+(y-Y_i)^2}\,,\ \rho(P_n,P_i)=\sqrt{(X_n-X_i)^2+(Y_n-Y_i)^2}\,,\ q>0,$$

є оператором інтерлінації та задовольняє властивості

$$Lf(x,y,z)\in C(\mathbb{R}^3);\ \ Lf(X_k,Y_k,z)=f_k(z),\ k=\overline{1,N}.$$

Доведення. Враховуючи наступні властивості допоміжної функції $O_n(x,y)$

$$O_n(x,y)\ge 0,\quad O_n(x,y)\in C(\mathbb{R}^2),\quad O_n(X_k,Y_k)=\delta_{n,k},\ n,k=\overline{1,N},$$

можна зробити висновок, що $Lf(x,y,z)\in C(\mathbb{R}^3)$.

Для доведення другого твердження теореми 3.1 напишемо наступну послідовність рівностей

$$Lf(X_k,Y_k,z)=\sum_{n=1}^{N}f_n(z)\,O_n(X_k,Y_k)=\sum_{n=1}^{N}f_n(z)\,\delta_{k,n}=f_k(x)\,\delta_{k,k}=f_k(x).$$

Таким чином, теорема 3.1 доведена.

Визначимо залишок наближення функції побудованим оператором інтерлінації.

Теорема 3.2. Якщо у формулі для $Lf(x,y,z)$ як допоміжні (базисні) функції взято вирази вигляду

$$O_n(x,y)=\frac{\prod\limits_{i=1,i\ne k}^{M}((x-X_i)(X_k-X_i)+(y-Y_i)(Y_k-Y_i))^{\lambda}}{\prod\limits_{i=1,i\ne k}^{M}((X_k-X_i)^2+(Y_k-Y_i)^2)^{\lambda}},\qquad(3.4)$$

де (X_k,Y_k) – задана сітка вузлів, то функція $Lf(x,y,z)$ є інтерлінаційним поліномом, якщо $\lambda\in\mathbb{N}$, для якого виконується умова $Lf(X_k,Y_k,z)=f_k(z),\ k=\overline{1,N}$.

Доведення. Відмітимо, що (3.4) є поліномом степеню $(N-1)q$ за змінними x, y, якщо $q \in \mathbb{N}$.

Доведемо, що для $Lf(x,y,z)$ виконуються інтерлінаційні властивості

$$O_n(X_p,Y_p) = \frac{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M} ((X_p - X_i)(X_k - X_i) + (Y_p - Y_i)(Y_k - Y_i))^q}{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M} ((X_k - X_i)^2 + (Y_k - Y_i)^2)^q} = \delta_{p,k}.$$

Якщо повторити викладки з теореми 3.1, отримаємо

$$Lf(X_p,Y_p,z) = f_p(z),\ p = \overline{1,N}.$$

Теорема 3.2 доведена.

Якщо ж q є раціональним числом $q = \frac{m}{n}$, то функції $O_n(x,y)$ можуть приймати дійсні значення лише за умов $m \in \mathbb{R}$, $n = 2k-1$, $k = 1, 2, \ldots$, оскільки вираз $(x - X_i)(X_k - X_i) + (y - Y_i)(Y_k - Y_i)$ може бути як додатним, так і від'ємним.

Якщо у формулі для $Lf(x,y,z)$ покласти

$$O_n(x,y) = \frac{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M} \left|(x - X_i)(X_k - X_i) + (y - Y_i)(Y_k - Y_i)\right|^q}{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M} ((X_k - X_i)^2 + (Y_k - Y_i)^2)^q},$$

то оператор $Lf(x,y,z)$ теж буде оператором інтерлінації, якщо $q > 0$ і

$$Lf(X_k,Y_k,z) = f_k(z).$$

Для функцій, що мають розриви першого роду на площинах розбиття області, наближення будується з урахуванням відповідних односторонніх значень у вузлах сітки [3]. Це дозволяє задати розривний інтерполяційний сплайн на

кожному елементі $\Pi_{i,j,k}$. Визначимо залишок наближення функції побудованим оператором інтерлінації.

Нехай внутрішня структура тривимірного тіла описується розривною функцією трьох змінних $f(x,y,z)$. Будемо вважати, що невідомий об'єкт повністю міститься в одиничному кубі $E=[0;1]^3$. Розіб'ємо область E на прямокутні елементи, тобто паралелепіпеди $\Pi_{i,j,k}=[x_i,x_{i+1}]\times[y_j,y_{j+1}]\times[z_k,z_{k+1}]$, $i=\overline{1,n}$, $j=\overline{1,m}$, $k=\overline{1,s}$. Будемо припускати, що функція має розриви першого роду на площинах заданого розбиття, а в кожній вузловій точці можуть бути задані вісім односторонніх значень апроксимованої функції $f(x,y,z)$, які розглядаються як експериментальні дані

$$C^{+++}_{i,j,k}=\lim_{\substack{x\to x_i+0\\ y\to y_j+0\\ z\to z_k+0}} f(x,y,z),\quad C^{-++}_{i,j,k}=\lim_{\substack{x\to x_i-0\\ y\to y_j+0\\ z\to z_k+0}} f(x,y,z),\quad C^{+-+}_{i,j,k}=\lim_{\substack{x\to x_i+0\\ y\to y_j-0\\ z\to z_k+0}} f(x,y,z),$$

$$C^{++-}_{i,j,k}=\lim_{\substack{x\to x_i+0\\ y\to y_j+0\\ z\to z_k-0}} f(x,y,z),\quad C^{+--}_{i,j,k}=\lim_{\substack{x\to x_i+0\\ y\to y_j-0\\ z\to z_k-0}} f(x,y,z),\quad C^{-+-}_{i,j,k}=\lim_{\substack{x\to x_i-0\\ y\to y_j+0\\ z\to z_k-0}} f(x,y,z),$$

$$C^{--+}_{i,j,k}=\lim_{\substack{x\to x_i-0\\ y\to y_j-0\\ z\to z_k+0}} f(x,y,z),\quad C^{---}_{i,j,k}=\lim_{\substack{x\to x_i-0\\ y\to y_j-0\\ z\to z_k-0}} f(x,y,z).$$

Тут знак «+» означає односторонню границю з боку більших значень відповідної координати, а знак «−» – односторонню границю з боку менших значень відповідної координати.

Означення 3.3. Розривним інтерполяційним сплайном на прямокутній сітці назвемо сплайн вигляду

$$S(x,y,z)=p_{ijk}(x,y,z)=$$

$$=C^{+++}_{i,j,k}\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\frac{y-y_{j+1}}{y_j-y_{j+1}}\frac{z-z_{k+1}}{z_k-z_{k+1}}+C^{-++}_{i+1,j,k}\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\frac{y-y_{j+1}}{y_j-y_{j+1}}\frac{z-z_{k+1}}{z_k-z_{k+1}}$$

$$+C^{+-+}_{i,j+1,k}\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\frac{y-y_j}{y_{j+1}-y_j}\frac{z-z_{k+1}}{z_k-z_{k+1}}+C^{++-}_{i,j,k+1}\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\frac{y-y_{j+1}}{y_j-y_{j+1}}\frac{z-z_k}{z_{k+1}-z_k}+$$

$$+C^{+--}_{i,j,k}\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\frac{y-y_j}{y_{j+1}-y_j}\frac{z-z_k}{z_{k+1}-z_k}+C^{-+-}_{i+1,j,k+1}\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\frac{y-y_{j+1}}{y_j-y_{j+1}}\frac{z-z_k}{z_{k+1}-z_k}+$$

$$+C^{--+}_{i+1,j+1,k}\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\frac{y-y_j}{y_{j+1}-y_j}\frac{z-z_{k+1}}{z_k-z_{k+1}}+C^{---}_{i+1,j+1,k+1}\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\frac{y-y_j}{y_{j+1}-y_j}\frac{z-z_k}{z_{k+1}-z_k}, \quad (3.5)$$

де

$$(x,y,z)\in\Pi_{i,j,k}, \quad i=\overline{1,m-1},\ j=\overline{1,n-1},\ k=\overline{1,s-1}.$$

Лема 3.1. Функція $S(x,y,z)$ є розривною функцією, полілінійною на кожному елементі розбиття, і має такі властивості:

$$\lim_{x\to x_{i+1}-0}S(x,y,z)=p_{ijk}(x_{i+1},y,z), \qquad \lim_{x\to x_i+0}S(x,y,z)=p_{ijk}(x_i,y,z),$$

$$\lim_{y\to y_{j+1}-0}S(x,y,z)=p_{ijk}(x,y_{j+1},z) \qquad \lim_{y\to y_j+0}S(x,y,z)=p_{ijk}(x,y_j,z),$$

$$\lim_{z\to z_{k+1}-0}S(x,y,z)=p_{ijk}(x,y,z_{k+1}), \qquad \lim_{z\to z_k+0}S(x,y,z)=p_{ijk}(x,y,z_k),$$

де $(x,y,z)\in\Pi_{i,j,k}$.

Доведення безпосередньо випливає з подання функції $S(x,y,z)=p_{ijk}(x,y,z)$.

Зауваження. Якщо для всіх точок області E відповідні односторонні границі в точках (x_i,y_j,z_k) співпадають між собою і дорівнюють відповідним значенням $f(x_i,y_j,z_k)$, то $S(x,y,z)\in C(E)$ і функція $S(x,y,z)$ буде класичним полілінійним сплайном на заданій сітці вузлів.

Теорема 3.3. Нехай функція $u=f(x,y,z)$ має розриви першого роду в деяких точках $f(x_i,y_j,z_k)$, а також

$$f(x,y,z)\in C^{(r,r,r)}(\Pi_{i,j,k}),\ i=\overline{1,m-1},\ j=\overline{1,n-1},\ k=\overline{1,s-1},\ r=1,2.$$

Тоді залишковий член апроксимації $RS(x,y,z)=f(x,y,z)-S(x,y,z)$ функції $u=f(x,y,z)$ поліномом вигляду (3.5) у кожному паралелепіпеді $\Pi_{i,j,k}$ має вигляд

$$RS(x,y,z)=\int_{x_i}^{x_{i+1}}\int_{y_j}^{y_{j+1}}\int_{z_k}^{z_{k+1}} f^{(r,r,r)}(\xi,\eta,\psi)G_1(x,\xi)G_2(y,\eta)G_3(z,\psi)d\xi d\eta d\psi, \quad (3.6)$$

де

$$(x,y,z)\in\Pi_{i,j,k},$$

$$G_1(x,\xi)=\begin{cases} h_1(x)\dfrac{(x_i-\xi)^{r-1}}{(r-1)!}, & x_i\le\xi\le x\le x_{i+1},\\ -h_2(x)\dfrac{(x_{i+1}-\xi)^{r-1}}{(r-1)!}, & x_i\le x\le\xi\le x_{i+1}.\end{cases}$$

$$G_2(y,\eta)=\begin{cases} h_1(y)\dfrac{(y_j-\eta)^{r-1}}{(r-1)!}, & y_j\le\eta\le y\le y_{j+1},\\ -h_2(y)\dfrac{(y_{j+1}-\eta)^{r-1}}{(r-1)!}, & y_j\le y\le\eta\le y_{j+1}.\end{cases}$$

$$G_3(z,\psi)=\begin{cases} h_1(z)\dfrac{(z_k-\psi)^{r-1}}{(r-1)!}, & z_k\le\psi\le z\le z_{k+1},\\ -h_2(z)\dfrac{(z_{k+1}-\psi)^{r-1}}{(r-1)!}, & z_k\le z\le\psi\le z_{k+1}.\end{cases}$$

Тут

$$h_1(x)=\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}},\ h_2(x)=\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}.$$

Аналогічно визначаються функції $h_1(y)$, $h_2(y)$, $h_1(z)$, $h_2(z)$ для відповідних координатних напрямів.

Рівність (3.6) випливає з інтегрального подання залишкового члена інтерполяційної формули Лагранжа для одновимірного випадку, наведеного в [3, 129].

Теорема 3.4. Якщо $f(x,y,z) \in C^{(r,r,r)}(\Pi_{i,j,k})$ і має розриви першого роду в деяких або в усіх точках (x_i, y_j, z_k), то існують такі значення

$$C^{+++}_{i,j,k},\ C^{-++}_{i,j,k},\ C^{+-+}_{i,j,k},\ C^{++-}_{i,j,k},\ C^{--+}_{i,j,k},\ C^{+--}_{i,j,k},\ C^{-+-}_{i,j,k},\ C^{---}_{i,j,k},$$

що

$$\left\| f(x,y,z) - S(x,y,z) \right\|_{C(D)} = O(\Delta_1^r + \Delta_2^r + \Delta_3^r),$$

$$\Delta_1 = \max_{0 \le i < m-1} (x_{i+1} - x_i),\ \Delta_2 = \max_{0 \le j < n-1} (y_{j+1} - y_j),\ \Delta_3 = \max_{0 \le k < s-1} (z_{k+1} - z_k),$$

$$\forall f(x,y,z) \in C^{(r,r,r)}(\Pi_{i,j,k}),\ \forall \Pi_{i,j,k} \subset D,\ \Delta_p \to 0,\ r = 1,2,\ p = 1,2,3.$$

Доведення. Підставимо у формулу для $p_{ijk}(x,y,z)$ значення

$$C^{+++}_{ijk} = f(x_i + 0, y_j + 0, z_k + 0), \quad C^{+-+}_{ijk} = f(x_i + 0, y_j - 0, z_k + 0),$$

$$C^{-++}_{ijk} = f(x_i - 0, y_j + 0, z_k + 0), \quad C^{++-}_{ijk} = f(x_i + 0, y_j + 0, z_k - 0),$$

$$C^{--+}_{ijk} = f(x_i - 0, y_j - 0, z_k + 0), \quad C^{+--}_{ijk} = f(x_i + 0, y_j - 0, z_k - 0),$$

$$C^{-+-}_{ijk} = f(x_i - 0, y_j + 0, z_k - 0), \quad C^{---}_{ijk} = f(x_i - 0, y_j - 0, z_k - 0).$$

Зазначимо, що оператор $p_{ijk}(x,y,z)$ може бути поданий у вигляді

$$p_{ijk}(x,y,z) = p_{ijk} f(x,y,z) = E1_i E2_j E3_k f(x,y,z),$$

$$E1_i f(x,y,z) = \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} f(x_i + 0, y, z) + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} f(x_{i+1} - 0, y, z),$$

$$E2_j f(x,y,z) = \frac{y - y_{j+1}}{y_j - y_{j+1}} f(x, y_j - 0, z) + \frac{y - y_j}{y_{j+1} - y_j} f(x, y_{j+1} - 0, z),$$

$$E3_k f(x,y,z) = \frac{z - z_{k+1}}{z_k - z_{k+1}} f(x, y, z_k + 0) + \frac{z - z_k}{z_{k+1} - z_k} f(x, y, z_{k+1} - 0).$$

Тоді

$$f(x,y,z) - p_{ijk} f(x,y,z) = (I - E1_i E2_j E3_k) f(x,y,z)$$
$$= ((I - E1_i) + (I - E2_j) + (I - E3_k) - (I - E1_i)(I - E2_j) - (I - E1_i)(I - E3_k) -$$
$$-(I - E2_j)(I - E3_k) + (I - E1_i)(I - E2_j)(I - E3_k)) f(x,y,z)$$
$$= (R1 + R2 + R3 - R1R2 - R1R3 - R2R3 + R1R2R3) f(x,y,z),$$

де

$$R1 f(x,y,z) = (I - E1_i) f(x,y,z),$$
$$R2 f(x,y,z) = (I - E2_j) f(x,y,z),$$
$$R3 f(x,y,z) = (I - E3_k) f(x,y,z).$$

Оцінимо похибку апроксимації в нормі $C(E)$ через оцінки на елементах $C(\Pi_{i,j,k})$:

$$\left\| f - p_{i,j,k} f \right\|_{C(D)} =$$
$$= \left\| R1f + R2f + R3f - R1R2f - R1R3f - R2R3f + R1R2R3f \right\|_{C(D)} =$$
$$= O(\Delta_1^r) + O(\Delta_2^r) + O(\Delta_3^r) + O(\Delta_1^r \Delta_2^r) + O(\Delta_1^r \Delta_3^r) + O(\Delta_2^r \Delta_3^r) + O(\Delta_1^r \Delta_2^r \Delta_3^r).$$

Тут

$$\Delta_1 = \max_{0 \le i < m-1} (x_{i+1} - x_i), \quad \Delta_2 = \max_{0 \le j < n-1} (y_{j+1} - y_j), \quad \Delta_3 = \max_{0 \le k < s-1} (z_{k+1} - z_k).$$

За малих значень Δ_1, Δ_2, Δ_3 члени вищого порядку

$$O(\Delta_1^r \Delta_2^r), \quad O(\Delta_1^r \Delta_3^r), \quad O(\Delta_2^r \Delta_3^r), \quad O(\Delta_1^r \Delta_2^r \Delta_3^r)$$

можна вважати малими порівняно з основними членами

$$O(\Delta_1^r),\ O(\Delta_2^r),\ O(\Delta_3^r).$$

Отже,

$$\left\| f(x,y,z) - S(x,y,z) \right\|_{C(D)} = O(\Delta_1^r + \Delta_2^r + \Delta_3^r).$$

Теорему 3.4 доведено.

3.2 Математичне моделювання просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методами поліноміальної інтерлінації функцій на системі прямих (ліній) спостережень – пунктів відбору проб ґрунту, розміщених регулярно

Вважатимемо, що експериментальні дані про просторово-часовий розподіл забруднювача в ґрунтовому середовищі отримані на системі вертикальних профілів спостережень, які можуть відповідати пунктам відбору проб ґрунту, лініям відбору проб або контрольним точкам ґрунтового моніторингу.

Нехай ці профілі розташовані у вузлах прямокутної сітки на площині (x,y) і задаються множиною

$$\Gamma_{k,\ell} : \{(x,y,z) : (x,y,z) = (X_k, Y_\ell, z),\ z \le 0\},\ k = \overline{1,m},\ \ell = \overline{1,n}.$$

Тоді результати вимірювань можна подати у вигляді профільних функцій $f_{k,\ell}(z) = f(X_k, Y_\ell, z)$, де $f(x,y,z)$ – невідома скалярна функція, що описує концентрацію (або об'ємну/масову частку) забруднювача у точці (x,y,z) ґрунтового масиву. Таким чином, для кожного вузла (X_k, Y_ℓ) відома залежність концентрації від глибини $z \le 0$. Нехай $s_{1k}(x)$, $k = \overline{1,m}$, та $s_{2\ell}(y)$, $\ell = \overline{1,n}$, – базисні поліноми степеню $(m-1)$ та $(n-1)$ відповідно, які реалізують інтерполяційні вла-

стивості на сітці спостережень:

$$s_{1k}(X_p)=\delta_{k,p},\ k,\ p=\overline{1,m};\ \ s_{2\ell}(Y_q)=\delta_{\ell,q},\ \ell,q=\overline{1,n};\quad G=[X_1,X_m]\times[Y_1,Y_n].$$

Такі базисні функції, зокрема можна задати у стандартному вигляді поліномів Лагранжа

$$s_{1k}(x)=\prod_{\substack{i=1\\ i\neq k}}^{m}\frac{x-X_i}{X_k-X_i},\quad s_{1l}(y)=\prod_{\substack{j=1\\ j\neq l}}^{n}\frac{y-Y_i}{Y_k-Y_i}.$$

Теорема 3.5. Оператор

$$O_{mn}f(x,y,z)=\sum_{k=1}^{m}\sum_{\ell=1}^{n}s_{1k}(x)s_{2\ell}(y)\ f_{k,\ell}(z)\in C(\mathbb{R}^3)\quad \forall f\in C(\mathbb{R}^3)$$

є оператором поліноміальної інтерлінації просторового поля $f(x,y,z)$, яке в прикладній постановці інтерпретується як концентрація забруднювача в ґрунті на системі вертикальних профілів спостережень (моніторингових точок відбору проб) $\Gamma_{k,\ell}$, $k=\overline{1,m}$, $\ell=\overline{1,n}$.

Зокрема, оператор O_{mn} точно відтворює експериментальні профільні дані у вузлах сітки, тобто для будь-якого $z\le 0$ виконується умова інтерлінації:

$$O_{mn}f(X_p,Y_q,z)=f(X_p,Y_q,z)=f_{k,\ell}(z),\ \ k=\overline{1,m},\ \ell=\overline{1,n}.$$

При цьому похибка (залишок) інтерлінації $R_{mn}f(x,y,z)=$ $=f(x,y,z)-O_{mn}f(x,y,z)$ для кожного фіксованого значення глибини z можна подати у вигляді

$$\exists\xi\in[X_1,X_m],\quad \exists\eta\in[Y_1,Y_n],\quad \forall z\in\mathbb{R}:$$

$$R_{mn}f(x,y,z)=f^{(m,0,0)}(\xi,y,z)\frac{\prod_{k=1}^{m}(x-X_k)}{m!}+f^{(0,n,0)}(x,\eta,z)\frac{\prod_{\ell=1}^{n}(y-Y_\ell)}{n!}-$$

$$-f^{(m,n,0)}(\xi,\eta,z)\frac{\prod_{k=1}^{m}(x-X_k)}{m!}\frac{\prod_{\ell=1}^{n}(y-Y_\ell)}{n!},$$

$$\max_{(x,y)\in G}\left|R_{mn}f(x,y,z)\right|\le K^{m,0,0}(y,z)\frac{\prod_{k=1}^{m}\left|x-X_k\right|}{m!}+$$

$$+K^{0,n,0}(z)\frac{\prod_{\ell=1}^{n}\left|y-Y_\ell\right|}{n!}+K^{m,n,0}(z)\frac{\prod_{k=1}^{m}\left|x-X_k\right|}{m!}\frac{\prod_{\ell=1}^{n}\left|y-Y_\ell\right|}{n!},\qquad(3.7)$$

$$K^{m,n,0}(z)=\max_{(x,y)\in G}\left|f^{(m,n,0)}(x,y,z)\right|,$$

$$f^{(i,j,0)}(x,y,z)=\frac{\partial^{i+j}}{\partial x^i\partial y^j}f(x,y,z).$$

Доведення. Введемо оператори

$$O_1f(x,y,z)=\sum_{k=1}^{m}f(X_k,y,z)\,s_{1k}(x),\quad O_2f(x,y,z)=\sum_{\ell=1}^{n}f(x,Y_\ell,z)s_{2\ell}(y),$$

які є операторами поліноміальної інтерфлетації на площинах $x=X_k$, $k=\overline{1,m}$, $y=Y_\ell$, $\ell=\overline{1,n}$, відповідно:

$$O_1f(X_k,y)=f(X_k,y),\ k=\overline{1,m};\quad O_2f(x,Y_\ell)=f(x,Y_\ell),\ \ell=\overline{1,n}.$$

Наведені оператори реалізують поетапне відновлення тривимірної залежності за однією просторовою координатою при фіксованому значенні іншої. У прикладній постановці це відповідає обчисленню проміжних значень концентрації забруднювача на вертикальних площинах, що проходять через лінії або профілі спостережень.

Таким чином, реконструкція тривимірного поля виконується як композиція послідовних інтерполяційних кроків, кожен з яких уточнює просторовий розподіл концентрації в одному з напрямів:

$$O_{mn} f(x,y,z) = O_1 O_2 f(x,y,z).$$

Для обґрунтування інтерлінаційної (відтворювальної) властивості $O_{mn} f(X_p, Y_q, z) = f(X_p, Y_q, z) = f_{k,\ell}(z)$, $k = \overline{1,m}$, $\ell = \overline{1,n}$, підставимо в означення оператора $O_{mn} f(x,y,z)$ вузлові значення $x = X_p$, $p = \overline{1,m}$, $y = Y_q$, $q = \overline{1,n}$. Тоді одержуємо

$$O_{mn} f(X_p, Y_q, z) = \sum_{k=1}^{m} \sum_{\ell=1}^{n} s_{1k}(X_p) s_{2\ell}(Y_q) f_{k,\ell}(z) =$$

$$\sum_{k=1}^{m} \sum_{\ell=1}^{n} \delta_{k,p} \delta_{\ell,q} f_{k,\ell}(z) = \delta_{p,p} \delta_{q,q} f_{p,q}(z) = f_{p,q}(z),\ 1 \le p \le m,\ 1 \le q \le n.$$

Тобто ми довели, що $O_{mn} f(X_p, Y_q, z) = f_{p,q}(z)$, $1 \le p \le m$, $1 \le q \le n$.

Для доведення першої з вказаних вище формул для залишку $R_{mn} f(x,y,z)$ зауважимо, що

$$R_{mn} f = f - O_{mn} f = (I - O_{mn}) f =$$

$$= ((I - O_1) + (I - O_2) - (I - O_1)(I - O_2)) f = (R_1 + R_2 - R_1 R_2) f.$$

Тут використані позначення $R_1 f = (I - O_1) f$, $R_2 f = (I - O_2) f$.

Якщо врахувати, що оператори $O_1 f$, $O_2 f$ є операторами інтерполяції Лагранжа за змінними x, y відповідно, для них можна написати наступні відомі вирази

$$R_1 f(x,y,z) = f^{(m,0,0)}(\xi, y, z) \frac{\prod_{k=1}^{m} (x - X_k)}{m!} \quad \forall z,$$

$$R_2 f(x,y,z) = f^{(0,n,0)}(x,\eta,z)\frac{\prod_{\ell=1}^{n}(y-Y_\ell)}{n!},\ Y_1 \le \eta \le Y_n \quad \forall z\,.$$

Тому

$$R_{mn} f(x,y,z) = f^{(m,0,0)}(\xi,y,z)\frac{\prod_{k=1}^{m}(x-X_k)}{m!} + f^{(0,n,0)}(x,\eta,z)\frac{\prod_{\ell=1}^{n}(y-Y_\ell)}{n!} -$$

$$-f^{(m,n,0)}(\xi,\eta,z)\frac{\prod_{k=1}^{m}(x-X_k)}{m!}\frac{\prod_{\ell=1}^{n}(y-Y_\ell)}{n!}.$$

Доведення нерівності (3.7) випливає з нерівності $|a+b| \le |a| + |b|$.

Теорема 3.5 доведена.

Таким чином, оператор $O_{mn} f(x,y,z)$ є математичною моделлю розподілу забруднення з використанням поліноміальних допоміжних (за змінними x, y) функцій.

3.3 Математичне моделювання просторового розподілу забруднення ґрунтів методами сплайн-інтерполяції на системі профілів (пунктів відбору проб ґрунту), розміщених регулярно

3.3.1 Поліноміальні сплайни

У цьому підрозділі подаються основні означення та властивості інтерполяційних сплайнів першого і третього порядків, які надалі використовуються як локальні апроксимаційні інструменти під час побудови моделей просторового поля концентрацій забруднювачів у ґрунтовому середовищі.

Сплайн-інтерполяційні залежності є зручними для опису даних екологічного моніторингу, коли значення концентрації відомі у скінченній кількості ву-

злових точок, наприклад, уздовж окремого профілю спостережень. У такому випадку сплайн дозволяє побудувати неперервне або гладке наближення між виміряними значеннями та використати його як складову подальшої інтерлінаційної або інтерфлетаційної реконструкції тривимірного поля.

Нехай уздовж обраного профілю спостережень, наприклад, за координатою x, відомі значення деякої скалярної характеристики забруднення: концентрації домішки, вмісту важкого металу, рівня хімічного навантаження або іншого екологічного показника. Тобто функція $y = f(x)$ задана у вузлових точках вимірювань $f(x_k) = f_k$, $k = \overline{0, n}$, де

$$x = x_k \ , \ \ k = \overline{0, n} , \ \ a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b .$$

Означення 3.4. Інтерполяційним сплайном першого порядку (лінійним сплайном) називатимемо функцію, яка на кожному відрізку є многочленом першого степеня та точно відтворює значення концентрації у вузлах спостережень.

Зокрема, на інтервалі $x_k \le x \le x_{k+1}$ маємо

$$Sp_1(x) = f(x_k)\frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} + f(x_{k+1})\frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k}, \ \ x_k \le x \le x_{k+1}, \ \ k = \overline{0, n-1}.$$

Такий сплайн забезпечує:

– інтерполяційні умови $Sp_1(x) \in C[a, b]$, $Sp_1(x_k) = f_k$, $k = \overline{0, n}$;

– неперервність на всьому відрізку $[a, b]$;

– локальний характер апроксимації, що є важливим при реконструкції профілів забруднення ґрунтів за даними польових вимірювань.

Лінійні сплайни доцільно застосовувати для первинного відновлення розподілу концентрацій важких металів, токсичних сполук або інших забруднювачів уздовж профілю спостережень. Такий підхід є зручним у випадках, коли експериментальні дані задані на нерівномірній сітці за глибиною або просторовою координатою, а також коли розподіл концентрації містить різкі локальні

зміни, які небажано надмірно згладжувати.

Інтерполяційний сплайн першого порядку забезпечує просте кусково-лінійне відновлення профілю концентрації між сусідніми вузлами вимірювань. У цьому випадку реконструйована функція точно проходить через задані експериментальні значення, а на кожному проміжку між сусідніми точками змінюється лінійно.

Для подальшого використання у задачах інтерлінації та інтерфлетації такий сплайн зручно подавати у вигляді лінійної комбінації базисних функцій, де коефіцієнтами є вузлові значення концентрації забруднювача:

$$S_{1,n}(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) S_{1,n,k}(x),\ a \le x \le b,$$

де $f(x_k)$ – виміряні значення концентрації забруднювача (наприклад, вмісту важкого металу) у вузлах спостережень x_k;

$S_{1,n,k}(x),\ k = \overline{0,n}$, – базисні сплайни першого порядку

$$S_{1,n,0}(x) = \begin{cases} \dfrac{x - x_1}{x_0 - x_1}, & a \le x < x_1, \\ 0, & x \ge x_1; \end{cases} \quad S_{1,n,n}(x) = \begin{cases} 0, & x \le x_{n-1}, \\ \dfrac{x - x_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}, & x_{n-1} < x \le b = x_n; \end{cases}$$

$$S_{1,n,k}(x) = \begin{cases} 0, & x \le x_{k-1},\ x \ge x_{k+1}, \\ \dfrac{x - x_{k-1}}{x_k - x_{k-1}}, & x_{k-1} < x \le x_k, \\ \dfrac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}}, & x_k < x < x_{k+1}, k = 1, ..., n-1. \end{cases}$$

Очевидно, що побудовані базисні сплайнові функції задовольняють інтерполяційну властивість $S_{1,n,k}(x_p) = \delta_{k,p},\ k, p = \overline{0,n}$.

Отримаємо оцінки похибки лінійної сплайн-апроксимації. Нехай функція

концентрації забруднювача $f(x) \in C^2[a,b]$, $M_2 = \max\limits_{a \le x \le b} |f''(x)|$. Тоді похибка апроксимації лінійним сплайном задовольняє оцінку

$$\max_{a \le x \le b} |f(x) - S_{1,n}(f;x)| \le \frac{M_2}{8}\Delta^2, \quad \Delta = \max_{0 \le k \le n-1}(x_{k+1} - x_k).$$

Якщо ж $f(x) \in C^1[a,b]$, $M_1 = \max\limits_{a \le x \le b} |f'(x)|$, то має місце грубіша оцінка

$$\max_{a \le x \le b} |f(x) - S_{1,n}(f;x)| \le \frac{\Delta}{2} M_1.$$

У контексті задач поширення важких металів або токсичних речовин це означає, що точність реконструкції профілю концентрації безпосередньо залежить від щільності розміщення точок відбору проб.

Розглянемо випадок наближення інтерполяційними кубічними сплайнами класу $C^2[a,b]$.

Нехай скалярна характеристика забруднення $y = f(x)$ задана своїми експериментальними значеннями $f(x_k) = f_k$, $k = \overline{0,n}$, у вузлах спостережень

$$x = x_k,\ k = \overline{0,n},\ \Delta_n[a,b]:\ a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Означення 3.5. Інтерполяційним кубічним сплайном називається функція, яка на кожному інтервалі є многочленом 3-го степеня і задовольняє умови

$$Sp_3(x) \in C^2[a,b], \quad Sp_3(x_k) = f_k, \quad k = \overline{0,n}.$$

Для забезпечення єдиності розв'язку додатково задають один із поширених варіантів крайових умов на кінцях $x = a$ і $x = b$.

Спосіб I: умови на перші похідні (клампований сплайн):

$$Sp_3'(a) = f'(a), \quad Sp_3'(b) = f'(b).$$

Спосіб II: умови на другі похідні:

$$Sp_3''(a) = f''(a), \;\; Sp_3''(b) = f''(b).$$

Спосіб III: у випадку, коли функція концентрації забруднювача є періодичною на відрізку $[a, b]$ з періодом $b - a$, тобто (для кубічного сплайна накладаються умови узгодження значень похідних на кінцях інтервалу): $Sp_3'(a) = Sp_3'(b)$, $Sp_3''(a) = Sp_3''(b)$, якщо $f(x)$ періодична з періодом $b - a$: $f(x + (b - a)) = f(x) \;\; \forall x \in \mathbb{R}$.

Такі умови доцільні, наприклад, при моделюванні циклічних екологічних процесів або просторово замкнених контурів моніторингу.

Спосіб IV: умови гладкого зшивання. Для внутрішніх вузлів розбиття забезпечується неперервність другої похідної (це гарантує фізично коректну гладкість реконструйованого поля концентрації):

$$Sp_3'''(x_1 - 0) = Sp_3'''(x_1 + 0), \;\; Sp_3'''(x_{n-1} - 0) = Sp_3'''(x_{n-1} + 0).$$

Наведено подання через *B*-сплайни. Кубічний сплайн можна подати у вигляді лінійної комбінації B-сплайнів третього степеня $B_3(x)$: $Sp_3(x) = \sum_{k=0}^{M} z_k B_3(x - X_k) \in C^2[a, b]$. Класичні B_n-сплайни на рівномірній сітці вузлів з кроком 1 знаходяться за формулами $B_m = N_m$.

У випадку класичних *B*-сплайнів на рівномірній сітці рекурсивне означення має вигляд:

$$N_m(x) = (N_{m-1} * N_1)(x) = \int_0^1 N_{m-1}(x - t) N_1(t) dt = \int_0^1 N_{m-1}(x - t) dt.$$

Наприклад, базові функції нульового порядку можуть мати вигляд:

$$N_1(x) = \chi_{[0,1]}(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0,1], \\ 0, & x \notin [0,1], \end{cases}$$

лінійні *B*-сплайни – вигляд:

$$N_2(x) = \begin{cases} x, & x \in [0,1], \\ 2-x, & x \in [1,2], \\ 0, & x \notin [0,2], \end{cases}$$

квадратичні *B*-сплайни – вигляд:

$$N_3(x) = \frac{1}{2}\begin{cases} 0, & x \notin [0,3], \\ x^2, & x \in [0,1], \\ -2x^2+6x-3, & x \in [1,2], \\ (x-3)^2, & x \in [2,3], \end{cases}$$

кубічні *B*-сплайни – вигляд:

$$N_4(x) = \frac{1}{6}\begin{cases} 0, & x \notin [0,4] \\ x^3, & x \in [0,1], \\ 1+3(x-1)+3(x-1)^2(2-x), & x \in [1,2], \\ 4-6(x-2)^2+3(x-2)^3, & x \in [2,3], \\ (4-x)^3, & x \in [3,4]. \end{cases}$$

Опишемо процедуру побудови сплайнів n-го $(n>1)$ степеня дефекту 1 на нерівномірній сітці вузлів [63]. Нехай похідна порядку $n-1$ для шуканого сплайна $B_n^{(n-1)}(x)$ задається так, що

$$B_n(x) := B_n(x, X, Y) \in C^{n-1}(\mathbb{R}), \ \operatorname{supp} B_n(x) = [X_0, X_{n+1}].$$

Розглянемо вузлові послідовності $X = (X_0, X_1, ..., X_n, X_{n+1})$, $Y = (y_0, y_1, ..., y_n, y_{n+1})$, де Y відповідає сплайну першого степеня з вузлами X_k,

$k = \overline{0, n+1}$, а значення $y_1, ..., y_n$ залишаються невідомими за умов $y_0 = y_{n+1} = 0$.

Тоді функцію $S_n^{(n-1)}(x)$ можна записати у вигляді

$$S_n^{(n-1)}(x) = \begin{cases} 0, & x \le X_0, \\ g_{n-1,k}(x,y) = y_{k-1}\dfrac{x - X_k}{X_{k-1} - X_k} + y_k \dfrac{x - X_{k-1}}{X_k - X_{k-1}}, & X_{k-1} \le x \le X_k, k = \overline{1, n+1}, \\ 0, & x \ge X_{n+1}. \end{cases}$$

Для нижчих похідних (або інтегральних відновлень) введемо рекурентне означення:

$$S_n^{(n-p)}(x) = \int_{X_0}^{x} S_n^{(n-p+1)}(t)dt, \ p = 2, ..., n.$$

Отже, щоб визначити коефіцієнти $y_1, ..., y_n$ достатньо розв'язати систему лінійних алгебраїчних рівнянь порядку $n-1$:

$$S_n^{(n-p)}(X_{n+1}, y) = 0, \ p = 2, ..., n, \ \int_{X_0}^{X_{n+1}} S_n(t)dt = 1.$$

Зауважимо, що умову нормування $\int_{X_0}^{X_{n+1}} S_n(t)dt = 1$ можна замінити еквівалентною вимогою. Подамо явні аналітичні формули для базисних сплайнів другого та третього степенів, побудованих на нерівномірній системі вузлів відповідно до наведеного алгоритму:

$$B_2(x, X) = SS_2(x, X)\left(\int_{X_0}^{X_3} SS_2(x, X)dx\right)^{-1},$$

$B_2(x, X) \in C^1(\mathbb{R})$, $B_2(x, X) = 0$, якщо $x \le X_0$ або $x \ge X_3$,

$$SS_2(x,X)=\begin{cases}0, & x\le X_0,\\ \dfrac{(x-X_0)^2}{X_1-X_0}, & X_0\le x\le X_1,\\ X_2-X_0+\dfrac{(x-X_2)^2}{X_1-X_2}-\dfrac{(x-X_1)^2}{X_2-X_1}\dfrac{X_2-X_0}{X_3-X_1}, & X_1\le x\le X_2,\\ \dfrac{(X_2-X_0)(X_3-X_2)}{X_3-X_1}-\dfrac{(x-X_3)^2-(X_3-X_2)^2}{X_2-X_3}\dfrac{X_2-X_0}{X_3-X_1}, & X_2\le x\le X_3,\\ 0, & x\ge X_3.\end{cases}$$

Зокрема, якщо вузли утворюють рівномірну сітку, тобто $X_k=k$, $k=0,1,2,3,4$, то наведені тут і нижче вирази для $SS_2(x,X)$ та $SS_3(x,X)$ узгоджуються з класичними формулами для *B*-сплайнів другого і третього степенів на рівномірній сітці.

З практичної точки зору важливими є оцінки похибки апроксимації диференційовних функцій кубічними сплайнами. Нехай $f(x)\in C^4[a,b]$ – функція, що задовольняє відповідні умови

$$f(x_k)=f_k,\ k=\overline{0,N},\quad M_4=\max_{a\le x\le b}\left|f^{\mathrm{IV}}(x)\right|.$$

У цьому випадку для функції $f(x)$ мають місце наступні оцінки похибки її наближення кубічними інтерполяційними сплайнами $Sp_3(x)$:

$$\left|Sp_3^{(r)}(x)-f^{(r)}(x)\right|\le R_r,\ r=0,1,2,3,$$

$$R_0=\frac{5}{384}\Delta^4M_4,\ R_1=\frac{\Delta^3}{24}M_4,\ R_2=\frac{3}{8}\Delta^2M_4,\ R_3=\frac{1}{2}\left(\beta+\frac{1}{\beta}\right)\Delta M_4,$$

$$\Delta=\max_{0\le k\le N-1}\Delta_k,\ \beta=\frac{\max\limits_{0\le k\le N-1}\Delta_k}{\min\limits_{0\le k\le N-1}\Delta_k},$$

$$B_3(x,X)=SS_3(x,X)\left(\int_{X_0}^{X_4}SS_3(x,X)dx\right)^{-1}$$

$B_3(x,X)\in C^2(\mathbb{R})$, $B_3(x,X)=0$, якщо $x\le X_0$ або $x\ge X_4$;

$$SS_3(x,X)=\begin{cases}
0, & x\le X_0,\\
\dfrac{y_1(x-X_0)^3}{6(X_1-X_0)}, & X_0\le x\le X_1,\\
\dfrac{y_1}{6}(X_1-X_0)^2+\dfrac{y_1}{2}(X_1-X_0)(x-X_1)+ & \\
+\dfrac{y_1}{2(X_1-X_2)}\left(\dfrac{(x-X_2)^3-(X_1-X_2)^3}{3}-(X_1-X_2)^2(x-X_1)\right)+ & \\
+\dfrac{(x-X_1)^3}{X_2-X_1}\dfrac{y_2}{6}, & X_1\le x\le X_2,\\
\dfrac{y_1}{2}(X_1-X_0)\left(\dfrac{X_1-X_0}{3}+(X_2-X_1)\right)+ & \\
+\dfrac{y_1}{2(X_1-X_2)}\left(-\dfrac{(X_1-X_2)^3}{3}+(X_1-X_2)^3\right)+ & \\
+\dfrac{y_2}{2}(X_2-X_1)(x-X_2)+ & \\
+\dfrac{y_2}{2(X_2-X_3)}\left(\dfrac{(x-X_3)^3-(X_2-X_3)^3}{3}-(X_2-X_3)^2(x-X_2)\right)+ & \\
+\dfrac{(x-X_2)^3}{X_3-X_2}\dfrac{y_3}{6}, & X_2\le x\le X_3,\\
\dfrac{y_1}{2}(X_1-X_0)\left(\dfrac{X_1-X_0}{3}+(X_2-X_1)\right)+ & \\
+\dfrac{y_1}{2(X_1-X_2)}\left(-\dfrac{(X_1-X_2)^3}{3}+(X_1-X_2)^3\right)+ & \\
+\dfrac{y_2}{2}(X_2-X_1)(X_3-X_2)+ & \\
+\dfrac{y_2}{2(X_2-X_3)}\left(\dfrac{-(X_2-X_3)^3}{3}-(X_2-X_3)^2(X_3-X_2)\right)+ & \\
+\dfrac{(X_3-X_2)^3}{X_3-X_2}\dfrac{y_3}{6}+\dfrac{y_1}{2}(X_2-X_0)(x-X_3)+ & \\
+\dfrac{y_2}{2}(X_3-X_1)(x-X_3)+\dfrac{y_3}{2}(X_3-X_2)(x-X_3)+ & \\
+\dfrac{y_3}{2(X_3-X_4)}\left(\dfrac{(x-X_4)^3-(X_3-X_4)^3}{3}+(X_4-X_3)^2(x-X_3)\right), & X_3\le x\le X_4,\\
0, & x\ge X_4,
\end{cases}$$

для

$$y_1=\frac{(X_4-X_1)(X_4-X_2)}{(X_3-X_0)(X_2-X_0)}y_3,\quad y_2=\frac{(X_4-X_2)(X_0+X_1-X_3-X_4)}{(X_3-X_0)(X_3-X_1)}y_3.$$

3.3.2 Математичне моделювання просторового розподілу забруднення ґрунту методом сплайн-інтерлінації функцій трьох змінних на системі ліній спостережень (профілів)

Розглянемо систему точок спостережень (X_k, Y_ℓ, z), $z \le 0$, $k = \overline{1, m}$, $\ell = \overline{1, n}$, які відповідають координатам відбору проб ґрунту або профільним лініям моніторингу та належать області $G = [X_1, X_m] \times [Y_1, Y_n]$.

Нехай $s_{1k}(x)$, $k = \overline{1,m}$, і $s_{2\ell}(y)$, $\ell = \overline{1,n}$, – базисні сплайни 1-го або 3-го порядку (побудовані на основі *B*-сплайнів), що задовольняють умови інтерполяції:

$$s_{1k}(X_p) = \delta_{k,p}, \;\; k, p = \overline{1,m}, \;\; s_{2\ell}(Y_q) = \delta_{\ell,q}, \;\; \ell, q = \overline{1,n}.$$

Припустимо, що концентрація забруднювача у вузлах спостережень визначена як $f_{k,\ell}(z) = f(X_k, Y_\ell, z)$, де $f(x,y,z)$ – функція просторового розподілу концентрації важких металів або хімічних домішок у ґрунті. Тоді оператор сплайн-інтерлінації трьох змінних можна задати у вигляді

$$O_{mn} f(x,y,z) = \sum_{k=1}^{m} \sum_{\ell=1}^{n} s_{1k}(x) s_{2\ell}(y) f_{k,\ell}(z).$$

Він буде задовольняти властивості

$$O_{mn} f(X_p, Y_q, z) = f(X_p, Y_q, z) = f_{k,\ell}(z), \;\; k = \overline{1,m}, \; \ell = \overline{1,n}$$

Для залишку $R_{mn} f(x,y,z) = f(x,y,z) - O_{mn} f(x,y,z)$ за кожного фіксованого значення глибини $z \le 0$ мають місце оцінки похибки. Якщо використовуються сплайни першого порядку, то

$$\max_{(x,y)\in G} \left| R_{mn} f(x,y,z) \right| \le K^{1,1}(z) \frac{h_1 h_2}{2^2}, \;\; \text{якщо} \;\; K^{1,1}(z) = \max_{(x,y)\in G} \left| f^{(1,1)}(x,y,z) \right|,$$

$$\max_{(x,y)\in G}\left|R_{mn}f(x,y,z)\right| \le K^{2,2}(z)\frac{h_1^2h_2^2}{8^2}\text{, якщо } K^{2,2}(z)=\max_{(x,y)\in G}\left|f^{(2,2)}(x,y,z)\right|,$$

якщо допоміжні функції $s_{1k}(x)$, $k=\overline{1,m}$, і $s_{2\ell}(y)$, $\ell=\overline{1,n}$, – є сплайнами першого порядку, то для залишку мають місце такі оцінки;

$$\max_{(x,y)\in G}\left|R_{mn}f(x,y,z)\right| \le K^{1,1}(z)(0{,}315)^2h_1h_2\text{, якщо } K^{1,1}(z)=\max_{(x,y)\in G}\left|f^{(1,1)}(x,y,z)\right|,$$

$$\max_{(x,y)\in G}\left|R_{mn}f(x,y,z)\right| \le K^{2,2}(z)(0{,}054)^2h_1^2h_2^2\text{, якщо } K^{2,2}(z)=\max_{(x,y)\in G}\left|f^{(2,2)}(x,y,z)\right|,$$

$$\max_{(x,y)\in G}\left|R_{mn}f(x,y,z)\right| \le K^{3,3}(z)(0{,}008)^2h_1^3h_2^3\text{, якщо } K^{3,3}(z)=\max_{(x,y)\in G}\left|f^{(3,3)}(x,y,z)\right|,$$

$$\max_{(x,y)\in G}\left|R_{mn}f(x,y,z)\right| \le K^{4,4}(z)h_1^4h_2^4\text{, якщо } K^{4,4}(z)=\max_{(x,y)\in G}\left|f^{(4,4,0)}(x,y,z)\right|,$$

$$h_1=\max(X_{k+1}-X_k),\ \ h_2=\max(Y_{\ell+1}-Y_\ell).$$

З огляду на локальний характер сплайн-інтерлінації функції $f(x,y,z)$ на системі пунктів відбору проб ґрунту (X_k,Y_ℓ,z), $z\le 0$, $k=\overline{1,m}$, $\ell=\overline{1,n}$, одержані вище оцінки мають місце не лише для всієї області G, а й для довільних прямокутних підобластей, зокрема для багатокутників із сторонами, що паралельні координатним осям.

Зауважимо також, що кубічні базисні сплайни $s_{1k}(x)$, $k=\overline{1,m}$, і $s_{2\ell}(y)$, $\ell=\overline{1,n}$, можуть бути реалізовані через кубічні *B*-сплайни у формі

$$s_{1k}(x)=\sum_{p=1}^{m}c_{1kp}SS_3(x,\bar{X}_p),\ k=\overline{1,m},$$

$$s_{2\ell}(y)=\sum_{q=1}^{n}c_{2\ell q}SS_3(y,\bar{Y}_q),\ \ell=\overline{1,n},$$

$$\bar{X}_p=[X_p,X_{p+1},...,X_{p+4}],\ X_{m+1}=X_m+(X_m-X_{m-1}),\ X_{m+2}=X_m+(X_m-X_{m-2}),\ \ldots;$$

$$\bar{Y}_q=[Y_q,Y_{q+1},...,Y_{q+4}],\ Y_{n+1}=Y_n+(Y_n-Y_{q-1}),\ Y_{n+2}=Y_n+(Y_q-Y_{q-2}),\ \ldots.$$

Невідомі коефіцієнти c_{1kp}, $c_{2\ell q}$ визначаються шляхом розв'язання відповідних систем лінійних алгебраїчних рівнянь, що випливають з умов інтерполяції

$$s_{1k}(X_p)=\delta_{k,p},\ k,p=\overline{1,m},\ s_{2\ell}(Y_q)=\delta_{\ell,q},\ \ell,q=\overline{1,n}.$$

де $\delta_{\ell,q}$ – це символ Кронекера:

$$\delta_{\ell,q}=\begin{cases}1, & k=p,\\ 0, & k\neq p.\end{cases}$$

3.4 Математичне моделювання просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методом сплайн-інтерлінації на системі нерегулярно розміщених прямих спостережень

Наведемо та проаналізуємо оператори сплайн-інтерлінації функцій трьох змінних на системі прямих

$$\Gamma_k:(X_k,Y_k,z),\ z\in[-H,0],\ k=\overline{1,M},$$

які розміщені нерегулярно на поверхні $z=0$, з використанням кусково-поліноміального (зокрема, кусково-аналітичного, наприклад, кусково-квадратичного) наближення за змінними x, y у межах кожної трикутної призми.

Розглянуті раніше в п. 3.1 оператори, лінійні за координатами x, y, можуть бути узагальнені наступним чином. Нехай введено M допоміжних функцій $h_k(t)\in C[0,1]$, $k=\overline{1,M}$, що задовольняють умови $h_k(0)=0$, $h_k(1)=1$, $k=\overline{1,M}$. На їх основі визначимо оператор

$$\tilde{O}_M f(x,y,z)=\tilde{O}_\mu f(x,y,z)=f_{\mu_1}(z)h_{\mu_1}\left(\frac{\varphi_{\mu_2,\mu_3}(x,y)}{\Delta_{\mu_1,\mu_2,\mu_3}}\right)+f_{\mu_2}(z)h_{\mu_2}\left(\frac{\varphi_{\mu_1,\mu_3}(x,y)}{\Delta_{\mu_2,\mu_1,\mu_3}}\right)+$$

$$+f_{\mu_3}(z)h_{\mu_3}\left(\frac{\varphi_{\mu_1,\mu_2}(x,y)}{\Delta_{\mu_3,\mu_1,\mu_2}}\right),\ z\in[-H,0],$$

де μ_1,μ_2,μ_3 – індекси трьох вершин трикутного елемента, що містить проєкцію точки (x,y,z) на площину Oxy;

$f_{\mu_i}(z)$ – значення функції на вертикальному профілі, який проходить через вершину $P_{\mu_i}=(X_{\mu_i},Y_{\mu_i})$;

h_{μ_i} – допоміжні функції, що задають спосіб узагальнення профільних даних;

$\varphi_{\mu_j,\mu_k}(x,y)$ – координатні або базисні функції, пов'язані зі сторонами трикутника. Вони визначають внесок відповідного профілю у відновлене значення функції в точці (x,y);

$\Delta_{\mu_i,\mu_j,\mu_k}$ – нормувальний визначник, пов'язаний із площею відповідного трикутника;

$\frac{\varphi_{\mu_2,\mu_3}(x,y)}{\Delta_{\mu_1,\mu_2,\mu_3}},\frac{\varphi_{\mu_1,\mu_3}(x,y)}{\Delta_{\mu_2,\mu_1,\mu_3}},\frac{\varphi_{\mu_1,\mu_2}(x,y)}{\Delta_{\mu_3,\mu_1,\mu_2}}$ – вагові коефіцієнти, які показують, з якою вагою кожний профіль бере участь у відновленні значення функції в точці (x,y,z);

Теорема 3.6. Оператор $\tilde{O}_M f(x,y,z)$ має такі властивості:

а) він є оператором інтерлінації функцій трьох змінних на системі прямих Γ_k, тобто

$$O_M f(X_k,Y_k,z)=f_k(z),\ 0\le z\le H,\ k=\overline{1,M};$$

б) з $f(x,y,z)\in C\left(\bigcup_\mu T_\mu\times[0,H]\right)$, $T_\mu\subset D$, випливає, що $O_M f(x,y,z)\in C\left(\bigcup_\mu T_\mu\times[0,H]\right)$.

Зокрема, якщо $h_k(t)=t\ \ \forall k=\overline{1,M}$, то $\tilde{O}_M f(x,y,z)=O_M f(x,y,z)$.

Доведення. Інтерлінаційні властивості а) випливають із відомої властивості визначника: детермінант з двома однаковими рядками дорівнює нулю. Отже, якщо $p \in \{\mu_1, \mu_2, \mu_3\}$, то

$$\tilde{O}_M f(X_p, Y_p, z) = \tilde{O}_\mu f(X_p, Y_p, z) = f_{\mu_1}(z) h_{\mu_1}\left(\frac{\varphi_{\mu_2,\mu_3}(X_p, Y_p)}{\Delta_{\mu_1,\mu_2,\mu_3}}\right) +$$

$$+ f_{\mu_2}(z) h_{\mu_2}\left(\frac{\varphi_{\mu_1,\mu_3}(X_p, Y_p)}{\Delta_{\mu_2,\mu_1,\mu_3}}\right) + f_{\mu_3}(z) h_{\mu_3}\left(\frac{\varphi_{\mu_1,\mu_2}(X_p, Y_p)}{\Delta_{\mu_3,\mu_1,\mu_2}}\right) = f_p(z),\ z \in [0, H],\ p = \overline{1, M}.$$

Тут враховано, що

$$\varphi_{\mu_2,\mu_3}(X_{\mu_1}, Y_{\mu_1}) = 1,\ \varphi_{\mu_2,\mu_3}(X_{\mu_2}, Y_{\mu_2}) = 0,\ \varphi_{\mu_2,\mu_3}(X_{\mu_3}, Y_{\mu_3}) = 0,$$
$$\varphi_{\mu_1,\mu_3}(X_{\mu_2}, Y_{\mu_2}) = 1,\ \varphi_{\mu_1,\mu_3}(X_{\mu_1}, Y_{\mu_1}) = 0,\ \varphi_{\mu_1,\mu_3}(X_{\mu_3}, Y_{\mu_3}) = 0,$$
$$\varphi_{\mu_1,\mu_2}(X_{\mu_3}, Y_{\mu_3}) = 1,\ \varphi_{\mu_1,\mu_2}(X_{\mu_1}, Y_{\mu_1}) = 0,\ \varphi_{\mu_1,\mu_2}(X_{\mu_2}, Y_{\mu_2}) = 0,$$
$$h_k(1) = 1 \quad \forall k \in \{1, ..., M\}.$$

Отже, $\forall z \in [-H, 0]$ оператор $\tilde{O}_M f(x, y, z)$ є оператором кусково-неперервної інтерлінації за змінними x, y. Щоб обґрунтувати включення

$$O_M f(x, y, z) \in C\left(\bigcup_\mu T_\mu \times [-H, 0]\right),\quad T_\mu \subset D,$$

достатньо зазначити, що оператори $O_{p,q,r} f(x, y, z)$ та $O_{p',q,r} f(x, y, z)$ на спільній грані двох призматичних елементів з пунктами відбору проб Γ_q та Γ_r мають однакові сліди. Це означає, що при переході від однієї тригранної призми з ребрами Γ_p, Γ_q, Γ_r до трьохгранної призми з ребрами $\Gamma_{p'}$, Γ_q, Γ_r, де $O_M f(x, y, z)$ не втрачає неперервності.

Теорему 3.6 доведено.

Викладемо метод побудови операторів інтерлінації функцій 3-х змінних,

що є узагальненням відомого методу Зламала [65, 93, 94, 128] для апроксимації функцій двох змінних кусково-поліноміальними (зокрема, кусково-квадратичними) залежностями на триангуляційних областях.

Нехай $p(x,y,z)$ – довільний поліном другого степеня за змінними x, y, коефіцієнти якого залежать від третьої змінної z

$$p(x,y,z)=\alpha_1(z)+\alpha_2(z)x+\alpha_3(z)y+\alpha_4(z)x^2+\alpha_5(z)xy+\alpha_6(z)y^2$$

Позначимо через $\Gamma_i(z)=(X_i,Y_i,z)$, $z\le 0$, $1\le i\le 3$, – ребра призми T, а через $Q_i(z)$, $1\le i\le 3$, – прямі-пункти відбору проб ґрунту, що проходять через середини граней трикутної призми (див. рис. 3.1 – вигляд призми зверху).

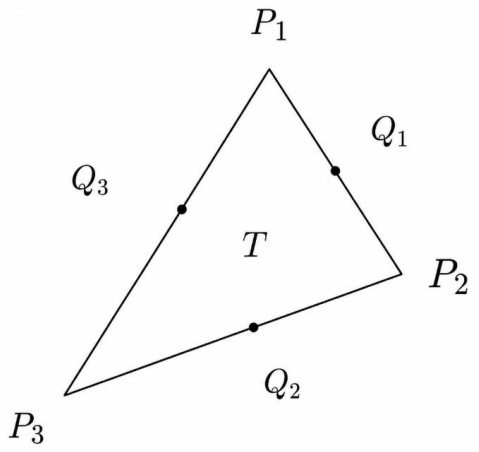

Рисунок 3.1 – Схематичне зображення тригранної призми з прямими-пунктами відбору проб ґрунту, розташованими в середині її граней

Очевидно, що для довільних функцій $a_i(z)$, $b_i(z)$, $1\le i\le 3$, існує єдиний поліном $p(x,y,z)$ другого степеня написаного вище вигляду, який задовольняє відповідні інтерполяційні умови

$$p(\Gamma_i)=p(X_1,Y_1,z)=a_i(z),$$

$$p(Q_i(z))=p\left(\frac{X_i+X_{i+1}}{2},\frac{Y_i+Y_{i+1}}{2},z\right)=b_i(z),\ 1\le i\le 3,\ X_4=X_1,\ Y_4=Y_1.$$

Отже, коли функція $f(x,y,z)$ є неперервною на T, то існує єдиний поліном $p(x,y,z)$ за змінними x, y, який апроксимує $f(x,y,z)$ на T у тому розумінні, що

$$f(\Gamma_i(z)) = p(\Gamma_i(z)) = f_i(z),\ 1 \le i \le 3, \tag{3.8}$$

$$f(Q_i(z)) = p(Q_i(z)) = \tilde{f}_i(z),\ 1 \le i \le 3 \tag{3.9}$$

Узагальненням відповідного твердження Зламала [65, 93, 94, 128] на випадок апроксимації функцій трьох змінних сформулюється у вигляді наступної теореми.

Теорема 3.7. Нехай задано довільне розбиття області $D\times[-H,0]$ на трикутні циліндричні області – призми

$$D \subset \mathbb{R}^2,\quad \bigcup_{i=1}^{N} \overline{T}_i \times [-H,0] = \overline{D}\times[-H,0].$$

Позначимо через h максимальну довжину сторін трикутників T_i, а через θ – найменший кут серед трикутників T_i. Нехай $f \in C^3(D\times[-H,0])$ і $s(x,y,z)$ – єдина кусково-поліноміальна функція (за змінними x, y), що інтерлінує $f(x,y,z)$ в сенсі (3.8), (3.9). Тоді виконується оцінка

$$\|f-s\|_{W_2^1(\Omega)} \le K\frac{h^2}{\sin\theta_0}\sup\left\{\left\|D^\alpha f\right\|_{L_\infty(\Omega)} : |\alpha| = 3\right\} \quad \forall z \in [-H,0]$$

для довільної тріангуляції з кутом, що задовольняє умову $\theta \ge \theta_0 > 0$. При цьому стала K не залежить від функції $f(x,y,z)$ та геометричних характеристик області D. Тут

$$D^\alpha f(x,y,z) = \frac{\partial^{\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3}}{\partial x^{\alpha_1}\partial y^{\alpha_2}\partial z^{\alpha_3}} f(x,y,z),$$

$$\alpha = (\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3),\ |\alpha| = \alpha_1+\alpha_2+\alpha_3,$$

$$\|f-s\|_{W_2^1(G)} =$$

$$= \sqrt{\iint\limits_{G} \left[(f(x,y) - s(x,y))^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}(x,y) - \frac{\partial s}{\partial x}(x,y) \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}(x,y) - \frac{\partial s}{\partial y}(x,y) \right)^2 \right] dxdy} .$$

Доведення цієї теореми здійснюється аналогічно доведенню відповідного результату М. Зламала [66, 93, 94, 128] для різних фіксованих значень z. Теорема 3.7 доведена.

3.5 Математичне моделювання просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методом узагальненої глобальної інтерполяційної формули Дональда Шепарда

У попередніх підрозділах розглядалися інтерлінаційні схеми, побудовані на основі кусково-поліноміальних залежностей, зокрема кусково-лінійних, кусково-квадратичних та інших апроксимацій. Такі підходи використовуються для опису просторового розподілу забруднювачів у ґрунтовому середовищі між прямими-пунктами відбору проб ґрунту або профілями, які можуть бути розташовані нерівномірно в межах досліджуваної території.

Математичні схеми такого типу дозволяють будувати локально узгоджене наближення поля концентрацій у проміжках між носіями вимірювань. При цьому точність реконструкції істотно залежить від густоти та геометричної конфігурації даних: чим меншими є максимальні відстані між сусідніми пунктами відбору проб ґрунту, профілями або вузлами розбиття, тим детальніше може бути відтворена локальна структура поля забруднення.

Разом із тим локальні кусково-поліноміальні моделі не завжди дають достатню інформацію про глобальну гладкість і загальну просторову поведінку реконструйованої функції. Це означає, що для встановлення додаткових властивостей відновленого поля, наприклад, належності функції до певного класу гладкості, оцінювання стійкості апроксимації або аналізу похибки, необхідно залучати додаткові аналітичні міркування та порівняльні чисельні експерименти.

У багатьох прикладних задачах реконструкція гладких поверхонь або просторових полів виконується за даними, розташованими нерівномірно. Така ситуація є типовою для екологічного моніторингу: у ґрунтових дослідженнях вимірювання виконуються у точках відбору проб, на профілях або у пунктах відбору проб ґрунту; у метеорології – на мережі станцій спостереження; у географічних і геоінформаційних задачах – за нерівномірно розміщеними координатними даними; у біологічних або екологічних дослідженнях – у пунктах фіксації спостережень. У кожному такому пункті зазвичай відома одна або кілька числових характеристик, наприклад, концентрація забруднювача, висота, температура, вологість або інший показник стану середовища.

Для роботи з нерегулярно розміщеними точковими даними одним із класичних підходів є метод Дональда Шепарда, що ґрунтується на зважуванні значень у відомих точках залежно від відстані до точки відновлення [32]. На відміну від інтерлінації, яка використовує інформацію на лініях, профілях або інших носіях даних, метод Шепарда безпосередньо орієнтований на інтерполяцію за системою нерегулярно розміщених точок.

У межах даної роботи метод Шепарда доцільно розглядати не як заміну інтерлінаційного підходу, а як порівняльний та допоміжний інструмент для реконструкції просторових полів концентрацій. Він дозволяє оцінити, наскільки результати, отримані за допомогою інтерлінації або інтерфлетації, узгоджуються з класичною схемою інтерполяції нерегулярних даних. Крім того, метод Шепарда є корисним у випадках, коли експериментальна інформація задана переважно у точках, а не на лініях чи профілях.

Варто зазначити, що попри значний розвиток методів інтерполяції нерегулярних даних, побудова надійної тривимірної реконструкції поля забруднення за обмеженою кількістю вимірювань залишається складною задачею. Якщо дані формують регулярну сітку, то можуть застосовуватися стандартні схеми інтерполяції на прямокутних або структурованих сітках. Однак для нерегулярних точок, пунктів відбору проб ґрунту або профілів необхідні спеціальні методи, здатні враховувати геометрію розташування даних, локальну неоднорід-

ність поля та можливі різкі зміни концентрацій:

– подання поверхні у вигляді білінійної інтерполяційної залежності на прямокутному елементі, що геометрично відповідає фрагменту гіперболічного параболоїда, побудованого за чотирма заданими вузловими значеннями;

– опис поверхні локальним поліномом у деякому околі n^2, $n = 2, 3, 4, 5, \ldots$, вузлів із застосуванням інтерполяційних формул Ньютона та методу розділених різниць;

– побудова гладкої поверхні за допомогою бікубічних сплайн-інтерполяційних залежностей, які забезпечують вищу гладкість відновленої функції порівняно з кусково-лінійними схемами.

Для трикутного розбиття одним із найбільш простих і практично зручних способів є формування поверхні як сукупності площинних фрагментів, кожен з яких визначається трьома сусідніми вузлами. Такий підхід відповідає кусково-лінійній інтерполяції на трикутниках і широко використовується для побудови наближених поверхонь за нерегулярно розміщеними точками.

У контексті реконструкції полів забруднення ґрунту ці методи можуть застосовуватися для побудови попередніх карт концентрацій, ізоліній, поверхонь рівня або горизонтальних зрізів. Однак їхня ефективність істотно залежить від густоти та геометрії розміщення точок спостережень. Якщо вимірювання задані не на регулярній сітці, а у вигляді пунктів відбору проб ґрунту, профілів або нерівномірно розташованих точок, доцільним є використання спеціалізованих методів реконструкції, зокрема інтерлінації, інтерфлетації або методу Шепарда.

У разі нерівномірного розміщення вузлів, коли дані задано не на регулярній сітці, а в окремих точках або на нерівномірно розташованих профілях, доцільно використовувати спеціальні схеми відновлення для нерегулярних даних. Якщо при цьому не ставиться вимога побудови глобально гладкої поверхні, а достатньо отримати неперервне або локально згладжене наближення, ефективними є зважені інтерполяційні підходи. У межах цієї роботи як базові порівняльні оператори використовуються схема Шепарда та її узагальнення, для яких відомі властивості побудованих поверхонь, збіжності та оцінки похибки наближення [32, 106, 107].

Коли точне відтворення всіх виміряних значень не є обов'язковим або коли вихідні дані містять помітні похибки, доцільно використовувати згладжувальні підходи. У цьому випадку замість інтерполяційної поверхні може будуватися трендова модель, наприклад, на основі методу найменших квадратів. Такий підхід дозволяє зменшити вплив випадкових похибок, але водночас може згладжувати локальні максимуми концентрацій, що є важливими для задач екологічного моніторингу.

Навіть без жорстких вимог до глобальної гладкості та точного проходження через усі вихідні точки окремі підходи, розроблені для регулярних сіток, можуть бути адаптовані до випадку нерегулярно розташованих даних. Однак такі модифікації часто потребують попередньої побудови допоміжного розбиття області, наприклад, триангуляції або змішаного розбиття на трикутні та чотирикутні елементи, що ускладнює алгоритмічну реалізацію.

Один із можливих підходів полягає в поділі заданої множини вузлів на трикутники або на поєднання чотирикутників із трикутниками. Наприклад, у внутрішній частині області інтерполювання можуть використовуватися чотирикутні елементи, тоді як поблизу межі області – трикутні, особливо якщо контур не утворений відрізками, паралельними координатним осям. У межах кожного чотирикутного елемента поверхня може описуватися білінійною формулою, а в межах трикутного елемента – площиною, визначеною трьома його вершинами.

Такі підходи є відносно простими з погляду чисельної реалізації за умови, що попередньо вже побудовано якісне розбиття множини вузлів. Вони базуються на локальних функціях, які легко обчислюються за експериментальними даними. Водночас практичним ускладненням є вибір самого розбиття: різні варіанти триангуляції або поєднання трикутників і чотирикутників можуть давати різні локальні поверхні та, відповідно, різні положення ізоліній. Тому при побудові такого розбиття доцільно враховувати геометричну якість елементів, уникати надто витягнутих трикутників і забезпечувати локальну узгодженість між сусідніми фрагментами поверхні.

Інший підхід ґрунтується на побудові глобальних або локальних апроксимуючих функцій, зокрема поліноміальних, тригонометричних або сплайн-

залежностей. Такі функції можуть забезпечувати вищу гладкість відновленої поверхні, однак їх застосування до нерегулярних даних потребує додаткових умов, вибору базису, параметрів згладжування або розв'язання допоміжних задач апроксимації. Для задач забруднення ґрунту це може бути корисним при побудові загального тренду, але менш зручним для точного відтворення локальних аномалій і різких змін концентрацій.

Отже, для нерегулярно розміщених даних існує кілька можливих підходів: локальна інтерполяція на трикутних або змішаних сітках, згладжувальні трендові моделі, глобальні апроксимуючі функції та зважені схеми типу Шепарда. У межах даної роботи метод Шепарда та його модифікації використовуються як порівняльна база для оцінювання ефективності інтерлінаційних та інтерфлетаційних операторів при реконструкції просторових полів забруднення ґрунту за неповними даними

$$g(x,y)=\sum_{j=1}^{M}B_j h_j(x,y)$$

із достатньою кількістю коефіцієнтів B_j, $j=\overline{1,M}$, щоб виконувалися всі інтерполяційні умови

$$g(x_i,y_i)=z_i,\ i=\overline{1,N}.$$

У підсумку для визначення невідомих коефіцієнтів одержуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь (див. [79, 80, 104]).

$$\sum_{j=1}^{M}B_j h_j(x_i,y_i)=z_i,\ i=\overline{1,N}.$$

Якщо базисні функції $h_j(x,y)$, $j=\overline{1,M}$, є алгебраїчними або тригонометричними поліномами від двох змінних, то при великих $M\geq N$ розв'язування відповідних систем потребує значного обсягу обчислювальних операцій.

Слід підкреслити, що сучасні підходи до двовимірного точного інтерполюван-

ня умовно поділяються на два типи залежно від вибору функцій $h_j(x,y)$, $j=\overline{1,M}$:

– використання однієї глобальної функції, яка є досить складною в реалізації;

– побудова сукупності простіших локальних функцій, узгоджених між собою на межах підобластей їх визначення.

Другий підхід є більш практичним, оскільки підобласті для кожної локальної функції задаються природним чином, а самі функції можна обрати неперервно диференційовними.

Для графічного відображення заданих точок у вигляді контурних карт або тривимірних зображень, для зіставлення цих даних з результатами, отриманими в інших точках досліджуваних регіонів, а також для аналізу екстремумів, градієнтів чи інших характеристик доцільно визначати неперервні функції, що точно відтворюють задані значення у вибраній системі точок. Це, зокрема, дає можливість обчислювати значення на більш густій сітці вузлів. При застосуванні таких функцій зазвичай вважають, що вихідні дані є точними, або що після інтерполяції можуть бути внесені відповідні коригування похибок.

Отже, задача побудови поверхонь на основі двовимірної інтерполяції є важливою та актуальною. Нехай задано скінченний набір із N трійок (X_i,Y_i,Z_i), де X_i, Y_i – координати розташування точок D_i та Z_i – відповідні значення (висоти або глибини). Задача полягає у побудові інтерполяційної функції $z=f(x,y)$, яка задовольняє систему співвідношень $Z_i=f(X_i,Y_i)$, $i=\overline{1,N}$. Такі інтерполяційні функції двох змінних мають бути неперервними або диференційовними. Відповідні заміни виконуються безпосередньо в інтерполяційних формулах.

Розглянемо інтерполяційні оператори Дональда Шепарда [32, 72, 97, 98] апроксимації функцій однієї змінної

$$S_{n,\lambda}(f,x)=\frac{\sum\limits_{k=0}^{n} f\left(\frac{k}{n}\right)\left|x-\frac{k}{n}\right|^{-\lambda}}{\sum\limits_{k=0}^{n}\left|x-\frac{k}{n}\right|^{-\lambda}},\ \lambda>0,\ n=1,2,...,$$

У роботі [126] отримано оцінки для відповідних операторів, що дозволило встановити такі нерівності

$$\omega(S_{n,\lambda}(f);h)\le c\min\left[hn^{2-\lambda}\int\limits_{1/n}^{1}\frac{\omega(f;t)}{t^{\lambda}}dt,\, n^{1-\lambda}\int\limits_{1/n}^{1}\frac{\omega(f;t)}{t^{\lambda}}dt+\omega(f;h)\right]\le$$

$$\le ch^{\lambda-1}\int\limits_{h}^{1}\frac{\omega(f;t)}{t^{\lambda}}dt\,,\ 0<h<1<\lambda\,,\ n\in\mathbb{N},$$

де стала c не залежить від n. Зокрема, для $1<\lambda\le 2$, $f\in \mathrm{Lip}_{\alpha}$, $0<\alpha\le 1$, маємо

$$\omega(S_{n,\lambda}(f);h)=\begin{cases} O(h^{\alpha}), & \alpha<\lambda-1,\\ O\left(h^{\alpha}\log\dfrac{1}{h}\right), & \alpha=\lambda-1,\\ O(h^{\lambda-1}), & \lambda-1<\alpha. \end{cases}$$

Якщо $\lambda>2$, то

$$\int\limits_{h}^{1}\frac{\omega(f;t)}{t^{\lambda}}dt\le\frac{2\omega(f;h)}{h}\int\limits_{h}^{1}t^{1-\lambda}dt\le ch^{1-\lambda}\omega(f;h),$$

що приводить до більш зручного співвідношення

$$\omega(S_{n,\lambda}(f);h)\le c\omega(f;h),\quad 0<h<1,\ \lambda>2,\ n\in\mathbb{N}.$$

Отже, наведені вище результати свідчать про те, що при $\lambda>2$, а також у випадку $1<\lambda\le 2$ і $\alpha<\lambda-1$ оператори Шепарда повністю відтворюють глобальну гладкість функції f, яка апроксимується [126]. Ситуація $\lambda=1$ залишається відкритою, оскільки для цього значення відсутня оцінка норми $\left\|S'_{n,\lambda}\right\|$.

У разі двох змінних x, y глобальний вираз Шепарда для вузлової сітки (X_k,Y_ℓ), $k=\overline{1,N}$, $\ell=\overline{1,N}$, можна подати у такій формі

$$S_{N,\lambda}(f;x,y)= \tag{3.10}$$

$$=\begin{cases} \dfrac{\sum\limits_{k=0}^{M}\sum\limits_{l=0}^{N} f(X_k,Y_l)\left(\sqrt{(x-X_k)^2+(y-Y_l)^2}\right)^{-\lambda}}{\sum\limits_{i=0}^{M}\sum\limits_{j=0}^{N}\left(\sqrt{(x-X_i)^2+(y-Y_j)^2}\right)^{-\lambda}}, & \sqrt{(x-X_k)^2+(y-Y_l)^2}\neq 0, \\ & \forall k=\overline{1,M}, l=\overline{1,N}, \\ f(X_i,Y_j), & \exists i\in\{1,...,M\}, j\in\{1,...,N\}: \\ & (x-X_i)^2+(y-Y_j)^2=0. \end{cases}$$

Твердження 3.1 (див. [32]). Оператор (3.10) має такі властивості:

а) $S_{M,N,\lambda}(f;x,y)\in C(\mathbb{R}^2)$,

б) $S_{M,N,\lambda}(f;X_i,Y_j)=Z_{i,j}$, $i=\overline{1,M}$, $j=\overline{1,N}$.

Доведення. Введемо позначення $d_{k,l}(x,y)=\sqrt{(x-X_k)^2+(y-Y_l)^2}$. Очевидно,

$$d_{k,l}(x,y)>0 \quad \forall (x,y)\in\mathbb{R}^2,\ (x,y)\neq(X_k,Y_l),$$

$$d_{k,l}(X_k,Y_l)=0,\ k=\overline{1,M},\ l=\overline{1,N}.$$

Тоді оператор $S_{M,N,\lambda}(f;x,y)$ можна написати у вигляді

$$S_{M,N,\lambda}(f;x,y)=\begin{cases} \dfrac{\sum\limits_{k=0}^{M}\sum\limits_{l=0}^{N} f(X_k,Y_l)\left(d_{k,l}(x,y)\right)^{-\lambda}}{\sum\limits_{i=0}^{M}\sum\limits_{j=0}^{N}\left(d_{i,j}(x,y)\right)^{-\lambda}}, & d_{k,l}(x,y)\neq 0\ \forall k=\overline{1,M}, l=\overline{1,N}, \\ & = \\ f(X_i,Y_j), & \exists i\in\{1,...,M\}, j\in\{1,...,N\}: \\ & (x-X_i)^2+(y-Y_j)^2=0, \end{cases}$$

$$=\begin{cases} \dfrac{\sum\limits_{k=0}^{M}\sum\limits_{l=0}^{N} f(X_k,Y_l)L_{k,l,\lambda}(x,y)}{\sum\limits_{i=0}^{M}\sum\limits_{j=0}^{N} L_{k,l,\lambda}(x,y)}, & d_{k,l}(x,y)\neq 0\ \forall k=\overline{1,M}, l=\overline{1,N}, \\ f(X_i,Y_j), & \exists i\in\{1,...,M\}, j\in\{1,...,N\}: \\ & (x-X_i)^2+(y-Y_j)^2=0, \end{cases}$$

де

$$L_{k,l,\lambda}(x,y)=\prod_{i=1,i\neq k}^{M}\prod_{j=1,j\neq l}^{N}(d_{i,j}(x,y))^{\lambda}\ .$$

Очевидно, що

$$L_{k,l,\lambda}(X_k,Y_l)=\prod_{i=1,i\neq k}^{M}\prod_{j=1,j\neq l}^{N}(d_{i,j}(X_k,Y_l))^{\lambda}>0\,,$$

$$L_{k,l,\lambda}(X_p,Y_q)=\prod_{i=1,i\neq k}^{M}\prod_{j=1,j\neq l}^{N}(d_{i,j}(X_p,Y_q))^{\lambda}=0\quad\forall(X_p,Y_q)\neq(X_k,Y_l)\,.$$

Це дозволяє стверджувати, що $\sum_{i=0}^{M}\sum_{j=0}^{N}L_{k,l,\lambda}(x,y)>0\ \ \forall(x,y)\in\mathbb{R}^2$, оскільки сума невід'ємних функцій може дорівнювати нулю лише в точці, у якій всі доданки дорівнюють нулю. Згідно ж з написаними вище властивостями всі функції $L_{k,l,\lambda}(x,y)$ не можуть дорівнювати нулю одночасно. Таким чином, у формулі

$$\frac{\sum_{k=0}^{M}\sum_{l=0}^{N}f(X_k,Y_l)L_{k,l,\lambda}(x,y)}{\sum_{i=0}^{M}\sum_{j=0}^{N}L_{k,l,\lambda}(x,y)}$$

знаменник є додатною функцією і тому $S_{M,N,\lambda}(f;x,y)\in C(\mathbb{R}^2)$. Тобто, твердження а) теореми 3.1 доведено.

Для доведення твердження б) напишемо наступну послідовність рівностей

$$S_{M,N,\lambda}(f;X_p,Y_q)=\frac{\sum_{k=0}^{M}\sum_{l=0}^{N}f(X_k,Y_l)L_{k,l,\lambda}(X_p,Y_q)}{\sum_{i=0}^{M}\sum_{j=0}^{N}L_{k,l,\lambda}(X_p,Y_q)}=$$

$$= \frac{\sum_{k=0}^{M}\sum_{l=0}^{N} f(X_k, Y_l)\delta_{k,p}\delta_{l,q}}{\sum_{i=0}^{M}\sum_{j=0}^{N}\delta_{k,p}\delta_{l,q}} = \frac{f(X_p, Y_q)\delta_{p,p}\delta_{q,q}}{\delta_{p,p}\delta_{q,q}} = f(X_p, Y_q),\ p = \overline{1,M},\ q = \overline{1,N}.$$

Таким чином, твердження б) теореми 3.1 теж доведено.

Твердження 3.1 доведене.

Диференціюючи $S_{M,N,\lambda}(f;x,y)$ за x або за y можна переконатися, що для виконання умови $S_{M,N,\lambda}(f;x,y) \in C^1(\mathbb{R}^2)$ необхідно, аби показник степеня λ задовольняв нерівність $\lambda \geq 1$. Крім того, у випадку $\lambda = 2$, маємо $\operatorname{grad} S_{M,N,\lambda}(f;x,y) = 0 \ \ \forall (x,y) = (X_k, Y_l),\ k = \overline{1,M},\ l = \overline{1,N}$, оскільки тоді

$$L_{k,l,2}(x,y) = \prod_{i=1, i\neq k}^{M}\prod_{j=1, j\neq l}^{N}(d_{i,j}(x,y))^2 = \prod_{i=1, i\neq k}^{M}\prod_{j=1, j\neq l}^{N}((x - X_i)^2 + (y - Y_j)^2)$$

має нульовий градієнт у всіх точках $(X_p, Y_q),\ p \neq k,\ q \neq l$.

З геометричного погляду це означає, що при $\lambda = 2$ поверхня $z = S_{M,N,\lambda}(f;x,y)$ в околі вузлів $(X_p, Y_q),\ p = \overline{1,M},\ q = \overline{1,N}$, містить горизонтальні ділянки.

Зупинимося на недоліках зваженої формули за оберненими відстанями до вузлів, відомої як формула Дональда Шепарда [32].

Недолік 1. Якщо кількість заданих точок N є великою, то кількість арифметичних операцій Q для обчислення $z = S_{M,N,\lambda}(f;x,y)$ у одній точці є пропорційна N: $Q = cN$. Унаслідок цього метод може виявитися малоефективним або малопридатним на практиці.

Недолік 2. У запропонованому підході використовуються лише відстані $d_{k,l}(x,y)$ від точки $P(x,y)$ до точки $D_{k,l}(X_k, Y_l)$ і не залучаються градієнти наближуваної функції в точках $D_{k,l}$.

Недолік 3. Умова нульового градієнта в кожній вузловій точці $D_{k,l}$ накла-

дає небажані обмеження на форму наближуваної поверхні.

Недолік 4. Обчислювальна похибка стає істотною в околі точок $D_{k,l}$, оскільки домінує ефект віднімання двох майже рівних чисел.

Далі вважаємо, що функція $u = f(x,y,z)$ описує просторовий розподіл концентрації (вмісту) забруднювача в ґрунтовому середовищі, і задано N прямих, що є пунктами відбору проб ґрунту,

$$\Gamma_k : \{(x,y,z) : x = X_k,\ y = Y_k,\ z \le 0\},\ \ k = \overline{1,N},$$

та N функцій $\gamma_k(z) = f(X_k, Y_k, z)$, $k = \overline{1,N}$, залежних від змінної z, які отримано на підставі аналізу проб/кернів ґрунту (або результатів з пунктів відбору проб ґрунту) у точках поверхні з координатами (X_k, Y_k), $k = \overline{1,N}$.

Тобто в межах роботи припускається, що кожному пункту відбору проб ґрунту відповідає не окреме число, а функція, яка є характеристикою розподілу концентрації заданого забруднювача залежно від глибини z. При цьому така функція може бути розривною за змінною z (глибиною).

Введемо до розгляду математичну модель просторового розподілу забруднювача в ґрунті у вигляді

$$S_{M,\lambda}(\{\gamma_p\}; x,y,z) = \frac{\sum_{k=1}^{M} \gamma_k(z) L_{k,\lambda}(x,y)}{\sum_{k=1}^{M} L_{k,\lambda}(x,y)},$$

$$L_{k,\lambda}(x,y) = \prod_{j=1,\, j\neq k}^{M} (d_j(x,y))^{\lambda},$$

$$d_j(x,y) = \sqrt{(x - X_j)^2 + (y - Y_j)^2}.$$

Теорема 3.8. Якщо $\gamma_k(z) \in C[-\infty, 0)$, $k = \overline{1,M}$, то

$$S_{M,\lambda}(\{\gamma_p\}; x, y, z) \in C(\mathbb{R}^3);\quad S_{M,\lambda}(\{\gamma_p\}; X_k, Y_k, z) = \gamma_k(z),\ k = \overline{1,M}.$$

Доведення. Використовуючи позначення $h_{p,\lambda}(x,y)=\dfrac{L_{p,\lambda}(x,y)}{\sum\limits_{k=1}^{M}L_{k,\lambda}(x,y)}$ і враховуючи наступні властивості допоміжних функцій

$$L_{p,\lambda}(x,y)\ge 0,\ \ L_{p,\lambda}(x,y)\in C(\mathbb{R}^2),$$

$$h_{p,\lambda}(x,y)\ge 0,\ p=\overline{1,M}\ ,\ \ h_{p,\lambda}(X_k,Y_k)=\delta_{k,p},\ k,\ p=\overline{1,M}\ ,$$

можна зробити висновок, що $S_{M,\lambda}(\{\gamma_p\};x,y,z)\in C(\mathbb{R}^3)$.

Для доведення другого твердження теореми 3.6 напишемо наступну послідовність рівностей

$$S_{M,\lambda}(\{\gamma_p\};X_p,Y_p,z)=\frac{\sum\limits_{k=1}^{M}\gamma_k(z)L_{k,\lambda}(X_p,Y_p)}{\sum\limits_{k=1}^{M}L_{k,\lambda}(X_p,Y_p)}=$$

$$=\frac{\sum\limits_{k=1}^{M}\gamma_k(z)\delta_{k,p}}{\sum\limits_{k=1}^{M}\delta_{k,p}}=\frac{\gamma_p(z)\delta_{p,p}}{\sum\limits_{k=1}^{M}\delta_{p,p}}=\gamma_p(z),\ p=\overline{1,M}\ .$$

Таким чином, теорема 3.8 доведена.

3.6 Математичне моделювання просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методом узагальненої глобальної інтерполяційної формули О. М. Литвина

Розглянемо інтерлінаційні оператори для довільної $f\in C(\mathbb{R}^3)$:

$$O_{M,\lambda}(f;x,y,z)=\sum_{k=1}^{M}\gamma_k(z)\ell_{M,k,\lambda}(x,y),\ \lambda\ge 1,\ M=2,3,...,$$

$$\ell_{M,k,\lambda}(x,y)=\prod_{i=1,i\neq k}^{M}\frac{d_i(x,y)^{\lambda}}{d_{i,k}^{\lambda}}=\frac{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_i(x,y)^{\lambda}}{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_{i,k}^{\lambda}},$$

$$d_i(x,y)=\sqrt{(X_i-x)^2+(Y_i-y)^2}\,,\ d_{i,k}=\sqrt{(X_i-X_k)^2+(Y_i-Y_k)^2}\,,$$

які для випадку $\gamma_k(z)=\gamma_k,\ k=\overline{1,M}$, є інтерполяційними операторами на нерегулярній сітці вузлів, запропонованими О. М. Литвином у 1990 р. [33].

Теорема 3.9. Для кожної $f(x,y,z)\in C(\mathbb{R}^3)$ виконуються співвідношення

$$O_{M,\lambda}(f;x,y,z)\in C(\mathbb{R}^3),\quad O_{M,\lambda}(f;X_p,Y_p,z)=\gamma_p(z),\ p=\overline{1,M}\,.$$

Доведення. Дослідимо властивості допоміжних функцій $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$. Перш за все відмітимо, що знаменник $\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_{i,k}^{\lambda}$ у формулі для $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$ є сталою величиною і $d_{i,k}^{\lambda}>0\ \ \forall i,k\in\{1,...,M\},\ \lambda>0$, а чисельник є невід'ємною функцією $\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_i(x,y)^{\lambda}\geq 0$. Тому $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)\geq 0\ \ \forall k=\overline{1,M},\ \lambda>0$. Крім того,

$$\ell_{M,k,\lambda}(X_p,Y_p)=\prod_{i=1,i\neq k}^{M}\frac{d_i(X_p,Y_p)^{\lambda}}{d_{i,k}^{\lambda}}=\frac{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_i(X_p,Y_p)^{\lambda}}{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_{i,k}^{\lambda}}=\frac{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_{i,p}^{\lambda}}{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_{i,k}^{\lambda}}=\delta_{k,p},\ k,p=\overline{1,M}\,,$$

оскільки

$$\frac{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_{i,p}^{\lambda}}{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_{i,k}^{\lambda}}=\begin{cases}1, & p=k,\\ 0, & p=i,\ d_{i,i}=0.\end{cases}$$

Таким чином, $\ell_{M,k,\lambda}(X_p,Y_p)=\delta_{k,p}$, $k,p=\overline{1,M}$. Враховуючи це, можна написати наступну послідовність рівностей

$$O_{M,\lambda}(f;X_p,Y_p,z)=\sum_{k=1}^{M}\gamma_k(z)\ell_{M,k,\lambda}(X_p,Y_p)=\sum_{k=1}^{M}\gamma_k(z)\delta_{k,p}=\gamma_p(z),\ p=\overline{1,M}.$$

Теорема 3.9 доведена.

Враховуючи, що знаменники у формулі для $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$ є сталими числами, можна зробити висновок про те, що $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$ є поліномом степеня $(M-1)\lambda$ за змінними x, y, лише якщо $\lambda=2p$, $p=1,2,....$

Зауважимо, що базисні функції $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$ є також функціями координат точок $D_k(X_k,Y_k)$, $k=\overline{1,M}$: $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)=\ell_{M,k,\lambda}(x,y;X,Y)$ і залежать, природно, від розміщення цих координат $D_k(X_k,Y_k)$, $k=\overline{1,M}$, на площині.

Приклади показують, що використання $O_{M,\lambda}(f;x,y,z)$ з написаним вище виглядом допоміжних функцій

$$\ell_{M,k,\lambda}(x,y)=\frac{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_i(x,y)^{\lambda}}{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}d_{i,k}^{\lambda}}$$

може призвести до різких змін між точками $D_k(X_k,Y_k)$, $k=\overline{1,M}$, оскільки чисельник в них є необмеженою величиною при $M\to\infty$. Це твердження є наслідком того, що оператори $O_{M,\lambda}(f;x,y,z)$ є очевидними узагальненнями поліноміальних інтерполяційних операторів Лагранжа на випадок нерегулярно розміщених вузлів. Існують теореми Вейєрштрасса, які стверджують, що на відрізку $[a,b]$ кожну неперервну функцію можна наблизити із заданою точністю $\varepsilon>0$ алгебраїчним поліномом деякого степеня n. Але інтерполяційні оператори Лагранжа, як відомо з [61, 97, 98], збігаються не для кожної неперервної функції.

Наприклад, доведено, що інтерполяційний поліном Лагранжа з рівномірно розміщеними на інтервалі $[-1,1]$ вузлами для функції $f(x)=|x|$ не збігається до цієї функції. Тому, нижче розглянемо ще інші формули для $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$.

Теорема 3.10. Якщо у формулі для $O_{M,\lambda}(f;x,y,z)$ покласти

$$\ell_{M,k,\lambda}(x,y)=\frac{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}[(x-X_i)(X_k-X_i)+(y-Y_i)(Y_k-Y_i)]^{\lambda}}{\prod\limits_{i=1,\,i\neq k}^{M}[(X_k-X_i)^2+(Y_k-Y_i)^2]^{\lambda}},$$

то функція $O_{M,\lambda}(f;x,y,z)$ є інтерполяційним поліномом степеня $(M-1)\lambda$ за змінними x, y, якщо $\lambda\in\mathbb{N}$ і $O_{M,\lambda}(f;X_k,Y_k,z)=\gamma_k(z)$, $k=\overline{1,M}$.

Доведення. Перш за все, відмітимо, що при $\lambda\in\mathbb{N}$ чисельник у формулі для допоміжних функцій $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$ є поліномом степеня $(M-1)\lambda$ за змінними x, y. Враховуючи, що знаменники у формулі для $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$ є сталими числами, можна зробити висновок про те, що $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$ є поліномом степеня $(M-1)\lambda$ за змінними x, y. Тобто і $O_{M,\lambda}(f;x,y,z)$ є поліномом степеня $(M-1)\lambda$ за змінними x, y, якщо $\lambda\in\mathbb{N}$.

Для доведення того, цей поліном є інтерполяційним, дослідимо допоміжні функції $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$. Для цього напишемо наступну послідовність рівностей

$$\ell_{M,k,\lambda}(X_p,Y_p)=\frac{\prod\limits_{i=1,\,i\neq k}^{M}[(X_p-X_i)(X_k-X_i)+(Y_p-Y_i)(Y_k-Y_i)]^{\lambda}}{\prod\limits_{i=1,\,i\neq k}^{M}[(X_k-X_i)^2+(Y_k-Y_i)^2]^{\lambda}}=\begin{cases}1, & p=k,\\ 0, & p\neq k,\ p=\overline{1,M}.\end{cases}$$

Таким чином, і при такому виборі $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$ виконуються співвідношення $\ell_{M,k,\lambda}(X_p,Y_p)=\delta_{k,p}$, $k,p=\overline{1,M}$. Повторюючи доведення теореми 3.8, отримаємо

$$O_{M,\lambda}(f;X_p,Y_p,z)=\gamma_p(z),\ p=\overline{1,M}\ .$$

Теорема 3.10 доведена.

Якщо ж λ є раціональним числом $\lambda=\dfrac{m}{n}$, то функції $\ell_{M,k,\lambda}(x,y)$ можуть приймати дійсні значення лише при умовах $m\in\mathbb{R}$, $n=2k-1$, $k=1,2,...$, оскільки вираз $(x-X_i)(X_k-X_i)+(y-Y_i)(Y_k-Y_i)$ може бути як додатним, так і від'ємним.

Теорема 3.11. Якщо у формулі для $O_{M,\lambda}(f;x,y,z)$ покласти

$$\ell_{M,k,\lambda}(x,y)=\frac{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}\left|(x-X_i)(X_k-X_i)+(y-Y_i)(Y_k-Y_i)\right|^{\lambda}}{\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{M}((X_k-X_i)^2+(Y_k-Y_i)^2)^{\lambda}},$$

то оператор $O_{M,\lambda}(f;x,y,z)$ теж буде оператором інтерлінації, якщо $\lambda>0$ і

$$O_{M,\lambda}(f;X_k,Y_k,z)=\gamma_k(z),\ k=\overline{1,M}\ .$$

Доведення проводиться аналогічно доведенню теореми 3.10, оскільки

$$\ell_{M,k,\lambda}(X_p,Y_p)=\frac{\prod\limits_{i=1,\,i\neq k}^{M}\left|(X_p-X_i)(X_k-X_i)+(Y_p-Y_i)(Y_k-Y_i)\right|^{\lambda}}{\prod\limits_{i=1,\,i\neq k}^{M}[(X_k-X_i)^2+(Y_k-Y_i)^2]^{\lambda}}=\begin{cases}1, & p=k,\\ 0, & p\neq k,\ p=\overline{1,M}.\end{cases}$$

Висновки до розділу 3

1. У розділі досліджено математичні моделі просторового розподілу забруднювача в ґрунтовому середовищі, побудовані на основі інтерлінації функцій $f(x,y,z)$ трьох змінних. Розглянуто кусково-поліноміальні інтерлінаційні схеми, зокрема кусково-лінійні та кусково-квадратичні апроксимації, які дозво-

ляють відновлювати значення концентрації між вертикальними профілями або пунктами моніторингу.

2. Систематизовано операторний підхід до реконструкції тривимірних полів концентрацій за неповними даними спостережень. Показано, що інтерлінаційні та інтерфлетаційні оператори є природним інструментом у випадку, коли експериментальна інформація задана не лише в окремих точках, а на лініях, профілях або пунктах відбору проб ґрунту.

3. Для порівняння з інтерлінаційним підходом розглянуто класичну формулу Д. Шепарда і узагальнена інтерполяційна формула О. М. Литвина, та її модифікований варіант із локалізованими вагами. Такі методи використовуються як базові точкові інтерполяційні схеми для нерегулярно розміщених даних і дозволяють оцінити ефективність інтерлінаційного відновлення у порівнянні з класичними зваженими підходами.

4. Отримані результати підтверджують доцільність використання інтерлінації як основного апарату реконструкції просторових полів забруднення ґрунту за неповними даними спостережень. Методи Д. Шепарда у цій схемі доцільно розглядати як порівняльні, допоміжні або контрольні інструменти для оцінювання якості реконструкції.

5. Результати розділу створюють основу для подальшої чисельної перевірки, побудови карт і зрізів забруднення, аналізу похибок реконструкції та порівняння різних методів відновлення просторових полів у прикладних задачах екологічного моніторингу.

Основні результати третього розділу опубліковані у роботах автора [3, 4, 6 – 8, 10, 11, 134, 136, 137], присвячених застосуванню інтерлінації функцій трьох змінних, класичного та модифікованого методу Шепарда для реконструкції просторових полів забруднення ґрунтового середовища за неповними даними спостережень.

Список джерел, які використано у даному розділі, наведено у повному списку використаних джерел [3, 4, 7, 8, 10, 11, 21 – 23, 32, 33, 57 – 63, 65, 66, 72, 75, 79, 80, 93, 94, 97, 98, 104, 106, 107, 126, 128, 129].

4 ОБЧИСЛЮВАЛЬНА РЕАЛІЗАЦІЯ ТА АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ ЗАПРОПОНОВАНИХ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ

4.1 Обчислювальна схема перевірки запропонованих моделей

У цьому розділі результати теоретичних викладок перевіряються за допомогою двох взаємодоповнювальних обчислювальних сценаріїв. Перший сценарій стосується моделювання перенесення забруднювачів у повітряному середовищі та реалізується у слабкій постановці методу Гальоркіна з подальшою скінченно-елементною дискретизацією. Другий сценарій пов’язаний із реконструкцією тривимірного поля забруднення ґрунту за системою профілів моніторингу та передбачає порівняння інтерлінаційного підходу з класичним і модифікованим методами Шепарда. Для першого сценарію використовуються джерела з FEM/слабких постановок та авторські праці щодо повітряної моделі [1, 2, 5, 9, 34 – 37, 77, 78]; для другого сценарію – праці з інтерлінації та методів Шепарда [4, 7, 8, 10, 21, 22, 32, 106, 107, 126].

Метою першого сценарію є чисельна перевірка побудованої в розділі 2 математичної моделі. Зокрема, перевіряється, що слабка постановка та її скінченно-елементна реалізація приводять до відтворюваної алгебраїчної системи, у якій коректно враховуються джерельні члени, крайові умови, реакційні внески та постобробка дифузійних потоків.

Метою другого сценарію є оцінювання якості відновлення тривимірного поля концентрацій забруднювача між профілями відбору проб забруднення ґрунту (див. розділ 3). Для цього інтерлінаційний оператор порівнюється з класичним методом Шепарда та його модифікованим варіантом. Таке порівняння дозволяє оцінити переваги профільно-орієнтованого відновлення у випадку, коли експериментальні дані мають структуру вертикальних ліній спостереження. Теоретичну основу такого порівняння становлять інтерлінація функцій та апроксимаційні властивості операторів Шепарда [21, 22, 32, 106, 107, 126].

У тексті розділу 4 наведено чисельні показники, які характеризують результати обчислювальних експериментів. Для сценарію скінченно-елементного моделювання у слабкій постановці Гальоркіна [1, 2, 5, 9, 19, 34 – 37, 78] використовуються максимальні концентрації, інтегральні концентрації та дифузійні потоки на межі області.

Для задачі реконструкції ґрунтового поля використовуються максимальна абсолютна похибка, середня абсолютна похибка та середньоквадратична похибка. Вибір показників похибки узгоджується зі стандартною практикою чисельного порівняння реконструкцій та задач параметричного оцінювання [19, 41].

Обидва сценарії запускаються послідовно. Спочатку формується розрахунок для повітряної моделі: будується сітка, збираються FEM-матриці [1, 2, 5, 9, 34 – 37], вводяться джерела, розв’язується нелінійна система для другої компоненти і лінійна система для першої компоненти. Після цього виконується реконструкція ґрунтового поля: задається контрольне 3D поле, обираються вертикальні профілі моніторингу, обчислюються три реконструкції та порівнюються похибки. Для задачі реконструкції ґрунтового поля порівняльний аналіз виконано на основі профільної інтерлінації, класичного методу Шепарда та його модифікованих варіантів [4, 7, 8, 10, 21, 22, 32, 106, 107, 126].

Наведемо алгоритм побудови загальної математичної моделі забруднення повітря та ґрунту в конкретній області.

Крок 1. Задати параметри контрольного сценарію для повітряної задачі та задачі реконструкції ґрунту.

Крок 2. Побудувати FEM-сітку для одновимірної повітряної моделі [34 – 37].

Крок 3. Зібрати матриці дифузії, маси, за потреби конвекції та праві частини з точковими джерелами [34 – 37].

Крок 4. Розв’язати нелінійну задачу для компоненти C_2 методом Ньютона [19].

Крок 5. Після знаходження C_2 розв’язати лінійну задачу для компоненти C_1.

Крок 6. Відновити похідні, дифузійні потоки, максимальні та інтегральні модельні показники, після чого сформувати таблиці і графіки профілів концентрацій.

Крок 7. Задати контрольне тривимірне поле забруднення ґрунту, розміщення вертикальних профілів моніторингу та робочий горизонт/зріз, на якому порівнюються реконструкції.

Крок 8. Побудувати реконструкції поля ґрунтового забруднення за допомогою профільної трикутної інтерлінації, IDW-бази за профілями, класичного методу Шепарда, 3D та модифікованого локального методу Шепарда [4, 7, 8, 10, 21, 22, 32, 106, 107, 126].

Крок 9. Обчислити локальні, середні, середньоквадратичні та інтегральні похибки реконструкцій, перевірити точне відтворення константних і афінних полів, а також оцінити збіжність при зміні кількості профілів [19, 35, 36, 41, 65 – 68].

Крок 10. Підготувати підсумкові таблиці, графіки, порівняльні характеристики та матеріали для розділу 4 і додатків.

У Додатках Б, В, Г, Д, Е наведені допоміжні розрахункові таблиці та додаткові чисельні результати.

4.2 Результати скінченно-елементного моделювання перенесення забруднювачів у повітрі

У цьому підрозділі наведено результати роботи першої частини алгоритму – побудови математичної моделі перенесення забруднювачів у повітряному середовищі. Розрахунок виконано для двох взаємопов’язаних постановок: редукованої стаціонарної дифузійно-реакційної схеми, дискретизованої методом скінченних елементів і розв’язуваної модифікованим методом Ньютона, та повної лінеаризованої конвективно-дифузійно-реакційної моделі, записаної у слабкій формі Гальоркіна [1, 2, 5, 9, 19, 34 – 37, 77, 78].

Редукована скінченно-елементна схема з модифікованим методом Ньютона використовується як основний контрольний розрахунок для перевірки варіаційної постановки, реакційного закону, збіжності нелінійної ітераційної процедури та коректності P_1-скінченно-елементної дискретизації. У цій постановці

спочатку розв'язується нелінійна задача для компоненти C_2 (SO_3), після чого при знайденому профілі C_2 визначається компонента C_1 (CO_2) [19, 34 – 37].

Задаємо вхідні данні, які згрупуємо в окрему таблицю 4.1, в якій наведено довжина області, кількість елементів, коефіцієнти дифузії, граничні коефіцієнти, параметри реакції, координати та інтенсивності джерел. Така форма забезпечує однозначне відтворення контрольного сценарію та пов'язує числові значення з відповідними членами математичної моделі.

Чисельна реалізація даної математичної моделі була реалізована на мові програмування Python згідно з теорією у розділі 2. Основні частини програми наведенні у Додатку Б.

Нелінійна система для компоненти C_2 розв'язується за п'ять ітерацій методу Ньютона, що свідчить про чисельну стійкість побудованої схеми для заданого набору параметрів [19].

Для зіставлення редукованої варіаційної схеми з фізично повнішою постановкою додатково розглянуто повну лінеаризовану конвективно-дифузійно-реакційну модель у слабкій формі Гальоркіна. У цьому випадку враховується конвективне перенесення з ефективною швидкістю $u = 0.35$. Важливо підкреслити, що така постановка використовується як слабка форма повної моделі, яка дозволяє оцінити вплив конвективного внеску на профілі концентрацій [1, 2, 34 – 37, 77, 78].

Порівняння, наведене в таблиці 4.2, показує відмінність між двома рівнями математичної моделі. Редукована скінченно-елементна схема з модифікованим методом Ньютона на базі варіаційного методу Рітца використовується як контрольна дифузійно-реакційна постановка для перевірки варіаційного функціонала, нелінійного реакційного закону та збіжності ітераційного процесу. Натомість повна модель у слабкій формі Гальоркіна [1, 2, 5, 9, 19, 34 – 37] враховує додаткове конвективне перенесення і тому відображає фізично повнішу постановку задачі.

Отримані значення максимумів CO_2 та SO_3 демонструють, що врахування конвективного члена змінює профіль розподілу концентрацій. Тому зістав-

лення цих двох постановок є важливим: воно дозволяє відокремити редукований контрольний чисельний приклад від повнішої конвективно-дифузійно-реакційної моделі та пояснює доцільність використання обох рівнів опису.

Таблиця 4.1 – Задання розрахункової області і фізичних коефіцієнтів

Параметр	Значення, походження та роль у моделі
$L = 1000$ м	Довжина одновимірної розрахункової області; задає масштаб перенесення від джерел до вихідної межі
$M = 120$	Кількість скінченних елементів у базовому сценарії; додатково перевіряються $M = 60$ і $M = 240$
$D_1 = 38,\ D_2 = 30$	Ефективні коефіцієнти дифузійного згладжування для компонент C_1 (CO_2)та C_2 (SO_3)
$\alpha_1 = 0.06,$ $\alpha_2 = 0.05$	Коефіцієнти робінівського зв'язку на вході області; задають вплив фонової концентрації
$C^{in} = (0.2;\ 0.1)$	Фонові вхідні значення для двох компонент; у прикладі трактуються як модельні надлишкові концентрації
$v = u(x) = 0.35$	Швидкість конвективного перенесення у повній слабкій постановці Гальоркіна, яка використовується для порівняння.
$\beta = 0.18$	Коефіцієнт зв'язку між C_2 і C_1 у редукованій двоетапній схемі
$k_{loss} = 0.018$	Лінійний реакційний/осаджувальний коефіцієнт для C_2; також формує внесок у рівняння для C_1
$k_m = 0.22,$ $K_m = 8.0$	Параметри насичувального реакційного закону типу Міхаеліса-Ментен
$q_m,\ x_k$	Інтенсивності та координати точкових джерел; вводяться у слабку форму через значення P_1-базисних функцій

Таблиця 4.2 – Порівняння редукованої скінченно-елементної схеми Рітца з модифікованим методом Ньютона та повної моделі у слабкій постановці методу Гальоркіна

Показник	Редукована FEM/Newton-схема	Повна модель у слабкій формі Гальоркіна
Тип постановки	дифузійно-реакційна редукована модель	лінеаризована конвективно-дифузійно-реакційна слабка форма
Конвективний член	не враховується	враховується, $u = 0{,}35$
Макс. C_1 (CO_2)	14,02174947	7,82873004
Макс. C_2 (SO_3)	4,15502912	3,83125850
Норма нев'язки $\|\| F_2(C_2^{(s)}) \|\|_\infty < \varepsilon_F$.	$1{,}96 \cdot 10^{-14}$ / $3{,}95 \cdot 10^{-14}$	$3{,}95 \cdot 10^{-14}$
Призначення	основний контрольний розрахунок для функціонала (2.16)	порівняння з фізично повнішою слабкою постановкою

Наведені в табл. 4.3 результати характеризують поведінку модельних компонент CO_2 та SO_3 у редукованій скінченно-елементній постановці з модифікованим методом Ньютона, тобто фактично контрольної задачі типу Рітца/FEM для редукованої дифузійно-реакційної моделі. Максимальні значення концентрацій дають змогу оцінити локальні пікові рівні модельного розподілу, інтегральні концентрації відображають сумарну насиченість розрахункової області відповідною компонентою, а дифузійний потік на правій межі характеризує інтенсивність вихідного перенесення через край області. Отримана різниця пояснюється тим, що додавання конвективного перенесення змінює баланс між локальним накопиченням, дифузійним розсіюванням і реакційними перетвореннями [19, 34 – 37, 41].

Таблиця 4.3 – Результати скінченно-елементного моделювання перенесення забруднювачів у повітрі

Компонент	Максимальна нормована/надлишкова концентрація	Інтегральний модельний показник	Вихідний дифузійний потік на правій межі
CO_2	14,02174947	8590,87174337	0,00000264
SO_3	4,15502912	337,24057258	0,00004518

Значення 14,02174947 для CO_2 та 4,15502912 для SO_3 не задаються як зовнішні фізичні константи і не беруться з таблиць атмосферного фону. Тому ці величини характеризують амплітуду модельного відгуку системи на заданий сценарій, а не абсолютну концентрацію забруднювачів у реальному повітрі.

Ці величини не слід інтерпретувати як безпосередні атмосферні вимірювання або абсолютні екологічні нормативи. Вони є результатами контрольного чисельного експерименту для перевірки коректності редукованої скінченно-елементної схеми з модифікованим методом Ньютона, узгодженості нелінійного реакційного закону та чисельної стійкості P_1-скінченно-елементної дискретизації. У подальшому така схема може бути використана як базовий обчислювальний приклад для параметричної ідентифікації, сценарного аналізу або дослідження впливу характеристик джерел забруднення [41].

Для переходу від таких нормованих/надлишкових величин до фізичних одиниць, наприклад, ppm або мг/м³, необхідне окреме калібрування за даними спостережень: реальними фоновими концентраціями, метеорологічними умовами, потужностями джерел, параметрами турбулентного перенесення та хімічної кінетики. У межах цього прикладу метою є не екологічне нормування, а перевірка узгодженості математичної постановки, дискретизації та програмної реалізації.

На рисунку 4.1 зображено одновимірну розрахункову область повітряної моделі з точковими джерелами та крайовими умовами, яка використовується для слабкої постановки Гальоркіна і FEM-дискретизації. *1D*-профіль уздовж напрямку

перенесення; точкові джерела входять у вузлові рівняння через P_1-базис.

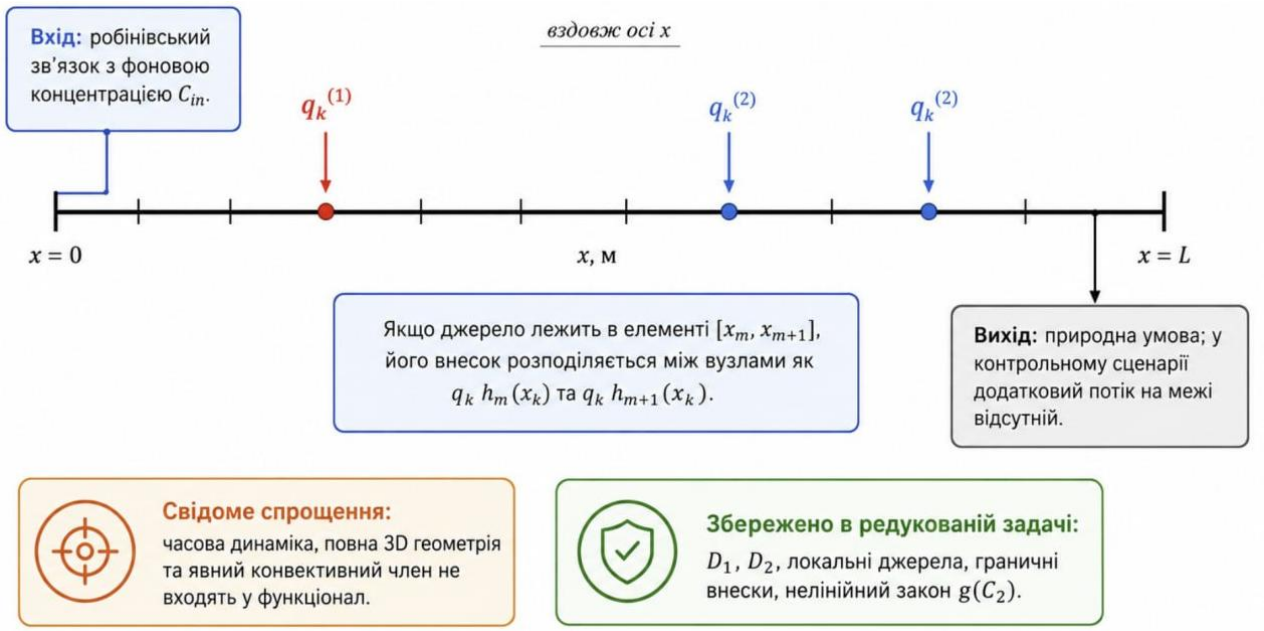

Рисунок 4.1 – Схема одновимірної розрахункової області повітряної моделі з точковими джерелами та крайовими умовами

На рис. 4.1 показано, як фізичні елементи задачі переходять у чисельну форму: вузли сітки задають P_1-апроксимацію, точкові джерела розподіляються між двома сусідніми вузлами через значення базисних функцій, а крайові умови задають вхідний фоновий зв'язок і контроль вихідного потоку [34 – 37].

Повна модель перенесення забруднювачів у повітрі ближча до реального процесу, бо враховує конвективне перенесення, дифузійне перемішування, реакції, джерела і крайові умови. Для програмного додатку використано редуковану постановку, оскільки вона дає однозначний функціонал, просту FEM-збірку і швидкий контрольний розрахунок. Тому отримані $C_1 = CO_2$ та $C_2 = SO_3$ трактуються як відносні або надлишкові модельні концентрації, а не як прямі польові вимірювання [1, 2, 5, 9, 34 – 37, 77, 78].

Основні спрощення, прийняті в редукованій постановці, а також їх математичний та обчислювальний зміст узагальнено в табл. 4.4.

Таблиця 4.4 – Масштаби, коефіцієнти та редукція фізичної моделі

Спрощення	Математичний і обчислювальний зміст
Стаціонарність	Часова динаміка не розв'язується; аналізується усталений профіль, що робить приклад придатним для FEM/Newton-перевірки
Одновимірна область	Простір зводиться до координати відстані від джерел; це ізолює вплив джерел, дифузії та реакції на форму профілю
Ефективні D_1, D_2	Складне турбулентне перемішування не моделюється окремо, а агрегується у коефіцієнти дифузійного згладжування
Закон $g(C_2(x))$	Детальна хімічна кінетика замінена насичувальним нелінійним законом із явною похідною для методу Ньютона
Відокремлення конвекції	Повна слабка постановка Гальоркіна з конвекцією використовується для порівняння, але не змішується з редукованим функціоналом
Нормовані концентрації	Це відносні/надлишкові модельні значення фізичні одиниці задаються калібруванням

На рисунку 4.2 окремо зіставлено профілі C_1 (CO_2) та C_2 (SO_3) отримані для редукованої варіаційної моделі на основі методу Рітца, методу скінченних елементів і модифікованого методу Ньютона, а також для повної слабкої постановки Гальоркіна з урахуванням конвекції. Різниця між кривими не є помилкою калібрування: редукована модель відповідає самоспряженій дифузійно-реакційній постановці без повного конвективного члена, тоді як повна модель додатково враховує конвективне перенесення.

Тут на рис. 4.2 зображено порівняння редукованого сценарію і повної слабкої постановки. Різниця між повною та редукованою постановками очікувана: повна гілка містить конвективне перенесення, тоді як редукована задача

використовується як контрольний FEM/Newton-сценарій для функціонала та обчислювальних перевірок.

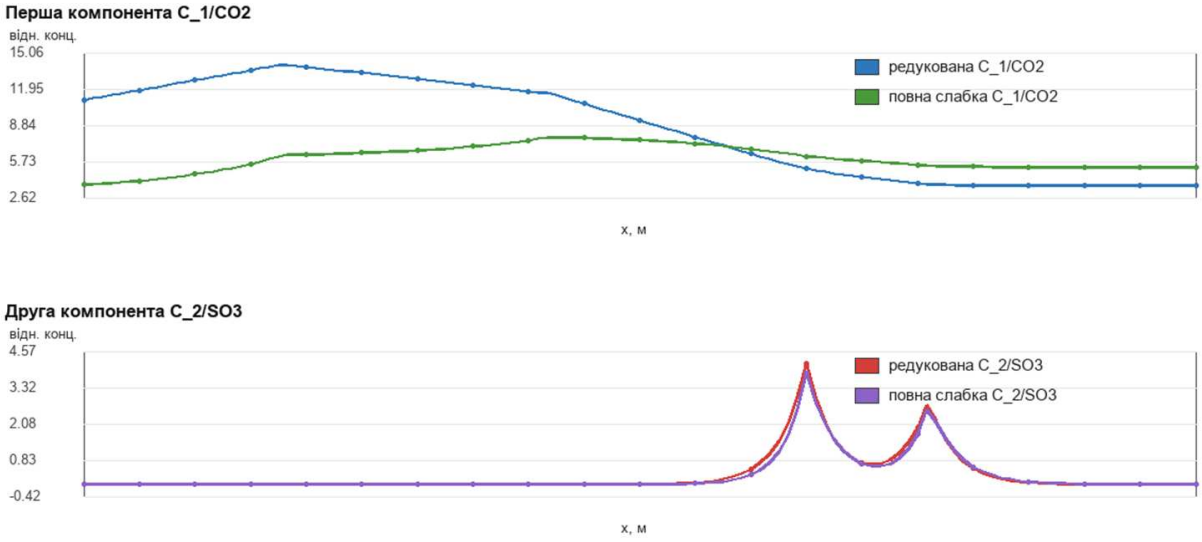

Рисунок 4.2 – Порівняння профілів редукованої FEM/Newton-моделі на базі варіаційного методу Рітца та повної слабкої постановки Гальоркіна

Максимум C_1 більший за максимум C_2, оскільки перша компонента в контрольному сценарії має ширший просторовий профіль і менше локалізується біля правих джерел. Компонента C_2 має два виражені локальні піки біля джерел, що видно на графіку. Кількість Newton-ітерацій дорівнює 5, тобто для заданих параметрів нелінійність реакційного закону не спричиняє нестійкої або повільної збіжності [19, 35, 36].

На рис. 4.3 зображене відносне відхилення максимумів від найдрібнішої сітки $M = 240$. Нульова лінія відповідає розрахунку на $M = 240$. Малі відхилення для $M = 60$ і $M = 120$ показують, що висновки не залежить від одного довільного кроку сітки [35, 36].

Тут показано не самі максимуми, а їх відносне відхилення від розрахунку на найдрібнішій сітці $M = 240$. Рисунок 4.3 показує що зміна кроку сітки не змінює якісний висновок контрольного розрахунку. Так один параметр змінюється на +/–20%, інші параметри залишаються базовими. Графік узгоджується з редукованою моделлю: збільшення джерел підвищує максимум C_2, сильніша

дифузія згладжує пік, а посилення реакційного поглинання зменшує залишкову концентрацію.

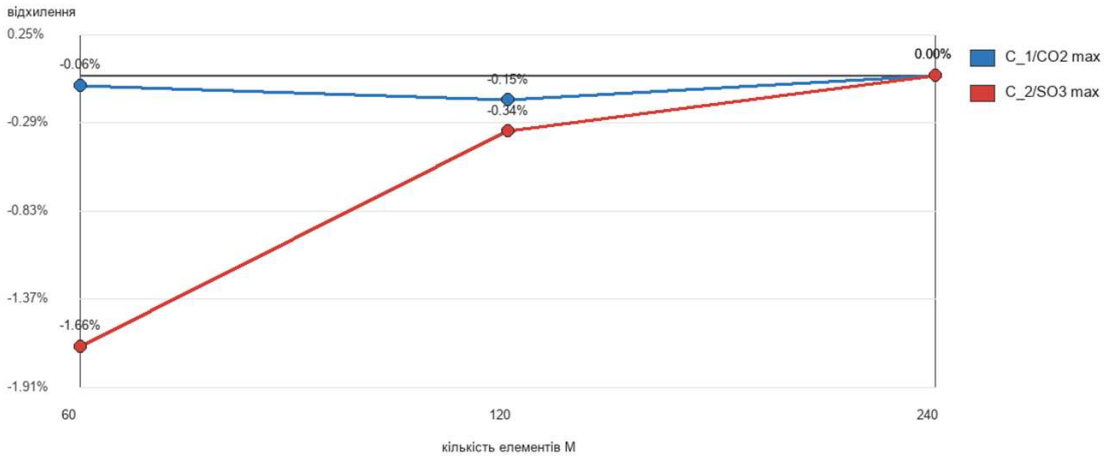

Рисунок 4.3 – Відносна перевірка сіткової збіжності для редукованого FEM/Newton-сценарію на базі варіаційного методу Рітца

Результати чутливості показують очікувану фізичну поведінку: підсилення джерел збільшує максимум C_2, збільшення дифузії розширює і згладжує профіль, а посилення реакційного поглинання зменшує залишкову концентрацію другої компоненти. Цей графік не задає реальні нормативні концентрації, а перевіряє знаки та відносну реакцію чисельної моделі на зміну параметрів [41].

4.3 Результати реконструкції тривимірного поля забруднення ґрунту

У задачі реконструкції тривимірного поля забруднення ґрунту порівняно три методи: інтерлінаційний підхід (підрозділ 3.1), класичний метод Шепарда (підрозділ 3.6) та модифікований метод Шепарда (підрозділ 3.6). Для кількісної оцінки якості реконструкції використано максимальну абсолютну похибку, середню абсолютну похибку та середньоквадратичну похибку (RMSE) [4, 7, 8, 10, 21, 22, 32, 106, 107, 126].

Обчислювальний експеримент проводиться в нормованій області $[0,1]^3$, де відомі лише вертикальні профілі, а не все поле концентрації. Значення поля

задаються як відносні концентрації забруднювача. Спрощення: координати нормовано до $[0,1]$, а фізичні розміри ділянки вводяться окремим перерахунком. Це дозволяє порівнювати оператори без змішування алгоритмічної похибки з невідомими польовими одиницями. У чисельному експерименті використано 64 вертикальні профілі, розміщені як регулярна сітка (8×8) у площині змінних (x, y), і 41 відлік за глибиною z на кожному профілі (див. рис. 4.4) [4, 7, 8, 10].

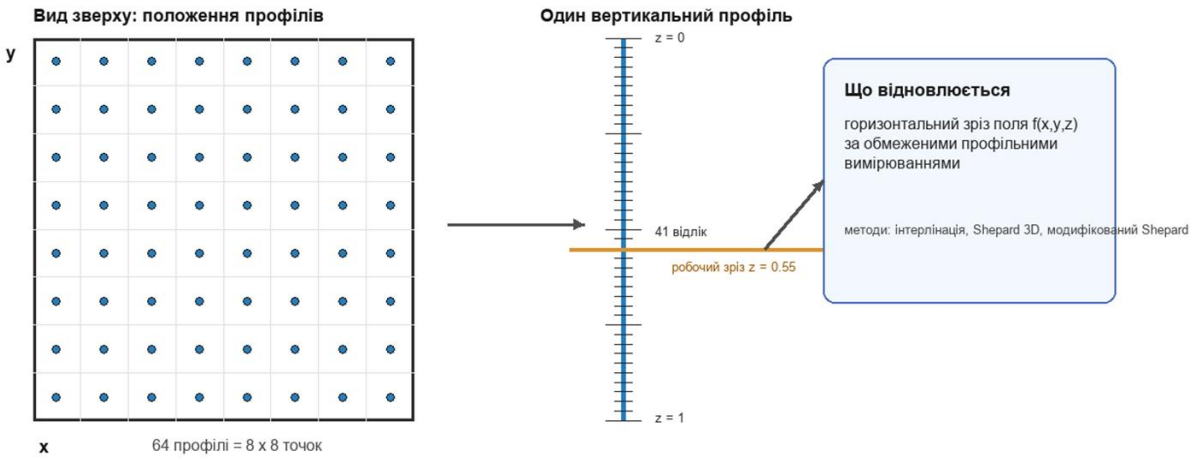

Рисунок 4.4 – Геометрія вертикальних профілів моніторингу та робочого зрізу поля забруднення ґрунту

В трикутній профільній інтерлінації для точки реконструкції (x, y, z) спочатку знаходиться трикутник структурованої сітки профілів, що містить горизонтальну проекцію на (x, y). На кожній з трьох вершин трикутника значення на глибині z отримується одновимірною інтерполяцією вздовж відповідного вертикального профілю. Після цього три значення комбінуються барицентричними вагами. Саме ця схема узгоджується з інтерлінаційною постановкою [21, 22, 65 – 68].

Метод IDW за профілями, тобто метод обернених зважених відстаней, передбачає усереднення із вагами, оберненими до відстані: спочатку значення відновлюються вздовж кожного вертикального профілю на заданій глибині, після чого виконується горизонтальне зважування між профілями. Тому цей підхід використовується як евристичний базовий метод для порівняння, а не як інтерлінаційний оператор у строгому сенсі теорем розділу 3 [32, 106, 107, 126].

Результати обчислюваного експерименту подані на рис. 4.5, 4.6. Програмна реалізація обчислюваного експерименту буде наведена в Додатку Б.

На рис. 4.5 подано теплові карти контрольного поля та результатів його реконструкції різними методами. Контрольне поле використовується як еталонне для порівняння, оскільки його значення відомі в усіх вузлах контрольної сітки. Теплові карти дають змогу візуально оцінити, наскільки кожний метод відтворює просторову структуру поля, зокрема положення локальних максимумів, плавний фоновий розподіл та області підвищених значень. Порівняння показує, що профільна інтерлінація та модифікований метод Шепарда краще зберігають локалізований пік контрольного поля, тоді як класичний метод Шепарда має тенденцію до більшого згладжування.

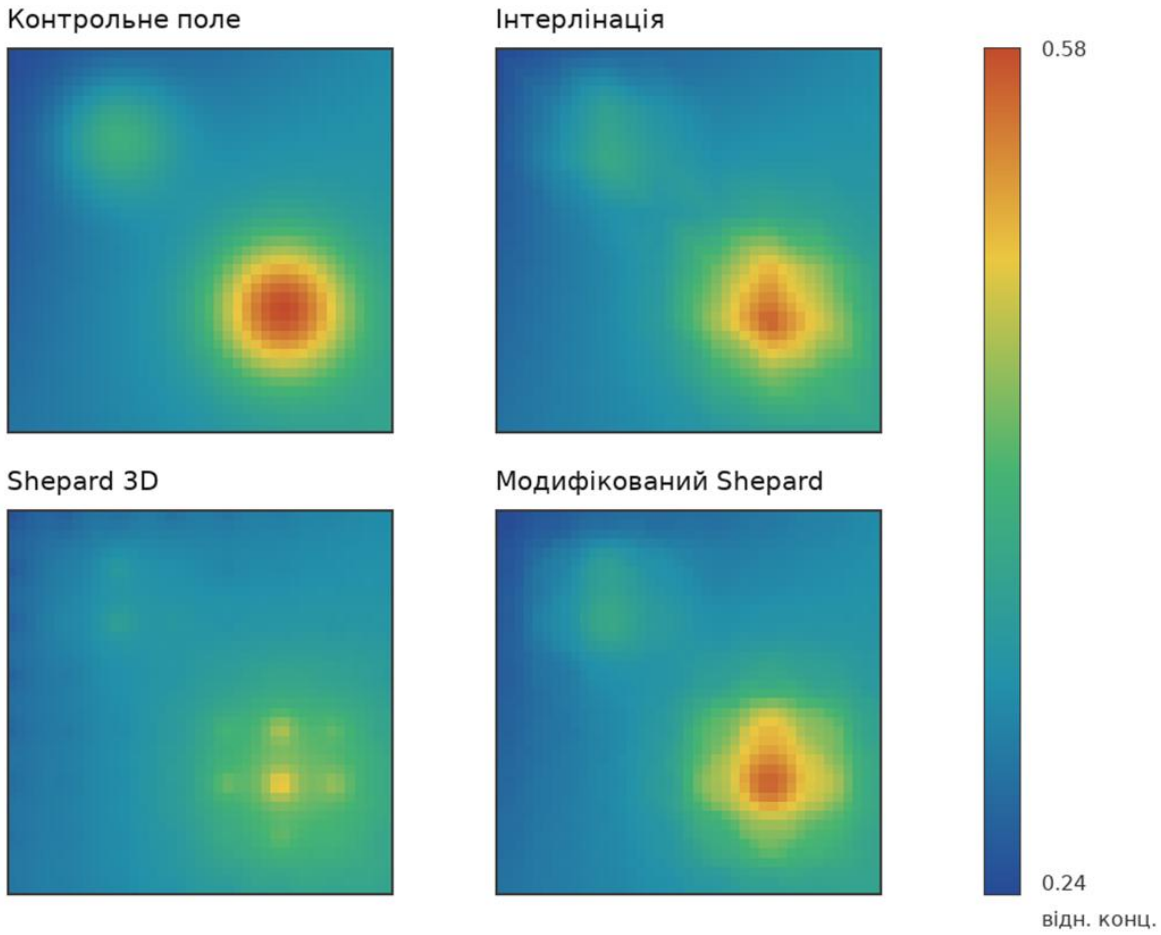

Рисунок 4.5 – Порівняння контрольного зрізу поля забруднення ґрунту та трьох реконструкцій

На рис. 4.6 зображено псевдо-3D-поверхні на одній шкалі для контрольного поля та методів реконструкції. Ця форма доповнює “heatmap”: вона показує, чи зберігає метод локальний пік та плавний фон контрольного поля.

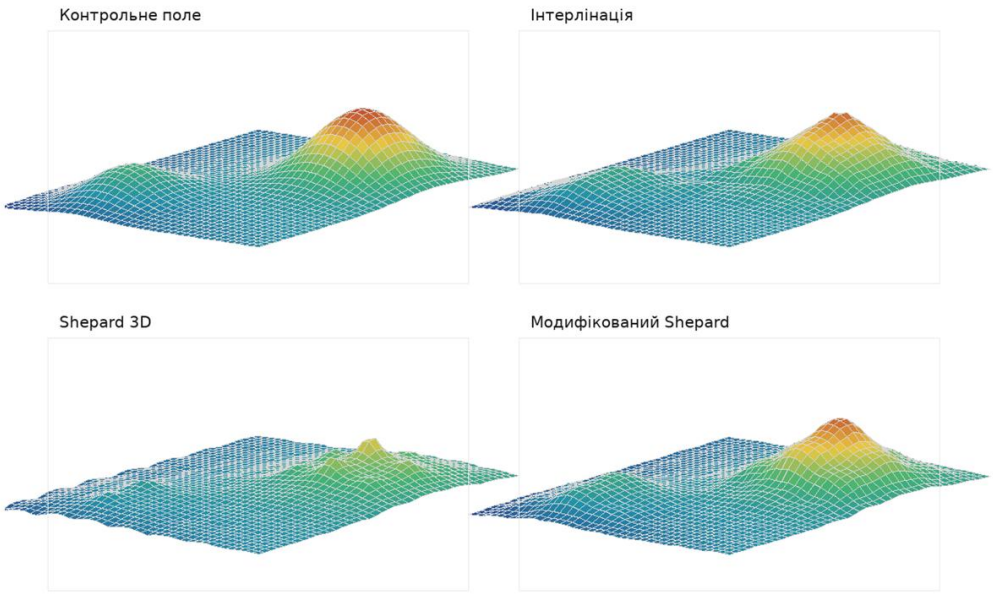

Рисунок 4.6 – Псевдо-3D подання зрізу контрольного поля та реконструкцій

На рисунку 4.7 наведено профільний розріз реконструкцій на робочому горизонті. Зріз $z = 0.55$, ряд $y = 0.33$: порівняння форми локального піка забруднення.

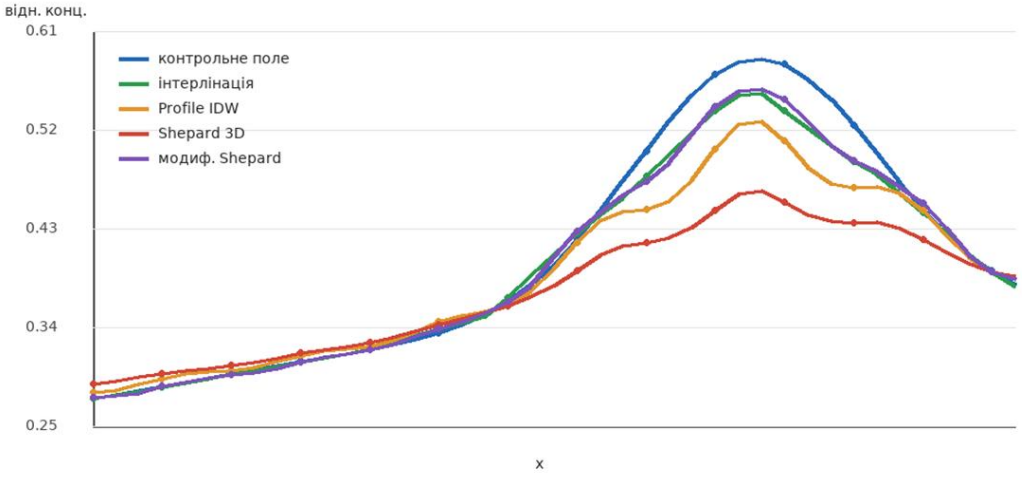

Рисунок 4.7 – Профільний розріз реконструкцій на робочому горизонті $z = 0.55$

Аналіз похибок трьох запропонованих методів представлений в табл. 4.5.

Таблиця 4.5 – Порівняння похибок реконструкції 3D поля забруднення ґрунту

Метод	Максимальна абсолютна похибка	Середня абсолютна похибка	Середньоквадратичну похибку (RMSE)
Інтерлінація	0,05996709	0,00524401	0,00939360
Метод Шепарда 3D	0,14837595	0,02160097	0,03085158
Модифікований метод Шепарда	0,05865419	0,00600197	0,00982028
IDW – baseline-метод	0,10350070	0,01035802	0,01764500

Отримані результати показують, що інтерлінаційний підхід забезпечує менші значення всіх трьох показників похибки порівняно з обома варіантами методу Шепарда. Це підтверджує доцільність використання інтерлінації для задач, у яких дані мають профільну структуру, тобто задані на вертикальних лініях спостережень або у свердловинах. [4, 7, 8, 10, 21, 22, 32, 106, 107, 126].

Для кількісного порівняння методів використано три показники: максимальну абсолютну похибку, середню абсолютну похибку та середньоквадратичну похибку (RMSE) [19, 41].

Отримані результати показують, що у контрольному сценарії профільних вимірювань інтерлінаційний підхід забезпечує менші значення всіх трьох показників похибки порівняно з класичним і модифікованим методами Шепарда. Модифікований метод Шепарда покращує результат порівняно з класичною формулою, однак за наведеними метриками все одно поступається інтерлінаційному підходу.

Це узгоджується з теоретичною мотивацією, викладеною у розділі 3. Якщо експериментальна інформація задана не довільною хмарою точок, а верти-

кальними профілями проб, то оператор інтерлінації краще використовує геометрію носіїв вимірювань. На відміну від методів Шепарда, які будують відновлення переважно за точковими значеннями та відстанями до них, інтерлінація враховує профільну структуру даних і тому точніше відтворює просторову зміну концентрації між свердловинами [21, 22, 32, 106, 107, 126].

Таким чином, у задачах реконструкції тривимірного поля забруднення ґрунту за даними профільного моніторингу інтерлінаційний підхід може розглядатися як основний метод відновлення, тоді як класичний і модифікований методи Шепарда доцільно використовувати як порівняльні або допоміжні схеми для оцінювання якості реконструкції.

На рисунку 4.8 зображена локалізація похибок реконструкції на зрізі поля ґрунту. Одна шкала абсолютних похибок для інтерлінації та IDW-baseline / Shepard методів. Профільна IDW-база близька до базової ідеї методу Шепарда, оскільки також використовує ваги, обернено пропорційні відстані. Однак у цій роботі вона застосовується не до всієї тривимірної хмари вимірювань, а до вертикальних профілів: спочатку значення відновлюється вздовж кожного профілю на фіксованій глибині, а потім виконується двовимірне зважування між профілями. Тому цей метод розглядається лише як допоміжний евристичний орієнтир, а не як класичний метод Шепарда (3D) і не як оператор профільної трикутної інтерлінації.

За RMSE трикутна профільна інтерлінація є базовим найкращим оператором. Старий профіль на IDW baseline (на базі Шепарда) має RMSE приблизно у 1.88 раза більшу, ніж інтерлінація, хоча він кращий за глобальний метод Шепарда. Модифікований локальний Шепард чисельно близький до інтерлінації за RMSE, але не має теоретичної властивості точного відтворення полів концентрації забруднення [4, 7, 8, 10, 21, 22, 32, 106, 107, 126].

На рис. 4.9 зображена збіжність для гладкого контрольного поля для профільної трикутної інтерлінації з барицентричними вагами, де середньоквадратична похибка (RMSE) зменшується зі зменшенням кроку тріангуляції [35, 36, 65 – 68]. Сіткову збіжність окремо перевірено для профільної трикутної інтерлінації, оскільки саме цей оператор безпосередньо пов’язаний з регулярною системою верти-

кальних профілів і кроком тріангуляції. Для методів Шепарда додатково наведено порівняльні похибки на однаковій сітці профілів; їх точність істотно залежить не лише від густини даних, а й від параметрів вагової функції та локального радіуса.

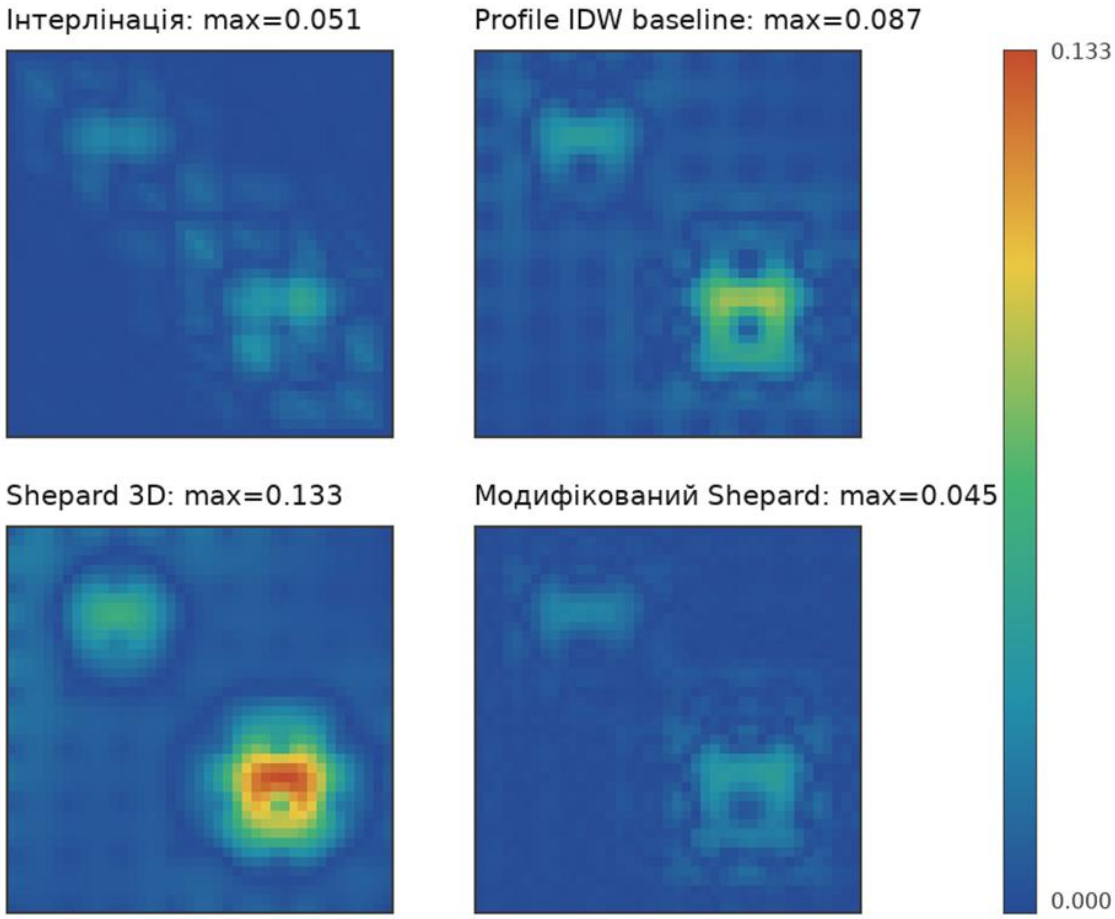

Рисунок 4.8 – Локалізація абсолютних похибок для інтерлінації та IDW baseline-методу на базі Шепарда та модифікованого методу Шепарда

Таблиця 4.6 – Залежність середньоквадратичної похибки (RMSE) від кроку сітки та кількості профілів

Сітка профілів	Кількість профілів	Крок	Середньоквадратична похибка (RMSE)
4 x 4	16	0.333333	0.02689892
6 x 6	36	0.200000	0.01805440
8 x 8	64	0.142857	0.00938168
12 x 12	144	0.090909	0.00409212

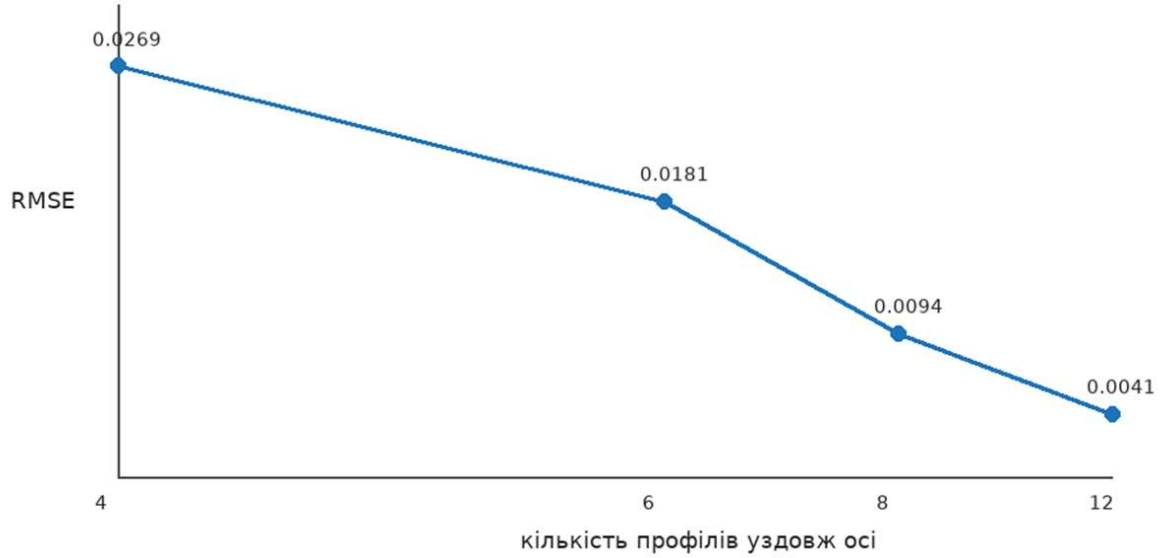

Рисунок 4.9 – Зменшення RMSE для гладкого контрольного поля при ущільненні сітки профілів

Висновки до розділу 4

1. Наведено програмну реалізацію контрольного FEM/Galerkin-сценарію для моделювання перенесення двох компонент забруднення у повітрі: C_1 (CO_2) та C_2 (SO_3). Опис програмної реалізації буде у додатку Б. Повна фізична модель враховує конвекцію, дифузію, реакційні взаємодії, локалізовані джерела та крайові умови, тоді як для чисельного benchmark-розрахунку використано редуковану стаціонарну дифузійно-реакційну постановку. Таке розділення дозволяє не змішувати повну слабку постановку Гальоркіна з функціоналом редукованої задачі на базі варіаційного методу Рітца та забезпечує математичну узгодженість FEM-дискретизації і Newton-ітерацій [1, 2, 5, 9, 19, 34 – 37, 77, 78].

2. У контрольному розрахунку максимальне значення першої компоненти становить 14.02174947, а другої компоненти – 4.15502912. Ці величини слід трактувати як відносні або надлишкові модельні концентрації, а не як прямі атмосферні вимірювання без додаткового калібрування. Компонента C_1 (CO_2) має ширший просторовий профіль, тоді як C_2 (SO_3) демонструє більш локалізовані піки поблизу джерел, що відповідає заданій структурі джерельних членів

і реакційного закону [1, 2, 5, 9, 41].

3. Нелінійна задача для компоненти C_2 (SO_3) розв'язується модифікованим методом Ньютона за 5 ітерацій, що свідчить про стійку збіжність для вибраного набору параметрів. Після знаходження C_2 задача для C_1 зводиться до лінійної системи, тому двоетапна схема $C_2 \to C_1$ є обчислювальною і прозорою та зручною для подальших параметричних перевірок [19].

4. Додаткові обчислення підтверджують коректну якісну поведінку моделі: збільшення інтенсивності джерел підвищує максимальні концентрації, збільшення дифузії згладжує локальні піки, а посилення реакційного поглинання зменшує залишкову концентрацію другої компоненти. Малі значення потоку біля правої межі узгоджуються з природною вихідною умовою без додатково нав'язаного джерела на межі [41].

5. Розроблений програмний модуль для повітряної задачі підтверджує працездатність редукованої FEM/Newton-моделі, дає відтворюваний контрольний сценарій для розділу 2 та формує числову основу для аналізу результатів у розділі 4. Його роль полягає не в калібруванні реальних атмосферних концентрацій, а в перевірці узгодженості математичної постановки, дискретизації, крайових умов, реакційного закону та чисельного алгоритму.

6. Обчислювальний експеримент підтвердив основні теоретичні положення про те, що похибка наближення функції $f(x,y,z)$, яка інтерпретується як просторове поле концентрації (або показника забруднення), за допомогою операторів інтерлінації на системі профілів відбору проб забруднення ґрунту із використанням кусково-лінійних за змінними x, y допоміжних функцій, зменшується за умови, що крок розбиття Δ (максимальна сторона трикутників сітки) є величиною, меншою за одиницю: $\Delta < 1$, а також за умови, що наближувана функція $f(x,y,z)$ має невеликі за модулем частинні похідні (тобто не містить різких локальних градієнтів) [21, 22, 35, 36, 65 – 68].

7. Наближуюча функція $O_M f(x,y,z)$ точно відновлює сталі і лінійні (афінні) поля: якщо $f(x,y,z) = ax + by + cz + d$, то $O_M f(x,y,z) = f(x,y,z)$ [21, 22, 65 – 68].

8. Якщо невідома функція $f(x,y,z)$, що інтерпретується як просторове поле концентрації (або інтегрального показника) забруднювача, співпадає з узагальненими глобальними формулами Д. Шепарда або О. М. Литвина, і запропонована математична модель відновлення поля використовує відповідно ці ж узагальнені формули, то така математична модель забезпечує точне відтворення заданого розподілу $f(x,y,z)$ у досліджуваній області [21, 22, 32, 65 – 68, 106, 107, 126]. У цьому розділі чисельно порівнюються профільна інтерлінація та схеми Д. Шепарда; формули О. М. Литвина тут використовуються як теоретичне підґрунтя інтерлінаційної постановки, а не як окремий реалізований програмний сценарій.

Основні результати четвертого розділу опубліковані у роботах автора, присвячених чисельному моделюванню поширення забруднювачів у повітряному середовищі, оптимізації та аналізу джерел забруднення, а також обчислювальній реалізації реконструкції тривимірних полів забруднення ґрунту методами інтерлінації та Шепарда [1, 2, 4, 5, 7 – 10].

У цьому розділі також використано базові джерела з чисельної математики, методу скінченних елементів, функціонального аналізу, обернених задач, теорії інтерлінації та апроксимації за методом Шепарда [1, 2, 4, 5, 7 – 10, 19, 21, 22, 31, 32, 34 – 37, 41, 63 – 68, 77, 78, 106, 107, 126].

ВИСНОВКИ

В дисертаційній роботі отримано результати, що в сукупності є розв'язанням наукової задачі побудови комплексу математичних моделей для аналізу забруднення довкілля. У межах дослідження поєднано два взаємодоповнювальні напрями. Перший напрям пов'язаний із математичним моделюванням перенесення багатокомпонентних домішок у повітряному середовищі на основі конвективно-дифузійно-реакційної постановки, слабкої форми Гальоркіна та скінченно-елементної дискретизації на базі методу Рітца. Другий напрям орієнтований на відновлення тривимірного поля забруднення ґрунту за даними свердловин і вертикальних профілів із використанням інтерлінації, класичного методу Шепарда та його модифікованого варіанта. Таке поєднання дозволяє розглядати різні фізичні середовища в межах єдиної методологічної логіки: для атмосферного середовища застосовується пряме фізико-математичне моделювання процесів перенесення, дифузії, реакційних перетворень і дії локалізованих джерел, тоді як для ґрунтового середовища основну роль відіграє реконструкція просторового поля за неповними дискретними даними моніторингу.

1. Проведено аналіз існуючих підходів до математичного моделювання розподілу концентрації забруднення у навколишньому середовищі, у межах якого виділені такі ключові методи, як процесні моделі переносення-дифузії в атмосфері та ґрунтах, класичні інтерполяційні методи, геостатистичний аналіз і крігінг, а також інтегровані ГІС/ДЗЗ-технології та алгоритми машинного навчання. Обґрунтовано, що ці методи є малопродуктивними для розв'язання вказаної задачі, оскільки вони вимагають надмірних обчислювальних ресурсів і детальних фізико-хімічних параметрів середовища, які зазвичай відсутні на практиці, а класичні інтерполяційні та геостатистичні підходи у своєму стандартному вигляді орієнтовані на хаотичну «хмару» точок і не здатні адекватно врахувати специфічну геометричну структуру реальних екологічних даних спостережень, які найчастіше задані на лінійних носіях інформації (вертикальних профілях, зрізах або свердловинах).

2. Розроблено двокомпонентну математичну модель перенесення забруднювальних речовин у повітряному середовищі, яка враховує дифузійне перемішування, спрямоване конвективне перенесення, нелінійні реакційні перетворення, взаємодію компонентів, локалізовані точкові джерела та крайові умови. Для повної конвективно-дифузійно-реакційної моделі побудовано слабку постановку Гальоркіна, оскільки наявність конвективного члена приводить до несамоспряженого оператора і не дозволяє безпосередньо застосувати класичний варіаційний підхід Рітца. Для редукованої моделі без повного конвективного члена побудовано варіаційну постановку Рітца, що дало змогу отримати математично прозору контрольну модель із симетричною структурою скінченно-елементної системи. Такий поділ дозволив поєднати фізичну повноту основної моделі з можливістю перевірки правильності чисельної реалізації на спрощеній самоспряженій постановці.

3. Для чисельного розв'язання побудованих задач розроблено скінченно-елементну схему з використанням локальних кусково-лінійних базисних функцій. Метод скінченних елементів обрано через його природний зв'язок зі слабкою постановкою, можливість коректного врахування змінних коефіцієнтів, крайових умов Робіна, відкритої вихідної межі та локалізованих джерел, заданих за допомогою дельта-функцій Дірака. Локальність базисних функцій забезпечила розріджену структуру матриць і дозволила згущувати сітку лише поблизу джерел або в областях великих градієнтів концентрації. Вперше для запропонованої двокомпонентної моделі побудовано узгоджену скінченно-елементну реалізацію, придатну як для редукованої симетричної постановки, так і для повної моделі з конвективним перенесенням.

4. Після скінченно-елементної дискретизації задача для компоненти SO_3 виявилася нелінійною внаслідок наявності реакційної залежності типу насичення та інших концентраційно-залежних членів. Для її розв'язання використано модифікований метод Ньютона, доповнений регуляризацією матриці Якобі та керуванням довжиною ітераційного кроку. Такий вибір забезпечив вищу стійкість алгоритму порівняно з класичним методом Ньютона за невдалого початкового наближення або поганої обумовленості системи. Після визначення другої компоненти рівняння для CO_2 стало лінійним, оскільки всі нелінійні залежності та міжкомпонентні внески на цьому етапі вже були відомими. На основі

цього вперше для запропонованої моделі реалізовано послідовний двоетапний алгоритм «нелінійна задача – лінійна задача», який зменшує розмір нелінійної системи, спрощує побудову матриці Якобі та скорочує обчислювальні витрати.

5. Для післяпроцесорного аналізу скінченно-елементного розв'язку застосовано L^2-проєкцію похідних концентрацій. Необхідність такої обробки пов'язана з тим, що при використанні кусково-лінійних елементів самі концентрації є неперервними, а їх похідні залишаються кусково-сталими та мають розриви у вузлах сітки. L^2-проєкція дозволила отримати узгоджені вузлові значення градієнтів і на їх основі визначити дифузійні та повні масові потоки. Це розширило можливості моделі від простого відтворення профілів концентрацій до аналізу напрямку та інтенсивності перенесення речовини, балансу потоків, порівняння дифузійної й конвективної складових, локального згущення сітки та параметричної ідентифікації. Вперше для запропонованої двокомпонентної схеми післяпроцесорну L^2-проєкцію інтегровано з розрахунком масоперенесення, що створює основу для подальшої оптимізації параметрів моделі, розташування джерел і заходів зі зменшення забруднення.

6. Систематизовано операторний апарат інтерлінації функцій багатьох змінних для задачі відновлення тривимірного поля забруднення ґрунту за неповними даними спостережень. На відміну від звичайної інтерполяції, у якій вихідна інформація задається в окремих точках, у розглянутій постановці даними є сліди функції та, у загальному випадку, сліди її диференціальних, інтегральних або інтегро-диференціальних операторів на лініях. Для прикладної задачі такими носіями інформації виступають вертикальні профілі ґрунтового моніторингу, на яких відомі залежності концентрації від глибини. Побудовані оператори задовольняють умову точного відтворення заданих профільних даних, тобто після звуження відновленого поля на кожний профіль отримується вихідна експериментальна функція. Ця властивість є основною відмінністю інтерлінаційної моделі від звичайних зважених апроксимацій, оскільки гарантує не лише наближене проходження поблизу вимірювань, а точне відновлення всього профілю як функції глибини.

На основі введеної системи допоміжних функцій сформовано загальну

структуру операторів поліноміальної сплайн-інтерлінації. Це дозволило відокремити геометрію носіїв даних і умови відтворення від конкретного виду апроксимувальної функції. Така побудова є універсальною: заміна класу допоміжних функцій змінює гладкість, локальність і обчислювальні властивості моделі, але не порушує загальної операторної схеми. Для задачі забруднення ґрунту це дає можливість обирати форму реконструкції залежно від структури даних: поліноміальні оператори – для регулярних сіток, сплайн-оператори – для локального згладжування профілів, а кусково-поліноміальні оператори – для нерегулярно розташованих пунктів відбору проб.

7. Побудовано та теоретично обґрунтовано поліноміальні й сплайнові моделі реконструкції просторового поля на регулярних системах профілів. Для профілів, розташованих у вузлах прямокутної сітки, тривимірну залежність подано як композицію послідовних операторів відновлення за горизонтальними координатами при збереженні повної функціональної залежності від глибини. Доведена теорема про те, що побудований оператор є оператором поліноміальної інтерлінації та точно відтворює експериментальні профілі в усіх вузлах сітки; для кожного фіксованого значення глибини також отримано подання залишку через похідні функції та добутки вузлових множників. Таким чином, модель має не лише конструктивну формулу, а й аналітичний опис похибки, який пов’язує точність реконструкції з гладкістю поля та густотою розташування профілів.

Для даних, які можуть містити різкі зміни або розриви першого роду, розвинено кусково-полілінійний апарат із використанням односторонніх значень у вузлах просторового розбиття. У кожній вузловій точці прямокутної сітки можуть задаватися до восьми односторонніх значень, що відповідають підходам до вузла з різних просторових напрямів. Це дозволяє описувати неоднорідні шари ґрунту, межі геологічних включень і локальні стрибки концентрації без штучного згладжування. Доведено, що побудований сплайн є полілінійним на кожному паралелепіпеді, відтворює відповідні односторонні сліди на його гранях, а за збігу односторонніх значень переходить у звичайний неперервний полілінійний сплайн. Для цього оператора отримано інтегральне подання залишкового члена та оцінку похибки через кроки сітки за трьома координатами, що

встановлює збіжність моделі при згущенні просторового розбиття.

8. Для нерегулярно розташованих профілів запропоновано локальний кусково-поліноміальний апарат, заснований на тріангуляції поверхні розміщення пунктів відбору проб та продовженні кожного трикутника у вертикальну тригранну призму. Усередині окремої призми поле концентрації відновлюється за даними профілів, які відповідають вершинам, ребрам або спеціально вибраним лініям призматичного елемента. Доведена теорема про інтерлінаційні властивості такого оператора та узгодженість його слідів на спільних гранях сусідніх призм. Завдяки цьому локальні фрагменти утворюють єдину кусково-неперервну просторову модель без розривів, спричинених переходом між елементами.

Для підвищення порядку наближення метод Зламала, відомий для кусково-поліноміальної апроксимації функцій двох змінних на трикутниках, узагальнено на випадок функцій трьох змінних у трикутних призмах. Побудовано кусково-квадратичні оператори, коефіцієнти яких є функціями вертикальної координати, та сформульовано оцінку похибки, що залежить від максимального діаметра трикутників і мінімального кута тріангуляції. Тим самим математично обґрунтовано вимогу до якості сітки: при вироджених або надмірно витягнутих трикутниках стійкість і точність знижуються, тоді як геометрично узгоджена тріангуляція забезпечує контрольоване наближення.

9. Для реконструкції за нерегулярними точковими даними розглянуто глобальний метод Шепарда та його модифікації з локалізованими вагами. Його перевагами є простота, відсутність необхідності будувати регулярну сітку та можливість безпосередньої роботи з довільно розташованими точками. Водночас глобальний характер ваг приводить до участі великої кількості віддалених вузлів у кожному обчисленні та може спричиняти надмірне згладжування локальних максимумів. Модифікований варіант із локалізованими вагами обмежує область впливу окремих вузлів, зменшує внесок віддалених вимірювань і краще відтворює локальні аномалії забруднення. Для задач ґрунтового моніторингу інтерлінаційний оператор є основною моделлю, а класичний і модифікований методи Шепарда – допоміжними засобами контролю точності, стійкості та ступеня згладжування реконструйованого поля.

10. Виконано обчислювальну перевірку запропонованих математичних моделей та показано зв’язок між теоретичними побудовами, чисельними алгоритмами і програмною реалізацією. Для задачі перенесення забруднювачів у повітрі розглянуто два рівні опису: редуковану стаціонарну дифузійно-реакційну задачу, для якої побудовано скінченно-елементну схему та застосовано модифікований метод Ньютона, і повну слабку постановку методу Гальоркіна, що враховує додатковий конвективний внесок. Порівняння цих постановок дало змогу відокремити контрольний чисельний сценарій для варіаційного функціонала від фізично повнішої моделі перенесення. Отримані максимальні, інтегральні та потокові показники для компонент CO_2 і SO_3 характеризують не безпосередні атмосферні вимірювання, а нормовану модельну реакцію системи на задані джерела, коефіцієнти дифузії, реакційні параметри та крайові умови. Мала величина вихідного дифузійного потоку на правій межі узгоджується з прийнятою природною вихідною умовою і підтверджує коректність чисельної реалізації граничного режиму.

11. Для задачі відновлення тривимірного поля забруднення ґрунту виконано порівняння профільної трикутної інтерлінації з барицентричними вагами, простого порівняльного методу (IDW) зваженого усереднення за оберненими відстанями між профілями, класичного методу Шепарда у тривимірній постановці та модифікованого локального методу Шепарда. Усі методи порівнювалися на одному контрольному полі та на тій самій системі вертикальних профілів, тому отримані похибки характеризують саме відмінність операторів реконструкції, а не різницю у вхідних даних.

Результати показали, що профільна трикутна інтерлінація та модифікований локальний метод Шепарда забезпечують найменші або близькі до найменших значення середньоквадратичної похибки. При цьому інтерлінаційний підхід має окрему методичну перевагу: він безпосередньо використовує геометрію носіїв вимірювальної інформації, тобто вертикальні профілі моніторингу, а не лише набір ізольованих точок простору. Це робить його природним для задач, у яких дані надходять із системи свердловин, профілів або вертикальних ліній спостереження.

12. Використання розроблених математичних моделей у практиці екологічного моніторингу, інженерно-геологічних та еколого-геохімічних дослі-

джень дає змогу перейти від аналізу окремих виміряних значень до просторово узгодженого опису поля забруднення. Зокрема, такі моделі можуть бути використані для локалізації зон підвищених концентрацій, визначення геометрії та глибини зони впливу, оцінювання меж поширення забруднювача, аналізу його можливої міграції, а також для оптимізації схеми відбору проб і розміщення пунктів контролю. Практичне значення такого підходу полягає в тому, що він дозволяє враховувати просторову неоднорідність, багатокомпонентний склад забруднення та зміну концентрацій за глибиною.

13. Напрями подальших досліджень за темою дисертаційної роботи можуть бути пов’язані з розширенням розмірності та фізичної повноти моделей, переходом від одновимірної атмосферної постановки до дво- і тривимірних нестаціонарних конвективно-дифузійно-реакційних систем, урахуванням турбулентного перенесення, змінних метеорологічних параметрів, складнішої хімічної кінетики та взаємодії більшої кількості компонентів. Перспективним є також дослідження стабілізованих скінченно-елементних схем для задач із домінуючою конвекцією, адаптивного згущення сітки за апостеріорними оцінками похибки, автоматичного вибору регуляризаційних параметрів у методі Ньютона та розвитку обернених задач ідентифікації коефіцієнтів дифузії, конвекції, реакції й інтенсивностей джерел за даними спостережень.

Для задач реконструкції ґрунтового середовища доцільним є подальший розвиток локальних інтерлінаційних та інтерфлетаційних операторів на нерегулярних сітках, побудова адаптивних триангуляцій з урахуванням геометрії профілів і зон високих градієнтів, розроблення стійких до шуму згладжувальних модифікацій, а також поєднання інтерлінації з геостатистичними, машинними та ймовірнісними методами. Окремим напрямом є перенесення запропонованого апарату на реальні польові дані з багатокомпонентними забрудненнями, неоднорідною структурою ґрунту та різною щільністю мережі спостережень, а також розроблення програмного модуля для автоматизованої побудови тривимірних карт забруднення, оцінювання невизначеності реконструкції та формування рекомендацій щодо розміщення нових пунктів моніторингу.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Kovtun A., Pershyna I., Mezhuev V. Mathematical Model of the Process of Air Pollutant Distribution for Multiple Point Sources of Industrial Pollution. *International Conference on Reliable Systems Engineering (ICoRSE) – 2025. Lecture Notes in Networks and Systems*. Vol. 1592. Springer, Cham, 2025. P. 409–420. DOI: 10.1007/978-3-032-02508-1_35.

2. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднюючих речовин у повітрі від промислового забруднення. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки*. 2025. Вип. 27. С. 53–68. DOI: 10.32626/2308-5878.2025-27.53-68.

3. Pershyna I., Ptashny O., Kovtun A. Restoration of the Internal Structure of Three Dimensional Discontinuous Objects Using Discontinuous Constructions. *3rd International Conference on Smart Technologies in Urban Engineering – 2024. Lecture Notes in Networks and Systems*. Vol. 1658. Springer, Cham, 2026. P. 279–287. DOI: 10.1007/978-3-032-06829-3_25.

4. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднення важкими металами методами неруйнівного контролю за допомогою інтерлінації функцій трьох змінних. *Прикладні проблеми комп'ютерних наук, безпеки та математики*. 2025. № 5. С. 24–31.

5. Ковтун А. Д., Першина Ю. І. Метод оптимізації розподілу забруднень у повітрі для випадку декількох джерел. *Innovative Technologies for Training and Educating Young People* : proceedings of the 2nd Intern. Sci. and Pract. Conf., Boston, USA, 14–17 Jan. 2025 / International Science Group. Boston, 2025. P. 259–263.

6. Ковтун А. Д., Першина Ю. І. Відновлення тривимірних розривних об'єктів за допомогою розривних сплайн-інтерполянтів. *XV Всеукраїнська конференція «Молоді вчені 2025 – від теорії до практики* : матеріали Всеукр. наук.-практ. конф., м. Дніпро, 20 березня 2025 р. Дніпро, 2025. С. 300–304.

7. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу за-

бруднення важкими металами за допомогою інтерлінації функцій трьох змінних. *XXXIII Міжнародна науково-практична конференція «Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я (MicroCAD-2025)»* : тези доп., м. Харків, 14–17 трав. 2025 р. / ред. Є. І. Сокол. НТУ «ХПІ». Харків, 2025. С. 1524.

8. Pershyna Y. I., Kovtun A. D. Interlineation method of 3D functions for the problem of detecting soil pollution with heavy metals. *Актуальні тенденції розвитку освіти, науки та технологій* : матеріали VIII Міжнар. наук.-практ. конф., м. Харків, 23 трав. 2025 р. : у 3 ч. / за заг. ред. Г. Г. Михальченко. Харків, 2025. Ч. 2. С. 16–18.

9. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу багатокомпонентного забруднення у повітрі. *XXXII Міжнародна науково-практична конференція «Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я (MicroCAD-2024)»* : тези доп., м. Харків, 22–25 трав. 2024 р. / ред. Є. І. Сокол. НТУ «ХПІ». Харків, 2024. С. 1300.

10. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Чисельна реалізація методу інтерлінації для 3D реконструкції полів концентрацій тяжких металів: модель, валідація та порівняння з методами Шепарда. *Комп'ютерно-інтегровані технології автоматизації технологічних процесів на транспорті та у виробництві* : Програма всеукр. науково-практ. конф. здобувачів вищ. освіти і молодих уч., м. Харків, 25 листоп. 2025 р. ХНАДУ. Харків, 2025. С. 30.

11. Литвин О. М., Литвин О. О., Ковтун А. Д. Математична модель засміченості деякої поверхні на основі аерокосмічних даних. *The Influence of Society on the Development of Science and the Invention of New Methods* : proceedings of the XXIII Intern. Sci. and Pract. Conf., Prague, Czech Republic, 13–16 June 2023. Prague, 2023. P. 312. DOI: 10.46299/ISG.2023.1.23.

12. Про схвалення Енергетичної стратегії України на період до 2050 року : Розпорядження Каб. Міністрів України від 21.04.2023 № 373-р. *Офіційний вісник України*. 2023. № 47. С. 156.

13. Monitoring heavy metals and metalloids in soils and vegetation by remote sensing: a review / V. Lovynska et al. *Remote Sensing*. 2024. Vol. 16, No. 17. Art.

3221. DOI: 10.3390/rs16173221.

14. Toro E. F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics : A Practical Introduction. 3rd ed. Berlin : Springer, 2009. 724 p.

15. Buryachenko V. A. Micromechanics of Heterogeneous Materials. New York : Springer, 2007. 687 p.

16. Metal contamination – a global environmental issue : sources, implications & advances in mitigation / G. Ondrasek et al. *RSC Advances*. 2025. Vol. 15, no. 5. P. 3904–3927. DOI: 10.1039/D4RA04639K.

17. Anderson M. P., Woessner W. W., Hunt R. J. Applied Groundwater Modeling : Simulation of Flow and Advective Transport. 2nd ed. San Diego : Academic Press, 2015. 562 p.

18. Meerschaert M. M. Mathematical Modeling. 4th ed. Waltham : Academic Press, 2013. 384 p.

19. Quarteroni A., Sacco R., Saleri F. Numerical Mathematics. 2nd ed. Berlin : Springer, 2007. 654 p.

20. Shapiro V. Semi-analytic Geometry with R-functions. *Acta Numerica*. 2007. Vol. 16. P. 239–303.

21. Литвин О. М. Інтерлінація функцій. Харків : Основа, 1993. 235 с.

22. Литвин О. М. Інтерлінація функцій та деякі її застосування. Харків : Основа, 2002. 544 с.

23. Литвин О. М. Методи обчислень: Додаткові розділи. Київ : Наукова думка, 2005. 331 с.

24. Demirela G., Terzi M. H., Durgun M. B. Heavy metal enrichments in rural environment soils, pollution dynamics, source identification, and the role of subsurface mineralizations. *Scientific Reports*. 2025. Vol. 15. Art. 35858. DOI: 10.1038/s41598-025-22281-y.

25. Toxic trajectories: modeling heavy metal-laden phosphate dust dispersion and multi-receptor health risks near Kpémé's industrial zone / D. Sama et al. *Results in Engineering*. 2025. Vol. 27. Art. 106160. DOI: 10.1016/j.rineng.2025.106160.

26. Menke W. Geophysical Data Analysis : Discrete Inverse Theory. 3rd ed.

Waltham : Academic Press, 2012. 293 p.

27. Zhao D. Multiscale Seismic Tomography. Tokyo : Springer, 2015. 304 p.

28. Bendat J. S., Piersol A. G. Random Data : Analysis and Measurement Procedures. 4th ed. Hoboken : Wiley, 2010. 640 p.

29. Selley R. C., Sonnenberg S. A. Elements of Petroleum Geology. 3rd ed. Amsterdam : Elsevier, 2015. 507 p.

30. Renewable Energy : Power for a Sustainable Future / ed. by S. Peake. 4th ed. Oxford : Oxford University Press, 2017. 656 p.

31. Lax P. D. Functional Analysis. New York : Wiley-Interscience, 2002. 592 p.

32. Shepard D. A two-dimensional interpolation function for irregularly spaced data. *ACM National Conference : proceedings of the 23rd ACM National Conf., Las Vegas, USA, 27–29 August 1968*. New York, 1968. P. 517–524. DOI: 10.1145/800186.810616.

33. Литвин О. М. Формули Тейлора і Даламбера. Інтерлінація функцій. Методика вивчення. Київ : УМК ВО, 1990. 48 с.

34. Strang G., Fix G. J. An Analysis of the Finite Element Method. 2nd ed. Wellesley (MA) : Wellesley-Cambridge Press, 2008. 400 p.

35. Ern A., Guermond J.-L. Finite Elements I : Approximation and Interpolation. Berlin : Springer, 2021. 314 p.

36. Quarteroni A., Valli A. Numerical Approximation of Partial Differential Equations. Berlin : Springer, 1994. 543 p.

37. Zienkiewicz O. C., Taylor R. L. The Finite Element Method for Fluid Dynamics. 6th ed. Oxford : Elsevier, 2013. 448 p.

38. Schechter R. S. The Variational Method in Engineering. New York : McGraw-Hill, 1967. 287 p.

39. Glansdorff P., Prigogine I. Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations. New York : Wiley-Interscience, 1971. 306 p.

40. Cussler E. L. Diffusion : Mass Transfer in Fluid Systems. 4th ed. Cambridge : Cambridge University Press, 2020. 638 p.

41. Aster R. C., Borchers B., Thurber C. H. Parameter Estimation and Inverse

Problems. 2nd ed. Waltham : Academic Press, 2013. 360 p.

42. Tarantola A. Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation. Philadelphia : Society for Industrial and Applied Mathematics, 2005. 342 p.

43. Geospatial and Correlation Analysis of Heavy Metal Distribution on the Territory of Integrated Steel and Mining Company Qarmet JSC / B. Suleimenov et al. *Sustainability*. 2025. Vol. 17. Art. 7148. DOI: 10.3390/su17157148.

44. Reynolds J. M. An Introduction to Applied and Environmental Geophysics. 2nd ed. Chichester : Wiley-Blackwell, 2011. 712 p.

45. Макаренко И. Б., Старостенко В. И., Легостаева О. В. Строение земной коры Коростенского плутона (северная часть Украинского щита) по результатам трехмерного плотностного моделирования. *Доповіді НАН України*. 2003. № 11. С. 113–120.

46. Ільченко Т. В. Швидкісна модель земної кори і верхів мантії Кіровоградського блока Українського щита за даними ГСЗ (профіль Бабанка – П'ятихатки). *Доповіді НАН України*. 2003. № 7. С. 100–119.

47. Булах Е. Г. Автоматизированная система интерпретации гравитационных аномалий (метод минимизации). Киев : Наукова думка, 1973. 111 с.

48. Старостенко В. И. Устойчивые численные методы в задачах гравиметрии. Киев : Наукова думка, 1978. 228 с.

49. Матусевич К. Н., Матусевич Н. К. Математична картографія. Рівне : Волинські обереги, 2003. 212 с.

50. Cressie N., Wikle C. K. Statistics for Spatio-Temporal Data. Hoboken : Wiley, 2011. 624 p.

51. McBratney A. B., Mendonça Santos M. L., Minasny B. On digital soil mapping. *Geoderma*. 2003. Vol. 117. P. 3–52. DOI: 10.1016/S0016-7061(03)00223-4.

52. GIS applications in monitoring and managing heavy metal contamination of water resources / G. Murariu, S. et al. *Applied Sciences*. 2025. Vol. 15, No. 19. Art. 10332. DOI: 10.3390/app151910332.

53. Goovaerts P. Geostatistics for Natural Resources Evaluation. New York ; Oxford : Oxford University Press, 1997. 483 p.

54. A prediction model for soil heavy metal content based on improved tensor completion / Z. Wang, et al. *Scientific Reports*. 2025. Vol. 15. Art. 23080. DOI: 10.1038/s41598-025-07565-7.

55. Remote sensing inversion on heavy metal content in salinized soil of the Yellow River Delta based on random forest regression: a case study of Gudao Town / P. Fu et al. *Scientific Reports*. 2024. Vol. 14. Art. 11216. DOI: 10.1038/s41598-024-62087-y.

56. Gök G., Tulun Ş., Çelebi H. Mapping of heavy metal pollution density and source distribution of campus soil using geographical information system. *Scientific Reports*. 2024. Vol. 14. Art. 29918. DOI: 10.1038/s41598-024-78961-8.

57. Про формулу розкладу в околі кута / А. М. Анікеєнко, О. М. Литвин, В. Л. Рвачов, М. О. Сафонов. *Доповіді АН УРСР. Сер. А*. 1972. С. 99–101.

58. Куценко Л.Н., Литвин О.Н. Обобщенная інтерполяція на тріангульованих областях і її застосування в методі кінцевих елементів. Деп. у ВІНІТІ: ч. 1 № 1379 (13.01.1976); ч. 2 № 2303 (20.02.1977).

59. Литвин О. М., Федько В. В. Обобщенная кусочно-эрмитова интерполяція. *Укр. мат. журн.* 1976. Т. 28, № 6. С. 812–819.

60. Литвин О. М., Рвачов В. Л. Класична формула Тейлора, її узагальнення та застосування. Київ : Наукова думка, 1973. 122 с.

61. Lytvyn O. N. Interlineation and interflatation functions of many variables (blending functions interpolation) and economical algorithms in the approximation theory. *Computational Methods* / eds. G. R. Liu, V. B. C. Tan, X. Han. Vol. 2. Springer, 2006. P. 1105–1110. DOI: 10.1007/978-1-4020-3953-9_15.

62. Литвин О. М., Сергієнко І. В. Методи апроксимації функцій і сучасні комп’ютерні технології: огляд. *Кібернетика і системний аналіз*. 2007. № 1. С. 64–81.

63. Coons S. A. Surfaces for computer-aided design of space forms. *Project MAC Report MAC-TR-41*. Cambridge, 1967. P. 3–30.

64. de Boor C. A Practical Guide to Splines. Revised ed. New York : Springer, 2001. 346 p.

65. Гулік Л. І., Литвин О. М. Про один підхід до розв’язання граничної задачі Діріхле для рівняння Пуассона з використанням інтерлінації. *Доповіді*

НАН України. 2004. № 1. С. 13–18.

66. Гулик Л. І., Литвин О. М. Новий підхід до розв'язання задачі Діріхле для рівняння Пуассона з використанням інтерлінації функцій. *Комп'ютерна математика.* 2003. Вип. 1. С. 1–9.

67. Гулік Л. І., Литвин О. М. Інтерлінація функцій трьох змінних на системі ортогональних прямих. *Доповіді НАН України*. 2004. № 11. С. 16–22.

68. Гулік Л. І., Литвин О. М. Інтерфлетація функцій трьох змінних на піраміді з однією криволінійною гранню. *Кібернетика і системний аналіз*. 2005. № 6. С. 32–49.

69. Гулік Л. І. Інтерфлетація функцій трьох змінних на паралелепіпеді з однією криволінійною гранню. *X Міжнародна наукова конференція імені академіка М. Кравчука* : тези доп., 13–15 трав. 2004 р. Київ, 2004. С. 357.

70. Гулік Л. І. Точне задоволення умов Діріхле на границі тривимірної області складної форми за допомогою інтерфлетації. *Тези доповідей міждержавної науково-методичної конференції* : тези доп., 26–28 трав. 2004 р. Дніпродзержинськ, 2004. С. 14–15.

71. Гулік Л. І., Литвин О. М. Точне задоволення граничних умов для тривимірної області складної форми за допомогою інтерфлетації. *Міжнародна конференція «Питання оптимізації обчислень (ПОО-XXXII)»* : праці міжнародної конференції, смт Кацивелі, 19–23 вересня 2005 р. Київ, 2005. С. 66.

72. Макаров В. Л., Хлобыстов В. В. Основы теории операторного полиномиального интерполирования. Київ : Ін-т математики НАН України, 1998. 278 с.

73. Макаров В. Л., Хлобыстов В. В., Янович Л. А. Интерполирование операторов. Киев : Ин-т математики НАН Украины, 1998. 278 с.

74. Литвин О. М., Гулік Л. І., Ткаченко О. В. Математичне моделювання процесів за допомогою сплайнів з нерівномірно розподіленими вузлами. *Питання оптимізації обчислень (ПОО–XXXV)* : праці міжнародного симпозіуму, смт Кацивелі, 24–29 вересня 2009 р. Київ, 2009. Т. 2. С. 415–419.

75. Gordon W. Blending function methods for bivariate and multivariate interpolation and approximation. *SIAM J. Numerical Analysis*. 1971. Vol. 8, No. 1. P.

158–177.

76. Корнейчук Н. П., Переверзев С. В. К вопросу о приближении функций двух переменных операторами, построенными на базе одномерных операторов. *Теория функций и топология :* сб. науч. работ Ин-та математики АН УССР. Киев : Наук. думка, 1983. С. 43–49.

77. Brezis H. Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations. New York : Springer, 2011. 599 p.

78. LeVeque R. J. Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems. Philadelphia : SIAM, 2007. 341 p.

79. Гаврилюк І. П., Макаров В. Л. Методи обчислень : у 2 т. Київ : Вища школа, 1995. Т. 1. 368 с.

80. Гаврилюк І. П., Макаров В. Л. Методи обчислень : у 2 т. Київ : Вища школа, 1995. Т. 2. 431 с.

81. Vogel C. R. Computational Methods for Inverse Problems. Philadelphia : Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), 2002. 183 p.

82. Engl H. W., Hanke M., Neubauer A. Regularization of Inverse Problems. Dordrecht : Kluwer Academic Publishers, 1996. 321 p.

83. Kaipio J., Somersalo E. Statistical and Computational Inverse Problems. New York : Springer, 2004. 339 p.

84. Natterer F. The Mathematics of Computerized Tomography. Philadelphia : SIAM, 2001. 222 p.

85. Biondi B. 3D Seismic Imaging. Tulsa : Society of Exploration Geophysicists (SEG), 2006. 281 p.

86. Zhdanov M. S. Geophysical Inverse Theory and Regularization Problems. Amsterdam : Elsevier, 2002. 640 p.

87. Yilmaz O. Seismic Data Analysis: Processing, Inversion, and Interpretation of Seismic Data. Tulsa : Society of Exploration Geophysicists (SEG), 2001. 2027 p.

88. Seismic Tomography: With Applications in Global Seismology and Exploration Geophysics / ed. by G. Nolet. Dordrecht : D. Reidel Publishing

Company, 1987. 396 p.

89. Chilès J.-P., Delfiner P. Geostatistics: Modeling Spatial Uncertainty. 2nd edition. Hoboken : John Wiley & Sons, 2012. 734 p.

90. Deutsch C. V., Journel A. G. GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide. 2nd ed. New York : Oxford University Press, 1998. 369 p.

91. Blakely R. J. Potential Theory in Gravity and Magnetic Applications. Cambridge : Cambridge University Press, 1996. 441 p.

92. Telford W. M., Geldart L. P., Sheriff R. E. Applied Geophysics. 2nd ed. Cambridge : Cambridge University Press, 1990. 770 p.

93. Brenner S. C., Scott L. R. The Mathematical Theory of Finite Element Methods. 3rd ed. New York : Springer, 2008. 397 p.

94. Ciarlet P. G. The Finite Element Method for Elliptic Problems. Philadelphia : SIAM, 2002. 532 p.

95. Evans L. C. Partial Differential Equations. 2nd ed. Providence, RI : American Mathematical Society, 2010. 749 p.

96. Gilbarg D., Trudinger N. S. Elliptic Partial Differential Equations of Second Order. Berlin : Springer, 2001. 517 p.

97. DeVore R. A., Lorentz G. G. Constructive Approximation. Berlin : Springer, 1993. 449 p.

98. Cheney E. W. Introduction to Approximation Theory. Providence, RI: AMS Chelsea Publishing, 1998. 259 p.

99. Farin G. Curves and Surfaces for Computer-Aided Geometric Design: A Practical Guide. 5th ed. San Francisco : Morgan Kaufmann, 2010. 499 p.

100. Schumaker L. L. Spline Functions and Applications. Cambridge : Cambridge University Press, 2007. 553 p.

101. Дубенець В. Г., Хільчевський В. В., Савченко О. В. Основи методу скінченних елементів : підручник. 2-ге вид. Чернігів : ЧДТУ, 2007. 336 с.

102. Malcata F. X. Mathematics for Enzyme Reaction Kinetics and Reactor Performance. Hoboken : Wiley, 2020. 1072 p.

103. Copeland R. A. Enzymes: A Practical Introduction to Structure,

Mechanism, and Data Analysis. 3rd ed. Hoboken : John Wiley & Sons, 2023. 579 p.

104. Коллатц Л. Функциональный анализ и вычислительная математика. Москва : Мир, 1969. 252 с.

105. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. Ленинград ; Москва : Наука, 1980. 352 с.

106. Barnhill R. E., Dube R. P., Little F. F. Properties of Shepard's surfaces. *Rocky Mountain Journal of Mathematics*. 1983. Vol. 13. P. 365–382.

107. Farwig R. Rate of Convergence of Shepard's Global Interpolation Formula. *Mathematics of Computation*. 1986. Vol. 46, No. 174. P. 577–590.

108. Gal S. G., Szabados J. On the preservation of global smoothness by some interpolation operators. *Studia Scientiarum Mathematicarum Hungarica*. 1999. Vol. 35. P. 397–414.

109. Adell J. A., De La Cal J. Preservation of Moduli of Continuity for Bernstein-Type Operators. *Approximation, Probability and Related Fields* / ed. by G. Anastassiou, S. T. Rachev. Boston : Springer, 1994. P. 1–18.

110. Altomare F., Campiti M. Korovkin-Type Approximation Theory and its Applications. Berlin : Walter de Gruyter, 1994. 627 p.

111. Adell J. A., Perez-Palomares A. Second modulus preservation inequalities for generalized Bernstein-Kantorovich operators. *Approximation and Optimization*. Vol. 1. Cluj-Napoca : Transilvania, 1997. P. 147–156.

112. Anastassiou G. A., Cottin C., Gonska H. H. Global smoothness of approximating functions. *Analysis*. 1991. Vol. 11. P. 43–57. DOI: 10.1524/anly.1991.11.1.43

113. Bloom W. R., Elliott D. The modulus of continuity of the remainder in the approximation of Lipschitz functions. *Journal of Approximation Theory*. 1981. Vol. 31. P. 59–66. DOI: 10.1016/0021-9045(81)90030-7.

114. Бари Н. К., Стечкин С. Б. Наилучшая аппроксимация и дифференциальные свойства двух сопряженных функций. *Труды Московского математического общества*. 1956. Т. 5. С. 483–522.

115. Берман Д. Л. Расхождение процесса интерполяции Ермита-Фейера.

Успехи математических наук. 1958. Т. 13, вып. 80. С. 143–148.

116. Brown B. M., Elliott D., Paget D. F. Lipschitz constants for the Bernstein polynomials of a Lipschitz continuous function. *Journal of Approximation Theory*. 1987. Vol. 49. P. 196–199. DOI: 10.1016/0021-9045(87)90087-6.

117. Cismasiu C. S. Some properties of the linear positive operators of probabilistic type. *Seminar on Numerical and Statistical Calculus*. Cluj-Napoca : Univ. Babes-Bolyai, 1987. P. 129–133.

118. Cheney E. W. Introduction to Approximation Theory. New York ; Toronto ; London : McGraw-Hill, 1966. 235 p.

119. Cottin C., Gonska H. H. Simultaneous approximation and global smoothness preservation. *Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo*. 1993. Suppl. 33. P. 259–279.

120. Butzer P. L., Nessel R. J. Fourier Analysis and Approximation. Vol. 1 : One-Dimensional Theory. New York : Academic Press, 1971. 569 p.

121. Kratz W., Stadtmüller U. On the uniform modulus of continuity of certain discrete approximation operators. *Journal of Approximation Theory*. 1988. Vol. 54, No. 3. P. 326–337. DOI: 10.1016/0021-9045(88)90009-3.

122. Mastroianni G., Szabados J. Jackson order of approximation by Lagrange interpolation. *Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo*. 1993. Suppl. 33. P. 375–386. DOI: 10.1007/bf01874609.

123. Natanson I. P. Constructive Function Theory. Vols. 1–3. New York : Frederick Ungar Publishing Co., 1964–1965. 356 p.

124. Стечкин С. Б. Порядок наилучшей аппроксимации непрерывных функций. *Известия АН СССР*. 1951. Т. 15. С. 219–242.

125. Szabados J. On the convergence and saturation problem of the Jackson polynomials. *Acta Mathematica Academiae Scientiarum Hungaricae*. 1973. Vol. 24. P. 399–406. DOI: 10.1007/BF01958053

126. Szabados J. Direct and converse approximation theorems for the Shepard operator. *Approximation Theory and its Applications*. 1991. Vol. 7. P. 63–76. DOI: 10.1007/BF02836457

127. Szabados J., Vértesi P. Interpolation of Functions. Teaneck, NJ : World Scientific, 1990. 305 p.

128. Литвин О. М., Литвин О. О., Денисова О. І. 2D кубические интерполяционные сплайны на нерегулярной сетке узлов. *Компьютерная математика*. 2013. № 1. С. 100–109.

129. Литвин О. М., Першина Ю. І., Пасічник В. О. Дослідження методу знаходження розривів першого роду функції однієї змінної. *Вісник НТУ «ХПІ». Серія: Математичне моделювання в техніці та технологіях*. 2015. № 6 (1115). С. 67–76.

130. U.S. Environmental Protection Agency. Air Quality Dispersion Modeling – Preferred and Recommended Models: AERMOD Modeling System. EPA Support Center for Regulatory Atmospheric Modeling (SCRAM). URL: https://www.epa.gov/scram/air-quality-dispersion-modeling-preferred-and-recommended-models.

131. U.S. Environmental Protection Agency. CMAQ: The Community Multiscale Air Quality Modeling System. EPA. URL: https://www.epa.gov/cmaq.

132. The CHIMERE v2020r1 online chemistry-transport model / L. Menut et al. *Geoscientific Model Development*. 2021. Vol. 14. P. 6781–6811. DOI: 10.5194/gmd-14-6781-2021.

133. The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 10.4 / I. Pisso et al. *Geoscientific Model Development*. 2019. Vol. 12. P. 4955–4997. DOI: 10.5194/gmd-12-4955-2019.

134. Ковтун А. Д. Метод виявлення вмісту важких металів у ґрунті за допомогою інтерлінації функції. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті* : матеріали 30-го Міжнар. молодіжного форуму, м. Харків, 22–24 квіт. 2026 р. Т. 7. Харків : ХНУРЕ, 2026. С. 303–304.

135. Ковтун А. Д. Метод оптимізації розподілу забруднень у повітрі для випадку декількох джерел. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті*: матеріали 28-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп'ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання», Харків, Україна, 16–18 квітня 2024 р. Харків: ХНУРЕ, 2024. С. 216–218

136. Ковтун А. Д. Відновлення тривимірних розривних об’єктів за допомогою розривних сплайн-інтерполянтів. Радіое*лектроніка і молодь у XXI столітті*: матеріали 29-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп’ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання», Харків, Україна, 16–19 квітня 2025 р. Харків: ХНУРЕ, 2025. С. 251–253.

137. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математична модель просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методами поліноміальної інтерлінації функцій. *Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров’я*: тези доповідей XXXIV Міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2026, Харків, Україна, 13–16 травня 2026 р. Харків: НТУ «ХПІ», 2026. С. 568.

ДОДАТОК А
Список публікацій здобувача і відомості про апробацію результатів дисертації

А.1 Список публікацій здобувача

Наукові публікації, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації

1. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднюючих речовин у повітрі від промислового забруднення. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки*. 2025. Вип. 27. С. 53–68. DOI: 10.32626/2308-5878.2025-27.53-68 [Наукове фахове видання України категорії Б; входить до міжнародної наукометричної бази Google Scholar.]

2. Kovtun A., Pershyna I., Mezhuev V. Mathematical Model of the Process of Air Pollutant Distribution for Multiple Point Sources of Industrial Pollution. *International Conference on Reliable Systems Engineering (ICoRSE) – 2025. Lecture Notes in Networks and Systems*. Vol. 1592. Springer, Cham, 2025. P. 409–420. DOI: 10.1007/978-3-032-02508-1_35 [Входить до міжнародної наукометричної бази Scopus.]

3. Pershyna I., Ptashny O., Kovtun A. Restoration of the Internal Structure of Three Dimensional Discontinuous Objects Using Discontinuous Constructions. *3rd International Conference on Smart Technologies in Urban Engineering – 2024. Lecture Notes in Networks and Systems*. Vol. 1658. Springer, Cham, 2026. P. 279–287. DOI: 10.1007/978-3-032-06829-3_25 [Входить до міжнародної наукометричної бази Scopus.]

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації

4. Литвин О. М., Литвин О. О., Ковтун А. Д. Математична модель засміченості деякої поверхні на основі аерокосмічних даних. *The Influence of Society on the Development of Science and the Invention of New Methods: proceedings of the XXIII International Scientific and Practical Conference*. Prague, Czech Republic,

June 13–16, 2023. International Science Group, 2023. P. 312. DOI: 10.46299/ISG.2023.1.23.

5. Ковтун А. Д. Метод оптимізації розподілу забруднень у повітрі для випадку декількох джерел. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті: матеріали 28-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп'ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання»*, Харків, Україна, 16–18 квітня 2024 р. Харків : ХНУРЕ, 2024. С. 216–218.

6. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу багатокомпонентного забруднення у повітрі. *Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я. MicroCAD-2024*. Харків : НТУ «ХПІ», 2024. С. 1300.

7. Ковтун А. Д. Відновлення тривимірних розривних об'єктів за допомогою розривних сплайн-інтерполянтів. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті: матеріали 29-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп'ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання»*, Харків, Україна, 16–19 квітня 2025 р. Харків : ХНУРЕ, 2025. С. 251–253.

8. Ковтун А. Д., Першина Ю. І. Метод оптимізації розподілу забруднень у повітрі для випадку декількох джерел. *Innovative technologies for training and educating young people: proceedings of the 2nd International scientific and practical conference*. Boston, USA, January 14–17, 2025. International Science Group, 2025. P. 259–263.

9. Ковтун А. Д., Першина Ю. І. Відновлення тривимірних розривних об'єктів за допомогою розривних сплайн-інтерполянтів. *Молоді вчені 2025 — від теорії до практики: матеріали XV Всеукраїнської науково-практичної конференції здобувачів вищої освіти і молодих учених*. Дніпро : Журфонд, 2025. С. 300–304.

10. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднення важкими металами за допомогою інтерлінації функцій трьох змінних. *Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXXIII Міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2025*, Харків, Україна, 14–17 травня 2025 р. Харків : НТУ «ХПІ», 2025. С. 1524.

11. Pershyna Y. I., Kovtun A. D. Interlineation method of 3D functions for the problem of detecting soil pollution with heavy metals. *Актуальні тенденції розвитку освіти, науки та технологій: матеріали VIII Міжнародної науково-практичної конференції*, Харків, Україна, 23 травня 2025 р. Харків : БННППІ Каразінського університету, 2025. Ч. 2. С. 16–18.

12. Першина Ю. І., Ковтун А. В. Чисельна реалізація методу інтерлінації для 3D реконструкції полів концентрацій тяжких металів: модель, валідація та порівняння з методами Шепарда. *Комп'ютерно-інтегровані технології автоматизації технологічних процесів на транспорті та у виробництві: матеріали Всеукраїнської науково-практичної конференції здобувачів вищої освіти і молодих учених (КІТ-2025)*. Харків : ХНАДУ, 2025. С. 30.

13. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математична модель просторового розподілу забруднювачів у ґрунті методами поліноміальної інтерлінації функцій. *Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXXIV Міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2026*, Харків, Україна, 13–16 травня 2026 р. Харків : НТУ «ХПІ», 2026. С. 568.

14. Ковтун А. Д. Метод виявлення вмісту важких металів у ґрунті за допомогою інтерлінації функції. *Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті: матеріали 30-го Міжнародного молодіжного форуму. Т. 7. «Комп'ютерний зір, системний аналіз та математичне моделювання»*, Харків, Україна, 22–24 квітня 2026 р. Харків : ХНУРЕ, 2026. С. 303–304.

Наукові праці, які додатково відображають
наукові результати дисертації

15. Першина Ю. І., Ковтун А. Д. Математичне моделювання розподілу забруднення важкими металами методами неруйнівного контролю за допомогою інтерлінації функцій трьох змінних. *Прикладні проблеми комп'ютерних наук, безпеки та математики*. 2025. № 5. С. 24–31.

А.2 Відомості про апробацію результатів дисертації

Таблиця А.1 – Відомості про апробацію результатів дисертації

№	Назва конференції	Місце проведення	Дати проведення	Форма участі
1.	XXIII International Scientific and Practical Conference «The Influence of Society on the Development of Science and the Invention of New Methods»	Чеська республіка, м. Прага	13 – 16 червня 2023 р.	заочна
2.	28-й Міжнародний молодіжний форум «Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті»	Україна, м. Харків, Харківський національний університет радіоелектроніки	16 – 18 квітня 2024 р.	очна
3.	XXXII Міжнародна науково-практична конференція «Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я MicroCad-2024»	Україна, м. Харків, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»	22 – 25 травня 2024 р.	очна
4.	29-й Міжнародний молодіжний форум «Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті»	Україна, м. Харків, Харківський національний університет радіоелектроніки	16 – 19 квітня 2025 р.	очна
5.	Всеукраїнська науково-практична конференція здобувачів вищої освіти і молодих учених «Комп'ютерно-інтегровані технології автоматизації технологічних процесів на транспорті та у виробництві»	Україна, м. Харків, Харківський національний автомобільно-дорожній університет	25 листопада 2025 р.	очна

Кінець таблиці А.1

6.	VIII Міжнародна наукова-практична конференція «Актуальні тенденції розвитку освіти, науки та технологій»	Україна, м. Харків, Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, Бахмутський навчально-науковий професійно-педагогічний інститут	23 травня 2025 р.	очна
7.	XV Всеукраїнська науково-практична конференція здобувачів вищої освіти і молодих учених «Молоді вчені 2025 – від теорії до практики»	Україна, м. Дніпро, Український державний університет науки і технологій	20 березня 2025 р.	очна
8.	XXXIII Міжнародна науково-практична конференція «Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я MicroCad-2025»	Україна, м. Харків, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»	14 – 17 травня 2025 р.	очна
9.	2nd International scientific and practical conference "Innovative technologies for training and educating young people"	США, м. Бостон	14 – 17 січня 2025 р.	заочна
10.	30-й Міжнародний молодіжний форум «Радіоелектроніка і молодь у XXI столітті»	Україна, м. Харків, Харківський національний університет радіоелектроніки	22 – 24 квітня 2026 р.	очна
11.	XXXIV Міжнародна науково-практична конференція «Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я MicroCad-2026»	Україна, м. Харків, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»	13 – 16 травня 2026 р.	очна

ДОДАТОК Б

Програмна реалізація алгоритмів реконструкції поля забруднення ґрунту

У цьому додатку показано, які програмні блоки формують ці результати, які вхідні дані використовуються, які файли створюються на виході та як функції Python відповідають математичним формулам розділів 3 і 4.

Основний програмний модуль розміщений у файлі programs/section3_interlineation_soil_reconstruction/soil_interlineation_shepard.py. Він є відтворюваним розрахунковим сценарієм: після запуску створюються CSV-таблиці, JSON-маніфест параметрів і PNG-рисунки, які використовуються у розділі 4. У додатку важливо зафіксувати не самі рисунки, а шлях від формули до функції коду. Вхідні параметри не розкидані по програмі, а зібрані у класі SoilConfig. Такий запис зменшує ризик розходження між текстом дисертації, таблицями розділу 4 і фактичним запуском програми. Якщо змінюється кількість профілів, крок за глибиною, параметри ваг або фізичний масштаб ділянки, це видно в одному місці. Фрагмент програмного коду, що відповідає за конфігурацію вхідного сценарію, має вигляд:

```
0017:
0018: @dataclass(frozen=True)
0019: class SoilConfig:
0020:     profile_side: int = 8
0021:     z_samples: int = 41
0022:     grid_xy: int = 41
      ...
0034:     pollution_threshold: float = 0.34
0035:     physical_length_m: float = 100.0
0036:     physical_width_m: float = 100.0
0037:     physical_depth_m: float = 2.0
0038:     bulk_density_kg_m3: float = 1300.0
```

Для обчислювальної частини використано мінімальний набір залежностей. NumPy відповідає за сітки, векторні операції, лінійну алгебру, експоненти та інтегрування трапеціями. dataclasses фіксує параметри запуску. pathlib, csv та json використовуються для відтворюваного запису результатів. Pillow формує

PNG-рисунки для розділу 4 без потреби в інтерактивному графічному середовищі. Фрагмент програмного коду, що відповідає за імпорти та тип функції поля, має вигляд:

```
0001: """Section 3 profile interlineation and Shepard soil-reconstruction experiments."""
0002:
0003: from __future__ import annotations
0004:
0005: import csv
0006: import json
    ...
0011: import numpy as np
0012: from PIL import Image, ImageDraw, ImageFont
0013:
0014:
0015: FieldFunction = Callable[[np.ndarray, np.ndarray, np.ndarray], np.ndarray]
```

Контрольне поле у програмі є синтетичним відносним полем концентрації. Воно потрібне для перевірки операторів, а не для прямої заміни лабораторних вимірювань. Профілі будуються як значення цього поля на вертикальних лініях з фіксованими координатами x_i, y_j.

Формально один профіль задається множиною відліків:

$$\Pi_{ij} := \{(x_i, y_j, z_s, f(x_i, y_j, z_s)), s = 0, \ldots, S-1\}$$

Фрагмент програмного коду, що відповідає за контрольне поле і профілі, має вигляд:

```
0041: def smooth_control_field(x: np.ndarray, y: np.ndarray, z: np.ndarray) -> np.ndarray:
0042:     return (
0043:         0.16
0044:         + 0.08 * x
0045:         + 0.05 * (1.0 - y)
0046:         + 0.06 * z
    ...
0082:     z_samples = np.linspace(0.0, 1.0, config.z_samples)
0083:     profiles = np.zeros((positions.shape[0], config.z_samples), dtype=float)
0084:     for i, (x_i, y_i) in enumerate(positions):
0085:         profiles[i, :] = field(np.full_like(z_samples, x_i), np.full_like(z_samples, y_i),
z_samples)
0086:     return positions, z_samples, profiles
```

Таблиця Б.1 – Вхідні дані та параметри сценарію

Блок	Функції Python	Призначення
Конфігурація	SoilConfig	єдине місце для кількості профілів, сіток, параметрів Шепарда та фізичного масштабу
Профілі	make_profile_positions, make_profiles	формування регулярної сітки вертикальних ліній і відліків за глибиною
Інтерлінація	barycentric_weights, containing_structured_triangle, profile_interlineation_eval	локальна трикутна реконструкція з барицентричними вагами
IDW	legacy_profile_idw_eval	старий евристичний контрольний метод оберненовідстаневого усереднення
Shepard	profile_points_to_3d_samples, shepard3d_eval	глобальний Shepard 3D та локальний модифікований Shepard
Перевірки	evaluate_reconstruction, run_exactness_tests, run_smooth_convergence, compute_integral_mass	метрики похибки, точність для простих полів, сходимість та інтегральні показники
Експорт	write_outputs	створення CSV, PNG, JSON і текстових підсумків для розділу 4

Таблиця Б.2 – Сенс змінних та параметрів у математичній моделі

Група параметрів	Змінні	Сенс у математичній моделі
Геометрія профілів	profile_side, z_samples	задають систему вертикальних профілів Γ_{ij} та кількість відліків за z
Контрольна сітка	grid_xy, grid_z, slice_z	визначають точки, у яких перевіряються оператори реконструкції
Ваги Шепарда	lambda_3d, beta_3d, anisotropy_z	задають форму ваг оберненої відстані у 3D
Локальний Shepard	modified_* , modified_shepard_neighbors	обмежують розрахунок найближчими відліками та окремою шкалою z
IDW	legacy_profile_lambda_2d, legacy_profile_beta_2d	параметри старого профільного усереднення за горизонтальною відстанню
Інтегральні оцінки	pollution_threshold, physical_* , bulk_density_kg_m3	перехід від нормованого поля до умовного об'єму, інтеграла та масового індексу

Таблиця Б.3 – Профільна трикутна інтерлінація

Об’єкт у програмі	Форма даних	Зміст
positions	(m^2, 2)	горизонтальні координати профілів
z_samples	(S,)	нормовані глибини від 0 до 1
profiles	(m^2, S)	значення поля на кожному вертикальному профілі
coords_arr	(m^2 S, 3)	3D-точки для Shepard 3D
values_arr	(m^2 S,)	значення поля у 3D-точках профілів

Основний оператор у програмі – профільна трикутна інтерлінація. Він не усереднює всі профілі одночасно. Спочатку знаходиться трикутник сітки профілів, що містить горизонтальну проекцію точки реконструкції. Потім на трьох

вершинах трикутника значення на потрібній глибині обчислюється одновимірною інтерполяцією вздовж вертикальних профілів. Після цього три значення комбінуються барицентричними вагами.

$$O_T f(x,y,z) = \lambda_1 f_{V_1}(z) + \lambda_2 f_{V_2}(z) + \lambda_3 f_{V_3}(z),$$

$$\left[\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1\right]\begin{bmatrix}\lambda_2 \\ \lambda_3\end{bmatrix} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_1,\ \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1,\ \lambda_1 = 1 - \lambda_2 - \lambda_3 .$$

Фрагмент програмного коду, що відповідає за барицентричні ваги і вибір трикутника, має вигляд:

```
0089: def barycentric_weights(point: np.ndarray, triangle: np.ndarray) -> np.ndarray:
0090:     a, b, c = triangle
0091:     mat = np.array([[b[0] - a[0], c[0] - a[0]], [b[1] - a[1], c[1] - a[1]]], dtype=float)
0092:     rhs = point – a
0093:     uv = np.linalg.solve(mat, rhs)
0094:     return np.array([1.0 - uv[0] - uv[1], uv[0], uv[1]], dtype=float)
    ...
0119:     coords = make_profile_positions(profile_side)[vertices]
0120:    weights = barycentric_weights(np.array([xq, yq], dtype=float), coords)
0121:     return vertices, weights
0122:
0123:
```

Фрагмент програмного коду, що відповідає за обчислення значення інтерлінації, має вигляд:

```
0124: def profile_interlineation_eval(
0125:     xq: float,
0126:     yq: float,
0127:     zq: float,
0128:     positions: np.ndarray,
0129:     z_samples: np.ndarray,
    ...
0134:     vertices, weights = containing_structured_triangle(xq, yq, profile_side)
0135:     vertical_values = np.array([np.interp(zq, z_samples, profiles[v, :]) for v in vertices])
0136:     return float(np.dot(weights, vertical_values))
0137:
0138:
```

Псевдокод основного оператора: знайти комірку сітки; вибрати один з двох трикутників; обчислити λ_1, λ_2, λ_3; для кожної вершини виконати vertical

interpolation за *z*; повернути скалярний добуток ваг і трьох вертикальних значень.

IDW як база залишена у програмі як контрольний старий підхід. Її не слід називати інтерлінацією: вона не використовує трикутник, не має барицентричних ваг і не гарантує точного відтворення афінних полів. За змістом це обернено-відстаневе профільне усереднення, близьке до базової ідеї Шепарда, але застосоване не до довільної 3D-хмари, а до вертикальних профілів після інтерполяції за глибиною

$$f_{\mathrm{IDW}}(x,y,z)=\frac{\sum_i w_i f_i(z)}{\sum_i w_i},\ w_i=(d_i+\lambda)^{-\beta},\ d_i=\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}\ .$$

Фрагмент програмного коду, що відповідає за профільну IDW, має вигляд:

```
0139: def legacy_profile_idw_eval(
0140:     xq: float,
0141:     yq: float,
0142:     zq: float,
0143:     positions: np.ndarray,
0144:     z_samples: np.ndarray,
    ...
0152:     if distances[nearest] < 1e-12:
0153:         return float(vertical_values[nearest])
0154:     weights = 1.0 / (distances + lambda_2d) ** beta_2d
0155:     return float(np.dot(weights, vertical_values) / np.sum(weights))
0156:
```

Для порівняння з профільною інтерлінацією програма перетворює профілі на хмару 3D-точок. Класичний Shepard 3D використовує всі точки, тому може надмірно згладжувати локальні плями. Локальний модифікований Shepard використовує той самий механізм ваг, але обмежує розрахунок найближчими відліками, що зменшує глобальне згладжування

$$f_{\mathrm{Sh}}(q)=\frac{\sum_i W_i(q)F_i}{\sum_i W_i(q)},\ W_i(q)=\left(\|A(q-q_i)\|+\lambda\right)^{-\beta}.$$

Фрагмент програмного коду, що відповідає за спільну функцію для Shepard 3D і локального Shepard, має вигляд

```
0158: def shepard3d_eval(
0159:     xq: float,
0160:     yq: float,
0161:     zq: float,
0162:     coords: np.ndarray,
0163:     values: np.ndarray,
      ...
0185:
0186:     local_dist = dist[selected]
0187:     weights = 1.0 / (local_dist + lambda_3d) ** beta_3d
0188:     return float(np.dot(weights, values[selected]) / np.sum(weights))
0189:
```

Таблиця Б.4 – Цикл оцінювання та формування похибок

Метод	Які точки використовує	Програмна роль
Shepard 3D	усі 3D-відліки профілів	глобальний обернено-відстаневий метод порівняння
Модифікований Shepard	найближчі 32 3D-відліки	локалізований варіант для зменшення надмірного згладжування
IDW	усі профілі у площині (x,y)	старий евристичний profile- IDW, не основний оператор
Трикутна інтерлінація	три профілі у локальному трикутнику	основний профільно-орієнтований оператор

Розділ 4 містить таблиці й рисунки з числовими значеннями похибок. У цьому додатку достатньо показати, як ці похибки формуються програмно. Функція evaluate_reconstruction перебирає контрольну сітку, обчислює істинне значення тестового поля, викликає кожен оператор реконструкції та накопичує абсолютні похибки.

$$\max|e| = \max_q |f_h(q) - f(q)|,\ \text{mean}|e| = \frac{1}{N}\sum_q |f_h(q) - f(q)|,$$

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{q}\left(f_h(q) - f(q)\right)^2}\,.$$

Фрагмент програмного коду, що відповідає за цикл оцінювання реконструкцій, має вигляд:

```
0214: def evaluate_reconstruction(
0215:     config: SoilConfig,
0216:     field: FieldFunction,
0217:     profile_side: int | None = None,
0218:     include_slice: bool = True,
0219:     include_shepard: bool = True,
    ...
0277:     }
0278:     if include_shepard:
0279:         metrics["shepard3d"] = error_stats(err_shep)
0280:         metrics["modified_shepard"] = error_stats(err_mod)
0281:     return metrics
```

Окремі функції не дублюють висновки розділу 4, а забезпечують контроль якості програми. run_exactness_tests перевіряє сталі та афінні поля; run_smooth_convergence повторює розрахунок для різної кількості профілів; compute_integral_mass обчислює інтегральний показник, умовний фізичний інтеграл, об’єм зони вище порогу та масово-зважений індекс.

Фрагмент програмного коду, що відповідає за тести точності та збіжності, має вигляд:

```
0284: def run_exactness_tests(config: SoilConfig) -> list[dict[str, float | str]]:
0285:     test_config = replace(config, grid_xy=17, grid_z=9)
0286:     rows: list[dict[str, float | str]] = []
0287:     for name, field in [("constant", constant_field), ("affine_linear", affine_field)]:
0288:         metrics = evaluate_reconstruction(test_config, field, include_slice=False, include_shepard=True)
0289:         for method_key, label in [
    ...
0320:         h = 1.0 / (side - 1)
0321:         rows.append(
0322:             {
0323:                 "profile_side": side
0324:                 "profiles_count": side * side
```

Фрагмент програмного коду, що відповідає за інтегральні показники, має

вигляд:

```
0334: def integrate_field_on_unit_cube(values: np.ndarray, grid: np.ndarray, z_grid: np.ndarray) -> float:
0335:     by_z = np.trapezoid(values, z_grid, axis=2)
0336:     by_y = np.trapezoid(by_z, grid, axis=1)
0337:     return float(np.trapezoid(by_y, grid, axis=0))
0338:
0339:
    ...
0401:         row["absolute_error"] = error
0402:         row["relative_error_percent"] = 100.0 * error / denom
0403:     return rows
0404:
0405:
```

Таблиця Б.5 – Вихідні файли програми

Перевірка	Функція	Що підтверджує
Константне поле	run_exactness_tests	оператори не створюють штучний зсув сталої величини
Афінне поле	run_exactness_tests	трикутна інтерлінація відтворює лінійні поля на рівні машинної похибки
Ущільнення профілів	run_smooth_convergence	зменшення кроку профільної сітки зменшує RMSE для гладкого поля
Інтегральний показник	compute_integral_mass	перевіряє збереження сумарного навантаження після реконструкції
Порогова зона	compute_integral_mass	оцінює об'єм області, де відносна концентрація перевищує заданий поріг

Функція write_outputs створює матеріали для розділу 4. У цьому додатку не повторюються графіки і числові таблиці, оскільки вони вже подані у розділі 4. Натомість наведено реєстр файлів, щоб було зрозуміло, звідки береться кожен результат.

Фрагмент програмного коду, що відповідає за експорт CSV, PNG і JSON, має вигляд:

```
0966: def write_outputs(out_dir: Path, config: SoilConfig, metrics: dict[str, Any]) -> None:
0967:     out_dir.mkdir(parents=True, exist_ok=True)
0968:     with (out_dir / "section3_soil_reconstruction_slice.csv").open("w", newline="", encoding="utf-8") as f:
0969:         writer = csv.writer(f)
0970:         writer.writerow(["x", "y", "true", "interlineation", "legacy_profile_idw", "shepard3d", "modified_shepard"])
0971:         for row in metrics["slice_rows"]:
      ...
0982:     write_surface_perspective(out_dir / "section3_soil_reconstruction_surface_perspective.png", metrics["slice_rows"])
0983:     write_cross_section_profiles(out_dir / "section3_soil_reconstruction_profile_cut.png", metrics["slice_rows"])
0984:     draw_exactness_chart(out_dir / "section3_soil_exactness_affine_error.png", exact_rows)
0985:     draw_line_chart(out_dir / "section3_soil_smooth_convergence.png", convergence_rows)
0986:     draw_integral_chart(out_dir / "section3_soil_integral_mass_errors.png", integral_rows)
```

Програма запускається як окремий скрипт. Точка входу main() створює конфігурацію, виконує розрахунок для synthetic_soil_field і передає результати до write_outputs. Це забезпечує повторюваний цикл: параметри → профілі → реконструкції → перевірки → вихідні файли.

Фрагмент програмного коду, що відповідає за точку входу програми, має вигляд:

```
1166: def main() -> None:
1167:     config = SoilConfig()
1168:     metrics = evaluate_reconstruction(config, synthetic_soil_field)
1169:     out_dir = Path(__file__).resolve().parents[1] / "section4_experiments_results" / "outputs"
1170:     write_outputs(out_dir, config, metrics)
```

Важливе обмеження: формула Литвина зі старих додатків у цьому Python-модулі не реалізована як окремий обчислювальний baseline, тому розділ 4 не повинен заявляти чисельне порівняння з формулою Литвина без додаткової верифікованої реалізації. Її можна згадувати як теоретично пов’язаний оператор, якщо посилання підтверджене у розділі 3 і переліку джерел посилання.

Таблиця Б.6 – Відповідність формул, функцій та матеріалів розділу 4

Файл	Тип даних	Де використовується
section3_soil_reconstruction_slice.csv	значення на робочому зрізі	джерело для heatmap і pseudo-3D рисунків розділу 4
section3_soil_comparative_characteristics.csv	max, mean, RMSE, відношення RMSE	таблиця порівняння методів у розділі 4
section3_soil_exactness_tests.csv	похибки на сталому й афінному полях	підтримка твердження про точне відтворення простих полів
section3_soil_smooth_convergence.csv	RMSE при різній кількості профілів	таблиця і графік збіжності у розділі 4
section3_soil_integral_mass.csv	інтеграл, пороговий об'єм, масовий індекс	підтримка інтегральної інтерпретації результатів
section3_soil_parameter_manifest.json	параметри запуску	відтворюваність обчислювального сценарію
*.png	візуалізації	рисунки розділу 4; у додатку не дублюються

Поточний скрипт використовує synthetic_soil_field, тому він є контрольним обчислювальним сценарієм. Для переходу до реальних вимірювань не потрібно змінювати математичну частину операторів. Потрібно замінити етап формування profiles: замість значень синтетичного поля у масив profiles записуються лабораторні концентрації на вертикальних профілях. Якщо глибини відбору проб різні для різних профілів, перед реконструкцією треба привести їх до спільної сітки z_samples або зберігати окрему сітку глибин для кожного профілю і змінити функцію vertical interpolation.

Таблиця Б.7 – Запуск програми та обмеження реалізації

Формула / поняття	Функція Python	Матеріал розділу 4
система профілів Γ_{ij}	make_profile_positions, make_profiles	геометрія вертикальних профілів
барицентричні ваги λ_i	barycentric_weights	обґрунтування профільної трикутної інтерлінації
оператор $O_T f$	profile_interlineation_eval	основна реконструкція ґрунтового поля
IDW-ваги	legacy_profile_idw_eval	порівняльний baseline
3D-ваги Шепарда	shepard3d_eval	класичний і локальний модифікований Shepard
max, mean, RMSE	error_stats, evaluate_reconstruction	порівняльні таблиці похибок
точність для афінних полів	run_exactness_tests	контроль теоретичної властивості інтерлінації
залежність від кроку	run_smooth_convergence	перевірка сіткової збіжності
інтеграл і пороговий об'єм	compute_integral_mass	інтегральні екологічні індикатори

Таким чином, програмна архітектура відокремлює два рівні: оператори реконструкції та джерело даних. У дисертаційному контрольному прикладі джерелом даних є синтетичне поле, бо треба знати істинне значення $f(x,y,z)$ для розрахунку похибки. У реальному моніторингу істинне поле невідоме, тому замість повної похибки використовуються cross-validation, контроль залишків у профілях або порівняння з додатковими лабораторними точками.

Таблиця Б.8 – Етапи адаптації

Етап адаптації	Що змінюється у програмі	Що не змінюється
Завантаження даних	додається читання CSV/XLSX з координатами профілів, глибинами та концентраціями	формули інтерлінації та Шепарда
Калібрування одиниць	відносна шкала замінюється на мг/кг або іншу лабораторну одиницю	структура масиву profiles
Нерівномірні профілі	потрібна Delaunay-тріангуляція або інший пошук локального трикутника	барицентрична ідея локального відновлення
Пропуски вимірювань	додається перевірка NaN, фільтрація або локальна інтерполяція за глибиною	порівняння операторів після підготовки даних
Порогові зони	pollution_threshold задається за нормативом або експертним рівнем	обчислення інтегрального/ порогового індикатора

Щоб не виникало розходження між програмою, розділом 4 і додатками, числові значення не слід переписувати вручну з проміжних скриншотів. Правильний порядок такий: змінити SoilConfig або джерело профілів; запустити скрипт; перевірити section3_soil_parameter_manifest.json; оновити CSV-файли; лише після цього переносити потрібні таблиці або рисунки у розділ 4. Додаток Б при цьому залишається технічним описом алгоритму і не дублює аналітичні висновки.

Отже, програмний модуль реалізує повний шлях від профільних вхідних даних до файлів, з яких формуються таблиці й рисунки розділу 4. На відміну від розділу 4, цей додаток не повторює числовий аналіз, а документує алгоритми, структуру даних, відповідність формулам та правила відтворення обчислювального експерименту.

Таблиця Б.9 – Контрольні пункти практичної перевірки

Контрольний пункт	Практична перевірка
Версія параметрів	значення у SoilConfig збігаються з manifest JSON
Склад методів	у comparative CSV є всі рядки: interlineation, IDW baseline, Shepard 3D, modified Shepard
Відсутність ручних чисел	таблиці розділу 4 беруться з CSV, а не з довільного переписування
Відтворюваність рисунків	PNG-файли згенеровано тим самим запуском, що й таблиці
Коректність тверджень	у тексті не заявляється чисельна реалізація формули Литвина, доки її немає у коді

ДОДАТОК В

Варіаційне виведення редукованої дифузійно-реакційної постановки

Вихідною ідеєю є рівняння матеріального балансу для багатокомпонентного середовища, у якому зміна концентрації кожної компоненти визначається дифузійним переносом, можливим конвективним переносом, реакційними перетвореннями та локалізованими джерелами або стоками речовини. У класичних моделях переносу багатокомпонентних сумішей така постановка використовується для опису реакторних систем із точковою подачею або відведенням речовини. У цій роботі ця ідея адаптується до задачі поширення забруднень CO_2 та SO_3 у повітряному середовищі від трубоподібних локалізованих джерел.

На відміну від реакторної постановки, де одномірність може випливати з інтенсивного поперечного перемішування в коридорному каналі, у задачі атмосферного забруднення одномірна модель трактується як редукований опис уздовж вибраного напряму переважаючого переносу або вздовж осі аналізованого профілю. Така редукція не претендує на повний тривимірний опис повітряного середовища, а використовується для побудови узгодженої крайової задачі, придатної для варіаційної постановки, FEM-дискретизації та порівняння профілів концентрацій.

У цьому додатку наведено деталізацію варіаційного переходу, який у основному тексті використовується для обґрунтування редукованої самоспряженої дифузійно-реакційної постановки. Повна конвективно-дифузійно-реакційна модель загалом є несамоспряженою через наявність конвективного оператора, тому для неї базовою є слабка форма Гальоркіна. Натомість функціонал Рітца використовується для редукованої частини задачі, у якій конвективний член або занулюється, або не включається до мінімізованого функціонала.

Такий підхід узгоджується з класичними варіаційними методами, методом скінченних елементів та концепцією локального потенціалу для дисипативних систем [34, 35, 38, 39].

Для одновимірної області $x \in 0, L$ природним простором слабкої постановки є простір Соболєва $H^1(0, L)$. Тому концентрації шукаються у вигляді $C_i(x) \in H^1(0, L)$, $i = 1, 2$. Цей простір є достатнім для того, щоб перші слабкі похідні входили до інтегралів дифузійної частини, а граничні значення на кінцях інтервалу були коректно визначені. Саме тому у слабкій постановці можна використовувати умови Робіна та відповідні граничні внески [34, 35 ,77 , 78].

Для довільної допустимої варіації вводиться сім'я функцій

$$C_i^{\varepsilon}(x) = C_i(x) + \varepsilon \eta_i(x),$$

де ε – малий параметр, а $\eta_i(x) \in H^1(0, L)$ – довільна тестова функція.

Стаціонарність функціонала означає $\dfrac{d}{d\varepsilon} I(C_i + \varepsilon \eta_i)|_{\varepsilon=0} = 0$.

Для однієї компоненти дифузійна частина редукованого функціонала може бути записана у вигляді

$$I_D(C_i) = \frac{1}{2} \int_0^L D_i \left(\frac{dC_i \ x}{dx} \right)^2 dx.$$

.

Її перша варіація дорівнює

$$\delta I_D = \int_0^L D_i \frac{dC_i(x)}{dx} \frac{d\eta_i}{dx} dx.$$

Після інтегрування частинами маємо

$$\delta I_D = \left[D_i \frac{dC_i(x)}{dx} \eta_i \right]_0^L - \int_0^L \frac{d}{dx} \left(D_i \frac{dC_i(x)}{dx} \right) \eta_i \ \ x \ \ dx.$$

Отже, в об'ємній частині варіації виникає дифузійний оператор

$$\frac{d}{dx}\left(D_i \frac{dC_i\ x}{dx}\right).$$

Граничний член обробляється окремо відповідно до заданих крайових умов.

У прийнятій моделі нелінійна реакційна частина зосереджена у рівнянні для другої компоненти $C_2(x) \equiv SO_3$. Надалі вважаємо, що $D_i > 0$, $K_m > 0$, $C_2 \geq 0$, а параметри k_r, k_D, k_{SO_3}, λ_{SO_3}, C_{H_2O}, C_{O_2} є невід'ємними. Це забезпечує коректність реакційного закону та відсутність виродження знаменника $K_m + C_2$.

Для неї використовується реакційний закон

$$g(C_2) = \frac{k_r C_2}{K_m + C_2} + k_D C_2 + k_{SO_3} C_{H_2O} C_2 + \lambda_{SO_3} C_{O_2} C_2.$$

Щоб отримати цей член із варіаційної постановки, вводиться локальний реакційний потенціал $\Phi(C_2)$, для якого $\Phi'(C_2(x)) = g(C_2(x))$. Один із можливих записів такого потенціалу має вигляд

$$\Phi(C_2) = k_r (C_2 - K_m \ln(K_m + C_2)) + \frac{1}{2}(k_D + k_{SO_3} C_{H_2O} + \lambda_{SO_3} C_{O_2})\, C_2^2.$$

Тоді реакційна частина функціонала для другої компоненти записується як $I_R(C_2) = -\int_0^L \Phi(C_2(x))\, dx$. Її перша варіація дорівнює

$$\delta I_R = -\int_0^L g(C_2(x))\eta(x)\, dx.$$

Саме цей внесок надалі переходить у нелінійний реакційний вектор FEM-системи для другої компоненти.

Точкові джерела *i*-ї компоненти задаються у вигляді $f_i(x) = \sum_{k=1}^{p_i} q_{ik}\delta(x - x_{ik})$, у слабкій формі цей результат еквівалентний викорис-

танню властивості дельта-функції Дірака $\int_0^L \eta_i(x)\delta(x-x_{ik})\,dx = \eta_i(x_{ik})$. Тому точкові джерела природно входять у слабку FEM-постановку через значення тестових функцій у точках розташування джерел [77, 78].

На лівій межі $x=0$ умова Робіна може бути записана у вигляді

$$D_i C_i'(0) = \kappa_{i,0}(C_i(0) - C_{i,0}^{ext}).$$

Для отримання такої умови як природної у варіаційній постановці вводиться граничний функціонал

$$I_{R,0}(C_i) = \frac{1}{2}\kappa_{i,0}(C_i(0) - C_{i,0}^{ext})^2.$$

Його перша варіація дорівнює

$$\delta I_{R,0} = \kappa_{i,0}(C_i(0) - C_{i,0}^{ext})\eta_i(0).$$

У поєднанні з граничним членом від дифузійної частини це дає умову Робіна на $x=0$. Для правої межі $x=L$ у основній моделі може використовуватися природна відкрита умова, тобто відсутність додаткового дифузійного потоку. У такому випадку додатковий робінівський граничний функціонал на $x=L$ не вводиться. У більш загальному випадку праву умову Робіна можна записати як $-D_i C_i'(L) = \kappa_{i,L}(C_i(L) - C_{i,L}^{ext})$. Тоді аналогічний граничний внесок має вигляд $I_{R,L}(C_i) = \frac{1}{2}\kappa_{i,L}(C_i(L) - C_{i,L}^{ext})^2$. Такі граничні внески є стандартними для слабких і варіаційних постановок задач із крайовими умовами Робіна [34, 35, 40].

Важливо, що у варіаційній постановці частина граничних умов може виникати як природні умови функціонала. Це означає, що вони не нав'язуються окремо як жорсткі обмеження на допустимий клас функцій, а з'являються з граничних членів першої варіації. Такий підхід особливо зручний для умов Робіна та відкритих природних меж, оскільки дозволяє узгоджено включати гра-

ничні потоки у FEM-систему.

Для другої компоненти C_2 редукована слабка форма має вигляд: знайти $C_2 \in H^1(0,L)$, таку що для всіх тестових функцій $\eta_2 \in H^1(0,L)$

$$\int_0^L D_2 C_2'(x)\eta_2'(x)\,dx - \int_0^L g(C_2(x))\eta_2(x)\,dx - \sum_{k=1}^{p_2} q_{2k}\eta_2(x_{2k}) + \delta I_{\partial\Omega}^{\,2} = 0.$$

Тут $\delta I_{\partial\Omega}$ позначає суму граничних внесків, що відповідають умовам Робіна або природним граничним умовам. Після знаходження C_2 перша компонента C_1 визначається з лінійної редукованої FEM-системи. Її слабка форма має вигляд

$$\int_0^L D_1 C_1'(x)\eta_1'(x)\,dx - \int_0^L \beta k_D C_2(x)\eta_1(x)\,dx - \sum_{k=1}^{p_1} q_{1k}\eta_1(x_{1k}) + \delta I_{\partial\Omega}^{\,1} = 0.$$

Тут $C_2(x)$ вже вважається відомим після першої Newton/FEM-стадії.

Конвективний член повної моделі має вигляд $-\dfrac{d}{dx}(u(x)C_i(x))$. Загалом цей оператор є несамоспряженим, тому він не включається до глобального мінімізованого функціонала Рітца для повної задачі. Якщо конвективний вплив є суттєвим, повна модель повинна дискретизуватися через слабку форму Галеркіна. У редукованій дифузійно-реакційній постановці використовується перехід $u(x) = 0$ або винесення конвективного внеску за межі функціонала. Це дозволяє застосувати варіаційний функціонал до самоспряженої частини задачі. Така редукція є природною, зокрема, у дифузійно-домінованому режимі, коли число Пекле є малим. Таким чином, у роботі використовуються дві узгоджені постановки:

а) повна конвективно-дифузійно-реакційна модель – через слабку форму Гальоркіна;

б) редукована самоспряжена дифузійно-реакційна постановка – через функціонал Рітца, FEM-дискретизацію та модифікований метод Ньютона.

ДОДАТОК Г

Обчислення нелінійного реакційного вектору за двоточковою квадратурою Гаусса

У редукованій FEM/Newton-схемі нелінійний реакційний член для другої компоненти C_2, що відповідає концентрації SO_3, входить до вектора нев'язки через інтеграл

$$G_{2,m}(\vec{C}_2) = \int_0^L g(C_2^h(x)) h_m(x)\,dx,\ m = 0,\ldots,M.$$

Тут $C_2^h(x)$ – скінченно-елементне наближення другої компоненти, $h_m(x)$ – кусково-лінійна P_1-базисна функція, а $g(C_2(x))$ – реакційний закон для SO_3. Оскільки $g(C_2(x))$ є нелінійною функцією, відповідний інтеграл доцільно обчислювати поелементно за допомогою квадратури Гаусса [34, 35, 101, 102].

У роботі використовується реакційний закон

$$g(C_2) = \frac{k_r C_2}{K_m + C_2} + k_D C_2 + k_{SO_3} C_{H_2O} C_2 + \lambda_{SO_3} C_{O_2} C_2.$$

Перший доданок відповідає кінетиці типу Міхаеліса–Ментен, а інші доданки моделюють лінійні або феноменологічні механізми гідратації, взаємодії з водяною парою та киснем [102, 103]. Для побудови матриці Якобі у модифікованому методі Ньютона використовується аналітична похідна

$$g'(C_2(x)) = \frac{k_r K_m}{(K_m + C_2(x))^2} + k_D + k_{SO_3} C_{H_2O} + \lambda_{SO_3} C_{O_2}.$$

Аналітичне використання $g'(C_2(x))$ є доцільним, оскільки воно забезпечує узгоджену побудову матриці Якобі без необхідності застосовувати скінченно-різницеве наближення похідної.

Розглянемо довільний скінченний елемент $e = x_m, x_{m+1}$ довжина якого дорівнює $\Delta x_m = x_{m+1} - x_m$ На цьому елементі P_1-апроксимація другої компоненти має вигляд $C_2^h(x) = C_{2,m} h_m(x) + C_{2,m+1} h_{m+1}(x)$. Для застосування квадратури Гаусса виконується перехід до еталонного відрізка $\xi \in -1,1$. Зв'язок між еталонною координатою ξ і фізичною координатою x задається формулою $x(\xi) = \frac{x_m + x_{m+1}}{2} + \frac{\Delta x_m}{2}\xi$. При цьому $dx = \frac{\Delta x_m}{2} d\xi$.

Для двоточкової квадратури Гаусса-Лежандра на відрізку $-1,1$ використовуються вузли $\xi_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \xi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$, та ваги $w_1 = w_2 = 1$. Ця квадратура є точною для поліномів степеня до третього включно. У даній задачі вона використовується як ефективний чисельний інструмент для наближеного обчислення нелінійних інтегралів реакційної частини.

Відповідні фізичні точки квадратури на елементі e визначаються як $x_r^e = \frac{x_m + x_{m+1}}{2} + \frac{\Delta x_m}{2}\xi_r$, $r = 1,2$. Локальні базисні функції на еталонному елементі мають вигляд $N_1(\xi) = \frac{1-\xi}{2}$, $N_2(\xi) = \frac{1+\xi}{2}$. Тому для двох точок Гаусса зручно ввести коефіцієнти

$$a = \frac{1}{2}(1 + \frac{1}{\sqrt{3}}) \approx 0.788675, \quad b = \frac{1}{2}(1 - \frac{1}{\sqrt{3}}) \approx 0.211325$$

Тоді значення концентрації у точках Гаусса можна записати як

$$C_2^1 = aC_{2,m} + bC_{2,m+1}, \quad C_2^2 = bC_{2,m} + aC_{2,m+1}.$$

Локальний внесок елемента $e = x_m, x_{m+1}$ у реакційний вектор для лівого вузла m має вигляд $I_m^e \approx \frac{\Delta x_m}{2}\left[a\, g(C_2^1(x)) + b\, g(C_2^2(x))\right]$. Для правого вузла

$m+1$ маємо $I_{m+1}^{e} \approx \frac{\Delta x_m}{2}\left[b\, g(C_2^1(x)) + a\, g(C_2^2(x))\right]$. Оскільки базисна функція $h_m(x)$ має підтримку лише на двох сусідніх елементах $\left[x_{m-1}, x_m \cup x_m, x_{m+1}\right]$, то для внутрішнього вузла $m = 1,\ldots,M-1$ глобальний реакційний внесок є сумою двох елементних внесків:

$$G_{2,m}(\vec{C}_2(x)) \approx I_m^{e_{m-1}} + I_m^{e_m} .$$

Тут $e_{m-1} = x_{m-1}, x_m$, $e_m = x_m, x_{m+1}$. Для крайових вузлів $m = 0$ та $m = M$ відповідно враховується лише один сусідній елемент.

Для побудови матриці Якобі у методі Ньютона використовується похідна $g'(C_2(x))$. Локальний внесок у реакційну частину матриці Якобі має вигляд

$$J_{G,pq}^{e} \approx \frac{\Delta x_m}{2} \sum_{r=1}^{2} g'(C_2^h(x_r^{\,e}))N_p(\xi_r)N_q(\xi_r), \; p,q = 1,2 .$$

Якщо нев’язка для другої компоненти записана у вигляді

$$F_2(\vec{C}_2) = K^2 \vec{C}_2 - G_2(\vec{C}_2) - \vec{b}^{\,2} ,$$

то матриця Якобі має вигляд $J_2(\vec{C}_2) = K^2 - J_G(\vec{C}_2)$. Знак “–” перед J_G зумовлений тим, що реакційний вектор G_2 входить до нев’язки зі знаком мінус. Таким чином, двоточкова квадратура Гаусса використовується лише як технічний інструмент для поелементного обчислення нелінійного реакційного вектора і відповідної частини матриці Якобі. Вона не змінює фізичної постановки задачі, а забезпечує узгоджене чисельне обчислення нелінійної частини у межах редукованої FEM/Newton-схеми.

ДОДАТОК Д

Локальні матриці P_1-елементів, джерельні та граничні внески

Використання методу скінченних елементів є доцільним для цієї задачі з кількох причин. По-перше, FEM дає наближений розв'язок у вигляді кусково-аналітичної функції. По-друге, граничні умови Робіна та природні граничні умови можуть бути враховані безпосередньо у слабкій або варіаційній постановці. По-третє, метод зручно застосовувати у випадку локалізованих джерел, розривних коефіцієнтів або неоднорідних членів, які містять δ-функції. Саме ці властивості є важливими для задачі поширення забруднень від трубоподібних джерел у повітряному середовищі.

У цьому додатку наведено стандартні локальні матриці, які використовуються при побудові глобальної FEM-системи для одновимірної редукованої дифузійно-реакційної задачі. У основному тексті роботи використовуються вже зібрані глобальні матриці, тому детальні локальні виведення винесено в додаток [34, 35, 101, 102].

Розглянемо елемент $e = x_m, x_{m+1}$ довжина якого дорівнює $\Delta x_m = x_{m+1} - x_m$. На цьому елементі використовуються дві локальні P_1-базисні функції: $h_m(x) = \dfrac{x_{m+1} - x}{\Delta x_m}$, $h_{m+1}(x) = \dfrac{x - x_m}{\Delta x_m}$. Їхні похідні на елементі є сталими:

$$\frac{dh_m}{dx} = -\frac{1}{\Delta x_m}, \qquad \frac{dh_{m+1}}{dx} = \frac{1}{\Delta x_m}.$$

Локальні матриці мають розмірність 2×2, оскільки на одному одновимірному P_1-елементі є лише два вузли та дві відповідні локальні базисні функції. Після складання локальних внесків по всіх елементах формується глобальна матриця розмірності $(M+1) \times (M+1)$, де $M+1$ – кількість вузлів сітки.

Для внутрішнього вузла x_m, $m=1,\ldots,M-1$, базисна функція $h_m(x)$ відмінна від нуля лише на двох сусідніх елементах $\left[x_{m-1},x_m \cup x_m,x_{m+1}\right]$. На всіх інших елементах вона дорівнює нулю. Тому кожне вузлове рівняння FEM-системи містить внески лише від сусідніх вузлів. Саме ця локальність приводить до розрідженої, зокрема тридіагональної, структури глобальних матриць у одновимірній P_1-FEM-схемі [34, 35, 101, 102].

Дифузійна частина слабкої форми приводить до локальної матриці

$$K_{a,b}^{(i,e)} = \int_{x_m}^{x_{m+1}} D_i \frac{dN_a}{dx}\frac{dN_b}{dx}dx,\ a,b=1,2.$$

Для сталого коефіцієнта дифузії D_i на елементі отримуємо

$$K_e^{\ i} = \frac{D_i}{\Delta x_m}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ця матриця додається до глобальної матриці K^i у рядки та стовпці, що відповідають вузлам m і $m+1$. Для елемента $e=x_m,x_{m+1}$ правило складання має вигляд:

$$K_{m,m}^{\ i} \leftarrow K_{m,m}^{\ i} + \frac{D_i}{\Delta x_m},\ \ K_{m,m+1}^{\ i} \leftarrow K_{m,m+1}^{\ i} - \frac{D_i}{\Delta x_m},$$

$$K_{m+1,m}^{\ i} \leftarrow K_{m+1,m}^{\ i} - \frac{D_i}{\Delta x_m},\ \ K_{m+1,m+1}^{\ i} \leftarrow K_{m+1,m+1}^{\ i} + \frac{D_i}{\Delta x_m}.$$

Якщо коефіцієнт дифузії залежить від координати, тобто $D_i = D_i(x)$, то на елементі може використовуватися усереднене значення $D_i^{\ e}$ або чисельне інтегрування.

Масова матриця виникає при L^2-проекції похідної, а також при записі лінійних реакційних або зв'язувальних внесків у FEM-просторі.

Її локальні елементи визначаються як

$$M_{ab}^{\ e} = \int_{x_m}^{x_{m+1}} N_a(x) N_b(x)\, dx, \quad a,b = 1,2.$$

Для лінійних P_1-елементів маємо

$$M_e = \frac{\Delta x_m}{6}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Для рівномірної сітки з кроком h глобальна матриця мас має вигляд

$$\mathbf{M} = \frac{h}{6}\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 4 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 4 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Ця матриця є симетричною, додатно визначеною та тридіагональною для одновимірної P_1-сітки.

Точкові джерела задаються у вигляді $f_i(x) = \sum_{k=1}^{p_i} q_{ik}\delta(x - x_{ik})$. Їхній внесок у праву частину для базисної функції $h_m(x)$ дорівнює $b_m^{\ i} = \int_0^L h_m(x) f_i(x)\, dx$. За властивістю дельта-функції Дірака маємо $b_m^{\ i} = \sum_{k=1}^{p_i} q_{ik} h_m(x_{ik})$. Якщо джерело x_{ik} лежить всередині елемента $\left[x_j, x_{j+1}\right]$, то воно впливає лише на два сусідні вузли:

$$b_j^{\ i} \leftarrow b_j^{\ i} + q_{ik} h_j(x_{ik}), \quad b_{j+1}^{\ i} \leftarrow b_{j+1}^{\ i} + q_{ik} h_{j+1}(x_{ik}).$$

Для P_1-елемента ці значення можна записати явно:

$$h_j(x_{ik}) = \frac{x_{j+1} - x_{ik}}{x_{j+1} - x_j}, \quad h_{j+1}(x_{ik}) = \frac{x_{ik} - x_j}{x_{j+1} - x_j}.$$

Таким чином, інтенсивність точкового джерела розподіляється між сусідніми вузлами лінійно відповідно до положення джерела всередині елемента. Якщо джерело збігається з вузлом сітки, його внесок повністю додається до відповідної компоненти правої частини.

Фізично інтенсивність q_{ik} може бути пов'язана з параметрами k-го джерела викиду. Якщо C_{ik}^{src} – концентрація i-ї речовини у вихідному газовому потоці джерела, A_k – площа перерізу вихідного отвору, u_k – характерна швидкість вихідного потоку, а A – ефективна площа області осереднення, то інтенсивність локалізованого джерела можна задавати у вигляді $q_{ik} = \frac{C_{ik}^{src} A_k u_k}{A}$. Якщо позначити об'ємну витрату через $Q_k = A_k u_k$, то еквівалентно $q_{ik} = \frac{C_{ik}^{src} A_k}{A}$. Такий запис узгоджується з припущенням, що геометричний розмір джерела значно менший за характерний масштаб області моделювання, тому його внесок у рівняння переносу може бути поданий через δ-функцію.

Умова Робіна на межі задає зв'язок між дифузійним потоком і відхиленням концентрації від зовнішнього або вхідного значення. У FEM-системі така умова дає додатковий внесок у діагональний елемент матриці та у праву частину [34, 35, 40]. У випадку вхідної межі $x = 0$ величина $C_{i,0}^{ext}$ ототожнюється із заданою вхідною або фоновою концентрацією C_i^{in}, тобто $C_{i,0}^{ext} \equiv C_i^{in}$.

Для лівої межі $x = 0$ розглянемо умову

$$D_i C_i'(0) = \kappa_{i,0}(C_i(0) - C_{i,0}^{ext}).$$

У матричній збірці це дає оновлення

$$K_{0,0}^{\,i} \leftarrow K_{0,0}^{\,i} + \kappa_{i,0}, \quad f_0^{\,i} \leftarrow f_0^{\,i} + \kappa_{i,0} C_{i,0}^{ext}.$$

Для правої межі $x = L$ у загальному випадку можна записати умову

$$-D_i C_i'(L) = \kappa_{i,L}(C_i(L) - C_{i,L}^{ext}).$$

Тоді відповідні оновлення мають вигляд

$$K_{M,M}^{\ i} \leftarrow K_{M,M}^{\ i} + \kappa_{i,L},\ f_M^{\ i} \leftarrow f_M^{\ i} + \kappa_{i,L} C_{i,L}^{ext}.$$

Якщо у моделі на правій межі використовується природна умова відсутності додаткового дифузійного потоку, то робінівський внесок на $x = L$ не додається.

У цьому додатку наведено явний вигляд системи, яка використовується для відновлення вузлових значень похідної після знаходження концентрацій C_1 та C_2. Ця система є етапом постобробки FEM-розв'язку і не вводить нової фізичної задачі переносу.

У підрозділі про L^2-проєкцію вузлова похідна визначається із системи

$$\mathbf{M}\vec{G}_i = \mathbf{S}\vec{C}_i,\ i = 1,2.$$

Тут $\vec{G}_i = (G_{i,0}, G_{i,1}, \ldots, G_{i,M})^T$ – вектор вузлових значень похідної, а $\vec{C}_i = (C_{i,0}, C_{i,1}, \ldots, C_{i,M})^T$ – вектор уже знайдених вузлових концентрацій.

Матриця $\mathbf{M}$ є стандартною матрицею мас, а матриця $\mathbf{S}$ визначається як

$$S_{\ell m} = \int_0^L h_m'(x) h_\ell(x)\, dx.$$

Індекс m відповідає базисній функції, яка диференціюється, а індекс ℓ – тестовій функції. Оскільки матриця мас $\mathbf{M}$ для P_1-елементів є симетричною та додатно визначеною, система $\mathbf{M}\vec{G}_i = \mathbf{S}\vec{C}_i$ має єдиний розв'язок для кожної компоненти $i = 1,2$ [34, 35, 101, 102].

Для рівномірної сітки з кроком h матриця мас має вигляд

$$\mathbf{M}=\frac{h}{6}\begin{pmatrix}2 & 1 & 0 & \cdots & 0\\ 1 & 4 & 1 & \cdots & 0\\ 0 & 1 & 4 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2\end{pmatrix}$$

Коефіцієнти 2 у першому та останньому рядках виникають тому, що крайові вузли належать лише одному елементу, тоді як внутрішні вузли належать двом сусіднім елементам.

За прийнятим означенням $S_{\ell m}=\int_0^L h_m'(x)h_\ell(x)\,dx$ для внутрішніх вузлів $\ell=1,\ldots,M-1$ маємо

$$S_{\ell,\ell-1}=-\frac{1}{2},\ S_{\ell,\ell}=0,\ S_{\ell,\ell+1}=\frac{1}{2}.$$

На лівій межі

$$S_{0,0}=-\frac{1}{2},\ S_{0,1}=\frac{1}{2}.$$

На правій межі

$$S_{M,M-1}=-\frac{1}{2},\ S_{M,M}=\frac{1}{2}.$$

Тому матриця $\mathbf{S}$ має вигляд

$$\mathbf{S}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1 & 1 & 0 & \cdots & 0\\ -1 & 0 & 1 & \cdots & 0\\ 0 & -1 & 0 & 1 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1\\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 1\end{pmatrix}$$

Ця матриця не є матрицею жорсткості фізичної задачі переносу. Вона виникає лише при слабкому представленні похідної у процедурі L^2-проєкції.

Для внутрішнього вузла $\ell = 1,\ldots,M-1$ система $\mathbf{M}\vec{G}_i = \mathbf{S}\vec{C}_i$ дає рівняння

$$\frac{h}{6}G_{i,\ell-1} + \frac{4h}{6}G_{i,\ell} + \frac{h}{6}G_{i,\ell+1} = \frac{1}{2}(C_{i,\ell+1} - C_{i,\ell-1}).$$

Для лівого краю $\ell = 0$ маємо $\frac{h}{3}G_{i,0} + \frac{h}{6}G_{i,1} = \frac{1}{2}(C_{i,1} - C_{i,0})$. Для правого краю $\ell = M$ маємо $\frac{h}{6}G_{i,M-1} + \frac{h}{3}G_{i,M} = \frac{1}{2}(C_{i,M} - C_{i,M-1})$. Ці рівняння показують, що система L^2-проекції згладжує поелементні сталі значення похідної та дає узгоджені вузлові значення $G_{i,m}$.

Після знаходження $\vec{G}_i$ вузловий дифузійний потік уздовж осі *x* визначається як

$$J_{i,m} = -D_i G_{i,m},\ m = 0,\ldots,M.$$

У векторному вигляді $\vec{J}_i = -D_i\vec{G}_i$. Якщо коефіцієнт дифузії є змінним, тобто $D_i = D_i(x)$, то потік доцільно обчислювати поелементно або через окрему проекцію добутку $D_i(x)G_i^h(x)$.

Якщо на межі використовується умова Робіна, то отримані вузлові значення похідної можна порівнювати з граничним потоком. Це є лише процедурою контролю, а не новою крайовою задачею для похідної.

Для лівої межі $D_i C_i'(0) = \kappa_{i,0}(C_i(0) - C_{i,0}^{ext})$ контрольне значення похідної має вигляд

$$G_{i,0}^{Robin} = \frac{\kappa_{i,0}}{D_i}(C_{i,0} - C_{i,0}^{ext}).$$

Для правої межі у загальному випадку Робіна

$$-D_i C_i'(L) = \kappa_{i,L}(C_i(L) - C_{i,L}^{ext})$$

контрольне значення можна записати як

$$G_{i,M}^{Robin} = -\frac{\kappa_{i,L}}{D_i}(C_{i,M} - C_{i,L}^{ext}).$$

Якщо на правій межі задана природна умова відсутності додаткового дифузійного потоку, то відповідне контрольне значення приймається як $G_{i,M}^{Robin} = 0.$ Отже, L^2-проєкція забезпечує внутрішнє відновлення вузлових похідних, а граничні умови Робіна можуть використовуватися лише як додатковий контроль або, за потреби, як спосіб перевірки крайових значень потоку. Це не змінює основної двоступеневої FEM/Newton-схеми.