

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ДИНАМИКИ РЕЛАКСАЦИОННОГО ПРОЦЕССА КОНВЕКТИВНОЙ ДИФФУЗИИ В УСЛОВИЯХ ПЛАНОВОЙ ФИЛЬТРАЦИИ

**Аннотация.** Для описания динамики релаксационного процесса конвективной диффузии в условиях плановой фильтрации предложена математическая модель, базирующаяся на уравнении в производных нецелого порядка по времени. Поставлена соответствующая этой модели краевая задача. На основе локально-одномерной схемы разработан параллельный алгоритм расчета. Приведены результаты численной реализации решения.

**Ключевые слова:** неклассические математические модели, релаксационный конвективно-диффузионный процесс, уравнение диффузии дробного порядка, краевые задачи, приближенные решения, параллельные алгоритмы.

### ВВЕДЕНИЕ

Задачи геоинформатики, связанные с разработкой методов математического моделирования динамики процессов конвективной диффузии растворимых веществ при фильтрации из различных источников загрязнений грунтовых вод, весьма актуальны, в частности в аспекте охраны окружающей среды, и активно изучаются [1–6]. При этом не утратила актуальности и проблема повышения степени адекватности существующих классических количественных моделей диффузионных процессов при фильтрации в геопористых средах. Особенно это касается геопористых сред и систем со сложной пространственно-временной структурой, для которых характерны эффекты памяти, пространственной нелокальности и самоорганизации. В этих условиях использование для моделирования динамики неравновесных конвективно-диффузионных процессов классических математических моделей не всегда корректно. Прогресс в моделировании таких процессов достигается с применением подхода, использующего формализм дробного интегро-дифференцирования. Соответствующие математические модели диффузии, интенсивно разрабатываемые в настоящее время, базируются на уравнениях дробного порядка [7–9]. Примеры такого подхода изложены в статьях [5, 6]: в первой выполнено математическое моделирование дробно-дифференциальной динамики локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при установившейся двухмерной плановой напорной фильтрации из хранилища сточных вод к водозабору (реке), во второй — моделирование указанного неравновесного диффузионного процесса при плоско-вертикальной установившейся фильтрации из хранилища промышленных стоков.

В данной работе рассматривается задача математического моделирования дробно-дифференциальной динамики релаксационного процесса конвективной диффузии при двухмерной установившейся плановой напорной фильтрации из хранилища сточных вод к водозабору (соответствующая фильтрационная схема приведена в [10]). Постановка задачи выполнена в рамках дробно-дифференциальной математической модели с учетом (в отличие от работы [5]) наличия релаксационных свойств диффузионного потока.

**ПОСТРОЕНИЕ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА И ПОСТАНОВКА КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ**

При рассмотрении релаксационного конвективно-диффузионного процесса в среде со сложной пространственно-временной структурой будем исходить из обобщения классического закона Фика [11, 12]

$$\vec{q}(x, y, t + \tilde{\tau}_q) = -d\nabla C + \vec{v}C, \quad (1)$$

где  $\vec{q}$  — конвективно-диффузионный поток,  $C$  — концентрация растворимых веществ в жидкой фазе,  $\vec{v}$  — вектор скорости фильтрации,  $d$  — коэффициент диффузии,  $\nabla$  — оператор Гамильтона,  $\tilde{\tau}_q$  — параметр релаксации потока,  $x, y, t$  — геометрические и временная переменные соответственно.

Имея в виду изучение дробно-дифференциальной динамики процесса «конвекция-диффузия с релаксацией», ограничимся в левой части соотношения (1) первыми двумя членами разложения в дробный ряд Тейлора [13] по временной переменной. Тогда получим дробно-дифференциальное обобщение релаксационного закона Фика [11] в виде

$$\vec{q} + \tau_q D_t^{(\alpha)} \vec{q} = -d\nabla C + \vec{v}C, \quad (2)$$

где  $D_t^{(\alpha)}$  — оператор дробного дифференцирования Капуто–Герасимова по переменной  $t$  порядка  $\alpha$  ( $0 < \alpha < 1$ ) [8, 9],  $\tau_q = \tilde{\tau}_q^\alpha / \Gamma(\alpha + 1)$ ,  $\Gamma(z)$  — гамма-функция Эйлера [14].

Предполагая поле скоростей фильтрации потенциальным, из (2) получаем

$$(1 + \tau_q D_t^{(\alpha)}) \operatorname{div} \vec{q} = -d\Delta C + \vec{v} \cdot \nabla C, \quad (3)$$

где  $\Delta$  — оператор Лапласа.

С учетом уравнения материального баланса

$$\sigma \frac{\partial C}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{q} = 0,$$

где  $\sigma$  — пористость среды, получаем из (3) искомое уравнение модели в виде

$$\sigma \left( \frac{\partial}{\partial t} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)} \right) C = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C \quad (0 < \alpha < 1). \quad (4)$$

Отметим, что при  $\alpha \rightarrow 1$  из соотношения (4), в частности, имеем [15]

$$\sigma \left( \frac{\partial}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) C = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C.$$

Ниже уравнение (4) применяется для изучения дробно-дифференциальной динамики процесса конвективной диффузии с релаксацией растворимых веществ в установившемся фильтрационном поле.

Рассмотрим в рамках неклассической математической модели, базирующейся на уравнении (4), задачу моделирования динамики процесса конвективной диффузии при установившейся двухмерной плановой фильтрации из котлована кругового сечения радиусом  $r > 0$  в дренажный канал соответственно фильтрационной схеме работы [5]. В математической постановке эта задача сводится к отысканию в полуплоскости с круговым вырезом решения уравнения (4), например, при следующих краевых условиях:

$$C|_{\gamma_1} = C_1, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad C(x, y, 0) = C_0(x, y), \quad C'_t(x, y, 0) = 0, \quad (5)$$

где  $C_1$  — заданная концентрация растворимых веществ на входе фильтрационного потока (границе  $\gamma_1$  хранилища),  $x=0$  — уравнение дренажного канала (на границе канала задается условие быстрого выноса растворенных веществ),  $C_0(x, y)$  — функция начального распределения концентрации.

Поскольку область фильтрации — неканоническая область сложной конфигурации, эффективный способ решения задач рассматриваемого типа основывается [5] на переходе к новым переменным  $(\varphi, \psi)$  — точкам геометрически более простой области  $G_\omega$  комплексного потенциала течения  $\omega = \varphi + i\psi$  ( $\varphi$  — потенциал скорости течения,  $\psi$  — функция тока), являющейся [10] в данной задаче прямоугольником  $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < \varphi_0, 0 < \psi < Q\}$ . Тогда соответствующую краевую задачу для исследования динамики рассматриваемого миграционного процесса математически можно сформулировать для области комплексного потенциала течения в виде

$$\sigma \left( \frac{\partial}{\partial t} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)} \right) C(\varphi, \psi, t) = v^2(\varphi, \psi) T^2 \left( d\Delta C(\varphi, \psi, t) - \frac{1}{T} \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right), \quad (6)$$

$$((\varphi, \psi, t) \in G_\omega \times (0, +\infty)),$$

$$C(0, \psi, t) = C_1, \quad \frac{\partial C(\varphi_0, \psi, t)}{\partial \varphi} = 0, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial \psi} \right|_{\psi=0, \psi=Q} = 0, \quad (7)$$

$$C(\varphi, \psi, 0) = C_0(\varphi, \psi), \quad C'_t(\varphi, \psi, 0) = 0, \quad (8)$$

где  $v^2 = v_x^2 + v_y^2$ ,  $v_x = \frac{1}{T} \frac{\partial \varphi}{\partial x}$ ,  $v_y = \frac{1}{T} \frac{\partial \varphi}{\partial y}$ ,  $\varphi_0 = \kappa HT$ ,  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \psi^2}$  — оператор Лапласа,  $T$  — мощность напорного водоносного пласта,  $Q$  — фильтрационный расход,  $\kappa$  — коэффициент фильтрации,  $H$  — действующий напор [5].

Введем безразмерные переменные и параметры следующими соотношениями (константы  $a, l, r$  определены в [5]):

$$x' = \frac{x}{r}, \quad y' = \frac{y}{r}, \quad \varphi' = \frac{\varphi}{\varphi_0}, \quad \psi' = \frac{\psi}{\varphi_0}, \quad C' = \frac{C}{C_1},$$

$$l' = \frac{l}{r}, \quad d' = \frac{dT}{\varphi_0}, \quad t' = \frac{a^2}{\varphi_0 T} t, \quad \tau'_q = \left( \frac{a^2}{\varphi_0 T} \right)^\alpha \tau_q. \quad (9)$$

Переходя в (6)–(8) к безразмерным переменным согласно (9) и опуская в дальнейшем знак «штрих» над безразмерными величинами, получаем в области  $G_\omega \times (0, +\infty)$  (здесь  $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < 1, 0 < \psi < \tilde{q}\}$ ) краевую задачу

$$\sigma \left( \frac{\partial}{\partial t} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)} \right) C(\varphi, \psi, t) = V^2(\varphi, \psi) \left( d\Delta C - \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right) \quad (0 < \alpha < 1), \quad (10)$$

$$C(0, \psi, t) = 1, \quad \frac{\partial C(1, \psi, t)}{\partial \varphi} = 0, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial \psi} \right|_{\psi=0, \psi=\tilde{q}} = 0, \quad (11)$$

$$C(\varphi, \psi, 0) = C_0(\varphi, \psi), \quad C'_t(\varphi, \psi, 0) = 0, \quad (12)$$

где согласно [5]

$$V(\varphi, \psi) = \sin^2\left(\frac{\pi\psi}{2\tilde{q}}\right) + \operatorname{sh}^2\left(\frac{\pi(\varphi-1)}{2\tilde{q}}\right), \quad \tilde{q} = \frac{\pi}{\ln(l + \sqrt{l^2 - 1})}.$$

**ЗАМКНУТАЯ ФОРМА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ (10)–(12) В СЛУЧАЕ  
ОСРЕДНЕННОЙ СКОРОСТИ ФИЛЬТРАЦИИ**

В случае осреднения скорости фильтрации по области комплексного потенциала течения таким образом, что  $V^2(\varphi, \psi)d = v_{\text{cp}}^2 = \text{const}$ , имеем (в предположении  $\sigma, d = \text{const}$ ) вместо (10) уравнение с постоянными коэффициентами

$$\sigma\left(\frac{\partial}{\partial t} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)}\right)C(\varphi, \psi, t) = v_{\text{cp}}^2\left(\Delta C - \mu \frac{\partial C}{\partial \varphi}\right), \quad (13)$$

где  $\mu = 1/d$ .

Исключая из (13) конвективную составляющую, получаем краевую задачу вида

$$\sigma\left(\frac{\partial}{\partial t} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)}\right)u(\varphi, \psi, t) = v_{\text{cp}}^2\left(\Delta u - \frac{\mu^2}{4}u\right), \quad (14)$$

$$u(0, \psi, t) = 1, \quad \left(\frac{\partial u}{\partial \varphi} + \frac{\mu}{2}u\right)\Big|_{\varphi=1} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial \psi}\Big|_{\psi=0, \psi=\tilde{q}} = 0, \quad (15)$$

$$u(\varphi, \psi, 0) = u_0(\varphi, \psi), \quad u'_t(\varphi, \psi, 0) = 0, \quad (16)$$

где

$$u = C \exp\left(-\frac{\mu}{2}\varphi\right), \quad u_0 = C_0 \exp\left(-\frac{\mu}{2}\varphi\right).$$

Переходя в задаче (14)–(16) к однородным граничным условиям, имеем

$$\sigma\left(\frac{\partial}{\partial t} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)}\right)w(\varphi, \psi, t) = v_{\text{cp}}^2\left(\Delta w - \frac{\mu^2}{4}w\right) + f(\varphi), \quad (17)$$

$$w(0, \psi, t) = 0, \quad \left(\frac{\partial w}{\partial \varphi} + \frac{\mu}{2}w\right)\Big|_{\varphi=1} = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial \psi}\Big|_{\psi=0, \psi=\tilde{q}} = 0, \quad (18)$$

$$w(\varphi, \psi, 0) = w^{(0)}(\varphi, \psi), \quad w'_t(\varphi, \psi, 0) = 0, \quad (19)$$

где

$$w = u + \frac{\mu}{\mu+2}\varphi - 1, \quad w^{(0)}(\varphi, \psi) = u_0(\varphi, \psi) + \frac{\mu}{\mu+2}\varphi - 1, \quad f(\varphi) = v_{\text{cp}}^2 \frac{\mu^2}{4} \left(\frac{\mu}{\mu+2}\varphi - 1\right).$$

Применяя к (17)–(19) конечное интегральное преобразование Фурье по переменным  $\varphi, \psi$  вида

$$\tilde{w}_{nm}(t) = \int_0^1 \int_0^{\tilde{q}} w(\varphi, \psi, t) \sin(\lambda_n \varphi) \cos(\nu_m \psi) d\varphi d\psi, \quad (20)$$

где  $\nu_m = \frac{\pi m}{\tilde{q}}$ ,  $\lambda_n > 0$  — корни уравнения  $\operatorname{ctg} \lambda = -\frac{\mu}{2\lambda}$  ( $n = 1, 2, \dots, m = 0, 1, 2, \dots$ ) [16],

получаем задачу

$$\sigma \left( \frac{\partial}{\partial t} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)} \right) \tilde{w}_{nm}(t) + \kappa_{nm}^2 \tilde{w}_{nm}(t) = F_{nm} \quad (n \geq 1, m \geq 0), \quad (21)$$

$$\tilde{w}_{nm}(0) = \gamma_{nm}, \quad \tilde{w}'_{nm}(0) = 0 \quad (n \geq 1, m \geq 0), \quad (22)$$

где  $\gamma_{nm} = \int_0^1 \int_0^{\tilde{q}} w^{(0)}(\varphi, \psi) \sin(\lambda_n \varphi) \cos(\nu_m \psi) d\varphi d\psi$ ,  $F_{nm} = \begin{cases} 0, & m, n \geq 1, \\ \theta_n, & n \geq 1, m = 0, \end{cases}$

$$\theta_n = \tilde{q} \int_0^1 f(\varphi) \sin(\lambda_n \varphi) d\varphi, \quad \kappa_{nm}^2 = v_{\text{cp}}^2 \left( \lambda_m^2 + \nu_m^2 + \frac{\mu^2}{4} \right).$$

Решение задачи (21), (22) можно записать в виде

$$\tilde{w}_{nm}(t) = \Phi_{nm}(t) + \int_0^t G_{nm}(\tau) d\tau, \quad (23)$$

где  $\Phi_{nm}(t) = \sigma \gamma_{nm} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \kappa_{nm}^{2k}}{k! (\sigma \tau_q)^{k+1}} t^{k(\alpha+1)} \left\{ t^\alpha H_{1,2}^{1,1} \left[ -\frac{t^\alpha}{\tau_q} \middle| \begin{matrix} (-k, 1) \\ (0, 1), (-\alpha-k(\alpha+1), \alpha) \end{matrix} \right] + \right.$

$$\left. + \tau_q H_{1,2}^{1,1} \left[ -\frac{t^\alpha}{\tau_q} \middle| \begin{matrix} (-k, 1) \\ (0, 1), (-k(\alpha+1), \alpha) \end{matrix} \right] \right\}, \quad (24)$$

$$G_{nm}(\tau) = F_{nm} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \kappa_{nm}^{2k}}{k! (\sigma \tau_q)^{k+1}} \tau^{k+\alpha(k+1)} H_{1,2}^{1,1} \left[ -\frac{\tau^\alpha}{\tau_q} \middle| \begin{matrix} (-k, 1) \\ (0, 1), (-\alpha-k(\alpha+1), \alpha) \end{matrix} \right], \quad (25)$$

$H_{1,2}^{1,1}[\dots]$  —  $H$ -функция Фокса [9].

Возвращаясь в область оригиналов преобразования Фурье (20) согласно соотношению

$$w(\varphi, \psi, t) = \frac{4}{\tilde{q}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\left( \lambda_n^2 + \frac{\mu^2}{4} \right) \chi_m}{\lambda_n^2 + \frac{\mu^2}{4} + \frac{\mu}{2}} \tilde{w}_{nm}(t) \sin(\lambda_n \varphi) \cos(\nu_m \psi), \quad (26)$$

где  $\chi_m = \begin{cases} 1/2, & m = 0, \\ 1, & m \geq 1, \end{cases}$  получаем замкнутое решение исходной краевой задачи в виде

$$C(\varphi, \psi, t) = \exp\left(\frac{\mu}{2} \varphi\right) \left[ 1 - \frac{\mu}{2+\mu} \varphi + w(\varphi, \psi, t) \right].$$

Здесь функция  $w(\varphi, \psi, t)$  определяется соотношениями (26), (23)–(25).

#### ПОЛУЧЕНИЕ ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ В ОБЩЕМ СЛУЧАЕ

В случае переменной скорости фильтрации ( $V^2 \neq \text{const}$ ) приближенное решение рассматриваемой задачи (10)–(12) можно получить на основе конечно-разностного подхода следующим образом.

Введем в рассмотрение сеточную область

$$\omega_{ht} = \{(\varphi_i, \psi_k, t_j) : \varphi_i = ih_1 \ (i = \overline{0, m+1}),$$

$$\psi_k = h_2(k-0,5) \ (k = \overline{0, n+1}), \ t_j = j\tau \ (j = \overline{0, N})\},$$

где  $h_1 = \frac{2}{2m+1}$ ,  $h_2 = \frac{\tilde{q}}{n}$  — шаги сетки по геометрическим переменным  $\varphi$  и  $\psi$  соответственно,  $\tau$  — шаг сетки по временной переменной, и поставим в соответствие рассматриваемой краевой задаче следующий аналог локально-одномерной [17] разностной схемы А.А. Самарского:

$$\frac{\sigma}{2}(C_t + \tau_q \Delta_t^{(\alpha+1)} \bar{C}) = V^2 (d\bar{C}_{\varphi\varphi} - \bar{C}_0), \quad (27)$$

$$\frac{\sigma}{2}(\bar{C}_t + \tau_q \Delta_t^{(\alpha+1)} \hat{C}) = V^2 d\hat{C}_{\psi\psi}. \quad (28)$$

Здесь  $\hat{C} = C^{j+1}$ ,  $\bar{C} = C^{j+1/2}$ ,  $C = C^j$ ,  $t_{j+1/2} = t_j + \frac{\tau}{2}$ ,  $\Delta_t^{(\alpha+1)}$  — разностный аналог оператора дробного дифференцирования  $D_t^{(\alpha+1)}$ , определяемый соотношениями

$$\Delta_t^{(\alpha+1)} \hat{C} = \frac{4}{\tau^2 \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=0}^j b_s^{(j)} (C^{s+1} - 2C^{s+1/2} + C^s), \quad (29)$$

$$\Delta_t^{(\alpha+1)} \bar{C} = \frac{4}{\tau^2 \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=0}^j b_s^{(j)} (C^{s+1/2} - 2C^s + C^{s-1/2}), \quad (30)$$

$$b_s^{(j)} = \tau^{1-\alpha} [(j-s+1)^{1-\alpha} - (j-s)^{1-\alpha}] \ (j = \overline{0, N}). \quad (31)$$

Расписывая в соотношениях (27), (28) разностные операторы с учетом (29), (30) и приводя подобные члены, получаем на полуцелом и целом временных слоях системы уравнений

$$A_{ik} C_{i+1,k}^{j+1/2} - B_{ik} C_{ik}^{j+1/2} + S_{ik} C_{i-1,k}^{j+1/2} = \Phi_{ik}^j \ (i = \overline{1, m}, \ k = \overline{1, n}, \ j = \overline{0, N}), \quad (32)$$

$$P_{ik} C_{i,k+1}^{j+1} - Q_{ik} C_{ik}^{j+1} + P_{ik} C_{i,k-1}^{j+1} = \Omega_{ik}^j \ (i = \overline{1, m}, \ k = \overline{1, n}, \ j = \overline{0, N}), \quad (33)$$

где

$$A_{ik} = \frac{V^2}{h_1} \left( \frac{d}{h_1} - 0,5 \right), \ S_{ik} = \frac{V^2}{h_1} \left( \frac{d}{h_1} + 0,5 \right), \ B_{ik} = \frac{\sigma}{\tau} + \frac{2\sigma\tau_q}{\tau^{\alpha+1} \Gamma(2-\alpha)} + A_{ik} + S_{ik},$$

$$P_{ik} = \frac{V^2 d}{h_2^2}, \ Q_{ik} = \frac{\sigma}{\tau} + \frac{2\sigma\tau_q}{\tau^{\alpha+1} \Gamma(2-\alpha)} + 2P_{ik},$$

$$\Phi_{ik}^j = \frac{\sigma}{\tau} \left[ \frac{2\tau_q}{\tau \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=0}^{j-1} b_s^{(j)} (C_{ik}^{s+1/2} - 2C_{ik}^s + C_{ik}^{s-1/2}) - \right.$$

$$\left. - C_{ik}^j + \frac{2\tau_q}{\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)} (C_{ik}^{j-1/2} - 2C_{ik}^j) \right],$$

$$\Omega_{ik}^j = \frac{\sigma}{\tau} \left[ \frac{2\tau_q}{\tau \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=0}^{j-1} b_s^{(j)} (C_{ik}^{s+1} - 2C_{ik}^{s+1/2} + C_{ik}^s) - C_{ik}^{j+1/2} + \frac{2\tau_q}{\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)} (C_{ik}^j - 2C_{ik}^{j+1/2}) \right].$$

Здесь  $\sum_{s=0}^{j-1} (\cdot) \equiv 0$  при  $j-1 < 0$ .

Разностные уравнения систем (32), (33) являются трехточечными и эффективно решаются методом прогонки [17, 18]. Прогоночные соотношения имеют вид

$$C_{i,k}^{j+1/2} = \alpha_{i+1,k} C_{i+1,k}^{j+1/2} + \beta_{i+1,k}^j, \quad C_{ik}^{j+1} = \tilde{\alpha}_{i,k+1} C_{i,k+1}^{j+1} + \tilde{\beta}_{i,k+1}^j \quad (i = \overline{1, m}, k = \overline{1, n}),$$

а прогоночные коэффициенты вычисляются по формулам

$$\alpha_{i+1,k} = \frac{A_{ik}}{B_{ik} - S_{ik} \alpha_{ik}}, \quad \beta_{i+1,k}^j = \frac{\alpha_{i+1,k}}{A_{ik}} (S_{ik} \beta_{ik}^j - \Phi_{ik}^j),$$

$$\tilde{\alpha}_{i,k+1} = \frac{P_{ik}}{Q_{ik} - P_{ik} \tilde{\alpha}_{ik}}, \quad \tilde{\beta}_{i,k+1}^j = \tilde{\alpha}_{i,k+1} \left( \tilde{\beta}_{ik}^j - \frac{\Omega_{ik}^j}{P_{ik}} \right) \quad (i = \overline{1, m}, k = \overline{1, n}, j = \overline{0, N}).$$

Для стартовых значений прогоночных коэффициентов получаем

$$\alpha_{1k} = 0, \quad \beta_{1k}^j = 1, \quad \tilde{\alpha}_{i1} = 1, \quad \tilde{\beta}_{i1}^j = 0 \quad (i = \overline{1, m}, k = \overline{1, n}, j = \overline{0, N}).$$

Отметим, что устойчивость метода прогонки для систем (32), (33) вытекает из факта диагонального преобладания в матрицах коэффициентов этих систем алгебраических уравнений [17]. Последующий переход в физическую область  $G_z$  осуществляется согласно соотношениям (10) работы [5].

#### ОСОБЕННОСТИ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ АЛГОРИТМА РАСЧЕТА ДЛЯ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМ

Локально-одномерная схема расщепления распараллеливается для кластерных систем с использованием красно-черного распределения данных в соответствии со схемой, описанной в работе [3]. Каждый из  $N$  процессов параллельной программы вычисляет значения прогоночных коэффициентов и искомой функции для  $N$  блоков ячеек сетки размера  $\frac{m}{N} \times \frac{n}{N}$ . Вертикальные и горизонтальные прогонки выполняются параллельно за  $N$  шагов с обменом данными после каждого из них.

Алгоритм нахождения решения на одном шаге по времени кратко опишем следующим образом.

**1. Вычисление прогоночных коэффициентов вертикальных прогонок.** Процесс  $j$  на  $i$ -м шаге обрабатывает блок  $(2N - i - j - 1) \bmod N$  и передает значения прогоночных коэффициентов в  $\left(\frac{n}{N} - 1\right)$ -й строке блока процессору  $(N + j - 1) \bmod N$ .

**2. Обратный ход вертикальных прогонок.** Процесс  $j$  на  $i$ -м шаге обрабатывает блок  $(N + i - j) \bmod N$  и передает значения искомой функции в первой строке блока процессору  $(j + 1) \bmod N$ .

### 3. Вычисление прогоночных коэффициентов горизонтальных прогонок.

Процесс  $j$  на  $i$ -м шаге обрабатывает блок  $i$  и передает значения прогоночных коэффициентов в  $\left(\frac{m}{N}-1\right)$ -й колонке блока процессору  $(N+j-1)\bmod N$ .

4. Обратный ход горизонтальной прогонки. Процесс  $j$  на  $i$ -м шаге обрабатывает блок  $(N-i-1)$  и передает значения искомой функции в первой колонке блока процессору  $(j+1)\bmod N$ .

Время работы такого алгоритма оценим соотношением [3]

$$T_N(m, n) = \frac{nm}{N} t_c + 2(N-1)(t_{tr}(n) + t_{tr}(m)),$$

где  $t_c$  — сумма времени, необходимого для вычисления одной пары прогоночных коэффициентов, и времени вычисления решения в одном узле сетки при обратном ходе прогонки,  $t_{tr}(s)$  — время пересылки блока, состоящего из  $s$  единиц обрабатываемых данных.

Особенность рассматриваемой задачи в том, что основную сложность при вычислении прогоночных коэффициентов создают операции суммирования, объем которых существенно увеличивается в процессе вычислений. Эффективность распараллеливания при этом должна повышаться в случае, когда каждый процесс выполняется на отдельном узле кластера. В ситуации, когда на одном узле выполняется несколько процессов, на эффективность алгоритма определяющее влияние имеет быстродействие подсистемы памяти.

Графики быстродействия и ускорения алгоритма при решении задачи (32), (33) на сетке размера  $10^3 \times 10^3$  на одном узле кластера СКИТ-3 представлены на рис. 1, 2.

На рис. 1 показаны графики зависимости времени  $T_k$  (мс) работы параллельного алгоритма от номера  $k$  шага по времени (кривая 1 соответствует одному процессу, кривая 2 — четырем процессам, кривая 3 — восьми процессам). На рис. 2 графики приведены графики зависимости ускорения  $E_k$  параллельного алгоритма также от номера  $k$  шага по времени (кривая 1 соответствует четырем процессам, кривая 2 — восьми процессам).

Полученные результаты тестирования демонстрируют прогнозируемое уменьшение ускорения алгоритма при увеличении отношения количества операций доступа к памяти к количеству арифметических операций, что наблюдается

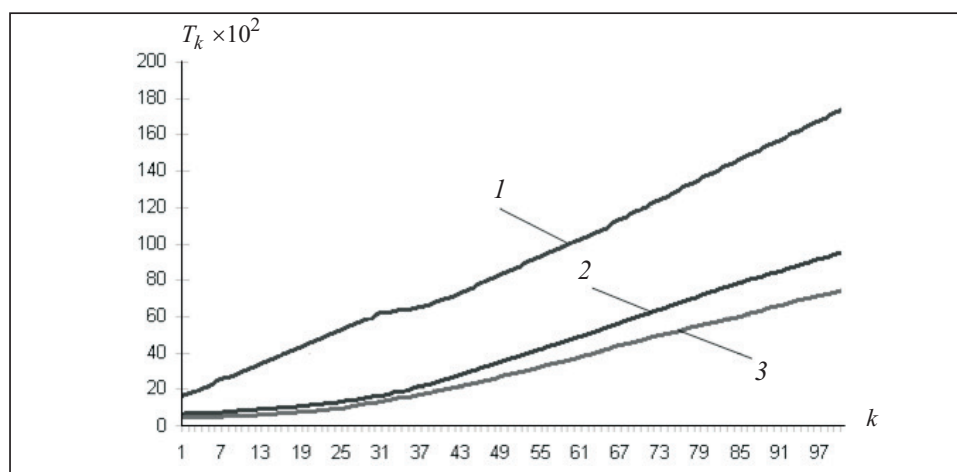


Рис. 1



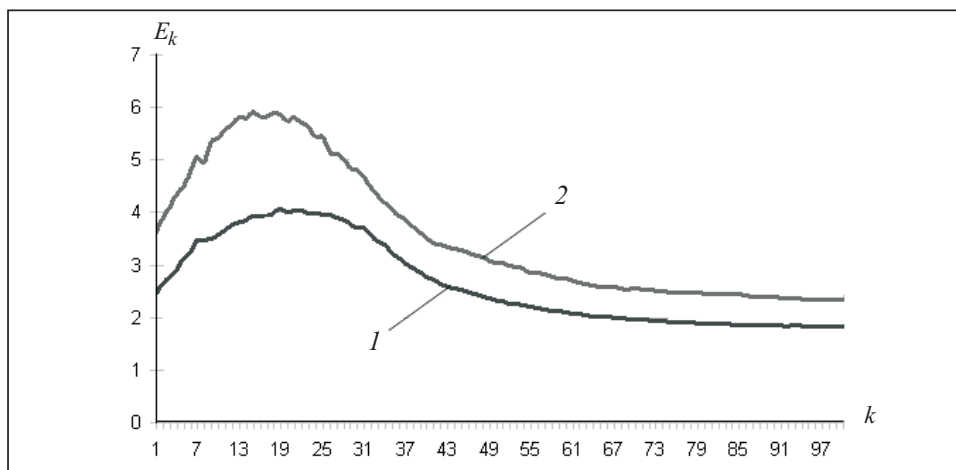


Рис. 2

при увеличении номера шага по времени. Такое свойство алгоритма обуславливает актуальность последующего развития алгоритмического и программного обеспечения в направлении использования для решения задачи ресурсов графических процессоров на узлах современных кластерных систем.

#### РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Численное моделирование динамики процесса миграции растворимых веществ в рамках рассматриваемой неклассической конвективно-диффузионной математической модели выполнено относительно безразмерных переменных, определяемых соотношениями (9) для начального распределения поля концентраций  $C(\varphi, \psi, 0) \equiv 0$ . Некоторые результаты графически изображены на рис. 3–6 и соответствуют динамике полей концентраций вдоль линии тока  $\psi = 0$ .

На рис. 3, 4 показана динамика полей концентраций (вдоль указанной линии тока) в фиксированные моменты времени, определяемые значениями безразмерного параметра  $t = 0,01$  (рис. 3) и  $t = 0,1$  (рис. 4) при значении параметра релаксации  $\tau_q = 0,005$  и различных значениях порядка дробной производной:  $\alpha = 0,6$  (кривая 1),  $\alpha = 0,8$  (кривая 2),  $\alpha = 1$  (кривая 3).

Графики на рис. 5 показывают динамику кривых концентрации для неклассической модели, соответствующей  $\alpha = 0,6$  и значению безразмерного релаксационного параметра  $\tau_q = 50$  в различные моменты времени:  $t = 0,1$  (кривая 1),  $t = 0,5$  (кривая 2),  $t = 1$  (кривая 3).

Особенности динамики поля концентраций в фиксированный момент времени  $t = 0,1$  в зависимости от величины  $\alpha$  порядка дробной производной представлены на рис. 6:  $\alpha = 0,8$  (кривая 1),  $\alpha = 0,7$  (кривая 2),  $\alpha = 0,6$  (кривая 3);  $\tau_q = 0,5$ .

Анализ результатов численных экспериментов позволяет сделать следующие выводы об особенностях динамики полей концентраций растворимых веществ в рамках изучаемой математической модели.

1. Для малых значений безразмерного параметра релаксации  $\tau_q$  кривые концентрации в неклассической модели при различных значениях порядка  $\alpha$  дробной производной качественно согласуются с соответствующими кривыми, полученными в рамках классической математической модели конвективной диффузии. Имеющиеся в начале миграционного процесса (для указанных  $\tau_q$ ) различия в поведении концентрационных кривых в зависимости от величины  $\alpha$  в рамках неклассической модели (рис. 3) с развитием миграционного процесса постепенно исчезают (рис. 4).

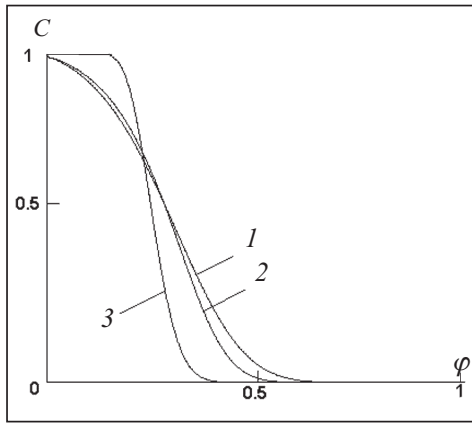


Рис. 3

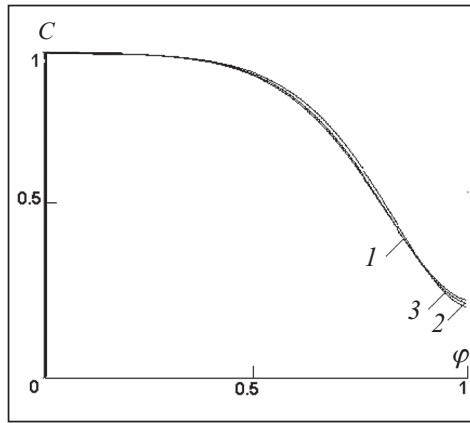


Рис. 4

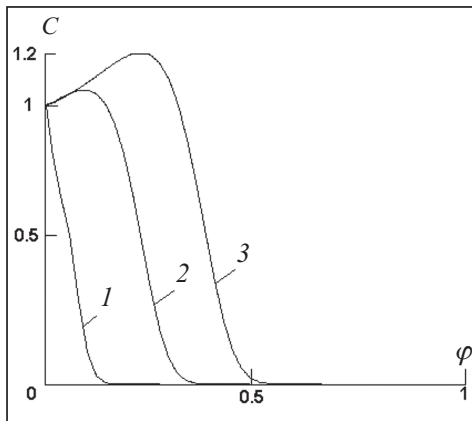


Рис. 5

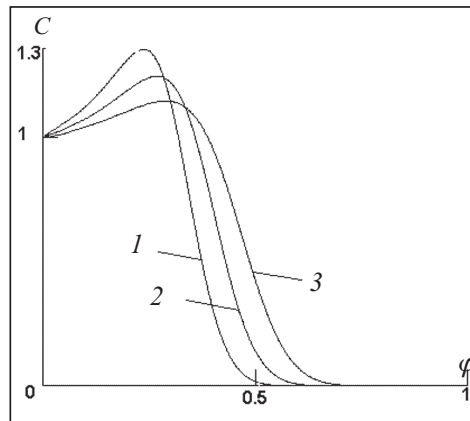


Рис. 6

2. С увеличением значения безразмерного параметра релаксации  $\tau_q$  (при фиксированном значении порядка  $\alpha$  дробной производной) процесс массопереноса в рамках рассматриваемой модели приобретает отчетливо выраженный волновой характер с возрастающей с течением времени амплитудой концентрационной волны (рис. 5).

3. Увеличение значения порядка  $\alpha$  дробной производной (при фиксированных значениях параметра релаксации  $\tau_q$ ) также влечет за собой рост амплитуды концентрационной волны в каждый фиксированный момент времени (рис. 6). Максимальное значение (при  $\alpha \rightarrow 1$ ) амплитуды волны соответствует аналогу телеграфного уравнения.

Отметим, что указанные выше свойства исследуемой математической модели существенно отличают ее от моделей, изученных в [5, 6].

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренная в настоящей работе неклассическая математическая модель для исследования динамики релаксационного процесса конвективной диффузии при плановой установившейся геофильтрации из хранилища растворимых веществ к водозабору основана на диффузионно-волновом уравнении нецелого порядка для искомой функции концентрации. Она позволяет, в частности, изучать влияние эффектов памяти на динамику распределения полей концентраций в сложных условиях протекания диффузионного процесса, для которых характерно явление нарушения классического закона Фика.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ляшко И.И., Демченко Л.И., Мистецкий Г.Е. Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах. — Киев: Наук. думка, 1991. — 264 с.
2. Лаврик В.И., Никифорович Н.А. Математическое моделирование в гидроэкологических исследованиях. — К.: Фитосоциоцентр, 1998. — 288 с.
3. Богаенко В.А., Булавацкий В.М., Скопецкий В.В. Параллельный алгоритм расчета фильтрационно-конвективной диффузии загрязнений из водоносных горизонтов // Управляющие системы и машины. — 2008. — № 5. — С. 18–23.
4. Богаенко В.А., Булавацкий В.М., Скопецкий В.В. Математическое моделирование динамики геохимических процессов загрязнения водоносных горизонтов // Управляющие системы и машины. — 2009. — № 4. — С. 60–66.
5. Bulavatsky V.M. Numerical modeling of the dynamics of a convection diffusion process locally non-equilibrium in time // Cybernetics and Systems Analysis. — 2012. — **48**, N 6. — P. 861–869.
6. Bulavatsky V.M. Mathematical modeling of dynamics of the process of filtration convection diffusion under the condition of time nonlocality // Journal of Automation and Information Science. — 2012. — **44**, N 2. — P. 13–22.
7. Gorenflo R., Mainardi F. Fractional calculus: integral and differential equations of fractional order // Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics / Eds. A. Carpinteri, F. Mainardi. — Wien: Springer Verlag, 1997. — P. 223–276.
8. Podlubny I. Fractional differential equations. — New York: Acad. Press, 1999. — 341 p.
9. Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J. Theory and applications of fractional differential equations. — Amsterdam: Elsevier, 2006. — 523 p.
10. Лаврик В.И., Бомба А.Я. О приближенном решении одной краевой задачи конвективной диффузии при плановой напорной фильтрации // Математические методы исследования физических полей. — Киев: Ин-т математики НАН Украины. — 1980. — С. 26–36.
11. Лыков А.В., Берковский Б.М. Законы переноса в неньютоновских жидкостях // Тепло- и массообмен в неньютоновских жидкостях. — М.: Энергия, 1968. — С. 5–14.
12. Chazizadeh H.R., Azimi A., Maerefat M. An inverse problem to estimate relaxation parameter and order of fractionality in fractional single-phase-lag heat equation // Intern. J. of Heat and Mass Transfer. — 2008. — **55**. — P. 2095–2101.
13. Odibat Z.M., Shawagfeh N.T. Generalized Taylor's formula // Appl. Math. Comput. — 2007. — **186**. — P. 286–293.
14. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и таблицами. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1979. — 830 с.
15. Булавацький В.М., Кривонос Ю.Г., Скопецький В.В. Некласичні математичні моделі процесів тепло- та масопереносу. — К.: Наук. думка, 2005. — 283 с.
16. Мартыненко Н.А., Пустыльников Л.М. Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распределенными параметрами. — М.: Наука, 1986. — 304 с.
17. Самарский А.А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1977. — 656 с.
18. Samarskii A.A., Vabishchevich P.N. Computational heat transfer. — New York: Wiley, 1995. — **2**. — 422 p.

*Поступила 16.03.2015*