

СИСТЕМНЫЙ ПОДХОД К МАТЕМАТИЧЕСКОМУ И КОМПЬЮТЕРНОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ГЕОМИГРАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАКЕТА FreeFem++ И РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Аннотация. Описан способ построения математических моделей взаимосвязанных процессов в пористых средах, исходя из сложной многокомпонентной системы. Показаны возможности пакета FreeFem++ при решении соответствующих краевых задач для систем квазилинейных параболических уравнений в областях с подвижными границами методом конечных элементов с использованием распараллеливания вычислений.

Ключевые слова: математическое и компьютерное моделирование, многокомпонентные пористые среды, химическая и механическая суффозии, фильтрационная консолидация, тепломассоперенос, свободная подвижная граница, системы квазилинейных параболических уравнений, метод конечных элементов, FreeFem++, параллельные вычисления.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе предлагается математическая модель геоинформатики, используемая для математического описания динамики процесса неизотермической фильтрационной консолидации насыщенных солевыми растворами деформируемых пористых сред. Изучение консолидационных процессов в насыщенных деформируемых пористых средах является актуальной задачей, в частности в связи с вопросами обеспечения безопасности и надежности таких инженерных объектов, как поверхностные накопители бытовых и промышленных стоков, охраны подземных вод от загрязнений токсичным содержимым накопителей и др. [1–4]. Нередко накопители заполняются отходами промышленности — концентрированными химическими растворами. Для оценки процессов консолидации их оснований некорректно использовать классическую теорию фильтрационной консолидации, основанную на предположении, что фильтрат в массиве является чистой водой. Кроме того, природные пористые среды многокомпонентны и исследование физико-химических процессов в них требует учета взаимовлияния и взаимозависимостей этих процессов, а также рассмотрения пористой среды как сложной многокомпонентной системы [5]. Взаимосвязанные процессы, в частности теплоперенос в пористых средах, исследованы в [6, 7]. В работах [1–4, 8, 9] изучены взаимосвязанные процессы в грунтах, одним из которых является миграция солей, ионов и наличие в порах грунта электролитов (в общем — процессы массопереноса). В [3, 10, 11] рассмотрены взаимосвязанные процессы фильтрации, миграции наночастиц, суффозии и кольматации в пористых средах.

В случае исследования в многокомпонентных пористых средах нескольких взаимосвязанных процессов их взаимные влияния могут учитываться двумя способами: 1) непосредственное взаимодействие потоков компонентов (химический осмос, термодиффузия растворенных веществ и т.п. [4; 12, chap. 9]); 2) задание зависимости параметров пористой среды (пористость, коэффициент пористости, коэффициент фильтрации и т.д.) от определяющих параметров процессов (температура, концентрация химических веществ, концентрация суффозионных частиц, напор в поровой жидкости). В работах [13, 14] системные взаимозависимости характеристик процессов (концентрация химических веществ, концентрация суффозионных частиц, температура, напор или давление

в поровой жидкости и т.д.) и параметров пористой среды предложено определять не из непосредственных соображений при выводе уравнений состояния пористой среды, а с использованием полной производной во времени. Тогда, например, уравнение неразрывности жидкого компонента грунта приобретает вид

$$\frac{d(\rho_p \sigma)}{dt} + \nabla(\rho_p \mathbf{u}) = 0.$$

Здесь σ — пористость пористой среды, ρ_p — плотность поровой жидкости, \mathbf{u} — вектор скорости фильтрации. В таком случае при возникновении нового фактора его влияние на уравнение неразрывности учитывается автоматически, поскольку

$$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial \sigma}{\partial s_i} \frac{\partial s_i}{\partial t},$$

где $\mathbf{S} = \{s_i\}_{i=1}^n$ — вектор-функция факторов влияния. При отсутствии факторов влияния $\frac{d\sigma}{dt} = \frac{\partial \sigma}{\partial t}$ и получаем классическое уравнение неразрывности жидкого компонента. Уравнение неразрывности позволяет учитывать факторы влияния при условии, что известна зависимость $\sigma = \sigma(t, \mathbf{S})$ (из теоретических соображений или натуральных экспериментов). Аналогичные рассуждения справедливы и для уравнения неразрывности твердого компонента пористой среды.

Математические модели взаимосвязанных процессов в гетерогенных пористых средах, как правило, описываются нелинейными краевыми задачами. Наличие нескольких процессов, кроме того, приводит к краевым задачам для систем дифференциальных уравнений в частных производных. С физической точки зрения многие процессы предусматривают наличие подвижных границ в областях, в которых такие процессы исследуются. В частности, это связано с набуханием пористых сред при изменении режима влажности, термическим расширением компонентов пористых сред при изменении температуры, растворением и кристаллизацией (химическая суффозия), проседанием поверхности грунта в случае возведения зданий, фильтрационными разрушениями (размыв, суффозия) пористых сред и др. Поэтому построенные модели относятся к задачам стефановского типа. Отсюда возникает необходимость в эффективных методах численного решения таких краевых задач [15–17].

Данная статья посвящена разработке методики системного подхода к математическому и компьютерному моделированию воздействия явлений суффозии на проседание поверхности пористой среды в ходе фильтрационной консолидации грунта с учетом влияния взаимосвязанных процессов тепло- и солепереноса. Целью работы является также определение возможностей пакета FreeFem++ [18] при решении поставленных нелинейных краевых задач методом конечных элементов (МКЭ) с использованием распараллеливания вычислений.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим процесс фильтрационной консолидации грунта с учетом явлений химической и механической суффозий, который занимает область Ω с границей Γ . Математическую модель указанной задачи с учетом результатов работ [13, 14] и влияния тепло-солепереноса опишем следующей краевой задачей:

$$\begin{aligned} & \frac{R\gamma a}{1+(R-1)\xi} \frac{\partial h}{\partial t} - (1+e)^2 \frac{\partial s}{\partial t} - (1+e)^2 \frac{1}{\rho_N} \frac{\partial N}{\partial t} - \\ & - e \left(\frac{1}{\rho_p} \left(\frac{\partial \rho_p}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \rho_p}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial t} \right) - \frac{1}{\rho_m} \left(\frac{\partial \rho_m}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m}{\partial N} \frac{\partial N}{\partial t} \right) \right) = \quad (1) \\ & = (1+e) \nabla(\mathbf{K}_h(c, T, s, N) \nabla h - \mathbf{K}_c \nabla c - \mathbf{K}_T \nabla T), \quad \mathbf{Z} \in \Omega(t), \quad t > 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma \left(1 - \frac{c}{\rho_p} \frac{\partial \rho_p}{\partial c} \right) \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla (\mathbf{D}_c \nabla c) - \mathbf{u} \left(1 - \frac{c}{\rho_p} \frac{\partial \rho_p}{\partial c} \right) \nabla c + \\ + \frac{c}{\rho_p} \left(\sigma \frac{\partial \rho_p}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \frac{\partial \rho_p}{\partial T} \nabla T \right) - \frac{\partial N}{\partial t}, \quad \mathbf{Z} \in \Omega(t), \quad t > 0, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \nabla (\mathbf{D}_s \nabla s) - \alpha_{er} \mathbf{u} \nabla s, \quad \mathbf{Z} \in \Omega(t), \quad t > 0, \quad (3)$$

$$c_T \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla (\lambda \nabla T) - \rho_p c_p \mathbf{u} \nabla T - \left(\rho_s c_s \frac{\partial s}{\partial t} + \rho_N c_N \frac{\partial N}{\partial t} \right) T, \quad \mathbf{Z} \in \Omega(t), \quad t > 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\gamma_1 (C_m - c), \quad \mathbf{Z} \in \bar{\Omega}(t), \quad t \geq 0, \quad (5)$$

$$\mathbf{u} = -\mathbf{K}_h(c, T, s, N) \nabla h + \mathbf{K}_c \nabla c + \mathbf{K}_T \nabla T, \quad \mathbf{Z} \in \bar{\Omega}(t), \quad t \geq 0, \quad (6)$$

$$\mathbf{q}_c(\mathbf{Z}, t) = -\mathbf{D}_c \nabla c + \mathbf{u} c, \quad \mathbf{Z} \in \bar{\Omega}(t), \quad t \geq 0, \quad (7)$$

$$\mathbf{q}_T(\mathbf{Z}, t) = -\lambda \nabla T + \rho_p c_p \mathbf{u} T, \quad \mathbf{Z} \in \bar{\Omega}(t), \quad t \geq 0, \quad (8)$$

$$\mathbf{q}_s(\mathbf{Z}, t) = -\mathbf{D}_s \nabla s + \alpha_{er} \mathbf{u} s, \quad \mathbf{Z} \in \bar{\Omega}(t), \quad t \geq 0, \quad (9)$$

$$h(\mathbf{Z}, t)|_{\Gamma_1} = H_1(\mathbf{Z}, t), \quad \mathbf{Z} \in \Gamma_1, \quad (\mathbf{u}(\mathbf{Z}, t), \mathbf{n})|_{\Gamma_2} = 0, \quad (10)$$

$$c(\mathbf{Z}, t)|_{\Gamma_1} = C_1(\mathbf{Z}, t), \quad \mathbf{Z} \in \Gamma_1, \quad (\mathbf{q}_c(\mathbf{Z}, t), \mathbf{n})|_{\Gamma_2} = 0, \quad (11)$$

$$T(\mathbf{Z}, t)|_{\Gamma_1} = T_1(\mathbf{Z}, t), \quad \mathbf{Z} \in \Gamma_1, \quad (\mathbf{q}_T(\mathbf{Z}, t), \mathbf{n})|_{\Gamma_2} = 0, \quad (12)$$

$$s(\mathbf{Z}, t)|_{\Gamma_1} = S_1(\mathbf{Z}, t), \quad \mathbf{Z} \in \Gamma_1, \quad (\mathbf{q}_s(\mathbf{Z}, t), \mathbf{n})|_{\Gamma_2} = 0, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{dl(\mathbf{X}, t)}{dt} = - \int_{l(\mathbf{X}, t)}^{L(\mathbf{X})} \left(\frac{e}{\rho_p (1+e)} \left(\frac{\partial \rho_p}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \rho_p}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial t} \right) - \right. \\ \left. - \frac{e}{\rho_m (1+e)} \left(\frac{\partial \rho_m}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m}{\partial N} \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial t} \right) + \nabla \mathbf{u} \right) dz, \end{aligned} \quad (14)$$

$$l(\mathbf{X}, t)|_{t=0} = l_0(\mathbf{X}), \quad (15)$$

$$\begin{aligned} h(\mathbf{Z}, 0) = h_0(\mathbf{Z}), \quad c(\mathbf{Z}, 0) = C_0(\mathbf{Z}), \quad T(\mathbf{Z}, 0) = T_0(\mathbf{Z}), \quad N(\mathbf{Z}, 0) = N_0(\mathbf{Z}), \\ s(\mathbf{Z}, 0) = S_0(\mathbf{Z}), \quad \mathbf{Z} \in \bar{\Omega}. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь R — размерность задачи; ξ — коэффициент бокового давления грунта; ρ_p — плотность порового раствора; $c(\mathbf{Z}, t)$ — концентрация солей в поровом растворе; γ — удельный вес солевого раствора; a — коэффициент сжимаемости грунта; $h(\mathbf{Z}, t)$ — неизвестная функция избыточных напоров в поровой жидкости; t — время; e — коэффициент пористости грунта; $s(\mathbf{Z}, t)$ — относительная объемная концентрация суффозионных частиц; ρ_N — плотность твердого компонента солей; $N(\mathbf{Z}, t)$ — массовая концентрация солей в твердом компоненте; $T(\mathbf{Z}, t)$ — температура пористой среды; ρ_m — плотность твердых частиц грунта (включая водорастворимые и нерастворимые компоненты); $\mathbf{K}_h(\Phi)$ — коэффициент фильтрации, зависящий от вектора факторов

влияния $\Phi = (c, T, s, N)$; $\mathbf{K}_c, \mathbf{K}_T$ — коэффициенты химического и термического осмоса соответственно; σ — пористость грунта ($\sigma = \frac{e}{1+e}$, где e — коэффициент пористости грунта); \mathbf{D}_c — коэффициент конвективной диффузии химического раствора в поровой жидкости; \mathbf{u} — вектор скорости фильтрации солевого раствора; c_T — объемная теплоемкость грунта; λ — коэффициент эффективной теплопроводности влажного грунта; c_p, c_N, c_s — удельные теплоемкости порового раствора, твердого компонента солей и суффозионных частиц соответственно; \mathbf{D}_s — коэффициент дисперсии суффозионных частиц; α_{er} — коэффициент размыва грунта; γ_1 — константа скорости массообмена; C_m — концентрация предельного насыщения; $\mathbf{q}_c, \mathbf{q}_T, \mathbf{q}_s$ — векторы потоков растворенных солей, тепла, а также суффозионных частиц соответственно; \mathbf{n} — вектор направляющих косинусов внешней нормали к границе области; (\mathbf{a}, \mathbf{b}) — скалярное произведение двух векторов — \mathbf{a} и \mathbf{b} ; $H_1(\mathbf{Z}, t), C_1(\mathbf{Z}, t), T_1(\mathbf{Z}, t), S_1(\mathbf{Z}, t), h_0(\mathbf{Z}), C_0(\mathbf{Z}), T_0(\mathbf{Z}), S_0(\mathbf{Z}), N_0(\mathbf{Z})$ — заданные функции.

Уравнение (1) описывает изменение избыточных напоров в поровой жидкости грунта, который находится в процессе консолидации; схема его вывода приведена в работе [13]. Системный учет взаимосвязанных процессов в математической модели (1)–(16) осуществлен двумя путями: 1) в формуле (6) учтено взаимное влияние градиентов неизвестных факторов (температура, концентрация солей, напор) на скорость фильтрации; 2) такие влияния учтены посредством зависимости параметров поровой жидкости (плотность, коэффициент фильтрации) и параметров твердого компонента от функций-факторов воздействия. Условие (14) выведено в работе [14] и описывает изменение положения во времени верхней подвижной границы грунта. Предполагается, что грунт может проседать только за счет вертикальных смещений. В момент времени t верхняя граница грунта в точке $\mathbf{Z} = (x, y, z)$ определяется уравнением $z = l(\mathbf{X}, t)$, где $\mathbf{X} = (x, y)$. Здесь интегрирование проводится по вертикальному отрезку $[l(\mathbf{X}, t); L(\mathbf{X})]$, $l(\mathbf{X}, t)$ — верхняя граница грунта, $L(\mathbf{X})$ — нижняя неподвижная граница грунта.

Граничные условия (10)–(13) заданы на частях Γ_1 и Γ_2 границы Γ ; во избежание лишних обозначений эти условия выбраны одинаковыми для всех неизвестных функций. На практике выделенные условия могут отличаться в зависимости от характера граничной поверхности. Полагаем также $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma, \Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$.

СХЕМА ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Для отыскания приближенного решения полученной нелинейной краевой задачи используем МКЭ. Приближенное обобщенное решение задачи (1)–(16) ищем в виде

$$(h(\mathbf{Z}, t); c(\mathbf{Z}, t); T(\mathbf{Z}, t); s(\mathbf{Z}, t); N(\mathbf{Z}, t)) \approx \left\{ \sum_{j=1}^n a_j^{(k)}(t) \varphi_j(\mathbf{Z}) \right\}_{k=1}^5, \quad (17)$$

где n — количество узлов в конечноэлементном покрытии замыкания $\bar{\Omega}(t)$ области $\Omega(t)$; $a_j^{(k)}(t), j = \overline{1, n}, k = \overline{1, 5}$, — неизвестные коэффициенты, зависящие только от времени; $\varphi_j(\mathbf{Z})$ — полиномиальные базисные функции МКЭ.

Используя известную процедуру МКЭ [4, 16–18], с учетом (17) получаем задачу Коши для системы нелинейных дифференциальных уравнений относительно вектора $\mathbf{A}(t) = \{\mathbf{A}^{(k)}(t)\}_{k=1}^5$

$$\sum_{k=1}^5 \mathbf{R}^{(pk)} \frac{d\mathbf{A}^{(k)}}{dt} + \sum_{k=1}^5 \mathbf{G}^{(pk)}(\mathbf{A}) \mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{F}^{(i)}, \quad p = \overline{1, 5}, \quad (18)$$

$$\bar{\mathbf{R}}^{(p)} \mathbf{A}^{(p)(0)} = \bar{\mathbf{F}}^{(p)}, \quad p = \overline{1, 5}, \quad (19)$$

где

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^{(k)}(t) &= \{a_i^{(k)}(t)\}_{i=1}^n, \quad \mathbf{A}^{(k)(0)} = \mathbf{A}^{(k)}(t)|_{t=0}, \quad \mathbf{R}^{(pk)} = \{r_{ij}^{(pk)}(t)\}_{i,j=1}^n, \\
\mathbf{G}^{(pk)} &= \{g_{ij}^{(pk)}(t)\}_{i,j=1}^n, \quad \mathbf{F}^{(k)} = \{f_i^{(k)}(t)\}_{i=1}^n, \quad \bar{\mathbf{R}}^{(k)} = \{\bar{r}_{ij}^{(k)}(t)\}_{i,j=1}^n, \quad \bar{\mathbf{F}}^{(k)} = \{\bar{f}_i^{(k)}(t)\}_{i=1}^n, \\
r_{ij}^{(11)} &= \frac{R}{1+(R-1)\xi} \int_{\Omega} \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \quad r_{ij}^{(12)} = - \int_{\Omega} \frac{e}{\gamma a \rho_p} \frac{\partial \rho_p}{\partial c} \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \\
r_{ij}^{(13)} &= - \int_{\Omega} \left(\frac{e}{\gamma a \rho_p} \frac{\partial \rho_p}{\partial T} - \frac{e}{\gamma a \rho_m} \frac{\partial \rho_m}{\partial T} \right) \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \quad r_{ij}^{(14)} = - \int_{\Omega} \frac{(1+e)^2}{\gamma a} \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \\
r_{ij}^{(15)} &= - \int_{\Omega} \left(\frac{(1+e)^2}{\gamma a \rho_N} - \frac{e}{\gamma a \rho_m} \frac{\partial \rho_m}{\partial N} \right) \varphi_j \varphi_j d\mathbf{Z}, \quad g_{ij}^{(11)} = \int_{\Omega} \frac{(1+e)}{\gamma a} \mathbf{K}_h(\Phi) \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j d\mathbf{Z}, \\
g_{ij}^{(12)} &= - \int_{\Omega} \frac{(1+e)}{\gamma a} \mathbf{K}_c \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j d\mathbf{Z}, \quad g_{ij}^{(13)} = - \int_{\Omega} \frac{(1+e)}{\gamma a} \mathbf{K}_T \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j d\mathbf{Z}, \\
r_{ij}^{(22)} &= \int_{\Omega} \sigma \left(1 - \frac{c}{\rho_p} \frac{\partial \rho_p}{\partial c} \right) \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \quad r_{ij}^{(23)} = - \int_{\Omega} \frac{c \sigma}{\rho_p} \frac{\partial \rho_p}{\partial T} \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \quad r_{ij}^{(25)} = \int_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mathbf{Z}, \\
g_{ij}^{(22)} &= \int_{\Omega} \mathbf{D}_c \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j d\mathbf{Z} + \int_{\Omega} \mathbf{u} \left(1 - \frac{c}{\rho_p} \frac{\partial \rho_p}{\partial c} \right) \nabla \varphi_j \varphi_i d\mathbf{Z}, \\
g_{ij}^{(23)} &= - \int_{\Omega} \frac{c}{\rho_p} \frac{\partial \rho_p}{\partial T} \mathbf{u} \nabla \varphi_j \varphi_i d\mathbf{Z}, \quad r_{ij}^{(33)} = \int_{\Omega} c_T \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \quad r_{ij}^{(34)} = \int_{\Omega} \rho_s c_s \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \\
r_{ij}^{(35)} &= \int_{\Omega} \rho_N c_N \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \\
g_{ij}^{(33)} &= \int_{\Omega} \lambda \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j d\mathbf{Z} + \int_{\Omega} \rho_p c_p \mathbf{u} \nabla \varphi_j \varphi_i d\mathbf{Z}, \quad r_{ij}^{(44)} = \int_{\Omega} \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \\
g_{ij}^{(44)} &= \int_{\Omega} \mathbf{D}_s \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j d\mathbf{Z} + \int_{\Omega} \alpha_{er} \mathbf{u} \nabla \varphi_j \varphi_i d\mathbf{Z}, \quad r_{ij}^{(55)} = \int_{\Omega} \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \\
g_{ij}^{(25)} &= - \int_{\Omega} \gamma_1 \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \quad f_i^{(5)} = - \int_{\Omega} \gamma_1 C_m \varphi_i d\mathbf{Z}, \quad \bar{r}_{ij}^{(k)} = \int_{\Omega} \varphi_i \varphi_j d\mathbf{Z}, \quad k=2,5, \\
\bar{f}_i^{(1)} &= \int_{\Omega} h_0 \varphi_i d\mathbf{Z}, \quad \bar{f}_i^{(2)} = \int_{\Omega} C_0 \varphi_i d\mathbf{Z}, \quad \bar{f}_i^{(3)} = \int_{\Omega} T_0 \varphi_i d\mathbf{Z}, \\
\bar{f}_i^{(4)} &= \int_{\Omega} S_0 \varphi_i d\mathbf{Z}, \quad \bar{f}_i^{(5)} = \int_{\Omega} N_0 \varphi_i d\mathbf{Z}.
\end{aligned}$$

Элементы матриц в (18), (19), которые не определены согласно указанным формулам, принимаются равными нулю.

Для отыскания численного решения задачи Коши (18), (19) разделим временной отрезок $[0; t_{\max}]$ на M одинаковых частей с шагом $\tau = \frac{t_{\max}}{M}$. Обозначим $\mathbf{A}^{(m)} = \{\mathbf{A}^{(m)(k)}\}_{k=1}^5$ приближенные решения задачи Коши (18), (19) при $t = m\tau$. Введем еще обозначение $\mathbf{A}^{(m+1/2)} = \frac{1}{2}(\mathbf{A}^{(m+1)} + \mathbf{A}^{(m)})$. Приближенное решение

системы нелинейных дифференциальных уравнений (18) получим с помощью схемы Кранка–Николсона [16]

$$\sum_{k=1}^5 \mathbf{R}^{(pk)} \frac{\mathbf{A}^{(m+1)(k)} - \mathbf{A}^{(m)(k)}}{\tau} + \sum_{k=1}^5 \mathbf{G}^{(pk)} (\mathbf{A}^{(m+1/2)}) \mathbf{A}^{(m+1/2)(k)} = \mathbf{F}^{(m+1/2)(p)},$$

$$p = \overline{1,5}, m = 0, 1, 2, \dots, M-1.$$

Поскольку схема Кранка–Николсона требует решения на каждом временном слое систем нелинейных уравнений, во избежание этих трудностей приближенные решения задачи Коши можно искать, используя схему предиктор-корректор [16].

АППРОКСИМАЦИЯ СВОБОДНОЙ ГРАНИЦЫ

Согласно [15] в алгоритмах аппроксимации свободных границ выделяют две большие группы: алгоритмы отслеживания и алгоритмы улавливания. Условие (14) позволяет легко отслеживать положение свободной границы $z = l(\mathbf{X}, t)$ во времени. Для практической реализации предложенного алгоритма преобразуем правую часть (14). Из уравнения (1) имеем

$$\nabla \mathbf{u} = - \frac{R\gamma a}{(1+(R-1)\xi)(1+e)} \frac{\partial h}{\partial t} + (1+e) \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{1+e}{\rho_N} \frac{\partial N}{\partial t} +$$

$$+ \frac{e}{1+e} \left(\frac{1}{\rho_p} \left(\frac{\partial \rho_p}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \rho_p}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial t} \right) - \frac{1}{\rho_m} \left(\frac{\partial \rho_m}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m}{\partial N} \frac{\partial N}{\partial t} \right) \right).$$

Подставив это равенство в (14), получим

$$\frac{dl(\mathbf{X}, t)}{dt} = \int_{l(\mathbf{X}, t)}^{L(\mathbf{X})} \left(\frac{R\gamma a}{(1+(R-1)\xi)(1+e)} \frac{\partial h}{\partial t} - (1+e) \frac{\partial s}{\partial t} - \frac{1+e}{\rho_N} \frac{\partial N}{\partial t} \right) dz. \quad (20)$$

Преимущество условия (20) перед (14) очевидно (в случае использования МКЭ). Наличие в условии (14) $\nabla \mathbf{u}$ предполагает, что приближенные решения краевой задачи по крайней мере дважды дифференцированы. Это требование накладывает ограничения на использование базисных функций в (17); в частности, невозможно применение кусочно-линейных базисных функций.

В общем, схематический алгоритм решения задачи (1)–(16) имеет следующую структуру. При известном положении свободной границы $l^{(m)} = l(\mathbf{X}^{(m)}, t_m)$ неизвестные функции ищутся на следующем временном шаге t_{m+1} , $m = 0, 1, 2, \dots$. Здесь $\mathbf{X}^{(m)}$ означает переменную точку на свободной границе, определенную при $t_m = m\tau$. Далее, с использованием найденных функций определяется новое положение $l^{(m+1)} = l(\mathbf{X}^{(m+1)}, t_{m+1})$. Эта операция осуществляется следующим образом. Перебираются все узлы $\mathbf{Z}_i^{(m)} = (x_i^{(m)}, y_i^{(m)}, z_i^{(m)})$, $i = \overline{1, n}$, конечноэлементной сетки. Для упрощения предположим, что область, в которой исследуется процесс, выпукла. Согласно упрощающим предположениям [14] в условии (20) учитываются только вертикальные проседания. Тогда в новом положении $\mathbf{Z}_i^{(m+1)}$ узла $\mathbf{Z}_i^{(m)}$ неизвестной и переменной будет только $z_i^{(m+1)}$, в то время как $x_i^{(m+1)} = x_i^{(m)}$, $y_i^{(m+1)} = y_i^{(m)}$. С учетом (20) имеем

$$\frac{z_i^{(m+1)} - z_i^{(m)}}{\tau} = \int_{z_i^{(m)}}^{L(\mathbf{X}_i^{(m)})} \left(\frac{R\gamma a}{(1+(R-1)\xi)(1+e)} \frac{h^{(m+1)} - h^{(m)}}{\tau} - (1+e) \frac{s^{(m+1)} - s^{(m)}}{\tau} - \frac{1+e}{\rho_N} \frac{N^{(m+1)} - N^{(m)}}{\tau} \right) dz. \quad (21)$$

Интегралы в (21) на отрезке $[z_i^{(m)}; L(\mathbf{X}_i^{(m)})]$ находим, используя любую формулу численного интегрирования. Поскольку приближения функций в (17) — полиномы, целесообразно применять, например, квадратурные формулы Гаусса.

Пакет FreeFem++ [18] позволяет автоматизировать решение краевых задач МКЭ и содержит элементы С++-подобного объектно-ориентированного языка программирования. Пользователь задает область, в которой ищется решение задачи, путем аналитической формулировки уравнений ее границы. Для приближенного решения задачи требуется запись ее слабой постановки, т.е. сведение задачи к виду (18), (19) система фактически осуществляется сама. Практическая реализация схемы (21) в среде FreeFem++ не вызывает принципиальных трудностей — это два вложенных цикла: внешний реализует перебор всех узлов сетки, а внутренний — некоторую квадратурную формулу. Обращение к номерам и координатам узлов конечноэлементной сетки осуществляется стандартно, как к свойствам объектов соответствующих классов. Одной из положительных возможностей FreeFem++ является широкий набор средств для визуализации приближенных решений.

РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Распараллеливание вычислений — эффективный инструмент уменьшения затрат машинного времени на решение прикладных задач [19–23]. Возможности пакета FreeFem++ относительно распараллеливания касаются применения параллельных решателей для разреженных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) [18, chap. 11]. Одним из таких методов является MUMPS (MUltifrontal Massively Parallel Solver) [24]. Для детального ознакомления с возможностями метода относительно соответствующего пакета прикладных программ для распараллеливания вычислений имеется соответствующая литература, например [18, chap. 11, § 11.2.1].

На рис. 1 графически отражено влияние эффекта распараллеливания на время решения модельной задачи (1)–(16) со значениями коэффициентов, определенными далее. Как видно, эффект начинает проявляться при превышении количества узлов 50 тысяч. При количестве узлов около 82 тысяч время выполнения с 15 мин уменьшается до 10 мин. Заметим, что у пользователя-исследователя есть возможность дописывать и подгружать собственные модули к пакету FreeFem++, реализующие авторские методы и идеи касательно алгоритмов параллельных вычислений в МКЭ.

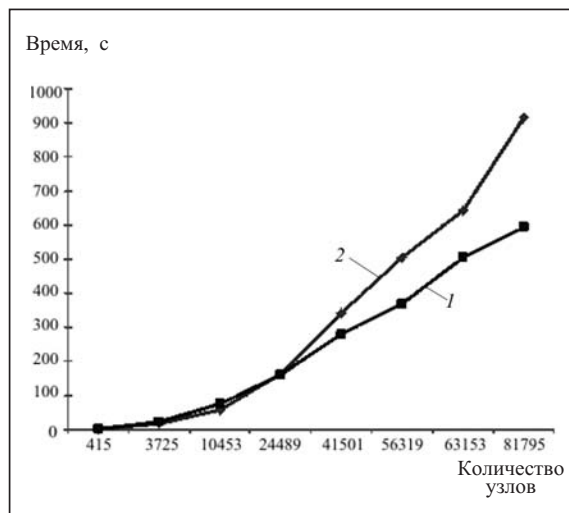


Рис. 1. Графики зависимости времени решения задачи от количества узлов: 1 — с распараллеливанием, 2 — без распараллеливания

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И ИХ АНАЛИЗ

В серии проведенных численных экспериментов использовались следующие зависимости для коэффициентов краевой задачи (1)–(16). В частности, коэффициент объемной теплоемкости пористой среды

$$c_T = \rho_p c_p \sigma + \rho_s c_s s + \rho_N c_N N + \rho_m c_m (1 - \sigma_0),$$

где σ_0 — пористость «скелета» пористой среды (пористость в случае полного отсутствия суффозионных и водорастворимых частиц). Формула зависимости плотности водного раствора NaCl от его концентрации c (%) и температуры T ($^{\circ}\text{C}$) использована из работы [13]. Зависимость коэффициента фильтрации от физико-механических и химических факторов определялась с помощью модифицированной формулы Козени–Кармана

$$K_h = k_0(c, T) \frac{1 + e_0}{1 + e} \left(\frac{e}{e_0} \right)^3,$$

где e_0 — начальное значение коэффициента пористости; e — коэффициент пористости $\left(e = \frac{\sigma}{1 - \sigma} \right)$; $\sigma(\mathbf{Z}, t) = \sigma_0 - \frac{N(\mathbf{Z}, t)}{\rho_N} - \frac{s(\mathbf{Z}, t)}{\rho_s}$. Зависимость $k_0(c, T)$ ап-

проксимировалась методом радиальных базисных функций согласно данным натурных экспериментов из [25]. Коэффициент дисперсии суффозионных частиц: $D_s = \alpha |\mathbf{u}|$, где α — некоторый коэффициент, устанавливаемый экспериментально.

Значения остальных входных данных следующие:

$$\sigma_0 = 0.7; e_0 = \frac{\sigma_0}{1 - \sigma_0}; c_p = 4.128 \text{ кДж/кг} \cdot ^{\circ}\text{C}; \rho_s = 2200 \text{ кг/м}^3;$$

$$c_s = 0.92 \text{ кДж/кг} \cdot ^{\circ}\text{C}; \rho_N = 2170 \text{ кг/м}^3; c_N = 0.8709 \text{ кДж/кг} \cdot ^{\circ}\text{C};$$

$$\rho_m = 1500 \text{ кг/м}^3; c_m = 0.8 \text{ кДж/кг} \cdot ^{\circ}\text{C}; k_c = 2.8 \cdot 10^{-6} \text{ м}^5 / \text{кг} \cdot \text{сут};$$

$$k_T = 2.8 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2 / ^{\circ}\text{C} \cdot \text{сут}; D_c = 9.51 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2 / \text{сут}; \gamma_1 = 10^{-7} \text{ сут}^{-1};$$

$$\lambda = 108 \text{ кДж/м}^{\circ}\text{C} \cdot \text{сут}; \alpha_{er} = 0.01; \alpha = 0.1 \text{ м}; C_m = 350 \text{ г/л};$$

$$C_2 = C_{\min} = 8 \text{ г/л}; C_4 = C_m; C_0 = C_{\min}; H_2 = 20 \text{ м}; H_4 = 1 \text{ м}; T_0 = T_{\min} = 4^{\circ}\text{C};$$

$$N_0 = 120 \text{ кг/м}^3; S_2 = S_{\min} = 1 \text{ кг/м}^3; S_4 = S_{\min}; S_0 = 80 \text{ кг/м}^3.$$

В качестве модельной задачи с физической точки зрения исследован процесс фильтрационной консолидации суффозионного грунта под бетонным гидротехническим сооружением, где учитываются явления как химической, так и механической суффозий (рис. 2). На границах Γ_3 и Γ_6 заданы условия непроницаемости, Γ_1 и Γ_5 — условия симметричности, а границы Γ_2 и Γ_4 дренированные. Концентрация химических веществ в верхнем бьефе (граница Γ_2) равна 350 г/л. При этом учтены сезонные колебания температуры от $T_{\max} = 40^{\circ}\text{C}$ до $T_{\min} = 4^{\circ}\text{C}$ на границе контакта грунта с атмосферой. Размеры области фильтрационной консолидации (в метрах): $b_1 = -20$, $b_2 = 20$, $l = 10$, $l_1 = -10$, $l_2 = 10$. Получены значения температуры, концентрации солей в поровом растворе, концентрации суффозионных частиц, концентрации солей в твердом компоненте грунта и напоров на период времени до 3600 сут включительно (примерно 10 лет).

В табл. 1 приведены результаты проседания некоторых точек верхней границы грунта для следующих случаев: 1 — без учета влияния суффозионных явлений; 2 — с учетом механической суффозии; 3 — с учетом влияния механической и химической суффозий. При сравнении результатов проседания грунта через 10 лет в случаях учета и неучета влияния явлений суффозий видно, что они существенно отличаются (изменение в пределах 13–108 %).

Таблица 1

Случаи проседания точек грунта	Расчетные значения величин (см) проседания точек поверхности грунта с координатами				
	-20	-10	0	10	20
1	0,14	0,85	9,98	19,91	28,34
2	0,23 (+68%)	1,70 (+100%)	12,81 (+28%)	23,53 (+18%)	32,10 (+13%)
3	0,26 (+90%)	1,77 (+108%)	12,97 (+30%)	23,76 (+19%)	32,20 (+14%)

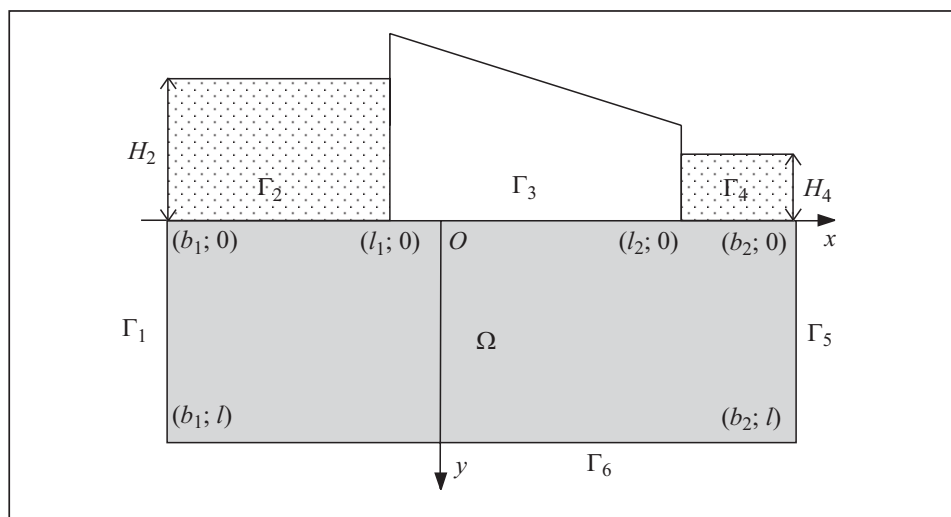


Рис. 2. Графическое изображение области Ω фильтрационной консолидации

Качественный анализ физико-химических процессов в грунте позволяет сделать выводы о влиянии механико-химической суффозии на неравномерные проседания поверхности грунта. Однако реальные числовые прогнозы можно получить только средствами математического и компьютерного моделирования.

Результаты проведенного эксперимента для модельной задачи указывают на возможность значительного влияния на проседание грунта явлений механико-химической суффозии. При решении реальных практически важных задач предварительно должны быть известны все параметры реальных процессов и грунта как системы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Многокомпонентность искусственных и природных пористых сред, а также взаимосвязанность и взаимозависимость процессов, происходящих в них, требуют методологически системного подхода к математическому и компьютерному моделированию соответствующих явлений. В статье представлены элементы системного подхода на примере задачи консолидации насыщенной пористой среды с учетом проседаний ее поверхности, а также влияния взаимосвязанных процессов суффозии, тепло- и солепереноса. Построена математическая модель, в которой влияние взаимосвязанных процессов учитывается двумя способами: первый (известный) — учет непосредственного взаимодействия потоков компонентов (химический осмос, термический осмос и т.п.), второй (в некоторой степени авторский) — через зависимости параметров пористой среды от определяющих процессы функций (температура, концентрация химических веществ, напор в поровой жидкости) и использование в уравнениях неразрывности компонентов пористой среды полной производной во времени. При применении такого подхода вывод математических моделей упрощается.

Показаны возможности пакета FreeFem++ по реализации схем МКЭ относительно моделей, которые описываются краевыми задачами для систем квазилинейных параболических уравнений в областях с подвижными границами. Изменения положения верхней границы исследуемого массива грунта — следствие как уплотнения (консолидации), так и растворения солей (химическая суффозия), а также выноса части твердых частиц фильтрационным потоком за пределы области (механическая суффозия). На примере модельной задачи показаны изменения проседаний грунта (13–108%) при учете явления суффозии. Эффект распараллеливания вычислений (в пакете FreeFem++) к системе четырех квазилинейных параболических уравнений начинает проявляться при превышении количества узлов 50 тысяч (при использовании квадратических базисных функций и треугольных конечных элементов). Исследователь может легко подключать авторские программы-модули к указанному пакету и проводить исследования их эффективности вместе с МКЭ нелинейных краевых задач, задач для систем уравнений в частных производных, задач в областях с подвижными границами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bulavatsky V.M., Skopetskii V.V. Generalized mathematical model of the dynamics of consolidation processes with relaxation. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2008. Vol. 44, N 5. P. 646–654.
2. Bulavatsky V.M., Skopetsky V.V. On an unconventional mathematical model of geoinformatics. *Journal of Automation and Information Sciences*. 2010. Vol. 42, N 10. P. 16–25.
3. Бомба А.Я., Булавацький В.М., Скопецький В.В. Нелінійні математичні моделі процесів геогідродинаміки. К.: Наук. думка, 2007. 291 с.
4. Власюк А.П., Мартинюк П.М. Математичне моделювання консолідації ґрунтів при фільтрації сольових розчинів в неізотермічних умовах. Рівне: НУВГП, 2008. 416 с.
5. Kolditz O., Gorke U.-J., Shao H., Wang W., Bauer S. Thermo-hydro-mechanical-chemical processes in fractured porous media: Modelling and benchmarking: Benchmarking. Cham: Springer, 2016. 243 p.
6. Ballarini E., Graupner B., Bauer S. Thermal–hydraulic–mechanical behavior of bentonite and sand-bentonite materials as seal for a nuclear waste repository: Numerical simulation of column experiments. *Applied Clay Science*. 2017. Vol. 135. P. 289–299.
7. Beyer C., Popp S., Bauer S. Simulation of temperature effects on groundwater flow, contaminant dissolution, transport and biodegradation due to shallow geothermal use. *Environmental Earth Sciences*. 2016. Vol. 75. P. 12–44.
8. Bayesteh H., Mirghasemi A.A. Numerical simulation of pore fluid characteristic effect on the volume change behavior of montmorillonite clays. *Computers and Geotechnics*. 2013. Vol. 48. P. 146–155.
9. Jambhekar V.A., Helmig R., Schroder N., Shokri N. Free-flow–porous-media coupling for evaporation-driven transport and precipitation of salt in soil. *Transp. Porous Med.* 2015. Vol. 110, N 2. P. 251–280.
10. Golay F., Bonelli S. Numerical modeling of suffusion as an interfacial erosion process. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*. 2011. Vol. 15, N 8. P. 1225–1241.
11. Seghir A., Benamar A., Wang H. Effects of fine particles on the suffusion of cohesionless soils. Experiments and modeling. *Transp. Porous Med.* 2014. Vol. 103, N 2. P. 233–247.
12. Mitchell J.K., Soga K. Fundamentals of soil behavior. Hoboken: Wiley, 2005. 592 p.
13. Герус В.А., Мартинюк П.М. Узагальнення рівняння консолідації ґрунтів з урахуванням впливу фізико-хімічних факторів. *Вісник Харківського нац. ун-ту ім. В. Н. Каразіна. Сер. Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління*. 2015. Вип. 27. С. 41–52.
14. Герус В.А., Мартинюк П.М., Мічута О.Р. Загальна кінематична гранична умова в теорії фільтраційної консолідації ґрунтів. *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*. 2015. Вип. 22. С. 23–30.
15. Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. Обзор контактных алгоритмов. *Изв. РАН, МТТ*. 2005. № 1. С. 44–85.
16. Сергиенко И.В., Скопецький В.В., Дейнека В.С. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах. К.: Наук. думка, 1991. 432 с.
17. Трушевський В.М., Шинкаренко Г.А., Щербина Н.М. Метод скінченних елементів і штучні нейронні мережі: теоретичні аспекти та застосування. Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2014. 396 с.

18. Hecht F., Auliac S., Pironneau O., Morice J., Le Hyaric A., Ohtsuka K. FreeFem++. Paris: Univ. Pierre et Marie Curie, 2013. 378 p.
19. Sergienko I.V., Molchanov I.N., Khimich A.N. Intelligent technologies of high-performance computing. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2010. Vol. 46, N 5. P. 833–844.
20. Khimich A., Nikolaevskaya E., Chistyakova T. Programming with multiple precision. Berlin: Springer-Verlag, 2012. 206 p.
21. Трушевський В.М., Шинкаренко Г.А. Розпаралелена апроксимація еліптичних крайових задач штучною нейромережею з радіально-базисними функціями. *Вісн. Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. та інф.* 2014. Вип. 22. С. 108–117.
22. Baranov A.Yu., Bilous M.V., Sergienko I.V., Khimich A.N. Hybrid algorithms to solve linear systems for finite-element modeling of filtration processes. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2015. Vol. 51, N 4. P. 594–602.
23. Smith I.M., Griffiths D.V., Margetts L. Programming the finite element method. Chichester: Wiley, 2014. 664 p.
24. Duff I. S., Erisman A.M., Reid J.K. Direct methods for sparse matrices. Oxford: Oxford Univ. Press, 2017. 429 p.
25. Мічута О.Р., Мартинюк П.М., Герус В.А. Математичне моделювання процесів хімічної та контактної суфозії в ґрунтах. Рівне: НУВГП, 2016. 207 с.

Надійшла до редакції 22.05.2017

В.А. Герус, Н.В. Іванчук, П.М. Мартинюк
СИСТЕМНИЙ ПІДХІД ДО МАТЕМАТИЧНОГО І КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ
ГЕОМІГРАЦІЙНИХ ПРОЦЕСІВ З ВИКОРИСТАННЯМ ПАКЕТУ FreeFem++
ТА РОЗПАРАЛЕЛЮВАННЯ ОБЧИСЛЕНЬ

Анотація. Описано спосіб побудови математичних моделей взаємозв'язаних процесів у пористих середовищах з точки зору теорії складних багатокомпонентних систем. Показано можливості пакету FreeFem++ з розв'язування відповідних крайових задач для систем квазілінійних параболічних рівнянь в областях з рухомими межами методом скінченних елементів з використанням розпаралелювання обчислень.

Ключові слова: математичне та комп'ютерне моделювання, багатокомпонентні пористі середовища, хімічна та механічна суфозія, фільтраційна консолідація, тепломасоперенесення, вільна рухома межа, системи квазілінійних параболічних рівнянь, метод скінченних елементів, FreeFem++, паралельні обчислення.

V.A. Herus, N.V. Ivanchuk, P.M. Martyniuk
A SYSTEM APPROACH TO MATHEMATICAL AND COMPUTER MODELING OF GEOMIGRATION
PROCESSES BY USING FreeFem++ AND PARALLELIZATION OF CALCULATIONS

Abstract. A porous media is a complex multicomponent system. The method of constructing the mathematical models of interrelated processes in such systems is described. The capabilities of FreeFem++ package in solving the corresponding free boundary-value problems for systems of quasilinear parabolic equations using the finite-element method and parallel computing are shown.

Keywords: mathematical and computer modeling, multicomponent porous media, chemical and mechanical suffusion, filtration consolidation, heat and mass transfer, free moveable boundary, system of quasilinear parabolic equations, finite element method, FreeFem++, parallel computations.

Герус Владимир Андреевич,
аспирант Национального университета водного хозяйства и природопользования, Ровно,
e-mail: v.a.gerus@nuwm.edu.ua.

Иванчук Наталья Витальевна,
старший преподаватель кафедры Национального университета водного хозяйства и природопользования,
Ровно, e-mail: n.v.medvid@nuwm.edu.ua.

Мартинюк Петр Николаевич,
доктор техн. наук, доцент, заведующий кафедрой Национального университета водного хозяйства и природопользования, Ровно, e-mail: p.m.martyniuk@nuwm.edu.ua.