КОМПЬЮТЕРНАЯ МАТЕМАТИКА

Математическое моделирование

УДК 517.954:532.546

В.М. БУЛАВАЦКИЙ, А.В. ГЛАДКИЙ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛОКАЛЬНО-НЕРАВНОВЕСНОГО ГЕОМИГРАЦИОННОГО ПРОЦЕС СА В УСЛОВИЯХ МАССООБМЕНА

Построена математическая модель для изучения локально-неравновесных во времени геомиграционных процессов солевых растворов в условиях массообмена. Поставлена соответствующая нелинейная краевая задача и приведен алгоритм получения ее приближенного решения.

Введение. Вопросы математического моделирования пространственно-временных процессов геофильтрации и массопереноса представляют значительный интерес, прежде всего, при разработке современных геотехнологий добычи полезных ископаемых а также при изучении вопросов охраны подземных вод и водозаборов от загрязнений, являющихся результатом действия техногенных факторов человеческой деятельности (в частности, знание особенностей динамики геофильтрационных процессов играет важную роль при решении задач охраны подземных вод от загрязнений токсичным содержимым накопителей промстоков [1, 2]).

Отметим, что математическое моделирование геофильтрационных процессов, являясь одним из важнейших направлений геоинформатики и геогидродинамики, развивается преимущественно в предположении насыщенности массивов геопористой среды чистой водой [3]. Однако, в настоящее время особую актуальность приобретают исследования в области математического моделирования динамики указанных процессов в массивах насыщенных солевыми растворами. При этом проведены комплексные исследования в области математического моделирования динамики геофильтрации солевых растворов при учете релаксационных свойств жидкости, релаксационных свойств пористого скелета, учете неизотермичности процесса и термодиффузии, теплового расширения жидкой фазы и другие. [4].

В сложных горно-геологических условиях существенно проявляется неравновесность геофильтрационного процесса, которая обусловлена рядом причин, изложенных, например в [5]. Это приводит к необходимости разработки методов математического моделирования динамики локально-неравновесных геофильтрационных процессов. Далее построена математическая модель для исследования динамики процесса фильтрации и массопереноса солевых растворов в геопористой среде (в частности фрактальной структуры) в условиях сильной временной нелокальности при учете массообмена с вмещающими породами. В рамках предложенной модели выполнена постановка соответствующей краевой задачи для массива конечной мощности с проницаемыми гранями и разработана методика приближенного решения указанной краевой задачи.

1. Построение математической модели процесса и постановка краевой задачи. Используем следующее обобщение геофильтрационного закона Дарси [3] на случай движения солевых растворов с учетом осмоса в условиях сильной временной нелокальности:

$$u_x = D_t^{1-\beta}\left(-\frac{k}{\mu}\frac{\partial p}{\partial x} + \nu\frac{\partial C}{\partial x}\right), \tag{1}$$

где u_x – скорость фильтрации; p – давление; C – концентрация солей в жидкой фазе; k – коэффициент фильтрации; μ – вязкость жидкости; ν – коэффициент осмоса [2]; $D_t^{1-\beta}$ – оператор дробного дифференцирования Римана – Лиувилля [6, 7] порядка $1-\beta$ ($0<\beta\le 1$).

Отсюда с учетом уравнения неразрывности [3]

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \beta_1^*\frac{\partial p}{\partial t} = 0 \tag{2}$$

(β_1^* – коэффициент упругоемкости пласта), получаем уравнение для определения фильтрационного давления в виде

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_t^{1-\beta}\left(\kappa\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \eta\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right) \tag{3}$$

или

$$D_t^{(\beta)} p(x,t) = \kappa\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \eta\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \tag{4}$$

где $\kappa = \dfrac{k}{\mu\beta_1^*}$, $\eta = \dfrac{\nu}{\beta_1^*}$, $D_t^{(\beta)}$ – оператор регуляризованной дробной производной (по Капуто [6, 7]) порядка β.

Предполагая наличие также условий сильной временной нелокальности для диффузионного процесса, будем исходить из следующего обобщения закона Фика:

$$q = D_t^{1-\beta}\left(-d\frac{\partial C}{\partial x} + CJ_t^{1-\beta}u_x\right), \tag{5}$$

где $q -$ диффузионный поток, $d -$коэффициент диффузии, $J_t^{1-\beta} -$ дробный интеграл Римана – Лиувилля порядка $1-\beta$ [6]. Для получения уравнения конвективной диффузии растворимых веществ при геофильтрации солевых растворов запишем одномерное уравнение баланса массы с учетом межфазного массообмена в виде

$$\sigma\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0\,, \tag{6}$$

где $\sigma -$пористость среды, $N -$концентрация вещества в твердой фазе. Тогда из соотношения (6), с учетом (1) и (5), в предположении слабой сжимаемости среды получаем уравнение для определения концентрации солей жидкой фазе в виде:

$$\sigma\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial t} = D_t^{1-\beta}\left(d\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \left(\frac{k}{\mu}\frac{\partial p}{\partial x} - \nu\frac{\partial C}{\partial x}\right)\frac{\partial C}{\partial x}\right) \tag{7}$$

или

$$\sigma D_t^{(\beta)}C(x,t) + D_t^{(\beta)}N(x,t) = d\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \left(\frac{k}{\mu}\frac{\partial p}{\partial x} - \nu\frac{\partial C}{\partial x}\right)\frac{\partial C}{\partial x}. \tag{8}$$

Обобщенное на случай временной нелокальности уравнение кинетики массообмена с учетом уравнения неравновесной обратимой сорбции при изотерме Генри запишем в виде

$$D_t^{(\beta)}N = \gamma(\sigma C - \alpha N)\,, \tag{9}$$

где $\alpha -$коэффициент равновесного сорбционного распределения, $\gamma -$коэффициент скорости сорбции.

Таким образом, неклассическая математическая модель геофильтрации солевых растворов с учетом осмотических явлений в условиях массообмена и временной нелокальности базируется на системе уравнений дробного порядка вида

$$D_t^{(\beta)}p(x,t) = \kappa\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \eta\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\,, \tag{10}$$

$$\sigma D_t^{(\beta)}C(x,t) + D_t^{(\beta)}N(x,t) = d\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \left(\frac{k}{\mu}\frac{\partial p}{\partial x} - \nu\frac{\partial C}{\partial x}\right)\frac{\partial C}{\partial x}, \tag{11}$$

где $D_t^{(\beta)}N(x,t)$ определяется согласно (9).

Эта модель обобщает на случай наличия локально-неравновесных во времени условий протекания процесса математическую модель равновесного массопереноса солевых растворов в деформируемых пористых средах в условиях действия осмотических явлений [2]. Действительно, при $\beta \to 1$ из (10), (11) получаем соответствующие соотношения из [2].

В рамках предложенной модели, моделирование динамики полей давлений и концентраций при геофильтрации в условиях временной нелокальности процесса сводится, например, в случае массива конечной мощности l, к решению в области $(0,l)\times(0,+\infty)$ системы уравнений (9)–(11) с краевыми условиями

$$p(0,t)=0\,, \qquad p(l,t)=0\,, \qquad p(x,0)=p_0\,, \tag{12}$$

$$C(0,t)=C_0\,, \qquad \frac{\partial C(l,t)}{\partial x}=0\,, \qquad C(x,0)=0\,, \qquad N(x,0)=N_0\,, \tag{13}$$

где p_0 – начальное давление в массиве, C_0 – заданное значение концентрации солей на входе фильтрационного потока, N_0 – заданная начальная концентрация вещества в твердой фазе.

2. Методика получения приближенного решения краевой задачи и вычислительный алгоритм. Введем в рассмотрение сеточную область $\omega_h=\left\{x_i : x_i=ih \quad (i=\overline{0,m+1})\right\}$, где h – шаг сетки по геометрической переменной и поставим в соответствие задаче для вычисленя поля давлений (10), (12) дифференциально-разностную задачу вида

$$D_t^{(\beta)}\vec{u}(t)=\frac{1}{h^2}\left(T^{(m)}-2E\right)\vec{u}(t)+\vec{w}(t)\,, \tag{14}$$

$$\vec{u}(0)=\vec{e}, \tag{15}$$

где обозначено

$$\vec{u}(t)=\left[p_1(t),\,p_2(t),\ldots,p_m(t)\right]^T, \qquad \vec{e}=(p_0,p_0,\ldots,p_0)^T,$$

$$\vec{w}(t)=\left[w_1(t),\,w_2(t),\ldots,w_m(t)\right]^T=\frac{\eta}{h^2}\left[(2E-T_3^{(m)})\vec{V}(t)-\vec{\omega}_1\right],$$

$$\vec{V}(t)=\left[C_1(t),C_2(t)\,,\ldots,C_m(t)\right]^T, \quad \vec{\omega}_1=(1,0,\ldots,0)^T,$$

$T^{(m)}$, $T_3^{(m)}$ – квадратные матрицы порядка m, определенные в [8], E – единичная матрица порядка m.

Введем также в рассмотрение P – трансформации векторов $\vec{u}$ и $\vec{w}$ соотношениями

$$\vec{\bar{u}}(t)=P^{(m)}\vec{u}(t), \qquad \vec{\bar{w}}(t)=P^{(m)}\vec{w}(t), \tag{16}$$

где $P^{(m)}=\left[p_{kj}\right]_{k,j=1}^{m}$ – фундаментальная матрица порядка m [8].

Умножая (14), (15) слева на матрицу $P^{(m)}$, с учетом соотношения [8]

$$T^{(m)}=P^{(m)}\Lambda^{(m)}P^{(m)},$$

где $\Lambda^{(m)}=\left[\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_m\right]$ – диагональная матрица собственных чисел матрицы $T^{(m)}$, получаем задачу в изображениях, записываемую в скалярной форме в виде

$$D_t^{(\beta)}\hat{u}_i(t) - \kappa_i \hat{u}_i(t) = \hat{w}_i(t) \qquad (i = \overline{1, m}), \tag{17}$$

$$\hat{u}_i(0) = \hat{e}_i \qquad (i = \overline{1, m}), \tag{18}$$

где $\kappa_i = \dfrac{1}{h^2}(\lambda_i - 2)$, $\hat{e}_i = p_0 \sum\limits_{k=1}^{m} p_{ik}$,

$$\hat{w}_i(t) = -\frac{\eta}{h^2}\sum_{k=1}^{m} p_{ik}\left(C_{k-1}(t) - 2C_k(t) + C_{k+1}(t)\right).$$

Согласно [6] решение задачи (17), (18) запишем в виде

$$\hat{u}_i(t) = \hat{e}_i E_\beta(\kappa_i t^\beta) + \int_0^t (t-\tau)^{\beta-1} E_{\beta,\beta}\left(\kappa_i (t-\tau)^\beta\right)\hat{w}_i(\tau)\, d\tau \quad (i = \overline{1, m}), \tag{19}$$

где $E_\beta(z)$ – функция Миттаг–Леффлера, $E_{\alpha,\beta}(z)$ – обобщенная функция Миттаг – Леффлера [6].

Возвращаясь в соотношениях (19) к оригиналам по геометрической переменной, получаем точное решение исходной дифференциально-разностной задачи (14), (15) в виде следующей явной зависимости функции давления p от концентрации C:

$$p_i(t) = G_i(t) \; - \; \sum_{k=1}^{m}\int_0^t \left(C_{k-1}(\tau) - 2C_k(\tau) + C_{k+1}(\tau)\right)\Phi_{ik}(t-\tau)\, d\tau \;\; (i = \overline{1, m}), \tag{20}$$

где

$$G_i(t) = \sum_{s=1}^{m}\sum_{k=1}^{m} p_{is} p_{sk} E_\beta(\kappa_s t^\beta), \qquad \Phi_{ik}(t) = \frac{\eta t^{\beta-1}}{h^2}\sum_{s=1}^{m} p_{is} p_{sk} E_{\beta,\beta}(\kappa_s t^\beta).$$

Задача (11), (13) для вычисления полей концентраций решается численно. Для этого введем в рассмотрение сеточную область $\omega_{h\tau} = \left\{(x_i, t_j) : x_i = ih \; (i = \overline{0, m+1}),\; t_j = j\tau \;\; (j = \overline{0, n}\,)\right\}$ (h, τ – шаги сетки по геометрической переменной и времени соответственно) и используем, например, монотонную разностную схему А.А. Самарского, которая в обозначениях работы [9] запишется в виде

$$\sigma \Delta_t^{(\beta)} C = \chi \hat{C}_{\bar{x}x} + u^+ \hat{C}_x + u^- \hat{C}_{\bar{x}} - \gamma(\sigma \hat{C} - \alpha N), \tag{21}$$

где

$$\chi = \frac{d}{R}, \quad R = 1 + \frac{h|u|}{2d}, \quad u^\pm = \frac{1}{2}\left(u \pm |u|\right), \quad u = k p_{\overset{0}{x}} - \nu C_{\overset{0}{x}}.$$

При этом в соотношении (21) оператор $\Delta_t^{(\beta)}$ обозначает дискретный аналог производной дробного порядка $D_t^{(\beta)}$. Согласно [10] можно записать

$$\Delta_{t_{j+1}}^{(\beta)} C = \frac{1}{\Gamma(2-\beta)}\sum_{s=0}^{j} b_s^{(j)} C_{t,s}, \tag{22}$$

где $b_s^{(j)} = \tau^{1-\beta}\left[(j-s+1)^{1-\beta} - (j-s)^{1-\beta}\right]$, $C_{t,s} = \dfrac{C^{s+1} - C^s}{\tau}$, $\Gamma(\alpha)$ – гамма-функция Эйлера. В классе достаточно гладких функций имеем $D_t^{(\beta)}u = \Delta_t^{(\beta)}u + O(\tau)$ [10].

Расписывая в соотношении (21) соответствующие разностные операторы и приводя подобные члены, получаем следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$A_i^j C_{i-1}^{j+1} - S_i^j C_i^{j+1} + B_i^j C_{i+1}^{j+1} = -F_i^j \qquad (i = \overline{1, m};\ j = \overline{0, n}), \tag{23}$$

где обозначено

$$A_i^j = \frac{1}{h}\left(\frac{\chi_i^j}{h} - (u^-)_i^j\right),\ B_i^j = \frac{1}{h}\left(\frac{\chi_i^j}{h} + (u^+)_i^j\right),\ S_i^j = \frac{\sigma}{\tau^\beta \Gamma(2-\beta)} - \gamma\sigma + A_i^j + B_i^j,$$

$$F_i^j = \frac{\sigma}{\Gamma(2-\beta)}\left(\frac{1}{\tau^\beta} C_i^j - \sum_{s=0}^{j-1} b_s^{(j)} \frac{C_i^{s+1} - C_i^s}{\tau} + \alpha\gamma N_i^j\right).$$

Разностные уравнения системы (23) являются трехточечными и эффективно решаются методом прогонки [9]. Устойчивость метода прогонки для системы (23) вытекает из факта диагонального преобладания в матрице коэффициентов данной системы алгебраических уравнений.

Концентрация N вещества в твердой фазе находится с учетом (9) в явном виде:

$$N(x,t) = N_0 E_\beta(-\alpha\gamma t^\beta) + \sigma\gamma\int_0^t (t-\tau)^{\beta-1} E_{\beta,\beta}\left(-\alpha\gamma(t-\tau)^\beta\right) C(x,\tau)\, d\tau. \tag{24}$$

Вычислительный алгоритм для приближенного решения рассматриваемой задачи состоит в последовательном вычислении величин C, p и N согласно (21), (20) и (24).

Заключение. Рассмотренная в работе математическая модель позволяет численно моделировать динамику процессов переноса при геофильтрации солевых растворов в локально-неравновесных по времени условиях при наличии массообмена. Учет явления временной нелокальности миграционного процесса и явления массообмена при выработке инженерных решений, например, в области проектирования систем экологически безопасного функционирования поверхностных накопителей промышленных и бытовых стоков в сложных горно-геологических условиях и геосредах фрактальной структуры позволит избежать ряда ошибок в прогнозировании степени безопасности указанных объектов.

В.М. Булавацький, А.В. Гладкий

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЛОКАЛЬНО-НЕРІВНОВАЖНОГО ГЕОМІГРАЦІЙНОГО ПРОЦЕСУ ЗА УМОВ МАСООБМІНУ

Побудовано математичну модель для вивчення локально-нерівноважних у часі геоміграційних процесів сольових розчинів за умов масообміну. Поставлена відповідна нелінійна крайова задача та наведено алгоритм отримання її наближеного розв'язку.

V.M. Bulavatsky, A.V. Gladky

MATHEMATICAL MODELING OF LOCAL-NONEQUILIBRIUM GEOMIGRATION PROCESS IN CONDITIONS MASS TRANSFER

The mathematical model for research of local - nonequilibrium geomigration process of solute solutions is constructed. The statement of corresponding nonlinear boundary-value problem and the algorithm of receipt of its approximation solution are given.

1. *Булавацький В.М., Кривонос Ю.Г., Скопецький В.В.* Некласичні математичні моделі процесів тепло- та масопереносу. − К.: Наук. думка, 2005.− 283 с.
2. *Власюк А.П., Мартинюк П.М.* Математичне моделювання консолідації грунтів в процесі фільтрації сольових розчинів.– Рівне: Вид-во УДУВГП, 2004. – 211 с.
3. *Баренблатт Г.И., Ентов В.Н., Рыжик В.М.* Движение жидкостей и газов в природных пластах. – М.: Недра, 1984. – 303 с.
4. *Бомба А.Я., Булавацький В.М., Скопецький В.В.* Нелінійні математичні моделі процесів геогідродинаміки. – К.: Наук. думка, 2007. – 292 с.
5. *Хасанов М.М., Булгакова Г.Т.* Нелинейные и неравновесные эффекты в геологически сложных средах. – Москва – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. – 288 с.
6. *Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J.* Theory and applications of fractional differential equations. – Amsterdam: Elsevier, 2006. – 523 p.
7. *Чикрий А.А., Матичин И.И.* Об аналоге формулы Коши для линейных систем произвольного дробного порядка // Доп. НАН України, 2007. – № 1. – С. 50–55.
8. *Положий Г.Н.* Численное решение двумерных и трехмерных краевых задач математической физики и функции дискретного аргумента. – Киев: Вища школа, 1962. – 161 с.
9. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977. – 656 с.
10. *Таукенова Ф.И., Шхануков–Лафишев М.Х.* Разностные методы решения краевых задач для дифференциальных уравнений дробного порядка // Журн. вычислительной математики и математической физики. – 2006. – **46**, № 10. – С. 1871–1881.

Получено 10.09.2012

Об авторах:

Булавацкий Владимир Михайлович,
доктор технических наук, профессор, ведущий научный сотрудник
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины,
e-mail: v_bulav@ukr.net

Гладкий Анатолий Васильевич,
доктор физико-математических наук, профессор, заведующий отделом
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины.