

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ДИНАМИКИ  
ПРОЦЕССА ФИЛЬТРАЦИОННО-КОНВЕКТИВНОЙ  
ДИФФУЗИИ РАСТВОРИМЫХ ВЕЩЕСТВ  
В НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

**Введение**

Настоящая работа посвящена разработке методики математического моделирования динамики неизотермического локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при плоско-вертикальной установившейся фильтрации грунтовых вод со свободной поверхностью. Подобные задачи возникают во многих технических приложениях, например в связи с необходимостью очистки грунтовых вод от загрязнения промышленными и бытовыми стоками [1]. Методика математического моделирования динамики указанных процессов переноса в рамках классических математических моделей в настоящее время достаточно хорошо разработана [1, 2]. (Математически аналогичные постановки краевых задач встречаются также в теории тепломассопереноса движущихся растворов и газовых смесей.)

При этом весьма актуальна проблема повышения степени адекватности классических количественных математических моделей процессов тепломассопереноса в системах со сложной пространственно-временной структурой, для которых характерны эффекты памяти, пространственной нелокальности и самоорганизации [3, 4]. Указанное обстоятельство привело к тенденции пересмотра основных положений классической теории тепломассопереноса, в частности, значительный прогресс при моделировании конвективно-диффузионного переноса в неравновесных условиях достигнут на основе формализма интегро-дифференцирования дробного порядка. Примеры использования данного подхода изложены в работах [5, 6], в первой из них выполнено математическое моделирование дробно-дифференциальной динамики локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при установившейся двумерной плановой напорной фильтрации из хранилища сточных вод к водозабору (реке), а во второй — моделирование указанного неравновесного диффузионного процесса при плоско-вертикальной установившейся фильтрации из рек, каналов или поверхностных накопителей промышленных стоков.

В [7] изучена новая дробно-дифференциальная математическая модель предназначенная для исследования неравновесной динамики процесса конвективной диффузии растворимых веществ при плоско-вертикальной установившейся фильтрации грунтовых вод в области со свободной границей. Рассматривается локально-неравновесный во времени конвективно-диффузионный процесс в пористой среде со сложной пространственно-временной структурой, для которого характерно выполнение релаксационного закона диффузии Фика.

В указанных выше случаях систем со сложной пространственно-временной структурой рассматриваемые математические модели динамики локально-неравновесных во времени процессов конвективной диффузии растворимых веществ при двумерной установившейся фильтрации со свободной поверхностью строились в предположении изотермичности условий протекания процессов.

В отличие от этого, ниже выполнено математическое моделирование динамики неизоотермического локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при двумерной установившейся плоско-вертикальной фильтрации со свободной поверхностью согласно фильтрационной схеме, соответствующей распространению загрязнений из рек, каналов или хранилищ промстоков [8].

### 1. Построение математической модели процесса и постановка краевой задачи

Рассматривая неизоотермический локально-неравновесный во времени процесс конвективной диффузии растворимых веществ в водонасыщенной пористой среде со сложной пространственно-временной структурой, будем исходить из следующего обобщения классического диффузионного закона Фика:

$$\bar{q} = D_t^{1-\alpha}(-d\nabla C + \bar{v}C - d_T\nabla T), \quad (1)$$

где  $\bar{q}$  — конвективно-диффузионный поток,  $C$  — концентрация растворимых веществ в жидкой фазе,  $\bar{v}$  — скорость фильтрации,  $d$  — коэффициент диффузии,  $d_T$  — коэффициент термодиффузии,  $D_t^{1-\alpha}$  — оператор дробного дифференцирования Римана–Лиувилля порядка  $1-\alpha$  ( $0 < \alpha \leq 1$ ) [9–12],  $\nabla$  — оператор Гамильтона.

Из соотношения (1) и уравнения «материального баланса»

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

( $\sigma$  — пористость среды) получаем уравнение

$$\sigma \frac{\partial C}{\partial t} = D_t^{1-\alpha}(d\Delta C - \operatorname{div}(C\bar{v}) + d_T\Delta T)$$

или

$$\sigma D_t^{(\alpha)}C = d\Delta C - \operatorname{div}(C\bar{v}) + d_T\Delta T, \quad (2)$$

где  $D_t^{(\alpha)}$  — оператор регуляризованной дробной производной (Капуто–Герасимова [9–12]) порядка  $\alpha$ ,  $\Delta$  — оператор Лапласа. С учетом уравнения неразрывности фильтрационного потока  $\operatorname{div} \bar{v} = 0$  из соотношения (2) окончательно находим

$$\sigma D_t^{(\alpha)}C = d\Delta C - \bar{v} \cdot \nabla C + d_T\Delta T. \quad (3)$$

Отметим, что при  $\alpha \rightarrow 1$  из (3) получаем классическое уравнение конвективной диффузии с учетом термодиффузии  $\sigma C_t = d\Delta C - \bar{v} \cdot \nabla C + d_T\Delta T$ . Уравнение для определения аномального температурного поля в неравновесных условиях запишем в виде [13]

$$C_T D_t^{(\beta)}T = \lambda\Delta T - \rho C_p \bar{v} \cdot \nabla T, \quad (4)$$

где  $C_T$  — объемная теплоемкость грунта,  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности,  $\rho$ ,  $C_p$  — плотность и удельная теплоемкость порового раствора соответственно,  $\beta$  — порядок регуляризованной дробной производной по временной переменной ( $0 < \beta \leq 1$ ).

Рассматривая установившуюся плоско-вертикальную фильтрацию в потенциальном поле скоростей согласно схеме миграции загрязнений из рек, каналов или поверхностных накопителей промышленных стоков (см. рис. 1, а, где изо-

бражена область фильтрации в физической плоскости), получаем, что задача моделирования динамики аномального процесса конвективной диффузии загрязнений в неизотермических условиях воздействия аномального температурного поля математически может быть сформулирована как задача отыскания решения системы уравнений (3), (4)  $((x, y, t) \in G_z \times (0, +\infty))$  при следующих краевых условиях:

$$C|_{AC} = C_1, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial n} \right|_{AB, CB} = 0, \quad C|_{t=0} = 0, \quad (5)$$

$$T|_{AC} = T_1, \quad T|_{AB, CB} = T_2, \quad T|_{t=0} = 0, \quad (6)$$

где  $C_1, T_1$  — заданные концентрация растворимых веществ и температура на входе фильтрационного потока,  $T_2$  — заданная температура на линиях тока  $AB, CB$ ,  $n$  — внешняя нормаль к соответствующей кривой,  $G_z$  — правая часть симметричной области фильтрации в физической плоскости  $z = x + iy$  (рис. 1, а).

Поскольку область фильтрации  $G_z$  является областью с частично неизвестной границей, эффективным способом решения краевых задач вида (3)–(6) является переход к новым переменным  $(\varphi, \psi)$  — точкам геометрически более простой области комплексного потенциала течения  $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < +\infty, 0 < \psi < 1\}$  (рис. 1, б, где изображена область комплексного потенциала). Тогда соответствующая краевая задача для исследования динамики рассматриваемого миграционного процесса математически может быть сформулирована для области комплексного потенциала в виде

$$\sigma D_t^{(\alpha)} C = v^2(\varphi, \psi) \left( d\Delta_{\varphi, \psi} C - \frac{\partial C}{\partial \varphi} + d_T \Delta_{\varphi, \psi} T \right), \quad (7)$$

$$C_T D_t^{(\beta)} T = v^2(\varphi, \psi) \left( \lambda \Delta_{\varphi, \psi} T - \rho C_p \frac{\partial T}{\partial \varphi} \right), \quad ((\varphi, \psi, t) \in G_\omega \times (0, +\infty)), \quad (8)$$

$$C|_{\varphi=0} = C_1, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial \psi} \right|_{\psi=0, \psi=Q} = 0, \quad C|_{t=0} = 0, \quad (9)$$

$$T|_{\varphi=0} = T_1, \quad T|_{\psi=0, \psi=Q} = T_2, \quad T|_{t=0} = 0, \quad (10)$$

где  $\Delta_{\varphi, \psi} = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \psi^2}$  — оператор Лапласа,  $Q$  — фильтрационный расход,  $v^2 = v_x^2 + v_y^2$ ,  $\vec{v} = (v_x, v_y) = \nabla \varphi$ ,  $\varphi$  — потенциал скорости,  $\psi$  — функция тока.

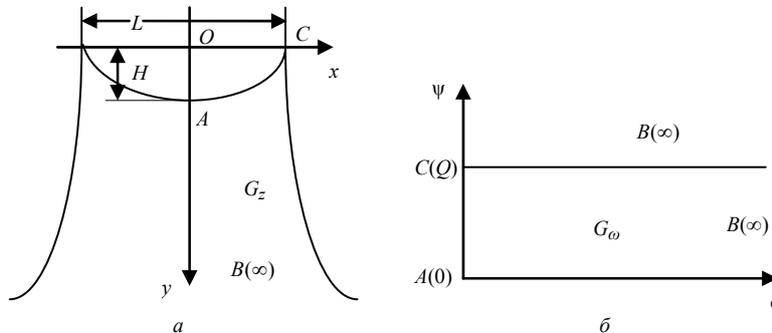


Рис. 1

Для области течения, изображенной на рис. 1, *a*, решение соответствующей задачи установившейся фильтрации записывается в виде [8]

$$x = He^{\frac{\pi\varphi}{2Q}} \sin\left(\frac{\pi\psi}{2Q}\right) + \frac{\psi}{\kappa},$$

$$y = He^{\frac{\pi\varphi}{2Q}} \cos\left(\frac{\pi\psi}{2Q}\right) + \frac{\varphi}{\kappa},$$

где  $\kappa$  — коэффициент фильтрации,  $Q = \kappa\left(\frac{L}{2} - H\right)$  — фильтрационный расход.

(Формула для вычисления  $v^2(\varphi, \psi)$  дана в [8] и приводится ниже.)

Введем безразмерные переменные и параметры в виде соотношений

$$x' = \frac{x}{L}, \quad y' = \frac{y}{L}, \quad \varphi' = \frac{\varphi}{Q}, \quad \psi' = \frac{\psi}{Q}, \quad H' = \frac{H}{L}, \quad C' = \frac{C}{C_1}, \quad T' = \frac{T}{T_1},$$

$$d' = \frac{d}{Q}, \quad v' = \frac{v}{v_0}, \quad t' = \left(\frac{v_0^2}{Q}\right)^{\frac{1}{\alpha}} t, \quad \kappa' = \frac{\kappa L}{Q}, \quad \kappa_1' = \frac{2Q}{\pi\kappa H}, \quad a' = \left(\frac{Q}{v_0 H}\right)^2,$$

$$d'_T = \frac{T_1}{QC_1} d_T, \quad \lambda' = \frac{\lambda}{C_T} \left(\frac{Q^{2\alpha}}{v_0^{\alpha-1}}\right)^2, \quad \mu' = \frac{\rho C_p}{C_T} \left(\frac{Q}{v_0^2}\right)^{\beta-1}, \quad \theta' = \frac{T_2}{T_1}, \quad (11)$$

где  $L$  — масштабный параметр,  $v_0$  — характерный скоростной параметр.

Переходя в (7)–(10) к безразмерным переменным согласно (11) и опуская в дальнейшем «штрих» над безразмерными величинами, получаем в области  $G_\omega \times (0, +\infty)$  краевую задачу:

$$\sigma D_t^{(\alpha)} C = v^2(\varphi, \psi) \left( d \Delta_{\varphi, \psi} C - \frac{\partial C}{\partial \varphi} + d_T \Delta_{\varphi, \psi} T \right), \quad (12)$$

$$D_t^{(\beta)} T = v^2(\varphi, \psi) \left( \lambda \Delta_{\varphi, \psi} T - \mu \frac{\partial T}{\partial \varphi} \right), \quad (13)$$

$$C|_{\varphi=0} = 1, \quad \frac{\partial C}{\partial \psi} \Big|_{\psi=0, \psi=1} = 0, \quad C|_{t=0} = 0, \quad (14)$$

$$T|_{\varphi=0} = 1, \quad T|_{\psi=0, \psi=1} = \theta, \quad T|_{t=0} = 0, \quad (15)$$

где согласно [8] имеем

$$v^2(\varphi, \psi) = \frac{4a}{\pi^2} \left( \frac{1}{e^{\pi\varphi} \sin^2\left(\frac{\pi\psi}{2}\right)} + \frac{1}{\left( e^{\frac{\pi\varphi}{2}} \cos\left(\frac{\pi\psi}{2}\right) + \kappa_1 \right)^2} \right).$$

При этом переход из области комплексного потенциала в физическую область осуществляется по формулам

$$x = He^{\frac{\pi\varphi}{2}} \sin\left(\frac{\pi\psi}{2}\right) + \frac{\psi}{\kappa}, \quad y = He^{\frac{\pi\varphi}{2}} \cos\left(\frac{\pi\psi}{2}\right) + \frac{\varphi}{\kappa}. \quad (16)$$

## 2. Методика получения приближенного решения краевой задачи

Ниже кратко изложена конечно-разностная методика получения решения краевой задачи (12)–(15).

Введем в рассмотрение сеточную область

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

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

где  $h_1 = \frac{2\varphi_0}{2m+1}$ ,  $h_2 = \frac{1}{n}$  — шаги сетки по геометрическим переменным  $\varphi$  и  $\psi$  соответственно,  $\tau$  — шаг сетки по временной переменной,  $\varphi_0 = \text{const}$ .

Ограничивая область комплексного потенциала справа некоторой прямой  $\varphi = \varphi_0$  ( $\varphi_0 \gg 1$ ) и задавая на этой прямой дополнительные граничные условия (например, условия Неймана), поставим в соответствие рассматриваемой краевой задаче следующий аналог локально-одномерной [14] разностной схемы А.А. Самарского:

$$\frac{\sigma}{2} \Delta_t^{(\alpha)} \bar{C} = v^2 (d\bar{C}_{\varphi\varphi} - \bar{C}_0 + d_T \bar{T}_{\varphi\varphi}), \quad (17)$$

$$\frac{\sigma}{2} \Delta_t^{(\alpha)} \hat{C} = v^2 (d\hat{C}_{\psi\psi} + d_T \hat{T}_{\psi\psi}), \quad (18)$$

$$\frac{1}{2} \Delta_t^{(\beta)} \bar{T} = v^2 (\lambda \bar{T}_{\varphi\varphi} - \mu \bar{T}_0), \quad (19)$$

$$\frac{1}{2} \Delta_t^{(\beta)} \hat{T} = v^2 \lambda \hat{T}_{\psi\psi}, \quad (20)$$

где  $\hat{C} = C^{j+1}$ ,  $\bar{C} = C^{j+\frac{1}{2}}$ ,  $C = C^j$ ,  $t_{j+\frac{1}{2}} = t_j + \frac{\tau}{2}$ ,  $\hat{T} = T^{j+1}$ ,  $\bar{T} = T^{j+\frac{1}{2}}$ ,  $T = T^j$ ,

$\Delta_t^{(\alpha)}$ ,  $\Delta_t^{(\beta)}$  — разностные аналоги операторов дробного дифференцирования  $D_t^{(\alpha)}$ ,  $D_t^{(\beta)}$ , определяемые соотношениями [15]

$$\Delta_t^{(\alpha)} y = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=0}^j r_s^{(j)} y_{t,s}, \quad r_s^{(j)} = \tau^{1-\alpha} [(j-s+1)^{1-\alpha} - (j-s)^{1-\alpha}],$$

$$\Delta_t^{(\beta)} y = \frac{1}{\Gamma(2-\beta)} \sum_{s=0}^j b_s^{(j)} y_{t,s}, \quad b_s^{(j)} = \tau^{1-\beta} [(j-s+1)^{1-\beta} - (j-s)^{1-\beta}],$$

$y_{t,s} = \frac{y^{s+1} - y^s}{\tau}$ ,  $\Gamma(\alpha)$  — гамма-функция [16].

Отметим, что в классе достаточно гладких функций имеем [15]:  $D_t^{(\alpha)} u = \Delta_t^{(\alpha)} u + O(\tau)$  ( $D_t^{(\beta)} u = \Delta_t^{(\beta)} u + O(\tau)$ ). Получим сначала решение «солевой задачи» (12), (14) на полуцелом временном слое.

Расписывая в (17) разностные операторы и приводя подобные члены, получаем на полуцелом слое  $t_{j+\frac{1}{2}}$  систему уравнений

$$A_{ik} C_{i+1,k}^{j+\frac{1}{2}} - B_{ik} C_{ik}^{j+\frac{1}{2}} + S_{ik} C_{i-1,k}^{j+\frac{1}{2}} = \Phi_{ik}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}), \quad (21)$$

где

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

$$\Phi_{ik}^j = \frac{\sigma}{2\Gamma(2-\alpha)} \left( \sum_{s=0}^{j-1} \gamma_s^{(j)} \frac{C_{ik}^{s+1} - C_{ik}^s}{\tau} - \left( \frac{2}{\tau} \right)^\alpha C_{ik}^j \right) - \frac{d_T \upsilon_{ik}^2}{2h_1} \left( T_{i-1,k}^{j+\frac{1}{2}} - 2T_{ik}^{j+\frac{1}{2}} + T_{i+1,k}^{j+\frac{1}{2}} \right),$$

$$\gamma_s^{(j)} = \tau^{1-\alpha} \left[ \left( j + \frac{1}{2} - s \right)^{1-\alpha} - \left( j - \frac{1}{2} - s \right)^{1-\alpha} \right].$$

Решение системы (25) ищем в виде

$$C_{ik}^{j+\frac{1}{2}} = \alpha_{i+1,k} C_{i+1,k}^{j+\frac{1}{2}} + \beta_{i+1,k}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}), \quad (22)$$

где прогоночные коэффициенты вычисляются по формулам

$$\alpha_{i+1,k} = \frac{A_{ik}}{B_{ik} - S_{ik} \alpha_{ik}}, \quad \beta_{i+1,k}^j = \frac{\alpha_{i+1,k} (S_{ik} \beta_{ik}^j - \Phi_{ik}^j)}{A_{ik}} \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}).$$

Стартовые значения прогоночных коэффициентов определяются с учетом разностного аналога граничного условия при  $\varphi = 0$ :  $C_{0k}^j = 1$ . Отсюда имеем  $\alpha_{1k} = 0$ ,  $\beta_{1k}^j = 1$  ( $k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}$ ). При этом из разностного аналога однородного граничного условия второго рода в точке  $\varphi = \varphi_0$ :  $C_{mk}^{j+\frac{1}{2}} = C_{m+1,k}^{j+\frac{1}{2}}$  ( $k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}$ ) с учетом (22) находим

$$C_{m+1,k}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_{m+1,k}^j}{1 - \alpha_{m+1,k}} \quad (k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}).$$

На целом временном слое из (18) получаем

$$P_{ik} C_{i,k+1}^{j+1} - Q_{ik} C_{ik}^{j+1} + P_{ik} C_{i,k-1}^{j+1} = \Omega_{ik}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}), \quad (23)$$

где

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

$$\Omega_{ik}^j = \frac{\sigma}{\Gamma(2-\alpha)} \left( \sum_{s=0}^j \rho_s^{(j)} \frac{C_{ik}^{s+\frac{1}{2}} - C_{ik}^s}{\tau} - \frac{1}{2^{1-\alpha} \tau^\alpha} C_{ik}^{j+\frac{1}{2}} \right) - \frac{d_T \upsilon_{ik}^2}{h_2^2} (T_{i,k-1}^{j+1} - 2T_{ik}^{j+1} + T_{i,k+1}^{j+1}),$$

$$\rho_s^{(j)} = \tau^{1-\alpha} \left[ (j+1-s)^{1-\alpha} - \left( j + \frac{1}{2} - s \right)^{1-\alpha} \right].$$

Решение системы (23) ищем в виде

$$C_{ik}^{j+1} = \tilde{\alpha}_{i,k+1} C_{i,k+1}^{j+1} + \tilde{\beta}_{i,k+1}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}),$$

где

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

С учетом разностного граничного условия  $C_{i0}^{j+1} = C_{i1}^{j+1}$  ( $i = \overline{1, m}; j = \overline{0, N}$ ) получаем стартовые значения прогоночных коэффициентов

$$\tilde{\alpha}_{i1} = 1, \quad \tilde{\beta}_{i1}^j = 0 \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{0, N}),$$

а с учетом условия  $C_{in}^{j+1} = C_{i,n+1}^{j+1}$  ( $i = \overline{1, m}; j = \overline{0, N}$ ) находим

$$C_{i,n+1}^{j+1} = \frac{\tilde{\beta}_{i,n+1}^j}{1 - \tilde{\alpha}_{i,n+1}} \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{0, N}).$$

Эти соотношения позволяют вычислить значения полей концентраций на целом временном слое.

Для «тепловой задачи» (13), (15), расписывая в (19) разностные операторы и приводя подобные члены, получаем на полупространстве  $t_{j+\frac{1}{2}}$  систему уравнений

$$R_{ik} T_{i+1,k}^{j+\frac{1}{2}} - U_{ik} T_{ik}^{j+\frac{1}{2}} + G_{ik} T_{i-1,k}^{j+\frac{1}{2}} = W_{ik}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}), \quad (24)$$

где

$$R_{ik} = \frac{\upsilon_{ik}^2}{h_1} \left( \frac{\lambda}{h_1} - 0,5\mu \right), \quad G_{ik} = \frac{\upsilon_{ik}^2}{h_1} \left( \frac{\lambda}{h_1} + 0,5\mu \right), \quad U_{ik} = \frac{1}{2^{1-\beta} \tau^\beta \Gamma(2-\beta)} + R_{ik} + G_{ik},$$

$$W_{ik}^j = \frac{1}{2\Gamma(2-\beta)} \left( \sum_{s=0}^{j-1} \tilde{\gamma}_s^{(j)} \frac{T_{ik}^{s+1} - T_{ik}^s}{\tau} - \left( \frac{2}{\tau} \right)^\beta T_{ik}^j \right),$$

$$\tilde{\gamma}_s^{(j)} = \tau^{1-\beta} \left[ \left( j + \frac{1}{2} - s \right)^{1-\beta} - \left( j - \frac{1}{2} - s \right)^{1-\beta} \right].$$

Решение системы (24) ищем в виде

$$T_{ik}^{j+\frac{1}{2}} = \tilde{\alpha}_{i+1,k} T_{i+1,k}^{j+\frac{1}{2}} + \tilde{\beta}_{i+1,k}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}), \quad (25)$$

где прогоночные коэффициенты вычисляются по формулам

$$\tilde{\alpha}_{i+1,k} = \frac{R_{ik}}{U_{ik} - G_{ik}\tilde{\alpha}_{ik}}, \quad \tilde{\beta}_{i+1,k}^j = \frac{\tilde{\alpha}_{i+1,k}}{R_{ik}} (G_{ik}\tilde{\beta}_{ik}^j - W_{ik}^j) \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}).$$

Стартовые значения прогоночных коэффициентов определяются с учетом разностного аналога граничного условия при  $\varphi = 0: T_{0k}^j = 1$ . Отсюда имеем

$$\tilde{\alpha}_{1k} = 0, \quad \tilde{\beta}_{1k}^j = 1 \quad (k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}).$$

При этом из разностного аналога однородного граничного условия второго рода

в точке  $\varphi = \varphi_0: T_{mk}^{j+\frac{1}{2}} = T_{m+1,k}^{j+\frac{1}{2}}$  ( $k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}$ ) с учетом (25) находим

$$T_{m+1,k}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\tilde{\beta}_{m+1,k}^j}{1 - \tilde{\alpha}_{m+1,k}} \quad (k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}).$$

Этим заканчивается решение «тепловой задачи» на полуцелом слое  $t_{j+\frac{1}{2}}$ .

На целом временном слое из (20) получаем

$$M_{ik}T_{i,k+1}^{j+1} - N_{ik}T_{ik}^{j+1} + M_{ik}T_{i,k-1}^{j+1} = F_{ik}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}), \quad (26)$$

где

$$M_{ik} = \frac{\lambda \nu_{ik}^2}{h_2^2}, \quad N_{ik} = \frac{1}{2^{1-\beta} \tau^\beta \Gamma(2-\beta)} + 2M_{ik},$$

$$F_{ik}^j = \frac{1}{\Gamma(2-\beta)} \left( \sum_{s=0}^{j-1} \tilde{\rho}_s^{(j)} \frac{T_{ik}^{s+1} - T_{ik}^s}{\tau} - \frac{1}{2^{1-\beta} \tau^\beta} T_{ik}^{j+\frac{1}{2}} \right),$$

$$\tilde{\rho}_s^{(j)} = \tau^{1-\beta} \left[ (j+1-s)^{1-\beta} - \left( j + \frac{1}{2} - s \right)^{1-\beta} \right].$$

Решение системы (26) ищем в виде

$$T_{ik}^{j+1} = \alpha_{i,k+1}^* T_{i,k+1}^{j+1} + \beta_{i,k+1}^{*j} \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}),$$

где прогоночные коэффициенты вычисляются по формулам

$$\alpha_{i,k+1}^* = \frac{M_{ik}}{N_{ik} - M_{ik} \alpha_{ik}^*}, \quad \beta_{i,k+1}^{*j} = \alpha_{i,k+1}^* \left( \beta_{i,k}^{*j} - \frac{F_{ik}^j}{M_{ik}} \right) \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}).$$

Из граничных условий  $T|_{\psi=0, \psi=1} = \theta$  находим

$$\alpha_{i1}^* = 0, \quad \beta_{i1}^{*j} = \theta, \quad T_{i,n+1}^{j+1} = \theta \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{0, N}),$$

что позволяет вычислить решение на целом временном слое. При этом устойчивость метода прогонки для (21), (23), (24), (26) вытекает из факта диагонального преобладания в матрицах коэффициентов этих систем алгебраических уравнений. Последующий переход в физическую область  $G_z$  осуществляется согласно соотношениям (16). Определяющая часть алгоритма решения задачи состоит в решении (в указанном далее порядке) систем уравнений (24), (26), (21), (23).

### 3. Распараллеливание и результаты тестирования параллельных алгоритмов

Учитывая достаточно высокую вычислительную сложность алгоритма решения, актуальным является его распараллеливание для систем с распределенной памятью. Будем рассматривать двумерную красно-черную схему распределения данных по вычислительной системе, которая показала свою эффективность при распараллеливании алгоритмов решений задач фильтрационно-конвективной диффузии в рамках классической постановки [17].

При распределении данных по этой схеме каждый из  $P$  процессов параллельной программы вычисляет значения прогоночных коэффициентов и искомой функции для  $P$  блоков ячеек сетки размера  $\left( \frac{n}{P}, \frac{m}{P} \right)$ , где  $(n, m)$  — размер сетки, с локальными обменов данными между соседними по рангу процессами после проведения вычислений.

Время работы такого алгоритма можно оценить [17] как

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

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

Отметим, что независимость вычислений по строкам и столбцам сетки в локально-одномерных методах позволяет использовать многопоточное распараллеливание в пределах каждого процесса распределенной программы. Таким образом, можно рассматривать два варианта размещения параллельного алгоритма на вычислительной системе: 1) один процесс занимает одно процессорное ядро; 2) один процесс занимает один узел системы и использует многопоточное распараллеливание вычислений.

Тестирование параллельных алгоритмов проводилось на кластере СКИТ-3 Института кибернетики НАН Украины. В серии экспериментов проверялась эффективность параллельного алгоритма и двух схем его размещения на вычислительной системе. Тестовая задача решалась на сетке размера 300x300 ячеек и замерялось время выполнения вычислений на 50 шагах с использованием четырехъядерных узлов кластера. Полученные результаты приведены на рис. 2, где изображено ускорение  $S$  параллельных алгоритмов в зависимости от количества  $C$  задействованных процессорных ядер (1 — один процесс на одно ядро, 2 — один процесс на один узел кластера).

Использование многопоточного распараллеливания внутри процесса распределенной программы позволяет уменьшить количество и объем обменов данными между процессами при сохранении уровня распараллеливания вычислений. Как видно из полученных данных, это позволяет получить почти двукратный прирост ускорения при задействовании 32-х процессорных ядер на восьми узлах кластера.

Влияние увеличения сложности исполнения вычислений на ускорение параллельных алгоритмов проиллюстрировано на рис. 3 для случая задействования 32-х процессорных ядер на восьми узлах кластера (на рис. 3 изображено ускорение  $S$  параллельных алгоритмов в зависимости от номера  $N$  шага по времени (1 — один процесс на одно ядро, 2 — один процесс на один узел кластера)).

Ускорение тут ожидаемо увеличивается с ростом сложности на шагах по времени.

Анализ использования для выполнения вычислений на распределенных системах (таких, как кластеры) красно-черной блочной схемы распределения данных в комбинации с многопоточным распараллеливанием в пределах каждого процесса распределенной программы показал, что алгоритм, использующий многопоточное распараллеливание, более эффективен из-за уменьшения объемов обменов данными между процессами.

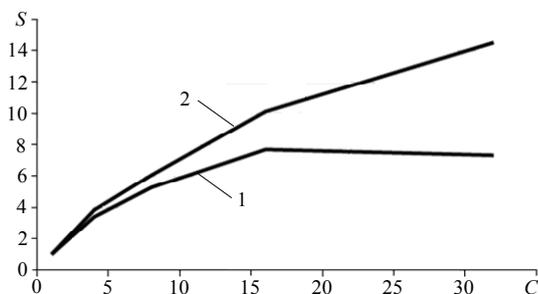


Рис. 2

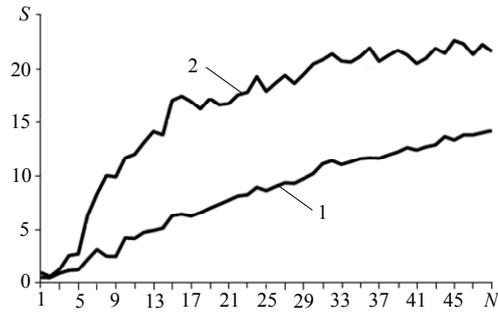


Рис. 3

#### 4. О результатах компьютерного моделирования динамики миграционного процесса

Численное моделирование динамики неизотермического локально-неравновесного во времени процесса миграции растворимых веществ в рамках рассматриваемой неклассической конвективно-диффузионной математической модели выполнено относительно безразмерных переменных, определяемых соотношениями (11) для входных данных из работы [18].

Некоторые из полученных результатов графически изображены на рис. 4, 5. На рис. 4 показана картина кривых концентрации вдоль линии тока  $\psi = 0,5$  в фиксированный момент времени  $t = 0,1$  в зависимости от величины порядка дробной производной  $\beta$  в неизотермическом случае (1 —  $\beta = 1, \alpha = 0,85$ ; 2 —  $\beta = 0,9, \alpha = 0,85$ ; 3 —  $\beta = 0,85, \alpha = 0,85$ ; 4 —  $\beta = \alpha = 1, d_T = 0,0005$ ).

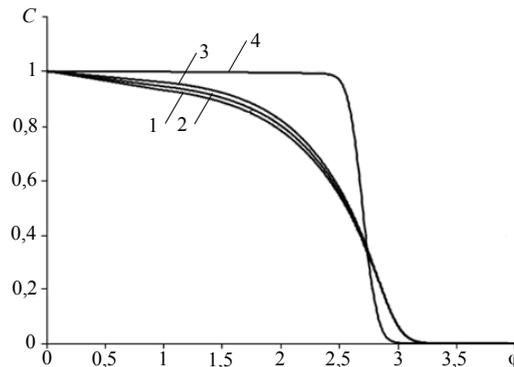


Рис. 4

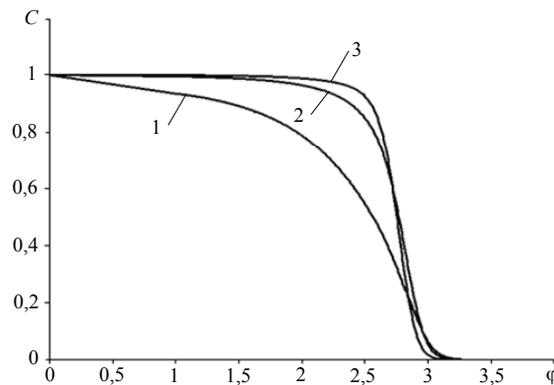


Рис. 5

На рис. 5 представлены кривые концентрации вдоль той же линии тока и в тот же фиксированный момент времени, но в зависимости от величины поряд-

ка дробной производной  $\alpha$  в «солевой задаче» в неизотермическом случае (1 —  $\alpha = 0,85, \beta = 0,95$ ; 2 —  $\alpha = 0,9, \beta = 0,95$ ; 3 —  $\alpha = 0,95, \beta = 0,95$ ;  $d_T = 0,0005$ ).

Результаты численных экспериментов позволяют, в частности, сделать вывод, что дробно-дифференциальная динамика неизотермических процессов фильтрационно-конвективной диффузии растворимых веществ в рамках рассматриваемой модели преимущественно не столь интенсивна, как соответствующая динамика указанных неизотермических процессов, моделируемая в рамках классических математических моделей, основанных на законах Фика и Фурье.

### Заключение

В рамках математической модели фильтрационно-конвективной диффузии растворимых веществ в водонасыщенных пористых средах со сложной внутренней структурой, в условиях неизотермичности и временной нелокальности, поставлена и численно решена задача моделирования дробно-дифференциальной динамики процесса миграции растворимых веществ при плоско-вертикальной установившейся фильтрации грунтовых вод в области со свободной границей согласно фильтрационной схеме, описывающей миграцию загрязнений из рек, каналов или поверхностных накопителей промышленных стоков.

Разработана методика получения приближенного решения двумерной краевой задачи конвективной диффузии и теплопереноса в дробно-дифференциальной постановке; с учетом достаточно высокой вычислительной сложности алгоритма решения задачи затронуты вопросы его распараллеливания для систем с распределенной памятью.

Приведены результаты тестирования эффективности параллельных алгоритмов, а также результаты компьютерного моделирования динамики изучаемого миграционного процесса.

*В.О. Богаєнко, В.М. Булавацький, Ю.Г. Кривонос*

### МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДРОБОВО-ДИФЕРЕНЦІЙНОЇ ДИНАМІКИ ПРОЦЕСУ ФІЛЬТРАЦІЙНО-КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ РОЗЧИННИХ РЕЧОВИН ЗА НЕІЗОТЕРМІЧНИХ УМОВ

Виконано математичне моделювання дробово-диференційної динаміки неизотермічного процесу конвективної дифузії розчинних речовин при двовимірній ustalеній плоско-вертикальній фільтрації з вільною поверхнею.

*V.A. Bogaenko, V.M. Bulavatsky, Yu.G. Kryvonos*

### MATHEMATICAL MODELING OF FRACTIONAL-DIFFERENTIAL DYNAMICS OF PROCESS OF FILTRATION-CONVECTIVE DIFFUSION OF SOLUBLE SUBSTANCES IN NONISOTHERMAL CONDITIONS

Mathematical modeling of fractional-differential dynamics of nonisothermal process of convective diffusion of soluble substances at 2D stationary plainly-vertical filtration with a free surface is performed.

1. *Мистецкий Г.Е.* Гидростроительство. Автоматизация расчета массопереноса в почвогрунтах. — Киев : Будівельник, 1985. — 136 с.
2. *Ляшко И.И., Демченко Л.И., Мистецкий Г.Е.* Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах. — Киев : Наук. думка, 1991. — 264 с.
3. *Булавацкий В.М., Кривонос Ю.Г., Скопецкий В.В.* Некласичні математичні моделі процесів тепло- та масопереносу. — Київ : Наук. думка, 2005. — 283 с.
4. *Хасанов М.М., Булгакова Г.Т.* Нелинейные и неравновесные эффекты в реологически сложных средах. — Москва–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2003. — 288 с.
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. *Bulavatsky V.M., Bogaenko V.A.* Mathematical modeling of the fractional differential dynamics of the relaxation process of convective diffusion under conditions of planned filtration // Cybernetics and Systems Analysis. — 2015. — **51**, № 6. — P. 886–895.
8. *Полубаринова-Кочина П.Я.* Теория движения грунтовых вод. — М. : Наука, 1977. — 664 с.
9. *Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И.* Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. — Минск : Наука и техника, 1987. — 688 с.
10. *Podlubny I.* Fractional differential equations. — New York : Academic Press, 1999. — 341 p.
11. *Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J.* Theory and applications of fractional differential equations. — Amsterdam : Elsevier, 2006. — 523 p.
12. *Учайкин В.В.* Метод дробных производных. — Ульяновск : Артишок, 2008. — 512 с.
13. *Povstenko Yu.* Linear fractional diffusion-wave equation for scientists and engineers. — Switzerland : Springer Int. Publ., 2015. — 460 p.
14. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. — М. : Наука, 1977. — 656 с.
15. *Таукенова Ф.И., Шхануков–Лафишев М.Х.* Разностные методы решения краевых задач для дифференциальных уравнений дробного порядка // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2006, — **46**, № 10. — С. 1871–1881.
16. *Арсенин В.Я.* Математическая физика. Основные уравнения и специальные функции. — М. : Наука, 1966. — 386 с.
17. *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.
18. *Власюк А.П., Остапчук О.П.* Математичне моделювання переносу солевих розчинів при фільтрації підземних вод у ґрунтових масивах. — Рівне : НУВГП, 2015. — 214 с.

Получено 22.11.2016