

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
НА ОСНОВЕ НЕЛОКАЛЬНОЙ МОДЕЛИ
ДИНАМИКИ КОНВЕКТИВНОЙ
ДИФФУЗИИ РАСТВОРИМЫХ ВЕЩЕСТВ
В ПОДЗЕМНОМ ФИЛЬТРАЦИОННОМ ПОТОКЕ
В УСЛОВИЯХ МАССООБМЕНА

Ключевые слова: динамика конвективно-диффузионных процессов, установившаяся плоско-вертикальная фильтрация грунтовых вод, математическое и компьютерное моделирование, дробно-дифференциальные математические модели, производная дробного порядка Капуто–Катугампола, нелинейные краевые задачи, конечно-разностные решения.

Введение

Настоящая работа посвящена задаче математического и компьютерного моделирования динамики локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при плосковертикальной установившейся фильтрации со свободной поверхностью из рек, каналов или накопителей промстоков с учетом влияния процессов массообмена. Подобные задачи часто возникают, например, в вопросах рассоления и промывки почв, опреснения грунтовых вод и их очистки от загрязняющих веществ [1–5]. При этом весьма актуальной является проблема повышения степени адекватности классических моделей процессов переноса в системах со сложной пространственно-временной структурой для которых характерны эффекты памяти, пространственной нелокальности и самоорганизации [6, 7].

Эффективный подход к описанию процессов переноса в сложных системах, для которых важен учет нелокальных пространственно-временных свойств, связан с использованием аппарата интегро-дифференцирования дробного порядка, в рамках которого удастся получить ряд новых важных результатов [8–14]. При этом в работе [15] впервые выполнено математическое моделирование дробно-дифференциальной динамики локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при двумерной установившейся плоско-вертикальной фильтрации со свободной поверхностью, где в качестве соответствующей фильтрационной схемы рассматривается схема распространения загрязнений рек, каналов или хранилищ промстоков [2]. В отличие от [15] в настоящей работе соответствующая математическая модель процесса переноса базируется не на традиционном понятии дробной производной в смысле Капуто [11, 12], а на понятии обобщенной производной Капуто (производной Капуто–Катугампола), как производной от функции по другой функции, что позволяет в некотором смысле управлять процессом моделирования [16]. Отличительной особенностью данной публикации от [15] является также то, что в настоящей работе неравновесный процесс конвекции–диффузии в пористой среде рассматривается в условиях наличия массообмена с вмещающими породами.

Математическая модель миграционного процесса и постановка краевой задачи

Рассмотрим фильтрационную схему, соответствующую задаче конвективной диффузии загрязнений из рек, каналов или поверхностных накопителей промышленных стоков ([15], рис. 1, а). Будем изучать процесс фильтрации в потенциальном поле скоростей

$$\vec{v} = (v_x, v_y) = \nabla\varphi, \quad \operatorname{div} \vec{v} = 0,$$

где $\varphi = -\bar{k}h$ — потенциал скорости фильтрации \vec{v} , \bar{k} — усредненный коэффициент фильтрации, h — пьезометрический напор. Для фильтрационной схемы соответствующей задаче конвективной диффузии загрязнений из рек, каналов или поверхностных накопителей промышленных стоков известна область комплексного потенциала течения $\omega = \varphi + i\psi$ (ψ — функция тока), а также решение соответствующей задачи фильтрации, т.е. известна [2] характеристическая функция течения $z = f(\omega)$. При этом область комплексного потенциала течения G_ω имеет вид горизонтальной полуполосы ([15], рис. 1, б) и решение соответствующей задачи фильтрации записывается в виде [2]

$$x = He^{\frac{\pi\varphi}{2Q}} \sin\left(\frac{\pi\psi}{2Q}\right) + \frac{\psi}{k}, \quad y = He^{\frac{\pi\varphi}{2Q}} \cos\left(\frac{\pi\psi}{2Q}\right) + \frac{\varphi}{k}, \quad (1)$$

где $Q = \bar{k}\left(\frac{L}{2} - H\right)$ — фильтрационный расход, L, H — геометрические параметры водоема.

Как известно, классическая математическая модель конвективной диффузии растворимых веществ с учетом массообмена в двумерном фильтрационном поле скоростей базируется на уравнении вида [1, 2, 17, 18]

$$\sigma \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial t} = D\Delta_{xy} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y}, \quad (2)$$

где C — функция концентрации растворенных веществ в жидкой фазе, N — концентрация этих веществ в твердой фазе, σ — пористость среды, $v_x = v_x(x, y)$, $v_y = v_y(x, y)$ — составляющие вектора скорости фильтрации, $D = \text{const}$ — коэффициент конвективной диффузии [1, 2], Δ_{xy} — оператор Лапласа по переменным x, y .

Для корректности математической модели к (2) необходимо добавить уравнение кинетики массообмена, которое запишем в виде уравнения неравновесной обратимой сорбции растворенных веществ при изотерме Генри [1, 2]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta_*(\sigma C - \alpha_* N),$$

где $\alpha_* = 1/\Gamma$, Γ — коэффициент Генри [17], β_* — константа скорости обмена, C и N — концентрации в жидкой и твердой фазах соответственно.

При моделировании дробно-дифференциальной динамики миграционного процесса с учетом аномальных эффектов и массообмена с вмещающими породами соответствующая математическая модель должна включать нелокальный

оператор временной производной, в частности оператор дробной производной Капуто–Катугампола от функции p по функции $g(t) = t^\rho$ ($\rho > 0$), определяемой следующим соотношением [19, 20]:

$$D_{t, t^\rho}^{(\beta)} p(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^t \frac{p'(\tau) d\tau}{(t^\rho - \tau^\rho)^\beta},$$

где β ($0 < \beta < 1$) — порядок производной, $\Gamma(z)$ — гамма-функция Эйлера.

Окончательно получаем следующую систему уравнений для концентраций C и N :

$$\sigma D_{t, t^\rho}^{(\beta)} C + \frac{\partial N}{\partial t} = D \Delta_{xy} C - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta_* (\sigma C - \alpha_* N), \quad (4)$$

где сохранены введенные выше обозначения.

Задавая на входе фильтрационного потока концентрацию растворимых веществ C_0 и начальную концентрацию N_0 этих веществ в твердой фазе, краевые условия для системы (3), (4) запишем в виде

$$C|_{AC} = C_0, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial n} \right|_{AB, CB} = 0, \quad C|_{t=0} = 0, \quad N|_{t=0} = N_0, \quad (5)$$

где n — внешняя нормаль к соответствующей кривой, AB — ось симметрии потока, CB — линия тока ([15], рис. 1, а).

Поскольку область фильтрации G_z является областью с частично неизвестной границей, перейдем к новым переменным (φ, ψ) — точкам геометрически более простой области комплексного потенциала течения $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < +\infty, 0 < \psi < Q\}$ ([15], рис. 1, б). Тогда краевая задача (3)–(5) для исследования динамики рассматриваемого миграционного процесса математически может быть сформулирована для области комплексного потенциала течения в виде

$$\sigma D_{t, t^\rho}^{(\beta)} C(\varphi, \psi, t) + \frac{\partial N(\varphi, \psi, t)}{\partial t} = v^2(\varphi, \psi) \left[D \Delta_{\varphi\psi} C(\varphi, \psi, t) - \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right], \quad (6)$$

$$\frac{\partial N(\varphi, \psi, t)}{\partial t} = \beta_* (\sigma C - \alpha_* N), \quad ((\varphi, \psi, t) \in G_\omega \times (0, +\infty)), \quad (7)$$

$$C|_{\varphi=0} = C_0, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial \psi} \right|_{\psi=0, \psi=Q} = 0, \quad C|_{t=0} = 0, \quad N|_{t=0} = N_0, \quad (8)$$

где $v^2(\varphi, \psi)$ определяется явным соотношением, приведенным в [15].

При значительной минерализации порового раствора коэффициент фильтрации может существенно меняться в зависимости от изменения концентрации растворенных в воде солей. Количественные оценки влияния степени минерализации на проницаемость грунтов приведены, например, в [21]. В [22] изложены результаты экспериментальных исследований фильтрации солевых

растворов в песчаных грунтах и суглинках. Их математическая обработка приводит к следующей зависимости коэффициента фильтрации среды k от концентрации C солевого раствора (для суглинков) [22]:

$$k(C) = a_0 + a_1 C + a_2 C^2 + a_3 C^3 + a_4 C^4 + a_5 C^5, \quad (9)$$

где $a_0 = 1,0054 \cdot 10^{-3}$, $a_1 = 1,0563 \cdot 10^{-2}$, $a_2 = -7,4311 \cdot 10^{-2}$, $a_3 = 1,7051 \cdot 10^{-1}$, $a_4 = -1,6703 \cdot 10^{-1}$, $a_5 = 5,9404 \cdot 10^{-2}$, $C \in [0, 1]$ — безразмерная величина концентрации.

Тогда зависимость коэффициента конвективной диффузии от концентрации C растворимых веществ будет иметь вид [22]

$$D = D(v, C) = D_m + \lambda \frac{k(C)}{\bar{k}} |\bar{v}(x, y)|, \quad (10)$$

где D_m — коэффициент молекулярной диффузии, λ — параметр гидродинамической дисперсии, $k(C)$ — коэффициент фильтрации пористой среды, как функция концентрации C , определяемый соотношением (9), \bar{k} — усредненный коэффициент фильтрации.

Учет аномальных эффектов при математическом описании дробно-дифференциальной динамики процесса конвективной диффузии растворимых веществ в поле фильтрационных скоростей, а также учет зависимости параметров диффузии от концентрации растворителя и наличия массообмена между жидкой и твердой фазами грунтовой среды приводит, в отличие от (6), (7), к следующей нелинейной системе уравнений:

$$\sigma D_{t, t^\rho}^{(\beta)} C + \frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(v, C) \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D(v, C) \frac{\partial C}{\partial y} \right) - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta_* (\sigma C - \alpha_* N), \quad (12)$$

где $D_{t, t^\rho}^{(\beta)} C$ — производная Капуто–Катугампола по переменной t порядка β ($0 < \beta < 1$) от функции C по функции t^ρ ($\rho > 0$). Что касается постановки соответствующей краевой задачи для уравнения (11), необходимо отметить, что нужные для постановки задачи начальные и граничные условия в ряде случаев могут быть взяты в виде (8).

Поскольку область фильтрации G_z является областью с частично неизвестной границей, то эффективный способ решения задачи основывается на переходе к новым переменным (φ, ψ) — точкам геометрически более простой области комплексного потенциала течения $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < +\infty, 0 < \psi < Q\}$ ([15], рис. 1, б). Тогда краевая задача (11), (12), (8) для исследования аномальной динамики рассматриваемого миграционного процесса математически может быть сформулирована для области комплексного потенциала течения в виде

$$\sigma D_{t, t^\rho}^{(\beta)} C(\varphi, \psi, t) + \frac{\partial N(\varphi, \psi, t)}{\partial t} = v^2(\varphi, \psi) \times$$

$$\times \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} \left(D(\varphi, \psi, C) \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(D(\varphi, \psi, C) \frac{\partial C}{\partial \psi} \right) - \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right], \quad (13)$$

$$\frac{\partial N(\varphi, \psi, t)}{\partial t} = \beta_* (\sigma C - \alpha_* N), \quad (14)$$

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

$$C|_{\varphi=0} = C_0, \quad \frac{\partial C}{\partial \psi} \Big|_{\psi=0, \psi=Q} = 0, \quad C|_{t=0} = 0, \quad N|_{t=0} = N_0, \quad (15)$$

где $v^2(\varphi, \psi)$ определяется явным соотношением, приведенным в [15], а коэффициент диффузии D определяется согласно (10).

Конечно-разностный метод получения решения краевой задачи

Ниже кратко изложены основные положения конечно-разностного метода получения решения рассматриваемой краевой задачи (13)–(15).

Введем в рассмотрение сеточную область

$$\omega_{h\tau} = \{(\varphi_i, \psi_k, t_j) : \varphi_i = ih_1 \ (i = \overline{0, m+1}), \\ \psi_k = h_2(k-0,5) \ (k = \overline{0, n+1}), \ t_j = j\tau \ (j = \overline{0, J})\},$$

где h_1, h_2, τ — соответственно шаги сетки по геометрическим переменным и времени и ограничим область комплексного потенциала течения справа некоторой прямой $\varphi = \varphi_0$ ($\varphi_0 \gg 1$), приводя ее к прямоугольному виду. Поставим в соответствие рассматриваемой краевой задаче следующий линейризованный вариант локально-одномерной [23] разностной схемы А.А. Самарского:

$$\frac{1}{2}(\sigma \Delta_t^{(\beta)} \bar{C} + N_t) = v^2 \left((\tilde{D} \bar{C}_{\bar{\varphi}})_{\varphi} - \bar{C}_{\frac{\varphi}{\varphi_0}} \right), \quad (16)$$

$$\frac{1}{2}(\sigma \Delta_t^{(\beta)} \hat{C} + \bar{N}_t) = v^2 (\tilde{\tilde{D}} \hat{C}_{\bar{\psi}})_{\psi}, \quad (17)$$

$$N_t = \beta_* (\sigma C - \alpha_* \bar{N}), \quad (18)$$

$$\bar{N}_t = \beta_* (\sigma \bar{C} - \alpha_* \hat{N}), \quad (19)$$

где сеточные функции $\tilde{D}, \tilde{\tilde{D}}$ вычисляются по формулам [23]

$$\tilde{D}_{ik} = 0,5(D_{i-1,k} + D_{ik}), \quad \tilde{\tilde{D}}_{ik} = 0,5(D_{i,k-1} + D_{ik}).$$

При этом разностные аналоги обобщенного оператора дробного дифференцирования в первом приближении определим такими соотношениями:

$$\Delta_t^{(\beta)} \bar{C} = \frac{1}{\tau} \left(2b_j (C^{j+1/2} - C^j) + \sum_{s=0}^{j-1} \bar{b}_s^{(j)} (C^{s+1} - C^s) \right), \quad (20)$$

$$\Delta_t^{(\beta)} \hat{C} = \frac{2}{\tau} \sum_{s=0}^j \left[\bar{\bar{b}}_s^{(j)} C^{s+1} + (\bar{q}_s^{(j)} - \bar{\bar{b}}_s^{(j)}) C^{s+1/2} - \bar{q}_s^{(j)} C^s \right]. \quad (21)$$

Здесь обозначено

$$b_j = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_{t_j}^{t_{j+1/2}} \frac{d\tau}{(g(t_{j+1})-g(\tau))^\beta}, \bar{b}_s^{(j)} = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_{t_s}^{t_{s+1}} \frac{d\tau}{(g(t_{j+1/2})-g(\tau))^\beta},$$

$$\bar{q}_s^{(j)} = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_{t_s}^{t_{s+1/2}} \frac{d\tau}{(g(t_{j+1})-g(\tau))^\beta}, \bar{\bar{b}}_s^{(j)} = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_{t_{s+1/2}}^{t_{s+1}} \frac{d\tau}{(g(t_{j+1})-g(\tau))^\beta}, g(t) = t^\rho.$$

Расписывая в (16), (18) разностные операторы с учетом (20), (21) и приводя подобные члены, получаем на полуцелом слое $t_{j+1/2}$ следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$A_{ik}^j C_{i+1,k}^{j+\frac{1}{2}} - B_{ik}^j C_{ik}^{j+\frac{1}{2}} + S_{ik}^j C_{i-1,k}^{j+\frac{1}{2}} = \Phi_{ik}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, J}), \quad (22)$$

где

$$A_{ik}^j = \frac{\upsilon_{ik}^2}{h_1} \left(\frac{\tilde{D}_{i+1,k}^j}{h_1} - 0,5 \right), S_{ik}^j = \frac{\upsilon_{ik}^2}{h_1} \left(\frac{\tilde{D}_{ik}^j}{h_1} + 0,5 \right), B_{ik}^j = \frac{\sigma}{\tau} b_j + A_{ik}^j + S_{ik}^j,$$

$$\tilde{D}_{ik}^j = 0,5 (D_{i-1,k}^j + D_{ik}^j), D_{ik}^j = D_m + \lambda \frac{k(C_{ik}^j)}{\bar{k}} |\bar{\upsilon}_{ik}|,$$

$$\Phi_{ik}^j = \frac{\sigma}{\tau} \left(\frac{1}{2} \sum_{s=0}^{j-1} \bar{b}_s^{(j)} (C_{ik}^{s+1} - C_{ik}^s) - b_j C_{ik}^j \right) + \frac{1}{\tau} \left(N_{ik}^{j+\frac{1}{2}} - N_{ik}^j \right),$$

$$N_{ik}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2 + \tau \alpha_* \beta_*} (2N_{ik}^j + \tau \sigma \beta_* C_{ik}^j).$$

Аналогично на целом временном слое из (17), (19) получаем систему

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

где введены обозначения

$$P_{ik}^j = \frac{\upsilon_{ik}^2 \tilde{D}_{i,k+1}^j}{h_2^2}, R_{ik}^j = \frac{\upsilon_{ik}^2 \tilde{D}_{ik}^j}{h_2^2}, Q_{ik}^j = \frac{\sigma \bar{b}_j^{(j)}}{\tau} + P_{ik}^j + R_{ik}^j,$$

$$\Omega_{ik}^j = \frac{\sigma}{\tau} \left(\sum_{s=0}^j \bar{q}_s^{(j)} \left(C_{ik}^{s+\frac{1}{2}} - C_{ik}^s \right) - \bar{b}_j^{(j)} C_{ik}^{j+\frac{1}{2}} + \sum_{s=0}^{j-1} \bar{b}_s^{(j)} \left(C_{ik}^{s+1} - C_{ik}^{s+\frac{1}{2}} \right) \right) +$$

$$+ \frac{1}{\tau} \left(N_{ik}^{j+1} - N_{ik}^{j+\frac{1}{2}} \right), N_{ik}^{j+1} = \frac{1}{2 + \tau \alpha_* \beta_*} \left(2N_{ik}^{j+\frac{1}{2}} + \tau \sigma \beta_* C_{ik}^{j+\frac{1}{2}} \right).$$

Запишем решения систем уравнений (22), (23) с трехдиагональными матрицами согласно методу прогонки [23]:

$$C_{ik}^{j+\frac{1}{2}} = \alpha_{i+1,k} C_{i+1,k}^{j+\frac{1}{2}} + \beta_{i+1,k}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, J}), \quad (24)$$

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

где прогоночные коэффициенты вычисляются по формулам:

$$\alpha_{i+1,k}^j = \frac{A_{ik}^j}{B_{ik}^j - S_{ik}^j \alpha_{ik}^j}, \quad \beta_{i+1,k}^j = \frac{\alpha_{i+1,k}^j}{A_{ik}^j} (S_{ik}^j \beta_{ik}^j - \Phi_{ik}^j), \quad (26)$$

$$\tilde{\alpha}_{i,k+1}^j = \frac{P_{ik}^j}{Q_{ik}^j - R_{ik}^j \tilde{\alpha}_{ik}^j}, \quad \tilde{\beta}_{i,k+1}^j = \frac{\tilde{\alpha}_{i,k+1}^j}{P_{ik}^j} (R_{ik}^j \tilde{\beta}_{ik}^j - \Omega_{ik}^j) \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, J}), \quad (27)$$

$$\alpha_{1k}^j = 0, \quad \beta_{1k}^j = C_0 \quad (k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}), \quad \tilde{\alpha}_{i1}^j = 1, \quad \tilde{\beta}_{i1}^j = 0 \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{0, J}), \quad (28)$$

$$C_{m+1,k}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_{m+1,k}^j}{1 - \alpha_{m+1,k}^j} \quad (k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}), \quad C_{i,n+1}^{j+1} = \frac{\tilde{\beta}_{i,n+1}^j}{1 - \tilde{\alpha}_{i,n+1}^j} \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{0, J}). \quad (29)$$

Соотношения (24)–(29) позволяют вычислить решение на целом временном слое. При этом устойчивость метода прогонки для (22), (23) вытекает из факта диагонального преобладания в матрицах коэффициентов этих систем линейных алгебраических уравнений. Окончательное решение задачи получаем после перехода в физическую область G_z , осуществляемого согласно соотношениям (1).

Результаты численных экспериментов и выводы

Численное моделирование особенностей дробно-дифференциальной динамики изучаемого процесса миграции растворимых веществ в рамках описанной выше неклассической конвективно-диффузионной математической модели выполнено для входных данных из работы [21]. Некоторые из полученных при этом результатов в безразмерных переменных $t' = t/t_0$, $\varphi' = \varphi/Q$, $\psi' = \psi/Q$, $C' = C/C_0$ (t_0 — характерный временной параметр, численное значение которого в расчетах принималось равным $t_0 = 5$ сут) графически изображены на рис. 1–4 (без учета массообмена) и рис. 5–8 (с учетом массообмена). Знак «штрих» над безразмерными величинами опущен.

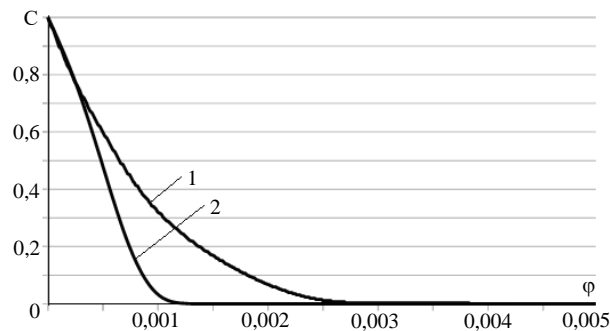


Рис. 1

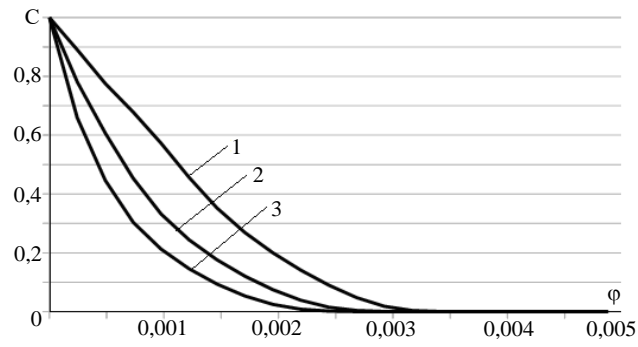


Рис. 2

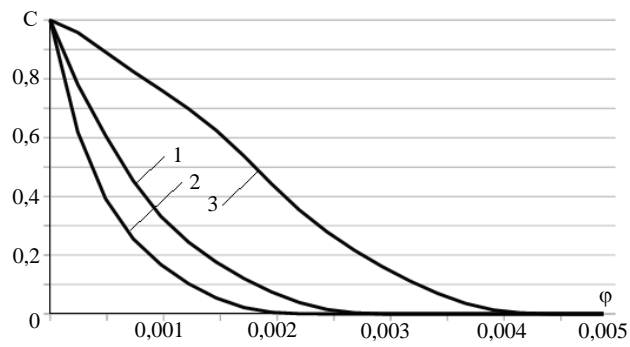


Рис. 3

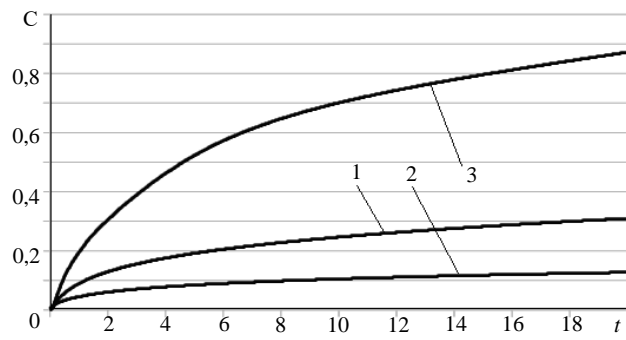


Рис. 4

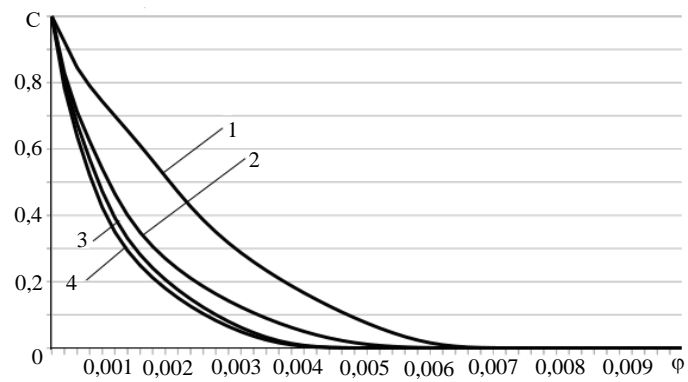


Рис. 5

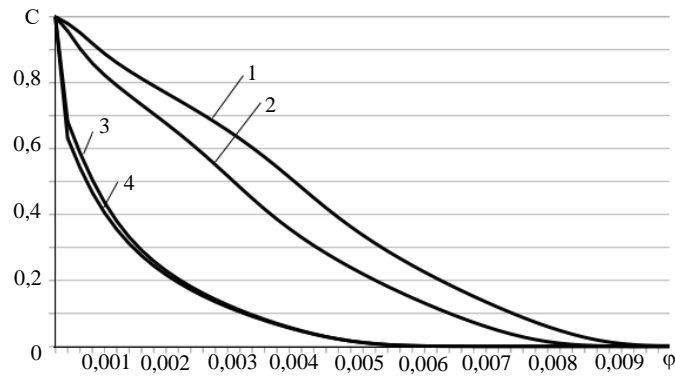


Рис. 6

На рис.1 показано распределение полей концентраций вдоль линии тока $\psi = 0,5$ при $\beta = 0,8$ в фиксированный момент времени $t = 10$ при учете нелинейной зависимости $k = k(C)$ согласно (9) (кривая 1) в сравнении со случаем усредненного ($k = \text{const}$) значения коэффициента фильтрации (кривая 2 соответствует величине $k = 0,00084$) для модели с классической производной Капуто–Герасимова, соответствующей $\rho = 1$.

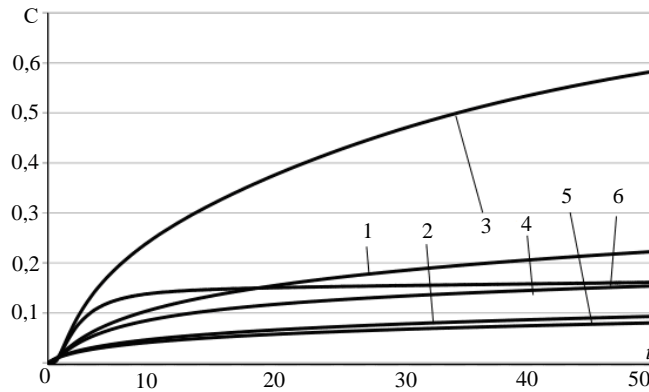


Рис. 7

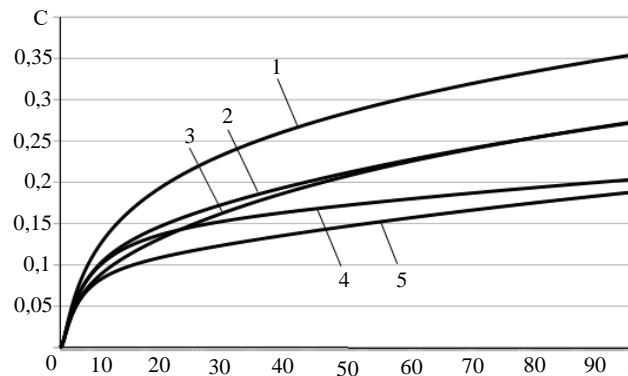


Рис. 8

Распределение полей концентраций для этой же модели с классической дробной производной в зависимости от величины порядка производной β при учете зависимости $k = k(C)$ представлено на рис. 2 ($1 - \beta = 1,0$; $2 - \beta = 0,8$; $3 - \beta =$

$= 0,6; t = 10$). На рис. 3 приведены (соответствующие моменту времени $t = 10$) графики полей концентраций при $k = k(C)$ и фиксированном значении порядка дробной производной $\beta = 0,8$ в зависимости от показателя ρ ($1 - \rho = 1, 2 - \rho = \frac{1}{2}, 3 - \rho = 2$).

На рис. 4 изображены соответствующие графики концентраций в фиксированной точке $(1,25; 0,5)$ области комплексного потенциала течения при $k = k(C)$ в зависимости от безразмерной временной переменной t при $1 - \rho = 1, 2 - \rho = \frac{1}{2}, 3 - \rho = 2$.

На рис. 5 показано изменение концентрации вдоль линии тока $\psi = 0,5$ при $t = 50$ для классической дробной производной Капуто при $1,3 - \beta = 1,0; 2,4 - \beta = 0,9$ без учета массообмена (кривые 1, 2) и с учетом массообмена (кривые 3, 4) при $\alpha_* = 0,1; \beta_* = 0,1$.

На рис. 6 представлены кривые изменения концентрации вдоль линии тока $\psi = 0,5$ в момент времени $t = 50$ для модели с обобщенной дробной производной при $1,3 - \beta = 0,9; 2,4 - \beta = 0,8$ и $\rho = 2$ без учета массообмена (кривые 1, 2) и с его учетом (кривые 3, 4) при $\alpha_* = 0,1; \beta_* = 0,1$.

На рис. 7 изображены кривые динамики концентраций во времени в точке $(0,0025; 0,5)$ при $\beta = 0,8$ и $1,4 - \rho = 1; 2,5 - \rho = \frac{1}{2}; 3,6 - \rho = 2$ без учета массообмена (кривые 1, 2, 3) и с его учетом (кривые 4, 5, 6) при $\alpha_* = 0,1; \beta_* = 0,1$.

На рис. 8 показана динамика концентраций во времени в фиксированной точке $(0,0025; 0,5)$ области комплексного потенциала при $\beta = 0,9; \rho = 2$ для различных значений параметров массообмена ($1 - \alpha_* = 0, \beta_* = 0; 2 - \alpha_* = 0,1, \beta_* = 0,1; 3 - \alpha_* = 0,1, \beta_* = 0,2; 4 - \alpha_* = 0,4, \beta_* = 0,1; 5 - \alpha_* = 0,4, \beta_* = 0,2$).

Анализ результатов численных экспериментов позволяет сделать следующие выводы об особенностях динамики полей концентраций растворимых веществ при описании миграционного процесса на основе рассматриваемой математической модели с обобщенной производной Капуто.

1. В случае моделирования дробно-дифференциальной динамики миграционного процесса в рамках модели с классической производной Капуто–Герасимова ($\rho = 1$) фронт концентрации растворимых веществ при учете функциональной зависимости $k = k(C)$ существенно опережает фронт концентрации, рассчитанный при $k = \text{const}$ (рис. 1).

2. В предположении наличия нелинейной зависимости $k = k(C)$ с уменьшением значений порядка дробной производной β происходит запаздывание развития фронта концентрации в жидкой фазе (рис. 2).

3. Величина показателя степени ρ существенным образом влияет на результаты моделирования процесса конвективной диффузии в рамках изучаемой нелинейной модели, давая как субдиффузионную (кривые 2 на рис. 3, 4), так и супердиффузионную (кривые 3 на рис. 3, 4) картины распределения полей концентраций.

4. Учет явления массообмена при моделировании распространения загрязнений из водоемов в грунтовой среде приводит к запаздыванию в развитии фронта концентраций в жидкой фазе (рис. 5–8).

5. Степень влияния массообмена на динамику миграционного процесса зависит от величины порядка β дробной производной следующим образом. Умень-

шение величины запаздывания формирования концентрационных полей наблюдается в случае уменьшения порядка производной и наоборот (рис. 5). Характер данной закономерности не нарушается в зависимости от изменения величины показателя степени ρ (рис. 6).

6. В случае фиксированного показателя β влияние массообмена на динамику полей концентраций во времени возрастает при увеличении показателя ρ (рис. 7).

7. Запаздывание в развитии фронта концентраций при наличии массообмена существенно зависит от параметров массообмена α_* , β_* . Влияние массообмена возрастает с увеличением значения α_* (рис. 8). Увеличение значения β_* при фиксированном α_* дополнительно замедляет процесс формирования концентрационных полей, особенно на начальных его этапах (рис. 8).

Заключение

Разработанная конвективно-диффузионная математическая модель дробно-дифференциальной динамики растворимых загрязняющих веществ в подземном фильтрационном потоке позволяет в процессе моделирования изучаемого явления учитывать влияние как эффектов памяти среды, так и влияние процессов межфазного массообмена на динамику аномальных процессов переноса в насыщенных грунтовых массивах. Игнорирование как аномальных свойств процессов миграции, так и влияние межфазного массообмена в рамках моделирования конвективно-диффузионной динамики растворимых веществ при решении задач разработки инженерных решений может привести к ошибкам в прогнозах степени безопасности указанных объектов и к отрицательным последствиям для экологического состояния окружающей среды.

В.А. Богаєнко, В.М. Булавацький

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НА ОСНОВІ НЕЛОКАЛЬНОЇ МОДЕЛІ ДИНАМІКИ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ РОЗЧИННИХ РЕЧОВИН У ПІДЗЕМНОМУ ФІЛЬТРАЦІЙНОМУ ПОТОЦІ В УМОВАХ МАСООБМІНУ

Розглянуто задачу моделювання динаміки локально-нерівноважного в часі процесу конвективної дифузії розчинних речовин при плоско-вертикальній сталій фільтрації ґрунтових вод з вільною поверхнею з урахуванням наявності міжфазного масообміну. Актуальність розв'язання таких задач обумовлена, зокрема, питаннями розробки заходів з промивки ґрунтів, а також з опріснення та очищення ґрунтових вод від забруднюючих речовин. Для математичного моделювання відповідних процесів переносу в середовищах, що мають властивості часової нелокальності, в роботі застосовується апарат інтегро-диференціювання дробового порядку. Розроблено відповідну нелінійну дробово-диференціальну математичну модель міграційного процесу із залученням узагальненої похідної дробового порядку Капуто–Катугампола від функції по іншій функції, що дозволяє в деякому сенсі управляти процесом моделювання. В рамках цієї моделі, нерівноважний процес конвекції–дифузії в пористому середовищі розглядається за умов наявності масообміну. Для запропонованої математичної моделі виконано постановку відповідної крайової задачі та розроблено методику її чисельного розв'язання. Дана методика базується на попередньому переході за допомогою методу конформ-

них відображень з фізичної області течії до області комплексного потенціалу, яка є канонічною. Алгоритм наближеного розв'язання даної крайової задачі в області комплексного потенціалу базується на лінеаризованому варіанті локально-одновимірної різницевої схеми А.А. Самарського. Наведено результати комп'ютерного моделювання, які демонструють, що величина показника ступеня у похідній Капуто–Катугампола істотно впливає на результати моделювання, даючи як субдифузійну, так і супердифузійну картини розподілу полів концентрацій. Обчислювальні експерименти також показують, що врахування явища масообміну при моделюванні поширення забруднень з водойм в ґрунтовому середовищі призводить до затримки у розвитку фронту концентрацій в рідкій фазі. Сформульовано висновки щодо характеру впливу параметрів математичної моделі на результуючу картину формування концентраційних полів.

Ключові слова: динаміка конвективно-дифузійних процесів, усталена плоско-вертикальна фільтрація ґрунтових вод, математичне і комп'ютерне моделювання, дробово-диференціальні математичні моделі, похідна дробового порядку Капуто–Катугампола, нелінійні крайові задачі, скінченно-різницеві розв'язки.

V.A. Bohaienko, V.M. Bulavatsky

COMPUTER SIMULATION BASED ON THE NON-LOCAL MODEL OF THE DYNAMICS OF CONVECTIVE DIFFUSION OF SOLUBLE SUBSTANCES IN THE UNDERGROUND FILTRATION FLOW IN THE CONDITIONS OF MASS EXCHANGE

The paper deals with the problem of modeling the dynamics of locally nonequilibrium in time process of soluble substances convective diffusion under the conditions of flat-vertical steady-state groundwater filtration with free surface taking into account the presence of interfacial mass transfer. The urgency of solving such problems is due, in particular, to the need for the development of measures for soil flashing, as well as desalination and purification of groundwater from pollutants. For mathematical modeling of the corresponding transfer processes in media with a property of temporal non-locality, the apparatus of fractional-order integro-differentiation is used in the paper. A corresponding nonlinear fractional differential mathematical model of the migration process has been developed with the involvement of Caputo–Katugampola generalized fractional order derivative of a function with respect to another function, which allows in a certain sense to control the modeling process. In this model, the nonequilibrium convection-diffusion processes in porous media are considered under the conditions when mass exchange with host rocks is present. For the proposed mathematical model, the formulation of the corresponding boundary value problem was carried out and a technique for its numerical solution was developed. This technique is based on a preliminary transition using the conformal mapping method from the physical flow domain to the domain of complex potential, which is canonical. The algorithm for approximate solution of the considered boundary value problem in the domain of complex potential is based on a linearized version of the locally one-dimensional difference scheme of A.A. Samarsky. The given results of computer simulations demonstrate that the value of the exponent in the Caputo–Katugampola derivative significantly affects the simulation results, giving both sub-diffusion and super-diffusion patterns of the distribution of concentration fields. Computational experiments also show that when mass exchange phenomenon is taken into account while modeling pollution propagation from water bodies to soil media, it leads to a delay in the development of concentration front in liquid phase. In the

paper we draw conclusions regarding the influence of mathematical model's parameters on the resulting picture of concentration fields formation.

Keywords: dynamics of convective diffusion processes, steady-state plane-vertical groundwater filtration, mathematical and computer modeling, fractional differential mathematical models, Caputo–Katugampola fractional derivative, nonlinear boundary value problems, finite-difference solutions.

1. Ляшко И.И., Демченко Л.И., Мистецкий Г.Е. Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах. Киев : Наук. думка, 1991. 264с.
2. Полубарина-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. М. : Наука, 1977. — 664с.
3. Булавацкий В.М. Специальные краевые задачи подземной гидродинамики. Киев : Наук. думка, 1993. —133 с.
4. Бомба А.Я., Булавацкий В.М., Скопецкий В.В. Нелінійні математичні моделі процесів геогідродинаміки. Київ : Наук. думка, 2007. 292 с.
5. Булавацкий В.М., Кривонос Ю.Г., Скопецкий В.В. Некласичні математичні моделі процесів тепло- та масопереносу. Київ : Наук. думка, 2005. 283 с.
6. Хасанов М.М., Булгакова Г.Т. Нелинейные и неравновесные эффекты в реологически сложных средах. Москва–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2003. —288с.
7. Соболев С.Л. Локально–неравновесные модели процессов переноса. *Успехи физических наук*, 1997, **167**. № 10. С. 1095–1106.
8. Мейланов М.М., Шибанова М.Р. Особенности решения уравнения теплопереноса в производных дробного порядка. *Журнал технической физики*. 2011. **81**. № 7. С. 1–6.
9. Gorenflo R., Mainardi F. Fractional calculus: integral and differential equations of fractional order. *Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics*. Wien : Springer Verlag, 1997. P. 223–276.
10. Mainardi F. Fractional calculus and waves in linear viscoelasticity. London: Imperial College Press, 2010. 368 p.
11. Podlubny I. Fractional differential equations. New York: Academ. Press, 1999. 341 p.
12. Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J. Theory and applications of fractional differential equations. Amsterdam : Elsevier, 2006. 523 p.
13. Povstenko Yu. Linear fractional diffusion-wave equation for scientists and engineers. Springer Int. Publ. Switzerland, 2015. 460 p.
14. Учайкин В.В. Метод дробных производных. Ульяновск : Артишок, 2008. 512с.
15. Bulavatsky V.M. Mathematical modeling of dynamics of the process of filtration convective diffusion under the condition of time nonlocality. *Journal of Automation and Information Science*. 2012. N 4. **44**. P. 13–22.
16. Булавацкий В.М., Кривонос Ю.Г. Математические модели с функцией контроля для исследования дробно-дифференциальной динамики геомиграционных процессов. *Международный научно-технический журнал «Проблемы управления и информатики»*. 2014. № 3. С. 138–147.
17. Веригин Н.Н., Васильев С.В., Куранов Н.Р. Методы прогноза солевого режима грунтов и грунтовых вод. М. : Колос, 1979. 336 с.
18. Мистецкий Г.Е. Гидростроительство. Автоматизация расчета массопереноса в почвогрунтах. Киев : Будівельник, 1985. 136с.
19. Katugampola U.N. New approach to generalized fractional derivatives. *Bul. Math. Anal. Appl.* 2014. N 6. P. 1–15.
20. Almeida R.A. Caputo fractional derivative of a function with respect to another function. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2017. N 44. P. 460–481.
21. Власюк А.П., Остапчук О.П. Математичне моделювання переносу сольових розчинів при фільтрації підземних вод у ґрунтових масивах. Рівне : НУВГП, 2015. 214 с.
22. Власюк А.П., Мартинюк П.М. Математичне моделювання консолідації ґрунтів при фільтрації сольових розчинів в неізотермічних умовах. Рівне: Вид-во НУВГП, 2008. 416 с.
23. Самарский А.А. Теория разностных схем. М. : Наука, 1977. 656 с.

Получено 15.04.2019