

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.12.021>

УДК 517.9:519.6

В.А. Богаенко, В.М. Булавацкий

Институт кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, Киев

E-mail: sevab@ukr.net, v_bulav@ukr.net

Компьютерное моделирование динамики процесса миграции растворимых веществ при фильтрации грунтовых вод со свободной поверхностью на основе дробно-дифференциального подхода

Представлено академиком НАН Украины А.А. Чикрием

Выполнено математическое моделирование дробно-дифференциальной динамики аномального процесса конвективной диффузии растворимых веществ при плоско-вертикальной установившейся фильтрации грунтовых вод со свободной поверхностью. В рамках модели с обобщенной производной дробного порядка Капуто—Герасимова поставлена соответствующая нелинейная краевая задача, приведена конечно-разностная методика ее приближенного решения, изложены результаты компьютерных экспериментов.

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

В данном сообщении излагается методика математического моделирования динамики локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при плоско-вертикальной установившейся фильтрации со свободной поверхностью из рек, каналов или накопителей промышленных стоков. Такого рода задачи возникают, в частности, в вопросах рассоления и промывки почв при мелиорации земель, опреснения грунтовых вод и их очистки от засоления и загрязнения промышленными и бытовыми стоками [1–3]. Теория и практика математического моделирования в таких задачах, поставленных в рамках классических моделей, в настоящее время существенно разработана [1–7]. В [8] выполнено математическое моделирование дробно-дифференциальной динамики локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при двумерной установившейся плоско-вертикальной фильтрации со свободной поверхностью. В настоящей работе (в отличие от [8]) соответствующая математическая модель базируется на понятии обобщенной производной Капуто—Герасимова $D_{t,g}^{(\alpha)}f$, как произ-

© В.А. Богаенко, В.М. Булавацкий, 2018

ISSN 1025-6415. Допов. Нац. акад. наук Укр. 2018. № 12

21

водной от функции по другой функции, что позволяет в некотором смысле управлять процессом моделирования изучаемого явления с помощью надлежащего выбора “пробной” функции $g(t)$. В качестве соответствующей фильтрационной схемы рассматривается схема распространения загрязнений из рек, каналов или хранилищ промышленных стоков из работы [4].

Построение математической модели процесса и постановка краевой задачи. Рассмотрим фильтрационную схему, соответствующую задаче конвективной диффузии загрязнений из рек, каналов или поверхностных накопителей промышленных стоков (см. [8], рис.1, а). Предполагаем осуществление процесса фильтрации в потенциальном поле скоростей

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

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 [4] характеристическая функция течения $z = f(\omega)$. При этом область комплексного потенциала течения G_ω имеет вид горизонтальной полуполосы (см. [8] рис. 1, б) и решение соответствующей задачи фильтрации записывается в виде [4]

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

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

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

Как известно, уравнение математической модели конвективной диффузии включает в себя коэффициент конвективной диффузии D (учитывающий гидродинамическую дисперсию и молекулярную диффузию [1, 2]).

В рассматриваемой ниже математической модели предполагается зависимость коэффициента конвективной диффузии как от скорости переноса v , так и от концентрации C растворимых веществ в виде [7]:

$$D = D(v, C) = D_m + \lambda \frac{k(C)}{\bar{k}} |\vec{v}(x, y)|, \quad (3)$$

где D_m – коэффициент молекулярной диффузии; λ – параметр гидродинамической дисперсии; $k(C)$ – коэффициент фильтрации пористой среды, как функция концентрации C [9].

Тогда для математического описания особенностей дробно-дифференциальной динамики процесса конвективной диффузии растворимых веществ в установившемся по-

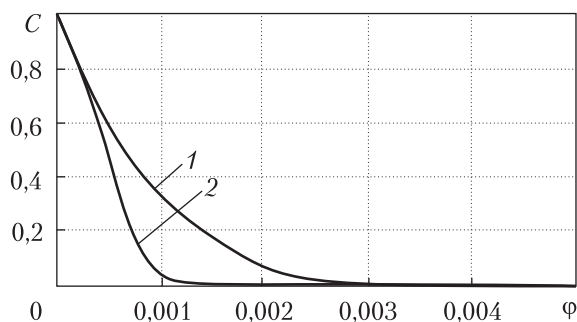


Рис. 1

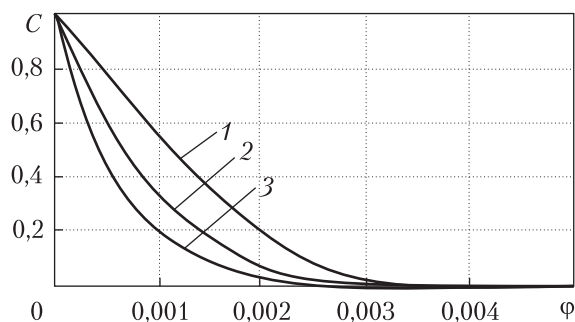


Рис. 2

тенциальном поле фильтрационных скоростей с учетом эффектов памяти получаем следующее модельное уравнение:

$$\sigma D_{t,g}^{(\beta)} C = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(v, C) \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D(v, C) \frac{\partial C}{\partial y} \right) - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y}, \quad (4)$$

где C — функция концентрации; σ — пористость среды; $v_x = v_x(x, y)$, $v_y = v_y(x, y)$ — составляющие вектора скорости фильтрации; $D_{t,g}^{(\beta)} C$ — производная Капуто–Герасимова по переменной t порядка β ($0 < \beta < 1$) от функции C по функции g , определяемая соотношением [10, 11]:

$$D_{t,g}^{(\beta)} C(x, y, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^t \frac{C'_\tau(x, y, \tau) d\tau}{[g(t) - g(\tau)]^\beta}, \quad (5)$$

где $g(t) \in C^1[0, +\infty)$, $g'(t) > 0$ ($t \geq 0$), $g(0) = 0$, $\Gamma(z)$ — гамма-функция Эйлера [12].

В частном случае $g(t) \equiv t$ из (5) очевидно получаем соотношение, на котором базируется определение общепринятой дробной производной Капуто–Герасимова [13, 14].

Если на входе фильтрационного потока известна концентрация C_0 растворимых веществ, то краевые условия для (4) запишутся в виде [8]

$$C|_{AC} = C_0, \quad \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{AB, CB} = 0, \quad C|_{t=0} = 0, \quad (6)$$

где n — внешняя нормаль к соответствующей кривой; AB — ось симметрии потока; CB — линия тока (см. [8], рис. 1).

Поскольку область фильтрации G_z является областью с частично неизвестной границей, то эффективный способ решения краевых задач для уравнения (4) может быть основан на переходе к новым переменным (φ, ψ) — точкам геометрически более простой области комплексного потенциала течения $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < +\infty, 0 < \psi < Q\}$ ([8], рис.1, б). Тогда краевая задача (4), (6) для исследования динамики рассматриваемого миграционного процесса математически может быть сформулирована для области комплексного потенциала в виде

$$\sigma D_{t,g}^{(\beta)} C(\varphi, \psi, t) = v^2(\varphi, \psi) \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} \left(D(\varphi, \psi, C) \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(D(\varphi, \psi, C) \frac{\partial C}{\partial \psi} \right) - \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right] \quad (7)$$

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

$$C|_{\varphi=0} = C_0, \quad \frac{\partial C}{\partial \psi} \Big|_{\psi=0, \varphi=Q} = 0, \quad C|_{t=0} = 0, \quad (8)$$

где $v^2(\varphi, \psi)$ определяется явным соотношением, приведенным в [8], а коэффициент диффузии D — согласно (3).

Методика получения приближенного решения краевой задачи. Ниже кратко изложена конечно-разностная методика получения решения краевой задачи (7), (8).

Введем в рассмотрение сеточную область, ограничивая область комплексного потенциала течения справа прямой $\varphi = \varphi_e \gg Q$,

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

где h_1, h_2, τ — соответственно шаги сетки по геометрическим переменным и времени и поставим в соответствие рассматриваемой задаче следующий линеаризованный вариант локально-одномерной [15] разностной схемы А.А. Самарского:

$$\frac{\sigma}{2} \Delta_t^{(\beta)} \bar{C} = v^2 \left((\tilde{D} \bar{C}_\varphi)_\varphi - \bar{C}_0 \right)_\varphi, \quad (9)$$

$$\frac{\sigma}{2} \Delta_t^{(\beta)} \hat{C} = v^2 (\tilde{\tilde{D}} \hat{C}_\psi)_\psi, \quad (10)$$

где $\hat{C} = C^{j+1}$, $\bar{C} = C^{j+1/2}$, $C = C^j$, $t_{j+1/2} = t_j + \frac{\tau}{2}$ и сеточные функции $\tilde{D}, \tilde{\tilde{D}}$ вычисляются по формулам [15] $\tilde{D}_{ik} = 0,5(D_{i-1,k} + D_{ik})$, $\tilde{\tilde{D}}_{ik} = 0,5(D_{i,k-1} + D_{ik})$.

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

$$\Delta_t^{(\beta)} \bar{C} = \frac{1}{\tau} \left(2b_j (C^{j+1/2} - C^j) + \sum_{s=0}^{j-1} \bar{b}_s^{(j)} (C^{s+1} - C^s) \right), \quad (11)$$

$$\Delta_t^{(\beta)} \hat{C} = \frac{2}{\tau} \sum_{s=0}^j \left[\bar{b}_s^{(j)} C^{s+1} + (\bar{q}_s^{(j)} - \bar{b}_s^{(j)}) C^{s+1/2} - \bar{q}_s^{(j)} C^s \right]. \quad (12)$$

Здесь

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

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

Расписывая в (9) разностные операторы с учетом (11), (12) и приводя подобные члены, получаем на полуцелом временном слое $t_{j+1/2}$ следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$A_{ik}^j C_{i+1,k}^{j+1/2} - B_{ik}^j C_{ik}^{j+1/2} + S_{ik}^j C_{i-1,k}^{j+1/2} = \Phi_{ik}^j \quad (i = \overline{1, m}; \quad k = \overline{1, n}; \quad j = \overline{0, N}), \quad (13)$$

где

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

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

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

Аналогично на целом временном слое из (10) получаем систему:

$$P_{ik}^j C_{i,k+1}^{j+1} - Q_{ik}^j C_{ik}^{j+1} + R_{ik}^j C_{i,k-1}^{j+1} = \Omega_{ik}^j \quad (i = \overline{1, m}; \quad k = \overline{1, n}; \quad j = \overline{0, N}), \quad (14)$$

где введены обозначения

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

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

Решения трехдиагональных систем уравнений (13), (14) согласно методу прогонки [15] запишутся в виде

$$C_{ik}^{j+1/2} = \alpha_{i+1,k}^j C_{i+1,k}^{j+1/2} + \beta_{i+1,k}^j \quad (i = \overline{1, m}; \quad k = \overline{1, n}; \quad j = \overline{0, N}), \quad (15)$$

$$C_{ik}^{j+1} = \tilde{\alpha}_{i,k+1}^j C_{i,k+1}^{j+1} + \tilde{\beta}_{i,k+1}^j \quad (i = \overline{1, m}; \quad k = \overline{1, n}; \quad j = \overline{0, N}), \quad (16)$$

где прогоночные коэффициенты вычисляются по формулам

$$\alpha_{i+1,k}^j = \frac{A_{ik}^j}{B_{ik}^j - S_{ik}^j \alpha_{ik}^j}, \quad \beta_{i+1,k}^j = \frac{\alpha_{i+1,k}^j}{A_{ik}^j} (S_{ik}^j \beta_{ik}^j - \Phi_{ik}^j), \quad (17)$$

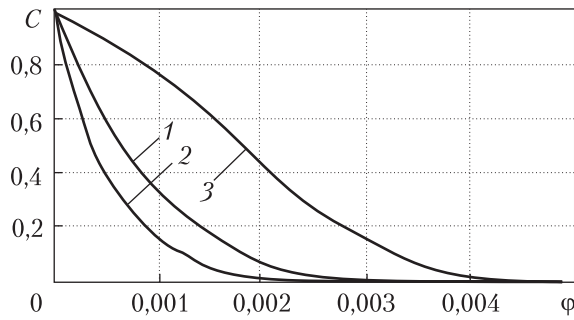


Рис. 3

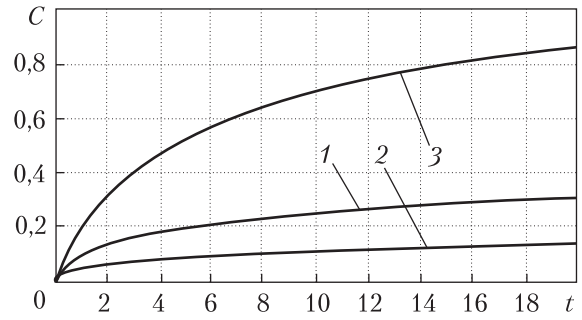


Рис. 4

$$\tilde{\alpha}_{i,k+1}^j = \frac{P_{ik}^j}{Q_{ik}^j - R_{ik}^j \tilde{\alpha}_{ik}^j}, \quad \tilde{\beta}_{i,k+1}^j = \frac{\tilde{\alpha}_{i,k+1}^j}{P_{ik}^j} (R_{ik}^j \tilde{\beta}_{ik}^j - \Omega_{ik}^j) \quad (i = \overline{1, m}; \quad k = \overline{1, n}; \quad j = \overline{0, N}), \quad (18)$$

$$\alpha_{1k}^j = 0, \quad \beta_{1k}^j = C_0 \quad (k = \overline{1, n}; \quad j = \overline{0, N}), \quad \tilde{\alpha}_{i1}^j = 1, \quad \tilde{\beta}_{i1}^j = 0 \quad (i = \overline{1, m}; \quad j = \overline{0, N}), \quad (19)$$

$$C_{m+1,k}^{j+1/2} = \frac{\beta_{m+1,k}^j}{1 - \alpha_{m+1,k}^j} \quad (k = \overline{1, n}; \quad j = \overline{0, N}), \quad C_{i,n+1}^{j+1} = \frac{\tilde{\beta}_{i,n+1}^j}{1 - \tilde{\alpha}_{i,n+1}^j} \quad (i = \overline{1, m}; \quad j = \overline{0, N}). \quad (20)$$

Соотношения (15)–(20) позволяют вычислить решение на целом временном слое. При этом устойчивость метода прогонки для (13), (14) вытекает из факта диагонального преобладания в матрицах коэффициентов этих систем линейных алгебраических уравнений. Последующий переход в физическую область G_2 осуществляется согласно соотношениям (1), (2).

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 [7]. При этом в расчетах использована следующая эмпирическая полиномиальная зависимость коэффициента фильтрации среды k от концентрации C солевого раствора для суглинков, предложенная в работе [9]:

$$k(C) = a_0 + a_1 C + a_2 C^2 + a_3 C^3 + a_4 C^4 + a_5 C^5, \quad (21)$$

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.

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 (знак “штрих” над безразмерными величинами опущен).

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 (21) (кривая 1) в сравнении со случаем усредненного ($k = \text{const}$) значения коэф-

фициента фильтрации (кривая 2 соответствует величине $k = 0,00084$) для модели с классической производной Капуто—Герасимова, соответствующей $g(x) = x$.

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 $\alpha = 0,8$ в зависимости от вида “пробной” функции ($1-g(x) = x$, $2-g(x) = x^{1/2}$, $3-g(x) = x^2$).

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 ($1-g(x) = x$, $2-g(x) = x^{1/2}$, $3-g(x) = x^2$).

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—Герасимова.

1. В случае моделирования дробно-дифференциальной динамики миграционного процесса в рамках модели со стандартной производной Капуто—Герасимова ($g(x) = x$) фронт концентрации растворимых веществ при учете функциональной зависимости $k = k(C)$ значительно опережает фронт концентрации, рассчитанный при $k = \text{const}$ (см. 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 (см. рис. 2).

3. Вид функции $g(x)$ 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.

Таким образом, предложенная диффузионная математическая модель (основанная на соответствующем дробно-дифференциальном уравнении с производной вида (5)) позволяет в определенном смысле управлять процессом моделирования изучаемого явления с помощью надлежащего выбора “пробной” функции. При этом в зависимости от вида функции $g(t)$ данная модель позволяет описывать как “сверхмедленные” так и “сверхбыстрые” диффузионные режимы для процесса фильтрационно-конвективной диффузии в пористых средах со сложной внутренней структурой. Игнорирование аномальных свойств процессов миграции в случае моделирования конвективно-диффузионной динамики растворимых веществ при разработке инженерных решений (например, в области проектирования систем экологически безопасного функционирования поверхностных накопителей промышленных или бытовых стоков в сложных горно-геологических условиях и геосредах фрактальной структуры) может привести к серьезным ошибкам в прогнозах степени безопасности указанных объектов.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Лаврик В.И., Фильчакова В.П., Яшин А.А. Конформные отображения физико-топологических моделей. Киев: Наук. думка, 1990. 376 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. Мистецкий Г.Е. Гидростроительство. Автоматизация расчета массопереноса в почвогрунтах. Киев: Будівельник, 1985. 136 с.
4. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. Москва: Наука, 1977. 664 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. 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.
7. Власюк А.П., Остапчук О.П. Математичне моделювання переносу сольових розчинів при фільтрації підземних вод у ґрунтових масивах. Рівне: НУВГП, 2015. 214 с.
8. Bulavatsky V.M. Mathematical modeling of dynamics of the process of filtration convection diffusion under the condition of time nonlocality. *J. Automation and Information Science*. 2012. **44**, № 2. P. 13–22.
9. Власюк А.П., Мартинюк П.М. Математичне моделювання консолідації ґрунтів при фільтрації сольових розчинів в неізотермічних умовах. Рівне: НУВГП, 2008. 416 с.
10. Булавацкий В.М., Кривонос Ю.Г. Математические модели с функцией контроля для исследования дробно-дифференциальной динамики геомиграционных процессов. *Проблемы управления и информатики*. 2014. № 3. С. 138–147.
11. Almeida R. A. Caputo fractional derivative of a function with respect to another function. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2017. **44**. P. 460–481.
12. Abramovitz M., Stegun I.A. Handbook of Mathematical Functions. New York: Dover, 1965. 831 p.
13. Podlubny I. Fractional differential equations. New York: Academic Press, 1999. 341 p.
14. Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J. Theory and applications of fractional differential equations. Amsterdam: Elsevier, 2006. 523 p.
15. Samarskii A.A. The Theory of Difference Schemes. New York: CRC Press, 2001. 766 p.

Поступило в редакцию 14.06.2018

REFERENCES

1. Lavryk, V. I., Filchakova, V. P. & Yashyn, A. A. (1990). Conformal mappings of physical topological models. Kiev: Naukova Dumka (in Russian).
2. Liashko, I. I., Demchenko, L. I. & Mystetskyj, G. E. (1991). Numerical solution of heat and mass transfer problems in porous media. Kiev: Naukova Dumka (in Russian).
3. Mystetskyj, G. E. (1985). Hydroconstruction. Automation of computations of mass transfer in soils. Kiev: Budivelnik (in Russian).
4. Polubarinova-Kochina, P. Ia. (1977). Theory of groundwater movement. Moscow: Nauka (in Russian).
5. Bulavatskyj, V. M., Kryvonos, Iu. G. & Skopetskyj, V. V. (2005). Non-classical mathematical models of heat and mass transfer. Kyiv: Naukova Dumka (in Ukrainian).
6. Bohaienko, V. A., Bulavatskyj, V. M., Skopetskyj, V. V. (2008). Parallel algorithm for computing filtrational convective pollutants diffusion from aquiferous strata. *Upravliaiushchie sistemy i machyny*, No. 5, pp. 18-23 (in Russian).
7. Vlasiuk, A. P. & Ostanchuk, O. P. (2015). Mathematical modelling of salt solutions movement in the case of ground water filtration in soil massifs. Rivne: NUVGP (in Ukrainian).
8. Bulavatsky, V. M. (2012). Mathematical modeling of dynamics of the process of filtration convection diffusion under the condition of time nonlocality. *J. Automation and Information Science*, 44, No. 2, pp. 13-22.
9. Vlasiuk, A. P. & Martyniuk, P. M. (2008). Mathematical modelling of soil consolidation in the case of salt solutions filtration in non-isothermal conditions. Rivne: NUVGP (in Ukrainian).

10. Bulavatskyj, V. M. & Kryvonos, Iu. G. (2014). Mathematical models with control functions for studying fractional differential dynamics of geomigration processes. Problemy upravlenija i informatiki, No. 3, pp. 138-147 (in Russian).
11. Almeida, R. A. (2017). Caputo fractional derivative of a function with respect to another function. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 44, pp. 460-481.
12. Abramovitz, M. & Stegun, I.A. (1965). Handbook of Mathematical Functions. New York: Dover.
13. Podlubny, I. (1999). Fractional differential equations. New York: Academic Press.
14. Kilbas, A. A., Srivastava, H. M. & Trujillo, J. J. (2006). Theory and applications of fractional differential equations. Amsterdam: Elsevier.
15. Samarskii, A. A. (2001). The Theory of Difference Schemes. New York: CRC Press.

Received 14.06.2018

V.A. Bogaenko, V.M. Булавацький

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ

E-mail: sevab@ukr.net, v_bulav@ukr.net

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІКИ
ПРОЦЕСУ МІГРАЦІЇ РОЗЧИННИХ РЕЧОВИН ПРИ ФІЛЬТРАЦІЇ
ГРУНТОВИХ ВОД З ВІЛЬНОЮ ПОВЕРХНЕЮ НА ОСНОВІ
ДРОБОВО-ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОГО ПІДХОДУ

Виконано математичне моделювання дробово-диференціальної динаміки аномального процесу конвективно-ї дифузії розчинних речовин при плоско-вертикальній установленій фільтрації ґрунтових вод з вільною поверхнею. В рамках моделі з узагальненою похідною дробового порядку Капуто—Герасимова поставлена відповідна нелінійна крайова задача, наведена скінченно-різницева методика її наближеного розв'язання, викладені результати комп'ютерних експериментів.

Ключеві слова: динаміка конвективно-дифузійних процесів, установлена плоско-вертикальна фільтрація ґрунтових вод, математичне і комп'ютерне моделювання, дробово-диференціальні математичні моделі, узагальнена похідна Капуто—Герасимова, нелінійні крайові задачі, скінченно-різницева розв'язки.

V.A. Bogaenko, V.M. Bulavatskyj

V. M. Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: sevab@ukr.net, v_bulav@ukr.net

COMPUTER MODELING OF THE DYNAMICS OF MIGRATION
PROCESSES OF SOLUBLE SUBSTANCES IN THE CASE
OF GROUNDWATER FILTRATION WITH FREE SURFACE
ON THE BASE OF THE FRACTIONAL DERIVATIVE APPROACH

The mathematical modeling of the fractional differential dynamics of the process of anomalous convective diffusion of soluble substances is conducted for the case of flat-vertical steady state groundwater filtration with free surface. Within the framework of the model with a generalized Caputo—Gerasimov fractional derivative, the corresponding non-linear boundary-value problem is posed, a finite-difference method for its approximated solution is given, and the results of computer experiments are described.

Keywords: dynamics of convective and diffusive processes, steady state flat-vertical groundwater filtration, mathematical and computer modeling, fractional differential mathematical models, generalized Caputo—Gerasimov derivative, non-linear boundary-value problems, finite-difference solutions.