

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ОДНОГО ЛОКАЛЬНО-НЕРАВНОВЕСНОГО ВО ВРЕМЕНИ КОНВЕКТИВНО-ДИФFUЗИОННОГО ПРОЦЕССА

Ключевые слова: математическое моделирование, неклассические модели, неравновесный конвективно-диффузионный процесс, уравнение диффузии дробного порядка, краевые задачи, приближенные решения.

ВВЕДЕНИЕ

Настоящая статья посвящена изучению задачи геоинформатики, состоящей в разработке методики математического моделирования динамики локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при плановой установившейся фильтрации из хранилища сточных вод к водозабору. Похожие постановки задач возникают в практике мелиорации земель (рассоление и промывка почв), при опреснении грунтовых вод и их очистке от засоления и загрязнения промышленными и бытовыми стоками, а также при добыче полезных ископаемых методом подземного выщелачивания [1, 2]. Отметим, что теория и практика математического моделирования в этой области для задач, поставленных в рамках классических математических моделей тепломассопереноса, интенсивно разрабатывается [1–5].

В настоящее время особенно актуальной является проблема повышения степени адекватности классических количественных моделей процессов тепломассопереноса в системах со сложной пространственно-временной структурой, для которых характерны эффекты памяти, пространственной нелокальности и самоорганизации. Это обусловило тенденцию пересмотра основных положений классической теории тепломассопереноса [6–8], в частности, значительный прогресс при моделировании конвективно-диффузионного переноса в неравновесных условиях достигнут с использованием формализма интегро-дифференцирования дробного порядка [9–13]. Поскольку в указанных выше случаях систем со сложной пространственно-временной структурой рассматриваемые математические модели базируются на дифференциальных уравнениях дробного порядка, данные процессы переноса являются сильно нелокальными во времени и (или) пространстве [14].

Далее выполнено математическое моделирование динамики локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при установившейся двумерной плановой напорной фильтрации из хранилища сточных вод к водозабору (реке). В качестве соответствующей фильтрационной схемы рассмотрена схема, изученная в [15].

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА И ПОСТАНОВКА КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ

Рассматривая 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:

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

где \vec{q} — конвективно-диффузионный поток; C — концентрация растворимых веществ в жидкой фазе; \vec{v} — скорость фильтрации; d — коэффициент конвективной диффузии; $D_t^{1-\beta}$ — оператор дробного дифференцирования Римана–Лиувилля порядка $1-\beta$, $0 < \beta \leq 1$, [9–13]; ∇ — оператор Гамильтона.

Из соотношения (1) и уравнения материального баланса

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

получаем уравнение

$$\sigma \frac{\partial C}{\partial t} = D_t^{1-\beta} (d\Delta C - \operatorname{div}(C\vec{v})),$$

или

$$\sigma D_t^{(\beta)} C = d\Delta C - \operatorname{div}(C\vec{v}), \quad (2)$$

где σ — пористость среды, $D_t^{(\beta)}$ — оператор регуляризованной дробной производной (по Капуто [9–13]) порядка β , Δ — оператор Лапласа.

С учетом уравнения неразрывности $\operatorname{div} \vec{v} = 0$ из (2) окончательно находим

$$\sigma D_t^{(\beta)} C = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C. \quad (3)$$

Отметим, что при $\beta \rightarrow 1$ из (3) имеем классическое уравнение конвективной диффузии [5]:

$$\sigma C_t = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C.$$

В первом приближении рассмотрим уравнение (3) в потенциальном поле скоростей

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

где φ — потенциал скорости.

На рис. 1, *a* показана фильтрационная схема [15], соответствующая задаче миграции загрязнений из котлована кругового сечения радиуса r с центром в точке $(-l, 0)$ в дренажный канал (реку) $x = 0$ при плановой установившейся фильтрации. Для этой схемы область G_ω комплексного потенциала течения $\omega = \varphi + i\psi$ (ψ — функция тока) имеет вид прямоугольника (рис. 1, *б*) и решение соответствующей задачи фильтрации (характеристическая функция течения) известно и записывается в виде [15]:

$$x = \frac{l_*}{2} \frac{\operatorname{sh} \left(\frac{\pi}{Q} (\varphi - \varphi_0) \right)}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{\pi}{2Q} (\varphi - \varphi_0) \right) - \cos^2 \left(\frac{\pi\psi}{2Q} \right)},$$

$$y = -\frac{l_*}{2} \frac{\sin \left(\frac{\pi\psi}{Q} \right)}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{\pi}{2Q} (\varphi - \varphi_0) \right) - \cos^2 \left(\frac{\pi\psi}{2Q} \right)},$$

где $\varphi_0 = \kappa HT$, κ — коэффициент фильтрации, H — действующий напор, T — мощность напорного водоносного пласта, $Q = \pi\varphi_0 / \ln \left(\frac{l + \sqrt{l^2 - r^2}}{r} \right)$ — фильтрационный расход, $l_* = \sqrt{l^2 - r^2}$, $\varphi = -\kappa Th$, h — пьезометрический напор.

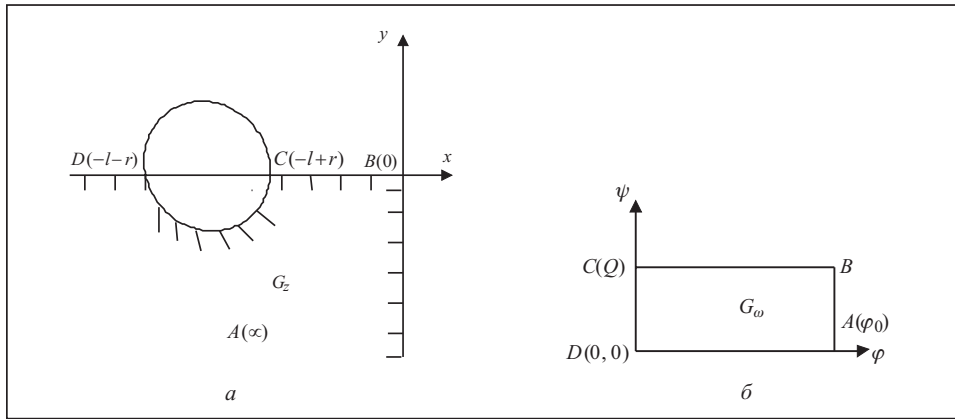


Рис. 1

Задачу исследования нелокального во времени процесса миграции загрязнений в нижней части области фильтрации G_z (см. рис. 1, а), симметричной относительно оси абсцисс, математически можно сформулировать как задачу отыскания решения уравнения (3) $((x, y, t) \in G_z \times (0, +\infty))$ при следующих краевых условиях:

$$C|_{DC} = C_1, \quad \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{AD, CB, AB} = 0, \quad C|_{t=0} = 0,$$

где C_1 — заданная концентрация растворимых веществ на входе фильтрационного потока, n — внешняя нормаль к соответствующей кривой.

Поскольку область фильтрации G_z — неканоническая область сложной конфигурации, эффективным способом решения краевых задач для уравнения (3) является переход к новым переменным (φ, ψ) — точкам геометрически более простой области комплексного потенциала течения $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < \varphi_0, 0 < \psi < Q\}$ (см. рис. 1, б). Тогда соответствующую краевую задачу для исследования динамики рассматриваемого миграционного процесса математически можно сформулировать для области комплексного потенциала течения в виде

$$\sigma D_t^{(\beta)} C = v^2(\varphi, \psi) T^2 \left(d \left(\frac{\partial^2 C}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial \psi^2} \right) - \frac{1}{T} \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right) \quad ((\varphi, \psi, t) \in G_\omega \times (0, +\infty)), \quad (4)$$

$$C|_{DC} = C_1, \quad \frac{\partial C}{\partial \psi} \Big|_{DA, CB} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial \varphi} \Big|_{AB} = 0, \quad C|_{t=0} = 0, \quad (5)$$

где $v^2 = v_x^2 + v_y^2$, $v_x = \frac{1}{T} \frac{\partial \varphi}{\partial x}$, $v_y = \frac{1}{T} \frac{\partial \varphi}{\partial y}$.

Введем безразмерные переменные и параметры соотношениями

$$x' = \frac{x}{r}, \quad y' = \frac{y}{r}, \quad \varphi' = \frac{\varphi}{\varphi_0}, \quad \psi' = \frac{\psi}{\varphi_0}, \quad C' = \frac{C}{C_1}, \quad (6)$$

$$l' = \frac{l}{r}, \quad d' = \frac{dT}{\varphi_0}, \quad t' = \left(\frac{a^2}{\varphi_0 T} \right)^{1/\beta} t, \quad (7)$$

где $a = \frac{2Q}{\pi r \sqrt{l^2 - 1}}$.

Переходя в (4), (5) к безразмерным переменным согласно (6), (7) и опуская в дальнейшем знак штрих над безразмерными величинами, получаем в области $G_\omega \times (0, +\infty)$ краевую задачу

$$\sigma D_t^{(\beta)} C(\varphi, \psi, t) = V^2(\varphi, \psi) \left(d \left(\frac{\partial^2 C}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial \psi^2} \right) - \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right), \quad (8)$$

$$C(0, \psi, t) = 1, \quad \frac{\partial C(\varphi, 0, t)}{\partial \psi} = 0, \quad \frac{\partial C(\varphi, \tilde{q}, t)}{\partial \psi} = 0, \quad \frac{\partial C(1, \psi, t)}{\partial \varphi} = 0, \quad C(\varphi, \psi, 0) = 0, \quad (9)$$

где

$$V(\varphi, \psi) = \sin^2 \left(\frac{\pi \psi}{2\tilde{q}} \right) + \operatorname{sh}^2 \left(\frac{\pi(\varphi-1)}{2\tilde{q}} \right), \quad \tilde{q} = \frac{\pi}{\ln(l + \sqrt{l^2 - 1})}.$$

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

$$x = \frac{\sqrt{l^2 - 1}}{2} \frac{\operatorname{sh} \left(\frac{\pi}{\tilde{q}} (\varphi - 1) \right)}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{\pi}{2\tilde{q}} (\varphi - 1) \right) - \cos^2 \left(\frac{\pi \psi}{2\tilde{q}} \right)}, \quad (10)$$

$$y = -\frac{\sqrt{l^2 - 1}}{2} \frac{\sin \left(\frac{\pi \psi}{\tilde{q}} \right)}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{\pi}{2\tilde{q}} (\varphi - 1) \right) - \cos^2 \left(\frac{\pi \psi}{2\tilde{q}} \right)}.$$

ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ В СЛУЧАЕ ОСРЕДНЕННОЙ СКОРОСТИ ФИЛЬТРАЦИИ

Осредняя скорость фильтрации $v(\varphi, \psi)$ по области комплексного потенциала течения таким образом, что $v \approx v_* = \text{const}$, приходим (в предположении $\sigma, d = \text{const}$) к задаче вида (8), (9) для неклассического уравнения конвективной диффузии с постоянными коэффициентами. В этом случае можно найти численно-аналитическое решение рассматриваемой задачи, используя дифференциально-разностный подход в сочетании с методом суммарных представлений [16–18]. Последовательность соответствующих выкладок аналогична изложенной в [2] и кратко состоит в следующем.

Исключая из уравнения (8) конвективную составляющую подстановкой

$$C(\varphi, \psi, t) = u(\varphi, \psi, t) e^{\frac{\varphi}{2d}}, \quad (11)$$

получаем относительно неизвестной функции $u(\varphi, \psi, t)$ задачу вида

$$D_t^{(\beta)} u = \kappa \Delta u - \eta u, \quad (12)$$

$$u|_{\varphi=0} = 1, \quad \left(\frac{\partial u}{\partial \varphi} + \frac{1}{2d} u \right) \Big|_{\varphi=1} = 0, \quad (13)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \psi} \Big|_{\psi=0, \psi=\tilde{q}} = 0, \quad (14)$$

$$u(\varphi, \psi, 0) = 0, \quad (15)$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \psi^2}$, $\eta = \frac{\kappa}{4d^2}$, $\kappa = \frac{v_*^2 d}{\sigma}$.

Введем в рассмотрение сеточную область $\omega_h = \{(\varphi_i, \psi_j) : \varphi_i = ih_1 (i = \overline{0, m+1}), \psi_j = (j-0,5)h_2 (j = \overline{0, n+1})\}$, где h_1, h_2 — шаги сетки по геометрическим пере-

менным φ и ψ соответственно. Рассматриваемой задаче (12)–(15) поставим в соответствие дифференциально-разностную задачу вида

$$D_t^{(\beta)} u_{ij}(t) = \kappa \Delta_h u_{ij}(t) - \eta u_{ij}(t) \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{1, n}), \quad (16)$$

$$u_{0j}(t) = 1 \quad (j = \overline{1, n}), \quad (17)$$

$$u_{m+1, j}(t) - \operatorname{tg} \beta_* u_{mj}(t) = 0 \quad (j = \overline{1, n}), \quad (18)$$

$$u_{i0}(t) - u_{i1}(t) = 0 \quad (i = \overline{1, m}), \quad (19)$$

$$u_{i, n+1}(t) - u_{in}(t) = 0 \quad (i = \overline{1, m}), \quad (20)$$

$$u_{ij}(0) = 0 \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{1, n}), \quad (21)$$

где $\operatorname{tg} \beta_* = 1 - \frac{h_1}{2d}$ ($h_1 \leq 4d$); Δ_h — разностный аналог оператора Лапласа по переменным φ, ψ ; $u_{ij}(t) = u(\varphi_i, \psi_j, t)$ ($i = \overline{0, m+1}; j = \overline{0, n+1}$). Отсюда с учетом граничных условий (17), (18) получаем задачу

$$D_t^{(\beta)} \bar{u}_j(t) = \frac{\kappa}{h_1^2} T_1^{(m)} \bar{u}_j(t) - \zeta \bar{u}_j(t) + \frac{\kappa \gamma^2}{h_1^2} (\bar{u}_{j-1}(t) + \bar{u}_{j+1}(t)) + \frac{\kappa}{h_1^2} \bar{\omega}_j \quad (j = \overline{1, n}), \quad (22)$$

$$\bar{u}_0(t) - \bar{u}_1(t) = \bar{0}, \quad (23)$$

$$\bar{u}_{n+1}(t) - \bar{u}_n(t) = \bar{0}, \quad (24)$$

$$\bar{u}_j(0) = 0 \quad (j = \overline{1, n}), \quad (25)$$

где $\zeta = \eta + \frac{2\kappa}{h_1^2} (1 + \gamma^2)$, $\gamma = \frac{h_1}{h_2}$, $\bar{u}_j(t) = \{u_{ij}(t)\}_{i=1}^m$, $\bar{\omega}_j = \{\omega_{ij}\}_{i=1}^m$, $\omega_{1j} = 1$, $\omega_{2j} = \dots = \omega_{mj} = 0$ ($j = \overline{1, n}$), $T_1^{(m)}$ — квадратная матрица порядка m , определенная в [16].

Введем в рассмотрение $P_1^{(m)*}$ -трансформацию векторов \bar{u}_j и $\bar{\omega}_j$ согласно соотношениям

$$\tilde{\bar{u}}_j(t) = \{\hat{u}_{ij}\}_{i=1}^m = P_1^{(m)*} \bar{u}_j(t), \quad \tilde{\bar{\omega}}_j = \{\hat{\omega}_{ij}\}_{i=1}^m = P_1^{(m)*} \bar{\omega}_j,$$

где $P_1^{(m)*}$ — квадратная матрица порядка m , транспонированная по отношению к фундаментальной матрице $P_1^{(m)}$, определенной соотношениями [16, 18]:

$$P_1^{(m)} = [P_{ik}^{(1)}]_{i,k=1}^m = [c_k \sin(i\theta_k)]_{i,k=1}^m, \quad c_k = \left(\sum_{i=1}^m \sin^2(i\theta_k) \right)^{-1/2}.$$

Здесь θ_k — корни уравнения $\sin[(m+1)\theta] = \operatorname{tg} \beta_* \sin(m\theta)$, расположенные в интервале $(0, \pi)$. Умножая (22)–(25) слева на матрицу $P_1^{(m)*}$ с учетом соотношения $T_1^{(m)} = P_1^{(m)} \Lambda_1^{(m)} P_1^{(m)*}$ ($\Lambda_1^{(m)} = [\lambda_1^{(1)}, \lambda_2^{(1)}, \dots, \lambda_m^{(1)}]$ — диагональная матрица собственных чисел матрицы $T_1^{(m)}$ [16]) и принимая во внимание граничные условия (23), (24), получаем задачу

$$D_t^{(\beta)} \bar{v}_j(t) = \left(\delta_i + \frac{\kappa \gamma^2}{h_1^2} T_2^{(n)} \right) \bar{v}_j(t) + \frac{\kappa}{h_1^2} \bar{F}_i \quad (i = \overline{1, m}), \quad (26)$$

$$\bar{v}_i(0) = \bar{0} \quad (i = \overline{1, m}), \quad (27)$$

где обозначено

$$\delta_i = \frac{\kappa}{h_1^2} \lambda_i^{(1)} - \zeta, \quad \bar{v}_i(t) = \{\hat{u}_{ij}(t)\}_{j=1}^n, \quad \bar{F}_i = \{\hat{w}_{ij}\}_{j=1}^n \quad (i = \overline{1, m}),$$

$T_2^{(n)}$ — квадратная матрица порядка n , определенная в [16].

Введем в рассмотрение $P_2^{(n)*}$ -трансформацию векторов \bar{v}_i, \bar{F}_i соотношениями $\bar{v}_i(t) = \{\hat{v}_{ij}\}_{j=1}^n = P_2^{(n)*} \bar{v}_i(t), \bar{F}_i = \{\hat{f}_{ij}\}_{j=1}^n = P_2^{(n)*} \bar{F}_i \quad (i = \overline{1, m})$, где $P_2^{(n)*}$ — квадратная матрица порядка n , транспонированная по отношению к фундаментальной матрице $P_2^{(n)}$, определенной соотношениями [16, 18]:

$$P_2^{(n)} = [P_{ik}^{(2)}]_{i,k=1}^n = \begin{cases} 1 & (k=1; i=\overline{1, n}), \\ \frac{\sqrt{n}}{2} \cos\left(\frac{(2i-1)(k-1)}{2n} \pi\right) & (k=\overline{2, n}; i=\overline{1, n}). \end{cases}$$

Умножая (26), (27) слева на матрицу $P_2^{(n)*}$ с учетом соотношений [16] $T_2^{(n)} = P_2^{(n)} \Lambda_2^{(n)} P_2^{(n)*}, \Lambda_2^{(n)} = \text{diag}[\lambda_1^{(2)}, \lambda_2^{(2)}, \dots, \lambda_n^{(2)}], \lambda_k^{(2)} = 2 \cos\left(\frac{k-1}{n} \pi\right) \quad (k = \overline{1, n})$, получаем задачу, записанную в координатной форме в виде

$$D_t^{(\beta)} \hat{v}_{ij}(t) - \theta_{ij} \hat{v}_{ij}(t) = \frac{\kappa}{h_1^2} \hat{f}_{ij} \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{1, n}), \quad (28)$$

$$\hat{v}_{ij}(0) = 0 \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{1, n}), \quad (29)$$

где $\theta_{ij} = \frac{\kappa}{h_1^2} [\lambda_i^{(1)} + \gamma^2 \lambda_j^{(2)} - 2(1 + \gamma^2)] - \eta$.

Решение задачи (28), (29) согласно [9] имеет вид

$$\hat{v}_{ij}(t) = \frac{\kappa}{h_1^2} \hat{f}_{ij} \int_0^t (t-\tau)^{\beta-1} E_{\beta, \beta}[\theta_{ij}(t-\tau)^\beta] d\tau \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{1, n}), \quad (30)$$

где $E_{\alpha, \beta}(z)$ — обобщенная функция Миттаг–Леффлера [9–13].

Возвращаясь в (30) к оригиналам по геометрическим переменным, получаем решение исходной дифференциально-разностной задачи в виде

$$u_{ij}(t) = \int_0^t (t-\tau)^{\beta-1} G_{ij}^{(\beta)}(t-\tau) d\tau \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{1, n}), \quad (31)$$

где обозначено

$$G_{ij}^{(\beta)}(t-\tau) = \sum_{s=1}^m \sum_{k=1}^n \alpha_{sk}^{(i,j)} E_{\beta, \beta}[\theta_{sk}(t-\tau)^\beta], \quad \alpha_{sk}^{(i,j)} = \frac{\kappa}{h_1^2} p_{1s}^{(1)} p_{is}^{(1)} p_{jk}^{(2)} \sum_{v=1}^n p_{vk}^{(2)}.$$

Последующий переход к функции концентрации C осуществляется согласно (11).

Отметим, что с вычислительной точки зрения соотношения (31) обладают очевидными преимуществами метода суммарных представлений, в частности, возможностью выборочного счета в заданных точках области фильтрации [16–18].

**МЕТОДИКА ПОЛУЧЕНИЯ ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ
КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ В ОБЩЕМ СЛУЧАЕ**

В случае переменной скорости фильтрации ($v^2 \neq \text{const}$) приближенное решение рассматриваемой задачи (8), (9) можно получить на основе конечно-разностной методики следующим образом.

Введем в рассмотрение сеточную область $\omega_{h\tau} = \{(\varphi_i, \psi_k, t_j) : \varphi_i = ih_1 \text{ (} i = \overline{0, m+1}\text{), } \psi_k = h_2(k-0,5) \text{ (} k = \overline{0, n+1}\text{), } t_j = j\tau \text{ (} j = \overline{0, N+1}\text{)}\}$, где $h_1 = \frac{2}{2m+1}$, $h_2 = \frac{\tilde{q}}{n}$ — шаги сетки по геометрическим переменным φ и ψ соответственно, τ — шаг сетки по временной переменной, и поставим в соответствие рассматриваемой краевой задаче следующий аналог локально-одномерной [19] разностной схемы А.А. Самарского:

$$\frac{\sigma}{2} \Delta_t^{(\beta)} \bar{C} = V^2 (d \bar{C}_{\bar{\varphi}\bar{\varphi}} - \bar{C}_{\bar{\varphi}}^0), \quad (32)$$

$$\frac{\sigma}{2} \Delta_t^{(\beta)} \hat{C} = V^2 d \hat{C}_{\bar{\psi}\bar{\psi}}. \quad (33)$$

Здесь $\hat{C} = C^{j+1}$, $\bar{C} = C^{j+1/2}$, $C = C^j$, $t_{j+1/2} = t_j + \tau/2$, $\Delta_t^{(\beta)}$ — разностный аналог оператора дробного дифференцирования $D_t^{(\beta)}$, определяемый соотношениями [20]:

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

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

Отметим, что в классе достаточно гладких функций имеем $D_t^{(\beta)} u = \Delta_t^{(\beta)} u + O(\tau)$ [20] и что порядок аппроксимации рассматриваемой разностной схемы $O(h_1^2 + h_2^2 + \tau)$.

Расписывая в (32) разностные операторы и приводя подобные члены, получаем на полуцелом слое $t_{j+1/2}$ систему уравнений

$$A_{ik} C_{i+1,k}^{j+1/2} - B_{ik} C_{ik}^{j+1/2} + S_{ik} C_{i-1,k}^{j+1/2} = \Phi_{ik}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}), \quad (34)$$

где обозначено

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

$$\Phi_{ik}^j = \frac{\sigma}{2\Gamma(2-\beta)} \left(\sum_{s=0}^{j-1} \gamma_s^{(j)} \frac{C_{ik}^{s+1} - C_{ik}^s}{\tau} - \left(\frac{2}{\tau} \right)^\beta C_{ik}^j \right),$$

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

На целом временном слое из (33) находим

$$P_{ik} C_{i,k+1}^{j+1} - Q_{ik} C_{ik}^{j+1} + P_{ik} C_{i,k-1}^{j+1} = \Omega_{ik}^j \quad (i = \overline{1, m}; k = \overline{1, n}; j = \overline{0, N}), \quad (35)$$

где

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

$$\Omega_{ik}^j = \frac{\sigma}{\Gamma(2-\beta)} \left(\sum_{s=0}^j \rho_s^{(j)} \frac{C_{ik}^{s+1/2} - C_{ik}^s}{\tau} - \frac{1}{2^{1-\beta} \tau^\beta} C_{ik}^{j+1/2} \right),$$

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

Системы (34), (35) решаются методом прогонки. При этом устойчивость этого метода для (34) и (35) вытекает из факта диагонального преобладания в матрицах коэффициентов этих систем алгебраических уравнений. Последующий переход в физическую область G_z осуществляется согласно соотношений (10).

Заметим, что в случае переменного коэффициента диффузии $d = d(\varphi, \psi)$ соответствующая рассматриваемой задаче краевая задача конвективной диффузии в области комплексного потенциала течения G_ω формулируется для уравнения

$$\sigma D_t^{(\beta)} C = V^2 (\varphi, \psi) \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \left(d \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(d \frac{\partial C}{\partial \psi} \right) - \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right), \quad (36)$$

где $(\varphi, \psi, t) \in G_\omega \times (0, +\infty)$ при краевых условиях вида (9). Для решения задачи (36), (9) можно использовать, например, разностную схему

$$\frac{\sigma}{2} \Delta_t^{(\beta)} \bar{C} = V^2 ((\bar{d} \bar{C}_{\bar{\varphi}})_\varphi - \bar{C}_\varphi), \quad (37)$$

$$\frac{\sigma}{2} \Delta_t^{(\beta)} \hat{C} = V^2 (\bar{\bar{d}} \hat{C}_{\bar{\psi}})_\psi, \quad (38)$$

где для сеточных функций $\bar{d}, \bar{\bar{d}}$ приняты стандартные обозначения $\bar{d}_{ik} = 0,5(d_{i-1,k} + d_{ik})$, $\bar{\bar{d}}_{ik} = 0,5(d_{i,k-1} + d_{ik})$.

После тривиальных преобразований соотношений (37), (38) снова приходим к системе вида (34) с очевидными изменениями

$$A_{ik} = \frac{V_{ik}^2}{h_1} \left(\frac{\bar{d}_{i+1,k}}{h_1} - 0,5 \right), \quad S_{ik} = \frac{V_{ik}^2}{h_1} \left(\frac{\bar{d}_{ik}}{h_1} + 0,5 \right)$$

и к системе

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

где

$$P_{ik} = \frac{V_{ik}^2 \bar{\bar{d}}_{i,k+1}}{h_2^2}, \quad R_{ik} = \frac{V_{ik}^2 \bar{\bar{d}}_{i,k}}{h_2^2}, \quad Q_{ik} = \frac{\sigma}{2^{1-\beta} \tau^\beta \Gamma(2-\beta)} + P_{ik} + R_{ik}.$$

Решения полученных линейных систем также находятся методом прогонки.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И ВЫВОДЫ

Численное моделирование динамики локально-неравновесного во времени процесса миграции растворимых веществ в рамках рассматриваемой неклассической конвективно-диффузионной математической модели выполнено относительно безразмерных переменных, определяемых соотношениями (6), (7). Некоторые из полученных при этом результатов изображены на рис. 2–4.

Графики на рис. 2 показывают динамику полей концентраций вдоль линии тока $\psi = 0$ в фиксированный момент времени $t = 0,123$ для различных значений порядка дробной производной: кривая 1 при $\beta = 1$; кривая 2 при $\beta = 0,925$; кривая 3 при $\beta = 0,8$.

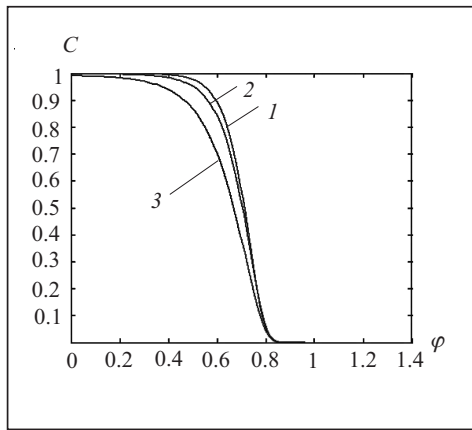


Рис. 2

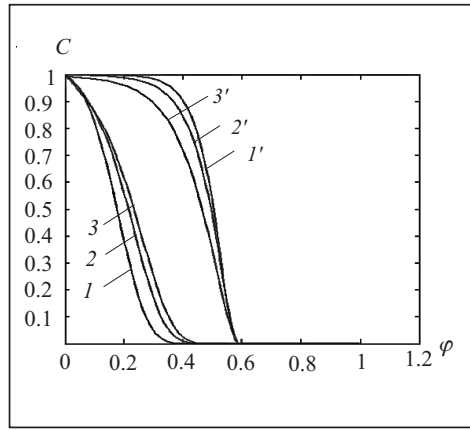


Рис. 3

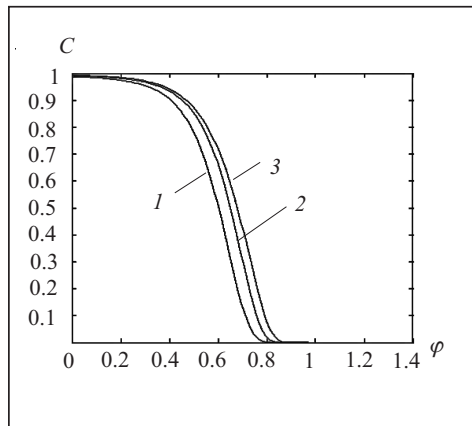


Рис. 4

Графики на рис. 3 представляют опережение фронта концентрации вдоль линии тока $\psi = 0,5$ на ранней стадии и задержку его на поздних стадиях процесса в неклассической модели по сравнению с классической (кривые 1, 2, 3 при $t = 0,004$; кривые 1', 2', 3' при $t = 0,3$; кривые 1, 1' при $\beta = 1$; кривые 2, 2' при $\beta = 0,9$; кривые 3, 3' при $\beta = 0,85$).

Графики на рис. 4 показывают снижение с течением времени скорости движения фронта концентраций вдоль линии тока в противоположном водозабору направлении в рамках неклассической диффузионной модели

(кривая 1 при $t = 0,034$; кривая 2 при $t = 0,079$; кривая 3 при $t = 0,182$; $\beta = 0,87$).

Анализ результатов численных экспериментов позволяет сделать следующие выводы об особенностях динамики полей концентраций растворимых веществ при плановой напорной фильтрации в условиях заметного влияния временной нелокальности.

1. В рамках неклассической диффузионной модели кривые концентраций качественно совпадают с соответствующими кривыми, полученными согласно классической равновесной модели [21], однако имеется существенное количественное отличие между величинами концентраций (в данной точке в фиксированный момент времени), соответствующими различным моделям диффузии, причем это отличие тем больше, чем меньше величина показателя дробности производной β (см. рис. 2).

2. Наблюдается немонотонный характер изменения скорости фронта концентраций в неклассической модели по сравнению с классической, а именно: опережение фронта концентраций на ранней стадии развития диффузионного процесса и задержка его на поздних стадиях (субдиффузия) в неклассической модели по сравнению с классической (см. рис. 3).

3. В условиях локально-неравновесной во времени диффузионной модели скорость движения фронта концентрации с течением времени снижается (см. рис. 4).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные численные эксперименты подтверждают наличие существенных различий в результатах моделирования процесса миграции загрязнений в пла-

новом фильтрационном потоке в рамках классической и локально-неравновесной во времени (неклассической) диффузионных моделей.

Игнорирование явления временной нелокальности процесса аномальной конвективной диффузии растворимых веществ при принятии инженерных решений, например в области проектирования систем экологически безопасного функционирования поверхностных накопителей промышленных или бытовых стоков в сложных горно-геологических условиях, а также геосредах фрактальной структуры, может привести к ошибкам в прогнозных оценках степени безопасности указанных объектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лаврик В.И., Никифорович Н.А. Математическое моделирование в гидроэкологических исследованиях. — К.: Фитосоцицентр, 1998. — 288 с.
2. Булавацкий В.М. Специальные краевые задачи подземной гидродинамики. — К.: Наук. думка, 1993. — 133 с.
3. Бомба А.Я., Булавацкий В.М., Скопецкий В.В. Нелінійні математичні моделі процесів геогідродинаміки. — К.: Наук. думка, 2007. — 292 с.
4. Булавацкий В.М., Скопецкий В.В. Системный подход к проблеме математического моделирования процесса фильтрационной консолидации // Кибернетика и системный анализ. — 2006. — № 6. — С. 71–79.
5. Ляшко И.И., Демченко Л.И., Мистецкий Г.Е. Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах. — К.: Наук. думка, 1991. — 264 с.
6. Булавацкий В.М., Кривонос Ю.Г., Скопецкий В.В. Некласичні математичні моделі процесів тепло- та масопереносу. — К.: Наук. думка, 2005. — 283 с.
7. Соболев С.Л. Локально-неравновесные модели процессов переноса // Успехи физ. наук. — 1997. — 167, № 10. — С. 1095–1106.
8. Хасанов М.М., Булгакова Г.Т. Нелинейные и неравновесные эффекты в реологических сложных средах. — Москва; Ижевск: Ин-т компьютерных исслед., 2003. — 288 с.
9. Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J. Theory and applications of fractional differential equations. — Amsterdam: Elsevier, 2006. — 523 p.
10. Gorenflo R., Mainardi F. Fractional calculus: integral and differential equations of fractional order // Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics / Eds. A. Carpinteri, F. Mainardi. — Wien: Springer-Verlag, 1997. — P. 223–276.
11. Podlubny I. Fractional differential equations. — New York: Acad. Press, 1999. — 341 p.
12. 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.
13. Чикрий А.А., Матичин И.И. Об аналоге формулы Коши для линейных систем произвольного дробного порядка // Доп. НАН Укр. — 2007. — № 1. — С. 50–55.
14. Бондаренко А.Н., Иващенко Д.С. Методы численного решения краевых задач теории аномальной диффузии // Сиб. электрон. мат. изв. — 2008. — 5. — С. 581–594 (<http://semr.math.nsc.ru>).
15. Лаврик В.И., Бомба А.Я. О приближенном решении одной краевой задачи конвективной диффузии при плановой напорной фильтрации // Мат. методы исслед. физ. полей. — Киев: Ин-т математики АН УССР, 1980. — С. 26–36.
16. Положий Г.Н. Численное решение двумерных и трехмерных краевых задач математической физики и функции дискретного аргумента. — К.: Вища шк., 1962. — 161 с.
17. Глущенко А.А. Один приближенный метод решения нестационарных задач математической физики // Докл. АН УССР. Сер. А. — 1978. — № 6. — С. 490–494.
18. Ляшко И.И., Великоиваненко И.М. Численно-аналитическое решение краевых задач теории фильтрации. — К.: Наук. думка, 1973. — 264 с.
19. Самарский А.А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1977. — 656 с.
20. Таукенова Ф.И., Шхануков-Лафишев М.Х. Разностные методы решения краевых задач для дифференциальных уравнений дробного порядка // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 2006. — 46, № 10. — С. 1871–1881.
21. Богаенко В.А., Булавацкий В.М., Скопецкий В.В. Математическое моделирование динамики геохимических процессов загрязнения водоносных горизонтов // Управляющие системы и машины. — 2009. — № 4. — С. 60–66.

Поступила 16.06.2011