

829

Учреждение Российской академии наук
Научно-исследовательский институт
прикладной математики и автоматизации
Кабардино-Балкарского научного центра РАН

На правах рукописи

Валев

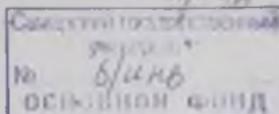
Вендина Алла Анатольевна

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО
РЕЖИМА МИГРАЦИИ ЗАГРЯЗНЕНИЯ
В СРЕДАХ С ФРАКТАЛЬНОЙ СТРУКТУРОЙ

05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Диссертация
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор Сербина Л. И.



Нальчик – 2011

Оглавление

Введение.....	4
Глава 1. Анализ методов математического моделирования нестационарной миграции загрязнений в однородных пористых средах..	19
§1.1. Построение обобщенной математической модели динамики взаимодействия подземных вод со сточными загрязненными водами в природных средах.....	19
§1.2. Модульный метод анализа пространственно-временных свойств динамики загрязнения подземных вод.....	33
§1.3. Исследование математической модели режима загрязнения подземных вод при наличии источника загрязнения постоянной интенсивности.....	40
§1.4. Исследование математической модели режима загрязнения подземных вод при наличии источника загрязнения изменяющейся интенсивности.....	45
Глава 2. Методы математического моделирования нелинейной миграции загрязнений в пористых средах с фрактальной структурой.....	52
§2.1. Построение математической модели нелинейной миграции загрязнения подземных вод в средах с фрактальной структурой.....	52
§2.2. Исследование вопроса корректной постановки модельной задачи медленно и быстро протекающих режимов миграции загрязнения подземных вод	57
§2.3. Построение конечно-разностного аналога для модельного дробного уравнения миграции загрязнений подземных вод.....	63
§2.4. Построение вычислительного алгоритма реализации модельной задачи нелинейной миграции загрязнений.....	68
§2.5. Численно-аналитический алгоритм расчета распределения	

концентрации загрязнения грунтовых подземных вод вблизи источника загрязнения.....	74
§2.6. Математическая модель распределения концентрации загрязнения подземных вод в средах с фрактальной структурой.....	78
Глава 3. Расчетные методы и вычислительный эксперимент нелинейной миграции загрязнений в природных средах.....	83
§3.1. Неявный метод оценки фрактальной размерности по известным характеристикам загрязнения подземных вод.....	83
§3.2. Численная реализация алгоритма расчета концентрации загрязнений фрактального процесса миграции.....	87
§3.3. Расчетно-экспериментальный анализ нелинейных эффектов миграции загрязнения.....	92
§3.4. Расчетно-экспериментальный анализ асимптотического распределения концентрации загрязнения подземных вод.....	97
Заключение.....	102
Литература.....	103
Приложение.....	111
Приложение 1. Алгоритм реализации модельной задачи нелинейной миграции загрязнений.....	111
Приложение 2. Алгоритм расчета концентрации загрязнений фрактального процесса миграции.....	111
Приложение 3. Алгоритм расчета нелинейных эффектов миграции загрязнения.....	115

Введение

Актуальность темы. Центральное место в современных проблемах защиты подземных вод от загрязнения, опасность которого возникает в связи с возможной фильтрацией в водоносные пласты неочищенных стоков и жидких отходов, приобретает проблема исследования процессов взаимодействия чистых природных вод и загрязненных сточных жидкостей под влиянием различных гидродинамических и физико-химических факторов. Реальный режим и характер загрязнения подземных вод определяется сложностью реологии движущихся жидкостей и морфологическим строением пористой среды, а также многообразием процессов взаимодействия между жидкостью и пористой средой, которая представляет сложную динамическую систему, характеризующуюся сложной иерархией неоднородностей различных размеров.

Сложность анализа множества факторов, влияющих на оценку условий и возможных последствий загрязнения подземных вод, с учетом фактора времени привели к широкому применению методов математического моделирования, в основе которых лежат дифференциальные уравнения в частных производных. Значительные успехи изучения пространственно-временных закономерностей процесса загрязнения тесно связаны с использованием численно-аналитических методов решения начально-краевых задач для дифференциальных уравнений в частных производных, как основных, так и смешанного типов.

Вопросы исследования загрязнения подземных вод являются классической проблемой, которые с той или иной полнотой рассматривались многими авторами, как у нас в стране, так и зарубежом. В проведенных ранее исследованиях Ф.М. Бочевера [12], Н.Н. Веригина [29, 30], В.М. Шестакова [72], П.Я. Полубариновой-Кочинной [58], А.Э. Шейдегера [71], Я.А. Папченского [55, 56], Ю.М. Шехтмана [73] и др. задачи нелинейной миграции традиционно решаются на основе линейных представлений о гидрогеологических про-

цессах с упрощающими допущениями, в которых сложная пористая среда моделируется простыми фигурами евклидовой геометрии.

В теоретических исследованиях А.М. Нахушева [49, 50], Л.И. Сербинной [61, 62], В.А. Нахушевой [51, 52], Р.Р. Нигматулина [53, 54], М.Х. Шханукова [74], Р.П. Мейланова [47, 48] особое внимание обращено на то, что нелинейные процессы переноса в реологически сложных средах часто обнаруживают инвариантность (фрактальность) пространственных и временных свойств и их математическое описание требует расширения диапазона измерения гидрофизических характеристик и разработки новых, более эффективных, математических моделей, адекватно отражающих нелинейные свойства фрактальных процессов. Одно из перспективных направлений изучения нелинейных явлений фрактальной миграции связано с успешными попытками применения математического аппарата дробного интегрирования и дифференцирования.

Дифференциальные уравнения дробного порядка представляют собой принципиально новый качественный метод описания, который, обобщая ранее известные результаты, открывает вместе с тем новые возможности изучения механизма нелинейных эффектов, возникающих при асимптотических режимах загрязнения. В связи с этим, работа, выполненная в этом направлении, является актуальной.

Целью диссертационной работы является разработка математических моделей нелинейной миграции загрязнений в подземных водах, учитывающих влияние сложной структуры порового пространства реологических сред, постановка и решение начально-краевых задач для наиболее важных частных случаев, выбор и модификация численно-аналитических методов решения поставленных задач, разработка соответствующего комплекса программ.

Для достижения поставленной цели сформулированы и решены следующие задачи:

- построить математические модели, описывающие нелинейные взаимодействия потока загрязненных подземных вод со сложной структурой по-

рового пространства реологических сред;

- поставить и выяснить вопрос разрешимости начально-краевых задач расчета концентрации загрязнения подземных вод, учитывающих расположение и интенсивность источника загрязнения;

- выбрать и модифицировать методы решения поставленных начально-краевых задач;

- создать комплекс программ для реализации численных методов решения задач нелинейной миграции и исследование полученных результатов;

- проверить адекватность построенной модели загрязнения подземных вод путем сравнения полученных на ее основании результатов численных расчетов с экспериментальными данными, приведенными в литературе;

- провести вычислительные эксперименты с целью исследования влияния геометрии порового пространства на нелинейный процесс при медленном режиме миграции загрязнения подземных вод.

Методы исследования. Для решения поставленных в работе научных задач использованы методы математического моделирования динамических систем, элементы дробного исчисления и классического анализа, методы теории дифференциальных и интегральных уравнений и методы вычислительной математики, специализированные программные среды: Maple, Mathcad, MatLab.

Достоверность полученных в диссертации результатов обусловлена: корректным применением математически обоснованных и физически аргументированных методов анализа нелинейного процесса миграции; строгостью формулировок начально-краевых задач, использованием методов теории дифференциальных уравнений и аппарата дробного интегрирования; хорошей согласованностью приближенно-аналитических результатов и результатов численного эксперимента.

Научную новизну диссертационной работы составляют:

1. Методы математического моделирования нелинейного процесса миграции загрязненных подземных вод в реологически сложных средах, в осно-

ве которых лежат дифференциальные уравнения с дробной производной по времени.

2. Распространение методов численно-аналитического решения начально-краевых задач на модельные дифференциальные уравнения фрактальной миграции.

3. Метод оценки размерности геометрической структуры порового пространства реологических сред, характеризующего нелинейные эффекты динамики загрязнения подземных вод.

4. Эффективные численно-аналитические алгоритмы расчета динамики концентрации загрязнения подземных вод при различных режимах ее протекания.

5. Разработка комплекса программ, с помощью которого могут быть составлены прогнозные оценки нелинейных явлений и эффектов нестационарного режима загрязнения подземных вод, обусловленных сложной структурой порового пространства.

Практическая значимость работы. Предложенные в диссертационной работе методы численного моделирования нелинейного процесса миграции загрязнения подземных вод в реологически сложных средах могут быть использованы при решении практически важных задач мониторинга экологической безопасности и рационального использования земель и водных ресурсов.

Положения, выносимые на защиту.

1. Постановка и решение начально-краевых задач определения динамики распространения загрязнения подземных вод, описываемой математической моделью, в основе которой лежит дифференциальное уравнение с дробной производной по времени, учитывающей влияние сложной структуры порового пространства на процесс миграции.

2. Аналитические методы анализа пространственно-временных свойств нелинейного процесса загрязнения подземных вод в реологических средах, в основе которых лежат модифицированные способы решения корректно по-

ставленных начально-краевых задач, учитывающих действие источников загрязнения различной интенсивности и расположения.

3. Результаты численного анализа влияния сложной геометрии структуры порового пространства на нелинейный характер загрязнения подземных вод в реологических средах.

4. Асимптотические методы оценки нелинейных эффектов нестационарного режима загрязнения подземных вод, позволяющих определять время и область стабилизации процесса.

Апробация работы. Результаты докладывались на ежегодных научных конференциях профессорско-преподавательского состава Северо-Кавказского технического университета (2006 – 2010 гг., г. Ставрополь); на заседаниях Научно-исследовательского семинара НИИ ГИМА КБНЦ РАН по современному анализу, информатике и физике (2010, 2011 гг., г. Нальчик); на III Международной конференции «Нелокальные краевые задачи и родственные проблемы математической биологии, информатики и физики» (2006 г., г. Нальчик); на VII Международной научно-практической конференции «Методы и алгоритмы прикладной математики в технике, медицине, экономике» (2007 г., г. Новочеркасск); на V, VI, VIII Школах молодых ученых «Нелокальные краевые задачи и проблемы современного анализа и информатики» (2008 – 2010 гг., г. Нальчик); на I Всероссийской конференции молодых ученых «Математическое моделирование фрактальных процессов, родственные проблемы анализа и информатики» (2010 г., п. Терскол); на II Международном Российско-Казахском симпозиуме «Уравнения смешанного типа, родственные проблемы анализа и информатики» (2011 г., г. Нальчик).

Публикации. Основные результаты диссертации изложены в 16 научных работах [13 – 28], 3 из которых [15, 19, 26] опубликованы в журналах из перечня ВАК РФ, рекомендованных для опубликования основных результатов кандидатских диссертаций, 13 – в сборниках всероссийских и международных конференций.

Личный вклад автора. Все представленные в диссертационной работе

результаты получены лично соискателем либо при его непосредственном участии.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, разбитых на параграфы, заключения, списка литературы и приложения. Объем работы 116 стр.

Содержание работы

Во **введении** обоснованы актуальность темы исследования и ее практическая значимость, сформулированы цель и задачи работы, определена новизна и обоснована достоверность полученных результатов, изложены основные положения диссертационной работы по главам.

В **первой главе** рассматриваются, используя традиционные методы теории массопереноса, основные вопросы и особенности математического моделирования нестационарного процесса взаимодействия подземных вод со сточными водами в реологических средах.

Параграф 1.1 посвящен построению и исследованию качественных и структурных свойств базовой математической модели неустановившегося процесса миграции загрязненных подземных вод в почвах и почвогрунтах. Здесь сформулированы основные теоретические положения. Указаны важнейшие параметры, описывающие внутреннюю структуру потока и описан характер его взаимодействия с пористой средой. Особое внимание обращено на то, что основной характеристикой, определяющей нелинейный характер миграции, является сложная геометрия порового пространства.

Вывод базового дифференциального уравнения миграции загрязнений примесями подземных вод основан на использовании принципа локальности, который предполагает, что основные законы механики сплошных сред справедливы не только для всей системы в целом, но и для любой ее части, какой бы она малой не была. Это позволяет в интегральных законах сохранения, совершая предельный переход, при стремлении области интегрирования к нулю, получить эквивалентные законы сохранения локальных процессов ми-

грации в форме следующих дифференциальных уравнений в частных производных:

$$v_x = -k \frac{\partial h}{\partial x}, \quad v_y = -k \frac{\partial h}{\partial y}; \quad \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} = \frac{\partial(m\rho)}{\partial t};$$

$$u_x = -v_x c + D^* \frac{\partial c}{\partial x}, \quad u_y = -v_y c + D^* \frac{\partial c}{\partial y}; \quad m \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{\partial N}{\partial t}; \quad (0.1)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = f(c; N; \gamma_i). \quad (0.2)$$

Здесь $v = v(x; y; t)$ – скорость фильтрационного потока; k – коэффициент фильтрации; $h = h(x; y; t)$ – напор потока подземных вод в момент времени t и в точке $(x; y)$; $\rho = \rho(x; y; t)$ – плотность потока; u_x, u_y – компоненты массовой скорости движения загрязнений; $c = c(x; y; t)$ – концентрация загрязнений подземных вод; m – пористость; $D^* = D^*(x; y; t)$ – дисперсия; N – сорбционная емкость пористой среды; γ_i – коэффициенты скорости кинетики взаимодействия и сорбционного равновесия.

Для анализа нестационарного процесса миграции загрязнений подземными водами, в силу уравнений (0.1), (0.2), предлагается обобщенное уравнение

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = \operatorname{div}[D^* \operatorname{grad} c] - \operatorname{div}[vc] - \frac{\partial N}{\partial t}. \quad (0.3)$$

Нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка параболического типа (0.3) является базовым уравнением для решения многих прикладных задач. Оно, в рамках справедливости эмпирических законов Дарси и Фурье – Фика, описывает процесс изменения во времени концентрации загрязнений в какой-либо точке в результате разности переноса загрязнений фильтрационным потоком и гидродинамической дисперсии при наличии растворения и поступления в раствор солей и примесей, содержащихся в почвогрунтах.

В параграфе 1.2 для анализа пространственно-временных свойств не-

линейного процесса загрязнения подземных вод в реологических средах рассматривается модульный метод исследования. Предлагаемый альтернативный модульный подход исследования математической модели нелинейной миграции (0.3), опираясь на общность математической постановки задачи, предполагает предварительное, последовательное изучение упрощенных модельных задач миграции, которые строятся в соответствии с принципами целевой направленности, иерархичности и системности. Он позволяет с единых позиций получить информацию о характере каждого решения и о свойствах всей системы в целом. Алгоритмическая идея модульного анализа, реализованная применительно к задачам нелинейной миграции для уравнения (0.3), сводит его к рассмотрению следующих модельных уравнений миграции загрязнения:

– уравнение конвективного переноса

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = -\operatorname{div}[uc] - \frac{\partial N}{\partial t}; \quad (0.4)$$

– уравнение диффузии

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = \operatorname{div}[D^* \operatorname{grad} c] - \frac{\partial N}{\partial t}; \quad (0.5)$$

– уравнение конвективно-диффузионного переноса

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = \operatorname{div}[D^* \operatorname{grad} c] - \operatorname{div}[uc]; \quad (0.6)$$

– одномерное линейное уравнение динамики миграции загрязнения

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} + \beta(c_m - c). \quad (0.7)$$

Следует отметить, что предлагаемые модули (0.4) – (0.7), базирующиеся на различных классах гипотетических моделей сравнения, как правило, одномерных задач миграции, решаются с помощью стандартных, экономичных алгоритмов и в большинстве случаев могут служить тестами для сложных численных методов расчетов нелинейной миграции.

В параграфе 1.3 построен на базе модельного уравнения (0.7) в случае, когда концентрация загрязнения подземных вод меняется по экспоненциаль-

ному закону $c(x;t) = u(x;t)e^{\alpha x - \eta t} + c_m$, класс линейных математических моделей одномерного распространения загрязненных подземных вод, в основе которого лежит классическое дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (0.8)$$

Математическое моделирование процесса загрязнения подземных вод в реологических средах, с учетом постоянно действующих на границе области источников загрязнения, приводит к постановке следующей начально-краевой задачи: найти в слое $0 \leq x \leq l$ для всех моментов времени $t \in [0; T]$, решение $u = u(x;t)$ уравнения (0.8), удовлетворяющее начально-краевым условиям:

$$u(x;0) = (c_1 - c_m)e^{-\alpha x}, \quad u(0;t) = (c_2 - c_m)e^{\eta t}, \quad u(l;t) = (c_3 - c_m)e^{-\alpha l + \eta t}. \quad (0.9)$$

Основным результатом этого параграфа является развитие фундаментального метода Фурье решения начально-краевой задачи (0.8), (0.9), который можно сформулировать в виде следующего утверждения.

Пусть $\xi = \frac{\alpha l}{\pi}$, $\tau = \frac{\pi^2 D^*}{l^2} t$, $\eta = \frac{\eta l^2}{\pi^2 D^*}$, $p = \frac{c_m - c_3}{c_m - c_2}$, тогда обобщенное

решение задачи (0.8), (0.9) существует и оно представимо в виде

$$\begin{aligned} u(x;t) = & -\frac{2}{\pi}(c_m - c_1) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k^2}{k^2 + \xi^2} \left[1 - (-1)^k e^{-\pi \xi} \right] \sin \frac{\pi k x}{l} e^{-k^2 \tau} - \\ & -\frac{2}{\pi}(c_m - c_2) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k \left[1 - (-1)^k p e^{-\pi \xi} \right]}{k^2 + \eta} \sin \frac{\pi k x}{l} \left(e^{\eta \tau} - e^{-k^2 \tau} \right). \end{aligned} \quad (0.10)$$

Параграф 1.4 посвящен анализу распространения загрязненных подземных вод в случае, когда на ее границе существуют действующие источники загрязнения, интенсивность которых изменяется с течением времени. Математическое описание данной схемы режима загрязнения подземных вод сводится к постановке локальной начально-краевой задачи

$$c(x;0) = \varphi(x), \quad c(0,t) = \psi_1(t), \quad c(l;t) = \psi_2(t). \quad (0.11)$$

для модельного дифференциального уравнения (0.7) в области

$$\Omega = \{(x, t) : 0 < x < l, 0 < t < \infty\}.$$

Для выяснения нелинейных особенностей процесса миграции загрязненных подземных вод в полубесконечной области пористой среды, используя метод преобразования Лапласа, в случае когда $\xi = \frac{\omega x}{D^*}$, $\theta = \frac{\nu^2 t}{D^* m}$,

$$\beta_1 = \frac{\beta \cdot D^*}{\nu^2}, \quad l_1 = \frac{\nu l}{D^*}, \quad \text{получено решение начальной краевой задачи (0.10),}$$

(0.11), представимое следующей формулой

$$c(\xi; \theta) = \frac{2\pi e^{-\frac{1}{2}\xi}}{l_1^2} \sum_{n=1}^{\infty} n \sin \frac{\pi \xi}{l_1} \left[\int_0^{\theta} u_1(\theta - \rho) e^{-\mu \rho} d\rho - (-1)^n e^{\frac{1}{2}l_1 \theta} \int_0^{\theta} u_2(\theta - \rho) e^{-\mu \rho} d\rho \right] +$$

$$+ \frac{2e^{\frac{1}{2}\xi}}{l_1} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\mu \theta} \sin \frac{\pi \xi}{l_1} \int_0^l u_0(\tau) e^{-\frac{1}{2}\tau} \sin \frac{\pi \tau}{l_1} d\tau + c_m,$$

$$\text{где } \mu = \frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} + \beta_1 + \frac{1}{4}.$$

Вторая глава посвящена изучению пространственно-временных закономерностей формирования нелинейных явлений и эффектов, возникающих при асимптотических режимах загрязнения подземных вод в реологических средах со сложной топологией порового пространства, интерпретируемых как фрактальные множества. Фундаментальной основой для выявления качественных особенностей и количественных характеристик этих явлений служат дифференциальные уравнения дробного порядка и связанные с ними начально-краевые условия. При построении физически обоснованных модельных уравнений, адекватно учитывающих влияние пористой среды на нелинейный характер движения, существенно используется регуляризованный оператор Римана – Лиувилля ∂_{0t}^{α} (или оператор дробного порядка α в смысле Капуто) по временной переменной t [68, стр. 170], определяемый формулой

$$\partial_{0t}^{\alpha} \varphi = D_{0t}^{\alpha-n} \frac{\partial^n \varphi}{\partial \tau^n}, \quad n-1 \leq \alpha \leq n, \quad n = 1, 2, \dots,$$

где D_{0t}^α – оператор дробного интегро-дифференцирования в смысле Римана – Лиувилля [68, стр. 158] порядка α с началом в начальный момент времени $t=0$, а с концом в текущий момент времени $t>0$, который действует на функцию $\varphi(t) \in L[0; T]$ по формуле

$$D_{0t}^\alpha \varphi(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \int_a^t \frac{\varphi(\tau) d\tau}{(t-\tau)^{\alpha+1}}, & \alpha < 0, \\ \frac{d^{[\alpha]+1}}{dt^{[\alpha]+1}} D_{0t}^{\alpha-[\alpha]-1} \varphi, & \alpha \geq 0. \end{cases}$$

Здесь $\Gamma(x)$ – гамма-функция Эйлера; $[\alpha]$ – целая часть числа α .

В параграфе 2.1 на основе модификации классической схемы, в основе которой лежат фундаментальные законы сохранения, с помощью введенного понятия фрактальной скорости изменения концентрации загрязнения $c'_t \approx D_{0t}^\alpha c(x; \tau)$, построено модельное уравнение нелинейной миграции, учитывающее сложные взаимодействия между жидкостью и пористой средой, обусловленные масштабной инвариантностью процесса. Для исследования фрактального процесса загрязнения подземных вод в пористых средах предлагается дифференциальное уравнение дробного порядка вида

$$mD_{0t}^\alpha c = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_\alpha(x; t) \frac{\partial c}{\partial x} \right] - \frac{\partial[\nu(x; t)c]}{\partial x} + \beta(c_m - c), \quad (0.12)$$

где $D_\alpha(x; t)$ – коэффициент фрактальной диффузии; $\nu(x; t)$ – фрактальная скорость, а сопутствующие ему локальные и нелокальные условия заданы формулами:

$$\lim_{t \rightarrow 0} D_{0t}^{\alpha-1} c = c_0(x), \quad D_\alpha \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = D_{0t}^{\alpha-1}(0; \tau), \quad \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=l} = 0. \quad (0.13)$$

Вопрос исследования медленно изменяющегося во времени режима миграции загрязнения подземных вод, учитывающего влияние фрактальной структуры порового пространства, сводится к исследованию вопроса разрешимости модельной нелокальной начально-краевой задачи (0.12), (0.13).

В параграфе 2.2, используя метод энергетических неравенств, доказа-

на справедливость априорной оценки

$$\|c_*\|_0^2 \leq M(\|\beta\|_{2,\Omega}^2 + \|c_*(x;0)\|_0^2), \quad (0.14)$$

где $c_* = D_{0t}^{\alpha-1}(x; \tau)$, а $M > 0$ – известное число.

Из априорной оценки (0.14) следует единственность и непрерывная зависимость решения нелокальной задачи (0.12), (0.13) от входных данных.

В параграфе 2.3 разработан, следуя общей теории разностных схем, модифицированный интегро-интерполяционный метод построения разностных аналогов для дифференциальных операторов произвольного порядка. Задаче (0.12), (0.13) на пространственной сетке $\bar{\omega}_{hk} = \{(ih \times j\tau), i = 0, 1, 2, \dots, n, j = 0, 1, 2, \dots, s\}$ поставлено в соответствии семейство разностных схем:

$$m\Delta_{0t}^{\alpha}c = \Lambda(\sigma\bar{c} + (1-\sigma)c) + \beta c_m + c(x;0)/\tau^{\alpha}\Gamma(1-\alpha), \quad (0.15)$$

$$(kc_x^-)_{x,i} = \frac{1}{h^2}[k_{i+1}(c_{i+1} - c_i) - k_i(c_i - c_{i-1})], \quad (vc)_x = \frac{1}{h}[v_i c_i - v_{i-1} c_{i-1}], \quad (0.16)$$

где $\Lambda c = (kc_x^-)_x - (vc)_x - \beta c$, $\Delta_{0t}^{\alpha}c = \frac{1}{\tau\Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=1}^{j+1} (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s+1}^{1-\alpha})(c_i^s - c_i^{s-1})$ – разностный аналог производной Капуто порядка α .

Пусть $0 < w_1 < D_{\alpha}(x;t) < w_2$, $v(x;t) < w_3$, $\beta(x;t) < w_4$, $w_5 = \max_i \{w_i\}$, то-

гда условие $\tau^{\alpha} \leq \frac{(2-2^{1-\alpha})h^2}{2w_5\Gamma(2-\alpha)(1-\sigma)}$ достаточно для устойчивости разностной схемы (0.15), (0.16) по начальным данным.

В параграфе 2.4 рассмотрен вопрос аппроксимации начально-краевых условий, в соответствии с которым нелокальная начально-краевая задача (0.12), (0.13) эквивалентно редуцирована к следующей разностной задаче: найти в области $\bar{\omega}_{hk}$ функцию $\bar{c}_i = c(x_i; t_{j+1})$, удовлетворяющую алгебраическому уравнению (0.15) и нелокальным начально-краевым условиям:

$$c_i^0 = f(x_i), \quad \frac{\bar{c}_n - \bar{c}_{n-1}}{h} = 0, \quad \bar{c}_0 = \frac{\bar{k}_0 \Gamma(2-\alpha) \bar{c}_1 + h \sum_{s=1}^l c_0^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s-1}^{1-\alpha})}{\bar{k}_0 \Gamma(2-\alpha) - h t_1^{1-\alpha}}. \quad (0.17)$$

Основным результатом этого параграфа является решение модифицированным методом прогонки дискретной задачи (0.15) – (0.17). Анализ полученного решения позволяет сделать вывод о том, что учет нелокальности по времени приводит к возникновению скачкообразных возмущений концентрации в потоке грунтовых вод.

В параграфе 2.5. вопрос исследования распределения концентрации загрязнения подземных вод вблизи от источника загрязнения сводится к исследованию частного случая нелокальной начально-краевой задачи для уравнения (0.12): найти регулярное в области $\Omega = \{(x;t): 0 \leq x \leq l, 0 < t < \infty\}$ решение $c = c(x;t)$ уравнения

$$D_{0t}^\alpha c = a \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - b \frac{\partial c}{\partial x} + \beta(c_m - c), \quad (0.18)$$

удовлетворяющее условиям:

$$c(0;t) = \varphi(t), \quad c'_x(0;t) = \psi(t), \quad 0 \leq t \leq T. \quad (0.19)$$

Основным результатом этого параграфа является реализованное в виде эффективного аналитического алгоритма высокой точности приближенное решение начально-краевой задачи (0.19) для уравнения (0.18) в классе ограниченных при $t \rightarrow 0$ функций.

В параграфе 2.6 получено, что асимптотическое распределение самоподобного во времени фрактального процесса загрязнения подземных вод определяется с помощью степенного ряда

$$c(x;t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n(x) t^{\alpha(n+1)-1}}{\Gamma(\alpha + n\alpha)} = \frac{a_0(x) t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} + \frac{a_1(x) t^{2\alpha-1}}{\Gamma(2\alpha)} + \frac{a_2(x) t^{3\alpha-1}}{\Gamma(3\alpha)} + \dots, \quad (0.20)$$

коэффициенты $a_n(x)$ которого определяются формулами:

$$a_0(x) = \Gamma(\alpha) c_0(x), \quad a_n(x) = \frac{1}{m^n} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^{2n-k} D_\alpha^{n-k} \nu^k}{\Gamma(\alpha + n\alpha)} \binom{k}{n} \frac{\partial^{2n-k} a_0(x)}{\partial x^{2n-k}}.$$

В **третьей** главе с помощью специализированных программных сред (Maple, Mathcad, MatLab) проводится вычислительный эксперимент основных количественных характеристик миграции загрязнения подземных вод.

В **параграфе 3.1** на основе аналитического алгоритма (0.10) расчета концентрации загрязнения подземных вод при наличии источника загрязнения, интенсивность которого постоянна, пользуясь общими методами решения обратных задач, получено модельное неявное представление определения коэффициента d_f фрактальной размерности пористой среды

$$c(l_*) = \frac{2c_2 e^{l_*/2d_f} \operatorname{sh}[(l-l_*)/2d_f] + c_3 e^{(l-l_*)/2d_f} \operatorname{sh}(l_*/2d_f)}{2\operatorname{sh}(l/2d_f)}.$$

В **параграфе 3.2** проведен вычислительный эксперимент решения начально-краевой задачи

$$c(x; 0) = c_0(x), \quad v(c(0; t) - c^*) = D_\alpha \frac{\partial c(0; t)}{\partial x}, \quad \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=l} = 0$$

для нелокального уравнения фрактальной миграции с дробной производной Капуто по времени

$$m \partial_{0t}^\alpha c(x; \tau) = D_\alpha \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} - \beta(c - c_m) - \frac{mc(x; 0)}{t^\alpha \Gamma(2 - \alpha)}.$$

Графические результаты численного расчета, реализованные в системе Maple для различных значений параметра $\alpha \in (0; 1)$, позволяют сделать вывод, что распределение концентрации загрязнений с уменьшением параметра α носит нелинейный затухающий во времени характер.

В **параграфе 3.3** для анализа временной зависимости процессов кинетики, возникающих в процессе фрактальной миграции предлагаются модельные дифференциальные уравнения с дробной производной по времени:

$$D_{0t}^\alpha N = \beta(c - \gamma N), \quad D_{0t}^\alpha N = \beta c, \quad D_{0t}^\alpha N = \frac{1}{\gamma} D_{0t}^\alpha c, \quad \alpha \in (0, 1).$$

Основным результатом этого параграфа является качественный анализ влияния нелинейных эффектов сорбции на процесс распространения загряз-

нения потоком подземных вод в случае нелинейного сорбционного равновесия, который проведен при постоянных значениях кинетических параметров миграции.

В **параграфе 3.4** рассматриваются вопросы графической реализации решения (0.20) задачи долгосрочного прогноза фрактальной миграции. Доказана гипотеза о степенном характере начального распределения концентрации загрязнения подземных вод.

Графическая интерпретация функциональной зависимости концентрации загрязнений при медленных режимах миграции показывает, что фрактальный параметр α является «управляющим» параметром, определяющим характер распределения концентрации загрязнения в потоке подземных вод в реологически сложных средах.

В **приложении** приведен листинг разработанного программного продукта в среде Maple и экранные формы выходных данных.

Глава 1. Анализ методов математического моделирования нестационарной миграции загрязнений в однородных пористых средах

§1.1. Построение обобщенной математической модели динамики взаимодействия подземных вод со сточными загрязненными водами в природных средах

Исследования процессов миграции загрязнений в водонасыщенных природных средах занимают центральное место в решении ряда проблем защиты подземных вод от загрязнений, опасность которого возникает в связи с возможной фильтрацией в водоносные пласты неочищенных бытовых стоков и жидких отходов промышленных производств. В силу того, что вода является хорошим растворителем многих веществ и различных примесей, водорастворимые вещества, часто токсичные, содержащиеся в отходах производства, через определенное время обнаруживаются в подземных водах, вместе с которыми они мигрируют на большие расстояния, загрязняя окружающую среду. В результате взаимодействия подземных вод с загрязненными сточными водами наблюдается изменение их физических, химических и биологических свойств. Одной из основных задач подземной экологии является прогноз взаимодействия чистых природных подземных вод с загрязненными вредными веществами и примесями под влиянием источников загрязнения. Основой количественных методов оценки степени и характера явлений кинетики их взаимодействия служат аналитические и численные методы решения начально-краевых задач для дифференциальных уравнений, лежащих в основе динамики загрязнения в водоносных пластах, для построения которых используются некоторые общие закономерности и особенности нелинейной фильтрации в пористых средах.

При воздействии техногенных факторов в подземные воды попадают

различные загрязняющие вещества и примеси, поэтому режим подземных вод формируется под влиянием многих природных факторов и источников загрязнения, роль и значения которых различны и зависят от конкретных гидрогеологических условий. Загрязненная таким образом вода представляет собой раствор, содержащий обычно несколько растворенных, эмульгированных или взвешенных компонентов. При поступлении в водонасыщенные грунты загрязненные воды взаимодействуют с чистыми подземными водами и породами водоносных пластов. Это взаимодействие протекает в условиях высокой гетерогенности сложной структуры порового пространства и активного влияния биологических компонентов почвы. Оно сопровождается переносом импульса энергии и связано с электрическими, магнитными и температурными полями водонасыщенных сред. Интенсивность и характер взаимодействия в системе: фильтрующиеся загрязненные воды – пористые водонасыщенные среды – чистые подземные воды определяются комплексом различных взаимосвязанных физико-химических процессов. Закономерности одновременно происходящих явлений и процессов в такой многофакторной системе очень сложны, в частности они включают дисперсию, взаиморастворения в зоне контакта и разнообразные по своей природе сорбционные явления, растворения фильтрующихся пород, химические реакции, способные вызвать удаление из подземных вод растворенных веществ или, напротив, обогащение теми же компонентами.

Основной вклад в формирование процесса загрязнения подземных вод и водоносных пластах создает процесс совместного пространственного перемещения загрязняющих веществ и примесей грунтовыми водами. В результате процесса взаимодействия чистых природных подземных вод с загрязненными, называемого миграцией, в водонасыщенных средах образуются более или менее крупные ореолы загрязнений, которые со временем увеличиваются в размерах, захватывая участки распространения чистых природных подземных вод. Основной задачей исследования процесса миграции загрязнений подземными водами является определение концентрации загрязняющих ве-

ществ во времени и по пути их распространения, то есть оценка изменения кинетики этих процессов в потоке подземных вод. Количественные методы оценки загрязнения подземных вод непосредственно связаны с установлением зависимости между размерами области, контурными давлениями, структурой природной пористой среды и физическими свойствами мигрирующих веществ.

Наиболее существенным фактором миграции является перемещение загрязнений потоком подземных вод под воздействием сил тяжести, давления и сил сопротивления, называемое конвекцией. Поступающие в водоносный пласт загрязненные воды, под действием градиента напора, вытесняют чистые подземные воды и перемещаются в пористой среде по направлению общего движения потока подземных вод. Влияние конвективного переноса на процесс миграции определяется интенсивностью и характером фильтрации жидкости в пористых средах.

Рассмотрим режим движения подземных вод при полном насыщении пористой среды. Будем считать, что при движении воды в грунте происходит растворение содержащихся в нем солей и примесей. Движение воды и растворенных в ней солей и загрязняющих примесей происходит под действием сил тяжести, давления, диффузии и сопротивления движению, включая вязкость и внешнее трение. Силы инерции, а также упругие силы в воде и скелете грунтов незначительны, поэтому ими пренебрегаем. Почвы и почвогрунт являются средой, на фоне которой происходит явление конвективного переноса. На характере и скорости конвективного переноса самым существенным образом сказываются состав, строение водоносных сред и площадь контакта между водой и породой. Одной из важнейших геометрических характеристик почвогрунтов, оказывающих значительное влияние на интенсивность и характер движения конвективного переноса, является пористость среды [63]. Пористость, которая характеризует часть пор, заполненных свободной водой и открытых для фильтрации, называется активной пористостью. Она определяется как отношение объема пустот V_m к объему всего грунта V :

$$m = \frac{V_m}{V}$$

Активная пористость m изменяется в пределах $0 \leq m \leq 1$, при $m = 0$ почвогрунт непроницаем, а при $m = 1$ жидкость заполняет весь объем.

Основной характеристикой конвективного переноса загрязнений подземными водами в пористой среде является скорость течения в точке, под которой понимается средняя скорость движения жидкости по всему объему. Средняя по объему пор скорость движения, определяемая, как отношение расхода фильтрационного потока к площади пор его поперечного сечения, называется скоростью фильтрации

$$v_\phi = \frac{Q}{S}, \quad (1.1.1)$$

Скорость фильтрации является статистической средней действительных скоростей v движения подземных вод в поровом пространстве. Эти две скорости связаны соотношением

$$v = \frac{v_\phi}{m}$$

В естественных условиях подземные воды под влиянием силы тяжести (гравитации) находятся в непрерывном движении. Работа этих сил, то есть потеря энергии, направлена на преодоление сил сопротивлений, зависящих от свойств породы и жидкости. Перемещение жидкости по водоносному пласту от повышенных участков к пониженным имеет сложный разнообразный характер и качественный состав, который отличается изменчивостью на отдельных участках водонасыщенной среды и испытывает колебания в пространстве и времени. Фундаментальную роль в описании процессов движения потока подземных вод в водонасыщенных средах выполняет закон Дарси, в соответствии с которым объем воды Q , протекающий через слой толщины l и площадью S под действием градиента напора

$$h = \frac{P}{\rho g} + z, \quad (1.1.2)$$

выражается линейной зависимостью

$$Q = \frac{kSh}{l}. \quad (1.1.3)$$

Здесь $h = h(p; z)$ – величина напора; ρ, p – соответственно плотность и давление жидкости; g – ускорение силы тяжести; z – путь потока. В случае несжимаемой жидкости полагают $\rho = const$.

Из формулы (1.1.3), учитывая введенное понятие скорости движения подземных вод (1.1.1), следует, что ламинарный поток процесса фильтрации в пористых средах под действием градиента напора $J = \frac{h}{l}$ определяется линейной зависимостью скорости фильтрации от потери напора вдоль потока

$$v = -kgrad h = -kJ, \quad (1.1.4)$$

где k – коэффициент пропорциональности, называемый коэффициентом фильтрации; $J = grad h$ – градиент напора, характеризующий его потерю. Знак минус в (1.1.4) указывает на то, что напор в направлении движения убывает.

Коэффициент фильтрации k характеризует свойства пористой среды и жидкости. При градиенте напора, равном единице, он равен скорости фильтрации. Зная коэффициент фильтрации можно определить коэффициент проницаемости K , характеризующий свойства пористой среды области миграции, то есть

$$K = \frac{k\mu}{\rho},$$

где μ – вязкость.

Естественные и загрязненные потоки характеризуются исключительно большим разнообразием, а во многих случаях и сложностью взаимодействия. Основной закон фильтрации (1.1.4) и его обобщения, связывая между собой вектор скорости фильтрации и градиент фильтрационного давления, служат фундаментальной основой при математическом моделировании динамики подземных вод. Самой общей формой фильтрационного потока является пространственный поток подземных вод, изменяющийся во всех направлениях.

Анализ пространственных потоков чрезвычайно сложен, а условия, требующие такого представления потока в гидрогеологической практике, встречаются достаточно редко. Поэтому обычно изучение пространственных потоков, путем идеализации и схематизации гидрогеологических условий, сводится к упрощению реального процесса движения. Основным принципом упрощения потока подземных вод заключается в пренебрежении факторами, незначительно влияющими на расход потока и его изменение в природных условиях.

Основополагающую роль в теории миграции играют плоские двумерные потоки. Они представляют собой модели самых распространенных в природе фильтрационных течений, которые характеризуются тем, что вектор скорости в прямоугольной декартовой системе координат изменяется по двум направлениям. Во всех сечениях, параллельных этой плоскости, поток сохраняет свои параметры.

В общем случае фильтрационный поток в условиях его физического взаимодействия с пористой средой, может быть описан двумерными уравнениями составляющих скоростей фильтрации

$$v_x = -k \frac{\partial h}{\partial x}, \quad v_y = -k \frac{\partial h}{\partial y} \quad (1.1.5)$$

и уравнением неразрывности

$$\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} = \frac{\partial(m\rho)}{\partial t}. \quad (1.1.6)$$

Здесь x, y – декартовы координаты; v_x, v_y – составляющие скорости движения подземных вод в пористой среде; $\rho v_x, \rho v_y$ – фильтрационные расходы.

В основе расчетной схемы (1.1.5), (1.1.6) динамики потока подземных вод лежат представления о том, что плоское течение подземных вод происходит под действием капиллярных и гравитационных сил, характеристики которых связаны уравнением неразрывности, а фильтрационные процессы протекают в предположении справедливости закона Дарси. Наличие в потоке

подземных вод загрязняющего вещества учитывается свойствами жидкости и пористой среды: пористостью m и плотностью ρ при некотором давлении p . Кинематическая структура фильтрационного потока определяется изменяющимся во времени действием напоров (давлением) и скоростей.

В общем случае нестационарное движение гравитационного потока подземных вод с достаточным приближением, предполагая известной геометрию порового пространства и используя закон сохранения масс, в силу уравнений (1.1.5), (1.1.6), описывается нелинейным дифференциальным уравнением параболического типа.

Формирование процесса миграции загрязнений в пористых средах происходит различными путями. Одним из важнейших факторов процесса переноса является начальная концентрация загрязняющих веществ и примесей. В том случае, когда влияние градиента концентрации в фильтрационном потоке является преобладающим, возникает возможность распространения загрязнений при отсутствии фильтрационного течения. Распространение загрязнений в потоке подземных вод, происходящее только под влиянием градиента концентрации, осуществляется силами молекулярной диффузии. Для жидкостей разных плотностей это движение является преобладающим. Процесс, осуществляемый силами молекулярной диффузии в пористых средах, подчиняется тем же закономерностям, что и в свободной среде. Диффузионный поток Q_D через поперечное сечение S водонасыщенного пласта длины l , в соответствии с законом Фика, пропорционален градиенту концентрации c загрязнений и направлен в сторону ее убывания

$$Q_D = -D_m S \text{grad} c .$$

где D_m – коэффициент молекулярной диффузии; c – концентрация загрязнений.

Величина конвективно-фильтрационного потока определяется формулой

$$Q_k = \nu c .$$

Распространение в пористых средах загрязненных подземных вод предполагает вытеснение одной жидкости другой. В условиях наибольшего развития конвективного переноса граница между загрязненными и чистыми водами теоретически имеет вид резкого, так называемого, «поршневого фронта», перемещающегося со средней скоростью фильтрационного потока и разделяющего воды с различными концентрациями загрязнений. Однако по пути фильтрации, под влиянием градиентов концентрации вещества, температуры, давления и силы тяжести, возникают явления взаиморастворения и перемешивания загрязняющих веществ. Эти процессы, возникающие при значительных скоростях фильтрации, усиливаются, в связи с наличием дополнительного обмена, обусловленного неоднородностью поля скоростей фильтрационного потока и неоднородностью фильтрационных свойств пористых сред. Обычно в процессах вытеснения вместо четкого фронта обнаруживается зона смешивания, в которой концентрации загрязнений изменяются. Формирование зоны смешивания в первую очередь связано с фильтрационной дисперсией. Рассеяние загрязнений, возникающее в результате совместного взаимодействия процессов диффузии и конвекции загрязнений, принципиально отличается от диффузии тем, что, являясь следствием фильтрации, оно оказывает существенное влияние на перенос вещества.

Результаты многочисленных теоретических и экспериментальных исследований показывают, что гидродисперсия определяется теми же зависимостями, что и молекулярная диффузия. Общая массовая скорость движения вещества под влиянием диффузии и фильтрации выражается формулой

$$Q = Q_D + Q_k = \nu c - D^* \text{grad}c,$$

то есть полный поток складывается из конвективного переноса вещества Q_k со средней скоростью фильтрации ν и диффузионного переноса Q_D с коэффициентом гидродисперсии D^* .

Коэффициент гидродисперсии D^* , учитывая явления молекулярной диффузии и гидродисперсии, отражает механизм рассеяния загрязняющих

веществ в процессе конвективного переноса. Установлено, что он существенно зависит от концентрации загрязнений и скорости фильтрационного потока, а также от сложной геометрии порового пространства. Для коэффициента конвективной диффузии обычно принимается линейная зависимость от скорости фильтрации ν вида

$$D^* = D_M + \lambda \nu, \quad (1.1.7)$$

где λ – параметр рассеяния, характеризующий структуру потока и геометрию порового пространства.

Коэффициент гидродисперсии D^* для сильно пористых агрегированных природных сред определяется выражением более общего вида

$$D = D_M + \lambda \nu + f \nu^2, \quad (1.1.8)$$

где f – числовой коэффициент, характеризующий направление скорости фильтрации.

Конвективная диффузия загрязнений в подземных водах вызывает изменения скорости их движения в пористых средах: при уменьшении концентрации загрязнений в направлении фильтрационного потока их скорость увеличивается, а против этого направления – уменьшается. Процесс перемещения загрязнений в противоположную сторону направления потока движения подземных вод, обусловленный реологическими свойствами жидкостей и структурой порового пространства, приводит к нелинейным эффектам, которые нарушают условия термодинамического равновесия. Обобщением закона Фика на неравновесные процессы массопереноса является выражение

$$Q = -D^* \text{grad} c - \tau \frac{\partial Q}{\partial t},$$

где τ – время релаксации.

Для исследования потока конвективной диффузии в неоднородных водоносных средах при наличии релаксационных явлений, учитывая обобщенный закон Фика, используется модельное уравнение

$$Q = \nu c - D^* \text{grad} c - \lambda \frac{\partial Q}{\partial x} - \tau \frac{\partial Q}{\partial t}, \quad (1.1.9)$$

которое учитывает изменение концентрации во времени в некоторой точке потока, уносимой течением. Дифференциальное уравнение (1.1.9) выражает основной закон диффузии Фика в пористых средах при наличии конвекции.

К физико-химическим процессам, существенно осложняющим миграцию загрязнений, относятся сорбция растворенных в воде веществ и растворение водой отдельных компонентов водонасыщенных пород [43]. Сорбционные процессы характеризуются, прежде всего, сорбционной емкостью пород N , которая представляет собой предельное количество сорбируемого в данных условиях вещества к единице объема грунта. Обычно уравнение изотермы сорбции записывают в виде неявной функции

$$N = f(c; N; \gamma_i), \quad (1.1.10)$$

где γ_i – коэффициент скорости растворения, который характеризует условия взаимодействия вещества в растворе в статических условиях равновесия.

В случае, когда скорость сорбционного процесса ограничивается скоростью конвективно-диффузионной миграции вещества, наиболее часто в качестве уравнений кинетики сорбции в водонасыщенных средах используется выражение вида

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta(c - \gamma N), \quad (1.1.11)$$

где γ – коэффициент распределения вещества между фазами в условиях равновесия. Кинетические параметры γ и β являются обобщенными характеристиками разнообразных процессов поглощения, обуславливающих удаление растворенных веществ при фильтрации.

При необратимой сорбции (поглощении), обусловленной неограниченно большой сорбционной емкостью поглощения водоносной среды, когда $\gamma \ll 1$, уравнение (1.1.11) принимает вид

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta c.$$

При значительных скоростях сорбционного процесса, когда γ велико, процесс сорбции приобретает равновесный характер. Полагая в уравнении

(1.1.11) $\gamma \rightarrow \infty$ и $\frac{\partial N}{\partial t} = 0$, получим

$$N_0 = \frac{1}{\gamma} c_0 = \Gamma c_0, \quad (1.1.12)$$

где $\Gamma = \frac{1}{\gamma}$ – коэффициент Генри, а N_0 , c_0 – равновесные концентрации вещества в твердой и жидкой фазах.

Соответственно скорость сорбции при условии (1.1.12) прямо пропорциональна скорости изменения концентрации загрязнений в подземных водах, то есть

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial c}{\partial t}.$$

При длительном воздействии воды фильтрация сопровождается интенсивным растворением солей, содержащихся в водонасыщенных средах, которое приводит к дополнительному изменению концентрации загрязнений. Соотношение между концентрацией в растворе и в твердой фазе при продолжительной фильтрации определяется уравнением изотермы сорбции

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\beta(c_m - c), \quad (1.1.13)$$

где c_m – предельная допустимая концентрация.

При миграции загрязняющих веществ и примесей в водонасыщенных средах определяющее влияние на формирование скорости и дальности распространения загрязнений в пористых средах имеют силы, обуславливающие фильтрацию жидкости (то есть силы тяжести, давления и сопротивления), а в процессах растворения веществ основную роль играют диффузионные силы. Закономерности миграции загрязнений в подземных водах под влиянием наложения на конвективный перенос диффузионных процессов, сопровождающихся сорбционными явлениями, описываются уравнениями движения массовой скорости:

$$u_x = -v_x c + D_x^* \frac{\partial c}{\partial x}, \quad u_y = -v_y c + D_y^* \frac{\partial c}{\partial y}; \quad (1.1.14)$$

уравнением массового баланса

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{\partial N}{\partial t}; \quad (1.1.15)$$

уравнением кинетики массообмена, представимым функцией (1.1.10).

Здесь $c(x; y; t)$ – концентрация загрязнений в точке $(x; y)$ фильтрационного потока в момент времени t ; $D^* = D^*(x; y; t)$ – коэффициент гидродиффузии; $u_x = c v_x$, $u_y = c v_y$ – компоненты массовой скорости движения загрязнений, где элементы массовой скорости v_x , v_y определяются из решения уравнений (1.1.5), (1.1.6); N – концентрация убывающего из раствора или поступающего мигрирующего компонента.

Подставляя (1.1.14) в уравнение (1.1.15), получаем модельное уравнение переноса загрязнений подземными водами в пористых средах

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}[D^* \text{grad} c] - \text{div}[uc] - \frac{\partial N}{\partial t} \quad (1.1.16)$$

Нелинейное дифференциальное уравнение (1.1.16) в частных производных второго порядка параболического типа построено в рамках гипотезы сплошности и справедливости законов сохранения массы, движения энергии. Оно, описывая процесс изменения концентрации загрязнения подземных вод под действием сил конвективной диффузии, осложненных физико-химическими взаимодействиями в водонасыщенных средах, является базовым уравнением для решения многих практических задач миграции загрязнений в природных водоносных средах. В математическом отношении модельное уравнение (1.1.16) описывает процесс переноса загрязнений фильтрационным потоком в плоскости пласта (составляющие конвективного переноса) при наличии гидродинамической дисперсии (составляющие диффузионного переноса) с учетом растворения и поступления в раствор солей и примесей, содержащихся в почвогрунтах.

В общем случае модельное уравнение переноса загрязнений потоком подземных вод (1.1.16) является нелинейным дифференциальным уравнением

ем с переменными коэффициентами. При $\frac{\partial N}{\partial t} = 0$, $m = 1$ и $D^* = const$ оно аналогично классическому уравнению конвективной диффузии в его обычной форме [3].

В зависимости от характера фильтрации подземных вод в случае, когда $\frac{\partial c}{\partial t} = 0$, основное уравнение миграции (1.1.16) описывает установившийся процесс миграции, а в случае, когда $\frac{\partial c}{\partial t} \neq 0$ – неустановившийся.

Для решения конкретных задач миграции загрязнения задаются начальные и граничные условия, описывающие реальный процесс. В качестве начального условия принимается естественное (фоновое) распределение концентрации вещества в пласте при $t = t_0$, то есть

$$c(x; y; t_0) = c_0(x; y),$$

где $c_0(x; y)$ – известная функция, которую в некоторых частных случаях полагают постоянной величиной ($c_0 = const$ или $c_0 = 0$).

Начальные условия характеризуют распределение концентрации в стационарном потоке до начала процесса миграции. Режим процесса миграции загрязнений определяется также условиями, которым должна удовлетворять искомая функция и ее производные на границе рассматриваемой области [2]. Плоскопараллельные динамические процессы миграции загрязнений протекают, как правило, в ограниченных или полуограниченных областях водонасыщенных сред, на границе L которых задаются следующие физически обоснованные условия:

– на границе L задан закон изменения во времени концентрации загрязнений в виде некоторой функции (условие I-го рода)

$$c(x; y; t) = c_1(t).$$

Обычно приходится иметь дело с границами, на которых сохраняется постоянство концентрации и тогда граничное условие записывается в виде

$$c(x; y; t) = c_0;$$

– на границе L или ее части задается закон изменения расхода загрязнений во времени, то есть задана нормальная составляющая концентрации (условие II-го рода)

$$-D^* \frac{\partial c(x; y; t)}{\partial n} = q(x; y; t).$$

Для миграции с равномерным и постоянным загрязнением расход Q может быть задан в виде некоторой постоянной величины.

– на границе L задается изменение потока загрязнений линейной зависимостью между концентрацией и ее производной с учетом механизма конвективного обмена (условие III-го рода)

$$v_n(c - c_1) - D^* \frac{\partial c(x; y; t)}{\partial n} = q(x; y; t),$$

где $\frac{\partial c}{\partial n}$ – внутренняя нормаль к L , а v_n – нормальная составляющая скорости фильтрации.

Математический анализ задач миграции в однородных пористых средах при некоторых физико-химических допущениях показывает, что они сводятся, в основном, к решению нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка эллиптического или параболического типа при различных комбинациях начально-краевых условий. При этом неустановившиеся процессы загрязнений подземных вод описываются дифференциальными уравнениями параболического типа [11, стр. 104], а установившиеся – дифференциальными уравнениями эллиптического типа [11, стр. 141]. Кроме того, нестационарные режимы миграции могут быть описаны дифференциальными уравнениями эллиптического типа при наличии дополнительных динамических условий на участках границе области миграции.

§1.2. Модульный метод анализа пространственно-временных свойств динамики загрязнения подземных вод

Численно-аналитические алгоритмы решения начально-краевых задач для базового уравнения миграции (1.1.16) лежат в основе различных расчетных схем прогнозных оценок режима загрязнений подземных вод. Оценка режима миграции загрязнения в разных условиях может быть сведена к определению:

- максимальной концентрации загрязняющего вещества в интересующей точке и времени ее появления;
- максимальных размеров зоны загрязнения в заданный период времени при известной концентрации загрязнений в источнике.

Математическое описание процесса миграции загрязнений осуществляется по выявленным закономерностям в начальный период распространения загрязнений. Математические модели для определения вероятной концентрации загрязнений подземных вод в пространстве и во времени в общей физической постановке, очень сложны и представляют собой систему нелинейных дифференциальных уравнений (1.1.5) – (1.1.7), (1.1.10), (1.1.16) с частными производными. Точное решение начально-краевых задач для этой системы уравнений весьма затруднительно, и даже, в случае установившегося режима, их решение наталкивается на значительные математические трудности. В связи с этим широкое распространение получили аддитивные схемы, обладающие суммарной аппроксимацией, к которым относятся схема расщепления, дробных шагов, локально-одномерные схемы.

В рамках этих схем прогнозные начально-краевые задачи для базового дифференциального уравнения (1.1.16) за счет введения дополнительных ограничений сводятся к упрощенным модельным задачам. В наиболее простой постановке, при незначительных скоростях миграции и малых концентрациях загрязнения, задачу прогнозирования концентрации загрязнений подзем-

ных вод разбивают на два этапа:

- 1) решение фильтрационной задачи подземных вод;
- 2) расчет, на основе построенного поля скоростей фильтрации, количественных оценок в пространстве и во времени концентрации загрязнения подземных вод.

На первом этапе, с помощью известных аналитических методов, независимо от системы уравнений (1.1.14), (1.1.15), при заданных начально-краевых условиях решается система уравнений (1.1.5), (1.1.6), описывающая процесс движения фильтрационного потока в пористых природных средах. Предполагая $\rho = const$ находим составляющие v_x , v_y скорости движения v подземных вод, которые в общем случае являются функциями координат $(x; y)$ и времени t . Подстановка найденных значений v_x , v_y в основное уравнение миграции (1.1.16) приводит к нелинейному дифференциальному уравнению в частных производных второго порядка с одной независимой переменной $c = c(x; y; t)$, Получаемые на основе решения уравнения (1.1.16) расчетные схемы определяются начальными и граничными условиями [5] и особенностями разнообразных физико-химических явлений процесса миграции.

Указанного подхода придерживаются в большинстве случаев для решения прогнозных инженерных задач [13, 22, 23 – 26]. Однако следует отметить, что описанный способ нахождения прогнозных оценок является все-таки достаточно сложным, так как:

- область движения подземных вод, в которой исследуется процесс загрязнения, как правило, имеет сложную геометрическую форму, граница которой не всегда известна, и поэтому нахождение решения соответствующих начально-краевых задач конвективной диффузии в таких областях с помощью численно-аналитических методов затруднительно;

- выражения для v_x , v_y составляющих скоростей, которые входят в основное уравнение в качестве коэффициентов при первых производных, весьма громоздки и их определение связано с решением в той же области за-

дачи фильтрации, что само по себе представляет сложную задачу.

Указанные трудности, возникающие при постановке и решении начально-краевых задач двумерных моделей процесса миграции загрязнений подземных вод, в значительной степени можно преодолеть, принимая допущение о том, что реальные водоносные среды можно рассматривать как однородные или кусочно-однородные среды. В этом случае процессы двумерной плоскопараллельной фильтрации в задачах миграции, с целью упрощения, описывают при помощи двух семейств взаимно-ортогональных кривых в плоскости xOy : кривые $\psi = const$, параллельные направлению течения, называемые функциями тока; и кривые семейства $\varphi = const$, перпендикулярные направлению течения, которые называются потенциалом течения. В рамках принятой модели для двух любых взаимно-ортогональных направлений, ориентированных как координатные оси Ox и Oy , справедливы условия Коши – Римана

$$u_x = \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad u_y = \frac{\partial \varphi}{\partial y} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

Решениями двумерных задач миграции при отсутствии источников и стоков являются аналитические функции $w(z)$ комплексного потенциала течения несжимаемой жидкости, которые в частном случае могут рассматриваться как функции действительного переменного

$$w(z) = \varphi + i\psi.$$

Здесь $w(z)$ – комплексный потенциал течения комплексной переменной $z = x + iy$; $\psi = \psi(x, y)$ – функция тока; а функция $\varphi = \varphi(x, y) = -kh$ – потенциал, который связан с давлением формулой (1.1.2).

Основная идея описанного метода теории потенциалов, применительно к построению математической модели миграции загрязнений подземных вод, состоит в переходе от независимых переменных x, y к новым независимым переменным $\varphi = \varphi(x, y), \psi = \psi(x, y)$. Выразим частные производные функции концентрации загрязнения $c = c(x, y, t)$ через новые независимые пере-

менные. В результате находим

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial \psi} \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad \frac{\partial c}{\partial y} = \frac{\partial c}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial \psi} \frac{\partial \psi}{\partial y},$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 c}{\partial \varphi^2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 c}{\partial \varphi \partial \psi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} +$$

$$+ \frac{\partial c}{\partial \varphi} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial \psi^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial c}{\partial \psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2},$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial^2 y} = \frac{\partial^2 c}{\partial \varphi^2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 c}{\partial \varphi \partial \psi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial y} +$$

$$+ \frac{\partial c}{\partial \varphi} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial \psi^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial c}{\partial \psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}.$$

Затем находим

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial^2 y} = \frac{\partial^2 c}{\partial \varphi^2} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{\partial^2 c}{\partial \psi^2} \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 \right] +$$

$$+ 2 \frac{\partial^2 c}{\partial \varphi \partial \psi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} + 2 \frac{\partial^2 c}{\partial \varphi \partial \psi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial y} +$$

$$+ \frac{\partial c}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial c}{\partial \psi} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right).$$

Модельное уравнение миграции загрязнений подземных вод (1.1.16), при постоянном коэффициенте диффузии $D^* = const$, для взаимозаменяемых функций тока ψ и потенциала φ , удовлетворяющих уравнению Лапласа

$$\Delta \varphi = 0, \quad \Delta \psi = 0$$

и для которых справедливо равенство

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 = v_x^2 + v_y^2 = v^2,$$

преобразуется к виду

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D^* \left(\frac{\partial^2 c}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial \psi^2} \right) - \frac{\partial c}{\partial \varphi} + \frac{1}{v^2} \left(m \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial t} \right). \quad (1.2.1)$$

Дифференциальное уравнение (1.2.1), в случае установившегося плоско-параллельного процесса, для каждого выделенного горизонтального пласта, принимает вид

$$\frac{\partial^2 c}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial \psi^2} - \frac{1}{D^*} \frac{\partial c}{\partial \varphi} = 0. \quad (1.2.2)$$

В условиях установившейся миграции загрязнений подземных вод схематизация процесса осуществляется путем построения недеформируемых линий тока. В этом случае процесс миграции характеризуется фиксированным набором линий тока $\psi = const$, и дифференциальное уравнение (1.2.2) упрощается и принимает вид

$$\frac{\partial^2 c}{\partial \varphi^2} = \frac{1}{D^*} \frac{\partial c}{\partial \varphi}. \quad (1.2.3)$$

Точные аналитические методы решения модельных начально-краевых задач для уравнений (1.2.1) – (1.2.3) представляют значительный интерес для проверки точности широко применяемых приближенных численных методов решения для базового уравнения (1.1.16).

Важную роль для предварительного изучения прогнозных характеристик и параметров миграции загрязнений подземных вод имеет модульный анализ задачи, который основан на различных классах гипотетических моделей сравнения. Один из основных подходов модульного анализа связан с возможностью учета влияния только определенного набора физических характеристик взаимодействия и геометрических параметров пористой среды. В силу этого, в рамках модульного анализа при математическом описании оказывается возможным пренебречь влиянием других сил по сравнению с силой, определяющей интенсивность и направление суммарного потока миграции.

Предварительное изучение свойств каждого модельного уравнения позволяет получить информацию о характере решения и о свойствах всей системы в целом.

При значительном влиянии фактора гравитации и начального градиента концентрации процесс миграции загрязнений происходит за счет сил кон-

вективного и диффузионного переноса. Степень проявления одного из этих факторов, при прочих равных условиях, определяется величиной скорости движения подземных вод. В потоках подземных вод с ничтожно малыми скоростями фильтрации при наличии градиента концентрации загрязнений процесс миграции загрязнений осуществляется за счет диффузионного переноса. В этом случае миграция вещества в потоке подземных водах происходит в результате процесса рассеяния. Структурные свойства потока рассеяния аналогичны действию фильтрационной дисперсии, а модельное уравнение рассеяния принимает вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_x^* \frac{\partial c}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_y^* \frac{\partial c}{\partial y} \right], \quad (1.2.4)$$

В дифференциальном уравнении (1.2.4) распространение загрязнения подземными водами трактуется как диффузионный процесс с коэффициентом диффузии, зависящим от градиентов концентрации и давления.

При отсутствии диффузии различные физико-химические взаимодействия, такие как сорбция, десорбция, описываются одним модельным уравнением вида (1.1.10). Вид пространственно-временных закономерностей изменения концентрации сорбирующего вещества зависит от наличия или отсутствия состояния равновесия или вида зависимости между растворенными и сорбированными концентрациями. Влияние сорбции в равновесных условиях снижает эффект продольной дисперсии, а при неравновесных, наоборот, усиливается [7]. В реальных условиях более вероятно равновесное состояние, поэтому при растворении или кристаллизации слаборастворимых солей, находящихся в незначительных количествах в почвогрунтах и незначительных скоростях фильтрации, считают справедливым закон действия масс, когда скорость растворения пропорциональна концентрации и удовлетворяет модельному уравнению кинетики растворения (1.1.13).

В уравнении кинетики (1.1.13) неизвестная функция $c = c(x; y; t)$ определяет среднюю концентрацию примесей в подземных водах, обусловленную различием концентраций на внешней границе области миграции.

Суммарный процесс рассеяния и растворения примесей в водоносных средах при незначительных скоростях, в случае нестационарной фильтрации, описывается дифференциальным уравнением

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_x^* \frac{\partial c}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_y^* \frac{\partial c}{\partial y} \right] + \beta(c_m - c).$$

Следствием преобладания конвективного переноса загрязнений является тот факт, что перенос загрязнений в пористых водоносных средах происходит в соответствии со структурой потока движения подземных вод. В большинстве случаев реальные фильтрационные потоки осредняют в одном из выбранных направлений. Подобное допущение позволяет количественно охарактеризовать процесс переноса загрязнений по главным направлениям, представляющий наибольший практический интерес. В наиболее простых случаях, при наличии градиента напора фильтрации, метод осреднения позволяет рассматривать одномерный процесс переноса загрязнений, уравнение которого имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} + \beta(c_m - c). \quad (1.2.5)$$

Одномерный процесс переноса загрязнений в том случае, когда молекулярно-диффузионные силы малы, описывается модельным уравнением массопереноса

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v_x \frac{\partial c}{\partial x} + \beta(c_m - c). \quad (1.2.6)$$

Дифференциальным уравнениям (1.2.5), (1.2.6), в силу условия (1.1.14), будут соответствовать массовые скорости движения, определяемые формулами:

$$u_x = -v_x c + D_x^* \frac{\partial c}{\partial x}, \quad u_x = -v_x c.$$

§1.3. Исследование математической модели режима загрязнения подземных вод при наличии источника загрязнения постоянной интенсивности

Рассмотрим распространение примесей в одномерном потоке подземных вод пористой среды, которые распространяются под действием единичного выброса от источника загрязнения заданной концентрации. Математическое описание одномерного потока движения загрязненных подземных вод сводится к постановке следующей начально-краевой задачи.

Задача 1.3.1. Найти в прямоугольной области $\Omega = \{(x;t) : 0 < x < l, 0 < t < T\}$ решение $c = c(x;t)$ уравнения (1.2.5), удовлетворяющее условиям

$$\begin{aligned} c(x;0) &= c_1, & 0 < x < l, \\ c(0;t) &= c_2, & c(l;t) = c_3, & t > 0, \end{aligned}$$

где c_1, c_2, c_3 – некоторые заданные постоянные величины.

В соответствии с существующими предположениями [67] об экспоненциальном характере процесса массопереноса полагаем, что функция концентрации загрязнения в любой момент времени t в произвольной точке области Ω описывается функцией вида

$$c(x;t) = u(x;t)e^{\alpha x - \gamma t} + c_m,$$

где $u = u(x;t)$ – новая искомая функция, а α, γ – неизвестные параметры, характеризующие процесс миграции загрязнений.

Находим частные производные $\frac{\partial c}{\partial t}$, $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ и подставим их значения в уравнение (1.2.5). В результате получим

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \gamma u = D^* \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2\alpha D^* \frac{\partial u}{\partial x} + \alpha^2 D^* u - \nu \frac{\partial u}{\partial x} - \alpha \nu u - \beta u. \quad (1.3.1)$$

В полученном равенстве (1.3.1) подберем неизвестные параметры α и γ та-

ким образом, чтобы новая искомая функция концентрации загрязнений

$$u(x; t) = (c_m - c(x; t))e^{-\alpha x + \gamma t} \quad (1.3.2)$$

удовлетворяла уравнению Фурье

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (1.3.2)$$

Очевидно, что в этом случае коэффициенты α и γ должны удовлетворять системе уравнений

$$2\alpha D^* - \nu = 0,$$

$$\alpha^2 D^* - \alpha \nu - \beta + \gamma = 0.$$

Откуда, решая эту систему, находим неизвестные значения параметров:

$$\alpha = \frac{\nu}{2D^*}, \quad \gamma = \frac{\nu^2 + 4D^* \beta}{4D^*}.$$

Таким образом, задача 1.3.1 сводится к следующей начально-краевой задаче.

Задача 1.3.2. Найти в слое $0 < x < l$ для всех моментов времени $t \in (0; T)$, решение $u = u(x; t)$ уравнения (1.3.2), удовлетворяющее следующему начально-краевым условиям:

$$u(x; 0) = (c_1 - c_m)e^{-\alpha x}, \quad (1.3.3)$$

$$u(0; t) = (c_2 - c_m)e^{\gamma t}, \quad (1.3.4)$$

$$u(l; t) = (c_3 - c_m)e^{-\alpha l + \gamma t}. \quad (1.3.5)$$

Найдем класс нетривиальных решений начально-краевой задачи 1.3.2, представимых в виде следующего ряда

$$u(x; t) = \sum_{k=1}^{\infty} T_k(t) \sin \frac{\pi k}{l} x, \quad (1.3.6)$$

коэффициенты $T_k(t)$ которого определяются формулами

$$T_k(t) = \frac{2}{l} \int_0^l u(x; t) \sin \frac{\pi k}{l} x dx. \quad (1.3.7)$$

Преобразуем правую часть равенства (1.3.6). Применяя формулу интегрирования по частям дважды, получим

$$T_k = \frac{2}{\pi k} \left[u(0;t) - (-1)^k u(l;t) \right] - \frac{2l}{\pi^2 k^2} \int_0^l \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \sin \frac{\pi k}{l} x dx.$$

Тогда искомая функция $T_k(t)$ в силу (1.3.7) представима в виде

$$T_k = \frac{2}{\pi k} \left[u(0;t) - (-1)^k u(l;t) \right] - \frac{2l}{D\pi^2 k^2} \int_0^l \frac{\partial u}{\partial t} \sin \frac{\pi k}{l} x dx, \quad (1.3.8)$$

Упростим выражение (1.3.8). Для этого найдем частную производную

$$\frac{\partial T_k}{\partial t} = \frac{2}{l} \int_0^l \frac{\partial u}{\partial t} \sin \frac{\pi k}{l} x dx, \quad (1.3.9)$$

а затем подставим найденное значение (1.3.9) в уравнение (1.3.8). В результате получим обыкновенное неоднородное дифференциальное уравнение первого порядка относительно неизвестной функции $T_k(t)$

$$\frac{dT_k(t)}{dt} + \frac{D\pi^2 k^2}{l^2} T_k(t) = \frac{2D\pi k}{l^2} \left[u(0;t) - (-1)^k u(l;t) \right]. \quad (1.3.10)$$

Решение уравнения (1.3.10) представимо в виде [8]

$$T_k(t) = e^{-\frac{D\pi^2 k^2}{l^2} t} \left[A_k + \frac{2D\pi k}{l^2} \int_0^t e^{\frac{D\pi^2 k^2}{l^2} \tau} \left[u(0;\tau) - (-1)^k u(l;\tau) \right] d\tau \right], \quad (1.3.11)$$

где A_k – некоторая неизвестная постоянная.

Исходя из условий (1.3.3), (1.3.11), находим что

$$A_k = T_k(0) = \frac{2}{l} \int_0^l u(x;0) \sin \frac{\pi k}{l} x dx. \quad (1.3.12)$$

Тогда решение начально-краевой задачи 1.3.2 в силу равенств (1.3.6), (1.3.11), (1.3.12) представимо в виде

$$u = \frac{2}{l} \sum_{k=1}^{\infty} \sin \frac{\pi k x}{l} e^{-\frac{\pi^2 k^2 D^*}{l^2} t} \left\{ \int_0^l u(x;0) \sin \frac{\pi k x}{l} dx + \right. \\ \left. + \frac{\pi D^*}{l} k \int_0^t e^{\frac{\pi^2 k^2 D^*}{l^2} \tau} \left[u(0;\tau) - (-1)^k u(l;\tau) \right] d\tau \right\}. \quad (1.3.13)$$

Преобразуем полученное решение (1.3.13), учитывая, что функции $u(x;0)$, $u(0;t)$ и $u(l;t)$ определяются начально-краевыми условиями (1.3.1),

(1.3.2) и (1.3.4). Для этого вычислим в выражении (1.3.13) первый интеграл.

Применяя формулу интегрирования по частям, находим

$$J_1 = (c_1 - c_m) \int_0^l \sin \frac{\pi k x}{l} e^{-\alpha x} dx = \frac{1}{\pi} (c_1 - c_m) \frac{k^2}{k^2 + \left(\frac{\alpha l}{\pi}\right)^2} \left[1 - (-1)^k e^{-\alpha l} \right]. \quad (1.3.14)$$

Преобразуем второй интеграл в правой части равенства (1.3.13) с учетом начально-краевых условий (1.3.1) – (1.3.3)

$$\begin{aligned} J_2 &= (c_2 - c_m) \int_0^l e^{\frac{\pi^2 k^2 D^*}{l^2} t} e^{\eta t} dt - (-1)^k (c_3 - c_m) \int_0^l e^{\frac{\pi^2 k^2 D^*}{l^2} t} e^{-\alpha l + \eta t} dt = \\ &= \frac{2}{\pi^2 D^*} \frac{(c_2 - c_m) - (-1)^k (c_3 - c_m) e^{-\alpha l}}{k^2 - \frac{\eta^2}{\pi^2 D^*}} \left[e^{\left[\frac{\pi^2 k^2 D^*}{l^2} + \eta \right] t} - 1 \right]. \quad (1.3.15) \end{aligned}$$

Подставляя значения интегралов (1.3.14), (1.3.15) в выражение (1.3.13), получим

$$\begin{aligned} u(x; t) &= -\frac{2}{\pi} (c_m - c_1) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k^2}{k^2 + \xi^2} \left[1 - (-1)^k e^{-\pi \xi} \right] \sin \frac{\pi k x}{l} e^{-k^2 \tau} - \\ &- \frac{2}{\pi} (c_m - c_2) \sum_{k=1}^{\infty} k \frac{\left[1 - (-1)^k p e^{-\pi \xi} \right]}{k^2 + \eta} \sin \frac{\pi k x}{l} \left(e^{\eta t} - e^{-k^2 \tau} \right), \quad (1.3.16) \end{aligned}$$

где $\xi = \frac{\alpha l}{\pi}$, $\tau = \frac{\pi^2 D^*}{l^2} t$, $\eta = \frac{\eta^2}{\pi^2 D^*}$, $p = \frac{c_m - c_3}{c_m - c_2}$.

Выражение (1.3.16) представляет собой численно-аналитический алгоритм решения задачи 1.3.2. Он позволяет, в том случае, когда известны характеристики потока миграции загрязнений, дать оценку режима загрязнений в ограниченном пласте водонасыщенных сред.

Таким образом, если $\xi = \frac{\alpha l}{\pi}$, $\tau = \frac{\pi^2 D^*}{l^2} t$, $\eta = \frac{\eta^2}{\pi^2 D^*}$, $p = \frac{c_m - c_3}{c_m - c_2}$, тогда

обобщенное решение задачи 1.3.2 существует и оно представимо в виде (1.3.16)

Постановка задачи 1.3.1 в случае, когда изменение концентрации за-

грязнений по истечении длительного времени на рассматриваемом промежутке, становится незначительным, сводится к частной задаче: найти решение уравнения (1.2.5), удовлетворяющее условиям

$$c(0;t) = c_2, \quad \frac{\partial c}{\partial t}(l;t) = c_3, \quad t > 0,$$

$$c = c_m - (c_m - c_1)e^{(\beta+\alpha)x} \left[1 - (\beta + \alpha) \frac{e^{(l-x)\alpha} \operatorname{sh}(x\alpha)}{\beta \operatorname{sh}(l\alpha) + \alpha \operatorname{ch}(l\alpha)} \right],$$

где

$$\beta = \frac{v}{2D^*m}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{v^2}{4(D^*)^2 m^2} + \frac{\gamma}{D^*}}, \quad m = \alpha + \beta.$$

Пренебрегая в полученном решении силами диффузии, получим решение в виде

$$c = c_m - (c_m - c_2)e^{-\frac{\beta m}{v}x}. \quad (1.3.17)$$

Анализ формулы (1.3.17) позволяет сделать вывод, что неустановившийся процесс загрязнения подземных вод при наличии источника загрязнения по истечении длительного времени стремится к естественному равновесному состоянию.

§1.4. Исследование математической модели режима загрязнения подземных вод при наличии источника загрязнения изменяющейся интенсивности

Математическое описание одномерного процесса распространения загрязнений подземными водами в том случае, когда на границе однородного пласта пористой среды имеется источник загрязнений с изменяющейся интенсивностью, сводится к следующей начально-краевой задаче.

Задача 1.4.1. Найти в области $\Omega = \{(x; t) : 0 < x < l, 0 < t < \infty\}$ регулярное решение уравнения (1.2.5), удовлетворяющее начально-краевым условиям

$$c(x; 0) = \varphi(x), \quad (1.4.1)$$

$$c(0; t) = \psi_1(t), \quad c(l; t) = \psi_2(t), \quad (1.4.2)$$

где функции $\varphi(x)$, $\psi_1(t)$ и $\psi_2(t)$ – заданные функции.

Для построения численно-аналитического алгоритма переходного процесса загрязнения однородного пласта применим интегральный метод преобразования.

Функция вида

$$u = u(\xi; \theta) = c(\xi; \theta) - c_m, \quad (1.4.3)$$

где

$$\xi = \frac{ix}{D^*}, \quad \theta = \frac{i^2 t}{D^* m} \quad (1.4.4)$$

сводит задачу 1.4.1 к эквивалентной задаче для уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial \theta} = \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} - \beta_1 u \quad (1.4.5)$$

с сопутствующими начально-краевыми условиями

$$u(\xi; 0) = u_0(\xi) = \varphi(\xi) - c_m, \quad (1.4.6)$$

$$u(0; \theta) = u_1(\theta) = \psi_1(\theta) - c_m, \quad u(l; \theta) = u_2(\theta) = \psi_2(\theta) - c_m, \quad (1.4.7)$$

где $\beta_1 = \frac{\beta \cdot D^*}{v^2}$, $l_1 = \frac{vl}{D^*}$.

Для решения задачи неустановившейся миграции 1.4.1 применим метод операционного исчисления. Преобразуем уравнение (1.4.5) с помощью интегрального преобразования Лапласа

$$u(\xi; \theta) = \bar{u}(\xi; p) = \int_0^{\infty} e^{-p\theta} u(\xi; \theta) d\theta, \quad (1.4.8)$$

где p – комплексный параметр, $Re p > 0$.

Применяя к (1.4.8) теорему [34] о дифференцировании оригинала

$$\frac{\partial u}{\partial \theta} = p\bar{u}(\xi; p) - u(\xi; 0) = p\bar{u}(\xi; p) - u_0(\xi),$$

учитывая условие (1.4.6) и свойства линейности интегрального оператора, получим обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка

$$\frac{d^2 \bar{u}(\xi; p)}{d\xi^2} - \frac{d\bar{u}(\xi; p)}{d\xi} - \bar{u}(\xi; p)[p + \beta_1] = -u_0(\xi). \quad (1.4.9)$$

Граничные условия (1.4.7) для уравнения (1.4.9) соответственно примут вид:

$$L[u(0; \theta)] = \bar{u}(0; p) = \bar{u}_1(p), \quad L[u(l_1; \theta)] = \bar{u}(l_1; p) = \bar{u}_2(p). \quad (1.4.10)$$

В этом случае решение обыкновенного линейного дифференциального уравнения (1.4.9) представимо в виде суммы

$$\bar{u}(\xi; p) = \bar{u}_*(\xi; p) + \bar{u}_{**}(\xi; p), \quad (1.4.11)$$

где функция $\bar{u}_*(\xi; p)$ есть решение однородного уравнения

$$\frac{d^2 \bar{u}(\xi; p)}{d\xi^2} - \frac{d\bar{u}(\xi; p)}{d\xi} - \bar{u}(\xi; p)[p + \beta_1] = 0 \quad (1.4.12)$$

с соответствующими ему неоднородными граничными условиями (1.4.10).

Функция $\bar{u}_{**}(\xi; p)$ в выражении (1.4.11) является решением неоднородного уравнения (1.4.9) с однородными граничными условиями

$$\bar{u}(0; p) = 0, \quad \bar{u}(l_1; p) = 0. \quad (1.4.13)$$

Решением обыкновенного однородного дифференциального уравнения

второго порядка с постоянными коэффициентами (1.4.12) является функция

$$\bar{u}_*(\xi; p) = Ae^{k_1\xi} + Be^{k_2\xi}, \quad (1.4.14)$$

где $k_{1,2} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{(p + \beta_1) + \frac{1}{4}}$ — корни характеристического уравнения

$$k^2 - k - (p + \beta_1) = 0.$$

Найдем в выражении (1.4.14) неизвестные коэффициенты A и B . Используя граничные условия (1.4.10) имеем

$$\bar{u}_*(0; p) = A + B = \bar{u}_1(p),$$

откуда получим

$$A = \bar{u}_1(p) - B,$$

$$\bar{u}(l_1; p) = (\bar{u}_1(p) - B)e^{k_1 l_1} + B e^{k_2 l_1} = \bar{u}_2(p).$$

$$B = \frac{\bar{u}_1(p)e^{k_1 l_1} - \bar{u}_2(p)}{e^{k_1 l_1} - e^{k_2 l_1}}, \quad A = \frac{\bar{u}_2(p) - \bar{u}_1(p)e^{k_2 l_1}}{e^{k_1 l_1} - e^{k_2 l_1}}. \quad (1.4.15)$$

Тогда функция $\bar{u}_*(\xi; p)$, в силу (1.4.15), примет вид

$$\bar{u}_*(\xi; p) = \frac{\bar{u}_1(p)(e^{k_1 l_1 + k_2 \xi} - e^{k_2 l_1 + k_1 \xi})}{e^{k_1 l_1} - e^{k_2 l_1}} + \frac{\bar{u}_2(p)(e^{k_1 \xi} - e^{k_2 \xi})}{e^{k_1 l_1} - e^{k_2 l_1}}.$$

Полученное решение $\bar{u}_*(\xi; p)$, применяя алгебраические преобразования, представим в виде

$$\bar{u}_*(\xi; p) = \bar{u}_1(p)U_1(\xi; p) + \bar{u}_2(p)U_2(\xi; p), \quad (1.4.16)$$

где

$$U_1(\xi; p) = e^{\frac{1}{2}\xi} \frac{\operatorname{sh} \sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}(l_1 - \xi)}{\operatorname{sh} \sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}l_1}, \quad U_2(\xi; p) = e^{\frac{1}{2}\xi} \frac{\operatorname{sh} \sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}\xi}{\operatorname{sh} \sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}l_1}.$$

Найдем частное решение $\bar{u}_{**}(\xi; p)$ уравнения (1.4.9), удовлетворяющее условиям (1.4.13). Применяя к уравнению (1.4.9) оператор Лапласа по переменной ξ : $\bar{u}(q; p) = L[\bar{u}(\xi; p)]$, q — комплексный фиксированный параметр, а затем применяя к нему теоремы дифференцирования:

$$\frac{d\bar{u}(\xi; p)}{d\xi} = p\bar{u}(\xi; p) - \bar{u}(0; p), \quad \frac{d^2\bar{u}(\xi; p)}{d\xi^2} = q^2\bar{u}(\xi; p) - q\bar{u}(0; p) - \bar{u}'_{\xi}(0; p),$$

в силу свойств линейности оператора Лапласа, получим алгебраическое уравнение

$$q^2\bar{u}(q; p) - q\bar{u}(0; p) - \bar{u}'_{\xi}(0; p) - q\bar{u}(q; p) + \bar{u}(0; p) - (p + \beta_1)\bar{u}(q; p) = -\bar{u}_0(q).$$

Решая его относительно функции $\bar{u}(q; p)$, находим

$$\bar{u}(q; p) = \frac{\bar{u}'_{\xi}(0; p)}{q^2 - q - (p + \beta_1)} - \frac{\bar{u}_0(q)}{q^2 - q - (p + \beta_1)}. \quad (1.4.17)$$

Применяя к выражению (1.4.17) обратное преобразование Лапласа, находим

$$\begin{aligned} L^{-1}\left(\frac{1}{q^2 - q - (p + \beta_1)}\right) &= L^{-1}\left[\frac{1}{\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}} \left(q - \frac{1}{2}\right)^2 - \left(p + \beta_1 + \frac{1}{4}\right)}\right] = \\ &= \frac{e^{\frac{1}{2}\xi}}{\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}} sh\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}\xi. \end{aligned}$$

Пользуясь теоремами о свертке и смещения [35], находим, что

$$\begin{aligned} \bar{u}_{**}(\xi; p) &= \frac{e^{\frac{1}{2}\xi} \cdot \bar{u}'_{\xi}(0; p)}{2\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}} \left(e^{\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}\xi} - e^{-\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}\xi} \right) - \\ &- \frac{e^{\frac{1}{2}\xi}}{2\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}} \int_0^{\xi} u_0(\tau) e^{-\frac{1}{2}\tau} \left(e^{\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}(\xi - \tau)} - e^{-\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}(\xi - \tau)} \right) d\tau. \quad (1.4.18) \end{aligned}$$

Из выражения (1.4.18) с учетом граничного условия (1.4.10) заключаем, что

$$\bar{u}'_{\xi}(0; p) = \frac{1}{e^{\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}l_1} - e^{-\sqrt{p + \beta_1 + \frac{1}{4}}l_1}} \times$$

$$\times \int_0^{l_1} u_0(\tau) e^{-\frac{1}{2}\tau} \left(e^{\sqrt{p+\beta_1+\frac{1}{4}}(l_1-\tau)} - e^{-\sqrt{p+\beta_1+\frac{1}{4}}(l_1-\tau)} \right) d\tau. \quad (1.4.19)$$

Подставляя выражение (1.4.19) в равенство (1.4.18), исключая множитель $\bar{u}'_{\xi}(0; p)$, после непосредственных алгебраических преобразований находим, что функция $\bar{u}_{**}(\xi; p)$ представима в виде

$$\begin{aligned} \bar{u}_{**}(\xi; p) = & e^{\frac{1}{2}\xi} \int_0^{\xi} u_0(\tau) e^{-\frac{1}{2}\tau} \frac{sh\sqrt{p+\beta_1+\frac{1}{4}}\tau \cdot sh\sqrt{p+\beta_1+\frac{1}{4}}(l_1-\xi)}{\sqrt{p+\beta_1+\frac{1}{4}} \cdot sh\sqrt{p+\beta_1+\frac{1}{4}}l_1} d\tau + \\ & + e^{\frac{1}{2}\xi} \int_{\xi}^{l_1} u_0(\tau) e^{-\frac{1}{2}\tau} \frac{sh\sqrt{p+\beta_1+\frac{1}{4}}\xi \cdot sh\sqrt{p+\beta_1+\frac{1}{4}}(l_1-\tau)}{\sqrt{p+\beta_1+\frac{1}{4}} \cdot sh\sqrt{p+\beta_1+\frac{1}{4}}l_1} d\tau. \quad (1.4.20) \end{aligned}$$

Таким образом, решение уравнения (1.4.9), удовлетворяющее граничным условиям (1.4.10), представляет собой функцию, равную сумме двух функций, определяемую формулами (1.4.16) и (1.4.20).

Для того чтобы найти функцию $u = u(\xi; \theta)$ необходимо вернуться в пространство оригиналов. Применим обратное преобразование Лапласа к функциям (1.4.16) и (1.4.20), используя известные формулы соответствия [35]:

$$L^{-1} \left[\frac{sh\sqrt{p}(l_1-\xi)}{sh\sqrt{p}l_1} \right] = \frac{2\pi}{l_1^2} \sum_{n=1}^{+\infty} n \sin \frac{\pi n \xi}{l_1} e^{-\frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} \theta},$$

$$L^{-1} \left[\frac{sh\sqrt{p}\xi}{sh\sqrt{p}l_1} \right] = -\frac{2\pi}{l_1^2} \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n n \sin \frac{\pi n \xi}{l_1} e^{-\frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} \theta},$$

$$L^{-1} \left\{ \begin{array}{l} \frac{sh\sqrt{p}\tau \cdot sh\sqrt{p}(l_1-\xi)}{\sqrt{p} \cdot sh\sqrt{p}l_1}, \quad 0 \leq \tau \leq \xi \\ \frac{sh\sqrt{p}\xi \cdot sh\sqrt{p}(l_1-\tau)}{\sqrt{p} \cdot sh\sqrt{p}l_1}, \quad \xi \leq \tau \leq l_1 \end{array} \right\} = \frac{2}{l_1} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} \theta} \sin \frac{\pi n}{l_1} \tau \sin \frac{\pi n}{l_1} \xi,$$

а также теоремы о свертке и смещения, найдем оригинал

$$\begin{aligned}
 u(\xi; \theta) &= \frac{2\pi e^{\frac{1}{2}\xi}}{l_1^2} \sum_{n=1}^{\infty} n \sin \frac{\pi n \xi}{l_1} \int_0^{\theta} u_1(\theta - \rho) e^{-\left(\frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} + \beta_1 + \frac{1}{4}\right)\rho} d\rho - \\
 &- \frac{2\pi e^{\frac{1}{2}(\xi - l_1)}}{l_1^2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n n \sin \frac{\pi n \xi}{l_1} \int_0^{\theta} u_2(\theta - \rho) e^{-\left(\frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} + \beta_1 + \frac{1}{4}\right)\rho} d\rho + \\
 &+ \frac{2e^{\frac{1}{2}\xi}}{l_1} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} + \beta_1 + \frac{1}{4}\right)\theta} \sin \frac{\pi n \xi}{l_1} \int_0^l u_0(\tau) e^{\frac{1}{2}\tau} \sin \frac{\pi n \tau}{l_1} d\tau. \quad (1.4.21)
 \end{aligned}$$

Таким образом, в силу (1.4.3), (1.4.4) и (1.4.21) решение начально-краевой задачи 1.4.1 в области $\Omega = \{(x; t): 0 < x < l, 0 < t < \infty\}$ представимо в виде

$$\begin{aligned}
 c(\xi; \theta) &= \frac{2\pi e^{\frac{1}{2}\xi}}{l_1^2} \sum_{n=1}^{\infty} n \sin \frac{\pi n \xi}{l_1} \left[\int_0^{\theta} u_1(\theta - \rho) e^{-\mu\rho} d\rho - (-1)^n e^{\frac{1}{2}l_1\theta} \int_0^{\theta} u_2(\theta - \rho) e^{-\mu\rho} d\rho \right] + \\
 &+ \frac{2e^{\frac{1}{2}\xi}}{l_1} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\mu\theta} \sin \frac{\pi n \xi}{l_1} \int_0^l u_0(\tau) e^{\frac{1}{2}\tau} \sin \frac{\pi n \tau}{l_1} d\tau + c_m, \quad (1.4.22)
 \end{aligned}$$

где $\mu = \frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} + \beta_1 + \frac{1}{4}$.

Замечание 1. В случае, когда однородная пористая среда не содержит солей и примесей в твердой фазе ($\beta = 0$), уравнение (1.2.5) не содержит слагаемое $\frac{\partial N}{\partial t}$, то есть имеет вид

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \nu \frac{\partial c}{\partial x}. \quad (1.4.23)$$

В этом случае рассмотренная ранее задача 1.4.1 сводится к отысканию решения начально-краевой задачи (1.4.1), (1.4.2) для уравнения (1.4.23). С помощью введения новых переменных ξ и θ , определяемых формулами (1.4.4), уравнение (1.4.23) принимает вид

$$\frac{\partial c}{\partial \theta} = \frac{\partial^2 c}{\partial \xi^2} - \frac{\partial c}{\partial \xi}. \quad (1.4.24)$$

Проделав аналогичные преобразования, учитывая условие $\beta = 0$, на основании формулы (1.4.22) решение начально-краевой задачи (1.4.2), (1.4.3) для уравнения (1.4.24) представимо в виде

$$\begin{aligned} c(\xi; \theta) = & \frac{2\pi e^{\frac{1}{2}\xi}}{l_1^2} \sum_{n=1}^{\infty} n \sin \frac{\pi n \xi}{l_1} \int_0^{\theta} \psi_1(\theta - \rho) e^{-\left(\frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} + \frac{1}{4}\right)\rho} d\rho - \\ & - \frac{\pi e^{\frac{1}{2}(\xi - l_1)}}{l_1^2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n n \sin \frac{\pi n \xi}{l_1} \int_0^{\theta} \psi_2(\theta - \rho) e^{-\left(\frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} + \frac{1}{4}\right)\rho} d\rho + \\ & + \frac{2e^{\frac{1}{2}\xi}}{l_1} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{\pi^2 n^2}{l_1^2} + \frac{1}{4}\right)\theta} \sin \frac{\pi n \xi}{l_1} \int_0^{l_1} \varphi(\tau) e^{-\frac{1}{2}\tau} \sin \frac{\pi n \tau}{l_1} d\tau. \end{aligned}$$

Глава 2. Методы математического моделирования нелинейной миграции загрязнений в пористых средах с фрактальной структурой

§2.1. Построение математической модели нелинейной миграции загрязнения подземных вод в средах с фрактальной структурой

Для исследования характера режима загрязнения примесями подземных вод в классической теории массопереноса традиционно используются различные модельные уравнения, в основе которых лежат квазилинейные уравнения в частных производных второго порядка параболического типа (1.1.16). Математические модели данного типа, построенные в рамках гипотезы сплошности, справедливости линейных законов Дарси и Фика, важное место в которых занимает геометрия порового пространства, при описании конкретных процессов миграции, могут несколько модифицироваться, обобщаться и усложняться. Однако, лежащие в их основе методы анализа термодинамики необратимых процессов, основанные на приближенной аппроксимации структуры порового пространства простыми геометрическими фигурами Евклидовой геометрии: структурными моделями капиллярного типа или различными моделями сферических пустот, не учитывают тот факт, что почва и почвогрунт имеют сложную структуру порового пространства, интерпретируемую как фрактальное множество. В идеальной природной системе, находящейся в термодинамическом равновесии, появление нелинейных эффектов процесса миграции загрязненных подземных вод, происходит лишь с появлением фазовых переходов – качественных скачков, то есть когда некоторые параметры системы переходят свои критические значения. Образование временных, пространственных и пространственно-временных изменений концентрации примесей в реальном потоке подземных вод определяется сложностью реологии движущейся жидкости, строением пористой среды и

взаимодействием многообразных процессов между жидкостью и пористой средой [36].

Одним из важных свойств, характерным для реальных процессов миграции в сплошных средах, является обнаруженное на практике и подтвержденное некоторыми экспериментальными данными свойство самоподобия [46, 69] или масштабной инвариантности во времени и пространстве. Такие свойства процесса миграции загрязнения составляют основу особого класса физических процессов, называемых фрактальными. Главным фактором, определяющим формирование фрактального процесса, является сложная топология порового пространства природных сред. Интерпретация структуры пор, как множества с фрактальной размерностью Хаусдорфа – Безиковича, приводит к существенно новым дифференциальным уравнениям дробного порядка [6, 32, 40, 53, 70].

При построении физически обоснованных дробных модельных уравнений процесса миграции загрязнения подземных вод, адекватно учитывающих влияние структуры пористой среды, существенно используется регуляризованный оператор Римана – Лиувиля ∂_{0t}^{α} или оператор дробного порядка α в смысле Капуто по временной переменной t , определяемый формулой

$$\partial_{0t}^{\alpha} \varphi = D_{0t}^{\alpha-n} \frac{\partial^n \varphi(\tau)}{\partial \tau^n}, \quad n-1 \leq \alpha \leq n, \quad n = 1, 2, \dots,$$

где D_{0t}^{α} – оператор дробного интегро-дифференцирования в смысле Римана – Лиувиля [74, стр. 158] порядка α с началом в начальный момент времени $t = 0$, а с концом в текущий момент времени $t > 0$, который действует на функцию $\varphi(t) \in L[0; T]$ по формуле

$$D_{0t}^{\alpha} \varphi(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \int_0^t \frac{\varphi(\tau) d\tau}{(t-\tau)^{\alpha+1}}, & \alpha < 0, \\ \frac{d^{[\alpha]+1}}{dt^{[\alpha]+1}} D_{0t}^{\alpha-[\alpha]-1} \varphi(\tau), & \alpha \geq 0. \end{cases} \quad (2.1.1)$$

Здесь $\Gamma(x)$ – гамма-функция Эйлера; $[\alpha]$ – целая часть числа α .

Связь между дробными операторами Римана – Лиувилля и Капуто [74, стр. 120] определяется следующим соотношением

$$\partial_{0t}^{\alpha} c(\tau) = D_{0t}^{\alpha} c(\tau) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{c^{(k)}(0) \tau^{-\alpha}}{\Gamma(k+1)}. \quad (2.1.2)$$

В случае, когда $c^{(k)}(0) = 0$, операторы Римана – Лиувилля и Капуто совпадают, а при целочисленном значении параметра α дробные операторы дифференцирования совпадают с обычными производными.

При математическом описании фрактального процесса миграции загрязнения подземных вод важной характеристикой становится показатель α дробной производной, который для широкого класса природных пористых сред совпадает с фрактальной размерностью d_f порового пространства. Зависимость фрактальной размерности почвы от изменения концентрации загрязнения подземных вод существенно влияет на появление нелинейных эффектов процесса нестационарной миграции.

Изменение концентрации $c = c(x; t)$ загрязнения подземных вод за промежуток времени Δt в некотором элементе Ω пористой среды на величину δc , определяется равенством

$$\delta c_1 = c'_t \Delta t, \quad (2.1.3)$$

где величина c'_t определяет скорость изменения концентрации загрязнений в потоке подземных вод, а c_1 – величина концентрации загрязнения, зависящая от пространственных координат, времени и параметров режима миграции.

Дифференциальное выражение (2.1.3), описывающее изменение концентрации загрязнения при условии, что $\lim_{t \rightarrow 0} c(t) = c(0)$, представимо в виде

$$\frac{dc_1}{dt} = c'_t(t).$$

Значение производной $c'_t(t)$, на основании свойств оператора дробного интегро-дифференцирования, представим в виде

$$c'_t(t) = D_{0t}^{\alpha} D_{0t}^{1-\alpha} c(\tau) \quad \forall \alpha \in (0; 1). \quad (2.1.4)$$

Выражение (2.1.4) с помощью обозначения

$$D_{0t}^{1-\alpha} c(\tau) = c_1(t)$$

принимает вид

$$c_1'(t) = D_{0t}^\alpha c(\tau). \quad (2.1.5)$$

Временная зависимость (2.1.5) изменения концентрации загрязнения характерна для быстрых и медленных режимов миграции загрязнения подземных вод, при этом дробная производная отражает топологическую структуру и причинно-следственные связи взаимодействия жидкости с природной средой.

Для описания нелинейного процесса миграции загрязнений подземных вод в средах с фрактальной структурой, на основе модификации классической схемы математического описания пространственно-временных закономерностей в форме обобщенного модельного дифференциального уравнения (1.1.16), учитывая выражение (2.1.5) фрактальной скорости изменения концентрации загрязнения, получаем следующее обобщенное дифференциальное уравнение миграции с дробной производной по времени

$$mD_{0t}^\alpha c = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_\alpha(x;t) \frac{\partial c}{\partial x} \right] - \frac{\partial [v(x;t)c]}{\partial x} - \frac{\partial N}{\partial t}, \quad (2.1.6)$$

где $\alpha \in (0;1)$, а D_α – коэффициент фрактальной диффузии. При $\alpha = 1$ уравнение дробной миграции (2.1.6) совпадает с классическим уравнением миграции примесей (1.1.16).

Обобщенное модельное уравнение с дробной производной учитывает сложные взаимодействия между жидкостью и пористой средой, обусловленные масштабной инвариантностью процесса, которые возникают при медленных и быстро протекающих процессах миграции в средах с фрактальной структурой.

Определение. Регулярным решением уравнения (2.1.6) в прямоугольной области $\Omega = \{(x;t): 0 < x < l, 0 < t < T\}$ называется такое решение $c = c(x;t)$, которое удовлетворяет условию $c(x;t) \in C^{2,1}(\Omega)$.

Математическое описание неравновесных, стохастических эффектов нелинейных процессов загрязнения подземных вод в средах с фрактальной структурой, сопровождающихся растворением загрязненных веществ, сводится к исследованию вопроса разрешимости следующей нелокальной начально-краевой задачи.

Задача 2.1.1. Найти в области Ω регулярное решение $c = c(x; t)$ уравнения

$$mD_{0t}^{\alpha}c = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\alpha}(x; t) \frac{\partial c}{\partial x} \right] - \frac{\partial [v(x; t)c]}{\partial x} + \beta(c_m - c), \quad (2.1.7)$$

удовлетворяющее начально-краевым условиям

$$\lim_{t \rightarrow 0} D_{0t}^{\alpha-1}c(x; \tau) = c_0(x), \quad (2.1.8)$$

$$D_{\alpha} \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = D_{0t}^{\alpha-1}(0; \tau), \quad (2.1.9)$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=l} = 0. \quad (2.1.10)$$

Условие (2.1.8) является нелокальным условием типа Коши для уравнения дробного порядка. Условие (2.1.9) определяет баланс загрязнений во входном сечении слоя $[0; l]$ пористой среды с фрактальной структурой, а условие (2.1.10) описывает допустимое пренебрежение обратным диффузионным переносом загрязнений на выходном сечении рассматриваемого потока в случае плохо проницаемой границы области.

§2.2. Исследование вопроса корректной постановки модельной задачи медленно и быстро протекающих режимов миграции загрязнения подземных вод

Для исследования вопроса корректной постановки модельной задачи 2.1.1, описывающей процесс нелинейной миграции в прямоугольной области $\Omega = \{(x;t) : 0 < x < l, 0 < t < T\}$, введем интегро-дифференциальный оператор

$$c_* = D_{0t}^{\alpha-1} c(x;t). \quad (2.2.1)$$

Будем считать, что коэффициенты уравнения (2.1.7) удовлетворяют следующим условиям:

- 1) $D_{\alpha}(x;t) \in C(\Omega)$, $(D_{\alpha})_t(x;t) \in C(\Omega)$, $v(x;t) \in C(\Omega)$, $v_t(x;t) \in C(\Omega)$, $v_{xt}(x;t) \in C(\Omega)$, $\beta(x;t) \in L_2(\Omega)$;
- 2) $D_{\alpha}(x;t) \geq k > 0$, $(D_{\alpha})_t(x;t) \leq 0$, $v(x;t) \geq 0$, $v_t(x;t) \leq 0$, $v_x(x;t) \geq 0$, $v_{xt}(x;t) \leq 0$, 3) $\beta(x;t) \geq 0$, $\beta_t(x;t) \leq 0$.

Пусть функция $c = c(x;t) \in C^{2,1}(\Omega)$ есть решение задачи 2.1.1, тогда справедлива оценка

$$\|c_*\|_0^2 \leq M \left(\|\beta\|_{2,\Omega}^2 + \|c_*(x;0)\|_0^2 \right), \quad (2.2.2)$$

где $M > 0$ – известное число.

С целью получения априорной оценки (2.2.2) дифференциальное уравнение (2.1.7) представим в более удобном виде

$$D_{0t}^{\alpha} c - (D_{\alpha}(x;t)c_x)_x + v(x;t)c_x + cv_x(x;t) + \beta(x;t)c = c_m \beta(x;t). \quad (2.2.3)$$

В пространстве $L_2(0;l)$ введем скалярное произведение

$$(u;v) = \int_0^l uv dx \quad (2.2.4)$$

и норму

$$\|u\|_0 = \left[\int_0^l u^2(x;t) dx \right]^{1/2}.$$

В соответствии с методом энергетических неравенств, умножим обе части равенства (2.2.3) на функцию (2.2.1). Используя определение функционала (2.2.4), получим следующее равенство

$$(D_{0t}^\alpha c; c_*) - ((D_\alpha c_x)_x; c_*) + (v c_x; c_*) + (c v_x; c_*) + (\beta c; c_*) = c_m (\beta; c_*). \quad (2.2.5)$$

Покажем, что $(D_{0t}^\alpha c; c_*) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \|c_*\|_0^2$. Действительно, в силу (2.2.4) имеем

$$\begin{aligned} (D_{0t}^\alpha c; c_*) &= \int_0^l \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{c(x;\tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{c(x;\tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} dx = \\ &= \int_0^l c_* \frac{\partial c_*}{\partial t} dx = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^l c_*^2 dx = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \|c_*\|_0^2. \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

Представим второе слагаемое выражения (2.2.5), применяя формулу интегрирования по частям, в виде

$$\begin{aligned} ((D_\alpha c_x)_x; c_*) &= \int_0^l c_* d[D_\alpha c_x] = D_\alpha c_*(l;t) c_x(l;t) - \\ &- D_\alpha c_*(0;t) c_x(0;t) - \int_0^l D_\alpha c_x(c_*)_x dx. \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

Выражение (2.2.7), в силу нелокальных краевых условий (2.1.9), (2.1.10), принимает вид

$$((D_\alpha c_x)_x; c_*) = -c_*^2(0;t) - \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^l D_\alpha c_x \int_0^t \frac{c(x;\tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} dx. \quad (2.2.8)$$

Следующие слагаемые в левой части равенства (2.2.5), используя (2.2.4), представимы в виде:

$$(c_x v; c_*) = \int_0^l v c_x c_* dx, \quad (v_x c; c_*) = \int_0^l v_x c c_* dx, \quad (\beta c; c_*) = \int_0^l \beta c c_* dx. \quad (2.2.9)$$

Для правой части выражения (2.2.5), в соответствии с неравенством Коши, справедлива оценка

$$(\beta; c_*) = \int_0^l \beta c_* dx \leq \frac{1}{2} \int_0^l \beta^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^l c_*^2 dx = \frac{1}{2} \|\beta\|_0^2 + \frac{1}{2} \|c_*\|_0^2. \quad (2.2.10)$$

Равенство (2.2.5), в силу выражений (2.2.6) – (2.2.10), представимо в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \|c_*\|_0^2 + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^l D_\alpha c_x \int_0^\tau \frac{c_x(x;\tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} dx + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^l u c_x \int_0^\tau \frac{c(x;\tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} dx + \\ + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^l v_x c \int_0^\tau \frac{c(x;\tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} dx + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^l \beta c \int_0^\tau \frac{c(x;\tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} dx \leq \\ \leq c_*^2(0;t) + \frac{c_m}{2} \|\beta\|_0^2 + \frac{c_m}{2} \|c_*\|_0^2. \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

Интегрируя полученное неравенство (2.2.11) по переменной τ в пределах от 0 до t , находим

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|c_*\|_0^2 + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t d\tau \int_0^l D_\alpha c_x \int_0^\tau \frac{c_x(x;\tau_1) d\tau_1}{(\tau-\tau_1)^\alpha} dx + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t d\tau \int_0^l u c_x \int_0^\tau \frac{c(x;\tau_1) d\tau_1}{(\tau-\tau_1)^\alpha} dx + \\ + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t d\tau \int_0^l v_x c \int_0^\tau \frac{c(x;\tau_1) d\tau_1}{(\tau-\tau_1)^\alpha} dx + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t d\tau \int_0^l \beta c \int_0^\tau \frac{c(x;\tau_1) d\tau_1}{(\tau-\tau_1)^\alpha} dx \leq \\ \leq \frac{c_m}{2} \|\beta\|_{2,\Omega}^2 + \frac{c_m}{2} \int_0^t \|c_*(x;\tau)\|_0^2 d\tau + \frac{1}{2} \|c_*(x;0)\|_0^2, \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

где $\|u\|_{2,\Omega}^2 = \int_0^t \|u(x;\tau)\|_0^2 dt$.

Найдем оценки интегралов, входящих в левую часть выражения (2.2.12). Для этого в повторном интеграле

$$J_1 = \int_0^t \left[\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^l D_\alpha(x;\tau) c_x(x;\tau) \int_0^\tau \frac{c_x(x;\tau_1) d\tau_1}{(\tau-\tau_1)^\alpha} dx \right] d\tau$$

изменим порядок интегрирования

$$J_1 = \int_0^l \left[\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t D_\alpha(x;\tau) c_x(x;\tau) d\tau \int_0^\tau \frac{c_x(x;\tau_1) d\tau_1}{(\tau-\tau_1)^\alpha} \right] dx. \quad (2.2.13)$$

Преобразуем подынтегральное выражение, вводя обозначения

$f(\tau) = c_x(x; \tau)$, $f(\tau_1) = c_x(x; \tau_1)$. В результате получим

$$\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t D_\alpha c_x d\tau \int_0^\tau \frac{c_x(x; \tau_1) d\tau_1}{(\tau - \tau_1)^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t D_\alpha f(\tau) d\tau \int_0^\tau \frac{f(\tau_1) d\tau_1}{(\tau - \tau_1)^\alpha}. \quad (2.2.14)$$

Теперь на основании известной [74] формулы

$$\int_0^\infty t^{\mu-1} \cos kt d\tau = \frac{\Gamma(\mu)}{k^\mu} \cos \frac{\mu\pi}{2}, \quad k > 0, \quad 0 < \mu < 1, \quad (2.2.15)$$

которая при $k = \tau - \tau_1$, $\mu = \alpha$ принимает вид

$$\frac{1}{(\tau - \tau_1)^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(\alpha) \cos \frac{\alpha\pi}{2}} \int_0^\infty t^{\alpha-1} \cos(\tau - \tau_1) t d\tau, \quad (2.2.16)$$

выражение (2.2.14) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t D_\alpha(x; \tau) f(\tau) d\tau \int_0^\tau \frac{f(\tau_1) d\tau_1}{(\tau - \tau_1)^\alpha} = \\ & = \frac{1}{\Gamma(\alpha) \Gamma(1-\alpha) \cos \frac{\alpha\pi}{2}} \int_0^t D_\alpha(x; \tau) f(\tau) d\tau \int_0^\tau f(\tau_1) d\tau_1 \int_0^\infty \xi^{\alpha-1} \cos \xi(\tau - \tau_1) d\xi = \\ & = \frac{1}{\Gamma(\alpha) \Gamma(1-\alpha) \cos \frac{(1-\alpha)\pi}{2}} \left\{ \int_0^\infty \xi^{\alpha-1} d\xi \int_0^\tau D_\alpha(x; \tau) f(\tau) \cos \xi \tau d\tau \int_0^\tau f(\tau_1) \cos \xi \tau_1 d\tau_1 + \right. \\ & \quad \left. + \int_0^\infty \xi^{\alpha-1} d\xi \int_0^t D_\alpha(x; \tau) f(\tau) \sin \xi \tau d\tau \int_0^\tau f(\tau_1) \sin \xi \tau_1 d\tau_1 \right\}. \quad (2.2.20) \end{aligned}$$

В выражении (2.2.17) преобразуем первое слагаемое

$$\begin{aligned} & \int_0^t D_\alpha(x; \tau) f(\tau) \cos \xi \tau d\tau \int_0^\tau f(\tau_1) \cos \xi \tau_1 d\tau_1 = \frac{1}{2} \int_0^t D_\alpha(x; \tau) \left[\int_0^\tau f(\tau) \cos \xi \tau_1 d\tau_1 \right]^2 d\tau = \\ & = \frac{1}{2} \int_0^t D_\alpha(x; \tau) d \left[\int_0^\tau f(\tau) \cos \xi \tau_1 d\tau_1 \right]^2 = \frac{1}{2} D_\alpha(x; t) \left(\int_0^t f(\tau) \cos \xi \tau d\tau \right)^2 - \\ & \quad - \frac{1}{2} \int_0^t (D_\alpha)_\tau(x; \tau) \left(\int_0^\tau f(\tau) \cos \xi \tau_1 d\tau_1 \right)^2 d\tau. \quad (2.2.18) \end{aligned}$$

Выполняя аналогичные действия, покажем, что

$$\begin{aligned} \int_0^t D_\alpha(x; \tau) f(\tau) \sin \xi \tau d\tau \int_0^\tau f(\tau_1) \sin \xi \tau_1 d\tau_1 &= \frac{1}{2} \int_0^t D_\alpha(x; \tau) d \left[\int_0^\tau f(\tau_1) \sin \xi \tau_1 d\tau_1 \right]^2 = \\ &= \frac{1}{2} D_\alpha(x; t) \left(\int_0^t f(\tau_1) \sin \xi \tau d\tau \right)^2 - \frac{1}{2} \int_0^t (D_\alpha)_\tau(x; \tau) \left(\int_0^\tau f(\tau_1) \sin \xi \tau_1 d\tau_1 \right)^2. \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

Нетрудно заметить, что для равенства (2.2.17), в силу условий $D_\alpha(x; t) \geq k > 0$, $(D_\alpha)_\tau(x; t) \leq 0$, с учетом выражений (2.2.18), (2.2.19), справедлива следующая оценка

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t D_\alpha(x; \tau) f(\tau) d\tau \int_0^\tau \frac{f(\tau_1) d\tau_1}{(\tau - \tau_1)^\alpha} = \\ &= \frac{1}{2\Gamma(\alpha)\Gamma(1-\alpha)\cos\frac{(1-\alpha)\pi}{2}} \left\{ \int_0^\infty \xi^{\alpha-1} d\xi D_\alpha(x; t) \left(\int_0^t f(\tau) \cos \xi \tau d\tau \right)^2 - \right. \\ &- \int_0^\infty \xi^{\alpha-1} d\xi \int_0^t (D_\alpha)_\tau(x; \tau) \left(\int_0^\tau f(\tau) \cos \xi \tau_1 d\tau_1 \right)^2 d\tau + \int_0^\infty \xi^{\alpha-1} d\xi D_\alpha(x; t) \left(\int_0^t f(\tau_1) \sin \xi \tau d\tau \right)^2 \\ &\left. - \int_0^t (D_\alpha)_\tau(x; \tau) \left(\int_0^\tau f(\tau_1) \sin \xi \tau_1 d\tau_1 \right)^2 \int_0^\infty \xi^{\alpha-1} d\xi \right\} \geq 0. \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

По описанной схеме определяем оценку для трех других повторных интегралов левой части равенства (2.2.17). В результате получим если $\beta(x; t) \geq 0$, $\beta_t(x; t) \leq 0$, то

$$J_2 = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t d\tau \int_0^\tau \beta(x; \tau) c(x; \tau) \int_0^\tau \frac{c(x; \tau_1) d\tau_1}{(\tau - \tau_1)^\alpha} dx \geq 0; \quad (2.2.21)$$

если $\nu(x; t) \geq 0$, $\nu_t(x; t) \leq 0$, то

$$J_3 = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t dt \int_0^t \nu(x; \tau) c_x(x; \tau) \int_0^\tau \frac{c(x; \tau_1) d\tau_1}{(\tau - \tau_1)^\alpha} dx; \quad (2.2.22)$$

если $\nu_x(x; t) \geq 0$, $\nu_{xt}(x; t) \leq 0$, то

$$J_4 = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t d\tau \int_0^t v_x(x; \tau) c(x; \tau) \int_0^\tau \frac{c(x; \tau_1) d\tau_1}{(\tau - \tau_1)^\alpha} dx. \quad (2.2.23)$$

В силу полученных оценок (2.2.21) – (2.2.23) для выражения (2.2.12) справедливо более сильное неравенство

$$\begin{aligned} \|c_*\|_0^2 &\leq c_m \|\beta\|_{2, \Omega}^2 + c_m \int_0^t \|c_*(x; \tau)\|_0^2 d\tau + \|c_*(x; 0)\|_0^2, \\ \|c_*\|_0^2 &\leq M \left(F(t) + \int_0^t \|c_*(x; 0)\|_0^2 d\tau \right), \end{aligned} \quad (2.2.24)$$

где $F(t) = c_m \|\beta\|_{2, \Omega}^2 + \|c_*(x; 0)\|_0^2$, $M \geq c_m$ – некоторая известная постоянная.

Применив к неравенству (2.2.24) лемму 5.5 [42, стр. 112], получим сформулированное неравенство (2.2.2), из которого следует единственность и непрерывная зависимость решения задачи 2.1.1 от входных данных.

§2.3. Построение конечно-разностного аналога для модельного дробного уравнения миграции загрязнений подземных вод

Поиск аналитического решения корректно поставленной задачи 2.1.1 связан со значительными математическими трудностями, поэтому для построения ее решения она редуцируется к численно-разностному аналогу.

Для построения конечно-разностного аналога обобщенного дробного уравнения, лежащего в основе решения задачи 2.1.1, примем допущение, которое не умаляет общности рассуждений, что начальное условие (2.1.8) для уравнения (2.1.7) принимает частный вид

$$c(x;0) = f(x), \quad (2.3.1)$$

а также будем считать, что знакоположительные функции $D_\alpha(x; y)$, $v(x; y)$, $\beta(x; y)$, входящие в дробное уравнение миграции (2.1.7) таковы, что:

$$0 < w_1 < D_\alpha(x; y) < w_2, v(x; y) < w_3, \beta(x; y) < w_4, w_5 = \max_i \{w_i\}. \quad (2.3.2)$$

В соответствии с общими принципами построения конечно-разностных аналогов [59, стр. 70] в области $\bar{\Omega}$ рассматривается сетка $\bar{\omega}_{hk} = \{(ih \times j\tau), i = 0, 1, 2, \dots, n, j = 0, 1, 2, \dots, s\}$ с шагами $h = l/n$, $\tau = T/s$. Обозначим через $c_i = c(x_i; t_j)$ значение в функции $c(x; t)$ в узле $(x_i; t_j)$, определенной на $\bar{\omega}_{hk}$, через k_i , v_i , β_i значения функций $D_\alpha(x; t)$, $v(x; t)$, $\beta(x; t)$ в точке $(x_i; t_j)$ соответственно, а через \bar{c}_i , \bar{k}_i , \bar{v}_i , $\bar{\beta}_i$ значения этих же функций в узловой точке $(x_i; t_{j+1})$ сетки $\bar{\omega}_{hk}$.

Формулы разностного дифференцирования [9, стр. 226] в узловых точках сетки $\bar{\omega}_{hk}$ соответственно принимают вид:

$$\left(\frac{kc}{x}\right)_{x,i} = \frac{1}{h^2} [k_{i+1}(c_{i+1} - c_i) - k_i(c_i - c_{i-1})], \quad (2.3.3)$$

$$(vc)_x = \frac{1}{h} [v_i c_i - v_{i-1} c_{i-1}], \quad (2.3.4)$$

Используя функциональную зависимость (2.1.2) дробных операторов Римана – Лиувилля $D_{0t}^\alpha c$ и Капуто $\partial_{0t}^\alpha c$ порядка $\alpha \in (0; 1)$

$$\begin{aligned} D_{0t}^\alpha c &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{c(x; \tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{c'_\tau(x; \tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} + \frac{c(x; 0)}{\Gamma(1-\alpha)t^\alpha} = \\ &= \partial_{0t}^\alpha c + \frac{f(x)}{\Gamma(1-\alpha)t^\alpha}, \end{aligned}$$

получим

$$\partial_{0t}^\alpha c = D_{0t}^\alpha c - \frac{f(x)}{\Gamma(1-\alpha)t^\alpha}. \quad (2.3.5)$$

Представим оператор дробного интегро-дифференцирования Капуто $\partial_{0t}^\alpha c$ в виде конечной суммы интегралов по отрезкам $[t_{s-1}; t_s]$, расположенным между узлами расчетной сетки

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{c'_\tau(x; \tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{s=l_{s-1}}^j \int_{t_{s-1}}^{t_s} \frac{c'_\tau(x; \tau) d\tau}{(t_j-\tau)^\alpha} = \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{s=l_{s-1}}^j \int_{t_{s-1}}^{t_s} \frac{c'_\tau(x; t_{s-1/2}) + c''_{\tau\tau}(x; \xi)(\tau - t_{s-1/2})}{(t_j-\tau)^\alpha} d\tau = \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{s=1}^j c'_\tau(x; t_{s-1/2}) \int_{t_{s-1}}^{t_s} (t_j-\tau)^{-\alpha} d\tau + \frac{c''_{\tau\tau}(x; \xi)}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{s=1}^{j-1} \int_{t_{s-1}}^{t_s} \frac{(\tau - t_{s-1/2})}{(t_j-\tau)^\alpha} d\tau = \\ &= \frac{1}{\tau \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=1}^j (t_{j-s-1}^{1-\alpha} - t_{j-s}^{1-\alpha}) (c_i^s - c_i^{s-1}) + \\ &+ \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{s=l_{s-1}}^j \int_{t_{s-1}}^{t_s} \frac{c''_{\tau\tau}(x; \xi)(\tau - t_{s-1/2})}{(t_j-\tau)^\alpha} d\tau + O(\tau^2), \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

где ξ – произвольная точка между τ и $t_{s-1/2}$.

Так как для второго слагаемого в правой части равенства (2.3.6) справедлива оценка

$$\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{s=l_{s-1}}^j \int_{t_{s-1}}^{t_s} \frac{c''_{\tau\tau}(x; \xi)(\tau - t_{s-1/2})}{(t_j-\tau)^\alpha} d\tau \leq \frac{M\tau}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{s=1}^j (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s+1}^{1-\alpha}) = O(\tau),$$

где $|c''_{\tau\tau}| < M$, то для регуляризованной дробной производной Капуто в

$(j+1)$ -м слое справедлив численный аналог

$$\partial_{0t}^\alpha c = \Delta_{0t}^\alpha c + O(\tau),$$

где

$$\Delta_{0t}^\alpha c = \frac{1}{\tau \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=1}^{j+1} (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s+1}^{1-\alpha}) (c_i^s - c_i^{s-1}). \quad (2.3.7)$$

Из выражения (2.3.7) следует, что разностный оператор Δ_{0t}^α , аппроксимирующий дробную производную по Капуто, не является локальным, так как он определен на всем множестве расчетных узлов текущего временного слоя, что является математическим описанием нелинейных эффектов памяти: «частицы хорошо помнят, как они сюда попали».

В выражении (2.3.7) выполним алгебраические преобразования

$$\begin{aligned} \Delta_{0t}^\alpha c &= \frac{1}{\tau \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=1}^{j+1} (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s+1}^{1-\alpha}) (c_i^s - c_i^{s-1}) = \\ &= \frac{1}{\tau \Gamma(2-\alpha)} \left[c_i^0 (t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + c_i^1 (t_{j+1}^{1-\alpha} - 2t_j^{1-\alpha} + t_{j-1}^{1-\alpha}) + c_i^2 (t_j^{1-\alpha} - 2t_{j-1}^{1-\alpha} + t_{j-2}^{1-\alpha}) + \right. \\ &\quad \left. + c_i^{j-1} (t_2^{1-\alpha} - t_1^{1-\alpha}) + c_i^j (t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + c_i^{j+1} t_1^{1-\alpha} \right] = \\ &= \frac{1}{\tau \Gamma(2-\alpha)} \left[\sum_{s=1}^{j-1} c_i^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}) + \right. \\ &\quad \left. + f(x_i) (t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + c_i^j (t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + c_i^{j+1} t_1^{1-\alpha} \right]. \quad (2.3.8) \end{aligned}$$

Равенство (2.3.8) позволяет получить еще одно разностное представление для регуляризованного дробного разностного оператора $\Delta_{0t}^\alpha c$

$$\begin{aligned} \Delta_{0t}^\alpha c &= \frac{1}{\tau \Gamma(2-\alpha)} \left[\sum_{s=1}^{j-1} c_i^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}) + \right. \\ &\quad \left. + f(x_i) (t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + c_i^j (t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + c_i^{j+1} t_1^{1-\alpha} \right]. \quad (2.3.9) \end{aligned}$$

Нелокальному дифференциальному уравнению (2.1.7), учитывая формулы (2.3.5), (2.3.7), поставим в соответствие линейное неявное разностное уравнение с весами

$$m\Delta_{\sigma t}^{\alpha}c = \Lambda(\sigma\bar{c} + (1-\sigma)c) + \beta c_m - \frac{mf(x)}{\Gamma(1-\alpha)t^{\alpha}}, \quad (2.3.10)$$

где

$$\Lambda c = (kc_x)_x - (vc)_x - \beta c \quad (2.3.11)$$

Разностное уравнение (2.3.10), с учетом равенств (2.3.3), (2.3.4), (2.3.9) и введенными обозначениями, преобразуется к виду

$$\begin{aligned} & \frac{m}{\Gamma(2-\alpha)} \left[\sum_{s=1}^{j-1} c_i^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}) + \right. \\ & \left. + f(x_i)(t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + c_i(t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + \hat{c}_i t_1^{1-\alpha} \right] = \\ & = \frac{\tau\sigma}{h^2} [\bar{k}_{i+1}(\hat{c}_{i+1} - \bar{c}_i) - \bar{k}_i(\bar{c}_i - \bar{c}_{i-1})] - \frac{\tau(1-\sigma)}{h} [v_i c_i - v_{i-1} c_{i-1}] + \\ & + \frac{\tau(1-\sigma)}{h^2} [k_{i+1}(c_{i+1} - c_i) - k_i(c_i - c_{i-1})] - \frac{\tau\sigma}{h} [\hat{v}_i \bar{c}_i - \hat{v}_{i-1} \bar{c}_{i-1}] + \\ & - \sigma\tau\hat{\beta}_i \bar{c}_i - (1-\sigma)\tau\beta_i c_i + \tau\beta_i c_m - \frac{mf(x_i)}{\Gamma(1-\alpha)t^{\alpha-1}}. \end{aligned} \quad (2.3.12)$$

Для анализа устойчивости полученной численно-разностной модели нелинейной миграции (2.3.10), (2.3.11) представим равенство (2.3.12) в каноническом виде

$$A_i \bar{c}_{i-1} - B_i \bar{c}_i + D_i \hat{c}_{i+1} = -F_i. \quad (2.3.13)$$

В равенстве (2.3.13) коэффициенты A_i , B_i , D_i и слагаемое F_i определяются формулами

$$A_i = \frac{\sigma\tau}{h^2} \bar{k}_i + \frac{\tau\sigma}{h} \hat{v}_{i-1}, \quad B_i = \frac{\tau\sigma}{h^2} (\bar{k}_{i+1} + \bar{k}_i) + \frac{\tau\sigma}{h} \hat{v}_i + \frac{mt_1^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} + \tau\sigma\hat{\beta}_i, \quad D_i = \frac{\tau\sigma}{h^2} \bar{k}_{i+1},$$

$$\begin{aligned} F_i = & -\frac{m}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=1}^{i-1} (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}) (c_i^s - c_i^{s-1}) + \\ & + \left[\frac{t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} - \frac{\tau(1-\sigma)}{h^2} (k_{i+1} + k_i + hv_i + h^2\beta_i) \right] c_i + \tau\beta_i c_m + \\ & + \frac{\tau(1-\sigma)}{h^2} (k_{i+1}c_{i+1} + k_{i-1}c_{i-1} + hv_{i-1}c_{i-1}) - \frac{mf(x_i)}{\Gamma(1-\alpha)t^{\alpha-1}} - \frac{mf(x_i)}{\Gamma(2-\alpha)} (t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}). \end{aligned}$$

На основании принципа максимума [60, стр. 53], достаточным условием существования решения разностного уравнения (2.3.13), то есть достаточным условием для выполнения неравенства

$$\|c^{j+1}\|_C \leq \left\| \frac{F}{S} \right\|_C, \quad \|c\|_C = \max_{0 \leq i \leq N} |c_i|, \quad (2.3.14)$$

является выполнение условия

$$S = |B| - |A| - |D| > 0. \quad (2.3.15)$$

Действительно,

$$S = \frac{mt_1^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} + \tau\sigma\hat{\beta}_i + \frac{\tau\sigma}{h}\hat{v}_i + \frac{\tau\sigma}{h}\hat{v}_{i-1} \geq \frac{mt_1^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} > 0.$$

Используя известное [74] соотношение

$$-t_{j+1}^{1-\alpha} + 2t_j^{1-\alpha} - t_{j-1}^{1-\alpha} > 0,$$

нетрудно получить, что

$$\begin{aligned} \frac{t_2^{1-\alpha} - t_1^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} c_j^{j-1} - \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=1}^{j-1} (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s+1}^{1-\alpha}) (c_i^s - c_i^{s-1}) &\leq \\ &\leq \frac{k^{1-\alpha}(2^{1-\alpha} - 1)}{\Gamma(2-\alpha)} \max_{0 \leq s \leq j} \|c^s\|_C. \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

Из выполнения неравенств (2.3.15) и (2.3.16) очевидно следует выполнение неравенства

$$\frac{\tau^{1-\alpha}(2 - 2^{1-\alpha})}{\Gamma(2-\alpha)} \geq \frac{w_5(1-\sigma)\tau}{h^2},$$

откуда получаем условие для τ^α

$$\tau^\alpha \leq \frac{(2 - 2^{1-\alpha})h^2}{w_5(1-\sigma)\Gamma(2-\alpha)}. \quad (2.3.17)$$

С помощью (2.3.12), (2.3.17) получаем оценку для F_i

$$\|F\|_C \leq \frac{\tau^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \max_{0 \leq s \leq j} \|c^s\|_C + \|\beta^s\|_C \tau. \quad (2.3.18)$$

Из (2.3.13) с учетом (2.3.15) находим

$$\|\bar{c}\|_C \leq \|c^0\|_C + \Gamma(2-\alpha) \sum_{j=0}^l \|\beta^j\|_C \tau^\alpha.$$

Таким образом, доказано, что если имеет место соотношение

$$\tau^\alpha \leq \frac{(2-2^{1-\alpha})h^2}{2w_5\Gamma(2-\alpha)(1-\sigma)},$$

то разностная схема с весами (2.3.3), (2.3.4), (2.3.7), (2.2.10) устойчива в $C(\Omega)$.

§2.4. Построение вычислительного алгоритма реализации модельной задачи нелинейной миграции загрязнений

Вопрос аппроксимации задачи 2.1.1 к разностной задаче решается путем построения конечно-разностных аналогов для начально-краевых условий (2.1.9), (2.1.10), которые получаем на основе построенной в параграфе §2.3 неявной схемы с весами (2.3.3), (2.3.4), (2.3.7), (2.2.10), в соответствии с которой нелинейное уравнение миграции линеаризуется алгебраическим уравнением вида (2.3.12).

В соответствии с формулами численного дифференцирования [67] равенство (2.3.1) и локальное краевое условие на правой границе области Ω (2.1.10) принимают вид:

$$c_i^0 = f(x_i), \quad \frac{\bar{c}_n - \bar{c}_{n-1}}{h} = 0. \quad (2.4.1)$$

Интеграл в правой части нелокального краевого условия (2.1.9) в соответствии с общими методами построения разностных интегральных операторов представим в виде суммы интегралов по отрезкам $[t_{s-1}; t_s]$, расположенным между узлами расчетной сетки

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{c(0; \tau)}{(t-\tau)^\alpha} d\tau &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{s=l_{j-1}}^j \int c(0; t_s) (t_j - \tau)^{-\alpha} d\tau = \\ &= \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=1}^j c(0; t_s) (t_{j-s+1}^{1-\alpha} - t_{j-s}^{1-\alpha}) + O(\tau). \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

С учетом формул (2.4.1) и (2.4.2) краевое условие (2.1.9) редуцируется к разностному уравнению вида

$$-\bar{k}_0 \frac{\bar{c}_1 - \bar{c}_0}{h} = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=1}^{j+1} c(0; t_s) (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s+1}^{1-\alpha}). \quad (2.4.3)$$

Выполняя алгебраические преобразования в равенстве (2.4.3)

$$\bar{c}_0 \left(\frac{\bar{k}_0 \Gamma(2-\alpha) - h t_1^{1-\alpha}}{k_0 \Gamma(2-\alpha)} \right) = \bar{c}_1 + \frac{h}{k_0 \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=1}^j c(0; t_s) (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s+1}^{1-\alpha})$$

находим, что

$$\bar{c}_0 = \frac{\bar{k}_0 \Gamma(2-\alpha) \bar{c}_1}{\bar{k}_0 \Gamma(2-\alpha) - h t_1^{1-\alpha}} + \frac{h}{\bar{k}_0 \Gamma(2-\alpha) - h t_1^{1-\alpha}} \sum_{s=1}^j c_0^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s+1}^{1-\alpha}). \quad (2.4.4)$$

Таким образом, дифференциальная нелокальная начально-краевая задача 2.1.1 эквивалентно сводится к разностной задаче в следующей постановке.

Задача 2.4.1. Найти в области $\bar{\omega}_{h\tau}$ решение $\bar{c}_i = c(x_i; t_{j+1})$ алгебраического уравнения (2.3.12), удовлетворяющее нелокальным начально-краевым условиям (2.4.1), (2.4.4).

Для решения задачи 2.4.1 рассматривается модифицированный метод прогонки, в соответствии с которым значение аппроксимирующей функции $c(x_i; t_{j+1})$ в узловой точке $(x_i; t_{j+1})$ представимо в виде

$$\bar{c}_i = \bar{a}_i \bar{b}_i + \bar{a}_i \bar{c}_{i+1}. \quad (2.4.5)$$

Выполняя в разностном уравнении (2.3.12) алгебраические преобразования, запишем его в виде

$$\bar{c}_i \left[r t_1^{1-\alpha} + \sigma \bar{k}_{i+1} + \sigma \bar{k}_i + \sigma h \bar{v}_i + \sigma h^2 \bar{\beta}_i \right] =$$

$$\begin{aligned}
&= \bar{\sigma}_{\bar{k}_{i+1}\bar{c}_{i+1} + \bar{c}_{i-1}}[\bar{\sigma}_{\bar{k}_i + \sigma h \bar{v}_{i-1}}] - f(x_i) \left(r(t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + \frac{mh^2}{\Gamma(1-\alpha)r^\alpha} \right) - \\
&- c_i \left[r(t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + (1-\sigma)(k_{i+1} + k_i + hv_i + h^2\beta_i) \right] + \\
&+ (1-\sigma)(k_{i+1}c_{i+1} + k_i c_{i-1} + hv_{i-1}c_{i-1}) + h^2\beta_i c_m - \\
&- r \sum_{s=1}^{j-1} c_i^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}), \tag{2.4.6}
\end{aligned}$$

где $r = \frac{mh^2}{\pi\Gamma(2-\alpha)}$.

Входящее в выражение (2.4.6) значение аппроксимирующей функции c в слое $i-1$ в силу (2.4.5) представимо в виде

$$\bar{c}_{i-1} = \bar{a}_{i-1}\bar{b}_{i-1} + \bar{a}_{i-1}\bar{c}_i. \tag{2.4.7}$$

Тогда в силу (2.4.7) разностное уравнение (2.4.6) преобразуется к виду

$$\begin{aligned}
&\bar{c}_i \left[r t_1^{1-\alpha} + \bar{\sigma}_{\bar{k}_{i+1}} + \bar{\sigma}_{\bar{k}_i} + \sigma h \bar{v}_i + \sigma h^2 \bar{\beta}_i - \bar{a}_{i-1}(\bar{\sigma}_{\bar{k}_i + \sigma h \bar{v}_{i-1}}) \right] = \\
&= \bar{\sigma}_{\bar{k}_{i+1}\bar{c}_{i+1} + \bar{a}_{i-1}\bar{b}_{i-1}}(\bar{\sigma}_{\bar{k}_i + \sigma h \bar{v}_{i-1}}) - f(x_i) \left(r(t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + \frac{mh^2}{\Gamma(1-\alpha)r^\alpha} \right) - \\
&- c_i \left[r(t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + (1-\sigma)(k_{i+1} + k_i + hv_i + h^2\beta_i) \right] + \\
&+ (1-\sigma)(k_{i+1}c_{i+1} + k_i c_{i-1} + hv_{i-1}c_{i-1}) + h^2\beta_i c_m - \\
&- r \sum_{s=1}^{j-1} c_i^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}),
\end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}
&\bar{c}_i = \bar{\sigma}_{\bar{k}_{i+1}\bar{c}_{i+1} / q + \bar{a}_{i-1}\bar{b}_{i-1}}(\bar{\sigma}_{\bar{k}_i + \sigma h \bar{v}_{i-1}}) / q - \\
&- c_i \left[r(t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + (1-\sigma)(k_{i+1} + k_i + hv_i + h^2\beta_i) \right] / q + \\
&+ (1-\sigma)(k_{i+1}c_{i+1} + k_i c_{i-1} + hv_{i-1}c_{i-1}) / q + h^2\beta_i c_m / q - \\
&- \frac{r}{q} \sum_{s=1}^{j-1} c_i^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}) - \\
&- \frac{f(x_i)}{q} \left(r(t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + \frac{mh^2}{\Gamma(1-\alpha)r^\alpha} \right), \tag{2.4.8}
\end{aligned}$$

где $q = rt_1^{1-\alpha} + \sigma\bar{k}_{i+1} + \sigma\bar{k}_i + \sigma h\bar{v}_i + \sigma h^2\bar{\beta}_i - \bar{a}_{i-1}(\sigma\bar{k}_i + \sigma h\bar{v}_{i-1})$.

Из непосредственного сравнения выражений (2.4.5) и (2.4.8) получаем рекуррентные формулы для нахождения прогночных коэффициентов:

$$\bar{a}_i = \sigma\bar{k}_{i+1} / q, \quad (2.4.9)$$

$$\begin{aligned} \bar{b}_i = & \bar{a}_{i-1}\bar{b}_{i-1}(\bar{k}_i + h\bar{v}_{i-1}) / \bar{k}_{i+1} - \frac{f(x_i)}{\sigma\bar{k}_{i+1}} \left(r(t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + \frac{mh^2}{\Gamma(1-\alpha)\tau^\alpha} \right) - \\ & - c_i \left[r(t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + (1-\sigma)(k_{i+1} + k_i + hv_i + h^2\beta_i) \right] / \sigma\bar{k}_{i+1} + \\ & + (1-\sigma)(k_{i+1}c_{i+1} + k_i c_{i-1} + hv_{i-1}c_{i-1}) / \sigma\bar{k}_{i+1} + h^2\beta_i c_m / \sigma\bar{k}_{i+1} - \\ & - \frac{r}{\sigma\bar{k}_{i+1}} \sum_{s=1}^{j-1} c_i^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}). \end{aligned} \quad (2.4.10)$$

Для определения первых членов итерационных последовательностей, определяемых соотношениями (2.4.9), (2.4.10), полагаем в равенствах (2.4.5), (2.4.6) $i=1$. Учитывая разностное представление (2.4.4) нелокального условия (2.4.2) на левой границе области $\bar{\omega}_{h\tau}$, находим

$$\bar{c}_1 = \bar{a}_1\bar{b}_1 + \bar{a}_1\bar{c}_2, \quad (2.4.11)$$

$$\begin{aligned} \bar{c}_1 = & \sigma\bar{k}_2\bar{c}_2 / q_1 + \frac{h(\sigma\bar{k}_1 + \sigma h\bar{v}_0)}{q_1(k_0\Gamma(2-\alpha) - ht_1^{1-\alpha})} \sum_{s=1}^j c(0; t_s) (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s+1}^{1-\alpha}) - \\ & - \frac{f(x_1)}{q_1} \left(r(t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + \frac{mh^2}{\Gamma(1-\alpha)\tau^\alpha} \right) - \\ & - c_1 \left[r(t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + (1-\sigma)(k_2 + k_1 + hv_1 + h^2\beta_1) \right] / q_1 + \\ & + (1-\sigma)(k_2c_2 + k_1c_0 + hv_0c_0) / q_1 + h^2\beta_1c_m / q_1 - \\ & - \frac{r}{q_1} \sum_{s=1}^{j-1} c_1^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}), \end{aligned} \quad (2.4.12)$$

где $q_1 = rt_1^{1-\alpha} + \sigma\bar{k}_2 + \sigma\bar{k}_1 + h\sigma\bar{v}_1 + h^2\sigma\bar{\beta}_1 - \frac{k_0\Gamma(2-\alpha)(\sigma\bar{k}_1 + h\sigma\bar{v}_0)}{k_0\Gamma(2-\alpha) - ht_1^{1-\alpha}}$.

Сравнивая коэффициенты в равенствах (2.4.11), (2.4.12), заключаем,

$$\bar{a}_1 = \sigma \bar{k}_2 / q_1, \quad (2.4.13)$$

$$\begin{aligned} \bar{b}_1 = & \frac{h(\bar{k}_1 + h\bar{v}_0)}{\bar{k}_2(\bar{k}_0\Gamma(2-\alpha) - ht_1^{1-\alpha})} \sum_{s=1}^j c(0; t_s) (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - t_{j-s+1}^{1-\alpha}) + \\ & - \frac{f(x_1)}{\sigma k_2} \left(r(t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + \frac{mh^2}{\Gamma(1-\alpha)\tau^\alpha} \right) - \\ & - c_1 \left[r(t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + (1-\sigma)(k_2 + k_1 + hv_1 + h^2\beta_1) \right] / \sigma \bar{k}_2 + \\ & + (1-\sigma)(k_2c_2 + k_1c_0 + hv_0c_0) / \sigma \bar{k}_2 + h^2\beta_1c_m / \sigma \bar{k}_2 - \\ & - \frac{r}{\sigma k_2} \sum_{s=1}^{j-1} c_1^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}). \end{aligned} \quad (2.4.14)$$

Построенные расчетные формулы (2.4.8) – (2.4.10), (2.4.13), (2.4.14) представляют собой эффективный численный алгоритм для расчета прогнозных оценок концентрации загрязнений подземных вод $c = c(x; t)$ в произвольной точке области $\bar{\omega}_{h\tau}$.

На первом этапе, в рамках предлагаемого расчетного алгоритма модифицированного метода прогонки, используя начальное условие Коши, определяем значения функции концентрации на нулевом временном слое $j = 0$: $c_i^0 = f(x_i)$. На каждой последующей итерации определяем значения функции \bar{c}_i в узлах сетки для $(j+1)$ -го слоя области $\bar{\omega}_{h\tau}$. Для этого по рекуррентным соотношениям (2.4.13), (2.4.14), (2.4.9), (2.4.10), реализуя прямой ход модифицированного метода прогонки, определяем коэффициенты a_i , b_i , $i = 1, 2, \dots, n-1$ разностного соотношения (2.4.5). На правой границе области $\bar{\omega}_{h\tau}$ при $x = l$, учитывая равенства (2.4.1) и (2.4.5) находим значения искомой функции в узлах сетки $(n; j+1)$, при $j > 0$

$$\bar{c}_n = \frac{\bar{a}_{n-1} \cdot \bar{b}_{n-1}}{1 - \bar{a}_{n-1}},$$

а затем, реализуя обратный ход изложенного метода, по рекуррентной формуле (2.4.5) находим значения искомой функции \bar{c}_i , ($i = n-1, \dots, 2, 1, 0$) во всех

остальных точках временного $(j+1)$ -го слоя, где $j > 0$.

На рис. 2.1, 2.2 приведены результаты численной реализации предложенного алгоритма. Как следует из графика, учет нелокальности по времени приводит к возникновению скачкообразных малых возмущений концентрации в потоке грунтовых вод, что качественно отличается от известных решений параболического уравнения миграции (1.2.5), которые носят затухающий во времени характер.

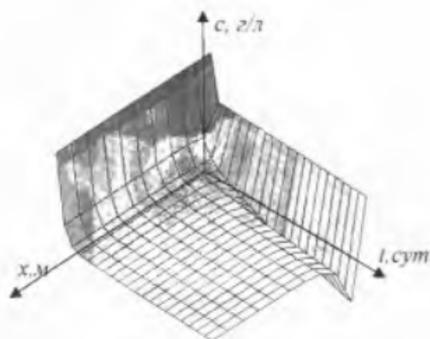


Рис 2.1. $\alpha = 0,5$

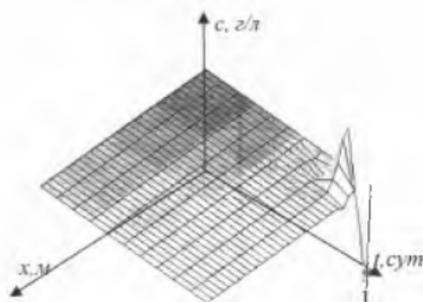


Рис. 2.2. $\alpha = 0,1$

§2.5. Численно-аналитический алгоритм расчета распределения концентрации загрязнения грунтовых подземных вод вблизи источника загрязнения

Математической моделью одномерного движения загрязнения подземных вод в пористых средах, интерпретируемых как среды с фрактальной структурой, в случае, когда коэффициент фрактальной диффузии $D_\alpha = a$ и скорость фрактальной конвекции $v = b$ есть величины постоянные, является частный случай обобщенного модельного уравнения (2.1.7), представимое в виде

$$D_{0t}^\alpha c = a \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - b \frac{\partial c}{\partial x} + \beta(c_m - c), \quad (2.5.1)$$

где $c = c(x; t)$ – концентрация почвенного раствора в точке x слоя $(0; l)$ в момент времени $t \geq 0$.

Для широкого класса задач экологической безопасности, связанных с прогнозом режима загрязнения подземных вод, математической основой является видоизмененная задача Коши для уравнения (2.5.1) в следующей постановке.

Задача 2.5.1. Найти регулярное в любой точке $x \in [0; l]$ и для любого момента времени $t \geq 0$ решение $c = c(x; t)$ уравнения (2.5.1), ограниченное при $t \rightarrow 0$ и удовлетворяющее условиям Коши

$$c(0; t) = \varphi(t), \quad c'_x(0; t) = \psi(t), \quad 0 \leq t \leq T. \quad (2.5.2)$$

В данном случае функция $\varphi(t)$ описывает концентрацию примесей подземных вод, а $\psi(t)$ – поток концентрации на поверхности почвогрунта при $x = 0$ в момент времени t от начального $t = 0$ до расчетного $t = T$.

В основе предлагаемого алгоритма компьютерной реализации решение задачи 2.5.1 в классе ограниченных функций лежит следующая схема.

Пусть $0 < x_0 < x_1 < \dots < x_n < x_{n+1} = l$, $h_i = x_{i+1} - x_i$, $c(x_i; t) = \varphi_i(t)$, $c'_x(x_i; t) = \psi_i(t)$, $i = \overline{0, n}$. В дифференциальном уравнении (2.5.1) введем новую независимую переменную по формуле

$$u_i(x; t) = c(x; t)e^{\mu(x-x_i)}, \quad \mu = \text{const}.$$

Найдем

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x} - u_i \mu \right) e^{-\mu(x-x_i)}, \quad (2.5.3)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} - 2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x} + u_i \mu^2 \right) e^{-\mu(x-x_i)}. \quad (2.5.4)$$

Подставив значения частных производных в уравнение (2.5.1), получим

$$\begin{aligned} D_{0t}^\alpha u_i(x; t) e^{-\mu(x-x_i)} &= a \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} - 2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x} + u_i \mu^2 \right) e^{-\mu(x-x_i)} - \\ &- b \left(\frac{\partial u_i}{\partial x} - u_i \mu \right) e^{-\mu(x-x_i)} + \beta (c_m - u_i e^{-\mu(x-x_i)}), \\ D_{0t}^\alpha u_i(x; t) e^{-\mu(x-x_i)} &= a \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} + (-2\mu a - b) \frac{\partial u_i}{\partial x} + \\ &+ (a\mu^2 + b\mu - \beta) u_i + \beta c_m u_i e^{\mu(x-x_i)}. \end{aligned}$$

Таким образом, функция $u_i = u_i(x; t)$ удовлетворяет следующему уравнению

$$D_{0t}^\alpha u_i = a \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} + \gamma \frac{\partial u_i}{\partial x} + f_i, \quad (2.5.5)$$

и начальным условиям

$$u_i(x; t) \Big|_{x=x_i} = u(x; t) e^{\mu(x-x_i)} \Big|_{x=x_i} = u(x_i; t) = \varphi_i(t), \quad (2.5.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial x} \Big|_{x=x_i} &= \left(\frac{\partial u}{\partial x} + u \mu \right) e^{\mu(x-x_i)} \Big|_{x=x_i} = \\ &= u_x(x_i; t) + \mu u(x_i; t) = \psi_i(t) + \mu \varphi_i(t) = v_i(t), \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

где $2\mu = -\frac{b}{a}$, $\gamma = a\mu^2 + \mu b - \beta$, $f_i = \beta c_m e^{\mu(x-x_i)}$.

Система (2.5.5) – (2.5.7) аппроксимируется нагруженным разностным уравнением

$$D_{0t}^{\alpha} \frac{1}{h_i} \det \begin{vmatrix} u(x_i; \eta) & x_i - x \\ u(x_{i+1}; \eta) & x_{i+1} - x \end{vmatrix} = a \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} + f_i(x).$$

Точное решение фрактальной миграции

$$\left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right]_{\varphi_{i+1} A_i^{\mu}} \begin{vmatrix} \varphi_i & x_i - x \\ \varphi_{i+1} A_i^{\mu} & x_{i+1} - x \end{vmatrix} = h_i \left[a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f_i(x) \right], \quad \text{где } A_i^{\mu} = e^{\mu h_i} \quad (2.5.8)$$

примем за приближенное решение уравнения (2.5.1). Из уравнения (2.5.8) находим

$$\begin{aligned} & \left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right] \left\{ \varphi_i \int_{x_i}^x (x_{i+1} - x) dx - \varphi_{i+1} A_i^{\mu} \int_{x_i}^x (x_i - x) dx \right\} = \\ & = h_i \left[a \int_{x_i}^x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x} \right) + \beta c_m \int_{x_i}^x e^{\mu(x-x_i)} dx \right], \\ & - \left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right] \left\{ \varphi_i [(x_{i+1} - x)^2 - h_i^2] - \varphi_{i+1} A_i^{\mu} (x_i - x)^2 \right\} = \\ & = 2h_i \left[a \frac{\partial u_i}{\partial x} - a \frac{\partial u_i}{\partial x} \right]_{x=x_i} + \frac{\beta c_m}{\mu} \left[e^{\mu(x-x_i)} - 1 \right], \\ & - \left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right]_{\varphi_{i+1} A_i^{\mu}} \begin{vmatrix} \varphi_i & (x_i - x)^2 \\ \varphi_{i+1} A_i^{\mu} & (x_{i+1} - x)^2 - h_i^2 \end{vmatrix} = 2h_i \left[a \frac{\partial u_i}{\partial x} + \frac{\partial F_i}{\partial x} - av_i \right], \quad (2.5.9) \end{aligned}$$

где

$$F_i = \int_{x_i}^x (x - \xi) f_i(\xi) d\xi = \frac{\beta c_m \left[\mu(x_i - x) + e^{\mu(x-x_i)} - 1 \right]}{\mu^2}, \quad \frac{\partial F_i}{\partial x} = \frac{\beta c_m \left[e^{\mu(x-x_i)} - 1 \right]}{\mu}.$$

Из равенства (2.5.9) следует

$$\begin{aligned} & - \left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right] \left\{ \varphi_i \int_{x_i}^x [(x_{i+1} - x)^2 - h_i^2] dx - \varphi_{i+1} A_i^{\mu} \int_{x_i}^x (x_i - x)^2 dx \right\} = \\ & = 2h_i \int_{x_i}^x \left[a \frac{\partial u_i}{\partial x} + \frac{\partial F_i}{\partial x} - 2av_i \right] dx, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 -\left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma\right] \left\{ \varphi_i \left[h_i^2 (x_i - x) - \frac{1}{3} (x_{i+1} - x)^3 + \frac{1}{3} h_i^3 \right] - \frac{1}{3} \varphi_{i+1} A_i^{\mu} (x_i - x)^3 \right\} = \\
 = 2h_i \left[a(u_i - \varphi_i) + F_i - av_i (x - x)^3 \right].
 \end{aligned}$$

Полученное равенство запишем в виде

$$\begin{aligned}
 -\left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma\right] \left\{ \begin{array}{l} \varphi_i \\ \varphi_{i+1} A_i^{\mu} \end{array} \begin{array}{l} (x - x_i)^3 / 3 \\ (x_i - x) h_i^2 + [h_i^3 - (x_{i+1} - x)^3] / 3 \end{array} \right\} = \\
 = 2h_i \left[a(u_i - \varphi_i) + F_i + av_i (x - x_i) \right]. \quad (2.5.10)
 \end{aligned}$$

Из (2.5.9), (2.5.10) в силу (2.5.7), (2.5.8) при $x = x_{i+1}$ имеем

$$-h_i^2 \left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right] \left(\varphi_i - \varphi_{i+1} A_i^{\mu} \right) = 2h_i \left[a(v_{i+1} - v_i) + \frac{\beta c_m (A_i^{\mu} - 1)}{\mu} \right],$$

$$\frac{h_i^3}{3} \left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right] \left(2\varphi_i + \varphi_{i+1} A_i^{\mu} \right) = 2h_i \left[a\varphi_{i+1} A_i^{\mu} - a\varphi_i + \frac{\beta c_m (A_i^{\mu} - 1 - \mu u_i)}{\mu^2} - av_i u_i \right].$$

Отсюда в силу обратимости оператора $\left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right]$ получаем рекуррентные формулы

$$\left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right] \varphi_{i+1} = 2h_i^{-1} A_i^{-\mu} \left[a(v_{i+1} - v_i) + c_m \beta (A_i^{\mu} - 1) / \mu \right] + A_i^{-\mu} \left(D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right) \varphi_{i+1}, \quad (2.5.11)$$

$$\left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right] \varphi_{i+1} = 2A_i^{-\mu} \left\{ 3h_i^{-2} (F_{i+1} - a\varphi_i - av_i h_i) - \left[D_{0t}^{\alpha} - \gamma \right] \varphi_i \right\}, \quad (2.5.12)$$

где $F_{i+1} = \frac{\beta c_m (A_i^{\mu} - 1 - \mu u_i)}{\mu^2}$, $\gamma_i = \gamma + 6ah_i^{-2}$, $\varphi_0 = \varphi_0(t)$, $v_0 = \mu\varphi_0(t) + \psi_0(t)$.

Формулы (2.5.11), (2.5.12) представляют собой эффективный численный алгоритм при решении задач распределения концентрации нестационарного процесса загрязнения вблизи от источника стока или выброса загрязнений.

§2.6. Математическая модель распределения концентрации загрязнения подземных вод в средах с фрактальной структурой

Процесс миграции загрязненных подземных вод, при определенной схематизации, как было показано ранее в §2.1, в случае, когда влияние кинетики массообмена между жидкостью и поровым пространством реологической среды незначительно или полностью отсутствует, описывается дробным дифференциальным уравнением

$$mD_{0t}^{\alpha}c(x; \tau) = D_{\alpha} \frac{\partial^2 c(x; t)}{\partial x^2} - v_{\alpha} \frac{\partial c(x; t)}{\partial x}, \quad (2.6.1)$$

где $c = c(x; t)$ – функция независимых переменных x и t , которая описывает концентрацию загрязнения подземных вод в точке x в момент времени t ; D_{0t}^{α} – оператор дробного дифференцирования порядка $\alpha \in (0; 1)$; D_{α} и v_{α} – соответственно коэффициент фрактальной диффузии и величина фрактальной скорости, учитывающие влияние фрактальной структуры порового пространства на конвективно-диффузионный процесс.

Дифференциальное уравнение дробной миграции (2.6.1) выступает в качестве математической модели [16, 19] многих процессов переноса в реологических средах со сложной структурой порового пространства. Для характеристики нелинейных эффектов режима загрязнения, определяемого многообразием и сложностью взаимодействия между жидкостью и фрактальной структурой пористой среды, следуя [50], присоединим к уравнению (2.6.1) видоизмененное условие Коши в нелокальной постановке

$$\lim_{t \rightarrow 0} D_{0t}^{\alpha-1} c(x; \tau) = \varphi(x) \quad (2.6.2)$$

или в локальной

$$\lim_{t \rightarrow 0} t^{1-\alpha} c(x; t) = c_0(x), \quad (2.6.3)$$

где $\varphi(x)$, $c_0(x)$ – некоторые заданные, непрерывно дифференцируемые,

функции.

Условия (2.6.2), (2.6.3), возникающие при математическом моделировании различных нелинейных явлений в динамических системах, соответствуют доле поровых каналов или ветвей в почвогрунтах, открытых для просачивания загрязненных подземных вод. Для большинства природных сред порядок α оператора D_{0l}^α отражает фрактальную размерность пористой среды.

Задача качественной и количественной оценки распределения концентрации загрязнения подземных вод в масштабе медленного времени сводится к вопросу разрешимости в полубесконечной области $\Omega = \{(x;t) : 0 < x < l, 0 < t < \infty\}$ уравнения (2.6.1), удовлетворяющего условию (2.6.3) и краевым условиям

$$c(0;t) = c_1, \quad c(l;t) = c_2,$$

где $c_1 = \text{const} > 0$, $c_2 = \text{const} > 0$.

Решение уравнения (2.6.1) с дробной по времени производной будем искать в классе функций $c = c(x;t)$, удовлетворяющих всем условиям разложимости в ряды вида

$$c(x;t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n b_n(t).$$

Гипотеза [51, стр. 38] о том, что в точке $x_0 \in (0;l)$ реологической среды с фрактальной структурой порового пространства между концентрацией загрязнения подземных вод и временем t существует простейшая корреляционная зависимость вида

$$c(x_0;t) = \frac{\lambda t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)},$$

где параметры $\lambda = \text{const} > 0$, $\alpha \in (0;1)$, позволяет искомого решение $c = c(x;t)$ уравнения дробной миграции (2.6.1) искать в виде следующего ряда

$$c(x;t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n(x) t^{\alpha(n+1)-1}}{\Gamma(\alpha+n\alpha)} = \frac{a_0(x) t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} + \frac{a_1(x) t^{2\alpha-1}}{\Gamma(2\alpha)} + \frac{a_2(x) t^{3\alpha-1}}{\Gamma(3\alpha)} + \dots, \quad (2.6.4)$$

в котором $\Gamma(z)$ – гамма-функция Эйлера, а коэффициенты $a_0(x)$, $a_1(x)$, ..., $a_n(x)$, ... – неизвестные функции, подлежащие определению.

Искомое решение $c(x;t)$ уравнения (2.6.1), согласно правилу, по которому оператор дробного дифференцирования действует на степенную функцию t^μ

$$D_{0,t}^\alpha t^\mu = \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-\alpha+1)} t^{\mu-\alpha},$$

представим в виде

$$D_{0,t}^\alpha c(x;t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n(x) t^{n\alpha-1}}{\Gamma(n\alpha)} = \frac{a_1(x) t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} + \frac{a_2(x) t^{2\alpha-1}}{\Gamma(2\alpha)} + \frac{a_3(x) t^{3\alpha-1}}{\Gamma(3\alpha)} + \dots \quad (2.6.5)$$

Дифференциальное уравнение миграции (2.6.1) в классе функций $c(x;t)$, представимых в виде степенного ряда (2.6.4), эквивалентно следующему уравнению

$$\begin{aligned} m \frac{a_1(x) t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} + m \frac{a_2(x) t^{2\alpha-1}}{\Gamma(2\alpha)} + \dots = D_\alpha \frac{a_0''(x) t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} + D_\alpha \frac{a_1''(x) t^{2\alpha-1}}{\Gamma(2\alpha)} + \\ + D_\alpha \frac{a_2''(x) t^{3\alpha}}{\Gamma(3\alpha)} + \dots - \nu_\alpha \frac{a_0'(x) t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} - \nu_\alpha \frac{a_1'(x) t^{2\alpha-1}}{\Gamma(2\alpha)} - \nu_\alpha \frac{a_2'(x) t^{3\alpha-1}}{\Gamma(3\alpha)} - \dots \quad (2.6.6) \end{aligned}$$

Из выражения (2.6.6), приравнявая коэффициенты при одинаковых показателях степени $t^{k\alpha-1}$, $k=0,1,2,\dots$, для определения неизвестных коэффициентов ряда (2.6.4), находим следующую систему рекуррентных соотношений

$$a_1(x) = \frac{D_\alpha}{m} a_0''(x) - \frac{\nu_\alpha}{m} a_0'(x),$$

$$a_2(x) = \frac{D_\alpha}{m} a_1''(x) - \frac{\nu_\alpha}{m} a_1'(x) = \frac{D_\alpha^2}{m^2} \partial^4 a_0(x) - \frac{2\nu_\alpha D_\alpha}{m^2} \partial^3 a_0(x) + \frac{\nu_\alpha^2}{m^2} \partial^2 a_0(x),$$

...

$$a_n(x) = \frac{D_\alpha}{m} a_{n-1}^*(x) - \frac{\nu_\alpha}{m} a'_{n-1}(x) = \frac{D_\alpha^n}{m^n} \frac{\partial^{2n} a_0(x)}{\partial x^{2n}} - \frac{n\nu_\alpha D_\alpha^{n-1}}{m^n} \frac{\partial^{2n-1} a_0(x)}{\partial x^{2n-1}} +$$

$$+ \frac{n(n-1)D_\alpha^{n-2}\nu_\alpha^2}{2m^n} \frac{\partial^{2n-2} a_0(x)}{\partial x^{2n-2}} - \dots + (-1)^n \frac{\nu_\alpha^n}{m^n} \frac{\partial^n a_0(x)}{\partial x^n}, \dots \quad (2.6.7)$$

Из общего представления всех решений системы рекуррентных уравнения (2.6.7), с помощью непосредственных алгебраических преобразований, получена следующая формула

$$a_n(x) = \frac{1}{m^n} \sum_{k=0}^n (-1)^{2n-k} D_\alpha^{n-k} \nu_\alpha^k \binom{k}{n} \frac{\partial^{2n-k} a_0(x)}{\partial x^{2n-k}}. \quad (2.6.8)$$

Здесь биномиальный коэффициент $\binom{k}{n} = \frac{n!}{k!(n-k)!} = \frac{\Gamma(n+1)}{k!\Gamma(n-k+1)}$.

В справедливости обобщенной формулы (2.6.8) нетрудно убедиться, используя метод математической индукции. Формула (2.6.8) справедлива, если

$n=1$: $a_1(x) = \frac{D_\alpha}{m} a_0^*(x) - \frac{\nu_\alpha}{m} a'_0$. Допустим, что формула справедлива и для любого l

$$a_l(x) = \frac{1}{m^l} \sum_{k=0}^l (-1)^{2l-k} D_\alpha^{l-k} \nu_\alpha^k \binom{k}{l} \frac{\partial^{2l-k} a_0(x)}{\partial x^{2l-k}}. \quad (2.6.9)$$

Из рекуррентных соотношений (2.6.7) в силу формулы (2.6.9) имеем

$$a_{l+1}(x) = \frac{D_\alpha}{m} a_l^*(x) - \frac{\nu_\alpha}{m} a'_l(x) = \frac{D_\alpha}{m^{l+1}} \sum_{k=0}^l (-1)^{2l-k} D_\alpha^{l-k} \nu_\alpha^k \binom{k}{l} \frac{\partial^{2l+2-k} a_0(x)}{\partial x^{2l+2-k}} -$$

$$- \frac{\nu_\alpha}{m^{l+1}} \sum_{k=0}^l (-1)^{2l-k} D_\alpha^{l-k} \nu_\alpha^k \binom{k}{l} \frac{\partial^{2l+1-k} a_0(x)}{\partial x^{2l+1-k}}. \quad (2.6.10)$$

Группируя в выражении (2.6.10) слагаемые с биномиальными коэффициентами $\binom{k-1}{l}$ и $\binom{k}{l}$, и учитывая, что $\binom{k}{l} + \binom{k-1}{l} = \binom{k}{l+1}$, получим, что формула также верна и для любых $l+1$ членов.

В обобщенной формуле (2.6.8) неизвестную функцию $a_0(x)$ определяем, используя условие (2.6.3). Тогда в силу (2.6.4), находим, что

$$a_0(x) = \Gamma(\alpha) c_0(x). \quad (2.6.11)$$

Таким образом, искомое решение задачи (2.6.1), (2.6.3) представимо в виде расчетного алгоритма, реализуемого формулами (2.6.11) и

$$c(x; t) = a_0(x) + \frac{1}{m^n} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{2n-k} D_{\alpha}^{n-k} v_{\alpha}^k t^{\alpha(k+1)-1}}{\Gamma(\alpha + n\alpha)} \binom{k}{n} \frac{\partial^{2n-k} a_0(x)}{\partial x^{2n-k}}. \quad (2.6.12)$$

Глава 3. Расчетные методы и вычислительный эксперимент нелинейной миграции загрязнений в природных средах

§3.1. Неявный метод оценки фрактальной размерности по известным характеристикам загрязнения подземных вод

Общие закономерности процесса конвективно-диффузионного переноса примесей подземными водами и влияние на этот процесс макро и микро-дисперсии в пористых природных средах, удовлетворительным способом описываемые дифференциальным уравнением нелинейной миграции (1.1.16), существенным образом зависят от входящего в него коэффициента дисперсии D^* . Коэффициент дисперсии зависит от геометрических характеристик и структуры пористой среды и свойств фильтрующейся жидкости. Основные закономерности дисперсии для различных сред в зависимости от скорости фильтрации описываются следующими [31, стр. 294] экспериментально установленными формулами:

$$D^* = D_M + \lambda v + f v^2, \quad (3.1.1)$$

$$D^* = D_M + \lambda v. \quad (3.1.2)$$

Здесь коэффициент λ характеризует структуру и геометрию порового пространства, $v = v(x; y; z)$ – скорость фильтрующейся жидкости.

Коэффициент конвективной дисперсии D^* в том случае, когда скорость фильтрации потока велика, но закон Дарси считается справедливым, не зависит от молекулярного перемешивания и тогда для дисперсии, в силу формул (3.1.1) и (3.1.2), справедлива формула

$$D^* = \lambda v + f v^2. \quad (3.1.3)$$

При незначительных скоростях фильтрации, когда $v^2 \leq v$, для коэффициента дисперсии принимается линейная зависимость вида

$$D^* = \lambda v. \quad (3.1.4)$$

Вывод модельных уравнений дисперсии (3.1.1) – (3.1.4) неразрывно связан с принципом локальности, согласно которому природные пористые системы рассматриваются как неоднородные с усредненными фильтрационными характеристиками для всей системы в целом. При этом при решении многих задач прикладного характера коэффициент дисперсии принимается постоянным, как правило, экспериментально определяемым для каждого типа почв и почвогрунтов. Эти предпосылки обеспечивают получение общих удовлетворительных результатов для составления прогнозных оценок значения концентрации загрязненных подземных вод.

Однако, используемый в расчетах, принцип локальности во многих случаях может привести к несовпадению истинной концентрации загрязнения с прогнозной, рассчитанной по усредненным параметрам пласта. Это объясняется тем, что неоднородность порового пространства, оказывающая влияние на характер распространения миграции, вызывает ускоренное продвижение загрязненных веществ по более проницаемым поровым каналам, что приводит к нелинейным явлениям. Используемые методы расчета классической теории миграции не способны описать возникающие эффекты памяти и проникновения «языков» примесей.

Для учета нелинейных особенностей процесса миграции примесей выдвигается гипотеза о том, что параметр λ в модельном представлении коэффициента дисперсии (3.1.4), характеризующий структуру порового пространства и описывающий топологию внутренней структуры почв и почвогрунтов, учитывает также его фрактальные особенности, то есть $\lambda = d_f$ – фрактальный параметр.

Уравнение миграции при равномерном одномерном стационарном режиме фильтрации принимает вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_f \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x}, \quad (3.1.5)$$

где $D_f = d_f \nu$.

Дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа (3.1.5) является вполне приемлемой математической моделью для прогноза примесей в подземных водах. Надежность этих таких прогнозов в значительной степени зависит от достоверности кинетического параметра D_f .

Задача определения коэффициента фрактальной дисперсии D_f является одной из центральных проблем прогноза концентрации в потоке подземных вод в природных пористых средах, которая сводится к решению обратных задач миграции.

Рассмотрим, в соответствии с общим методом решения обратных задач, полученное ранее решение задачи 1.3.1, которое представим в виде

$$\begin{aligned}
 c(x;t) = & \frac{2\pi c_2 e^{\frac{x}{2d_f}} d_f^2}{l^2} \sum_{n=1}^{\infty} n \sin \frac{\pi n x}{l} \int_0^{\frac{\nu}{d_f m}} e^{-\frac{4\pi^2 n^2 d_f^2 + l^2}{4l^2} \rho} d\rho - \\
 & - \frac{\pi e^{\frac{1}{2d_f}(x-l)}}{l^2} d_f^2 c_3 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n n \sin \frac{\pi n x}{l} \int_0^{\frac{\nu}{d_f m}} e^{-\frac{4\pi^2 n^2 d_f^2 + l^2}{4l^2} \rho} d\rho + \\
 & + \frac{2e^{\frac{x}{2d_f}} d_f c_1}{l} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{(4\pi^2 n^2 d_f^2 + l^2) \nu}{4d_f m l^2}} \sin \frac{\pi n x}{l} \int_0^{l/d_f} e^{-\frac{1}{2}\tau} \sin \frac{\pi n d_f \tau}{l} d\tau. \quad (3.1.6)
 \end{aligned}$$

Выражение (3.1.6), вычисляя непосредственно интегралы в правой части, запишем в виде

$$\begin{aligned}
 c(x;t) = & 8\pi e^{\frac{x}{2d_f}} d_f^2 c_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \sin \frac{\pi n x}{l}}{4\pi^2 n^2 d_f^2 + l^2} \left[1 - e^{-\frac{(4\pi^2 n^2 d_f^2 + l^2) \nu}{4d_f m l^2}} \right] - \\
 & - 4\pi e^{\frac{1}{2d_f}(x-l)} d_f^2 c_3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n n \sin \frac{\pi n x}{l}}{4\pi^2 n^2 d_f^2 + l^2} \left[1 - e^{-\frac{(4\pi^2 n^2 d_f^2 + l^2) \nu}{4d_f m l^2}} \right] +
 \end{aligned}$$

$$+ \frac{2e^{\frac{x}{2d_f}} d_f c_1}{l} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{(4\pi^2 n^2 d_f^2 + l^2)x}{4d_f m l^2}} \sin \frac{\pi n x}{l} \int_0^{l/d_f} e^{-\frac{1}{2}\tau} \sin \frac{\pi n d_f \tau}{l} d\tau. \quad (3.1.7)$$

Из (3.1.7) получаем следующее асимптотическое представление функции концентрации загрязнений $c = c(x; t)$ при $t \rightarrow \infty$

$$c(x) = \frac{2e^{\frac{x}{2d_f}} c_2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \sin \frac{\pi n x}{l}}{n^2 + (l/2\pi d_f)^2} - \frac{e^{\frac{1}{2d_f}(x-l)} c_3}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n n \sin \frac{\pi n x}{l}}{n^2 + (l/2\pi d_f)^2}. \quad (3.1.8)$$

Выражение (3.1.8), учитывая известные соотношения [33, стр. 54] для сумм тригонометрических рядов

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \sin n x}{n^2 + a^2} = \frac{\pi \operatorname{sh} a(\pi - x)}{2 \operatorname{sh} a\pi}, \quad [0 < x < 2\pi];$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n n \sin n x}{n^2 + a^2} = \frac{\pi \operatorname{sh} a x}{2 \operatorname{sh} a\pi}, \quad [-\pi < x < \pi]$$

представим в виде

$$c(x) = \frac{2c_2 e^{x/2d_f} \operatorname{sh}[(l-x)/2d_f] + c_3 e^{(l-x)/2d_f} \operatorname{sh}(x/2d_f)}{2\operatorname{sh}(l/2d_f)}. \quad (3.1.9)$$

Полученное выражение (3.1.9) представляет собой нелинейное алгебраическое уравнение относительно пространственной переменной x . Оно, в случае, когда значение концентрации $c(x)$ в произвольной точке $x = l_*$ известно, представляет нелинейное алгебраическое уравнение относительно неизвестного фрактального параметра d_f

$$c(l_*) = \frac{2c_2 e^{l_*/2d_f} \operatorname{sh}[(l-l_*)/2d_f] + c_3 e^{(l-l_*)/2d_f} \operatorname{sh}(l_*/2d_f)}{2\operatorname{sh}(l/2d_f)}. \quad (3.1.10)$$

Модельное уравнение (3.1.10) представляет собой эффективный численный алгоритм расчета фрактального коэффициента дисперсии D_f .

§3.2. Численная реализация алгоритма расчета концентрации загрязнений фрактального процесса миграции

Рассмотрим процесс одномерной миграции загрязнений потоком подземных вод в природной пористой системе. В параграфе 1.1 показано, что распространение примесей потоком подземных вод в случае установившейся равномерной фильтрации в однородных пористых средах описывается дифференциальным с постоянными коэффициентами вида

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} - \beta(c - c_m). \quad (3.2.1)$$

Здесь D^* , v , β – постоянные величины, определяемые в лабораторных условиях или в результате решения обратных начально-краевых задач для уравнения (3.2.1).

Дифференциальное уравнение (3.2.1) является уравнением в частных производных второго порядка параболического типа. Полученные ранее численно-аналитические решения дифференциального уравнения (3.2.1) с различными типами начально-краевых условий, рассмотренные в работах [8, 39, 62, 67, 24, 25, 26, 28, 29], не учитывают конечности скорости любого возмущения, аномальных явлений и эффектов нелинейной миграции в сильнопористых природных средах.

Рассмотрим динамику изменения концентрации загрязнений грунтовых вод в сильнопористых средах, интерпретируемых как среды с фрактальной структурой. В этом случае, она описывается обобщенным нелинейным уравнением с дробной производной Капуто по времени

$$m \partial_{0+}^{\alpha} c(x; \tau) = D_{\alpha} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} - \beta(c - c_m) - \frac{mc(x; 0)}{\tau^{\alpha} \Gamma(2 - \alpha)}. \quad (3.2.2)$$

Здесь фрактальный коэффициент $D_{\alpha} = const$ описывает дробную диффузию загрязненных веществ в потоке подземных вод, а нелокальное диффе-

ренциальное уравнение (3.2.2) учитывает возникающие в процессе миграции нелинейные эффекты памяти. Для анализа такого процесса в прямоугольной области $\Omega = \{(x; t) : 0 < x < l, 0 < t < T\}$ рассматривается нелокальная начально-краевая задача в следующей постановке.

Задача 3.2.1. Найти регулярное решение $c = c(x; t)$ уравнения миграции (3.2.2), удовлетворяющее начально-краевым условиям

$$c(x; 0) = c_0(x), \quad (3.2.3)$$

$$v(c(0; t) - c^*) = D_\alpha \frac{\partial c(0; t)}{\partial x}, \quad \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=l} = 0. \quad (3.2.4)$$

Первое условие равенств (3.2.4) представляет собой математическую модель [45] баланса загрязнений на левой границе выделенного слоя $[0; l]$: расход загрязняющего вещества поступающего в пористую среду с фильтрационным потоком $c \cdot v$ равен расходу вещества вследствие действия сил диффузии и гравитации, а второе уравнение равенств (3.2.4) описывает допустимое пренебрежение обратного диффузионного потока на правой границе слоя $[0; l]$.

Для численно-аналитической реализации задачи 3.2.1 с учетом известных [10] разностных соотношений:

$$c''_{xx} = \frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}}{h^2}, \quad c'_x = \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{h} \quad (3.2.5)$$

рассматривается разностное алгебраическое уравнение вида

$$m\Delta_{\alpha}^{\alpha} c = \Lambda(\sigma \bar{c} + (1 - \sigma)c) + \beta c_m - \frac{mf(x)}{\Gamma(1 - \alpha)r^{\alpha}}, \quad (3.2.6)$$

где

$$\Lambda c = kc_{xx} - vc_x - \beta c,$$

а разностный оператор $\Delta_{\alpha}^{\alpha} c$ определяется равенством (2.3.8) или (2.3.10).

Таким образом, дифференциальная нелокальная начально-краевая задача 3.2.1 эквивалентно сводится к разностной задаче в следующей постановке.

Задача 3.2.2. Найти в области $\bar{\omega}_{hr}$ функцию $c_i = c(x_i; t_j)$, удовлетворяющую алгебраическому уравнению (3.2.6), нелокальным начальными краевым условиям (2.4.1) и условию

$$c_0 = \frac{kc_1 + \nu c^* h}{h\nu + k}.$$

На основе полученных ранее расчетных рекуррентных формул (2.4.5), (2.4.9), (2.4.10), (2.4.13), (2.4.14), полагая в них значения k , ν , β постоянными, не трудно получить численный алгоритм решения разностной задачи 3.2.2 в виде следующего рекуррентного соотношения:

$$\bar{c}_i = \bar{a}_i \bar{b}_i + \bar{a}_i \bar{c}_{i+1}, \quad (3.2.7)$$

в котором коэффициенты \bar{a}_i , \bar{b}_i ($i = 2, 3, \dots, n-1$) определяются с помощью итерационных формул вида:

$$\bar{a}_i = \sigma k / q, \quad (3.2.8)$$

$$\begin{aligned} \bar{b}_i = & \bar{a}_{i-1} \bar{b}_{i-1} (k + h\nu) / k - \frac{f(x_i)}{\sigma k} \left(r \left(t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha} \right) + \frac{mh^2}{\Gamma(1-\alpha)r^\alpha} \right) - \\ & - c_i \left[r \left(t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha} \right) + (1-\sigma)(2k + h\nu + h^2\beta) \right] / \sigma k + \\ & + (1-\sigma)(kc_{i+1} + kc_{i-1} + h\nu c_{i-1}) / \sigma k + h^2 \beta c_m / \sigma k - \\ & - \frac{r}{\sigma k} \sum_{s=1}^{i-1} c_i^s \left(t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha} \right), \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

где $q = r t_1^{1-\alpha} + 2\sigma k + \sigma h\nu + \sigma h^2\beta - \bar{a}_{i-1}(\sigma k + \sigma h\nu)$.

При $i = 1$, на основании формул (2.4.13), (2.4.14), коэффициенты \bar{a}_1 и \bar{b}_1 соответственно принимают вид:

$$\bar{a}_1 = \sigma k / q_1, \quad (3.2.10)$$

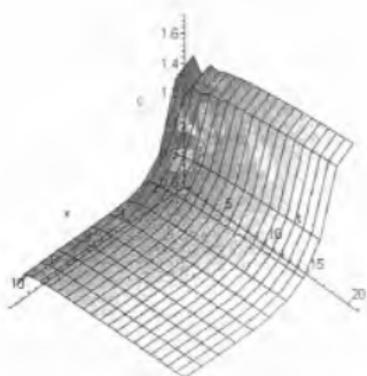
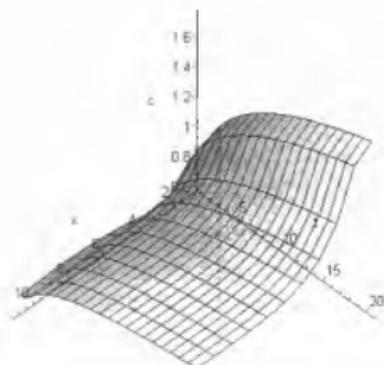
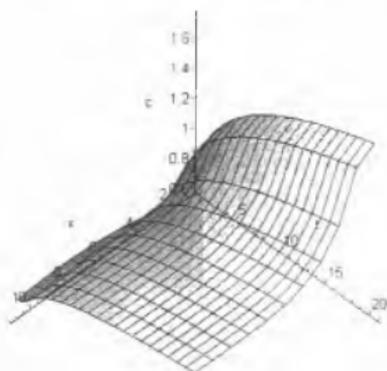
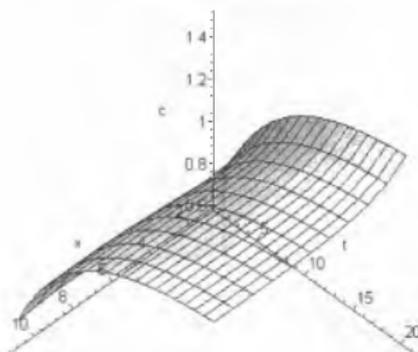
$$\begin{aligned} \bar{b}_1 = & \frac{\nu c^* h(k + h\nu)}{k(h\nu + k)} - \frac{f(x_1)}{\sigma k} \left(r \left(t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha} \right) + \frac{mh^2}{\Gamma(1-\alpha)r^\alpha} \right) - \\ & - c_1 \left[r \left(t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha} \right) + (1-\sigma)(2k + h\nu + h^2\beta) \right] / \sigma k + \\ & + (1-\sigma)(kc_2 + kc_0 + h\nu c_0) / \sigma k + h^2 \beta c_m / \sigma k - \end{aligned}$$

$$-\frac{r}{\sigma k} \sum_{s=1}^{j-1} c_1^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}), \quad (3.2.11)$$

где $q_1 = rt_1^{1-\alpha} + 2\sigma k + h\sigma v + h^2\sigma\beta - \frac{k(\sigma k + \sigma h v)}{h v + k}$.

Результаты численного расчета решения (3.2.8) – (3.2.11), реализованного в системе Maple для различных значений параметров α , приведены на рис. 3.1 – 3.4 (рис. 3.1 при $\alpha = 0,1$, рис. 3.2 при $\alpha = 0,5$, рис. 3.3 при $\alpha = 0,7$, рис. 3.4 при $\alpha = 1$). Анализ полученных графических результатов показывает, что имеет место качественное отличие распределения концентрации загрязнений в потоке при их описании с дробными производными. Вместо экспоненциального, характерного для классических решений (рис. 3.4, $\alpha = 1$), распределения изменения концентрации, имеем затухающий степенной характер распределения примесей. Это свойство изменения концентрации загрязнений в потоке подземных вод является физическим отражением фрактальных свойств процесса миграции.

Учет нелокальности по времени в модельном уравнении (3.2.2) приводит, как это видно из рис. 3.1 – 3.3 к резкому скачкообразному изменению концентрации при заданном значении времени, что качественно отличает полученное решение от имеющихся ранее традиционных решений на основе классического уравнения миграции.

Рис. 3.1. $\alpha = 0,1$ Рис. 3.2. $\alpha = 0,5$ Рис. 3.3. $\alpha = 0,7$ Рис. 3.4. $\alpha = 1$

§3.3. Расчетно-экспериментальный анализ нелинейных эффектов миграции загрязнения

При одновременном движении в почвогрунтах воды и примесей, сопровождающимся различными физико-химическими изменениями и выносом солей из грунтов, происходит изменение плотности концентрации загрязнения подземных вод, коэффициента диффузии и проницаемости грунтов.

При достаточно длительном взаимодействии породы с подземными водами определенной концентрации $c = c(x; t)$ изменение сорбируемого компонента в твердой фазе описывается общим уравнением кинетики сорбции (1.1.10). Вид нелинейной функции в правой части (1.1.10) зависит от состава подземных вод, концентрации примеси, состава воды, характера и интенсивности поглощения растворенных примесей в подземных водах. Кинетика этих разнородных процессов изучена слабо и вид функциональной зависимости $N = f(c; N; \gamma_{cm})$ устанавливается, как правило, по экспериментальным данным. Учитывая исключительное разнообразие и сложность различных физико-химических процессов, формирующих сорбцию и поглощение растворенных веществ при фильтрации и неизбежную, в связи с этим, приближенность прогнозов, как правило, исходят из более простых, а вместе с тем более общих, уравнений кинетики. В частности, когда скорость сорбционного процесса лимитируется скоростью конвективно-диффузионной миграции вещества, уравнение кинетики миграции в однородных пористых средах представляется функций вида

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta(c - \gamma N), \quad (3.3.1)$$

где β – коэффициент скорости сорбции; γ – коэффициент распределения вещества в равновесных условиях. Параметры β , γ представляют собой обобщенные параметры процесса поглощения, характеризующие удаление

растворенных веществ из воды при движении потока подземных вод. Их значения существенным образом определяются геометрией порового пространства [44].

При решении практических задач миграции актуальными являются частные случаи процесса сорбции (1.1.10), такие как необратимая сорбция и равновесный режим. При необратимой сорбции, которая характеризуется неограниченно возрастающей сорбционной емкостью водоносного пласта, равенство (3.3.1) принимает вид

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta c, \quad \gamma \ll 1. \quad (3.3.2)$$

При значительной скорости сорбционного процесса процесс сорбции приобретает равновесный характер. Полагая в уравнении (3.3.1) $\beta = \infty$, получаем модельное уравнение кинетики вида

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (3.3.3)$$

то есть скорость сорбции в случае сорбционного равновесия прямо пропорциональна скорости изменения концентрации вещества в растворе.

Модельные уравнения (3.3.1) – (3.3.3), описывающие кинетику массообмена в однородных пористых средах, не учитывают возникающие нелинейные эффекты массообмена в сплошных средах, интерпретируемых как среды с фрактальной структурой. Физическая интерпретация дробных производных [53] позволяет обобщить уравнение кинетики введением вместо обычных производных дробных. Будем считать, что временная зависимость для процессов кинетики, учитывающая взаимодействие физической системы в целом описывается с помощью оператора дробного интегрирования D_{0t}^{α} , то есть справедливо равенство

$$\frac{\partial N}{\partial t} \approx D_{0t}^{\alpha} N, \quad \alpha \in (0; 1). \quad (3.3.4)$$

В соответствии с равенством (3.3.4) обобщенные уравнения кинетики сорбции принимают следующий вид

$$D_{0t}^{\alpha} N = \beta(c - \gamma N), \quad (3.3.5)$$

$$D_{0t}^{\alpha} N = \beta c, \quad (3.3.6)$$

$$D_{0t}^{\alpha} N = \frac{1}{\gamma} D_{0t}^{\alpha} c. \quad (3.3.7)$$

В случае, когда концентрация загрязнений в некоторый момент времени t нам известна, решение видоизмененной задачи Коши

$$\lim_{t \rightarrow 0} D_{0t}^{\alpha-1} N(x; t) = N_0(x)$$

позволяет определить сорбционную емкость пласта в заданной точке пласта.

Обобщенное уравнение миграции (2.1.3), в соответствии с принимаемой гипотезой (3.3.4), можно представить в виде

$$m D_{0t}^{\alpha} c = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\alpha}(x; t) \frac{\partial c}{\partial x} \right] - \frac{\partial [\nu(x; t)c]}{\partial x} - D_{0t}^{\alpha} N. \quad (3.3.8)$$

В случае установившегося нелинейного сорбционного равновесия, уравнение фрактальной миграции (3.3.8) с учетом равенства (3.3.7), принимает вид

$$m_{\text{эф}} D_{0t}^{\alpha} c = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\alpha}(x; t) \frac{\partial c}{\partial x} \right] - \frac{\partial [\nu(x; t)c]}{\partial x}, \quad (3.3.9)$$

где $m_{\text{эф}} = m + \frac{1}{\gamma}$ – коэффициент эффективной фрактальной пористости.

Анализ влияния нелинейных эффектов сорбции на процесс распространения загрязнений потоком подземных вод, в случае нелинейного сорбционного равновесия, при постоянных значениях кинетических параметров миграции, сводится к вопросу разрешимости следующей нелокальной начально-краевой задачи.

Задача 3.3.1. Найти в области $\Omega = \{(x; t) : 0 < x < l, 0 < t < T\}$ регулярное решение $c = c(x; t)$ уравнения

$$m_{\text{эф}} \partial_{0t}^{\alpha} c = D_{\alpha} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \nu \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{m_{\text{эф}} c(x; 0)}{\tau^{\alpha} \Gamma(2 - \alpha)}, \quad (3.3.10)$$

удовлетворяющее начально-краевым условиям

$$c(x;0) = c_0(x), \quad \frac{\partial c(x;l)}{\partial x} = 0, \quad (3.3.11)$$

$$D_\alpha \frac{\partial c(0;t)}{\partial x} = -u c(0;t). \quad (3.3.12)$$

Как известно [45], краевое условие (3.3.12) описывает процесс засоления в природных пористых средах, где $u = const$ – скорость испарения влаги с поверхности почвы.

Следует отметить, что задача 3.3.1 является частным случаем задачи 3.2.1 и поэтому ее решение определяется в виде следующих рекуррентных соотношений:

$$\bar{c}_i = \bar{a}_i \bar{b}_i + \bar{a}_i \bar{c}_{i+1}, \quad (3.3.13)$$

$$\bar{a}_i = \sigma k / q, \quad (3.3.14)$$

$$\begin{aligned} \bar{b}_i = & \bar{a}_{i-1} \bar{b}_{i-1} (k + h\nu) / k - \frac{f(x_i)}{\sigma k} \left(r(t_j^{1-\alpha} - t_{j+1}^{1-\alpha}) + \frac{mh^2}{\Gamma(1-\alpha)t^\alpha} \right) - \\ & - c_i \left[r(t_2^{1-\alpha} - 2t_1^{1-\alpha}) + (1-\sigma)(2k + h\nu) \right] / \sigma k + \\ & + (1-\sigma)(kc_{i+1} + kc_{i-1} + h\nu c_{i-1}) / \sigma k - \\ & - \frac{r}{\sigma k} \sum_{s=1}^{j-1} c_i^s (t_{j-s+2}^{1-\alpha} - 2t_{j-s+1}^{1-\alpha} + t_{j-s}^{1-\alpha}), \end{aligned} \quad (3.3.15)$$

где $q = rt_1^{1-\alpha} + 2\sigma k + \sigma h\nu - \bar{a}_{i-1}(\sigma k + \sigma h\nu)$.

Численная реализация расчетного алгоритма (3.3.13) – (3.3.15) приведена на рисунках 3.5 – 3.8. Графики решения задачи 3.3.1 описывают изменение концентрации почвенного раствора в зависимости от параметра сорбционного равновесия γ при конкретных значениях кинетических параметров массообмена: $m = 0,5$, $D_\alpha = 0,7$, $\nu = 1,1$, $\gamma = 0,1, 0,01, 0,5$. На рисунке 3.5 дано графическое представление решения задачи 3.3.1 при отсутствии массообменных процессов, то есть когда $m_{\text{эф}} = m$. Интерпретация численных значений, представленных на рис. 3.5 – 3.8, позволяет сделать вывод о том, что с уменьшением параметра γ процессы вымывания солей асимптотически замедляются (при $t \rightarrow \infty$). Это можно объяснить тем, что сильные сорбенты,

характеризующиеся малыми величинами γ ($\gamma \ll 1$), обладают большой емкостью поглощения, и для вымывания загрязнений из таких почв требуется большее количество промывной воды.

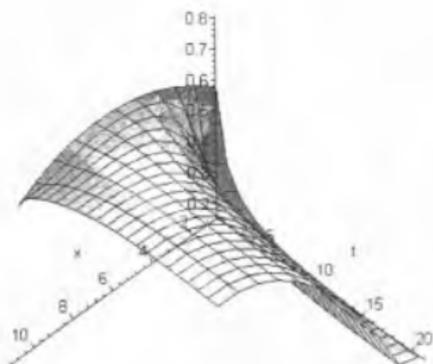


Рис. 3.5. Массообменные процессы отсутствуют, $m_{эф} = m$

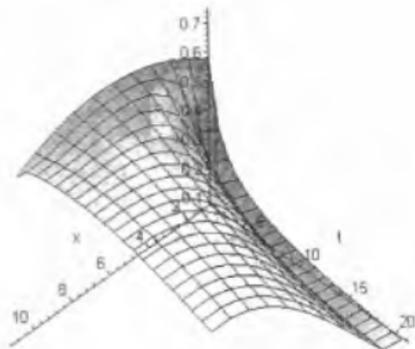


Рис. 3.6. $\gamma = 0,1$

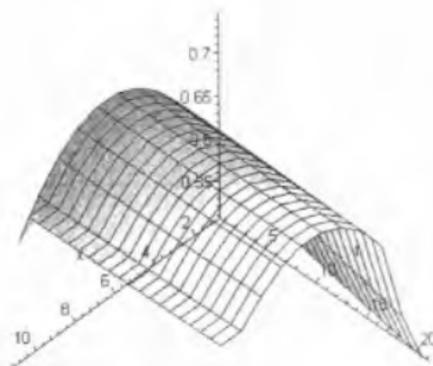


Рис. 3.7. $\gamma = 0,01$

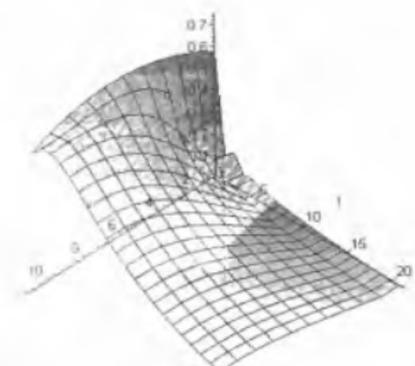


Рис. 3.8. $\gamma = 0,5$

§3.4. Расчетно-экспериментальный анализ асимптотического распределения концентрации загрязнения подземных вод

Асимптотическое распределение концентрации загрязнения подземных вод в пористых средах с фрактальной структурой при периодическом поступлении загрязняющих веществ во фрактальную среду описывается с помощью расчетных алгоритмов (2.5.9), (2.5.10). Анализ такого распределения показывает, что определяющими параметрами процесса миграции являются фрактальная диффузия, фрактальная размерность порового пространства и фрактальная скорость.

Численная реализация решения (2.5.9), (2.5.10) при заданных значениях миграционных параметров: $D_\alpha = 0,6$, $\nu = 0,8$, $m = 0,73$, с изменением фрактального параметра $\alpha \in (0;1)$ при начальном периодическом поступлении в подземные воды загрязняющего вещества, описываемое функцией $c_0(x;0) = 0,8 + 0,7 \cos(\pi x / 4)$ [1], приведены на рис. 3.9 – 3.12.

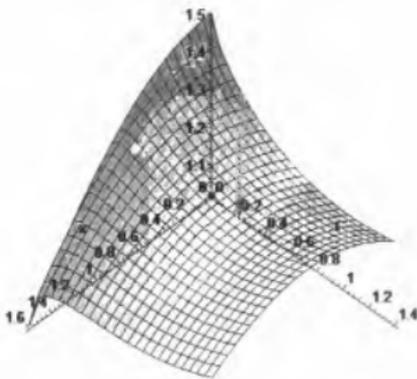


Рис. 3.9. $\alpha = 0,2$.

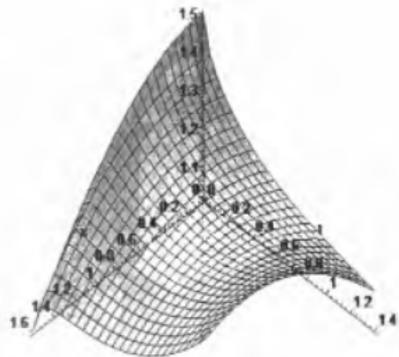
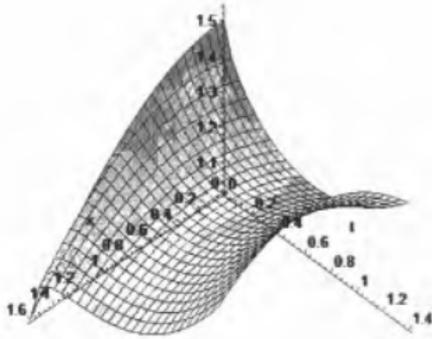
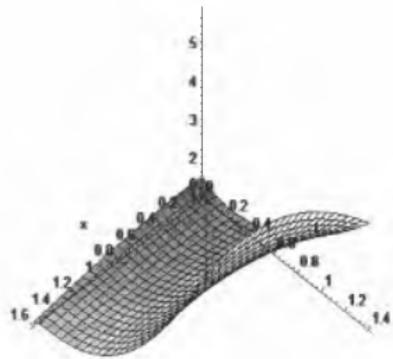


Рис. 3.10. $\alpha = 0,4$.

Рис. 3.11. $\alpha = 0,5$.Рис. 3.12. $\alpha = 0,9$

Анализ представленных графиков показывает, что с уменьшением параметра α распределение концентрации $c = c(x; t)$ носит асимптотический характер.

На рис. 3.13, 3.14 приведены результаты численной реализации распределения концентрации в заданной точке пространства с изменением времени и дробного показателя производной α . Как следует из графиков, учет нелокальности по времени приводит к качественному изменению распределения поля концентрации в заданный момент времени t . Уменьшение фрактального параметра α приводит к накоплению концентрации в подземных грунтовых водах в заданной точке пространства с течением времени, а его увеличение приводит к фактическому уменьшению концентрации мигрирующего потока, что соответствует вымыванию загрязняющего вещества из грунтовых вод.

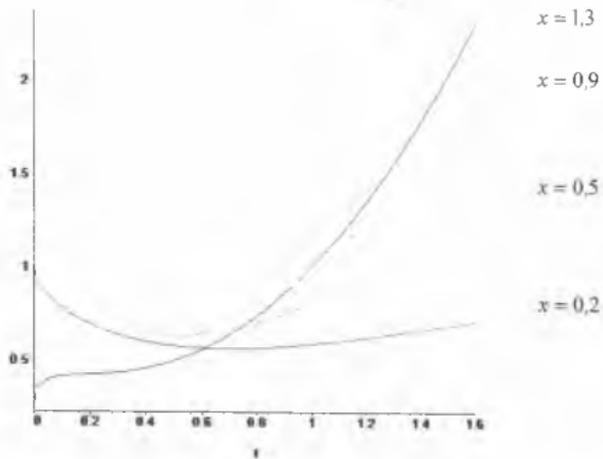


Рис. 3.13. Графики численного решения задачи (2.6.1), (2.6.3) фрактальной миграции при $D_\alpha = 0,7$, $\nu_\alpha = 0,85$, $m = 0,75$, $\alpha = 0,2$.

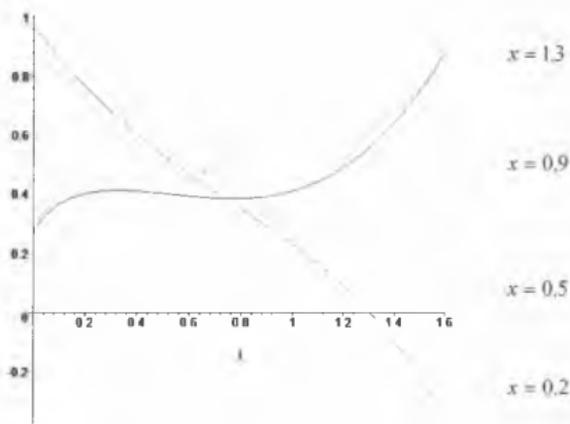


Рис. 3.14. Графики численного решения задачи (2.6.1), (2.6.3) фрактальной миграции при $D_\alpha = 0,7$, $\nu_\alpha = 0,85$, $m = 0,75$, $\alpha = 0,8$.

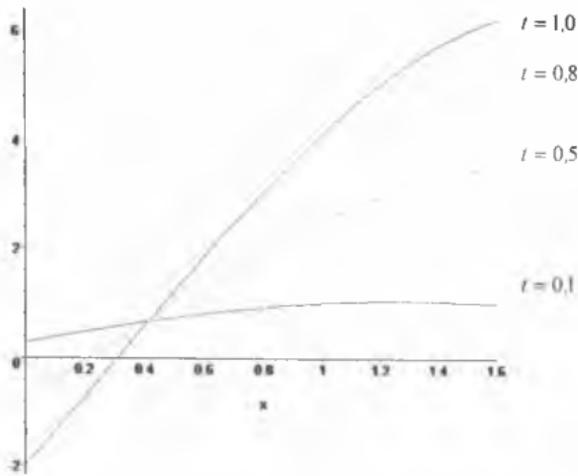


Рис. 3.15. Графики численного решения задачи (2.6.1), (2.6.3) фрактальной миграции при $D_\alpha = 0,75$, $\nu_\alpha = 1,15$, $m = 0,8$, $\alpha = 0,2$.

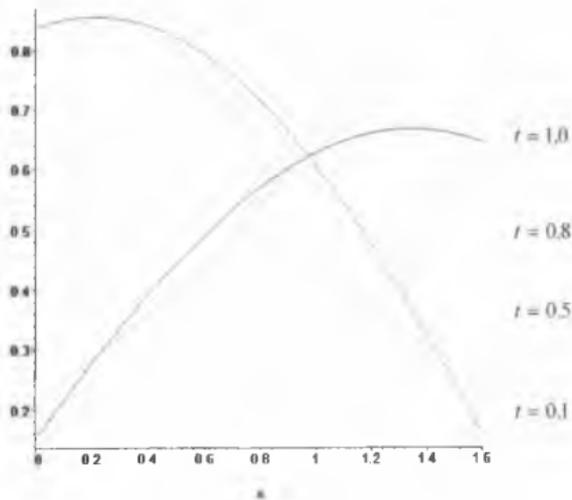


Рис. 3.16. Графики численного решения задачи (2.6.1), (2.6.3) фрактальной миграции при $D_\alpha = 0,7$, $\nu_\alpha = 0,85$, $m = 0,75$, $\alpha = 0,5$.

На рис. 3.15, 3.16 приведены результаты численной реализации распределения концентрации загрязнения в подземных водах при фиксированных значениях времени t на заданном участке $0 \leq x \leq 1,6$ движения подземных вод. Как следует из графиков, дробный временной параметр α , отражающий фундаментальное свойство фрактальности движения, оказывает существенное влияние на распределение концентрации в пространстве. Следовательно, порядок дробной производной α является «управляющим» параметром процесса миграции, так как при его изменении меняется вид и характер функциональной зависимости концентрации загрязнений.

Заключение

Проведенные исследования по математическому моделированию нестационарных нелинейных процессов загрязненных подземных вод в пористых природных средах с фрактальной структурой позволяют сделать следующие выводы: что главным результатом работы является научно обоснованное решение проблемы создания адекватных математических моделей изучаемого процесса. При этом

1. Разработанный класс математических моделей загрязнения подземных вод в природных средах, в основе которых лежат дифференциальные уравнения в частных производных с дробной производной по времени, обобщает ранее известные модельные представления нелинейного процесса миграции и расширяет возможности математического моделирования изучаемого процесса.

2. Предложенный метод модульного анализа с минимальным числом неизвестных характеристик и функциональных зависимостей дает возможность комплексной оценки изучаемого процесса.

3. Аналитические методы решения математических моделей, в основе которых лежат начально-краевые задачи для дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка параболического типа, описывают структурные особенности режима миграции при наличии источников загрязнения.

4. Расчетно-экспериментальный анализ, в основе которого лежат разработанные эффективные алгоритмы расчета концентрации загрязнения подземных вод, позволяет с высокой степенью точности осуществлять прогноз режима миграции.

Литература

1. Аверьянов, С.А. Борьба с засолением орошаемых земель / С.А. Аверьянов. – М. : Колос, 1978. – 288 с.
2. Айдаров, И.П. Прогноз водного и солевого режимов орошаемых земель / И.П. Айдаров // Борьба с засолением земель. – М. : Колос, 1981. – С. 85–91.
3. Араманович, И. Г. Уравнения математической физики / И. Г. Араманович, В. И. Левин. – М. : Наука, 1969. – 287 с.
4. Бабенко, Ю.И. Теплообмен. Методы расчета тепловых и диффузионных потоков / Ю.И. Бабенко. – Л. : Химия, 1986. – 144 с.
5. Барон, В.А. К вопросу прогноза солевого режима почвогрунтов / В.А. Барон // Проблемы почвоведения. – М. : Наука, 1978. – С. 105–131.
6. Бейбалаев, В.Д. Численный метод решения математической модели теплопереноса в средах с фрактальной структурой / В.Д. Бейбалаев // Фундаментальные исследования, 2007. – №12. – С. 249–251.
7. Бейбалаев, В.Д. Математическая модель кинетики сорбции в средах с фрактальной структурой / В.Д. Бейбалаев // Современные проблемы науки и образования, 2008. – №6. – С. 5.
8. Беляев, Н.М. Методы теории теплопроводности / Н.М. Беляев, А.А. Рядно. – М. : Высшая школа, 1982. – 304 с.
9. Березин, И.С. Методы вычислений / И.С. Березин, Н.П. Жидков. – М. : Наука, 1966 – Т. I. – 632 с.
10. Берковский, Б.И. Разностные методы в исследовании задач теплообмена / Б.И. Берковский, Е.Ф. Ноготов. – Минск : Наука и техника, 1976. – 144 с.
11. Берс, Л. Уравнения с частными производными / Л. Берс, Ф. Джон, М. Шехтер. – М. : Мир, 1966. – 352 с.
12. Бицадзе, А.В. Уравнения математической физики / А.В. Бицадзе. – М. : Наука, 1988. – 336 с.

13. Бочевер, Ф.М. Защита подземных вод от загрязнения / Ф.М. Бочевер, Н.Н. Лапшин, А.Е. Орадовская. – М. : Недра, 1979. – 254 с.
14. Вендина, А.А. Аналитические методы решения начально-краевых задач для модельного уравнения конвективно-диффузионного переноса / А.А. Вендина // Научный потенциал студенчества – будущему России / Материалы Всероссийской научной студенческой конференции. – Ставрополь : СевКавГТУ, 2006. – С. 7.
15. Вендина, А.А. Математическое моделирование массопереноса в пористых средах / А.А. Вендина // Научная жизнь. – М. : Наука, – 2008. – № 3 – С. 21–24.
16. Вендина, А.А. Математическое моделирование нестационарного процесса конвективно-диффузионного переноса в почвогрунтах / А.А. Вендина // Вестник Северо-Кавказского технического университета. Науки о Земле. Ставрополь : СевКавГТУ, 2008. – №3. – С. 39–45.
17. Вендина, А.А. Математическое моделирование процесса миграции в сильно пористых средах / А.А. Вендина // Материалы Первой Всероссийской конференции молодых ученых. – Терскол : Изд-во КБНЦ РАН, 2010. – С. 68–70.
18. Вендина, А.А. Метод априорной оценки решения нелокальной задачи нелинейной миграции / А.А. Вендина // Материалы Второго Международного Российско-Казахского симпозиума «Уравнения смешанного типа, родственные проблемы анализа и информатики». – Нальчик : Изд-во КБНЦ РАН, 2011. – С. 52–54.
19. Вендина, А.А. Моделирование процесса распределения вещества в пористых средах, сопровождающегося растворением / А.А. Вендина // XIV Всероссийская школа-коллоквиум по стохастическим методам и VIII Всероссийский симпозиум по прикладной и промышленной математике. Сочи – Адлер, 2007.
20. Вендина, А.А. О математическом моделировании процесса фрактальной миграции загрязнений в природных пористых системах / А.А. Вен-

дина // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки, выпуск 3(24), 2011. – С. 199–201.

21. Вендина, А.А. О математическом моделировании процессов влаго-солепереноса в пористых средах / А.А. Вендина // Материалы международного Российско-Азербайджанского симпозиума «Уравнения смешанного типа и родственные проблемы анализа и информатики» и VI Школы молодых ученых «Нелокальные краевые задачи и проблемы современного анализа и информатики». – Нальчик-Эльбрус : Изд-во КБНЦ РАН, 2008. – С. 198–199.

22. Вендина, А.А. Определение параметров переноса вещества в пористых средах / А.А. Вендина // Нелокальные краевые задачи и проблемы современного анализа и информатики: Материалы V Школы молодых ученых. – Нальчик-Эльбрус : Изд-во КБНЦ РАН, 2007. – С. 37–39.

23. Вендина, А.А. Решение модельного уравнения солепереноса, учитывающего динамику растворения солей / А.А. Вендина // Методы и алгоритмы прикладной математики в технике, медицине, экономике: материалы VII Междунар. науч.-практ. конф., г. Новочеркасск, 2 фев. 2007г.: В 2 ч / Юж.-Рос. техн. ун-т (НПИ). – Новочеркасск : ЮРГТУ, 2007. – Ч. 2. – С. 77–78.

24. Вендина, А.А. Решение одной задачи распределения солей в одномерной однородной системе без учета влияния растворения и реакций обмена / А.А. Вендина // Материалы X региональной научно-технической конференции «Вузовская наука – Северокавказскому региону». Том первый. Естественные и точные науки. Технические и прикладные науки. – Ставрополь : СевКавГТУ, 2006. – С. 4.

25. Вендина, А.А. Решение одной начально-краевой задачи солепереноса, учитывающей кинетику растворения солей / А.А. Вендина // Материалы XXXVI научно-технической конференции по итогам работы профессорско-преподавательского состава СевКавГТУ за 2006 год. Том первый. Естественные и точные науки. Технические и прикладные науки. – Ставрополь : СевКавГТУ, 2007. – С. 7.

26. Вендина, А.А. Решение одной одномерной задачи распределения солей без учета процессов растворения / А.А. Вендина // Тезисы докладов III Международной конференции “Нелокальные краевые задачи и родственные проблемы математической биологии, информатики и физики”. – Нальчик : Изд-во КБНЦ РАН, 2006. – С. 74–75.

27. Вендина, А.А. Решение одномерной стационарной задачи распределения вещества в почвогрунтах / А.А. Вендина // Вестник Северо-Кавказского технического университета. Науки о Земле. – Ставрополь : СевКавГТУ, 2008. – №2. – С. 58–61.

28. Вендина, А.А. Численно-аналитическая реализация модели водно-солевого режима в сильно-пористых средах / А.А. Вендина // Материалы VIII школы молодых ученых «Нелокальные краевые задачи и проблемы современного анализа и информатики». – Нальчик-Хабез : Изд-во КБНЦ РАН, 2012. – С. 31–32.

29. Вендина, А.А. Численный метод алгоритм решения начально-краевой задачи для уравнения переноса в пористых средах / А.А. Вендина // Материалы II Международной научной студенческой конференции «Научный потенциал студенчества – будущему России». Том первый. Общественные науки. Ставрополь : СевКавГТУ, 2008. – С. 5–6.

30. Веригин, Н.Н. О влиянии граничных условий при моделировании переноса солей в почвогрунтах при промывке / Н.Н. Веригин, К.З. Азизов, Ф.Д. Михайлов // Почвоведение, 1986. №3 – С. 67–73.

31. Веригин, Н.Н. О кинетике растворения и выноса солей при фильтрации воды в грунтах / Н.Н. Веригин // Растворение и выщелачивание горных пород. – М. : Госстройиздат, 1957. – С. 17–27.

32. Гавич, И.К. Гидрогеодинамика / И.К. Гавич. – М. : «Недра», 1988. – 349 с.

33. Геккиева С.Х. Задача Коши для обобщенного уравнения переноса с дробной производной по времени / С.Х. Геккиева // Доклады АМАН. – 2000. – Т. 5. – №1. – С. 17–18.

34. Градштейн, И.С. Таблицы интегралов, сумм рядов и произведений / И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. – М. : Физматгиз, 1963. – 1108 с.
35. Дёч, Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа / Г. Дёч. – М. : Физматгиз, 1960. – 207 с.
36. Дигурова, А.М. О сходимости разностных схем, аппроксимирующих краевые задачи для дифференциального уравнения на фракталах / А.М. Дигурова, М.Х. Шхануков // Сб. научн. тр. IV Всерос. симп. «Математическое моделирование и компьютерные технологии». – Кисловодск: 2000. Т. 2. – С. 14–15.
37. Динариев О.Ю. Фильтрация в трещиноватой среде с фрактальной геометрией трещин / О.Ю. Динариев // Механ. Жидкости и газа. – 1990. – №5. – С. 66–70.
38. Диткин, В.А. Интегральные преобразования и операционное исчисление / В.А. Диткин, А.П. Прудников. – М. : Наука, 1974. – 542 с.
39. Кольцова, Э.М. Численные методы решения уравнений переноса во фрактальных средах / Э.М. Кольцова, В.А. Василенко, В.В. Тарасов // Журнал физической химии. – 2000. – Т. 74. – №5. – С. 954–956.
40. Котляр, А.М. Методы математической физики и задач гидроаэродинамики / А.М. Котляр. – М. : Высшая школа, 1991. – 208 с.
41. Кочубей, А.Н. Диффузия дробного порядка / А.Н. Кочубей // Дифференциальные уравнения. – 1990. – Т. 26. – №4. – С. 660–670.
42. Курант, Р. Методы математической физики / Р. Курант, Д. Гильберт. – М.–Л. : ГИТТИ, 1951. – Т. II. – 310 с.
43. Ладыженская, О.А. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа / О.А. Ладыженская, В.А. Солонников, Н.Н. Уралцева. – М. : Наука, 1967. – 736 с.
44. Лейбензон, Л.С. Движение природных жидкостей и газов в пористой среде / Л.С. Лейбензон. – М.–Л. : ОГИЗ-ГОСТЕХИЗДАТ, 1947. – 244 с.
45. Лялько, В.И. Исследование процессов переноса тепла и вещества в земной коре / В.И. Лялько. – Киев : Наук. думк., 1978. – 152 с.

46. Лыков, А.В. Теория теплопроводности / А.В. Лыков. – М. : Высшая школа, 1967. – 600 с.
47. Мандельброт, Б. Фрактальная геометрия природы / Б. Мандельброт. – М. : Наука, 2002. – 654 с.
48. Мейланов, Р.П. К теории фильтрации в пористых средах с фрактальной структурой / Р.П. Мейланов // Письма ЖТФ. – 1996. – Т. 22. – №23. – С. 40–43.
49. Мейланов, Р.П. Обобщенные уравнения одномерной фильтрации с дифференцированиями дробной степени / Р.П. Мейланов // Инженерно-физический журнал. – 2001. – Т. 74. – №2. – С. 34–37.
50. Нахушев, А.М. Уравнения математической биологии / А.М. Нахушев. – М. : Высшая школа, 1995. – 301 с.
51. Нахушев, А.М. Элементы дробного исчисления и их применение / А.М. Нахушев. – Нальчик : издательство КБНЦ РАН, 2000. – 299 с.
52. Нахушева, В.А. Дифференциальные уравнения математических моделей нелокальных процессов / В.А. Нахушева. – М. : Наука, 2006. – 176 с.
53. Нахушева, В.А. Об одной математической модели переноса тепла в почве / В.А. Нахушева // Материалы международной конференции «Нелокальные краевые задачи и родственные проблемы математической биологии, информатики и физики». – Нальчик: издательство КБНЦ РАН, 2006. – С. 208–209.
54. Нигматулин, Р.Р. Дробный интеграл и его физическая интерпретация / Р.Р. Нигматулин // ТМФ. – 1992. – Т. 90. – №3. – С. 354–368.
55. Нигматуллин, Р.Р. Особенности релаксации системы с остаточной памятью / Р.Р. Нигматуллин // Физ. твёрдого тела. – 1985. – Т. 27. – №5. – С. 1583–1585.
56. Папченский, Я.А. Математические модели процессов переноса в мелиорируемых почвах / Я.А. Папченский. – М. : Изд-во МГУ, 1992. – 85 с.
57. Папченский, Я.А. Математические модели физико-химических процессов в почвах / Я.А. Папченский. – М. : Наука, 1990. – 188 с.

- 58.Потапов, А.А. Фракталы в радиофизике и радиолокации. Топология выборки. / А.А. Потапов. – М. : Университетская книга, 2005. – 848 с.
- 59.Полубаринова-Кочина, П.Я. Теория движения грунтовых вод / П.Я. Полубаринова-Кочина. – М. : Наука, 1977. – 664 с.
- 60.Самарский, А.А. Введение в теорию разностных схем / А.А. Самарский. – М. : Наука, 1971. – 552 с.
- 61.Самарский, А.А. Устойчивость разностных схем / А.А. Самарский, А.В. Гулин. – М. : Наука, 1973. – 415 с.
- 62.Сербина, Л.И. Нелокальные математические модели переноса в водоносных системах / Л.И. Сербина. – М. : Наука, 2007. – 167 с.
- 63.Сербина, Л.И. Нелокальные математические модели процессов переноса в системах с фрактальной структурой / Л.И. Сербина. – Нальчик: Изд-во КНЦ РАН, 2002. – 146 с.
- 64.Соболев, С.Л. Локально-неравновесные модели процессов переноса / С.Л. Соболев // Успехи физических наук. – 1997. – Т. 167. – №10. – С. 1095–1106.
- 65.Соболев, С.Л. Уравнения математической физики / С.Л. Соболев. – М. : Физмагиз, 1966. – 444 с.
- 66.Тарасевич, Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы / Ю.Ю. Тарасевич. – М. : Едиториал УРСС, 2002. – 112 с.
- 67.Тихонов, А.Н. Теоремы единственности для уравнения теплопроводности / А.Н. Тихонов // Матем. сборник. – 1935. – Т. 42. – №2. – С. 199–216.
- 68.Тихонов, А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. – М. : Наука, 1972. – 735 с.
- 69.Учайкин, В.В. Метод дробных производных / В.В. Учайкин. – Ульяновск: Изд-во «Артишок», 2008. – 512 с.
- 70.Федер, Е. Фракталы / Е. Фредер. – М. : Мир, 1991. – 254 с.
- 71.Чукбар, К.В. Стохастический перенос и дробные производные / К.В. Чукбар // Журнал экспериментальной и технической физики. – 1995. – Т. 108.

Вып. 5(11). – С. 1875–1884.

72.Шейдегер, А.Э. Физика течения жидкостей через пористые среды / А.Э Шейдегер. – М. : Наука, 1960. – 255 с.

73.Шестаков, В.М. Динамика подземных вод / В.М. Шестаков. – М. : Изд-во МГУ, 1973 – 551 с.

74.Шехтман, Ю.М. Фильтрация малоцентрированных суспензий / Ю.М. Шехтман. – М. : Изд-во АН СССР, 1961. – 212 с.

75.Шхануков, М.Х. О сходимости разностных схем для дифференциальных уравнений с дробной производной / М.Х. Шхануков // Доклады академии наук. – 1996. – Т. 348. – №6. – С. 746–748.

Приложение

Приложение 1. Алгоритм реализации модельной задачи нелинейной миграции загрязнений.

restart:

ввод данных

l:=1.5:

m:=0.77:

cm:=0.7:

alfa:=0.5:

задание сетки

T:=10:

n:=10:

s:=20:

h:=evalf(1/n):

k:=evalf(T/s):

r:=evalf(m*h^2/(k*GAMMA(2-alfa))):

x:=array(0..n):

t:=array(0..s):

d:=array(0..n,0..s):

v:=array(0..n,0..s):

c:=array(0..n,0..s):

a1:=1-alfa:

for i from 0 to n do for j from 0 to s do d[i,j]:=0.01; v[i,j]:=0.022;

q[i,j]:=0.034; end do; end do;

for i from 0 to n do x[i]:=i*h; end do;

for j from 0 to s do t[j]:=j*k; end do;

задание начальных условий

j:=0:

for i from 0 to n do c[i,j]:=0.4; end do:

метод прогонки прямой ход

a:=array[1..n-1,1..s-1];

b:=array[1..n-1,1..s-1];

q1:=evalf(r*t[1]^a1+d[2,j+1]/2+d[1,j+1]/2+h*v[1,j+1]/2+h^2*q[1,j+1]/2-d[0,j+1]*GAMMA(2-
 alfa)*(0.5*d[1,j+1]+0.5*h*v[0,j+1])/(d[0,j+1]*GAMMA(2-alfa)-
 h*t[1]^a1));

for j from 0 to s-1 do a[1,j+1]:=evalf(0.5*d[2,j+1]/q1);

b[1,j+1]:=evalf(h*(d[1,j+1]+h*v[0,j+1])/(d[2,j+1]*(d[0,j+1]*GAMMA(2-
 alfa)-h*t[1]^a1))*sum(c[0,p]*(t[j-p+2]^a1-t[j-p+1]^a1),p=1..j)-

c[1,0]*2/d[2,j+1]*(r*(t[j]^a1-t[j+1]^a1)+m*h^2/(GAMMA(1-
 alfa)*k^alfa))-c[1,j]*(r*(t[2]^a1-
 2*t[1]^a1)+0.5*(d[2,j]+d[1,j]+h*v[1,j]+h^2*q[1,j]))*2/d[2,j+1]+0.5*(d[2,j]
 *c[2,j]+d[1,j]*c[0,j]+h*v[0,j]*c[0,j])*2/d[2,j+1]+2*h^2*q[1,j]*cm/d[2,j+1]
 -2*r/d[2,j+1]*sum(c[1,p]*(t[j-p+2]^a1-2*t[j-p+1]^a1+t[j-p]^a1),p=1..j-1));

for i from 2 to n-1 do

q2:=evalf(r*t[1]^a1+d[i+1,j+1]/2+d[i,j+1]/2+h*v[i,j+1]/2+h^2*q[i,j+1]/2-
 a[i-1,j+1]*(0.5*d[i,j+1]+0.5*h*v[i-1,j+1]));

a[i,j+1]:=evalf(0.5*d[i+1,j+1]/q2); b[i,j+1]:=evalf(a[i-1,j+1]*b[i-
 1,j+1]*(d[i,j+1]+v[i-1,j+1]*h)/d[i+1,j+1]-0.5*c[i,0]/d[i+1,j+1]*(r*(t[j]^a1-
 t[j+1]^a1)+m*h^2/(GAMMA(alfa)*k^alfa))-c[i,j]*2/d[i+1,j+1]*(r*(t[2]^a1-
 t[1]^a1)+0.5*(d[i+1,j]+d[i,j]+h*v[i,j]+h^2*q[i,j]))+(d[i+1,j]*c[i+1,j]+d[i,j]
 *c[i-1,j]+h*v[i-1,j]*c[i-1,j])/d[i+1,j+1]+2*h^2*q[i,j]*cm/d[i+1,j+1]-
 2*r/d[i+1,j+1]*sum(c[i,p]*(t[j-p+2]^a1-2*t[j-p+1]^a1+t[j-p]^a1),p=1..j-1));

end do; for i from 1 to n-1 do c[n,j+1]:=a[n-1,j+1]*b[n-1,j+1]/(1-a[n-
 1,j+1]); c[n-i,j+1]:=a[n-i,j+1]*(b[n-i,j+1]+c[n-i+1,j+1]);

c[0,j+1]:=evalf(d[0,j+1]*GAMMA(2-alfa)*c[1,j+1]/(d[0,j+1]*GAMMA(2-
 alfa)-h*t[1]^a1)+h/(d[0,j+1]*GAMMA(2-alfa)-h*t[1]^a1))*sum(c[0,p]*(t[j-
 p+2]^a1-t[j-p+1]^a1),p=1..j)); end do; end do;

```

qu:=matrix(n+1,s+1,c);
with(plots):
matrixplot(qu,labels=[x,t,c]);

```

Приложение 2. Алгоритм расчета концентрации загрязнений фрактального процесса миграции.

restart:

ввод данных

l:=1.5:

m:=0.77:

q:=0.5:

cm:=0.7:

d:=0.0171:

v:=0.0124:

alfa:=0.7:

c0:=0.3:

задание сетки

T:=10:

n:=10:

s:=20:

h:=evalf(1/n):

k:=evalf(T/s):

r:=evalf(m*h^2/(k*GAMMA(2-alfa))):

x:=array(0..n):

t:=array(0..s):

c:=array(0..n,0..s):

a1:=1-alfa:

for i from 0 to n do x[i]:=i*h; end do:

for j from 0 to s do t[j]:=j*k; end do:

задание начальных условий

j:=0:

for i from 0 to n do c[i,j]:=0.4; end do:

метод прогонки

a:=array[1..n-1,1..s-1]:

b:=array[1..n-1,1..s-1]:

q1:=evalf(r*t[1]^a1+d+h*v/2+h^2*q/2-d*(0.5*d+0.5*h*v)/(h*v+d)):

for j from 0 to s-1 do a[1,j+1]:=evalf(0.5*d/q1);

b[1,j+1]:=evalf(v*c0*h*(k+h*v)/(v*h+k)/k-c[1,0]*2/d*(r*(t[j]^a1-t[j+1]^a1)+m*h^2/(GAMMA(1-alfa)*k^alfa))-c[1,j]*(r*(t[2]^a1-2*t[1]^a1)+0.5*(2*d+h*v+h^2*q))*2/d+0.5*(d*c[2,j]+d*c[0,j]+h*v*c[0,j])*2/d+2*h^2*q*cm/d-2*r/d*sum(c[1,p]*(t[j-p+2]^a1-2*t[j-p+1]^a1+t[j-p]^a1),p=1..j-1)); for i from 2 to n-1 do

q2:=evalf(r*t[1]^a1+d+h*v/2+h^2*q/2-a[i-1,j+1]*(0.5*d+0.5*h*v));

a[i,j+1]:=evalf(0.5*d/q2); b[i,j+1]:=evalf(a[i-1,j+1]*b[i-1,j+1]*(d+v*h)-c[i,0]/d*(r*(t[j]^a1-t[j+1]^a1)+m*h^2/(GAMMA(a1)*k^alfa))-c[i,j]*2/d*(r*(t[j]^a1-

t[j+1]^a1)+0.5*(2*d+h*v+h^2*q))+d*c[i+1,j]+d*c[i-1,j]+h*v*c[i-1,j])/d+2*h^2*q*cm/d-2*r/d*sum(c[i,p]*(t[j-p+2]^a1-2*t[j-p+1]^a1+t[j-p]^a1),p=1..j-1)); end do; for i from 1 to n-1 do c[n,j+1]:=a[n-1,j+1]*b[n-1,j+1]/(1-a[n-1,j+1]); c[n-i,j+1]:=a[n-i,j+1]*(b[n-i,j+1]+c[n-i+1,j+1]);

c[0,j+1]:=d*c[1,j+1]+v*c0*h)/(h*v+d); end do: end do:

qu:=matrix(n+1,s+1,c):

with(plots):

matrixplot(qu,labels=[x,t,c]);

Приложение 3. Алгоритм расчета нелинейных эффектов миграции загрязнения.

restart:

ввод данных

l:=1.5:

m1:=0.77:

g:=5.05:

m:=m1+g:

cm:=0.7:

d:=0.01:

v:=0.24:

alfa:=0.5:

u:=0.12:

задание сетки

T:=10:

n:=10:

s:=20:

h:=evalf(1/n):

k:=evalf(T/s):

r:=evalf(m*h^2/(k*GAMMA(2-alfa))):

x:=array(0..n):

t:=array(0..s):

c:=array(0..n,0..s):

a1:=1-alfa:

for i from 0 to n do x[i]:=i*h; end do:

for j from 0 to s do t[j]:=j*k; end do:

задание начальных условий

j:=0:

for i from 0 to n do c[i,j]:=0.4; end do:

метод прогонки прямой ход

a:=array[1..n-1,1..s-1]:

b:=array[1..n-1,1..s-1]:

q1:=evalf(r*t[1]^a1+d+h*v/2-d*(0.5*d+0.5*h*v)/(d-h*u)):

for j from 0 to s-1 do a[1,j+1]:=evalf(0.5*d/q1); b[1,j+1]:=evalf(-

c[1,0]*2/d*(r*(t[j]^a1-t[j+1]^a1)+m*h^2/(GAMMA(1-alfa)*k^alfa))-

c[1,j]*(r*(t[2]^a1-

2*t[1]^a1)+0.5*(2*d+h*v))*2/d+0.5*(d*c[2,j]+d*c[0,j]+h*v*c[0,j])*2/d-

2*r/d*sum(c[1,p]*(t[j-p+2]^a1-2*t[j-p+1]^a1+t[j-p]^a1),p=1..j-1)); for i

from 2 to n-1 do q2:=evalf(r*t[1]^a1+d+h*v/2-a[i-

1,j+1]*(0.5*d+0.5*h*v)); a[i,j+1]:=evalf(0.5*d/q2); b[i,j+1]:=evalf(a[i-

1,j+1]*b[i-1,j+1]*(d+v*h)-c[i,0]/d*(r*(t[j]^a1-

t[j+1]^a1)+m*h^2/(GAMMA(a1)*k^alfa))-c[i,j]*2/d*(r*(t[j]^a1-

t[j+1]^a1)+0.5*(2*d+h*v))+d*c[i+1,j]+d*c[i-1,j]+h*v*c[i-1,j])/d-

2*r/d*sum(c[i,p]*(t[j-p+2]^a1-2*t[j-p+1]^a1+t[j-p]^a1),p=1..j-1)); end do;

for i from 1 to n-1 do c[n,j+1]:=a[n-1,j+1]*b[n-1,j+1]/(1-a[n-1,j+1]); c[n-

i,j+1]:=a[n-i,j+1]*(b[n-i,j+1]+c[n-i+1,j+1]); c[0,j+1]:=d*c[1,j+1]/(d-h*u);

end do: end do:

qu:=matrix(n+1,s+1,c):

with(plots):

matrixplot(qu,labels=[x,t,c]);