

<https://doi.org/10.15407/fmmit2026.42.064>

Визначення концентрації та потоку домішкових речовин у пористому тілі з використанням похідної дробового порядку Капутто

Ярослав П'янило, Ганна Лянце, Галина П'янило

Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН
України danylo794@gmail.com, anna.lyantse@gmail.com

Використовуючи похідні дробових порядків Капутто за часом в роботі побудовано математичну модель розрахунку концентрації та потоку домішок у водних розчинах складних пористих середовищ. Задачу розв'язано з використанням інтегрального перетворення Лапласа-Карсона. Проаналізовано знаходження оригіналів зображень з використанням функції Міттаг-Лефлера та через розклад в експоненціальні ряди. Знайдено поведінку концентрації для великих і малих часів. Проведено обчислювальний експеримент.

Ключові слова: концентрація та потік речовин, похідні дробових порядків, математичне моделювання, методи розв'язування крайових задач.

Вступ. Зберігання газу відбувається в пластах складних пористих середовищ, які знаходяться на різній глибині, під значними тисками і високими температурами. Практично у всіх підземних сховищах наявна вода – законтурна або підшовна. В процесі закачування газу частина його дифундує у воду, а при відбиранні газу виділяється з води. Описання процесу переносу домішкової речовини в об'єктах природного середовища (пористих матеріалах) зводиться, як правило, до розв'язування лінійних параболічних рівнянь другого порядку або системи взаємозв'язаних лінійних параболічних рівнянь другого порядку для концентрацій з конвективною складовою і джерелами, що пропорційні до шуканих функцій–концентрацій [1,2,3]. В процесі зберігання газу в підземних сховищах змінюється як тиск, так і температура. Історія процесу має значний вплив на дифузію газу. Відомо, що процеси такого типу добре описуються похідними дробового порядку [4-6].

Як правило, математичні моделі процесів переносу будуються шляхом заміни частинних похідних їх дробовими аналогами. При цьому виникає ряд додаткових проблем (крім тих, що є в класичних моделях). Оскільки похідних дробового порядку побудовано значну кількість, то виникає проблема, яку з них використовувати для описання процесу, який вивчається. Проблемаю є теж ефективність застосування дробового числення. З аналізу літератури та

обчислювальних експериментів слідує, що використання дробового числення за часом ефективно в тому випадку, коли на проходження процесу значний вплив має його історія (робота підземних сховищ газу) [5,6,7,8].

Метою роботи є дослідження застосування похідних дробового порядку до вивчення процесу дифузії газу у водних розчинах.

1. Формулювання задачі

Будемо розглядати шар, товщиною l , на нижній межі якого є нульова концентрація, на верхній змінюється за законом $c(l,t) = d + c_{0l}(1 - e^{-\zeta t})$, а початковий тиск $c(x,0) = dx/l$. Тут d, c_{0l}, ζ - деякі сталі, які визначаються експериментально. Задача зводиться до розв'язування рівняння дифузії з конвективною складовою

$${}^c D_\tau^\alpha c + \nu \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

за відповідних крайових умов з використанням похідної дробового порядку Капутто [8-11]

$${}^c D_\tau^\alpha = \frac{{}^c \partial^\alpha}{\partial \tau^\alpha} f(\tau) := \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^\tau \frac{f'(\xi)}{(\tau-\xi)^\alpha} d\xi.$$

Потік речовини визначається за формулою

$$J_x(x,t) = -D \partial c / \partial x|_{x=x_0}.$$

Задача розв'язується з використанням інтегрального перетворення Лапласа-Карсона і в зображеннях має вигляд

$$\bar{c}_z = -\vartheta e^{\eta x} \frac{sh(\theta(l-x))}{sh(\theta l)} + \psi e^{-\eta(l-x)} \frac{sh(\theta x)}{sh(\theta l)} + \bar{c}_c.$$

В останній формулі позначено:

$$\vartheta = -\bar{c}_c(0,p), \quad \psi = \bar{c}(l,p) - \bar{c}_c(l,p), \quad b = \frac{\nu}{D}, \quad u = \frac{p^{2-\alpha}}{D},$$

$$\bar{c}_c(x,p) = -\frac{bd}{ul} + \frac{d}{l}x, \quad \eta = \frac{b}{2}, \quad \theta = \frac{1}{2}\sqrt{b^2 + 4u}.$$

Для знаходження остаточного розв'язку необхідно від зображень перейти до оригіналу. Очевидно, що оригінал $c_z(x,t)$ доцільно будувати на базі теореми про згортку [12]

$$L^{-1}[F(p)\Psi(p)] = \frac{d}{dt} \int_0^t f(t-\tau)\psi(\tau) d\tau,$$

оскільки оригінал $\bar{c}_c(x,p)$ відомий, то необхідно тільки знайти оригінал зображення виду

$$\Psi(\theta, x) = \frac{sh(\theta x)}{sh(\theta l)}$$

Тут $f(t)$ та $\psi(t)$ оригінали зображень $F(p)$ та $\Psi(p)$ відповідно. Оригінал зображення $\Psi(\theta, x)$ можна шукати двома підходами – розклад на прості дроби та розклад в експоненціальні ряди.

Функція $\Psi(\theta, x)$ має наступний розклад на прості дроби [12]

$$\Psi(\theta, x) = \frac{sh(\theta x)}{sh(\theta l)} = \frac{x}{l} + \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \sin\left(\frac{k\pi x}{l}\right) \frac{\theta^2}{\theta^2 + v_k^2}, v_k = \frac{k\pi}{l}, \theta = \frac{p^{2-\alpha}}{D}$$

Оригінал $\theta^2 / (\theta^2 + v_k^2)$ знаходиться з використанням узагальненої функції Мітгаг-Лефлера $E_{\alpha, \beta}(-at^\alpha)$ [8,10,11], перетворення Лапласа якої має вигляд

$$L\left[t^{\beta-1} E_{\alpha, \beta}(-at^\alpha)\right] = \frac{p^{\alpha-\beta}}{p^\alpha + a}$$

В математичному моделюванні функції Мітгаг-Лефлера використовуються рідко, оскільки виникають значні обчислювальні труднощі при дискретному заданні вхідної інформації з невисокою точністю. Більш практичним є розклад функції $\Psi(\theta, x)$ в експоненціальні ряди, які мають вигляд

$$\Psi(\theta x, p) = \sum_{j=0}^{\infty} e^{-\theta(2j+1-x)} (1 - e^{-2\theta x})$$

Як видно з останньої формули, для обернення зображення $\Psi(\theta x, p)$ необхідно знайти обернення зображення виду

$$g(\alpha, w, t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} e^{pt} \exp\left(-w \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{v}{D}\right)^2 + 4 \frac{p^\alpha}{D}}\right) dp$$

для довільних значень параметру α . При цьому повинні виконуватись умови існування оригіналу.

Аналогічно, як і в роботі [14] можна показати, що

$$g(t) = -\frac{1}{\pi t} e^{p_0 t} \int_0^{\infty} e^{-u^2} \exp\left(-wu_t \cos \frac{\alpha\pi}{2}\right) \sin\left(wu_t \sin \frac{\alpha\pi}{2}\right) u du$$

Тут позначено

$$p_0 = v_z e^{\frac{\pi i}{\alpha}}, v_\alpha = (v^2/4D)^{1/\alpha}, u_t = (u^2/t - v_\alpha \exp(\pi i/\alpha))^{\alpha/2}$$

Маючи тепер оригінал $g(\alpha, w, t)$, знаходимо

$$\psi(x, t) = \sum_{j=0}^{\infty} \left[g\left(4 - 2\alpha, \frac{(2j+1)l-x}{D}, t\right) - g\left(4 - 2\alpha, \frac{(2j+1)l+x}{D}, t\right) \right]$$

Використовуючи теорему про згортку оригіналів знаходиться розподіл концентрації

$$c_z(x, t) = \zeta c_{0l} \int_0^t e^{-\zeta(t-\tau)} \psi(x, \tau) d\tau + \frac{d}{l} x.$$

При розв'язуванні багатьох прикладних задач достатньо знати поведінку розв'язку для малих або великих часів. Зокрема це потрібно для визначення перехідних часів або граничних значень шуканого розв'язку. Сформульовану задачу можна розв'язувати декількома способами – безпосередньо шукати асимптотику знайденого оригіналу або використати теореми таубероного типу. Згідно згаданих теорем для визначення поведінки оригіналу для малих часів необхідно мати розклад зображень при великих значеннях параметру перетворення і в отриманому розкладі перейти до оригіналу. Легко бачити, що функція $g(\alpha, w, t)$ і є оригіналом кожного з доданків функції $\Psi(ux, p)$. Таким чином, щоб знайти поведінку оригіналу $c_z(x, t)$ для малих часів необхідно знайти асимптотику $g(\alpha, w, t)$ для малих часів. Для цього використаємо результати роботи [15], з якої слідує, що для знаходження асимптотики $g(\alpha, w, t)$ необхідно знайти особливу точку підінтегральної функції і побудувати розклади в її околі всіх функцій, які знаходяться під знаком інтегралу.

Функцію $g(\alpha, w, t)$ запишемо у виді

$$g(\alpha, w, t) = -\frac{1}{\pi t} e^{p_0 t} \int_0^\infty \exp\left[-u^2 - wu, \cos \frac{\alpha\pi}{2}\right] \sin\left(wu, \sin \frac{\alpha\pi}{2}\right) u du.$$

Функція

$$\gamma(u) = u^2 + w \left(\frac{u^2}{t} - \nu_\alpha e^{\frac{\pi i}{\alpha}} \right)^{\alpha/2} \cos \frac{\alpha\pi}{2}$$

має екстремальну точку

$$u_0 = \sqrt{t \left(w t^{2/(\alpha-2)} + \nu_\alpha e^{\frac{\pi i}{\alpha}} \right)^{1/2}}.$$

Нехай $\theta(u) = \sin\left(wu, \sin \frac{\alpha\pi}{2}\right) u$. Тоді

$$g(\alpha, w, t) = -\frac{1}{\pi t} e^{p_0 t} \int_0^\infty \exp[-\gamma(u)] \theta(u) du.$$

Враховуючи розклад підінтегральних функцій в околі особливої точки, отримуємо [16]

Ярослав П'янило, Ганна Лянце, Галина П'янило Визначення концентрації та потоку домішкових речовин у пористому тілі з використанням похідної дробового порядку Капутто

$$g(\alpha, w, t) = -\frac{1}{\pi t} \exp(p_0 t - \gamma(u_0) - \gamma''(u_0) u_0^2) \theta(u_0) \times \\ \times \int_0^\infty \exp[-\gamma''(u_0) u^2 + 2u_0 \gamma''(u_0) u] du = \\ = -\frac{1}{\pi t} \exp(p_0 t - \gamma(u_0) - \gamma''(u_0) u_0^2) \theta(u_0) \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma''(u_0)}} \exp(u_0^2 \gamma''(u_0)) \operatorname{erfc}(u_0 \sqrt{\gamma''(u_0)}).$$

Оскільки [13]

$$\exp(u_0^2 \gamma''(u_0)) \operatorname{erfc}(u_0 \sqrt{\gamma''(u_0)}) = \frac{1}{u_0 \sqrt{\pi \gamma''(u_0)}},$$

то для малих часів

$$g(\alpha, w, t) = -\frac{1}{2\pi t \gamma''(u_0)} \exp(p_0 t - \gamma(u_0) - \gamma''(u_0) u_0^2) \sin\left(w \left(\frac{u_0^2}{t} - \nu_\alpha e^{\frac{\pi i}{\alpha}}\right)^{\alpha/2} \sin \frac{\alpha\pi}{2}\right).$$

Маючи тепер оригінал $g(\alpha, w, t)$, знаходимо

$$\psi(x, t) \approx g\left(4 - 2\alpha, \frac{l-x}{D}, t\right).$$

Позначимо

$$w(t) = w \left(\frac{u_0^2}{t} - \nu_\alpha e^{\frac{\pi i}{\alpha}}\right)^{\alpha/2} \sin \frac{\alpha\pi}{2}.$$

Використовуючи теорему про згортку оригіналів знаходимо поведінку коефіцієнта концентрації для малих часів

$$c_z(x, t) \approx \zeta c_{0l} e^{p_0 t - \gamma(u_0)} \int_0^t e^{-\zeta(t-\tau)} \frac{1}{\tau \gamma''(u_0)} \exp(-\gamma''(u_0)(\tau - u_0)^2) \sin(w_\tau) d\tau + \frac{d}{l} x.$$

Асимптотика останнього інтегралу будується аналогічно як і в попередньому випадку.

Якщо не враховувати конвективну складову, то крайньою правою особливою точкою буде нуль. Тоді на основі теорем туберового типу знаходимо, що для великих часів

$$c_z(x, t) = c_{0l} \frac{x}{l} \left[1 - \frac{l^2 - x^2}{6D^2} \frac{t^{2\alpha-3}}{\Gamma(2\alpha-2)} + \frac{l^2 - x^2}{6\zeta D^2} \frac{t^{2\alpha-4}}{\Gamma(2\alpha-3)} \right] + \frac{d}{l} x,$$

$$J_x(x, t) = -D \left[\frac{c_{0l}}{l} \left(1 + \frac{x^2 - l^2/3}{2D^2} \frac{t^{2\alpha-4}}{\Gamma(2\alpha-3)} - \frac{x^2 - l^2/3}{2\zeta D^2} \frac{t^{2\alpha-5}}{\Gamma(2\alpha-4)} \right) + \frac{d}{l} \right].$$

Оскільки асимптотичні розклади можна диференціювати [15], то для малих часів потік обчислюється за формулою

$$J_x = -D\zeta c_{0l} \int_0^t e^{-\zeta(t-\tau)} \psi'_x(x, \tau) d\tau + \frac{d}{l}.$$

Обчислювальний експеримент. Результати проведених числових досліджень розподілу концентрації і потоку домішкових речовин показують, що вплив порядку дробової похідної є найбільшим при малих часах.

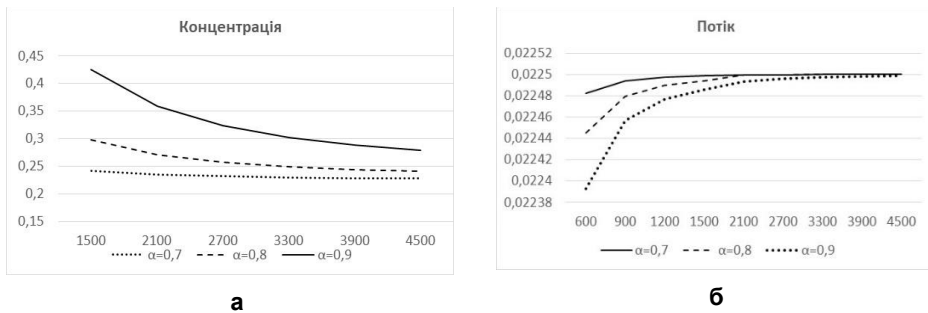


Рис.1.Залежність концентрації (а)та потоку (б) від часу для $x=10$ м і різних значень порядку дробової похідної.

На рис. 1 подано результати проведеного числового експерименту для $l=40$ м; $D=0,05$ м/с²; $d=0,6$ моль/м³; $c_{0l}=0,3$ моль/м³; ζ 0,1 та різних значень порядку дробової похідної.

Висновки

В роботі знайдено розподіл концентрації в залежності від координати та часу для великих і малих часів. Розв'язки такого типу мають широке застосування для визначення перехідних часів. Необхідність такого дослідження пояснюється тим, що при побудові оперативних моделей, які використовуються для управління процесами, на перехідні процеси накладаються суттєві технологічні обмеження як за часом, так і за координатами. Результати моделювання всередині області визначення суттєво залежать від значень порядку дробової похідної. Оскільки граничні значення задовольняють умови сформульованої задачі і від порядку дробової похідної не залежать, то при умові адекватного вибору цього порядку отримується розв'язок, який враховує історію процесу, що вивчається. Отримані результати можуть бути використані для моделювання процесів, в яких суттєвий вплив має історія процесу, зокрема процесів тепломасопереносу в складних пористих структурах. Однак такий підхід вимагає додаткового розв'язання ряду задач: який вид похідної дробового порядку слід вибирати; побудова критерію вибору значення параметру похідної дробового порядку тощо. Слід також зауважити, що залежність ефективності та складності обчислень дробового числення суттєво залежить від точності вхідної інформації та від технологічних обмежень, які накладаються на математичні модель процесу.

ЛІТЕРАТУРА

Ярослав П'янило, Ганна Лянце, Галина П'янило **Визначення концентрації та потоку домішкових речовин у пористому тілі з використанням похідної дробового порядку Капутто**

- [1] Ya. D. Pyanylo Mathematical modeling of mass transfer in complex engineering and biomedical systems *Journal of Mathematical Sciences*, Vol. 273, No. 1, June, 2023 p.163-180.
- [2] G. Jumarie, "On the solution of the stochastic differential equation of exponential growth driven by fractional Brownian motion," *Applied Mathematics Letters*, vol. 18, no. 7, pp. 817–826, 2005.
- [3] A. A. Kilbas, H. M. Srivastava, and J. J. Trujillo, *Theory and Applications of Fractional Differential Equations*, vol. 204 of *North-Holland Mathematics Studies*, Elsevier, Amsterdam, Theetherlands, 2006.
- [4] N. B. Lopuh & Ya.D. Pyanylo Mathematical Modeling of Gas Filtration in the Bottomhole Zone of Underground Gas Storage Wells Using Fractional Derivatives *Journal of Mathematical Sciences* Volume 279, pages 282–292, (2024).
- [5] Lopuh N., Pyanylo, Y Simulation of Gas Filtration Processes in Fractured-Porous Media // Proceedings of the 2024 IEEE International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT). IEEE, - Czech Republic 2024,
- [6] Lopuh N. B, Pyanylo Ya. D. Numerical analysis of models with fractional derivatives for gas filtration in porous media // *Journal of Coupled Systems and Multiscale Dynamics* – 2014. – Vol. 2 (1). – Pp. 15-19.
- [7] Lopuh, N., Pyanylo, Y. Numerical Model Analysis of Atypical Gas Filtration in a Porous Medium 12th International Conference on Advanced Computer Information Technologies, ACIT 2022, 2022, pp. 1–4.
- [8] Yuriy Povstenko *Linear Fractional Diffusion-Wave Equation for Scientists and Engineers* Springer International Publishing Switzerland 2015–460p. DOI<https://doi.org/10.1007/978-3-319-17954-4>
- [9] R. Figueiredo Camargo, A. O. Chiacchio, and E. Capelas de Oliveira, "Differentiation to fractional orders and the fractional telegraph equation," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 49, no. 3, Article ID 033505, 2008.
- [10] A. V. Letnikov, "Theory of differentiation with an arbitrary index," *Sbornik: Mathematics*, vol. 3, pp. 1–66, 1868 (Russian).
- [11] M. Davison and C. Essex, "Fractional differential equations and initial value problems," *The Mathematical Scientist*, vol. 23, no. 2, pp. 108–116, 1998.
- [12] Диткин В.А., Прудников А.П. Справочник по операционному исчислению. – М.: Высшая школа, – 1965. – 466 с.
- [13] M. Abramowitz and I. A. Stegun *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*
- [14] Yaroslav Pyanylo, Anna Lyantse, Halyna Pyanylo Study of transition times in diffusion processes using fractional order derivatives *Фізико математичне моделювання та інформаційні технології* 2025 , вип. 41, 103-111
- [15] Рикстыньш Э.Я. Асимптотические разложения интегралов. Т.1. Рига, Зинатне, 1974, 392 с.
- [16] Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. – М.: Наука, 1981. – 800 с.

Determination of the concentration and flow of impurities in a porous medium using the Caputo fractional-order derivative

Yaroslav Pyanilo, Hanna Lyantse, Galina Pyanilo

Using fractional Caputo derivatives with respect to time, a mathematical model for calculating the concentration and flux of impurities in aqueous solutions of complex porous media was constructed in the work. The problem was solved using the Laplace-Carson integral transform. Finding the original images using the Mittag-Leffler function and through exponential series expansion was analyzed. The behavior of the concentration for large and small times was found. A computational experiment was conducted.

Отримано 16 04 2026