

Національна академія наук України  
Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України

**БОГАЄНКО ВСЕВОЛОД ОЛЕКСАНДРОВИЧ**

УДК 517.9:519.6

**МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ  
ГІДРОГЕОМІГРАЦІЙНИХ ПРОЦЕСІВ З НЕКЛАСИЧНОЮ ДИНАМІКОЮ  
НА ОСНОВІ ВИСОКОПРОДУКТИВНИХ ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ  
АЛГОРИТМІВ**

01.05.02 — математичне моделювання та обчислювальні методи

Реферат дисертації на здобуття наукового ступеня  
доктора фізико-математичних наук

**Київ - 2024**

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України.

**Офіційні опоненти:** д. ф.-м. н., професор

**Дорошенко Анатолій Юхимович**

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», професор кафедри інформаційних систем та технологій

д. ф.-м. н., професор

**Петрик Михайло Романович**

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, завідувач кафедри програмної інженерії

д. ф.-м. н., професор

**Дияк Іван Іванович**

Львівський національний університет імені Івана Франка, декан факультету прикладної математики та інформатики

Захист відбудеться “22” листопада 2024 року о 11<sup>00</sup> годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.194.02 Інституту кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України (03187, м. Київ, проспект Академіка Глушкова, 40).

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці в Інституті кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України (03187, м. Київ, проспект Академіка Глушкова, 40) та на офіційному сайті інституту <https://www.incyb.kiev.ua>.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради

Д. О. Терлецький

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

### Актуальність теми дослідження.

Розробка методів математичного та комп'ютерного моделювання динаміки міграційних процесів у ґрунтових середовищах є актуальною проблемою, зокрема в аспекті охорони навколишнього середовища. При перебігу відповідних процесів у середовищах для яких характерні ефекти пам'яті та просторової нелокальності, актуальною стає також проблема підвищення ступеня адекватності існуючих кількісних моделей.

Математичне моделювання динаміки міграції вологи та солей в ґрунтах є широко поширеним і розвивається, переважно, у контексті постановок задач, характерних для класичної математичної фізики. Серед великої кількості публікацій з цього питання виділимо роботи І. І. Ляшка, С. І. Ляшка, Г. М. Положого, Г. Е. Мистецького, В. М. Булавацького, А. Я. Бомби, П. М. Матринюка, А. П. Власюка, М. М. Біляєва, М. М. Верігіна, О. В. Ликова, О. В. Голубевої, А. А. Глушченка, Г. І. Марчука, П. Я. Полубаринової-Кочиної, І. В. Сергієнка, В. С. Дейнеки, А. Ф. Чудновського, В. В. Скопецького, О. Ю. Грищенко, В. І. Лаврика, О. Я. Олійника, В. В. Оноцького, Д. А. Ключина, Я. Г. Савули, О. Б. Стелі, Є. Я. Чаплі, О. Ю. Чернухи, Я. Д. П'янило, М. М. Хлапука та ін.

У складних нерівноважних умовах, зокрема в середовищах фрактальної структури, до яких відносять і ґрунти, перебіг процесів перенесення не завжди коректно описується класичними математичними моделями. Прогрес у цьому випадку досягається, зокрема, з використанням підходу, що базується на застосуванні апарату дробово-диференціального числення. Його розвиток відбувається у напрямках розробки та дослідження нових операторів дробових інтегралів та похідних, їх застосуванню для опису фізичних процесів чи побудови феноменологічних моделей, у теорії керування, обробці зображень, штучному інтелекті тощо завдяки роботам багатьох відомих дослідників серед яких слід відзначити роботи А. А. Кілбаса, Ю. Лучко, А. А. Чикрія, А. Кочубея, С. Едельмана, С. Г. Самко, О. И. Маричева, А. Чечкіна, В. Тарасова, А. Нахушева, В. Кірьякової (V. Kiryakova), Х. Трухільо (J. Trujillo), І. Подлубного (I. Podlubny), В. Учайкіна, Н. Вірченко, Р. Нігматтуліна, Г. Заславського, Р. Горенфло (R. Gorenflo), Р. Метцлера (R. Metzler), Ж. Тенрейру Машаду (J. Tenreiro Machado), Д. Балеану (D. Baleanu) та ін.

Відштовхуючись від узагальнень базових фізичних законів наразі побудована та досліджена значна кількість дробово-диференціальних міграційних моделей у пористих середовищах. Серед робіт присвячених цьому напрямку виокремимо роботи М. М. Меершєрта (M. M. Meerschaert), Д. А. Бенсона (D. A. Benson), Д. Балеану (D. Baleanu), А. Атангани (A. Atangana), Б. Самета (B. Samet), Р. Алмейди (R. Almeida), А. Маліновської (A. Malinowska), В. М. Булавацького. Поєднання різноманітних підходів узагальнення фізичних законів переносу породжує широкі класи моделей, наприклад моделі з похідними Хільфера, Прабхакара, Капуто–Фабріціо, Атангана–Балеану. Ще одним новим напрямком розвитку моделювання аномальних міграційних процесів є використання похідних дробового порядку від функції за іншою функцією. Зауважимо, що враховуючи велику кількість можливих визначень дробових похідних та комплексність процесів у таких пористих

середовищах, як ґрунти, розвиток апарату їх дробово-диференціального моделювання далекий від завершення.

Одним з найбільш розповсюджених методів чисельного розв'язання початково-крайових задач щодо дробово-диференціальних рівнянь є метод скінченних різниць якому присвячені роботи багатьох дослідників, зокрема І. Подлубного (I. Podlubny), К. Дітхельма (K. Diethelm), Р. Гарраппи (R. Garrappa), М. Стинеса (M. Stynes), Н. Форда (N. Ford), М. М. Меершперта (M. M. Meerschaert), Ч. Лі (Ch. Li), Ч. Гона (Ch. Gong), К. Оволабі (K. Owolabi), М. Х. Шканукова-Лафіщева, А. А. Аліханова та ін. Іншим підходом до моделювання є використання спектральних методів та методу Галеркіна, зокрема методу скінченних елементів. Серед авторів, що працюють у цьому напрямку виділимо А. Бхраві (A.N. Bhrawy), М. Ейнсворта (M. Ainsworth).

Одним з ефективних підходів у випадку багатовимірних задач є застосування схем розщеплення, зокрема неявних схем змінних напрямків (ADI, Alternating Direction Implicit), які отримали розвиток для дробово-диференціальних рівнянь у роботах, зокрема, Ж. Вана (Zh. Wang), Ж. Хао (Zh. Hao), Д. Ху (D. Hu), Т. Алероева. Застосування таких схем, окрім ефекту зниження обчислювальної складності та суттєвого зменшення зв'язаності блоків обчислень дозволяє ефективніше застосовувати методи розпаралелення.

Важливою обчислювальною проблемою, що виникає при чисельному розв'язанні початково-крайових задач для рівнянь з дробовими похідними за часовою змінною є необхідність обчислювати значення інтегральних операторів за мінімально можливий час з заданою точністю в умовах, коли інтервал інтегрування збільшується зі збільшенням номеру кроку за часом. Зменшення обчислювальної складності тут досягається в першу чергу застосуванням спеціальних дискретизацій та представлень операторів дробових похідних. Виділимо у цьому напрямку роботи Н. Форда (N. Ford), Ч. Гона (Ch. Gong), Є. Тиртишнікова, Д. Баффета (D. Baffet), Л. Юаня (L. Yuan), О. Агравала (O. Agrawal), К. Дітхельма (K. Diethelm), С. Ю. Лукашука, Р. К. Газізова, Н. С. Белевцова та інших. Зауважимо, що при використанні таких підходів, час розв'язання залишається близьким до постійного чи логарифмічно залежного від номера кроку за часом, що, проте, супроводжується зниженням точності отримуваних розв'язків.

Важливими в контексті практичного застосування дробово-диференціальних моделей аномальних процесів геоїміграції, є питання ефективної програмної реалізації. Інтегро-диференціальний характер відповідних моделей дозволяє ефективно застосовувати для пришвидшення розрахунків засоби паралельних обчислень. Основним підходом, що застосовується при розв'язанні задач з похідними дробового порядку за часовою змінною, є використання розпаралелення при безпосередньому обчисленні значень дробових похідних. Виділимо у цьому напрямку роботи К. Дітхельма (K. Diethelm) та Є. Каслік (E. Kaslik). Якщо моделі містять дробові похідні за просторовими змінними, на перше місце висувається швидкодія алгоритмів розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР). Застосуванню паралельних алгоритмів такого класу присвячені, зокрема, роботи Ч. Гона (Ch. Gong) та В. Бао (W. Bao). Відзначимо, що наразі розробка ефективних паралельних алгоритмів чисельного розв'язання початково-крайових задач для

дробово-диференціальних рівнянь та їх систем є незавершеною і актуальною науковою проблемою.

Практичне використання дробово-диференціальних математичних моделей для прогнозування аномальної динаміки геогідроміграційних процесів вимагає проведення ідентифікації їх параметрів. Специфіка дробово-диференціальних моделей полягає у тому, що порядки та параметри дробових похідних не мають технічних засобів вимірювання. Для ідентифікації параметрів дробово-диференціальних моделей використовуються підходи аналітичного чи чисельно-аналітичного розв'язання обернених задач щодо відповідних моделей та підхід з використанням методів штучного інтелекту та метаевристичної оптимізації, зокрема методу мурашиних колоній, алгоритму зозулі, алгоритму рою частинок, штучних нейронних мереж. Варто відзначити, що більшість алгоритмів метаевристичної оптимізації є легко розпаралелюваними за даними.

Таким чином, сучасні засоби дробово-диференціального моделювання міграційних процесів охоплюють широке коло моделей, які містять інтегро-диференціальні оператори за часовою та просторовими змінними. При цьому актуальним напрямком є комплексне чисельне дослідження моделей з різнотипними дробовими похідними; визначення особливостей динаміки процесів, що ними описуються; розробка обчислювально ефективних засобів визначення моделей, найкращих для опису спостережуваного процесу, ідентифікації їх параметрів та прогнозування розвитку процесів на їх основі.

Науково-прикладною проблемою, розв'язанню якої присвячена дисертаційна робота, є розвиток методів математичного моделювання аномальних гідрогеоміграційних процесів на основі дробово-диференціального підходу та розвиток методів комп'ютерного моделювання з метою підвищення обчислювальної ефективності при чисельному моделюванні і прогнозуванні динаміки міграційних процесів та ідентифікації параметрів відповідних моделей. Зазначені процедури комп'ютерного моделювання базуються на обчислювальних методах та паралельних алгоритмах для скінченно-різницевої схем і схем розщеплення для багатовимірних задач, з використанням, зокрема, підходу апроксимації ядер інтегро-диференціальних операторів.

### **Зв'язок з науковими програмами, планами, темами, грантами.**

Дисертаційну роботу виконано у лабораторії методів математичного моделювання процесів екології та енергетики Інституту кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України в рамках наукових тем "Розробити засоби математичного моделювання динаміки складних розподілених процесів стосовно задач екології на основі локальних та дробово-диференціальних моделей" (номер державної реєстрації 0119U002276, 2019-2023 рр.), "Розробити теоретичні основи математичного моделювання геоекологічних процесів на базі локальних та дробово-диференціальних моделей" (номер державної реєстрації 0114U002093, 2014-2018 рр.), "Розробити нові методи паралельної та розподіленої обробки надвеликих об'ємів даних для аналізу складних багатокомпонентних середовищ" (номер державної реєстрації 0117U000471, 2017-2021 рр.), "Розробити методи математичного моделювання складних систем для суперкомп'ютерів" (номер державної реєстрації 0118U005230, 2018-2019 рр.), "Розробити методи

високопродуктивних обчислень дослідження математичних моделей неоднорідних середовищ та обробки великих даних (Big Data) на основі суперкомп'ютерних технологій" (номер державної реєстрації 0120U103580, 2021 р.), "Розроблення моделей та методів високопродуктивних обчислень та їх застосування". (номер державної реєстрації 0122U200449, 2022 р.)

### **Мета і завдання дослідження.**

Метою дисертаційної роботи є розробка на базі дробово-диференціального підходу нових неklasичних математичних моделей геоміграційних процесів за складних умов їх перебігу; постановка та одержання розв'язків відповідних цим моделям крайових задач; розробка нових ефективних алгоритмів комп'ютерного моделювання і прогнозування динаміки процесів та ідентифікації параметрів моделей для високопродуктивних обчислювальних систем зі спільною та розподіленою пам'яттями.

Для досягнення мети вирішуються наступні задачі:

- розробка нових математичних моделей геоміграційних процесів за складних геогідрологічних умов на основі апарату диференціювання дробового порядку та постановка нових крайових задач;
- розробка класу паралельних алгоритмів моделювання геоміграційної динаміки на основі дробово-диференціальних моделей для систем зі спільною та розподіленою пам'яттю;
- розробка метаевристичних алгоритмів розв'язання задач ідентифікації параметрів дробово-диференціальних моделей геоміграційних процесів;
- застосування розробленого алгоритмічного апарату для розв'язання задач моделювання динаміки процесів масо-, тепло- та вологоперенесення у ґрунтах за складних умов їх перебігу, встановлення закономірностей зміни значень параметрів моделей при зміні характеру описуваних процесів.
- застосування розробленого алгоритмічного апарату для розв'язання прикладних задач, пов'язаних зі зрошувальним землеробством.

Об'єктом дослідження є неklasичні математичні моделі аномальної динаміки геоміграційних процесів та алгоритмічний апарат комп'ютерного моделювання геоміграційної динаміки на основі запропонованих дробово-диференціальних математичних моделей.

Предметом дослідження є методи та засоби математичного та комп'ютерного моделювання геоміграційних процесів.

### **Методи дослідження.**

Для побудови і дослідження неklasичних математичних моделей в рамках тематики дисертаційної роботи використано методи математичної фізики, теорії фільтрації, масо-, тепло- та вологоперенесення, механіки ґрунтів, теорії інтегро-диференціювання дробового порядку, теорії чисельних методів. Для чисельного розв'язання початково-крайових задач використаний метод скінченних різниць, зокрема, метод розщеплення для багатовимірних задач. Для розв'язання задач ідентифікації параметрів моделей використано метаевристичні методи розв'язання обернених задач, а саме: метод рою частинок та метод генетичного програмування. З метою побудови алгоритмів для високопродуктивних обчислювальних систем

використано методи розпаралелення обчислень для систем зі спільною та розподіленою пам'яттями.

### **Наукова новизна отриманих результатів.**

У дисертаційній роботі отримано такі нові результати:

- побудовано серію двовимірних дробово-диференціальних математичних моделей нелокальних процесів конвективної дифузії за умов планової фільтрації в ізотермічній та неізотермічній постановках, які, на відміну від існуючих, враховують фактори часової та просторової нелокальності при перебігу відповідних процесів у середовищах фрактальної структури;
- розроблено серію дробово-диференціальних моделей нелокальних процесів фільтраційної консолідаційної динаміки у разі аномального перебігу відповідних деформаційних процесів у геопористих середовищах;
- запропоновано та сформульовано серію дробово-диференціальних математичних моделей нелокальних процесів масоперенесення в ґрунтових середовищах з урахуванням явищ масообміну та факторів часової і просторової нелокальності;
- сформульовано крайові задачі щодо вказаних вище класів нових математичних моделей та одержано їх скінченнорізницеві розв'язки, на основі яких досліджено особливості динаміки процесів, що описуються відповідними моделями;
- побудовано клас паралельних алгоритмів розв'язання з використанням графічних прискорювачів одновимірних початково-крайових задач щодо дробово-диференціальних моделей геогідроміграційних процесів, які дозволяють збільшити ефективність комп'ютерного моделювання;
- створено клас ефективних паралельних алгоритмів реалізації локально-одновимірних скінченно-різницевих схем розв'язання багатовимірних дробово-диференціальних початково-крайових задач, які дозволяють збільшити швидкодію моделювання аномальних геогідроміграційних процесів;
- для розв'язання задач ідентифікації параметрів дробово-диференціальних моделей вологоперенесення, що містять  $\psi$ -похідні Капуто вперше застосовано методи рою частинок та генетичного програмування і показано їх ефективність.

### **Практичне значення отриманих результатів.**

Практичне значення отриманих результатів полягає в тому, що

- створені засоби математичного та комп'ютерного моделювання забезпечують високу швидкодію та контрольовану точність прогнозування процесів волого- та солеперенесення у ґрунтах, необхідну для ефективного їх застосування у цивільній інженерії та сільському господарстві;
- досліджені особливості опису процесів геоміграції моделями з різними дробово-диференціальними операторами дозволяють проводити вибір моделі відповідно до конкретного застосування, а також можуть надавати допоміжну інформацію при фізичних та гідрологічних дослідженнях відповідних середовищ;
- у роботі вирішені прикладні задачі моделювання вологоперенесення при зрошенні дощуванням у складних гідрологічних умовах, а саме прогнозування строків та норм поливу за різних умов на основі дробово-диференціальних моделей вологоперенесення. Відповідні результати були апробовані у виробничих умовах.

### **Особистий внесок здобувача.**

Усі результати, що складають основний зміст дисертаційної роботи та виносяться на захист, отримані автором самостійно. У роботах [1, 2, 6, 15], написаних у співавторстві з В. М. Булавацьким, здобувачеві належать участь у розробці методології побудови нових математичних моделей та побудові обчислювальних алгоритмів для знаходження чисельних розв'язків задач, створення відповідного математичного забезпечення, проведення числових розрахунків та аналіз отриманих результатів. У роботах [9, 14, 20], написаних у співавторстві з В. М. Булавацьким, здобувачеві належать участь у побудові математичних моделей та алгоритмів розв'язування задач, програмна реалізація алгоритмів, проведення числових розрахунків, обґрунтування комп'ютерної збіжності за даними розрахунків, проведення аналізу та систематизація отриманих результатів. У роботі [13], написаній у співавторстві з В. М. Булавацьким, та у роботах [3, 5], написаних у співавторстві з В. М. Булавацьким та Ю. Г. Кривоносом, здобувачеві належать побудова та програмна реалізація алгоритмів розв'язування крайових задач, проведення числових розрахунків та аналізу і обґрунтування отриманих результатів. У роботах [4, 7, 11, 25] внесок усіх співавторів рівноцінний. У роботі [17], написаній у співавторстві з А. В. Гладким, М. І. Ромащенко, Т. В. Матяш та у роботах [22, 29], написаних у співавторстві з А. В. Гладким, здобувачеві належать математична постановка задач, розробка та програмна реалізація алгоритмів, проведення обчислювальних експериментів та аналіз їх результатів. У роботі [23] здобувачеві належать матеріал підрозділів 4.1–4.4 та участь у написанні підрозділів 3.6, 3.7. Роботи [8, 10, 12, 16, 18–20, 24, 26–28] є одноосібними публікаціями здобувача.

### **Апробація матеріалів дисертації.**

Результати дисертації доповідались та обговорювались на конференціях "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання" м. Івано-Франківськ, 14-19 травня 2018 року; Fifth International Conference "High Performance Computing" HPC-UA 2018, м. Київ, 22-23 жовтня 2018; "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", м. Івано-Франківськ, 20-25 травня 2019 року; The Third International Conference on Computer Science, Engineering and Education Applications (ICCSEEA2020), м. Київ, 21-22 січня 2020 року; 9th International Conference "Information Control Systems & Technologies", м. Одеса, 24–26 вересня 2020 року; Modeling, control & information technologies, м. Рівне, 5-7 листопада 2020 року; науковому семінарі "Методи обчислювальної математики", Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України, м. Київ, 21 червня 2023 року; "Науковому семінарі з математичного моделювання та обчислювальних методів", НУВГП, м. Рівне, 26 квітня 2024 року.

### **Публікації за матеріалами дисертації.**

Результати досліджень опубліковані загалом у 29 наукових роботах. Основні результати опубліковані у 1 монографії [23] та 22 статтях у фахових наукових журналах, що з урахуванням класифікації SCImago Journal & Country Rank прирівнюється до 50 публікацій. Зокрема, 2 статті опубліковано у виданнях, що належать до квартиля Q1 [8, 17]; 9 статей у виданнях, що належать до квартиля Q2 [1, 2, 6, 11, 14, 16, 18, 19, 21]; 5 статей у виданнях, що належать до

квартиля Q3 [3, 5, 12, 15, 22]; 2 статті, що індексуються у наукометричній базі Scopus, проте не класифіковані до певного квартиля [9, 20]; 4 статті у фахових виданнях України, що не індексуються у наукометричній базі Scopus [4, 7, 10, 13]. Результати також опубліковані у 6 роботах у матеріалах наукових конференцій [24-29], з яких 2 індексуються у наукометричній базі Scopus [27, 28]

### **Інформація про кандидатську дисертацію.**

Дисертаційна робота "Автоматизація розв'язання просторових задач з неповними даними", подана за здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02, була захищена у 2006 році у спеціалізованій вченій раді Д 26.194.02 при Інституті кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України.

### **Структура та обсяг дисертації.**

Дисертація складається зі вступу, восьми розділів, висновків, списку використаних джерел (321 найменування), додатків на 4 сторінках. Загальний обсяг дисертації становить 397 сторінок, основну частину викладено на 340 сторінках.

## **ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ**

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету та основні задачі дослідження, визначено об'єкт та предмет дослідження, зазначено методи дослідження, наукову новизну та практичне значення отриманих результатів, вказано зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами. Наведено дані про апробацію результатів та інформацію про особистий внесок здобувача, публікації за темою дослідження, а також структуру та обсяг роботи.

У **першому розділі** дисертаційної роботи на основі літературних джерел проаналізовано стан проблеми. Зокрема, наведено деякі відомості про сучасний стан розвитку апарату дробового інтегро-диференціювання, а також відповідних математичних моделей міграційних процесів. Проаналізовані деякі чисельні методи, що використовуються для розв'язування початково-крайових задач щодо відповідних моделей. Враховуючи вищий порядок обчислювальної складності таких методів у порівнянні з випадком опису процесів моделями, що містять диференціальні оператори цілого порядку, розглядаються підходи до побудови алгоритмів, які дозволяють зменшити обчислювальну складність, зокрема, алгоритмів паралельних обчислень. Наведено також основні підходи до розв'язання задач ідентифікації параметрів дробово-диференціальних моделей, що є принциповим елементом при їх практичному застосуванні.

За результатом проведеного аналізу зроблено висновок про те, що актуальним є розвиток алгоритмічних засобів скінченно-різницевого розв'язання прямих задач та метаевристичних методів для задач ідентифікації параметрів. Актуальними є розробка та дослідження алгоритмів для високопродуктивних обчислювальних систем, які б дозволили забезпечити зниження порядку обчислювальної складності до рівня, співставного з відповідним рівнем для рівнянь з похідними цілого порядку в класичних геогідроміграційних математичних моделях.

У **другому розділі** наведені результати математичного моделювання процесів конвективної дифузії у двовимірному наближенні на основі нових, дробово-диференціальних математичних моделей. Так, у **п. 2.1** вивчаються засоби моделювання

дробово-диференціальної динаміки процесів "конвекція-дифузія з релаксацією" на основі нелокальної за часовою змінною моделі, яка ґрунтується на узагальненні релаксаційного закону Фіка у вигляді

$$\vec{q} + \tau_q D_t^{(\alpha)} \vec{q} = -d\nabla C + \vec{v}C, \quad (1)$$

де  $\vec{q}$  – конвективно-дифузійний потік,  $C$  – концентрація розчинних речовин в рідкій фазі,  $\vec{v}$  – вектор швидкості фільтрації,  $d$  – коефіцієнт дифузії,  $\nabla$  – оператор Гамільтона,  $\tau_q = \tilde{\tau}_q^\alpha / \Gamma(\alpha + 1)$ ,  $\tilde{\tau}_q$  – параметр релаксації потоку,

$D_t^{(\alpha)} f(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{df(\xi)}{d\xi} (t-\xi)^{-\alpha} d\xi$  – оператор дробового диференціювання

Капуто–Герасимова за змінною  $t$  порядку  $\alpha$  ( $0 < \alpha < 1$ ),  $x, y, t$  – геометричні та часова змінні, відповідно,  $\Gamma(z)$  – гамма-функція Ейлера.

З урахуванням рівняння матеріального балансу, маємо з (1) рівняння моделі у вигляді

$$\sigma \left( \frac{\partial}{\partial t} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)} \right) C = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C \quad (0 < \alpha < 1), \quad (2)$$

де  $\sigma$  – пористість середовища.

На основі неklasичної математичної моделі, що базується на рівнянні (2), розглядається задача моделювання динаміки процесу конвективної дифузії при усталеній двовимірній плановій фільтрації з котловану кругового перетину у дренажний канал згідно фільтраційної схеми, вивченої в роботах А. Я. Бомби та В. І. Лаврика. Вказана задача зводиться до відшукування у півплощині з круговим вирізом розв'язку рівняння (2) при крайових умовах

$$C|_{\gamma_1} = C_1, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad C(x, y, 0) = C_0(x, y), \quad C'_t(x, y, 0) = 0, \quad (3)$$

де  $C_1$  – задана концентрація розчинних речовин на вході фільтраційного потоку,  $x=0$  – рівняння дренажного каналу,  $C_0(x, y)$  – функція початкового розподілу концентрації.

Область фільтрації в даній задачі є неканонічною областю складної конфігурації. Ефективний спосіб розв'язування задач конвективної дифузії такого типу ґрунтується на методиці переходу до нових змінних  $(\varphi, \psi)$  – точок відомої для даної фільтраційної схеми, канонічної області  $G_\omega$  комплексного потенціалу течії  $\omega = \varphi + i\psi$  ( $\varphi$  – потенціал течії,  $\psi$  – функція течії), яка є в даній задачі прямокутником  $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < \varphi_0, 0 < \psi < Q\}$ .

Крайову задачу, відповідну (2),(3), сформульовано для області комплексного потенціалу течії у вигляді

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

$$C(0, \psi, t) = C_1, \quad \frac{\partial C(\varphi_0, \psi, t)}{\partial \varphi} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial \psi} \Big|_{\psi=0, \psi=Q} = 0,$$

$$C(\varphi, \psi, 0) = C_0(\varphi, \psi), \quad C'_i(\varphi, \psi, 0) = 0,$$

де  $v^2 = v_x^2 + v_y^2$ ,  $v_x = \frac{1}{T} \frac{\partial \varphi}{\partial x}$ ,  $v_y = \frac{1}{T} \frac{\partial \varphi}{\partial y}$ ,  $\varphi_0 = \kappa H T$ ,  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \psi^2}$  – оператор Лапласа,

$T$  – потужність напірного водоносного пласта,  $Q = \pi \varphi_0 / \ln \left( \frac{l + \sqrt{l^2 - r^2}}{r} \right)$  –

фільтраційна витрата,  $l, r$  – геометричні параметри області,  $\kappa$  – коефіцієнт фільтрації,  $H$  – напір.

Наближений розв'язок задачі отримується на основі скінченно-різницевого підходу в такий спосіб.

Введемо до розгляду сіткову область

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

де  $h_1 = \frac{2}{2m+1}$ ,  $h_2 = \frac{\tilde{q}}{n}$  – кроки сітки за геометричними змінними  $\varphi$  і  $\psi$ , відповідно,

$\tau$  – крок сітки за часовою змінною, і поставимо у відповідність крайовій задачі наступний аналог локально-одновимірної різницевої схеми О. А. Самарського:

$$\frac{\sigma}{2} (C_t + \tau_q \Delta_t^{(\alpha+1)} \bar{C}) = V^2 \left( d\bar{C}_{\varphi\varphi} - \bar{C}_\varphi \right), \quad (4)$$

$$\frac{\sigma}{2} (C_t + \tau_q \Delta_t^{(\alpha+1)} \hat{C}) = V^2 d\hat{C}_{\psi\psi}. \quad (5)$$

Тут  $\hat{C} = C^{j+1}$ ,  $\bar{C} = C^{j+\frac{1}{2}}$ ,  $C = C^j$ ,  $t_{j+\frac{1}{2}} = t_j + \frac{\tau}{2}$ , а  $\Delta_t^{(\alpha+1)}$  – різницевий аналог

оператора дробового диференціювання  $D_t^{(\alpha+1)}$ , який визначається як

$$\Delta_t^{(\alpha+1)} \hat{C} = \frac{4}{\tau^2 \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=0}^j b_s^{(j)} (C^{s+1} - 2C^{s+1/2} + C^s), \\ \Delta_t^{(\alpha+1)} \bar{C} = \frac{4}{\tau^2 \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=0}^j b_s^{(j)} (C^{s+1/2} - 2C^s + C^{s-1/2}), \\ b_s^{(j)} = \tau^{1-\alpha} \left[ (j-s+1)^{1-\alpha} - (j-s)^{1-\alpha} \right] \ (j = \overline{0, N}).$$

Різницеві рівняння систем (4), (5) є триточковими та ефективно розв'язуються методом прогонки.

Аналіз результатів проведених чисельних експериментів щодо моделювання дробово-диференціальної динаміки процесу конвективної дифузії розчинних речовин при усталеній плановій фільтрації з кругового котловану показали, що процес масоперенесення у рамках такої моделі має хвильовий характер з амплітудою концентраційної хвилі, що зростає з часом, а також при збільшенні значення порядку похідної  $\alpha$ . Максимальне значення амплітуди хвилі, що досягається при  $\alpha \rightarrow 1$ ,

відповідає аналогу телеграфного рівняння. При цьому, для малих значень параметра релаксації  $\tau_q$  криві концентрації в неklasичній моделі якісно узгоджуються з відповідними кривими, отриманими в рамках класичної моделі конвективної дифузії.

У п. 2.2 виконано математичне моделювання дробово-диференціальної динаміки аномального процесу конвективної дифузії при усталеній двовимірній фільтрації з річок та каналів згідно з фільтраційною схемою, вивченою в роботах П. Я. Полубаринової-Кочиної. Запропонована в цьому пункті математична модель міграційного процесу є більш загальною ніж модель, розглянута у п. 2.1, і враховує як час релаксації дифузійного потоку, так і часову нелокальність досліджуваних процесів. Рівняння моделі має вигляд

$$\sigma \left( D_t^{(\alpha)} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)} \right) C(x, y, t) = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C \quad (0 < \alpha < 1). \quad (6)$$

В рамках неklasичної математичної моделі конвективної дифузії, що базується на рівнянні (6), задача моделювання дробово-диференціальної динаміки нерівноважного в часі конвективно-дифузійного процесу у випадку плоско-вертикальної усталеної фільтрації з вільною поверхнею з річок або каналів зводиться до розв'язання в області  $G_z \times (0, +\infty)$  ( $G_z$  – відома область течії) рівняння (6) при крайових умовах

$$C|_\gamma = C_1, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial n} \right|_{\gamma_i} = 0, \quad C(x, y, 0) = C_0(x, y), \quad C'_t(x, y, 0) = 0,$$

де  $C_1$  – задана концентрація розчинних речовин на вході фільтраційного потоку,  $C_0(x, y)$  – функція початкового розподілу концентрації,  $n$  – зовнішня нормаль до відповідної кривої.

Оскільки розв'язок фільтраційної задачі у вигляді характеристичної функції течії  $z = f(\omega)$  відомий, переходячи у (6) до нових змінних  $(\varphi, \psi)$  – точок геометрично простішої області комплексного потенціалу течії  $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < +\infty, 0 < \psi < Q\}$  отримуємо

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

$$C(0, \psi, t) = C_1, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial \psi} \right|_{\psi=0, \psi=Q} = 0,$$

$$C(\varphi, \psi, 0) = C_0(\varphi, \psi), \quad C'_t(\varphi, \psi, 0) = 0,$$

де  $Q$  – фільтраційна витрата,  $v$  – швидкість фільтрації.

Для чисельного розв'язання крайової задачі побудована різницева схема на основі локально-одновимірного методу О. А. Самарського.

Проведено порівняння результатів чисельного моделювання згідно з цією моделлю та трьома моделями конвективної дифузії, що базуються на наступних рівняннях:

$$\sigma \frac{\partial C}{\partial t} = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C, \quad (M_1)$$

$$\sigma \frac{\partial C}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C, \quad (M_2)$$

$$\sigma D_t^{(\alpha)} C = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C, \quad (M_3)$$

Тут модель  $M_1$  – це класична математична модель конвективної дифузії,  $M_2$  – релаксаційна математична модель типу Каттанео,  $M_3$  – дробово-диференціальна математична модель.

Аналіз результатів обчислювальних експериментів дозволяє зробити наступні висновки. Так, на початкових стадіях розвитку процесу спостерігається як випередження, так і запізнення формування полів концентрації згідно з некласичними моделями у порівнянні з класичною моделлю, проте на більш пізніх стадіях спостерігається стійке запізнення при описі процесу згідно з моделлю, досліджуваною у п. 2.2, порівняно як з класичною моделлю, так і з релаксаційною моделлю з похідними цілого порядку. У порівнянні з дробово-диференціальною моделлю без врахування релаксаційних процесів, модель, досліджувана у п. 2.2, демонструє випередження фронту концентрацій на початкових стадіях, тоді як з плином часу результати розрахунків за обидвома моделями практично збігаються.

У п. 2.3 побудована та досліджується дробово-диференціальна модель конвективної дифузії у неізотермічних умовах з урахуванням явища термодифузії, що базується на системі рівнянь

$$\sigma D_t^{(\alpha)} C = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C + d_T \Delta T,$$

$$C_T D_t^{(\beta)} T = \lambda \Delta T - \rho C_\rho \vec{v} \cdot \nabla T,$$

де  $T$  – температура,  $d_T$  – коефіцієнт термодифузії,  $C_T$  – об'ємна теплоємність ґрунту,  $\lambda$  – коефіцієнт теплопровідності,  $\rho, C_\rho$  – щільність і питома теплоємність порового розчину, відповідно.

Для випадку області фільтрації, що розглядається у п. 2.2, поставлена відповідна цій моделі крайова задача та розроблена методика її чисельного розв'язання на основі локально-одновимірної скінченно-різницевої схеми.

Деякі з результатів розрахунків на основі цієї моделі наведено на рис. 1.

Результати обчислювальних експериментів демонструють, що дробово-диференціальна динаміка неізотермічного процесу конвективної дифузії є менш інтенсивною у порівнянні з відповідною динамікою при її моделюванні в рамках класичних математичних моделей.

У п. 2.4 сформульована дробово-диференціальна математична модель конвективної дифузії на основі  $k$ -похідної Капуто виду

$$\sigma {}^k D_t^\alpha C = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C,$$

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

де  $\varphi$  – потенціал швидкості фільтрації. де  ${}^k D_t^\alpha$  – оператор двопараметричної дробової  $k$ -похідної Капуто порядку  $\alpha$  ( $0 < \alpha < 1$ ), яка визначається співвідношенням (Р. А. Керутті (R. A. Cerutti))

$${}^k D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{k\Gamma_k(1-\alpha)} \int_0^t \frac{f'(\tau)}{(t-\tau)^{\frac{k+\alpha-1}{k}}} d\tau.$$

Для випадку області фільтрації, що розглядається у п. 2.2., поставлена відповідна цій моделі крайова задача та розроблена методика її чисельного розв'язання на основі локально-одновимірної скінченно-різницевої схеми.

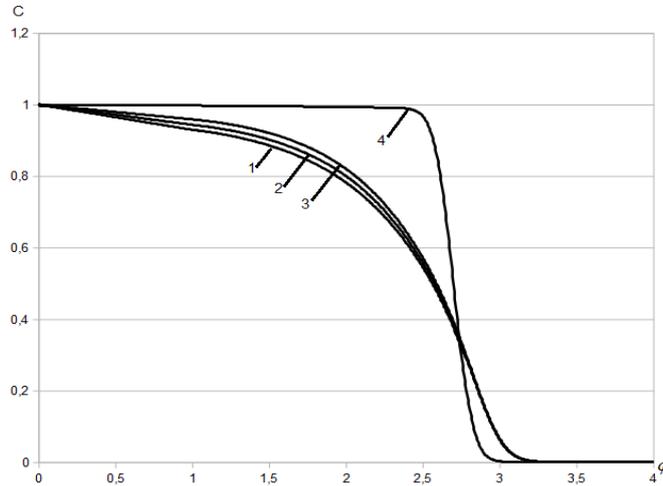


Рисунок 1 – Криві концентрації уздовж лінії течії  $\psi = 0,5$  у фіксований момент часу  $t = 0,1$  в залежності від величини порядку дробової похідної  $\beta$  ( $1 - \beta = 1, \alpha = 0,85$ ;  $2 - \beta = 0,9; \alpha = 0,85$ ;  $3 - \beta = 0,85; \alpha = 0,85$ ;  $4 - \beta = \alpha = 1$ ;  $d_T = 0,0005$ )

Розглядувана у п. 2.4 модель містить додатковий параметр у порівнянні з моделлю на основі стандартної похідної Капуто, що дає потенційну можливість більш точної її адаптації до вимірюваних характеристик модельованого процесу. Результати обчислювальних експериментів показують, що у порівнянні з моделлю на основі стандартної похідної Капуто запізнювання просування фронту концентрації є тим більшим, чим менше значення параметру  $k$ .

У **третьому розділі** наводяться результати математичного моделювання процесів фільтраційної консолідації насичених сольовими розчинами ґрунтів у одновимірному наближенні на основі нових дробово-диференціальних моделей з використанням методу скінченних різниць для отримання чисельних розв'язків поставлених нелінійних крайових задач.

У **п. 3.1** сформульовано математичну модель та поставлено нелінійну початково-крайову задачу, відповідну моделюванню нелокальних у часі процесів фільтраційної консолідації з урахуванням явища хімічного осмосу. Вказана модель містить похідні Капуто–Фабріціо з несингулярним ядром за часовою змінною. Система рівнянь моделі має вигляд

$${}^{CF} D_t^{\alpha,\lambda} H(x,t) = C_v \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} - \mu \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (0 < \alpha \leq 1), \quad (7)$$

$$\sigma {}^{CF}D_t^{\alpha, \lambda} C(x, t) = d \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (0 < \alpha_* \leq 1), \quad (8)$$

де  ${}^{CF}D_t^{\alpha, \lambda} H(x, t) = \frac{1}{\lambda(1-\alpha)} \int_0^t \frac{\partial H}{\partial \tau} e^{\frac{\alpha}{1-\alpha} \frac{t-\tau}{\lambda}} d\tau$  – двопараметрична похідна Капуто–

Фабріціо від функції  $H(x, t)$  за змінною  $t$  порядку  $\alpha$  ( $0 < \alpha \leq 1$ ),  $\lambda$  – дійсний позитивний параметр,  $u_x$  – швидкість фільтрації,  $H = p/\gamma$  – надлишковий напір,  $p$  – поровий тиск,  $\gamma$  – питома вага рідини,  $k$  – коефіцієнт фільтрації,  $\nu$  – коефіцієнт хімічного осмосу,  $C_v$  – коефіцієнт консолідації,  $\mu = \nu C_v/k$ .

Побудована монотонна різницева схема для чисельного розв'язання початково-крайової задачі щодо моделі (7), (8) з умовами першого роду. Різницеві рівняння відповідних СЛАР є триточковими та ефективно розв'язуються методом прогонки.

Результати проведених обчислювальних експериментів показують, що зменшення значень порядків дробових похідних у такій моделі призводить до прискорення процесу розсіювання полів напорів і до прискореного зростання концентрації сольового розчину у порівнянні з описом динаміки процесу в рамках класичних математичних моделей. Таким чином, можна стверджувати, що запропонована модель описує консолідаційні процеси у супердифузійному наближенні.

Математична модель, розглянута у п. 3.1, поширюється у п. 3.2 на випадок врахування явища лінійної повзучості скелету ґрунтового масиву. Система рівнянь отримуваної таким чином моделі, складається з рівняння для концентрації сольового розчину в вигляді (8), та рівняння для надлишкового напору у вигляді

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \zeta_\alpha {}^{CF}D_t^{\alpha, \lambda} H(x, t) = C_v \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} - \mu \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad \zeta_\alpha = \frac{a_1 \alpha}{a_0 + \beta(1 + \bar{e})} \quad (0 < \alpha < 1, \lambda > 0).$$

Чисельні розв'язки крайової задачі, аналогічної розглянутій у п. 3.1, одержуються на основі монотонної різницевої схеми О.А. Самарського.

Деякі з результатів проведених обчислювальних експериментів наведено на рис. 2.

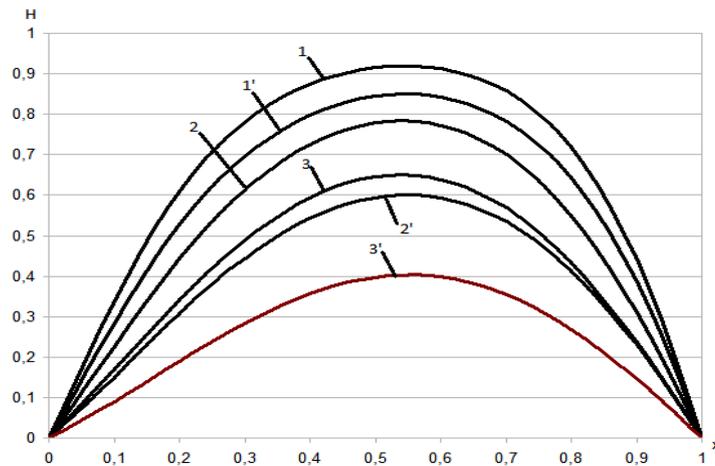


Рисунок 2 – Криві функції напорів для моделі без (криві 1–3) та з урахуванням фактора повзучості (криві 1'–3') при  $\alpha = \alpha_* = 0,85$  та

$$1, 1' - t = 0,1; 2, 2' - t = 0,5; 3, 3' - t = 0,9$$

Аналіз результатів проведених розрахунків засвідчує, що у порівнянні з випадком відсутності врахування явища повзучості ґрунтового скелету, тут спостерігається прискорене розсіювання поля надлишкових напорів в процесі консолідації. Зазначимо, що аналогічно моделі, дослідженої у п. 3.1, розглядувана модель з врахуванням явища лінійної повзучості описує супердифузійні процеси перенесення.

У п. 3.3 досліджується нова дробово-диференціальна математична модель фільтраційної консолідації насиченого сольовим розчином ґрунтового середовища з урахуванням його фрактальних властивостей, які моделюються рівняннями з фрактальними похідними у розумінні Хаусдорфа.

З узагальнень законів Дарсі та Фіка, узагальненого рівняння нерозривності фільтраційного потоку в умовах лінійного закону ущільнення та узагальненого співвідношення балансу солей у рідкій фазі для ґрунтового середовища фрактальної структури отримується наступна система рівнянь моделі:

$$D_t^{(\beta)} H = \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \left( \frac{\partial}{\partial x^\alpha} (C_v H - \mu C) \right),$$

$$\sigma D_t^{(\beta)} C = d_* \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \left( \frac{\partial C}{\partial x^\alpha} \right) + \frac{\partial}{\partial x^\alpha} (kH - \nu C) \cdot \frac{\partial C}{\partial x^\alpha},$$

де  $D_t^{(\beta)}$  – оператор регуляризованої дробової похідної Капуто–Герасимова порядку  $\beta$  за змінною  $t$ ,  $\frac{\partial}{\partial x^\alpha}$  – оператор фрактальної похідної у розумінні Хаусдорфа,  $\alpha > 0$  – фрактальна розмірність.

Для запропонованої моделі поставлена крайова задача моделювання відповідного процесу у випадку масиву скінченої потужності з проникними межами та розроблена чисельна методика її розв’язання на основі лінеаризованої різницевої схеми Кранка–Ніколсон.

Результати проведених обчислювальних експериментів демонструють, що, в залежності від значення коефіцієнту фрактальної розмірності середовища, описувані процеси можуть мати як субдифузійний, так і супердифузійний характер. Деякі з отриманих при цьому результатів наведено на рис. 3.

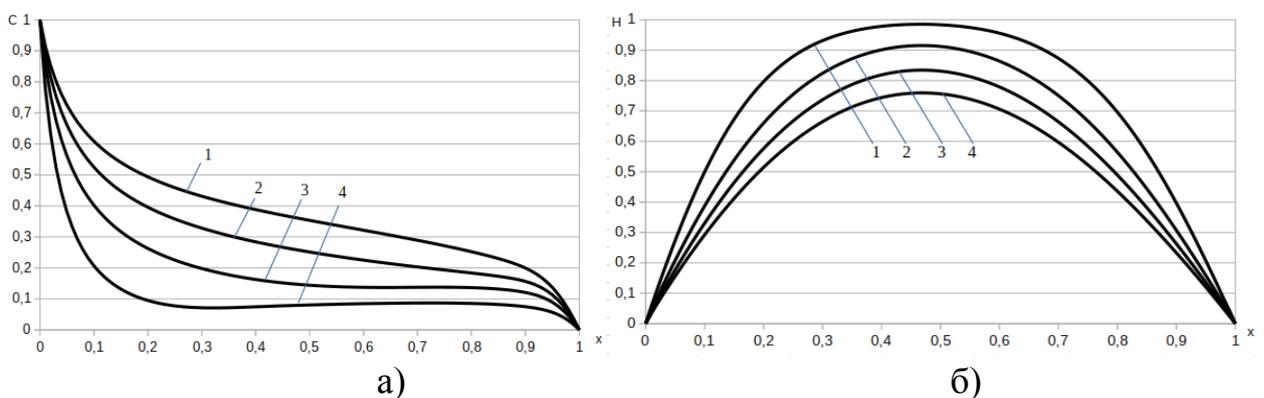


Рисунок 3 – Криві концентрацій  $C$  (а) та надлишкових напорів  $H$  (б) при  $\alpha = 0,9$ ;  $\beta = 0,8$  для 1 –  $t = 0,33$ ; 2 –  $t = 0,66$ ; 3 –  $t = 1,0$ ; 4 –  $t = 1,33$

**Четвертий розділ** присвячено математичному моделюванню нелокальних конвективно-дифузійних процесів при врахуванні явищ масообміну між частинками у мобільній та немобільній фазах згідно з різними законами кінетики масообміну як у одновимірному, так і у двовимірному наближенні.

У п. 4.1 сформульовано одновимірну дробово-диференціальну модель процесу промивки засолених ґрунтів з урахуванням масообміну, що містить дробово-диференціальне за просторовою змінною рівняння для фільтраційного напору та дробово-диференціальне за часовою змінною рівняння для поля концентрації солей у розчинній фазі. У безрозмірних система рівнянь моделі має вигляд

$$\frac{\partial H}{\partial t} = D_x^{(\alpha+1)} H(x,t) \quad (0 < \alpha \leq 1), \quad (9)$$

$$\sigma_* D_t^{(\gamma)} C = d D_x^{(1+\beta)} C - \frac{\partial}{\partial x} (vC) + \tilde{\gamma}_* (C_m - C) \quad (0 < \gamma, \beta \leq 1), \quad (10)$$

де  $D_x^{(\alpha)}$  – оператор дробової похідної Капуто–Герасимова за змінною  $x$  порядку  $\alpha$  ( $0 < \alpha \leq 1$ ),  $v = -\omega D_x^{(\alpha)} H$ ,  $\omega = \frac{k_f H_1}{a^\gamma l^{(1-\gamma)(\alpha+1)}}$ ,  $\tilde{\gamma} = \gamma \frac{l^{\gamma(\alpha+1)}}{a^\gamma}$ ,  $k_f$  – фрактальний коефіцієнт фільтрації,  $\sigma_*$  – пористість середовища,  $\gamma_*$  – константа швидкості розчинення,  $C_m$  – концентрація граничного насичення,  $a$  – коефіцієнт п'єзопроводності,  $H_1$  – задане значення напору на вході  $x=0$  фільтраційного потоку,  $l$  – розмір області фільтрації

Для початково-крайової задачі щодо системи рівнянь (9), (10) з умовами першого роду розроблена лінеаризована різницева схема. Результати обчислювальних експериментів щодо моделювання процесу промивки засолених ґрунтів з урахуванням масообміну демонструють, що процес розсолення помітно прискорюється при зменшенні величини порядку дробової похідної за просторовою змінною у рівнянні для поля напорів у порівнянні з описом процесу в рамках класичної моделі. Зменшення величини порядку дробової похідної за часом у рівнянні стосовно поля концентрації солей призводить до моделювання розвитку процесу розсолення з запізненням. Врахування масообміну з вміщуючими породами сприяє його уповільненню.

У п. 4.2 побудована та досліджена двовимірна нелокальна дробово-диференціальна модель конвективної дифузії розчинних речовин за умов масообміну, що містить похідну Капуто–Катугампола за часовою змінною. Кінетика масообміну у цій моделі описується згідно з рівнянням нерівноважної оборотної сорбції при ізотермі Генрі, зокрема у випадку нелінійної залежності коефіцієнта дифузії від концентрації солей у рідкій фазі.

Розглядаючи дробово-диференціальну модель динаміки міграційного процесу з урахуванням масообміну з вміщуючими породами на основі нелокального оператора дробової похідної Капуто–Катугампола від функції  $P$  за функцією  $g(t) = t^\rho$  ( $\rho > 0$ ) часової змінної, який визначається як

$D_{t,t^\rho}^{(\beta)} p(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^t \frac{p'(\tau)}{(t^\rho - \tau^\rho)^\beta} d\tau$ , де  $\beta$  ( $0 < \beta < 1$ ) – порядок похідної, отримуємо

наступну систему рівнянь моделі:

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

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

де  $v_x = v_x(x, y)$ ,  $v_y = v_y(x, y)$  – складові вектора швидкості фільтрації,  $D$  – коефіцієнт конвективної дифузії,  $\alpha_* = 1/\Gamma$ ,  $\Gamma$  – коефіцієнт Генрі,  $\beta_*$  – константа швидкості масообміну,  $N$  – концентрація солей у твердій фазі.

Розглядається випадок як сталого коефіцієнту дифузії, так і його залежності від концентрації речовин у рідкій фазі у формі

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

де  $D_m$  – коефіцієнт молекулярної дифузії,  $\lambda$  – параметр гідродинамічної дисперсії,  $k(C)$  – коефіцієнт фільтрації пористого середовища, як функція концентрації  $C$ ,  $\bar{k}$  – усереднений коефіцієнт фільтрації. Використовується відома (А. П. Власюк, М. Т. Кузло) залежність вигляду  $k(C) = a_0 + a_1 C + a_2 C^2 + a_3 C^3 + a_4 C^4 + a_5 C^5$ , експериментально отримана для випадку суглинкових ґрунтів.

Для моделі (11), (12) поставлена початково-крайова задача для випадку області фільтрації, що розглядається у п. 2.2, та розроблена методика її чисельного розв'язання на основі локально-одновимірної скінченно-різницевої схеми.

Результати обчислювальних експериментів показують, що варіація додаткового параметра похідної Капуто–Катугампола дозволяє отримувати як субдифузійну, так і супердифузійну картини розподілу полів концентрації. Ступінь впливу масообміну на динаміку міграційного процесу тут залежить від величини порядку дробової похідної за часовою змінною. Так, зменшення величини запізнювання спостерігається у разі зменшення порядку похідної та навпаки. Запізнення у розвитку фронту концентрацій при наявності масообміну також суттєво залежить від параметрів рівняння нерівноважної оборотної сорбції.

У п. 4.3 побудована математична модель та чисельно розв'язана двовимірною початково-крайова задача дробово-диференціального моделювання мобільно-немобільної динаміки процесу конвективної дифузії розчинних речовин при усталеній фільтрації ґрунтових вод до дренажу. Рівняння моделі отримується на основі МІМ (mobile-immobile media) підходу використовуючи рівняння динаміки відтоку частинок у немобільну фазу, що містить похідну Капуто за часовою змінною, вигляду

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = {}^c D_t^\gamma C,$$

де  ${}^C D_t^\gamma$  – оператор дробової похідної Капуто–Герасимова порядку  $\gamma$  ( $0 < \gamma < 1$ ) за змінною  $t$ .

Задача моделювання дробово-диференціальної динаміки процесу конвективної дифузії розчинних речовин розглядається для випадку умов плосковертикальної усталеної фільтрації ґрунтових вод з водою до нескінченного дренажного каналу. Характеристична функція течії та поле швидкостей для відповідної крайової задачі фільтрації є відомою. Відповідна фільтраційна задача вивчалась в роботах В. І. Лаврика та його учнів.

Основне рівняння моделі має вигляд

$${}^C D_t^\alpha C(x, y, t) + \beta {}^C D_t^\gamma C(x, y, t) = d \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} \quad (0 < \alpha, \gamma < 1).$$

У дисертаційній роботі запропонована методика чисельного розв'язання відповідної конвективно-дифузійної початково-крайової задачі в рамках МІМ підходу, що базується на локально-одновимірній скінченно-різницевої схемі О. А. Самарського.

Результати проведених обчислювальних експериментів демонструють, що при моделюванні згідно з таким підходом, явище запізнювання формування полів концентрації спостерігається найбільшою мірою на початковій та прилеглих до початкової стадіях розвитку міграційного процесу.

У **п. 4.4** розглядається спрощений аналог математичної моделі, описаної у п. 4.3, який отримується шляхом апроксимації похідної дробового порядку похідними цілого порядку вигляду  ${}^C D_t^\alpha u(t) \approx \alpha u'(t) + (1 - \alpha)(u(t) - u(0))$ . Така апроксимація дозволяє [doi: [10.1016/j.chaos.2017.07.026](https://doi.org/10.1016/j.chaos.2017.07.026)] отримувати наближення достатньої точності при  $\alpha$  близькому до 1.

Використання моделі такого типу дозволяє суттєво знизити час, що витрачається на моделювання, а результати обчислювальних експериментів показують, що вона із задовільною точністю описує відповідний конвективно-дифузійний процес при значенні порядку дробової похідної, більшому за 0.85.

Алгоритм вибору найбільш адекватної спостережуваному процесу дробово-диференціальної моделі конвективної дифузії з масообміном описується у **п. 4.5**.

При необхідності прогнозувати спостережуваний аномальний дифузійний процес в ситуації, коли невідомий фактичний механізм масообміну та неможливо апріорі визначити найбільш адекватну йому математичну модель, пропонується алгоритм прийняття рішень, побудований на основі верхніх оцінок різниці між розв'язками задач, досліджуваних у п. 4.2 та 4.3, та задачі, що не враховує масообмінні процеси.

Використання такого алгоритму дозволяє визначити адекватну спостережуваному процесу математичну модель, зменшуючи часові витрати на розв'язання обернених задач для калібрування.

У **п'ятому розділі** для одно- та багатовимірних задач моделювання геоміграційних процесів, що містять похідні Капуто–Герасимова та Капуто–Фабріціо, запропонований клас паралельних алгоритмів та оптимізованих обчислювальних схем.

У п. 5.1 розглядаються паралельні алгоритми для локально-одновимірних схем розщеплення застосованих до дробово-диференціальних рівнянь, які містять похідну Капуто–Герасимова за часовою змінною.

Нехай кожен з  $N$  процесів паралельної програми обчислює значення прогоночних коефіцієнтів та шуканої функції для  $N$  блоків комірок сітки розміру  $\left(\frac{n}{N}, \frac{m}{N}\right)$ , де  $(n, m)$  – розмір сітки. Вертикальні та горизонтальні прогонки виконуються паралельно за  $N$  кроків з обміном даними після кожного з них.

Тоді загальний алгоритм знаходження розв’язку на одному кроці за часом має наступний вигляд:

1) Обчислення прогоночних коефіцієнтів вертикальних прогонки. Процес  $j$  на  $i$ -тому кроці обробляє блок  $(2N - i - j - 1) \bmod N$  та передає значення прогоночних коефіцієнтів у  $\left(\frac{m}{N} - 1\right)$ -му рядку блоку процесу  $(N + j - 1) \bmod N$ ;

2) Зворотний хід вертикальних прогонки. Процес  $j$  на  $i$ -тому кроці обробляє блок  $(N + i - j) \bmod N$  та передає значення шуканої функції в першому рядку блоку процесу  $(j + 1) \bmod N$ ;

3) Обчислення прогоночних коефіцієнтів горизонтальних прогонки. Процес  $j$  на  $i$ -тому кроці обробляє блок  $i$  та передає значення прогоночних коефіцієнтів у  $\left(\frac{n}{N} - 1\right)$ -ому стовпці блоку процесу  $(N + j - 1) \bmod N$ ;

4) Зворотний хід горизонтальних прогонки. Процес  $j$  на  $i$ -тому кроці обробляє блок  $N - i - 1$  та передає значення шуканої функції у першому стовпці блоку процесу  $(j + 1) \bmod N$ .

Час роботи алгоритму можна оцінити як

$$T_N(n, m) = \frac{nm}{N} t_c + 2(N - 1) \left( t_{tr} \left( \frac{n}{N} \right) + t_{tr} \left( \frac{m}{N} \right) \right),$$

де  $t_c$  – сума часу, необхідного для обчислення однієї пари прогоночних коефіцієнтів, і часу обчислення розв’язку в одній точці при зворотному ході прогонки, а  $t_{tr}(s)$  – час пересилання блоку, що складається з  $s$  одиниць оброблюваних даних, між процесами розподіленої програми.

У п. 5.2 розглянуто паралельні алгоритми для графічних процесорів (GPU) у випадку моделей з похідними Капуто–Герасимова як за часовою, так і за просторовими змінними.

У пп. 5.2.1 пропонується GPU-алгоритм для двовірних задач з похідною за часовою змінною, що розв’язуються за локально-одновимірною скінченно-різницевою схемою. Пропонується наступний алгоритм:

- Кожен потік паралельної програми проводить незалежні обчислення в рядку/стовпці комірок сітки;

- Для додаткового розпаралелювання при обчисленні сум в апроксимаціях дробових похідних один рядок/стовпець комірок може оброблятися блоком потоків,

кожен з яких обчислює часткову суму, після чого потік з індексом 0 підсумовує отримані результати та проводить основні обчислення;

- Після виконання обчислень на першому кроці алгоритму необхідно передати з пам'яті GPU в пам'ять центрального процесора (CPU) дані, які мають бути передані іншому процесу розподіленої програми. Аналогічно, після отримання даних від іншого процесу, вони повинні бути скопійовані в пам'ять GPU;

- Після завершення обчислень, результат повинен бути скопійований з пам'яті GPU у пам'ять CPU.

Швидкодія алгоритму лінійно залежить від номера кроку за часом та від розміру сітки. Коефіцієнти цих лінійних залежностей залежать від кількості обчислювальних ресурсів графічного процесора.

**Твердження 5.2.** У випадку, коли GPU здатний виконати всі запущені потоки одночасно та  $m = n$ , час роботи алгоритму можна оцінити як

$$T_N^G(n, t) = \frac{n}{N} \left( t_{gc0} + \frac{k_{gc}}{N_t} t \right) + 4(N-1) \left( t_{tr} \left( \frac{n}{N} \right) + t_s \left( \frac{n}{N} \right) \right),$$

де  $t_{gc} = t_{gc0} + \frac{k_{gc}}{N_t} t$  – сума часу, необхідного для обчислення однієї пари прогоночних коефіцієнтів на GPU,  $N_t$  – кількість потоків в групі, яка проводить паралельне обчислення сум,  $t_s(l)$  – час копіювання блоку, що складається з  $l$  одиниць оброблюваних даних, з пам'яті GPU у пам'ять CPU та навпаки (будемо вважати цей час однаковим).

У пп. 5.2.2 розглядається аналогічний алгоритм, у якому обчислення виконуються паралельно на GPU та CPU:

- При проведенні вертикальних прогонок, обчислення в блоці стовпців  $(1, \dots, n_x)$  виконуються CPU паралельно з виконанням на GPU обчислень в блоці стовпців  $(n_x + 1, \dots, n)$ ;

- При проведенні горизонтальних прогонок, обчислення в блоці рядків  $(1, \dots, n_y)$  виконуються CPU паралельно з виконанням на GPU обчислень в блоці рядків  $(n_y + 1, \dots, m)$ ;

- Після проведення вертикальних прогонок виконується синхронізація значень шуканої функції між пам'яттю CPU та GPU: блок комірок  $(n_x + 1, \dots, n) \times (1, \dots, n_y)$  копіюється з пам'яті GPU у пам'ять CPU, а блок комірок  $(1, \dots, n_x) \times (n_y + 1, \dots, m)$  – з пам'яті CPU у пам'ять GPU;

- Синхронізація у зворотному напрямку виконується після проведення горизонтальних прогонок.

**Твердження 5.3.** Час роботи алгоритму у випадку розв'язання задачі одним CPU та одним GPU при  $m = n$ ,  $n_y = n_x$  і припущенні щодо лінійності залежності часу передачі даних між пам'яттями CPU та GPU від їх обсягу ( $t_s(l) = k_s l$ ), можна оцінити як:

$$T_3(n, n_x, t) = \max \left( n_{x^2} (t_{c0} + k_c t), (n - n_x) \left( t_{gc0} + \frac{k_{gc}}{N_t} t \right) \right) + 4k_s n_x (n - n_x).$$

Розглядається схема фіксованого вибору розміру  $n_x$  та його динамічної зміни.

Результати тестування розроблених алгоритмів показують їх невелику ефективність (до 5% при паралельному проведенні обчислень на GPU та CPU, до 1,5% при використанні двох GPU зі зниженням при зростанні номеру кроку за часом) через необхідність виконання великої кількості операцій копіювання даних між пам'яттями обчислювальних пристроїв.

У пп. 5.2.3 та 5.2.4 розглядаються паралельні алгоритми для GPU у випадку розв'язання задач щодо одновимірних моделей, які містять похідні Капуто–Герасимова.

У **пп. 5.2.3** пропонується алгоритм для моделі, що містить відповідну похідну за просторовою змінною.

У цьому випадку особливістю процедури знаходження значень елементів векторів правої частини СЛАР є те, що складність виконання операцій підсумовування залежить від змінної кількості доданків у відповідних сумах. Відповідно, при розпаралелюванні виникає проблема рівномірного завантаження потоків для розв'язання якої запропонована спеціальна схема розподілу елементів векторів правих частин СЛАР по GPU-потоків.

Результати проведених обчислювальних експериментів демонструють лінійне зростання прискорення алгоритму при зростанні розміру сітки.

У **пп. 5.2.4** розглядаються питання оптимізації обчислення значень похідної Капуто–Герасимова при розв'язанні задач щодо моделей, які містять таку похідну за часовою змінною. Запропоновані оптимізовані алгоритми, зокрема, процедури організації GPU-потоків у групи задля використання швидкої локальної пам'яті, що дозволяють збільшити масштабованість базового алгоритму. Досліджується ефективність використання декількох GPU в межах одного вузла для проведення обчислень. Показано, що підвищення швидкодії у цьому випадку суттєво обмежується необхідністю копіювання даних між пам'яттями графічних процесорів.

Для збільшення швидкодії обчислювальних схем моделювання процесів тепло- та масоперенесення на основі моделей з похідною Капуто–Герасимова за часовою змінною у **п. 5.3** запропонована процедура її наближення з заданою точністю на основі розкладення у ряди та методики розділення змінних.

При розв'язанні диференціальних рівнянь з дробовою похідною Капуто–Герасимова за часовою змінною, порядок складності при послідовному обчисленні наближених значень  $\Delta_t^{(\alpha)} u$  похідної може бути знижений за допомогою апроксимації сум степеневими рядами та їх модифікації в процесі обчислень.

Нехай

$$\Delta_t^{(\alpha)} u = \frac{1}{\tau^\alpha \Gamma(2 - \alpha)} \sum_{r=0}^i \left[ g(r, i) (u^{(r+\gamma)} - u^{(r)}) \right],$$

$$g(r, i) = (i - r + a)^{1-\alpha} - (i - r + c)^{1-\alpha}, 0 < \alpha \leq 1, a > c, \quad (13)$$

При апроксимації функції  $g(r, i)$  у вигляді відрізка ряду  $g(r, i) \approx \sum_{k=0}^{k_m} f_k^{(1)}(r) f_k^{(2)}(i)$ , де  $k_m$  – обмеження на кількість його членів, отримуємо

$$\Delta_t^{(\alpha)} u \approx \frac{1}{\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^{k_m} \left( f_k^{(2)}(i) \sum_{r=0}^i \left[ f_k^{(1)}(r) (u^{(r+\gamma)} - u^{(r)}) \right] \right).$$

Апроксимація функції (13), побудована на основі узагальненої формули бінома Ньютона, має вигляд

$$g(r, i) = \sum_{k=0}^{\infty} g_k^{(1)}(i, r) \approx \sum_{k=0}^{k_m} g_k^{(1)}(i, r), \quad g_k^{(1)}(i, r) = f_k^{(1,1)}(r) f_k^{(2,1)}(i), \quad (14)$$

$$f_k^{(2,1)}(i) = i^{1-\alpha-k}, \quad f_k^{(1,1)}(r) = \frac{(1-\alpha)(-\alpha)\dots(2-\alpha-k)}{k!} \left( (a-r)^k - (c-r)^k \right).$$

При фіксованому  $r$ ,  $g_k^{(1)}(i, r) \leq \varepsilon$  при

$$i \geq i^{(1)}(r, k), \quad i^{(1)}(r, k) = \left( \frac{(1-\alpha)(-\alpha)\dots(2-\alpha-k) \left( (a-r)^k - (c-r)^k \right)}{\varepsilon \cdot k!} \right)^{1/(\alpha+k-1)}.$$

Інша апроксимація функції (13) отримується як відрізок ряду Тейлора по  $i$  в точці  $i = b$ :

$$g(r, i) = \sum_{k=0}^{\infty} g_k^{(2)}(i, r, b) \approx \sum_{k=0}^{k_m} g_k^{(2)}(i, r, b),$$

$$g_k^{(2)}(i, r, b) = f_k^{(1,2)}(r, b) f_k^{(2,2)}(i, b), \quad f_k^{(2,2)}(i, b) = (i-b)^k, \quad (15)$$

$$f_k^{(1,2)}(r, b) = \frac{(1-\alpha)(-\alpha)\dots(2-\alpha-k)}{k!} \left( (a+b-r)^{1-\alpha-k} - (c+b-r)^{1-\alpha-k} \right).$$

Тут, при фіксованих  $r$  та  $k$ ,  $|g_k^{(2)}(i, r, b)| \leq \varepsilon$  при

$$|i-b| \leq i^{(2)}(r, b, k),$$

$$i^{(2)}(r, b, k) = \left( \frac{\varepsilon k!}{\left| (1-\alpha)(-\alpha)\dots(2-\alpha-k) \left( (a+b-r)^{1-\alpha-k} - (c+b-r)^{1-\alpha-k} \right) \right|} \right)^{1/k}.$$

В цілому, при фіксованих  $r$ ,  $k_m$  та  $\varepsilon$ , для наближеного обчислення  $g(r, i)$  пропонується використовувати серію апроксимацій (15), які з достатньою точністю апроксимують  $g(r, i)$  при  $r+1 \leq i < i^{(1)}(r, k)$ , та апроксимацію (14) на інтервалі  $i \geq i^{(1)}(r, k)$ . Апроксимація функції  $g(r, i)$  з порядком точності  $O(\varepsilon)$  будується відповідно до наступного алгоритму:

- 1) Нехай  $r_0 = r$ ;
- 2) Знаходимо значення  $b_j > r_j + 1: b_j - i^{(2)}(r, b_j, k) = r_j$  і будуємо апроксимацію (15);
- 3) Якщо  $b_j + i^{(2)}(r, b_j, k) < i^{(1)}(r, k)$ , то будуємо наступну апроксимацію (15): встановлюємо  $r_{j+1} = b_j + i^{(2)}(r, b_j, k)$  і переходимо до кроку 2;

## 4) Будуємо апроксимацію (14).

При послідовному обчисленні значень  $\Delta_i^{(\alpha)}u$  на кроці  $l$  пропонується процедура зміни та доповнення апроксимації  $\Delta_i^{(\alpha)}u$  для  $i=l-1$  таким чином, щоб утворити апроксимацію для  $i=l$ , що дозволяє знизити обчислювальну складність розв'язання задач на одному кроці за часом з лінійної до логарифмічної. Точність апроксимації дробової похідної за цього має порядок  $O(\varepsilon)$ , похибки заокруглення при програмній реалізації вважаються суттєво меншими за похибку методу. Проведені обчислювальні експерименти показали практичну ефективність застосування такої процедури при моделюванні на великих часових інтервалах (більше ніж  $\sim 700$  кроків за часом).

Іншим дослідженням у п. 5.3 методом підвищення швидкодії обчислень є динамічна зміна довжини кроку за часом з її підбором методом проб та помилок. Ефективність цієї процедури була експериментально доведена при моделюванні початкових стадій процесів. При продовженні моделювання, час, що витрачається на підбір кроку, зростає і процедура стає неефективною.

Процедура, запропонована у п. 5.3 для рівнянь, що містять похідні Капуто–Герасимова за часовою змінною, була у п. 5.4 поширена на випадок двовимірної дробово-диференціальної моделі геоміграційних процесів, яка містить відповідні похідні за просторовими змінними.

З огляду на високу обчислювальну складність, запропоновано алгоритми її розпаралелювання на системах з розподіленою пам'яттю. Розглядаються дві схеми розподілу даних:

- Одновимірна, блоками рядків, з перерозподілом даних у розподіл блоками стовпців. При використанні цієї схеми, спочатку проводяться незалежні обчислення в рядках сітки, а потім перерозподіл даних та незалежні обчислення у стовпцях. Обмін даними тут є глобальним, але проводиться тільки значеннями шуканої функції  $u$ ;
- Двовимірна, червоно-чорна, в якій обчислення, як по рядках, так і по стовпцях, проводяться за  $P$  ( $P$  – кількість процесів) кроків з обміном даними між сусідніми за рангом процесами. На кожному кроці, процеси обмінюються розрахованими апроксимаціями для кожного рядка або стовпця. Обміни в цьому випадку є локальними.

При невеликому  $P$ , алгоритм, що використовує двовимірну схему розподілу даних, має більшу швидкодію, ніж при використанні одновимірної схеми, внаслідок меншого обсягу даних, якими обмінюються процеси. При збільшенні  $P$ , обсяг даних у випадку одновимірної схеми зменшується, а у випадку двовимірної – зростає, що призводить до її неефективності.

При істотному збільшенні кількості залучених процесів, у випадку одновимірної схеми збільшується кількість операцій обміну і, відповідно, час, що витрачається на допоміжні операції.

Для зменшення кількості операцій обміну пропонується наступна параметрична схема розподілу даних, що поєднує в собі одновимірну та двовимірну схеми:

- При проведенні обчислень по рядках сітки, стовпці розбиваються на блоки розміром  $K \frac{n^2}{P^2}$  і у межах блоку стовпців  $j$  процес  $i$  обробляє блок рядків  $(i + j + K) \% P$ , де  $\%$  – залишок від ділення. Обчислення, аналогічно схемі з двовимірним розподілом даних, проводяться за  $\frac{P}{K}$  кроків з обміном даними після кожного з них;

- Після проведення обчислень по рядках сітки, дані перерозподіляються таким чином, щоб отримати аналогічний розподіл по стовпцях. Для цього в кожному блоці стовпців, для кожного блоку з  $K$  блоків рядків проводиться операція перерозподілу, аналогічна тій, що застосовується в схемі з одновимірним розподілом даних.

При  $K = P$ , розглянута алгоритмічна схема буде збігатися зі схемою з одновимірним розподілом даних, а при  $K = 1$  – зі схемою з двовимірним розподілом.

Обсяг даних, що передається при використанні цієї схеми, більший, ніж при одновимірному розподілі, проте менший, ніж при двовимірному. При великій кількості залучених процесів, кількість операцій обміну тут істотно менше, ніж в одно- та двовимірній схемах.

Пропоновані оптимізовані обчислювальні схеми та додаткове пришвидшення розрахунків, отримане при застосуванні графічних процесорів, дозволяють проводити моделювання міграційних процесів у середовищах фрактальної структури на великих часових проміжках.

**Шостий розділ** присвячено обчислювальним схемам для дробово-диференціальних рівнянь, що містять  $\psi$ -похідну Капуто від функції за іншою функцією та похідну Анатгана–Балеану.

У п. 6.1 розглядається дробова  $\psi$ -похідна Капуто за часовою змінною  $t$  вигляду

$$D_{t,g}^{(\beta)} H(x,t) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^t \frac{\partial H(x,\tau)}{\partial \tau} (g(t) - g(\tau))^{-\beta} d\tau.$$

На однорідній скінченно-різницевої сітці

$$\omega = \left\{ (x_i, t_j) : x_i = ih, t_j = j\tau, i = 0, \dots, m, j = 0, 1, \dots \right\}$$

наближення  $\Delta_{t,g}^{(\beta)}$  першого порядку точності оператора  $D_{t,g}^{(\beta)}$  має вигляд

$$\Delta_{t,g}^{(\beta)} C = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \sum_{s=0}^j b_s^{(j)} \frac{C^{s+1} - C^s}{\tau}, \quad b_s^{(j)} = \int_{t_s}^{t_{s+1}} (g(t_j) - g(\tau))^{-\beta} d\tau. \quad (16)$$

Визначення значень коефіцієнтів СЛАР, до яких зводиться розв'язання методом скінченних різниць дробово-диференціальних рівнянь, що містять  $\psi$ -похідну Капуто за часовою змінною, потребує проведення розрахунку сингулярних при  $\tau = t_j$  інтегралів  $b_s^{(j)}$  для наближеного визначення значень яких необхідно використовувати спеціальні чисельні методи.

З цією метою пропонується алгоритм чисельного інтегрування на основі методики рекурсивного підрозбиття.

При розв'язанні початково-крайових задач, кількість визначень значень інтегралів  $b_s^{(j)}$  лінійно збільшується зі збільшенням номеру кроку за часом. Для зменшення часу, що витрачається на обчислення інтегралів  $b_s^{(j)}$ , пропонується наступна рекурентна схема, заснована, на розкладенні інтегрованої функції у ряди та подальшому розділенні змінних.

Нехай існує нескінченно диференційована обернена функція  $f(\tau): f(g(\tau)) = \tau$ . Тоді, інтеграл  $b_s^{(j)}$  може бути представленим у вигляді ряду двома способами, викладеними нижче.

Виконавши в  $b_s^{(j)}$  заміну змінних  $x = g(t_j) - g(\tau) \Rightarrow \tau = f(g(t_j) - x)$  отримуємо

$$b_s^{(j)} = \int_{t_s}^{t_{s+1}} (g(t_j) - g(\tau))^{-\beta} d\tau = \int_{g(t_j)-g(t_{s+1})}^{g(t_j)-g(t_s)} f'(g(t_j) - x) x^{-\beta} dx.$$

Розклавши  $f'(x)$  у ряд Тейлора в точці  $x = g(t_j)$  маємо

$$\begin{aligned} b_s^{(j)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \left( (-1)^n \frac{f^{(n+1)}(g(t_j))}{n!} \int_{g(t_j)-g(t_{s+1})}^{g(t_j)-g(t_s)} x^{n-\beta} dx \right) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left( (-1)^n \frac{f^{(n+1)}(g(t_j))}{n!(n-\beta+1)} \left[ \begin{array}{l} (g(t_j) - g(t_s))^{n-\beta+1} \\ -(g(t_j) - g(t_{s+1}))^{n-\beta+1} \end{array} \right] \right). \end{aligned} \quad (17)$$

Друга схема обчислення  $b_s^{(j)}$  отримується виконуючи заміну змінних  $x = g(\tau) \Rightarrow \tau = f(x)$ . У цьому випадку маємо

$$b_s^{(j)} = \int_{t_s}^{t_{s+1}} (g(t_j) - g(\tau))^{-\beta} d\tau = \int_{g(t_s)}^{g(t_{s+1})} f'(x) (g(t_j) - x)^{-\beta} dx.$$

Розкладаючи  $(g(t_j) - x)^{-\beta}$  з використанням узагальненої формули бінома Ньютона та розкладаючи  $f'(x)$  у ряд Тейлора в точці  $x = g(t_{s+1})$  отримуємо

$$\begin{aligned} b_s^{(j)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \left( (-1)^n \binom{-\beta}{n} g(t_j)^{-\beta-n} S_n \right), \\ S_n(t_s, t_{s+1}) &= \sum_{m=0}^{\infty} \left[ B_m \frac{f^{(m+1)}(g(t_{s+1}))}{m!} \right], \quad B_m = \int_{g(t_s)}^{g(t_{s+1})} x^m (x - g(t_{s+1}))^{-\beta} dx. \end{aligned} \quad (18)$$

Значення інтегралів  $B_m$  обчислюються за рекурентною формулою

$$\begin{aligned} B_0 &= \int_{g(t_s)}^{g(t_{s+1})} x^n dx = \frac{1}{n+1} (g(t_{s+1})^{n+1} - g(t_s)^{n+1}), \\ B_{i+1} &= -\frac{n+i+2}{g(t_{s+1})(i+1)} \left( B_i - \frac{g(t_s)^{n+1} (g(t_s) - g(t_{s+1}))^{i+1}}{g(t_{s+1})(i+1)} \right). \end{aligned}$$

Особливістю схеми (18) є те, що значення коефіцієнтів  $S_n$ , один раз розрахованих для фіксованих  $t_s$  і  $t_{s+1}$ , можливо зберігати та використовувати надалі при зміні  $t_j$ .

Обчислювальні експерименти, проведені у випадку  $g(\tau) = \tau^2$ ,  $f(\tau) = \tau^{1/2}$ ,  $f'(\tau) = \frac{1}{2}\tau^{-1/2}$ ,  $f^{(n+1)}(\tau) = \frac{1/2-n}{\tau} f^{(n)}(\tau)$ , демонструють, що збіжність ряду (17) погіршується при  $t_s \rightarrow 0$ , тоді як збіжність ряду (18) погіршується при  $t_{s+1} \rightarrow t_j$ . Для забезпечення найвищої швидкодії при фіксованій точності пропонується алгоритм автоматичного вибору рядів (17) або (18) для наближення інтегралів  $b_s^{(j)}$  залежно від значень їх параметрів. Його використання дозволяє досягти 2.5-кратного прискорення при моделюванні аномального процесу дифузії.

Для одержання додаткового прискорення у п. 6.2 запропонована серія GPU алгоритмів, зокрема таких, що використовують можливості низькорівневої оптимізації коду.

Окрім проведення обчислень безпосередньо за (16) (алгоритм 1), розглядається застосування принципу фіксованої пам'яті, згідно з яким сума в (16) обмежується умовою  $b_s^{(j)} > \varepsilon_1$ , де  $\varepsilon_1$  – задана стала (алгоритм 2), а також алгоритм 3, що базується на представленні інтегралів у вигляді рядів (17) та (18).

Хоча проведення обчислень безпосередньо за (16) дозволило отримати найбільш точні розв'язки, час, що при цьому витрачається, був значно (у 3–22 рази) більшим, ніж у випадку використання інших алгоритмів (рис. 4). Як для алгоритму 2 методу фіксованої пам'яті, так і для алгоритму 3 розкладення у ряди, зменшення часу, витраченого на отримання розв'язку, супроводжувалось зменшенням точності. Загалом, порівнюючи з алгоритмом 1, алгоритмом 2 було отримане прискорення в 4–5 разів із втратою точності у 7–11%, тоді як для обчислювальної схеми розкладення у ряди було досягнуто 7–9-кратного прискорення з втратою точності у 8–30%.

Таким чином, алгоритм 3 має найнижчий порядок складності серед розглянутих обчислювальних схем, проте прискорення його GPU реалізації є нижчим, ніж у випадку інших розглянутих алгоритмів.

У зв'язку з цим, були побудовані та досліджені оптимізовані схеми GPU реалізації алгоритму 3, зокрема, алгоритм, що використовує локальну пам'ять GPU, векторні типи даних різного розміру, тензорні операції. Результати обчислювальних експериментів демонструють, що прискорення векторизованих алгоритмів у порівнянні з неекторизованими зростає зі збільшенням обсягу обчислень. Обчислювальні експерименти також показали, що похибки заокруглення при використанні типів даних різного розміру несуттєво впливають на точність розв'язання тестової задачі з точним розв'язком. За цього, однак, спостерігається лінійне падіння точності починаючи з певного кроку за часом, пов'язане з переповненням значень типу даних.

У випадку моделей, що містять  $\psi$ -похідні Капуто за просторовими змінними, запропонована методика, заснована на представленні інтегралів у вигляді рядів дозволяє зменшити обчислювальну складність виконання операцій множення

матриць на вектори при розв'язанні ітераційними методами СЛАР, що виникають при скінченно-різницевій дискретизації відповідних початково-крайових задач. У п. 6.3 наведено результати теоретичного та експериментального аналізу точності та обчислювальної складності такого алгоритму.

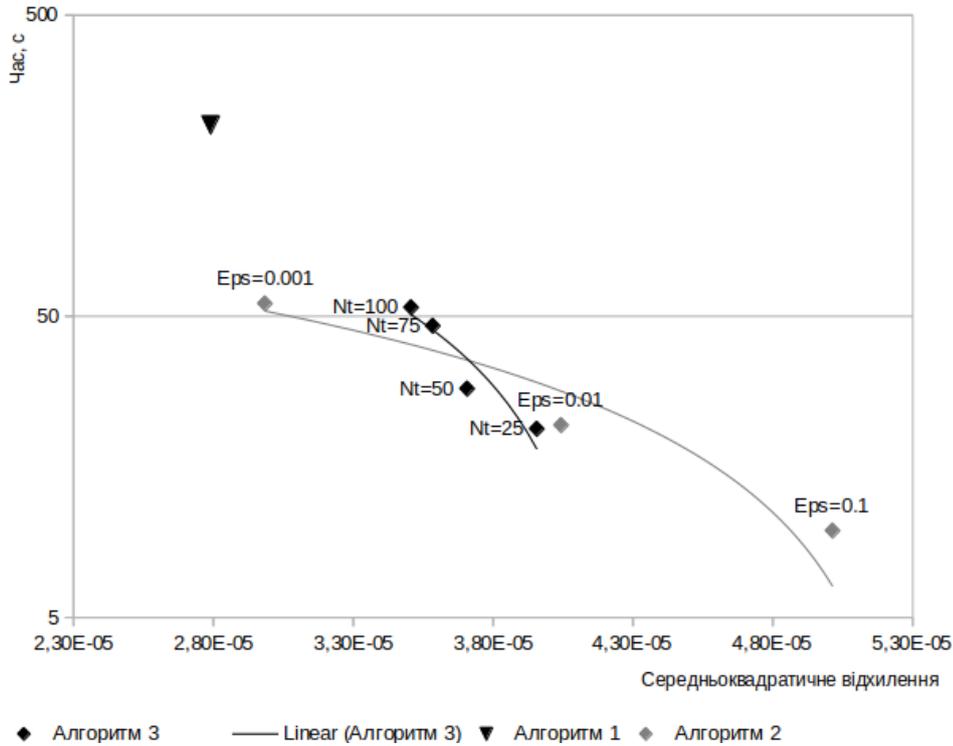


Рисунок 4 – Розподіл похибки розв'язання та загального часу, витраченого на проведення обчислень, для  $g(t) = t^{1/2}$

Розглядається одновимірне дробово-диференціальне за просторовою змінною рівняння фільтрації, яке може бути представлене у вигляді

$$\frac{\partial}{\partial t} H(x,t) = D_{x,g}^{(\alpha)} \left( k(H) \frac{\partial}{\partial x} H(x,t) \right) - S(x,t), \quad (19)$$

де  $H(x,t)$  – напір,  $k(H)$  – коефіцієнт фільтрації,  $S(x,t)$  – функція джерел,  $D_{x,g}^{(\alpha)}$  – ліва  $\psi$ -похідна Капуто за просторовою змінною.

Для рівняння (19) сформулюємо наступні початкові та крайові умови:

$$H(0,t) = H_1(t), \left. \frac{\partial H(x,t)}{\partial x} \right|_{x=L} = H_2(t), H(x,0) = H_0(x).$$

Введемо до розгляду неоднорідну скінченно-різницеву сітку

$$\omega = \left\{ (x_i, t_j) : i = \overline{0, m}, j = \overline{0, 1, 2, \dots} \right\}, h_i = x_{i+1} - x_i, \tau_j = t_{j+1} - t_j.$$

Дискретизуючи (19) отримуємо лінеаризовану різницеву схему, яка записується в стандартних позначеннях у вигляді

$$H_i = \Delta_x^{(\beta)} (kH_x) - S.$$

Обчислюючи значення коефіцієнта  $k(H)$  для  $H = H^{(j-1)}$ , де  $H^{(j-1)}$  – розв’язок задачі на  $j-1$ -му кроці за часом, член  $D_{x,g}^{(\beta)}\left(k\frac{\partial H}{\partial x}\right)$  на  $j$ -му кроці за часом може бути дискретизований використовуючи апроксимації (16) як

$$\begin{aligned} D_{x,g}^{(\beta)}\left(k\frac{\partial H}{\partial x}\right) &\approx \Delta_x^{(\beta)}\left(k\frac{\partial H^{(j)}}{\partial x}\right) \approx \Delta_x^{(\beta)}\left(k_i\frac{H_i^{(j)} - H_{i-1}^{(j)}}{h_{i-1}}\right) = \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \sum_{s=0}^i b_s^{(i)} \left( \frac{k_s}{h_s^2} H_{s+1}^{(j)} - \left( \frac{k_s}{h_s^2} + \frac{k_{s-1}}{h_s h_{s-1}} \right) H_s^{(j)} + \frac{k_{s-1}}{h_s h_{s-1}} H_{s-1}^{(j)} \right), \end{aligned} \quad (20)$$

або

$$\begin{aligned} D_{x,g}^{(\beta)}\left(k\frac{\partial H}{\partial x}\right) &\approx \Delta_x^{(\beta)}\left(k\frac{\partial H^{(j)}}{\partial x}\right) \approx \\ &\approx \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \left( b_i^{(i)} \left( \frac{k_i}{h_i^2} H_{i+1}^{(j)} - \left( \frac{k_i}{h_i^2} + \frac{k_{i-1}}{h_i h_{i-1}} \right) H_i^{(j)} + \frac{k_{i-1}}{h_i h_{i-1}} H_{i-1}^{(j)} \right) + \right. \\ &\left. + \sum_{s=0}^{i-1} b_s^{(i)} \left( \frac{k_s}{h_s^2} H_{s+1}^{(j-1)} - \left( \frac{k_s}{h_s^2} + \frac{k_{s-1}}{h_s h_{s-1}} \right) H_s^{(j-1)} + \frac{k_{s-1}}{h_s h_{s-1}} H_{s-1}^{(j-1)} \right) \right). \end{aligned} \quad (21)$$

Представляючи  $\Delta_x^{(\alpha)}(kH_x)$  у вигляді (21) отримуємо наступну тридіагональну СЛАР

$$\begin{aligned} H_0^j &= H_1(t_j), \\ A_i^{(j)} H_{i-1}^{(j)} - R_i^{(j)} H_i^{(j)} + B_i^{(j)} H_{i+1}^{(j)} &= \Omega_i^{(j)}, \quad (i = \overline{1, m-1}; j = 0, 1, 2, \dots), \\ -H_{m-1}^j + H_m^j &= H_2(t_j) * h_{m-1}, \end{aligned} \quad (22)$$

де

$$A_i^{(j)} = \frac{b_i^{(i)}}{\Gamma(1-\beta)} \frac{k_{i-1}}{h_i h_{i-1}}, B_i^{(j)} = \frac{b_i^{(i)}}{\Gamma(1-\beta)} \frac{k_i}{h_i^2}, R_i^{(j)} = \frac{b_i^{(i)}}{\Gamma(1-\beta)} \left( \frac{k_{i-1}}{h_i h_{i-1}} + \frac{k_i}{h_i^2} \right) + \frac{1}{\tau},$$

$$\Omega_i^{(j)} = \Omega_i^{(1)(j)} - \Omega_i^{(2)(j)}, \Omega_i^{(1)(j)} = -\frac{H_i^{(j-1)}}{\tau} - S_i,$$

$$\Omega_i^{(2)(j)} = -\frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \sum_{s=0}^{i-1} b_s^{(i)} \left( \frac{k_s}{h_s^2} H_{s+1}^{(j-1)} - \left( \frac{k_s}{h_s^2} + \frac{k_{s-1}}{h_s h_{s-1}} \right) H_s^{(j-1)} + \frac{k_{s-1}}{h_s h_{s-1}} H_{s-1}^{(j-1)} \right).$$

Зауважимо, що СЛАР (22) може бути ефективно розв’язана методом прогонки. При використанні дискретизації (20), отримується нижньотрикутна СЛАР

$$AH = \Omega^{(1)} - \Omega^{(3)}, A = M^{(1)} + TM^{(2)}, \quad (23)$$

$$H_m^{(j)} - H_{m-1}^{(j)} = h_m H_2(t), H_0^{(j)} = H_1(t),$$

$$M^{(1)} = \begin{pmatrix} -R_1 & B_1 & 0 & \dots & 0 \\ A_2 & -R_2 & B_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & A_{m-2} & -R_{m-2} & B_{m-2} \\ 0 & \dots & 0 & A_{m-1} & -R_{m-1} \end{pmatrix},$$

$$M^{(2)} = \begin{pmatrix} -\left(\frac{k_1}{h_1^2} + \frac{k_0}{h_1 h_0}\right) & \frac{k_1}{h_1^2} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{k_2}{h_2 h_1} & -\left(\frac{k_2}{h_2^2} + \frac{k_1}{h_2 h_1}\right) & \frac{k_2}{h_2^2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \frac{k_{m-2}}{h_{m-1} h_{m-2}} & -\left(\frac{k_{m-1}}{h_{m-1}^2} + \frac{k_{m-2}}{h_{m-1} h_{m-2}}\right) \end{pmatrix},$$

$$T = \begin{pmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ b_1^{(2)} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_1^{(m-2)} & \dots & b_{m-3}^{(m-2)} & 0 & 0 \\ b_1^{(m-1)} & \dots & \dots & b_{m-2}^{(m-1)} & 0 \end{pmatrix}, \Omega^{(3)} = \begin{pmatrix} -\frac{k_1}{h_2 h_1} H_0^{(j)} \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ -\frac{k_{m-1}}{h_{m-1}^2} H_m^{(j)} \end{pmatrix}.$$

Варто зазначити, що матриця  $T$  у випадку рівномірної сітки та  $g(x) = x$  є матрицею Теплиця.

При однакових значеннях кроків сітки, розв'язання задачі на основі СЛАР (22) є значно швидшим, ніж використання СЛАР (23), проте розв'язки є менш точними.

При чисельному розв'язанні початково-крайових задач щодо рівняння (19) обчислювати значення інтегралів  $b_s^{(i)}$  пропонується згідно зі схемою розкладення у ряди, аналогічною описаній у п. 6.1. Оскільки збіжність ряду (18) погіршується, коли  $t_{s+1} \rightarrow t_j$ , пропонується наближено обчислювати значення інтегралів  $b_s^{(i)}$ ,  $i - s \leq K_d$  використовуючи ряд (17), тоді як в інших випадках використовувати ряд (18). Значення інтегралів  $b_s^{(i)}$ ,  $i - s \leq K_d$  обчислюються на етапі ініціалізації, а множення матриці  $T$  на вектор  $v$  може бути виконане наступним чином:

$$(Tv)_i \approx \sum_{m=i-K_d}^{i-1} b_m^{(i)} + \sum_{n=0}^{\max_{j=1, \dots, i-1} K'_j} \left( (-1)^n \binom{-\alpha}{n} g(x_i)^{-\alpha-n} \bar{S}_{n,i} \right),$$

$$\bar{S}_{n,i} = \bar{S}_{n,i-1} + \begin{cases} v_{i-1} S_n(x_{i-1}, x_i), & n \leq K'_{i-1} \\ 0, & n > K'_{i-1} \end{cases}, \bar{S}_{n,1} = 0, \quad (24)$$

де  $K'_j$  – кількість членів у ряді (18), необхідних для наближення значень  $b_j^{(i)}, i = j + K_d, \dots, m$  із заданою точністю, а  $S_n(x_{i-1}, x_i)$  визначається згідно з (18).

Пропонується знаходити оптимальне значення  $K_d$  ітеративно збільшуючи його від початкового значення  $K_d = 1$  доти, доки  $K_d + \max_{j=1, \dots, m-1} K'_j$  не перестане зменшуватися.

Щодо значення  $K_d + \max_{j=1, \dots, m-1} K'_j$  справедлива наступна теорема.

**Теорема 6.1.** Наближене значення  $\bar{T}$  верхньої межі обчислювальної складності  $T = K_d + \max_{j=1, \dots, m-1} K'_j$  процедури розрахунку значення  $(Tv)_i$  за припущень

- 1)  $x_i = ih, g(x) = x^\beta, f'(z) = \frac{1}{\beta} x^{\beta-1}$ ,
- 2)  $|f'(z)| \leq F, z \in [g(x_j), g(x_{j+1})], F = \max(f'(g(x_j)), f'(g(x_{j+1})))$ ,
- 3)  $m \gg 1$ ,
- 4) максимальне значення  $\max_{j=1, \dots, m-1} K'_j$  досягається при  $i = m, j = m - K_d$ ,

має вигляд

$$\bar{T} = \sqrt{\frac{m(2-\alpha)}{2\beta}} \ln \left( \frac{\beta}{2m(2-\alpha)} e^{2 \frac{\ln \varepsilon - K_1}{\alpha-2} + 1} \right) - 1,$$

де  $K_1 = \left( \frac{1}{2} - \alpha \right) \ln \alpha - \frac{1}{2} \ln(2\pi) + \ln F + \beta(1-\alpha) \ln(ih)$ .

Щодо наближення матриці  $T$  існує наступна оцінка її точності.

**Теорема 6.2.** Позначаючи як  $\tilde{T}$  наближення матриці  $T$ , отримане згідно з апроксимацією інтегралів  $b_s^{(i)}$  рядом (18), обмеженим згідно з умовою  $I_n \geq \varepsilon$ , де  $I_n$  – член ряду (18), маємо наступну оцінку  $R_T(\varepsilon)$  точності наближення матриці  $T$  матрицею  $\tilde{T}$ :

$$R_T(\varepsilon) = \max_{i,j} (T_{ij} - \tilde{T}_{ij})^2 \leq \left( R_{m-\bar{K}_{d0}}^{(m)}(n_1(m, m - \bar{K}_{d0}), \varepsilon) \right)^2,$$

де  $n_1(j, i) = \frac{\alpha-2}{K_2} W \left( \frac{K_2}{\alpha-2} e^{\frac{\ln \varepsilon - K_1}{\alpha-2}} \right) - 1, \quad R_s^{(i)}(n, \varepsilon) = \frac{\varepsilon n^{1-\alpha} (n+1)^\alpha}{(1-\alpha)} \frac{g(x_{s+1})}{g(x_i)},$

$K_2 = \beta(\ln(j+1) - \ln i)$ ,  $W$  – функція Ламберта.

Розглядаються наступні схеми виконання операції множення матриці  $A$  на вектори:

- 1) Значення всіх елементів матриці  $A$  обчислюються на етапі ініціалізації;
- 2) У випадку однорідної сітки та  $g(x) = x$ , значення елементів тридіагональних матриць  $M^{(1)}, M^{(2)}$  та вектор  $T_v = (b_1^{(2)}, \dots, b_1^{(m-2)})$ , що представляє

елементи, у цьому випадку, матриці Теплиця  $T$ , обчислюються на етапі ініціалізації. Операція множення виконується як  $Av = M^{(1)}v + TM^{(2)}v$ ;

3) У випадку однорідної сітки і  $g(x) = x$ , значення елементів тридіагональних матриць  $M^{(1)}$ ,  $M^{(2)}$  і вектор  $T_v = (b_1^{(2)}, \dots, b_1^{(m-2)}, 0, 0, \dots, 0)$  обчислюються на етапі ініціалізації. Множення виконується як  $Av = M^{(1)}v + TM^{(2)}v$ , при чому множення матриць Теплиця на вектори виконується відомим алгоритмом з порядком складності  $O(m \ln m)$ ;

4) Значення елементів тридіагональних матриць  $M^{(1)}$ ,  $M^{(2)}$  обчислюються на етапі ініціалізації. Множення виконується згідно з (24).

Показано, що найшвидшим алгоритмом множення матриці на вектори при розв'язанні задачі згідно зі схемою (23) на однорідній сітці для  $g(x) = x$  є алгоритм, який базується на використанні швидкого множення матриць Теплиця. Залежність часу, витраченого на обчислення на одному кроці за часом, від номера кроку  $m$  відповідала теоретичними оцінками: була квадратичною для алгоритмів 1 і 2, логарифмічною – для алгоритму 3. Час виконання алгоритму 1 був близьким до часу виконання алгоритму 2. Час, витрачений на обчислення на одній ітерації для алгоритмів 1–3, не залежав від  $\alpha$ .

У випадках, коли алгоритми 2 і 3 не можуть бути застосовані, запропонований алгоритм 4 дозволяв прискорити процес розв'язання у порівнянні з базовим алгоритмом 1 (рис. 5).

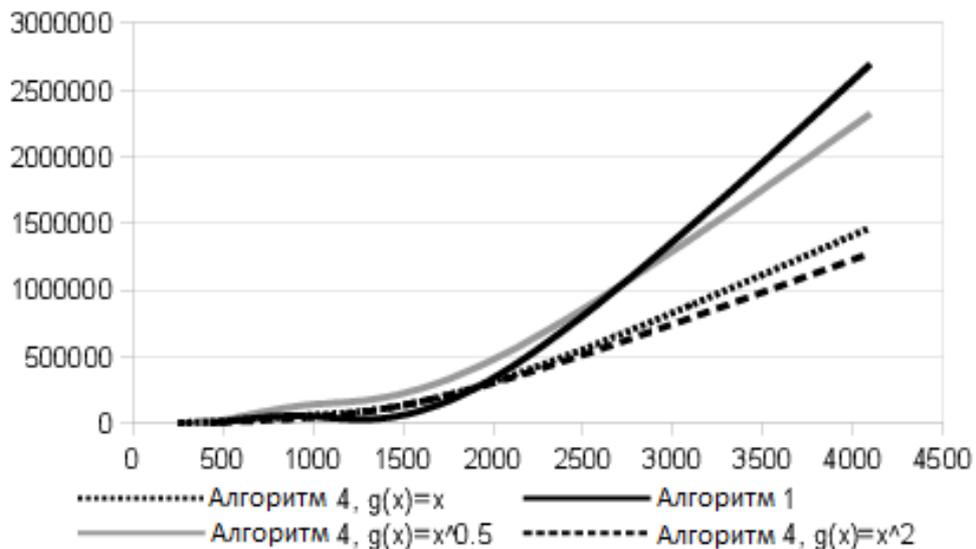


Рисунок 5 – Загальний час виконання, мс, для різних форм  $g(x)$  і  $\beta = 0,7$

У п. 6.4 аналізується баланс точності та швидкодії скінченно-різницевих схем для тривимірного рівняння дифузії з  $\psi$ -похідними Капуто як за часом, так і за просторовими змінними, зокрема, при застосуванні схем оптимізації обчислень, описаних у п. 6.1, 6.3.

Для рівняння

$$D_{t,g}^{(\alpha)} C = D_{x,g}^{(\beta)} \left( d \frac{\partial C}{\partial x} \right) + D_{y,g}^{(\beta)} \left( d \frac{\partial C}{\partial y} \right) + D_{z,g}^{(\beta)} \left( d \frac{\partial C}{\partial z} \right) - S,$$

аналогічно п.6.3, розглядаються неявна скіченно-різницева схема (схема 1), та чотири схеми розщеплення.

Будемо представляти похідну  $D_{t,g}^{(\alpha)}$  за часом у вигляді

$$D_{t,g}^{(\alpha)} C \Big|_{x=x_k, y=y_l, z=z_m, t=t_j} \approx \Delta_t^{(\alpha)} C \Big|_{x=x_k, y=y_l, z=z_m, t=t_j} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{s=0}^{j-1} \bar{\gamma}_s^{(j)} \frac{C_{klm}^{(s+1)} - C_{klm}^{(s)}}{\tau},$$

$$\bar{\gamma}_s^{(j)} = \int_{t_s}^{t_{s+1}} (g(t_j) - g(\tau))^{-\alpha} d\tau.$$

У випадку, коли член  $A_x C = D_x^{(\beta)} \left( d \frac{\partial C}{\partial x} \right)$  та, аналогічно, члени

$D_y^{(\beta)} \left( d \frac{\partial C}{\partial y} \right)$ ,  $D_z^{(\beta)} \left( d \frac{\partial C}{\partial z} \right)$  на  $j$ -го кроці за часом дискретизується на основі (20) як

$$A_x C \Big|_{x=x_k, y=y_l, z=z_m, t=t_j} \approx \tilde{L}_x C \Big|_{x=x_k, y=y_l, z=z_m, t=t_j} =$$

$$= \frac{1}{h_1^2 \Gamma(1-\beta)} \sum_{s=0}^{k-1} b_s^{(k)} \left( d_{slm}^{(j)} C_{s+1,l,m}^{(j)} - (d_{slm}^{(j)} + d_{s-1,l,m}^{(j)}) C_{slm}^{(j)} + d_{s-1,l,m}^{(j)} C_{s-1,l,m}^{(j)} \right),$$

на інтервалі  $t \in [t_j, t_{j+1}]$  отримуємо наступну апроксимацію вихідного рівняння:

$$k_1 \frac{\partial C}{\partial t} = (A_x + A_y + A_z) C - S_1 + O(\tau), \quad k_1 = \frac{\bar{\gamma}_j^{(j+1)}}{\Gamma(1-\alpha)}, \quad (25)$$

$$S_1 = S + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{t_j} \frac{\partial C}{\partial t} (g(t_{j+1}) - g(\tau))^{-\alpha} d\tau.$$

Тоді перша з розглядуваних схем розщеплення (схема 2a) приймає на інтервалі  $t \in [t_j, t_{j+1}]$  вигляд

$$\left( E - \frac{\tau}{k_1} \tilde{L}_x \right) C_{1/3} = C^{(j)} + \frac{\tau}{3k_1} S_2,$$

$$\left( E - \frac{\tau}{k_1} \tilde{L}_y \right) C_{2/3} = C_{1/3} + \frac{\tau}{3k_1} S_2,$$

$$\left( E - \frac{\tau}{k_1} \tilde{L}_z \right) C_1 = C_{2/3} + \frac{\tau}{3k_1} S_2,$$

$$S_2 = S + \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{s=0}^{j-2} \bar{\gamma}_s^{(j)} \frac{C^{(s+1)} - C^{(s)}}{\tau}.$$
(26)

де  $C^{1/3}$ ,  $C^{2/3}$  – розв'язки задачі на проміжних кроках.

**Теорема 6.3.** За умови, що виконуються нерівності  $|A_y A_x C| < M$ ,  $|A_z A_x C| < M$ ,  $|A_z A_y C| < M$ ,  $|A_z A_y A_x C| < M$ ,  $|A_y S_1| < M$ ,  $|A_z S_1| < M$ ,  $|A_z A_y S_1| < M$ , де  $M$  – константа, для похибки апроксимації рівняння (25) системою (26) справедлива оцінка  $\varepsilon_1 \leq O(\tau^{\min(2\alpha, 2-\alpha)} + h_1^2 + h_2^2 + h_3^2)$ .

Друга схема (схема 2б) отримується у подібному вигляді використовуючи апроксимацію, аналогічну (21).

Використовуючи методику розщеплення на диференціальному рівні отримується система

$$\begin{aligned} \left( E - \frac{\tau}{k_1} A_x \right) C_{1/3} &= C^{(j)} + \frac{\tau}{k_1} S_1, \\ \left( E - \frac{\tau}{k_1} A_y \right) C_{2/3} &= C_{1/3}, \\ \left( E - \frac{\tau}{k_1} A_z \right) C_1 &= C_{2/3}. \end{aligned}$$

Звідки використовуючи апроксимацію, аналогічну (20), отримуємо схему 3а, а використовуючи апроксимацію, аналогічну (21) – схему 3б.

Для всіх схем розглядаються процедури оптимізації розрахунків у випадку похідних як за часовою, так і за просторовими змінними, описані у п. 6.2, 6.3.

Визначено, що неявна схема є очікувано найточнішою (до 10 разів у проведених обчислювальних експериментах), проте також і найповільнішою (до 4 разів). Швидші схеми розщеплення мають обмеження щодо своєї ефективності в контексті точності розв'язання: проведені обчислювальні експерименти показують, що їх слід використовувати лише  $\alpha > 0,5; \beta > 0,5$ . Схеми розщеплення на рівні дискретної задачі у порівнянні з схемами розщеплення на диференціальному рівні є більш точними, проте на  $\sim 20\%$  повільнішими.

Порівняння використання методу фіксованої пам'яті та алгоритму, базованого на представлення інтегралів у вигляді ряду, для пришвидшення обчислень показує, що при апроксимації похідної за часом, при однаковій швидкодії менша втрата точності досягається при використанні алгоритму представлення інтегралів у вигляді ряду. Подібний алгоритм для дробових похідних за просторовими змінними ефективний лише для сіток великого розміру.

Виходячи з вищенаведеного, пропонується алгоритм автоматичного вибору оптимальної обчислювальної схеми в процесі розрахунків, який базується на припущенні, що  $L^2$ -норма розв'язку несуттєво змінюється в процесі моделювання. Розроблений алгоритм у випадку тестової задачі дозволив отримати 6-кратне прискорення розрахунків у порівнянні з неявною скінченно-різницевою схемою при до 10% втраті точності.

У п. 6.5 для випадку тривимірної моделі аномальної дифузії з  $\psi$ -похідними Капуто за просторовими змінними побудовані та досліджені паралельні алгоритми для систем з розподіленою пам'яттю.

Використовуючи розпаралелення за даними, аналогічно описаному у п.5.4, досліджується ефективність одновимірного блокового та червоно-чорного розподілу даних. Результати обчислювальних експериментів показали, що найбільш ефективною з точки зору швидкодії є локально-одновимірна схема розщеплення з одновимірним блоковим розподілом даних. Така схема має високу швидкість і масштабованість, які, однак, супроводжуються  $\sim 20$ -кратною втратою точності у порівнянні з неявною схемою. Паралельна реалізація неявної схеми в експериментах із залученням до 48 процесорних ядер була більш ефективною при використанні червоно-чорного розподілу даних. Проте, при збільшенні кількості залучених обчислювальних ресурсів, теоретичні оцінки показують, що масштабованість алгоритму з блоковим розподілом вища.

Використання підходу розкладення у ряди з подальшим розділенням змінних було застосовано у п. 6.6 для обчислення значень функції Міттаг-Лефлера, що дозволило побудувати ефективний алгоритм обчислення значень похідної Атангана–Балеану.

Похідна Атангана–Балеану від неперервно диференційованої функції  $f$  порядку  $\alpha$  має вигляд

$${}^{ABC}D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{1-\alpha} \int_0^t f'(z) E_\alpha \left( -\frac{\alpha}{1-\alpha} (t-z)^\alpha \right) dz, 0 < \alpha < 1, t > 0, \quad (27)$$

де  $E_\alpha(z)$  – функція Міттаг-Лефлера.

Наближаючи  $f'(z)$  у (27) з першим порядком точності, для  $t_j = j\tau$  ( $\tau$  – довжина кроку за часом,  $j > 0$  – номер кроку) отримуємо наступне скінченно-різницеve представлення:

$${}^{ABC}D_t^\alpha f(t) \Big|_{t=t_j} \approx {}^{ABC}\Delta_t^\alpha f(t) \Big|_{t=t_j} = \frac{1}{1-\alpha} \sum_{s=0}^{j-1} \frac{f(t_{s+1}) - f(t_s)}{\tau} I_{sj}, \quad (28)$$

$$I_{sj} = \int_{t_s}^{t_{s+1}} E_\alpha \left( -\frac{\alpha}{1-\alpha} (t_j - z)^\alpha \right) dz. \quad (29)$$

Для  $I_{sj}$  при  $|z| \leq 1$  отримуємо представлення

$$I_{sj} = \sum_{l=0}^{\infty} \left( t_{s+1}^{l+1} - t_s^{l+1} \right) \sum_{k=0}^{\infty} \left( (-1)^{l+k} \left( \frac{\alpha}{1-\alpha} \right)^k \frac{1}{\Gamma(\alpha k + 1)(l+1)} \binom{\alpha k}{l} t_j^{\alpha k - l} \right). \quad (30)$$

У випадку  $|z| > 1$  використовується представлення функції Міттаг-Лефлера у вигляді інтегралу [doi: [10.1515/ijnsns-2018-0358](https://doi.org/10.1515/ijnsns-2018-0358) ]

$$E_\alpha(z) = -\frac{1}{\pi\alpha} \int_0^\infty \frac{z \sin(\pi\alpha)}{u^2 - 2uz \cos(\pi\alpha) + z^2} e^{-u^{1/\alpha}} du. \quad (31)$$

Виконуючи в (31) заміну змінних  $u = v(t_j - z)^\alpha$  отримуємо

$$I_{sj} = \frac{1}{\pi\alpha} \int_0^\infty f(v, \alpha, s, j) dv,$$

$$f(v, \alpha, s, j) = \frac{p \sin(\pi\alpha)}{v^2 - 2vp \cos(\pi\alpha) + p^2} v^{-1/\alpha} e^{-v^{1/\alpha} t_j} \left( e^{v^{1/\alpha} t_s} - e^{v^{1/\alpha} t_{s+1}} \right), \quad (32)$$

$$p = -\frac{\alpha}{1-\alpha}.$$

Для обчислення  $I_{sj}$  використовуючи (32), обмежимо верхню межу інтегрування точкою  $C$ :  $f(C, \alpha, s, j) < \varepsilon_1$  і застосуємо до інтеграла квадратурну формулу з вагами  $w_l$  і вузлами  $v_l, l=1, \dots, N$  отримуючи

$$I_{sj} = \sum_{l=0}^N \left( \left( e^{v_l^{1/\alpha} t_s} - e^{v_l^{1/\alpha} t_{s+1}} \right) \frac{w_l}{\pi\alpha} \frac{p \sin(\pi\alpha)}{v_l^2 - 2v_l p \cos(\pi\alpha) + p^2} v_l^{-1/\alpha} e^{-v_l^{1/\alpha} t_j} \right). \quad (33)$$

Перепишемо співвідношення (30), (33) у вигляді

$$I_{sj} = \sum_{l=0}^N f_{1l}(t_s, t_{s+1}) f_{2l}(t_j),$$

де для представлення (30)  $f_{1l}^{(1)} = t_{s+1}^{l+1} - t_s^{l+1}, f_{2kl}^{(1)} = \frac{f_{3kl}^{(1)}}{l!},$

$f_{3kl}^{(1)} = (-1)^{l+k} \left( \frac{\alpha}{1-\alpha} \right)^k \frac{(\alpha k)_l}{\Gamma(\alpha k + 1)(l+1)} t_j^{\alpha k - l},$   $(\cdot)_l$  – спадajúчий факторіал, а для

представлення (33) –  $f_1^{(2)}(v) = \frac{p \sin(\pi\alpha)}{v^2 - 2vp \cos(\pi\alpha) + p^2}, f_2^{(2)}(v) = f_{2a}^{(2)}(v) f_{2b}^{(2)}(v),$

$f_{2a}^{(2)}(v) = v^{-1/\alpha} e^{-v^{1/\alpha} t_j}, f_{2b}^{(2)}(v) = e^{v^{1/\alpha} t_s} - e^{v^{1/\alpha} t_{s+1}}.$

Співвідношення (28) таким чином перетворюється на

$${}^{ABC} \Delta_t^\alpha f(t) \Big|_{t=t_j} = \frac{1}{1-\alpha} \sum_{l=0}^N S_{l,j-1} f_{2l}(t_j),$$

де  $S_{l,j-1}$  задається рекурентним співвідношенням

$$S_{l,j-1} = \sum_{s=0}^{j-1} \frac{f(t_{s+1}) - f(t_s)}{\tau} f_{1l}(t_s, t_{s+1}) = S_{l,j-2} + \frac{f(t_j) - f(t_{j-1})}{\tau} f_{1l}(t_{j-1}, t_j), S_{l0} = 0.$$

**Теорема 6.6.** Для часу виконання обчислень на основі усіченого ряду (30) справедлива оцінка

$$T^{(1)}(N) = O(N^2 + kN \ln t_j), k = -1, \alpha > 0.5; k = 1, \alpha \leq 0.5.$$

**Твердження 6.8.** У випадку наближення інтегралу (32) формулою (33) час, необхідний для виконання обчислень згідно з (33), має порядок

$$T^{(2)}(N) = O(N).$$

Таким чином, у порівнянні з традиційними схемами апроксимації, які мають лінійну обчислювальну складність відносно номеру  $j$  кроку за часом, складність

запропонованої схеми залежить лише від  $\ln t_j$ , при  $\left| -\frac{\alpha}{1-\alpha} t_j^\alpha \right| < 1$  і не залежить від  $j$  для вищих значень  $t_j$ .

Отримані оцінки точності апроксимації, при цьому, дозволяють обчислювати кількість членів у частинних сумах відповідних рядів для забезпечення необхідного значення точності.

Результати обчислювальних експериментів підтверджують, що запропонований алгоритм знижує загальну обчислювальну складність процедури моделювання з другого порядку для випадку базового алгоритму до порядку близького до першого. Однак, таке зниження дозволило прискорити обчислення у розглянутому тестовому випадку лише при виконанні обчислень для більше ніж  $\sim 5000$  кроків за часом.

**Сьомий розділ** присвячено побудові алгоритмів розв'язання задачі ідентифікації параметрів дробово-диференціальних моделей вологоперенесення.

Розглядається наступне узагальнене рівняння вологоперенесення у термінах напорів (п. 7.1) що містить  $\psi$ -похідні Капуто за часовою та просторовою змінними:

$$D_{t,g}^{(\beta)} H = C^{-1}(H) \left[ D_{z,g}^{(\alpha)} \left( k(H) \frac{\partial H}{\partial z} \right) - S \right], \quad 0 < z < L, t > 0, 0 < \alpha, \beta \leq 1, \quad (34)$$

де  $C^{-1}(H) = \frac{\partial H}{\partial \theta}$ ,  $\theta$  – об'ємний вміст води,  $\theta(H)$  – основна гідрофізична характеристика ґрунту,  $S$  – функція екстракції води. Значення коефіцієнта  $C^{-1}(H)$  обчислюється з використанням експериментально визначеної основної гідрофізичної характеристики (ОГХ), апроксимованої згідно з моделлю ван Генухтена.

На верхній границі  $z = 0$ , у випадку, коли ґрунт перебуває у вологонасиченому стані та вода накопичується на його поверхні, задається крайова умова першого роду. В інших ситуаціях задається крайова умова другого роду

$$k \frac{\partial H}{\partial z} = Q_e - Q_p - Q_i, \quad (35)$$

де  $Q_e$ ,  $Q_p$ ,  $Q_i$  – потоки, викликані, відповідно, випаровуванням, опадами та зрошенням.

Початкова умова для рівняння (34) має вигляд  $H(z, 0) = H_0(z)$ .

Маючи оцінку значення фактичного випаровування  $ET$ , потік випаровування  $Q_e$  з поверхні ґрунту та транспірації рослин  $T$  (для  $\alpha = \beta = 1$ ) обчислюються як

$$\begin{aligned} Q_e &= (1 - M)ET, \\ T &= M \cdot ET, \\ M &= 1 - e^{-\mu \cdot LAI}, \end{aligned} \quad (36)$$

де  $LAI$  – індекс площі листової поверхні,  $\mu$  – задана константа.

Для моделювання похибки оцінювання евапотранспірації пропонується домножувати її оцінку  $ET$  на постійний множник  $k_L$ . Аналогічно вводиться до розгляду множник  $k_p$  для потоків  $Q_p$ ,  $Q_i$ , викликаних опадами та зрошенням.

Для чисельного розв'язання прямої задачі (34)–(36) розроблена скінченно-різницева схема.

У п. 7.2 розглядається задача знаходження на основі даних інструментальних вимірювань значень параметрів моделі (34)–(36) за яких вона якнайточніше описує дані моніторингу процесу вологоперенесення.

Поставлено наступну обернену задачу:

- припустимо, що є  $N$  відомих значень напору  $H_i$ , виміряного у моменти часу  $T_i$  на глибинах  $Z_i$ ;
- необхідно знайти такий вектор значень параметрів моделі  $\vec{x}$ , що мінімізує цільову функцію згідно з методом найменших квадратів:

$$F(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N (H(Z_i, T_i, \vec{x}) - H_i)^2,$$

де  $H(z, t, \vec{x})$  – чисельний розв'язок прямої задачі зі значеннями параметрів з вектора  $\vec{x}$ , отриманий для глибини  $z$  та моменту часу  $t$ .

Беручи до уваги складність оберненої задачі та те, що параметри, які підлягають ідентифікації, представляються числами з рухомою комою, пропонується алгоритм рою частинок (PSO) для її розв'язання. Похибки у вихідних даних за цього вважаються такими, що мають нормальний розподіл.

У п. 7.3 для випадку, коли конкретний вигляд функціональних параметрів  $\psi$ -похідних Капуто заздалегідь є невідомим, запропоновано алгоритм генетичного програмування для знаходження їх аналітичної форми.

Нехай кожен індивід є парою функцій  $g_t$  і  $g_z$ , які представлені у вигляді дерев з вузлами, що являють собою одну з операцій:  $a + b$ ,  $a * b$ ,  $a^b$ ,  $\log_{b_0+c}(1+a)$ ,  $b_0 > 1$  – задана стала, або константу  $c$ ,  $0 < c < c_{max}$ , де  $c_{max}$  – задане значення, або змінну  $x$ ,  $x > 0$ .

Початкова популяція алгоритму генетичного програмування, що має розмір  $S_p$ , генерується випадковим чином із заданим обмеженням на максимальну глибину дерев  $d_m$ .

На кожній ітерації алгоритму виконуються наступні кроки:

1) Зважений випадковий вибір двох індивідів  $i_1, i_2$  з ваговими коефіцієнтами, що залежать від відповідних значень цільової функції;

2) Кросовер вибраних індивідів. Новий індивід  $i_n$  формується як копія  $i_1$ . Рівномірно випадкові піддерева вибираються в представленнях  $g_t$  у  $i_1$  та  $i_2$  і піддерево, вибране в  $i_2$ , замінює в  $i_n$  піддерево, вибране в  $i_1$ . Те ж саме виконується для  $g_z$ . Обчислюється значення цільової функції для  $i_n$  і якщо воно є меншим за найбільше значення цільової функції серед усіх індивідів популяції,  $i_n$  замінює у ній "найгіршого" індивіда;

3) З заданою ймовірністю  $p_m$  виконується операція мутації. Рівномірно випадковим чином вибрані піддерева всередині рівномірно випадковим чином вибраного індивіда замінюється випадково сформованими піддеревами глибини не

більше  $d_m$ . Якщо кількість вузлів у мутованого індивіда більше, ніж задане значення  $n_{max}$ , операція не проводиться.

У **восьмому розділі** наводяться результати застосування дробово-диференціального моделювання вологоперенесення для розв'язання задач, що виникають у землеробстві при управлінні зрошенням.

Наведені у **п. 8.1** результати проведеного для умов зрошення дощуванням на півдні України моделювання вологоперенесення та аналізу точності за класичним одновимірним рівнянням Річардса та його дробово-диференціальним аналогом з похідними Капуто–Герасимова свідчать, що при визначенні середньої об'ємної вологості кореневмісного шару ґрунту найбільша абсолютна похибка склала 9,5%, а середня – 1,9%. Використання дробово-диференціальної моделі дозволило на 7% знизити похибку опису динаміки напорів, а змодельована сумарна норма зрошення відрізнялася від фактичної не більше ніж на 12%. У розглядуваній ситуації спостереження за процесом у виробничих умовах, коли похибки датчиків можуть мати нелінійний характер та проявляться нерівномірно у часі, а їх причиною може бути порушена структура ґрунту, або затримки у реакції датчика, використання дробово-диференціальної моделі надавало якісно адекватнішу, порівняно з моделлю цілого порядку, картину розподілу та динаміки вологості у процесі зрошення. Застосування дробово-диференціальної моделі вологоперенесення з  $\psi$ -похідними Капуто за часовою та просторовою змінними для опису та прогнозування динаміки вологості ґрунту в складних гідрогеологічних умовах показало її здатність додатково підвищити точність моделювання.

Приймаючи за вихідну гіпотезу твердження, що форма ядра оператора дробової похідної відбиває нелокальні особливості структури ґрунтів, розглядається два варіанти похідної  $\psi$ -похідної Капуто (**п. 8.2**). Перший – це похідна Капуто–Катугампола, яка отримується у випадку  $g_z(z) = z^\chi$ . У другому варіанті як ядро оператора використовуються наступні сигмоподібні та зворотні сигмоподібні функції:

$$g_z(z) = \frac{1}{\sigma_a} \left( \frac{1}{1 + e^{-\chi(2z - \sigma_2)}} - \sigma_b \right), \chi \geq 0,$$

$$g_z(z) = -\frac{1}{2\chi} \ln \left( \frac{\sigma_a z + \sigma_b}{1 - \sigma_a z - \sigma_b} \right) + 1, \chi < 0,$$

$$\sigma_a = \frac{1}{1 + e^{-\chi(2 - \sigma_2)}} - \sigma_b, \sigma_b = \frac{1}{1 + e^{|\chi|\sigma_2}}.$$

Для похідної за часовою змінною розглядається лише випадок  $g_t(t) = t^\chi$ .

Функціональний параметр у степеневій формі (похідна Капуто–Катугампола) має один додатковий числовий параметр і його використання знижувало похибку на ~19%. Використання складнішої сигмоподібної функції з двома додатковими параметрами дозволило отримати зниження середньої абсолютної похибки у 2.6 рази. При цьому, у порівнянні з класичною моделлю, для датчика, розміщеного на глибині 15 см, дробово-диференціальні моделі дозволили отримати в 5–7 разів нижчу похибку моделювання. Тенденції у розподілі похибок залишалися подібними

при прогнозуванні протягом зрошувальних циклів, наступних за цикл, дані зібрані в межах якого використовувались для ідентифікації параметрів моделі.

Підбір аналітичної форми функціонального параметра дробової  $\psi$ -похідної Капуто на основі алгоритму генетичного програмування (п. 8.3) пропонує додаткові можливості для покращення адаптації моделей вологоперенесення до польових умов. Використання запропонованої процедури автоматичного вибору форми функціонального параметра дозволило отримати до 34% зниження похибки моделювання для набору даних, що використовувався для ідентифікації параметрів, і до 15% для тестового набору даних.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі розв'язано науково-технічну проблему створення методів та засобів математичного та комп'ютерного моделювання аномальних гідрогеоміграційних процесів на основі дробово-диференціального підходу шляхом побудови нових математичних моделей, що враховують фактори часової та просторової нелокальності при перебігу складних процесів масотеплоперенесення у геосередовищах, та побудови класу високопродуктивних алгоритмів розв'язання відповідних цим моделям початково-крайових задач, зокрема, паралельних алгоритмів для систем зі спільною та розподіленою пам'яттями, які дозволяють суттєво збільшити швидкість моделювання відповідних процесів.

Отримано наступні нові наукові результати:

1. сформульовано дробово-диференційні математичні моделі з похідними дробового порядку Капуто–Герасимова та  $k$ -похідною Капуто, поставлено початково-крайові задачі, розроблено скінченно-різницеві алгоритми їх розв'язання та чисельно досліджено особливості динаміки процесів конвективної дифузії розчинних речовин при двовимірній усталеній фільтрації на основі цих дифузійних математичних моделей.

2. побудовано дробово-диференційні математичні моделі процесів фільтраційної консолідації насичених сольовими розчинами ґрунтових середовищ, поставлено відповідні цим моделям початково-крайові задачі, розроблено скінченно-різницеві алгоритми їх розв'язання та чисельно досліджено особливості динаміки цих процесів, зокрема для моделі фільтраційної консолідації з урахуванням явища хімічного осмосу, що містить похідні Капуто–Фабріціо;

3. побудовано математичні моделі, виконано постановки початково-крайових задач, розроблено скінченно-різницеві алгоритми їх розв'язання та чисельно досліджено особливості динаміки нелокальних конвективно-дифузійних процесів при врахуванні явищ масообміну між частинками у мобільній та немобільній фазах згідно з різними законами кінетики масообміну як у одновимірному, так і у двовимірному наближенні, зокрема, на основі моделей, що містять дробову похідну Капуто–Катугампола;

4. розроблено клас паралельних алгоритмів для систем з розподіленою пам'яттю щодо локально-одновимірних схем розщеплення при їх застосовуванні до дробово-диференціальних рівнянь, які містять похідну Капуто–Герасимова за часовою змінною, з використанням одновимірного та червоно-чорного блокового розподілу даних;

5. розроблено клас паралельних алгоритмів для графічних процесорів у випадку моделей перенесення з похідними Капуто–Герасимова та  $\psi$ -похідною Капуто як за часовою, так і за просторовими змінними, зокрема таких, що використовують можливості низькорівневої оптимізації;

6. розроблено обчислювальні процедури апроксимації похідних Капуто–Герасимова, Атангана–Балеану та  $\psi$ -похідної Капуто на основі розкладення у ряди ядер інтегральних операторів та методики розділення змінних, використання яких при моделюванні геоміграційних процесів дозволяє знизити обчислювальну складність на одному кроці за часом з лінійної до логарифмічної чи близької до сталої.

7. на основі обчислювальних процедур апроксимації похідних Капуто–Герасимова та  $\psi$ -похідної Капуто розроблено паралельні алгоритми розв'язання багатовимірних початково-крайових міграційних задач з відповідними похідними за просторовими змінними, що дискретизуються згідно з локально-одновимірними скінченно-різницевиими схемами, на системах з розподіленою пам'яттю. Запропонована схема розподілення даних, що є поєднанням одновимірної та червоно-чорної схем, і дозволяє отримувати вищу за схему з одновимірним розподілом швидкодію при невеликій кількості залучених обчислювальних ресурсів та більшу масштабованість у порівнянні з червоно-чорною схемою.

8. для тривимірного рівняння дифузії з  $\psi$ -похідними Капуто як за часом, так і за просторовими змінними, досліджено точність та швидкодію неявних скінченно-різницевих схем та схем розщеплення при їх застосуванні разом з алгоритмами, направленими на підвищення швидкодії проведення обчислень та розроблено алгоритм автоматичного вибору оптимальної обчислювальної схеми;

9. на основі розроблених методів та алгоритмів, розв'язано ряд задач дробово-диференціального моделювання вологоперенесення у зрошувальному землеробстві згідно з моделями, що містять похідні Капуто–Герасимова та  $\psi$ -похідні Капуто. Запропонована методика їх прикладного застосування, у якій для ідентифікації параметрів методами рою частинок та генетичного програмування використовуються вимірювання вологості ґрунту чи всмоктуючих тисків на початковому етапі вегетації рослин, після чого проводиться прогнозне моделювання на декілька циклів зрошення з повторною ідентифікацією параметрів за необхідності. Це дозволяє виконувати коротко чи середньострокові прогнози водопотреби для використання їх при економічному плануванні, а також визначати найточнішу у конкретних умовах та на конкретній стадії розвитку рослин модель оцінювання евапотранспірації.

## **СПИСОК НАУКОВИХ ПУБЛІКАЦІЙ, ЗАРАХОВАНИХ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ**

1) Bulavatsky VM, Bohaienko VO. Mathematical Modeling of the Fractional Differential Dynamics of the Relaxation Process of Convective Diffusion Under Conditions of Planned Filtration. *Cybernetics and Systems Analysis* 2015; 51:886–895. doi: [10.1007/s10559-015-9781-2](https://doi.org/10.1007/s10559-015-9781-2) [Scopus, Web of Science, zbMATH]

2) Bulavatsky VM, Bohaienko VO. Mathematical Modeling of the Dynamics of Nonequilibrium in Time Convection–Diffusion Processes in Domains with Free

Boundaries. Cybernetics and Systems Analysis 2016; 52:427–440. doi: [10.1007/s10559-016-9843-0](https://doi.org/10.1007/s10559-016-9843-0) [Scopus, Web of Science, zbMATH, MathSciNet]

3) Bohaienko VO, Bulavatsky VM, Kryvonos IuH. On Mathematical modeling of Fractional-Differential Dynamics of Flushing Process for Saline Soils with Parallel Algorithms. Journal of Automation and Information Sciences 2016; 10:1-12. doi: [10.1615/JautomatInfScien.v48.i10.10](https://doi.org/10.1615/JautomatInfScien.v48.i10.10) [Scopus]

4) Булавацкий ВМ, Богаенко ВА. Численное моделирование дробно-дифференциальной динамики процесса фильтрационно-конвективной диффузии на основе параллельных алгоритмов для кластерных систем. Доповіді НАНУ 2017; 1: 21-28. doi: [10.15407/dopovidi2017.01.021](https://doi.org/10.15407/dopovidi2017.01.021) [zbMATH, MathSciNet]

5) Bohaienko VO, Bulavatsky VM, Kryvonos IuH. Mathematical Modeling of Fractional-Differential Dynamics of Process of Filtration-Convective Diffusion of Soluble Substances in Nonisothermal Conditions. Journal of Automation and Information Sciences 2017; 49(4):12-25. doi: [10.1615/JautomatInfScien.v49.i4.20](https://doi.org/10.1615/JautomatInfScien.v49.i4.20) [Scopus, MathSciNet]

6) Bulavatsky VM, Bohaienko VO. Numerical Simulation of Fractional-Differential Filtration-Consolidation Dynamics Within the Framework of Models with Non-Singular Kernel. Cybernetics and Systems Analysis 2018; 54:193–204. doi: [10.1007/s10559-018-0020-5](https://doi.org/10.1007/s10559-018-0020-5) [Scopus, Web of Science, zbMATH, MathSciNet]

7) Булавацкий ВМ, Богаенко ВА. Компьютерное моделирование дробно-дифференциальной динамики некоторых фильтрационно-консолидационных процессов. Доповіді НАНУ 2018; 4:16-24. doi: [10.15407/dopovidi2018.04.016](https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.04.016) [MathSciNet]

8) Bohaienko VO. Parallel Algorithms for Modelling Two-Dimensional Non-Equilibrium Salt Transfer Processes on the Base of Fractional Derivative Model. Fractional calculus and applied analysis 2018; 21(3):654–671. doi: [10.1515/fca-2018-0035](https://doi.org/10.1515/fca-2018-0035) [Scopus, Web of Science, zbMATH, MathSciNet]

9) Bohaienko VO, Bulavatsky VM. Mathematical Modeling of Solutes Migration Under the Conditions of Groundwater Filtration by the Model with the k-Caputo Fractional Derivative. Fractal Fract. 2018; 2(4):28. doi: [10.3390/fractalfract2040028](https://doi.org/10.3390/fractalfract2040028) [Scopus, Web of Science]

10) Bohaienko VO. Numerical schemes for modelling time-fractional dynamics of non-isothermal diffusion in soils. Mathematics and Computers in Simulation 2019; 157: 100–114. doi: [10.1016/j.matcom.2018.09.025](https://doi.org/10.1016/j.matcom.2018.09.025) [Scopus, Web of Science, DBLP, zbMATH, MathSciNet]

11) Булавацкий ВМ, Богаенко ВА. Компьютерное моделирование динамики процесса миграции растворимых веществ при фильтрации грунтовых вод со свободной поверхностью на основе дробно-дифференциального подхода. Доповіді НАНУ 2018; 12:21-29. doi: [10.15407/dopovidi2018.12.021](https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.12.021) [zbMATH, MathSciNet]

12) Bohaienko VO. A fast finite-difference algorithm for solving space-fractional filtration equation with a generalised Caputo derivative. Computational and Applied Mathematics 2019; 38:105. doi: [10.1007/s40314-019-0878-5](https://doi.org/10.1007/s40314-019-0878-5) [Scopus, Web of Science, DBLP, zbMATH, MathSciNet]

13) Богаенко ВА, Булавацкий ВМ. Компьютерное моделирование на основе нелокальной модели динамики конвективной диффузии растворимых веществ в

подземном фильтрационном потоке в условиях массообмена. Международный научно-технический журнал "Проблемы управления и информатики" 2019; 3:41-53.

14) Bohaienko VO, Bulavatsky VM. Simplified Mathematical Model for the Description of Anomalous Migration of Soluble Substances in Vertical Filtration Flow. *Fractal Fract.* 2020; 4: 20. doi: [10.3390/fractalfract4020020](https://doi.org/10.3390/fractalfract4020020) [Scopus, Web of Science]

15) Bulavatsky VM, Bohaienko VO. Some boundary-value problems of fractional-differential mobile-immobile migration dynamics in a profile filtration flow. *Cybernetics and Systems Analysis* 2020; 56(3): 410–425. doi: [10.1007/s10559-020-00257-2](https://doi.org/10.1007/s10559-020-00257-2) [Scopus, Web of Science, zbMATH, MathSciNet]

16) Bohaienko VO. Parallel finite-difference algorithms for three-dimensional space-fractional diffusion equation with  $\psi$ -Caputo derivatives. *Computational and Applied Mathematics* 2020; 39:163. doi: [10.1007/s40314-020-01191-x](https://doi.org/10.1007/s40314-020-01191-x) [Scopus, Web of Science, DBLP, zbMATH, MathSciNet]

17) Bohaienko VO, Gladky AV, Romashchenko MI, Matiash TV. A Identification of fractional water transport model with  $\psi$ -Caputo derivatives using particle swarm optimization algorithm. *Applied Mathematics and Computation* 2021; 390:125665. doi: [10.1016/j.amc.2020.125665](https://doi.org/10.1016/j.amc.2020.125665) [Scopus, Web of Science, DBLP, zbMATH, MathSciNet]

18) Bohaienko VO. Accuracy and speed of splitting methods for three-dimensional space-time fractional diffusion equation with  $\psi$ -Caputo derivatives. *Mathematics and Computers in Simulation* 2021; 188: 226-240. doi: [10.1016/j.matcom.2021.04.004](https://doi.org/10.1016/j.matcom.2021.04.004) [Scopus, Web of Science, DBLP, zbMATH, MathSciNet]

19) Bohaienko VO. On the recurrent computation of fractional operator with Mittag-Leffler kernel. *Applied Numerical Mathematics* 2021; 162: 137-149. doi: [10.1016/j.apnum.2020.12.016](https://doi.org/10.1016/j.apnum.2020.12.016) [Scopus, Web of Science, zbMATH, MathSciNet]

20) Bohaienko VO. Selection of  $\psi$ -Caputo derivative functional parameter in generalized water transport equation by genetic programming technique. *Results in Control and Optimization* 2021; 5: 100068. doi: [10.1016/j.rico.2021.100068](https://doi.org/10.1016/j.rico.2021.100068) [Scopus, Web of Science]

21) Bohaienko VO, Bulavatsky VM. Fractional-fractal modeling of filtration-consolidation processes in saline saturated soils. *Fractal and Fractional* 2020; 4(4): 59. doi: [10.3390/fractalfract4040059](https://doi.org/10.3390/fractalfract4040059) [Scopus, Web of Science]

22) Bohaienko V, Gladky A. Modelling fractional-order moisture transport in irrigation using artificial neural networks. *SeMA* 2023. doi: [10.1007/s40324-023-00322-8](https://doi.org/10.1007/s40324-023-00322-8) [Scopus]

23) Богаєнко ВО, Булавацький ВМ, Хіміч ОМ. Математичне та комп'ютерне моделювання в задачах гідрогеоміграційної динаміки. Київ: Наукова Думка, 2022.

24) Bohaienko VO. Numerical Integration Schemes for Finite Difference Solution of Time-Fractional Diffusion Equation with Generalized Caputo Derivative. "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання"; матеріали статей Міжнародної науково-практичної конференції, м. Івано-Франківськ, 14-19 травня 2018 року. Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2018, с.250-253.

25) Bohaienko VO, Bulavatsky VM, Gladky AV. GPU algorithms for solving time-fractional diffusion equation with generalised Caputo derivative with respect to a function. Fifth International Conference "High Performance Computing" HPC-UA 2018 (Ukraine, Kyiv, October 22-23, 2018), 2018, p.12-17.

26) Bohaienko VO. Efficient computation schemes for generalized two-dimensional time-fractional diffusion equation. "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання"; матеріали статей Міжнародної науково-практичної конференції, м. Івано-Франківськ, 20-25 травня 2019 року. Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2019, с.238-241.

27) Bohaienko VO. Performance of vectorized GPU-algorithm for computing  $\psi$ -Caputo derivative values. Hu Z., Petoukhov S., Dychka I., He M. (eds) Advances in Computer Science for Engineering and Education III. ICCSEEA 2020. Advances in Intelligent Systems and Computing, vol 1247. Cham: Springer, 2020, p. 266-275 doi: [10.1007/978-3-030-55506-1\\_24](https://doi.org/10.1007/978-3-030-55506-1_24) [Scopus]

28) Bohaienko VO. Computing  $\psi$ -Caputo Fractional Derivative Values Using CUDA 10. Proceedings of the 9th International Conference "Information Control Systems & Technologies" Odessa, Ukraine, September 24–26, 2020. CEUR Workshop proceedings, vol. 2711, 2020, p. 49. [Scopus, DBLP]

29) Bohaienko VO, Gladky AV. On the selection of fractional-differential model of convective diffusion with mass exchange. Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of International Scientific and Practical Conference 2020; 4:7-10. doi: [10.31713/MCIT.2020.02](https://doi.org/10.31713/MCIT.2020.02)

## АНОТАЦІЯ

**Богаєнко В. О. Математичне та комп'ютерне моделювання гідрогеоміграційних процесів з неklasичною динамікою на основі високопродуктивних обчислювальних алгоритмів.** – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.05.02 "Математичне моделювання та обчислювальні методи". Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України, Київ, 2024.

Робота присвячена розвитку засобів та підвищенню обчислювальної ефективності математичного моделювання гідрогеоміграційних процесів на основі дробово-диференціального підходу. Побудовані нові моделі нелокальних процесів конвективної дифузії та фільтраційної консолідації. Побудовано клас алгоритмів розв'язання початково-крайових задач для систем зі спільною та розподіленою пам'яттями. Запропоновані процедури наближення дробових похідних на основі розкладення у ряди та методики розділення змінних та серія паралельних алгоритмів на їх основі. Запропоновані алгоритми розв'язання задач ідентифікації параметрів дробово-диференціальних рівнянь вологоперенесення. Проведене моделювання вологоперенесення при зрошенні дощуванням в складних гідрогеологічних умовах підтверджує здатність розробленого апарату підвищувати точність моделювання.

**Ключові слова:** математичне моделювання, комп'ютерне моделювання, гідрогеоміграційні процеси, неklasична динаміка, дробово-диференціальні математичні моделі, високопродуктивні обчислення, паралельні алгоритми

## ABSTRACT

**Bohaienko V. O. Mathematical and computer modeling of hydrogeomigration processes with non-classical dynamics based on high-performance computational algorithms.** – Manuscript.

The dissertation for obtaining the scientific degree of Doctor of Physical and Mathematical Sciences by specialty 01.05.02 "Mathematical modeling and computational methods". VM Glushkov Institute of Cybernetics of NAS of Ukraine, Kyiv, 2024.

The work is devoted to the development of tools and to the increase of computational efficiency of mathematical modeling of hydrogeomigration processes based on the fractional-differential approach. Novel models of non-local processes of convective diffusion and filtration-consolidation were built. We built a class of algorithms for solving initial-boundary value problems for shared and distributed memory systems. Fractional derivatives approximation procedures grounded on the expansion into series and variable separation techniques are proposed along with a series of parallel algorithms on their base. We propose parameters identification algorithms for the fractional-differential water transport equations. Conducted water transport simulations under sprinkler irrigation in complex hydrogeological conditions affirm the ability of the developed tools to increase the accuracy of simulation.

**Keywords:** mathematical modeling, computer modeling, hydrogeomigration processes, non-classical dynamics, fractional-differential models, high-performance computing, parallel algorithms