

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ВО ВРЕМЕНИ КОНВЕКТИВНО-ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ОБЛАСТЯХ СО СВОБОДНЫМИ ГРАНИЦАМИ

Аннотация. Построена математическая модель, описывающая дробно-дифференциальную динамику локально-неравновесного во времени конвективно-диффузионного процесса растворимых веществ при плоско-вертикальной установившейся фильтрации со свободной границей. Приведена постановка соответствующей краевой задачи и изложена методика получения ее приближенного решения. Разработаны параллельные алгоритмы расчета для кластерных систем, приведены результаты тестирования быстродействия параллельных алгоритмов для графических процессоров и результаты численных экспериментов по моделированию динамики рассматриваемого миграционного процесса.

Ключевые слова: неклассические диффузионные модели, неравновесный во времени конвективно-диффузионный процесс, плоско-вертикальная фильтрация в пористой среде, уравнение диффузии с запаздыванием, уравнение диффузии дробного порядка, краевые задачи, приближенные решения, параллельные алгоритмы.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время весьма актуальны вопросы разработки методов математического моделирования конвективно-диффузионной динамики растворимых веществ при фильтрации из источников загрязнений грунтовых вод (в частности, в аспекте охраны окружающей среды [1–7]), а также проблема повышения степени адекватности существующих количественных моделей диффузионных процессов при фильтрации в геопористых средах. Особенно это касается геопористых сред и систем со сложной пространственно-временной структурой, для которых характерны эффекты памяти, пространственной нелокальности и самоорганизации. В этих условиях использование для моделирования динамики неравновесных конвективно-диффузионных процессов классических математических моделей не всегда является корректным, и прогресс в данном случае достигается, в частности, с помощью подхода, базирующегося на применении формализма дробного интегро-дифференцирования. Примеры такого подхода изложены, например, в [6], где выполнено математическое моделирование дробно-дифференциальной динамики локально-неравновесного во времени процесса конвективной диффузии растворимых веществ при установившейся двухмерной плановой напорной фильтрации из хранилища сточных вод к водозабору (реке), и в [7], где описано моделирование указанного неравновесного диффузионного процесса при плоско-вертикальной установившейся фильтрации из рек, каналов или поверхностных накопителей промышленных стоков.

В настоящей работе изучаются две новые математические модели предназначенные для исследования неравновесной динамики процесса конвективной диффузии растворимых веществ при плоско-вертикальной установившейся фильтрации в области со свободной границей. Рассматривается локально-неравновесный во времени конвективно-диффузионный процесс в пористой среде со сложной пространственно-временной структурой, для которой не выполняется классический закон диффузии Фика.

МОДЕЛЬ С «ЧИСТЫМ» ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

Рассмотрим локально-неравновесный во времени процесс конвективной диффузии растворимых веществ в водонасыщенной пористой среде со сложной пространственно-временной структурой, для которой характерно существенное влияние эффектов памяти. Обобщение классического закона диффузии Фика для данного случая запишем в виде [8]

$$\bar{q}(x, y, t + \tau_q) = -d\nabla C + \bar{v}C, \quad (1)$$

где \bar{q} — конвективно-диффузионный поток, C — концентрация растворимых веществ в жидкой фазе, \bar{v} — вектор скорости фильтрации, d — коэффициент конвективной диффузии (гидродинамической дисперсии), ∇ — оператор Гамильтона, τ_q — параметр релаксации потока, x, y, t — геометрические и временная переменные соответственно.

Из соотношения (1), уравнения материального баланса и уравнения неразрывности потока [1] получаем уравнение конвективной диффузии в виде

$$\sigma \frac{\partial C(x, y, t + \tau_q)}{\partial t} = d\Delta C(x, y, t) - \bar{v} \cdot \nabla C(x, y, t), \quad (2)$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ — оператор Лапласа, σ — пористость среды.

Далее будем рассматривать простейшую фильтрационную схему [9], соответствующую плоско-вертикальной установившейся фильтрации со свободной поверхностью из каналов (или удлинённых поверхностных накопителей промышленных стоков). В этом случае для соответствующей фильтрационной задачи известна характеристическая функция течения $z = f(\omega)$, где $\omega = \varphi + i\psi$ — комплексный потенциал течения (φ — потенциал скорости течения, ψ — функция тока).

Переходя ввиду сложности конфигурации области течения к новым независимым переменным (φ, ψ) — точкам геометрически более простой области G_ω комплексного потенциала течения (являющейся в данном случае горизонтальной полуполосой [9]), получаем из (2) модельное уравнение вида

$$\sigma \frac{\partial C(\varphi, \psi, t + \tau_q)}{\partial t} = v^2(\varphi, \psi) \left(d\Delta C(\varphi, \psi, t) - \frac{\partial C(\varphi, \psi, t)}{\partial \varphi} \right),$$

где $v^2 = v_x^2 + v_y^2$, $\bar{v} = (v_x, v_y) = \nabla \varphi$.

В целях изучения в рамках рассматриваемой математической модели динамики неравновесного во времени конвективно-диффузионного процесса сформулируем для области комплексного потенциала течения G_ω соответствующую краевую задачу вида

$$\sigma \frac{\partial C(\varphi, \psi, t)}{\partial t} = v^2(\varphi, \psi) \left(d\Delta C(\varphi, \psi, t - \tau_q) - \frac{\partial C(\varphi, \psi, t - \tau_q)}{\partial \varphi} \right), \quad (3)$$

$$C(0, \psi, t) = C_1, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial \psi} \right|_{\psi=0, \psi=Q} = 0, \quad (4)$$

$$C(\varphi, \psi, t) = C_0(\varphi, \psi, t) \quad (-\tau_q \leq t \leq 0, \quad 0 \leq \varphi, \quad 0 \leq \psi \leq Q), \quad (5)$$

где C_1 — заданная концентрация растворимых веществ на входе фильтрационного потока, $C_0(x, y, t)$ — функция начального распределения концентрации, $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < +\infty, 0 < \psi < Q\}$, Q — фильтрационный расход [9].

Введем в рассмотрение новые переменные и параметры соотношениями

$$\begin{aligned} \varphi' &= \frac{\varphi}{Q}, \quad \psi' = \frac{\psi}{Q}, \quad C' = \frac{C}{C_1}, \quad C'_0 = \frac{C_0}{C_1}, \quad v' = \frac{v}{v_0}, \\ t' &= \frac{v_0^2}{Q} t, \quad d' = \frac{d}{Q}, \quad \tau'_q = \frac{v_0^2}{Q} \tau_q, \end{aligned} \quad (6)$$

где v_0 — характерный скоростной параметр.

Переходя в (3)–(5) к новым переменным согласно соотношениям (6) и опуская в дальнейшем в целях упрощения записи знак «штрих», получаем в области $G_\omega \times (0, +\infty)$ (здесь $G_\omega = \{(\varphi, \psi): 0 < \varphi < +\infty, 0 < \psi < 1\}$) краевую задачу

$$\sigma \frac{\partial C(\varphi, \psi, t)}{\partial t} = v^2(\varphi, \psi) \left(d \Delta C(\varphi, \psi, t - \tau_q) - \frac{\partial C(\varphi, \psi, t - \tau_q)}{\partial \varphi} \right), \quad (7)$$

$$C(0, \psi, t) = 1, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial \psi} \right|_{\psi=0, \psi=1} = 0, \quad (8)$$

$$C(\varphi, \psi, t) = C_0(\varphi, \psi, t) \quad (-\tau_q \leq t \leq 0, \quad 0 \leq \varphi, \quad 0 \leq \psi \leq 1). \quad (9)$$

(Отметим, что явное выражение для скорости $v^2(\varphi, \psi)$ применительно к рассматриваемой фильтрационной схеме приведено в [7]).

Исключая из (7)–(9) конвективную составляющую подстановкой

$$C(\varphi, \psi, t) = u(\varphi, \psi, t) \exp\left(\frac{\varphi}{2d}\right),$$

получаем краевую задачу

$$\sigma \frac{\partial u(\varphi, \psi, t)}{\partial t} = v^2(\varphi, \psi) (\Delta u(\varphi, \psi, t - \tau_q) - \mu^2 u(\varphi, \psi, t - \tau_q)), \quad (10)$$

$$u(0, \psi, t) = 1, \quad \left. \frac{\partial u(\varphi, 0, t)}{\partial \psi} \right|_{\psi=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial u(\varphi, 1, t)}{\partial \psi} \right|_{\psi=1} = 0, \quad (11)$$

$$u(\varphi, \psi, t) = u_0(\varphi, \psi, t) \quad (-\tau_q \leq t \leq 0, \quad 0 \leq \varphi, \quad 0 \leq \psi \leq 1), \quad (12)$$

где обозначено

$$u_0(\varphi, \psi, t) = C_0(\varphi, \psi, t) \exp(-\mu\varphi), \quad \mu = \frac{1}{2}d, \quad v^2(\varphi, \psi) = v^2(\varphi, \psi)d.$$

Переходя в задаче (10)–(12) к однородным граничным условиям, получаем задачу

$$\sigma \frac{\partial w(\varphi, \psi, t)}{\partial t} = v^2(\varphi, \psi) (\Delta w(\varphi, \psi, t - \tau_q) - \mu^2 w(\varphi, \psi, t - \tau_q)) + f(\varphi, \psi), \quad (13)$$

$$w(0, \psi, t) = 0, \quad \left. \frac{\partial w(\varphi, 0, t)}{\partial \psi} \right|_{\psi=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial w(\varphi, 1, t)}{\partial \psi} \right|_{\psi=1} = 0, \quad (14)$$

$$w(\varphi, \psi, t) = w^{(0)}(\varphi, \psi, t) \quad (-\tau_q \leq t \leq 0, \quad 0 \leq \varphi, \quad 0 \leq \psi \leq 1), \quad (15)$$

где $w(\varphi, \psi, t) = u(\varphi, \psi, t) - 1$, $w^{(0)}(\varphi, \psi, t) = u_0(\varphi, \psi, t) - 1$, $f(\varphi, \psi) = -\mu^2 v^2(\varphi, \psi)$.

В случае осреднения скорости фильтрации по области комплексного потенциала течения таким образом, что $v^2(\varphi, \psi)d = v_{\text{cp}}^2 = \text{const}$, имеем (в предположении $\sigma, d = \text{const}$) вместо (13) уравнение с постоянными коэффициентами

$$\sigma \frac{\partial w(\varphi, \psi, t)}{\partial t} = v_{\text{cp}}^2 (\Delta w(\varphi, \psi, t - \tau_q) - \mu^2 w(\varphi, \psi, t - \tau_q)) + f(\varphi, \psi). \quad (16)$$

Отметим, что нетрудно получить замкнутое решение краевой задачи (16), (14), (15) на основе алгоритма, краткое изложение основных этапов которого приведено далее.

Применяя к задаче (16), (14), (15) интегральные преобразования Фурье по переменным φ, ψ вида

$$\hat{w}_n(\xi, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^1 w(\varphi, \psi, t) \sin(\xi\varphi) \cos(\lambda_n\psi) d\varphi d\psi, \quad \lambda_n = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

получаем задачу Коши

$$\frac{\partial \hat{w}_n(\xi, t)}{\partial t} = -b_n(\xi) \hat{w}_n(\xi, t - \tau_q) + \frac{1}{\sigma} \hat{f}_n(\xi), \quad (17)$$

$$\hat{w}_n(\xi, t) = \hat{\rho}_n(\xi, t) \quad (-\tau_q \leq t \leq 0), \quad (18)$$

где обозначено

$$b_n(\xi) = \frac{v_{\text{ср}}^2}{\sigma} (\xi^2 + \mu^2 + \lambda_n^2), \quad \hat{f}_n(\xi) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^1 f(\varphi, \psi) \sin(\xi\varphi) \cos(\lambda_n\psi) d\varphi d\psi,$$

$$\hat{\rho}_n(\xi, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \int_0^1 w^{(0)}(\varphi, \psi, t) \sin(\xi\varphi) \cos(\lambda_n\psi) d\varphi d\psi.$$

Решение задачи (17), (18) согласно [10, 11] запишется в виде

$$\begin{aligned} \hat{w}_n(\xi, t) = & \hat{\rho}_n(\xi, -\tau_q) \exp_{\tau_q} \{-b_n(\xi)t\} + \int_{-\tau_q}^0 \exp_{\tau_q} \{-b_n(\xi)(t - \tau_q - s)\} \frac{d\hat{\rho}_n(\xi, s)}{ds} ds + \\ & + \sigma^{-1} \hat{f}_n(\xi) \int_0^t \exp_{\tau_q} \{-b_n(\xi)(t - \tau_q - s)\} ds \end{aligned} \quad (19)$$

(здесь $\exp_{\tau_q} \{-b_n(\xi)t\}$ — функция запаздывающего потенциала [11]).

Переходя в последнем соотношении в область оригиналов по геометрическим переменным φ, ψ , получаем решение рассматриваемой задачи (16), (14), (15) в виде

$$w(\varphi, \psi, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \chi_n \cos(\lambda_n\psi) \int_0^\infty \hat{w}_n(\xi, t) \sin(\xi\varphi) d\xi,$$

где подынтегральная функция $\hat{w}_n(\xi, t)$ задается соотношением (19) и введено

$$\text{обозначение } \chi_n = \begin{cases} 1, & n = 0, \\ 2, & n \geq 1. \end{cases}$$

Отметим, что, как показано в [10, 11], для линейного уравнения диффузии с «чистым» запаздыванием вида (16) начальные условия краевой задачи полностью определяют динамику процесса, т.е. для такого уравнения, вообще говоря, корректной является не краевая задача, а задача Коши. Это обуславливает необходимость разработки новых моделей неравновесных процессов типа «конвекция–диффузия», для которых постановки соответствующих краевых задач корректны. Одна из таких моделей, рассмотренная далее, предназначена для исследования дробно-дифференциальной динамики неравновесных во времени конвективно-диффузионных процессов.

**ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ
ЛОКАЛЬНО-НЕРАВНОВЕСНОГО ВО ВРЕМЕНИ КОНВЕКТИВНО-ДИФФУЗИОННОГО
ПРОЦЕССА И ПОСТАНОВКА КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ**

Разложим функцию диффузионного потока в левой части соотношения (1) в ряд Тейлора по степеням параметра релаксации. Ограничиваясь двумя первыми членами указанного разложения, получаем уравнение релаксационного закона Фика в виде

$$\vec{q} + \tau_q \frac{\partial \vec{q}}{\partial t} = -d\nabla C + \vec{v}C. \quad (20)$$

Предполагая, что обобщенное уравнение материального баланса [12]

$$\sigma D_t^{(\alpha)} C + \operatorname{div} \vec{q} = 0 \quad (21)$$

выполнено, где σ — пористость среды, $D_t^{(\alpha)}$ — оператор дробного дифференцирования Капуто–Герасимова по переменной t порядка α ($0 < \alpha < 1$) [13–15], из соотношения (20) с учетом уравнения (21) получаем определяющее уравнение модели в виде

$$\sigma(D_t^{(\alpha)} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)})C(x, y, t) = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C \quad (0 < \alpha < 1). \quad (22)$$

Отсюда при $\alpha \rightarrow 1$ имеем уравнение

$$\sigma \left(\frac{\partial}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) C = d\Delta C - \vec{v} \cdot \nabla C. \quad (23)$$

Некоторые краевые задачи конвективной диффузии растворимых веществ при фильтрации в пористых средах, поставленные согласно модели типа Каттанео [16], определяемой уравнением (23), рассмотрены, например, в [3, 17].

В рамках неклассической математической модели конвективной диффузии, базирующейся на уравнении (22), задача моделирования дробно-дифференциальной динамики неравновесного во времени конвективно-диффузионного процесса в случае плоско-вертикальной установившейся фильтрации со свободной поверхностью из рек или каналов (согласно фильтрационной схеме, приведенной в [9, с. 155]) сводится к решению в области $G_z \times (0, +\infty)$ (G_z — область течения) уравнения (22) при следующих краевых условиях:

$$C|_{\gamma} = C_1, \quad \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{\gamma_i} = 0, \quad C(x, y, 0) = C_0(x, y), \quad C'_t(x, y, 0) = 0, \quad (24)$$

где C_1 — заданная концентрация растворимых веществ на входе фильтрационного потока с границей γ , γ_i ($i=1, 2$) — границы области фильтрации, являющиеся линиями тока, $C_0(x, y)$ — функция начального распределения концентрации, n — внешняя нормаль к соответствующей кривой.

Поскольку решение собственно фильтрационной задачи известно (т.е. известна [9] характеристическая функция течения $z = f(\omega)$), переходя в задаче (22), (24) к новым переменным (φ, ψ) — точкам геометрически более простой области комплексного потенциала течения $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < +\infty, 0 < \psi < Q\}$, имеем

$$\sigma(D_t^{(\alpha)} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)})C(\varphi, \psi, t) = v^2(\varphi, \psi) \left(d\Delta C(\varphi, \psi, t) - \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right), \quad (25)$$

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

$$C(0, \psi, t) = C_1, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial \psi} \right|_{\psi=0, \psi=Q} = 0, \quad (26)$$

$$C(\varphi, \psi, 0) = C_0(\varphi, \psi), \quad C'_t(\varphi, \psi, 0) = 0, \quad (27)$$

где Q — фильтрационный расход, v — скорость фильтрации [7, 9].

Введя в рассмотрение новые переменные и параметры соотношениями

$$\begin{aligned} \varphi' = \frac{\varphi}{Q}, \quad \psi' = \frac{\psi}{Q}, \quad t' = \left(\frac{v_0^2}{Q} \right)^{1/\alpha} t, \quad C' = \frac{C}{C_1}, \quad C'_0 = \frac{C_0}{C_1}, \\ v' = \frac{v}{v_0}, \quad d' = \frac{d}{Q}, \quad \tau'_q = \left(\frac{v_0^2}{Q} \right)^{1/\alpha} \tau_q \end{aligned} \quad (28)$$

и опуская в дальнейшем знак «штрих», получаем на основе (25)–(27) в области $G_\omega \times (0, +\infty)$ краевую задачу

$$\sigma(D_t^{(\alpha)} + \tau_q D_t^{(\alpha+1)})C(\varphi, \psi, t) = v^2(\varphi, \psi) \left(d\Delta C - \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right) \quad (0 < \alpha < 1), \quad (29)$$

$$C(0, \psi, t) = 1, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial \psi} \right|_{\psi=0, \psi=1} = 0, \quad (30)$$

$$C(\varphi, \psi, 0) = C_0(\varphi, \psi), \quad C'_t(\varphi, \psi, 0) = 0, \quad (31)$$

где $G_\omega = \{(\varphi, \psi) : 0 < \varphi < +\infty, 0 < \psi < 1\}$ — горизонтальная полуполоса.

Далее кратко излагается конечно-разностная методика получения решения краевой задачи (29)–(31).

КОНЕЧНО-РАЗНОСТНАЯ МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ

Введем в рассмотрение сеточную область

$$\begin{aligned} \omega_{h\tau} = \{(\varphi_i, \psi_k, t_j) : \varphi_i = ih_1 \ (i = \overline{0, m+1}), \ \psi_k = h_2(k - 0.5) \ (k = \overline{0, n+1}), \\ t_j = j\tau \ (j = \overline{0, N})\}, \end{aligned}$$

где $h_1 = \frac{2\varphi_0}{2m+1}$, $h_2 = \frac{\tilde{q}}{n}$ — шаги сетки по геометрическим переменным φ и ψ соответственно, τ — шаг сетки по временной переменной, $\varphi_0 = \text{const}$.

Ограничив область комплексного потенциала течения справа некоторой прямой $\varphi = \varphi_0$ ($\varphi_0 \gg 1$) и задав на ней дополнительное граничное условие (например, однородное условие Неймана), поставим в соответствие рассматриваемой краевой задаче следующий аналог локально-одномерной [18] разностной схемы А.А. Самарского:

$$\frac{\sigma}{2}(\Delta_t^{(\alpha)}\bar{C} + \tau_q \Delta_t^{(\alpha+1)}\bar{C}) = v^2(d\bar{C}_{\overline{\varphi\varphi}} - \bar{C}_0), \quad (32)$$

$$\frac{\sigma}{2}(\Delta_t^{(\alpha)}\hat{C} + \tau_q \Delta_t^{(\alpha+1)}\hat{C}) = v^2 d\hat{C}_{\overline{\psi\psi}}. \quad (33)$$

Здесь $\hat{C} = C^{j+1}$, $\bar{C} = C^{j+1/2}$, $C = C^j$, $t_{j+1/2} = t_j + \tau/2$, $\Delta_t^{(\alpha)}$ и $\Delta_t^{(\alpha+1)}$ — разностные аналоги операторов дробного дифференцирования $D_t^{(\alpha)}$ и $D_t^{(\alpha+1)}$ соответственно. При этом дискретная аппроксимация $D_t^{(\alpha)}$ определяется, напри-

мер, аналогично [19], а для $\Delta_i^{(\alpha+1)}$ имеют место соотношения

$$\Delta_i^{(\alpha+1)} \hat{C} = \frac{4}{\tau^2 \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=0}^j b_s^{(j)} (C^{s+1} - 2C^{s+1/2} + C^s), \quad (34)$$

$$\Delta_i^{(\alpha+1)} \bar{C} = \frac{4}{\tau^2 \Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=0}^j b_s^{(j)} (C^{s+1/2} - 2C^s + C^{s-1/2}), \quad (35)$$

$$b_s^{(j)} = \tau^{1-\alpha} [(j-s+1)^{1-\alpha} - (j-s)^{1-\alpha}] \quad (j=0, \bar{N}). \quad (36)$$

Расписывая в соотношениях (32), (33) разностные операторы с учетом (34)–(36) и приводя подобные члены, получаем на полуцелом и целом временных слоях системы уравнений

$$A_{ik} C_{i+1,k}^{j+1/2} - B_{ik} C_{ik}^{j+1/2} + S_{ik} C_{i-1,k}^{j+1/2} = \Phi_{ik}^j \quad (i=\bar{1}, \bar{m}; k=\bar{1}, \bar{n}; j=0, \bar{N}), \quad (37)$$

$$P_{ik} C_{i,k+1}^{j+1} - Q_{ik} C_{ik}^{j+1} + P_{ik} C_{i,k-1}^{j+1} = \Omega_{ik}^j \quad (i=\bar{1}, \bar{m}; k=\bar{1}, \bar{n}; j=0, \bar{N}), \quad (38)$$

где обозначено

$$A_{ik} = \frac{v_{ik}^2}{h_1} \left(\frac{d}{h_1} - 0.5 \right), \quad S_{ik} = \frac{v_{ik}^2}{h_1} \left(\frac{d}{h_1} + 0.5 \right),$$

$$B_{ik} = \frac{\sigma}{\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)} \left(\frac{1}{2^{1-\alpha}} + \frac{2\tau_q}{\tau} \right) + A_{ik} + S_{ik},$$

$$P_{ik} = \frac{v_{ik}^2 d}{h_2^2}, \quad Q_{ik} = \frac{\sigma}{\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)} \left(\frac{1}{2^{1-\alpha}} + \frac{2\tau_q}{\tau} \right) + 2P_{ik},$$

$$\begin{aligned} \Phi_{ik}^j = \frac{\sigma}{\tau \Gamma(2-\alpha)} & \left[\frac{1}{2} \sum_{s=0}^{j-1} \gamma_s^{(j)} (C_{ik}^{s+1} - C_{ik}^s) - \left(\frac{\tau}{2} \right)^{1-\alpha} C_{ik}^j + \frac{2\tau_q}{\tau^\alpha} (C_{ik}^{j-1/2} - 2C_{ik}^j) + \right. \\ & \left. + \frac{2\tau_q}{\tau} \sum_{s=0}^{j-1} b_s^{(j)} (C_{ik}^{s+1/2} - 2C_{ik}^s + C_{ik}^{s-1/2}) \right], \quad (39) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \Omega_{ik}^j = \frac{\sigma}{\tau \Gamma(2-\alpha)} & \left\{ \frac{1}{2} \sum_{s=0}^{j-1} b_s^{(j)} (C_{ik}^{s+1} - C_{ik}^s) + \left(\frac{\tau}{2} \right)^{1-\alpha} [(2^{1-\alpha} - 1)(C_{ik}^{j+1/2} - C_{ik}^j) - C_{ik}^{j+1/2}] + \right. \\ & \left. + \frac{2\tau_q}{\tau^\alpha} (C_{ik}^j - 2C_{ik}^{j+1/2}) + \frac{2\tau_q}{\tau} \sum_{s=0}^{j-1} b_s^{(j)} (C_{ik}^{s+1} - 2C_{ik}^{s+1/2} + C_{ik}^s) \right\} \quad (40) \end{aligned}$$

$\left(\sum_{s=0}^{j-1} (\cdot) \equiv 0 \text{ при } j-1 < 0 \right)$.

Разностные уравнения систем (37), (38) являются трехточечными и эффективно решаются методом прогонки [18, 20]. При этом прогоночные соотношения имеют вид

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

а прогоночные коэффициенты вычисляются по формулам

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

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

Для стартовых значений прогоночных коэффициентов получаем

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

Отметим, что устойчивость метода прогонки для систем (37), (38) следует из факта диагонального преобладания в матрицах коэффициентов этих систем алгебраических уравнений [18]. Последующий переход в физическую область G_z осуществляется согласно соотношениям (9), (10) из работы [7].

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РАСЧЕТА ДЛЯ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМ

Локально-одномерную схему расщепления с решением трехдиагональных систем линейных алгебраических уравнений методом прогонки можно распараллелить (алгоритм 1) для кластерных систем с использованием красно-черного внахлест распределения данных по аналогии со схемой, описанной в [4]. При размере (n, m) исходной сетки каждый из N процессов вычисляет значения прогоночных коэффициентов и искомой функции для N блоков ячеек размера $\left(\frac{n}{N}, \frac{m}{N}\right)$. Прямые и обратные шаги прогонок выполняются параллельно за N шагов, после каждого из которых проводится синхронизация данных между процессами.

Время работы алгоритма 1 можно оценить [4] как

$$T_N(n, m) = \frac{nm}{N} t_c + 2(N-1) \left(t_{tr} \left(\frac{n}{N} \right) + t_{tr} \left(\frac{m}{N} \right) \right), \quad (41)$$

где t_c — сумма времени, необходимого для вычисления одной пары прогоночных коэффициентов, и времени вычисления решения в одной точке при обратном ходе прогонки, а $t_{tr}(s)$ — время пересылки блока, состоящего из s единиц обрабатываемых данных, между процессами распределенной программы.

Значения t_c в рассматриваемой схеме линейно зависят от номера шага по времени:

$$t_c = t_{c0} + k_c t. \quad (42)$$

Подставляя (42) в (41), получаем

$$T_N(n, m, t) = \frac{nm}{N} (t_{c0} + k_c t) + 2(N-1) \left(t_{tr} \left(\frac{n}{N} \right) + t_{tr} \left(\frac{m}{N} \right) \right). \quad (43)$$

При увеличении номера шага по времени основную вычислительную сложность создают операции вычисления сумм (39), (40), а на время работы алгоритма значительное влияние оказывают быстрдействие подсистемы памяти и эффективность работы кеша. Повысить последнюю можно путем предварительного (до основного цикла определения значений прогоночных коэффициентов) двухуровневого частичного вычисления указанных сумм (алгоритм 1а). При этом

фрагмент алгоритма, имеющий структуру вида

```
for (i = 0; i < n; i++)
  for (j = 0; j < t; j++)
    s = s + V(i, j),
```

преобразуется в следующий фрагмент:

```
for (k = 0; k < (t / G); k++)
  for (i = 0; i < n; i++)
    for (j = 0; j < G; j++)
      if ((k * G + j) < t)
        s = s + V(i, k * G + j).
```

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ

Алгоритмы вычисления прогоночных коэффициентов и обратного хода прогонок для дополнительного ускорения расчетов можно распараллелить для выполнения графическими процессорами (GPU). Предлагается следующая схема распараллеливания (алгоритм 2):

— каждый поток параллельной программы проводит независимые вычисления в строке/колонке ячеек сетки;

— для дополнительного распараллеливания (алгоритм 2а) при вычислении сумм (39), (40) одну строку/колонку ячеек можно обрабатывать блоком потоков, каждый из которых вычисляет частичную сумму, после чего поток с индексом 0 суммирует полученные результаты и проводит основные вычисления;

— после выполнения вычислений на шаге алгоритма 1 необходимо передать из памяти GPU в память центрального процессора (CPU) данные, которые должны быть переданы другому процессу распределенной программы. Аналогично после получения данных от другого процесса их нужно скопировать в память GPU;

— после завершения вычислений результат необходимо скопировать из памяти GPU в память CPU.

Быстродействие алгоритма 2, как и алгоритма 1, линейно зависит от номера шага по времени и от размера сетки. Коэффициенты этих линейных зависимостей при этом зависят от количества вычислительных ресурсов GPU. В случае, когда последний способен выполнять все запущенные потоки одновременно и $m = n$, получаем

$$T_N^G(n, t) = \frac{n}{N} \left(t_{gc0} + \frac{k_{gc}}{N_t} t \right) + 4(N-1) \left(t_{tr} \left(\frac{n}{N} \right) + t_s \left(\frac{n}{N} \right) \right), \quad (44)$$

где $t_{gc} = t_{gc0} + \frac{k_{gc}}{N_t} t$ — сумма времени, необходимого для вычисления одной

пары прогоночных коэффициентов на GPU; N_t — количество потоков в блоке, проводящем параллельное вычисление сумм (39), (40); $t_s(l)$ — время копирования блока, состоящего из l единиц обрабатываемых данных, из памяти GPU в память CPU и наоборот (будем считать это время одинаковым).

В оценке (44) и в дальнейшем не учитывается время, которое центральный процессор тратит на вспомогательные операции, в частности, на управление GPU.

КОМБИНИРОВАННЫЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

Дополнительное ускорение можно получить, используя для проведения вычислений как графический, так и центральный процессор (алгоритм 3):

— при проведении вертикальных прогонок вычисления в блоке колонок $(1, \dots, n_x)$ выполняются CPU параллельно с вычислениями на GPU в блоке колонок $(n_x + 1, \dots, n)$;

— при проведении горизонтальных прогонок вычисления в блоке строк $(1, \dots, n_y)$ выполняются CPU параллельно с вычислениями на GPU в блоке строк $(n_y + 1, \dots, m)$;

— после проведения вертикальных прогонок выполняется синхронизация значений искомой функции между памятью CPU и GPU: блок ячеек $(n_x + 1, \dots, n) \times (1, \dots, n_y)$ копируется из памяти GPU в память CPU, а блок ячеек $(1, \dots, n_x) \times (n_y + 1, \dots, m)$ — из памяти CPU в память GPU;

— синхронизация в обратном направлении выполняется после проведения горизонтальных прогонок.

Время работы алгоритма 3 в случае решения задачи одним CPU и одним GPU при $m = n$, $n_y = n_x$ и допущении линейной зависимости времени передачи данных между памятью CPU и GPU от их объема ($t_s(l) = k_s l$) можно оценить как

$$T_3(n, n_x, t) = \max \left(n_x^2 (t_{c0} + k_c t), (n - n_x) \left(t_{gc0} + \frac{k_{gc}}{N_t} t \right) \right) + 4k_s n_x (n - n_x). \quad (45)$$

Предлагается два подхода к выбору размера n_x :

— фиксированный выбор (алгоритм 3а), не требующий модификации алгоритма 3 и не учитывающий зависимости $T_3(n, n_x, t)$ от номера шага по времени.

Здесь при $t \leq t_1$, $t_1: n_x^2 (t_{c0} + k_c t_1) = (n - n_x) \left(t_{gc0} + \frac{k_{gc}}{N_t} t_1 \right)$, быстродействие вы-

числительной части алгоритма будет большим по сравнению с выполнением на одном GPU, однако это ускорение можно нивелировать дополнительным временем, тратящимся на синхронизацию данных. При $t > t_1$ фиксированный выбор становится неэффективным, так как основное влияние на быстродействие алгоритма будет иметь CPU;

— динамическое изменение по эвристическому критерию (алгоритм 3б), когда значение t_1 оценивается определением времени выполнения вычислений на каждом шаге. Считая, что $t_1 > t_2$, и выбрав начальное значение n_x , строим линейную зависимость $T_3(n, n_x, t)$ от t . На дальнейших шагах при $t > t_2$ отслеживается точность аппроксимации, полученной зависимостью определенного времени $T_3(n, n_x, t)$. Шаг $t \approx t_1$ тогда, когда точность становится неудовлетворительной. При этом, считая, что быстродействие GPU больше быстродействия CPU, уменьшаем $n_{x1} = k_n n_x$, где $k_n < 1$ — заданная константа.

При изменении размера n_x в процессе вычислений необходимо выполнить дополнительные операции синхронизации: передать из памяти CPU в память GPU все ранее вычисленные значения искомой функции в блоках $(n_{x1} + 1, \dots, n_x) \times (1, \dots, n_x)$ и $(1, \dots, n_{x1}) \times (n_{x1} + 1, \dots, n_x)$ ячеек сетки.

ТЕСТИРОВАНИЕ БЫСТРОДЕЙСТВИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМ

На кластере SKIT-4 Института кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины проведены две серии вычислительных экспериментов с алгоритмами, выполняющимися на CPU (алгоритм 1). В первой серии экспериментов задача (37), (38) решалась на одном CPU при различных размерах сетки (500×500, 750×750, 1000×1000 и 1500×1500). Результаты тестирования подтверждают линейную зависимость времени проведения вычислений на одном шаге от его номера и квадратичную зависимость от размеров сетки.

Во второй серии экспериментов задача с размером сетки 3000×3000 решалась различным количеством процессов. На рис. 1 показаны графики зависимос-

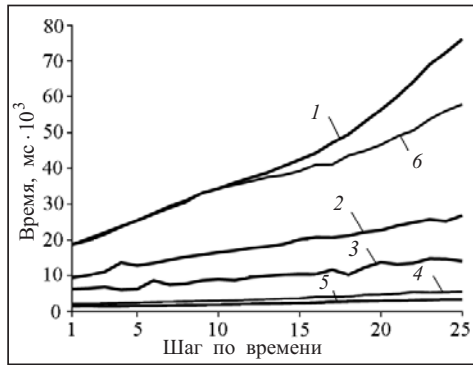


Рис. 1

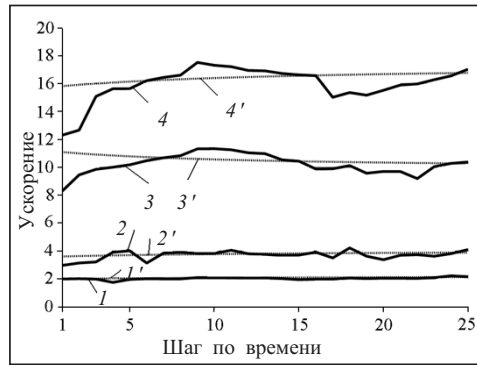


Рис. 2

ти времени работы алгоритма 1 от номера шага по времени (кривая 1 соответствует одному процессу, кривая 2 — двум процессам, кривая 3 — четырем процессам, кривая 4 — восьми процессам и кривая 5 — двенадцати процессам), а также алгоритма 1a (кривая 6 соответствует одному процессу). В этом случае сохраняются зависимости, характерные для первой серии экспериментов, а также наблюдается снижение быстродействия вследствие неэффективного использования кеша алгоритмом 1 (кривая 1) и нивелирование этого негативного эффекта алгоритмом 1a (кривая 6).

На рис. 2 приведено ускорение параллельного алгоритма на шагах по времени для кластерных систем (кривые 1-4) и его оценка (кривые 1'-4') по формуле (43) с различным количеством процессов (кривые 1 и 1' соответствуют двум процессам, кривые 2 и 2' — четырем процессам, кривые 3 и 3' — восьми процессам, а кривые 4 и 4' — двенадцати процессам), где при небольшом количестве использованных вычислительных ресурсов оценка алгоритма 1 достаточно точная, тогда как при их увеличении точность снижается.

ТЕСТИРОВАНИЕ БЫСТРОДЕЙСТВИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ

Аналогично тестированию CPU-алгоритмов проведены две серии вычислительных экспериментов. Данные касательно решения задачи (37), (38) на одном GPU алгоритмом 2a при различных размерах сетки приведены на рис. 3, где кривая 1 соответствует размеру сетки 500×500 , кривая 2 — размеру 750×750 , кривая 3 — размеру 1000×1000 , кривая 4 — размеру 1500×1500 .

В этом случае также имеем линейную зависимость времени проведения вычислений от номера шага, однако ее коэффициенты значительно меньше, чем для CPU-алгоритмов. Зависимость от размеров сетки остается квадратической вследствие невыполнения на реальных вычислительных системах допущений, согласно которым по формуле (44) эта зависимость должна быть линейной.

Вторая серия экспериментов состояла в решении алгоритмом 2a задачи с размером сетки 3000×3000 при использовании различного количества графических процессоров (на рис. 4 кривая 1 соответствует двум GPU, кривая 2 — четырем GPU, кривая 3 — восьми GPU, кривая 4 — двенадцати GPU). Результаты экспериментов показали наличие линейных зависимостей, аналогичных случаю решения задачи одним GPU. Также сравнивалось быстродействие базового алгоритма 2 и модифицированного алгоритма 2a, который на сетках размера от 500×500 до 1500×1500 при получении решения на 25 шагах по времени показал приблизительно на 5% большее быстродействие.

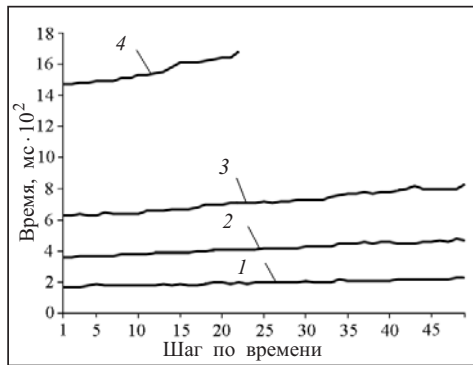


Рис. 3

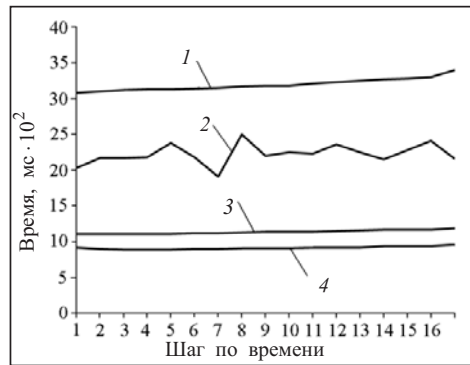


Рис. 4

Точность оценки времени работы параллельного алгоритма для кластеров с графическими процессорами аналогично результатам, полученным для CPU-алгоритма, снижается при увеличении количества используемых GPU.

Отметим существенно большее (до 10-кратного) ускорение GPU-алгоритмов при их меньшей масштабируемости: при использовании 12 GPU по сравнению с 12 CPU-ядрами получено только двукратное ускорение для задачи с сеткой размера 3000×3000.

ТЕСТИРОВАНИЕ БЫСТРОДЕЙСТВИЯ КОМБИНИРОВАННЫХ АЛГОРИТМОВ

Тестирование комбинированных алгоритмов при использовании одного GPU проведено на сетке размера 1500×1500. Фиксированное (или начальное) значение n_x принято равным kn , где k — заданное число, а множитель $k_n = 0.5$ для алгоритма 3б. Полученные результаты подтверждают описанные теоретические ожидания, в частности, существенное ухудшение быстродействия алгоритма 3а в процессе решения при лучшем начальном быстродействии (тестирование при $k = 0.1$) и эффективность динамического изменения параметра k в алгоритме 3б.

Для задачи с размером сетки 1500×1500 на 25 шагах по времени наибольшее ускорение от использования алгоритма 3а (при $k = 0.05$) по сравнению с GPU-алгоритмом 2 составило 4.5%. При дальнейшем проведении вычислений ускорение снижается и алгоритм становится неэффективным. Для алгоритма 3б наилучшее ускорение получено при $k = 0.1$ и составило 5%. При дальнейшем проведении вычислений ускорение в данном случае также снижается и при $n_x = 0$ алгоритм 3б становится идентичным алгоритму 2.

На задачах с размером сетки, меньшим 1500×1500, комбинированные алгоритмы вследствие существенного времени, тратящегося на синхронизацию данных, показывали меньшее быстродействие по сравнению с GPU-алгоритмом.

При решении задачи с сеткой размера 3000×3000 несколькими GPU и CPU эффективность от применения комбинированных алгоритмов была получена только при распараллеливании решения на два GPU (1.5% ускорения при использовании алгоритма 3б на 25 шагах по времени). При дальнейшем масштабировании гранулярность вычислений снижается и комбинированные алгоритмы становятся неэффективными.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ ДИНАМИКИ МИГРАЦИОННОГО ПРОЦЕССА

Численное моделирование динамики процесса миграции растворимых веществ в рамках рассматриваемой неклассической конвективно-диффузионной математической модели выполнено относительно безразмерных переменных, определя-

емых соотношениями (28) для фильтрационной схемы, приведенной в [7, 9], при начальном распределении поля концентраций $C(\varphi, \varphi, 0) \equiv 0$. Некоторые из полученных при этом результатов графически изображены на рис. 5–9 и соответствуют динамике полей концентраций вдоль линии тока $\psi = 0$.

Обозначим M_1, M_2, M_3, M_4 математические модели, базирующиеся соответственно на следующих уравнениях:

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

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

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

$$\sigma (D_t^{(\alpha)} C + \tau_q D_t^{(\alpha+1)} C) = d\Delta C - \bar{v} \cdot \nabla C. \quad (M_4).$$

При этом отметим, что модель M_1 — это классическая математическая модель конвективной диффузии [1, 2, 9], M_2 — релаксационная математическая модель типа Каттанео [12, 16, 19], M_3 и M_4 — дробно-дифференциальные математические модели.

Анализ результатов численных экспериментов позволяет сделать следующие выводы об особенностях динамики полей концентраций растворимых веществ в рамках изучаемой математической модели M_4 , а также относительно других математических моделей, перечисленных выше.

1. На начальных стадиях развития конвективно-диффузионного процесса для различных математических моделей возможны разные сценарии поведения во времени концентрационных кривых в фиксированной точке фильтрационной области, общей особенностью которых является наличие как интервалов времени с запаздыванием формирования поля концентраций в рамках неклассических математических моделей по сравнению с класси-

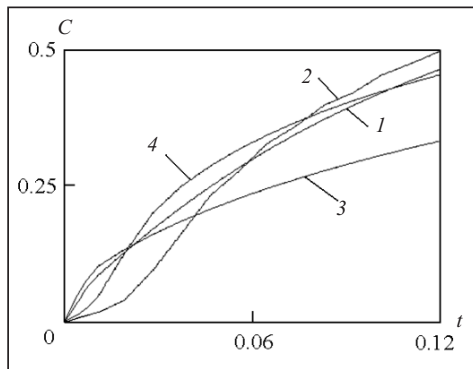


Рис. 5

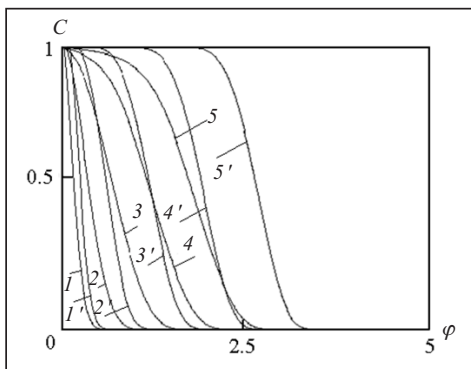


Рис. 6

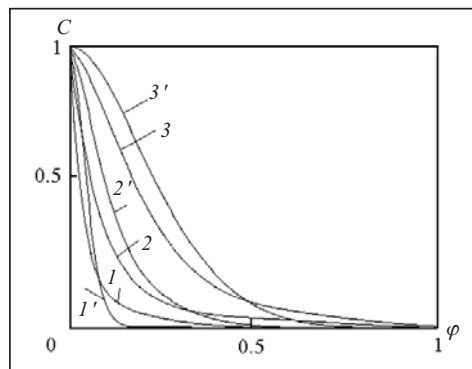


Рис. 7

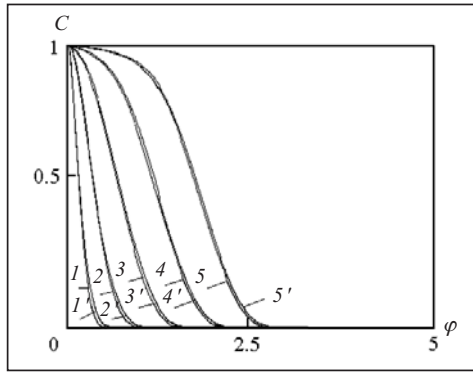


Рис. 8

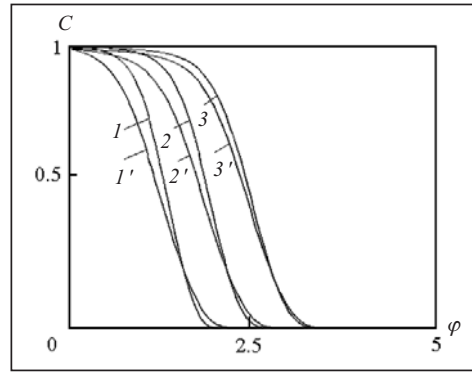


Рис. 9

ческой моделью M_1 , так и временных интервалов, для которых имеет место опережение формирования поля концентраций в рамках неклассических моделей по сравнению с классической. На рис. 5 показано поведение кривых концентрации во времени в фиксированной точке $(0.12, 0)$ области комплексного потенциала (кривая 1 при $\alpha = 1, \tau_q = 0$; кривая 2 при $\alpha = 1, \tau_q = 0.01$; кривая 3 при $\alpha = 0.8, \tau_q = 0$; кривая 4 при $\alpha = 0.8, \tau_q = 0.01$).

2. На более поздних стадиях развития конвективно-диффузионного процесса имеет место устойчивое запаздывание формирования полей концентраций в рамках дробно-дифференциальной математической модели M_4 как по сравнению с классической моделью M_1 , так и с моделью типа Каттанео M_2 (см. рис. 6, где показаны концентрационные кривые вдоль линии симметрии течения $\psi = 0$ для значений $\alpha = 0.8, \tau_q = 0.01$ (кривые 1–5) и значений $\alpha = 1.0, \tau_q = 0.01$ (кривые 1'–5') в дискретные моменты времени (кривые 1, 1' при $t = 1$; кривые 2, 2' при $t = 10$; кривые 3, 3' при $t = 10^2$; кривые 4, 4' при $t = 10^3$; кривые 5, 5' при $t = 10^4$)).

3. Сравнение результатов моделирования концентрационного поля в рамках моделей M_3 и M_4 указывает на наличие свойства преимущественно ускоренного продвижения фронта концентрации, найденного согласно модели M_4 , по сравнению с результатом моделирования согласно модели M_3 . При малых значениях параметра τ_q это явление характерно для начальной стадии процесса (см. рис. 7, где показаны кривые концентрации вдоль линии $\psi = 0$ для значений $\alpha = 0.8, \tau_q = 0$ (кривые 1–3) и значений $\alpha = 0.8, \tau_q = 0.01$ (кривые 1'–3') в фиксированные моменты времени (кривые 1, 1' при $t = 0.01$; кривые 2, 2' при $t = 0.1$; кривые 3, 3' при $t = 1.0$)), а затем с течением времени результаты расчета по обеим моделям практически совпадают (см. рис. 8, где показана динамика тех же кривых для достаточно удаленных от начального состояния стадий миграционного процесса (кривые 1, 1' при $t = 1$; кривые 2, 2' при $t = 10$; кривые 3, 3' при $t = 10^2$; кривые 4, 4' при $t = 10^3$; кривые 5, 5' при $t = 10^4$)). При больших значениях параметра τ_q указанное свойство проявляется не только на начальной, но и на значительно более удаленных от нее стадиях развития процесса «конвекция–диффузия» (см. рис. 9, где показаны кривые концентрации для значений $\alpha = 0.8, \tau_q = 100$ (кривые 1–3) и значений $\alpha = 0.8, \tau_q = 0$ (кривые 1'–3')) в фиксированные моменты времени (кривые 1, 1' при $t = 10^3$; кривые 2, 2' при $t = 10^4$; кривые 3, 3' при $t = 10^5$; $\psi = 0$)).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изучены математические модели, предназначенные для исследования неравновесной динамики процесса конвективной диффузии растворимых веществ при плоско-вертикальной установившейся фильтрации в областях со свободными границами. Построена математическая модель, описывающая дробно-дифференциальную динамику локально-неравновесного во времени конвективно-диффузионного процесса в пористой среде со сложной пространственно-временной структурой. Приведена постановка соответствующей указанной модели краевой задачи и предложена методика получения ее приближенного решения. Разработаны параллельные алгоритмы расчета для кластерных систем, приведены результаты тестирования быстродействия параллельных алгоритмов для графических процессоров. Графически представлены некоторые итоговые результаты численных экспериментов по моделированию динамики рассматриваемого миграционного процесса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ляшко И.И., Демченко Л.И., Мистецкий Г.Е. Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах. — К.: Наук. думка, 1991. — 264 с.
2. Лаврик В.И., Никифорович Н.А. Математическое моделирование в гидроэкологических исследованиях. — К.: Фитосоцицентр, 1998. — 288 с.
3. Булавацький В.М., Кривонос Ю.Г., Скопецкий В.В. Некласичні математичні моделі процесів тепло- та масопереносу. — К.: Наук. думка, 2005. — 283 с.
4. Богаенко В.А., Булавацкий В.М., Скопецкий В.В. Параллельный алгоритм расчета фильтрационно-конвективной диффузии загрязнений из водоносных горизонтов // Управляющие системы и машины. — 2008. — № 5. — С. 18–23.
5. Богаенко В.А., Булавацкий В.М., Скопецкий В.В. Математическое моделирование динамики геохимических процессов загрязнения водоносных горизонтов // Управляющие системы и машины. — 2009. — № 4. — С. 60–66.
6. Bulavatsky V.M. Numerical modeling of the dynamics of a convection diffusion process locally non-equilibrium in time // Cybernetics and Systems Analysis. — 2012. — **48**, N 6. — P. 861–869.
7. Bulavatsky V.M. Mathematical modeling of dynamics of the process of filtration convection diffusion under the condition of time nonlocality // Journal of Automation and Information Science. — 2012. — **44**, N 2. — P. 13–22.
8. Tzou D.Y. The generalized lagging response in small scale and high-rate heating // Intern. J. of Heat and Mass Transfer. — 1995. — **38**, N 17. — P. 3231–3240.
9. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. — М.: Наука, 1977. — 664 с.
10. Khusainov D.Ya., Ivanov A.F., Kovarzh I.V. Solution of one heat equation with delay // Nonlinear Oscillations. — 2009. — **12**, N 2. — P. 260–282.
11. Коварж І.В., Іванов А.Ф., Хусаїнов Д.Я. Постановка крайових задач і задач Коші для рівнянь параболічного типу з чистим запізненням // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. — 2007. — № 7. — С. 37–41.
12. Compte A., Metzler R. The generalized Cattaneo equation for the description of anomalous transport processes // J. Phys.A.:Math.Gen. — 1997. — **30**. — P. 7277–7289.
13. Gorenflo R., Mainardi F. Fractional calculus: integral and differential equations of fractional order // Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics / A. Carpinteri, F. Mainardi (Eds.). — Wien: Springer-Verlag, 1997. — P. 223–276.
14. Podlubny I. Fractional differential equations. — New York: Academic Press, 1999. — 341 p.
15. Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J. Theory and applications of fractional differential equations. — Amsterdam: Elsevier, 2006. — 523 p.
16. Cattaneo C. A form of heat conduction equation which eliminates the paradox of instantaneous propagation // Comp. Rend. — 1958. — **247**. — P. 431–433.

17. Бомба А.Я., Булавацький В.М., Скопецький В.В. Нелінійні математичні моделі процесів геогідродинаміки. — Київ: Наук. думка, 2007. — 292 с.
18. Самарский А.А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1977. — 656 с.
19. Zhang W., Cai X., Holm S. Time-fractional heat equations and negative absolute temperatures // Comput. Math. Appl. — 2014. — **67**. — P. 164–171.
20. Samarskii A.A., Vabishchevich P.N. Computational heat transfer. Vol. 2. — New York: Wiley, 1995. — 422 p.

Надійшла до редакції 01.09.2015

В.М. Булавацький, В.А. Богасенко

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІКИ НЕРІВНОВАЖНИХ У ЧАСІ
КОНВЕКТИВНО-ДИFUЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В ОБЛАСТЯХ З ВІЛЬНИМИ МЕЖАМИ**

Анотація. Побудовано математичну модель, що описує дробово-диференціальну динаміку локально-нерівноважного у часі конвективно-дифузійного процесу розчинних речовин при плоско-вертикальній усталеній фільтрації з вільною межею. Наведено постановку відповідної крайової задачі і наведено методику отримання її наближеного розв'язку. Розвинуто паралельні алгоритми розрахунку для кластерних систем, наведено результати тестування швидкодії паралельних алгоритмів для графічних процесорів та результати чисельних експериментів з моделювання динаміки розглянутого міграційного процесу.

Ключові слова: неklasичні дифузійні моделі, нерівноважний у часі конвективно-дифузійний процес, плоско-вертикальна фільтрація у пористому середовищі, рівняння дифузії з запізненням, рівняння дифузії дробового порядку, крайові задачі, наближені розв'язки, паралельні алгоритми.

V.M. Bulavatsky, V.A. Bogaenko

**MATHEMATICAL MODELLING OF DYNAMICS OF NONEQUILIBRIUM IN TIME
CONVECTIVE DIFFUSION PROCESS IN A DOMAIN WITH FREE BOUNDARY**

Abstract. The authors construct a mathematical model to describe the dynamics of fractional-differential locally nonequilibrium in time convection-diffusion process of soluble substances in the plain-vertical steady-state filtration with a free boundary. The statement of the respective boundary-value problem is presented and the technique of obtaining its approximated solution is set up. Developed parallel algorithms of calculation for cluster systems, the results of testing of response parallel algorithms for the GPU and results of numerical experiments on simulation of dynamics of considered migration process are adduced.

Keywords: non-classical diffusion models, non-equilibrium in times convective-diffusion process, plainly-vertical filtration in porous medium, diffusion equation with delay, fractional diffusion equation, boundary value problems, approximated solutions, parallel algorithms.

Булавацький Владимир Михайлович,

доктор техн. наук, професор, ведучий научний сотрудник Інститута кибернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, e-mail: v_bulav@ukr.net

Богасенко Всеволод Анатольевич,

кандидат техн. наук, старший научний сотрудник Інститута кибернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, e-mail: sevab@ukr.net