На правах рукописи

ЛУКАЩУК Станислав Юрьевич

АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И ЧИСЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДИФФУЗИОННОГО ТИПА

Специальность:
05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Уфа – 2017

Работа выполнена в ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиационный технический университет» на кафедре высокопроизводительных вычислительных технологий и систем и в лаборатории группового анализа математических моделей естествознания, техники и технологий

Научный консультант: доктор физико-математических наук, профессор
Газизов Рафаил Кавыевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Учайкин Владимир Васильевич
ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный университет», заведующий кафедрой теоретической физики

доктор физико-математических наук, профессор
Фёдоров Владимир Евгеньевич
ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет», заведующий кафедрой математического анализа

доктор физико-математических наук, профессор
Ахтямов Азамат Мухтарович
ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет», профессор кафедры математического моделирования

Ведущая организация: Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук», г. Москва

Защита диссертации состоится 19 декабря 2017 г. в 10^{00} часов на заседании диссертационного совета Д 212.288.06 на базе ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиационный технический университет» по адресу: 450008, г. Уфа, ул. К. Маркса, 12.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиационный технический университет» и на сайте *www.ugatu.su*.

Автореферат разослан «___» _____________ 2017 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
д-р физ.-мат. наук, профессор Г. Т. Булгакова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Теория интегро-дифференцирования дробного порядка в последние годы широко используется в качестве эффективного инструмента математического моделирования процессов аномального переноса, кинетика протекания которых не подчиняется нормальной (гауссовой) статистике. Такие процессы наблюдаются экспериментально в различных неупорядоченных и неоднородных сложных средах, в частности, при исследовании диффузии в турбулентных потоках, фильтрации флюидов в неоднородных пористых средах, тепло- и массопереноса в плазме, переноса зарядов в аморфных полупроводниках, эволюции сложных биологических систем, передачи информации в глобальных коммуникационных сетях и многих других явлений. При этом аномальность процесса обычно проявляется в виде эффектов памяти и/или пространственной нелокальности. Применимость дробно-дифференциального подхода к математическому описанию таких процессов показана во многих работах отечественных и зарубежных ученых, среди которых следует отметить работы Р. Р. Нигматуллина, В. В. Учайкина, Г. М. Заславского, Р. Т. Сибатова, T. F. Nonnenmacher, R. Metzler, J. Klafter, E. Barkai, B. Berkowitz, R. Hilfer, R. Balescu, D. Baleanu.

В настоящее время предложено большое количество дробно-дифференциальных моделей (ДДМ) диффузионного типа, многие из которых были построены с использованием метода случайных блужданий с непрерывным временем (CTRW), предложенным в 1965 г. Э. Монтроллом и Г. Вейсом. Однако более предпочтительным представляется построение таких моделей «из первых принципов», то есть из рассмотрения микроскопической динамики соответствующей системы с последующим переходом к её сокращенному описанию. Такой переход осуществляется, в частности, применением к уравнению Лиувилля проекционного формализма Цванцига–Мори. В работах Р. Р. Нигматуллина, В. Е. Тарасова, R. Hilfer предложены различные дробно-дифференциальные обобщения уравнения Лиувилля, однако проекционная техника для этих уравнений не развита и многие вопросы, связанные с построением на их основе макроскопических ДДМ остаются открытыми.

В настоящее время достаточно хорошо развита теория линейных дробно-дифференциальных уравнений (ДДУ), для которых удалось обобщить многие методы классической теории линейных дифференциальных уравнений целого порядка (обыкновенных и в частных производных), а также некоторые методы теории линейных интегральных уравнений. Исследованию интегрируемости ДДУ диффузионного типа посвящены работы А. М. Нахушева, А. А. Килбаса, А. Н. Кочубея, А. В. Псху, Ю. Ф. Лучко, В. Е. Фёдорова, R. Gorenflo, F. Mainardi, M. M. Meerschaert, J. J. Trujillo, E. K. Lenzi и др. Для нелинейных ДДУ получили развитие численно-аналитические методы, направленные на построение их приближенных решений (метод декомпозиции Адомиана, метод S. J. Liao анализа гомотопии, метод J. H. He возмущенной гомотопии и ряд других). Однако аналитические методы исследования качественных свойств нелинейных ДДМ и построения их точных решений только начинают развиваться.

Одним из эффективных подходов к исследованию качественных свойств дифференциальных уравнений является групповой анализ, основы которого были заложены в работах С. Ли и развиты в дальнейшем в работах научных школ Л. В. Овсянникова, Н. Х. Ибрагимова, P. Olver и др. В работах Ю. Н. Григорьева и С. В. Мелешко групповые методы и алгоритмы были успешно распространены на некоторые виды классических интегро-дифференциальных уравнений (в частности, уравнение Больцмана), что обусловливает возможность применения данного подхода и для исследования ДДУ. Следует отметить, что понятие симметрии достаточно часто используется при построении и анализе ДДМ, однако методы современного группового анализа практически не применялись для изучения таких моделей.

С симметриями уравнения и понятием лагранжиана также неразрывно связаны законы сохранения. Лагранжиан, зависящий от производных дробного порядка, впервые исследовался в работе F. Riewe, а соответствующие уравнения Эйлера–Лагранжа были впервые построены в работах O. P. Agrawal. В работах T. M. Atanackovic, L. A. Bourdin, G. S. F. Frederico, D. F. M. Torres, A. B. Malinowska на основе этих результатов был доказан ряд дробно-дифференциальных обобщений теоремы Нётер и построены законы сохранения для некоторых ДДМ. Вместе с тем, в работах Н. Х. Ибрагимова, S. Anco, G. Bluman были предложены универсальные алгоритмы построения законов сохранения для дифференциальных уравнений с производными целого порядка, не требующие существования классического лагранжиана. Задача распространения этих подходов на случай ДДМ также представляется актуальной.

С другой стороны, попытки практического использования существующих ДДМ часто наталкиваются на отсутствие необходимых числовых значений параметров этих моделей, важнейшим из которых является порядок дробного дифференцирования. В результате возникает задача параметрической идентификации ДДМ по данным натурных экспериментов, актуальная не только для нелинейных, но и для относительно простых и хорошо известных линейных моделей. Математически она приводит к различным постановкам коэффициентных обратных задач, при этом задача восстановления порядка дробного дифференцирования не имеет аналога в классической теории. Для ДДМ диффузионного типа такие задачи, связанные с восстановлением порядка дробного дифференцирования и коэффициента аномальной диффузии, исследовались в работах А.Н. Бондаренко и Д.С. Иващенко, E. Ozbilge и A. Demir, S. Tatar и S. Ulusoy, J. Cheng и ряда других авторов. В работах Ю. С. Шаталова для решения классических коэффициентных обратных задач теплопереноса была развита теория интегральных представлений, позволяющая в явном виде получать представления искомых коэффициентов через соответствующие интегральные характеристики потенциалов переноса. Представляется целесообразным развитие данного подхода для решения задач параметрической идентификации ДДМ.

Активно развиваются и численные методы исследования ДДМ. В работах В. М. Головизнина, И. А. Короткина, М. Х. Шхануков-Лафишева, А. А. Алиханова, M. M. Meerschaert, S. B. Yuste и др. предложены и исследованы различные численные алгоритмы решения задач для ДДМ диффузионного типа. Однако нелокальность операторов дробного дифференцирования приводит к колоссальной вычислительной трудоемкости таких алгоритмов. В результате становится актуальной задача разработки параллельных вычислительных алгоритмов, что позволит использовать при компьютерном моделировании ДДМ суперкомпьютеры и вычислительные кластеры. При этом главной проблемой становится уменьшение объемов межпроцессорных обменов данными при сохранении требуемого уровня точности вычислений.

К настоящему времени наиболее хорошо теоретически обоснованными и экспериментально подтвержденными ДДМ являются модели диффузионного типа, нашедшие практическое применение в различных областях естествознания. По этим причинам этот тип ДДМ наилучшим образом подходит для апробации новых аналитических и численных методов и алгоритмов.

Все перечисленное обусловливает актуальность разработки аналитических методов и численных алгоритмов для решения проблемы исследования дробно-дифференциальных математических моделей.

Цели и задачи работы. *Целью* диссертационной работы является развитие методологических основ исследования дробно-дифференциальных математических моделей, предусматривающее разработку новых подходов к построению таких моделей, развитие качественных и приближенных аналитических методов их исследования, а также аналитических и численных алгоритмов их параметрической идентификации, на примере дробно-дифференциальных моделей диффузионного типа.

Для достижения данной цели в работе были поставлены и решены следующие *задачи*.

1. Развитие кинетического подхода к построению ДДМ процессов переноса в системах со степенной памятью, основанного на принципах классической неравновесной статистической механики.

2. Развитие теоретико-группового подхода для исследования симметрийных свойств ДДМ с производными дробного порядка различных типов и применение разработанных методов и алгоритмов для нахождения симметрий и построения точных решений ДДМ диффузионного типа.

3. Разработка и обоснование симметрийных методов построения законов сохранения для ДДМ и построение с их помощью новых законов сохранения для имеющих практическое значение моделей диффузионного типа.

4. Разработка новых, в том числе симметрийных, методов теории возмущений для построения приближенных решений ДДМ, в которых возможно выделение малого параметра из порядка дробного дифференцирования.

5. Разработка аналитических и численно-аналитических методов идентификации постоянных параметров ДДМ аномального переноса (включая порядки дробного дифференцирования) на основе теории интегральных представлений.

6. Разработка параллельных численных алгоритмов для решения задач компьютерного моделирования и идентификации ДДМ аномального диффузионного переноса.

7. Создание программного комплекса компьютерного моделирования процессов аномальной диффузии.

Научная новизна.

1. Для статистического ансамбля систем с памятью предложена процедура вывода из классического уравнения Лиувилля его дробно-дифференциального аналога с производными Римана-Лиувилля по времени, использующая понятие эквивалентности двух уравнений по решению. На основе полученного уравнения Лиувилля с использованием проекционного формализма Цванцига–Мори построены дробно-дифференциальные аналоги кинетического уравнения Цванцига, обобщенного уравнения Ланжевена и уравнения Мори для эволюции макроскопических наблюдаемых. На примере модели аномальной диффузии показано, что полученные уравнения могут быть использованы для построения макроскопических ДДМ неравновесных необратимых процессов.

2. Развита теория продолжения локальных групп точечных преобразований на линейные дробно-дифференциальные переменные, образованные произвольными композициями операторов дробного интегрирования и дифференцирования целых порядков, предложены алгоритмы построения точечных симметрий ДДУ и их групповой классификации. Для ряда ДДМ диффузионного типа решены задачи групповой классификации и найдены их инвариантно-групповые решения.

3. Предложенный Н. Х. Ибрагимовым подход к доказательству классической теоремы Нётер обобщен на случай ДДМ. Доказаны дробно-дифференциальные аналоги теоремы Нётер и в явном виде получены дробно-дифференциальные обобщения операторов Нётер, дающие конструктивный алгоритм построения законов сохранения для ДДМ с лагранжианом и без него. Доказана нелинейная самосопряженность ряда моделей аномальной диффузии с дробными производными по времени и найдены их законы сохранения.

4. Для ДДМ с порядком дробного дифференцирования, близким к целому числу, предложен способ их приближения моделями в целых производных с малым параметром, выделяемым из порядка дробного дифференцирова-

ния. Это позволяет использовать методы теории приближенных групп преобразований для исследования приближенных симметрийных свойств ДДМ. Для приближенной нелинейной модели субдиффузии решена задача групповой классификации по приближенным группам точечных преобразований и доказано наличие новых случаев классификации по сравнению с исходной ДДМ. Предложен способ введения второго масштаба при разложении дробных производных Римана-Лиувилля по малому параметру, позволяющий строить приближенные решения соответствующих задач типа Коши.

5. Метод временных интегральных характеристик обобщен на случай коэффициентных обратных задач для ДДМ диффузионного типа. В явном виде найдены интегральные представления коэффициента аномальной диффузии и порядка дробного дифференцирования для диффузионно-волновой и субдиффузионной моделей с дробными производными Римана–Лиувилля и Капуто по времени, получены теоретические оценки точности идентификации. Предложены численно-аналитические алгоритмы идентификации, позволяющие восстанавливать параметры ДДМ аномальной диффузии по результатам измерений в любых внутренних точках области.

6. На основе методов декомпозиции разработаны семейства параллельных алгоритмов решения начально-краевых задач для ДДМ аномальной диффузии, выполнена теоретическая оценка их эффективности. Отличительной особенностью предложенных алгоритмов является возможность распараллеливания вычислительного процесса не только по пространству, но и по времени.

Теоретическая и практическая значимость работы. Основные полученные в работе результаты носят теоретический характер и способствуют развитию методологических основ математического моделирования процессов и систем с памятью и пространственной нелокальностью с использованием аппарата интегро-дифференцирования дробного порядка. Предложенный симметрийный подход к исследованию дробно-дифференциальных моделей способствуют развитию методов современного группового анализа.

Разработанные аналитические и численные методы идентификации параметров моделей аномальной диффузии обладают как теоретической, так и практической ценностью, поскольку дают возможность определения числовых значений параметров соответствующих моделей по данным натурных экспериментов. Этой же цели служит созданный программный комплекс компьютерного моделирования процессов аномальной диффузии.

Предложенные параллельные алгоритмы могут стать основой для разработки нового высокопроизводительного программного комплекса компьютерного моделирования процессов переноса с аномальной кинетикой, создание которого в настоящее время становится все более актуальным, в частности, для решения задач подземной гидромеханики и фильтрации флюидов в нефтегазовых коллекторах со сложной геологической структурой.

Исследования по теме диссертации проводились в рамках гранта Правительства РФ по постановлению № 220, договор № 11.G34.31.0042 между Минобрнауки РФ, ФГБОУ ВПО «УГАТУ» и ведущим ученым Н. Х. Ибрагимовым по теме «Математическое моделирование и групповой анализ дифференциальных уравнений» (2011–2015 гг.); проектной части госзадания Минобрнауки РФ «Математическое и компьютерное моделирование процессов фильтрации в неоднородных коллекторах нефтегазовых месторождений на основе дробно-дифференциального подхода» (проект 1.3103.2017/ПЧ, 2017-2019 гг.), программы Академии наук Республики Башкортостан «Физико-математические основы наукоемких технологий в республике Башкортостан» по теме «Неустойчивость и хаос в нелинейных волновых процессах» (договор № 5.45, 2002 г.), НИР тематического плана ФГБОУ ВПО «УГАТУ» (1997–2014 гг.).

Методология и методы исследования. Разработка темы диссертационного исследования проводилась на основе базовых принципов математического моделирования и основано на методах и результатах теории интегро-дифференцирования дробного порядка, методах классической неравновесной статистической механики, методах классического и современного группового анализа, методах интегральных представлений параметров математических моделей процессов тепло- и массопереноса, методах построения и анализа конечно-разностных схем, методах разработки параллельных алгоритмов для высокопроизводительных вычислительных систем, а также базовых принципах и технологиях проведения вычислительного эксперимента.

Использование совокупности перечисленных принципов и методов обусловливает адекватность и достоверность полученных в работе результатов.

Положения, выносимые на защиту.

В области разработки новых математических методов моделирования объектов и явлений: процедура вывода дробно-дифференциального уравнения Лиувилля для статистического ансамбля систем с памятью и построенная на его основе иерархия дробно-дифференциальных уравнений с производными Римана-Лиувилля по времени, обеспечивающая различные уровни сокращенного описания динамики системы с памятью и позволяющая строить новые макроскопические ДДМ неравновесных процессов в таких системах.

В области развития качественных и приближенных аналитических методов исследования математических моделей: формулы продолжения непрерывных групп точечных преобразований на линейные дробно-дифференциальные переменные; алгоритмы построения точечных симметрий и групповой классификации ДДМ с частными дробными производными различных типов; доказательство дробно-дифференциальных аналогов фундаментального операторного тождества и теоремы Нётер; явный вид дробно-дифференциальных обобщений операторов Нётер; конструктивный алгоритм построения законов сохранения для ДДМ; способ нахождения приближенных симметрий ДДМ, порядок дробного дифференцирования в которых близок к целому числу, с использованием методов теории приближенных групп преобразований; двухмасштабный алгоритм построения приближенных решений ДДМ с дробными производными Римана–Лиувилля, порядок которых близок к целому; модификация метода временных интегральных характеристик для решения задачи параметрической идентификации линейных моделей аномальной диффузии с дробными производными Римана–Лиувилля и Капуто по времени.

В области разработки, обоснования и тестирования эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий: численно-аналитические алгоритмы идентификации параметров ДДМ диффузионного типа, основанные на методе временных интегральных характеристик; параллельный численный алгоритм на основе модифицированного метода Шварца и двухсеточные параллельные алгоритмы решения начально-краевых задач для ДДМ аномальной диффузии; теоретические оценки параллельной эффективности предложенных параллельных алгоритмов; практические рекомендации по организации параллельного вычислительного процесса.

В области реализации эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента: программный комплекс компьютерного моделирования процессов аномальной диффузии, включающий пакет АД-НКЗ решения начально-краевых задач для ДДМ аномальной диффузии и пакет АД-ВИХ параметрической идентификации этих моделей.

Степень достоверности результатов. Достоверность полученных в работе результатов обеспечивается строгими математическими доказательствами сформулированных утверждений и теорем, обоснованным использованием применяемых методов исследования, а также тестированием разработанного программного кода и сравнением результатов вычислительных экспериментов с аналитическими решениями модельных задач. Основные результаты исследования опубликованы в отечественных и зарубежных рецензируемых журналах с высоким импакт-фактором.

Апробация результатов исследования. Результаты диссертационного исследования докладывались на восьмой, десятой и одиннадцатой научных межвузовских конференциях «Математическое моделирование и краевые задачи» (Самара, 1998, 2000, 2001), третьей Всероссийской научно-технической конференции «Теоретические и прикладные вопросы современных информационных технологий» (Улан-Удэ, 2002), второй и пятой Всероссийских научных конференциях «Математическое моделирование и краевые задачи» (Самара, 2005, 2008), VI Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям (Кемерово, 2005), Уфимской международной математической конференции памяти А. Ф. Леонтьева (Уфа, 2007, 2017), международных научных конференциях серии «Modern Group Analysis (MOGRAN)» (MOGRAN-11, Karlscrona, Sweden, 2007; MOGRAN-13, Уфа, 2009; MOGRAN-16, Уфа, 2013), 2^{nd} Conference of Nonlinear Science and Complexity (Porto, Portugal, 2008), International Workshop on New Trends in Science and Technology (Ankara, Turkey, 2008), международных научных конференциях серии «Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ)» (ПаВТ'2010, Уфа, 2010; ПаВТ'2011, Москва, 2011; ПаВТ'2012, Новосибирск, 2012), одиннадцатом Всероссийском симпозиуме по прикладной и промышленной математике (Кисловодск, 2010), Российской конференции «Многофазные системы: природа, человек, общество, технологии», посвященной 70-летию акад. Р. И. Нигматуллина (Уфа, 2010), VI Уфимской международной конференции «Комплексный анализ и дифференциальные уравнения» (Уфа, 2011), 5^{th} Symposium on Fractional Differentiation and Its Applications (Nanjing, China, 2012), V Российской конференции с международным участием «Многофазные системы: теория и приложения» (Уфа, 2012), Всероссийской конференции «Новые математические модели механики сплошных сред: построение и изучение» (Новосибирск, 2014), International Conference on Fractional Differentiation and its Applications ICFDA'14 (Catania, Italy, 2014), the 20th World Congress of the International Federation of Automatic Control IFAC 2017 (Toulouse, France, 2017), International Conference on Mathematical Modelling in Applied Sciences ICMMAS'17 (Санкт-Петербург, 2017), семинаре им. К. И. Бабенко (Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша), семинаре Института математики с ВЦ УНЦ РАН, семинарах лаборатории ГАММЕТТ под руководством профессора Н. Х. Ибрагимова, кафедр математики и ВВТиС УГАТУ.

Публикации по теме диссертации и личный вклад автора.

По результатам диссертационного исследования опубликовано 43 работы, в том числе 32 статьи [1-20, 23-34], из них [1-20] опубликованы в рецензируемых научных изданиях, входящих в Перечень ВАК или включенных в международные реферативные базы данных и системы цитирования Web of Science и/или Scopus; получено два свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ [21,22].

Все представленные в диссертации и выносимые на защиту научные результаты получены автором лично. Большая часть этих результатов опубликована в 18 работах без соавторов [2,5,6,8,10,12,13,16-22,24,29,32,33]. В совместной работе [1] автору принадлежит принцип декомпозиции, в работах [3,4,7,9,11,26-28,30] — все результаты, касающиеся развития симметрийного подхода для исследования дробно-дифференциальных моделей в частных дробных производных, а также ряд примеров построения точечных и нелокальных симметрий для обыкновенных дробно-дифференциальных уравнений; в [14] автором получены симметрии, точные решения и законы сохранения для дробно-дифференциальных обобщений уравнения Компанейца, в

[15] автору принадлежит алгоритм исследования симметрийных свойств рассматриваемых моделей и результаты исследования диффузионно-волнового уравнения, в [23] автором получены интегральные представления коэффициентов диффузионных моделей, в [25] — разработан параллельный алгоритм решения диффузионно-волнового уравнения, в [31] — предложена постановка коэффициентной обратной задачи для уравнения аномальной диффузии и алгоритм ее решения, в [34] — аппроксимация дробной производной и результаты расчетов приближенных симметрий.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, шести глав основного содержания, заключения, списка литературы и четырех приложений. Объем диссертации составляет 275 страниц, в том числе 251 страница основного содержания и 24 страницы приложений, включает 22 рисунка, 13 таблиц и список литературы из 371 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы исследования, проводится анализ степени ее разработанности, формулируются цели и задачи работы, перечисляются методы исследования, приводятся выносимые на защиту положения, отмечается их научная новизна, степень достоверности, теоретическая и практическая значимость. Приводятся сведения об апробации работы, публикациях и личном вкладе автора.

Первая глава посвящена развитию методов классической неравновесной статистической механики для построения ДДМ макроскопических процессов в системах с памятью.

В **§1** рассматривается статистический ансамбль закрытых систем, состоящих из одинаковых частиц, взаимодействующих с системой энергетических ловушек. Предполагается, что время нахождения частицы в ловушке является случайной величиной, плотность распределения которой имеет степенную асимптотику (так называемый, «тяжелый хвост»). Исключение из моделирования детальных процессов взаимодействия частиц с ловушками приводит к возникновению в основной системе эффектов памяти. Такие системы будут кратко называться системами со степенной памятью. Из теории Монтролла–Вейса случайных блужданий с непрерывным временем следует, что для описания таких систем могут быть использованы ДДМ.

Для описания динамики ансамбля систем со степенной памятью в работе рассматривается дробно-дифференциальное обобщение уравнения Лиувилля

$$ {}_{t_0}D_t^{\alpha}\rho + i\mathcal{L}_{\alpha}\rho = 0, \quad \alpha \in (0,1), \tag{1}$$

где $\rho = \rho(q,p,t)$ — функция распределения систем статистического ансамбля в фазовом пространстве, q и p — векторы обобщенных координат и импульсов,

$\mathcal{L}_\alpha = \mathcal{L}_\alpha(q,p,t)$ — обобщение оператора Лиувилля,

$$\left({}_{t_0}D_t^\alpha \rho\right)(q,p,t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\frac{\partial}{\partial t}\int_{t_0}^{t}\frac{\rho(q,p,\tau)}{(t-\tau)^\alpha}d\tau, \quad \alpha\in(0,1)$$

— дробная производная Римана–Лиувилля порядка $\alpha \in (0,1)$, характеризующая влияние ловушек на динамику системы частиц. Предполагается, что при $\alpha = 1$ эффекты памяти исчезают и уравнение (1) переходит в классическое уравнение Лиувилля

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + i\mathcal{L}\rho = 0, \tag{2}$$

где $\mathcal{L}$ — оператор Лиувилля. В случае $\mathcal{L} = \mathcal{L}(q,p)$ при начальном условии $\rho(q,p,t_0) = \rho_0(q,p)$ уравнение (2) имеет известное формальное решение

$$\rho(q,p,t) = e^{-i(t-t_0)\mathcal{L}}\rho_0(q,p). \tag{3}$$

Решается задача определения вида оператора $\mathcal{L}_\alpha$ из (1). Для этого сначала рассматривается такое состояние систем ансамбля, при котором эффекты памяти скомпенсированы, и уравнение (1) имеет формальное решение (3).

Утверждение 1.1. *Дробно-дифференциальное уравнение*

$${}_{t_0}D_t^\alpha\rho - (t-t_0)^{-\alpha}e^{i(t-t_0)\mathcal{L}}E_{1,1-\alpha}(-i(t-t_0)\mathcal{L})\rho = 0, \quad \alpha\in(0,1) \tag{4}$$

при $t \geq t_0$ *эквивалентно классическому уравнению Лиувилля* (2)*, то есть обладает тем же формальным решением* (3)*. Здесь* $E_{1,1-\alpha}$ *является функцией типа Миттаг-Леффлера от линейного оператора* $-i(t-t_0)\mathcal{L}$*:*

$$E_{1,1-\alpha}(-i(t-t_0)\mathcal{L}) = \mathcal{I} + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-i)^k}{\Gamma(k+1-\alpha)}(t-t_0)^k\mathcal{L}^k.$$

В асимптотике больших времен из (4) получен дробно-дифференциальный аналог уравнения Лиувилля

$${}_{t_0}D_t^\alpha\Delta\rho - (-i\mathcal{L})^\alpha\Delta\rho = 0, \quad \Delta\rho(q,p,t) = \rho(q,p,t) - \rho_{eq}(q,p), \tag{5}$$

которое описывает эволюцию отклонения $\Delta\rho$ функции распределения от ее равновесного значения ρ_{eq} на больших временах и может быть использовано для построения ДДМ неравновесных процессов в системах с памятью. В этом случае $-i\mathcal{L}_\alpha = (-i\mathcal{L})^\alpha$, что аналогично полученному ранее в работах Р. Хилфера.

Аналогично в §1 рассмотрен общий случай $\mathcal{L} = \mathcal{L}(q,p,t)$.

В **§2** для уравнения (5) развита проекционная техника Цванцига–Мори[1].

[1]Зубарев, Д. Н. Статистическая механика неравновесных процессов / Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2002. — Т. 1. — 432 с.

Утверждение 2.1. *Пусть эволюция ансамбля систем с памятью описывается ДДУ (5) и проекционный оператор $\mathcal{P}$ коммутирует с оператором дробного дифференцирования ${}_{t_0}D_t^\alpha$. Тогда «значимая» часть $\Delta\rho_1 = \mathcal{P}\Delta\rho$ функции $\Delta\rho$ удовлетворяет дробно-дифференциальному кинетическому уравнению типа Цванцига*

$$
\begin{aligned}
&{}_{t_0}D_t^\alpha \Delta\rho_1 - \mathcal{P}(-i\mathcal{L})^\alpha \Delta\rho_1 = \\
&\qquad = \mathcal{P}(-i\mathcal{L})^\alpha \int_{t_0}^{t} (t-\tau)^{\alpha-1} E_{\alpha,\alpha}\left((t-\tau)^\alpha \mathcal{Q}(-i\mathcal{L})^\alpha\right) \mathcal{Q}(-i\mathcal{L})^\alpha \Delta\rho_1(\tau) d\tau, \quad (6)
\end{aligned}
$$

где $\mathcal{Q} = 1 - \mathcal{P}$.

Уравнение (6) может служить основой для построения макроскопических моделей неравновесных процессов в системах с памятью.

Также для описания эволюции макроскопических наблюдаемых применена проекционная техника Мори. Аналогично уравнению (5), для эволюции отклонения $\Delta A = A - A_{eq}$ динамической переменной $A(q,p,t)$ от равновесного значения A_{eq} получено уравнение

$$
{}_{t_0}D_t^\alpha \Delta A - (i\mathcal{L})^\alpha \Delta A = 0. \quad (7)
$$

Начальное условие для (7) имеет вид ${}_{t_0}I_t^{1-\alpha} \Delta A\big|_{t=t_0} = B_0$, $B_0 = const$.

Следуя Мори, определим в гильбертовом пространстве динамических переменных проекционный оператор

$$
\mathcal{P}\Delta A = \sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{M} (\Delta A, B_{0m}) \Sigma_{mn} B_{0n}, \quad (8)
$$

осуществляющий проектирование динамической переменной ΔA на линейное подпространство, образованное элементами $B_{0m} = {}_{t_0}I_t^{1-\alpha} \Delta P_m(t)\big|_{t=t_0}$ $(m = 1, 2, \ldots, M)$. Здесь (A, B) — взвешенное на равновесную функцию распределения скалярное произведение, P_m — базисные динамические переменные, средние значения которых совпадают с макроскопическими наблюдаемыми, $\Sigma = (B_0, B_0^T)^{-1}$, $B_0 = (B_{01}, B_{02}, \ldots, B_{0M})^T$.

Утверждение 2.2. *Пусть $\{P_m(t)\}$ $(m = 1, 2, \ldots, M)$ — совокупность базисных динамических переменных и $\Delta P_m(t) = P_m(t) - (P_m)_{eq}$, где $(P_m)_{eq}$ — равновесное значение переменной $P_m(t)$. Тогда если $\Delta P_m(t)$ $(m = 1, 2, \ldots, M)$ удовлетворяют дробно-дифференциальному уравнению (7) с начальными условиями ${}_{t_0}I_t^{1-\alpha} (\Delta P_m(t))\big|_{t=t_0} = B_{0m}$, то они удовлетворяют также системе дробно-дифференциальных обобщенных уравнений Ланжевена*

$$
\left({}_{t_0}D_t^\alpha \Delta P_m\right)(t) = i\sum_{n=1}^{M} \Omega_{mn}^\alpha \Delta P_n(t) - \sum_{n=1}^{M} \int_{t_0}^{t} K_{mn}^\alpha(s) \Delta P_n(t-s) ds + F_m^\alpha(t), \quad (9)
$$

где

$$i\Omega^\alpha_{mn} = \sum_{k=1}^{M}((i\mathcal{L})^\alpha B_{0m}, B_{0k})\Sigma_{kn}, \quad K^\alpha_{mn}(t) = -\sum_{k=1}^{M}((i\mathcal{L})^\alpha F^\alpha_m(t), B_{0k})\Sigma_{kn},$$

$$F^\alpha_m(t) = (t-t_0)^{\alpha-1}E_{\alpha,\alpha}((t-t_0)^\alpha \mathcal{Q}(i\mathcal{L})^\alpha)\mathcal{Q}(i\mathcal{L})^\alpha B_{0m}, \quad \mathcal{Q} = 1-\mathcal{P}$$

и $\mathcal{P}$ *— проекционный оператор, определяемый* (8).

В результате умножения (9) на квазиравновесную функцию распределения ρ_q и интегрирования по фазовому пространству, получаются ДДУ типа Мори для макроскопических наблюдаемых:

$$ {}_{t_0}D^\alpha_t \left\langle \Delta P_m \right\rangle^t_q = i\sum_{n=1}^{M}\Omega^\alpha_{mn}\left\langle \Delta P_n \right\rangle^t_q - \sum_{n=1}^{M}\int_{t_0}^{t} K^\alpha_{mn}(s)\left\langle \Delta P_n \right\rangle^{t-s}_q ds, \qquad (10)$$

$$\left\langle \Delta P_m \right\rangle^t_q = \int P_m(q,p,t)\rho_q(q,p)dqdp.$$

В конце §2 в качестве примера использования уравнения (10) для построения ДДМ приведен вывод модели аномальной диффузии

$${}_{t_0}D^\alpha_t u(\mathbf{r},t) = K_\alpha \Delta u(\mathbf{r},t).$$

При выводе уравнения (5) была использована эквивалентность уравнений (2) и (4) по формальному решению (3). В **§3** обсуждаются свойства эквивалентных по решению уравнений целого и дробного порядков и приводится ряд примеров.

Определение 3.1. Обыкновенные дифференциальные уравнения в целых и/или дробных производных, обладающие в некоторой области одним и тем же решением, будут называться *уравнениями, эквивалентными по этому решению в данной области.*

Пример 3.1. Нелинейные уравнения

$$\left({}_0D^{1+\alpha}_x y\right)^2 - x\,{}_0D^{1+\alpha}_x y + {}_0D^\alpha_x y = 0, \qquad \alpha \in (0,1),$$

$$(1+\alpha)\Gamma(2+\alpha)[(x^{1-\alpha}y)'']^2 - 4x(x^{1-\alpha}y)'' + 4(x^{1-\alpha}y)' = 0$$

в области $x \in (0,\infty)$ эквивалентны по решению

$$y(x) = x^{\alpha-1}\left(C_1x^2 + (1+\alpha)\Gamma(2+\alpha)C_1^2 x + C_2\right). \qquad (11)$$

На многообразии, задаваемом (11), эти уравнения связаны преобразованием

$$x = \bar{x}, \quad y = (1+\alpha)[(1+\alpha^2)\bar{y} + (1-\alpha)\bar{x}\bar{y}']/4,$$

$${}_0D^\alpha_x y = (1+\alpha)\Gamma(2+\alpha)\bar{x}^{1-\alpha}\left[(1-\alpha)\bar{x}^{-1}\bar{y} + \bar{y}'\right]/4.$$

Предложен следующий эвристический принцип эквивалентности.

Предложение. *Для любого обыкновенного ДДУ с дробными производными Римана-Лиувилля существует эквивалентное ему по решению, зависящему от максимально возможного количества постоянных интегрирования, обыкновенное дифференциальное уравнение с производными целого порядка, связанное с исходным ДДУ некоторым преобразованием, относительно которого это решение остается инвариантным.*

Данный принцип позволяет использовать дифференциальные уравнения целого порядка для исследования свойств ДДМ при условии, что найдено соответствующее преобразование, переводящее дробно-дифференциальное уравнение модели в эквивалентное ему уравнение с производными целого порядка.

Вторая глава посвящена развитию симметрийного подхода к исследованию дробно-дифференциальных моделей. В **§4** выводятся формулы продолжения группы точечных преобразований на интегралы и производные дробного порядка.

Пусть $x = (x^1, x^2, \ldots, x^n) \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$ — вектор независимых переменных,

$$\Omega = (a^1, b^1) \times \ldots \times (a^n, b^n), \quad -\infty < a^i < b^i < \infty \quad (i = 1, 2, \ldots, n), \tag{12}$$

$u = (u^1, u^2, \ldots, u^m)$ — вектор зависимых переменных (функций от x).

Рассматривается однопараметрическая группа G преобразований

$$\begin{aligned} \bar{x}^i &= f^i(x, u, \mathfrak{a}), \quad f^i|_{\mathfrak{a}=0} = x^i \quad (i = 1, 2, \ldots, n); \\ \bar{u}^\mu &= g^\mu(x, u, \mathfrak{a}), \quad g^\mu|_{\mathfrak{a}=0} = u^\mu \quad (\mu = 1, 2, \ldots, m), \end{aligned} \tag{13}$$

для которых справедливы инфинитезимальные разложения

$$\bar{x}^i = x^i + \mathfrak{a}\xi^i(x, u) + o(\mathfrak{a}), \quad \bar{u}^\mu = u^\mu + \mathfrak{a}\eta^\mu(x, u) + o(\mathfrak{a}).$$

Обозначим $x_i(s) = (x^1, \ldots, x^{i-1}, s, x^{i+1}, \ldots, x^n)$ и $u(x) \in AC([a^i, b^i])$ означает принадлежность $u(x)$ классу AC абсолютно непрерывных функций по переменной $x^i \in [a^i, b^i]$.

Теорема 4.1. *Пусть $\alpha_i > 0$, $u^\mu(x) \in C^1(\Omega)$ и ${}_{a^i}I^{\alpha_i}_{x^i} u^\mu \in AC([a^i, b^i])$, где*

$$\left({}_{a^i}I^{\alpha_i}_{x^i} u^\mu\right)(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_i)} \int_{a^i}^{x^i} \frac{u^\mu(x_i(s))}{(x^i - s)^{1-\alpha_i}}\, ds. \tag{14}$$

Тогда если уравнение $x^i - a^i = 0$ инвариантно относительно группы G точечных преобразований (13), *то для преобразования дробного интеграла* (14) *под действием этой группы справедливо разложение*

$$\left({}_{a^i}I^{\alpha_i}_{\bar{x}^i} \bar{u}^\mu\right)(\bar{x}) = \left({}_{a^i}I^{\alpha_i}_{x^i} u^\mu\right)(x) + \mathfrak{a}\ {}_{+}\zeta^\mu_{-\alpha_i} + o(\mathfrak{a}), \tag{15}$$

где ${}_{+}\zeta^\mu_{-\alpha_i}$ определяется формулой продолжения

$${}_{+}\zeta^\mu_{-\alpha_i} = {}_{a^i}I^{\alpha_i}_{x^i} W^\mu + \xi^j \frac{\partial}{\partial x^j}\left({}_{a^i}I^{\alpha_i}_{x^i} u^\mu\right), \quad W^\mu = \eta^\mu - \xi^j \frac{\partial u^\mu}{\partial x^j}. \tag{16}$$

Представления (15), (16) дают возможность построить формулы продолжения для любых композиций операторов дифференцирования и дробного интегрирования. В частности, в работе доказаны соответствующие теоремы для лево- и правосторонних дробных производных Римана–Лиувилля и Капуто.

Методам нахождения симметрий дробно-дифференциальных уравнений посвящен **§5**. Сначала вводятся обобщения понятий дифференциальных переменных и дифференциальных функций.

Рассматриваются операторы трех типов, действующие независимо по каждой координате x^i $(i = 1, 2, \dots, n)$ вектора независимых переменных $x \in \Omega$: операторы полного дифференцирования D_i, операторы левостороннего дробного интегрирования $I_{i+}^{\alpha_i} \equiv {}_{a^i}I_{x^i}^{\alpha_i}$ порядка $\alpha_i \in (0,1)$ и операторы правостороннего дробного интегрирования $I_{i-}^{\beta_i} \equiv {}_{x^i}I_{b^i}^{\beta_i}$ порядка $\beta_i \in (0,1)$. Обозначим

$$B_i^{-1} = I_{i-}^{\beta_i}, \quad B_i^0 = D_i, \quad B_i^{+1} = I_{i+}^{\alpha_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \tag{17}$$

Определение 5.1. Переменные $u_{[k]}$, полученные в результате последовательного применения операторов B_i^δ $(\delta = \{-1, 0, +1\})$ из (17) к зависимым переменным u^μ и определяемые соотношениями

$$\begin{aligned} &u_{[1]} = \left\{u_{i_1}^{\mu\delta_1}\right\} \equiv \left\{B_{i_1}^{\delta_1}(u^\mu)\right\}, \quad u_{[2]} = \left\{u_{i_1 i_2}^{\mu\delta_1\delta_2}\right\} \equiv \left\{B_{i_2}^{\delta_2}B_{i_1}^{\delta_1}(u^\mu)\right\}, \ \dots \\ &u_{[k]} = \left\{u_{i_1 i_2\dots i_k}^{\mu\delta_1\delta_2\dots\delta_k}\right\} \equiv \left\{B_{i_k}^{\delta_k}\left(u_{i_1 i_2\dots i_{k-1}}^{\mu\delta_1\delta_2\dots\delta_{k-1}}\right)\right\} = \left\{B_{i_k}^{\delta_k}B_{i_{k-1}}^{\delta_{k-1}}\dots B_{i_1}^{\delta_1}(u^\mu)\right\}, \ \dots \\ &(i_1, i_2, \dots, i_k = 1, 2, \dots, n, \quad \delta_1, \delta_2, \dots, \delta_k = -1, 0, 1, \quad \mu = 1, 2, \dots, m), \end{aligned} \tag{18}$$

называются *линейными дробно-интегро-дифференциальными переменными.*

Определение 5.2. Аналитическая функция конечного числа переменных x, u, $u_{[1]}$, … называется *линейно-дробно-интегро-дифференциальной функцией.* Максимальный порядок k переменных вида (18), входящих в функцию

$$F = F\left(x, u, u_{[1]}, u_{[2]}, \dots, u_{[k]}\right) \quad (k < \infty),$$

называется *порядком* этой функции. Множество всех линейно-дробно-интегро-дифференциальных функций конечного порядка обозначается $\mathcal{F}$.

Утверждение 5.1. *Если $F \in \mathcal{F}$, то $D_i(F) \in \mathcal{F}$ $(i = 1, 2, \dots, n)$.*

Полученные в §4 формулы продолжения позволяют построить продолжение группы G преобразований (13) на все линейные дробно-интегро-дифференциальные переменные (18) до k-го порядка включительно. Инфинитезимальный оператор такой продолженной группы $G_{[k]}$ имеет вид

$$X_{[k]} = \xi^i \frac{\partial}{\partial x^i} + \eta^\mu \frac{\partial}{\partial u^\mu} + \sum_{s=1}^{k} \zeta_{i_1 i_2\dots i_s}^{\mu\delta_1\delta_2\dots\delta_s} \frac{\partial}{\partial u_{i_1 i_2\dots i_s}^{\mu\delta_1\delta_2\dots\delta_s}}, \tag{19}$$

$$\zeta_{i_1 i_2\dots i_s}^{\mu\delta_1\delta_2\dots\delta_s} = B_{i_s}^{\delta_s}\dots B_{i_2}^{\delta_2}B_{i_1}^{\delta_1}(W^\mu) + \xi^j D_j\left(u_{i_1 i_2\dots i_s}^{\delta_1\delta_2\dots\delta_s}\right), \quad W^\mu = \eta^\mu + \xi^i u_i^\mu.$$

Определение 5.3. Будем говорить, что система уравнений

$$F\left(x, u, u_{[1]}, u_{[2]}, \dots, u_{[k]}\right) = 0, \quad F = (F^1, F^2, \dots, F^p), \quad F^i \in \mathcal{F} \tag{20}$$

допускает некоторое преобразование T, если многообразие E, задаваемое этой системой в продолженном пространстве, инвариантно относительно преобразования $\tilde{T}$, являющегося продолжением преобразования T на все линейные дробно-интегро-дифференциальные переменные, входящие в систему (20). Если система уравнений вида (20) допускает любое преобразование некоторой группы G преобразований, то *система уравнений допускает группу G*.

Для нахождения симметрий дробно-дифференциальных уравнений множество переменных $u_{[k]}$ является избыточным, поскольку ДДУ порождают дополнительные скрытые связи между этими переменными.

Пример 5.1. Линейное ДДУ

$${}_0D_x^{\alpha+1}y + a\,{}_0D_x^{\alpha}y + by' + cy = 0, \quad \alpha \in (0, 1),$$

обладает общим решением вида $y(x) = C_1f_1(x) + C_2f_2(x)$, где $f_1(x)$ и $f_2(x)$ — два независимых его частных решения и C_1, C_2 — произвольные постоянные. Отсюда следует, что y' и ${}_0D_x^{\alpha}y$, являющиеся переменными вида $y_{[1]}$, не могут рассматриваться как независимые, поскольку в силу общего решения имеется дополнительная (скрытая) связь вида ${}_0D_x^{\alpha}y + g_1(x)y + g_2(x)y' = 0$.

Порождение дробно-дифференциальными уравнениями скрытых связей между дробно-интегро-дифференциальными переменными не позволяет применить к ним классический критерий инвариантности.

Пусть $\{F = 0\}$ — совокупность исходной системы уравнений $F = 0$ и всех порождаемых ею связей между дробно-интегро-дифференциальными переменными, входящими в функции $X_{[k]}F$. Тогда равенство

$$X_{[k]}F|_{\{F=0\}} = 0 \tag{21}$$

является *необходимым условием* того, что система ДДУ (20) допускает группу G точечных преобразований с инфинитезимальным оператором X. Данное условие не является достаточным, поскольку удовлетворяющее ему преобразование может переводить ДДУ в эквивалентное ему по решению. Этот факт иллюстрируется в работе примерами.

Для дробно-дифференциальных уравнений особую роль играют симметрии, известные как симметрии линейно-автономного вида:

$$X = \xi^i(x)\frac{\partial}{\partial x^i} + \left[\eta_0^{\mu}(x) + u^{\nu}\eta_{\nu}^{\mu}(x)\right]\frac{\partial}{\partial u^{\mu}}. \tag{22}$$

В конце §5 приводится итерационный алгоритм нахождения симметрий ДДМ, первый шаг которого предполагает нахождение симметрий вида (22), затем с их использованием находятся скрытые связи между переменными, после чего находятся симметрии более общего вида.

В **§6** проводится симметрийный анализ нелинейной модели аномальной диффузии с источником следующего вида:

$$ {}_0D_t^{\alpha}u = (k(u)u_x)_x + f(u), \quad k(u) > 0, \quad \alpha \in (0,2). \tag{23} $$

С точностью до найденных преобразований эквивалентности проведена групповая классификация уравнения (23) относительно функций $k(u) > 0$ и $f(u)$, показавшая, что это уравнение обладает только линейно-автономными точечными симметриями. Размерность допускаемой группы в случае нелинейного уравнения (23) не превышает четырех. Для каждого случая групповой классификации построена оптимальная система одномерных подалгебр, для каждой подалгебры проведена симметрийная редукция, выписаны соответствующие редуцированные уравнения и найдены их некоторые точные решения.

В **§7** на примере простейшего уравнения ${}_0D_x^{\alpha+1}y = 0,\ \alpha \in (0,1)$ показано, что построенные в §4 формулы продолжения могут быть успешно использованы для нахождения нелокальных симметрий. Найдены четыре нелокальные симметрии этого уравнения:

$$ \begin{aligned} X_1 &= \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y^{(\alpha-1)}(0)x^{\alpha-2}}{\Gamma(\alpha-1)}\frac{\partial}{\partial y}, \\ X_2 &= y^{(\alpha-1)}\frac{\partial}{\partial x} + \left((\alpha-1)yy^{(\alpha)} - \frac{y^{(\alpha)}y^{(\alpha-1)}(0)x^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha-1)} + \frac{y^{(\alpha-1)}y^{(\alpha-1)}(0)x^{\alpha-2}}{\Gamma(\alpha-1)}\right)\frac{\partial}{\partial y}, \\ X_3 &= x^2\frac{\partial}{\partial x} + [(2\alpha-1)xy + (1-\alpha^2)Iy]\frac{\partial}{\partial y}, \\ X_4 &= xy^{(\alpha-1)}\frac{\partial}{\partial x} + [\alpha yy^{(\alpha-1)} - (1-\alpha)xyy^{(\alpha)} + (1-\alpha^2)y^{(\alpha)}Iy]\frac{\partial}{\partial y}, \end{aligned} $$

где $y^{(\alpha-1)} \equiv {}_0I_x^{1-\alpha}y,\ y^{(\alpha)} \equiv {}_0D_x^{\alpha}y,\ Iy \equiv {}_0I_xy$. Доказано, что все найденные нелокальные симметрии удовлетворяют необходимому условию инвариантности (21).

В **третьей главе** решается задача нахождения законов сохранения по известным симметриям дробно-дифференциальных моделей.

В области Ω (12) рассматривается функционал

$$ \Phi[u] = \int_{\Omega} \mathcal{L}(x, u, u_{[1]}, u_{[2]}, \ldots, u_{[k]})dx, \quad \mathcal{L} \in \mathcal{F}. \tag{24} $$

Предполагается, что $u(x)$ удовлетворяет заданным граничным условиям, согласованным с входящими в $\mathcal{L}$ дробно-интегро-дифференциальными операторами. Доказано, что соответствующее функционалу (24) уравнение Эйлера–

Лагранжа имеет вид
$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta u} = 0, \tag{25}$$
в котором оператор вариационной производной $\delta/\delta u$ определяется как
$$\frac{\delta}{\delta u} = \frac{\partial}{\partial u} + \sum_{s=1}^{k} \left(B^{\delta_1}_{i_1}\right)^* \left(B^{\delta_2}_{i_2}\right)^* \ldots \left(B^{\delta_s}_{i_s}\right)^* \frac{\partial}{\partial u^{\delta_1\delta_2\ldots\delta_s}_{i_1 i_2 \ldots i_s}}. \tag{26}$$

Доказано следующее дробно-дифференциальное обобщение фундаментального операторного тождества (тождества Нётер).

Теорема 8.1. *Справедливо равенство*
$$X_{[k]}(F) + D_i(\xi^i)F = W\frac{\delta F}{\delta u} + D_i(\mathcal{N}^i_{[k]}F), \quad W = \eta - \xi^i u_i, \quad F \in \mathcal{F}, \tag{27}$$
где операторы $X_{[k]}$ *и* $\delta/\delta u$ *имеют, соответственно, вид* (19) *и* (26), *а дробно-дифференциальные операторы Нётер* $\mathcal{N}^i_{[k]}$ *определяются равенствами*
$$\mathcal{N}^i_{[k]}F = \xi^i F + J^{\delta_1}_{(i)}\left\{W, \frac{\partial F}{\partial u^{\delta_1}_i}\right\} + \sum_{s=2}^{k}\left[J^{\delta_1}_{(i)}\left\{W, \left(B^{\delta_2}_{j_2}\right)^* \ldots \left(B^{\delta_s}_{j_s}\right)^* \frac{\partial F}{\partial u^{\delta_1\delta_2\ldots\delta_s}_{i j_2\ldots j_s}}\right\} + \right.$$
$$\left. + \sum_{r=2}^{s} J^{\delta_r}_{(i)}\left\{B^{\delta_{r-1}}_{j_{r-1}} \ldots B^{\delta_1}_{j_1}(W), \left(B^{\delta_{r+1}}_{j_{r+1}}\right)^* \ldots \left(B^{\delta_s}_{j_s}\right)^* \frac{\partial F}{\partial u^{\delta_1\ldots\delta_{r-1}\delta_r\delta_{r+1}\ldots\delta_s}_{j_1\ldots j_{r-1} i j_{r+1}\ldots j_s}}\right\}\right] \tag{28}$$
$$(i = 1, 2, \ldots, n, \quad k = 1, 2, \ldots).$$
Здесь оператор $J^{\delta}_{(i)}$ *действует на упорядоченную пару функций* $\{f(x), g(x)\}$ $(x \in \Omega)$ *по правилу*
$$J^{\delta}_{(i)}\{f, g\} = \begin{cases} -\dfrac{1}{\Gamma(\alpha_i)} \displaystyle\int_{a^i}^{x^i}\int_{x^i}^{b^i} \frac{f(x_i(t))\, g(x_i(s))}{(s-t)^{1-\alpha_i}} ds dt, & \delta = +1; \\ fg, & \delta = 0; \\ \dfrac{1}{\Gamma(\beta_i)} \displaystyle\int_{a^i}^{x^i}\int_{x^i}^{b^i} \frac{f(x_i(s))\, g(x_i(t))}{(s-t)^{1-\beta_i}} ds dt, & \delta = -1. \end{cases}$$

Тождество (27) дает возможность доказать дробно-дифференциальные аналоги теоремы Нётер, а операторы (28) дают конструктивный алгоритм построения законов сохранения.

Теорема 8.2 (обобщение теоремы Нётер). *Пусть* $\mathcal{L} \in \mathcal{F}$ *и элементарное действие* $\mathcal{L}dx$ *инвариантно относительно группы точечных преобразований с оператором* $\tilde{X}_{[k]} = X_{[k]} + D_i(\xi^i)dx\frac{\partial}{\partial\,(dx)}$. *Тогда функции*
$$C^i = \mathcal{N}^i_{[k]}\mathcal{L} \quad (i = 1, 2, \ldots, n), \tag{29}$$

где операторы $\mathcal{N}^i_{[k]}$ *определяются по* (28)*, являются компонентами сохраняющегося вектора для уравнения Эйлера–Лагранжа* (25)*, то есть удовлетворяют закону сохранения* $D_i(C^i) = 0$.

Далее в работе приводятся примеры использования данных теорем для построения законов сохранения ДДМ, имеющих лагранжиан. Тем не менее, большинство ДДМ не имеет классического лагранжиана, поэтому для построения их законов сохранения выполнено дробно-дифференциальное обобщение принципа нелинейной самосопряженности.

Определение 8.2. Функция

$$\mathcal{L} = vF\left(x, u, u_{[1]}, u_{[2]}, \ldots, u_{[k]}\right), \quad v = v(x, u, u_{[1]}, \ldots) \tag{30}$$

называется *формальным лагранжианом* для уравнения $F = 0$ $(F \in \mathcal{F})$.

Определение 8.3. ДДУ $F = 0$ $(F \in \mathcal{F})$ будет называться *нелинейно-самосопряженным*, если после некоторой подстановки

$$v = \varphi(x, u, u_{[1]}, \ldots), \quad v \neq 0, \tag{31}$$

сопряженное уравнение $F^*(x, u, v, \ldots) \equiv \delta\mathcal{L}/\delta u = 0$ с $\mathcal{L}$ из (30), удовлетворяется тождественно для всех решений исходного уравнения.

Утверждение 8.1. *Любое линейное ДДУ является нелинейно самосопряженным.*

Для нелинейно самосопряженных уравнений законы сохранения могут быть построены по (29), в которых $\mathcal{L}$ — формальный лагранжиан (30).

В **§9** строятся законы сохранения для ДДМ аномальной диффузии с дробными производными Римана–Лиувлля и Капуто по времени:

$${}_0\mathcal{D}^\alpha_t u = (k(u)u_x)_x, \quad \alpha \in (0, 2), \quad t \in (0, T]\ (T \leq \infty), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}. \tag{32}$$

Доказано, что нелинейное $k(u) \neq const$ уравнение (32) является нелинейно самосопряженным. При этом если ${}_0\mathcal{D}^\alpha_t u$ — дробная производная Римана–Лиувилля, то подстановка (31) имеет вид

$$v(t, x) = \begin{cases} c_1 + c_2 x, & \alpha \in (0, 1); \\ c_1 + c_2 x + (c_3 + c_4 x)t, & \alpha \in (1, 2), \end{cases}$$

а если ${}_0\mathcal{D}^\alpha_t u$ — дробная производная Капуто, то

$$v(t, x) = \begin{cases} (T - t)^{\alpha - 1}(c_1 + c_2 x), & \alpha \in (0, 1); \\ (T - t)^{\alpha - 2}\left[c_1 + c_3 x + (T - t)(c_2 + c_4 x)\right], & \alpha \in (1, 2). \end{cases}$$

Здесь c_i $(i = 1, 2, 3, 4)$ — произвольные постоянные.

Найдены все законы сохранения уравнения (32), соответствующие каждому оператору для каждого случая групповой классификации этого уравнения. В частности, для случая дробной производной Римана–Лиувилля законы сохранения диффузионно-волнового уравнения ($\alpha \in (1,2)$) представлены в таблице 1.

Таблица 1 Сохраняющиеся векторы для ДДУ (32) с дробной производной Римана–Лиувилля порядка $\alpha \in (1,2)$

№	C^t	C^x
1.	${}_0D_t^{\alpha-1}u$	$-k(u)u_x$
2.	$t\,{}_0D_t^{\alpha-1}u - {}_0I_t^{2-\alpha}u$	$-tk(u)u_x$
3.	$x\,{}_0D_t^{\alpha-1}u$	$K(u) - xk(u)u_x$
4.	$tx\,{}_0D_t^{\alpha-1}u - x\,{}_0I_t^{2-\alpha}u$	$tK(u) - txk(u)u_x$
5.	$t^2\,{}_0D_t^{\alpha-1}u - 2t\,{}_0I_t^{2-\alpha}u + 2{}_0I_t^{3-\alpha}u$	$-t^2k(u)u_x$
6.	$t^2x\,{}_0D_t^{\alpha-1}u - 2tx\,{}_0I_t^{2-\alpha}u + 2x\,{}_0I_t^{3-\alpha}u$	$t^2K(u) - t^2xk(u)u_x$

В **§10** рассматривается четыре дробно-дифференциальных обобщения уравнения Компанейца, являющегося моделью фотонной диффузии. Найдены симметрии различных частных случаев этих уравнений, доказана их нелинейная самосопряженность, построены законы сохранения. Также с использованием метода законов сохранения, предложенного Н. Х. Ибрагимовым, найдены частные решения этих уравнений и показано, что часть из них не является инвариантно-групповыми. Например, нелинейная ДДМ типа Компанейца

$$ {}_0D_t^{\alpha}u_t = x^{-2}D_x\left[x^4\left(u_x + u^2\right)\right] \tag{33} $$

обладает единственной симметрией $X_1 = x\frac{\partial}{\partial x} - u\frac{\partial}{\partial u}$ и является нелинейно-самосопряженным уравнением с подстановкой (31) с $\varphi = (A(T-t)^{\alpha} + B)x^2$. Координаты соответствующего сохраняющегося вектора имеют вид

$$ C^t = x^2\,{}_0I_t^{1-\alpha}u_t, \quad C^x = -x^4(u_x + u^2), $$

который дает следующие неинвариантные решения уравнения (33):

$$ u(t,x) = x^{-2}\left[x + C_1\operatorname{th}\left(C_2 - C_1x^{-1}\right)\right], \;\; u(t,x) = (x + C_5)^{-1}, $$

$$ u(t,x) = x^{-2}\left[x - C_3\operatorname{tg}\left(C_4 - C_3x^{-1}\right)\right], \;\; u(t,x) = x^{-2}\left(x + C_6t^{\alpha} + C_7\right), $$

где C_i $(i = 1,2,\ldots,7)$ — произвольные постоянные.

В **четвертой главе** рассматриваются ДДМ, в которых порядок дробного дифференцирования близок к целому числу. Это дает возможность введения в модель малого параметра, по которому возможно разложение операторов дробного дифференцирования. В результате такая ДДМ может быть приближена уравнением в целых производных с малым параметром. В **§11** доказано

Утверждение 11.1. *Пусть функция $f(x)$ аналитична в интервале (a,b) и для нее существует левосторонняя дробная производная Римана–*

Лиувилля ${}_aD_x^\alpha f$. *Тогда, если параметр* ε *связан с порядком дробного дифференцирования* $\alpha > 0$ *соотношением* $\alpha = n \pm \varepsilon$ ($n = [\alpha] + 1$ *при* $\{\alpha\} \geq 0.5$ *и* $n = [\alpha]$ *при* $\{\alpha\} < 0.5$), *то при* $\varepsilon \to 0$ *справедливо разложение*

$$
{}_aD_x^\alpha f \equiv {}_aD_x^{n\pm\varepsilon} f = f^{(n)}(x) \pm \varepsilon \Bigg\{ [\psi(n+1) - \ln(x-a)]\, f^{(n)}(x) - \\
- \sum_{\substack{k=0 \\ k\neq n}}^{\infty} \frac{(-1)^{k-n}}{(k-n)} \frac{n!}{k!} (x-a)^{k-n} f^{(k)}(x) \Bigg\} + O(\varepsilon^2), \quad (34)
$$

где $\psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$ *— логарифмическая производная гамма-функции.*

Разложения, аналогичные (34), получены также для правосторонней дробной производной Римана–Лиувилля и производных Капуто.

Полученные разложения могут быть использованы для нахождения приближенных решений ДДМ.

Пример 11.1. Нелинейное ДДУ

$$
{}_0D_x^\alpha y = y^2, \quad \alpha \in (0,1),
$$

точное решение которого не известно, при условии $\alpha = 1 - \varepsilon$ ($\varepsilon \ll 1$) может быть приближено уравнением с малым параметром

$$
y' + \varepsilon y^2 \left[\ln x + \gamma - 1 + (xy)^{-1} - \ln(1 + xy) \right] - y^2 = O(\varepsilon^2),
$$

приближенное решение которого находится в явном виде:

$$
y(x) = \frac{1}{C-x} + \varepsilon \left[\frac{\ln(C-x) - 1}{C-x} - \frac{C+x}{(C-x)^2} \ln x + \frac{3 - \gamma + \ln C}{(C-x)^2} x \right] + O(\varepsilon^2)
$$

(здесь произвольная постоянная $C \equiv C(\varepsilon) = C_{(0)} + \varepsilon C_{(1)} + O(\varepsilon^2)$).

Для исследования дифференциальных уравнений, полученных в результате разложения дробных производных по малому параметру, могут быть применены методы приближенного группового анализа. В §11 найдены все приближенные симметрии уравнения, полученного из ДДМ

$$
{}_0D_x^{2-\varepsilon} y = y^\sigma \quad (\sigma \neq 0,\, 1). \quad (35)
$$

В частности, показано, что при $\sigma = \varepsilon\sigma_{(1)}$ такое приближенное уравнение будет обладать устойчивой симметрией

$$
X = \frac{\partial}{\partial x} - \varepsilon \left[\frac{y}{x} - \frac{x}{2} + 2\sigma_{(1)} \ln x \right] \frac{\partial}{\partial y},
$$

не имеющей аналога среди точных симметрий уравнения (35).

В **§12** проведена полная групповая классификация по приближенным симметриям уравнения с малым параметром

$$u_t + \varepsilon\left[(\ln t + \gamma - 1)u_t + \frac{u}{t} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n t^n}{n(n+1)!}D_t^{n+1}u\right] =$$
$$= k_{(0)}(u)u_{xx} + k'_{(0)}(u)u_x^2 + \varepsilon[k_{(1)}(u)u_{xx} + k'_{(1)}(u)u_x^2], \quad (36)$$

полученного из нелинейной ДДМ субдиффузии вида (23) при $f(u) = 0$ в предположении справедливости разложения $k(u) = k_{(0)}(u) + \varepsilon k_{(1)}(u)$. В частности, показано, что в отличие от ДДМ (23), в котором случай $k(u) = e^u$ не приводит к расширению основной группы, приближенная группа уравнения (36) при $k(u) = e^u[1+\varepsilon(1+A_1u+A_2u^2)]$ расширяется устойчивой симметрией

$$X = [1 - \varepsilon(\ln t - 2 - A_1)]t\frac{\partial}{\partial t} - [1 - \varepsilon(\ln t + 2A_2u)]\frac{\partial}{\partial u}.$$

Таким образом, полученные в результате разложения дробных производных по малому параметру приближенные модели могут обладать более широкой группой симметрий, что дает возможность построения приближенно инвариантных решений, которые не могут быть получены из разложения по малому параметру точных инвариантных решений исходных ДДМ.

Недостатком разложения (34) является его непригодность в окрестности границы $x = a$, что не позволяет использовать его для нахождения приближенных решений соответствующих начальных и граничных задач. Поэтому в **§13** развит двухмасштабный подход к разложению дробных производных. Вводятся второй масштаб $x_1 = (x-a)^\varepsilon$ и новая зависимая переменная z:

$$f(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\Gamma(1-\varepsilon)}\dfrac{z(x,x_1)}{x_1}, & \alpha = n - \varepsilon \quad (\{\alpha\} \ge 0.5,\ n = m); \\ \dfrac{1}{\Gamma(1+\varepsilon)}x_1 z(x,x_1), & \alpha = n + \varepsilon \quad (\{\alpha\} < 0.5,\ n = m-1). \end{cases} \quad (37)$$

Утверждение 13.1. *Пусть $f(x)$ и $z(x,x_1)$ связаны соотношением* (37). *Тогда для левосторонней дробной производной ${}_aD_x^{n\pm\varepsilon}f$ справедливо следующее двухмасштабное разложение:*

$$\left({}_aD_x^{n\pm\varepsilon}f\right)(x) = \frac{\partial^n z}{\partial x^n} + \varepsilon x_1\sum_{p=0}^{n-1}\binom{n}{p}\frac{(-1)^{n-p-1}(n-p-1)!}{(x-a)^{n-p}}\frac{\partial^p}{\partial x^p}\frac{\partial z}{\partial x_1} \pm$$
$$\pm\,\varepsilon\left[(\psi(n+1)+\gamma)\frac{\partial^n z}{\partial x^n} - \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k n!}{k(k+n)!}(x-a)^k\frac{\partial^{k+n}z}{\partial x^{k+n}}\right] + O(\varepsilon^2). \quad (38)$$

Получено также разложение с точностью $O(\varepsilon^3)$, необходимое для решения соответствующих приближенных задач типа Коши. На основе разложений вида (38) предложен алгоритм приближенного решения задачи типа Коши для ДДМ, работоспособность которого проиллюстрирована рядом примеров.

Пример 13.1. Рассмотрим задачу типа Коши

$$ {}_0D_x^{\alpha} y = y^2, \quad \alpha \in (0,1); \qquad ({}_0I_x^{1-\alpha} y)(0) = C_0, \quad C_0 \neq 0. \tag{39}$$

При $\alpha = 1-\varepsilon$ $(0 < \varepsilon \ll 1)$ имеем $x_1 = x^{\varepsilon}$, $z(x, x_1) = \Gamma(\alpha) x_1 y(x)$. В результате применения двухмасштабного разложения, при $z = z_{(0)} + \varepsilon z_{(1)} + \varepsilon^2 z_{(2)} + O(\varepsilon^3)$, было получено следующее приближенное решение задачи (39):

$$ y(x) \approx \frac{z_{(0)} + \varepsilon z_{(1)}}{\Gamma(\alpha) x_1} \approx \frac{C_0}{\Gamma(\alpha)} \frac{x^{\alpha-1}}{1 - C_0 x^{2\alpha-1}} \times $$
$$ \times \left\{ 1 + (1-\alpha) \left[2(2-\gamma) \frac{C_0 x^{2\alpha-1}}{1 - C_0 x^{2\alpha-1}} + \ln(1 - C_0 x^{2\alpha-1}) \right] \right\}. $$

Пятая глава посвящена решению задачи параметрической идентификации ДДМ аномальной диффузии. В **§14** метод временных интегральных характеристик обобщается на случай ДДМ на примере задачи идентификации постоянных параметров семейства линейных моделей аномальной диффузии

$$ {}_0\mathcal{D}_t^{\alpha} u = k u_{xx} + f(t) g(x), \quad x \in (a,b), \quad t > 0, \quad \alpha \in (0,1) \cup (1,2). \tag{40}$$

При использовании в (40) в качестве ${}_0\mathcal{D}_t^{\alpha} u$ дробной производной Римана–Лиувилля, начальные условия ставятся в виде

$$ \begin{aligned} &{}_0I_t^{m-\alpha} u|_{t=0} = \psi_0(x), \quad x \in (a,b), \quad \alpha \in (0,2), \quad m = [\alpha] + 1; \\ &{}_0D_t^{\alpha-1} u|_{t=0} = \psi_1(x), \quad x \in (a,b), \quad \alpha \in (1,2), \end{aligned} \tag{41}$$

а в случае использования дробной производной Капуто — имеют вид

$$ \begin{aligned} &u|_{t=0} = \varphi_0(x), \quad x \in (a,b), \quad \alpha \in (0,2), \\ &u_t|_{t=0} = \varphi_1(x), \quad x \in (a,b), \quad \alpha \in (1,2). \end{aligned} \tag{42}$$

Для ряда частных случаев построены явные интегральные представления искомых коэффициентов k и α через временные интегральные характеристики, определяемые преобразованием Лапласа

$$ u^*(x,p) = \int_0^{\infty} e^{-pt} u(x,t) dt. $$

В частности, доказано

Утверждение 14.1 *Пусть в уравнении* (40) $g(x) = 1$ *и в случае использования дробной производной Римана–Лиувилля начальные условия* (41) *постоянны:* $\psi_0(x) = \psi_0 = const$, $\psi_1(x) = \psi_1 = const$, *а при использовании дробной производной Капуто начальные условия* (42) *являются линейными функциями пространственной координаты:* $\varphi_j(x) = \varphi_j^0 + (x-a)\varphi_j^1$ $(j = 0, 1)$. *Если в качестве априорной информации о решении известны значения* $u_{l_i}(t)$ *в двух внутренних точках области* $l_1 = L/3$ *и* $l_2 = 2L/3$, *то имеют место следующие интегральные представления:*

$$k = \frac{L^2\Psi(p)}{9\mathrm{Arch}^2\Phi(p)}, \quad \alpha = \log_p \Psi(p), \tag{43}$$

где

$$\Phi(p) = \frac{\vartheta_L(p) - \vartheta_0(p)}{\vartheta_{2L/3}(p) - \vartheta_{L/3}(p)} - \frac{1}{2}, \quad \Psi(p) = \frac{4F(p)(\Phi(p) - 1)}{\theta(p)},$$

$$\theta(p) = 2(\vartheta_{L/3} + \vartheta_{2L/3})\Phi(p) - \left(\vartheta_0(p) + \vartheta_{L/3}(p) + \vartheta_{2L/3}(p) + \vartheta_L(p)\right).$$

Здесь $F(p) = f^*(p) + \delta h(p)$,

$$\delta = \begin{cases} 1, & {}_0\mathcal{D}_t^\alpha = {}_0D_t^\alpha; \\ 0, & {}_0\mathcal{D}_t^\alpha = {}_0^C D_t^\alpha, \end{cases} \quad h(p) = \begin{cases} \psi_0, & \alpha \in (0, 1); \\ \psi_1 + p\psi_0, & \alpha \in (1, 2), \end{cases}$$

$$\vartheta_{jL}(p) = \begin{cases} u^*_{a+jL}(p), & {}_0\mathcal{D}_t^\alpha = {}_0D_t^\alpha; \\ u^*_{a+jL}(p) - \dfrac{p(\varphi_0^0 + jL\varphi_0^1) + \varphi_1^0 + jL\varphi_1^1}{p^2}, & {}_0\mathcal{D}_t^\alpha = {}_0^C D_t^\alpha \end{cases} \left(j = 0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 1\right).$$

Интегральные представления (43) *существуют только при* $F(p) \neq 0$.

Для полученных интегральных представлений построены теоретические оценки точности идентификации. В частности, справедливо

Утверждение 14.2. *В условиях утверждения* 14.1, *при использовании в уравнении* (40) *дробной производной Римана–Лиувилля, линейные оценки относительной погрешности идентификации коэффициента аномальной диффузии* k *и порядка дробного дифференцирования* α *по интегральным представлениям* (43) *определяются значениями верхних границ* Δ_u, Δ_f, Δ_{ψ_0}, Δ_{ψ_1} *и* Δ_L *абсолютных погрешностей задания функций* $u(x,t)$, $f(t)$ *и постоянных* ψ_0, ψ_1, L:

$$\frac{|d\alpha|}{\alpha} \leq \frac{1}{|\ln\Psi(p)|}\left[\frac{\Delta_h}{h} + \frac{4\Delta_u(\Phi(p)+1)}{p|\psi(p)|} + \right.$$
$$\left. + \frac{\Delta_u(2\Phi(p)+3)}{p\left|u^*_{2L/3}(p) - u^*_{L/3}(p)\right|}\left(\frac{1}{\Phi(p)-1} + \frac{2(u^*_{2L/3}(p) + u^*_{L/3}(p))}{|\psi(p)|}\right)\right] \equiv \bar{\delta}_\alpha(p);$$

$$\frac{|dk|}{k} \le 2\frac{\Delta_L}{L} + |\ln\Psi(p)|\delta_\alpha(p) + \frac{2\Delta_u(2\Phi(p)+3)}{p\sqrt{\Phi^2(p)-1}\mathrm{Arch}\Phi(p)|u^*_{2L/3}-u^*_{L/3}|} \equiv \bar{\delta}_k(p),$$

где

$$\Delta_h = \begin{cases} p^{-1}\Delta_f + \Delta_{\psi_0}, & \alpha \in (0,1); \\ p^{-1}\Delta_f + \Delta_{\psi_1} + p\Delta_{\psi_0}, & \alpha \in (1,2). \end{cases}$$

На основе полученных оценок предложены различные алгоритмы определения значения параметра преобразования Лапласа p, выступающего в данном подходе в роли параметра регуляризации.

В **§15** приводятся результаты вычислительных экспериментов по идентификации параметров модели аномальной диффузии на основе полученных интегральных представлений, подтверждающие работоспособность и эффективность подхода.

Для использования построенных явных интегральных представлений коэффициентов диффузионной ДДМ значения $u(x,t)$ должны быть известны в строго определенных внутренних точках области, граничные и начальные условия должны иметь заданный вид. На практике эти условия далеко не всегда могут быть выполнены. Поэтому в **§16** предложены два численных алгоритма идентификации, основанные на методе временных интегральных характеристик, свободные от указанных ограничений. Первый алгоритм использует информацию о величине погрешности задания исходных данных, второй алгоритм применим в случае, когда оценки таких погрешностей неизвестны или недостоверны. Разработанные алгоритмы идентификации реализованы программно и включены в программный комплекс компьютерного моделирования процессов аномальной диффузии.

В **§17** приводятся описание разработанного программного комплекса и результаты его тестирования. Комплекс реализован в системе компьютерной математики Maple и состоит из двух пакетов расширения: АД-НКЗ [22], предназначенного для решения начально-краевых задач для ДДМ аномальной диффузии, и АД-ВИХ [21], предназначенного для параметрической идентификации этих моделей методом временных интегральных характеристик. Каждый пакет состоит из набора процедур, разделенных на четыре группы: 1) расчетные процедуры, реализующие разработанные алгоритмы, 2) процедуры обработки результатов расчетов, 3) процедуры ввода-вывода данных, 4) процедуры графического пользовательского интерфейса. Комплекс обладает графическим пользовательским интерфейсом, реализованным с помощью технологии Maplets системы Maple. Отличительными особенностями комплекса являются возможность задания исходных функциональных зависимостей в аналитическом виде и символьное выполнение большинства шагов реализованных в нем численно-аналитических алгоритмов.

Шестая глава посвящена разработке параллельных численных алгоритмов для исследования моделей аномальной диффузии. В **§18** приводится модификация алгоритма Шварца для решения уравнения субдиффузии. Пусть область $\Omega = (-\infty, \infty)$ разбивается на две (возможно, неперекрывающиеся) подобласти $\Omega_1 = (-\infty, L]$ и $\Omega_2 = [0, \infty)\,,\ L \geq 0$. Обозначим через $u_i\,(x,t)$ решение в подобласти Ω_i $(i = 1, 2)$. Декомпозиция задачи Коши для уравнения субдиффузии имеет вид

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial u_i\,(x,t)}{\partial t} = K\,{}_0D_t^{\alpha}\left(\frac{\partial^2 u_i\,(x,t)}{\partial x^2}\right) + f\,(x,t)\,,\ x \in \Omega_i,\ t > 0,\ \alpha \in (0,1);\\
&u_i\,(x,0) = g\,(x)\,,\ x \in \Omega_i,\ i = 1,2.
\end{aligned} \tag{44}$$

Условия на границах $x = 0$ и $x = L$ пересечения подобластей Ω_1 и Ω_2:

$$\begin{aligned}
(B + \Lambda_1)\,u_1\,(x,t)\big|_{x=L} &= (B + \Lambda_1)\,u_2\,(x,t)\big|_{x=L}\,,\\
(B + \Lambda_2)\,u_2\,(x,t)\big|_{x=0} &= (B + \Lambda_2)\,u_1\,(x,t)\big|_{x=0}\,,
\end{aligned} \tag{45}$$

где Λ_1 и Λ_2 — подлежащие определению линейные дробно-дифференциальные операторы, действующие по временной переменной t, $B = K\,{}_0D_t^{\alpha}(\partial/\partial x)$.

Утверждение 18.1. *Пусть операторы Λ_1 и Λ_2 имеют вид*

$$\Lambda_1 = \sqrt{K}\,{}_0D_t^{\frac{1+\alpha}{2}}, \qquad \Lambda_2 = -\sqrt{K}\,{}_0D_t^{\frac{1+\alpha}{2}}.$$

Тогда итерационный процесс метода Шварца для задачи (44), (45) *сходится не более чем за две итерации независимо от начального приближения и глубины перекрытия L.*

Утверждение 18.1 обобщается на случай разбиения области на N подобластей, при этом сходимость достигается не более чем за N итераций.

На основе полученной декомпозиции построен параллельный алгоритм и доказано, что он имеет асимптотически линейное ускорение с увеличением номера временного слоя.

В **§19** развит двухсеточный подход к построению параллельных алгоритмов на примере ДДМ аномальной диффузии, учитывающей одновременно эффекты памяти и пространственной нелокальности:

$$\begin{gathered}
{}_0D_t^{\alpha}u = \sigma K_0 D_x^{1+\beta}u + (1-\sigma)K_x D_L^{1+\beta}u + f(x,t,u),\\
u = u(x,t), \quad t \in (0,T], \quad x \in (0,L), \quad \alpha,\, \beta,\, \sigma \in (0,1).
\end{gathered} \tag{46}$$

В расчетной области $\bar{\Omega} = [0,L] \times [0,T]$ вводится «грубая» сетка:

$$\omega_G = \{(X_k = k\Delta X,\, T_l = l\Delta T),\, k = 0,1,\ldots,N,\, l = 0,1,\ldots,M,\\ \Delta X = L/N,\, \Delta T = T/M\}.$$

Ячейки, образованные соседними узлами грубой сетки, рассматриваются как самостоятельные расчетные подобласти $\bar{\Omega}_{k,l} = [X_{k-1}, X_k] \times [T_{l-1}, T_l]$.

Дробные производные, входящие в уравнение (46), для $(t, x) \in \Omega_{k,l}$ записываются как

$$ {}_0D_t^{\alpha} u = {}_{T_{l-1}}D_t^{\alpha} u + {}_0I_{T_{l-1}} u, $$

$$ {}_0D_x^{1+\beta} u = {}_{X_{k-1}}D_x^{1+\beta} u + {}_0J_{X_{k-1}} u, \quad {}_xD_L^{1+\beta} u = {}_xD_{X_k}^{1+\beta} u + {}_{X_k}J_L u, $$

где

$$ {}_0I_{T_{l-1}} u = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \int_0^{T_{l-1}} \frac{u(x, \tau)}{(t-\tau)^{\alpha+1}} d\tau, $$

$$ {}_0J_{X_{k-1}} u = \frac{1}{\Gamma(-\beta-1)} \int_0^{X_{k-1}} \frac{u(\xi, t)}{(x-\xi)^{\beta+2}} d\xi, \quad {}_{X_k}J_L u = \frac{1}{\Gamma(-\beta-1)} \int_{X_k}^{L} \frac{u(\xi, t)}{(\xi-x)^{\beta+2}} d\xi. $$

Тогда уравнение (46) для каждой подобласти $\Omega_{k,l}$ примет вид

$$ {}_{T_{l-1}}D_t^{\alpha} u = \sigma K \, {}_{X_{k-1}}D_x^{1+\beta} u + (1-\sigma) K \, {}_xD_{X_k}^{1+\beta} u + f(x, t, u) + L_{k,l} u, $$

где

$$ L_{k,l} = \sigma K \, {}_0J_{X_{k-1}} + (1-\sigma) K \, {}_0J_{X_{k-1}} - {}_0I_{T_{l-1}} $$

— линейный интегральный оператор. Слагаемое $L_{k,l}u$ для подобласти $\Omega_{k,l}$ отвечает за эффекты дальнодействия, поскольку для его вычисления используются значения функции $u(x,t)$ при $(x,t) \notin \Omega_{k,l}$.

Затем в каждой подобласти $\Omega_{k,l}$ вводится «точная» расчетная сетка.

Предложен двухсеточный параллельный алгоритм с декомпозицией по пространству, обеспечивающий сохранение точности вычислений за счет кубической сплайн-интерполяции искомой функции по значениям в узлах грубой сетки и аппроксимации многочленами второй и третьей степени искомой функции на точной сетке для вычисления дробных производных по пространственной переменной в окрестности границ подобластей $\Omega_{i,j}$. Это дает возможность вычислить аналитически основную составляющую дробной производной, а с помощью конечно-разностной аппроксимации рассчитывать лишь относительно небольшие поправки. При вычислении дробных производных осуществляется сдвиг искомой функции на величину соответствующего граничного значения:

$$ {}_{X_{k-1}}D_x^{1+\beta} u = {}_{X_{k-1}}D_x^{1+\beta} \left[u(x,t) - u(X_{k-1}, t) \right] + \frac{u(X_{k-1}, t)}{\Gamma(-\beta)(x - X_{k-1})^{\beta+1}}, $$

$$ {}_xD_{X_k}^{1+\beta} u = {}_xD_{X_k}^{1+\beta} \left[u(x,t) - u(X_k, t) \right] + \frac{u(X_k, t)}{\Gamma(-\beta)(X_k - x)^{\beta+1}}. $$

Также предложена дробно-дифференциальная модификация алгоритма PARAREAL, обеспечивающего распараллеливание по временной переменной.

В **§20** приводятся теоретические оценки эффективности разработанных параллельных алгоритмов. Пусть количество параллельных вычислителей равно количеству пространственных подобластей $P = N$.

Утверждение 20.1. *Для ускорения S_p параллельного алгоритма с декомпозицией по пространству при $N \ll n$ справедлива оценка*

$$S_p \leq \frac{N(2Nn + M)}{2n + M},$$

где N и M — количество узлов грубой расчетной сетки по пространственной и временной переменным, n — количество узлов точной сетки по пространственной переменной в каждой расчетной подобласти.

Утверждение 20.2. *Для ускорения S_p параллельного алгоритма с декомпозицией по времени при $N \ll n$ и $M \ll m$ справедлива оценка*

$$S_p \leq \frac{MN(2Nn + Mm)}{R(2n + m)},$$

где N и M — количество узлов грубой расчетной сетки по пространственной и временной переменным, n и m — аналогичные параметры точной сетки для каждой расчетной подобласти, R — максимальное количество внутренних итераций алгоритма на одном временном шаге.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Развита проекционная техника построения ДДМ неравновесных процессов в системах со степенной памятью. Для статистического ансамбля таких систем, на основе понятия эквивалентности уравнений по решению, предложена процедура построения дробно-дифференциального аналога уравнения Лиувилля, особенностью которого является наличие дробной производной Римана–Лиувилля по времени. С использованием полученного уравнения и проекционного формализма, построена иерархия ДДМ сокращенного описания эволюции микроскопического состояния системы, которая включает дробно-дифференциальные аналоги кинетического уравнения Цванцига, обобщенного уравнения Ланжевена и уравнения Мори. Построенные уравнения дают возможность построения новых макроскопических ДДМ неравновесных необратимых процессов в системах с памятью.

2. Теория продолжения локальных групп точечных преобразований обобщена на линейные дробно-дифференциальные переменные, образованные произвольными композициями операторов дробного интегрирования и целочисленного дифференцирования. Разработаны алгоритмы нахождения точечных симметрий и решения задач групповой классификации ДДМ с частными производными дробного порядка, работоспособность и эффективность которых продемонстрирована на некоторых классах уравнений аномальной диффузии с дробными производными Римана–Лиувилля и Капуто.

Найдены новые инвариантно-групповые решения этих уравнений. Показано, что развитый подход может быть использован также и для построения нелокальных симметрий ДДМ.

3. В классе функций, зависящих от линейных интегро-дифференциальных переменных дробного порядка, доказано фундаментальное операторное тождество Нётер, позволившее доказать дробно-дифференциальные аналоги теоремы Нётер и ее усиления. В явном виде получены дробно-дифференциальные обобщения операторов Нётер, дающие конструктивный алгоритм построения законов сохранения для ДДМ, обладающих классическим лагранжианом, с использованием симметрий этих моделей. Показано, что к ДДМ, не имеющим классического лагранжиана, применим принцип нелинейной самосопряженности и конструктивный алгоритм может быть использован для построения законов сохранения для нелинейно самосопряженных ДДМ. Доказана нелинейная самосопряженность ряда нелинейных ДДМ аномальной диффузии с дробными производными Римана–Лиувилля и Капуто по времени и найдены соответствующие новые семейства законов сохранения.

4. Предложен способ приближения ДДМ, порядок дробного дифференцирования в которых близок к целому числу, моделями в производных целого порядка с малым параметром. Показано, что для исследования таких приближенных уравнений могут быть использованы методы теории приближенных групп преобразований. Решена задача групповой классификации приближенного нелинейного уравнения субдиффузии с малым параметром по приближенным группам точечных преобразований и доказано наличие новых устойчивых симметрий и новых случаев классификации по сравнению с исходной ДДМ, что дает возможность построения новых приближенных решений для этой модели. Для приближенного решения задач типа Коши для ДДМ с дробными производными Римана–Лиувилля, порядок которых близок к целому, предложен двухмасштабный алгоритм, обеспечивающий построение приближенных решений, пригодных как в основной области решения, так и в пограничном слое в окрестности начальных точек, в которых решение является сингулярным. Работоспособность алгоритма подтверждена рядом примеров.

5. Для решения задач параметрической идентификации ДДМ диффузионного типа с постоянными коэффициентами развит метод временных интегральных характеристик. Построены явные аналитические интегральные представления коэффициента аномальной диффузии и порядка дробного дифференцирования через временные интегральные характеристики для моделей аномальной диффузии с дробными производными Римана–Лиувилля и Капуто по времени. Получены теоретические оценки точности идентификации. Разработаны численно-аналитические алгоритмы идентификации параметров ДДМ аномальной диффузии, основанные на методе временных инте-

гральных характеристик, позволяющие восстанавливать искомые параметры по результатам измерений в любых внутренних точках расчетной области.

6. Разработаны новые параллельные алгоритмы решения начально-краевых задач для ДДМ аномальной диффузии. На основе проведенной модификации метода Шварца предложен параллельный алгоритм с пространственной декомпозицией расчетной области, выполнена теоретическая оценка его эффективности. Разработано семейство двухсеточных параллельных алгоритмов с одновременной декомпозицией как по пространственным, так и по временной переменным. Даны рекомендации по организации вычислительного процесса, обеспечивающие требуемую точность численного решения. Разработанные алгоритмы позволяют повысить вычислительную эффективность решения как прямых задач, так и задач идентификации ДДМ диффузионного типа.

7. Предложенные в работе численные и численно-аналитические алгоритмы реализованы в виде программного комплекса, позволяющего проводить прямое компьютерное моделирование процессов аномальной диффузии, описываемых уравнениями с дробными производными Римана–Лиувилля и Капуто, а также восстанавливать постоянные параметры диффузионно-волновой и субдиффузионной моделей. Комплекс реализован в виде совокупности пакетов расширения системы Maple, что позволило сохранить аналитическую составляющую алгоритмов идентификации.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в журналах и изданиях, включенных в Перечень ВАК или в одну из баз данных и систем цитирования Web of Science, Scopus

1. Газизов, Р. К. Разработка параллельных алгоритмов решения задач механики сплошной среды на основе принципа пространственной декомпозиции / Р. К. Газизов, С. Ю. Лукащук, К. И. Михайленко // Вестник УГАТУ. — 2003. — Т. 4, № 1. — С. 100–107.
2. Лукащук, С. Ю. Решение коэффициентных обратных задач для уравнений параболического типа методом интегральных характеристик / С. Ю. Лукащук // Вестник УГАТУ. — 2003. — Т. 4, № 2. — С. 67–71.
3. Газизов, Р. К. Непрерывные группы преобразований дифференциальных уравнений дробного порядка / Р. К. Газизов, А. А. Касаткин, С. Ю. Лукащук // Вестник УГАТУ. — 2007. — Т. 9, № 3 (21). — С. 125–135.
4. Gazizov, R. K. Symmetry properties of fractional diffusion equations / R. K. Gazizov, A. A. Kasatkin, S. Yu. Lukashchuk // Physica Scripta. — 2009. — Vol. 136. — No. 014016. — P. 1–6.
5. Лукащук, С. Ю. Восстановление коэффициентов уравнения конвекции-диффузии дробного порядка методом временных интегральных харак-

теристик / С. Ю. Лукащук // Обозрение прикладной и промышленной математики. — 2010. — Т. 17, № 3. — С. 438–439.

6. Лукащук, С. Ю. Параллельный алгоритм решения дробно-дифференциальных уравнений переноса на основе модифицированного метода Шварца / С. Ю. Лукащук // Вестник ЮУрГУ. Сер. Математическое моделирование и программирование. — 2011. — Т. 17 (234), № 8. — С. 85–91.
7. Gazizov, R. K. Group-invariant solutions of fractional differential equations / R. K. Gazizov, A. A. Kasatkin, S. Yu. Lukashchuk // Nonlinear Science and Complexity / Ed. by J. A. T. Machado, A. C. J. Luo, R. S. Barbosa [et al.]. — Springer, 2011. — P. 51–59.
8. Lukashchuk, S. Y. Estimation of parameters in fractional subdiffusion equations by the time integral characteristics method / S. Yu. Lukashchuk // Computers & Mathematics with Applications. — 2011. — Vol. 62, No. 3. — P. 834–844.
9. Газизов, Р. К. Уравнения с производными дробного порядка: замены переменных и нелокальные симметрии / Р. К. Газизов, А. А. Касаткин, С. Ю. Лукащук // Уфимский математический журнал. — 2012. — Т. 4, № 4. — С. 54–63.
10. Lukashchuk, S. Y. Time-fractional extensions of the Liouville and Zwanzig equations / S. Yu. Lukashchuk // Central European Journal of Physics. — 2013. — Vol. 11, No. 6. — P. 740–749.
11. Gazizov, R. K. Linearly autonomous symmetries of the ordinary fractional differential equations / R. K. Gazizov, A. A. Kasatkin, S. Yu. Lukashchuk // Proc. of 2014 Int. Conf. on Fractional Differentiation and Its Applications (ICFDA 2014). — IEEE, 2014. — No. 6967419. — P. 1–6.
12. Lukashchuk, S. Y. An approximate solution method for ordinary fractional differential equations with the Riemann–Liouville fractional derivatives / S. Yu. Lukashchuk // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. — 2014. — Vol. 19, No. 2. — P. 390–400.
13. Лукащук, С. Ю. О построении законов сохранения для интегро-дифференциальных уравнений дробного порядка / С. Ю. Лукащук // Теоретическая и математическая физика. — 2015. — Т. 184, № 2. — С. 179–199.
14. Gazizov, R. K. Nonlinear self-adjointness, conservation laws and exact solutions of time-fractional Kompaneets equations / R. K. Gazizov, N. H. Ibragimov, S. Yu. Lukashchuk // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. — 2015. — Vol. 23, No. 1-3. — P. 153–163.
15. Lukashchuk, S. Y. Group classification of nonlinear time-fractional diffusion equation with a source term / S. Yu. Lukashchuk, A. V. Makunin // Applied Mathematics and Computation. — 2015. — Vol. 257. — P. 335–343.

16. Lukashchuk, S. Y. Conservation laws for time-fractional subdiffusion and diffusion-wave equations / S. Yu. Lukashchuk // Nonlinear Dynamics. — 2015. — Vol. 80, No. 1-2. — P. 791–802.
17. Лукащук, С. Ю. Идентификация параметров дробно-дифференциальных моделей аномальной диффузии методом временных интегральных характеристик / С. Ю. Лукащук // Вестник ЮУрГУ. Сер. Математическое моделирование и программирование. — 2016. — Т. 9, № 3. — С. 105–118.
18. Лукащук, С. Ю. Взаимосвязь математических моделей, описываемых уравнениями с производными целого и дробного порядков / С. Ю. Лукащук // Вестник УГАТУ. — 2016. — Т. 20, № 4 (74). — С. 97–106.
19. Лукащук, С. Ю. Групповая классификация одного нелинейного приближенного уравнения субдиффузии / С. Ю. Лукащук // Вестник Самарского гос. техн. ун-та. Сер. физ.-мат. науки. — 2016. — Т. 20, № 4. — С. 603–619.
20. Лукащук, С. Ю. Симметрийная редукция и инвариантные решения нелинейного дробно-дифференциального уравнения аномальной диффузии с источником / С. Ю. Лукащук // Уфимский математический журнал. — 2016. — Т. 8, № 4. — С. 114–126.

Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ

21. Лукащук, С. Ю. АД-ВИХ: идентификация параметров уравнения аномальной диффузии методом временных интегральных характеристик / С. Ю. Лукащук // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2016610761 от 19.01.2016.
22. Лукащук, С. Ю. АД-НКЗ: численное решение первой начально-краевой задачи для неоднородного уравнения аномальной диффузии / С. Ю. Лукащук // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2017616979 от 21.06.2017.

Основные публикации в прочих изданиях

23. Shatalov, Yu. S. The problem of coefficients identification in the mathematical model of the ion implantation diffusion process / Yu. S. Shatalov, S. Yu. Lukashchuk, Yu. Yu. Rikachev // Inverse Problems in Engineering. — 1999. — Vol. 7, No. 3. — P. 267–290.
24. Лукащук, С. Ю. Идентификация параметров дифференциального уравнения субдиффузии / С. Ю. Лукащук // Математическое моделирование и краевые задачи: Тр. второй Всерос. научн. конф. Ч. 3. — Самара : Самарский гос. техн. ун-т, 2005. — С. 160–163.
25. Лукащук, С. Ю. Численное решение диффузионно-волновых уравнений дробного порядка на кластерных системах / С. Ю. Лукащук, И. В. Костригин // Тр. VI Всерос. конф. молодых ученых

по мат. модел. и информац. техн. — Кемерово, 2005. — С. 1–10. — http://www.nsc.ru/ws/YM2005/9231/short.html (эл. текст доклада).

26. Gazizov, R. K. Symmetries and group-invariant solutions of nonlinear fractional differential equations / R. K. Gazizov, A. A. Kasatkin, S. Yu. Lukashchuk // Proc. of the Int. Workshop on New Trends in Science and Technology. — Turkey, Ankara. — 2008. — P. 1–6.
27. Gazizov, R. K. Group-invariant solutions of fractional differential equations / R. K. Gazizov, A. A. Kasatkin, S. Yu. Lukashchuk // Proc. of the 2nd Conf. of Nonlinear Science and Complexity. — Portugal, Porto. — 2008. — P. 1–12.
28. Газизов, Р. К. Симметрийный подход к дифференциальным уравнениям дробного порядка / Р. К. Газизов, А. А. Касаткин, С. Ю. Лукащук // Математическое моделирование и краевые задачи: Тр. пятой Всерос. научн. конф. с межд. участием. Ч. 3. — Самара : Самарский гос. техн. ун-т, 2008. — С. 59–61.
29. Лукащук, С. Ю. Модификация алгоритма parareal для решения дифференциальных уравнений дробного порядка / С. Ю. Лукащук // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2010): Тр. межд. научн. конф. — Челябинск : Изд. ЮУрГУ, 2010. — С. 519–524.
30. Газизов, Р. К. Симметрийные свойства дифференциальных уравнений переноса дробного порядка / Р. К. Газизов, А. А. Касаткин, С. Ю. Лукащук // Тр. Ин-та Механики УНЦ РАН. — 2012. — Т. 1. — С. 59–64.
31. Карачурина, Э. В. Решение коэффициентной обратной задачи для уравнения аномальной диффузии дробного порядка / Э. В. Карачурина, С. Ю. Лукащук // Тр. Ин-та Механики УНЦ РАН. — 2012. — Т. 2. — С. 65–70.
32. Lukashchuk, S. Y. Two scale method for ordinary fractional differential equations / S. Yu. Lukashchuk // Proc. of the Fifth Symposium on Fractional Differentiation and Its Applications. — Nanjing : Hohai University, Nanjing, China, 2012. — P. 1–4. — paper #108.
33. Лукащук, С. Ю. Двухсеточные параллельные алгоритмы для решения дробно-дифференциальных уравнений аномальной диффузии / С. Ю. Лукащук // Вестник ЮУрГУ. Сер. Вычислительная математика и информатика. — 2012. — Т. 47 (306), № 2. — С. 83–98.
34. Gazizov, R. K. Approximations of fractional differential equations and approximate symmetries / R. K. Gazizov, S. Yu. Lukashchuk // Preprints of the 20th IFAC World Congress. — IFAC, 2017. — P. 14587–14592.

Диссертант