
ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 519.63

МЕТОДЫ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

© Ю. В. Слостушенский¹, Д. Л. Ревизников², С. А. Семенов³*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)**e-mail: ¹slastushenskiy@mosinter.net, ²reviznikov@mai.ru, ³stdx@inbox.ru**Поступила в редакцию 12.03.2024 г., после доработки 12.03.2024 г.; принята к публикации 29.04.2024 г.*

Рассматриваются вопросы параметрической идентификации дробно-дифференциальных моделей, описывающих процессы аномальной диффузии/теплопроводности. Акцент делается на варианте с пространственно локализованным начальным условием, что соответствует экспериментальному подходу к определению диффузионных характеристик. Предлагаются методы решения задачи идентификации, не требующие многократного решения прямой задачи. Проводится тестирование методов в режиме квазиреального эксперимента.

Ключевые слова: аномальная диффузия, дробная производная, формула Грюнвальда–Летникова, конечно-разностная схема, модель случайного блуждания, метод Монте-Карло, параметрическая идентификация.

DOI: 10.31857/S0374064124070081, EDN: KNEXAX

ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия математическое моделирование целого класса объектов проводится при активном привлечении дробно-дифференциального исчисления. Дробные производные нашли своё применение в разнообразных областях науки и техники, таких как электромагнетизм, вязкоупругость, механика жидкости, электрохимия, динамика биологических популяций, оптика, обработка сигналов и др. [1–4]. Одним из наиболее ярких приложений дробно-дифференциальных уравнений является моделирование аномальной диффузии/теплопроводности. Аномальные диффузионные процессы в последнее время вызывают всё больший интерес у исследователей в связи с обнаружением аномальных свойств у ряда наноматериалов и наносистем (наноканалы, нанотрубки, нанонити и т. д.) [5–7]. В отличие от нормальной диффузии, которая характеризуется линейной зависимостью среднего квадрата смещения частиц от времени $\langle r^2 \rangle \sim t$, в аномальных диффузионных процессах наблюдается отклонение от линейного закона и появляется дробный показатель степени p : $\langle r^2 \rangle \sim t^p$, где r — вектор смещения частиц. При этом возможны режимы супердиффузии ($1 < p < 2$) и субдиффузии ($0 < p < 1$), которые связаны соответственно с баллистическим (прыжковым) механизмом переноса и наличием ловушек в среде. Подобное наблюдается в сложноструктурированных неоднородных средах, когда существенными становятся эффекты пространственной нелокальности и/или долгосрочной памяти. В качестве примеров систем, в которых наблюдаются корреляция или когерентность движения частиц, можно также привести пористые среды, среды с фрактальной структурой, аморфные полупроводники, аэрогели и т. д.

Для ряда дробно-дифференциальных уравнений известны аналитические решения [8, 9], однако более универсальным подходом нахождения решений являются численные методы.

К ним можно отнести конечно-разностные методы, построенные на основе формул Грюнвальда–Летникова [10–12], а также методы Монте-Карло [13, 14]. Важной задачей для дробно-дифференциальных моделей является параметрическая идентификация [15–17]. При этом, имея экспериментальные данные, необходимо определить не только коэффициенты уравнения, но и порядок дробной производной. Решение такой задачи возможно в экстремальной постановке, что типично для обратных задач математической физики [18, 19]. Как правило, формируется функция потерь, выражающая отклонение расчётных данных от эталонных (экспериментальных), которая минимизируется по искомым параметрам. Такой подход, в частности, применялся авторами в работах [20, 21]: в [20] параметры идентифицировались по результатам молекулярно-динамического моделирования, в [21] решалась задача поиска порядка дробной производной с учётом интервальной неопределённости экспериментальных данных [22]. Во всех вариантах в процессе решения задачи оптимизации многократно решалась прямая задача для дробно-дифференциального уравнения. В настоящей работе для варианта с пространственно локализованным начальным условием предлагаются методы идентификации, не требующие многократного решения прямой задачи. Этот класс задач представляется актуальным, так как с использованием локализованной подачи массы/энергии экспериментально определяются характеристики диффузии/теплопроводности различных сред.

В п. 1 сформулирована постановка прямой задачи для дробно-дифференциального уравнения диффузии и приведены распространённые численные методы её решения. В п. 2 представлены методы решения обратной задачи параметрической идентификации дробно-дифференциальной модели. Результатам тестирования идентификационных методов в режиме квазиреального эксперимента посвящен п. 3; проведено численное решение прямой задачи с заданными параметрами дробно-дифференциального уравнения; результаты решения зашумлены и рассмотрены в качестве эталонных (экспериментальных) данных, по которым идентифицируются параметры уравнения — порядок дробной производной и коэффициент диффузии.

1. ПОСТАНОВКА ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ЕЁ РЕШЕНИЯ

Рассмотрим вопросы математического описания процессов одномерной аномальной диффузии в приближении сплошной среды на основе уравнений с частными дробными производными. При этом возможно появление как пространственных (для режима супердиффузии), так и эволюционных (для режима субдиффузии) дробно-дифференциальных операторов. Математическая модель одномерной супердиффузии представляется следующим дробно-дифференциальным уравнением:

$$\frac{\partial U(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial_{\beta}^{\alpha} U(x, t)}{\partial x^{\alpha}}, \quad (1)$$

где $U(x, t)$ — объёмная концентрация вещества в среде, D — коэффициент диффузии.

Данное уравнение получается из классического дифференциального уравнения диффузии заменой производной второго порядка по пространственной переменной на производную $\partial_{\beta}^{\alpha} U(x, t)/\partial x^{\alpha}$, которая представляет собой двустороннюю дробную производную порядка α (из физических соображений следует условие $1 < \alpha \leq 2$) с параметром скоса β ($-1 \leq \beta \leq 1$) (см. определение оператора $\partial_{\beta}^{\alpha}/\partial x^{\alpha}$ ниже). Уравнение (1) описывает аномальную диффузию с показателем $p = 2/\alpha$. Очевидно, что в предельном случае ($\alpha = 2$) описывается классическая диффузия.

Диффузионный процесс рассматривается в пространстве $\{(x, t) \in \mathbb{R}^2: x \in \mathbb{R}, t > 0\}$. В качестве начального условия может быть задана любая неотрицательная функция из про-

пространства $L_1(-\infty, +\infty)$, т.е. $U(x, 0) = f(x) \geq 0$, $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = U_0 < \infty$. В настоящей работе делается акцент на варианте задания локализованного источника массы:

$$U(x, 0) = U_0 \delta(x). \quad (2)$$

На данный момент известно несколько альтернативных определений дробных интегралов и производных, но наиболее распространёнными являются определения по Риману–Лиувиллю, которые заключаются в обобщении формулы Коши для n -кратного интеграла на дробный порядок n , а именно, необходимые односторонние дробные производные произвольных порядков α в уравнении (1) определяются следующими формулами:

$$\begin{aligned} \frac{\partial_+^\alpha U(x, t)}{\partial x^\alpha} &= \frac{1}{\Gamma([\alpha] + 1 - \alpha)} \frac{d^{[\alpha]+1}}{dx^{[\alpha]+1}} \int_{-\infty}^x (x - \tau)^{[\alpha]-\alpha} U(\tau, t) d\tau, \\ \frac{\partial_-^\alpha U(x, t)}{\partial x^\alpha} &= \frac{(-1)^{[\alpha]+1}}{\Gamma([\alpha] + 1 - \alpha)} \frac{d^{[\alpha]+1}}{dx^{[\alpha]+1}} \int_x^{+\infty} (\tau - x)^{[\alpha]-\alpha} U(\tau, t) d\tau, \end{aligned}$$

где $\Gamma(\cdot)$ — гамма-функция Эйлера. Видно, что дробная производная является нелокальным оператором свёртки.

Методы численного решения дробно-дифференциального уравнения (1) основаны на аппроксимации односторонних дробных производных порядка α с использованием формул Грюнвальда–Летникова:

$$\frac{\partial_+^\alpha U(x, t)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k - \alpha)}{\Gamma(k + 1)} U(x - kh, t) \quad (3)$$

для левосторонней дробной производной по пространству и

$$\frac{\partial_-^\alpha U(x, t)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k - \alpha)}{\Gamma(k + 1)} U(x + kh, t) \quad (4)$$

— для правосторонней.

Формулы (3), (4) представляют собой вариант дробного интегро-дифференцирования, основанный на конечно-разностных отношениях. Именно они положены в основу большинства современных вычислительных алгоритмов решения дробно-дифференциальных уравнений.

Пусть пространство наблюдения $-L \leq x \leq L$ ($L > 0$) и время эволюции $0 \leq t \leq R$ ($R > 0$) разбиты пространственно-временной сеткой $x_i = -L + ih$, $h = 2L/K > 0$, $i = 0, 1, 2, \dots, K = 2S$ и $t_n = n\tau$, $\tau = R/N > 0$, $n = \overline{0, N}$.

Тогда, как следствие формул (3), (4), производные уравнения (1) будут аппроксимированы в узлах сетки (x_i, t_n) с шагами h, τ следующим образом:

$$\frac{\partial_+^\alpha U(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{i+s} g_{\alpha,k} U(x_i - (k-s)h, t_n) + O(h), \quad (5)$$

$$\frac{\partial_-^\alpha U(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{K-i+s} g_{\alpha,k} U(x_i + (k-s)h, t_n) + O(h), \quad (6)$$

где $g_{\alpha,k} = \Gamma(k - \alpha) / \Gamma(-\alpha)(k + 1)$ — нормированные веса Грюнвальда–Летникова, $\sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha,k} = 0$, $s \geq 0$ — целое значение сдвига для модифицированной (смещённой) формулы Грюнвальда–Летникова.

Отметим, что применение смещённой формулы Грюнвальда–Летникова для аппроксимации дробной производной по пространству принципиально, так как явный и неявный методы, основанные на использовании стандартной формулы Грюнвальда–Летникова ($s=0$), оказываются неустойчивыми. Введение смещения ($s=1$) позволяет получить абсолютно устойчивую неявную схему и условно устойчивую явную схему с условием устойчивости

$$D \frac{\tau}{h^\alpha} \leq \frac{1}{\alpha}. \quad (7)$$

Для конструирования двусторонней дробной производной по пространству с параметром сгиба $-1 \leq \beta \leq 1$ обычно используется линейная комбинация левосторонней и правосторонней дробных производных:

$$\frac{\partial_\beta^\alpha U(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{1+\beta}{2} \frac{\partial_+^\alpha U(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} + \frac{1-\beta}{2} \frac{\partial_-^\alpha U(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha}. \quad (8)$$

В итоге явная конечно-разностная схема численного решения уравнения (1) имеет вид

$$\frac{U_{i,n} - U_{i,n-1}}{\tau} = \frac{D}{h^\alpha} \left(\frac{1+\beta}{2} \sum_{k=0}^{i+1} g_{\alpha,k} U_{i-k+1,n-1} + \frac{1-\beta}{2} \sum_{k=0}^{K-i+1} g_{\alpha,k} U_{i+k-1,n-1} \right).$$

Алгоритмическая сложность явного алгоритма $P \sim NK^2$, что на порядок выше соответствующей величины $P \sim NK$ для классической диффузии. Это связано с нелокальным характером дробной производной.

Аналогично строится неявная схема численного решения. При этом в связи с нелокальностью дробно-дифференциального оператора матрица дискретного аналога неявной схемы не является разреженной, что существенно отличает данный класс задач от задач классической диффузии.

Обе схемы имеют первый порядок точности и по пространству, и по времени [10, 11, 23]. Вопросы построения разностных схем повышенного порядка точности рассмотрены в [24, 25].

В связи с высокой вычислительной сложностью конечно-разностных методов для дробно-дифференциальных уравнений представляет интерес метод случайного блуждания по сетке, который является естественным обобщением метода Монте-Карло для уравнения классической диффузии [13, 14].

Примем

$$y(x_i, t_n) = \frac{1}{U_0} \int_{x_i-h/2}^{x_i+h/2} U(x, t_n) dx = \frac{h}{U_0} U(x_i, t_n)$$

и запишем уравнение (1) в дискретном виде, переходя от концентрации $U(x_i, t_n)$ к доле массы в ячейке (или вероятности нахождения частицы в ячейке) $y(x_i, t_n)$:

$$\frac{\partial y(x_i, t_n)}{\partial t} = D \left(\frac{1+\beta}{2} \frac{\partial_+^\alpha y(x_i, t_{n-1})}{\partial x^\alpha} + \frac{1-\beta}{2} \frac{\partial_-^\alpha y(x_i, t_{n-1})}{\partial x^\alpha} \right), \quad i = \overline{0, K}, \quad n = \overline{1, N}.$$

Воспользуемся формулами для аппроксимации соответствующих односторонних дробных производных, но без перехода к конечным суммам:

$$\begin{aligned} \frac{y_{i,n} - y_{i,n-1}}{\tau} &= \frac{D}{h^\alpha} \left(\frac{1+\beta}{2} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha,k} y_{i-k+1,n-1} + \frac{1-\beta}{2} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha,k} y_{i+k-1,n-1} \right), \\ y_{i,n} &= y_{i,n-1} + \frac{D\tau}{h^\alpha} \left(\frac{1+\beta}{2} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha,k} y_{i-k+1,n-1} + \frac{1-\beta}{2} \sum_{k=0}^{\infty} g_{\alpha,k} y_{i+k-1,n-1} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Соответствующие коэффициенты перехода для случайного блуждания стоят при величинах y_i в ходе их перераспределения по правилу

$$y_i(t_n) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} q_k y_{i-k}(t_{n-1}). \quad (10)$$

Эти коэффициенты и есть нужные для модели случайного блуждания вероятности q перемещений по пространству. Из выражений (9), (10) следует, что

$$q_0 = 1 - \frac{D\tau}{h^\alpha} \alpha, \quad q_{\pm 1} = \frac{D\tau}{h^\alpha} \left(\frac{\alpha(\alpha-1)}{2} \frac{1 \pm \beta}{2} + \frac{1 \mp \beta}{2} \right), \quad q_{\pm k} = \frac{D\tau}{h^\alpha} \frac{1 \pm \beta}{2} g(\alpha, k+1).$$

Видно, что процесс перераспределения является пространственно-однородным (вероятности прыжков q_k не зависят от i) и стационарным (вероятности q_k не зависят от n). Отметим, что вероятности соответствующих перемещений полностью определяются только набором величин, включающим параметры уравнения α , β , D и сеточные параметры h , τ .

В работе [14] показано, что для вероятностей q_k выполнены обязательные условия $q_k \geq 0$, если верно (7), и $\sum_{k=-\infty}^{+\infty} q_k = 1$, обеспечивающие неотрицательность массы в ячейке $y_i(t_n) \geq 0$ и сохранение общей массы $\sum_{k=-\infty}^{+\infty} y_k(t_n) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} y_k(0) = 1$.

Вычислительные затраты метода Монте-Карло пропорциональны числу симуляций $Q: P \sim \sim QN$, вследствие чего на одинаковой сетке с увеличением разбиения с некоторого момента метод случайного блуждания при той же точности начинает превосходить по скорости конечно-разностные методы [24].

В настоящей статье прямая задача для дробно-дифференциального уравнения решается с целью получения эталонных данных для параметрической идентификации модели в режиме квазиреального эксперимента.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ И МЕТОДЫ ЕЁ РЕШЕНИЯ

Поставим следующую обратную задачу: оценить по известным значениям $U(x_i, t_n)$ параметры дробно-дифференциального уравнения (1) — порядок дробной производной по пространству α и коэффициент диффузии D при локализованном начальном условии (2).

Как отмечалось во введении, аномальная диффузия характеризуется нелинейной зависимостью среднего квадрата смещения частиц от времени $\langle r^2 \rangle \sim t^p$. В режиме супердиффузии ($1 < p < 2$) показатель степени p связан с порядком дробной производной уравнения (1) соотношением $\alpha = 2/p$ [8, 9]. В случае нормальной диффузии ($p = 1$) аналитическое решение уравнения (1) представляется распределением Гаусса с дисперсией, линейно зависящей от времени:

$$\frac{U(x, t)}{U_0} = \frac{1}{\tilde{\sigma}\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\tilde{\sigma}^2}}, \quad \tilde{\sigma}^2 = 2Dt = 2\sigma^2. \quad (11)$$

Решение дробно-дифференциального уравнения (1) также может быть представлено функцией плотности вероятности из множества устойчивых распределений, которые характеризуются не экспоненциальным, а степенным законом убывания на бесконечности. Это затрудняет прямое использование дисперсии для параметрической идентификации, так как в строгом смысле она оказывается бесконечной при любых $\alpha < 2$, что на практике приводит к сильной чувствительности решения обратной задачи к зашумлённым данным.

В связи с этим рассмотрим два метода оценки параметров уравнения (1) — по скорости спада максимума и по динамике границ w -ядра функции $U(x_i, t_n)$.

Утверждение 1. Порядок α дробной производной по пространству и коэффициент D уравнения (1) с начальным условием (2) однозначно определяются по известным значениям $U(0, t)$.

Доказательство. Воспользуемся известным аналитическим решением задачи Коши для уравнения (1) с начальным условием (2) [1]:

$$\begin{aligned}\frac{U(x, t)}{U_0} &= \frac{1}{\sigma} f_{\alpha\beta}\left(\frac{x}{\sigma}\right), \quad \sigma = \left(\left|\cos \frac{\pi\alpha}{2}\right| Dt\right)^{1/\alpha}, \\ f_{\alpha\beta}(x) &= \frac{1}{\pi x} \sum_{k=1}^{\infty} (-x)^k \frac{\Gamma(k/\alpha + 1)}{k!} \sin\left(\frac{\pi k}{2\alpha}(\theta - \alpha)\right), \quad x \geq 0, \\ f_{\alpha\beta}(x) &= f_{\alpha(-\beta)}(-x), \quad x < 0, \quad \theta = \frac{2}{\pi} \arctg\left(\beta \operatorname{tg} \frac{\pi(\alpha - 2)}{2}\right).\end{aligned}\quad (12)$$

В случае пространственной симметрии дробная производная $\partial_\beta^\alpha U(x, t)/\partial x^\alpha$ полагается равносторонней ($\beta = 0$) и выражение (12) упрощается:

$$\begin{aligned}\frac{U(x, t)}{U_0} &= \frac{1}{\sigma} f_{\alpha 0}\left(\frac{x}{\sigma}\right), \quad \sigma = \left(\left|\cos \frac{\pi\alpha}{2}\right| Dt\right)^{1/\alpha}, \\ f_{\alpha 0}(x) &= \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k x^{2k} \frac{\Gamma((2k+1)/\alpha + 1)}{(2k+1)!}, \quad x \geq 0, \\ f_{\alpha 0}(x) &= f_{\alpha 0}(-x), \quad x < 0.\end{aligned}\quad (13)$$

Воспользовавшись (12) для вычисления $U(0, t)$, получим

$$\begin{aligned}U(0, t) &= U_0 \left(\left|\cos \frac{\pi\alpha}{2}\right| Dt\right)^{-1/\alpha} f_{\alpha\beta}(0) = U_0 \left(\left|\cos \frac{\pi\alpha}{2}\right| Dt\right)^{-1/\alpha} \left(-\frac{1}{\pi}\right) \Gamma\left(\frac{1}{\alpha} + 1\right) \sin\left(\frac{\pi}{2\alpha}(\theta - \alpha)\right) = \\ &= U_0 \left(\left|\cos \frac{\pi}{p}\right| Dt\right)^{-p/2} \left(-\frac{1}{\pi}\right) \Gamma\left(\frac{p}{2} + 1\right) \sin\left(\frac{\pi p}{4}\left(\theta - \frac{2}{p}\right)\right).\end{aligned}\quad (14)$$

После логарифмирования выражения (14) по какому-либо основанию A имеем

$$\begin{aligned}\log U(0, t) &= \log \left[-U_0 \frac{1}{\pi} \Gamma\left(\frac{p}{2} + 1\right) \sin\left(\frac{\pi p}{4}\left(\theta - \frac{2}{p}\right)\right) \left(\left|\cos \frac{\pi}{p}\right| Dt\right)^{-p/2}\right] = \\ &= -\frac{p}{2} \log t - \frac{p}{2} \log \left[\left|\cos \frac{\pi}{p}\right| D\right] + \log \left[-U_0 \frac{1}{\pi} \Gamma\left(\frac{p}{2} + 1\right) \sin\left(\frac{\pi p}{4}\left(\theta - \frac{2}{p}\right)\right)\right].\end{aligned}\quad (15)$$

Легко видеть, что выражение (15) представляет собой линейную функцию вида $\tilde{y} = a \cdot \tilde{t} + b$, где $\tilde{y} = \log U(0, t)$ и $\tilde{t} = \log t$.

В результате показатель степени p однозначно определяется из (15) по скорости спада максимума функции концентрации в логарифмической шкале как

$$p = -2 \frac{d \log U(0, t)}{d \log t} = -2a, \quad (16)$$

соответственно $\alpha = 2/p$, а коэффициент диффузии вычисляется по формуле

$$D = \left|\cos \frac{\pi}{p}\right|^{-1} \left(-\frac{U_0}{\pi A^b} \Gamma\left(\frac{p}{2} + 1\right) \sin\left(\frac{\pi p}{4}\left(\theta - \frac{2}{p}\right)\right)\right)^{2/p} \quad (17)$$

при известном значении β или θ , A — основание логарифма. Таким образом, утверждение доказано.

В случае пространственной симметрии ($\beta = 0$) выражение для коэффициента диффузии принимает вид

$$D = \left| \cos \frac{\pi}{p} \right|^{-1} \left(\frac{U_0}{\pi A^b} \Gamma \left(\frac{p}{2} + 1 \right) \right)^{2/p} = \left| \cos \frac{\pi\alpha}{2} \right|^{-1} \left(\frac{U_0}{\pi A^b} \Gamma \left(\frac{1}{\alpha} + 1 \right) \right)^\alpha. \quad (18)$$

Полученные формулы (16)–(18) дают первый практический алгоритм вычисления параметров дробно-дифференциального уравнения (1). При этом оценку коэффициентов a и b линейной функции $\tilde{y} = a\tilde{t} + b$ по известным данным $U(x_i, t_n)$ можно провести разными способами, например, методом наименьших квадратов. Отметим, что в представленном алгоритме информация о решении $U(x_i, t_n)$ используется не в полном объёме, достаточно лишь данных в точке $x = 0$.

Далее изложим метод, в котором информация о решении более полная. Введём в рассмотрение центрированное w -ядро ($0 < w < 1$) распределения $U(x, t)$, определив его как отрезок $[-d, d]$ такой, что $w = \int_{-d}^d U(x, t)/U_0 dx$. Физически w -ядро соответствует пространственной области, содержащей долю диффундирующего вещества, равную w . Ясно, что для выполнения условия $w = \text{const}$ границы w -ядра $[-d, d]$ должны сдвигаться со временем, т.е. $d = d(t)$. Второй предлагаемый метод идентификации параметров уравнения (1) с начальным условием (2) основан на анализе этой функциональной зависимости $d(t)$.

Утверждение 2. Порядок α дробной производной по пространству и коэффициент D уравнения (1) с начальным условием (2) однозначно определяются по известным значениям функции $d(t)$.

Доказательство. Вновь воспользуемся известным аналитическим решением (12) задачи Коши уравнения (1) с начальным условием (2) для вычисления w -ядра распределения $U(x, t)$:

$$w = \int_{-d}^d \frac{U(x, t)}{U_0} dx = \int_{-d}^d \frac{1}{\sigma} f_{\alpha\beta} \left(\frac{x}{\sigma} \right) dx = F_{\alpha\beta} \left(\frac{x}{\sigma} \right) \Big|_{-d}^d = \text{const}, \quad (19)$$

где функция $F(x)$ — некоторая не имеющая явного вида первообразная плотности вероятности (12), т.е. соответствующая функция распределения.

Функция $F(x)$ является монотонной, поэтому вне зависимости от её вида условие (19) будет выполнено тогда и только тогда, когда $d \sim \sigma$, следовательно

$$d(t) = l\sigma(t) = l \left(\left| \cos \frac{\pi\alpha}{2} \right| Dt \right)^{1/\alpha} = l \left(\left| \cos \frac{\pi}{p} \right| Dt \right)^{p/2} \quad (20)$$

для любых произвольно выбранного $l > 0$ и однозначно соответствующего ему значения

$$w = F_{\alpha\beta} \left(\frac{x}{\sigma} \right) \Big|_{-l\sigma}^{l\sigma} = F_{\alpha\beta}(l) - F_{\alpha\beta}(-l) = \Phi(l), \quad 0 < w < 1. \quad (21)$$

После логарифмирования по основанию A равенства (20) получим выражение

$$\log(d(t)) = \log \left(l \left(\left| \cos \frac{\pi}{p} \right| Dt \right)^{\frac{p}{2}} \right) = \frac{p}{2} \log t + \frac{p}{2} \log \left(\left| \cos \frac{\pi}{p} \right| D \right) + \log l, \quad (22)$$

которое представляет собой линейную функцию вида $\tilde{y} = a\tilde{t} + b$, где $\tilde{y} = \log d(t)$ и $\tilde{t} = \log t$.

В результате из (22) показатель степени p однозначно определяется по динамике границ w -ядра в логарифмической шкале по формуле

$$p = 2 \frac{d \log d(t)}{d \log t} = 2a, \quad (23)$$

соответственно $\alpha = 2/p$, а коэффициент диффузии вычисляется по формуле

$$D = \left| \cos \frac{\pi}{p} \right|^{-1} \frac{A^{2b/p}}{l^{2/p}} = \left| \cos \frac{\pi \alpha}{2} \right|^{-1} \frac{A^{b\alpha}}{l^{\alpha}}. \quad (24)$$

Утверждение доказано.

Полученные формулы (23), (24) дают второй алгоритм вычисления параметров дробно-дифференциального уравнения (1). Оценку коэффициентов a и b линейной функции $\tilde{y} = a\tilde{t} + b$ можно провести методом наименьших квадратов, при этом необходимые значения $d(t_n)$ границ w -ядра $[-d_n, d_n]$ вычисляются как

$$d(t_n) = \min_j \sum_{i=K/2-j}^{K/2+j} U_{i,n} \geq wU_0, \quad n = \overline{0, N}.$$

Отметим, что рассчитываемый порядок α дробной производной не зависит от используемого w -ядра и для его определения можно взять любое значение $0 < w < 1$. В выражение (24) для коэффициента диффузии D величина l входит явно, причём связь между l и w даётся нелинейным уравнением (21) с неявно заданной правой частью. Решение уравнения (21) связано с дополнительными вычислительными затратами, так как при этом приходится решать прямую задачу (1), (2), а затем вычислять функцию $F(x)$ численным интегрированием. Использование аналитического решения (12) вычислительно не эффективно, так как присутствующий в нём знакопеременный ряд медленно сходится. Однако, как показали вычислительные эксперименты, хорошим универсальным приближением функции $\Phi(l)$ уравнения (21) в диапазоне $l \leq 1$ является $\operatorname{erf}(l/2)$, строго верное для гауссова распределения (11). В таком случае решения прямой задачи не требуется и достаточно заранее выбранной пары значений l и w .

3. ТЕСТИРОВАНИЕ МЕТОДОВ

Тестирование описанных в п. 2 методов будем проводить в режиме квазиреального эксперимента. Сначала, задав параметры дробно-дифференциального уравнения, решим прямую задачу. Далее, добавив к полученному решению шумовую компоненту, будем использовать его в качестве генератора эталонных (экспериментальных) данных, по которым будем идентифицировать параметры уравнения — порядок дробной производной и коэффициент диффузии.

Для всех примеров решение генерировалось в виде сеточной функции $U(x_i, t_n)$ с импульсом $U_0 = 625$ на отрезке $-L \leq x \leq L$ и на промежутке времени $0 \leq t \leq R$ при значениях границ $L = 312$ и $R = 10\,000$ на пространственно-временной сетке $x_i = -L + ih$, $h = 2L/K = 1$, $i = \overline{0, K}$, $K = 624$ и $t_n = n\tau$, $\tau = R/N = 1$, $n = \overline{0, N}$, $N = 10\,000$. К полученному результату добавлялась шумовая компонента, после чего зашумлённые данные использовались для идентификации параметров α и D уравнения (1).

В дальнейшем будем обозначать значения порядка дробной производной, полученные разными методами, как α_1 , α_2 , а соответствующие значения коэффициента диффузии — D_1 , D_2 . Для точных значений параметров будем использовать обозначения α , D .

Рассмотрим вариант с $\beta = 0$ и отсутствием шумовой компоненты. Проварьируем значения α в диапазоне от 1 до 2, подбирая коэффициент D максимально возможным, но так, чтобы за рассматриваемое время не нарушить однородные условия на границах. Полученные результаты приведены в табл. 1. Видно, что оба предложенных метода верно оценивают наблюдаемую диффузию как аномальную и находят заданные в уравнении (1) параметры α и D , но не во всём диапазоне значений $1 \leq \alpha \leq 2$, а для примерно $1.5 \leq \alpha \leq 2$. В диапазоне же значений $1 \leq \alpha \leq 1.5$ приведённые результаты обнаруживают проблему: при $\alpha \rightarrow 1$ получаемые оценки неверны. Однако данная проблема возникает не из-за ошибочности предлагаемых методов идентификации, а вследствие неточности используемого подхода к численному решению уравнения (1).

Таблица 1. Заданные и идентифицированные параметры уравнения

α	D	α_1	D_1	α_2	D_2
1.00	0.40	2.000	0.200146	2.000	0.200002
1.10	0.01	1.472	0.007097	1.434	0.007357
1.20	0.01	1.395	0.009549	1.363	0.010000
1.30	0.01	1.412	0.010570	1.389	0.010932
1.40	0.01	1.465	0.010744	1.446	0.010973
1.50	0.01	1.535	0.010585	1.519	0.010705
1.60	0.02	1.616	0.020728	1.613	0.021093
1.70	0.05	1.706	0.050970	1.708	0.051913
1.80	0.10	1.803	0.101074	1.805	0.102616
1.90	0.20	1.903	0.201429	1.901	0.202342
2.00	0.40	2.000	0.401322	2.000	0.400072

Представление двусторонней дробной производной при $-1 < \beta < 1$ линейной комбинацией (8) из двух формул Грюнвальда–Летникова для левосторонней и правосторонней дробных производных при близких к единице значениях параметра α оказывается неточным. В результате численные решения уравнения (1) со значениями параметра $\alpha \rightarrow 1$ будут приближаться к распределению Гаусса, как если бы $\alpha = 2$, но с коэффициентом диффузии, зависящим от сеточного параметра h .

Действительно, при $\alpha \rightarrow 1$ для уравнения (1) нормированные веса Грюнвальда–Летникова $g_{\alpha,k}$ будут выглядеть как $(1, -1, 0, 0, \dots)$ и формулы дробных производных (5), (6) примут вид разности вперёд и минус разности назад:

$$\frac{\partial_+^\alpha U(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{U_{i+1,n} - U_{i,n}}{h} \approx \frac{\partial U(x_i, t_n)}{\partial x} \quad (\text{для } \beta = +1),$$

$$\frac{\partial_-^\alpha U(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{U_{i-1,n} - U_{i,n}}{h} \approx -\frac{\partial U(x_i, t_n)}{\partial x} \quad (\text{для } \beta = -1).$$

В результате для равносторонней дробной производной ($\beta = 0$) имеем

$$\frac{\partial_0^\alpha U(x_i, t_n)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{2} \frac{U_{i+1,n} - U_{i,n}}{h} + \frac{1}{2} \frac{U_{i-1,n} - U_{i,n}}{h} = \frac{U_{i+1,n} - 2U_{i,n} + U_{i-1,n}}{2h} \approx \frac{h}{2} \frac{\partial^2 U(x_i, t_n)}{\partial x^2}.$$

Следует отметить, что в практически важных случаях подход к численному решению уравнения (1) на основе линейной комбинации двух формул Грюнвальда–Летникова работает вполне удовлетворительно, так как сильные аномалии ($1 \leq \alpha \leq 1.5$) наблюдаются редко.

Далее рассмотрим методы идентификации для зашумлённых данных.

Для генерации эталонных данных использовалось решение уравнения (1) при значениях параметров $\alpha = 1.8$ и $D = 0.1$ с переменным уровнем добавленной шумовой компоненты. Профили этого решения в виде $U(x/L, t)$ без шума и с шумом 20% представлены на рисунке для различных выбранных моментов времени t . Полученные результаты приведены в табл. 2. Видно, что оба предложенных метода устойчивы к зашумлению входного массива

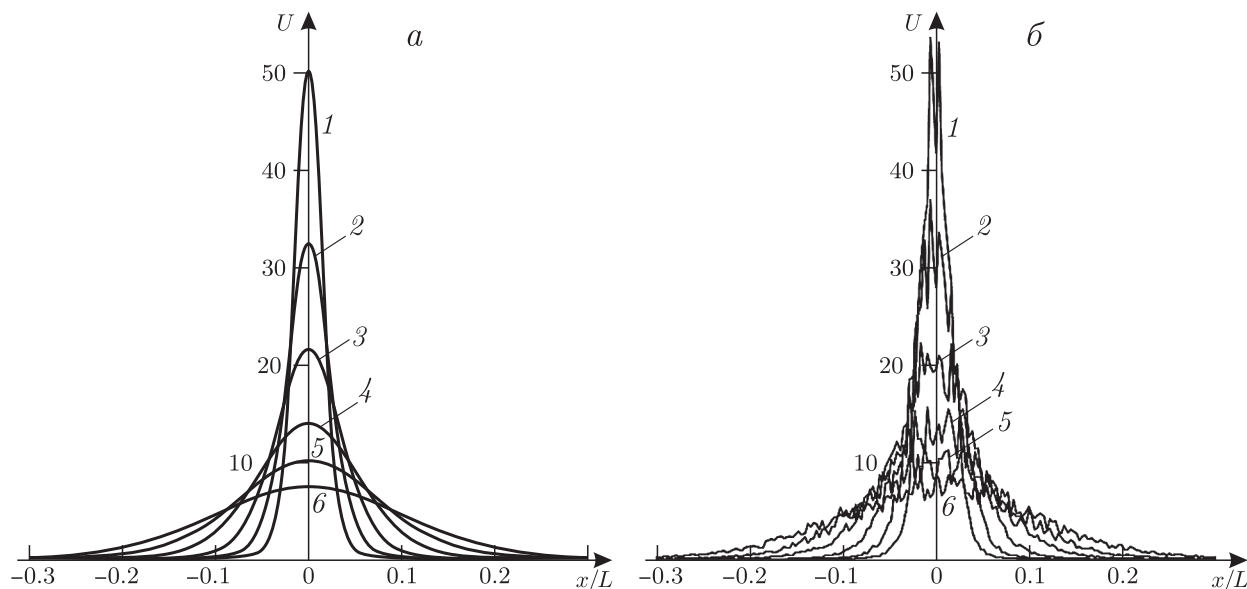


Рисунок. Профили решения без шума (а) и с шумом 20% (б): 1 — $t = 100$; 2 — 220; 3 — 460; 4 — 1000; 5 — 1780; 6 — 3160.

Таблица 2. Идентифицированные параметры уравнения в зависимости от заданной доли шума

Доля шума, %	α_1	D_1	α_2	D_2
0.000	1.803	0.101074	1.805	0.102616
2.000	1.805	0.101222	1.805	0.102513
4.000	1.803	0.101162	1.805	0.102451
6.000	1.807	0.102071	1.805	0.102858
8.000	1.803	0.101091	1.803	0.102388
10.000	1.803	0.101383	1.805	0.102637
12.000	1.802	0.100970	1.803	0.102249
14.000	1.807	0.102478	1.807	0.103220
16.000	1.802	0.101186	1.807	0.103184
18.000	1.808	0.103122	1.802	0.101920
20.000	1.803	0.101982	1.802	0.101734

данных, верно оценивают наблюдаемую диффузию как аномальную и находят заданные в уравнении (1) параметры α и D для широкого диапазона заданного уровня шума. Отметим высокую точность идентификации параметров даже при значительных уровнях шумового воздействия на решение, что связано с применением метода наименьших квадратов при значительном количестве N используемых эталонных точек на заданном интервале времени $0 \leq t \leq R$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложены методы идентификации параметров дробно-дифференциального уравнения супердиффузии для варианта с пространственно локализованным начальным условием. Данный класс задач актуален в связи с использованием локализованной подачи массы/энергии при экспериментальном определении характеристик диффузии/теплопроводности различных сред. Отличительной чертой представленных методов является отсутствие необходимости многократного решения прямой задачи. Тестирование методов в режиме квазиреального эксперимента показало их высокую точность и устойчивость к погрешности входных данных.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Benson, D.A. Application of a fractional advection-dispersion equation / D.A. Benson, S.W. Wheatcraft, M.M. Meerschaert // *Water Resources Research*. — 2000. — V. 36, № 6. — P. 1403–1412.
2. Шитикова, М.В. Обзор вязкоупругих моделей с операторами дробного порядка, используемых в динамических задачах механики твёрдого тела / М.В. Шитикова // *Изв. РАН. Механика твёрдого тела*. — 2022. — № 1. — С. 3–40.
3. Мороз, Л.И. Дробно-дифференциальные модели динамических откликов сегнетоэлектриков / Л.И. Мороз, А.Г. Масловская. — Благовещенск : Изд-во АмГУ, 2022. — 198 с.
4. Tverdyi, D. Application of the fractional Riccati equation for mathematical modeling of dynamic processes with saturation and memory effect / D. Tverdyi, R. Parovik // *Fractal and Fractional*. — 2022. — V. 6, № 3. — Art. 163.
5. Anomalous heat conduction and anomalous diffusion in nonlinear lattices, single walled nanotubes, and billiard gas channels / L. Baowen, J. Wang, L. Wang, G. Zhang // *Chaos*. — 2005. — V. 15. — Art. 15121.
6. Maruyama, S. CVD growth and heat transfer of carbon nanotubes / S. Maruyama // *Proc. of the 14th Int. Heat Transfer Conf. IHTC14, August 8–13, 2010, Washington, DC, USA*. — P. 23350.
7. Yang, N. Violation of Fourier's law and anomalous heat diffusion in silicon nanowires / N. Yang, G. Zhang, L. Baowen // *Nano Today*. — 2010. — № 5. — P. 85–90.
8. Самко, С.Г. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения / С.Г. Самко, А.А. Килбас, О.И. Маричев. — Минск : Наука и техника, 1987. — 688 с.
9. Нахушев, А.М. Дробное исчисление и его применение / А.М. Нахушев. — М. : Физматлит, 2003. — 272 с.
10. Meerschaert, M.M. Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations / M.M. Meerschaert, C. Tadjeran // *J. Comp. Appl. Math.* — 2004. — V. 172. — P. 65–77.
11. Meerschaert, M.M. Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations / M.M. Meerschaert, C. Tadjeran // *Appl. Numer. Math.* — 2006. — V. 56, № 1. — P. 80–90.
12. Space-fractional advection-dispersion equations with variable parameters: diverse formulas, numerical solutions, and application to the MADE-site data / Z. Yong, D.A. Benson, M.M. Meerschaert, E.M. LaBolle // *Water Resources Research*. — 2007. — V. 43. — Art. W05439.

13. Gorenflo, R. Random walk models for space-fractional diffusion processes / R. Gorenflo, F. Mainardi // *Fract. Calc. Appl. Anal.* — 1998. — V. 1, № 2. — P. 167–191.
14. Сластушенский, Ю.В. Модель случайного блуждания для уравнения аномальной диффузии / Ю.В. Сластушенский // *Науч.-техн. вестн. Поволжья.* — 2011. — № 5. — С. 242–246.
15. Ерохин, С.В. Параметрическая идентификация порядка дробной производной в модели Бегли–Торвика / С.В. Ерохин, Т.С. Алероев // *Мат. моделирование.* — 2018. — Т. 30, № 7. — С. 93–102.
16. Параметрическая идентификация математической модели вязкоупругих материалов с использованием производных дробного порядка / С.В. Ерохин, Т.С. Алероев, Л.Ю. Фриштер, А.В. Колесниченко // *Международ. журн. по расчёту гражданских и строит. конструкций.* — 2015. — Т. 11, № 3. — С. 82–86.
17. Унгарова, Л.Г. Применение нелинейных дробных аналогов реологических моделей в задаче аппроксимации экспериментальных данных по растяжению поливинилхлоридного пластика / Л.Г. Унгарова // *Вестн. Самар. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки.* — 2016. — Т. 20, № 4. — С. 691–706.
18. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. — М. : Наука, 1974. — 224 с.
19. Основы идентификации и проектирования тепловых процессов и систем. Обратные задачи теплообмена / О.М. Алифанов, П.М. Вабищевич, В.В. Михайлов и др. — М. : Логос, 2001. — 400 с.
20. Ревизников, Д.Л. Численное моделирование аномальной диффузии бильярдного газа в полигональном канале / Д.Л. Ревизников, Ю.В. Сластушенский // *Мат. моделирование.* — 2013. — Т. 25, № 5. — С. 3–14.
21. Морозов, А.Ю. Алгоритмы численного решения дробно-дифференциальных уравнений с интервальными параметрами / А.Ю. Морозов, Д.Л. Ревизников // *Сиб. журн. индустр. математики.* — 2023. — Т. 26, № 4. — С. 93–108.
22. Морозов, А.Ю. Интервальный подход к решению задач параметрической идентификации динамических систем / А.Ю. Морозов, Д.Л. Ревизников // *Дифференц. уравнения.* — 2022. — Т. 58, № 7. — С. 962–976.
23. Петухов, А.А. Алгоритмы численного решения дробно-дифференциальных уравнений / А.А. Петухов, Д.Л. Ревизников // *Вестн. Моск. авиац. ин-та.* — 2009. — Т. 16, № 6. — С. 228–234.
24. Ревизников, Д.Л. Применение дробно-дифференциального исчисления для описания аномальной диффузии / Д.Л. Ревизников, Ю.В. Сластушенский // *Вестн. Моск. авиац. ин-та.* — 2011. — Т. 18, № 4. — С. 76–82.
25. Мороз, Л.И. Численное моделирование процесса аномальной диффузии на основе схемы повышенного порядка точности / Л.И. Мороз, А.Г. Масловская // *Мат. моделирование.* — 2020. — Т. 32, № 10. — С. 62–76.

METHODS FOR PARAMETRIC IDENTIFICATION OF FRACTIONAL DIFFERENTIAL EQUATIONS

Y. V. Slastushenskiy¹, D. L. Reviznikov², S. A. Semenov³

Moscow Aviation Institute (National Research University), Russia
 e-mail: ¹slastushenskiy@mosinter.net, ²reviznikov@mai.ru, ³stdx@inbox.ru

The issues of parametric identification of fractional differential models describing the processes of anomalous diffusion/heat conductivity are considered. The emphasis is on the option with a spatially localized initial condition, which corresponds to the experimental approach to determine diffusion characteristics. Methods are proposed for solving the identification problem that do not require multiple solutions of the direct problem. Testing of methods is carried out in a quasi-real experiment mode.

Keywords: anomalous diffusion, fractional derivative, Grunwald–Letnikov formula, finite-difference scheme, random walk model, Monte Carlo method, parametric identification.

REFERENCES

1. Benson, D.A., Wheatcraft, S.W., and Meerschaert, M.M., Application of a fractional advection-dispersion equation, *Water Resources Research*, 2000, vol. 36, no. 6, pp. 1403–1412.
2. Shitikova, M.V., Fractional operator viscoelastic models in dynamic problems of mechanics of solids: a review, *Mechanics of Solids*, 2022, vol. 57, no. 1, pp. 1–33.
3. Moroz, L.I. and Maslovskaya, A.G., *Drobnno-differentsial'nyye modeli dinamicheskikh otklikov segnetoelektrikov* (Fractional Differential Models of Dynamic Responses of Ferroelectrics), Blagoveshchensk: ASU Publishing, 2022.
4. Tverdyi, D. and Parovik, R., Application of the fractional Riccati equation for mathematical modeling of dynamic processes with saturation and memory effect, *Fractal and Fractional*, 2022, vol. 6, no. 3, art. 163.
5. Baowen, L., Wang, J., Wang, L., and Zhang, G., Anomalous heat conduction and anomalous diffusion in nonlinear lattices, single walled nanotubes, and billiard gas channels, *Chaos*, 2005, vol. 15, art. 15121.
6. Maruyama, S., CVD growth and heat transfer of carbon nanotubes, *Proc. of the 14th Int. Heat Transfer Conf.*, IHTC14, August 8–13, 2010, Washington, DC, USA, p. 23350.
7. Yang, N., Zhang, G., and Baowen, L., Violation of Fourier's law and anomalous heat diffusion in silicon nanowires, *Nano Today*, 2010, no. 5, pp. 85–90.
8. Samko, S.G., Kilbas, A.A., and Marichev, O.I., *Integraly i proizvodnyye drobnogo poryadka i nekotoryye ikh prilozheniya* (Integrals and Derivatives of Fractional Order and Some of their Applications), Minsk: Nauka i Tekhnika, 1987.
9. Nakhushiev, A.M., *Drobnoye ischisleniye i yego primeneniye* (Fractional Calculus and its Applications), Moscow: Fizmatlit, 2003.
10. Meerschaert, M.M. and Tadjeran, C., Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations, *J. Comp. Appl. Math.*, 2004, vol. 172, pp. 65–77.
11. Meerschaert, M.M. and Tadjeran, C., Finite difference approximations for two-sided space-fractional partial differential equations, *Appl. Numer. Math.*, 2006, vol. 56, no. 1, pp. 80–90.
12. Yong, Z., Benson, D.A., Meerschaert, M.M., and LaBolle, E.M., Space-fractional advection-dispersion equations with variable parameters: diverse formulas, numerical solutions, and application to the MADE-site data, *Water Resources Research*, 2007, vol. 43, art. W05439.
13. Gorenflo, R. and Mainardi, F., Random walk models for space-fractional diffusion processes, *Fract. Calc. Appl. Anal.*, 1998, vol. 1, no. 2, pp. 167–191.
14. Slatushenskiy, Y.V., Random walk model for anomalous diffusion equation, *Nauch.-tekhn. vestn. Povolzh'ya* (Scientific and Technical Volga Region Bulletin), 2011, no. 5, pp. 242–246.
15. Erokhin, S.V. and Aleroev, T.S., Parametric identification of the fractional-derivative order in the Bagley–Torvik model, *Math. Models and Comp. Simul.*, 2019, vol. 11, no. 2, pp. 219–225.
16. Erokhin, S.V., Aleroev, T.S., Frishter, L.Y., and Kolesnichenko, A.V., Parameter identification of the viscoelastic materials mathematical model using fractional derivatives, *Int. J. Comput. Civil and Struct. Engin.*, 2015, vol. 11, no. 3, pp. 82–86.
17. Ungarova, L.G., The use of linear fractional analogues rheological models in the problem of approximating the experimental data on the stretch polyvinylchloride elastron, *Vestn. Samar. gos. tekhn. un-ta. Ser. fiz.-mat. nauki* (J. of Samara State Technical University. Ser. Physical and Mathematical Sciences), 2016, vol. 20, no. 4, pp. 691–706.
18. Tikhonov, A.N. and Arsenin, V.Y., *Metody resheniya nekorrektnykh zadach* (Methods for Solving Ill-Posed Problems), Moscow: Nauka, 1974.
19. Alifanov, O.M., Vabishchevich, P.M., Mikhailov, V.V. et al., *Osnovy identifikatsii i proyektirovaniya teplovykh protsessov i sistem. Obratnyye zadachi teploobmena* (Fundamentals of Identification and Design of Thermal Processes and Systems. Inverse Heat Transfer Problems), Moscow: Logos, 2001.
20. Reviznikov, D.L. and Slatushenskiy, Y.V., Numerical simulation of anomalous diffusion in polygonal billiard gas channel, *Math. Models and Comput. Simul.*, 2013, vol. 25, no. 5, pp. 3–14.
21. Morozov, A.Y. and Reviznikov, D.L., Algorithms for numerical solution of fractional differential equations with interval parameters, *J. Appl. Industr. Math.*, 2023, vol. 26, no. 4, pp. 93–108.
22. Morozov, A.Y. and Reviznikov, D.L., Interval approach to solving parametric identification problems for dynamical systems, *Differ. Equat.*, 2022, vol. 58, no. 7, pp. 952–965.
23. Petukhov, A.A. and Reviznikov, D.L., Algorithms for numerical solution of fractional differential equations, *Aerospace MAI J.*, 2009, vol. 16, no. 6, pp. 228–234.
24. Reviznikov, D.L. and Slatushenskiy, Y.V., Application of fractional differential calculus to describe anomalous diffusion, *Aerospace MAI J.*, 2011, vol. 18, no. 4, pp. 76–82.
25. Moroz, L.I. and Maslovskaya, A.G., Numerical simulation of an anomalous diffusion process based on a scheme of a higher order of accuracy, *Math. Models and Comput. Simul.*, 2021, vol. 13, no. 3, pp. 492–501.