Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Уральский федеральный университет имени
первого Президента России Б.Н. Ельцина»

На правах рукописи

Ибрахим Абделрахим Кхалифа Омран

Конечно-разностные и спектрально-Галеркинские методы в моделях, описываемых дробными уравнениями в частных производных с запаздыванием

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург — 2023

Работа выполнена на кафедре вычислительной математики и компьютерных наук ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор,
Пименов Владимир Германович

Официальные оппоненты: **Масловская Анна Геннадьевна**,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет», (г. Благовещенск),
профессор кафедры математического анализа и моделирования.

Плеханова Марина Васильевна,
доктор физико-математических наук, доцент,
ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет»,
профессор кафедры математического анализа.

Бештоков Мурат Хамидбиевич,
кандидат физико-математических наук, доцент,
Институт прикладной математики и автоматизации – филиал ФГБНУ «Федеральный научный центр «Кабардино-Балкарский научный центр Российской академии наук» (г. Нальчик)
ведущий научный сотрудник отдела Вычислительных методов.

Защита состоится «22» марта 2023 года в 11.00 часов на заседании диссертационного совета УрФУ 1.2.05.22 по адресу: 620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51, зал диссертационных советов, комн. 248.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», `https://dissovet2.urfu.ru/mod/data/view.php?d=12&rid=4413`.

Автореферат разослан «21» февраля 2023 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук Косолобов Д.А.

Общая характеристика работы

Актуальность и степень разработанности темы. Модели, описываемые дробными уравнениями в частных производных, в последние годы превратились в мощный инструмент математического моделирования. Наиболее важными причинами, по которым эти модели предпочтительнее моделей целочисленного порядка, являются их гибкое представление и их способность обеспечивать точное описание широкого круга явлений. Включение запаздывания по времени в дробные модели позволяет получить более общее представление и более точное описание событий. Причина этого в том, что дробные производные, в отличие от обычных, нелокальны по своей природе и могут использоваться для объяснения эффектов памяти, тогда как запаздывание раскрывают историю предыдущего состояния. Такого рода модели очень полезны для описания множества сложных систем и их анормального поведения в естественных науках и эффективно применяются во многих областях.

Модель Шнакенберга, представленная в 1979 году [1], представляет собой естественную систему автокатализа, которая часто встречается в различных биологических системах и считается одной из наиболее значимых систем биохимических реакций при моделировании сложных биологических процессов. Эта модель описывает автокаталитическую химическую реакцию, используя периодическое колебательное поведение пространственного распределения морфогена, а также предлагает понимание того, как множественные морфогены реагируют с клетками и паттернами. В этих реакциях скорость реакции увеличивается по мере протекания реакции. Такая ситуация возникает, когда продукт действует как катализатор реакции, поэтому скорость реакции со временем увеличивается, а химическая кинетика реакции становится положительной. Несмотря на свою важность, модель Шнакенберга не получила большого внимания со стороны дробного представления. В большинстве ранее представленных работ для описания этой модели использовались обыкновенные дифференциальные уравнения, особенно с учетом запаздывания по времени, в том числе работы [2–5] следующего вида:

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi_1}{\partial t} - \kappa_1 \frac{\partial \Phi_1^2}{\partial |x|^2} = f_1\big(\Phi_1(x,t), \Phi_1(x,t-s), \Phi_2(x,t), \Phi_2(x,t-s)\big), \quad x \in \Omega, \quad t \in I, \\ \frac{\partial \Phi_2}{\partial t} - \kappa_2 \frac{\partial \Phi_2^2}{\partial |x|^2} = f_2\big(\Phi_1(x,t), \Phi_1(x,t-s), \Phi_2(x,t), \Phi_2(x,t-s)\big), \quad x \in \Omega, \quad t \in I, \end{cases} \tag{1}$$

где $\Phi_1(x,t)$ и $\Phi_2(x,t)$ обозначают концентрации или плотности частиц соответственно в момент времени t, κ_1, κ_2 представляют коэффициенты диффузии, а s обозначает время запаздывания.

Многие реальные проблемы плохо согласуются с классическими моделями, основанными на производных целочисленного порядка. Например, эти производные не учитывают многие физические свойства переменных и параметров, участвующих в системе, а также эффекты памяти [6]. Модели дробного порядка, как правило, являются мощным инструментом для понимания физических аспектов переменных и параметров в моделях. Насколько нам известно, еще не было опубликовано ни одного исследования, посвященного численным решениям нелинейной модели Шнакенберга с запаздыванием, описываемой дробными уравнениями в частных производных. Этот пробел в литературе приводит нас к рассмотрению этого тематического исследования.

С другой стороны, аналитические методы плохо работают с моделями дробного порядка, особенно с нелинейными моделями. В результате были предприняты значительные усилия для разработки эффективных численных методов решения именно этого класса задач.

Недавние исследования были сосредоточены на разработке альтернативных подходов к нахождению приближенного решения для дробных моделей, а также на пригодности спектрального метода Лежандра для других нелинейных моделей [7–9]. Совсем недавно Заки и Хенди представили оригинальный метод решения класса одномерных нелинейных дробных по времени и пространству дифференциальных уравнений [10–13]. В частности, авторы [10] успешно объединили конечно-разностную аппроксимацию типа $L1$-формулы [14] со спектральным методом Лежандра-Галеркина, чтобы создать эффективную схему решения уравнения нелинейной дробной пространственно-временной диффузии следующего вида:

$$\frac{\partial^\beta \Phi}{\partial t^\beta} = \kappa \frac{\partial^\alpha \Phi}{\partial |x|^\alpha} + f\left(x, t, \Phi(x,t)\right) + g(x,t), \quad x \in \Omega, \quad t \in I, \tag{2}$$

Более того, применяя тот же метод с разностной формулой $L2-1_\sigma$ [15] вместо формулы $L1$, они смогли создать численную схему высокого порядка для нелинейного пространственно-временного дробного уравнения Гинзбурга-Ландау в [12], а для связанной нелинейной пространственно-временной дробной комплексной системы Гинзбурга-Ландау в [13]. Следует отметить, что эти работы считаются одними из первых, в которых метод конечных разностей сочетался со спектральными схемами для разработки численных схем решения нелинейных задач дробного порядка.

Применение вышеупомянутых схем для разработки и исследования новых численных алгоритмов решения дробных моделей с запаздыванием является главной задачей этой диссертации. Согласно известным автору результатам из литературы, пока еще ни в одном исследовании не использовалась эта техника для решения нелинейных дробных моделей с запаздыванием. Несмотря на общепризнанные значительные трудности, такие как нелокальность во времени и пространстве и нелинейность рассматриваемой проблемы, этот пробел в литературе мотивирует рассмотреть данную проблему.

Цели и задачи диссертационной работы. Данная диссертация направлена на разработку и обоснование численных методов решения нелинейных дробных моделей с запаздыванием. Основные проблемы рассматриваемой работы состоят в том, как численно аппроксимировать дробную производную Капуто по времени, дробные производные Рисса по времени и запаздывание по времени для создания простой в реализации и эффективной численной схемы. В качестве основных задач диссертационной работы можно выделить следующие:

1. Разработать и проанализировать численный метод решения нелинейных дробных по пространству и времени уравнений реакции-диффузии с запаздыванием.
2. Построить и исследовать численный метод решения нелинейных многочленных дробных по пространству и времени уравнений реакции-диффузии с запаздыванием.
3. Предложить новый численный алгоритм для решения модели реакции-диффузии Шнакенберга дробного порядка с запаздыванием по времени экспрессии генов.
4. Разработать численный алгоритм высокого порядка точности для решения нелинейных уравнений дробной пространственно-временной реакций-диффузии с запаздыванием.
5. Провести обоснование устойчивости и сходимости разработанных алгоритмов и изучить факторы, влияющие на порядки сходимости.
6. Предоставить численные эксперименты, чтобы проиллюстрировать вычислительную эффективность и теоретические результаты для предлагаемых методов.

Методология и методы исследования. Исследование основано на идеях и методах из быстро развивающейся области численных методов решения дробных дифференциальных уравнений в частных производных. Для решения задач диссертации, наряду с расчетными схемами, использовались различные математические методы и компьютерные алгоритмы.

Точнее, численные методы были построены с использованием конечно-разностных формул типа $L1$ или $L2-1_\sigma$ совместно со спектральной техникой Галеркина–Лежандра для решения нелинейных уравнений в частных производных дробного порядка с запаздыванием. Для теоретического анализа оценки сходимости и устойчивости для предложенных схем, представленных в этой работе, используются методологии дискретных энергетических неравенств, а также недавно полученных дискретных дробных неравенств Гроноулла [16–18]. Для разработки программ на основе предложенных вычислительных алгоритмов использовалась среда Mathematica (версия: 12.1).

Научная новизна. В диссертационной работе получены следующие основные результаты.

1. Разработан явный численный метод решения нелинейных дробных по времени и пространству уравнений реакции - диффузии с постоянным запаздыванием. Исследована устойчивость предложенного метода и определен порядок сходимости.
2. Построена эффективная гибридная численная схема решения обобщенного нелинейного многочленного дробного по пространству и времени уравнения реакции-диффузии с запаздыванием. Исследована устойчивость предложенного метода и получен порядок сходимости.
3. Впервые в литературе представлен и исследован новый численный метод решения обобщенной формы модели реакции-диффузии Шнакенберга дробного порядка с запаздыванием.
4. Построено приближение высокого порядка для решения нелинейных дробных по времени и пространству уравнений реакции-диффузии с запаздыванием по времени. Исследована устойчивость предложенного метода и получен порядок сходимости.

Положения, выносимые на защиту:

1. Разработка и обоснование численного метода решения нелинейного уравнения реакции-диффузии с дробной производной Рисса по пространству Рисса и с дробной производной Капуто по времени с постоянным запаздыванием. Доказательство устойчивости разработанного метода и определение порядка его сходимости;
2. Разработка и обоснование численного метода решения обобщенных нелинейных многочленных дробных по времени и пространству уравнений реакции-диффузии с запаздыванием. Доказательство устойчивости разработанного метода и получение порядка их сходимости;
3. Разработка и обоснование численного алгоритма решения уравнения дробного порядка по времени и пространству с запаздыванием общего вида модели Шнакенберга;
4. Разработка и обоснование численного метода высокого порядка для решения нелинейных уравнений реакции-диффузии дробного порядка по времени и пространству с запаздыванием.

Теоретическая и практическая значимость работы. Уравнения в частных производных дробного порядка с дополнительным эффектом запаздывания по времени в целом являются мощным средством и играют важную роль при описании различных явлений в науке и технике. Теоретическая значимость работы заключается в разработке и исследовании новых численных методов решения классов уравнений в дробных производных как по времени, так и по пространству, с эффектом запаздывания. Кроме того, теоретическую значимость имеет получение условий для обеспечения устойчивости и сходимости этих методов.

С другой стороны, практическая значимость работы заключается в возможности применения результатов работы для изучения сложных моделей аномального переноса с помощью компьютерных экспериментов. Также возможно использование разработанных численных алгоритмов для моделирования других явлений, описываемых подобными дробными моделями, таких как исследования моделей полупроводников и моделей сложных биологических процессов.

Достоверность результатов. Достоверность результатов, полученных в работе, подтверждается соответствующими математическими доказательствами, а также численными экспериментами, проведенными на тестовых примерах.

Апробация работы. Основные результаты работы обсуждались на семинарах кафедры вычислительной математики и компьютерных наук Института естественных наук и математики Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, а также были представлены на следующих конференциях:

52-я и 53-я Всероссийские школы-конференции с международным участием "Современные проблемы математики и ее приложений" (Екатеринбург, Институт математики и механики имени академика Н.Н. Красовского УрО РАН, 2021 и 2022 гг. `https://sopromat.imm.uran.ru/ListReports`).

Личный вклад. Основные результаты работы: а именно: детальная разработка численных алгоритмов для рассматриваемых задач, их тестирование и исследование их устойчивости и порядков сходимости; разработка программного комплекса, реализующего разработанные алгоритмы и выполняющего численные эксперименты на моделях дробного порядка с эффектом запаздывания, получены лично автором. Систематизация результатов и подготовка научных публикаций также принадлежат лично автору. Формулировка цели, постановка задач диссертационной работы, выбор общих методов исследования, подготовка публикаций осуществляются совместно с научным руководителем В.Г. Пименов. Соавторы А.С. Хенди и М.А. Заки в совместных публикациях помогали в постановке целей, в выборе общих методов исследования и в подготовке публикаций.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации представлены 4 научными статьями [1] — [4]. Работы публикуются в изданиях, индексируемых в международных базах данных Scopus и WoS. Также получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ [5].

Благодарности. Автор благодарит научного руководителя, заведующего кафедрой вычислительной математики и компьютерных наук, д.ф.-м.н, профессора В.Г. Пименова за помощь, поддержку и внимание к работе. Также автор выражает особую благодарность Ахмеду С. Хенди, старшему научному сотруднику УрФУ, и Махмуду А. Заки, сотруднику кафедры прикладной математики Национального исследовательского центра Египта, за их огромную помощь и постоянную поддержку. Также автор благодарит сотрудников кафедры вычислительной математики и компьютерных наук за гостеприимство и доброжелательность.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Библиография содержит 190 наименований. Общий объем работы составляет 135 страниц машинописного текста.

Основное содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность работы, дается обзор литературы по исследуемой проблеме, формулируются цели и задачи работы, излагается ее научная и практическая значимость.

В **Главе 1** построен и исследован численный метод решения нелинейных дробных по пространству и времени уравнений реакции-диффузии с запаздыванием по времени.

В разделе 1.1 представлен краткий обзор предварительных результатов и мотивации задачи. Сформулируем задачу для следующей модели

$$\frac{\partial^\beta \Phi}{\partial t^\beta} = \kappa \frac{\partial^\alpha \Phi}{\partial |x|^\alpha} + f(\Phi(x,t), \Phi(x,t-s)) + g(x,t), \quad x \in \Omega, \quad t \in I, \tag{3}$$

снабженной начально-краевыми условиями вида

$$\begin{cases} \Phi(x,t) = \psi(x,t), & x \in \Omega, \quad t \in [-s, 0], \\ \Phi(a,t) = \Phi(b,t) = 0, & t \in I. \end{cases} \tag{4}$$

Здесь $\Omega = [a,b] \subset \mathbb{R}$ и $I = [0,T] \subset \mathbb{R}$ — пространственная и временная область соответственно. $0 < \beta < 1$ — это дробный порядок производной по времени, при этом дробная производная по времени понимается в смысле Капуто. Положительные константы κ, и s обозначают соответственно параметры диффузии и запаздывания. $1 < \alpha < 2$ — это дробный порядок производной по пространству. Левая и правая дробные производные Римана-Лиувилля порядка α $(n-1 < \alpha < n)$ в неограниченной области определяются следующим образом [19]

$$_{-\infty}D_x^\alpha \Phi(x,t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \int_{-\infty}^{x} (x-\tau)^{n-1-\alpha} \Phi(\tau,t) d\tau, \tag{5}$$

$$_{x}D_\infty^\alpha \Phi(x,t) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \int_{x}^{\infty} (\tau - x)^{n-1-\alpha} \Phi(\tau,t) d\tau, \tag{6}$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция. Таким образом, пространственная дробная производная в форме Рисса на пространственном интервале Ω может быть определена как [20]

$$\frac{\partial^\alpha \Phi}{\partial |x|^\alpha} = -c_\alpha \left({}_aD_x^\alpha \Phi(x,t) + {}_xD_b^\alpha \Phi(x,t) \right), \quad c_\alpha = \frac{1}{2\cos\frac{\pi\alpha}{2}}, \quad 1 < \alpha < 2.$$

Производная Капуто $\frac{\partial^\beta \Phi}{\partial t^\beta}$ порядка β определяется как

$$\frac{\partial^\beta}{\partial t^\beta} \Phi(x,t) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^t (t-r)^{-\beta} \frac{\partial}{\partial r} \Phi(x,r) dr, \qquad 0 < \beta < 1. \tag{7}$$

В разделе 1.2 представлена полностью дискретная схема для задачи (3)-(4), основанная на объединении разностной формулы $L1$ и спектрального метода Лежандра-Галеркина. Для временной дискретизации мы равномерно делим временной интервал [0, T] с временным шагом τ, определяемым как $\tau = \frac{s}{N_s}$, таким образом, что N_s является положительным целым числом. Равномерные разбиения задаются как $t_n = n\tau$, $\forall -N_s \le n \le M$, где $M = \lceil \frac{T}{\tau} \rceil$. Обозначим $\Phi^n = \Phi(.,t_n)$, тогда дискретный дробно-разностный оператор можно определить на основе унифицированной $L1$-формулы для дробной производной Капуто по времени порядка β при время t_n согласно следующему определению.

Определение 1. *Пусть Φ^n, $0 \le n \le M$ — заданная последовательность вещественных функций, тогда определим оператор дискретной дробной разности по времени D_τ^β следующим образом*

$$D_\tau^\beta \Phi^n = \frac{\tau^{-\beta}}{\Gamma(2-\beta)} \sum_{i=1}^{n} a_{n-i}\ \delta_t \Phi^i = \frac{\tau^{-\beta}}{\Gamma(2-\beta)} \sum_{i=0}^{n} b_{n-i} \Phi^i, \quad \forall n = 1, \ldots, M. \tag{8}$$

В приведенной выше формуле константы определяются так: $b_0 = a_0$, $b_n = -a_{n-1}$, $b_{n-i} = a_{n-i} - a_{n-i-1}$, $\forall\ 1 \le i \le n-1$, *а также определяем* $\delta_t \Phi^i = \Phi^i - \Phi^{i-1}$.

Чтобы получить полудискретную форму модели (3) — (4) в каждый момент времени t_n, мы аппроксимируем член с дробный по времени производной через (8). Для аппроксимации нелинейной функции источника используются аппроксимации Тейлора. Как следствие, мы получаем систему с дискретным временем

$$\begin{cases} D_\tau^\beta \Phi^n = \dfrac{\partial^\alpha \Phi^n}{\partial |x|^\alpha} + f(2\Phi^{n-1} - \Phi^{n-2}, \Phi^{n-N_s}) + g^n(x), \quad 1 \le n \le M, \quad x \in \Omega, \\ \Phi^n(x) = \psi(x), \quad -N_s \le n \le 0, \quad x \in \Omega. \end{cases} \tag{9}$$

Рассмотрим коэффициент $\lambda := \Gamma(2-\beta)\tau^\beta$, тогда схема (9) может быть переписана в следующем эквивалентном виде

$$\Phi^n - \lambda\kappa \frac{\partial^\alpha \Phi^n}{\partial |x|^\alpha} = a_{n-1}\Phi^0 - \sum_{i=1}^{n-1} b_{n-i}\Phi^i + f(2\Phi^{n-1} - \Phi^{n-2}, \Phi^{n-N_s}) + \lambda g^n(x), \quad \forall n = 1, \ldots, M. \tag{10}$$

Для пространственной дискретизации мы определяем следующее функциональное пространство и соответствующие базовые функции, так чтобы граничные условия выполнялись так, как это принято в спектральных методах для дробных по пространству дифференциальных уравнений [21, 22]:

$$\mathcal{W}_N^0 = \mathcal{P}_N(\Omega) \cap H_0^1(\Omega) = \operatorname{span}\{\varphi_n(x) : n = 0, 1, \ldots, N-2\}, \tag{11}$$

где для каждого $\hat{x} \in [-1, 1]$ функция φ_n определяется выражением

$$\varphi_n(x) = L_n(\hat{x}) - L_{n+2}(\hat{x}) = \frac{2n+3}{2(n+1)}(1 - \hat{x}^2) J_n^{1,1}(\hat{x}), \tag{12}$$

и $x = \frac{1}{2}((b-a)\hat{x} + a + b) \in [a, b]$. Таким образом, полностью дискретная $L1$-Галеркина спектральная схема для задачи (3) — (4) состоит из множества аппроксимаций $\Phi_N^n \in \mathcal{W}_N^0$, удовлетворяющие следующей системе

$$\begin{cases} (\Phi_N^n, \upsilon) - \lambda \left(\dfrac{\partial^\alpha}{\partial |x|^\alpha} \Phi_N^n, \upsilon \right) = a_{n-1} \left(\Phi_N^0, \upsilon \right) - \displaystyle\sum_{i=1}^{n-1} b_{n-i} \left(\Phi_N^i, \upsilon \right) \\ +\lambda \left(I_N f(2\Phi_N^{n-1} - \Phi_N^{n-2}, \Phi_N^{n-N_s}), \upsilon \right) + \lambda \left(I_N g^n(x), \upsilon \right), \quad \forall \upsilon \in \mathcal{W}_N^0, \quad \forall n = 1, \ldots, M, \\ \Phi_N^n = \pi_N^{1,0} \psi(t_n, x), \quad -N_s \le n \le 0, \end{cases} \tag{13}$$

где $\pi_N^{1,0}$ — подходящий в данном случае оператор проектирования. После этого представим приближенные решения в виде

$$\Phi_N^n = \sum_{i=0}^{N-2} \hat{\Phi}_i^n \varphi_i(x), \tag{14}$$

где $\hat{\Phi}_i^n$ — неизвестные коэффициенты разложения, которые необходимо определить.

Унифицированную полную дискретную схему для модели (3) — (4) можно выразить в виде линейной системы в матричной форме, используя (14) и полагая $\upsilon = \varphi_k$, для каждого $0 \le k \le N-2$ следующим образом:

$$\left(\bar{M} - \lambda c_\alpha (S + S^T)\right) U^n = K^{n-1} + \lambda H^{n-1} + \lambda G^n. \tag{15}$$

Обозначения в этом выражении даются системой тождеств

$$\begin{cases} s_{ij} = \int_\Omega {}_a D_x^{\frac{\alpha}{2}} \varphi_i(x) {}_x D_b^{\frac{\alpha}{2}} \varphi_j(x) dx, & S = (s_{ij})_{i,j=0}^{N-2}, \\ m_{ij} = \int_\Omega \varphi_i(x)\varphi_j(x) dx, & \bar{M} = (m_{ij})_{i,j=0}^{N-2}, \\ h_i^{n-1} = \int_\Omega \varphi_i(x) I_N f(2\Phi_N^{n-1} - \Phi_N^{n-2}, \Phi_N^{n-N_s}) dx, & H^{n-1} = (h_0^{n-1}, h_1^{n-1}, \dots, h_{N-2}^{n-1})^\top, \\ g_i^n = \int_\Omega \varphi_i(x) I_N g^n dx, & G^n = (g_0^n, g_1^n, \dots, g_{N-2}^n)^\top, \\ U^n = (\hat{\Phi}_0^n, \hat{\Phi}_1^n, \dots, \hat{\Phi}_{N-2}^n)^\top, & K^{n-1} = -\sum_{j=0}^{n-1} b_{n-j} \bar{M} U^j. \end{cases} \tag{16}$$

Элементы матрицы жесткости S и матрицы масс $\bar{M}$ легко вычисляются с помощью следующей леммы.

Лемма 1. *[21, 22] Элементы матрицы жесткости S равны $s_{ij} = a_i^j - a_i^{j+2} - a_{i+2}^j + a_{i+2}^{j+2}$ для каждого $i, j = 0, 1, \dots, N-2$. А именно,*

$$\begin{aligned} a_i^j &= \int_\Omega {}_a D_x^{\frac{\alpha}{2}} L_i(\hat{x}) {}_x D_b^{\frac{\alpha}{2}} L_j(\hat{x}) dx \\ &= \left(\frac{b-a}{2}\right)^{1-\alpha} \frac{\Gamma(i+1)\Gamma(j+1)}{\Gamma(i-\frac{\alpha}{2}+1)\Gamma(j-\frac{\alpha}{2}+1)} \cdot \sum_{r=0}^{N} \varpi_r^{-\frac{\alpha}{2}, -\frac{\alpha}{2}} J_i^{\frac{\alpha}{2}, -\frac{\alpha}{2}} \left(x_r^{-\frac{\alpha}{2}, -\frac{\alpha}{2}}\right) J_j^{-\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2}} \left(x_r^{-\frac{\alpha}{2}, -\frac{\alpha}{2}}\right), \end{aligned} \tag{17}$$

и $\left\{x_r^{-\frac{\alpha}{2}, -\frac{\alpha}{2}}, \varpi_r^{-\frac{\alpha}{2}, -\frac{\alpha}{2}}\right\}_{i=0}^{N}$ — множество точек Якоби-Гаусса и весов относительно весовой функции $\omega^{-\frac{\alpha}{2}, -\frac{\alpha}{2}}$. Матрица масс $\bar{M}$ симметрична, с ненулевыми элементами

$$m_{ij} = m_{ji} = \begin{cases} \dfrac{b-a}{2j+1} + \dfrac{b-a}{2j+5}, & \forall i = j, \\ -\dfrac{b-a}{2j+5}, & \forall i = j+2. \end{cases} \tag{18}$$

В разделах 1.3 и 1.4 приведены результаты теоретического анализа полу- и полностью дискретной спектральной схемы Галеркина для модели (3) — (4). Слабая формулировка полностью дискретной схемы такова: найти $\{\Phi_N^k\}_{k=1}^M \in \mathcal{P}_N$, такие что они удовлетворяют следующим условиям

$$\left(D_\tau^\beta \Phi_N^k,\ \upsilon_N\right) + A\left(\Phi_N^k,\ \upsilon_N\right) = \left(I_N f(2\Phi_N^{k-1} - \Phi_N^{k-2},\ \Phi_N^{k-N_s}),\ \upsilon_N\right) + \left(I_N g^k,\ \upsilon_N\right),\ \forall \upsilon_N \in \mathcal{P}_N, \tag{19}$$

с $\Phi_N^k = \pi_N^{1,0} \varphi^k,\ -N_s \le k \le 0$. Также предполагается, что функция f удовлетворяет условию Липшица. Доказано, что предложенная схема безусловно устойчива, имеет порядок сходимости $2-\beta$ по времени и экспоненциальную скорость сходимости по пространству. Устойчивость и сходимость полностью дискретного приближения доказываются привлечением дискретного дробного неравенства Гронуолла [16]. Эти результаты получены в следующих двух теоремах, которые были доказаны в [2], см. публикации автора.

Теорема 1 (Устойчивость). *Полностью дискретная схема* (19) *безусловно устойчива в том смысле, что для всех* $\tau > 0$ *выполняется*

$$\left\| \Phi_N^k - \tilde{\Phi}_N^k \right\|^2 \leq C \max_{1 \leq k \leq M} \left\| g^k - \tilde{g}^k \right\|^2,$$

где C *— положительная константа, не зависящая от* N *и* τ.

Теорема 2 (Сходимость). *Пусть* $\{\Phi^k\}_{k=-N_s}^M$ *и* $\{\Phi_N^k\}_{k=-N_s}^M$ *— точное и приближенное решения уравнения* (3) *и предложенной схемы* (19) *соответственно. Также пусть* $\Phi \in C^2([0,T]; L^2(\Omega)) \cap C^1([0,T]; H^s(\Omega))$. *Тогда для константы* C, *независящей от* N *и* τ, *следующее утверждение справедливо*

$$|\Phi^k - \Phi_N^k|_{\alpha/2} \leq C(N^{\alpha/2-s} + N^{-r} + \tau^{2-\beta}), \quad 1 \leq k \leq M,$$

где переменная r *обозначает порядок регулярности ресурсного члена.*

В разделе 1.5 приведены выполненные нами численные результаты, согласующиеся с теоретическими в случае гладкости решения по времени и пространству.

Пример 1. *Рассмотрим нелинейную задачу реакции-диффузии с запаздыванием*

$$\frac{\partial^\beta \Phi}{\partial t^\beta}(x,t) = \frac{\partial^\alpha \Phi}{\partial |x|^\alpha}(x,t) - 2\Phi(x,t) + \frac{\Phi(x,t-0.1)}{1+\Phi^2(x,t-0.1)} + g(x,t), \quad x \in (0,1), \quad t \in (0,1], \tag{20}$$

где $g(x,t)$ *— заданная функция такая, что задача* (20) *имеет точное решение* $\frac{t^2}{\Gamma(3)} x^2(1-x)^2$.

В таблице 1 приведены L^2-ошибки и соответствующие им порядки сходимости при $\alpha - 1 = \beta = 0.1,\ 0.5,\ 0.9,\ N = 50$. Мы видим, что эти результаты подтверждают ожидаемую сходимость теоретического порядка во времени. Все результаты сходимости согласуются с теоретическими результатами.

Таблица 1: L^2-ошибки и их порядки сходимости относительно τ, α и β для $N = 50$.

τ	$\alpha-1=\beta=0.1$		$\alpha-1=\beta=0.5$		$\alpha-1=\beta=0.9$	
	Error	Order	Error	Order	Error	Order
0.1/5	2.612×10^{-7}	−−	4.076×10^{-6}	−−	2.449×10^{-5}	−−
0.1/10	7.466×10^{-8}	1.807	1.454×10^{-6}	1.487	1.143×10^{-5}	1.099
0.1/15	3.588×10^{-8}	1.807	7.943×10^{-7}	1.491	7.319×10^{-6}	1.100
0.1/20	2.156×10^{-8}	1.771	5.168×10^{-7}	1.494	5.334×10^{-6}	1.100
0.1/25	1.481×10^{-8}	1.682	3.702×10^{-7}	1.495	4.173×10^{-6}	1.100

В **Главе 2** разработан и исследован численный метод решения обобщенных нелинейных многочленных дробных по пространству и времени уравнений реакции-диффузии с запаздыванием.

В разделе 2.1 представлен краткий обзор предварительных результатов и мотивации задачи. После этого сформулируем задачу для следующей модели

$$\sum_{r=0}^{m} q_r \frac{\partial^{\beta_r} \Phi}{\partial t^{\beta_r}} = \kappa \frac{\partial^\alpha \Phi}{\partial |x|^\alpha} + f\left(\Phi(x,t), \Phi(x,t-s)\right) + g(x,t), \quad x \in \Omega, \quad t \in I, \tag{21}$$

снабженной начально-краевыми условиями вида

$$\begin{cases} \Phi(x,t) = \psi(x,t), & x \in \Omega, \quad t \in [-s,0], \\ \Phi(a,t) = \Phi(b,t) = 0, & t \in I, \end{cases} \tag{22}$$

где дробные порядки по времени в рассматриваемой модели взяты в виде ($0 < \beta_0 < \beta_1 < \beta_2 < \cdots < \beta_m < 1$), дробные по времени производные понимаются в смысле Капуто, $1 < \alpha < 2$ — пространственный дробный порядок, а параметры q_r положительны.

В разделе 2.2 представлена полностью дискретная схема для задачи (21)-(22), основанная на объединении разностной формулы $L1$ и спектрального метода Лежандра-Галеркина. Для дискретизации дробных по времени производных разделим интервал [0, T] равномерно с шагом по времени τ, определяемым равенством $\tau = \frac{s}{N_s}$ таким образом, что N_s — целое положительное число. Равномерные разбиения, заданные $t_n = n\tau,\ \forall - N_s \leq n \leq M$, где $M = \lceil \frac{T}{\tau} \rceil$. Обозначим $\Phi^n = \Phi(., t_n)$, тогда многочленный дискретный дробно-разностный оператор можно описать на основе равномерной $L1$-аппроксимации для дробной временной производной Капуто порядка β_r в момент времени t_n как в следующем определении.

Определение 2. *Пусть $\{\Phi^n\}_{n=0}^{M}$ - последовательность вещественных функций, определенных на Ω. Определим многочлен* оператор дискретной дробной разности по времени $\sum_{r=0}^{m} q_r D_\tau^{\beta_r}$ *по формуле*

$$\sum_{r=0}^{m} q_r D_\tau^{\beta_r} \Phi^n = \sum_{r=0}^{m} \frac{q_r}{\Gamma(2-\beta_r)\tau^{\beta_r}} \sum_{i=1}^{n} a_{n-i}^{\beta_r} \delta_t \Phi^i = \sum_{r=0}^{m} \frac{q_r}{\Gamma(2-\beta_r)\tau^{\beta_r}} \sum_{i=0}^{n} b_{n-i}^{\beta_r} \Phi^i, \tag{23}$$

для всех значений $n = 1, \ldots, M$. В этом выражении $\delta_t \Phi^i = \Phi^i - \Phi^{i-1}$,, а константы определяются как $b_0^{\beta_r} = a_0^{\beta_r}$, $b_n^{\beta_r} = -a_{n-1}^{\beta_r}$, $b_{ni}^{\beta_r} = a_{ni}^{\beta_r} - a_{n-i-1}^{\beta_r}$, для каждого $i = 1, \ldots, n-1$.

Чтобы получить полудискретную форму модели (21) — (22) в каждый момент времени t_n мы аппроксимируем дробный по времени член через (23). Для аппроксимации нелинейной функции источника используем разложение Тейлора для линеаризации. Как следствие, мы получаем систему с дискретным временем

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{r=0}^{m} q_r D_\tau^{\beta_r} \Phi^n = \frac{\partial^\alpha \Phi^n}{\partial |x|^\alpha} + f(2\Phi^{n-1} - \Phi^{n-2}, \Phi^{n-N_s}) + g^n(x), \quad 1 \leq n \leq M, \quad \forall x \in \Omega, \\ \Phi^n(x) = \psi(x), \quad -N_s \leq n \leq 0, \quad x \in \Omega. \end{cases} \tag{24}$$

Введем параметр $\lambda_r := \frac{q_r}{\Gamma(2-\beta_r)\tau^{\beta_r}}$. Ттогда схема (24) может быть переписана в следующей эквивалентной форме, приведенной ниже:

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^{m} \lambda_r a_0^{\beta_r} \Phi^n - \kappa \frac{\partial^\alpha \Phi^n}{\partial |x|^\alpha} &= \sum_{r=0}^{m} \lambda_r\ a_{n-1}^{\beta_r} \Phi^0 - \sum_{r=0}^{m} \lambda_r \sum_{i=1}^{n-1} b_{n-i}^{\beta_r} \Phi^i \\ &+ f(2\Phi^{n-1} - \Phi^{n-2}, \Phi^{n-N_s}) + g^n(x), \qquad \forall n = 1, \ldots, M. \end{aligned} \tag{25}$$

Для пространственной дискретизации применяем те же шаги (11) — (12), тогда полностью дискретная спектральная схема $L1$-Галеркина состоит из множества аппроксимаций $\Phi_N^n \in \mathcal{W}_N^0$, удовлетворяющие следующей системе

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{r=0}^{m} \lambda_r a_0^{\beta_r} \left(\Phi_N^n, \upsilon\right) - \kappa \left(\frac{\partial^\alpha \Phi_N^n}{\partial |x|^\alpha}, \upsilon\right) = \sum_{r=0}^{m} \lambda_r a_{n-1}^{\beta_r} \left(\Phi_N^0, \upsilon\right) - \sum_{r=0}^{m} \lambda_r \sum_{i=1}^{n-1} b_{n-i}^{\beta_r} \left(\Phi_N^i, \upsilon\right) \\ + \left(I_N f\left(2\Phi_N^{n-1} - \Phi_N^{n-2}, \Phi_N^{n-N_s}\right), \upsilon\right) + \left(I_N g^n(x), \upsilon\right), \quad \forall \upsilon \in \mathcal{W}_N^0, \quad \forall n = 1, \ldots, M, \\ \Phi_N^n = \pi_N^{1,0} \psi(t_n, x), \quad -N_s \leq n \leq 0, \end{cases} \tag{26}$$

где $\pi_N^{1,0}$ — подходящий оператор проектирования. Далее представим приближенное решение в виде

$$\Phi_N^n = \sum_{i=0}^{N-2} \hat{\Phi}_i^n \varphi_i(x). \tag{27}$$

где $\hat{\Phi}_i^n$ — неизвестные коэффициенты разложения, которые необходимо определить. Подставляя это выражение в (26) и полагая $\upsilon = \varphi_k$, для каждого $0 \le k \le N-2$ получаем следующее матричное представление равномерной L_1-Галеркина спектральной схемы

$$\left(\sum_{r=0}^{m} \lambda_r a_0^{\beta_r} \bar{M} - \kappa c_\alpha (S + S^T)\right) U^n = K^{n-1} + H^{n-1} + G^n. \tag{28}$$

Обозначения в этом выражении даются системой тождеств

$$\begin{cases} s_{ij} = \displaystyle\int_\Omega {}_aD_x^{\frac{\alpha}{2}} \varphi_i(x) {}_xD_b^{\frac{\alpha}{2}} \varphi_j(x) dx, & S = (s_{ij})_{i,j=0}^{N-2}, \\ m_{ij} = \displaystyle\int_\Omega \varphi_i(x)\varphi_j(x) dx, & \bar{M} = (m_{ij})_{i,j=0}^{N-2}, \\ h_i^{n-1} = \displaystyle\int_\Omega \varphi_i(x) I_N f(2\Phi_N^{n-1} - \Phi_N^{n-2}, \Phi_N^{n-N_s}) dx, & H^{n-1} = (h_0^{n-1}, h_1^{n-1}, \dots, h_{N-2}^{n-1})^\top, \\ g_i^n = \displaystyle\int_\Omega \varphi_i(x) I_N g^n dx, & G^n = (g_0^n, g_1^n, \dots, g_{N-2}^n)^\top, \\ U^n = (\hat{\Phi}_0^n, \hat{\Phi}_1^n, \dots, \hat{\Phi}_{N-2}^n)^\top, & K^{n-1} = -\displaystyle\sum_{r=0}^{m} \lambda_r \sum_{j=0}^{n-1} b_{n-j}^{\beta_r} \bar{M} U^j. \end{cases}$$

В разделе 2.3 обсуждается теоретический анализ полностью дискретной спектральной схемы Галеркина для модели (21) — (22). Слабая формулировка полностью дискретной схемы такова: найти $\{\Phi_N^k\}_{k=1}^M \in \mathcal{P}_N$, такие, что они удовлетворяют следующей системе

$$\left(\sum_{r=0}^{m} q_r D_\tau^{\beta_r} \Phi_N^k,\ \upsilon_N\right) + A\left(\Phi_N^k,\ \upsilon_N\right) = \left(I_N\, f(2\Phi_N^{k-1} - \Phi_N^{k-2},\ \Phi_N^{k-N_s}),\ \upsilon_N\right) + \left(I_N\, g^k,\ \upsilon_N\right),\ \forall \upsilon_N \in \mathcal{P}_N, \tag{29}$$

с $\Phi_N^k = \pi_N^{1,0} \varphi^k,\ -N_s \le k \le 0$. Также предполагается, что функция f удовлетворяет условию Липшица. Устойчивость и сходимость полностью дискретного приближения доказываются привлечением дискретного дробного неравенства Гронуолла [18]. Доказано, что предложенная схема безусловно устойчива, имеет порядок сходимости $2-\beta_m$ по времени и экспоненциальную скорость сходимости по пространству. Мы можем представить эти результаты в следующих двух теоремах, которые были доказаны в [1], см. публикации автора.

Теорема 3 (Устойчивость). *Полностью дискретная схема* (29) *безусловно устойчива в том смысле, что для всех* $\tau > 0$ *выполняется*

$$\left\| \Phi_N^k - \tilde{\Phi}_N^k \right\|^2 \le C \max_{1 \le k \le M} \left\| g^k - \tilde{g}^k \right\|^2,$$

где C *— положительная константа, не зависящая от* N *и* τ.

Теорема 4 (Сходимость). *Пусть* $\{\Phi^k\}_{k=-N_s}^M$ *и* $\{\Phi_N^k\}_{k=-N_s}^M$ *— точное и приближенное решения модели* (21) *и схемы* (29) *соответственно. Также пусть* $\Phi \in C^2([0,T]; L^2(\Omega)) \cap C^1([0,T]; H^s(\Omega))$. *Тогда для константы* C, *не зависящей от* N *и* τ, *справедливо следующее утверждение*

$$|\Phi^k - \Phi_N^k|_{\alpha/2} \le C(N^{\alpha/2-s} + N^{-r} + \tau^{2-\beta_m}), \quad 1 \le k \le M,$$

В разделе 2.4 представлены численные эксперименты, которые мы выполнили. Они показывают влияние временных и пространственных дробных порядков на поведение динамики для решения нелинейных уравнений реакции-диффузии с запаздыванием.

Пример 2. *Рассмотрим нелинейную задачу реакции-диффузии с запаздыванием*

$$\sum_{r=1}^{q} \frac{\partial^{\beta_r}\Phi}{\partial t^{\beta_r}}(x,t) = \frac{\partial^{\alpha}\Phi}{\partial |x|^{\alpha}}(x,t) - 2\Phi(x,t) + \frac{\Phi(x,t-1.5)}{1+\Phi^2(x,t-1.5)} + g(x,t), \quad x \in (0,1), \quad t \in (0,1], \tag{30}$$

где дробные порядки выбраны как $\beta_r = \frac{2q+r-5}{3q}$. *Функция источника* $g(x,t)$ *задана так, что задача* (30) *имеет точное решение* $t^{\beta_5+1}x^2(1-x)^2$.

В таблице 2 перечислены L^2-ошибки и соответствующие им порядки сходимости при $\alpha = 1.1,\ 1.5,\ 1.9$, $N = 50$ при $q = 5$. Мы видим, что эти результаты подтверждают ожидаемую сходимость теоретического порядка во времени. Все результаты сходимости согласуются с теоретическими результатами.

Таблица 2: L^2-ошибки и их порядки сходимости относительно τ и α при $N = 50$.

τ	$\alpha = 1.1$		$\alpha = 1.5$		$\alpha = 1.9$	
	Error	Order	Error	Order	Error	Order
$1.5/50$	5.057×10^{-5}	$--$	4.692×10^{-5}	$--$	4.163×10^{-5}	$--$
$1.5/100$	1.927×10^{-5}	1.392	1.989×10^{-5}	1.238	1.783×10^{-5}	1.223
$1.5/150$	1.094×10^{-5}	1.395	1.192×10^{-5}	1.262	1.086×10^{-5}	1.224
$1.5/200$	7.327×10^{-6}	1.396	8.283×10^{-6}	1.267	7.592×10^{-6}	1.244
$1.5/250$	5.365×10^{-6}	1.396	6.226×10^{-6}	1.279	5.732×10^{-6}	1.259
$1.5/300$	4.159×10^{-6}	1.397	4.933×10^{-6}	1.277	4.560×10^{-6}	1.255
$2-\beta_5$	$--$	1.333	$--$	1.333	$--$	1.333

В **главе 3** представлен новый численный метод решения обобщенной формы модели реакции-диффузии Шнакенберга экспрессии генов с запаздыванием по времени.

В разделе 3.1 представлен краткий обзор истории модели, предварительных результатов, а затем представлена формулировка математической модели. Модель Шнакенберга использует пространственное распределение периодических колебаний морфогенов для представления сложной автокаталитической химической реакции. Физически механизм этой системы требует как минимум трех процессов, один из которых должен быть автокаталитическим, связанным простым уравнением, описывающим эту безудержную каталитическую химическую реакцию, как [23]

$$\emptyset_1 \underset{\ell_{-1}}{\overset{\ell_1}{\rightleftharpoons}} \mathrm{U}, \quad \emptyset_2 \xrightarrow{\ell_2} V, \quad 2U + V \xrightarrow{\ell_3} U, \tag{31}$$

где U и V — концентрации реагентов, а ℓ_i — детерминированные скорости реакций. Также предполагается, что химические вещества $\emptyset_1$ и $\emptyset_2$ непрерывно поставляются и их выработка не учитывается. Применение запаздывания по времени к последнему нелинейному члену (31), как указано в [23], приводит к реакции, представленной

$$\emptyset_1 \underset{\ell_{-1}}{\overset{\ell_1}{\rightleftharpoons}} \mathrm{U}, \quad \emptyset_2 \xrightarrow{\ell_2} V, \quad 2U + V \xrightarrow{\ell_3} W, \quad W \xrightarrow{delay} 3U. \tag{32}$$

Рассматривая Φ_1 и Φ_2 как концентрации U и V соответственно в (32) и позволяя реагентам диффундировать, дробная модель Шнакенберга с запаздыванием принимает вид

$$\begin{cases} \frac{\partial^{\beta}\Phi_1}{\partial t^{\beta}} - \kappa_1 \frac{\partial^{\alpha}\Phi_1}{\partial |x|^{\alpha}} = f_1\big(\Phi_1(x,t), \Phi_1(x,t-s), \Phi_2(x,t), \Phi_2(x,t-s)\big) + g_1(x,t), & x \in \Omega, \quad t \in I, \\ \frac{\partial^{\beta}\Phi_2}{\partial t^{\beta}} - \kappa_2 \frac{\partial^{\alpha}\Phi_2}{\partial |x|^{\alpha}} = f_2\big(\Phi_1(x,t), \Phi_1(x,t-s), \Phi_2(x,t), \Phi_2(x,t-s)\big) + g_2(x,t), & x \in \Omega, \quad t \in I, \\ \Phi_j(a,t) = \Phi_j(b,t) = 0, \quad j \in \{1,2\}, \quad t \in I, & \\ \Phi_1(x,t) = \psi_1(x), \quad \Phi_2(x,t) = \psi_2(x), \quad x \in \Omega, \quad t \in [-s, 0]. & \end{cases} \tag{33}$$

Здесь концентрации автокатализатора и реагента или активатора и ингибитора представлены двумя функциями $\Phi_1(x,t)$ и $\Phi_2(x,t)$ соответственно в момент времени t. Параметры диффузии двух химических концентраций обозначены κ_1 и κ_2. Запаздывание по времени, возникающее в результате экспрессии генов, представлено положительной константой s. Также $g_1(x,t)$ и $g_1(x,t)$ являются двумя известными исходными функциями. Кроме того, чтобы обеспечить физически реалистичные интерпретации всякий раз, когда время находится где-то между величиной запаздывания и нулем, начальные условия $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ были выбраны как положительные начальные концентрации.

В разделе 3.2 представлен вывод численной схемы для модели (33) на основе комбинации интерполяционной $L1$ формулы и спектрального метода Лежандра-Галеркина. Мы выбираем временной шаг, заданный $\tau = \frac{s}{N_s}$, где N_s — целое положительное число, чтобы равномерно разделить временную область I. Это определяет класс равномерных разбиений, обозначаемых $t_n = n\tau$, для каждого $-N_s \le n \le M$, где $M = \left\lceil \frac{T}{\tau} \right\rceil$. Обозначим $\Phi_j^n = \Phi_j(.,\ t_n)$, $j \in (1,2)$, затем, применяя шаги (8) — (10), приходим к получению дискретной системы модели (33) в каждый момент времени t_n следующим образом

$$\begin{cases} \Phi_1^n - \lambda\kappa_1 \frac{\partial^\alpha \Phi_1^n}{\partial |x|^\alpha} = a_{n-1}\Phi_1^0 - \sum_{i=1}^{n-1} b_{n-i}\Phi_1^i \\ \quad +\lambda f_1\left(2\Phi_1^{n-1} - \Phi_1^{n-2}, \Phi_1^{n-N_s}, 2\Phi_2^{n-1} - \Phi_2^{n-2}, \Phi_2^{n-N_s}\right) + \lambda g_1^n(x), \quad 1 \le n \le M, \\ \Phi_2^n - \lambda\kappa_2 \frac{\partial^\alpha \Phi_2^n}{\partial |x|^\alpha} = a_{n-1}\Phi_2^0 - \sum_{i=1}^{n-1} b_{n-i}\Phi_2^i \\ \quad +\lambda f_2\left(2\Phi_1^{n-1} - \Phi_1^{n-2}, \Phi_1^{n-N_s}, 2\Phi_2^{n-1} - \Phi_2^{n-2}, \Phi_2^{n-N_s}\right) + \lambda g_2^n(x), \quad 1 \le n \le M. \end{cases} \tag{34}$$

Для пространственной дискретизации применим те же шаги (11) и (12), тогда полностью дискретная спектральная $L1$-Галеркина схема для модели системы (33) состоит из набора аппроксимаций $\Phi_{j,N}^n \in \mathcal{W}_N^0$, $j \in (1,2)$, таких, что $\forall \upsilon \in \mathcal{W}_N^0$, удовлетворяют следующей системе

$$\begin{cases} \left(\Phi_{1,N}^n, \upsilon\right) - \lambda\kappa_1 \left(\dfrac{\partial^\alpha}{\partial |x|^\alpha}\Phi_{1,N}^n, \upsilon\right) = a_{n-1}\left(\Phi_{1,N}^0, \upsilon\right) - \displaystyle\sum_{i=1}^{n-1} b_{n-i}\left(\Phi_{1,N}^i, \upsilon\right) \\ \quad +\lambda\left(I_N f_1\left(2\Phi_{1,N}^{n-1} - \Phi_{1,N}^{n-2}, \Phi_{1,N}^{n-N_s}, 2\Phi_{2,N}^{n-1} - \Phi_{2,N}^{n-2}, \Phi_{2,N}^{n-N_s}\right), \upsilon\right) + \lambda\ I_N\left(g_1^n(x), \upsilon\right), \quad 1 \le n \le M, \\ \left(\Phi_{2,N}^n, \upsilon\right) - \lambda\kappa_2 \left(\dfrac{\partial^\alpha}{\partial |x|^\alpha}\Phi_{2,N}^n, \upsilon\right) = a_{n-1}\left(\Phi_{2,N}^0, \upsilon\right) - \displaystyle\sum_{i=1}^{n-1} b_{n-i}\left(\Phi_{2,N}^i, \upsilon\right) \\ \quad +\lambda\left(I_N f_2\left(2\Phi_{1,N}^{n-1} - \Phi_{1,N}^{n-2}, \Phi_{1,N}^{n-N_s}, 2\Phi_{2,N}^{n-1} - \Phi_{2,N}^{n-2}, \Phi_{2,N}^{n-N_s}\right), \upsilon\right) + \lambda\ I_N\left(g_2^n(x), \upsilon\right), \quad 1 \le n \le M, \\ \Phi_{1,N}^0 = \pi_N^{1,0}\ \psi_1(t_n, x), \quad \Phi_{2,N}^0 = \pi_N^{1,0}\ \psi_2(t_n, x), \quad -N_s \le n \le 0, \end{cases} \tag{35}$$

где $\pi_N^{1,0}$ — подходящий в данном случае оператор проектирования. Следуя этому, мы можем дополнительно определить приближение как

$$\Phi_{j,N}^n = \sum_{i=0}^{N-2} \hat{\Phi}_{j,i}^n\ \varphi_i(x), \quad j \in \{1,2\}, \tag{36}$$

где $\hat{\Phi}_{j,i}^n$ — неопределенные коэффициенты разложения. Единую полную дискретную схему для модели (33) можно выразить в виде линейной системы в матричной форме, используя (36) и допуская $\upsilon = \varphi_k$ для каждого $0 \le k \le N-2$ следующим образом

$$\left(\bar{M} - \lambda c_\alpha (S + S^T)\right) U_j^n = K_j^{n-1} + \lambda H_j^{n-1} + \lambda G_j^n, \quad j \in \{1,2\}, \tag{37}$$

где ниже приведены обозначения в выражении (37):

$$
\begin{aligned}
&s_{ij}=\int_{\Omega}{}_aD_x^{\frac{\alpha}{2}}\varphi_i(x)_xD_b^{\frac{\alpha}{2}}\varphi_j(x)dx, \qquad S=(s_{ij})_{i,j=0}^{N-2},\\
&m_{ij}=\int_{\Omega}\varphi_i(x)\varphi_j(x)dx, \qquad \bar{M}=(m_{ij})_{i,j=0}^{N-2}, \quad K^{n-1}=-\sum_{i=0}^{n-1}b_{n-i}\bar{M}U_j^i,\\
&h_{j,i}^{n-1}=\int_{\Omega}\varphi_i(x)I_Nf_j\left(2\Phi_{1,N}^{n-1}-\Phi_{1,N}^{n-2},\Phi_{1,N}^{n-N_s},2\Phi_{2,N}^{n-1}-\Phi_{2,N}^{n-2},\Phi_{2,N}^{n-N_s}\right)dx,\\
&H_j^{n-1}=(h_{j,0}^{n-1},h_{j,1}^{n-1},\ldots,h_{j,N-2}^{n-1})^{\top}, \qquad U_j^n=(\hat{\Phi}_{j,0}^n,\hat{\Phi}_{j,1}^n,\ldots,\hat{\Phi}_{j,N-2}^n)^{\top},\\
&g_{j,i}^n=\int_{\Omega}\varphi_i(x)I_Ng_j^ndx, \qquad G_j^n=(g_{j,0}^n,g_{j,1}^n,\ldots,g_{j,N-2}^n)^{\top}.
\end{aligned}
\tag{38}
$$

В разделе 3.3 приведены результаты теоретического анализа предложенной схемы для модели (33). Слабую формулировку предложенной схемы можно выразить так: найти $\{\Phi_{j,N}^k\}_{k=1}^M\in\mathcal{P}_N,\ j\in\{1,2\}$ такие, что

$$
\begin{aligned}
&\left(D_\tau^\beta\Phi_{j,N}^k,\ \upsilon_N\right)+A\left(\Phi_{j,N}^k,\ \upsilon_N\right)\\
&=\left(I_N\,f_j\left(2\Phi_{1,N}^{k-1}-\Phi_{1,N}^{k-2},\Phi_{1,N}^{k-N_s},2\Phi_{2,N}^{k-1}-\Phi_{2,N}^{k-2},\Phi_{2,N}^{k-N_s}\right),\ \upsilon_N\right)+\left(I_N\,g_j^k,\ \upsilon_N\right),\quad \forall\upsilon_N\in\mathcal{P}_N,
\end{aligned}
\tag{39}
$$

где $\Phi_{j,N}^k=\pi_N^{1,0}\varphi^k,\ \ -N_s\le k\le 0$, а функции f_j , $j\in(1,2)$ удовлетворяют условию Липшица. Устойчивость и сходимость полностью дискретного приближения доказываются привлечением дискретного дробного неравенства Гроноулла [16]. Доказано, что предложенная схема безусловно устойчива, имеет порядок сходимости $2-\beta$ по времени и экспоненциальную скорость сходимости по пространству. Изложим эти результаты в следующих двух теоремах, которые были доказаны в [3], см. публикации автора.

Теорема 5 (Устойчивость)**.** *Предлагаемый метод* (39) *является безусловно устойчивым, в том смысле, что при при $\tau>0$, выполняется*

$$
\left\|\Phi_{1,N}^k-\tilde{\Phi}_{1,N}^k\right\|^2+\left\|\Phi_{2,N}^k-\tilde{\Phi}_{2,N}^k\right\|^2\le C\max_{1\le k\le M}\left(\left\|g_1^k-\tilde{g}_1^k\right\|^2+\left\|g_2^k-\tilde{g}_2^k\right\|^2\right),
$$

где C — положительная константа, не зависящая от N и τ.

Теорема 6 (Сходимость)**.** *Пусть $\{\Phi_j^k\}_{k=-N_s}^M$ и $\{\Phi_{j,N}^k\}_{k=-N_s}^M$, $j\in\{1,2\}$ — точное и приближенное решения модельной системы* (33) *и предложенного метода* (39) *соответственно. Предположим, что $\Phi_j\in C^2\left([0,T];L^2(\Omega)\right)\cap C^1\left([0,T];H^s(\Omega)\right)$. Тогда для константы C, не зависящей от N и τ, справедливо следующее утверждение*

$$
\left|\Phi_1^k-\Phi_{1,N}^k\right|_{\alpha/2}+\left|\Phi_2^k-\Phi_{2,N}^k\right|_{\alpha/2}\le C\left(N^{\alpha/2-s}+N^{-r}+\tau^{2-\beta}\right)\ ,\quad 1\le k\le M,
$$

где r обозначает параметр регулярности ресурсного члена.

В разделе 3.4 мы исследуем новые эффекты, полученные при введении дробной модели Шнакенберга с запаздыванием (33) по сравнению с целочисленной моделью (1).

Пример 3. *Рассмотрим следующую систему Шнакенберга:*

$$
\begin{cases}
\frac{\partial^\beta\Phi_1(x,t)}{\partial t^\beta}=\frac{\partial^\alpha\Phi_1(x,t)}{\partial|x|^\alpha}-\Phi_1(x,t)+\Phi_1^2(x,t-s)\Phi_2(x,t-s), & x\in(0,1),\quad t>0,\\
\frac{\partial^\beta\Phi_2(x,t)}{\partial t^\beta}=\frac{\partial^\alpha\Phi_2(x,t)}{\partial|x|^\alpha}-\Phi_1^2(x,t-s)\Phi_2(x,t-s), & x\in(0,1),\quad t>0,\\
\Phi_1(0,t)=\Phi_2(0,t)=\Phi_1(1,t)=\Phi_2(1,t)=0,\quad t\ge0,\\
\Phi_1(x,t)=e^{-2(x-5)^2}\ge0,\quad \Phi_2(x,t)=e^{-2(x+5)^2}\ge0,\quad (x,t)\in[0,1]\times[-s,0].
\end{cases}
\tag{40}
$$

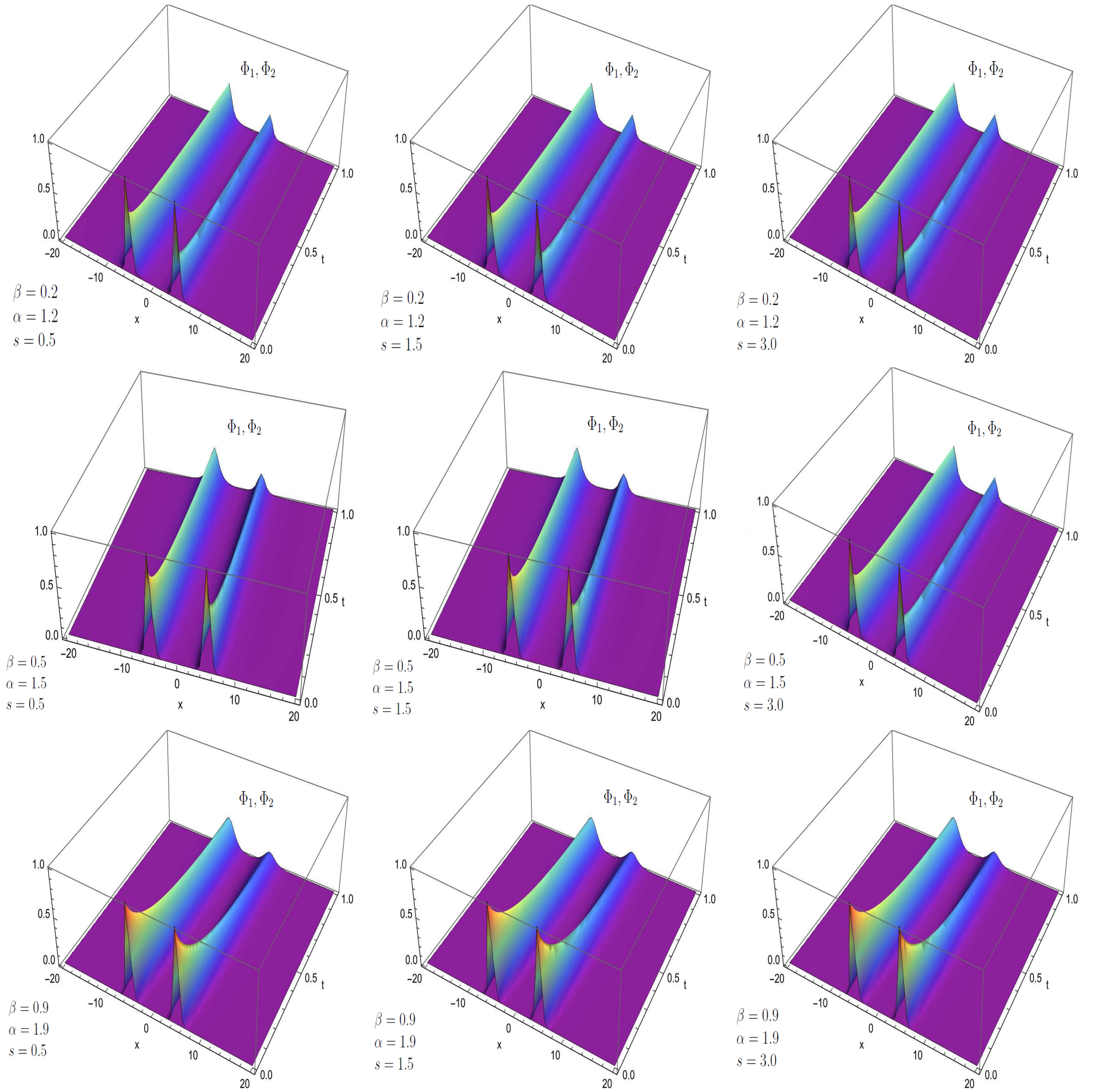

Рис. 1: Эволюция Φ_1 и Φ_2 для разных значений $\beta = 0.2; 0.5; 0.9$, $\alpha = 1.2; 1.5; 1.9$ and $s = 0.5; 1.5; 3.0$.

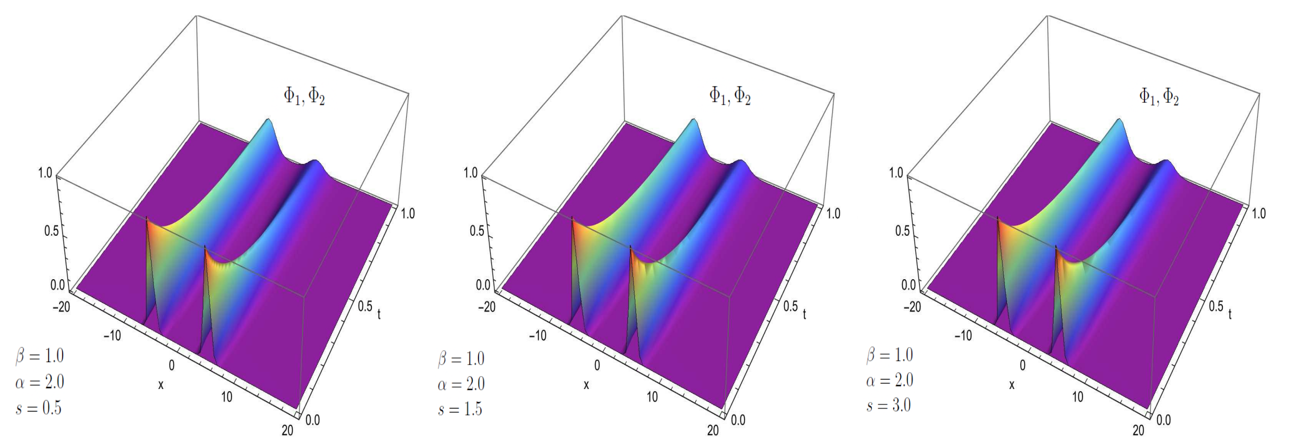

Рис. 2: Эволюция Φ_1 и Φ_2 для разных значений $\beta = 1.0$, $\alpha = 2.0$ and $s = 0.5; 1.5; 3.0$.

На рисунках 1 и 2 показан профиль поведения динамики численного решения для различных значений β, α и s. На рисунке 1 первая ряда представлена в $\alpha = 1.2$ and $\beta = 0.2$. Вторая ряда представлена в $\alpha = 1.5$ and $\beta = 0.5$. Третья ряда представлена в $\alpha = 1.9$ and $\beta = 0.9$. На рисунке 2 представленная рядаа выполнена в $\alpha = 2.0$ and $\beta = 1.0$ (целочисленный порядок). Задержка берется в первом столбце при $s = 0.5$, во втором столбце представлена при $s = 1.5$, а в третьем столбце представлена при $s = 3.0$.

Из этих рисунков видно, что эволюция решения довольно резкая на первых временных шагах в зависимости от β. Мы также обнаружили, что параметр дробного порядка α влияет на форму решений. Этот эффект совершенно очевиден для функций Φ_1 и Φ_2 на рисунке 1 по сравнению с рисунком 2. Это означает, что форма решения становится более гладкой, когда значения β и α берутся в целочисленном порядке ($\beta = 1.0$ и $\alpha = 2.0$, см. модель (1), представленную во введении), как показано на рисунке 2. Можно сделать вывод, что поведение автокатализатора и реагента под действием функций Φ_1 и Φ_2 лучше описывается в случае дробного, а не целого порядка. Кроме того, мы можем сказать, что параметры дробного порядка могут использоваться в физике для изменения формы волн без изменения эффектов нелинейности и дисперсии дробно-нелинейных моделей.

В **Главе 4** разработан и проанализирован численный метод высокого порядка для решения нелинейных дробных по времени и пространству уравнений реакции-диффузии с запаздыванием.

В разделе 4.1 представлен краткий обзор предварительных результатов и мотивации задачи. После этого сформулирована задача для модели (3) — (4).

Раздел 4.2 посвящен разработке численной аппроксимации высокого порядка для задачи (3) — (4), основанной на сочетании разностной формулы Алиханова $L2-1_\sigma$ и спектрального метода Лежандра-Галеркина для дискретизации временных и пространственных дробных производных соответственно. Мы выбираем временной шаг, заданный $\tau = \frac{s}{N_s}$, где N_s — целое положительное число, чтобы равномерно разделить временную область I. Это определяет класс равномерных разбиений, обозначаемых $t_k = k\tau$, для каждого $-N_s \leq k \leq M$, где $M = \left\lceil \frac{T}{\tau} \right\rceil$. Обозначим $t_{k+\sigma} = (k+\sigma)\tau = \sigma t_{k+1} + (1-\sigma)t_k$, для $k = 0, 1, \ldots, M$, где $\sigma = 1 - \frac{\beta}{2}$, $0 < \beta < 1$. Возьмем $\Phi^{k+\sigma} = \Phi^{k+\sigma}(\cdot) = \Phi(\cdot,\ t_{k+\sigma})$.

Определение 3. *Для временной дробной производной Капуто формула приближения* $L2-1_\sigma$ *в узле* $t_{k+\sigma}, k \in \mathbb{Z}_{[0,M-1]}$ *определяется как [15]*

$$
{}_0D_\tau^\beta \Phi^{k+\sigma} = \frac{\tau^{-\beta}}{\Gamma(2-\beta)} \sum_{l=0}^{k+1} \mathcal{D}_l^{(k,\beta,\sigma)} \Phi^l, \quad 0 < \beta < 1. \tag{41}
$$

Чтобы обеспечить полудискретизированный вид модели (3) — (4) в каждый момент времени $t_{k+\sigma}$, дробная по времени составляющая приближается равномерной $L2-1_\sigma$ разностной формулой (41), а нелинейный источник дискретизируется с использованием аппроксимаций Тейлора. Таким образом, система с дискретным временем выглядит следующим образом:

$$
\begin{cases}
{}_0D_\tau^\beta \Phi^{k+\sigma} = \kappa \dfrac{\partial^\alpha \Phi^{k+\sigma}}{\partial |x|^\alpha} + f\left((\sigma+1)\Phi^k - \sigma\Phi^{k-1}, \sigma\Phi^{k+1-N_s} + (1-\sigma)\Phi^{k-N_s}\right) + g^{k+\sigma}(x), \quad x \in \Omega, \\
\Phi_i^k = \psi(x_i, t_k), \quad -N_s \leq k \leq 0, \quad x \in \Omega, \\
\Phi_0^k = \Phi_M^k(x) = 0, \quad -N_s \leq k \leq 0, \quad x \in \Omega.
\end{cases} \tag{42}
$$

Введем следующие два параметра:

$$\lambda_k^{(\beta,\sigma)} := \left(\frac{\mathcal{D}_{k+1}^{(k,\beta,\sigma)}}{\tau^\beta\Gamma(2-\beta)}\right)^{-1}, \qquad \tilde{\mathcal{D}}_j^{(k,\beta,\sigma)} := \begin{cases} \frac{\zeta_k^{(\beta,\sigma)}\ \mathcal{D}_j^{(k,\beta,\sigma)}}{\tau^\beta\Gamma(2-\beta)}, & 0 \le j \le k-1, \\ \frac{\zeta_k^{(\beta,\sigma)}\ \mathcal{D}_k^{(k,\beta,\sigma)}}{\tau^\beta\Gamma(2-\beta)}, & j = k. \end{cases}$$

Это позволяет преобразовать схему (42) в эквивалентную форму, приведенную ниже.

$$\Phi^{k+1} - \kappa\sigma\lambda_k^{(\beta,\sigma)}\frac{\partial^\alpha\Phi^{k+1}}{\partial|x|^\alpha} = \kappa(1-\sigma)\lambda_k^{(\beta,\sigma)}\frac{\partial^\alpha\Phi^k}{\partial|x|^\alpha} - \sum_{j=0}^{k}\tilde{\mathcal{D}}_{j,l}^{(k,\beta,\sigma)}\Phi^j$$
$$+ \lambda_k^{(\beta,\sigma)} f\left((\sigma+1)\Phi^k - \sigma\Phi^{k-1}, \sigma\Phi^{k+1-N_s} + (1-\sigma)\Phi^{k-N_s}\right) + g^{k+1}. \tag{43}$$

Для пространственной дискретизации мы применяем те же шаги (11)-(12), тогда полностью дискретная спектральная схема Галеркина $L2-1_\sigma$ для (43) может быть представлена следующим образом: найти $\Phi^{k+1} \in \mathcal{W}_N^0$, $k \ge 0$ такие, что удовлетворяют следующей системе

$$\begin{cases} \left(\Phi^{k+1}, \upsilon\right) - \kappa\sigma\lambda_k^{(\beta,\sigma)}\left(\frac{\partial^\alpha\Phi^{k+1}}{\partial|x|^\alpha}, \upsilon\right) = \kappa(1-\sigma)\lambda_k^{(\beta,\sigma)}\left(\frac{\partial^\alpha\Phi^k}{\partial|x|^\alpha}, \upsilon\right) - \sum_{j=0}^{k}\tilde{\mathcal{D}}_{j,l}^{(k,\beta,\sigma)}\left(\Phi^j, \upsilon\right) \\ \quad +\lambda_k^{(\beta,\sigma)}\left(I_N f\left((\sigma+1)\ \Phi^k - \sigma\ \Phi^{k-1}, \sigma\ \Phi^{k+1-N_s} + (1-\sigma)\ \Phi^{k-N_s}\right), \upsilon\right) \\ \quad + \left(I_N g^{k+1}(x), \upsilon\right), \quad k \ge 0, \quad \forall\ \upsilon \in W_N^0, \\ \Phi_N^0 = \pi_N^{1,0}\ \psi, \end{cases} \tag{44}$$

где $\pi_N^{1,0}$ — подходящий в данном случае оператор проектирования. Следуя этому, мы можем определить приближение как

$$\Phi_N^{k+1} = \sum_{i=0}^{N-2}\hat{\Phi}_i^{k+1}\varphi_i(x), \tag{45}$$

где $\hat{\Phi}_i^{k+1}$ — неопределенные коэффициенты разложения. Равномерная спектральная $L2-1_\sigma$-Галеркина схема для модели (3) — (4) может быть выражена в виде линейной системы в матричной форме с использованием (45), и полагая $\upsilon = \varphi_k$, для каждого $0 \le k \le N-2$ получаем

$$\left(\bar{M} - \kappa\sigma\lambda_k^{(\beta,\sigma)}(S+S^T)\right)U^{k+1} = R^k + \lambda_k^{(\beta,\sigma)}H^k + G^{k+1}, \tag{46}$$

где обозначения в приведенном выше выражении определяются как

$$\begin{aligned}
&s_{ij} = \int_\Omega {}_aD_x^{\frac{\alpha}{2}}\varphi_i(x)\,{}_xD_b^{\frac{\alpha}{2}}\varphi_j(x)dx, \qquad S = (s_{ij})_{i,j=0}^{N-2}, \\
&m_{ij} = \int_\Omega \varphi_i(x)\varphi_j(x)dx, \qquad \bar{M} = (m_{ij})_{i,j=0}^{N-2}, \\
&h_i^k = \int_\Omega \varphi_i(x) I_N f\left((\sigma+1)\ \Phi^k - \sigma\ \Phi^{k-1}, \sigma\ \Phi^{k+1-N_s} + (1-\sigma)\ \Phi^{k-N_s}\right)dx, \\
&H^k = (h_0^k, h_1^k, \ldots, h_{N-2}^k)^\top, \qquad U^{k+1} = \left(\hat{\Phi}_0^{k+1}, \hat{\Phi}_1^{k+1}, \ldots, \hat{\Phi}_{N-2}^{k+1}\right)^\top, \\
&g_i^{k+1} = \int_\Omega \varphi_i(x) I_N g^{k+1}dx, \qquad G^{k+1} = (g_0^{k+1}, g_1^{k+1}, \ldots, g_{N-2}^{k+1})^\top, \\
&R^k = \kappa(1-\sigma)\lambda_k^{(\beta,\sigma)}(S+S^T)\Phi^k - \tilde{\mathcal{D}}_l^{(k,\beta,\sigma)}\bar{M}\Phi^k.
\end{aligned}$$

В разделе 4.3 проводится теоретический анализ спектральной $L2-1_\sigma$-Галеркина схемы для модели (3) — (4). Слабая формулировка полностью дискретной схемы такова: найти

$\{\Phi_N^k\}_{k=1}^M \in \mathcal{P}_N$, удовлетворяющие следующей системе:

$$\begin{aligned}\left(D_\tau^\beta \Phi_N^{k+\sigma}, \upsilon_N\right) + A\left(\Phi_N^{k+\sigma}, \upsilon_N\right) = \Big(I_N f\left((\sigma+1)\Phi_N^k - \sigma\, \Phi_N^{k-1}, \sigma\, \Phi_N^{k+1-N_s} + (1-\sigma)\Phi_N^{k-N_s}\right), \upsilon\Big) \\ + \left(I_N g^{k+\sigma}, \upsilon\right), \quad \forall \upsilon_N \in \mathcal{P}_N,\end{aligned} \tag{47}$$

с $\Phi_N^k = \pi_N^{1,0}\varphi^k, \quad -N_s \leq k \leq 0$. Также предполагается, что функция f удовлетворяет условию Липшица. Устойчивость и сходимость полностью дискретного приближения доказываются привлечением дискретного дробного неравенства Гронуолла [17]. Мы доказали, что предложенная схема является безусловно устойчивой, со сходимостью второго порядка по времени и порядка сходимости по пространству с экспоненциальной скоростью. Мы можем сформулировать эти результаты в следующих двух теоремах, которые были доказаны в [4], см. публикации автора.

Теорема 7 (Устойчивость)**.** *Разработанный метод* (47) *является безусловно устойчивым в следующем смысле: при $\tau > 0$ выполняется следующее*

$$\left\|\Phi_N^{k+\sigma} - \tilde{\Phi}_N^{k+\sigma}\right\|^2 \leq C \max_{1\leq k\leq M} \left\|g^{k+\sigma} - \tilde{g}^{k+\sigma}\right\|^2,$$

где C — положительная константа, не зависящая от N и τ.

Теорема 8 (Сходимость)**.** *Пусть $\{\Phi^k\}_{k=-N_s}^M$ и $\{\Phi_N^k\}_{k=-N_s}^M$ — точное и приближенное решения задачи* (3) *и предлагаемого метода* (47) *соответственно. Предположим, что $\Phi \in C^2\left([0,T]; L^2(\Omega)\right) \cap C^1\left([0,T]; H^s(\Omega)\right)$. Тогда для константы C, не зависящей от N и τ, справедливо следующее утверждение*

$$\left|\Phi^{k+\sigma} - \Phi_N^{k+\sigma}\right|_{\alpha/2} \leq C\left(\tau^2 + N^{-r}\right), \quad 1 \leq k \leq M,$$

где r обозначает порядок регулярности ресурсного члена.

В разделе 4.4 приведены выполненные нами численные эксперименты, согласующиеся с теоретическими в случае гладкости решения по времени и пространству. Приведем следующий пример.

Пример 4. *Рассмотрим следующую нелинейную диффузионную задачу с запаздыванием*

$$\frac{\partial^\beta \Phi}{\partial t^\beta}(x,t) = \frac{\partial^\alpha \Phi}{\partial |x|^\alpha}(x,t) - 2\Phi(x,t) + \frac{\Phi(x,t-0.1)}{1+\Phi^2(x,t-0.1)} + g(x,t), \quad x \in (0,1), \quad t \in (0,1], \tag{48}$$

такую, что задача (48) *имеет точное решение $\frac{t^2}{\Gamma(3)} x^2(1-x)^2 g(x,t)$.*

В таблице 3 приведено сравнение L2-ошибок и соответствующих порядков сходимости для различных значений α и β с $N = 100$ для $L1$ и для $L2-1_\sigma$ методов. Показано, что точность по времени $2-\beta$ достигается для L^2-ошибок в случае схемы $L1$, а для L^2-ошибок достигается более высокий порядок точности по времени в случае схемы $L2-1_\sigma$, причем точность согласуется с временным порядком сходимости, предусмотренным теоремой о сходимости.

Таблица 3: Скорость сходимости и связанные с ней ошибки для Φ по сравнению с N и τ при $N = 100$.

	τ	$\alpha-1=\beta=0.1$		$\alpha-1=\beta=0.5$		$\alpha-1=\beta=0.9$	
		Error	Order	Error	Order	Error	Order
$L1$	0.1/5	2.612×10^{-7}	$--$	4.076×10^{-6}	$--$	2.449×10^{-5}	$--$
	0.1/10	7.466×10^{-8}	1.807	1.454×10^{-6}	1.487	1.143×10^{-5}	1.099
	0.1/15	3.588×10^{-8}	1.807	7.943×10^{-7}	1.491	7.319×10^{-6}	1.100
	0.1/20	2.156×10^{-8}	1.771	5.168×10^{-7}	1.494	5.334×10^{-6}	1.100
	0.1/25	1.481×10^{-8}	1.682	3.702×10^{-7}	1.495	4.173×10^{-6}	1.100
$L2-1_\sigma$	0.1/5	2.341×10^{-7}	$--$	1.030×10^{-6}	$--$	1.909×10^{-6}	$--$
	0.1/10	5.893×10^{-8}	1.990	2.572×10^{-7}	2.001	4.773×10^{-7}	1.999
	0.1/15	2.622×10^{-8}	1.997	1.143×10^{-7}	2.000	2.122×10^{-7}	1.999
	0.1/20	1.473×10^{-8}	2.004	6.435×10^{-8}	1.997	1.194×10^{-7}	1.997
	0.1/25	9.405×10^{-9}	2.010	4.123×10^{-8}	1.995	7.652×10^{-8}	1.995

Глава 5 посвящена описанию пакета программ, используемых при проведении компьютерных экспериментов для численных методов моделирования моделей, описываемых дробными уравнениями в частных производных и эффектом запаздывания. Представлены основные характеристики разработанных программных комплексов, позволяющих моделировать влияние временных и пространственных дробных порядков на поведение динамики решений нелинейных дробных моделей с запаздыванием. В этой главе описываются входные и выходные данные программных систем и способы работы с ними. В результате были разработаны четыре программных модуля, соответствующих исследуемому алгоритму. Численные решения, представленные в этой диссертации, получены с использованием программных пакетов, описанных в этой главе. Разработанные методы численного решения рассматриваемых моделей реализованы на языке программирования Mathematica 12.1. Программа для ЭВМ прошла процедуру государственной регистрации программы для ЭВМ, получено соответствующее свидетельство.

В **заключении** представлены основные результаты проделанной диссертационной работы. Указаны рекомендации и возможные направления будущих исследований.

Заключение

Диссертация посвящена разработке и исследованию численных методов решения дифференциальных уравнений дробного порядка с нелинейными эффектами запаздывания. Такого рода эффекты могут часто возникать в реальном мире, например, при моделировании систем автоматического управления с обратной связью, динамики популяций и моделирования сложных биологических процессов. Основные результаты, полученные в диссертации, можно сформулировать следующим образом:

1. Разработан, апробирован и исследован на устойчивость и порядок сходимости явный численный метод, основанный на сочетании разностной схемы типа $L1$ и спектрального приближения Галеркина-Лежандра, для решения нелинейных дробных попространтсву и времени уравнений реакции-диффузии с запаздыванием по времени;

2. Для обобщенных нелинейных многочленных дробных по пространству и времени урав-

нений реакции-диффузии с запаздыванием построена, апробирована и исследована на порядок сходимости и устойчивость гибридная численная схема, основанная на сочетании разностной схемы типа $L1$ и спектрального приближения Галеркина-Лежандра;

3. Для обобщенной модели реакции-диффузии Шнакенберга с запаздыванием разработан, апробирован и исследован на устойчивость и порядок сходимости новый численный алгоритм, основанный на сочетании спектральной аппроксимации Галеркина-Лежандра и разностной схемы типа $L1$;

4. Разработан, протестирован и проанализирован на устойчивость и порядок сходимости эффективный численный алгоритм высокого порядка, основанный на разностной формуле $L2-1$ Алиханова и спектральном приближении Галеркина-Лежандра для нелинейного дробного по пространству и времени уравнения реакции-диффузии уравнения с запаздыванием.

Рекомендации и дальнейшие перспективы разработки темы. Возможные приложения этих выводов включают разработку программных комплексов для численного моделирования различных задач, характеризующихся уравнениями с дробными производными и влиянием запаздывания по времени. В свете этого исследование многочленных задач дробного порядка по времени с эффектами нескольких запаздываний может стать многообещающей областью для будущих исследований по разработке алгоритмов. Другое возможное исследование дальнейших исследований по теме диссертации может быть сосредоточено на разработке и изучении численных методов решения дробных задач, которые демонстрируют эффект распределенного запаздывания. Биологические и медицинские проблемы, а также другие модели реального мира являются обычными местами для такого рода исследовательской деятельности.

Публикации автора по теме диссертации

Статьи, опубликованные в рецензируемых научных журналах, определённых ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ:

1. Omran A.K., Zaky M.A., Hendy, A.S. and Pimenov V.G. An efficient hybrid numerical scheme for nonlinear multiterm caputo time and riesz space fractional-order diffusion equations with delay // Journal of Function Spaces. — 2021. — Vol. 2021. (0.78 п.л. / 0.19 п.л.) (Scopus, WoS)

2. Omran A.K., Zaky M.A., Hendy, A.S. and Pimenov V.G. An easy to implement linearized numerical scheme for fractional reaction–diffusion equations with a prehistorical nonlinear source function // Mathematics and Computers in Simulation. — 2022. — Vol. 200 — P. 218-239. (1.26 п.л. / 0.32 п.л.) (Scopus, WoS)

3. Omran A.K., Zaky M.A., Hendy, A.S. and Pimenov V.G. Numerical algorithm for a generalized form of Schnakenberg reaction-diffusion model with gene expression time delay // Applied Numerical Mathematics. — 2023. Vol. 185. — P. 295–310. (0.9 п.л. / 0.23 п.л.) (Scopus)

4. Omran, A.K. and Pimenov, V.G. High-order numerical algorithm for fractional-order nonlinear diffusion equations with a time delay effect // Aims Mathematics. 2023. Vol. 8(4). P. 7672-7694. (1.32 п.л. / 0.66 п.л.) (Scopus)

Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ

5. Ибрахим Абделрахим Кхалифа Омран, Хенди Ахмед Саид Абдельазиз, Ибрахим Махмуд Абдельсалам Заки. Простая в реализации линейная численная схема для дробных уравнений реакции-диффузии с доисторической нелинейной функцией источника // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022613332. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ Федеральной службы по интеллектуальной собственности России 14 марта 2022 г.

Литература

1. Schnakenberg, J. Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour // Journal of theoretical biology.— 1979. — Vol. 81, no. 3. — P. 389–400.

2. Seirin Lee, S and Gaffney, EA and Baker, RE. The dynamics of Turing patterns for morphogen-regulated growing domains with cellular response delays // Bulletin of mathematical biology.— 2011. — Vol. 73, no. 11. — P. 2527–2551.

3. Yi, F and Gaffney, E A and Seirin-Lee, SE. The bifurcation analysis of Turing pattern formation induced by delay and diffusion in the Schnakenberg system // Discrete & Continuous Dynamical Systems-B.— 2017. — Vol. 22, no. 2. — P. 647.

4. Jiang, W and Wang, H and Cao, X. Turing instability and Turing–Hopf bifurcation in diffusive Schnakenberg systems with gene expression time delay // Journal of Dynamics and Differential Equations.— 2019. — Vol. 31, no. 4. — P. 2223–2247.

5. Alfifi, HY. Stability analysis for Schnakenberg reaction-diffusion model with gene expression time delay // Chaos, Solitons & Fractals.— 2022. — Vol. 155. — P. 111730.

6. Caputo M. The role of memory in modeling social and economic cycles of extreme events // A Handbook of Alternative Theories of Public Economics. — Edward Elgar Publishing, 2014. — P. 245–259.

7. Pourbabaee M., Saadatmandi A. A novel Legendre operational matrix for distributed order fractional differential equations // Applied Mathematics and Computation. — 2019. — Vol. 361. — P. 215–231.

8. Hafez R.M., Zaky M.A., Hendy A.S. A novel spectral Galerkin/Petrov–Galerkin algorithm for the multi-dimensional space–time fractional advection– diffusion–reaction equations with nonsmooth solutions // Mathematics and Computers in Simulation. — 2021. — Vol. 190. — P. 678–690.

9. Zhang, H., Liu, F., Jiang, X. and Turner, I. Spectral method for the two-dimensional time distributed-order diffusion-wave equation on a semi-infinite domain // Journal of Computational and Applied Mathematics. — 2022. — Vol. 399. — P. 113712.

10. Zaky M.A., Hendy A.S., Macías-Díaz J.E. Semi-implicit Galerkin–Legendre spectral schemes for nonlinear time-space fractional diffusion–reaction equations with smooth and nonsmooth solutions // Journal of Scientific Computing. — 2020. — Vol. 82, no. 1. — P. 1–27.

11. Zaky M. A., Hendy A. S. Convergence analysis of an L1-continuous Galerkin method for nonlinear time-space fractional Schödinger equations // International Journal of Computer Mathematics. — 2021. — Vol. 98, no. 7. — P. 1420–1437.

12. Zaky M.A., Hendy A.S., Macías-Díaz J.E. High-order finite difference/spectral-Galerkin approximations for the nonlinear time–space fractional Ginzburg–Landau equation // Numerical Methods for Partial Differential Equations. — 2020.

13. Zaky M.A., Hendy A.S., De Staelen R.H. Alikhanov Legendre—Galerkin spectral method for the coupled nonlinear time-space fractional Ginzburg–Landau complex system // Mathematics. — 2021. — Vol. 9, no. 2. — P. 183.

14. Oldham K. and Spanier J. The fractional calculus theory and applications of differentiation and integration to arbitrary order // Elsevier, 1974.

15. Alikhanov A.A. A new difference scheme for the time fractional diffusion equation // Journal of Computational Physics. — 2015. — Vol. 280. — P. 424–438.

16. Li, L., Zhou, B., Chen, X. and Wang, Z. Convergence and stability of compact finite difference method for nonlinear time fractional reaction–diffusion equations with delay // Applied Mathematics and Computation. — 2018. — Vol. 337. — P. 144–152.

17. Hendy A.S. and Macías-Díaz J.E. A novel discrete Grönwall inequality in the analysis of difference schemes for time-fractional multi-delayed diffusion equations // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. — 2019. — Vol. 73. — P. 110–119.

18. Zaky, M.A., Hendy, A.S., Alikhanov, A.A. and Pimenov, V.G. Numerical analysis of multi-term time-fractional nonlinear subdiffusion equations with time delay: what could possibly go wrong? // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. — 2021. — Vol. 96. — P. 105672.

19. Podlubny, I. Fractional differential equations: an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications // Elsevier 1998. — Vol. 198.

20. Wang, D. and Xiao, A. and Yang, W. Crank–Nicolson difference scheme for the coupled nonlinear Schrödinger equations with the Riesz space fractional derivative // Journal of Computational Physics 2013. — Vol. 242. — P. 670–681.

21. Zeng F. et al. A Crank–Nicolson ADI spectral method for a two-dimensional Riesz space fractional nonlinear reaction-diffusion equation // SIAM Journal on Numerical Analysis. — 2014. — Vol. 52, no. 6. — P. 2599–2622.

22. Shen J. Efficient spectral-Galerkin method I. Direct solvers of second-and fourth-order equations using Legendre polynomials // SIAM Journal on Scientific Computing. — 1994. — Vol. 15, no. 6. — P. 1489–1505.

23. Woolley T. E. et al. Effects of intrinsic stochasticity on delayed reaction-diffusion patterning systems // Physical Review E. — 2012. — Vol. 85, no. 5. — P. 051914.