

DOI: [10.7242/1999-6691/2013.6.2.23](https://doi.org/10.7242/1999-6691/2013.6.2.23)

УДК 519.6

## АДАПТИВНЫЙ АЛГОРИТМ ХРАНЕНИЯ ПОЛЕЙ ПРИ РАСЧЕТЕ ДИНАМИКИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ С НАСЛЕДСТВЕННОЙ ИЛИ ЗАПАЗДЫВАЮЩЕЙ ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ

А.П. Захаров, Д.А. Брацун

*Пермский государственный гуманитарно-педагогический университет, Пермь, Россия*

Предложен новый метод расчета динамики пространственно-распределенной системы, текущее состояние которой зависит от всей или частичной ее предыстории. Метод основан на адаптивном алгоритме оптимизации хранения полей путем запоминания не всех имевшихся в прошлом, а только некоторых из них, называемых опорными. При этом промежуточные состояния восстанавливаются в ходе расчета с помощью интерполяции данных между опорными состояниями. Применение такой методики позволяет производить численные расчеты без использования средств вычислительной техники с большим объемом оперативной памяти. Эффективность предложенного алгоритма показана на примере численного моделирования процессов реакции-диффузии белков, отвечающих за биоритмы в клетках живых организмов.

*Ключевые слова:* пространственно-распределенные динамические системы, запаздывание, наследственные среды, метод конечных разностей, адаптивный алгоритм хранения данных

## ADAPTIVE ALGORITHM FOR FIELDS STORAGE IN CALCULATIONS OF DYNAMICS OF CONTINUOUS MEDIA WITH HISTORY OR TIME DELAYED FEEDBACK

A.P. Zakharov and D.A. Bratsun

*Perm State Humanitarian Pedagogical University, Perm, Russia*

A new method for calculating the dynamics of spatially-extended system the current state of which depends on the whole or partial previous evolution of the system is proposed. The method is based on an adaptive algorithm for optimal data storage by storing in the memory not all previous states of the system, but only some selected of them, called the basic states. The intermediate states are restored by interpolation between the basic states. The use of this technique allows the numerical calculations to be implemented on computer systems without large RAM memory. The effectiveness of the developed algorithm is demonstrated by the example of a numerical simulation of the reaction-diffusion of proteins responsible for biorhythms in cells.

*Key words:* spatially extended dynamical systems, time delay, history force, finite difference method, adaptive algorithm for data storage

### 1. Введение

В последнее время все больший интерес вызывают пространственно-распределенные динамические системы, имеющие запаздывающие или наследственные слагаемые. Если состояние сплошной среды в текущий момент времени зависит от всей ее предыдущей эволюции, то такую среду называют наследственной, и, как правило, ее эволюция описывается интегро-дифференциальными уравнениями. В качестве примера можно привести двухфазную среду, состоящую из жидкости и мелких твердых частиц, между которыми, кроме всего прочего, действует наследственная сила Бассэ, обусловленная всей предысторией нестационарного взаимодействия жидкости и частиц [1, 2]. Другим примером из механики жидкости может служить процесс адсорбции поверхностно-активного вещества на межфазной поверхности: эволюция такой системы также описывается уравнениями, содержащими интегральные слагаемые, зависящие от всей предыстории процессов адсорбции–десорбции в системе [3]. В механике деформируемого твердого тела подобного рода задачи возникают при изучении упруго-наследственных сред, которые также характеризуются интегральной обратной связью [4, 5].

В частном случае, когда состояние системы определяется не всей эволюцией, а только каким-то ее конкретным отрезком в прошлом, говорят о среде с запаздывающей обратной связью. Сфера приложений теории динамических систем с запаздывающим аргументом обширна. Она включает в себя популяционную динамику и социальные процессы [6], нелинейные химические реакции [7], процессы геной регуляции [8], поведение систем с автоматическим управлением [9], механику жидкости [10, 11] и так далее. Запаздывание может быть обусловлено самыми различными причинами: ограниченностью скорости распространения сигнала (электромагнитная волна в релятивистской электродинамике), растянутостью изучаемого процесса во времени (воспроизводство популяции в биологии), наличием инерционности некоторых элементов (обратная связь в теории управления), существованием длинных цепочек многоэтапных реакций с известным результатом в конце (процессы транскрипции–трансляции в математической генетике) и другим.

Так как математический анализ сплошных сред с наследственными или запаздывающими силами имеет нетривиальный характер, исследователи стараются рассматривать модели, не содержащие такие

слагаемые. В ряде случаев редукция, примененная к системе без запаздывания (или наследования), дает вполне адекватное описание реальных процессов. Однако чаще всего такое допущение приводит к неправильным результатам. Так, отбрасывание слагаемого с наследственной силой Бассэ в задаче изучения вибраций жидкости с частицами приводило к различию данных теории и эксперимента в несколько раз [2], а пренебрежение эффектом запаздывания долгое время скрывало природу наблюдаемой экспериментально колебательной конвекции в термосифоне [9].

Необходимо отметить, что подавляющее число практически важных задач с наследственной или запаздывающей обратной связью не имеет аналитического решения, а нахождение численного решения затруднено необходимостью запоминать большие объемы данных. Когда отказаться от учета эффектов наследования и запаздывания невозможно, возникает стремление свести общую пространственно-временную задачу к рассмотрению эволюции только по времени, например, с помощью метода прямых [12]. И тогда поведение системы описывается обыкновенными дифференциальными уравнениями, для которых разработаны эффективные методы решения [13].

Вообще говоря, наиболее распространенным методом расчета пространственно-распределенных динамических систем является конечно-разностный метод. Простейшая явная схема позволяет организовать расчет с привлечением пространственных полей всего для двух моментов времени. Особенность сплошной среды, имеющей наследственную или запаздывающую обратную связь, заключается в том, что для нахождения текущего состояния необходимо иметь данные о ее состоянии в пределах всего времени эволюции (запаздывания). На практике такой подход реализуем только для сравнительно малоразмерных моделей с небольшим временем эволюции или запаздывания. В противном случае объем обрабатываемой информации и время расчета значительно возрастают. Оценки показывают, что даже для двумерных моделей сплошных сред прямолинейное хранение информации для всех временных слоев требует настолько значительных объемов оперативной памяти, что ставит под вопрос работу на персональных компьютерах. Обращение к конечно-разностным схемам с переменным шагом по времени или расчет эволюции трехмерных пространственных моделей только усугубляют ситуацию.

В данной работе предлагается простой алгоритм, в котором в рамках временного диапазона запаздывания (или всей эволюции системы) достаточно запоминать только некоторые пространственные поля, а недостающую информацию интерполировать в ходе проведения расчета. Идею хранения информации о базовых слоях авторам подсказал хорошо известный алгоритм компрессии видеопотока MPEG-2, в котором с целью снижения временной избыточности производится прореживание кадров из общего видеоряда [14]. Как известно, разработчики алгоритма разделяют все кадры на несколько типов, в различной степени содержащих необходимую информацию об изображении. Применение MPEG-2 алгоритма приводит к уменьшению объема данных видеопотока на порядок без существенного ухудшения качества изображения.

Новизна исследования заключается в создании адаптивного алгоритма хранения данных и использовании его при расчете пространственно-распределенных задач механики сплошной среды, в которых присутствует наследственная или запаздывающая обратная связь. Эффективность метода демонстрируется на примере численного моделирования процессов реакции-диффузии белков, ответственных за поддержание биоритмов в клетках.

## 2. Метод конечных разностей для пространственно-распределенных систем с наследственной или запаздывающей обратной связью

Рассмотрим систему безразмерных нелинейных кинетических уравнений, описывающих поведение пространственно-распределенной динамической системы диффузионного типа:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = f \left( \mathbf{U}(t), \mathbf{U}(t - \tau), \int_0^t \mathbf{U}(t - \lambda) dg(\lambda) \right) + D \Delta \mathbf{U}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{U}(t, x, y, z)$  — набор физических (механических, химических, биологических) переменных, которые характеризуют нелинейную кинетику системы в отсутствие диффузии;  $D$  — матрица коэффициентов пространственной диффузии;  $\Delta$  — оператор Лапласа в декартовых координатах  $x$ ,  $y$  и  $z$ . Нелинейная функция  $f$  может содержать как обычные слагаемые  $\mathbf{U}(t, x, y, z)$ , которые зависят только от текущего времени  $t$ , так и наследственные интегральные слагаемые, обусловленные всей предыдущей эволюцией системы. В частном случае, когда текущее состояние системы в момент  $t$  определяется одним фиксированным состоянием в прошлом  $t - \tau$ , наследственная обратная связь становится запаздывающей. Для замыкания система уравнений (1) должна быть дополнена граничными и начальными условиями.

Численное исследование сплошных сред вида (1), как правило, осуществляется с помощью метода конечных разностей, который является одним из наиболее распространенных численных методов решения уравнений в частных производных. При построении разностных схем заметным преимуществом обладают

явные схемы, отличающиеся логической простотой в сочетании с надежностью. Однако, в сравнении с неявными схемами, они обладают одним существенным недостатком, а именно жестким ограничением величины шага по времени для обеспечения устойчивости схем. Тем не менее, популярность явных схем как вычислительных инструментов только растет, так как целью современного научного анализа динамических систем все чаще становится не просто поиск стационарных решений для них, а скорее изучение их нелинейной динамики. Кроме того, появление высокопроизводительных вычислительных систем позволило серьезно компенсировать ограниченность явных методов. Но при этом возникает одна из ключевых проблем численного моделирования пространственно-распределенных систем — несовершенство архитектуры вычислительной техники, выражающееся в задержке («лаге») при передаче данных от процессора к оперативной памяти, и небольшой размер кэш-памяти процессора. Указанные проблемы проявляют себя в полной мере в задачах вида (1), в которых на каждом шаге по времени в расчетах участвуют данные о прошлых состояниях системы, что приводит к необходимости хранения большого объема данных.

Введем в рассмотрение равномерную пространственную сетку

$$x_i = ih \quad (i = \overline{0, N_x}); \quad y_j = jh \quad (j = \overline{0, N_y}); \quad z_k = kh \quad (k = \overline{0, N_z}), \quad (2)$$

где  $h$  — шаг сетки,  $N_x, N_y, N_z$  — количество узлов вдоль координат  $x, y, z$  соответственно. Запишем систему уравнений (1) в конечно-разностной форме, используя на сетке (2) центральные разности для пространственных производных и разность вперед для производной по времени с шагом по времени  $\theta$ .

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{i,j,k}^{n+1} = & \mathbf{U}_{i,j,k}^n + \theta \left( f \left( \mathbf{U}_{i,j,k}^n, \mathbf{U}_{i,j,k}^{n-L}, \frac{1}{2} \sum_{L=1}^n (g(\lambda_{L+1}) - g(\lambda_L)) (\mathbf{U}_{i,j,k}^{n-L-1} + \mathbf{U}_{i,j,k}^{n-L}) \right) + \right. \\ & \left. + \frac{D}{h^2} (\mathbf{U}_{i+1,j,k}^n + \mathbf{U}_{i-1,j,k}^n + \mathbf{U}_{i,j+1,k}^n + \mathbf{U}_{i,j-1,k}^n + \mathbf{U}_{i,j,k+1}^n + \mathbf{U}_{i,j,k-1}^n - 6\mathbf{U}_{i,j,k}^n) \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Как видно из выражения (3), для вычисления поля на  $(n+1)$ -м шаге по времени требуется информация о поле не только в предыдущий момент времени  $n$ , но и в момент  $n-L$  в прошлом (при запаздывающей обратной связи) или даже во все предыдущие моменты времени от 1-го до  $n$ -го (при наследственной обратной связи). Если общее время эволюции  $t$  (или время запаздывания  $\tau$ ) достаточно велико, то велико и число  $L$ . Необходимо сохранять в памяти компьютера данные для всех временных слоев, так как они участвуют в построении решения. Ситуация усугубляется еще и тем, что для явной схемы очень важно контролировать шаг по времени: для сохранения устойчивости схемы он должен быть меньше заданного значения  $\theta$  (критерий Куранта):

$$\theta < \frac{h^2}{2 \max |\mathbf{U}|}. \quad (4)$$

Допустим, что размер интегрируемой области  $l = 50$  и рассматривается однородная сетка  $100 \times 100 \times 100$ . Если время запаздывания в системе  $\tau = 10$ , то согласно критерию Куранта (4) должно выполняться неравенство  $\theta \leq 0,125$  (при условии  $\max |\mathbf{U}| \approx 1$ , что довольно часто имеет место, например, в задачах реакции-диффузии). Тогда в диапазон времени запаздывания укладывается не менее 80 фиксированных шагов по времени. Если каждый элемент сеточной функции определяется вещественным числом, занимающим 8 Б памяти, то для хранения данных потребуется выделить порядка 610,4 МБ памяти. В данном случае, с учетом обстоятельства, что запаздывающие значения необходимо иметь на каждом шаге по времени, организация хранения данных на внешнем носителе становится недопустимой, так как будет нуждаться в значительных затратах времени на доступ к этим устройствам. Выгрузка данных в кэш-память процессора также не возможна, так как эта память имеет ограниченный объем: на момент написания статьи максимальный размер кэш-памяти даже третьего уровня (L3-cache) составляет немногим более 24 МБ. Таким образом, ключевым фактором, влияющим на быстроту проведения расчетов, становится выгрузка в оперативную память больших объемов данных на каждом шаге по времени. Считывание из оперативной памяти также занимает определенное время.

Если величины компонент вектора  $\mathbf{U}$  в ходе эволюции испытывают значительные колебания, то шаг по времени, согласно критерию (4), также меняется. При запаздывающей обратной связи возникает следующая проблема: если на промежутке времени запаздывания целое число сделанных шагов не укладывается, то в момент  $t - \tau$  просто не существует  $\mathbf{U}$ , нужного для построения текущего поля. В этом случае необходимо либо сгенерировать недостающее поле путем интерполяции по двум ближайшим соседям, либо отказаться от плавающего шага по времени.

Для преодоления всех этих трудностей авторами работы предлагается следующее решение: осуществлять хранение данных в памяти не на каждом шаге по времени, а только в некоторые моменты, которые будем называть опорными; значения переменных для промежуточных слоев времени восстанавливать путем интерполяции данных с опорных слоев (Рис. 1). Предполагается, что в зависимости от параметров конкретной модели, гладкости искомых функций и размерности накладываемой сетки могут быть задействованы различные виды интерполяции.

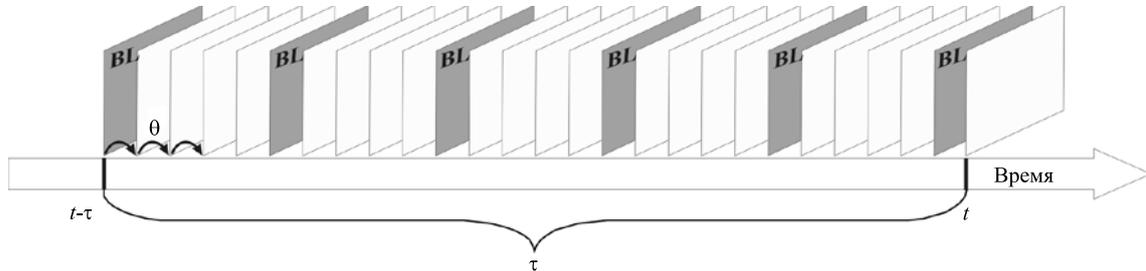


Рис. 1. Схема выделения опорных временных слоев (отмечены аббревиатурой BL):  $t$  – текущее время расчета,  $\tau$  – время запаздывания,  $\theta$  – шаг по времени

Вторая идея алгоритма заключается в выборе оптимального количества опорных слоев, то есть предполагается, что в процессе расчета плотность расположения таких слоев в пределах некоторого временного отрезка может меняться. Частота выделения опорных слоев при расчете той или иной функции обуславливается ее гладкостью, и это позволяет фиксировать точность вычислений. Кроме того, данный адаптивный подход приводит к снижению погрешности в системах с динамически меняющимся шагом по времени.

При оценке гладкости векторной функции  $\mathbf{U}$  введем функцию  $G$ , которая описывает относительную величину максимального изменения любой из ее компонент  $U(t, x, y, z)$  в момент времени  $t + \theta$ :

$$G(t + \theta) = \max \left( \frac{|U(t + \theta, x, y, z) - U(t, x, y, z)|}{U(t, x, y, z)} \right), \text{ если } 0 \leq x \leq N_x, 0 \leq y \leq N_y, 0 \leq z \leq N_z. \quad (5)$$

Для определенности допустим, что в пространственно-распределенной системе (1) имеется только запаздывающая обратная связь. Введем в рассмотрение важный для алгоритма параметр  $K$ , задающий количество слоев в интервале запаздывания, которые должны стать опорными, заносимыми в оперативную память.

По-видимому, установить связь между параметром  $K$  и переменной  $G(t)$ , задаваемой (5), в самом общем виде не представляется возможным. Вид их функциональной связи зависит от конкретной задачи. Например, известно, что для задач реакции-диффузии, когда концентрации реагентов в процессе эволюции могут меняться только в рамках заданных пределов, что соответствует  $G > 0,1$ , хранить следует все данные ( $K = 1$ ). При меньших значениях  $G(t)$  алгоритм можно употреблять без существенной потери точности. Для минимизации погрешности интерполяции и соблюдения достаточно высокой скорости расчета параметр должен принимать значения из отрезка  $[1 \leq K \leq 20]$ . Наибольший положительный эффект применения данного алгоритма проявляется, если функция  $G(t)$  мала: в этом случае в диапазоне до значения 0,01: в этом случае для вычисления запаздывающего значения можно ограничиться каждым 20-м временным слоем ( $K = 20$ ) и тем самым сократить объем хранимых данных и количество операций с ними. При больших значениях параметра  $K$  удовлетворить заданной точности расчетов становится сложнее. Таким образом, для задач реакции-диффузии оптимальное число опорных слоев может быть найдено из соотношений:

$$K = \frac{\tau}{\theta(1 + \exp^{(2-50G)})}, \quad (6)$$

где  $\theta_\tau$  — промежуток времени между соседними опорными слоями:

$$\theta_\tau = \frac{\tau}{K} = \theta(1 + \exp^{(2-50G)}). \quad (7)$$

Понятно, что число  $K$  принимает только целочисленные значения, каждое из которых означает, что в потоке данных опорным становится каждый  $K$ -й слой, поэтому при использовании (6) как одного из возможных соотношений предполагается округление полученного значения  $K$  в меньшую сторону. В случае, когда моделируемая функция достаточно быстро меняется, для максимально точного расчета запаздывающих значений необходимо оперировать всеми данными в пределах диапазона запаздывания:  $K=1$ . Эта величина параметра соответствует отказу от алгоритма и переходу к прямолинейному запоминанию всего потока данных.

Соотношения (6), (7) позволяют задать степень детализации информационных полей, хранимых в памяти компьютера, в зависимости от скорости изменения функции  $U$ , которая определяется переменной  $G(t)$ . При этом параметр  $K$  не зависит от шага по времени, вследствие чего можно избавиться от лишних данных, когда функция меняется слабо (Рис. 2).

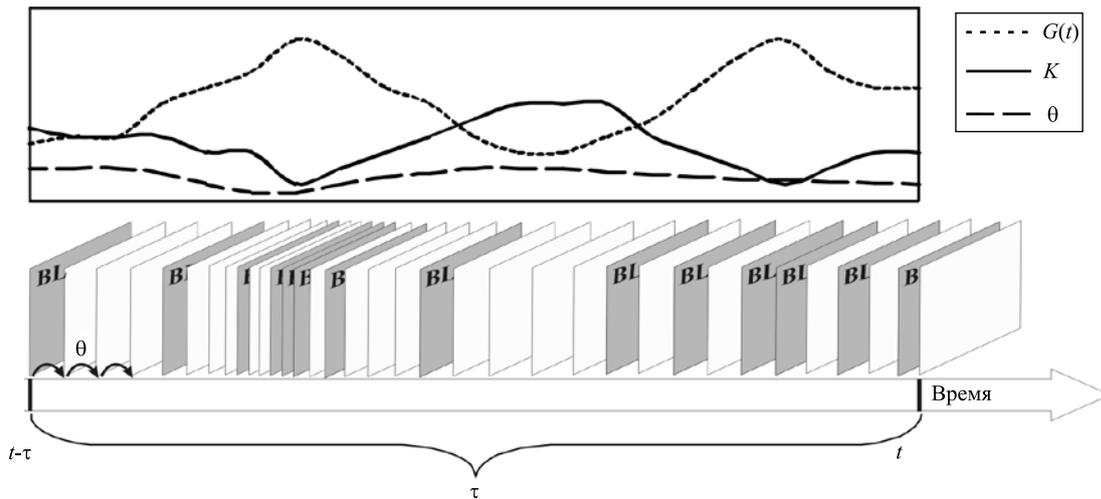


Рис. 2. Зависимость количества опорных слоев от гладкости функции в случае адаптивного метода

Очевидно, что в рамках предлагаемого метода возникает проблема восстановления значений полей для всех временных слоев, данные для которых не запоминаются в ходе расчета. С учетом того, что число опорных слоев в потоке данных может варьироваться, для получения запаздывающих значений применяется интерполяционный полином Ньютона с разделенными разностями [15]. Процедура производится для каждого узла сетки, при этом узлами интерполирования являются значения всех хранимых опорных слоев (Рис. 3).

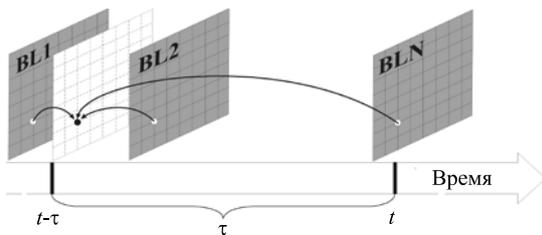


Рис. 3. Схема интерполяции данных неопорного слоя по хранимым в памяти данным опорных слоев

Необходимо заметить, что восстанавливаемый временной слой всегда находится между первым и вторым опорными слоями (Рис. 3). Если функция  $G(t)$  достаточно гладкая, то при построении полинома для сокращения времени расчета можно принимать во внимание только эти опорные слои. Но в общем случае для  $N$  опорных слоев многочлен Ньютона имеет вид:

$$P_N(t - \tau, x, y, z) = R(U_{BL1}(x, y, z)) + (t - \tau - t_{BL1})R(U_{BL1}(x, y, z), U_{BL2}(x, y, z)) + \dots + (t - \tau - t_{BL1})(t - \tau - t_{BL2}) \dots (t - \tau - t_{BLN})R(U_{BL1}(x, y, z), \dots, U_{BLN}(x, y, z)), \quad (8)$$

где  $R$  — разделенная разность соответствующего порядка  $N$ ,  $t_{BLN}$  — время записи опорного слоя  $N$ ,  $U_{BLN}(x, y, z)$  — компонента вектора  $U$  для слоя  $N$ . Общее число хранимых слоев  $N$  в периоде запаздывания зависит от параметра  $K$  и шага по времени. В простейшем случае, когда  $K$  и шаг по времени  $\theta$  фиксированы, значение  $N$  можно определить как  $N = \tau / (K\theta)$ , а при использовании адаптивного алгоритма хранения опорных слоев на каждом шаге по времени формула (8) имеет тот порядок  $N$ , который соответствует количеству опорных слоев в момент времени  $t$ . Важно, что изложенный алгоритм адаптивного хранения совершенно не зависит от численной схемы — он лишь устанавливает порядок хранения данных за время эволюции (или время запаздывания) системы. Например, алгоритм расчета может быть легко обобщен на использование неявной конечно-разностной схемы.

### 3. Пример реализации метода: расчет пространственной динамики биоритмов

В работе [16] авторами предложена модель, описывающая пространственно-временную динамику белков, ответственных за механизм биоритмов в живых клетках. Главным элементом механизма, вызывающего колебания, служит эффект запаздывания в биохимических реакциях транскрипции генов (переноса генетической информации с молекул ДНК на молекулы РНК) [8]. Так как вывод модельных уравнений имеет громоздкий вид, здесь он не приводится. Представим только конечные уравнения реакции-диффузии:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{1}{1+4K_1^F F} \left( k_F \frac{K_1^W K_2^F W^2 (t-\tau)}{1+K_1^W K_2^F W^2 (t-\tau)} - \gamma_F F - k F W \right) + D \Delta_{xy} F, \quad (9)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{1+4K_1^W W} \left( k_W \frac{K_1^F K_2^W F^2 (t-\tau)}{1+K_1^F K_2^W F^2 (t-\tau)} - \gamma_W W - k F W \right) + D \Delta_{xy} W, \quad (10)$$

где  $F$ ,  $W$  обозначают концентрации белков  $FRQ$  и  $WCC$  в момент времени  $t$  в точке с координатами  $(x, y)$  (так маркируются специфические белки, ответственные за работу биологических часов в клетках);  $K_i^{F,W}$ ,  $k_{F,W}$ ,  $\gamma_{F,W}$ ,  $k$  — параметры задачи;  $\Delta_{xy}$  — оператор Лапласа в двух пространственных измерениях  $x$  и  $y$ .

Запаздывание по времени в системе (9), (10) возникает следующим образом. При считывании генетической информации в момент времени  $t$  РНК-полимераза (фермент, осуществляющий синтез молекул РНК) прикрепляется к началу гена, и процесс транскрипции стартует. Конечным продуктом этой реакции являются мономеры белка, которые образуются в момент времени  $t + \tau$ . Время запаздывания  $\tau$  необходимо системе, чтобы полностью считать информацию от начала до конца гена, перекодировать ее в матричную РНК (мРНК), а затем синтезировать белок. Когда в момент времени  $t$  система запускает процесс, ей известно, что он завершится в момент  $t + \tau$ . Таким образом, система запаздывает с принятием решения на время  $\tau$  из-за существования обратной связи. Хотя времена запаздывания  $\tau_F$  и  $\tau_W$  для синтеза белков  $FRQ$  и  $WCC$  соответственно, вообще говоря, разные, положим для простоты:  $\tau_F = \tau_W = \tau$ .

В численных расчетах, представленных ниже, использовались следующие значения параметров:  $K_i^{F,W} = 5 \text{ нмоль}^{-1} \cdot \text{ч}$ ,  $k_F = 8 \text{ нмоль} \cdot \text{ч}^{-1}$ ,  $k_W = 4 \text{ нмоль} \cdot \text{ч}^{-1}$ ,  $k = 30 \text{ нмоль}^{-1} \cdot \text{ч}^{-1}$ ,  $\gamma_F = 0,3 \text{ ч}^{-1}$ ,  $\gamma_W = 0,4 \text{ ч}^{-1}$ ,  $\tau = 6 \text{ ч}$ . Система уравнений (9), (10) интегрировалась в квадратной области  $\Sigma$ :  $(0 < x < 100 \text{ см}, 0 < y < 100 \text{ см})$ , на границе которой задавались условия отсутствия потока:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x=0,100} = 0, \quad \left. \frac{\partial F}{\partial y} \right|_{y=0,100} = 0, \quad \left. \frac{\partial W}{\partial x} \right|_{x=0,100} = 0, \quad \left. \frac{\partial W}{\partial y} \right|_{y=0,100} = 0. \quad (11)$$

Начальным условием являлось случайное равномерное (порожденное генератором псевдослучайных чисел) распределение концентраций реагентов в интервале  $[0; 2]$ . Чтобы запустить процесс расчета в промежутке времени  $[-6; 0]$ , поля концентрации также задавались как гармонические функции

$$F(t, x, y) = A_F \sin(\omega_F t + \varphi_F), \quad W(t, x, y) = A_W \cos(\omega_W t + \varphi_W) \quad (12)$$

со случайно задаваемыми для каждого узла сетки амплитудой  $A_{F,W} \in [0; 1]$ , фазой  $\varphi_{F,W} \in [0; 5]$  и частотой  $\omega_{F,W} \in [0,2; 6,2]$ .

Решение краевой задачи (9)–(11) осуществлялось с помощью метода конечных разностей с использованием алгоритма хранения данных, изложенного выше. Уравнения и граничные условия аппроксимировались на равномерной сетке  $200 \times 200$  узлов с помощью аппроксимаций второго порядка по пространственным координатам. Применялась явная схема (3); для обеспечения ее устойчивости шаг по времени вычислялся по формуле (4). При данных параметрах шаг по времени составлял  $\theta \leq 0,03 \text{ ч}$ . Таким образом, в ходе эволюции в пределах диапазона запаздывания ( $\tau = 6 \text{ ч}$ ) выполнялось не менее 200 шагов по времени.

Как было сказано выше, прямолинейный подход к проблеме хранения данных подразумевает запоминание ЭВМ информации со всех временных слоев для каждого реагента двухкомпонентной системы в пределах диапазона запаздывания. Если расчет производится для данных вещественного типа,

требуемая память для хранения значения в каждом элементе составляет 10 Б. Соответственно минимальный размер выделяемой оперативной памяти для хранения одного временного слоя одного компонента равен приблизительно 390,63 КБ, а всего массива данных — 76,3 МБ. В случае двухкомпонентной системы необходимый объем памяти удваивается.

#### 4. Анализ результатов расчетов

Для оценки эффективности разработанного авторами адаптивного метода произведен сравнительный расчет пространственно-временной динамики белков по модели (9)–(11) с хранением данных обо всех опорных слоях в пределах диапазона запаздывания ( $K = 1$ ). В самом начале эволюции, когда хранимые в памяти опорные слои еще отсутствовали, расчет осуществлялся следующим образом: при  $(t - \tau) \leq 0$  в каждом узле сетки функции возвращалось ее значение, заданное в виде гармонической функции, определяемой набором случайных значений частоты, амплитуды и фазы (12). Этот подход к экстраполяции эволюции системы позволял одновременно задавать начальные условия, а также производить разделение по фазам в системе. При  $(t - \tau) > 0$  в случае совпадения времени  $t - \tau$  со временем записи данных об одном из хранимых слоев бралась информация с хранимого слоя; если же ни у одного из хранимых слоев не оказывалось времени записи, равного  $t - \tau$ , то в ход пускалась формула интерполяции Ньютона (8) для нахождения приближенного значения функции (см. Рис. 3).

С точки зрения программной реализации методов организации хранения опорных слоев хранение осуществлялось с применением динамических массивов по принципу очереди и таким образом, что  $t_1 \leq (t - \tau) \leq t_2$ , где  $t_1, t_2$  — время записи первого и второго опорных слоев. Основным критерием эффективности данного метода является полное время вычислений по модели. В таблице представлена зависимость этого времени от параметра  $K$ . Видно, что в случае, когда в памяти хранится каждый 20-й слой по времени ( $K = 20$ ), расчет завершается в 10,5 раз быстрее, причем, как оказалось, вне зависимости от технических параметров вычислительной машины. Естественно, что время расчета динамики системы обуславливается вычислительной мощностью конкретного компьютера, но степень ускорения остается неизменной. Указанное в таблице время замерялось на машине Intel Core 2 Quad Q8300.

Таблица. Ускорение расчета при использовании различных способов хранения данных

Способ хранения данных	Послойный, с количеством слоев $K$					Согласно адаптивному алгоритму
	1	2	5	10	20	
Результаты расчета						
Полное время, с	7012	2320	913	720	665	909
Ускорение процедуры, раз	1	3,02	7,68	9,74	10,54	7,71

Однако для определения минимально допустимого количества опорных слоев необходимо учитывать вносимую методическую погрешность. Параметрами обсуждаемой модели, по изменению значений которых может оцениваться точность получаемых результатов, были выбраны период, амплитуда и сдвиг фазы колебаний концентрации реагентов.

Оценка проводилась следующим образом: для каждого значения параметра  $K$  выполнялась серия расчетов с выводом данных из различных узлов сетки. Затем временные ряды для каждого расчета в одинаковых узлах сопоставлялись и находилось среднее значение искомой величины.

Более детально схема вычислений для сравнения эффективности различных методов хранения информации выглядит следующим образом:

1. Задавался фиксированный набор узлов сетки, используемых для оценки (например 10 узлов).
2. Выбиралось значение параметра  $K$  (например  $K = 1$ ).
3. Производился расчет согласно модели.
4. По временному ряду каждого узла устанавливалось значение амплитуды, частоты, а также фазы колебаний в конечный момент времени расчета.
5. Находилось среднее значение амплитуды, частоты и фазы для всех временных рядов.
6. Осуществлялся повтор действий пунктов 2–5 для остальных значений параметра  $K$  ( $K = [2; 5; 10; 20]$  или запускался алгоритм адаптивного метода).
7. По результатам пункта 6, согласно формуле  $\delta = 100(X_1 - X)/X_1$ , где  $X_1$  — значение оцениваемого параметра задачи при  $K = 1$ , вычислялась вносимая методическая погрешность.

Результаты расчета показаны на диаграмме (Рис. 4), из которой видно, что значительное увеличение погрешности вычислений происходит тогда, когда значение параметра  $K$  превышает 5. Если проследить за колебаниями концентрации в одном из узлов сетки, то можно заметить, что наиболее точные значения получаются при использовании послойного метода с количеством слоев  $K = 2$  и адаптивного метода, однако полное время расчета существенно больше при послойном хранении информации (Рис. 5).



Рис. 4. Погрешность применения метода при различных степенях детализации хранимых слоев; графы 1, 2, 5, 10, 20 соответствуют фиксированным значениям  $K$ ; адаптивный метод подразумевает изменение  $K$  согласно выражениям (5), (6)

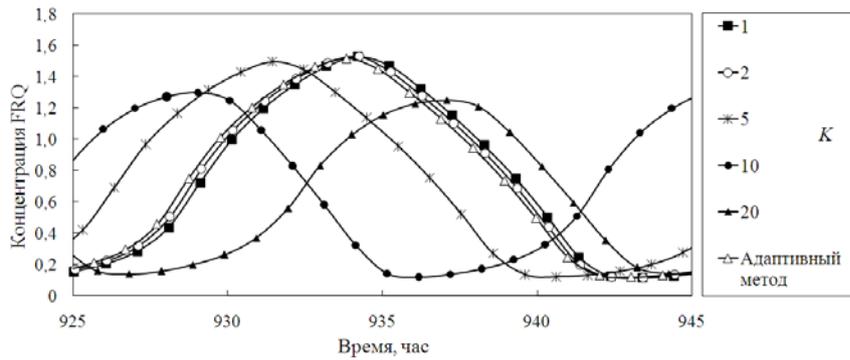


Рис. 5. Временной ряд для узла [20, 20] при различных способах хранения информации

Представляется интересным, каким образом предлагаемый метод влияет на точность воспроизведения пространственно-временных структур. Как следствие сильной нелинейности данной системы, даже малые отклонения в периоде, амплитуде и фазе колебаний могут приводить к значительным изменениям структуры. Рисунок 6 содержит поля концентрации белка  $FRQ$  после 1000 единиц времени эволюции для четырех различных вариантов расчета. Первый фрагмент (Рис. 6, а) соответствует стандартному подходу к решению задачи, когда в оперативной памяти компьютера хранятся данные каждого шага

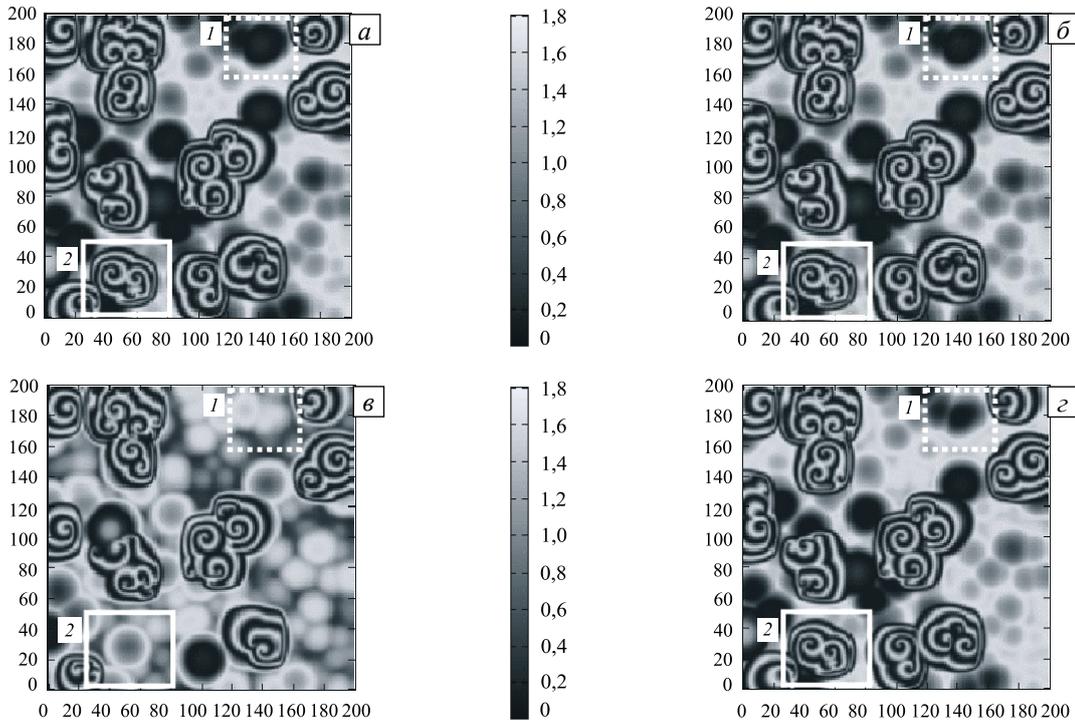


Рис. 6. Поле концентрации компонента  $FRQ$  в момент времени 1000 часов, для различных вариантов расчетов:  $K=1$  (хранение 100% слоев в диапазоне запаздывания) (а),  $K=2$  (хранение 50% слоев) (б),  $K=20$  (хранение 5% слоев) (в), адаптивный метод (г)

по времени в пределах диапазона запаздывания ( $K = 1$ ). При запоминании информации только о половине временных слоев ( $K = 2$ ) пространственное распределение концентрации реагента практически не меняется (Рис. 6, б). При использовании каждого 20-го слоя как опорного ( $K = 20$ ) результат вычислений имеет другое качество (Рис. 6, в). Это хорошо видно при сравнении взятых в рамку участков поля с эталонными (см. Рис. 6, а). Вследствие сильной погрешности, вносимой методом с детализацией хранимых слоев при  $K = 20$ , в области 1 на рисунке 6, в значения концентрации белка находятся в противофазе с эталонными значениями, а в области 2 вообще не наблюдается развитие спиральной волны, которая имеет место при эталонном расчете. Адаптивная схема отбора числа опорных слоев показывает превосходный результат — поле концентраций вплоть до мелких деталей совпадает с результатами применения прямого подхода (Рис. 6, з).

## 5. Заключение

В работе предложен новый алгоритм оптимизации хранения информации о промежуточных полях искомым величин при численном расчете эволюции пространственно-распределенных систем с наследственной или запаздывающей обратной связью. Алгоритм предполагает хранение в памяти данных не со всех, а только с некоторых опорных временных слоев и последующую интерполяцию для восстановления данных с промежуточных слоев. В качестве примера рассмотрена реализация конечно-разностного метода при численном моделировании процессов реакции-диффузии, запаздывающих по времени. Показано, что предложенный алгоритм позволяет существенно сократить время расчета при незначительном росте относительной погрешности. Применение данной методики допускает реализацию численных расчетов без обращения к вычислительным системам с большим объемом оперативной памяти.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (ГК № 1.3103.2011), Министерства образования и науки Пермского края (соглашение С-26/244) и Пермского государственного гуманитарно-педагогического университета (в рамках проекта № 031-Ф Программы стратегического развития университета).

## Литература

1. Нигматулин П.И. Основы механики гетерогенных сред. – М.: Наука, 1978. – 336 с.
2. Bratsun D.A. Effect of unsteady forces on the stability of non-isothermal particulate flow under finite-frequency vibrations // *Microgravity Sci. Tec.* – 2009. – V. 21, N. 1. – P. 153-158. DOI
3. Joos P. Dynamic Surface Phenomena. – The Netherlands: VSP BV, Utrecht, 1999. – 360 p.
4. Работнов Ю.Н. Элементы наследственной механики твердых тел. – М.: Наука, 1977. – 384 с.
5. Голотина Л.А., Шардаков И.Н. Численное моделирование термомеханического поведения аморфно-кристаллических полимеров с памятью формы // *Вычисл. мех. сплош. сред.* – 2011. – Т. 4, № 4. – С. 5-10. DOI
6. Мюррей Дж. Математическая биология. Том 1. Введение. – М.-Ижевск: Изд-во ИКИ-РХД, 2009. – 774 с.
7. Gourley S.A., So J.W.-H., Wu J.H. Nonlocality of reaction-diffusion equations induced by delay: biological modeling and nonlinear dynamics // *Journal of Mathematical Sciences.* – 2004. – V. 124, N. 2. – P. 5119-5153. DOI
8. Bratsun D., Volfson D., Hasty J., Tsimring L.S. Delay-induced stochastic oscillations in gene regulation // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* – 2005. – V. 102, N. 41. – P. 14593-14598. DOI
9. Янушевский Р.Т. Управление объектами с запаздыванием. – М.: Наука, 1978. – 416 с.
10. Брацун Д.А., Зюзгин А.В., Половинкин К.В., Путин Г.Ф. Об активном управлении равновесием жидкости в термосифоне // *ПЖТФ.* – 2008. – Т. 34, № 15. – С. 36-42.
11. Петров И.А., Славнов Е.В. Моделирование течения в шнеке с радиальным зазором как системы с распределенной обратной связью, описываемой дифференциальным уравнением с запаздывающим аргументом // *Вычисл. мех. сплош. сред.* – 2012. – Т. 5, № 1. – С. 107-113. DOI
12. Пименов В.Г. Численные методы решения уравнения теплопроводности с запаздыванием // *Вестн. Удмуртск. ун-та. Матем. мех. Компьютер. науки.* – 2008. – № 2. – С. 113-116.
13. Эльсгольц Л.Э., Норкин С.Б. Введение в теорию дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом. – М.: Наука, 1971. – 296 с.
14. Эломон Д. Сжатие данных, изображения и звука. – М.: Техносфера, 2004. – 368 с.
15. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
16. Брацун Д.А., Захаров А.П. Моделирование пространственно-временной динамики циркадианных ритмов *Neurospora crassa* // *Компьютерные исследования и моделирование.* 2011. – Т. 3, № 2. – С. 191-213.

Поступила в редакцию 17.01.13; опубликована в электронном виде 15.07.13

## Сведения об авторах

Брацун Дмитрий Анатольевич, дфмн, зав.каф., Пермский государственный гуманитарно-педагогический университет (ПГГПУ), 614600, Пермь, ул. Сибирская, д. 24, E-mail: dmitribratsun@rambler.ru

Захаров Андрей Павлович, асп., ПГГПУ, E-mail: az1211@mail.ru