

УДК 519.635.2

К вопросу о численном расчете пространственно-распределенных динамических систем с запаздыванием по времени

Д. А. Брацун, А. П. Захаров

Пермский государственный педагогический университет
Россия, 614600, Пермь, ул. Сибирская, 24
az1211@mail.ru; +79222465522

Предложен новый алгоритм оптимизации хранения промежуточных полей при численном расчете эволюции пространственно-распределенных запаздывающих систем методом конечных разностей. Алгоритм предполагает хранение в памяти не всех, а только некоторых опорных временных слоев и последующую интерполяцию данных при восстановлении промежуточных слоев. Применение данной методики позволяет производить численные расчеты без использования вычислительных систем с большим объемом оперативной памяти. Эффективность предложенного алгоритма продемонстрирована на примере численного моделирования процессов транскрипции белков, определяющих циркадианные ритмы в клетках.

Ключевые слова: *пространственно-распределенные динамические системы; запаздывание; метод конечных разностей.*

Введение

В последнее время все больший интерес вызывают динамические системы, имеющие наследственные слагаемые. Состояние такой динамической системы в какой-то фиксированный момент времени может зависеть в общем случае от всей предыдущей эволюции системы или определяться только конкретным моментом в прошлом. В последнем случае возникает динамическая система, зависящая от запаздывающего аргумента. Диапазон приложений теории таких систем включает в себя популяционную динамику и социальные процессы [1–3], нелинейные химические реакции

[4] и процессы генной регуляции [5], поведение систем с автоматическим управлением [6, 7], механику жидкости [8–10] и т.д. Запаздывание может быть обусловлено самыми различными причинами, например, растянутостью изучаемого процесса во времени (воспроизводство популяции в биологии), ограниченностью скорости распространения сигнала (электромагнитная волна в релятивистской электродинамике), наличием инерционности некоторых элементов (в теории управлении с обратной связью) или существованием цепочек многоэтапных последовательных реакций с известным результатом в конце (процессы транскрипции-трансляции в математической генетике). В ряде случаев исключение запаздывания из рассмотрения эволюции системы позволяет относительно адекватно описывать реальные процессы. Однако зачастую такое упрощение приводит к парадоксальным выводам [11]. Необходимо отме-

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования Пермского края (грант С-26/244), Министерства науки и образования РФ и ФЦП (ГК № 14.740.11.0352), проекта №031-Ф Программы стратегического развития ПГПУ.

© Брацун Д. А., Захаров А. П., 2012

тить, что уравнения, содержащие члены с запаздывающими аргументами, анализировать непросто. В подавляющем числе случаев подобные задачи не удастся решить аналитически, а численное решение также вызывает определенные трудности.

Среди моделей с запаздыванием особое место занимают пространственно распределенные системы, так как они дают возможность изучать влияние запаздывания на структурообразование в системе. Вообще говоря, наиболее распространённым методом расчета нелокальных систем является конечно-разностный метод. Простейшая явная схема позволяет организовать расчет с привлечением пространственных полей всего для двух моментов времени. Особенность нелокальной системы с запаздыванием заключается в том, что для нахождения значения функций с запаздывающим аргументом необходимо хранить данные полей всех временных слоев в пределах диапазона запаздывания. На практике такой подход реализуем только для сравнительно малоразмерных моделей с небольшим временем запаздывания. В противном случае объем оперируемых данных, а значит, и время расчета модели значительно возрастают. Оценки показывают, что даже для двумерных эволюционных моделей прямолинейное хранение всех временных слоев требует настолько значительных объемов оперативной памяти, что это сильно затрудняет использование персональных компьютеров. Применение конечно-разностных схем с переменным шагом по времени или расчёт эволюции трёхмерных пространственных моделей только усугубляют ситуацию.

В данной работе предлагается простой алгоритм, который позволяет запоминать в рамках диапазона запаздывания только некоторые пространственные поля, а недостающую информацию интерполировать в ходе проведения расчета. Эффективность метода демонстрируется на примере численного моделирования процессов пространственно-временной динамики белков, ответственных за поддержание биоритмов в клетках.

1. Метод расчета систем реакции-диффузии с запаздыванием по времени

Наиболее распространенным способом построения моделей реакции-диффузии, включающих одновременно запаздывание и диффузию, является простое добавление соответствующего диффузионного слагаемого к обыкновенному дифференциальному уравнению. Этот подход получил свою критику в литературе [4], где указывается, что диффузия и запаздывание не являются независимыми друг от друга явлениями. Однако эта проблема не является принципиальной в рамках данной статьи, так как предложенные способы корректировки моделей не меняют общей конструкции уравнений и не устраняют технические трудности, возникающие при изучении этих уравнений.

Таким образом, мы построим модель реакции-диффузии с запаздыванием традиционным способом. Рассмотрим систему нелинейных кинетических уравнений диффузионного типа:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = f(\mathbf{U}(t), \mathbf{U}(t - \tau)) + D \Delta \mathbf{U}, \quad (1)$$

где $\mathbf{U}(x, y, z)$ – набор физических (или химических) переменных, которые определяют нелинейную кинетику системы в отсутствие диффузии; D – матрица коэффициентов пространственной диффузии; Δ – оператор Лапласа в декартовых координатах x , y и z . Нелинейная функция f содержит как обычные, так и запаздывающие во времени величины. Время запаздывания τ для простоты фиксировано, хотя для предлагаемого метода расчёта это не принципиально. Система уравнений (1) должна быть дополнена граничными и начальными условиями.

Численное исследование динамических систем 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 их надёжностью. Однако в сравнении с неявными схемами они обладают одним существенным недо-

статком, а именно – жестким ограничением на шаг по времени для обеспечения устойчивости схем. Тем не менее, популярность явных схем среди исследователей со временем только растет, так как целью современного научного анализа изучаемой динамической системы все больше становится не просто поиск ее стационарных решений, но и изучение нелинейной динамики системы. Кроме того, появление высокопроизводительных вычислительных систем, позволило серьезно компенсировать ограничение явных методов. И все-таки одними из ключевых проблем, которые возникают при компьютерном моделировании задач математической физики, являются несовершенство архитектуры вычислительной техники, выражающееся в задержке ("лаге") при передаче данных от процессора к оперативной памяти, и небольшой размер кэш-памяти процессора. Указанные проблемы в полной мере проявляют себя в задачах с запаздыванием, в которых, во-первых, на каждом шаге по времени используются запаздывающие значения функции, а во-вторых, для этого необходимо хранить большой объем данных внутри диапазона времени запаздывания.

Введем в рассмотрение равномерную пространственную сетку

$$x_i = ih, \quad i = \overline{0, N_x}; \quad y_j = jh, \quad j = \overline{0, N_y};$$

$$z_k = kh, \quad k = \overline{0, N_z}, \quad (2)$$

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 центральные разности для пространственных производных и разность вперед для производной по времени:

$$U_{i,j,k}^{n+1} = U_{i,j,k}^n + \theta(f(U_{i,j,k}^n, U_{i,j,k}^{n-L}) +$$

$$+ \frac{D}{h^2}(U_{i+1,j,k}^n + U_{i-1,j,k}^n + U_{i,j+1,k}^n + U_{i,j-1,k}^n +$$

$$+ U_{i,j,k+1}^n + U_{i,j,k-1}^n - 6U_{i,j,k}^n)),$$

где θ – шаг по времени, L – число шагов по времени, выполненных в рамках диапазона времени запаздывания τ . Как видно из выражения (3), для вычисления поля на $n+1$ шаге по времени требуется информация о поле не

только в предыдущий момент времени n , но и в момент $n-L$ в прошлом. Если время запаздывания τ велико, то велико и число L . Необходимо сохранять в памяти данные для всех L временных слоев в диапазоне времени запаздывания, так как они участвуют в построении решения. Ситуация усугубляется тем, что для явной схемы очень важно контролировать шаг по времени: для устойчивости схемы он должен быть меньше определенного значения (критерий Куранта):

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

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 должно выполняться условие $\theta \leq 0.125$ (при условии $\max |U| \approx 1$, что очень часто встречается в задачах реакции-диффузии). В этом случае в диапазоне времени запаздывания укладывается не менее 80 фиксированных шагов по времени. Если каждый элемент сеточной функции определяется вещественным числом, занимающим 8 байт памяти, то для хранения данных потребуется выделить порядка 610,4 Мб памяти. Учитывая обстоятельство, что запаздывающие значения используются на каждом шаге по времени, организация хранения данных на внешнем носителе в данном случае является не допустимой, так как это сопровождается значительными затратами времени на доступ к этим устройствам. Выгрузка данных в кэш-память процессора также невозможна, так как эта память имеет ограниченный объем. Так, на момент написания статьи максимальный размер кэш-памяти даже третьего уровня (L3-cache) составляет немногим более 24 Мбайт. Таким образом, ключевым фактором, влияющим на быстроту проведения расчетов, является выгрузка в оперативную память больших объемов данных на каждом шаге по времени. Считывание из оперативной памяти также занимает определенное время.

Если компоненты вектора U в ходе эволюции испытывают значительные колебания, то шаг по времени согласно критерию (4) также меняется. Здесь возникает следующая проблема: если на промежутке времени запаз-

дывания целое число сделанных шагов не укладывается, то в момент $t - \tau$ просто не существует поля \mathbf{U} , которое могло бы быть использовано для построения текущего поля. В этом случае необходимо либо сгенерировать это недостающее поле путем интерполяции по двум ближайшим соседям, либо отказаться от плавающего шага по времени.

Для преодоления всех этих трудностей мы предлагаем следующее решение: данные хранить не на каждом шаге по времени, а только в определенные моменты, которые будем называть *опорными*. Значения переменных для промежуточных слоев времени восстанавливаются путем интерполяции данных опорных слоёв, хранимых в памяти (рис. 1). Предполагается, что в зависимости от параметров конкретной модели, гладкости функций и размерности накладываемой сетки, могут быть использованы различные виды интерполяции.

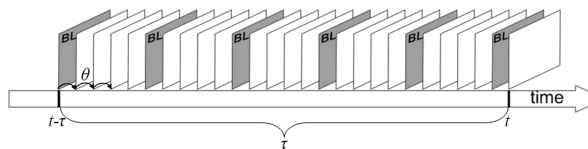


Рис. 1 Схема выделения опорных временных слоев (отмечены аббревиатурой BL): t – текущее время расчета, τ – время запаздывания, θ – шаг по времени

Вторая идея алгоритма заключается в использовании оптимального количества опорных слоев, т. е. предполагается, что в процессе расчета плотность расположения таких слоев в пределах диапазона запаздывания может меняться. Частота выделения опорных слоев определяется гладкостью функции – это позволит фиксировать точность вычислений. Данный подход также позволяет снизить погрешность в системах с динамически меняющимся шагом по времени.

Для оценки гладкости функции введем функцию G , которая определяет относительный характер максимального изменения значения поля:

$$G(t) = \max \left(\frac{|U(t + \theta, x, y, z) - U(t, x, y, z)|}{U(t, x, y, z)} \right), \quad (5)$$

где $U(t, x, y, z)$ – компонента вектора \mathbf{U} .

Далее введем в рассмотрение важный параметр алгоритма – число K , определяю-

щее сколько и каких слоев на интервале запаздывания должны стать опорными и заноситься в оперативную память. Оно означает, что в потоке данных каждый K -й слой является опорным. В случае, когда моделируемая функция достаточно быстро меняет свое значение, для максимально точного расчета запаздывающих значений необходимо использовать все данные в пределах диапазона запаздывания: $K=1$. Фактически это значение параметра соответствует отказу от применения алгоритма и прямолинейному запоминанию всего потока данных. Для определенного класса задач, один пример из которых будет представлен ниже, эмпирически установлено, что этот случай наступает при $G > 0.1$. При меньших значениях $G(t)$ алгоритм можно применять без существенной потери точности. Для минимизации погрешности интерполяции и сохранения достаточно высокой скорости расчета параметр K должен принимать значения из отрезка $[1, 20]$. Наибольший положительный эффект применения данного алгоритма проявляется, если функция $G(t)$ меняется достаточно медленно ($G < 0.01$): для вычисления запаздывающего значения в этом случае можно ограничиться каждым двадцатым временным слоем ($K = 20$), сокращая тем самым объем хранимых данных и количество операций с этими данными. При больших значениях параметра K удовлетворить заданной точности расчетов становится сложнее. Таким образом, для нахождения оптимального числа опорных слоев будем пользоваться следующим эмпирическим правилом:

$$K = \begin{cases} 1, & G > 0.1 \\ 20, & G < 0.01 \\ [1/5G], & 0.01 \leq G \leq 0.1 \end{cases} \quad (6)$$

Соотношения (6) позволяют задать степень детализации данных полей, хранимых в памяти компьютера, в зависимости от скорости изменения функции \mathbf{U} , которая определяется переменной $G(t)$.

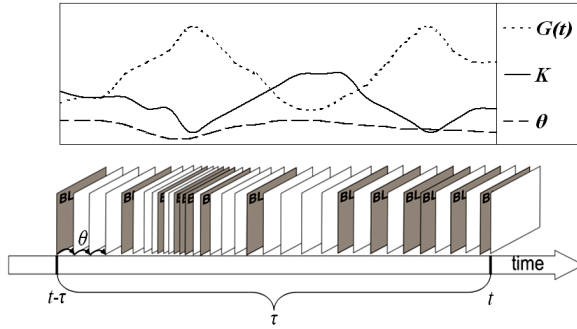


Рис. 2. Зависимость количества опорных слоев от гладкости функции

При этом параметр K не зависит от шага по времени, позволяя избавиться от лишних данных, когда функция меняется слабо (рис. 2).

Очевидно, что в рамках предлагаемого метода возникает проблема восстановления значений полей для всех временных слоёв, данные для которых не запоминаются в ходе расчета. Учитывая, что число опорных слоев в потоке данных может варьироваться, для получения запаздывающих значений применялся интерполяционный полином Ньютона (7). Процедура производится для каждого узла сетки, при этом узлами интерполирования являются значения всех хранимых опорных слоев (рис. 3).

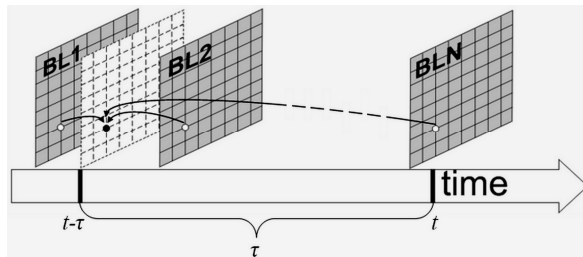


Рис. 3. Схема интерполяции требуемых данных по хранимым в памяти данным опорных слоев

Необходимо заметить, что восстанавливаемый временной слой всегда находится между первым и вторым опорными слоями (см. рис. 3). Если функция $G(t)$ достаточно гладкая, при построении полинома можно использовать только эти опорные слои, сокра-

щая время расчета. Но в общем случае для N опорных слоев многочлен Ньютона имеет вид:

$$P_N(t-\tau, x, y, z) = R(U_{BL1}(x, y, z)) + (t-\tau-t_{BL1})R(U_{BL1}(x, y, z), U_{BL2}(x, y, z)) + (t-\tau-t_{BL1})(t-\tau-t_{BL2}) \dots (t-\tau-t_{BLN}) R(U_{BL1}(x, y, z), \dots, U_{BLN}(x, y, z)) \quad (7)$$

где R – разделенные разности соответствующего порядка, t_{BLN} – время опорного слоя N , $U_{BLN}(x, y, z)$ – компонента вектора \mathbf{U} для слоя N .

2. Пример реализации метода: расчет эволюции циркадианных колебаний

В работе [12] нами была предложена модель, описывающая пространственно-временную динамику белков, ответственных за механизм циркадианных колебаний в организме *Neurospora crassa*. Главным элементом механизма колебаний является эффект запаздывания в биохимических реакциях транскрипции генов. Молекулярные процессы, которые приняты во внимание в нашей модели, схематически представлены на рис. 4.

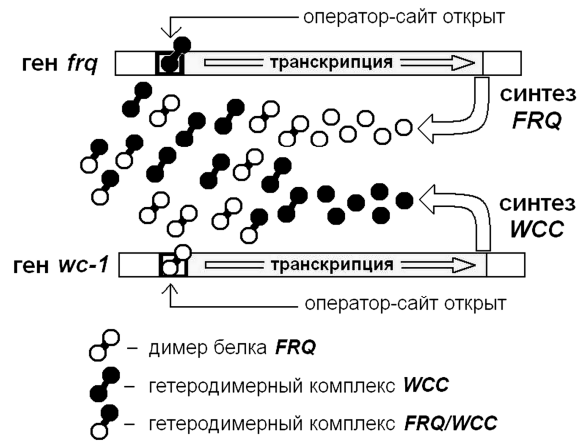


Рис. 4. Схема процессов транскрипции генов *freq* и *wc-1*

Изучение генома нейроспоры выявило несколько генов, которые участвуют в регулировании суточных ритмов этого организма. В связи с этим мы выделяем две основные компоненты механизма колебаний. Одной из них

Таблица 1. Список реакций транскрипции генов *frq* и *wc*. Здесь, и далее k , k_1 , k_{-1} , k_2 , k_{-2} , γ_F , γ_W , b_F , b_W – скорости соответствующих реакций.

1	Процесс димеризации:	$F + F \xrightarrow{k_1^F} F_2$, $W + W \xrightarrow{k_1^W} W_2$
2	Процесс дедимеризации:	$F_2 \xrightarrow{k_{-1}^F} F + F$, $W_2 \xrightarrow{k_{-1}^W} W + W$
3	Динамика оператор-сайтов:	$D_0^F + W_2 \xrightarrow{k_2^F} D_1^F$, $D_0^W + F_2 \xrightarrow{k_2^W} D_1^W$ $D_1^F \xrightarrow{k_{-2}^F} D_0^F + W_2$, $D_1^W \xrightarrow{k_{-2}^W} D_0^W + F_2$
4	Процесс синтеза белков:	$D_1^F(t) \xrightarrow{k_F} D_1^F + F^{t+\tau_F}$, $D_1^W(t) \xrightarrow{k_W} D_1^W + W^{t+\tau_W}$
5	Процесс распада белков:	$F \xrightarrow{\gamma_F} \emptyset$, $W \xrightarrow{\gamma_W} \emptyset$
6	Процесс образования гетеродимера:	$F + W \xrightarrow{k} \emptyset$

является ген *frq*, который кодирует белок *FRQ* (отмечен на рис. 4 белым цветом). Как известно, в середине темного времени суток уровень *FRQ* низок, зато к середине светлого времени суток он достигает своего максимума [13]. Второй компонент формируют два гена *wc-1* и *wc-2*, которые кодируют соответствующие белки *WC-1* и *WC-2*. Изучение поведения этих белков показало, что они формируют гетеродимерный комплекс *WCC* [14], который мы рассматриваем в качестве партнера для белка *FRQ* (отмечен на рис. 4 черным цветом).

Известно, что белки *FRQ* и *WCC* могут существовать как в форме мономеров, концентрацию которых обозначим F и W , так и в форме димеров $2F$ и $2W$. Обе формы активно взаимодействуют друг с другом – в системе одновременно протекают реакции димеризации и распада димеров соответствующих белков (реакции 1 и 2 в табл.1). Примем во внимание, что во время транскрипции любого гена происходит регуляция этого процесса посредством открытия и закрытия оператор-сайта молекулой димера (отмечен на рис. 4 черным цветом). Наличие такого оператор-сайта можно учесть введением специальной функции $D \in \{D_0, D_1\}$, которая принимает значение D_0 в случае открытия оператор-сайта и D_1 в случае его закрытия. С формальной точки зрения состояние оператор-сайта можно рассматривать как дополнительный реагент в системе. Своеобразие данной системы состоит в том, что гены *frq* и *wc-1,2* регулируют синтез белков друг друга, формируя положительную связь: оператор-сайт гена

считается открытым, если к нему прикрепляется димер белка-партнера (реакции 3 в табл.1).

Процессы синтеза белков задаются уравнениями 4 в табл. 1. Они описывают считывание генетической информации: в момент времени t , если оператор-сайт открыт, РНК-полимераза прикрепляется к началу гена и процесс транскрипции стартует. Конечным продуктом этой реакции являются мономеры белка, которые синтезируются в момент времени $t + \tau$. Время запаздывания τ необходимо системе, чтобы полностью считать информацию от начала до конца гена, а затем синтезировать белок. Хотя времена запаздывания τ_F и τ_W для синтеза белков *FRQ* и *WCC*, вообще говоря, разные, мы для простоты полагаем $\tau_F = \tau_W$.

Белки могут выводиться из системы с помощью двух механизмов. Один из них предполагает обычную деградацию со временем (реакции 5 в табл. 1). Другой механизм учитывает нелинейное взаимодействие *FRQ* и *WCC*, в результате которого формируется общий гетеродимерный комплекс *FRQ/WCC* (реакция 6 в табл. 1). Мы предполагаем, что комплекс *FRQ/WCC* сам по себе не участвует в генной регуляции циркадианных ритмов, хотя его образование фактически выводит молекулы белков из системы и этим влияет на общую динамику (см. рис. 4). Эти процессы играют важную роль в системе, формируя петли положительной и отрицательной обратной связи.

Кинетические уравнения для динамики системы, записанные на основании списка ре-

акций (табл.1), после небольших преобразований [12] принимают вид:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{1}{1 + 4K_1^F F} \cdot \left(k_F \frac{K_1^W K_2^F W^2 (t - \tau)}{1 + K_1^W K_2^F W^2 (t - \tau)} - \gamma_F F - kFW \right) + D\Delta_{xy} F, \quad (8)$$

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

где $K_i^F \equiv k_i^F / k_{-i}^F$, $K_i^W \equiv k_i^W / k_{-i}^W$, Δ_{xy} – оператор Лапласа в двух пространственных измерениях x и y . В численных расчетах были использованы значения параметров, приведенные в табл.2.

Таблица 2. Параметры модели

τ	k	k_F	k_W	K_1^F
6	30	8	4	5

K_2^F	K_1^W	K_2^W	γ_F	γ_W
5	5	5	0.3	0.4

Система уравнений (8–9) интегрировалась в квадратной области Σ : ($0 < x < 100$, $0 < y < 100$), на границе которой задавались следующие условия:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x=0,100} = 0, \quad \left. \frac{\partial F}{\partial y} \right|_{y=0,100} = 0, \quad (10)$$

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

Начальным условием являлось случайное распределение концентраций реагентов. В промежутке времени $[-6; 0]$ поля концентрации задавались гармоническими функциями со случайной амплитудой, фазой и частотой.

Краевая задача (8–10) решалась с помощью метода конечных разностей. Уравнения и граничные условия аппроксимировались на равномерной сетке 200 на 200 узлов с помощью аппроксимаций второго порядка по

пространственным координатам. Использовалась явная схема (3), и для обеспечения ее устойчивости шаг по времени вычислялся по формуле

$$\theta = \frac{h^2}{2(2 + \max(|F|, |W|))}, \quad (11)$$

где h – шаг сетки по пространству.

При данных параметрах шаг по времени составляет $\theta \leq 0.03$. Таким образом, в ходе эволюции в пределах диапазона запаздывания ($\tau = 6$) выполняется не менее 200 шагов по времени. Как было указано выше, прямолинейный подход к данной проблеме подразумевает хранение в машинной памяти данных 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 10 байт. Соответственно минимальный размер выделяемой оперативной памяти для хранения одного временного слоя одного компонента равен около 390.63 Кбайт, а всего массива данных равен порядка 76.3 Мбайт. Для двухкомпонентной системы необходимый объем памяти удваивается.

3. Анализ результатов расчетов

Для оценки эффективности разработанного метода был произведен расчет пространственно-временной динамики системы (8–10) с хранением всех опорных слоев в пределах диапазона запаздывания ($K=1$). В самом начале эволюции, когда хранимых в памяти опорных слоев еще нет, расчет осуществлялся следующим образом: если $(t - \tau) \leq 0$, то для каждого узла сетки возвращалось значение функции, заданной в виде гармонических колебаний, определяемых набором случайных значений частоты, амплитуды и фазы. Этот подход к экстраполяции эволюции системы позволял одновременно задать начальные условия, а также произвести расфазировку в системе. При $(t - \tau) > 0$, в случае совпадения времени $t - \tau$ со временем одного из хранимых слоев, использовался этот слой. В случае, когда время $t - \tau$ не совпадало со временем записи ни одного из хранимых слоев, использовалась формула интерполяции Ньютона (7)

Таблица 3. Ускорение скорости расчета при использовании разработанного метода

K	1	2	5	10	20	adaptive algorithm
time, s ^a	7012	2320	913	720	665	909
speedup, times	1	3.02	7.68	9.74	10.54	7.71

для определения приближенного значения функции (см. рис. 3).

С точки зрения программной реализации метода хранение опорных слоев организуется с применением динамических массивов по принципу очереди. Таким образом, $t_1 \leq (t - \tau) \leq t_2$, где t_1 , t_2 – время первого и второго опорного слоя. Основным критерием эффективности использования данного метода является время расчета модели.

В табл. 3 представлена зависимость времени расчета от параметра K . Видно, что в случае, когда в памяти хранится каждый 20-й слой по времени $K = 20$, расчет происходит в 10.5 раз быстрее, причем вне зависимости от технических параметров вычислительной машины.

Однако для определения минимально допустимого количества опорных слоев необходимо учитывать вносимую методическую погрешность. Параметрами данной модели, по изменению значений которых может производиться оценка точности 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 с различных узлов сетки. Затем временные ряды для каждого расчета в одинаковых узлах сопоставлялись и находилось среднее значение.

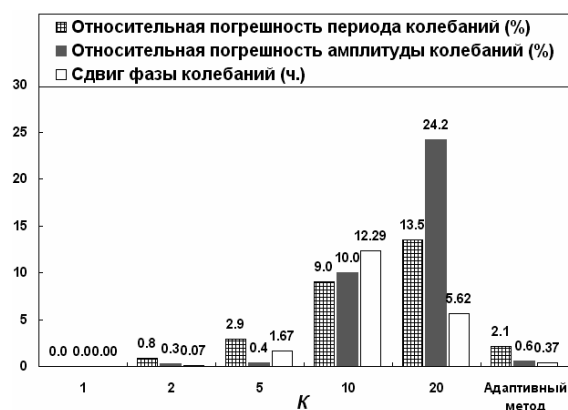


Рис. 5. Погрешность применения метода

Более детально схему оценки результатов методики можно представить следующим образом:

Задается фиксированный набор узлов сетки, используемых для оценки (например 10 точек: (20;20), (50;50), (80;80), (120;120), (150;150), (180;180), (30;170), (90;130), (140;100), (190;10)).

Выбирается значение параметра K (например $K=1$) и производится расчет модели.

По временному ряду каждого узла определяется значение амплитуды, частоты, а также фазы колебаний в конечный момент времени расчета.

Находится среднее значение амплитуды, частоты и фазы для всех временных рядов.

Повтор пунктов 2–5 для остальных значений параметра K ($K = [2;5;10;20]$ и адаптивный метод).

Для результатов пункта 6 вычисляется вносимая методическая погрешность. При этом используется формула относительной погрешности вычислений: $\delta = 100(X_1 - X)/X_1$, где X_1 – значение оцениваемого параметра при $K=1$.

Сводные значения представлены на диаграмме (рис. 5). На основании данных диаграммы можно отметить, что значительное увеличение погрешности вычислений происходит тогда, когда значение параметра K устанавливается менее 5. Если рассматривать колебания концентрации в одном из узлов сетки, то исходя из графика (рис. 6) можно сказать, что наиболее точные результаты могут быть получены при $K=2$ и с использованием адаптивного метода, однако в первом случае время расчета модели существенно больше.

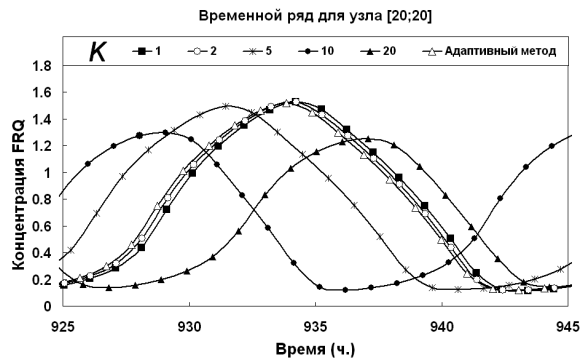
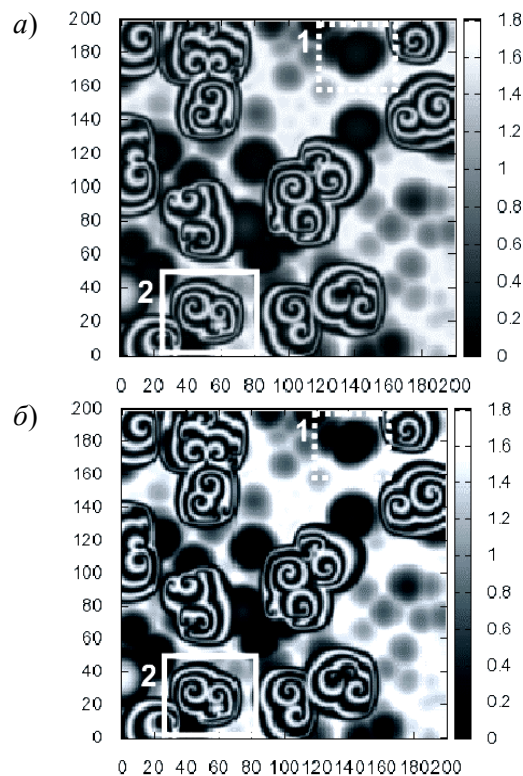


Рис. 6. Временной ряд для узла $[20;20]$ при использовании различных значений параметра K

Представляет интерес, каким образом предлагаемый метод влияет на точность воспроизведения пространственно-временных структур. Как следствие выраженной сильной нелинейности данной системы, даже малые отклонения в периоде, амплитуде и фазе колебаний могут приводить к значительным изменениям в структуре. На рис. 7 представлены поля концентрации белка FRQ после 1000 единиц времени эволюции для четырех различных вариантов расчета. Первый рисунок (рис. 7,а) соответствует стандартному подходу к решению задачи, когда в оперативной памяти компьютера хранятся данные каждого шага по времени в пределах диапазона запаздывания ($K = 1$). При хранении только половины временных слоев ($K = 2$) пространственное распределение концентрации реагента практически не изменилось (рис. 7,б). При использовании только каждого 20-го слоя в качестве опорного ($K = 20$) результат вычислений меняется качественно (рис. 7,в). Это хорошо видно, если сравнивать выделенные на рисунке участки поля с эталонным полем на рис. 7,а. Вследствие сильной погрешности, вносимой методом, в выделенной области 1 на рис. 7,в значения концентрации белка находятся в противофазе с эталонным значением, а в области 2 вообще не наблюдается развитие спиральной волны, которая наблюдается при эталонном расчете. Схема расчета, использующая адаптивную схему отбора числа опорных слоев показывает превосходный результат — поле концентраций вплоть до мелких деталей совпадает с эталонным (рис. 7,г).

Заключение

Представленный метод позволяет существенно сократить время численного моделирования пространственно-распределенных систем с запаздыванием по времени. В работе рассмотрено применение данного метода к численной реализации модели цепочки химических реакций двух взаимодействующих реагентов, описывающих процесс транскрипции генов. Время расчета данной модели с использованием разработанного метода сокращается на 87%. Наряду с этим полученные результаты имеют вносимую относительную погрешность не более 2% по периоду колебаний, и не более 0.6% амплитуды колебаний. Это свидетельствует об эффективности применения данного метода для расчета пространственно-распределенных систем с запаздыванием по времени.



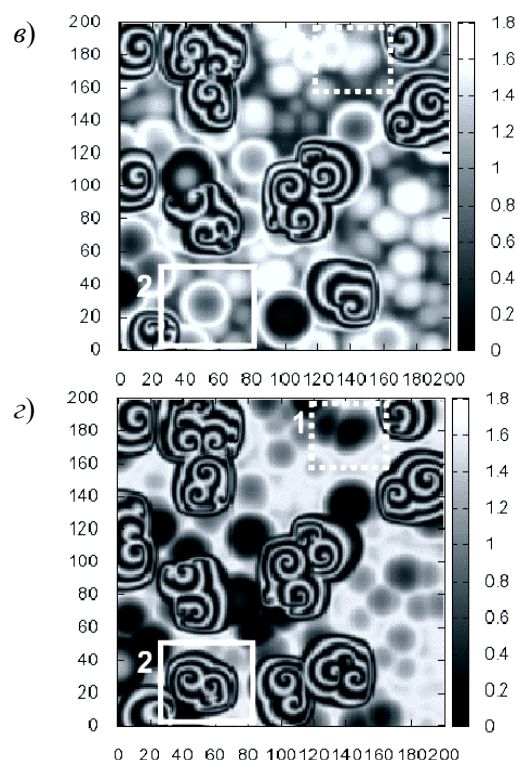


Рис. 7. Поле концентрации компонента *FRQ* в момент времени 1000 часов, для различных вариантов расчетов: (а) $K=1$ (хранение 100% слоев в диапазоне запаздывания); (б) $K=2$ (хранение 50% слоев); (в) $K=20$ (хранение 5% слоев); (г) адаптивный метод

Список литературы

1. Мюррей Дж. Математическая биология Т.1: Введение. Москва-Ижевск: Изд-во ИКИ-РХД, 2009.
2. Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б. Математические модели биологических продукционных процессов. М.: Изд-во МГУ, 1993.
3. Трубецков Д.И., Мчедлова Е.С., Красичков Л.В. Введение в теорию самоорганизации открытых систем. М.: Физматлит, 2002.
4. Гурли С. А., Соу Дж. В.-Х., Ву Дж. Х. Нелокальные уравнения реакции-диффузии с запаздыванием: биологические модели и нелинейная динамика // Тр. Междунар. конф. по дифференциальным и функционально-дифференциальным уравнениям ICM-2002 (Москва, МАИ, 11–17 августа, 2002 г.). М.: МАИ, 2003. Ч.1. С. 84–120.
5. Bratsun D., Volfson D., Hasty J., Tsimring L. Delay-induced stochastic oscillations in gene regulation // PNAS. 2005a. Vol.102, №41. P.14593–14598.
6. Янушевский Р.Т. Управление объектами с запаздыванием. М.: Наука, 1978.
7. Браун Д.А., Зюзгин А.В., Половинкин К.В., Путин Г.Ф. Об активном управлении равновесием жидкости в термосифоне // ПЖТФ. 2008. Т.34, вып.15. С.36–42.
8. Нугматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.
9. Мохов И.И., Елисеев А.В., Хворостьянов Д.В. Эволюция характеристик межгодовой климатической изменчивости, связанной с явлениями Эль-Ниньо/Ла-Нинья // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2000. Т. 36, № 6. С. 741–751.
10. Bratsun D.A. Effect of unsteady forces on the stability of non-isothermal particulate flow under finite-frequency vibrations // Microgravity Sci. Technol. 2009. Vol.21. P.153–158.
11. Ахмеров Р.Р., Садовский Б.Н. Основы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. Available. URL: <http://www.nsc.ru/rus/textbooks/akhmerov/ode/index.html> (Дата обращения: 24.08.2012).
12. Браун Д.А., Захаров А.П. Моделирование пространственно-временной динамики циркадианных ритмов *Neurospora crassa* // Компьютерные исследования и моделирование. 2011. Т.3, № 2. С.191–213.
13. Dunlap J. C. Molecular bases for circadian clocks // Cell. 1999. Vol. 96, №. 2. P.271–90.
14. Loros J.J., Dunlap J.C. Genetic and molecular analysis of circadian rhythms in *Neurospora* // Annu. Rev. Physiol. 2001. Vol. 63. P.757–794.

On numerical solution of spatially extended dynamical systems with time-delay

D. A. Bratsun, A. P. Zakharov

Perm State Pedagogical University, Russia, 614990, Perm, Sibirskaya st., 24
az1211@mail.ru; +79222465522

A novel algorithm for optimizing storage of intermediate space fields in the numerical simulation of evolution of spatially extended time-delayed systems by finite difference method is proposed. The algorithm involves storing in the memory not all, but only some selected time layers, and the subsequent interpolation of the data in the construction of intermediate layers. This approach allows the numerical calculations to be implemented on computer systems without large memory. The effectiveness of the developed algorithm is demonstrated by the example of numerical simulation of the transcription of proteins that determine circadian rhythms in cells.

Key words: *spatially extended dynamical systems; time delay; finite difference method.*