Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. Н. Назаров, Обобщение усредненных моделей с введением трёхмерного пространства, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2011, выпуск 4(), 110–117

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu842>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.137.237

26 апреля 2023 г., 11:31:30

УДК 519.673

ОБОБЩЕНИЕ УСРЕДНЕННЫХ МОДЕЛЕЙ С ВВЕДЕНИЕМ ТРЁХМЕРНОГО ПРОСТРАНСТВА

*М. Н. Назаров*Национальный исследовательский университет «МИЭТ»,
5, проезд 4806, Зеленоград, Москва, 124498.

E-mail: nazarov-maximilian@yandex.ru

В качестве обобщаемых моделей рассматриваются любые математические модели, заданные системой обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка для численностей абстрактных объёмных единиц. Основной задачей работы является построение универсальной схемы обобщения моделей с введением трёхмерного пространства и учётом миграции объектов в пространстве без перехода к частным производным.

Ключевые слова: математическое моделирование, обыкновенные дифференциальные уравнения, пространственное обобщение моделей.

1. Введение. Под усреднённой задачей будем подразумевать систему уравнений общего вида

$$\left\{ \frac{dN_i(t)}{dt} = F_i(N_1(t), \dots, N_k(t)) \right\}_{i=1,2,\dots,k}, \quad (1)$$

сформулированную для описания динамики численностей $\{N_i(t)\}_{i=1,2,\dots,k}$ некоторых абстрактных объёмных объектов, локализованных в замкнутом пространстве. Объём объекта типа i будем обозначать как V_i .

Процесс построения пространственного обобщения для модели (1) можно условно разбить на три этапа:

- Шаг 1:** пространство модели разбивается на элементарные объёмы V_{zxy} ;
Шаг 2: для каждого отдельного элемента объёма V_{zxy} используются уравнения, аналогичные уравнениям системы (1), но сформированные для набора $\left\{ N_i^{(z,x,y)}(t) \right\}_{i=1,2,\dots,k}$ численностей объектов, локализованных в объёме V_{zxy} ;
Шаг 3: учитывается возможность миграции объектов в другие ячейки путём введения аддитивной поправки $\text{Migration}_i^{(z,x,y)}(t)$ в систему (1).

2. Описание пространства. В рамках данной работы в качестве пространства модели будут рассматриваться только параллелепипеды объёма $V = hlw$ (рис. 1) с согласованными длинами сторон $h = aH(a)$, $l = aL(a)$, $w = aW(a)$. Подобное пространство можно однозначно разбить на элементарные кубы V_{zxy} с длиной ребра a : $V_{zxy} = a^3$. Для линейных размеров пространства модели V , измеренных в элементарных кубах (см. рис. 1), будем использовать следующие обозначения: $H = h/a$ — высота V ; $L = l/a$ — длина V ; $W = w/a$ — ширина V . Таким образом, любой элементарный куб V_{zxy} позиционируется своими дискретными координатами $z \in \{1, 2, \dots, H\}$, $x \in \{1, 2, \dots, L\}$, $y \in \{1, 2, \dots, W\}$.

Максим Николаевич Назаров, аспирант, каф. высшей математики – 1.

Рис. 1. Пространство модели

Для упрощения работы с дискретным пространством кубов введём специальные обозначения (см. табл.):

- 1) $d \in \text{Directions} = \{\uparrow, \downarrow, \rightarrow, \leftarrow, \odot, \otimes\}$ — направления миграции;
- 2) $\bar{d} \in \text{Directions}$ — противоположное направление для d ;
- 3) $d(z, x, y)$ — соседний куб с V_{zxy} по направлению d ;
- 4) $\text{Dir}(z, x, y)$ — допустимые направления миграции для ячейки V_{zxy} :

$$\text{Dir}(z, x, y) = \{d \mid d(z, x, y) = (\dot{z}, \dot{x}, \dot{y}) \wedge \dot{z} \in \{1, 2, \dots, H\} \wedge \dot{x} \in \{1, 2, \dots, L\} \wedge \dot{y} \in \{1, 2, \dots, W\}\}.$$

d	$\uparrow$	$\downarrow$	$\rightarrow$	$\leftarrow$	$\odot$	$\otimes$
$\bar{d}$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\leftarrow$	$\rightarrow$	$\otimes$	$\odot$
$d(z, x, y)$	$(z+1, x, y)$	$(z-1, x, y)$	$(z, x+1, y)$	$(z, x-1, y)$	$(z, x, y+1)$	$(z, x, y-1)$

3. Описание динамики. В первую очередь приведём список переменных, констант и настроечных параметров, необходимых для использования схемы обобщения:

- переменные модели: $\left\{N_i^{(z,x,y)}(t)\right\}_{i=1,2,\dots,k}^{z \in \{1,2,\dots,H\}, x \in \{1,2,\dots,L\}, y \in \{1,2,\dots,W\}}$;
- константы модели (базовые): $h, l, w, a, \{V_i\}_{i=1,2,\dots,k}, t_r$;
- зависимые константы: $V(h, l, w), H(a, h), L(a, l), W(a, w), \{r_i(t_r)\}_{i=1,2,\dots,k}$;
- настроечный параметр: $0 < c \ll 1$.

В этом перечне $r_i(t_r)$ — это радиус миграции единиц типа i , численно равный максимальному расстоянию, которое объекты типа i могут преодолеть за время t_r в результате свободной миграции.

Динамика обобщённой модели описывается системой $H \cdot L \cdot W \cdot k$ уравнений вида

$$\frac{dN_i^{(z,x,y)}(t)}{dt} = F_i \left(N_1^{(z,x,y)}(t), \dots, N_k^{(z,x,y)}(t) \right) + \text{Migration}_i^{(z,x,y)}(t). \quad (2)$$

В системе (2) первое слагаемое идентично правой части системы (1), за тем лишь исключением, что записано не для всего объёма модели, а для элементарного куба $V_{(z,x,y)}$. Второе слагаемое системы (2) вводится для учёта

обмена веществом с соседними ячейками. Для подсчёта количества мигрировавших объектов нужно учесть потоки по всем допустимым¹ направлениям:

$$\text{Migration}_i^{(z,x,y)}(t) = \sum_{d \in \text{Dir}(z,x,y)} \text{Emig}_{i,\bar{d}}^{d(z,x,y)}(t) - \text{Emig}_{i,d}^{(z,x,y)}(t). \quad (3)$$

Поток эмигрантов $\text{Emig}_{i,d}^{(z,x,y)}(t)$ из ячейки V_{zxy} по направлению d для объектов типа i в момент времени t может быть вычислен как

$$\text{Emig}_{i,d}^{(z,x,y)}(t) = M_i^{(z,x,y)}(t) \Delta l a^2 + \frac{\Delta_{(z,x,y)}^d(t)}{2V_i k t_r}. \quad (4)$$

Рис. 2. Элементарная ячейка V_{zxy}

Рис. 3. Граница ячейки V_{zxy}

Величина $\Delta l = \max_{i=1,2,\dots,k} r_i$ задаёт максимальное расстояние, на которое за время t_r могут сместиться объекты модели. Переменная $\Delta_{zxy}^d(t)$ позволяет осуществлять компенсацию² в случае переполнения ячеек (z, x, y) или $d(z, x, y)$. Величина $M_i^{(z,x,y)}(t)$ — это концентрация в единицу времени потенциальных мигрантов типа i . Сомножитель $\Delta l a^2$ из формулы (4) задаёт объём, представленный на рис. 2. Предполагается, что за элементарный акт миграции происходит обмен между объёмами $\Delta l a^2$ двух соседних кубов (см. рис. 2). При этом слагаемое $M_i^{(z,x,y)}(t) \Delta l a^2$ задаёт число потенциальных мигрантов типа i из ячейки V_{zxy} для любого направления миграции за время t_r . Найти $M_i^{(z,x,y)}(t)$ можно, перемножив концентрацию объектов типа i на среднюю частоту миграции:

$$M_i^{(z,x,y)}(t) = [i^{zxy}(t)] \phi_{M_i}.$$

Поскольку распределение объектов в рамках ячейки считается равномерным, концентрация во всем объёме V_{zxy} совпадает с концентрацией в объёме $\Delta l \cdot a^2$ и её можно посчитать так:

$$[i^{zxy}(t)] = \frac{N_i(t)}{V_{zxy}} = \frac{N_i(t)}{a^3}.$$

Частоту миграции из отдельной точки куба в соседнюю ячейку можно найти через схему геометрических вероятностей как $P = V_{M_i}(l)/V_{r_i}$ (см. рис. 3).

¹Определения для специальных обозначений $d, \bar{d}, d(z, x, y), \text{Dir}(z, x, y)$ см. п. 2.

²Описание механизма компенсации — см. формулу (6).

В этом выражении $V_{M_i}(l)$ — объём, который отсекается границей ячейки V_{zxy} от шара радиуса r_i с центром в произвольной точке граничной области.

ЗАМЕЧАНИЕ. Предполагается, что для объекта, центрированного в произвольной точке l (см. рис. 3), равновероятна миграция во все точки объёма V_{r_i} .

Среднюю частоту миграции можно найти по формуле

$$\phi_{M_i} = \frac{1}{\Delta l t_r} \int_0^{\Delta l} \frac{V_{M_i}(l)}{V_{r_i}} dl = \frac{1}{\Delta l t_r V_{r_i}} \int_0^{\Delta l} V_{M_i}(l) dl. \quad (5)$$

Здесь деление на t_r производится в связи с тем, что r_i — максимальное расстояние свободной миграции за время t_r . Объём шара V_{r_i} и его усечённой части $V_{M_i}(l)$ вычисляются соответственно:

$$V_{r_i} = 4\pi r_i^3/3, \\ V_{M_i}(l) = \begin{cases} 0, & \text{если } \Delta l - l > r_i; \\ \pi(r_i + l - \Delta l)^2(2r_i - l + \Delta l)/3, & \text{если } \Delta l - l \leq r_i. \end{cases}$$

ЗАМЕЧАНИЕ. При использовании формулы (5) игнорируется эффект от сопряжённых³ областей. Предполагается, что объёмы областей пересечения с сопряжёнными граничными областями пренебрежимо малы. Как следствие, возникает ограничение на выбор констант модели: $a \gg \Delta l$.

Возвращаясь к формуле (4), можно заметить, что помимо числа потенциальных мигрантов в ней участвует и второе слагаемое: $(\Delta_{zxy}^d(t))/(2V_i k t_r)$. Фактически именно это слагаемое позволяет стабилизировать схему и не дать ячейкам переполниться в результате миграции. Коэффициент компенсации переполнения $\Delta_{(z,x,y)}^d(t)$ вычисляется так:

$$\Delta_{(z,x,y)}^d(t) = \xi \left(\max \left\{ L_{(z,x,y)}^d(t), \bar{L}_{d(z,x,y)}^d(t) \right\} - \Delta l \cdot a^2 \right) \times \\ \times \text{sign} \left(L_{(z,x,y)}^d(t) - \bar{L}_{d(z,x,y)}^d(t) \right). \quad (6)$$

В уравнении (6) в качестве ξ используется пороговая функция $\xi(x) = \sigma(x)x$, где $\sigma(x)$ — это либо функция Хевисайда,⁴ либо приближенная к ней $\sigma_{\text{ctg}}(x) = 1 - \frac{1}{\pi} \cdot \text{arccotg} \left(\frac{x}{c} \right)$. Предпочтительнее использовать σ_{ctg} , так как функция Хевисайда не имеет классической производной. При этом $c > 0$, $c \ll 1$ — настроечный параметр, который осуществляет приближение σ_{ctg} к σ тем более точно, чем ближе c к нулю. Вторая функция в уравнении (6) — это либо функция знака $\text{sign}(x)$, либо приближенная к ней $\text{sign}_{\tan}(x) = \frac{2}{\pi} \arctan \left(\frac{x}{c} \right)$.

Величина $L_{(z,x,y)}^d(t)$ из формулы (6) задаёт объём, который должны были бы занимать объекты в области, показанной на рис. 2, ячейки (z, x, y) после осуществления обмена с соседней ячейкой по направлению d :

$$L_{(z,x,y)}^d(t) = V_L^{(z,x,y)}(t) - \delta V_L^{(z,x,y)}(t) + \delta V_L^{d(z,x,y)}(t). \quad (7)$$

³На рис. 2 сопряжёнными являются области по направлениям $\uparrow, \downarrow, \odot$ и $\otimes$.

⁴Функция Хевисайда, также известная как единичная ступенчатая функция, — это одна из наиболее широко используемых обобщённых функций (см. [1]).

Величина $V_L^{(z,x,y)}(t)$ из формулы (7) — текущая заполненность граничной области (объёма Δla^2):

$$V_L^{(z,x,y)}(t) = \sum_{i=1,2,\dots,k} [i^{zy}(t)] V_i \Delta la^2. \quad (8)$$

В уравнении (8), перемножая концентрацию на объём буферной зоны $[i^{zy}(t)] \Delta la^2$, получаем численность объектов типа i в буферной зоне. Затем, умножая численность на объём V_i , получаем объём, который занимают в буферной зоне объекты типа i .

Величина $\delta V_L^{(z,x,y)}(t)$ — объём потенциальных мигрантов:

$$\delta V_L^{(z,x,y)}(t) = \sum_{i=1,2,\dots,k} M_i^{(z,x,y)}(t) V_i \Delta la^2 t_r. \quad (9)$$

Отличие от формулы (8) состоит лишь в том, что концентрация потенциальных мигрантов описывается величиной $M_i^{(z,x,y)}(t) t_r$.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. Для любых ячеек (z, x, y) и допустимых направлений $d \in \text{Dir}(z, x, y)$ будет верно $\Delta_{(z,x,y)}^d(t) = -\Delta_{d(z,x,y)}^{\bar{d}}(t)$.

Доказательство. Используя соотношения⁵ $(z, x, y) = \bar{d}(d(z, x, y))$ и $\bar{\bar{d}} = d$, а также $\text{sign}(-x) = -\text{sign}(x)$, получим

$$\begin{aligned} \Delta_{(z,x,y)}^d(t) &= \xi \left(\max \left\{ L_{(z,x,y)}^d(t), L_{d(z,x,y)}^{\bar{d}}(t) \right\} - \Delta la^2 \right) \times \\ &\quad \times \text{sign} \left(L_{(z,x,y)}^d(t) - L_{d(z,x,y)}^{\bar{d}}(t) \right) = \\ &= \xi \left(\max \left\{ L_{\bar{d}(d(z,x,y))}^{\bar{d}}(t), L_{d(z,x,y)}^{\bar{d}}(t) \right\} - \Delta la^2 \right) \times \\ &\quad \times (-1) \cdot \text{sign} \left(L_{d(z,x,y)}^{\bar{d}}(t) - L_{\bar{d}(d(z,x,y))}^{\bar{d}}(t) \right) = -\Delta_{d(z,x,y)}^{\bar{d}}(t). \quad \square \end{aligned}$$

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. Ни при каких обстоятельствах невозможно переполнение ячейки пространства в результате миграции, описываемой уравнениями (3)–(9).

Доказательство. Достаточно привести доказательство для абстрактной ячейки (z, x, y) и произвольного направления d , так как обмен осуществляется между граничными областями ячеек. Реальную заполненность буферной зоны ячейки (z, x, y) по направлению d (см. рис. 2) можно посчитать как объём, занимаемый объектами до миграции (на момент времени t), сложенный с объёмом мигрантов, поступивших из ячейки $d(z, x, y)$, за вычетом объёма эмигрировавших из (z, x, y) объектов по направлению d :

$$\sum_{i=1,2,\dots,k} [i^{zy}(t)] V_i \Delta la^2 + \sum_{i=1,2,\dots,k} \left(M_i^{d(z,x,y)}(t) \Delta la^2 + \frac{\Delta_{d(z,x,y)}^{\bar{d}}(t)}{2V_i k t_r} \right) t_r V_i -$$

⁵Для доказательства соотношений см. таблицу из п. 2.

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{i=1,2,\dots,k} \left(M_i^{(z,x,y)}(t) \Delta l a^2 + \frac{\Delta_{(z,x,y)}^d(t)}{2V_i k t_r} \right) t_r V_i = \\
 & = V_L^{(z,x,y)}(t) + \sum_{i=1,2,\dots,k} M_i^{d(z,x,y)}(t) \Delta l a^2 V_i t_r + \Delta_{d(z,x,y)}^{\bar{d}}(t) \sum_{i=1,2,\dots,k} \frac{1}{2k} - \\
 & - \sum_{i=1,2,\dots,k} M_i^{(z,x,y)}(t) \Delta l a^2 V_i t_r - \Delta_{(z,x,y)}^d(t) \sum_{i=1,2,\dots,k} \frac{1}{2k} = \\
 & = V_L^{(z,x,y)}(t) + \delta V_L^{d(z,x,y)}(t) - \delta V_L^{(z,x,y)}(t) - \Delta_{(z,x,y)}^d(t) = L_{(z,x,y)}^d(t) - \Delta_{(z,x,y)}^d(t).
 \end{aligned}$$

Для доказательства были использованы формулы (8) и (9), а также утверждение $\Delta_{(z,x,y)}^d(t) = -\Delta_{d(z,x,y)}^{\bar{d}}(t)$. Если обратиться к формуле (6), то будет видно, что при потенциальном переполнении ($L_{(z,x,y)}^d(t) > \Delta l a^2$) реальная заполненность будет устанавливаться значением $\Delta l a^2$. $\square$

4. Выбор коэффициентов схемы. На данный момент для априорного оценивания точности/эффективности использования схемы п. 2 можно предложить только относительно грубые критерии для выбора констант a , t_r и c .

КРИТЕРИЙ 1. Чем ближе c выбирается к нулю, тем точнее приближаются $\sigma_{\text{ctg}}(x)$ к функции Хевисайда $\sigma(x)$ и $\text{sign}_{\tan}(x)$ к функции $\text{sign}(x)$. Ограничивающим фактором уменьшения c выступает растущая сложность численного решения системы (2).

КРИТЕРИЙ 2. Чем ближе t_r выбирается к нулю, тем меньше погрешность в вычислении максимального расстояния свободного дрейфа $r_i(t_r)$ для объектов модели. Ограничивающими факторами являются растущая сложность численного решения системы (2) и естественный предел измерения r_i : для всех способных к передвижению объектов модели расстояние $r_i(t_r)$ должно отличаться от нуля.

КРИТЕРИЙ 3. Чем ближе a выбирается к нулю, тем на большее число ячеек ($H \cdot L \cdot W$) будет разбито исходное пространство, что, в свою очередь, повышает шансы получить равномерное заполнение объектами отдельной ячейки. Однако с уменьшением длины ребра a одновременно растет число⁶ уравнений в системе (2), что выступает естественным ограничением эффективности. Вторым ограничением для уменьшения параметра a является требование $a \gg \Delta l$, выдвигаемое в замечании к уравнению (5). Если заранее известен средний объём V_{mean} , который могут занимать области с равномерным распределением объектов, то можно дополнительно ограничить a минимальным значением $\sqrt[3]{V_{\text{mean}}}$.

5. Заключение. Альтернативой использования схемы п. 2 является переход к уравнениям с частными производными. При использовании частных производных основным преимуществом по отношению к схеме п. 2 будет повышение точности моделирования, а главным недостатком — потеря вычислительной эффективности. Однако далеко не всегда альтернатива с частными производными доступна, так как осуществление перехода может быть существенно нетривиальным (если вообще возможным для определённых моделей).

⁶Например, при замене a на $a/2$ число уравнений увеличивается на 8.

Отметим три основных достоинства схемы п. 2:

- универсальность;
- возможность аналитического решения;
- существование высокопроизводительных параллельных алгоритмов.

Универсальность схемы пространственного обобщения позволяет использовать её для любой математической модели, удовлетворяющей условиям п. 1. Возможность получения аналитического решения проистекает из того, что в качестве модельных уравнений используются обыкновенные дифференциальные уравнения, а пространственное обобщение сводится к увеличению числа переменных и введению аддитивной поправки в уравнения. Если исходная система (1) удовлетворяет условиям теоремы о существовании и единственности⁷, то итоговая система (2) также будет удовлетворять этим условиям в том случае, если вместо функции Хевисайда и функции знака используются σ_{ctg} и sign_{tan} .

Параллельность в нахождении численного решения системы (2) достигается на уровне отдельной ячейки V_{zxy} , что позволяет в идеале связать с каждой отдельной ячейкой свой вычислитель. Высокая производительность численного решения достижима⁸ ввиду того, что для вычисления $N_i^{(z,x,y)}(t + dt)$ необходимо получить только значения $N_i^{(z,x,y)}(t)$ и $N_i^{d(z,x,y)}(t)$ для всех возможных направлений d .

Помимо схемы, представленной в п. 2, автором использовались как минимум пять альтернативных вариантов схемы обобщения:

- 1) использование концентраций $[i](t)$ вместо численностей $N_i(t)$ в качестве параметров модели;
- 2) разбиение пространства модели на элементы объёма разной формы;
- 3) использование пространств произвольной формы;
- 4) введение притока/оттока объектов i через границу модели;
- 5) дополнение миграции потоками объектов модели произвольной скорости и направления.

Автор выражает благодарность А. В. Решетникову за критические замечания и помощь в корректировке рукописи статьи.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Kanwal R. P.* Generalized Functions: Theory and Technique. Massachusetts: Birkhäuser Boston, 1998. 474 pp.
2. *Понтрягин Л. С.* Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Наука, 1974. 331 с. [*Pontryagin L. S.* Ordinary Differential Equations. Moscow: Nauka, 1974. 331 pp.]
3. *Tel G.* Introduction to Distributed Algorithms. Cambridge – New York: Cambridge University Press, 1994. 546 pp.

Поступила в редакцию 06/XI/2010;
в окончательном варианте — 15/VII/2011.

⁷Теорема о существовании и единственности решения системы дифференциальных уравнений первого порядка (см. [2]).

⁸Малое число взаимосвязей между отдельными вычислителями является необходимым условием для эффективного использования распределённых систем (см. [3]).

MSC: 68W15; 70G99, 34A99

GENERALIZATION OF COARSE-GRAINED MODELS WITH INTRODUCTION OF THREE-DIMENSIONAL SPACE

M. N. Nazarov

National Research University of Electronic Technology,
5, Pas. 4806, Zelenograd, Moscow, Russia, 124498.

E-mail: nazarov-maximilian@yandex.ru

As a candidate for generalization in the scope of this work we consider any model derived from a system of first order ordinary differential equations for quantities of abstract bulk objects. The main objective of this work is to construct a universal scheme for generalization of such models with introduction of three-dimensional space and regard for migration of objects without switching to partial derivatives.

Key words: *mathematical modeling, ordinary differential equations, model space generalization.*

Original article submitted 06/XI/2010;
revision submitted 15/VII/2011.

Maxim N. Nazarov, Postgraduate Student, Dept. of Higher Mathematics – 1.