

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.*

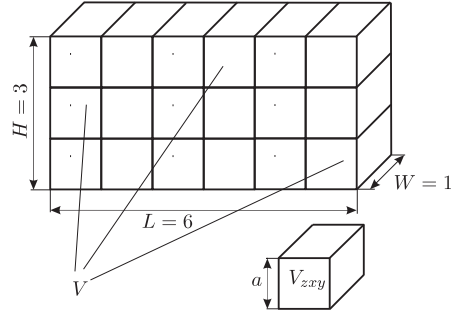


Рис. 1. Пространство модели

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 допустимым<sup>1</sup> 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

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

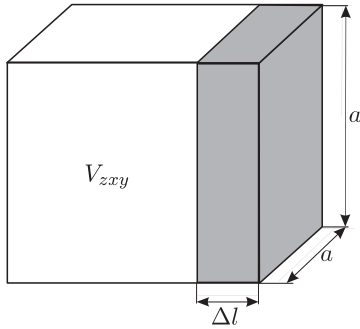


Рис. 2. Элементарная ячейка  $V_{zxy}$

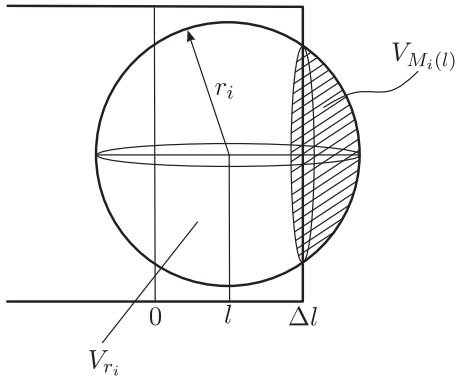


Рис. 3. Граница ячейки  $V_{zxy}$

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 компенсацию<sup>2</sup> 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).

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

<sup>2</sup> Описание 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 сопряжённых<sup>3</sup> 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:

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

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

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  $d$ :

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

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

<sup>4</sup>Функция 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  $\Delta la^2$ ):

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

В уравнении (8), перемножая концентрацию на объём буферной зоны  $[i^{zxy}(t)] \Delta la^2$ , 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 соотношения<sup>5</sup>  $(z, x, y) = \bar{d}(d(z, x, y))$  и  $\bar{\bar{d}} = d$ , а также  $\text{sign}(-x) = -\text{sign}(x)$ , получим

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

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  $\bar{d}$ :

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

<sup>5</sup>Для 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 число<sup>6</sup> 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  $V_{\text{mean}}$ , 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).

<sup>6</sup>Например, 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 единственности<sup>7</sup>, то итоговая система (2) также будет удовлетворять этим условиям в том случае, если вместо функции Хевисайда и функции знака используются  $\sigma_{\text{ctg}}$  и  $\text{sign}_{\text{tan}}$ .

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 достижима<sup>8</sup> 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.

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

<sup>8</sup>Малое 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](mailto: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.