



ОСНОВЫ  
ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА  
ДИНАМИЧЕСКИХ  
СИСТЕМ

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ ПО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ ПРАКТИКУМУ

О. Ф. Воропаева

Новосибирский государственный университет  
механико-математический факультет  
кафедра математического моделирования

Федеральный исследовательский центр  
информационных и вычислительных технологий

О. Ф. Воропаева

---

# **ОСНОВЫ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

---

Учебное пособие  
по вычислительному практикуму  
(для студентов 3–4 курсов и магистрантов ММФ НГУ)

Новосибирск – 2022

# ОГЛАВЛЕНИЕ

---

---

ОГЛАВЛЕНИЕ.....	3
<b>ВВЕДЕНИЕ.....</b>	<b>8</b>
<b>Глава 1. Понятие динамической системы. Связь с математическим моделированием .....</b>	<b>11</b>
1.1. О понятии динамической системы .....	11
1.2. Понятия состояния и закона эволюции динамической системы.....	14
1.3. Элементы качественного анализа динамических систем....	16
1.3.1. Базовые понятия.....	16
1.3.2. О качественном анализе решения .....	23
1.4. Примеры динамических систем. Модели динамики численности популяций.....	26
1.4.1. Линейная модель. Модель Мальтуса.....	30
1.4.2. Простейшая нелинейная модель. Разнополая популяция в условиях неограниченных ресурсов .....	32
1.4.3. Модель Ферхюльста–Пирла (логистическое уравнение).....	33
1.4.4. Модели, основанные на идее логистического уравнения .....	36
1.5. Некоторые модели динамики численности населения Земли.....	38
1.6. О нелинейных моделях.....	44
Литература .....	45
<b>Глава 2. Модели на основе обыкновенных дифференциальных уравнений .....</b>	<b>47</b>
2.1. Общая постановка задачи Коши для ОДУ 1-го порядка.....	47
2.2. Численное решение задачи Коши. Основные понятия.....	48
2.2.1. Дискретизация области .....	49
2.2.2. Об аппроксимации дифференциального оператора.....	50
2.2.3. Разностная схема .....	52

2.3. Численные методы решения задачи Коши для ОДУ 1-го порядка.....	56
2.3.1. Основные понятия.....	56
2.3.2. Явные методы семейств Рунге–Кутты.....	58
2.3.3. Методы типа предиктор–корректор.....	60
2.3.4. Чисто неявные методы. ФДН.....	64
2.4. Численное решение систем ОДУ.....	66
2.4.1. Понятие жесткости системы ОДУ.....	66
2.4.2. Об устойчивости разностных схем. Обобщение на системы ОДУ.....	72
2.4.3. Явные и неявные методы Рунге–Кутты.....	74
2.4.4. Идеи методов Розенброка и ( m,k)-методов.....	76
2.4.5. Методы с контролем точности и устойчивости.....	77
2.5. Технология проведения методических расчетов.....	81
2.5.1. Общая постановка задачи.....	83
2.5.2. О выборе численного метода.....	86
2.5.3. Практические рекомендации.....	89
2.5.4. Методические расчеты.....	91
2.6. Примеры тестовых задач.....	100
2.6.1. Тестовая задача 1. Численное решение задачи Коши для линейного ОДУ.....	100
2.6.2. Тестовая задача 2. Численное решение задачи Коши для жесткой системы ОДУ.....	102
2.6.3. Тестовая задача 3. Движение заряженной частицы в постоянном магнитном поле.....	103
2.7. Примеры практических заданий.....	105
2.7.1. Решение нелинейной задачи Коши для ОДУ 2-го порядка. Задача о колебании физического маятника.....	106
2.7.2. Математическая модель линейного осциллятора..	107
2.7.3. Задача о движении жидкости при ее нагреве снизу. Система Лоренца.....	108
2.7.4. Численное моделирование изменчивости состояний магнитного поля Земли: 4D-модель динамо Рикитакэ....	111

2.7.5. Численное моделирование изменчивости состояний магнитного поля Земли: 3D-модель Рикитаке.....	114
2.7.6. Модель функционирования средней фирмы.....	115
2.7.7. Математическая модель развития социального процесса. «Бибер-лихорадка» .....	116
2.7.8. Модель распространения «К-рор–лихорадки» .....	119
2.7.9. Модели динамики численности популяций под влиянием генетического фактора (экогенетические модели).....	121
2.7.10. Математическая модель эволюции простейшей экосистемы.....	123
2.7.11. Математическая модель гиперпролиферации клеток кожи человека .....	125
2.7.12. Математическая модель продольного возмущенного движения самолета.....	128
2.7.13. Модель суточного колебания концентрации озона в атмосфере .....	129
2.7.14. Модель химической реакции Белоусова–Жаботинского.....	131
2.7.15. Задача*. Математическая модель сообщества «производители – продукт – управленцы» .....	133
Литература .....	139
<b>Глава 3. Модели на основе дифференциальных уравнений с запаздыванием.....</b>	<b>142</b>
3.1. Общая постановка основной начальной задачи.....	142
3.2. Численное решение основной начальной задачи .....	144
3.2.1. Метод последовательного интегрирования (метод шагов).....	144
3.2.2. Численное решение уравнений с запаздыванием ..	147
3.3. Тестовые задания .....	149
3.3.1. Тестовая задача 1.....	149
3.3.2. Тестовая задача 2.....	149
3.3.3. Тестовая задача 3.....	150

3.4. Примеры практических заданий. Математические модели функционирования белковой системы, управляющей реакцией клетки на повреждение ДНК .....	151
3.4.1. Математическая модель 1 .....	153
3.4.2. Математическая модель 2 .....	154
3.4.3. Математическая модель 3 .....	156
3.4.4*. Математическая модель 4 .....	158
3.4.5. Математическая модель 5 .....	159
Литература .....	161
<b>Глава 4. Предельный переход от системы ОДУ к уравнениям с запаздыванием: технология вычислительного эксперимента</b> .....	162
4.1. Теоретическое обоснование .....	163
4.2. Примеры реализации вычислительной схемы перехода..	166
4.2.1. Задача с одним уравнением с запаздыванием .....	166
4.2.2. Задача для нелинейной системы дифференциальных уравнений с запаздыванием.....	169
4.3. Практические задания .....	174
4.3.1. Задача о многостадийном синтезе вещества.....	174
4.3.2. Задача о функционировании биологической системы p53–Mdm2 .....	175
4.3.3. Задача* .....	176
Литература .....	176
<b>Глава 5. Вычислительный эксперимент как инструмент изучения сложных объектов и систем</b> .....	178
5.1. Общие идеи математического моделирования .....	179
5.1.1. О понятии объекта и его модели .....	179
5.1.2. Свойства математических моделей.....	181
5.2. Что такое вычислительный эксперимент? .....	185
5.2.1 Технологическая цепочка вычислительного эксперимента.....	187
Литература .....	193
<b>Приложение. Математическое моделирование функционирования одной биологической системы</b> .....	194
1. Введение.....	194

2. Математическая постановка задачи.....	197
3. Численный алгоритм решения начальной задачи .....	200
4. Методические расчеты.....	202
4.1. Тестовые расчеты. Выбор метода решения задачи....	202
4.2. Численное решение при базальных значениях параметров. Оценка роли параметра запаздывания .....	202
4.3. Численное решение при базальных значениях параметров. Оценка влияния начальных условий.....	206
5. Описание экспериментальных данных.....	208
6. Численный анализ качественных свойств решений. Исследование зависимости решения от параметров.....	210
7. О связи с многостадийной моделью в виде системы ОДУ ....	221
8. Выводы.....	231
Литература .....	233

# ВВЕДЕНИЕ

---

«Главным делом жизни вашей  
Может стать любой пустяк.  
Надо только твердо верить,  
Что важнее дела нет.  
И тогда не помешает  
Вам ни холод, ни жара,  
Задыхаясь от восторга,  
Заниматься чепухой...»

«Всякий раз как появляется дело,  
достойное, чтобы им заняться,  
имеет смысл поручить его человеку,  
способному с ним справиться.»

*Из учебного пособия Р. Р. Ахмерова*

Биологические и медицинские, физические и химические, социальные и экономические, экологические и многие другие сложные системы – объекты, процессы, явления и т.д. – окружают нас, и мы сами представляем собой бесконечно сложные трудноформализуемые системы. Не является секретом тот факт, что эти и многие другие системы во всей полноте и сложности не поддаются исследованию обычными теоретическими методами. Идеализированные лабораторные, а тем более прямые натурные эксперименты над ними дороги, опасны или вообще невозможны по многим, в том числе по этическим причинам или потому, что многие из этих систем существуют в единственном экземпляре. Поэтому математическое моделирование – это один из наиболее доступных и «экологических» способов познания живого и неживого мира вокруг и внутри нас.

Моделирование присутствует почти во всех видах творческой активности людей. Привнесение в эти сферы точного знания в виде математических моделей помогает ограничить интуитивное умозрительное восприятие объектов и процессов, а с другой стороны – расширяет поле для приложений известных математических методов и теорий. Четкая формулировка основных понятий и предположений, апостериорный анализ адекватности используемых моделей, гарантированная точность вычислительных алгоритмов, сопоставление с экспериментальными данными – эти профессиональные требования делают математическое моделирование по-настоящему плодотворным и полезным занятием.

Цель настоящего учебного пособия состоит в том, чтобы подготовить читателя к восприятию классического университетского курса «Методы вычислений» как инструмента для математического моделирования реальных объектов и помочь овладеть практическими навыками проведения вычислительного эксперимента.

Хорошо известно, что подавляющее большинство математических моделей в химии, биологии и медицине, социологии и экологии и др. основано на системах обыкновенных дифференциальных уравнений или функционально-дифференциальных уравнений с запаздывающими аргументами и решении для них задач с начальными условиями. Поэтому в пособии представлен именно этот класс постановок задач и численных методов их решения. В краткой форме приведены основные факты и понятия из теории и практики численных методов, объясняется технология постановки вычислительного эксперимента. Основное внимание уделено методологическим вопросам данного вида научного исследования. Для этого в каждом разделе представлены краткая теория, набор тестовых задач и практические рекомендации, позволяющие разработать эффективный численный алгоритм и проверить правильность его реализации в виде компьютерной программы. Все это создает основу для

применения программы и собственных приобретенных навыков численного анализа в работе с математическими моделями.

В качестве особого примера представлена одна из известных минимальных математических моделей биологического процесса. В приложении излагается технология и результаты численного анализа этой динамической системы. С привлечением данной модели разработана серия учебных заданий. Детально описан новый инструмент – переход к моделям на основе ОДУ, которые аппроксимируют исходную систему уравнений с привлечением идеи гипотетических генных сетей.

В пособии представлен большой набор апробированных и доступных для реализации в ходе практических занятий в учебной аудитории или для самостоятельной работы минимальных математических моделей из разных областей науки – от механики до социологии и медицины. Все примеры, в значительной мере, отражают современное состояние научных исследований в области математического моделирования трудноформализуемых объектов.

---

# ГЛАВА 1. ПОНЯТИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ. СВЯЗЬ С МАТЕМАТИЧЕСКИМ МОДЕЛИРОВАНИЕМ

---

## 1.1. О ПОНЯТИИ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

---

Любой изучаемый объект при более-менее тщательном анализе представляется исследователю как система, т.е. множество взаимосвязанных элементов, образующих определенную целостность, единство и подчиненных определенной цели. Нам необходимо иметь адекватный, надежный и проверенный инструмент для описания изменений, которые происходят с элементами системы и их связями в процессе «наблюдений» за объектом. Таким инструментом может стать математическая модель или динамическая математическая модель [1, 2].

Первоначально, со времен И. Ньютона, термин «динамическая система» применялся в основном к механическим системам  $N$  материальных точек, движение и развитие которых описывается системой

$$\frac{dx_k(t)}{dt} = \Phi_k(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (k = 1, \dots, N) \quad (1.1)$$

или

$$\frac{dx_k(t)}{dt} = \Phi_k(t, x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (k = 1, \dots, N) \quad (1.2)$$

автономных или, соответственно, неавтономных обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Поскольку хорошо известно, что уравнения вида (1.2) достаточно легко могут быть сведены к виду (1.1) простым преобразованием, далее речь пойдет только об автономных ОДУ и их системах, правые части которых не содержат явной зависимости от переменной  $t$ .

Отметим, что дифференциальные уравнения небесной механики Ньютона – это обыкновенные дифференциальные уравнения, удовлетворяющие теоремам существования и единственности решения при заданных начальных условиях. *Решение дифференциальных уравнений вида (1.1) позволило на основании сведений о расположении и скоростях тел в данный момент времени с большой точностью предсказать расположение их во всякий другой момент времени (предсказать, например, точное время солнечных и лунных затмений, расположение планет в то или другое время и т. д.)*. Именно это внушило последующим поколениям исследователей твердую уверенность в самом существовании неизменных законов природы и в возможности на основании знания этих законов по сведениям о настоящем узнавать прошедшее и/или предсказывать будущее. По-видимому, имея в виду первоначальный смысл и роль этих задач и результатов в механике и, в частности, в небесной механике, системы уравнений вида (1.1) в классической литературе упоминаются как «**динамические системы**» [3, 4]. Но в современной литературе в термин «динамическая система» вкладывается обычно существенно более широкий смысл.

*Динамическая система* – это одно из фундаментальных математических понятий, которое используется в тех случаях, когда возникает потребность строить отображения сложных

систем в формальные конструкции – математические модели [5]. В самом широком смысле оно охватывает системы любой природы (физической, химической, биологической, экономической и т.д.), описание которых может принимать различные математические формы – от систем дифференциальных уравнений до графов, марковских цепей и т.д. Но в общепринятом узком смысле, как правило, речь идет о *детерминированных моделях*, т.е. таких, которые, как и во времена Ньютона, предполагают точный однозначный прогноз будущих состояний объекта исследования по его начальному состоянию. То есть, если точно задать все начальные условия и указать все факторы, которые влияют на поведение рассматриваемой системы, то можно сколь угодно точно и однозначно предсказать все последующие состояния системы. С этой точки зрения динамическая система – это идеализация объекта, процесса или явления, в рамках которой пренебрегают «флуктуациями и всеми другими статистическими явлениями» [4]. Самое лаконичное толкование состоит в том, что динамическая система – это просто математическая модель некоторой реальной системы (объекта).

Отметим, что на протяжении нескольких веков интерес к изучению динамических систем никогда не угасал. Более того, в настоящее время он возрос многократно благодаря новым областям применения, развитию вычислительной техники и математическому моделированию. С развитием наук, в особенности затрагивающих человека, стало очевидно, что понятие динамических систем крайне полезно для анализа различных эволюционных процессов.

Нам в рамках данного учебного пособия представляется крайне важным, не отрицая ни одного из этих определений, увидеть во вполне абстрактных изучаемых системах дифференциальных уравнений отражение реальных биологических, химических, физических, экономических, экологических или иных

процессов. Поэтому мы примем следующее толкование, которое, как представляется, включает в себя многие точки зрения и одновременно указывает на главное свойство динамических систем:

- ✚ **Динамическая система** – это модель реальной системы, которая обладает множеством состояний и формально (математически) описывается законом эволюции этих состояний.

Под законом эволюции мы здесь будем понимать системы обыкновенных дифференциальных уравнений и функционально-дифференциальных уравнений с запаздыванием.

## 1.2. ПОНЯТИЯ СОСТОЯНИЯ И ЗАКОНА ЭВОЛЮЦИИ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

---

Одной из важных научных проблем естествознания давно признана следующая общая задача, приводящая к рассмотрению вопроса о динамической системе: *предсказание поведения или закона изменения состояний изучаемого объекта во времени и пространстве на основе определенных знаний о его начальном состоянии* [5].

Предположим, что будущее состояние многих физических, химических, биологических, экологических, экономических и даже общественных систем может быть предсказано в некоторых пределах, если известно

- настоящее состояние и
- закон, управляющий их эволюцией.

В самом общем виде это следует понимать так, что для любого  $t$  задано отображением  $\phi_t$ , которое переводит начальное состояние в некоторое другое, т.е. со временем система меняет свое положение в некотором заданном пространстве состояний, действуя в соответствии с этим отображением (законом). Иногда само отображение  $\phi_t$  известно в явном виде, но чаще задается косвенно, например, дифференциальным уравнением, и может быть вычислено только приближенно. При условии, что сам этот закон не изменяется со временем, поведение таких систем может рассматриваться как полностью определенное их начальным состоянием [5].

Пусть в пространстве всевозможных состояний динамической системы имеется подмножество  $X = U \subseteq R^m$  с координатами  $u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$ , причем начальное состояние  $u(0) = u_0$ ,  $u_0 \in U \subseteq R^m$ . Тогда закон эволюции  $\phi_t$  может быть задан в терминах скоростей изменения этих координат:

$$\frac{du}{dt} = f(u), \quad u \in U \subseteq R^m, \quad f : U \rightarrow R^m \quad (1.3)$$

или в покомпонентном виде

$$\frac{du_k}{dt} = f_k(u_1, u_2, \dots, u_m), \quad k = 1, \dots, m. \quad (1.4)$$

Таким образом, здесь *эволюционный закон* – это автономная система дифференциальных уравнений, заданная в некоторой области и удовлетворяющая там условиям теоремы существования и единственности решения дифференциального уравнения. *Состояние системы*  $u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$  – это набор некоторых количественных характеристик, описывающих наиболее значи-

мые для конкретного исследования свойства объекта или процесса (например, масса, плотность или концентрация веществ, температура, пространственная координата или скорость).

## 1.3. ЭЛЕМЕНТЫ КАЧЕСТВЕННОГО АНАЛИЗА ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

---

### 1.3.1. БАЗОВЫЕ ПОНЯТИЯ

Основополагающие результаты в области теоретического анализа динамических систем были получены А.М. Ляпуновым и А. Пуанкаре в конце 19-го века, а позднее А.А. Андроновым, В.И. Арнольдом и многими другими исследователями. Чтобы проиллюстрировать общий смысл и значение этих исследований для теории динамических систем и математического моделирования, приведем здесь вопросы, перечисленные однажды Анри Пуанкаре в связи с задачами небесной механики: *«Будет ли одно из тел всегда оставаться в некотором участке неба или оно сможет удалиться в бесконечность? Будет ли расстояние между двумя из этих тел неограниченно убывать или, напротив, это расстояние будет всегда заключено в определенных границах?»*. Эти и многие другие вопросы такого характера, в первую очередь, относят к ведению качественной теории дифференциальных уравнений.

Отметим, что качественный анализ системы, проводимый обычно специальными аналитическими или полуаналитическими методами, в рамках данного курса рассматриваться не будет. Но мы введем основные понятия, необходимые для проведения анализа поведения динамической системы непосредственно в ходе числительных экспериментов по результатам ее приближенного решения.

- ✚ Множество всевозможных состояний  $u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$  называется  $m$ -мерным *пространством состояний* или *фазовым пространством* динамической системы (1.3). Если переменных величин, характеризующих состояние системы, только две –  $u_1$  и  $u_2$ , то плоскость  $(u_1, u_2)$  называется *фазовой плоскостью*.

Когда решение задачи (1.3) получено, оно может быть представлено в виде интегральных кривых  $u_k = u_k(t, u_0)$  ( $k = 1, 2, \dots, m$ ) в пространстве переменных  $(t, u_1, u_2, \dots, u_m)$  или в виде фазовой траектории  $\xi(u_0)$  в фазовом пространстве  $(u_1, u_2, \dots, u_m)$  (в этом случае  $t$  играет роль параметра). Пример, поясняющий наиболее важные понятия, показан на рис. 1.1, 1.2.

- ✚ Изменению состояния системы во времени соответствует «движение» изображающей ее точки с координатами  $(u_1, u_2, \dots, u_m)$  в фазовом пространстве вдоль некоторой линии, которая называется *фазовой траекторией*.

Фазовая траектория характеризует эволюцию системы с течением времени. Каждая точка фазовой траектории соответствует определенному состоянию системы в тот или иной момент времени. Таким образом, само понятие фазовой траектории является одним из основных, а расчет фазовых траекторий – важнейшая часть численного анализа динамической системы.

- ✚ Совокупность фазовых траекторий для всевозможных начальных состояний (начальных условий) называется *фазовым портретом динамической системы*.

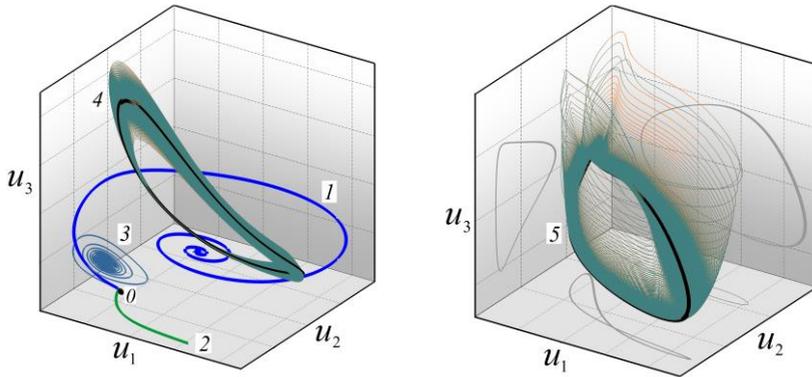


Рис. 1.1. Фрагменты фазовых траекторий (линии 1–5), соответствующих разным типам решений и финальным состояниям динамической системы: 0 – начальное состояние; 1, 2, 3 – траектории, приводящие к неподвижным предельным точкам; 4, 5 – траектории, иллюстрирующие сложную динамику системы (черные линии – предельные траектории, серые – проекции на координатные плоскости).

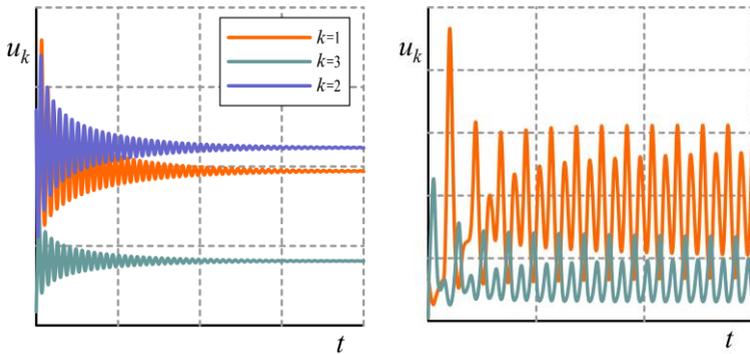


Рис. 1.2. Интегральные кривые, соответствующие траекториям 3 (слева, затухающие колебания) и 5 (справа, квазипериодические колебания) на рис. 1.1.

Фазовый портрет содержит важнейшую информацию о поведении решений динамической системы, т.е. об изменении ее состояний. Имея в распоряжении фазовый портрет, можно определить последовательность изменения состояний системы от начального до финального при  $t \rightarrow \infty$ , а также число и характер асимптотических состояний системы, к которым стремятся решения.

В настоящее время имеется довольно четкое представление о том, что динамические (детерминированные) системы могут иметь **четыре характерных типа решений**: *стационарное, периодическое, квазипериодическое и хаотическое* (детерминированный хаос). Этим типам решений в фазовом пространстве соответствуют так называемые аттракторы системы, которые, в частности, можно обнаружить при графическом представлении численных или точных решений.

✚ Под *аттрактором* понимают (минимальное) подмножество фазового пространства, притягивающее при  $t \rightarrow \infty$  все траектории из окрестности этого подмножества.

Перечисленные типы решений в фазовом пространстве представляют собой аттракторы в виде неподвижной предельной точки (устойчивое равновесие), предельного цикла, квазипериодического аттрактора ( $m$ -мерного тора) и хаотического (или странного) аттрактора.

✚ *Положение равновесия* – это такое состояние динамической системы, которое не меняется со временем. Его называют также стационарным состоянием. Этот простейший тип траектории в фазовом пространстве определяется условием равновесия  $\frac{du_k}{dt} = 0$ .

Эта траектория является вырожденной, т.е. она представляет собой *неподвижную точку в фазовом пространстве*. неподвижная точка является особой точкой, т.к. в ней не определена касательная к траектории. Соответствующая интегральная кривая  $u_k = u_k(t, u_0)$  ( $k = 1, 2, \dots, m$ ), отвечающая положению равновесия, представляет собой прямую в пространстве  $R \times R^m$ , параллельную оси времени.

✚ *Циклом* называется периодическая траектория  $\xi(u_0)$  в фазовом пространстве  $(u_1, u_2, \dots, u_m)$ , не являющаяся положением равновесия, такая что каждая ее точка удовлетворяет условию  $u_k(t + T_0, u_0) = u_k(t_0, u_0)$  для некоторого  $T_0 > 0$  и всех  $t \in R$ . Циклу соответствуют периодические колебания интегральных кривых  $u_k = u_k(t, u_0)$  ( $k = 1, 2, \dots, m$ ) в пространстве переменных  $(t, u_1, u_2, \dots, u_m)$ .

Предельный цикл является устойчивым, если все фазовые траектории, начинающиеся в его  $\varepsilon$ -окрестности, асимптотически приближаются к этому предельному циклу при  $t \rightarrow +\infty$ . Если предельный цикл неустойчив, тогда при  $t \rightarrow +\infty$  траектории «срываются» с этого цикла и удаляются от него, устремляясь к другому циклу либо к неподвижной предельной точке. Из теоремы Коши о единственности решения системы ОДУ вытекает важное следствие: фазовые траектории в регулярных точках не пересекаются.

✚ *Квазипериодическое движение* – это движение, составленное из двух независимых колебаний интегральных кривых  $u_k = u_k(t, u_0)$  ( $k = 1, 2, \dots, m$ ) в пространстве переменных  $(t, u_1, u_2, \dots, u_m)$ . Им соответствуют торообразные траектории  $\xi(u_0)$  в фазовом пространстве  $(u_1, u_2, \dots, u_m)$ : траектория

«навивается» на тор в фазовом пространстве так, что одна частота определяется временем оборота по малому кругу тора, другая – по большому кругу.

Хотя траектория может никогда не повторяться точно (если частоты несоизмеримы), «движение» системы остаётся регулярным: траектории, начинающиеся поблизости друг от друга на торе, так и остаются близкими одна к другой, и долгосрочный прогноз гарантирован [5].

✚ *Динамический (детерминированный) хаос* – это вид нерегулярного (непериодического) поведения нелинейной динамической системы, при котором траектории, начинающиеся поблизости друг от друга, непредсказуемо расходятся. «Движение» выглядит случайным, несмотря на то, что оно описывается строго детерминированным законом эволюции, т.е. решение уравнений подчиняется теореме единственности и однозначно воспроизводится при фиксированных начальных условиях.

Интересно и важно, что причина появления детерминированного хаоса кроется не в том, что в систему намеренно тем или иным образом вносится элемент случайности, как в стохастических (недетерминированных) моделях, а просто в сверхчувствительности самой динамической системы по отношению к начальным условиям или параметрам, когда их ничтожно малое изменение (иногда сопоставимое с ошибками машинного округления) со временем неожиданно приводит к сколь угодно большим изменениям динамики системы.

Заметим, что понятия детерминизм и хаос полностью противоположны по смыслу. *Детерминизм* ассоциируется с полной предсказуемостью и воспроизводимостью поведения системы, а *хаос* – с полной непредсказуемостью и невозпроизводимостью. Довольно продолжительное время считалось, что динамическая

(детерминированная) система вообще не может иметь хаотических траекторий или аттракторов. Впервые подобные свойства у динамической системы в 3D-пространстве состояний обнаружил Э. Лоренц и его коллеги в 60-х годах 20-го века. Это была попытка численного исследования сложнейшего процесса тепловой атмосферной конвекции на основе простейшей системы трех обыкновенных дифференциальных уравнений, полученной в результате преобразования классической системы уравнений гидродинамики (см. задачу в п. 2.7.3). Считается, что детерминированный хаос возник как результат нелинейности полученной динамической системы и ее сверхчувствительности. Лоренц, анализируя свой результат, пишет: *«установившееся непериодическое решение неустойчиво в том смысле, что близкие к нему в какой-то момент решения не останутся близкими навсегда. Неустановившееся непериодическое решение иногда устойчиво, но в этом случае устойчивость – одно из переходных свойств, стремящееся исчезнуть»* [6].

При обсуждении проблемы детерминированного хаоса мы, хотим этого или нет, *сравниваем детерминированные модели со стохастическими, которые основаны на вероятностном подходе и часто позиционируются как наиболее достоверное представление реального объекта.* Следует отметить, что детерминированные модели, с одной стороны, действительно являются более упрощенными, поскольку не позволяют достаточно полно учитывать элемент неопределенности. С другой стороны, они позволяют учесть многие дополнительные факторы, зачастую недоступные стохастическим моделям. Потому что нередко оказывается, что, учитывая одни факторы при моделировании, мы забываем о других. Никакая модель не может учесть абсолютно все факторы. Но профессионально разработанная модель отличается тем, что позволяет учесть наиболее существенные из них. *При любом выборе подхода к моделированию достоверным явля-*

*ется тот результат, который слабо зависит от этого выбора и весьма близок к реальным наблюдениям.*

В ходе исследования важно не только получить знание об основных типах решений, которые характерны для данной динамической системы, но и выяснить, как и при каких условиях система перестраивается, осуществляя переход от решения одного типа к решению другого типа. Это имеет особо важное значение, если иметь в виду, что модель отражает свойства реального объекта.

✚ Бифуркация («раздвоение») – это качественная и топологическая перестройка системы и ее фазового портрета, происходящая при переходе системы через критическое (бифуркационное) значение какого-либо из ее параметров. Эти значения называют еще точками бифуркации.

Перестройка решения (бифуркация) происходит при изменении значений параметров системы или начальных условий. Чтобы не сделать грубых ошибок в качественном, в том числе бифуркационном, анализе системы, следует знать следующее: согласно известным представлениям, *простейшие типы квазипериодических и хаотических (странных) аттракторов могут реализовываться в динамических системах с размерностью фазового пространства  $n$  не менее 3.*

### 1.3.2. О КАЧЕСТВЕННОМ АНАЛИЗЕ РЕШЕНИЯ

Определенную часть работы по качественному анализу изучаемой на практике динамической системы выполняют непосредственно в ходе численного эксперимента, связанного с решением задачи Коши (см., например, [7]).

При качественном анализе динамической системы желательно получить ее бифуркационную диаграмму, которая в сжа-

том виде содержит все возможные модели поведения данной системы [5]. С ее помощью могут быть получены ответы на вопросы, являющиеся ключом к пониманию функционирования исследуемой динамической системы (модели):

- находится ли система в состоянии равновесия или она близка к нему, и сколько у системы таких состояний?
- являются ли решения, соответствующие данному состоянию равновесия, устойчивыми или неустойчивыми (т.е. возвращается ли к этому состоянию равновесия точка после отклонения от него или нет)?
- каковы области значений переменных, на которых точки на интегральных кривых при возрастании  $t$  стремятся к данному состоянию равновесия?
- существуют ли у рассматриваемой системы (1.3) интегральные кривые, являющиеся замкнутыми кривыми (т.е. замкнутые траектории)?

Для ответа на эти и многие другие вопросы нужно знать поведение решения в течение сколь угодно большого промежутка времени, т. е. нужно знать характер решения «в целом». Исследование решений дифференциальных уравнений с этой точки зрения получило название «качественного исследования», а соответствующая теория – качественной теорией дифференциальных уравнений. В качестве учебного пособия по этой теме можно порекомендовать, например, [7].

Однако **на практике** динамические математические модели по сложности лишь напоминают модельные уравнения, доступные для теоретического исследования. Поэтому чаще всего исчерпывающий качественный анализ конкретной динамической системы является трудно реализуемой самостоятельной

задачей, особенно если количество параметров модели и размерность фазового пространства достаточно велики. Поэтому

- обычно при математическом моделировании этот анализ начинается с уточнений того диапазона параметров, который имеет смысл с точки зрения свойств моделируемого объекта. Приоритет отдается поиску установившихся движений. В классической теории, как мы уже упоминали, это устойчивые состояния равновесия, периодические движения, тороидальные образования, многообразия из устойчивых состояний равновесия;
- обычно точные начальные значения фазовых (зависимых) переменных модели неизвестны или в разных моделируемых ситуациях они могут быть разными. Значит, необходимо исследовать зависимость состояний системы от начальных условий;
- как правило, точные значения входящих в модель параметров также неизвестны или при их выборе имеет место большой произвол, поэтому необходимо исследовать систему при всех возможных значениях параметров в заранее определенном диапазоне.

Напомним, что возможные фазовые траектории динамических систем можно грубо классифицировать как положения равновесия, циклы и, если размерность пространства переменных  $(u_1, u_2, \dots, u_m)$   $m \geq 3$ , то «все остальные».

Однако следует иметь в виду, что качественный анализ, позволяющий установить некоторые общие свойства системы – это лишь часть общего исследования. *Важно установить, имеют ли эти качественные свойства отношение к поведению реального объекта.* Проведение качественных исследований динамических систем не может отменить тот факт, что если систе-

ма уравнений претендует на роль математической модели какого-либо реального объекта или процесса, то доказательством ее адекватности являются описываемые этой моделью количественные данные экспериментальных наблюдений. В большинстве случаев лабораторные и натурные эксперименты показывают, как развиваются системы, будучи в состояниях, далеких от равновесия. Тогда в рамках математической модели требуется описать именно эволюцию системы, часто – на самых ранних ее этапах. Например, в биомедицинских системах важно, как и почему болезнь начинается, как протекает, а также именно для этой стадии важно изучить способы управления системой, приводящие к выздоровлению.

Таким образом, качественный анализ динамических систем является частью общей технологии математического моделирования и постановки вычислительного эксперимента. Его значение состоит в том, что именно он дает представление об общих закономерностях эволюции состояний динамической системы. Конкретизация результатов этого анализа с помощью экспериментальных данных делает процесс моделирования завершенным.

## 1.4. ПРИМЕРЫ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ. МОДЕЛИ ДИНАМИКИ ЧИСЛЕННОСТИ ПОПУЛЯЦИЙ

---

В любой науке существуют простые модели, которые (до определенной степени) поддаются аналитическому исследованию и обладают определенными качественными свойствами, позволяющими описывать целый спектр природных явлений. Такие модели часто называют *базовыми*. Как правило, базовые модели

являются минимальными (малоразмерными), т.е. такими, для которых размерность пространства состояний системы принимается минимальной (или оптимальной). После того, как досконально математически изучена суть процессов на основе базовой модели, по аналогии становится понятными явления, происходящие в гораздо более сложных реальных системах. Таким образом, благодаря простоте и наглядности, базовые модели становятся чрезвычайно полезными при изучении самых разных динамических систем. Представим здесь наиболее известные и простые модели этого ряда. Эти модели обычно рекомендуются как основа для описания динамики численности популяций, но реально область их применения гораздо более обширна.

- ✚ Под *популяцией* обычно понимают группу особей одного вида, занимающих строго ограниченное и определенное место обитания.

Иными словами, популяция – это семейство особей, которые входят в состав конкретного биоценоза. Для свободноживущих форм и видов место обитания и границы распространения обусловлены такими факторами, как рельеф, климат и пр. Для паразитических организмов преградой для расселения служат приспособленность и жизненный цикл. В биологии под клеточной популяцией имеют в виду изолированное потомство конкретной группы клеток. С точки зрения генетики популяция – это неоднородная наследственная совокупность форм одного вида. Каждое семейство особей отвечает конкретным признакам и представляет собой определенный фенотип и генотип. Таким образом, даже это простое перечисление признаков, характеризующих разные виды, указывает на то, что для конкретного исследователя жизнь популяции как динамической системы может характеризоваться разным набором параметров состояния в зависимости от цели исследования.

Пусть *основное существенное свойство популяций* – это изменение во времени количественных характеристик распределения популяции в некотором ограниченном пространстве. Распределение особей зависит от многих факторов, в том числе от климатических условий, генома, цепи питания и степени адаптации. *Количественный показатель распределения* – численность популяции или ее отдельной группы.

✚ Под *численностью* будем понимать общее количество организмов на данной территории или в данном объеме, относящихся к одной популяции, в каждый момент времени.

Чаще всего оно бывает динамическим, зависит от соотношения смертности и плодовитости особей (можно было бы также в качестве количественной характеристики рассматривать *плотность* популяции, которая определяется биомассой или количеством организмов на единице площади (объема), однако в данном случае имеет смысл остановиться на исторически сложившемся выборе).

✚ *Рождаемость* определяется количеством особей, которые появились в результате размножения в единицу времени; *смертность* – это количество форм жизни, погибших за единицу времени.

*Основные «физические» гипотезы, упрощающие задачу:*

- главное свойство живых систем – способность к размножению;
- миграцией особей можно пренебречь;
- популяция считается изолированной и однородной (т.е. все особи в популяции одинаковы и равномерно распределены в пространстве).

Тогда пусть единственный параметр состояния данной динамической системы  $N$  – численность популяции в среде в некоторый момент времени  $t$ , причем  $N(t_0) = N_0$ . Ставится задача математического описания изменения  $N(t)$ , т.е. *необходимо сформулировать закон эволюции* этой динамической системы.

В самом общем виде закон эволюции и начальное состояние системы могут быть представлены так:

$$\frac{dN}{dt} = V_b - V_d, \quad N(t_0) = N_0,$$

где  $V_b$  – рождаемость, а  $V_d$  – смертность.

Отметим, что для многих *одноклеточных организмов или клеток*, входящих в состав клеточных тканей, размножение – это просто деление, а для более сложно организованных растений и животных размножение происходит по более сложному закону. Но в простейшей модели можно предположить, что *скорость размножения вида пропорциональна численности этого вида*. В результате приходим к модели, сформулированной в виде задачи

$$\frac{dN}{dt} = \varepsilon N, \quad \varepsilon = b - d, \quad N(t_0) = N_0, \quad (1.5)$$

где  $N(t)$  – численность популяции, непрерывная дифференцируемая функция,  $N_0$  – начальная (при  $t = t_0$ ) численность популяции. Величины  $b > 0$  и  $d > 0$  – константы пропорциональности, определяющие рождаемость и смертность и зависящие от многих факторов среды. В общем случае  $\varepsilon = \varepsilon(t, N, k_1, \dots, k_p)$ , где  $k_1, \dots, k_p$  – параметры модели.

В ходе изучения конкретной популяции с применением модели (1.5) предстоит уточнить вид  $\varepsilon$  и в ходе решения задачи Коши ответить на следующие вопросы:

- как изменяется численность популяции в такой системе со временем?
- может ли в ней в конце концов установиться стационарное состояние, т.е. когда численность популяции станет постоянной?
- какие вообще возможны состояния системы?
- согласуются ли принятый закон эволюции и выводы с экспериментальными данными, которые получены для конкретной исследуемой популяции?

Далее рассмотрим два важных частных случая (более детально с этими и другими математическими моделями популяций можно ознакомиться в [6–10]). Все модели этого ряда могут быть использованы в численных экспериментах, имеющих методические цели.

#### 1.4.1. ЛИНЕЙНАЯ МОДЕЛЬ. МОДЕЛЬ МАЛЬТУСА

Это простейшая линейная модель динамики популяций. Эволюционный закон численности популяции (1.5) был впервые сформулирован Т. Мальтусом в книге «О росте народонаселения» (1798 г.). Предполагалось, что  $\varepsilon = b - d = \text{const}$ , где  $b > 0$  и  $d > 0$  – удельные скорости роста и убыли численности популяции.

Для ответа, по крайней мере, на некоторые из поставленных выше вопросов не составит труда записать точное решение этой задачи Коши:  $N(t) = N_0 e^{\varepsilon t}$ . Можно провести качественный

анализ возможных состояний исследуемой динамической системы:

- если величина  $\varepsilon > 0$ , то, чем больше величина  $N$ , тем больше производная  $dN/dt$ , и тем быстрее растет сама величина  $N(t)$  – численность популяции – с течением времени  $t$  (это свойство называется автокатализом). Этот случай обуславливает неограниченный рост переменной  $N(t)$ .
- Если параметр  $\varepsilon < 0$ , величина  $N(t)$  будет с течением времени уменьшаться и стремиться к нулю.
- И лишь тогда, когда параметр  $\varepsilon = b - d = 0$ , величина  $N$  не будет меняться с течением времени. В этом случае важно, что малые изменения параметра  $\varepsilon = b - d$  приведут системе либо к состоянию неограниченного роста, либо к асимптотическому уменьшению величины  $N$  до нуля, т.е. равновесие между рождаемостью и смертностью неустойчиво в том смысле, что даже небольшое нарушение равенства  $b = d$  приводит с течением времени ко все большему отклонению функции  $N(t)$  от равновесного значения  $N(0)$ .
- Кроме того, следует обратить внимание, что состояния системы зависят и от начального условия: при  $N(0)=0$  и при любых значениях параметров система будет находиться в этом состоянии, однако даже малое отклонение  $N(0)$  от нуля выводит систему из этого неустойчивого состояния.

Заметим, что из всех обсуждаемых состояний данной простейшей динамической системы именно способность к неограниченному росту  $N$  всегда вызывала и до сих пор вызывает повышенный интерес и шквал обсуждений не только среди исследователей, но и во всем мировом сообществе. Дело в том, что Мальтус на этой основе сформулировал, среди прочего, три ос-

новных тезиса о «законе народонаселения» Земли, т.е. применил свою модель к жизни человеческой популяции: а) из-за биологической потребности человека к продолжению рода численность населения постоянно растёт, пока есть источники средств существования; б) народонаселение строго ограничено средствами существования; в) рост народонаселения может быть остановлен лишь встречными причинами, которые сводятся к нравственному воздержанию или несчастьям (войны, эпидемии, голод, социальные меры). Анализируя теорию Мальтуса, Ч. Дарвин одной из причин нарушения закона Мальтуса в реальной живой природе видел в борьбе видов за существование.

Справедливости ради отметим, что закон экспоненциального роста действительно наблюдается на определенной стадии роста популяций клеток в ткани, водорослей или бактерий в культуре. Но для большинства популяций существуют ограничивающие факторы, и по тем или иным причинам рост популяции рано или поздно прекращается. Единственное исключение представляет собой человеческая популяция, которая на протяжении всего исторического времени растет, причем на определенных этапах истории – весьма быстрыми темпами.

Стоит также обратить внимание на то, что уравнение, предложенное Мальтусом как модель динамики численности популяции, постоянно используется в курсе Методы вычислений как модельное уравнение для широкого спектра теоретических исследований свойств численных методов.

#### 1.4.2. ПРОСТЕЙШАЯ НЕЛИНЕЙНАЯ МОДЕЛЬ. РАЗНОПОЛАЯ ПОПУЛЯЦИЯ В УСЛОВИЯХ НЕОГРАНИЧЕННЫХ РЕСУРСОВ

Если в основе процесса размножения популяции лежит скрещивание, предполагающее встречи между особями разных полов одного и того же вида, то теоретически прирост будет тем выше, чем больше количество встреч между особями, а последнее про-

порционально  $N^2$ . Динамика такой системы может быть описана целым рядом моделей. Из них наиболее простая, соответствующая условиям с неограниченным ресурсом, непосредственно вытекает из модели (1.5):

$$\frac{dN}{dt} = \varepsilon N, \quad \varepsilon = \alpha N, \quad N(t_0) = N_0. \quad (1.6)$$

С практической точки зрения эта модель имеет определенную ценность именно при низкой численности популяции, когда скорость размножения резко падает, так как вероятность встречи двух особей разных полов уменьшается при понижении плотности популяции пропорционально квадрату плотности. Однако истинная ценность модели (1.6) состоит в том, что она служит частью большинства моделей, в которых в той или иной мере должен быть учтен фактор скрещивания.

Интересно, что уравнение (1.6) демонстрирует полную аналогию с уравнением для скорости химической реакции второго порядка в химической кинетике, записанным с использованием классического закона действующих масс.

#### 1.4.3. МОДЕЛЬ ФЕРХЮЛЬСТА-ПИРЛА (ЛОГИСТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ)

Популяционные модели сразу становятся нелинейными, если принять во внимание ограниченность доступных популяции ресурсов, которая характерна для реальной жизни. П. Ферхюльстом (1838г.) и Р. Пирлом совместно с Л. Ридом (1920г.) предложена модель, учитывающая этот фактор.

Пусть существует «равновесная» численность популяции  $N_p$ , которую может обеспечить окружающая среда; скорость изменения численности популяции пропорциональна самой чис-

ленности, умноженной (в отличие от модели Мальтуса) на величину ее отклонения от равновесного значения:

$$\frac{dN}{dt} = \varepsilon N, \quad \varepsilon = \alpha \left( 1 - \frac{N}{N_p} \right), \quad N(t_0) = N_0. \quad (1.7)$$

Здесь параметр  $\alpha > 0$ . Элементарный анализ показывает, что при  $N < N_p$  скорость роста численности популяции положительна, при  $N > N_p$  она отрицательна, а если  $N \rightarrow N_p$ , то величина  $dN/dt$  стремится к нулю. Член  $(1 - N/N_p)$  обеспечивает действие механизма «насыщения» численности популяции: изначально, когда численность популяции еще крайне мала ( $N \ll N_p$ ), уравнение (1.7) практически совпадает с (1.5), действуя как модель Мальтуса, так что численность популяции  $N$  нарастает экспоненциально. Но по мере увеличения  $N$  скорость роста численности популяции уменьшается (начинает сказываться ограниченность природных ресурсов), и при  $t \rightarrow \infty$  численность популяции  $N$  стремится к  $N_p$ , а скорость роста популяции — к нулю. Таким образом, при любом ненулевом  $N(t_0) = N_0$  численность популяции стремится к равновесному значению  $N_p$ , причем тем медленней, чем величина  $N(t)$  ближе к  $N_0$ .

Заметим, что предположения о механизмах насыщения используются при построении многих моделей в различных областях знаний. Параметр  $K = N_p$  называют «емкость среды» (т.е. максимально возможная численность популяции), он определяется целым рядом различных обстоятельств, характерных для разных видов, в том числе ограничениями на количество субстрата для микроорганизмов, на объем биореактора для развивающейся в нем популяции клеток ткани, на доступную пищевую базу или убежища для высших животных. Уравнение вида

(1.7) широко известно как *логистическое уравнение*, его точным решением является логистическая функция

$$N(t) = \frac{KN_0 e^{\alpha t}}{K + N_0 (e^{\alpha t} - 1)}, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} N(t) = K.$$

Интересно, что в литературе приводится достаточно примеров изменения численности популяций по логистическому закону. Например, в случае экспериментально наблюдаемой динамики популяций жука *Rhizoretha Dominica* в 10-граммовой порции пшеничных зерен (порция пополняется каждую неделю): первые 50 суток численность популяции изменяется крайне медленно, в следующие 2.5–3 месяца наблюдается стремительный рост, но, достигнув насыщения при численности 25–30 особей в 1 грамме зерен, рост популяции жуков замедляется и прекращается вовсе (см., например, [7]).

*Область применения логистического уравнения* оказалась довольно широкой. Было замечено, что уравнение описывает два крайних типа поведения популяций (или стратегии роста и выживания экологических систем) –  $\alpha$ -стратегия и  $K$ -стратегия. При достаточно большом значении параметра  $\alpha$  (в задачах экологии этот параметр имеет смысл врожденной скорости роста численности популяции, связанной с максимальной скоростью размножения особи данного вида) в уравнении (1.7) доминирует первое слагаемое правой части  $\alpha N$ . При этих условиях решение модели соответствует  $\alpha$ -стратегии поведения, для которой характерно бурное размножение и короткая жизнь особей в популяции, быстрые увеличения и падения ее численности. При относительно низких значениях  $\alpha$  реализуется  $K$ -стратегия поведения, которая предполагает весьма низкий темп размножения и долгую жизнь популяции, когда скорость размножения, зависящая от численности (плотности) популяции, быстро растет,

если численность популяции падает. Размеры популяции близки к равновесному уровню, определяемому значением  $K$ . Обе стратегии представляют два способа решения одной задачи – задачи выживания.

#### 1.4.4. МОДЕЛИ, ОСНОВАННЫЕ НА ИДЕЕ ЛОГИСТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Логистическое уравнение интересно еще и тем, что оно породило целый ряд моделей, нашедших самое широкое применение благодаря своим уникальным свойствам. Крайне популярны дискретные аналоги логистического уравнения (эти модели, в частности, подробно представлены и исследованы в [11]). Так, *дискретный аналог логистического уравнения имеет вид*

$$N_{k+1} = \alpha N_k (1 - N_k),$$

где  $k$  определяет последовательные моменты времени, в течение которого производится моделирование изменений численности популяции.

Наряду с уже отмечавшимися свойствами – стремлением к устойчивому равновесию при весьма малых значениях  $\alpha$  – динамическая система приобретает и качественно новые свойства: с ростом этого параметра в системе возникают сначала периодические колебания численности, а при  $\alpha > 2.57$  наблюдаются хаотические вспышки и падения  $N$ . Это наиболее характерно для динамики численности сезонно размножающихся насекомых с перекрывающимися поколениями (речь идет о таких популяциях, в которых каждый новый сезон начинается с появления совершенно нового поколения особей, причем предыдущее поколение не выживает).

*Модель Хатчинсона (1948 г.), фактически являющаяся логистическим уравнением с запаздыванием,*

$$\frac{dN(t)}{dt} = \alpha N(t) \left( 1 - \frac{N(t-\tau)}{K} \right),$$

позволяет учесть при моделировании тот естественный факт, что в природе процессы размножения и гибели происходят не одновременно, и популяция реагирует на любое изменение внешних условий с опозданием на время  $\tau$ . В [7] отмечается, что эта весьма реалистичная модель учитывает инерцию в реакции популяции, колебательный характер стремления численности популяции к ее стационарному значению, возможность устойчивого сосуществования лишь ограниченного числа представителей данной популяции. В уравнении Хатчинсона, как и в логистическом уравнении (1.5), может быть  $N(t) > 0$  при  $t > t_0$  и  $N(t_0) > 0$ , однако главную роль в определении динамики такой системы может сыграть начальное условие, которое должно быть задано на интервале  $[t_0 - \tau, t_0]$ .

Наконец, нельзя не отметить, что идея логистического уравнения используется в классическом *уравнении Колмогорова-Петровского-Пискунова (КПП)* [12] (см. также работу Р. Фишера [13])

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1-u),$$

которое было предложено его авторами для анализа распространения в пространстве и времени волн плотности численности особей, обладающих доминантным геном, от некоторого ненулевого начального условия, но одновременно сыграло большую роль в разрешении сложных математических вопросов, связанных с неограниченным пространственным распространением вещества (тепла) в диффузионном процессе при постоянном коэффициенте диффузии.

Уравнение КПП в настоящее время остается одним из основных инструментов моделирования широкого круга диффузионных процессов. Речь идет о таких процессах, например, в биохимии, для которых характерна конечная скорость распространения вещества или энергии в пространстве, но в стандартной диффузионной модели при постоянном коэффициенте диффузии этого эффекта добиться трудно. В этой ситуации для моделирования привлекается уравнение КПП (в представленном уравнении коэффициент диффузии, как мы видим, равен 1), в котором конечная скорость распространения возмущений от локализованного источника, заданного начальным условием, является существенно нелинейным эффектом, обеспеченным логистическим членом.

## 1.5. НЕКОТОРЫЕ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ ЧИСЛЕННОСТИ НАСЕЛЕНИЯ ЗЕМЛИ

---

*Эмпирический закон гиперболического роста численности населения Земли – это закон эволюции системы, который заключается в том, что численность населения Земли в течение нескольких тысячелетий (от 10000г. до н.э. до 2022г. н.э.) неуклонно росла в среднестатистическом смысле, и этот рост соответствует гиперболе.*

Учитывая необычайную сложность и многофакторность моделируемой системы, в научном сообществе не прекращаются попытки предложить, прежде всего, лаконичную *феноменологическую математическую модель*, способную на языке формул описать имеющиеся статистические данные о росте численности человечества. В основе подобного подхода лежит содержательная (демографическая) модель, в рамках которой осредняются все локальные и временные отклонения, происходящие в

различных регионах мира, и народонаселение Земного шара рассматривается как единая взаимосвязанная система, как нечто целостное.

При таком подходе единственной количественной характеристикой состояния данной динамической системы принимается  $N$  – численность населения. Процесс роста населения Земли должен рассматриваться на громадном интервале времени, охватывающем время жизни всех поколений людей. В сравнении с этим историческим периодом время жизни одного поколения жителей Земли, сопоставимое со средним временем жизни одного человека, представляется пренебрежимо малым и уже поэтому – несущественным (разумеется, мы понимаем, что в моделях подобного типа это далеко не единственное упрощение!).

Главным кандидатом на эту роль могла бы стать линейная модель Мальтуса (1.5), но она не справилась с описанием динамики численности человеческой популяции в силу целого ряда причин (см. п. 1.4.1). Лучшее согласие с наблюдениями может быть получено из решения уравнения, которое ранее предлагалось рассматривать как модель динамики численности разнополой популяции в условиях неограниченных ресурсов (1.6) (имея в виду эту непосредственную связь моделей, мы здесь сохраняем номер формулы):

$$\frac{dN}{dt} = \frac{N^2}{C}. \quad (1.6')$$

Это нелинейное уравнение описывает самоускоряющийся рост функции  $N(t)$ , известный в науке как *режим с обострением*. Решение уравнения  $N(t) = C(T - t)^{-1}$  имеет глубокий содержательный смысл, поскольку с точки зрения демографии, в принципе, наблюдаемый неуклонный рост народонаселения подчи-

няется степенным законам  $N(t) = C(T - t)^\alpha$  (эта гипотеза основана на соображениях подобия и выражает автомодельность  $N$ ). Вид решения уравнения (1.6') указывает на то, что параметр  $T$ , имеющий смысл времени, представляет собой не что иное, как критический момент, «Судный день» и, возможно, финал жизни этой популяции. Постоянные  $C$  и  $\alpha$  следует определять по данным демографических наблюдений.

На основе демографических данных и, по-видимому, независимо от рассматриваемого здесь подхода, Форстером и др. [14] и Хорнером [15] были получены, соответственно, следующие эмпирические, т.е. основанные на статистических оценках реальной популяции, законы эволюции

$$N(t) = \frac{179 \cdot 10^9}{(2027 - t)^{0.99}}, \quad N(t) = \frac{200 \cdot 10^9}{2025 - t}, \quad (1.8)$$

фактически конкретизирующие значения  $T \approx 2027 \div 2025$  (годы) и  $C \approx (179 \div 200) \times 10^9$  в (1.6'). Следует отметить, что модели Форстера и Хорнера с удивительной точностью описывают рост населения Земли в течение сотен и даже многих тысяч лет, но не содержат каких-либо объяснений о природе наблюдаемого процесса.

Подробный анализ этих результатов можно найти в интереснейших работах С. П. Капицы [16, 17], который справедливо замечает, что уравнение (1.6'), как и эмпирические модели (1.8), действительно могут служить хорошим приближением для описания народонаселения мира. Но только с ограничением – пока мы находимся в достаточном удалении от критической эпохи в окрестности  $T \approx 2025 \div 2027$  г., т.е. такого момента времени, когда  $N \rightarrow \infty$  и решение моделей (1.6') и (1.8) терпят разрыв. В [14] это время обозначено именно как «Судный день». При этом, со-

гласно (1.8), стремительный рост  $N$  по мере приближения к  $t=T$  означает, что численность человечества должна была бы удваиваться в 2024 году за один год, что практически невозможно, поскольку, очевидно, существует предельная скорость роста населения. Таким образом, модели этого ряда достигают границ своей применимости при достаточно больших  $t$  и поэтому требуют корректировки. Наличие этих границ обусловлено сосредоточенностью всех трех моделей (1.6') и (1.8) на описании стремительного роста численности народонаселения в последние времена, в то время как реально во многих наиболее развитых странах мира уже наметился постепенный демографический спад.

Точно так же модели не работают и на малых временах: оказалось, что, согласно моделям, «20 млрд лет назад, т.е. при сотворении мира, уже присутствовало 10 человек (несомненно, обсуждавших все происходящее!)» [16]. Этот забавный факт не вызывает удивления: ясно, что на асимптотически далеких временах модели не могут правильно описывать численность, хотя бы потому, что история человечества конечна.

Все эти некорректности С. П. Капице [16, 17] удалось сгладить благодаря введению в обсуждаемую модель особого временного масштаба, связанного со временем жизни отдельного человека ( $\tau \approx 42$  года). При этом временная шкала условно разделяется на три эпохи А, В и С, различающиеся по характеру и темпам роста численности населения Земли. Для описания скорости роста народонаселения  $N$  в «доисторические» времена (эпоха А) в уравнение (1.6') добавляется линейный член, который вносит ограничение снизу на минимальную скорость роста народонаселения при  $t \rightarrow 0$ :

$$\frac{dN}{dt} = \frac{N^2}{C} + \frac{1}{\tau}. \quad (1.9a)$$

В «срединные» времена (эпоха В) согласованный с имеющимися статистическими данными рост численности народонаселения Земли описывается уравнением

$$\frac{dN}{dt} = \frac{C}{(T-t)^2}. \quad (1.9б)$$

Однако еще задолго до кризиса при  $t = T$ , т.е. тогда, когда мы только входим в эпоху демографического взрыва, модель следует видоизменить так, чтобы скорость роста стала конечной:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{C}{(T-t)^2 + \tau^2} \quad (\text{эпоха С}). \quad (1.9в)$$

Итак, введением микроскопического (по сравнению с характерным временем роста численности человечества) параметра  $\tau$  удастся продолжить решение в прошлое и будущее. В [17] детальный анализ результатов моделирования позволил определить, среди прочего, конкретные временные интервалы в (1.9): эпоха А началась 4.4 млн лет тому назад и продолжалась около 2.8 миллионов лет; эпоха В охватывает важнейший отрезок времени длительностью 1.6 миллионов лет; время наступления демографического перехода к «катастрофическому» росту следует отнести к 1965 году. В согласии с демографическими данными последнего периода времени и по результатам моделирования, начиная с перехода к сценарию «Судного дня»,  $T \approx 2007$  г. (очевидно, сдвиг даты «Судного дня» связан именно с введением в модель параметра  $\tau$ ). При этом в рамках принятой модели (1.9) было не только зафиксировано замедление роста численности населения Земли, но и установлен предел, к которому стремится численность человечества в обозримом будущем – примерно 14 млрд человек.

С самого начала было очевидно, что любая из перечисленных моделей, предлагая феноменологическое, макроэкономическое описание роста народонаселения, не может претендовать на объяснение конкретных детальных механизмов, приводящих к росту и развитию. Автор модели (1.9) и соответствующей ей теории справедливо выделяет как один из основных результатов исследования, казалось бы, парадоксальный вывод: *рост численности населения Земли и его замедление могут быть не связанными с непосредственным влиянием внешних ресурсов* (дефицитом пищи и энергии). Согласно математической модели (1.9), скорость роста народонаселения будет ограничиваться а) способностью человека к воспроизводству, б) способностью общества и окружающей среды поддерживать этот рост. То есть причиной роста, скорее всего, является четко обозначенное в модели коллективное взаимодействие внутри популяции. Тогда и первопричиной замедления роста численности населения, по видимому, может являться сама организация этого взаимодействия и только во-вторую очередь – дефицит ресурсов.

Таким образом, гиперболический рост народонаселения возможен, только если человечество выступает «как единый игрок», то есть при условии той или иной формы сотрудничества всех людей на Земле. С. П. Капица и ряд других авторов рассматривают рост народонаселения как благо и связывают его с совместным интеллектуальным развитием человечества, развитием технологий, «вообще с любыми знаниями и навыками, которые могут быть использованы для спасения человека от смерти или для продления его жизни» [16, 17].

## 1.6. О НЕЛИНЕЙНЫХ МОДЕЛЯХ

---

Как мы заметили, более реалистичные из представленных простейших моделей, в том числе те, которые корректируют модель Мальтуса, оказались нелинейными.

Если используемая модель оказалась нелинейной, то, во-первых, надо осознавать, что поиск решений таких систем уравнений вполне может оказаться нетривиальной математической задачей. Но обсуждаемые в этом пособии численные методы, как правило, позволяют справиться с возникающими трудностями.

Во-вторых, полезно понимать, что интерес к изучению свойств нелинейных систем, главным образом, обусловлен тем, что реальный мир, окружающая нас природа и общество в своем существовании и развитии подчиняются нелинейным законам. Линеиные закономерности также имеют место, однако они представляют собой лишь частный случай (или приближение) более общих нелинейных законов. Особенностью, присущей исключительно нелинейным системам, является возможность реализации в них множества различных – от самых простых до самых сложных – режимов функционирования, которые зависят от начального состояния, от параметров системы и от внешних воздействий. В частности, в нелинейных системах возможны режимы детерминированного хаоса в виде незатухающих апериодических колебаний, напоминающих случайный процесс.

Нашей следующей задачей станет знакомство с методами приближенных вычислений решений задачи Коши для систем ОДУ, возникающих при изучении разного рода динамических систем в физике, экологии, биологии и других областях наук.

## ЛИТЕРАТУРА

---

1. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. М.: Физматлит, 2001. 320 с.
2. Эйхгофф П. Основы идентификации систем управления. М.: Мир. 1975. 683 с.
3. Андронов А. А., Леонтович Е. А., Гордон И. И., Майер А. Г. Качественная теория динамических систем второго порядка. Москва: Наука. 1966.
4. Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э. Теория колебаний. М.: Физматлит. 1959. 916 с.
5. Братусь А. С., Новожилов А. С., Платонов А. П. Динамические системы и модели биологии. М.: Физматлит. 2010. 400 с.
6. Лоренц Э. Детерминированное непериодическое течение / Странные аттракторы. М.: Мир. 1981. С. 88–116.
7. Холодниок М., Клич А., Кубичек М., Марек М. Методы анализа нелинейных динамических моделей. М.: Мир. 1991. 365с.
8. Романовский Ю. М., Степанова Н. В., Чернавский Д. С. Математическая биофизика. 1984. 304 с.
9. Ризниченко Г. Ю. Лекции по математической биологии. <http://mathbio.ru/lecture>
10. Марри Дж. (Murray J.D.) Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях. М.: Мир. 1983. 397 с.

11. *Братусь А. С., Новожилов А. С., Родина Е. В.* Дискретные динамические системы и математические модели в экологии: Учебное пособие. М.: МИИТ. 2005. 139 с.
12. *Колмогоров А. Н., Петровский И. Г., Пискунов Н. С.* Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием вещества, и его применение к одной биологической проблеме // Бюллетень МГУ. Сер. А. Математика и Механика. 1937. Т. 1. № 6. С. 1–26.
13. *Fisher R. A.* The wave of advance of advantageous genes // *Annals of Eugenics*. 1937. V. 7. P. 355–369.
14. *Foerster H., Mora P., Amiot L.* Doomsday: Friday, 13 November, A.D. 2026. At this date human population will approach infinity if it grows as it has grown in the last two millennia // *Science*. 1960. N. 132. С. 1291–1295.
15. *Hoerner S.* Population explosion and interstellar expansion // *J. of the British Interplanetary Society*. 1975. V. 28. P. 692–712.
16. *Каница С. П.* Феноменологическая математическая модель роста народонаселения мира // Математическое моделирование. 1992. Т. 4. № 6. С. 65–79.
17. *Каница С. П.* Феноменологическая теория роста населения Земли // *Успехи физических наук*. 1996. Т. 166. № 1. С. 63–80.

---

# ГЛАВА 2. МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

---

## 2.1. ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ ОДУ 1-ГО ПОРЯДКА

---

---

Рассмотрим задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{d\vec{u}(t)}{dt} = \vec{f}(\vec{u}), \quad t > t_0, \quad \vec{u}(t_0) = \vec{\varphi}(t_0) \quad (2.1)$$

или в покомпонентном виде ( $k = 1, \dots, m$ )

$$\frac{du_k(t)}{dt} = f_k(u_1, u_2, \dots, u_m), \quad t > t_0, \quad u_k(t_0) = \varphi_k(t_0). \quad (2.2)$$

В задаче Коши по известному решению в точке  $t = t_0$  необходимо найти решение каждого уравнения системы при других значениях  $t > t_0$ . Условия существования и единственности решения задачи Коши требуют, чтобы в замкнутой области  $D = \{ |t| \leq a, |u_k - \varphi_k| \leq b, k = 1, 2, \dots, m \}$  функции  $f_k$  были непрерывны по всем аргументам, ограничены и удовлетворяли условию Липшица по аргументам  $u_1, u_2, \dots, u_m$ . Предполагаем далее, что все эти условия для рассматриваемых задач выполняются.

## 2.2. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КОШИ. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

---

Для простоты рассмотрим сначала одно обыкновенное дифференциальное уравнение. Тогда требуется найти непрерывную функцию  $u=u(t)$ , удовлетворяющую дифференциальному уравнению при  $t > t_0$  и начальному условию при  $t = t_0$ :

$$\frac{du}{dt} = f(u), \quad t > t_0, \quad u(t_0) = \varphi(t_0). \quad (2.3)$$

В большинстве важных для практики случаев задача (2.3) не может быть решена точно или такое решение связано со слишком большими трудностями. Поэтому будем рассматривать методы численного, т.е. приближенного решения задачи (2.3).

Чтобы решить задачу Коши (2.3), будем использовать вместо дифференциального уравнения его приближение – разностную схему. Для этого необходимо [1–7]:

1. заменить область непрерывного изменения аргумента  $t$  областью дискретного изменения аргумента,
2. заменить дифференциальное уравнение некоторым разностным уравнением.

Осуществление этой процедуры приводит к тому, что вопрос о численном решении исходной задачи Коши для дифференциального уравнения сводится к вопросу о решении системы алгебраических уравнений, что упрощает задачу и адаптирует ее к решению с помощью компьютерной программы [1].

Пример. Знакомство с этим подходом обычно начинают с простейшей явной разностной схемы Эйлера, когда уравнение (2.3) заменяется разностным уравнением следующего вида:

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(y_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, \quad y_0 = \varphi_0.$$

Как мы видим, зная начальное значение, не составляет труда вычислить решение этого уравнения по рекуррентной формуле

$$y_{i+1} = y_i + hf(y_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, \quad y_0 = \varphi_0.$$

Но при этом следует иметь в виду, что не является очевидной даже сама связь решения разностного уравнения с решением задачи (2.3), и требуется выполнить вполне определенную работу, чтобы доказать близость решений двух задач.

Чтобы разобраться и научиться применять на практике эту методологию решения практических задач, введем сначала некоторые понятия и кратко обсудим основные проблемы реализации разностного подхода применительно к решению задачи Коши для ОДУ 1-го порядка.

### 2.2.1. ДИСКРЕТИЗАЦИЯ ОБЛАСТИ

Пусть  $G$  – область евклидова пространства  $R^1$  с границей  $\Gamma$ . Введем на  $G+\Gamma$  для независимой переменной  $t$  равномерную сетку с шагом  $h > 0$ , т. е. рассмотрим пронумерованное слева направо множество точек  $\bar{\omega}_h = \omega_h + \gamma_h = \{t_i = ih, i = 0, 1, 2, \dots\}$ , где  $\omega_h \in G$ ,  $\gamma_h \in \Gamma$ . И будем искать решение задачи (2.3) в узлах сетки.

- ✚ Функция, заданная в узлах сетки, называется *сеточной функцией*. Для сеточных функций удобно ввести специальные обозначения, например:  $u_h(t_i) = u(t_i) = u_i$ .

Вводя сетку и сеточную функцию, мы осуществляем аппроксимацию пространства решений дифференциального уравнения пространством сеточных функций [1]. Пусть  $u(t)$  – точное решение дифференциальной задачи (2.3). Тогда вместо функции непрерывного аргумента  $u(t)$  удобно рассматривать также функцию  $u_h(t_i) = u_i$  дискретного аргумента  $t_i$ , заданную в узлах сетки. Далее можно поставить вопрос о вычислении сеточной функции  $u_h(t_i)$ , потому что при измельчении сетки, т.е. при  $h \rightarrow 0$ , она является все более подробной таблицей искомого решения  $u(t)$  и дает о нем все более полное представление. Поэтому условимся считать, что задача (2.3) решена точно, если найдена сеточная функция  $u_h(t_i) = u_i$  [5]. Заранее предупредим, что и такую задачу не удастся решить точно, поэтому будут предложены методы ее приближенного решения. Тогда вместо функции  $u_h(t_i) = u_i$  введем сеточную функцию  $y_h(t_i) = y_i$  – приближенное решение задачи (2.3), где  $i = 0, 1, 2, \dots$ . При этом надо учитывать, что сеточная функция  $y_h(t_i) = y_i$  определена только в узлах сетки.

Заметим, что равномерное расположение узлов вводится для простоты изложения. Некоторые вопросы использования неравномерных сеток будут обсуждаться ниже.

### 2.2.2. ОБ АППРОКСИМАЦИИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА

Далее будет представлена общая последовательность рассуждений, связанных с заменой (аппроксимацией) дифференциального оператора разностным оператором в пространстве сеточных функций [1, 2].

Пусть задан линейный дифференциальный оператор  $L$ , действующий на непрерывную функцию  $u(t)$ , такую что:

$$Lu = f(u), \quad t > t_0, \quad u(t_0) = \varphi(t_0).$$

Заменим дифференциальный оператор  $L$  разностным  $L_h$ . При этом вместо  $Lu$  получим разностное выражение  $L_h u_h$ , представляющее собой линейную комбинацию значений  $u_h(t)$  сеточной функции на некотором шаблоне  $\sigma_i = \sigma(t_i) \in \bar{\omega}_h$  (шаблон – это вполне определенное множество узлов сетки, расположенных в окрестности точки  $t_i$  и участвующих в вычислении решения в этой точке):

$$(L_h u)_i = \sum_{t_j \in \sigma_i} a_{ij}^h u_h(t_j), \quad (2.4)$$

где  $a_{ij}^h$  – коэффициенты.

- ✚ Замена  $Lu$  на  $L_h u$  называется *разностной аппроксимацией* дифференциального оператора  $L$ . Погрешностью аппроксимации оператора  $L$  оператором  $L_h$  называется разность  $\psi = L_h u - Lu$ .
- ✚ Оператор  $L_h$  имеет  $m$ -й порядок аппроксимации в точке  $t$ , если  $\psi(t) = L_h u(t) - Lu(t) = O(h^m)$  или  $|\psi(t)| \leq Mh^m$ , где  $M = \text{const} > 0$  не зависит от  $h, m > 0$ .
- ✚ Оператор  $L_h$  имеет  $m$ -й порядок аппроксимации на сетке  $\bar{\omega}_h$ , если  $\|L_h u_h - (Lu)_h\|_h = O(h^m)$  [2].

Пример. Пусть  $Lu \equiv \frac{du}{dt}$ , тогда, например, выражение

$L_h u = \frac{u(t_i + h) - u(t_i)}{h}$  есть аппроксимация дифференциального

оператора  $Lu$  на шаблоне  $(t_i, t_i + h)$ . Аппроксимаций дифференциального оператора может быть много или даже бесконечно много.

Замечание. Рассмотренный пример, по сути, демонстрирует получение разностной схемы непосредственной заменой производной в дифференциальном уравнении разностным соотношением. Этот прием универсален, но замена производных разностными отношениями – не единственный, а часто и не лучший способ построения разностных схем [5, 7]. В курсе Методы вычислений подробно изучаются другие способы, которые особенно хорошо показали себя применительно к задачам Коши для ОДУ [8]. Мы здесь ограничимся лишь указанием на то, что они привели к появлению известных семейств численных методов – Рунге–Кутты, Адамса и других. Интересно, что все эти семейства в качестве наиболее простого явного метода 1-го порядка включают в себя приведенную выше схему Эйлера.

### 2.2.3. РАЗНОСТНАЯ СХЕМА

Рассмотрим теперь более общую задачу. Пусть для простоты дифференциальное уравнение в задаче Коши (2.3) является линейным. Поставим ему в соответствие некоторую разностную задачу с линейным оператором  $L_h$  вида (2.4):

$$L_h y_h = \phi_h(t), \quad t \in \omega_h; \quad y_h(t_0) = \varphi_h(t_0), \quad t_0 \in \gamma_h. \quad (2.5)$$

Здесь сеточные функции  $y_h, \phi_h$  зависят от шага сетки  $h$ . Поэтому, меняя шаг сетки и устремляя  $h \rightarrow 0$ , мы получаем последовательности  $\{y_h\}, \{\phi_h\}$ .

- ✚ Семейство разностных задач (2.5), зависящее от параметра  $h$  – это и есть *разностная схема* (или *разностный метод*) для дифференциальной задачи (2.3).

При решении задачи (2.3) разностным методом необходимо знать, с какой точностью решение разностной задачи (2.5) приближает решение исходной дифференциальной задачи. Пусть, как и прежде,  $u_h(t) = u(t)$  – значение решения дифференциальной задачи (2.3) в узлах сетки, причем  $u(t)$  – непрерывная функция, имеющая к тому же  $p$  производных, а  $y_h$  – решение разностной задачи (2.5). Тогда необходимо провести оценку погрешности, которая выражается сеточной функцией  $z_h = y_h - u_h$ .

- ✚ Функцию  $\psi_h = \phi_h - L_h u_h$  называют *погрешностью аппроксимации для уравнения*  $L_h y_h = \phi_h(t)$  *на решении*  $u = u(t)$  *уравнения*  $Lu = f(t)$ .
- ✚ Разностная схема (2.5) имеет *точность  $p$ -го порядка* или *сходится со скоростью*  $O(|h|^p)$ , если  $\|y_h - u_h\|_h = O(|h|^p)$  [2].

Замечание. При очень общих предположениях порядок точности разностной схемы (метода) совпадает с порядком аппроксимации [3].

При использовании численных (приближенных) методов главным является *вопрос о сходимости приближенного решения к точному решению*. Рассмотрим этот вопрос чуть более подроб-

но. Понятие сходимости формулируется по-разному, воспользуемся теперь объяснением из [3] – оно в дальнейшем будет нами применяться при проведении численных экспериментов и решении практических заданий. Применительно к разностным методам, о которых будем говорить в настоящем разделе, наибольшее распространение получило понятие сходимости при  $h \rightarrow 0$ . Оно означает следующее: фиксируем точку  $t$  и построим последовательность сеток  $\bar{\omega}_h$  таких, что  $h \rightarrow 0$  и  $t_i = ih = t$  (тогда необходимо  $i \rightarrow \infty$ ).

- ✚ Численный метод *сходится в точке  $t$* , если  $|y_i - u(t_i)| \rightarrow 0$  при  $h \rightarrow 0$ ,  $t_i = t$ .
- ✚ Метод имеет  $p$ -й *порядок точности*, если существует такое число  $p > 0$ , что  $|y_i - u(t_i)| = O(h^p)$  при  $h \rightarrow 0$ . В этом случае говорят также, что метод имеет  $p$ -й *порядок сходимости*.

Следует иметь в виду, что при вычислении решения задачи (2.3) на компьютере можно найти решение задачи Коши, лишь ограничиваясь достаточно большим интервалом  $t_0 \leq t \leq t_N = T$  (интервал может быть и весьма мал, если того требуют конкретные условия задачи). При этом любую сеточную функцию  $v_h = v(t_i) = v_i$  можно представить в виде вектора  $v = (v_0, v_1, \dots, v_{N-1}, v_N)$ . Множество сеточных функций образует конечномерное нормированное пространство. Тогда пусть для решения задачи (2.3) на интервале  $t \in [t_0, T]$  вводится сетка с узлами  $t_0 < t_1 < \dots < t_{N-1} < t_N = T$ .

- ✚ Метод *сходится на отрезке  $(t_0, T]$* , если он сходится в каждой точке  $t \in (t_0, T]$ .

Наиболее часто для оценки сеточных функций  $v_h(t)$ , в том числе для оценки сходимости приближенного решения к точному, используются следующие нормы [3]:

$$\|v_h\|_C = \max_{0 \leq i \leq N} |v_h(t_i)|, \quad \|v_h\|_p = \left( \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N v_h^p(t_i) \right)^{1/p}.$$

Полезно напомнить, что для введенного нами конечномерного вектора  $v = (v_0, \dots, v_N)$  между разными нормами существуют соотношения:

$$\|v\|_1 \leq \|v\|_2 \leq \|v\|_C \leq \sqrt{N+1} \|v\|_2 \leq (N+1) \|v\|_1.$$

Для этих норм известно, что из сходимости в одной из них следует сходимость во всех остальных нормах, и поэтому они считаются эквивалентными. Очевидно, что векторные нормы необходимы при анализе приближенных решений одного дифференциального уравнения или одной (каждой) компоненты вектора решения системы уравнений. С другой стороны, в случае системы уравнений важно оценить вектор решения задачи в целом, для чего потребуются матричные нормы, желательные согласованные с соответствующими векторными нормами (если предполагается их одновременное использование).

В пространстве квадратных матриц  $V$  порядка  $(N+1)$  наиболее употребительны следующие нормы [6]:

$$\|V\|_C = \max_{0 \leq i \leq N} \left| \sum_{j=0}^N |v_{ij}| \right|, \quad \|V\|_1 = \max_{0 \leq i \leq N} \left( \sum_{i=0}^N |v_{ij}| \right),$$

$$\|V\|_M = (N + 1) \max_{i,j} |v_{ij}|, \quad \|V\|_E = \left( \sum_{i,j=0}^N |v_{ij}|^2 \right)^{1/2}.$$

Из них согласованными являются, например, векторные и соответствующие матричные нормы  $\|\cdot\|_C$  и  $\|\cdot\|_1$ . В конкретной задаче выбор метрического пространства должен, в первую очередь, определяться ее физическим смыслом, а во вторую – математическими соображениями, включая сходимость. На этот счет в [6] приведен достаточно яркий пример: при расчете прочности самолета следует учитывать, что перенапряжение в маленьком участке может разрушить конструкцию; поэтому нужна равномерная близость приближенного решения к точному, а близости в среднем недостаточно.

## 2.3. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ ОДУ 1-ГО ПОРЯДКА

---

### 2.3.1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Среди всех известных методов наиболее употребительными считаются методы интегрирования на сетке с постоянным шагом  $h = t_i - t_{i-1} = \text{const}$ , общий вид которых будет обсуждаться в данном параграфе. Будем рассматривать конечно-разностные методы или, что то же самое, разностные схемы. Они определяют общий алгоритм вычисления приближенного решения задачи (2.3) в точках  $t_i$ .

✚ *Линейным  $g$ -шаговым методом* называется система разностных уравнений

$$\frac{a_0 y_i + a_1 y_{i-1} + \dots + a_r y_{i-r}}{h} = b_0 f_i + b_1 f_{i-1} + \dots + b_r f_{i-r}, \quad (2.6)$$

где  $i = r, r+1, \dots$ ;  $a_k, b_k$  – числовые коэффициенты ( $k=0, 1, \dots, r$ ), не зависящие от  $i$  – номера узла расчетной сетки;  $a_0 \neq 0$ .

- ✚ Схема (2.6) называется *явной  $r$ -шаговой*, если  $b_0 = 0$  и значения  $y_i$  определяются только через предыдущие значения  $y_{i-1}, y_{i-2}, \dots, y_{i-r}$  по явной формуле:

$$y_i = \frac{1}{a_0} \sum_{k=1}^r (h b_k f_{i-k} - a_k y_{i-k}) = F(y_{i-1}, y_{i-2}, \dots, y_{i-r}). \quad (2.7)$$

В такой схеме вычисления начинаются со значения  $i=r$ . Чтобы найти  $y_r$ , надо задать  $r$  начальных значений, хотя мы знаем, что начальные условия в задаче Коши (2.3) задаются только в одной точке  $i=0$ .

- ✚ Схема (2.7) называется *явной одношаговой*, если в ней  $r = 1$ :

$$y_i = \frac{1}{a_0} (h b_1 f_{i-1} - a_1 y_{i-1}) = F(y_{i-1}).$$

- ✚ Если в формуле (2.7)  $r > 1$ , то схема (или метод) называется  *$r$ -шаговой*, и для ее использования необходимо задать  $r$  начальных значений решения в точках  $y_0, y_1, \dots, y_{r-1}$ . Значение  $y_0$  определяется задачей (2.3):  $y_0 = \varphi(t_0)$ , а величины  $y_1, \dots, y_{r-1}$  вычисляются с применением одношаговой схемы, при ее выборе желательно не допускать понижение порядка точности.

✚ Схема (2.6) называется *явной  $r$ -шаговой*, если  $b_0 \neq 0$ . Тогда определение значения  $y_i$  приводит к нелинейному уравнению вида:

$$a_0 y_i - h b_0 f(t_i, y_i) = F(y_{i-1}, y_{i-2}, \dots, y_{i-r}), \quad (2.8)$$

где 
$$F(y_{i-1}, y_{i-2}, \dots, y_{i-r}) = \sum_{k=1}^r (h b_k f_{i-k} - a_k y_{i-k}).$$

Для решения уравнения вида (2.8) применяются соответствующие численные методы решения нелинейных алгебраических уравнений, среди них обычно предпочтение отдается методу Ньютона или методу простой итерации.

Дополнительно можно заметить, что коэффициенты уравнения (2.6) определены с точностью до множителя. Для устранения этого произвола при разработке схемы требуют, чтобы выполнялось естественное условие  $\sum_{k=0}^r b_k = 1$ , которое означает, что правая часть уравнения (2.6) аппроксимирует правую часть дифференциального уравнения (2.3). В рамках курса Методы вычислений подробно обсуждается вопрос о том, как от конкретного выбора коэффициентов  $a_k$  и  $b_k$  зависит погрешность аппроксимации.

### 2.3.2. ЯВНЫЕ МЕТОДЫ СЕМЕЙСТВ РУНГЕ–КУТТЫ

К настоящему времени разработано достаточно много методов численного решения задачи Коши вида (2.3), и интерес к этому виду научных исследований нисколько не угасает.

Классические рекуррентные формулы семейства методов Рунге–Кутты различных порядков точности представлены в таблице

1. Они являются наиболее популярными как в рамках учебных программ, так и при решении достаточно широкого круга практических задач, поскольку давно реализованы в многочисленных общедоступных и коммерческих программных пакетах.

Таблица 1. Формулы явных методов Рунге–Кутты. I – вид формулы на шаге интегрирования, II – оценка погрешности на шаге, III – оценка погрешности на интервале		
I	II	III
$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i)$	$O(h^2)$	$O(h)$
$y_{i+1} = y_i + k_2,$ $k_1 = hf(t_i, y_i), k_2 = hf(t_i + h/2, y_i + k_1/2)$	$O(h^3)$	$O(h^2)$
$y_{i+1} = y_i + (k_1 + 4k_2 + k_3)/6,$ $k_1 = hf(t_i, y_i), k_2 = hf(t_i + h/2, y_i + k_1/2),$ $k_3 = hf(t_i + h, y_i - k_1 + 2k_2)$	$O(h^4)$	$O(h^3)$
$y_{i+1} = y_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6,$ $k_1 = hf(t_i, y_i), k_2 = hf(t_i + h/2, y_i + k_1/2),$ $k_3 = hf(t_i + h/2, y_i + k_2/2),$ $k_4 = hf(t_i + h, y_i + k_3)$	$O(h^5)$	$O(h^4)$

Обратим внимание, что представленные в табл. 1<sup>1</sup> схемы Рунге–Кутты являются явными, т.к. для определения  $y_{i+1}$  все вычисления производятся по явным формулам. Они являются одношаговыми, т.к. для определения  $y_{i+1}$  надо сделать только один шаг на сетке из узла  $t_i$  в узел  $t_{i+1}$ . Однако все эти методы являются s-

---

<sup>1</sup> Здесь и ниже для удобства использования в случае тестовых задач формулы записаны с учетом (возможной) явной зависимости от  $t$ .

стадийными, поскольку переход решения из узла  $t_i$  в узел  $t_{i+1}$  осуществляется в  $s$  стадий. Суть каждой стадии состоит в пересчете значения функции  $f$  правой части, при этом  $k_s$  играют роль поправок, а числовые коэффициенты при них обеспечивают требуемый порядок точности. Это напоминает идею метода предиктор–корректор, о которой будем подробно говорить ниже. Отметим также, что, например, в [3] методы семейства Рунге–Кутты вообще не рассматривают как разностные методы по той же причине – строго говоря, на промежуточных стадиях допускается вычисление правых частей  $f$  уравнений не только в узлах сетки, но и в некоторых промежуточных точках.

Следует также иметь в виду, что явные одношаговые схемы из таблицы 1 условно устойчивы, т.е. они требуют ограничения сверху величины шага сетки  $h$ , но все же теоретически условие устойчивости схемы 4-го порядка немного слабее условия для схемы 2-го порядка [2].

### 2.3.3. МЕТОДЫ ТИПА ПРЕДИКТОР–КОРРЕКТОР

Рассмотрим одну из простейших разностных схем для приближенного решения задачи Коши (2.3) – схему с весами:

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = \sigma f(t_{i+1}, y_{i+1}) + (1 - \sigma)f(t_i, y_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

(2.9) При  $\sigma = 0$  мы имеем явный метод Эйлера, который, очевидно, совпадает с методом Рунге–Кутты 1-го порядка (табл. 1). При  $\sigma = 1$  получим неявный метод Эйлера 1-го порядка точности, он безусловно (при любых  $h$ ) устойчив и для некоторых простых уравнений, в том числе с линейной правой частью, реализуется просто (следует заметить [1–8], что, согласно исследованиям, при  $\sigma \geq 1/2$  все схемы семейства (2.9) абсолютно устойчивы).

В практических расчетах предпочтение отдается схеме, полученной при  $\sigma = 1/2$ :

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f(t_{i+1}, y_{i+1}) + f(t_i, y_i)), \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

Схема широко известна как схема из семейства методов Адамса (в этом семействе явная схема 1-го порядка совпадает со схемой 1-го порядка из семейства методов Рунге–Кутты в табл. 1). Она относится к классу неявных схем, абсолютно устойчива и имеет 2-й порядок точности, вполне приемлемый для широкого круга задач, для которых сверхточность не является необходимой частью исследования (например, во многих сложных задачах, связанных с количественным описанием экспериментальных данных). Легко заметить, что в правой части схемы (2.10) фигурирует  $f(y_{i+1})$ , где  $y_{i+1}$  – значение решения, которое требуется определить. Если  $f$  линейна, то очевидно, что это совсем не вызывает трудностей. Если  $f$  нелинейна, то проблема вычисления  $y_{i+1}$  может быть решена несколькими способами, в том числе дополнительным привлечением какого-либо известного метода решения нелинейных алгебраических уравнений. Поговорим об этом более подробно.

Сложность численной реализации нелинейных задач является существенным недостатком неявных схем. Наиболее удобным способом решения таких задач считается *метод предиктор–корректор*, в рамках которого трудно реализуемая неявная схема всего в два этапа – предиктор («предсказание») и корректор (уточнение) – фактически сводится к явной схеме. В настоящее время накоплен большой положительный опыт использования следующей разностной схемы типа предиктор–корректор (для наглядности для численного решения, получен-

ного в точке на этапе предиктора, введено дополнительное обозначение  $z$ ):

$$z_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i), \quad (2.11a)$$

$$y_{i+1} = y_i + 0.5h(f(t_{i+1}, z_{i+1}) + f(t_i, y_i)), \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (2.11б)$$

Здесь, как мы видим, роль схемы-предиктора (2.11a) играет явная схема Эйлера, а роль корректора (2.11б) – сама схема (2.10). Можно видеть, что такая схема предполагает проведение в каждой точке  $t_{i+1}$  расчетной сетки последовательно двух вычислений решения – сначала по формуле (2.11a), а сразу после этого с использованием уже полученного решения  $z_{i+1}$  – по формуле (2.11б), которая теперь реализуется как явная. Практика показывает, что схема (2.11) наследует сразу два важных свойства схем, из которых она сконструирована: она имеет 2-й порядок точности, но условно устойчива. При этом она обладает еще двумя важными для практики свойствами – она легко реализуется и надежна, в том числе при решении тех задач, для которых классические схемы Рунге–Кутты показывают не лучшие результаты.

За годы компьютерных приближенных вычислений продемонстрированная здесь идея метода предиктор–корректор много раз подтверждала свою эффективность, особое место ей отводится, в частности, при решении многомерных задач математической физики.

На основе методов Адамса 3-го порядка построена схема типа предиктор–корректор, в которой на этапе предиктора используется явный, а на этапе корректора – неявные методы Адамса соответствующего [3]

$$z_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} [23f(t_i, y_i) - 16f(t_{i-1}, y_{i-1}) + 5f(t_{i-2}, y_{i-2})],$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} [5f(t_{i+1}, z_{i+1}) + 8f(t_i, y_i) - f(t_{i-1}, y_{i-1})]$$

или более высокого порядка (см., например, [9])

$$z_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} [23f(t_i, y_i) - 16f(t_{i-1}, y_{i-1}) + 5f(t_{i-2}, y_{i-2})],$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f(t_{i+1}, z_{i+1}) + 19f(t_i, y_i) - 5f(t_{i-1}, y_{i-1}) + f(t_{i-2}, y_{i-2})].$$

Применительно к численному решению задачи Коши для ОДУ и их систем идея предиктора–корректора, по-видимому, наиболее удачно реализована в отношении неявной схемы из семейства методов Адамса 4-го порядка (схема Адамса–Бэшфорта–Моултона):

$$z_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55f(t_i, y_i) - 59f(t_{i-1}, y_{i-1}) + 37f(t_{i-2}, y_{i-2}) - 9f(t_{i-3}, y_{i-3})], \quad (2.12a)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f(t_{i+1}, z_{i+1}) + 19f(t_i, y_i) - 5f(t_{i-1}, y_{i-1}) + f(t_{i-2}, y_{i-2})]. \quad (2.12б)$$

Здесь, как и в схеме (2.11), схема-предиктор (2.12a) избавляет нас от необходимости привлекать дополнительно метод решения нелинейного алгебраического уравнения относительно неизвестной величины  $y_{i+1}$ . При этом схема-предиктор сама по себе тоже имеет 4-й порядок точности, так что она может применяться для решения задачи Коши и без корректора.

Чтобы добиться еще большего уточнения решения, полученного с использованием схем типа предиктор–корректор,

(например, (2.11) или (2.12)), часто дополнительно на этапе корректора используется *метод простой итерации*. Например:

$$\begin{aligned} z_{i+1} &= y_i + hf(t_i, y_i), \\ y_{i+1}^0 &= z_{i+1}, \\ y_{i+1}^{s+1} &= y_i + \frac{h}{2} \left( f(t_{i+1}, y_{i+1}^s) + f(t_i, y_i) \right), \quad i = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \tag{2.13}$$

Здесь  $s$  – номер итерации, которые повторяются, пока на шаге не выполнится условие  $\left| y_i^{(s+1)} - y_i^{(s)} \right| / \left| y_i^{(s)} \right| \leq \lambda, \quad s = 0, 1, 2, \dots$

Тот же прием применяется на практике и при использовании схемы 4-го порядка (2.12): сначала вычисляется нулевое приближение по явной формуле Адамса, а затем производятся 1–2 итерации на основе неявной формулы того же порядка.

Практика показывает, что при достаточно тщательном выборе итерационного параметра  $\lambda$  уже за несколько первых итераций во многих задачах можно достичь вполне значимого уточнения решения. Однако правомерность самой идеи привлечения итераций в методе предиктор–корректор должна быть проверена и доказана численными экспериментами (см. ниже).

#### 2.3.4. ЧИСТО НЕЯВНЫЕ МЕТОДЫ. ФДН

Исключительно хорошо зарекомендовали себя на практике и *чисто неявные методы*, которые также известны как *формулы дифференцирования назад (ФДН)*, имеющие общий вид

$$\sum_{k=0}^m a_k y_{i-k} = hf(t_i, y_i).$$

Такие схемы используются в методах Гира [3]. Метод Гира 3-го порядка

$$11y_{i+1} - 18y_i + 9y_{i-1} - 2y_{i-2} = 6hf(t_{i+1}, y_{i+1})$$

реализован в большинстве известных программных пакетов. Например, в пакете STEP+ [12] он используется в методе продолжения решения по параметру для качественного анализа свойств динамических систем, который предъявляет самые высокие требования к качеству приближенного решения.

Метод Гира 4-го порядка имеет следующий вид:

$$25y_{i+1} - 48y_i + 36y_{i-1} - 16y_{i-2} + 3y_{i-3} = 12hf(t_{i+1}, y_{i+1}) \quad (2.14)$$

При численной реализации этих двух методов возникают две стандартные проблемы, которые уже обсуждались выше:

- *во-первых*, в случае нелинейной функции  $f$  для определения неизвестной переменной  $y_{i+1}$  требуется дополнительно решить нелинейное алгебраическое уравнение. В случае методов Гира стандартом стало применение метода Ньютона.
- *во-вторых*, как и методы Адамса (2.12), методы Гира высокого порядка являются многошаговыми, т.е. для вычисления решения в точке  $t_{i+1}$  необходимо иметь решение в нескольких предыдущих узлах этой сетки.

Здесь особого внимания требуют именно несколько первых точек  $t_1, t_2, \dots$  – в этих точках многошаговые методы Адамса и Гира работать не могут, требуется привлечение одношаговых методов того же или близкого порядка. Недостающие значения могут быть найдены а) по схеме Рунге—Кутты того же порядка, б) даже с помощью схемы Эйлера, но только с существенно более мелким шагом, в) с помощью разложения решения в окрестности начальной точки по формуле Тейлора, но только с достаточно большим числом членов.

В связи с этим следует иметь в виду, что неудачный выбор метода – крайне серьезная проблема: *потеря точности хотя бы в одной точке неизбежно приводит к потере точности всего решения на интервале*. И точно так же *использование условно устойчивого метода в этих точках приводит к изменению свойств устойчивости решения*, полученного основными методами на всем остальном интервале.

## 2.4. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ОДУ

---

### 2.4.1. ПОНЯТИЕ ЖЕСТКОСТИ СИСТЕМЫ ОДУ

Приведенные выше расчетные формулы методов применимы без всяких изменений в случае систем ОДУ. Однако для некоторого класса систем ОДУ могут возникать столь серьезные трудности, что задача с применением обычных, наиболее употребительных методов вообще не может быть решена.

О явлении жесткости и связанных с ним вычислительных проблемах впервые заговорили еще в середине прошлого века – выяснилось, что для некоторых особо «жестких» задач применение явных методов типа Рунге–Кутты вызывает большие и, в значительной степени, неожиданные трудности, которые в то время усугублялись еще и ограниченностью вычислительных мощностей, не позволявших работать с достаточно мелким шагом сетки. В последующие десятилетия расширение классов решаемых задач, полнота и глубина их постановок позволили окончательно установить, что жесткость при изучении динамических систем – скорее неудобное правило, чем исключение. При этом все возрастающие мощности компьютеров и даже обилие уже готовых вычислительных средств и сегодня не снимает, а, возможно, лишь обостряет проблему.

При решении систем ОДУ довольно часто оказывается, что уже на первых шагах численного интегрирования исследователь наблюдает появление осцилляций – паразитных «волн», не характерных для решаемой задачи, при этом их амплитуда неконтролируемо нарастает с каждым шагом по сеточной области. Однако при уменьшении, причем довольно резко, шага сетки осцилляции исчезают. Примечательно, что этот эффект часто наблюдается именно для решений, которые на значительном интервале изменения переменной, по которой производится интегрирование, изменяются даже слишком медленно и, таким образом, создается впечатление, что решать такую задачу смело можно решать с довольно большим шагом сетки. В других случаях подобные эффекты наблюдаются, когда на очень коротком интервале одна из компонент решения задачи имеет слишком большую производную, а другая в то же время практически не меняется – такое поведение часто называют *релаксационным эффектом*, он характерен, например, для химических процессов. Во всех таких случаях исследователи говорят о жесткости систем дифференциальных уравнений или даже одного уравнения.

Специалисты отмечают, что сам анализ явления жесткости содержит целый ряд неопределенностей. Известно (см., например, [3, 9, 13–16]), что локальные особенности поведения решения задачи типа (2.2)

$$\frac{du_k(t)}{dt} = f_k(u_1, u_2, \dots, u_m), \quad t > t_0, \quad u_k(t_0) = \varphi_k(t_0), \quad k = 1, \dots, m$$

в точке фазового пространства  $u=w$  передаются линеаризованной системой

$$\frac{dv_k(t)}{dt} = \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_k}{\partial u_j}(t, w)v + \bar{f}_k(t), \quad t > t_0.$$

Матрица этой системы

$$A(t) = \{a_{kj}(t)\}, \quad \text{где } a_{kj}(t) = \frac{\partial f_k}{\partial u_j}.$$

Пусть  $\lambda_k = \lambda_k(t)$ ,  $k = 1, \dots, m$  – собственные числа этой матрицы. Дадим определение жесткости сразу для общего случая, когда задача решается на достаточно большом интервале  $[t_0, T]$  и для любого  $t \in [t_0, T]$  можно определить число жесткости

$$S(t) = \frac{\max_{0 \leq i \leq m} |\operatorname{Re} \lambda_i(t)|}{\min_{0 \leq i \leq m} |\operatorname{Re} \lambda_i(t)|}.$$

- ✚ Система уравнений (2.2) является *жесткой*, если собственные числа  $\lambda_k = \lambda_k(t)$  матрицы Якоби, вычисленные на решении  $u(t)$  задачи (2.2):  $\operatorname{Re} \lambda_k < 0$ ,  $k = 1, \dots, m$  (т.е. система асимптотически устойчива по Ляпунову) и число  $S^* = \sup_{t \in [t_0, T]} S(t)$  достаточно велико.

Таким образом, из определения следует, что система вида (2.2) является жесткой тогда, когда, помимо прочего, имеется *существенная разница в производных*

$\frac{\partial f_k}{\partial u_j}$  на рассматриваемом интервале изменения  $t$ . В данном определении зависимость собственных чисел от переменной  $t$  указывает на то, что само свойство жесткости будет зависеть от длины рассматриваемого интервала, на котором производится решение задачи. В случае, если система имеет постоянную (не зависящую от  $t$ ) матрицу  $A$ , тогда и число жесткости будет постоянным. Тем самым мы

убеждаемся, что *размер интервала интегрирования – это один из важных факторов при численном решении жестких задач* [13].

Из определения следует, что в любом случае характеристикой жесткости дифференциальной задачи является число жесткости  $S^*$ . Обычно задача считается жесткой, если  $S^* > 100$ , но на практике в особо сложных случаях возможно  $S^* > 1000$ . При этом, как указывается в одной из ранних работ по этой теме [13], в определении числа жесткости имеется полная аналогия с числом обусловленности матрицы  $A$ . Хорошо известно, что для плохо обусловленных матриц малые возмущения ее элементов приводят к значительному изменению решения. *Жесткость также может проявляться в сверхчувствительности системы к малым возмущениям (правой части), роль которых в данном случае могут сыграть, в частности, ошибки округления и локальные погрешности метода решения.*

Широко распространено следующее объяснение феномена жесткости и связанных с этим вычислительных проблем: *решение жесткой системы содержит как быстро, так и медленно убывающие составляющие, так что масштабы переменной  $t$ , на которых изменяются обе составляющие, кардинально различны.* Начиная с некоторого значения  $t$  создается впечатление, что быстрая составляющая «исчезла» и больше не оказывает влияния на решение задачи, т.е. решение полностью определяется медленно убывающей составляющей. Однако при использовании для решения такой задачи условно устойчивых методов быстро убывающая составляющая отрицательно влияет на устойчивость решения, вынуждая выбирать шаг расчетной сетки  $h$  слишком мелким, соответствующим масштабу  $t$ , на котором происходят наиболее быстрые изменения функций.

*Практический выход* из создавшейся ситуации состоит в следующем: при решении такой задачи следует обратить особое

внимание на выбор шага сетки, проверяя на последовательности сеток отсутствие ярко выраженной зависимости решения от  $h$ . Однако этих проблем, возможно, удастся избежать с помощью обдуманного выбора численного метода решения задачи: предпочтение следует отдавать методам с как можно более широкой областью устойчивости. Так, при выборе неявных абсолютно устойчивых численных методов шаг сетки можно выбирать исключительно из соображений лучшей точности, а не устойчивости. Наиболее подробно проблема жесткости и специальные методы численного интегрирования таких систем обсуждаются в [3, 13–16].

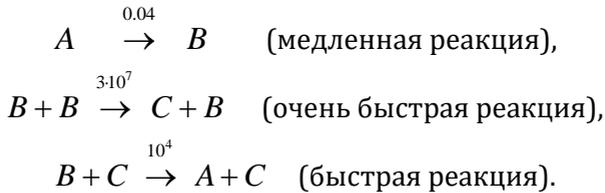
При обдумывании проблемы быстро и медленно убывающих составляющих в жестких системах или уравнениях *может возникнуть соблазн вовсе избавиться от «быстрых» компонент*. Однако во многих случаях оказывается, что ***это решение глубоко ошибочно***, поскольку влияние «быстрых» компонент может оказаться не просто весьма длительным, но даже решающим для моделируемого процесса. Это легко проверить, проведя соответствующий методический расчет.

Что касается реальных процессов и задач, то хорошо известно, что необоснованное пренебрежение разного рода «малыми» величинами при математическом моделировании может существенно исказить картину явлений. Поэтому в системах уравнений, описывающих пока еще не изученный процесс, исследователь обычно учитывает большое количество на первый взгляд второстепенных факторов. Следствием этого, как правило, является, с одной стороны — относительно высокий порядок системы, с другой — ее жесткость. При дальнейшем изучении процесса степень жесткости и порядок системы обычно понижаются, но существует и ряд важных задач, где жесткость присутствует по самой сути вещей [13]. Хорошо известно, что именно так обстоит дело в динамических системах, которые рассмат-

риваются в математической биологии, химической и биокинетике и др.

Особенно часто жесткие системы появляются при моделировании явлений, где разброс временных характеристик является отражением их физической природы. Помимо перечисленных, примерами служат задачи электротехники, описание сложных систем путем формального объединения разнотипных подсистем (как в случае многокомпаратментных моделей процессов в живом организме), исследование работы ядерного реактора и т.д. – в подобных случаях, как правило, выделяется малый множитель при производной, а компоненты вектора решения разделяются на «быстрые» и «медленные». В других случаях жесткость бывает результатом объединения и тесной взаимосвязи в общем случае нежестких однотипных объектов, но когда движение объекта в целом значительно отличаются от движения каждой из его составных частей.

Пример. В качестве одного из ярких примеров приведем жесткую систему [14], описывающую цепочку химических реакций (число над стрелкой – это эмпирическое значение константы скорости конкретной реакции):



Соответствующая математическая модель имеет вид:

$$\begin{aligned}
 \frac{du_1}{dt} &= -0.04u_1 + 10^4 u_2 u_3, & u_1(0) &= 1, \\
 \frac{du_2}{dt} &= 0.04u_1 - 10^4 u_2 u_3 - 3 \cdot 10^7 u_2^2, & u_2(0) &= 0,
 \end{aligned}$$

$$\frac{du_3}{dt} = 3 \cdot 10^7 u_2^2, \quad u_3(0) = 0,$$

где  $u_1$  – концентрация вещества А,  $u_2$  – концентрация вещества В,  $u_3$  – концентрация вещества С. Численные эксперименты показывают [14], что для решения этой задачи требуется более тщательно подходить к выбору численного метода и шага сетки.

#### 2.4.2. ОБ УСТОЙЧИВОСТИ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ. ОБОБЩЕНИЕ НА СИСТЕМЫ ОДУ

Все описанные в предыдущем разделе разностные методы решения задачи Коши для ОДУ 1-го порядка автоматически переносятся на системы ОДУ 1-го порядка. Например, для задачи (2.1) (или в покомпонентной записи (2.2)) формула для вычисления вектора решения в явном методе Эйлера имеет следующий вид:

$$\vec{y}_{i+1} = \vec{y}_i + h\vec{f}(\vec{y}_i), \quad \vec{y}_0 = \vec{\varphi}(t_0),$$

где под  $\vec{y}$  и  $\vec{f}$  надо понимать вектор-функции, а под  $\vec{\varphi}$  – заданный вектор. В покомпонентном виде эта формула запишется так (здесь верхний индекс – это порядковый номер компоненты):

$$\begin{aligned} y_{i+1}^1 &= y_i^1 + hf^1(y_i^1), \\ y_{i+1}^2 &= y_i^2 + hf^2(y_i^2), \\ &\dots \\ y_{i+1}^m &= y_i^m + hf^m(y_i^m). \end{aligned}$$

Все рассуждения о порядке аппроксимации и точности, высказанные для случая одного уравнения, сохраняются и в случае системы [1-7].

*Исследование устойчивости* каждого разработанного численного метода (разностной схемы) решения задачи Коши для системы ОДУ

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = A\vec{u}, \quad t > t_0, \quad \vec{u}(t_0) = \vec{\varphi}(t_0)$$

проводится, как правило, на модельном линейном скалярном уравнении

$$\frac{du(t)}{dt} = \lambda u, \quad t > 0, \quad u(0) = u_0,$$

где  $\lambda$  – комплексное число. Для того чтобы это уравнение моделировало исходную систему ОДУ, необходимо рассматривать модельное уравнение при всех таких  $\lambda$ , которые являются собственными числами матрицы  $A$ . Рассматривается множество всех точек комплексной плоскости  $\mu = h\lambda$ , для которых имеет место устойчивость [9] – эти точки составляют область устойчивости соответствующего разностного метода. Известно, что для явного метода Эйлера область устойчивости представляет собой круг единичного радиуса с центром в точке  $(-1, 0)$ , а для неявного метода Эйлера – внешность круга единичного радиуса с центром в точке  $(1, 0)$  (см., например, [3]).

В настоящее время сложность рассматриваемых задач и особенно проблема жесткости подтолкнула исследователей к тому, чтобы расширить понимание устойчивости, введя специальные определения устойчивости –  $A$ -устойчивость,  $A(\alpha)$ -устойчивость или  $L$ -устойчивость: оказалось, что методы, обладающие этими свойствами, справляются с решением жестких задач.

Напомним, что классическое определение устойчивости разностной схемы требует, чтобы при ее применении к модельному уравнению все корни характеристического уравнения не превосходили по модулю 1.

- ✚ Метод называется *A-устойчивым*, если область его устойчивости содержит полуплоскость  $\operatorname{Re} \mu < 0$ .
- ✚ Метод называется *A( $\alpha$ )-устойчивым*, если область его устойчивости содержит угол  $|\arg(-\mu)| < \alpha$ ,  $\mu = h\lambda$ ; при этом  $A\left(\frac{\pi}{2}\right)$ -устойчивость совпадает с A-устойчивостью.
- ✚ Часто требуется, чтобы метод адекватно воспроизводил поведение быстрых составляющих решения, соответствующих большим значениям  $|\lambda|$ . Этой цели соответствуют методы, обладающие свойством *L-устойчивости*.

Далее обсудим более подробно те задачи и проблемы, в связи с которыми были введены эти понятия устойчивости.

#### 2.4.3. ЯВНЫЕ И НЕЯВНЫЕ МЕТОДЫ РУНГЕ-КУТТЫ

Далее, как и прежде, удобно рассматривать систему ОДУ в матрично-векторном виде:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = A\vec{u}.$$

*Явные методы Рунге-Кутты* решения задачи Коши для этой системы на шаге интегрирования можно записать в следующем виде [11]:

$$\bar{y}_{i+1}^{(1)} = \bar{y}_i^{(1)} + Ah\bar{y}_i^{(1)} = (I + Ah)\bar{y}_i^{(1)},$$

$$\bar{y}_{i+1}^{(2)} = (I + Ah + A^2h^2 / 2)\bar{y}_i^{(2)},$$

$$\bar{y}_{i+1}^{(3)} = (I + Ah + A^2h^2 / 2 + A^3h^3 / 6)\bar{y}_i^{(3)},$$

$$\bar{y}_{i+1}^{(4)} = (I + Ah + A^2h^2 / 2 + A^3h^3 / 6 + A^4h^4 / 24)\bar{y}_i^{(4)},$$

где верхние индексы указывают порядок точности метода,  $I$  – единичная матрица. Как и в случае одного дифференциального уравнения, эти методы в случае системы ОДУ работают достаточно надежно, но имеют ограничения на шаг сетки, связанные с устойчивостью.

*Неявные A-устойчивые методы* аналогичных порядков точности записываются в следующем виде [11]:

$$\bar{y}_{i+1}^{(1)} = \bar{y}_i^{(1)} + Ah\bar{y}_{i+1}^{(1)} = (I - Ah)^{-1} \bar{y}_i^{(1)},$$

$$\bar{y}_{i+1}^{(2)} = (I - Ah + A^2h^2 / 2)^{-1} \bar{y}_i^{(2)},$$

$$\bar{y}_{i+1}^{(3)} = (I - Ah + A^2h^2 / 2 - A^3h^3 / 6)^{-1} \bar{y}_i^{(3)},$$

$$\bar{y}_{i+1}^{(4)} = (I - Ah + A^2h^2 / 2 - A^3h^3 / 6 + A^4h^4 / 24)^{-1} \bar{y}_i^{(4)}.$$

Выше уже отмечалось, что численная реализация неявных методов, чаще всего, опирается на метод простой итерации из-за необходимости решения нелинейных алгебраических уравнений. Следует при этом помнить, что для сходимости метода простых итераций требуется выполнение собственного ограничения (в соответствии с принципом сжимающих отображений), которое выражается (для неявных методов!) в ограничении сверху шага сетки.

#### 2.4.4. ИДЕИ МЕТОДОВ РОЗЕНБРОКА И ( M,K)-МЕТОДОВ

Вновь отметим, что ранее представленные методы из семейств Адамса и Гира, обладающие А- или  $A(\alpha)$ -устойчивостью, оказываются предпочтительнее в тех случаях, когда требуется решать жесткие задачи. Примером А-устойчивого метода 2-го порядка является схема (2.10). Семейство  $A(\alpha)$ -устойчивых ФДН-методов с достаточно большим значением угла полураствора  $\alpha$  носит общее название методов Гира. Примером  $A(\alpha)$ -устойчивого метода (при некотором  $\alpha$ ) является ранее представленный метод Гира 4-го порядка (2.14).

При решении жестких задач широкое распространение получили также *методы типа Розенброка*. Считается, что они обладают хорошими свойствами точности и устойчивости, а также относительно просты в реализации на ЭВМ. Методы такого типа можно получить из класса полунявных методов Рунге-Кутты, если при вычислении каждого  $k_j$  ограничиться только одной итерацией метода Ньютона. Таким образом, методы этой группы относят к безытерационным методам. Отличительной чертой методов из семейства Розенброка является введение матрицы Якоби непосредственно в численную формулу. Методы типа Розенброка имеют следующий общий вид:

$$y_{i+1} = y_i + \sum_{j=1}^s P_j k_j, \quad D_{is} k_s = hf(t_i + \alpha_s h, y_i + \sum_{l=1}^{s-1} \beta_{sl} k_l),$$

$$D_{is} = I - a_s hf'(t_i + b_s h, y_i + \sum_{j=2}^{s-1} \gamma_{sj} k_j),$$

где  $f'$  – матрица Якоби системы ОДУ,  $a_s, b_s, P_j, \alpha_s, \beta_{sl}, \gamma_{sj}$  – коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости метода. Обычно считается, что наиболее эффективные реализа-

ции этих методов возникают, если положить равными друг другу все  $a_s$  и  $b_s = 0$ ,  $\gamma_{sj} = 0$ .

При использовании методов типа Розенброка следует иметь в виду, что точность вычисления матрицы Якоби влияет на порядок точности численной схемы, и поэтому какие-либо ее возмущения могут приводить к потере порядка точности численной формулы [15]. Кроме того, при их реализации требуется обратить матрицу  $D_{is}$  или несколько раз решить СЛАУ.

В настоящее время уже разработано достаточно много методов этого типа, которые предлагают все более интересные и тонкие варианты решения указанных проблем. В частности, широко известен класс так называемых  $(m, k)$ -методов, в которых нахождение стадий не связывается с обязательным вычислением правой части системы дифференциальных уравнений, как это свойственно для методов Рунге-Кутты. Числа  $m$  и  $k$  означают число стадий и количество вычислений правой части на шаг интегрирования соответственно. Реализация  $(m, k)$ -методов так же проста, как и методов Розенброка, однако  $(m, k)$ -схемы имеют лучшие свойства точности и устойчивости. Методы этого класса для автономных и неавтономных систем разработаны и апробированы, в том числе на наиболее жестких известных примерах систем ОДУ; они подробно представлены, например, в [15, 16].

#### 2.4.5. МЕТОДЫ С КОНТРОЛЕМ ТОЧНОСТИ И УСТОЙЧИВОСТИ

Для слишком жестких систем (с большим числом жесткости  $S^*$ ) разработан и широко применяется способ *контроля устойчивости явных формул*, который привел к существенному пересмотру возможностей использования явных методов для решения жестких задач.

Общий принцип: Выбор величины шага на основе условий, контролирующих точность и устойчивость, позволяет не только повысить эффективность алгоритма интегрирования, но и вычислить решение ряда задач, которые не удается решить алгоритмом без такого контроля.

В жестких задачах, очевидно, на первый план выходит контроль устойчивости. Более того, неравенство для контроля устойчивости можно использовать не только с целью более гибкого управления величиной шага интегрирования, но и с целью автоматического выбора численной схемы с подходящей областью устойчивости. Поэтому актуальной является задача построения явных численных схем с расширенными областями устойчивости и последующего их использования на той части интервала интегрирования, где они предпочтительны [15].

Так, для более тщательной адаптации явных методов типа Рунге-Кутты к численному решению жестких систем ОДУ (преимущественно со средней жесткостью) разрабатываются *алгоритмы с контролем точности и устойчивости* численных схем, что зачастую резко повышает возможности применения явных методов для решения жестких задач. Для контроля точности разрабатываются критерии заданной точности в виде неравенств, которые используются непосредственно в ходе расчета и обуславливают варьирование шага сетки, т.е. уменьшение либо, наоборот, увеличение его в два раза. Заметим, что *контроль устойчивости* может быть осуществлен благодаря определенному произволу в выборе числовых параметров в методах Рунге-Кутты, начиная с трехстадийного метода общего вида  $y_{i+1} = y_i + P_1 k_1 + P_2 k_2 + P_3 k_3$ .

Одна из наиболее удачных формул типа *Рунге-Кутты* – *пятистадийная схема, впервые полученная Мерсоном*

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}k_1 + \frac{2}{3}k_4 + \frac{1}{6}k_5, \quad (2.15)$$

$$k_1 = hf(t_i, y_i), \quad k_2 = hf\left(t_i + \frac{h}{3}, y_i + \frac{1}{3}k_1\right),$$

$$k_3 = hf\left(t_i + \frac{h}{3}, y_i + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{6}k_2\right),$$

$$k_4 = hf\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{8}k_1 + \frac{3}{8}k_3\right),$$

$$k_5 = hf\left(t_i + h, y_i + \frac{1}{2}k_1 - \frac{3}{2}k_3 + 2k_4\right).$$

Для оценки точности дополнительно следует вычислить  $\bar{y}_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}k_1 - \frac{3}{2}k_3 + 2k_4$ , тогда локальная погрешность решения на шаге вычисляется по формуле  $R = 0.2|y_{i+1} - \bar{y}_{i+1}|$ . Шаг сетки увеличивают, если  $R \leq \frac{\varepsilon}{64}$ . Для контроля точности приближенного решения (2.15) рекомендуется использовать неравенство  $\|2k_1 - 9k_3 + 8k_4 - k_5\| \leq 150\varepsilon^{5/4}$ . Условие для контроля устойчивости схемы (2.15) основано на применении к разности  $(k_3 - k_2)$  формулы Тейлора. Условие выглядит следующим образом:

$$6 \max_{1 \leq i \leq N} |(k_3 - k_2)/(k_2 - k_1)| \leq \beta,$$

где константа  $\beta=3.5$ , на самом деле, ограничивает длину интервала устойчивости схемы (2.15). В некоторых источниках можно встретить и несколько отличающиеся от указанных здесь условия, их эффективность, по-видимому, следует проверять на кон-

кретной задаче. Одной из причин успеха схемы (2.15) называют то, что ее область устойчивости примерно одинаково вытянута вдоль вещественной и вдоль мнимой оси [15].

Широко известна также *шестистадийная схема Рунге–Кутты–Фельберга с контролем точности*. Эта схема одна из самых часто применяемых и дающих оптимальные результаты по соотношению производительность/точность:

$$\begin{aligned}
 y_{i+1} &= y_i + \frac{16}{135}k_1 + \frac{6656}{12825}k_3 + \frac{28561}{56430}k_4 - \frac{9}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6, \\
 k_1 &= hf(t_i, y_i), \quad k_2 = hf\left(t_i + \frac{h}{4}, y_i + \frac{1}{4}k_1\right), \\
 k_3 &= hf\left(t_i + \frac{3h}{8}, y_i + \frac{3}{32}k_1 + \frac{9}{32}k_2\right), \\
 k_4 &= hf\left(t_i + \frac{12h}{13}, y_i + \frac{1932}{2197}k_1 - \frac{7200}{2197}k_2 + \frac{7296}{2197}k_3\right), \\
 k_5 &= hf\left(t_i + h, y_i + \frac{439}{216}k_1 - 8k_2 + \frac{3680}{513}k_3 - \frac{845}{4104}k_4\right), \\
 k_6 &= hf\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i - \frac{8}{27}k_1 + 2k_2 - \frac{3544}{2565}k_3 + \frac{1859}{4104}k_4 - \frac{11}{40}k_5\right); \\
 \bar{y}_{i+1} &= y_i + \frac{25}{216}k_1 + \frac{1408}{2565}k_3 + \frac{2197}{4101}k_4 - \frac{1}{5}k_5.
 \end{aligned}$$

Как и в схеме (2.15), локальная погрешность решения на шаге оценивается как разница между решениями, полученными по формулам схем 4-го и 5-го порядков:  $R = |y_{i+1} - \bar{y}_{i+1}|$ . По результату проверки производится корректировка шага сетки в сторону роста или убывания.

Наконец, заметим, что использование большинства из перечисленных методов отнюдь не отменяет проблему, о которой говорилось выше – разработку (в дополнение к конечно-разностной схеме) специального алгоритма, обеспечивающего корректный учет нелинейности системы. *При решении нелинейных систем уравнений* дополнительно следует привлекать идеи, основанные на известных численных методах решения систем алгебраических уравнений. Среди них предпочтение может быть отдано, например, *идеи метода Зейделя*: при вычислении очередной компоненты вектора решения задачи в точке  $t_{i+1}$  следует привлекать уже вычисленные в этой точке значения других компонент вектора решения. В некоторых случаях более уместным оказывается итерационный процесс. При необходимости могут быть организованы глобальные итерации, когда расчет всей системы производится на всем интервале и затем повторяется, пока не будет достигнута сходимость.

## 2.5. ТЕХНОЛОГИЯ ПРОВЕДЕНИЯ МЕТОДИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

---

Задача численного анализа динамических систем представляет собой чрезвычайно ответственный трудоемкий многоэтапный процесс проведения разного рода численных экспериментов с применением компьютерной программы.

Поскольку речь идет о поиске приближенного решения поставленной задачи, то *на первый план выходят проблемы аккуратного и вдумчивого подбора наиболее эффективного численного метода ее решения, проверки точности и доказательства адекватности полученных численных результатов*. На любом, особенно самом ответственном этапе анализа эту миссию вы-

полняют так называемые *методические расчеты*. Таким образом, методические расчеты – это первостепенная, обязательная, но относительно малая часть общей задачи численного анализа динамической системы и математического моделирования. Часто наряду с термином «методические расчеты» используется термин «верификация».

*Многоэтапность численного анализа* предполагает постепенное наращивание уровня сложности решаемой задачи – от простейшей тестовой до задачи, являющейся главной целью всего исследования (далее ее будем называть основной задачей). Что это значит?

Во всех случаях, прежде чем писать компьютерную программу, решающую сложную основную задачу, целесообразно посмотреть, как будет работать тот или иной метод на простейших *тестовых задачах*, где, как правило, точное решение вычисляется в явном виде, *и/или модельных задачах*, решение которых хорошо изучено. Так мы узнаем, какими свойствами обладает новый метод, какой из известных методов лучше и по какому именно признаку. В частности, если на этом этапе метод дает неудовлетворительный результат, то от его применения, скорее всего, стоит отказаться. При этом будем иметь в виду, что тестовой задачей может служить практически любая задача рассматриваемого класса, а под модельной будем понимать такую, которая, помимо прочего, имеет какое-либо отношение к исходной сложной основной «физической» задаче, в идеале – является упрощением соответствующей математической модели.

При проведении больших научных исследований тестовая задача позволяет, в частности, быстро выявить ошибки компьютерной программы. А вот роль модельной задачи может оказаться намного шире: изучение модельного примера может позволить сравнить несколько существующих методов и выбрать оптимальные значения параметров этих методов для решения

основной задачи. На примере решаемой модельной задачи можно разыграть реальную ситуацию, возникающую при реализации метода. Такой подход часто более предпочтителен, чем подробное теоретическое исследование, поскольку дает большой выигрыш во времени [4].

Таким образом, методические расчеты проводятся сначала на тестовой задаче, затем та же технология реализуется на модельной задаче с целью уточнения полученных результатов и выводов. И, наконец, наиболее «реалистичная картина» свойств используемого метода и особенностей его применения, а также точности и адекватности полученных численных результатов демонстрируется в методических расчетах на основной, пока еще не изученной задаче. Иногда роль тестовой задачи может выполнять модельная.

#### 2.5.1. ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть требуется найти непрерывную при  $t_0 \leq t \leq T$  функцию  $u=u(t)$ , удовлетворяющую дифференциальному уравнению при  $t > t_0$  и начальному условию при  $t = t_0$ :

$$\frac{du}{dt} = f(u(t)), \quad t_0 < t \leq T, \quad u(t_0) = \varphi(t_0).$$

Напомним, что для приближенного решения задачи с помощью конечно-разностных численных методов на интервале  $t \in [t_0, T]$  должна быть введена сетка с узлами  $t_0 < t_1 < \dots < t_{N-1} < t_N = T$ , где  $h$  – (постоянный) шаг сетки. Пусть сеточная функция  $y_h$  – это искомое приближенное решение дифференциальной задачи в узлах сетки  $x_i$ . Важно, чтобы при  $h \rightarrow 0$  последовательность

численных решений  $y_h, y_{h/2}, y_{h/4}, \dots$  сходилась в себе и к точному решению дифференциальной задачи при  $h \rightarrow 0$ . Представление о точности численного решения  $y_h$  на интервале  $[t_0, T]$  дает оценка нормы погрешности  $\varepsilon = \|u - y_h\| = O(h^p) \leq Ch^p$  (см. определения в п. 2.2.3).

В тестовых и модельных задачах будем полагать, что нам известна функция точного решения задачи  $y = \varphi(t)$ . Тогда погрешность может быть вычислена непосредственно по сравнению с точным решением  $\varepsilon = \|\varphi - y_h\|$  с привлечением векторной или матричной (для системы ОДУ) норм, причем в случае систем ОДУ желательно пользоваться согласованными вариантами норм [6]. Наиболее употребительные векторные нормы приведены в п. 2.2.3.

В случае реальных задач рассчитывать на точное решение задачи – значит, отказаться вовсе от ее приближенного решения. А поскольку чаще всего это невозможно, то для оценки погрешности следует прибегнуть к хорошо известной оценке с привлечением *правила Рунге*:

$$u(t_i) - y_{h,i} \approx \frac{2^p}{2^p - 1} [y_{h/2,i} - y_{h,i}]. \quad (2.16)$$

Здесь  $y_{h,i}$  и  $y_{h/2,i}$  – приближенные решения задачи в узлах сетки  $t_i = ih$  сетки  $\bar{\omega}_h$ , полученные на вложенных сетках  $\bar{\omega}_h = \{t_i = ih, i = 0, 1, 2, \dots\}$  и  $\bar{\omega}_{h/2} = \{t_i = ih/2, i = 0, 1, 2, \dots\}$  соответственно. Формула (2.16) дает приближенную оценку главного члена погрешности, а значит, она адекватна, если остальные члены будут достаточно малы. Последнее, в значительной степени, зависит от величины шага сетки. Оценка Рунге дает нам

сведения о приближенном значении погрешности в точке  $t_i$ , а для ее оценки на интервале требуется, как и ранее, воспользоваться одной из известных векторных норм (если речь идет об одном уравнении или об одной компоненте вектора решения задачи). Отметим, что сравнение результатов расчетов, выполненных на сетках с шагами  $h$  и  $h/2$ , которые называются вложенными – это основной практический способ апостериорной (реальной) оценки погрешности.

*Об источниках вычислительных погрешностей.* Их появление на каждом шаге вычислений обусловлено следующими основными причинами:

- представлением чисел и округлением чисел при компьютерных вычислениях;
- погрешностями в значениях правой части разностного уравнения, которые имеют, как минимум, два источника – с одной стороны, сама эта функция при компьютерных вычислениях может приближаться функциями, вычислимыми относительно элементарных операций, а с другой – она является некоторым приближением к правой части реального дифференциального уравнения  $f(u)$ ;
- погрешностями самого численного метода решения задачи, включая погрешности дискретизации расчетной области, аппроксимации дифференциального оператора разностным (см. п. 2.2.1–2.2.3) и др.;
- во многих случаях значение  $y_{i+1}$  определяется из уравнения, эквивалентного (2.3), но не разрешенного в явном виде относительно переменной  $y_{i+1}$ ; тогда величина погрешности содержит составляющую, являющуюся следствием приближенного решения этого уравнения.

Следует иметь в виду, что при тщательном рассмотрении задачи и ее компьютерной реализации могут быть обнаружены и другие источники погрешностей – все они должны быть проанализированы и, по возможности, учтены и минимизированы.

Отдельно обратим внимание на следующее важное обстоятельство, имеющее значение именно для приближенного решения задачи Коши. Часто решение дифференциального уравнения отыскивается на большом промежутке с чрезвычайно большим количеством шагов сетки, при этом происходит пошаговое накопление погрешности. Может оказаться, что достижение нужной точности требует столь мелких шагов и столь малой величины вычислительной погрешности на шаге, что использование рассматриваемого метода будет нецелесообразно.

#### 2.5.2. О ВЫБОРЕ ЧИСЛЕННОГО МЕТОДА

В разделах 2.3.2 и 2.4.3 представлен достаточно большой набор известных численных методов решения задачи Коши и даны конкретные рекомендации по их использованию. Выбор какого-то одного или хотя бы нескольких из них – сложная задача.

Часто при выборе численного метода используется формулировка «наиболее употребимый», которая отражает определенную уже сложившуюся тенденцию в использовании конкретных численных методов. Опыт показывает, что ответ на вопрос о том, какая формула из предлагаемого семейства расчетных формул является наилучшей, часто не имеет простого и тем более однозначного ответа. В таких ситуациях обычно рекомендуют основываться на практическом опыте, хотя и само понятие практики вычислений можно понимать по-разному: это могут быть как общие рекомендации, общепринятые в некотором сообществе практиков, так и собственный опыт исследователя. Во всех случаях должна быть представлена убедительная система

доказательств эффективности принятого метода расчета, оценки погрешностей и порядка сходимости решения задачи, над которой работает исследователь. Таким образом, специалисты сходятся во мнении, что *выбор между несколькими рекомендованными методами должен быть осознан и обоснован результатами методических расчетов своей задаче.*

Число различных классов дифференциальных уравнений, интересных с точки зрения математического моделирования задач физики, биологии, медицины, экологии, химии, и экономики и других наук, «существенно превосходит число задач, на которых производится сравнение методов численного интегрирования, поэтому суждения «с позиций практики» не всегда объективны. Однако, несмотря на такую неопределенность, критерий практики часто несет в себе определенную положительную информацию, которая зачастую на данном этапе развития науки не может быть формализована или обоснована. Если исторически первый из методов рассматриваемого класса оказался приемлемым, то в дальнейшем пользователи привыкают к нему. Замена этого метода на другой, даже более эффективный метод требует определенных затрат времени на «привыкание» пользователей к новому методу (а следовательно, и определенных психологических затрат). Чтобы широкий круг пользователей согласился на подобную перестройку, необходимо существенное преимущество нового метода по какой-либо из характеристик» [4].

*О расчетах с переменным шагом и контролем погрешности на шаге.* Мы рассматриваем решение задач Коши для ОДУ с помощью численных методов, полагая всегда шаг сетки постоянным. Это простая стратегия имеет очень широкую область применения, особенно с учетом современного развития вычислительных мощностей. Однако в некоторых задачах бывает целесообразно применять сетку с неравномерным шагом, заданным

на основе общих соображений о типе решения задачи, или изменять шаг интегрирования непосредственно в ходе расчетов, контролируя величину погрешности метода или устойчивость решения на шаге (этот вариант подробно обсуждался в п. 2.4.3).

Переменный, адаптирующийся к особенностям решения задачи шаг интегрирования часто позволяет сделать решение задачи существенно более экономичным по сравнению со случаем интегрирования с постоянным шагом при сохранении точности результата. Однако в этом случае приходится учитывать архитектуру используемого численного метода. Так, например, схемы Рунге–Кутты непосредственно в процессе счета могут (по заданной программе) автоматически уменьшить или увеличить шаг на гладких участках, чтобы не производить лишней работы. В то время как для методов Адамса в подобных случаях должны быть использованы модификации с переменным шагом [6], однако они существенно более громоздкие и, соответственно, более трудоемкие, чем стандартные.

Интересной программистской задачей может стать реализация идеи автоматического перехода с одного метода на другой в процессе счета. Например, начинать счет всегда надо по схеме Рунге–Кутты, а далее можно чередовать Рунге–Кутты (чисто теоретически он точнее и работает с переменным шагом) и Адамса (он более экономичен). Конкретная реализация этой стратегии детально обсуждается в [5]: *«в программе должен быть предусмотрен автоматический выбор шага, при котором расчет ведется с нужной точностью. При этом программа выбора шага должна предусматривать некоторый «консерватизм»: диктовать изменение шага только в случае, если требуется «довольно сильно» его изменить. Если оказывается, что при вычислении нескольких последовательных значений приближенного решения по схеме Рунге–Кутты не происходит изменения шага, целесообразен автоматический переход на счет по более*

*экономной схеме Адамса. Как только вновь появляется необходимость изменить шаг, программа расчета должна переходить на вычисления по схеме Рунге — Кутты и т. д. Для контроля правильности выбора шага обычно параллельно ведут вычисления с некоторым заданным и вдвое меньшим шагом. В пределах требуемой точности решения должны совпадать. В противном случае надо вести вычисления с более мелким шагом. Нужно также предусмотреть пробу на возможность увеличить шаг».*

Таким образом, практическая рекомендация в пользу той или другой стратегии состоит в том, что еще на этапе методических расчетов следует уделить внимание оценке затрат на реализацию самой процедуры выбора переменного шага интегрирования, проверки точности и адаптации алгоритма. Окончательный ответ на основной вопрос – даст ли переход к алгоритму с переменным шагом реальный выигрыш – должен быть получен в численных экспериментах именно для конкретной решаемой задачи. Осознавая все это, не будем забывать также, что для некоторых (жестких) задач алгоритмы с контролем точности и устойчивости могут оказаться попросту безальтернативными.

### 2.5.3. ПРАКТИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ

1. Чтобы начать численные эксперименты, надо определиться с тем, какая именно задача будет решаться на данном этапе исследований и какую группу методов планируется использовать. Как сказано выше, начинать численное решение задачи Коши для ОДУ или их системы следует с самой простой тестовой задачи и с самого простого численного метода.

2. Необходимо написать как можно более простой и ясный программный код для вычисления приближенного решения  $y_i = y(t_i)$  в узлах сетки  $t_0 \leq t_i \leq t_N = T$  (для каждого численного

метода при фиксированном  $N$ ) – это выходная информация в компьютерной программе. Поскольку вещественные числа в компьютерах различных типов записываются по-разному, следует позаботиться о выборе из нескольких числовых форматов наиболее подходящего для конкретной задачи. Дополнительно следует предусмотреть вычисление в каждой точке расчетной сетки а) погрешности разностной схемы  $\varepsilon_i = |\varphi(t_i) - y_i|$  и/или б) оценки главного члена локальной погрешности по правилу Рунге, т.е. без использования точного решения (см. формулу (2.16)). По этим данным для каждого  $h$  необходимо вычислять глобальную (т.е. на интервале)  $\varepsilon$  абсолютную или относительную погрешность в некоторой норме, например

$$\varepsilon = \varepsilon_{\max}(h) = \max_{0 < i \leq N} \varepsilon_i \quad \text{или} \quad \varepsilon = \varepsilon_{rel}(h) = \frac{\max_{k=0, N} \varepsilon_i}{\max_{k=0, N} |y(t_k)|}.$$

3. При появлении самых первых результатов следует приступить к визуализации полученного решения, сравнивая (при возможности) его с точным. *Начинаящему исследователю следует ясно понимать, что именно решение задачи, а не погрешности являются конечной целью численного анализа динамических систем как математических моделей реального объекта.*

а) Проводится визуальный (поверхностный, грубый!) анализ зависимости приближенного решения от шага сетки и метода вычисления. Если все (визуально!) верно, то можно увидеть, что в расчетах на грубой сетке имеется существенная зависимость решения от численного метода, а при достаточно малых значениях  $h$  решения, полученные разными методами, визуально малоразличимы и близки к точному.

б) Если визуально все непротиворечиво, то можно рассмотреть и особенности самого решения – это может помочь в последую-

щем выборе оптимального именно для этой задачи численного метода или параметров расчетной сетки.

в) Уже на этом этапе к исследователю может прийти понимание, что в компьютерных вычислениях следует опасаться использования слишком малых  $h$ , стараясь устремлять к нулю погрешности метода, но опрометчиво не заботясь о времени счета.

4. Чтобы разобраться во всем этом более детально, следует переходить к следующему этапу – проведению обязательных для всех без исключения классов задач численных экспериментов – собственно к *методическим расчетам*.

#### 2.5.4. МЕТОДИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Дело в том, что на практике полученная в расчетах сеточная функция  $y_h(t_i) = y_i$  из-за неудачного выбора сетки, метода или других более сложных вычислительных проблем может оказаться какой угодно, не обязательно адекватной точному решению (тем более что в реальных задачах оно не известно). Поэтому специалисты разработали систему обязательных вычислительных экспериментов, без проведения которых функция  $y_h$  не считается приближенным решением задачи (1). Фактически эти эксперименты предусматривают углубленный анализ погрешностей численного решения и рассмотрение еще целого ряда важных вопросов.

1. *Проверка сходимости в себе последовательности решений на вложенных сетках.* Следует выполнить методические расчеты на последовательности сеток, каждый раз уменьшая шаг сетки вдвое (начиная с  $N = 10, 20, \dots$ ), но сохраняя постоянным интервал изменения независимой переменной, на котором решается задача. Например, провести расчеты на двух сетках

$\bar{\omega}_h = \{t_i = ih, i = 0, 1, 2, \dots\}$  и  $\bar{\omega}_{h/2} = \{t_i = ih/2, i = 0, 1, 2, \dots\}$  и сравнивать локальную погрешность в совпадающих точках или глобально – на интервале  $[t_0, T]$ . Графически следует подтвердить, что последовательность численных решений, полученных на последовательности вложенных сеток, действительно сходится в себе и, возможно, к точному решению (см. рис. 2.1).

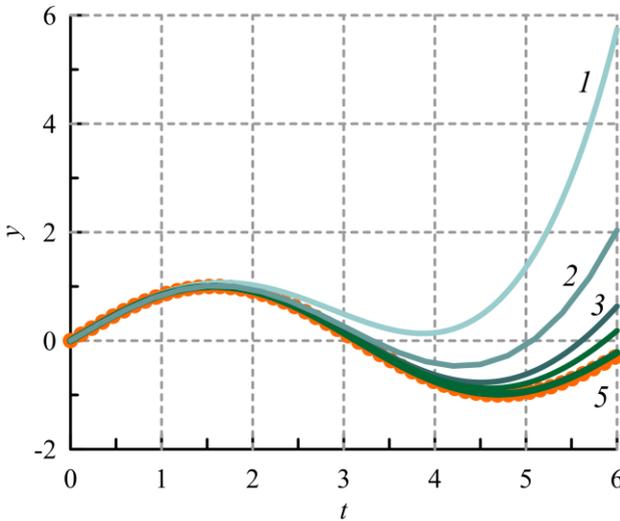


Рис. 2.1. Иллюстрация сходимости последовательности численных решений на сетках с шагами  $h/2^k$  к точному решению. Численные решения – линии 1–5 при  $k=1, \dots, 5$ ; точное решение – кружки.

2. Оценка порядка точности (сходимости) численного метода. Теоретический порядок точности (сходимости) метода  $p$  обычно известен из литературы, и мы ожидаем, что на гладких решениях погрешность решения будет вести себя примерно так, как показано на рис. 2.2 для методов порядка  $p=1, \dots, 4$ : если асимптотически погрешность  $\varepsilon \approx Ch^p$  при  $h \rightarrow 0$ , то, очевидно, при умень-

шении шага сетки  $h$  в  $2^k$  раза значение  $\varepsilon$  должно уменьшиться в  $2^{kp}$  раз. Но на практике все может складываться иначе, и поэтому необходимо получить более точную оценку фактического порядка  $p^*$ . Это особенно важно, когда от решения тестовых и модельных задач производится переход к решению основной, как правило, более сложной системы уравнений.

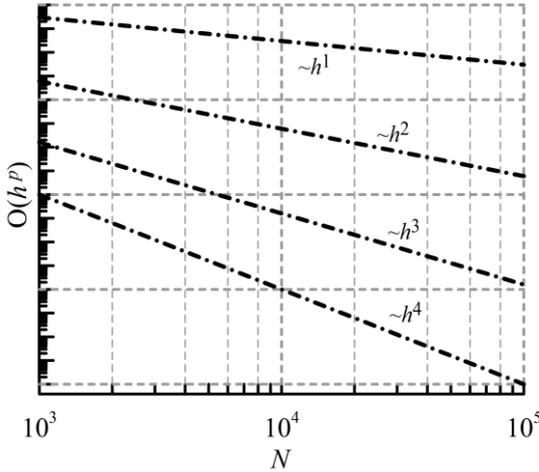


Рис. 2.2. Ожидаемые теоретические зависимости погрешности решения задачи  $\varepsilon$  от шага сетки  $h$  и применяемого численного метода порядка  $O(h^p)$ . Здесь  $N \sim 1/h$  – число узлов сетки на интервале  $[t_0, T]$

В методических целях по результатам расчетов на последовательности сеток (см. п. 1) рекомендуется составить таблицу погрешностей  $\varepsilon_{\max}(h)$  или  $\varepsilon_{rel}(h)$ , объединив в ней данные по всем используемым в численных экспериментах расчетным сеткам и методам решения задачи. Пример представлен в виде таблицы 2 (при проведении исследований в этой таблице, конечно, не должно оставаться пустых ячеек).

Таблица 2. Значения погрешности решения задачи $\varepsilon_{\max}$ в зависимости от шага сетки и применяемого численного метода					
$N$	Метод 1 $O(h)$	Метод 2 $O(h^2)$	Метод 3 $O(h^3)$	...	Метод 7 $O(h^p)$
16	16.23	8.296	$3.056 \cdot 10^{-1}$	...	$3.713 \cdot 10^{-1}$
32	8.934	2.007	$2.795 \cdot 10^{-2}$	...	$3.204 \cdot 10^{-3}$
64	4.648	$4.924 \cdot 10^{-1}$	$2.519 \cdot 10^{-3}$	...	$8.680 \cdot 10^{-4}$
...	...	...	...	...	...
1024	$2.997 \cdot 10^{-1}$	$1.877 \cdot 10^{-3}$	$3.614 \cdot 10^{-7}$	...	$5.547 \cdot 10^{-7}$
2048	$1.500 \cdot 10^{-1}$	$4.688 \cdot 10^{-4}$	$4.413 \cdot 10^{-8}$	...	$3.847 \cdot 10^{-8}$
...	...	...	...	...	...
32768	$9.384 \cdot 10^{-3}$	$1.830 \cdot 10^{-6}$	$1.052 \cdot 10^{-11}$	...	$5.898 \cdot 10^{-13}$
65536	$4.692 \cdot 10^{-3}$	$4.576 \cdot 10^{-7}$	$1.340 \cdot 10^{-12}$	...	$5.318 \cdot 10^{-14}$
131072	$2.346 \cdot 10^{-3}$	$1.193 \cdot 10^{-7}$	$2.637 \cdot 10^{-13}$	...	$1.167 \cdot 10^{-13}$

Можно применить два способа анализа: i) вычислить величины  $p^* = \log_2 |\varepsilon(h)/\varepsilon(h/2)|$  и пронаблюдать сходимость величин на последовательности сеток, сопоставить эти данные с теоретическим порядком точности метода  $p$ ; ii) представить графики погрешностей  $\varepsilon(h)$ , используя не линейную, а логарифмическую (по основанию 10) шкалу по обеим осям координат для более ясного представления малых и больших масштабов изменения величины погрешности. Вероятнее всего, используемая графическая программа определит и соответствующую реальному результату степенную функцию  $ch^{p^*}$ .

Пример графической обработки показан на рис. 2.3. Анализ этих данных позволяет ответить на следующие вопросы: действительно ли погрешность убывает по степенному закону  $Ch^p$  при уменьшении  $h$ , как это предсказывала теория для конкретного метода? возможны ли и при каких именно значениях  $h$  нарушение

ния сходимости? возможно ли нарушение сходимости при  $h \rightarrow 0$ ? если произошла потеря точности, то по каким причинам? какой метод окажется наиболее точным или экономичным? какой из двух методов одного и того же порядка предпочтителен для данной задачи?

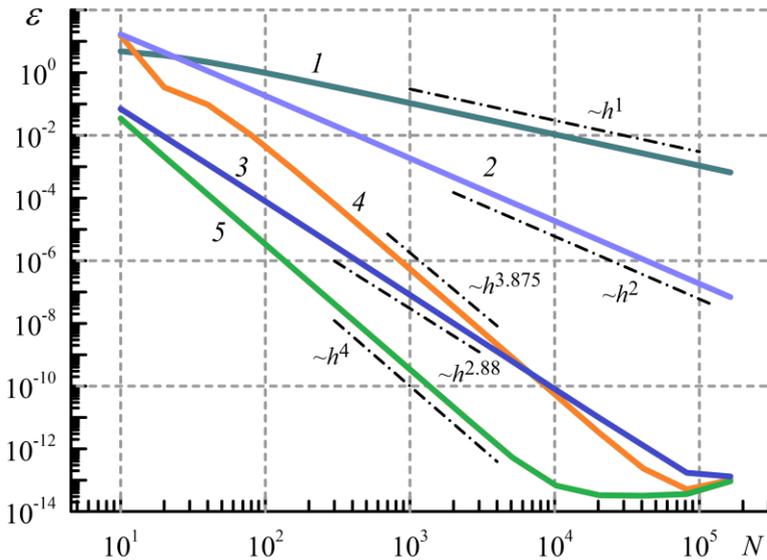


Рис. 2.3. График зависимости погрешности решения задачи  $\varepsilon$  от шага сетки  $h$  и применяемых численных методов теоретических порядков  $O(h^p)$ . Методы: 1 -  $p = 1$ ; 2 -  $p = 2$ ; 3 -  $p = 3$ ; 4 -  $p = 4$ ; 5 -  $p = 4$ . Сплошные линии 1-5 - результаты расчетов, штрих-пунктирные линии -  $O(h^{p^*})$ , где  $p^*$  - фактический порядок точности и скорости сходимости метода.

Здесь  $N \sim 1/h$  - число узлов сетки на интервале  $[t_0, T]$

В исследовательских целях можно выделить для последних серий расчетов сразу два численных метода: наиболее

точный метод – для проведения качественного анализа состояний динамической системы, наиболее экономичный – для решения оптимизационной задачи в рамках задачи идентификации параметров математической модели (численного решения обратной коэффициентной задачи). В учебных целях на задаче с известным точным решением можно также поставить вопрос о том, адекватна ли вообще оценка погрешности по правилу Рунге (2.16)? При каких значениях  $h$  ей можно доверять?

3. *Численные эксперименты, необходимые для организации больших серий расчетов.* В тот момент, когда методические расчеты, в основном, завершены, так что становится ясно, какой численный метод (методы) разумно применять для решения основной задачи, стоит задуматься об оптимальных значениях параметров методов – от этого зависит как точность, так и трудоемкость дальнейших экспериментов с динамической системой.

а) В первую очередь, речь идет о *выборе оптимального шага сетки* для каждого метода. Критерий оптимальности, конечно, зависит от цели исследования. Возможно, требуется как можно более высокая точность для поиска бифуркационных параметров и качественного анализа решений. Но часто главным критерием является минимизация затрат процессорного времени при разумной точности, когда исследователь планирует изучение множества разнообразных режимов функционирования, свойств и состояний динамической системы, а также способов управления этой системой при реализации различных сценариев, важных для практики. В последнем случае следует найти такое значение  $h$ , при котором отклонение решения от решения, полученного на сетке с шагом  $h/2$ , в некоторой норме достаточно мало.

б) При *использовании многошаговых методов* обязательным является осознанный, т.е. основанный на соображениях математической корректности и сохранения точности решения, *выбор*

метода для вычисления решения в первых точках. Требуется провести особую серию численных экспериментов, привлекая разные одношаговые методы или используя другие приемы, которые может продиктовать конкретная задача, и проанализировать влияние этого выбора на точность расчетов.

в) Особое внимание следует уделить выбору итерационного параметра в случае, если в дальнейшем будет использоваться соответствующая разностная схема. Например, выше обсуждалась схема (2.13):

$$\begin{aligned} z_{i+1} &= y_i + hf(t_i, y_i), \\ y_{i+1}^0 &= z_{i+1}, \\ y_{i+1}^{s+1} &= y_i + \frac{h}{2} \left( f(t_{i+1}, y_{i+1}^s) + f(t_i, y_i) \right), \quad i = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Здесь  $s$  – номер итерации,  $i$  – номер узла сетки,  $\lambda$  – заданный итерационный параметр. Тогда для каждого  $i$  итерации прекращаются, если выполнено условие сходимости итераций в точке (для исключения заикливания в компьютерной программе следует предусмотреть дополнительно разумное ограничение сверху числа итераций). Следует иметь в виду, что в случае задач Коши для ОДУ и их систем работа с итерационными разностными схемами должна быть продуманной, чтобы принести желаемый результат – способствовать значимому (иногда речь идет о порядках) уточнению численного решения. При наиболее тщательном и методичном исследовании, выполнив расчеты для набора значений итерационного параметра из достаточно широкого интервала  $10^{-10} \leq \lambda \leq 10^{-2}$  на последовательности сеток, можно получить развернутую картину зависимости погрешности метода от выбора итерационного параметра и шага сетки одновременно. Пример графической обработки результатов этой серии методических расчетов, наглядно иллюстрирующий эффективность итераций, показан на рис. 2.4.

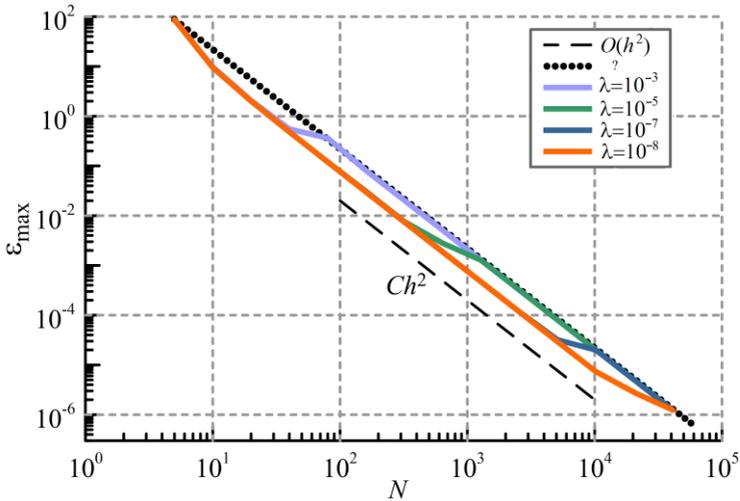


Рис. 2.4. Пример графика, иллюстрирующего результаты анализа  $\varepsilon_{\max}(N, \lambda)$  – зависимости погрешности приближенного решения от изменения шага сетки и итерационного параметра

Если возможно, рассмотрите на первом этапе ту же самую схему, но с минимумом итераций, используйте полученное решение наряду с точным решением (если оно известно) для оценки эффективности итерационного процесса. Представьте погрешности в виде таблицы  $\varepsilon(h, \lambda)$  и графически, проанализируйте их поведение в зависимости от изменения шага сетки и итерационного параметра. Следует ответить на ряд вопросов: гарантирует ли уменьшение  $\lambda$  снижение погрешности приближенного решения при фиксированном  $h$  и зависит ли этот процесс от  $h$ ? какие значения  $h$  и  $\lambda$  можно определить как оптимальные для решаемой задачи и почему? Удачный выбор итерационного параметра при оптимальном шаге расчетной сетки позволяет во многих задачах достичь серьезного уточнения решения. Требу-

ется только установить, какова цена этого уточнения: необходим подсчет количества итераций и затраченного процессорного времени.

Кстати, при достаточно тщательном анализе итерационного процесса совсем нетрудно ответить на вопрос: а что это за пунктирная линия на рис. 2.4?

4. Проведение больших серий численных экспериментов требует тщательного и своевременного документирования полученных результатов в виде *научного отчета*. Это способствует лучшей организации исследований и, в конечном итоге, более глубокому пониманию технологии моделирования, свойств используемых численных методов и самой динамической системы. Научный отчет должен состоять из

- а) краткого описания постановки решаемой задачи,
- б) описания результатов методических расчетов с иллюстрациями и ответами на поставленные вопросы,
- в) основных выводов, показывающих достоинства и недостатки используемых численных методов,
- г) результаты численного анализа решений.

Старайтесь минимизировать число графиков и таблиц, делая их более информативными, наглядными, облегчающими численный анализ решения задачи. Наиболее ответственным этапом работы является анализ полученного решения задачи – он требует внимательного, заинтересованного и критического взгляда исследователя. Любое отклонение полученного результата от теоретических представлений должно быть исследовано и обосновано дополнительными численными экспериментами.

## 2.6. ПРИМЕРЫ ТЕСТОВЫХ ЗАДАЧ

---

В качестве тестовых задач предлагается рассмотреть задачи, которые традиционно используются в учебном процессе на ММФ НГУ (см., например, [11, 17]).

### 2.6.1. ТЕСТОВАЯ ЗАДАЧА 1. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ ЛИНЕЙНОГО ОДУ

Дано ОДУ первого порядка

$$\frac{dy}{dx} = \varphi'_x(x) + \kappa(y - \varphi(x)), \quad x_0 \leq x \leq x_N, \quad (2.17)$$
$$y(x_0) = \varphi(x_0),$$

где  $\varphi(x)$  – заданная произвольная гладкая функция,  $\kappa$  – положительный параметр. Общее решение уравнения (2.17):  $y(x) = \alpha \exp(\kappa x) + \varphi(x)$ , при этом значение произвольной константы  $\alpha = 0$  для рассматриваемого начального условия, т.е. решением задачи Коши (2.17) является функция  $y(x) = \varphi(x)$ .

#### Задание.

1. Сформулируйте свою собственную задачу Коши (2.17):

а) выберите  $\varphi(x)$  в виде достаточно гладкой функции с участками роста и убывания на фиксированном интервале (примеры даны в таблице 3, размер интервала может быть скорректирован);

б) задайте начальное условие  $y(x_0) = \varphi(x_0)$  и определите аналитически функцию правой части (2.17), задайте  $\kappa \in [0, 5]$  – фиксированный вещественный положительный параметр,

в) расположите на интервале узлы сетки  $x_0 \leq x_i \leq x_N$ , пусть, например,  $h = (x_N - x_0)/N$ .

2. Для численного решения задачи используйте численные методы из разделов 2.3.2 и 2.4.3. Для каждого численного метода напишите программный код для вычисления в узлах сетки  $x_i$  приближенного решения  $y_i^h = y^h(x_i)$  при фиксированном заданном  $N$ . Предусмотрите вычисление локальной погрешности и оценку той же погрешности по правилу Рунге; для каждого  $N$  необходимо вычислять глобальную погрешность. Для проверки правильности работы программы провести тестовый вариант расчета, положив параметр  $\kappa = 0$ . Убедитесь, что программа не содержит грубых ошибок. Используйте готовую программу для проведения методических расчетов.

Таблица 3. Примеры точных решений для уравнения (2.17), заданных на интервале [1,12]	
1. $\varphi = \sin(2x) + \cos(x)$	7. $\varphi = \exp(\sin(x)) + \cos(2x)$
2. $\varphi = \sin(2\pi x) + \cos(x)$	8. $\varphi = \exp(1/x) + \cos(2x)$
3. $\varphi = \sin(x) + \cos(2\pi x)$	9. $\varphi = \sin(x) - \cos(4x)$
4. $\varphi = \sin(\ln(x)) + \cos(\pi x)$	10. $\varphi = \sin(2x) - \ln(x)$
5. $\varphi = \exp(-\sin(x)) - \cos(\pi x)$	11. $\varphi = \sin(x) - \ln(2x)$
6. $\varphi = \exp(\sin(2x)) + \cos(x)$	12. $\varphi = \sin(x) - 2\ln(4x)$

Замечание. Для оценки работы численного метода и алгоритма на нелинейной задаче может быть рассмотрена следующая постановка

$$\frac{dy}{dx} = \varphi'_x(x) + \kappa(y - \varphi(x))^\mu, \quad x_0 \leq x \leq x_N$$

$$y(x_0) = \varphi(x_0); \quad \mu = \text{const} > 0.$$

### 2.6.2. ТЕСТОВАЯ ЗАДАЧА 2. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ ЖЕСТКОЙ СИСТЕМЫ ОДУ

На интервале  $[0, X]$  задана система ОДУ 1-го порядка

$$\frac{du_1}{dx} = p_1 u_1 + p_2 u_2, \quad \frac{du_2}{dx} = p_2 u_1 + p_1 u_2 \quad (2.18)$$

с начальными условиями для компонент вектора  $\vec{u} = (u_1, u_2)$ :  $u_1(0) = u_{10} = \text{const}$ ,  $u_2(0) = u_{20} = \text{const}$ . Матрица  $\mathbf{A}$  данной системы является симметричной, имеет два вещественных различных собственных значения  $\lambda_1, \lambda_2$ . Общее решение системы (2.18) имеет вид ( $j = 1, 2$ ):

$$u_j(x) = 0.5 \cdot (u_{10} + u_{20}) \exp(\lambda_1 x) + (-1)^{j+1} 0.5 \cdot (u_{10} - u_{20}) \exp(\lambda_2 x).$$

Задание. Выбрать конкретные числа  $p_1, p_2$  так, чтобы система была жесткой ( $S^* > 100$ ), а также задать начальные значения компонент решения,  $u_{10} \neq u_{20}$ . Найти приближенное решение системы (2.18), воспользовавшись а) явным методом Рунге-Кутты 1-го порядка, б) неявным (А-устойчивым) методом Рунге-Кутты 1-го порядка, в) методом более высокого ( $p > 1$ ) порядка. Поль-

зуйтесь, если возможно, ранее оттестированным программным кодом.

Выполнить численные эксперименты, проводя расчеты на достаточно большом интервале  $[0, X]$ , продемонстрировать сходимость полученных численных решений на последовательности сеток (начиная с весьма малого числа узлов сетки). Оценить порядок сходимости и порядок точности методов.

Продемонстрировать проявления жесткости системы. Показать, что явный метод Эйлера для устойчивого счета действительно требует выбора шага  $h \approx 1/\max |\lambda_j|$ , а неявный метод свободен от этого ограничения. По результатам численных экспериментов оценить порядок точности и устойчивость используемого метода высокого порядка.

Пример:  $p_1 = -11$ ,  $p_2 = 9$ ,  $y_{10} = 5$ ,  $y_{20} = -3$ .

### 2.6.3. ТЕСТОВАЯ ЗАДАЧА 3. ДВИЖЕНИЕ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Пусть  $B$  – магнитное поле,  $m$ ,  $e$ ,  $c$  – масса, заряд частицы и скорость света соответственно. Положим также

$P = \frac{Be}{mc} = 2\pi$ ,  $T = \text{const}$ ,  $0 \leq t \leq T$ . Движение частицы в постоянном магнитном поле в декартовой системе координат определяется вектором скорости  $\vec{v} = (u, v)$  (эйлерово описание движения) и следующей системой уравнений движения частицы:

$$\frac{du}{dt} = Pv, \quad u(0) = U_0, \quad (2.19a)$$

$$\frac{dv}{dt} = -Pu, \quad v(0) = V_0. \quad (2.19b)$$

Точное решение системы (2.19):

$$u_T(t_i) = U_0 \cos(Pt_i) + V_0 \sin(Pt_i),$$

$$v_T(t_i) = V_0 \cos(Pt_i) - U_0 \sin(Pt_i).$$

Пространственные координаты  $(x, y)$  частицы в каждый последовательный момент времени  $t_i$  ( $i = 0, 1, 2, \dots$ ) определяют траекторию частицы с лагранжевыми координатами  $(x_0, y_0)$ . Зная компоненты скорости в декартовой системе координат, можно вычислить траекторию из решения задачи Коши

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= u, & x(0) &= x_0, \\ \frac{dy}{dt} &= v, & y(0) &= y_0. \end{aligned}$$

Точное решение этой задачи известно:

$$x_T(t_i) = x_c - v_T(t_i)/P, \quad y_T(t_i) = y_c + u_T(t_i)/P,$$

где  $(x_T(t_i) - x_c)^2 + (y_T(t_i) - y_c)^2 = R_c^2$ ,  $R_c = \frac{1}{P} \sqrt{U_0^2 + V_0^2}$ .

Имея численное решение задачи (2.19), траекторию частицы  $(x_0, y_0)$  можно вычислить, пользуясь формулами

$$x(t_i) = x_c - v(t_i)/P, \quad x_c = x + v/P = \text{const} = x_0 + V_0/P;$$

$$y(t_i) = y_c + u(t_i)/P, \quad y_c = y - u/P = \text{const} = y_0 - U_0/P.$$

Для оценки погрешности вычисления компонент вектора скорости и траектории рекомендуется использовать векторные нормы

$$Norm_C(u) = \max_i |u_i - u_T(t_i)| = C_1 h^s,$$

$$Norm_C(v) = \max_i |v_i - v_T(t_i)| = C_2 h^s$$

или матричные нормы  $Norm_C(\rho) = \max_i |\rho_i| = \frac{h^s}{P} \sqrt{C_1^2 + C_2^2}$ , где

$$\rho_i^{(1)} = \sqrt{(x_i - x_T(t_i))^2 + (y_i - y_T(t_i))^2},$$

$$\rho_i^{(2)} = \sqrt{\left[ (u_i - u_T(t_i))^2 + (v_i - v_T(t_i))^2 \right] / P^2}.$$

**Задание:** Задав начальные значения  $x_0, y_0, U_0, V_0$ , вычислить приближенно вектор скорости и траекторию частицы. Найти собственные значения  $\lambda_1, \lambda_2$  матрицы  $A$  путем решения ее характеристического уравнения. Выполнить методические расчеты и убедиться, что погрешность стремится к нулю в соответствии с порядком, предписанным теорией. Представить результаты в виде интегральных кривых и в виде фазовых траекторий на фазовой плоскости  $(x, y)$  и  $(u, v)$ . Проанализировать закон движения частицы.

## 2.7. ПРИМЕРЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАДАНИЙ

---

В этом разделе представлена коллекция минимальных математических моделей из разных областей науки – от механики до социологии. Задания составлены на основе анализа публикаций [18–23] и ряда других источников. Все модели отражают современное

менное состояние научных исследований в области создания математических моделей трудноформализуемых объектов. Все задачи апробированы и доступны для реализации в ходе практических занятий в учебной аудитории или для самостоятельной работы.

### 2.7.1. РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ ОДУ 2-ГО ПОРЯДКА. ЗАДАЧА О КОЛЕБАНИИ ФИЗИЧЕСКОГО МАЯТНИКА

Существует такая колебательная система, как физический маятник. Физическим маятником принято называть твердое тело, которое может совершать колебания вокруг неподвижной горизонтальной оси под действием силы тяжести. Описание движения физического маятника приводит к ОДУ 2-го порядка

$$\lambda \frac{d^2\theta}{dt^2} = -g \sin(\theta),$$

из которого может быть вычислено изменение во времени угла отклонения маятника  $\theta$  от положения равновесия (здесь  $g$  – ускорение свободного падения,  $\lambda$  – приведённая длина маятника). В результате процедуры обезразмеривания можно перейти к задаче Коши для модельного уравнения 2-го порядка следующего вида:

$$\frac{d^2u}{dt^2} = -\sin(u), \quad 0 \leq t \leq 4\pi k \quad (k=1, 2, \dots) \quad (2.20)$$

$$u(0) = 1, \quad \frac{du}{dt}(0) = 0$$

Задание. Требуется решить задачу (2.20) путем сведения к системе ОДУ 1-го порядка и привлечения для ее решения соответствующих численных методов решения задачи Коши. Для про-

верки качества численного алгоритма рекомендуется сначала решить модельную задачу 2.6.3, для которой известно точное решение (в рассматриваемой задаче при малых  $\theta$  имеем  $\sin(\theta) \approx \theta$ ). Пользуясь проверенным на модельной задаче численным алгоритмом и сведениями о поведении решения, решите нелинейную задачу (2.20). Проиллюстрируйте полученные решения. Сопоставьте решения модельной и нелинейной задач и выясните, в чем проявляется влияние нелинейности задачи.

### 2.7.2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЛИНЕЙНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Движение бруска, связанного с пружиной при наличии трения, задается дифференциальным уравнением второго порядка

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + k \frac{dx}{dt} + lx = 0, \quad (2.21)$$

где  $x(t)$  – отклонение от положения равновесия,  $m$  – масса бруска,  $k$  – коэффициент трения,  $l$  – коэффициент жесткости пружины. Будем считать, не нарушая общности, что  $m=1$ .

Начальные условия  $x(0) = x_0$ ,  $\frac{dx}{dt}(0) = y_0$  определяют начальное положение и начальную скорость движения бруска соответственно.

Задание: Решить задачу Коши (2.21) путем сведения к задаче Коши для системы ОДУ 1-го порядка и ее численного решения. Рекомендуется исследовать зависимость решения задачи от начальных условий (положив для начала  $x_0 = y_0 = 0$ ), а также от значений параметров  $l$  и  $k$ , принимая во внимание, что

а) в отсутствие трения ( $k=0$ ) брусок совершает гармонические колебания по закону

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{y_0}{\omega} \sin(\omega t), \quad \text{где } \omega = \sqrt{l} \text{ - частота колебаний бруса;}$$

б) слабое трение ( $0 < k < 2\omega$ ) ведет к затуханию колебаний, решение имеет вид

$$x(t) = \left[ x_0 \cos(\omega_1 t) + \frac{2y_0 + x_0 t}{2\omega_1} \sin(\omega_1 t) \right] e^{-\frac{1}{2}kt}, \quad \omega_1 = \sqrt{\omega^2 - \frac{k^2}{4}} \text{ и,}$$

следовательно,  $\lim_{t \rightarrow \infty} (x(t)) = 0$ ;

в) при сильном трении ( $k > 2\omega$ ) система стремится к положению равновесия без колебаний.

Сделайте выводы об особенностях движения бруска в описанных условиях.

### 2.7.3. ЗАДАЧА О ДВИЖЕНИИ ЖИДКОСТИ ПРИ ЕЕ НАГРЕВЕ СНИЗУ. СИСТЕМА ЛОРЕНЦА

Рассмотрим слой жидкости толщины  $H$ . Известно, что при нагревании жидкости снизу возникает градиент температуры, вследствие чего теплая жидкость всплывает, а холодная опускается. При этом в слое жидкости могут возникать горизонтальные цилиндрические валы, вращающиеся навстречу друг другу, а при увеличении подогрева каждый из них распадается еще на два вала меньшего размера и т. д., так что в пределе может возникать хаос (турбулентность). Этот процесс можно приближенно описать следующей нелинейной системой ОДУ:

$$\frac{dx}{dt} = \sigma(y - x), \quad (2.22a)$$

$$\frac{dy}{dt} = x(r - z) - y, \quad (2.22б)$$

$$\frac{dz}{dt} = xy - bz. \quad (2.22в)$$

Предполагается, что в системе (2.22)  $t$  – время;  $x$ ,  $y$  и  $z$  – переменные, описывающие скорость вращения водяных валов, распределение температуры по горизонтали и вертикали соответственно;  $r$ ,  $\sigma$ ,  $b$  – параметры системы, пропорциональные числу Прандтля, числу Рэлея и определенным физическим размерам самого слоя, соответственно.

В качестве начальных данных задаются произвольные константы, включая  $x(0) = 0$ ,  $y(0) = 0$ ,  $z(0) = 0$ .

Заметим, что система (2.22) известна мировой науке как система Лоренца, который, экспериментируя вместе с коллегами, впервые открыл для этой детерминированной системы сложный динамический режим функционирования, известный теперь как странный аттрактор Лоренца. Задание предполагает, что путь Лоренца может пройти любой, кто возьмется за его выполнение.

**Задание:** Выбрать численный алгоритм решения системы (2.22) на основе серии методических расчетов. Рекомендуется выполнить численный анализ решений системы (2.22) при постоянных значениях параметров  $\sigma=10$  и  $b=8/3$  и изменении параметра  $r$  от 0 до 500:

1. рассмотреть случай  $0 < r < 1$ , показать, что решение имеет единственную устойчивую неподвижную точку в начале коор-

динат  $O(0,0,0)$ ; при фиксированном  $r$  исследовать зависимость решения от остальных параметров системы;

2. показать, что при  $1 < r < 13,926$  решение имеет еще две неподвижные стационарные точки  $O_1$  и  $O_2$ , координаты которых совпадают с аналитическим решением

$$x = \pm\sqrt{b(r-1)}, \quad y = \pm\sqrt{b(r-1)}, \quad z = r-1,$$

при фиксированном  $r$  исследовать зависимость решения от остальных параметров системы;

3. рассмотреть детально случай  $r \approx 13.926$ , а также  $r \approx 24.74$ , когда решение в фазовом пространстве представляют собой странный аттрактор; изучите, как ведут себя фазовые траектории, имеющие начало в окрестности этого аттрактора;

4. продемонстрировать хаотический режим при  $24.74 < r < 148.8$ ;

5. показать, как изменяется решение при  $148.8 < r < 500$ . Действительно ли в фазовом пространстве вместо аттрактора Лоренца образуется предельный цикл, а движение в системе вновь становится периодическим?

Рекомендуется представить результаты расчетов сначала в виде зависимостей всех неизвестных задачи от времени, а затем в фазовом трехмерном пространстве (т.е. в системе координат  $(x, y, z)$ ); исследовать зависимость полученных численных решений и бифуркационных значений параметров от используемого численного метода; попытаться дать физическую интерпретацию полученных решений.

#### 2.7.4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЧИВОСТИ СОСТОЯНИЙ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ЗЕМЛИ: 4D-МОДЕЛЬ ДИНАМО РИКИТАКЕ

Модель динамо — одна из физических моделей, которая описывает многие особенности магнитного поля Солнца и планет земной группы, в том числе смену магнитных полюсов. При этом изучение процессов проводится на астрономических масштабах времени. Согласно теории динамо, магнитное поле возбуждается в результате конвективного движения в жидком (электропроводящем) ядре планеты (небесного тела); конвективные и турбулентные потоки плазмы действуют подобно динамо-машине, преобразуя механическую энергию в энергию магнитного поля.

Хорошо известно, что магнитное поле Земли многократно и нерегулярно меняет свою полярность. На сегодняшний день шкала полярности геомагнитного поля восстановлена более чем за 1700 миллионов лет, что составляет около половины возраста Земли. За это время зарегистрировано 593 переброса магнитного поля, причем время между двумя перебросами колеблется в интервале от десятков тысяч до сотен миллионов лет, демонстрируя хаотическое поведение, лишённое какой-либо периодичности.

В 60-х годах XX века японский геофизик Рикитаки, объясняя явление непредсказуемого переворота магнитного поля Земли, предложил каждую рассматриваемую конвективную ячейку или вихрь в этом физическом процессе считать одним диском динамо. Тогда, согласно модели простейшего двухдискового динамо, ток от диска 1 перетекает в диск 2, генерируя магнитное поле. Ток от диска 2, в свою очередь, усиливает магнитное поле около диска 1. Токи, а, следовательно, и магнитные поля колеблются сначала около некоторого стационарного состояния, а затем, увеличивая амплитуду, внезапно начинают испы-

тывать колебания уже вокруг другого стационарного состояния. Рикитаке предложил следующую простую нелинейную математическую модель этого процесса (так она выглядит в безразмерном виде):

$$\frac{dx_1}{dt} = -\nu x_1 + y_1 x_2, \quad (2.23a)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -\nu x_2 + y_2 x_1, \quad (2.23б)$$

$$\frac{dy_1}{dt} = 1 - \sigma_1 y_1 - x_1 x_2, \quad (2.23в)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = 1 - \sigma_2 y_2 - x_1 x_2, \quad (2.23г)$$

где  $\nu$ ,  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  – параметры модели,  $x_1$  и  $x_2$  – безразмерные токи первого и второго дисков,  $y_1$  и  $y_2$  – безразмерные угловые скорости дисков,  $\sigma_1, \sigma_2 > 0$  – коэффициенты трения в дисках,  $\nu > 0$  – омическая диссипация.

Задача интересна тем, что для решений данной системы при различных значениях параметров  $\nu$ ,  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  характерен переход от простейших динамических режимов к много более сложным, когда наблюдается хаотическое поведение, и наоборот, от режима хаоса к затухающим колебаниям с неподвижной предельной точкой (т.е. хаотический режим переброса магнитного поля сменяется стационарным значением магнитного поля с относительно малыми колебаниями).

Задание: Выполнить численное исследование изменчивости состояний магнитного поля Земли с применением модели (2.23). В качестве начальных условий положить:  $x_1(0) = 1$ ,  $x_2(0) = -1$ ;

для  $y_1, y_2$  можно задать любые константы, например,  $y_1(0) = -1$ ,  $y_2(0) = 2$ . Для начала положить  $t \in [0, 10000]$ , а при изучении фазовых портретов необходимо рассматривать как можно более широкий диапазон значений  $t$ .

Изучить поведение решений системы (2.23) при постоянных значениях параметров  $\sigma_1 = 0.0022$ ,  $\sigma_2 = 0.002$  в зависимости от параметра  $\nu \in [10^{-3}, 10]$  (учитывая, что этот интервал признается характерным для условий Земли). Для каждого из характерных случаев исследовать вопрос о зависимости полученных состояний системы от начальных условий.

Для нескольких значений  $\nu \in [10^{-3}, 10]$  выполнить расчеты, варьируя поочередно коэффициенты трения относительно значений  $\sigma_1 = 0.0022$ ,  $\sigma_2 = 0.002$ . Цель: получить наглядную картину перехода из одного фазового состояния в качественно другое, оценить бифуркационные значения  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ .

Проводя расчеты при  $\sigma_1 = 0.009$ ,  $\sigma_2 = 0.0009$ , можно показать, что при  $\nu = 0.66$  в системе наблюдается единственный предельный цикл в фазовом пространстве  $(x_1, x_2, y_1)$ , а в окрестности значения  $\nu = 0.7$  наблюдается бифуркация удвоения периода.

Пронаблюдать дальнейшее изменение фазовой картины, постепенно изменяя  $\nu$ . Проверить, действительно ли решение переходит из хаоса в стационарный режим с устойчивой предельной точкой? Изучить фазовые портреты этих решений в фазовых пространствах, образуемых другими наборами переменных.

2.7.5. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЧИВОСТИ СОСТОЯНИЙ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ЗЕМЛИ: 3D-МОДЕЛЬ РИКИТАКЕ

Рассмотреть 3D-модель Рикитаке, являющуюся аналогом модели (2.23), где  $A = y_1 - y_2$ :

$$\frac{dx_1}{dt} = -\nu x_1 + y x_2, \quad (2.24a)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -\nu x_2 + (y - A) x_1, \quad (2.24б)$$

$$\frac{dy}{dt} = 1 - x_1 x_2. \quad (2.24в)$$

Легко показать, что система уравнений (2.24) имеет стационарные решения вида

$$x_1 = \pm K, \quad x_2 = \pm K^{-1}, \quad y = y_1 = \nu K^2, \quad y_2 = \nu K^{-2}, \quad \text{если} \\ A = \nu(K^2 - K^{-2}) > 0.$$

Рассмотреть те же диапазоны параметров, что и в задаче 2.7.4. Рассмотреть подробно в расчетах случай  $K=2$  (это значение соответствует условиям Земли) при  $\nu=0.1; 0.6; 1$ . Действительно ли в фазовом пространстве  $(x_1, x_2, y)$  точки с координатами  $(K, K^{-1}, \nu K^2)$  и  $(-K, -K^{-1}, \nu K^2)$  являются «особыми» точками?

Проанализировать, как соотносятся решения задачи (2.24) с решениями задачи (2.23).

## 2.7.6. МОДЕЛЬ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ СРЕДНЕЙ ФИРМЫ

Модель функционирования средней фирмы (модель Шаповалова) описывает эволюцию величин кредита  $x$ , капитала  $y$  и численности сотрудников  $z$  с возможностью к саморегуляции с помощью управляющих положительных параметров  $\alpha, \beta, \gamma, \mu, \sigma, \delta$ :

$$\frac{dx}{dt} = -\sigma x + \delta y, \quad (2.25a)$$

$$\frac{dy}{dt} = \mu(x + y) - \beta xz, \quad (2.25б)$$

$$\frac{dz}{dt} = \alpha xy - \gamma z. \quad (2.25в)$$

**Задание.** Разработайте численный алгоритм решения задачи Коши для нелинейной системы (2.25). Разработайте компьютерную программу, протестируйте ее. Проведите методические расчеты, направленные на выбор численного метода этой задачи. Проведите численные исследования зависимости численного решения от начальных условий и значений параметров.

Известно, что устойчивой работе фирмы соответствует выход фазовой траектории системы (2.25) на устойчивое предельное множество – аттрактор (неподвижную точку или предельный цикл). Покажите, что при любых положительных значениях параметров  $\alpha, \beta, \gamma, \mu, \sigma$  и  $\delta$  система (2.25) имеет три особые точки:

$$O_0 = (0, 0, 0), \quad O_{1,2} = \left( \pm \sqrt{\frac{\gamma\mu(\delta + \sigma)}{\alpha\beta\sigma}}, \pm \sqrt{\frac{\gamma\mu\sigma(\delta + \sigma)}{\alpha\beta\delta^2}}, \frac{\mu(\delta + \sigma)}{\beta\delta} \right).$$

Покажите также, что при изменении параметра  $\gamma \in [0; 10]$  и  $\alpha = 5; \beta = 8; \delta = 1; \mu = 2.1; \sigma = 4.1$  в системе (2.25) может возникнуть хаотический аттрактор, напоминающий аттрактор Лоренца. Попробуйте ответить на вопрос: какая из полученных траекторий

называется гомоклинической бабочкой? Дайте экономическую интерпретацию полученных решений.

#### 2.7.7. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАЗВИТИЯ СОЦИАЛЬНОГО ПРОЦЕССА. «БИБЕР-ЛИХОРАДКА»

Чрезмерная увлеченность кумирами – характерное свойство человеческой цивилизации – подобна инфекционному заболеванию и, предположительно, описывается одними и теми же моделями. Для примера рассматривается увлеченность творчеством и личностью певца Дж. Бибера, сумевшего покорить сердца миллионов людей. Но на его месте легко может оказаться любой другой истинный кумир сегодняшнего дня.

Если вдуматься, то «Бибер-лихорадка» – это современное социальное «инфекционное» заболевание, распространяющееся преимущественно в молодежной популяции по всему миру, имеет характерные признаки других инфекционных заболеваний: быстрый темп распространения в больших популяциях, в конечном счете – выздоровление, но с «памятными» рубцами (в виде неадекватных татуировок и т.п.). Это заболевание является очень «заразным». Основные симптомы заболевания: уход от действительности и чрезмерные траты времени на Дж. Бибера, чрезмерные покупки бесполезных товаров и даже неконтролируемый плач и/или крики у увлеченных Бибером.

Рассмотрим популяцию, которая состоит из чувствительных к лихорадке ( $S$ ) и Бибер-инфицированных ( $B$ ) особей. Кроме того, в отдельную группу ( $R$ ) выделим выздоровевших особей с «иммунитетом» к инфекции, но их «иммунитет» может быть вновь утрачен. Математическая модель распространения такой инфекции имеет следующий вид:

$$\frac{dS}{dt} = \pi - \beta SB - \mu S, \quad (2.26a)$$

$$\frac{dB}{dt} = \beta SB - \mu R - bB, \quad (2.26б)$$

$$\frac{dR}{dt} = bB - \mu R. \quad (2.26в)$$

Начальные данные и рекомендуемые значения параметров модели (2.26) представлены с табл. 4.

Суть модели состоит в том, что особи заражаются через контакт с инфицированными лихорадкой (скорость передачи инфекции зависит от  $\beta$ ). Новые особи попадают в популяцию Бибера-зависимых с постоянной скоростью  $\pi$  и выходят из нее со скоростью  $\mu$ , пропорциональной  $S$ . Восприимчивые могут заразиться, а также соскучиться по Биберу или заскучать от Бибера со скоростью  $b$ . Отметим, что если  $\Sigma = S + B + R$  – это вся целевая аудитория, то  $\frac{d\Sigma}{dt} = \pi - \mu\Sigma$ . Отсюда следует, что в долгосрочной перспективе вся популяция будет приближаться к значению  $\Sigma = \pi / \mu$ . Продолжительность «жизни» в модели составляет не менее 12 лет, если мы рассматриваем особей в возрастном диапазоне 5–17 лет.

*«Если все это выглядит слишком странно для вас, то это простое упражнение может помочь: "S" – представьте себе любопытную молодую девушку; "B" – та же молодая девушка исто-во кричит на концерте; и "R" – представьте себе угрюмого под-ростка, который уже не будет кричать от восторга, но все еще не откажется пойти на концерт» [21].*

Таблица 4. Начальные условия и примерные значения параметров моделей (2.26), (2.27)					
$S(0)$	1500	чел.	$\mu$	1/144	месяц <sup>-1</sup>
$B(0)$	3	чел.	$b$	[1/24; 2]	месяц <sup>-1</sup>
$R(0)$	0	чел.	$P$	2	месяц <sup>-1</sup>
$\pi$	10	чел. мес. <sup>-1</sup>	$N$	1	месяц <sup>-1</sup>
$\beta$	$8.3 \cdot 10^{-4}$	чел. <sup>-1</sup> мес. <sup>-1</sup>	$\varepsilon$	0.75	чел. <sup>-1</sup> мес. <sup>-1</sup>

Известно, что модель (2.26) имеет два стационарных состояния равновесия: безрецидивное  $(S_0, B_0, R_0) = \left( \frac{\pi}{\mu}, 0, 0 \right)$  и эндемичное, т.е. характерное для эпидемии

$$(S_0, B_0, R_0) = \left( \frac{r}{\beta}, \frac{br}{\mu(b + \mu)}, \frac{r}{(b + \mu)} \right), \text{ где } r = \pi - \frac{\mu(b + \mu)}{\beta}.$$

**Задание.** Разработайте численный алгоритм решения задачи Коши для нелинейной системы (2.26). Разработайте компьютерную программу, оттестируйте ее. Проведите методические расчеты, направленные на выбор численного метода этой задачи. Проведите численные исследования зависимости численного решения от начальных условий и значений параметров.

В ходе численных экспериментов можно рассмотреть два сценария для скорости разочарования (скуки): медленный –  $b = 1/24$  (фанат заскучает через 2 года) и быстрый –  $b = 2$  (фанат заскучает через 2 недели). Считается, что медленный сценарий гораздо более вероятен и более инфекционен, чем корь (которая считается сейчас самым инфекционным заболеванием), поэтому быстрый сценарий предлагается рассматривать только для целей сравнения. Интересно, а каким в реальности должно быть  $b$ ? Рассмотрите его.

Требуется показать также, что при достаточно больших значениях времени численные решения задачи выходят на эти два стационарных состояния; изучить зависимость от начальных условий для переменных  $S$ ,  $B$ ,  $R$ , в том числе рассмотрев варианты сверхмаленьких и сверхбольших популяций.

Интереснее всего рассмотреть свои собственные примеры социальных эпидемий, которые развиваются по рассмотренной математической модели.

Можно также усовершенствовать модель, в том числе используя известные модификации SIR-модели.

#### 2.7.8. МОДЕЛЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ «К-РОР-ЛИХОРАДКИ»

«*K-pop*» (аббревиатура от *Korean pop*) — музыкальный жанр, возникший в Южной Корее и вобравший в себя элементы западного электропопа, хип-хопа, танцевальной музыки и современного ритм-н-блюза. Появившись изначально как музыкальный жанр, К-рор превратился в масштабную музыкальную субкультуру с миллионами поклонников во всём мире»<sup>Wiki</sup>. Можно смело утверждать, что «К-лихорадка» – это современное социальное «инфекционное» заболевание, мало чем отличающееся от Бибер-лихорадки.

Рассмотрим популяцию, которая состоит из чувствительных к лихорадке ( $S$ ) и К-инфицированных ( $B$ ) особей. Кроме того, в отдельную группу ( $R$ ) выделим выздоровевших особей с «иммунитетом» к инфекции, но их «иммунитет» может быть вновь утрачен. Будем учитывать также влияние СМИ на распространение лихорадки: предполагаем, что общая сумма средств массовой информации –  $M$ , часть из них К-положительны –  $P$ , а остальные К-отрицательные –  $N$ .

Математическая модель представляет собой систему ОДУ:

$$\frac{dS}{dt} = \pi - \beta SB - \varepsilon PS + (1 - \varepsilon)NB - \mu S + \varepsilon PR - (1 - \varepsilon)NS, \quad (2.27a)$$

$$\frac{dB}{dt} = \beta SB + \varepsilon PS - (1 - \varepsilon)NB - \mu B - bB, \quad (2.27б)$$

$$\frac{dR}{dt} = bB + (1 - \varepsilon)NS - \mu R - \varepsilon PR, \quad (2.27в)$$

$$M = \varepsilon P + (1 - \varepsilon)N.$$

Особи «заражаются» через один из двух путей: через контакт с инфицированными лихорадкой (скорость передачи инфекции  $\beta$ ) или через положительное воздействие СМИ ( $\varepsilon P$ ). Новые особи попадают в популяцию К-зависимых с постоянной скоростью  $\pi$  и выходят из нее со скоростью  $\mu$ . Восприимчивые могут заразиться со скоростью  $\beta$  и соскучиться по К-рор или заскучать от К-рор со скоростью  $b$ . Часть СМИ (с коэффициентом пропорциональности  $\varepsilon$ ) является положительно настроенной. Положительные СМИ ( $P$ ) делают из К-восприимчивых особей фанатов, и делают отошедших от К-рор (инфицированных) снова открытыми для инфекции. Отрицательные СМИ ( $N$ ) воздействуют обратным образом.

Начальные условия и примерные значения параметров модели (2.27) представлены в таблице 3. Продолжительность жизни в модели составляет не менее 12 лет ( $1/\mu$ ), если мы рассматриваем особей в возрастном диапазоне 5–17 лет.

Задание. Разработайте численный алгоритм решения задачи Коши для нелинейной системы (2.27). Разработайте компьютерную программу, протестируйте ее. Проведите методические расчеты, направленные на выбор численного метода этой зада-

чи. Проведите численные исследования зависимости численно-го решения от начальных условий и значений параметров.

В ходе численных экспериментов рассматриваются два сценария для скорости разочарования (скуки): медленный –  $b = 1/24$  (фанат заскучает через 2 года) и быстрый –  $b = 2$  (фанат заскучает через 2 недели). Считается, что медленный сценарий гораздо более вероятен и более инфекционен, чем корь (которая, видимо, временно считается сейчас самым инфекционным заболеванием), поэтому быстрый сценарий предлагается рассматривать только для целей сравнения. Оценки могут расходиться с этой картиной, особенно если отвлечься от К-рор, а, например, рассмотреть Дж. Бибера (см. предыдущую задачу) или Битлз. Каким в этой реальности должно быть значение  $b$  в каждом из этих случаев? Какие еще параметры или новые факторы могут быть полезны при описании этих трех сценариев лихорадки?

Рекомендуется изучить зависимость от начальных условий для переменных  $S, B, R$ , в том числе рассмотрев варианты сверхмаленьких и сверхбольших популяций. Дать оценку роли СМИ в этих предельных состояниях популяции.

Интересно также рассмотреть свои собственные примеры социальных эпидемий.

#### 2.7.9. МОДЕЛИ ДИНАМИКИ ЧИСЛЕННОСТИ ПОПУЛЯЦИЙ ПОД ВЛИЯНИЕМ ГЕНЕТИЧЕСКОГО ФАКТОРА (ЭКОГЕНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ)

Рассмотрим пример системы уравнений, которая описывает изменение численности популяций двух видов  $x$  и  $y$  под влиянием одного или двух эволюционирующих генетических признаков  $\alpha$ . Математическая модель 1 в виде задачи Коши для системы ОДУ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= x\left(1 - 0.5x - \frac{2}{7}\alpha_2^{-2}y\right), & x(0) &= x_0, \\ \frac{dy}{dt} &= y\left(2\alpha_2 - 0.5y - 3.5\alpha_2^2x\right), & y(0) &= y_0, \\ \frac{d\alpha_2}{dt} &= \varepsilon(2 - 7\alpha_2x), & \alpha_2(0) &= \alpha_{20}; & t &\in [0; T_k].\end{aligned}$$

Рекомендуемые диапазоны изменения начальных значений:  $0 \leq x_0 \leq 3$ ,  $0 \leq y_0 \leq 15$ , значение  $\alpha_{20}$  близко к нулю, например, можно положить  $\alpha_{20} = 0.0001$ ;  $T_k = 1500$ . Наличие малого параметра  $\varepsilon \leq 0.01$  в третьем уравнении системы показывает, что генетический признак меняется медленнее, чем численность популяций.

Одновременно можно рассмотреть и другой интересный пример модели популяций – это модель 2, в которой численность двух популяций  $x$  и  $y$  зависит от взаимодействия между ними и двух медленно меняющихся генетических признаков  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ :

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= x\left(2\alpha_1 - 0.5x - \alpha_1^2\alpha_2^{-2}y\right), & x(0) &= x_0, \\ \frac{dy}{dt} &= y\left(2\alpha_2 - 0.5y - \alpha_1^{-2}\alpha_2^2x\right), & y(0) &= y_0, \\ \frac{d\alpha_1}{dt} &= \varepsilon\left(2 - 2\alpha_1\alpha_2^{-2}y\right), & \alpha_1(0) &= \alpha_{10}, \\ \frac{d\alpha_2}{dt} &= \varepsilon\left(2 - 2\alpha_1^{-2}\alpha_2x\right), & \alpha_2(0) &= \alpha_{20}; & t &\in [0; T_k].\end{aligned}$$

Рекомендуемые диапазоны изменения начальных значений:  $0 \leq x_0 \leq 40$ ,  $0 \leq y_0 \leq 40$ , значение  $\alpha_{10}$  близко к нулю, например, можно положить  $\alpha_{10} = 0.0001$ ,  $\alpha_{20} = 10$ ;  $T_k = 2000$ ;  $\varepsilon \leq 0.01$ .

Задание: Разработайте численный алгоритм решения задачи Коши для нелинейной системы (2.25). Разработайте компьютерную программу, протестируйте ее. Проведите методические расчеты, направленные на выбор численного метода этой жесткой задачи.

Проведите численные исследования зависимости численного решения от начальных условий. Требуется изучить и представить наглядно зависимость численного решения задачи от начальных данных для  $x, y, \alpha_1, \alpha_2$  в указанных выше диапазонах их изменений; изучить зависимость решения задачи от значений параметров  $\varepsilon, T_k$ .

Имеет смысл сопоставить решения двух предложенных моделей при одинаковых значениях параметров (в диапазоне значений модели 2).

#### 2.7.10. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭВОЛЮЦИИ ПРОСТЕЙШЕЙ ЭКОСИСТЕМЫ

Рассмотрим экосистему, состоящую из кроликов, для которых имеется неограниченный запас пищи, и лис, которые для пропитания охотятся за кроликами. Классическая математическая модель Лотки–Вольтерра «хищник–жертва» описывает эту систему двумя нелинейными дифференциальными уравнениями 1-го порядка:

$$\frac{dr}{dt} = 2r - \alpha r f, \quad r(0) = r_0, \quad (2.28a)$$

$$\frac{df}{dt} = -f + \beta rf, \quad f(0) = f_0, \quad (2.286)$$

где  $t$  – время,  $r = r(t)$  – численность кроликов,  $f = f(t)$  – численность лис,  $\alpha, \beta$  – положительные константы.

Задание: Подобрать эффективный численный алгоритм для решения задачи Коши (2.28), написать программу и выполнить методические численные эксперименты. В качестве теста рекомендуется рассмотреть задачу при  $\alpha = \beta = 0$ .

Пусть сначала  $\alpha = \beta$ . Следует тщательно изучить зависимость численного решения задачи от начальных данных для  $r$  и  $f$ , а также от значений параметров, включая параметры  $\alpha$  и  $\beta$ . В частности, при исследовании этой динамической системы рекомендуется обратить внимание на ее поведение в окрестности  $\alpha = 0.01$  при различных значениях  $r_0$  и  $f_0$ , простирающихся от 2 до нескольких тысяч (важно, что эти значения не обязательно целые); в окрестности  $r_0 = 300$ , когда при некоторых  $f_0$  поведение системы становится периодическим.

С точки зрения критических состояний системы важно рассмотреть случай  $f_0 = 22$  с целью узнать, при каких значениях  $r_0$  кролики обречены на вымирание. Найдите начальные условия, которые обрекают на вымирание лис. Найдите начальные условия для случая  $r_0 = f_0$ , при которых вымирают оба вида.

Пусть теперь  $\beta < \alpha$ . Как это изменение повлияет на полученные результаты и выводы?

Модель (2.28) можно модифицировать с помощью замены первого уравнения в системе на уравнение  $\frac{dr}{dt} = 2\left(1 - \frac{r}{R}\right) - \alpha r f$ .

Предлагается выбрать какое-либо разумное значение  $R$  и вновь рассмотреть поставленные выше вопросы. В частности, интересно, как изменится решение при  $\alpha \rightarrow 0$ . Что произойдет с периодичностью решений?

#### 2.7.11. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГИПЕРПРОЛИФЕРАЦИИ КЛЕТОК КОЖИ ЧЕЛОВЕКА

*Пролиферация* — разрастание ткани путём размножения клеток делением. Целый ряд серьезных заболеваний человека связан с нарушениями в этом процессе, которые выражаются в гиперпролиферации – чрезмерном разрастании клеток. Кератиноциты – это основные клетки в наружном слое кожи человека (эпидермисе), нормальный жизненный цикл которых (рождение, развитие, размножение и естественная гибель) обеспечивает хорошее состояние кожи и внешнюю молодость.

Но кератиноциты способны также на гиперпролиферацию при определенных условиях, которые пока до конца не ясны медикам. Высказываются предположения, что ответственными за эти процессы являются онкогены. Онкогенами называют гены, вызывающие развитие опухолей. Кодированные такими генами белки принимают участие в регуляции процессов роста и дифференцировки, в особенности клеточной пролиферации.

Рассмотрим следующую модель гиперпролиферации кератиноцитов. На наиболее уязвимых участках кожи *кератиноциты* выделяют специальные вещества, вызывающие миграцию в кожу *T-лимфоцитов* (клеток иммунной системы), в которых активируются так называемые *хэлперы* и *супрессоры* иммунитета. Т-хэлперы и Т-супрессоры выполняют множество функций, в

том числе распознавание антигена и индукция иммунного ответа. Они также регулируют количество кератиноцитов на данном участке кожи.

Следующая информация является ключом к пониманию результатов моделирования в этом задании: известно, что в норме хэлперы и супрессоры (Т-лимфоциты) отсутствуют; на стадии хронического неострого течения болезни хэлперов и супрессоров достаточно много; на острой стадии заболевания много хэлперов; на стадии затухания заболевания – много супрессоров.

Пусть  $x$  – плотность субпопуляций пролиферирующих кератиноцитов,  $y$  – плотность субпопуляций активированных хэлперов,  $z$  – плотность субпопуляций активированных супрессоров. Динамику их взаимодействия описывает следующая система нелинейных ОДУ:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha_1 x - \alpha_2 xy - \alpha_3 xz - \alpha x^2, \quad (2.29a)$$

$$\frac{dy}{dt} = \kappa_1 xy - \kappa_2 yz - \kappa_3 y, \quad (2.29б)$$

$$\frac{dz}{dt} = \beta xz + \beta_1 yz - \gamma z \quad (2.29в)$$

при начальных условиях  $x(0) = x_0$ ,  $y(0) = y_0$ ,  $z(0) = z_0$ . Здесь  $\alpha$  – скорость ингибирования пролиферации кератиноцитов,  $\beta$  – скорость активации взаимодействующих с кератиноцитами супрессоров,  $\gamma$  – скорость гибели свободных супрессоров. Остальные параметры для простоты приняты равными 1.

Модель интересна тем, что стационарные решения (при фиксированных значениях параметров  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  это неподвиж-

ные точки в пространстве переменных  $(x, y, z)$  при  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \kappa_1 = \kappa_2 = \kappa_3 = \beta_1 = 1$  имеют достаточно ясный биомедицинский смысл (кроме неустойчивого тривиального решения):

- 1)  $x = y = z = 0$  - не имеет медицинского смысла,
- 2)  $x = \alpha^{-1}$ ,  $y = z = 0$  - базальное состояние, т.е. условная норма (Т-лимфоциты отсутствуют),
- 3)  $x = \gamma\beta^{-1}$ ,  $y = 0$ ,  $z = 1 - \alpha\gamma\beta^{-1}$  - состояние инволюции, т.е. затухания заболевания (много активированных супрессоров),
- 4)  $x = 1$ ,  $y = 1 - \alpha$ ,  $z = 0$  - острая стадия (много хэлперов),
- 5)  $x = \frac{2 - \gamma}{1 - \beta + \alpha}$ ,  $y = \frac{\gamma(1 + \alpha) - 2\beta}{1 - \beta + \alpha}$ ,  $z = \frac{1 - \gamma + \beta - \alpha}{1 - \beta + \alpha}$  - это хроническая фаза (много хэлперов и супрессоров).

При этом система (2.29) в зависимости от начальных условий и, главное - от значений параметров  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , переходит из одного стационарного состояния в другое через бифуркации решений.

**Задание:** Разработайте численный алгоритм решения задачи Коши для нелинейной системы ОДУ. Разработайте компьютерную программу, протестируйте ее. Проведите методические расчеты, направленные на выбор численного метода этой задачи. Проведите численные исследования зависимости численного решения от начальных условий и значений параметров.

На первом этапе численные эксперименты рекомендуется проводить при  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \kappa_1 = \kappa_2 = \kappa_3 = \beta_1 = 1$ . Следует проверить, что решения 1-5 действительно являются стационарными, изучить их устойчивость по отношению к вариациям начальных условий.

Следует обратить особое внимание на поведение системы вблизи значений  $\alpha = 0.15$ ,  $\beta = 0.4$ ,  $\gamma = 1.1$  и  $\alpha = 0.15$ ,  $\beta = 2$ ,  $\gamma = 0.8$ , а также исследовать зависимость решений задачи от значений параметров  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \beta_1$ .

#### 2.7.12. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОДОЛЬНОГО ВОЗМУЩЕННОГО ДВИЖЕНИЯ САМОЛЕТА

Рассматривается прямолинейный установившийся полет самолета, который осуществляется в процессе возмущенного движения без скольжения с небольшим отклонением параметров от начальных значений. В этом случае модель движения самолета распадается на две независимые системы, описывающие боковое и продольное движения. При особом выборе системы координат в условиях горизонтального полета для конкретных параметров самолета математическая модель продольного движения принимает вид линейной системы ОДУ:

$$\frac{dv}{dt} = -k_{v1}v + k_{v2}\alpha - k_{v3}\beta, \quad (2.30a)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = -k_{\alpha1}v - k_{\alpha2}\alpha + k_{\alpha3}\phi, \quad (2.30б)$$

$$\frac{d\beta}{dt} = \phi, \quad (2.30в)$$

$$\frac{d\phi}{dt} = -k_{\phi1}v - k_{\phi2}\alpha - k_{\phi3}\phi, \quad (2.30г)$$

где  $v$  – величина скорости,  $\alpha$  – угол атаки,  $\beta$  – угол между хордой крыла и горизонтальной плоскостью,  $t$  – время (все переменные обезразмерены). Рекомендуемые значения параметров, при которых система проявляет свойство жесткости, равны:

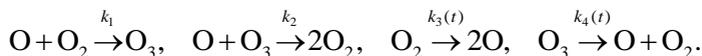
$$k_{v_1}=0.104, \quad k_{v_2}=0.043, \quad k_{v_3}=0.1, \quad k_{\alpha_1}=0.57, \quad k_{\alpha_2}=5.12, \quad k_{\alpha_3}=1, \\ k_{\phi_1}=12.574, \quad k_{\phi_2}=43.690, \quad k_{\phi_3}=9.672.$$

**Задание:** Разработайте численный алгоритм решения задачи Коши для жесткой нелинейной системы ОДУ. Разработайте компьютерную программу, протестируйте ее. Проведите методические расчеты, направленные на выбор численного метода этой задачи. Проведите численные исследования зависимости численного решения от начальных условий и значений параметров.

Нетрудно вычислить корни характеристического уравнения для системы (2.30), и также можно показать, что они разделяются по модулю на две группы:  $|\lambda_1| = |\lambda_2| \gg |\lambda_3| > |\lambda_4|$ . Это типично для горизонтального движения самолета: движение, отвечающее большим по модулю корням, называют короткопериодическим, а движение, отвечающее двум малым корням – длинно-периодическим. Можно показать, что система (2.30) является жесткой на любом отрезке  $[0, T]$ , где  $T > 0.1$  (это характерный размер пограничного слоя при движении самолета). Определенную трудность в этой задаче составляет поиск адекватных физике процесса начальных условий.

### 2.7.13. МОДЕЛЬ СУТОЧНОГО КОЛЕБАНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ОЗОНА В АТМОСФЕРЕ

Рассмотрим следующий механизм химических реакций:



И рассмотрим простейшую математическую модель этого механизма, которая основана на следующей системе ОДУ:

$$\frac{dy_1}{dt} = -k_1 y_1 y_2 - k_2 y_1 y_3 + 2k_3(t) y_2 + k_4(t) y_3, \quad y_1(0) = 10^6 \text{ cm}^{-3},$$

$$\frac{dy_2}{dt} = 0, \quad y_2(0) = 3.7 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3},$$

$$\frac{dy_3}{dt} = k_1 y_1 y_2 - k_2 y_1 y_3 - k_4(t) y_3, \quad y_3(0) = 10^{12} \text{ cm}^{-3}.$$

Здесь  $y_1$  – концентрация атомарного кислорода  $O$ ,  $y_2$  – концентрация молекулярного кислорода  $O_2$ ,  $y_3$  – концентрация озона  $O_3$ . Для простоты предполагается, что изменения концентрации  $O_2$  невелики. Значения констант скоростей химических реакций:  $k_1 = 1.63 \cdot 10^{-16}$ ,  $k_2 = 4.66 \cdot 10^{-16}$ , две другие константы отражают зависимость происходящих при производстве озона химических реакций от локальной освещенности участка земной поверхности (они обращаются в нуль ночью, резко возрастают на рассвете, достигают максимума в полдень и вновь зануляются на закате):

$$k_3 = \begin{cases} \exp(-c_3 / \sin(\omega t)), & \sin(\omega t) > 0, \quad c_3 = 22.62, \\ 0, & \sin(\omega t) \leq 0 \end{cases},$$

$$k_4 = \begin{cases} \exp(-c_4 / \sin(\omega t)), & \sin(\omega t) > 0, \quad c_4 = 7.601, \\ 0, & \sin(\omega t) \leq 0, \quad \omega = \pi / 43000 \text{ сек}^{-1}. \end{cases}.$$

Данная система является жесткой ночью и умеренно жесткой – в светлое время суток.

**Задание:** Для решения задачи привлечь метод, учитывающий специфику системы (жесткость, нелинейность). Написать программу и подобрать экспериментальным путем шаг сетки, обеспечивающий сходимость численных решений на последовательности сеток.

Рекомендуется решить задачу Коши сначала (в методических целях) на интервале времени, равном 2 суткам, и только потом исследовать зависимость численного решения задачи от малых возмущений начальных данных, а также от существенного отклонения  $c_3$  и  $c_4$  от заданных значений.

Серьезной задачей может стать изучение изменения концентрации озона в течение 1 месяца при заданных значениях параметров. Попытайтесь модифицировать модель таким образом, чтобы она адекватно описывала колебания концентрации озона в зависимости от суточных изменений освещенности поверхности Земли.

#### 2.7.14. МОДЕЛЬ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ БЕЛОУСОВА-ЖАБОТИНСКОГО

Реакция Белоусова–Жаботинского – одна из самых интересных и странных реакций в химии – периодическая реакция поразительной красоты и важности. До середины XX века в мире неорганической химии не было известно ни одного примера, когда химическая реакция периодически меняет своё направление. В то время как в биохимии подавляющее большинство процессов являются именно периодическими.

Б. П. Белоусову удалось детально рассчитать и соединить в одной колбе в нужных пропорциях ряд химических веществ, так что раствор начинает менять цвет с голубого до оранжевого и обратно с периодом колебания от долей секунды до десятков минут. А в плоской посуде по мелкому слою раствора ползут волны разного цвета. При описании этой реакции используют аналогии с биоритмами в живом организме: периодическую изменчивость в концентрациях реагирующих веществ сравнивают обычно с сердцебиением. Примечательно, что после нескольких десятков колебаний нужно подлить свежие растворы, чтобы

поддерживать химическую реакцию – совершенно так же, как нужно питать живой организм

В настоящее время этот класс химических реакций сильно расширился за счет реакций, в которых разные параметры состояния системы – цвет, концентрация веществ, температура и др. – изменяются периодически, образуя сложную пространственно-временную структуру реакционной среды. Оказалось, что при определенных условиях эти системы могут демонстрировать очень сложные типы динамических режимов – от периодических до хаотических. В частности, именно в реакции Белоусова–Жаботинского наблюдался первый экспериментальный странный аттрактор в химических системах.

Простейшая математическая модель реакции имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dt} &= k_1(y_2 - y_1y_2 + y_1 - k_2y_1^2), & y_1(0) &= 4, \\ \frac{dy_2}{dt} &= k_3(-y_2 - y_1y_2 + y_3), & y_2(0) &= 1.1, \\ \frac{dy_3}{dt} &= k_4(y_1 - y_3), & y_3(0) &= 4.\end{aligned}$$

**Задание:** Разработайте численный алгоритм решения задачи Коши для жесткой нелинейной системы ОДУ. Разработайте компьютерную программу, протестируйте ее. Проведите методические расчеты, направленные на выбор численного метода этой задачи. Проведите численные исследования зависимости численного решения от начальных условий и значений параметров.

Рекомендуется проводить расчеты в окрестности следующих значений параметров:  $k_1 = 77.27$ ,  $k_2 = 8.375 \cdot 10^{-6}$ ,  $k_3 = \frac{1}{77.27}$ ,

$k_4 = 0.161$ ;  $t \in [0, 300]$ . Для данной задачи характерным является наличие на рассматриваемом промежутке интегрирования не одного, а трех участков, на которых решение изменяется быстро. По этой причине шаг выбирается достаточно малым, что позволяет проводить расчеты на данных участках по явной схеме.

#### 2.7.15. ЗАДАЧА\*. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СООБЩЕСТВА «ПРОИЗВОДИТЕЛИ - ПРОДУКТ - УПРАВЛЕНЦЫ»

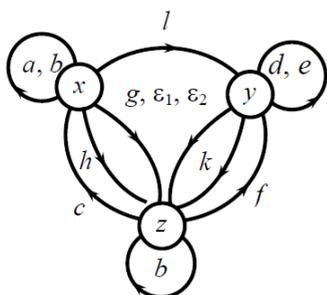
Задача требует особого внимания и по силам только тем, кто действительно заинтересован в работе с моделью, характеризующейся крайне высокой степенью неопределенности. Более подробное описание модели можно найти в монографии Ю. И. Неймарка [23].

Человеческое сообщество необычайно сложно, но можно попытаться описать только некоторые стороны этого бесконечно сложного организма, опираясь на какие-то присущие ему особенности. Например, для того чтобы жить, необходимо *производить ценности* – добывать пищу, а чтобы ее эффективнее добывать, нужна организованность; к тому же человеку нужно жилище, семья, орудия производства, зрелища и удовольствия. При реализации своих естественных потребностей человек вступает в конфликт с другими членами сообщества, имеющими свои потребности, и, вместе с тем, члены сообщества объединяются, чтобы эффективнее добывать то, что они хотят потреблять.

Выделим во всем этом три основных компонента: производители, продукт, управленцы. *Производители* – это те, которые непосредственно производят продукт и являются кормильцами себя самих и управленцев, *управленцы* не производят продукт, но способствуют его производству; *продукт* – это все то, что нужно для жизни человека, что он потребляет и чем он

пользуется. Придадим производителям, управленцам и продукту количественную определенность в виде величин, означающих численности производителей  $x$ , управленцев  $y$  и наличное количество используемого сообществом продукта  $z$ .

Грубое описание структуры и взаимоотношений в человеческом обществе дает простая модель «производители – продукт – управленцы», которой соответствует нижеследующая схема взаимных влияний.



Каждая стрелка этой схемы отвечает воздействию переменной, от которой она идет, на изменение той, к которой она ведет. Конечно, эта схема не раскрывает конкретного характера зависимостей и взаимных связей, она лишь указывает на их наличие и то, что мы хотим в нашей модели их учесть [23].

Математическая модель существования данного сообщества отражает факт объединения конкурирующих между собой людей в сообщество для более эффективного производства и получения необходимого для жизни продукта (модель 1)

$$\frac{dx}{dt} = (a - bx - ly + cz)x, \quad \frac{dy}{dt} = (-d - ey + fz)y$$

$$\frac{dz}{dt} = \begin{cases} F = g \frac{1 + \varepsilon_1 y}{1 + \varepsilon_2 y} \frac{x}{1 + \delta z} - hx - ky, & z > 0 \text{ или } z = 0, F > 0, \\ 0, & z = 0, F \leq 0, \end{cases}$$

или в более сложном виде (модель 2, в ней вводится дополнительный параметр  $m$ , учитывающий давление производителей на управленцев и возможность отличия от единицы параметра  $\mu$ , характеризующего эффективность производителей):

$$\frac{dx}{dt} = (a - bx - ly + cz)x, \quad \frac{dy}{dt} = (-d - mx - ey + fz)y$$

$$\frac{dz}{dt} = \begin{cases} F = g \frac{1 + \varepsilon_1 y}{1 + \varepsilon_2 y} \frac{\mu x}{1 + \delta z} - hx - ky, & z > 0 \text{ или } z = 0, F > 0, \\ 0, & z = 0, F \leq 0, \end{cases}$$

Здесь появилось множество параметров модели, о которых известно лишь следующее: это константы  $a, b, l, c, d, e, f, g, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \mu, \delta, h, k, m > 0$  в самом общем случае полноценного функционирования сообщества. Никогда ни один из параметров не может быть отрицательным, как не могут быть отрицательными  $x, y, z$ . Нулевые значения параметров или переменных задачи  $x, y, z$  соответствуют, как правило, некоторым предельным состояниям сообщества. Управление моделью, а значит, и жизнью сообщества, может быть осуществлено путем обдуманного изменения параметров.

*Поясним смысл некоторых неочевидных параметров:* управленцы заинтересованы в эффективности производителей  $\mu$ , совершенствовании технологии  $g$ , уменьшении доли производителей  $h$  в производимом продукте и увеличении своей доли  $k$ . Производители, напротив, заинтересованы в увеличении своей доли  $h$  и эффективности управления  $\varepsilon_1/\varepsilon_2$ . Реализация желаний управленцев ими исторически узурпирована: они – власть. Напротив, производители должны требовать реализации своих желаний и ограничения желаний управленцев.

### Задание:

1. Подобрать эффективный численный алгоритм для решения задачи Коши, основываясь на опыте выполнения тестовых задач. Написать программу и выполнить предлагаемые ниже численные эксперименты. Представлять результаты расчетов сначала в виде зависимостей всех неизвестных задачи от времени, а

затем в фазовом пространстве (в системе координат  $(x, y)$ ,  $(x, y, z)$  и т.д.).

2. Для проведения расчетов необходимо задать начальные значения  $x, y, z$  и значения параметров модели  $a, b, l, c, d, e, f, g, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \mu, \delta, h, k, m$ . Они неизвестны на данном этапе исследований, но могут быть определены на основе анализа результатов численных экспериментов.

Рекомендуется начать с поиска набора параметров модели 1, который, по крайней мере, обеспечивает неотрицательные значения численности популяций  $x, y, z$ .

3. Для одного из найденных разумных наборов параметров подобрать экспериментальным путем шаг сетки, обеспечивающий сходимость численных решений на последовательности сеток, вычислить порядок точности полученных решений.

4. Изучите, как ведут себя решения в окрестности точки  $x=y=z=x^*=y^*=z^*=0$  при варьировании начальных условий. Действительно ли эта точка является одним из устойчивых состояний системы?

5. Определенный интерес представляют количественные значения координат  $x^*, y^*$  и  $z^*$  для устойчивых сообществ, отвечающие устойчивым состояниям равновесия при  $m=0$ . Они легко могут быть найдены:

$$\text{а) } x^* = \frac{a}{b}, \quad y^* = z^* = 0;$$

$$\text{б) } x^* = \frac{a}{b} + \frac{c(g-h)}{\delta bh}, \quad y^* = 0, \quad z^* = \frac{g-h}{\delta h}.$$

Известно также, что основные устойчивые состояния и периодические колебания решения системы лежат в некотором параллелепипеде  $0 \leq x \leq A$ ,  $0 \leq y \leq B$ ,  $0 \leq z \leq C$ , где  $A$ ,  $B$ ,  $C$  определяются равенствами

$$\begin{aligned} \max(1, \varepsilon_1/\varepsilon_2) - (1 + \delta C)h &< 0, \\ -d - eB + fC &< 0, \quad a - bA + cC < 0. \end{aligned}$$

б) Дайте представление о зависимости решения задачи от значений параметров на основе анализа результатов расчетов, в которых производится поочередное варьирование каждого из параметров модели.

Проведите эти исследования по собственному усмотрению, опираясь на приведенные ниже результаты теоретического анализа возможных ситуаций в жизни сообщества (данные из глав 12 и 45 книги Ю. И. Неймарка [23]):

- удалось обнаружить, что с ростом уровня технологии  $g$ , помимо производителей  $x$ , возникает сначала продукт  $z$  и затем управленцы  $y$ , и что возникновение управленцев происходит независимо от параметра  $\varepsilon_1/\varepsilon_2$ , характеризующего их полезность.

- При низком уровне технологии, когда  $g < h$ , имеется единственное устойчивое состояние равновесия  $x = x^*$ ,  $y^* = z^* = 0$ , т. е. в обществе существуют одни только производители. При среднем уровне технологии, когда  $h < g < h(1 + \delta d/f)$ , появляется накопленный продукт  $z = z^*$ .

- При высоком уровне технологии, когда  $g > h(1 + \delta d/f)$ , появляются еще и управленцы. При этом устойчивое равновесие  $x = x^*$ ,  $y = y^*$ ,  $z = z^*$  может стать неустойчивым, и возникнут автоколебания. Это соответствует периодическому изменению всех переменных  $x$ ,  $y$  и  $z$ , причем на некоторых участках  $z$  может обращаться в нуль, что соответствует глубокому кризису.

занного следует, что возникновение управленцев не зависит от  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ , т.е. они возникают просто потому, что общество может их прокормить.

○ Интересно, что, в отличие от вожака стаи в первобытном или зверином сообществе, управленцы – аналог вожака – могут быть не только полезными, но и вредными. Но это не мешает их появлению и не ведет к исчезновению, если, конечно, уровень технологии  $g$  высок ( $g > h(1 + \delta d/f)$ ). Это, естественно, ведет к конфликту между управленцами и производителями и, возможно, внутри самих управленцев.

Следующая часть работы может быть направлена на анализ применимости модели 2 к описанию сценариев развития данного конфликта. Предположительно, конфликт ведет к действиям управленцев, способствующих их собственному укреплению, а не устранению. Добиться этого удастся разными путями, которые выходят за рамки модели. Остановить процесс очень трудно, поскольку он охватывает весь мир и сам себя поддерживает. Как раз в этом может просматриваться [23], по существу, кризис эволюции жизни.

Причина кризиса обнаруживается моделью 2, но может ли эта модель объяснить то, что предпринимает человечество для его преодоления? *Деятельность людей по управлению ситуацией гипотетически может быть смоделирована посредством управления параметрами модели.* Управление, в частности, можно осуществить через давление производителей на управленцев (член  $txu$  во втором уравнении модели 2). Увеличивая  $t$ , можно устранить неприемлемых управленцев или принудить их повысить свою эффективность. Этого же можно добиться, увеличивая  $h$ . Желание увеличить потребление производителями требует увеличения эффективности как производителей (увеличение  $\mu$ ), так и управленцев (увеличение  $\epsilon_1/\epsilon_2$ ). Сказанное следует из условия

$$\mu g > h \left( 1 + \frac{\delta(db + ma)}{fb - mc} \right),$$

отражающего наличие устойчивого равновесия и надлежащей зависимости  $m$  от  $\varepsilon_1/\varepsilon_2$ .

По результатам исследования рекомендуется сделать обоснованный вывод о том, адекватны ли модели 1 и 2, а также о том, на каком этапе моделирования могли возникнуть обнаруженные дефекты. Вывод, очевидно, сильно зависит от того, могут ли негативные сценарии быть преодолены через варьирование параметров модели.

Можно также рассмотреть варианты трансформации моделей, которые обеспечат эффективное управление сообществом для снижения рисков.

## ЛИТЕРАТУРА

---

1. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука. 1983. 616 с.
2. Самарский А. А. Введение в численные методы: Учебное пособие для вузов. М.: Наука. 1987. 288 с.
3. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы: Учебное пособие для вузов. М.: Наука. 1989. 432 с.
4. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы: Учебное пособие. М.: Наука. 1987. 600 с.
5. Годунов С. К., Рябенкий В. С. Разностные схемы (введение в теорию): Учебное пособие. М.: Наука. 1973. 400 с.
6. Калиткин Н. Н. Численные методы. М.: Наука. 1978. 512 с.

7. *Рябенский В. С.* Введение в вычислительную математику: Учебное пособие. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2000. 296 с.
8. *Хакимзянов Г. С., Черный С. Г.* Методы вычислений: В 4 ч.: Учеб. пособие / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2003. Часть 1. Численные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений. 160 с.
9. *Вабищевич П. Н.* Численные методы: Вычислительный практикум. М.: «ЛИБРОКОМ». 2010. 320 с.
10. *Ахмеров Р. Р.* Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Учебное пособие. Новосиб. Ун-т. Новосибирск. 1994. 100 с.
11. *Рычков А. Д.* Численные методы и параллельные вычисления: Учеб. пособие. СибГУТИ. Новосибирск. 2007. 144 с.
12. *Fadeev S. I., Korolev V. K., Gainova I. A., Medvedev A. E.* The package STEP+ for numerical study of autonomous systems arising when modeling dynamics of genetic-molecular systems // Proc. of the V Intern. Conf. on Bioinformatics of Genome Regulation and Structure. Novosibirsk, Russia. 2006. Vol. 2. P. 118–120.
13. *Ракитский Ю. В., Устинов С. М., Чернооруцкий И. Г.* Численные методы решения жестких систем. М.: Наука. 1979. 208 с.
14. *Хайрер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. Пер. с англ. М.: Мир. 1999. 685 с.
15. *Новиков Е. А., Шорников Ю. В.* Компьютерное моделирование жестких гибридных систем: монография. Новосибирск: Изд-во НГТУ. 2012. 450 с.

16. Новиков Е. А. Исследование  $(m, 2)$ -методов решения жестких систем // Вычислительные технологии. 2007. Т. 12. № 5. С. 103–115.
17. Михайлов А. П. Учебные задания вычислительной практики в компьютерном, классе: Учебное пособие/ Новосиб. ун-т. Новосибирск. 2003. 86 с.
18. Петров И. Б., Лобанов А. И. Лекции по вычислительной математике: Учебное пособие. М.: Интернет-Университет Информационных Технологий; БИНОМ. Лаборатория знаний. 2006. 523 с.
19. Странные аттракторы. Сборник статей. Пер. Я. Г. Синая, Л. П. Шильникова. М.: Мир. 1981. 253 с.
20. Гурина Т. А., Дорофеев И. А. Существование гомоклинической бабочки в модели устойчивости средней фирмы // Динамические системы. 2010. Вып. 28. С. 63–68.
21. Tweedle V., R. J. Smith? A mathematical model of Bieber Fever: The most infectious disease of our time? // In: Understanding the Dynamics of Emerging and Re-Emerging Infectious Diseases Using Mathematical Models. 2012. P. 157–177.
22. Лантев М. В., Никулин Н. К. Математическая модель паракринной регуляции пролиферативной активности эпидермиса при псориазе с участием Т-лимфоцитов // Биофизика. 2010. Т. 55. Вып. 2. С. 361–374.
23. Неймарк Ю. И. Математическое моделирование как наука и искусство: Учебник. Н. Новгород: Изд-во Нижегородского государственного университета. 2010.

---

## ГЛАВА 3. МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

---

### 3.1. ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ОСНОВНОЙ НАЧАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

---

Дифференциальными уравнениями с отклоняющимся аргументом называются дифференциальные уравнения, в которые неизвестная функции и ее производные входят, вообще говоря, при различных значениях аргумента. Наиболее распространенным и востребованным в математическом моделировании примером являются дифференциальные уравнения с запаздывающим аргументом. Хотя об уравнениях этого класса впервые заговорили еще в 18-м веке, только начиная с 50-х годов прошлого 20-го века теория дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом оформилась как самостоятельная область математического анализа. Это случилось, во-многом, благодаря усилиям А. Д. Мышкиса, Е. М. Райта, Р. Беллмана и Л. Е. Эльсгольца, которые одними из первых оценили значение и перспективы этой области и организовали ее всестороннее изучение. Тем не менее, уравнения с запаздыванием остаются молодой, т.е. малоизученной, но быстро развивающейся областью математики и до сегодняшнего времени. С самого начала следует обратить внимание на особенность постановки задачи с начальным условием, которая больше не называется задачей

Коши. Рассмотрим постановку задачи, следуя рассуждениям Л. Е. Эльсгольца, которые представлены в [1]. При этом оставляем в правой части уравнения явную зависимость от  $t$ , поскольку, как упоминалось выше, не представляет труда с помощью простого преобразования привести это уравнение к автономному виду.

Для простейшего дифференциального уравнения с запаздывающим аргументом *основная начальная задача* заключается в определении непрерывной функции  $u(t)$ , которая является решением уравнения с запаздывающим аргументом при  $t > t_0$ , при условии, что  $u(t) = \varphi_0(t)$  при  $t_0 - \tau \leq t \leq t_0$ , где  $\varphi_0(t)$  – заданная непрерывная функция, называемая начальной или функцией «истории»:

$$\frac{du(t)}{dt} = f(t, u(t), u(t - \tau)), \quad t > t_0, \quad (3.1)$$

$$u(t) = \varphi_0(t), \quad t_0 - \tau \leq t \leq t_0.$$

Здесь  $\tau > 0$  – параметр запаздывания (в большинстве математических моделей это постоянная величина, но может быть и иначе),  $t_0$  – начальная точка, отрезок  $t_0 - \tau \leq t \leq t_0$  называется начальным множеством (обозначается  $E_{t_0}$ ); обычно предполагается, что  $u(t_0 + 0) = \varphi_0(t_0)$ .

Если в начальной задаче (3.1)  $u(t)$ ,  $f$  и  $\varphi_0(t)$  считать вектор-функциями, то мы получим постановку начальной задачи для системы уравнений. В случае переменного параметра запаздывания  $\tau = \tau(t) > 0$  в задаче (3.1) также требуется найти решение этого уравнения при  $t > t_0$ , причем на начальном мно-

жестве  $E_{t_0}$  считаем  $u(t) = \varphi_0(t)$  ( $E_{t_0}$  состоит из начальной точки  $t_0$  и из значений  $t$ :  $t - \tau(t) \leq t_0$  при  $t \geq t_0$ ). Заметим, что в прикладных задачах начальную функцию, а также значение параметра запаздывания часто находят экспериментально.

Интересно отметить, что уравнения  $n$ -го порядка с запаздывающим аргументом можно заменить, так же как и для уравнений без запаздывания, соответствующей системой уравнений первого порядка, однако для некоторых постановок задач при этом не будет полной эквивалентности [1].

## 3.2. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОСНОВНОЙ НАЧАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

---

### 3.2.1. МЕТОД ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ (МЕТОД ШАГОВ)

Постановка задачи сигнализирует нам, что к теоретическому и численному решению начальной задачи для дифференциальных уравнений с запаздыванием требуется особый подход. Разработано несколько стратегий, но наиболее естественным подходом к решению задачи (3.1) представляется так называемый метод шагов (или метод последовательного интегрирования). Его суть состоит в том, что решение  $u(t)$  можно определить из дифференциальных уравнений без запаздывания, если с самого начала ограничиться рассмотрением интервала  $t_0 \leq t \leq t_0 + \tau$ :

$$\frac{du(t)}{dt} = f(t, u(t), \varphi_0(t - \tau)), \quad t_0 \leq t \leq t_0 + \tau; \quad u(t_0) = \varphi_0(t_0), \quad (3.2)$$

а далее (при необходимости продолжить решение задачи на более длинный интервал) придерживаться той же самой стратегии. При этом важно, что на первом «шаге» (3.2), так как задача рассматривается при  $t_0 \leq t \leq t_0 + \tau$ , то функция  $u(t - \tau) = \varphi_0(t - \tau)$  – заданная начальная функция. Рассуждая и действуя подобным образом поочередно на каждом подинтервале величиной  $\tau$ , получим последовательность ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) задач Коши

$$\frac{du(t)}{dt} = f(t, u(t), \varphi_n(t - \tau)), \quad t_0 + n\tau \leq t \leq t_0 + (n + 1)\tau, \quad (3.3)$$

$$u(t_0 + n\tau) = \varphi_n(t_0 + n\tau),$$

где  $\varphi_n(t)$  – решение рассматриваемой начальной задачи на предыдущем отрезке  $t_0 + (n - 1)\tau \leq t \leq t_0 + n\tau$ . Далее перечислим основные важные свойства и следствия применения этого подхода:

1. с теоретической и практической точек зрения крайне важно, что этот метод дает возможность определить решение  $u(t)$  на некотором конечном отрезке и одновременно доказывает существование решения в окрестности точки  $(t_0, \varphi(t_0))$ , если  $\varphi$  и  $f$  непрерывны в рассматриваемой области изменения переменных, и его единственность, если функция  $f$  удовлетворяет одному из условий, обеспечивающих единственность решения уравнения  $\frac{du(t)}{dt} = f(t, u(t), \varphi_0(t - \tau))$  (т. е. без запаздывания), например условию Липшица по второму аргументу.

2. Очевидно теперь, что метод шагов открывает возможность для решения задачи вида (3.1) после ее преобразования в (3.2) с

привлечением широко известных численных методов решения задачи Коши, тем более что метод шагов предоставляет нам вполне естественный для приближенных вычислений алгоритм действий без каких-либо потерь точности. Это крайне важно, поскольку при численном решении таких уравнений мы можем выбирать метод из главы 2 (но надо знать, что существуют и специальные методы численного решения таких уравнений).

3. Заметим, что даже в случае существования у функций  $\varphi$  и  $f$  непрерывных производных сколь угодно высокого порядка решение основной начальной задачи будет, вообще говоря, иметь разрыв первого рода у производной порядка  $(\kappa)$  в точке  $t_0 + (\kappa - 1)\tau$ . Хорошо, однако, что производные более низких порядков в этой точке будут непрерывны. Это отрицательно влияет на точность приближенных вычислений – методы высоких порядков в расчетах, как правило, не достигают теоретического порядка точности. Избежать этой проблемы можно в тех редких случаях, когда есть возможность подобрать специальным образом функцию  $\varphi_0(t)$ .

4. Из предыдущего следует, что решение  $u(t)$  с возрастанием  $t$  сглаживается. Отсюда следует, что периодические решения рассматриваемых уравнений бесконечно дифференцируемы, если, конечно, этим свойством обладает функция  $f$ . Это важно для практики вычислений – периодические решения, в принципе, могут обеспечивать лучшую точность.

5. Считается в теории, что применение метода последовательного интегрирования становится затруднительным, если запаздывание  $\tau$  мало по сравнению с отрезком, на котором требуется определить решение. Однако с точки зрения практики ин-тересны и важны, как правило, именно такие ситуации.

6. Очевидно, что метод последовательного интегрирования и вытекающие из него следствия распространяются и на дифференциальные уравнения с непрерывным переменным запаздыванием  $\tau(t)$ .

### 3.2.2. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

Мы выяснили, что применение к организации расчетов подхода, связанного с методом последовательного интегрирования, открывает самые широкие возможности для использования уже хорошо изученных численных методов решения задачи Коши, о которых речь шла в п. 2.3.2 и 2.4.3.

Как и в случае обыкновенных дифференциальных уравнений, введем для независимой переменной  $t$  равномерную сетку с шагом  $h > 0$ , т.е. рассмотрим множество точек  $\bar{\omega}_h = \{t_i = ih, i = 0, 1, 2, \dots\}$ . Тогда вместо функции непрерывного аргумента вводится в рассмотрение функция  $u(t_i) = u_i$  дискретного аргумента  $t_i$  или просто аргумента  $i$  – номера узла сетки. При численном решении задачи (3.3) возникают следующие трудности:

1. Значение аргумента  $t - \tau$  может не совпадать с узлом сетки  $t_i$ . Обычно в подобных (нередких) случаях требуется интерполяция значения функции с запаздывающим аргументом в эту точку  $t - \tau$ , что, безусловно, вносит дополнительные погрешности в решение задачи, а также сильно отягощает алгоритм, требуя для выполнения этой операции дополнительных затрат процессорного времени. Выход, на самом деле, весьма прост: *всегда в практических расчетах с достаточно высокой точностью можно согласовать шаг сетки и значение запаздывания  $\tau$ , потребовав заранее их пропорциональность:  $\tau = hM$* , где

$M \gg 1$  – натуральное число, его значение обусловлено соображениями требуемой точности приближенного решения.

2. На разных этапах больших научных исследований предпринимались попытки решения этой проблемы путем усовершенствования «классических» численных методов. Так, известны ранние попытки модификации методов Адамса и Рунге–Кутты, предложенные Зверкиной Т. С., и ряд других. Широкого применения эти модификации, как представляется, не получили из-за своей сложности и громоздкости, к тому же на некоторых тестовых примерах они не продемонстрировали сколько-нибудь существенного преимущества перед «классическими» вариантами тех же методов.

3. Замечено, что во многих случаях  $s$ -стадийные одношаговые методы не так надежны в этих задачах, как при решении ОДУ. Предложим здесь для рассмотрения достаточно изящную модификацию Л. Н. Белых [3] метода Рунге–Кутты 4-го порядка, которая заключается в использовании результатов вычисления коэффициентов  $k_j$  в точке  $t_i - \tau$ :

$$\begin{aligned}
 y_{i+1} &= y_i + (k_1^i + 2k_2^i + 2k_3^i + k_4^i) / 6, \\
 k_1^i &= hf(t_i, y_i, y_{i-M}), \\
 k_2^i &= hf(t_i + h/2, y_i + k_1^i/2, y_{i-M} + k_1^{i-M}/2), \\
 k_3^i &= hf(t_i + h/2, y_i + k_2^i/2, y_{i-M} + k_2^{i-M}/2), \\
 k_4^i &= hf(t_i + h, y_i + k_3^i, y_{i-M} + k_3^{i-M}).
 \end{aligned}$$

Здесь у вспомогательных величин индекс, указывающий порядковый номер узла расчетной сетки, перенесен вверх исключительно для наглядности и удобства восприятия.

### 3.3. ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

---

#### 3.3.1. ТЕСТОВАЯ ЗАДАЧА 1

Решить уравнение с запаздывающим аргументом

$$\frac{dx(t)}{dt} = -x(t - \tau), \quad \tau = 1, \quad t \in [0, 12]$$

с начальным условием  $x(\theta) = \varphi(\theta)$ ,  $\theta \in [-\tau, 0]$ , где  $\tau$  - параметр запаздывания. Уравнение имеет точное решение

$$x(t) = \sum_{n=0}^{\left[\frac{t}{\tau}\right]+1} (-1)^n \frac{(t - (n-1)\tau)^n}{n!}.$$

Рекомендуется решить уравнение для случая  $\varphi(\theta) = 1$ , можно также рассмотреть другие варианты начальной функции.

#### 3.3.2. ТЕСТОВАЯ ЗАДАЧА 2

Решить уравнение с запаздывающим аргументом

$$\frac{dx}{dt} = x(t - \tau), \quad \tau = 1, \quad t \in [0, 12]$$

с начальным условием  $x(\theta) = \varphi(\theta)$ ,  $\theta \in [-\tau, 0]$ , где  $\tau$  - параметр запаздывания.

Уравнение имеет точное решение

$$x(t) = \sum_{n=0}^{\left[\frac{t-t_0}{\tau}\right]+1} \frac{(t-t_0(n-1)\tau)^n}{n!}$$

Рекомендуется решить уравнение для случая  $\varphi(\theta) = 1$ , можно также рассмотреть другие варианты начальной функции.

### 3.3.3. ТЕСТОВАЯ ЗАДАЧА 3

Рассмотрим систему уравнений с запаздыванием  $\tau = \frac{\pi}{2}$  [5]:

$$\frac{dx_1(t)}{dt} = \frac{2}{\pi} \left( x_1(t) + x_2 \left( t - \frac{\pi}{2} \right) \right) - x_1 \left( t - \frac{\pi}{2} \right) - \frac{\pi}{2} \frac{x_2(t)}{x_3(t)},$$

$$\frac{dx_2(t)}{dt} = \frac{2}{\pi} \left( x_2(t) - x_2 \left( t - \frac{\pi}{2} \right) \right) - x_2 \left( t - \frac{\pi}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \frac{x_1(t)}{x_3(t)},$$

$$\frac{dx_3(t)}{dt} = \frac{\sqrt{x_1^2 \left( t - \frac{\pi}{2} \right) + x_2^2 \left( t - \frac{\pi}{2} \right)}}{x_3 \left( t - \frac{\pi}{2} \right)}$$

с начальными условиями, заданными в виде функций

$$\varphi_1(t) = t \cos(t), \quad \varphi_2(t) = t \sin(t), \quad \varphi_3(t) = t.$$

Точное решение задается теми же формулами, что и начальные условия.

### 3.4. ПРИМЕРЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАДАНИЙ. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ БЕЛКОВОЙ СИСТЕМЫ, УПРАВЛЯЮЩЕЙ РЕАКЦИЕЙ КЛЕТКИ НА ПОВРЕЖДЕНИЕ ДНК

---

Ежедневно в здоровом организме рождается несколько десятков миллиардов новых клеток (за год их общая масса оказывается сопоставимой с массой тела) и такое же их количество гибнет в основном через реализацию генетической программы, называемой *апоптоз*. Смысл этого процесса состоит в безболезненной фрагментации и удалении из организма ненужных или дефектных клеток (клеток с повреждением ДНК). Это позволяет, в частности, взять под контроль образование раковых клеток. Вместе с тем, следует иметь в виду, что избыточное уничтожение клеток путем апоптоза приводит к преждевременному старению и деградации отдельных органов и организма в целом.

*Физическая модель.* Одну из главных ролей в апоптозе играют сигнальный белок p53 и его отрицательный регулятор (эту функцию выполняют разные белки, например, Mdm2). Они содержатся в каждой клетке и взаимодействуют между собой. Белок p53 получает сигнал о повреждении и дает сигнал для формирования клеточного ответа, в том числе – для запуска программы апоптоза, а белок Mdm2 регулирует уровень и активность p53.

*Следующая информация является ключом к пониманию результатов моделирования:* известно, что в здоровой клетке уровень белков достаточно низкий, и эти белки уравнивают друг друга – такое состояние биологической системы p53–

регулятор называют *базальным состоянием*. Однако известно, что в 50–70% раковых клеток уровень p53 снижен, а Mdm2, наоборот, повышен. А при недостатке кислорода (ишемии), деменциях и даже при синдроме Дауна уровень p53 в клетках слишком высок, а Mdm2, наоборот, резко снижен. Таким образом, нарушение равновесия в системе p53–Mdm2 создает условия для накопления дефектных (раковых) клеток или неконтролируемой гибели здоровых клеток.

*О математических моделях.* В данном разделе будет показано, что одной и той же физической модели можно сопоставить значительное количество разных математических моделей.

*Общие рекомендации.* Для получения численного решения предлагается использовать программный код, апробированный на одной или нескольких тестовых задачах. Важно понимать, что основной целью всех экспериментов является моделирование разных сценариев «жизни» динамической системы. В ходе наблюдений за поведением численного решения можно получить достаточно большой объем информации о качественных свойствах динамической системы, часто не уступающий объему информации, полученной с помощью других более «тонких» методов исследования, принятых в качественной теории дифференциальных уравнений. К тому же эти эксперименты могут обеспечить более глубокое понимание динамики процесса и результатов, полученных теми самыми «тонкими» методами.

*Одной из главных задач численных экспериментов является поиск ответа на следующий вопрос: можно ли в рамках принятой модели описать состояния, потенциально опасные для живого организма – связанные с угрозой развития рака (резкое и длительное снижение уровня белка p53 на фоне роста уровня Mdm2) или с риском массовой гибели клеток (резкое и длительное снижение уровня белка Mdm2 на фоне стремительного роста уровня p53)?*

### 3.4.1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ 1

Дана обезразмеренная система нелинейных уравнений с запаздывающим аргументом, моделирующая изменение во времени величин  $y_1$  и  $y_2$  – количественных характеристик уровней белков p53 и Mdm2:

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= 1 - b_1 x_1, & \frac{dx_2}{dt} &= f(y_1(t - \tau)) - b_2 x_2, \\ \frac{dy_1}{dt} &= x_1 - (a_1 + a_{12} y_2) y_1, & \frac{dy_2}{dt} &= x_2 - a_2 y_2, \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$f(y) = \frac{y^n}{a + y^n}.$$

Здесь  $y_1$  и  $y_2$  – уровни активированных белков p53 и Mdm2;  $x_1$  и  $x_2$  – уровни белков, регулирующих активность p53 и Mdm2 соответственно;  $a_1 = a_2 = 0.13$ ,  $a_{12} = a_{21} = 0.02$ ,  $b_1 = 0.8$ ,  $b_2 = 0.01$ ,  $a = 4$  – заданные параметры системы (предполагается, что в окрестности этих значений решение имеет биологический смысл);  $\tau$  – время запаздывания реакции регулятора активности Mdm2 на изменение активности белка p53.

Начальные данные задаются в виде функций «истории»

$$y_1(t) = y_{10}(t), \quad t \in [-\tau, 0], \quad y_2(0) = y_{20}, \quad x_1(0) = x_{10}, \quad x_2(0) = x_{20}.$$

Задание: Решить численно задачу (3.4). Рекомендуется в методических целях рассмотреть сначала задачу с нулевым запаздыванием  $\tau = 0$  и начальными условиями  $y_1(\theta) = 0$ ,  $\theta \in [-\tau, 0]$ ,  $y_2(0) = 0$ ; изучить вопрос о влиянии

начальных условий на поведение решений, установить характер асимптотического поведения решения. Интересно понять, как зависит решение от значения параметра  $n$  (коэффициента Хилла).

Далее следует решать задачу с учетом ненулевого запаздывания и выяснить, какое влияние на динамику моделируемого процесса оказывает этот параметр. Возможны ли бифуркации решения, связанные с изменением величины запаздывания (например, потеря устойчивости стационарного решения и возникновение в системе периодических колебаний, которые наблюдаются во многих лабораторных экспериментах с системой p53–Mdm2)?

Важной частью анализа решения динамической системы (3.4) является изучение зависимости решения от значений параметров и поиск новых динамических режимов функционирования системы. Рекомендуется использовать более систематизированный подход, например, поочередно изменять каждый из параметров  $a_1, a_2, a_{12}, a_{21}, b_1, b_2, a$  на величину от  $\pm 5\%$  до  $\pm 200\%$  от значений, указанных в постановке задачи. На следующем этапе можно рассмотреть варианты случайных изменений и, возможно, найти для них биологические аналогии.

Представить результаты расчетов в виде интегральных кривых (зависимостей всех неизвестных задачи от времени), а также в виде траекторий на фазовой плоскости  $(y_1, y_2)$ ,  $(x_1, y_1)$ ,  $(x_2, y_2)$  и в трехмерном фазовом пространстве  $(y_1, y_2, x_1)$  и т. п.

### 3.4.2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ 2

Дана безразмерная система нелинейных уравнений с запаздывающим аргументом, моделирующая изменение во времени величин  $x$  и  $y$ :

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \beta_x \frac{S^n}{1+S^n} \xi(t) - \alpha_{xy} xy, \\ \frac{dy}{dt} &= \beta_y x(t-\tau) \xi(t-\tau) - \alpha_y y, \\ \frac{dS}{dt} &= \beta_S - \alpha_S y S\end{aligned}\tag{3.5}$$

с начальными условиями

$$x(t) = x^0(t), \quad x(0) = x_0, \quad y(0) = y_0, \quad S(0) = S_0, \quad t \in [-\tau, 0].$$

Здесь, как и ранее,  $x$  и  $y$  – уровни белков p53 и Mdm2,  $S$  – уровень активного сигнала;  $\alpha_y = 0.8$ ,  $\beta_x = 0.9$ ,  $\beta_y = 1.2$ ,  $\beta_S = 0.9$ ,  $\alpha_{xy} = 1.5$ ,  $\alpha_S = 2.7$ ,  $n = 4$ ,  $\xi = 1$  – заданные параметры системы;  $\tau$  – параметр запаздывания, который может изменяться от нескольких секунд до нескольких часов.

Задание: Решить численно задачу (3.5). Рекомендуется в методических целях рассмотреть сначала задачу с нулевым запаздыванием  $\tau = 0$ ; изучить вопрос о влиянии начальных условий на поведение решений, установить характер асимптотического поведения решения.

Решить задачу с учетом запаздывания, когда  $\tau$  изменяется от нескольких секунд до 20 часов. Выявить возможные варианты поведения решения при различных значениях  $\tau$  (неподвижные предельные точки, предельные циклы и т.п.). Представляет интерес решение при  $\tau = 0.9$  час. при поочередном варьировании параметров модели.

Предполагается, что определенную долю реалистичности в модель и ее решения внесет изменение  $\xi(t)$  с использованием

датчика случайных чисел (средняя величина  $\langle \xi(t) \rangle = 1$ ), причем с разной периодичностью – от  $h$  до  $\tau$  – изменения случайного значения  $\xi$ .

### 3.4.3. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ 3

Дана система нелинейных уравнений с запаздывающим аргументом:

$$\frac{dy_1}{dt} = s - af(y_1, y_2) - by_1, \tag{3.6}$$

$$\frac{dy_2}{dt} = c_1 \frac{y_1^\tau - f(y_1^\tau, y_2^\tau)}{y_1^\tau + k_g - f(y_1^\tau, y_2^\tau)} - c_2 y_2,$$

где

$$f(y_1, y_2) = \frac{1}{2} \left( y_1 + y_2 + k_f - \sqrt{(y_1 + y_2 + k_f)^2 - 4y_1 y_2} \right),$$

$$y_1 = y_1(t), \quad y_2 = y_2(t), \quad y_1^\tau = y_1(t - \tau), \quad y_2^\tau = y_2(t - \tau).$$

Здесь  $y_1$  и  $y_2$  – концентрации белков p53 и Mdm2, соответственно;  $s, a, b, c_1, c_2, k_f, k_g$  – параметры системы;  $\tau$  – параметр запаздывания, который может изменяться от нескольких минут до нескольких часов.

Начальные данные для системы (3.6) задаются в виде функций «истории»:  $y_k(\theta) = \varphi_k(\theta)$ ,  $\theta \in [-\tau, 0]$ ,  $k = 1, 2$  В расчетах, если это не оговорено дополнительно, полагаем  $\varphi_k(\theta) = 0$ . Базальные, т.е. соответствующие нормальным условиям, значения параметров модели:

$$s = 1 \frac{\text{a.u.}}{\text{c}}, \quad a = 3 \cdot 10^{-2} \text{c}^{-1}, \quad b = 10^{-4} \text{c}^{-1}, \quad (3.7)$$

$$c_1 = 1 \frac{\text{a.u.}}{\text{c}}, \quad c_2 = 10^{-2} \text{c}^{-1}, \quad k_f = 180 \text{a.u.}, \quad k_g = 28 \text{a.u.}$$

**Задание:** Привести систему (3.6) к безразмерному виду с использованием масштаба времени  $\tau$  и масштаба изменения уровня белков  $\lambda$ . Для этого положить  $t = t'\tau$  и записать уравнения относительно  $t'$ . Это эквивалентно сжатию оси времени в  $\tau$  раз. Точно так же следует принять  $y_i = \lambda y'_i$ , где  $\lambda = k_f$ .

Подобрать эффективный численный алгоритм для решения системы (3.6), основываясь на опыте решения тестовых задач. В качестве модельной задачи следует рассмотреть задачу при значениях параметров (3.7) и нулевом запаздывании. Представить наглядно зависимость численного решения задачи от величины запаздывания  $\tau$  и от начальных данных для  $y_1$  и  $y_2$ . Убедиться в сходимости стационарных решений, полученных численно на последовательности сеток, к аналитическому стационарному решению, заданному в виде нелинейной системы алгебраических уравнений:

$$y_2 = \frac{c_1}{c_2} \frac{(a+b)y_1 - s}{(a+b)y_1 - s + ak_g}, \quad y_2 = \frac{(s - by_1)((a+b)y_1 + ak_f - s)}{a((a+b)y_1 - s)}.$$

Выполнить расчеты с разными значениями параметра запаздывания. Показать, что жесткость системы (3.7) проявляется при увеличении параметра запаздывания (например, при  $\tau = 1200\text{c}$ ).

Убедиться в подобии численных решений, полученных до и после безразмеривания.

Положить  $\tau = 120\text{с}$ . Варьируя параметр  $k_f$  относительно нормального значения из (3.7), проверить, возможны ли ситуации перерождения решений с предельной точкой в решения с предельным циклом (бифуркации Андронова–Хопфа), определить бифуркационное значение параметра  $k_f$ . Численные стационарные решения сопоставить с аналитическим стационарным решением. Найти, при каких значениях  $k_f$  возможны нежелательные для здорового организма состояния моделируемой системы.

Дополнительные варианты заданий для модели (3.6) можно сформулировать на основе материала, содержащегося в Приложении.

#### 3.4.4\*. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ 4

Дана система нелинейных уравнений с запаздывающим аргументом (3.6) с параметрами (3.7). Известно, что биохимические реакции, которые описаны в модели, и соответствующие им значения параметров модели характеризуются определенной степенью случайности.

Задание. Пусть для каждого параметра модели ( $k$  – порядковый номер параметра) введен множитель  $\xi_k(t) : \xi_k \in [0; 1]$  – случайное число, принимающее новое значение

- а) в каждый момент времени (т. е. в каждой точке расчетной сетки),
- б) через каждые 10 секунд,
- в) через интервал, равный  $\tau = 120$  секунд.

Для каждого из вариантов а)–в) проведите численные эксперименты при  $\tau = 120\text{с}$

а) с использованием набора параметров модели (3.7),

б) с параметрами из набора (3.7), но при  $k_f = 1.8$ .

Сделайте, по крайней мере, несколько запусков каждой такой задачи и сравните решения, полученные со случайным набором параметров и при  $\xi_k(t) = 1$ .

Ответьте на вопрос: как повлиял режим введения случайных изменений параметров на решение задачи? Как повлияет на результат та же стратегия, только при  $\xi_k \in [0; 2]$ ? Для наиболее заинтересованных исследователей предлагается собрать достаточно представительную выборку для каждого варианта расчета и по результатам статистического анализа сделать выводы о характере изменений решения по сравнению с детерминированной моделью (3.6).

### 3.4.5. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ 5

Дана система нелинейных уравнений с запаздывающим аргументом

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \beta_s \theta(t) - \alpha_s S, \\ \frac{dy_1}{dt} &= s + \beta_{sp} \frac{S^{n_s}}{S^{n_s} + 1} \xi(t) - af(y_1, y_2) - by_1, \\ \frac{dy_2}{dt} &= c_1 \frac{y_1^\tau - f(y_1^\tau, y_2^\tau)}{y_1^\tau + k_g - f(y_1^\tau, y_2^\tau)} - \alpha_{sm} S y_2 - c_2 y_2, \\ \frac{dm}{dt} &= \beta_m y_1 - \alpha_m m, \end{aligned} \quad (3.8)$$

где верхний индекс  $\tau$  указывает на наличие запаздывающего аргумента,

$$f(y_1, y_2) = \frac{1}{2} \left( y_1 + y_2 + k_f - \sqrt{(y_1 + y_2 + k_f)^2 - 4y_1y_2} \right),$$

$$y_1 = y_1(t), \quad y_2 = y_2(t), \quad y_1^\tau = y_1(t - \tau), \quad y_2^\tau = y_2(t - \tau).$$

Здесь  $y_1$  и  $y_2$  – уровень белков p53 и Mdm2, соответственно;  $m$  – уровень микроРНК,  $S$  – уровень активного сигнала о повреждении ДНК,  $\beta_s$  – скорость генерации сигнала,  $\alpha_s$  – удельная скорость деградации сигнала,  $\tau$  – параметр запаздывания, который может изменяться от нескольких минут до нескольких часов.

Начальные данные задаются в виде нулевых функций «истории». Рекомендуемые значения параметров модели основаны на биологических соображениях:

$$s = 1, \quad a = 3 \cdot 10^{-2}, \quad b = 10^{-4}, \quad c_1 = 1, \quad c_2 = 10^{-2},$$

$$k_f = 4.5, \quad k_g = 28, \quad \beta_{sp} = 2.778 \cdot 10^{-3}, \quad \alpha_{sm} = 3.889 \cdot 10^{-4}, \quad (3.9)$$

$$\beta_s = 2.778 \cdot 10^{-3}, \quad \alpha_s = 2.083 \cdot 10^{-3}, \quad n = 4.$$

Задание. Полагаем  $\xi(t) = 1$ ,  $\theta(t) = 1$ . Рекомендуется повторить численные эксперименты, предложенные в предыдущем задании, сопоставив решения  $y_1$  и  $y_2$  с решениями по предыдущей модели. Дать представление о поведении во времени сигнала  $S$ ,  $y_1$  и  $y_2$  для двух разных способов задания  $\theta(t)$ . Исследовать, изменяется ли динамика компонент вектора численного решения задачи при поочередном варьировании параметров (3.9) в широком диапазоне значений. Проверить, возможны ли ситуации перерождения решений со стационарной предельной точкой в периодические решения с предельным циклом (бифуркации Андронова–Хопфа)?

Описывает ли модель (3.8) и при каких значениях параметров нежелательные для здорового организма состояния биологической системы  $p53$ - $Mdm2$ , если известно, что неуправляемый рост  $p53$  может привести к избыточной гибели здоровых клеток и деградации органов, а чрезмерное снижение концентрации  $p53$  может стать причиной рака?

## ЛИТЕРАТУРА

---

1. *Эльсгольц Л. Е., Норкин С. В.* Введение в теорию дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1971. 296 с.
2. *Мышкис А. Д.* Линейные дифференциальные уравнения с запаздывающим аргументом. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1951. 256 с.
3. *Белых Л. Н.* Анализ математических моделей в иммунологии. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1988. 192 с.
4. *Пименов В. Г.* Функционально-дифференциальные уравнения: численные методы. Екатеринбург: Из-во Урал. ун-та. 1998. 80 с.
5. *Воропаева О. Ф., Шокин Ю. И., Непомнящих Л. М., Сенчукова С. Р.* Математическое моделирование функционирования и регуляции биологической системы  $p53$ - $Mdm2$ . М.: Изд-во РАМН. 2014. 176 с.

---

## ГЛАВА 4. ПРЕДЕЛЬНЫЙ ПЕРЕХОД ОТ СИСТЕМЫ ОДУ К УРАВНЕНИЯМ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ: ТЕХНОЛОГИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

---

Одним из наиболее интересных свойств дифференциальных уравнений с запаздыванием является то, что *теоретически можно установить связь между ними и системами ОДУ высокой ( $n \gg 10$ ) размерности*. В этом замечательном математическом свойстве угадывается глубокий практический смысл, важный с точки зрения теории динамических систем.

Пусть существует реальный процесс с множеством промежуточных взаимосвязанных быстропротекающих стадий, а его математическая модель представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений крайне большой размерности (соответствующей количеству стадий).

Тогда естественно предполагать, что существует и другая – минимальная модель этого процесса, в рамках которой каждой отдельной промежуточной стадией можно пренебречь, описав только процесс в общем, например, как связь между начальной и финальной стадиями. Само по себе существование двух моделей одного объекта, конечно, не удивительно, если только не предполагать, что минимальная модель представляет собой дифференциальное уравнение с запаздыванием, такое

что существует предельный переход от системы ОДУ к этому дифференциальному уравнению. Постановка такой задачи весьма нетривиальна, поскольку, в первую очередь, требуется указать конкретный вид двух «родственных» объектов, что часто бывает крайне затруднительно.

Для некоторых наиболее простых задач такая связь была установлена сначала теоретически, а позднее была разработана специальная схема вычислительного эксперимента, помогающая доказывать эту связь в тех случаях, когда теоретически это сделать трудно или невозможно [1–6].

## 4.1. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ

---

Для дифференциального уравнения с запаздыванием и кусочно-непрерывной функцией начальных условий  $\varphi(t)$  (заданной на интервале, равном величине запаздывания  $\tau$ , с конечным числом точек разрыва, причем все разрывы первого рода) можно сформулировать последовательность задач Коши для системы ОДУ размерности  $n$  с компонентами вектора решения  $(x_1(t), \dots, x_n(t))$ , такую что последовательность последних компонент этого вектора  $\{x_n(t)\}$  при  $n \rightarrow \infty$  сходится равномерно к обобщенному решению исходного уравнения с запаздыванием. Тогда параметр запаздывания  $\tau$  имеет смысл суммарного времени протекания многостадийного процесса из начального состояния ( $i = 1$ ) в конечное состояние ( $i = n$ ).

В работе [1] для автономной системы ОДУ вида

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= \sigma(x_n) - \frac{n-1}{\tau} x_1, \\ \frac{dx_k}{dt} &= \frac{n-1}{\tau} (x_{k-1} - x_k), \quad k = 2, \dots, n-1, \\ \frac{dx_n}{dt} &= \frac{n-1}{\tau} x_{n-1} - \lambda x_n \end{aligned} \quad (4.1)$$

с нулевыми начальными условиями для компонент вектора  $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  строго доказано существование пределов ( $1 < i < n$ )

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_i(t) \rightarrow 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} x_n(t) = y(t), \quad (4.2)$$

если  $y(t)$  – решение дифференциального уравнения с запаздывающим аргументом  $\tau$  следующего вида:

$$\frac{dy}{dt} = \sigma(y(t-\tau)) - \lambda y, \quad t > \tau; \quad y(t) = 0 \text{ при } t \leq \tau. \quad (4.3)$$

Здесь  $\lambda > 0$ ,  $\sigma(x_n)$  – достаточно гладкая функция, удовлетворяющая условию Липшица.

Эту задачу полезно рассмотреть и с другой стороны – как задачу об аппроксимации решения уравнения с запаздывающим аргументом с помощью решения системы ОДУ. Доказана соответствующая («обратная») предельная теорема [2]. Значение предельных теорем состоит в том, что они дают не только теоретическое обоснование, но и подробную инструкцию для перехода от математической модели с запаздыванием к модели на основе системы ОДУ и/или наоборот.

Пусть сформулирована задача Коши вида (4.1) и соответствующая ей основная начальная задача (4.3) при нулевых начальных условиях, выполнены условия предельной теоремы.

*Для того чтобы показать наличие предельного перехода от модели многостадийного процесса в виде (4.1) к минимальной модели вида (4.3) в численном эксперименте, необходимо решить обе задачи с помощью численных методов, которые рассматривались в предыдущих главах. При этом задачу (4.1) следует решать многократно, каждый раз наращивая количество  $n$  дифференциальных уравнений, описывающих динамику промежуточных стадий, и устремляя  $n \rightarrow \infty$  (в численных расчетах бесконечность, очевидно, заменяется достаточно большим числом).*

*Далее полученные численные решения следует использовать для численного анализа, чтобы*

- а) показать выполнение условий (4.2),
- б) исследовать асимптотическое поведение погрешности «предельного» перехода (здесь кавычки используются из-за конечности размерности системы ОДУ),
- в) показать, что сходимости имеет место не только на уровне интегральных кривых, но и на уровне качественных свойств решений двух моделей.

Основные трудности реализации этого численного эксперимента таковы:

1. Наиболее важное место отводится формулировке самих связанных между собой моделей. Следует иметь в виду, что любое отклонение вида уравнений от того, для которого доказана предельная теорема, может потребовать дополнительных творческих усилий исследователя.
2. Самая трудоемкая часть работы – численное решение задач Коши для систем ОДУ вида (4.1), в которых количество уравнений постепенно наращивается, доходя до десятков или даже

сотен тысяч уравнений (в зависимости от мощности компьютера и сложности задачи).

3. Известно, что даже если размерность  $n$  системы ОДУ достаточно высока, и шаг сетки  $h$  достаточно мал, сходимости, т.е. «предельного» перехода может не быть. Требуется согласованность этих параметров задачи со значением параметра запаздывания:  $h \leq C\tau/n$ , где константа  $C$  зависит от численного метода решения задач, но обычно не превышает 1.

Наша задача состоит в том, чтобы разобраться, как на практике реализуется эта технология, поскольку в последние годы быстрыми темпами растет количество примеров динамических систем, к анализу которых она может быть применена.

## 4.2. ПРИМЕРЫ РЕАЛИЗАЦИИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СХЕМЫ ПЕРЕХОДА

---

---

### 4.2.1. ЗАДАЧА С ОДНИМ УРАВНЕНИЕМ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

Пусть дано уравнение (4.1), в котором  $\sigma(x)$  – некоторая заданная функция. Теоретически уже доказан предельный переход от этой системы ОДУ к решению соответствующего уравнения с запаздыванием (4.3) при нулевых начальных условиях. Вычислительная схема кратко описана выше именно для такого примера, остается уточнить некоторые детали. Итак, требуется четко и последовательно выполнить следующие этапы численного анализа.

1. Решить обе задачи с помощью численных методов решения, которые рассматривались в предыдущих главах. Задачу (4.1)

следует решать многократно, наращивая количество  $n$  дифференциальных уравнений, описывающих динамику промежуточных стадий. Таким образом, формируется последовательность численных решений (в численных расчетах бесконечность, очевидно, заменяется достаточно большим числом) для сравнения с численным решением уравнения с запаздыванием. При проведении численных расчетов требуется решать задачи с таким шагом сетки, который согласован с количеством промежуточных стадий и значением параметра запаздывания в соответствии с условием:  $h \leq C\tau/n$ , где константа  $C \approx 1$ . При этом шаг  $h$  удобно изменять не каждый раз, когда изменяется  $n$  число уравнений в системе ОДУ, а только при нарушении условия. Потому что это изменение должно затронуть обе модели, а не только модель на основе ОДУ. Оптимальная с точки зрения минимизации погрешности «предельного» перехода и сходимости этого процесса стратегия выбора шага сетки состоит в том, чтобы при варьировании  $n$  шаг сетки, на которой вычисляется решение двух задач, тоже изменялся и полагался равным  $h = C\tau/n$  [5].

Для более глубокого понимания процесса сходимости рекомендуется тщательно проиллюстрировать полученную последовательность численных решений  $\{x_n(t)\}$ , сопоставляя графики этой компоненты с графиком  $y(t)$  решения уравнения с запаздыванием.

2. Для анализа асимптотического поведения погрешности «предельного» перехода необходимо при каждом  $n$  вычислять величину  $\varepsilon_n = \max_{0 \leq i \leq N} [|y(t_i) - x_n(t_i)|]$ . Кроме того, очевидно, что должна контролироваться погрешность численного решения системы ОДУ, причем особое внимание требуется уделить интересующей нас последней компоненте вектора решения. Вве-

дем для этого погрешность  $\varepsilon_{\max} = \max_{0 \leq i \leq N} \left[ 2 \left| x_n^h(t_i) - x_n^{h/2}(t_i) \right| \right]$ , вычисляемую с использованием правила Рунге (очевидно, что  $\varepsilon_{\max}$  не дает полного представления о точности вычисления решения системы ОДУ).

В численных экспериментах число гипотетических «промежуточных» стадий  $n$  следует варьировать в расчетах в достаточно широком диапазоне, например, от 4 до  $10^6$ . Это позволит провести основанный на результатах численных экспериментов анализ асимптотического (при достаточно больших  $n$ ) поведения погрешности  $\varepsilon_n$  «предельного» перехода применительно к конкретной задаче. *Согласно теоретическим оценкам, скорость сходимости решений задачи (4.1) в предельном переходе к решению (4.3) определяется асимптотическим законом  $n^{-0.5}$ .*

3. Важной, но достаточно легко реализуемой на практике частью исследования является численный анализ промежуточных стадий и, в частности, проверка первого из условий (4.2):  $\lim_{n \rightarrow \infty} x_i(t) \rightarrow 0$ . Предпочтение отдается графическому представлению этого результата. Можно отметить, что эти функции имеют тот же характер зависимости от времени, что и соответствующее решение исходной задачи (4.4)–(4.5). Численный анализ показывает также, что, в согласии с условиями (2) предельной теоремы, функции  $|x_i(t)| \rightarrow 0$  с ростом  $n$  независимо от вида решения исходной модели. Введение «промежуточных» стадий можно интерпретировать, в определенной степени, как попытку замены (особенно в окрестности точки  $t = \tau$ ) разрывной функции  $y(t)$  ее «достаточно гладким» аналогом  $x_n(t)$ .

4. При организации данного вычислительного эксперимента следует исходить из того, что в процессе «предельного» перехода мы имеем дело со следующими источниками погрешностей, которые требуют постоянного контроля и балансировки:

а) собственно погрешности замены одной модели другой, которые гипотетически должны находиться в центре нашего внимания,

б) погрешности численного метода решения основной начальной задачи для системы с запаздыванием,

в) погрешности численного метода решения задачи Коши для системы ОДУ, причем с ростом ее размерности эти погрешности могут медленно, но нарастать при фиксированном шаге сетки,

г) практически неустранимые ошибки округления, имеющие несколько источников, о которых говорилось ранее, в соответствующем разделе.

В принципе, на решение именно проблемы контроля и балансировки разных источников погрешностей нацелены рекомендации п. 1, касающиеся согласованности выбора шага сетки  $s$  и  $\tau$ .

#### 4.2.2. ЗАДАЧА ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОЙ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

Пусть дана система дифференциальных уравнений с запаздыванием (эта задача уже предлагалась к решению в п. 3.4, но в другом контексте)

$$\frac{dy_1}{dt} = s - af(y_1(t), y_2(t)) - by_1(t), \quad (4.4)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = c_1 g(y_1(t - \tau), y_2(t - \tau)) - c_2 y_2(t), \quad (4.5)$$

где взаимодействие белков определяется функциями

$$f(y_1, y_2) = \frac{1}{2} \left( y_1 + y_2 + k_f - \sqrt{(y_1 + y_2 + k_f)^2 - 4y_1 y_2} \right), \quad (4.6)$$

$$g(y_1, y_2) = \frac{y_1 - f(y_1, y_2)}{y_1 + k_g - f(y_1, y_2)}. \quad (4.7)$$

Начальные условия полагаются нулевыми, значения параметров заданы (3.7).

Теоретических результатов о существовании предельного перехода от некоторой, пока не представленной системы ОДУ, к системе (4.4)–(4.7) не существует. Однако сама система (4.4)–(4.7) уже неоднократно была представлена в предыдущих разделах этого учебного пособия, а также для нее получено достаточно много интересных практических результатов. Поэтому попытаемся сформулировать применительно к этой системе задачу об аппроксимации решения уравнения с запаздывающим аргументом с помощью решения системы ОДУ. Впрочем, после формулировки системы ОДУ мы можем смело говорить и о предельном переходе от системы ОДУ к системе с запаздыванием при  $n \rightarrow \infty$ .

Как и в случае одного уравнения с запаздыванием из п. 4.2.1, вычислительная схема предполагает четкое последовательное выполнение следующих этапов численного анализа:

1. заменим уравнение с запаздыванием (4.5) системой, состоящей из  $n$  ОДУ, которые описывают в упрощенной форме кинетику промежуточных стадий процесса передачи биохимическо-

го сигнала рассматриваемой системе белков. В согласии с условиями предельной теоремы (4.1), в рамках новой модели предполагается простейшее линейное представление промежуточных стадий, поскольку рост числа  $n$  подразумевает ускорение каждой из этих стадий (при постоянном суммарном времени  $\tau$ , необходимом для их реализации). Тогда в ходе трансформации уравнения (4.4), в котором отсутствуют функции с запаздывающими аргументами, вместо  $y_1(t)$  будет фигурировать приближенная величина  $\tilde{y}_1(t)$ , вместо  $y_2(t)$  – приближенная величина  $x_n(t)$ .

Таким образом, система ОДУ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{y}_1}{dt} &= s - af(\tilde{y}_1, x_n) - b\tilde{y}_1, \\ \frac{dx_1}{dt} &= c_1g(\tilde{y}_1, x_n) - \frac{n-1}{\tau}x_1, \\ \frac{dx_k}{dt} &= \frac{n-1}{\tau}(x_{k-1} - x_k), \quad k = 2, \dots, n-1, \\ \frac{dx_n}{dt} &= \frac{n-1}{\tau}x_{n-1} - c_2x_n. \end{aligned} \tag{4.8}$$

Здесь  $x_1(t), \dots, x_n(t)$  – дополнительные переменные, имеющие смысл гипотетических «промежуточных» стадий, и функции  $f$  и  $g$  вычисляются в момент времени  $t$ :

$$\begin{aligned} f(\tilde{y}_1, x_n) &= \frac{1}{2} \left( \tilde{y}_1 + x_n + k_f - \sqrt{(\tilde{y}_1 + x_n + k_f)^2 - 4\tilde{y}_1x_n} \right), \\ g(\tilde{y}_1, x_n) &= \frac{\tilde{y}_1 - f(\tilde{y}_1, x_n)}{\tilde{y}_1 + k_g - f(\tilde{y}_1, x_n)}. \end{aligned}$$

2. Требуется решить задачу (4.4)–(4.5) при нулевых начальных условиях с помощью численных методов решения, которые рассматривались в предыдущих главах. Задачу (4.8) с учетом (4.6), (4.7) при нулевых начальных функциях и тех же самых значениях параметров следует решать сначала при  $n=4$ , затем при  $n=4, 8, 16, 32, \dots$  – многократно, каждый раз наращивая количество  $n$  дифференциальных уравнений, описывающих динамику промежуточных стадий. Как и в случае одного уравнения, при проведении численных расчетов требуется следить за выполнением условия:  $h \leq C\tau/n$ , где константа  $C \approx 1$ .

3. Для более глубокого понимания процесса сходимости рекомендуется тщательно проиллюстрировать полученную последовательность численных решений  $\{\tilde{y}_1(t)\}$  и  $\{x_n(t)\}$ , сопоставляя при каждом  $n$  графики  $\tilde{y}_1(t)$  с графиком  $y_1(t)$  и  $x_n(t)$  с  $y_2(t)$ . Требуется проверить, действительно ли при нулевых начальных условиях для обеих систем уравнений имеет место:  $\lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{y}_1(t) = y_1(t)$ ,  $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n(t) = y_2(t)$ . На стадии визуального контроля главное место отводится графическому представлению результатов численных расчетов.

4. Для анализа асимптотического поведения погрешности первой  $\tilde{y}_1(t)$  и последней  $x_n(t)$  компонент решения системы ОДУ по отношению к компонентам  $y_1(t)$ ,  $y_2(t)$  решения соответствующей задачи с запаздыванием используется величина

$$\varepsilon_n = \max_{0 \leq i \leq N} \left[ |y_1(t_i) - \tilde{y}_1(t_i)| + |y_2(t_i) - x_n(t_i)| \right],$$

которая имеет смысл погрешности «предельного» перехода.

В численных экспериментах число гипотетических «промежуточных» стадий  $n$  следует варьировать в достаточно широком диапазоне, например, от 4 до  $10^6$ . Это позволит провести основанный на результатах численных экспериментов анализ асимптотического (при достаточно больших  $n$ ) поведения погрешности  $\varepsilon_n$  «предельного» перехода применительно к конкретной задаче.

5. Далее проводится численный анализ промежуточных стадий и, в частности, проверка первого из условий (4.2):  

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_i(t) \rightarrow 0.$$

6. Легко показать, что предельный переход имеет место не только на уровне интегральных кривых, но и на уровне качественных свойств решений двух моделей. В частности, характерным свойством решения модели с запаздыванием (4.4)–(4.5) является бифуркация Андронова–Хопфа (бифуркация рождения предельного цикла из предельной точки), которая, в частности, происходит при определенных значениях параметра  $\tau$  и параметров  $k_f$  или  $k_g$  (см. Приложение). Этим же свойством при тех же самых бифуркационных значениях этих параметров обладает соответствующая система ОДУ (4.8) при нулевых начальных условиях, если  $n \rightarrow \infty$ .

Таким образом, хотя численная реализация предельного перехода в случае нелинейной системы дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом несколько усложнилась по сравнению с одним уравнением, все же сам предельный переход для данной динамической системы реализуется в соответствии с условиями предельной теоремы [1].

## 4.3. ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАДАНИЯ

---

### 4.3.1. ЗАДАЧА О МНОГОСТАДИЙНОМ СИНТЕЗЕ ВЕЩЕСТВА

Рассмотрите две модели синтеза веществ – (4.1) и (4.3) при  $\sigma(x) = \frac{\alpha}{1 + \beta x^\gamma}$ , нулевых начальных условиях и следующих значениях параметров:  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 1$ ,  $\gamma = 5$ ,  $\lambda = 1$ ,  $\tau = 2$ . Количество промежуточных стадий  $n$  наращивайте постепенно от значения  $n=4$  до  $2 \cdot 10^4$ , шаг сетки  $h \in [10^{-4}, 0.2]$ .

**Задание:** В численных экспериментах проверьте, что при достаточно большом количестве «промежуточных» стадий  $n$  может наблюдаться нарушение процесса сходимости последней компоненты решения системы ОДУ (4.1) к решению уравнения с запаздыванием (4.3) при нулевых начальных данных. Проведите численный анализ погрешностей перехода и проверьте, что при численной реализации «предельного» перехода для данной задачи необходимо выполнение условия  $h \leq C\tau/n$ . Полагая  $h = \tau/n$ , покажите, что при  $h \rightarrow 0$  имеет место предельный переход, а его погрешность  $\max_{0 \leq t \leq T} |x_n(t) - y(t)| = O(n^{-0.5})$ . Реализуйте схему вычислительного эксперимента, доказывающего наличие предельного перехода.

Рассмотрите задачу с заданной функцией  $\sigma(x)$  при других значениях параметров или другие варианты функций  $\sigma(x)$ .

#### 4.3.2. ЗАДАЧА О ФУНКЦИОНИРОВАНИИ БИОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ P53-MDM2

Рассмотрите две взаимосвязанные модели – (4.4)–(4.5) и (4.8) с учетом (4.6)–(4.7) при нулевых начальных условиях. Базальные, т.е. соответствующие нормальным условиям, значения параметров моделей:

$$s = 1 \text{ c}^{-1}, \quad a = 3 \cdot 10^{-2} \text{ c}^{-1}, \quad b = 10^{-4} \text{ c}^{-1}, \\ c_1 = 1 \text{ c}^{-1}, \quad c_2 = 10^{-2} \text{ c}^{-1}, \quad k_f = 180, \quad k_g = 28.$$

Задание: Подобрать эффективный численный алгоритм для решения обеих систем, основываясь на материале предыдущих разделов.

При разработке программы учитывайте, что в качестве решения задачи рассматриваются только  $\tilde{y}_1(t_i)$  и  $x_n(t_i)$ , а остальные  $x_1(t)$ , ...,  $x_{n-1}(t)$  нас не интересуют, и могут быть забыты сразу же после использования. Положить для задачи  $\tau = 1200$  с.; расчеты проводить на достаточно большом интервале времени, на котором решение выходит на стационарный режим.

Решить задачу (6), полагая последовательно  $n=4, 8, 16, 32, \dots$  Исследовать скорость сходимости погрешности «предельного» перехода, оценивая норму

$$\max_{0 \leq i \leq N} [|y_1(t_i) - \tilde{y}_1(t_i)| + |y_2(t_i) - x_n(t_i)|] = O(n^{-q}).$$

Чему равно  $q$  при достаточно больших  $n$ ?

### 4.3.3. ЗАДАЧА\*

✚ Рассмотрите задачу 4.3.1 при какой-либо другой функции  $\sigma(x)$  (не забывайте, что физический смысл самой системы уравнений из-за этого будет, скорее всего, утрачен).

✚ Для любой заинтересовавшей вас системы с запаздыванием, например, из главы 3, постройте соответствующую ей систему ОДУ. В численном эксперименте покажите, что предельный переход от системы ОДУ к системе дифференциальных уравнений с запаздыванием возможен, укажите конкретные значения параметра запаздывания и скорость сходимости.

## ЛИТЕРАТУРА

---

1. Лихошвай В. А., Фадеев С. И., Демиденко Г. В., Матушкин Ю. Г. Моделирование уравнением с запаздывающим аргументом многостадийного синтеза без ветвления // Сибирский журнал индустриальной математики. 2004. Т. 7. № 1. С. 73–94.
2. Демиденко Г. В., Мельник И. А. Об одном способе аппроксимации решений дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом // Сибирский математический журнал. 2010. Т. 51. № 3. С. 528–546.
3. Демиденко Г. В., Лихошвай В. А., Котова Т. В., Хропова Ю. Е. Об одном классе систем дифференциальных уравнений и об уравнениях с запаздывающим аргументом // Сибирский математический журнал. 2006. Т. 47. № 1. С. 58–68.

4. *Фадеев С. И., Лихошвай В. А., Штокало Д. Н., Королев В. К.* Об исследовании математических моделей матричного синтеза нерегулярных полимеров ДНК, РНК и белков // Сибирские электронные математические известия. 2010. Т. 7. С. 467–475.
5. *Штокало Д. Н.* Исследование математических моделей многостадийного синтеза вещества: дисс. на соискание уч. степени канд. физ.-мат. наук. Новосибирск. 2014. 148 с.
6. *Воропаева О. Ф., Козлова А. О., Сенотрусова С. Д.* Численный анализ перехода от уравнения с запаздыванием к системе ОДУ в математической модели сети онкомаркеров // Вычислительные технологии. 2016. Т. 21. № 2. С. 12–25.

---

## ГЛАВА 5. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ КАК ИНСТРУМЕНТ ИЗУЧЕНИЯ СЛОЖНЫХ ОБЪЕКТОВ И СИСТЕМ

---

Несомненно, к настоящему моменту всем заинтересованным начинающим исследователям стало ясно, что вычислительный эксперимент, связанный с решением не тестовых задач, а реальных (даже самых простых) математических моделей – это наука и искусство одновременно. На данном этапе обучения мы не рассматриваем сложнейшие вопросы конструирования самих математических моделей. Но говорим о дифференциальных уравнениях как о средстве математического описания сложных процессов, объектов и явлений, подчеркивая при этом необходимость действия в строгих рамках математического знания, к какой бы области знания ни принадлежал изучаемый объект.

Для того чтобы изучать процессы и объекты разной природы, исследователи предпринимают огромные усилия – запускают космические корабли для проникновения в глубины Вселенной, бороздят просторы мирового океана, строят сложнейшие технологические установки, бросаются в гущу социальных событий и потрясений. Но есть и другой путь – *постановка вычислительного эксперимента*. В отличие от любого другого эксперимента, он практически не требует непосредственного соприкосновения с реальным объектом – нужны математические модели, алгоритмы и готовые компьютерные

программы, а также, конечно, хорошее знание разных областей математики, эффективный компьютер и грамотный эксперт.

## 5.1. ОБЩИЕ ИДЕИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

---

---

### 5.1.1. О ПОНЯТИИ ОБЪЕКТА И ЕГО МОДЕЛИ

Любой объект является бесконечно сложным и характеризуется бесконечным числом параметров. Поэтому при его изучении чаще всего пользуются его упрощенными образами – моделями, даже когда, например, в силу ограниченности нашего знания, не имеют такого намерения. Далее термин *объект* будем понимать в наиболее широком смысле: объектом может служить не только то, что обычно именуется этим словом, но и любая ситуация, явление, процесс и т. д.

- ✚ Модель (от греческого *modulus* – норма, мера, образец) – это такой материальный или мысленно представляемый объект, который в процессе познания (изучения) заменяет объект-оригинал, сохраняя некоторые существенные для данного исследования свойства.

Пусть имеется реальный объект  $A$ , который обладает бесконечным множеством свойств  $S$ . И пусть мы собираемся исследовать не все возможные свойства из множества  $S$ , а только наиболее существенную для нас совокупность  $S'$  свойств реального объекта  $A$  с помощью математического инструментария. Для этого мы конструируем (или выбираем) математический объект  $A'$ , например, систему дифференциальных уравнений, исследование которого средствами математики должно ответить на по-

ставленные вопросы о свойствах  $S'$ . Тогда  $A'$  называется математической моделью объекта  $A$  относительно совокупности  $S'$  его свойств. Если иметь в виду, что для характеристики свойств  $S'$  требуется ввести понятие «состояние» объекта  $A$ , определить его начальное состояние и соответствующий закон эволюции, то тем самым мы приходим к понятию динамической системы. Изучение динамической системы как модели реального объекта нацелено на то, чтобы понять свойства объекта (как устроен объект или как он развивается), научиться управлять объектом, прогнозировать эффекты от воздействия на объект.

***Этот известный пример из книги В. Н. Тростникова «Человек и информация» [1] наглядно иллюстрирует проблематику моделирования.*** Все начинается с формулировки задачи, т.е. определения объекта исследования.

Формулировка задачи: Требуется узнать, сколько времени будет падать камень с высоты 200 метров?

Модель 1. Камень падает в пустоте; он имеет сферическую форму, его диаметр составляет около 5 см.

*Реалист возразит:* камень вовсе не сферический, а продолговатый. Воздух неоднороден по составу и плотности. И камень вращается при падении.

Модель 2. Камень имеет форму эллипсоида с полуосями 4, 3 и 3 см, он падает так, что большая полуось все время остается вертикальной. Давление воздуха примем равным 760 мм ртутного столба, отсюда найдем плотность воздуха и т.д....

*Реалист возразит:* камень на самом деле вовсе не эллипсоидальный, давление воздуха в том месте и в тот момент не было равно 760 мм ртутного столба и т.д.

*Что же ответит ему математик, занимающийся моделированием?*

*Математик, которого поддерживает физик как эксперт по бросанию камней и механике, ответит следующее: «Точное решение реальной задачи вообще невозможно. Мало того, что форму камня, которая влияет на сопротивление воздуха, невозможно описать никаким математическим уравнением; его вращение в полете также неподвластно математике из-за своей сложности. Да, воздух не является однородным, так как в результате действия случайных факторов в нем возникают флуктуации плотности. Если пойти ещё глубже, нужно учесть, что по закону всемирного тяготения каждое тело действует на каждое другое тело. Отсюда следует, что даже вздох ребенка во сне и маятник настенных часов изменяет своим движением траекторию этого камня. Короче говоря, если мы всерьез захотим точно исследовать поведение какого-либо предмета, то нам предварительно придется узнать местонахождение и скорость всех остальных предметов Вселенной. А это, разумеется, невозможно ...».*

**Вывод:** Чтобы описать явление, необходимо выявить самые существенные его свойства, закономерности, внутренние связи, роль отдельных характеристик явления. Выделив наиболее важные факторы, можно пренебречь менее существенными.

### 5.1.2. СВОЙСТВА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

*Какими же свойствами должна обладать хорошая математическая модель?* Этот вопрос необходимо тщательно, во всех деталях продумать еще на старте моделирования, т.е. задолго до того, как заработала компьютерная программа и получены первые результаты. Перечислим первоочередные свойства:

1. *Неполнота по отношению к объекту.* Опасайтесь соблазна построить самую точную модель, полагая, что «*наилучшей моделью кота является другой кот, а еще лучше – тот самый кот*». Здесь важно хорошо понимать границу нашего знания об объекте и ясно формулировать цель исследования. Связанные с высокой степенью неопределенности погрешности моделирования, которые имеют свойство неудержимо накапливаться, могут многократно превысить пользу от создания полной модели.

2. *Адекватность объекту по заданным свойствам.* Это свойство, в определенной степени, противоречит первому. Ведь если ориентироваться только на требование адекватности, то сложные модели следует предпочитать простым. Но цель исследователя – правильное количественное или качественное описание заданных свойств с некоторой разумной точностью. Поэтому естественно и правильно говорить только о большей или меньшей адекватности модели, которая доказывается в вычислительном эксперименте.

3. *Достаточная простота модели.* Уместно дать определение: модель является достаточно простой, если она позволяет провести в разумные по затратам (времени, труда, средств) и по точности качественный или количественный (в зависимости от постановки задачи) анализ исследуемых свойств и осмыслить результат. Это свойство подразумевает также реализуемость и достаточную полноту математической модели в том смысле, т.е. у исследователя должна быть уверенность, что модель в принципе дает возможность с помощью математических методов а) решить задачу, б) получить интересующие вас сведения о свойствах объекта. Простота не противоположна адекватности, но чем модель более адекватна объекту, тем она сложнее для анализа. Отсюда следует, что представление о простоте мо-

дели, в значительной степени, зависит от самого исследователя, его квалификации и амбициозности.

4. *Множественность, единство и универсальность математических моделей.* Реальный объект может иметь несколько неравносильных математических моделей – это, прежде всего, связано с необходимостью исследования различных систем его свойств. Принципиально разные модели могут появиться при изучении одной и той же системы свойств одного реального объекта. Одна и та же модель может быть актуальна для многих объектов со сходными свойствами (лучший пример универсальной модели – уравнения Навье-Стокса). Так, возможно, нужная вам модель кем-то уже создана?

5. *Наблюдаемость.* Это свойство часто понимают в качественном смысле и тогда относят к разряду желательных: математическая модель и ее переменные должны иметь более или менее непосредственный, ясный содержательный смысл, потому что это дает возможность не только лишний раз проконтролировать модель (например, хорошо, если эти переменные или их комбинации могут быть наблюдаемы в эксперименте), но и наметить план решения математической задачи, а также ориентировочно предвидеть результат решения, что может существенно ускорить процедуру проверки и использования модели. Но в большинстве случаев *наблюдаемость* – это одно из самых строгих формальных требований для моделей с высоким уровнем неопределенностей, которое подразумевает достаточную полноту экспериментальных измерений (наблюдений), определяющих состояние динамической системы (модели). Из-за технических ограничений или иных причин объекты часто наблюдаются лишь частично. Это означает, что не все параметры состояния объекта, включенные в модель, можно измерить напрямую. Иначе говоря – не все переменные задачи (компоненты вектора решения) являются наблюдаемыми. Проблемы с

наблюдаемостью влекут за собой проблемы с идентифицируемостью модели.

6. *Идентифицируемость моделей с высоким уровнем неопределенностей.* Речь идет не только о принципиальной (теоретической), но и практической возможности построения модели с учетом тех соображений, что должен быть баланс между количеством параметров состояния, количеством параметров модели и количеством экспериментальных измерений. Дело в том, что, учитывая определенное количество и качество экспериментальных данных, полученных в конкретных экспериментальных условиях, часто нет уверенности в том, что параметры модели могут быть однозначно оценены. Часто экспериментальных данных недостаточно (учитывая размерность модели), что приводит к параметрам, которые невозможно идентифицировать. А если параметры модели не определены должным образом, то и прогнозы модели не будут адекватны или вообще невозможны. Следовательно, центральный вопрос, на который должна ответить модель, может оказаться неразрешимым.

7. *Чувствительность.* Модель должна быть достаточно «грубой», малые возможные и допустимые поправки не должны кардинально и существенно менять ее поведение. Источников возможных погрешностей слишком много – от нашего неполного искаженного понимания самого объекта до неустранимых погрешностей округления при компьютерных вычислениях. Модель должна слабо реагировать на разные «мелочи». Но, тем не менее, она должна реагировать на определенные воздействия, причем желательно так, как предсказывает эксперимент. Иначе область применимости модели будет крайне узкой, и модель никогда не станет реальным инструментом исследования объекта. В практических вычислениях речь обычно идет о проверке чувствительности модели к малым изменениям параметров с использованием специальных алгоритмов.

Отдельно отметим, что, разумеется, большой интерес представляют модели, обладающие множественностью решений при одних и тех же значениях параметров, будучи сверхчувствительными к начальным данным или некоторым параметрам. Оценить значимость этого факта для характеристики объекта – дело эксперта. Задача математика – вместе с экспертом выделить из совокупности математически интересных фактов те, которые являются физически (химически, биологически и т.д.) значимыми.

8. *Потенциальность или предсказательность.* Построение новой модели связано, как правило, с большими затратами времени и энергии. Поэтому исследователь должен рассчитывать, что модель не только поможет ответить на очевидные вопросы, но и станет удобным и надежным инструментом получения нового знания в перспективе. Это означает, что мы хотим получить от модели больше, чем в нее вложили.

9. *Всякая модель имеет свои границы применимости.* Очевидно, что множество действительно полезных свойств, которыми можно было бы наделить потенциально хорошую модель, не ограничивается этим списком. Мы, как и предлагалось в начале данного раздела, выделили лишь наиболее существенные свойства и, тем самым, сформулировали свою модель этой реальности.

## 5.2. ЧТО ТАКОЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ?

---

Наиболее эффективно математическую модель можно реализовать на компьютере в виде алгоритмической модели. Процесс

построения и использования такой модели называется *вычислительным экспериментом*.

Вычислительный эксперимент – это, достаточно часто, почти единственный способ изучения многих сложных природных систем в физике, астрофизике, химии и биологии, медицине, экономике, психологии, социологии или технике. В отличие от «физического» эксперимента, вычислительный эксперимент не требует сложного оборудования, кроме компьютера, дешев, относительно прост и быстр в реализации, позволяет создать искусственно и просчитать самые невероятные ситуации, проверить разрушительные, реалистичные и, разумеется, фантастические гипотезы. При этом надо понимать следующее.

1. Вычислительный эксперимент – это научный метод изучения, прогнозирования, оптимизации сложных многопараметрических нелинейных процессов, теоретическое и экспериментальное исследование которых традиционными методами затруднено или невозможно.
2. Общая цель вычислительного эксперимента – получение ясного и достаточно полного представления об исследуемом объекте, соответствующего цели исследования и идее создания цифрового двойника объекта.
3. Частная цель – изучение не всех, а только заданных свойств объекта исследования.
4. Трудных вопросов много, среди них самые важные – как построить модель и как решить математическую задачу. Но главный вопрос всего один: *как обеспечить или подтвердить адекватность результатов моделирования?* Ответ на этот главный вопрос не всегда ясен, но путь, по которому следует пройти, ясен всем, кто серьезно занимается математическим моделированием: надо знать и строго соблюдать единую установленную

технологии проведения вычислительного эксперимента, которая только и способна обеспечить научную ценность результатов всей работы.

#### 5.2.1 ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ ЦЕПОЧКА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Последовательность практических действий, называемая технологической цепочкой вычислительного эксперимента, предполагает прохождение исследователем определенных фаз моделирования со следующими целевыми результатами: *объект исследования – физическая модель – математическая модель – численный алгоритм – программа – расчеты на ЭВМ – анализ результатов.*

Впервые в работах А. А. Самарского прозвучала идея о знаменитой триаде «модель – алгоритм – программа» как четком плане действий и как результате большой работы, по завершении которой исследователь получает в руки универсальный, гибкий и недорогой инструмент для исследования [1]. Обсудим эту технологию чуть более подробно.

1. *Уточнение объекта исследования.* Формулируем интересующие нас свойства объекта на языке той или иной науки. Следует с самого начала как можно более четко сформулировать научную цель исследования, ради которой будет разрабатываться модель.

2. *Формулировка «физической» (или содержательной) модели на языке той или иной науки.* Речь идет о механической, или биологической, или социальной и т. п. модели объекта. На этом этапе изучается литература и формулируются базовые гипотезы. Некоторые упрощающие допущения принимаются как аксиомы.

Конечный результат этого этапа может быть сформулирован в виде схемы, определяющей оптимальный для данного исследования список параметров состояния объекта и связи этих параметров. Параметры состояния – это будущие переменные задачи, для которых на следующем этапе будут разрабатываться уравнения. Например, при построении моделей движения жидкостей договорились, что количественными характеристиками движения являются масса или плотность, скорость и т.д. А при другом выборе переменных задачи (параметров состояния объекта) будет построена, в конечном итоге, какая-то другая модель.

Для выбранных переменных вспоминаем или формулируем законы и иные утверждения, установленные в этой науке (например, в механике — законы сохранения массы или энергии, или второй закон Ньютона, а в жизни популяций – соотношения баланса). Успех этого этапа работы, в значительной мере, опирается на неформальное обсуждение всех перечисленных аспектов со специалистами в рассматриваемой области и/или требует от вас самого тщательного изучения литературных источников в данной предметной области, пока еще не связанной с математикой.

3. *Формулировка математической модели.* Выписываем соответствующие уравнения или как-то иначе переводим все предыдущие соображения и рассуждения на формальный математический язык и, тем самым, переходим к математической модели. Формулируем, если требуется, дополнительные соотношения (ими могут быть начальные и граничные условия, определяющие уравнения и т.д.). Изучаем литературу в поисках аналогичных исследований и математических моделей. Главная цель этих поисков – понять, насколько оригинальны ваши идеи, цели, методы и сами модели. Успех этого этапа работы существенно опирается не только на неформальное обсужде-

ние постановки задачи с экспертом из предметной области, исследованием которой вы занимаетесь (биолог, социолог, врач или инженер), но и на квалификацию математика. Здесь следует напомнить себе о свойствах хороших моделей (п. 5.1.2).

4. *Изучение математической модели.* Этот этап состоит, в первую очередь, в теоретическом изучении математической модели, ее качественных свойств, особенностей, возможно – в доказательстве теорем существования и единственности, рассмотрении модельных ситуаций, анализе простейших, например, стационарных и/или автомодельных решений (т.е. все, что вы изучали на первых курсах и знаете, что это не просто). Вполне возможно, что уже в результате этого анализа удастся ответить на самые главные вопросы и закончить решение задачи. Или, наоборот, можно обнаружить существенные дефекты модели, которые возвратят вас к началу этого исследования – к пересмотру упрощающих предположений, принятых аксиом и физических или математических идеализаций. Т.е. заставят повторить все предыдущие этапы моделирования вновь, чтобы усовершенствовать или сменить модель. Но чаще всего случается то, что исследователь быстро приходит к выводу, что аналитическое решение или теоретическое исследование свойств – слишком сложная задача, надо переходить к приближенным вычислениям и численному анализу динамической системы.

Важно: Не спешите делать содержательные выводы и делать прогнозы об объекте и его свойствах на этом этапе! Потому что, вполне вероятно, вы еще не сопоставили свои выводы и решения с реальными наблюдениями и экспериментами. Есть только надежда, что выводы верны. Практика – критерий истинности результатов моделирования. Хотя этого подтверждения бывает нелегко дожидаться (например, как подтверждения существования бозона Хиггса).

5. *Создание численной (компьютерной) модели.* Сложные задачи трудно или невозможно решить теоретическими методами. Таких задач – абсолютное большинство. Однако их относительно просто или совсем непросто, но можно решить с помощью (как правило, приближенных) вычислений на компьютере. Для этого надо а) знать методы вычислений и умело ими воспользоваться для создания численного алгоритма решения задачи, б) знать языки программирования, чтобы написать программный код для реализации этого алгоритма, в) знать хотя бы некоторые общедоступные программные продукты для проведения статистического анализа, обработки данных, графического представления результатов, г) знать технологию проведения методических расчетов, и прочее. Главное – осознавать, что полученное решение задачи неточно, иметь представление об источниках погрешностей, правильно их анализировать.

6. *Оценка адекватности модели.* Нельзя доверять полученному с таким трудом результату, даже если искренне веришь в себя и в модель. Вместо этого надо заняться сбором доказательств адекватности. Их можно разделить условно на две группы:

а) верификация, т.е. процесс установления соответствия между численной моделью и математической моделью. Процесс верификации позволяет достичь уверенности в корректности численной модели, если дискретизация расчетной области выполнена в соответствии с предполагаемыми особенностями решения, алгоритм численного решения работают корректно, дискретное решение с необходимой степенью точности соответствует решению дифференциальной задачи (модели). Хорошо продуманная специалистами процедура верификации включает проверку того, что приближенное решение слабо зависит от выбора метода вычислений, алгоритма, размера шага и расположения узлов сетки (есть и еще ряд требований подобного рода). Все это – методические расчеты, их следует выполнять как

можно более тщательно. С этого надо начать. Но следует иметь в виду, что ни один из этапов верификации на самом деле не позволяет определить, насколько разработанная модель адекватна объекту исследования.

б) Валидация модели, т.е. оценка соответствия численной модели реальному объекту – это общемировой технологический стандарт в области разработки и использования математических моделей. Требуется, в частности, проверить, насколько физические явления и законы, включенные исследователем в численную модель, соответствуют постановке исходной задачи и достаточны для получения требуемых решений. Если известны какие-либо теоретические или «физические» факты о свойствах объекта исследования, которыми также обладает и приближенное решение, то это – хорошо. Если приближенное решение не соответствует каким-либо естественным ограничениям (например, численность народонаселения или концентрация веществ, или энергия, которые никогда не могут быть отрицательной величиной, оказались такими!) – это нехорошо и, это повод для пересмотра метода решения задачи или самой модели (надо проверить ошибки в программе и/или вернуться к началу процесса моделирования). Только сопоставление результатов моделирования с реальными экспериментальными измерениями и наблюдениями дает основание надеяться на адекватность модели и полученных решений задачи.

7. Этап использования модели для проведения исследований объекта – самый приятный. Модель готова, она проверена (хотя, конечно, у нее есть свои границы применимости и даже недостатки). Только теперь появляется возможность для интерпретации (истолкования) результатов исследования, ответов на главные вопросы о свойствах объекта, анализа разных сценариев их проявления, и даже для прогнозов, т.е. для использования модели как исследовательского инструмента. Возможно,

только теперь вы действительно оцените, как важно разработать модель с высоким потенциалом, обладающую универсальностью и всеми другими прекрасными свойствами, о которых мы говорили выше. Надо понимать также, что все новые и особенно «революционные» результаты, выходящие за рамки большой проверки адекватности (см. выше), справедливы только в рамках принятой модели и тоже требуют своей проверки физическим (не численным) экспериментом.

Для завершения темы обратимся к практическим рекомендациям из монографии Ю. И. Неймарка, которые могут быть полезны в ходе всего цикла моделирования: «Чем проще модель, тем меньше возможность ошибочных выводов. Модель должна быть простой, но не проще, чем это возможно. Пренебрегать можно чем угодно, нужно только знать, как это повлияет на решение. Модель и расчет не следует делать точнее исходных данных. Выводы не должны существенно меняться в пределах ошибок исходных данных и ошибок счета; если этого не удастся достичь за счет модификаций модели – тогда, возможно, необходимы более точные исходные данные. При анализе результатов исследования модели важны не только конкретные численные результаты, но и понимание, почему и как все происходит, как все это зависит от параметров. Во всяком случае, к этому следует стремиться, хотя в некоторых случаях это удастся далеко не сразу».

## ЛИТЕРАТУРА

---

1. *Тростников В. Н.* Человек и информация. М.: Наука. 1970. 187 с.
2. *Овсянников Л. В.* Введение в механику сплошных сред: Ч. 2. Новосибирск: Изд-во НГУ. 1976. 69 с.
3. *Яненко Н. Н., Преображенский Н. Г., Разумовский О. С.* Методологические проблемы математической физики. Новосибирск: Наука. 1986. 296 с.
4. *Белолипецкий В. М., Шокин Ю. И.* Математическое моделирование в задачах охраны окружающей среды. Новосибирск: Инфолио-пресс. 1997. 240 с.
5. *Самарский А. А., Михайлов А. П.* Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. М.: Физматлит. 2001. 320 с.
6. *Неймарк Ю. И.* Математическое моделирование как наука и искусство: Учебник. Н. Новгород: Изд-во Нижегородского гос. ун-та. 2010.
7. *Ибрагимов Н. Х.* Практический курс дифференциальных уравнений и математического моделирования. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2012. 332 с.
8. *Хакимзянов Г. С., Чубаров Л. Б., Воронина П. В.* Математическое моделирование: учебное пособие. Новосибирск: Новосибир. гос. ун-т. 2014. 264 с.

---

# ПРИЛОЖЕНИЕ. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ ОДНОЙ БИОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

---

В этом разделе детально разобран пример численного анализа динамической математической модели, которая предлагалась в предыдущих разделах для самостоятельного исследования в рамках различных практических заданий.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

---

---

Нормальное функционирование живого организма сопровождается накоплением дефектов в клеточной структуре и в процессах транскрипции и трансляции белков, возникновением ферментов с дефектным функционированием, с которыми механизмы возмещения не могут справиться. Ответом здорового организма на накопленные дефекты является апоптоз – генетически запрограммированная гибель клеток, не только позволяющая удалить ненужные или дефектные клетки, но и выполняющая центральную роль в поддержании клеточного гомеостаза.

Одну из ключевых ролей в апоптозе играет белок p53, кодируемый геном p53 [1]. Вовлеченный во многие жизненно важные процессы, белок p53 экспрессируется во всех клетках

организма. При отсутствии повреждений генетического аппарата p53 находится в неактивном состоянии. В случае превышения физиологически допустимого уровня повреждений ДНК, возникающих под воздействием ультрафиолетового излучения, ионизирующей радиации или различных химических веществ, задачей p53 становится избавление организма от генетически дефектных клеток.

Получая сигналы о клеточном повреждении, белок p53 либо останавливает клеточный цикл для восстановления генома, либо инициирует апоптотическую гибель клетки. Одновременно белок p53 широко известен как важный подавитель опухолевых процессов, поскольку он способен отслеживать раковые клетки и инициировать их апоптоз, т.е. самоуничтожение. Установлено, что *лабораторные мыши, вырабатывающие слишком много белка p53, старели слишком рано. Кроме того, у них преждевременно развивался остеопороз и уменьшался размер внутренних органов, но, несмотря на это, не развивался рак.*

Считается, что в нормальных клетках содержание и активность p53 должны быть достаточно низкими. Однако снижение функции p53 должно быть своевременно компенсировано, чтобы обеспечить необходимый ответ p53 на возможный стресс. Таким образом, в организме должен действовать механизм регулирования p53, чтобы избежать как избыточного продуцирования, так и его чрезмерного подавления. Белок Mdm2 считается ключевым отрицательным регулятором p53, который позволяет поддерживать крайне низкую концентрацию p53 в нормальной клетке, а в ответ на сигналы о повреждении ДНК быстро деградирует, обеспечивая накопление и полную активацию p53 в условиях стресса. Одновременно, Mdm2 активируется при повышении уровня белка p53, способствуя его разрушению, что важно для восстановления низкого уровня p53 после завершения стресса.

Примерно так же действует и еще один регулятор p53 – белок Wip1. Механизм функционирования системы p53-регулятор чрезвычайно сложен, так что ответы на важные для клинической практики вопросы зачастую оказываются взаимоисключающими.

Почему тогда люди болеют раком? Оказывается, дисбаланс в системе взаимодействия p53-Mdm2, p53-Wip1 может стать причиной серьезных патологических изменений органов и тканей. Так, с последствиями сбоев, обусловленных избыточным продуцированием p53 и гиперактивацией p53-зависимого апоптоза, связываются такие тяжелейшие заболевания, как различные виды нейродегенерации, остеопороз, остановка роста и преждевременное старение внутренних органов. В то же время, ***утрата функции белка p53 обнаруживается в 50-70% случаев злокачественных опухолей человека.***

Однако не все так плохо. Было замечено, что *естественное поведение системы p53-регулятор можно использовать в терапевтических целях.* Например, потеря активности p53 традиционно рассматривается как нежелательное и опасное событие, а восстановление активного p53, в том числе за счет искусственного срыва взаимодействия p53 и Mdm2, считается в противоопухолевой терапии одним из ключевых элементов, обеспечивающих нормальное прохождение сигналов остановки деления и/или апоптоза в раковых клетках. Одновременно следует учитывать и то обстоятельство, что p53-зависимый апоптоз, индуцируемый в нормальных тканях, может стать причиной тяжелых побочных эффектов, ограничивая эффективность противоопухолевой терапии. В связи с этим искусственное ингибирование p53 может иметь защитный эффект, поддерживая нормальную функцию ткани в процессе регенерации.

Таким образом, исследование функционирования белка p53 и его регуляторов Mdm2 и Wip1 имеет первостепенное зна-

чение как с точки зрения разработки новых подходов к лечению онкологических заболеваний, так и для определения стратегии профилактики множества болезней, включая меры по замедлению процессов старения.

***В современных условиях подобные исследования не обходятся без эффективной математической модели. Нужен алгоритм решения задачи, и нужно хорошо понимать, какими свойствами обладают решения принятой модели, согласуются ли они с экспериментальными данными. Все это позволит не только проводить необходимые для медицины исследования, но и использовать эту модель при разработке новых более полных математических моделей для еще более тщательного изучения механизмов защиты от рака, деменций и многих других самых опасных заболеваний и их раннего обнаружения.***

## 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

При математическом моделировании рассмотрим элементарную биологическую систему p53-регулятор и будем для определенности под регулятором понимать Mdm2. В качестве математической модели функционирования биологической системы белков p53 и Mdm2 принимается следующая динамическая система уравнений с запаздывающим аргументом [2]:

$$\frac{dy_1}{dt} = s - af(y_1(t), y_2(t)) - by_1(t), \quad (1)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = c_1g(y_1(t - \tau), y_2(t - \tau)) - c_2y_2(t), \quad (2)$$

где взаимодействие белков определяется функциями

$$f(y_1, y_2) = \frac{1}{2} \left( y_1 + y_2 + k_f - \sqrt{(y_1 + y_2 + k_f)^2 - 4y_1y_2} \right), \quad (3)$$

$$g(y_1, y_2) = \frac{y_1 - f(y_1, y_2)}{y_1 + k_g - f(y_1, y_2)}. \quad (4)$$

Здесь  $y_1$  и  $y_2$  – концентрации белков p53 и Mdm2 соответственно. Параметрами системы являются  $s$  – скорость генерации p53;  $a$  – скорость деградации p53 посредством убиквитинирования;  $b$  – скорость самопроизвольного распада p53;  $c_1$  – скорость производства белка Mdm2, в том числе за счет взаимодействия с p53;  $c_2$  – скорость деградации белка Mdm2;  $k_f$  – параметр, имеющий смысл константы диссоциации белкового комплекса p53–Mdm2;  $k_g$  – константа диссоциации белка p53 и гена Mdm2.

Для численного решения системы (1)–(4) задаются начальные данные в виде функций “истории” на интервале времени, предшествующем началу наблюдений:

$$y_k(\theta) = \varphi_k(\theta), \quad \theta \in [-\tau, 0], \quad k = 1, 2. \quad (5)$$

Значения параметров математической модели

$$\begin{aligned} s &= s^{basal} = 1 \frac{\text{a.u.}}{\text{c}}, & a &= a^{basal} = 3 \times 10^{-2} \frac{1}{\text{c}}, & b &= b^{basal} = 10^{-4} \frac{1}{\text{c}}, \\ c_1 &= c_1^{basal} = 1 \frac{\text{a.u.}}{\text{c}}, & c_2 &= c_2^{basal} = 10^{-2} \frac{1}{\text{c}}, & & \\ k_f &= k_f^{basal} = 180 \text{ a.u.}, & k_g &= k_g^{basal} = 28 \text{ a.u.} & & \end{aligned} \quad (6)$$

согласованы с данными известных лабораторных исследований и могут рассматриваться как базальные, т.е. соответствующие нормальному состоянию здорового организма (здесь а.у. – это

общепринятые «условные единицы» изменения уровней белков, с – секунды). Но этот вопрос требует дополнительных исследований, причем особое значение имеет согласование решения задачи при этих параметрах с экспериментальными данными.

Параметр  $\tau$  определяет время запаздывания реакции Mdm2 на изменение состояния белка p53 и, согласно данным лабораторных наблюдений, может варьировать от нескольких минут до нескольких часов в зависимости от фактора стресса системы (запаздывание учитывает, в частности, период полураспада мРНК, время диффузии, время, необходимое для пересечения ядерной мембраны и транскрипции/трансляции).

Необходимо отметить, что при выборе математической модели решающее значение имела способность описать в рамках системы (1)–(4) ряд важных свойств системы p53–Mdm2, наблюдаемых в лабораторных экспериментах. Их обсуждение мы сейчас опускаем.

Перед использованием модели она обезразмеривалась с применением двух масштабов – масштаба времени и масштаба изменения уровня белка. В дальнейшем при оценке полученных численных решений удобно использовать стационарное решение системы дифференциальных уравнений (1)–(4), которое представляет собой результат решения следующей системы нелинейных алгебраических уравнений [2]:

$$\begin{aligned} y_2^{(1)} &= \frac{c_1}{c_2} \left( 1 - \frac{ak_g}{(a+b)y_1 - s + ak_g} \right), \\ y_2^{(2)} &= \frac{(s - by_1)}{a} \left( 1 + \frac{ak_f}{(a+b)y_1 - s} \right). \end{aligned} \tag{7}$$

### 3. ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ НАЧАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

---

Система уравнений (1)–(4) имеет ряд свойств, которые необходимо учитывать при выборе алгоритма решения задачи – это запаздывание, нелинейность и жесткость.

При наличии функций с запаздывающими аргументами ключевой является проблема задания начальных условий – функций «истории» (5). В настоящей работе запаздывание  $\tau$  является варьируемым параметром, от значения которого решение зависит самым существенным образом. Вследствие этого исследованию решения от величины запаздывания и от начальных условий необходимо уделять самое пристальное внимание.

Существует также проблема нарушения гладкости решения в точке  $t = 0$  и последующего переноса разрывов производных в точки, кратные величине запаздывания  $\tau$ . Эта проблема известна из теории, но она является причиной серьезных трудностей и в практике приближенных вычислений. Особое значение имеет тщательный выбор метода решения задачи.

При проведении расчетов требуется самый тщательный контроль за шагом сетки и его влиянием на решение. Дело в том, что при варьировании параметров модели, особенно параметра запаздывания, можно легко попасть в область, где система (1)–(4) становится жесткой. Требуется исключить негативные вычислительные эффекты и паразитные решения, обусловленные не столько самой неустойчивостью (это слишком очевидно), сколько приближением к границе области устойчивости.

В основе алгоритма решения задачи лежит известный метод шагов (см. п. 3.2.1). Первоначально решение уравнений проводится на интервале  $(0, \tau]$  с привлечением функций «истории»  $\varphi_1(\theta)$ ,  $\varphi_2(\theta)$ , заданных на интервале  $\theta \in [-\tau, 0]$ , для определения функций с запаздывающими аргументами (см. уравнение (3.2)):

$$\frac{du(t)}{dt} = f(t, u(t), \varphi_0(t-\tau)), \quad t_0 \leq t \leq t_0 + \tau; \quad u(t_0) = \varphi_0(t_0).$$

В дальнейшем расчеты проводятся последовательно на интервалах размером  $\tau$  с «историей», полученной как решение системы на предыдущем интервале. Из соображений простоты численной реализации во всех расчетах величина запаздывания  $\tau$  полагалась кратной шагу расчетной сетки (при условии, что величина шага является достаточно малой величиной, это ограничение не оказывает существенного влияния на характер решения).

Для численного решения привлекался ряд численных методов: предиктор-корректор, основанный на методах Эйлера и Рунге-Кутты, методы Адамса и Рунге-Кутты, метод типа Розенброка и Гира разных порядков точности. Дополнительно были выполнены расчеты методом Адамса с корректировкой решения в окрестности разрывов производных, специально предназначенным для решения ОДУ с запаздыванием, а также метод Адамса-Бэшфорда-Моултона 4-го порядка [4–6].

## 4. МЕТОДИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

---

### 4.1. ТЕСТОВЫЕ РАСЧЕТЫ. ВЫБОР МЕТОДА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

На первом этапе анализ работоспособности методов проводился в численных экспериментах с простейшим уравнением с запаздывающим аргументом (*тестовое задание 3.3.1*). В данной тестовой задаче расчеты проводились сначала на последовательности сеток, а затем на сетке с оптимальным шагом по времени  $h=0.0125$ . В последнем случае относительная погрешность решения в равномерной норме, в частности, по методу Адамса 4-го порядка составила  $2.66683 \times 10^{-7}$ , по методу Рунге-Кутты 4 порядка –  $2.42773 \times 10^{-4}$ , по методу типа Розенброка –  $5.66895 \times 10^{-3}$ .

Основываясь на результатах тестовых расчетов, для решения задачи (1)–(5) использовался метод Адамса 4-го порядка. Дополнительно (в методических целях) привлекались методы предиктор-корректор и Адамса-Бэшфорга-Моултона. Во всех случаях для уточнения решения системы (1)–(5) устраивались итерации по нелинейности, при этом количество требуемых итераций не превышало 2–3.

Далее введем обозначение:  $\bar{y} = (y_1^h, y_2^h)$  – вектор приближенного решения задачи (1)–(5), при этом всюду ниже верхние индексы будут опускаться, поскольку всегда речь будет идти только о приближенном решении разностной задачи.

### 4.2. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПРИ БАЗАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ ПАРАМЕТРОВ. ОЦЕНКА РОЛИ ПАРАМЕТРА ЗАПАЗДЫВАНИЯ

Прежде чем приступить к исследованию работоспособности принятой математической модели (1)–(5) под влиянием факторов, которые в биологической литературе определяются как

стрессовые по отношению к нормальному состоянию здорового организма, необходимо получить более детальное представление о решении, соответствующем условному нормальному (базальному) состоянию (6).

Проведена серия расчетов задачи (1)–(6) с начальными условиями, определяемыми нулевыми значениями функций “истории”  $\varphi_k$  на интервале  $[-\tau, 0]$ . При базальных параметрах (6) единственным ключевым параметром, способным (гипотетически) повлиять на характер решения, является параметр запаздывания. Численные эксперименты показали, что при  $\tau = 0$  поведение решения можно охарактеризовать как переход с нулевых значений на новый уровень концентраций – стационарные предельные значения  $y_1^{basal} \approx 154.6347$  (p53),  $y_2^{basal} \approx 81.3105$  (Mdm2).

С ростом запаздывания  $\tau$  в системе p53–Mdm2 возникают затухающие колебания уровней белков, иллюстрирующие их взаимодействие по принципу обратной связи в условиях относительно слабого повреждения. При этом было установлено, что система (1)–(6) имеет состояние равновесия  $y_1^{basal}$ ,  $y_2^{basal}$ , к которому сходятся все затухающие решения, соответствующие достаточно широкому диапазону значений параметра запаздывания  $\tau$ . Таким образом, полученное при  $\tau = 0$  решение обладает единственным устойчивым предельным состоянием – фокусом – на рассмотренном интервале значений  $\tau$ .

Расчетные данные на рис. 1а демонстрируют начальный этап линейного роста  $y_1(t)$ , на котором достигается пиковое значение концентрации p53, обусловленное первоначально низким уровнем Mdm2 и запаздыванием реакции Mdm2 на рост p53 (величина участка роста соответствует величине запазды-

вания). Спустя время  $\tau$  начинается рост  $y_2(t)$  до уровня, необходимого для запуска механизма обратной связи, который характеризуется затухающими колебаниями обеих компонент решения (практически в противофазе) и сходимостью этого процесса к неподвижной точке – значениям концентраций  $y_1^{basal}$  (p53) и  $y_2^{basal}$  (Mdm2).

На рис. 16 приведены максимальные значения концентраций  $y_{1m} = \max_{k=0}^N(y_1(t_k))$  и  $y_{2m} = \max_{k=0}^N(y_2(t_k))$  при различных значениях запаздывания  $\tau$ , где  $N$  – число шагов расчетной сетки. Видно, что в рамках принятой модели с увеличением  $\tau$  пиковые значения уровней p53 увеличиваются, а рост максимальных значений уровней белка Mdm2 ограничен сверху при всех рассмотренных  $\tau \geq 1200$  с. Одновременно можно наблюдать существование нижней границы для p53, а также весьма продолжительные по времени участки релаксации с близкими к постоянным значениями уровней двух белков (области жесткости системы (1)–(4)).

Описанные численные эксперименты проводились для  $\tau \in [0, 25000]$  (с). При дальнейшем увеличении параметра запаздывания также не удалось получить других типов решений: в базальных условиях математическая модель всегда обеспечивает запуск биологического механизма отрицательной обратной связи в виде затухающих колебаний двух концентраций, происходящих в противофазе. Период затухающих колебаний весьма близок к значению  $2\tau$ , которое согласуется с известными теоретическими представлениями о решениях динамических систем с запаздыванием.

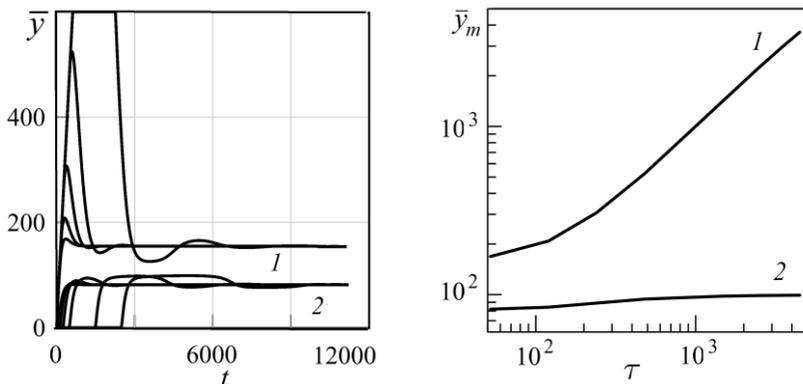


Рис. 1а. Изменение во времени компонент вектора  $\bar{y}=(y_1, y_2)$  – уровней p53 (линии 1) и Mdm2 (линии 2) в зависимости от параметра запаздывания  $\tau$ . Каждая из линий групп 1 и 2 располагаются в соответствии с ростом  $\tau = 52, 120, 240, 480, 1480$  с.

Рис. 1б. Максимальные значения концентраций  $y_{1m}$  и  $y_{2m}$  в зависимости от величины запаздывания  $\tau$ : 1 –  $y_{1m}$ , 2 –  $y_{2m}$ .

Чтобы более ясно представить характер решения, на рис. 2 показаны полученные в расчетах интегральные кривые и фазовые траектории в зависимости от значения параметра запаздывания. Можно видеть, что увеличение параметра запаздывания приводит к все более интенсивному возмущению системы. Однако асимптотически система приходит к одному и тому же стационарному состоянию, которое определяется значениями параметров системы.

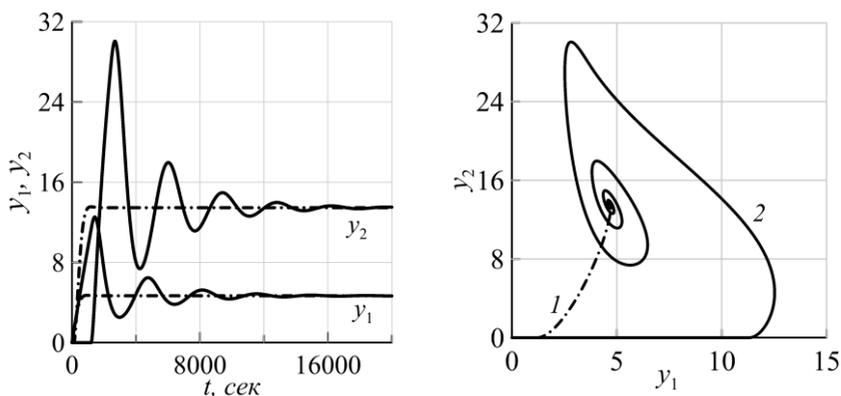


Рис. 2. Интегральные кривые (слева) и фазовые траектории (справа), полученные при  $s=0.01$ . Линии 1 –  $\tau = 120$  с, линии 2 –  $\tau = 1200$  с.

#### 4.3. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПРИ БАЗАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ ПАРАМЕТРОВ. ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ НАЧАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ

Проведена серия численных экспериментов, в которых в качестве начальных данных – функций «истории»  $\varphi_k(\theta)$  ( $k = 1, 2$ ) – использовались либо нулевые значения, либо стационарные значения концентраций  $y_1^{basal}$ ,  $y_2^{basal}$  с внесением в них «стрессовых» возмущений – от 10% до 4 порядков (в сторону убывания и возрастания, поочередно для каждой компоненты решения  $y_1$ ,  $y_2$  или одновременно для обеих). При этом варьировался также параметр запаздывания, а значения параметров системы  $s$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $k_f$ ,  $k_g$  принимались базальными (6).

Дополнительно выполнены численные эксперименты, в которых в качестве начальных данных на интервале  $[-\tau, 0]$  использовались периодические решения данной задачи (такой

тип решений, в частности, возможен при  $k_f = 0.01k_f^{basal}$ ,  $s = 0.1s^{basal}$  и  $\tau = 120c$ , а также при  $k_f = 0.067k_f^{basal}$  и  $\tau = 1200c$ , когда остальные параметры – базальные), а далее при всех  $t \geq 0$  расчеты проводились в базальных условиях (6).

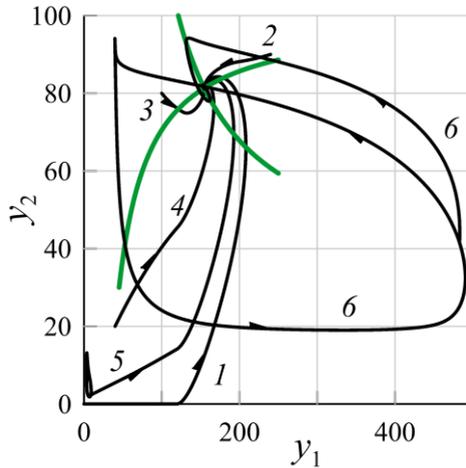


Рис. 3. Зависимость значений концентраций p53 ( $y_1$ ) и Mdm2 ( $y_2$ ) в базальных условиях при различных начальных данных: 1 -  $\varphi_k(\theta) = 0$  ( $k = 1, 2$ ); 2 -  $\varphi_1(\theta) = 240$ ,  $\varphi_2(\theta) = 90$ ; 3 -  $\varphi_1(\theta) = 80$ ,  $\varphi_2(\theta) = 100$ ; 4 -  $\varphi_1(\theta) = 40$ ,  $\varphi_2(\theta) = 20$ ; 5 -  $\varphi_k(\theta)$  – предельные циклы при  $k_f = 0.01k_f^{basal}$ ,  $s = 0.1$ ,  $\tau = 120c$ ; 6 -  $\varphi_k(\theta)$  – предельные циклы при  $\tau = 1200c$ ,  $k_f = 0.067k_f^{basal}$ ; зеленые линии – аналитическое стационарное решение (7).

На рис. 3 представлены результаты этих численных экспериментов. Расчеты показывают, что при всех рассмотренных вариантах начальных условий характер асимптотического поведения системы (1)–(6) практически не меняется независимо от величины запаздывания:  $y_1(t)$ ,  $y_2(t)$  возвращаются к установившимся ранее предельным значениям  $y_1^{basal}$ ,  $y_2^{basal}$ , т. е. решение задачи имеет устойчивый фокус. На рис. 3 видно, что этот фокус практически совпадает с точкой пересечения зеленых кривых, соответствующих двум ветвям аналитического стационарного решения задачи (7); стрелками показано направление изменения значений  $y_1$ ,  $y_2$  с ростом времени.

## 5. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

---

Для оценки адекватности модели (1)–(4) выполнено сопоставление вычисленных и измеренных в экспериментах [3] характерных значений уровня сигналов p53 и Wip1. Известно, что белок Wip1 индуцируется в ответ на экологические стрессы; как и Mdm2, он играет важную роль в регуляции p53. В эксперименте [3] клетки подвергаются гамма-облучению. Гипотетически это должно вызвать повреждения ДНК, и соответствующий биохимический сигнал о повреждении будет послан p53. При получении сигнала p53 оценивает уровень повреждения и формирует ответ, решая судьбу клетки.

На рис. 4 каждый ромб (это экспериментальные данные) показывает состояние одной клетки. Можно видеть, что большая часть клеток имеет состояния, которые характеризуются относительно низкими уровнями p53 и Wip1. Это, по-видимому,

означает, что облучение в эксперименте было не слишком сильным для этой группы клеток, и нормальная взаимосвязь в системе p53-Wip1 не нарушена. Но есть и клетки с критически высокими уровнями p53 или Wip1, и это свидетельствует об утрате отрицательной обратной связи в системе p53-Wip1, т.е. о том, что Wip1 не выполняет функцию регулятора p53.

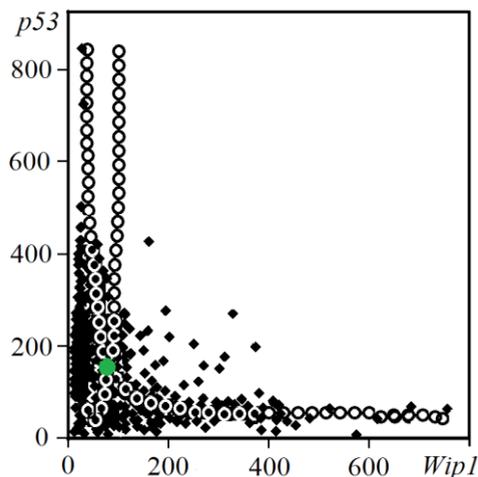


Рис. 4. Фазовый портрет состояний сети p53-Wip1 в норме и в условиях стресса: ромбы – лабораторные измерения [3]; кружки – модель; зеленая точка – усредненное базальное состояние.

Слишком высокий уровень p53 в клетке при низком уровне Wip1 показывает, что ответ p53 на сигнал о повреждении (с высокой вероятностью) заключается в запуске терминальной программы для клетки с сильным повреждением (это означает либо прекращение деления клетки и отложенную смерть в результате старения, либо немедленную самоликвидацию клетки путем апоптоза). Так реализуется функция p53 как «стража генома» для всех клеток, но особое значение такая реакция приобретает в случае раковых клеток.

Низкий уровень p53 в клетке при высоком уровне Wip1 показывает, что ответа со стороны p53, скорее всего, не последует, команды на самоликвидацию клетки не будет, каким бы сильным ни было повреждение. Значит, клетка сохранится, может размножиться, продолжая накапливать дефекты, и даже стать бессмертной, как это бывает с раковыми клетками.

На рис. 4 видно, что при базальных значениях параметров (6) и в их окрестности стационарные значения компонент вектора решения системы (1)–(5) остаются на достаточно низком уровне (это базальное состояние показано зеленой точкой на рис. 4). Кроме того, модель описывает и критические состояния системы p53–Wip1. Расчетные данные хорошо согласуются с лабораторными измерениями [3]. И они также согласуются с известными из других работ представлениями о поведении p53 и его регулятора в норме и в условиях стрессовых воздействий. Например, модель (1)–(5) хорошо воспроизводит наблюдаемые в эксперименте колебательные режимы функционирования системы, характерные для низкого уровня повреждения ДНК. В дальнейшем модель (1)–(4) показала адекватность при описании почти 20-ти различных лабораторных экспериментов [7].

## 6. ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ КАЧЕСТВЕННЫХ СВОЙСТВ РЕШЕНИЙ. ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ РЕШЕНИЯ ОТ ПАРАМЕТРОВ

---

Для того чтобы еще лучше понять свойства решений математической модели и их биологическую адекватность в окрестности принятых значений параметров (6), необходимо изучить,

как реагирует система уравнений на поочередное изменение этих параметров.

Отметим, что, *если адекватность модели подтверждена количественными сопоставлениями с экспериментальными данными, то тогда эти численные эксперименты можно интерпретировать как исследование реакции биологической системы на стрессы*, моделируемые отклонением основных параметров системы –  $s, a, b, c_1, c_2, k_f, k_g$  – от базальных значений (6). Примем теперь стационарное решение  $y_1^{basal}$ ,  $y_2^{basal}$  задачи (1)–(6) в качестве эталона, характеризующего в рамках рассмотренной модели нормальное состояние здорового организма – базальных значений концентраций p53 и Mdm2. Тогда для оценки реакции системы будем соотносить полученные в стрессовых ситуациях концентрации p53 и Mdm2 с их базальными значениями.

В ходе численных экспериментов значение  $s$  – скорости генерации p53 – варьировалось как в сторону возрастания, так и сторону убывания (дополнительно варьировался параметр запаздывания  $\tau$ ). Некоторые результаты расчетов представлены на рис. 5. Отклонения параметра  $s$  от базального составляли от 20% до 4 порядков. При  $\tau = 120$  с при незначительном завышении значения  $s$  были получены монотонно возрастающие решения, либо решения в виде затухающих колебаний, обладающие собственным (соответствующим конкретному значению  $s$ ) устойчивым фокусом. Возрастание параметра  $s$  более чем в 2 раза приводит к росту концентрации p53 не менее чем в 3 раза относительно ее базального значения. Более существенное завышение параметра  $s$  может приводить к резкому росту концентрации p53, при котором ингибитор (Mdm2) практически не оказывает должного регулирующего воздействия

(этот вариант развития процесса иллюстрирует, в частности, кривая 7 на рис. 5).

В свою очередь снижение  $s$  может иметь негативные последствия в виде чрезмерно низкого содержания обоих белков, особенно p53. В этих условиях увеличение параметра запаздывания до значений  $\tau \in [5000, 30000]$  (с), сопоставимых с наблюдаемыми в целом ряде лабораторных экспериментов, выводит систему из устойчивого состояния. При этом решение имеет вид затухающих колебаний с ярко выраженным временным интервалом релаксации (участком быстрого изменения концентрации одного из белков на фоне почти постоянного уровня концентрации второго белка), однако затухание происходит весьма медленно в сравнении с характерными временами выхода человека из болезненного состояния. В частности, при  $s = 0.01s^{basal}$  и запаздывании, равном 8 часам, система не достигает стационарного устойчивого состояния даже за 120 суток (здесь для ускорения сходимости в качестве функций «истории» выбирались полученные в ходе численных экспериментов постоянные значения, достаточно близкие к соответствующим стационарным значениям). Отметим также, что в данном случае устойчивый (определенный из аналитического стационарного решения (7)) уровень белка p53 в 33 раза, а Mdm2 – в шесть раз ниже базальных значений. Тот же характер поведения решения отмечается при  $s = 0.1s^{basal}$ , при этом устойчивый уровень концентрации белка p53 почти в 8 раз, а Mdm2 – более чем вдвое ниже базальных значений.

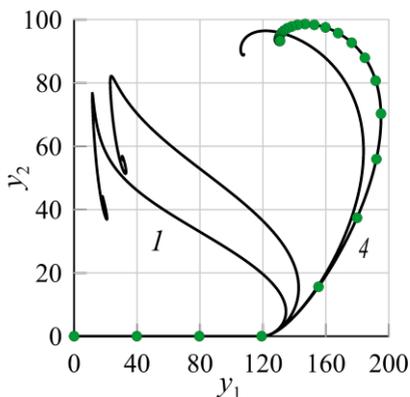
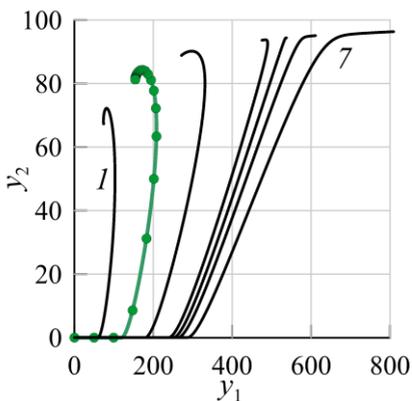


Рис. 5. Решение задачи (1)–(6) при различных значениях параметра  $s = qs^{basal}$ . Линии 1–7 соответствуют  $q = 0.5, 1, 1.5, 2.0, 2.1, 2.2, 2.4$ ;  $\tau = 120$  с.

Рис. 6. Решение задачи (1)–(6) при различных значениях параметра  $a = qa^{basal}$ : линии 1–4 соответствуют  $q = 10.0, 5.0, 1.2, 1.0$ ;  $\tau = 120$  с.

Замечание. На рисунках, изображающих фазовые портреты, для наглядности зелеными маркерами помечены линии, соответствующие решению при базальных значениях параметров (6).

Значение скорости Mdm2-зависимой деградации белка p53, т.е. параметра  $a$ , варьировалось как в сторону возрастания, так и сторону убывания (дополнительно варьировался параметр запаздывания  $\tau$ ). Следует отметить, что общая закономерность поведения аналогична той, которая показана на рис. 5 для параметра  $s$ , но только изменилось направление роста  $q$ . Для завышенных (до 100 раз) значений скорости деградации белка p53 при всех  $\tau \in [0, 10000]$  (с) были получены затухающие решения, обладающие собственным устойчивым фокусом. На рис. 6 можно видеть, что при сколько-нибудь заметном уве-

личении значения параметра  $a$  в системе нарастают релаксационные эффекты, система становится жесткой. Расчеты показали также, что резкое уменьшение параметра  $a$  может привести к опережающему росту уровня p53 ( $y_1$ ) на фоне медленного накопления Mdm2 ( $y_2$ ) (то же самое наблюдается с ростом  $s$ ). При этом в расчете получен чрезмерный рост концентрации p53, при котором регулирующие функции Mdm2 не реализуются. При  $\tau = 5000$  с подобное положение наблюдается при снижении данного параметра в 5 раз: тогда уровень p53 повышается почти в 30 раз в сравнении с базальным уровнем, а уровень Mdm2 остается близким к базальному (увеличивается лишь в 1.22 раза).

В ходе численных экспериментов варьировался также параметр  $b$  – скорость самопроизвольного распада p53. Результаты модельных расчетов при  $\tau = 120$  с (рис. 7), а также при значениях запаздывания  $\tau \geq 5000$ с, характерных для реальных биологических процессов в клетках живых организмов, показывают падение уровней обоих белков при существенном (на 2–4 порядка) увеличении параметра  $b$ . Установлено, что в рамках принятой модели значение параметра  $b = b^{basal}$  представляет собой минимальный предел: при уменьшении  $b$  ниже базального решение (по крайней мере, при всех  $\tau \in [0, 10000]$  (с)) практически не меняется. Так, на рис. 7 линии 4–5, иллюстрирующие решение при уменьшении параметра  $b$  на три порядка, оказались весьма близкими друг к другу.

Исследование зависимости решения от параметра запаздывания показало, что данному типу стресса при  $\tau \in [0, 5000]$  (с) соответствуют только затухающие решения. Таким образом, при варьировании параметра  $b$  решения в виде неконтролируемо-

го роста p53 обнаружены не были. При этом с ростом  $\tau$  более выраженными оказываются релаксационные эффекты.

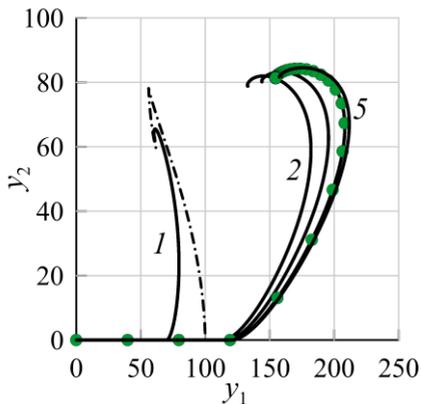


Рис. 7. Решение задачи (1)–(6) при различных значениях параметра  $b = qb^{basal}$ , где  $q=100, 10, 5, 1, 0.001$  (линии 1–5,  $\tau = 120$  с); штрих –  $q=100, \tau = 1200$  с.

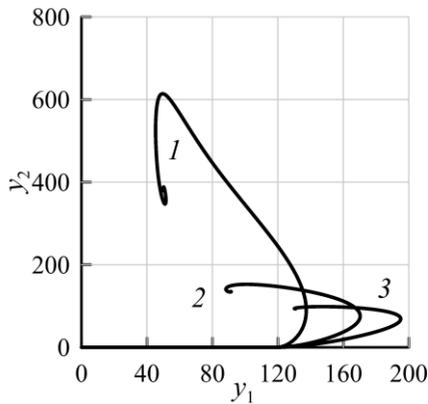


Рис. 8. Решение задачи (1)–(6) при варьировании  $c_1 = qc_1^{basal}$ ,  $q = 10, 2, 1.2$  (линии 1–3,  $\tau = 120$  с).

Численные эксперименты, в которых варьировался параметр  $c_1$  (скорость генерации белка Mdm2), проводились для  $\tau \in [120, 30000]$  (с) и  $10^{-4} \leq q \leq 5 \times 10^4$ , где  $q = c_1 / c_1^{basal}$ . Некоторые характерные решения представлены на рис. 8. Численные эксперименты показали, что при существенном (на порядок и более) уменьшении базального значения  $c_1$  возможен чрезмерный рост уровня p53 при крайне низком уровне Mdm2. И, напротив, при увеличении  $c_1$  наблюдаются, в основном, зату-

хающие решения с весьма низкими стационарными значениями p53, обусловленными резким ростом уровня Mdm2. Это свидетельствует о возможном нарушении обратной связи p53–Mdm2. Эти негативные процессы становятся наиболее выраженными при значениях  $\tau$ , близких к реальным значениям запаздывания, известным из лабораторных измерений.

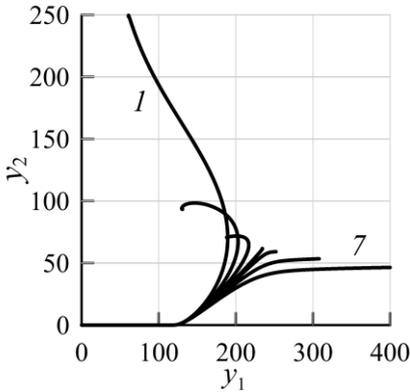


Рис. 9. Решение (в фазовой плоскости) при различных значениях параметра  $c_2 = qc_2^{basal}$ ,  $q=0.2$  (1), 0.833 (2), 1.2 (3), 1.425 (4), 1.5 (5), 1.7 (6), 2 (7);  $\tau = 120$  с.

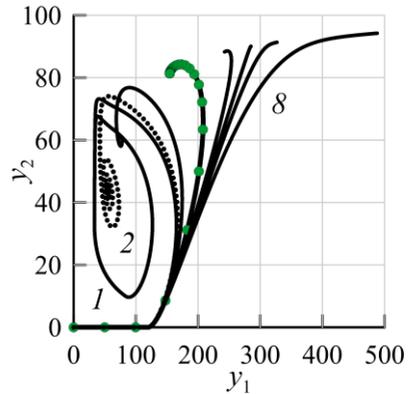


Рис. 10. Решение (в фазовой плоскости) при различных значениях параметра  $k_f = qk_f^{basal}$ ,  $q=0$  (1), 0.04 (2), 0.2 (3), 1 (4), 2 (5), 2.5 (6), 3 (7), 5 (8);  $\tau = 120$  с.

Расчеты при различных значениях параметра  $c_2$  – скорости деградации Mdm2 – показывают, что характер изменения решений аналогичен тому, который наблюдался при варьировании параметра  $c_1$ . На рис. 9 представлены, в частности, решения, соответствующие затуханию обратной связи p53–Mdm2 (линии 1 и 7).

Варьирование параметра  $k_f$  – константы диссоциации комплекса p53–Mdm2 – относительно базального значения  $k_f^{basal}$  показало, что в окрестности этого значения имеются затухающие решения, обладающие фокусами (рис. 10). Как и для большинства других параметров системы (1)–(4), для параметра  $k_f$  имеется пороговое значение, после превышения которого обратная связь белков затухает: концентрация p53 растет практически независимо от Mdm2 (математически такое поведение, очевидно, обусловлено видом функции взаимодействия  $g$  (4), который является отражением естественного ограничения по «ресурсу»). При  $\tau = 120\text{с}$  это пороговое значение оказалось весьма близким к значению  $k_f = 2.5k_f^{basal}$ , а при  $\tau = 25000\text{с}$  – к крайне завышенному значению  $k_f = 2000k_f^{basal}$ . При заниженных значениях  $k_f$  возможны периодические решения с постоянными амплитудой и периодом. Для запаздывания  $\tau = 120\text{с}$  значение  $k_f^* = 0.025k_f^{basal}$  весьма близко к бифуркационному, при котором затухающие решения с предельной точкой переходят в периодические решения с предельным циклом (бифуркация Андронова–Хопфа); при  $\tau = 25000\text{с}$  это значение равно  $k_f^* = 0.15k_f^{basal}$ , т.е. периодические колебания наблюдаются при существенно меньшем отклонении этой константы от  $k_f^{basal}$ . Все периодические решения, соответствующие значениям  $k_f < k_f^*$ , образуют вложенную последовательность предельных циклов с выраженными релаксационными явлениями; максимальный предельный цикл соответствует  $k_f = 0$  (в частности, для  $\tau = 120\text{с}$  решение при  $k_f = 0$  на рис. 10 помечено зелеными маркерами). Это означает, что периодические ко-

лебания концентраций в системе p53–Mdm2 при изменении  $k_f$  происходят относительно некоторых характерных постоянных значений, зачастую – весьма близких к базальным, однако достигаемые при этом максимальные значения концентраций могут оказаться критическими для нормального функционирования системы.

При варьировании параметра  $k_g$  относительно базального значения  $k_g^{basal}$  при весьма малом времени запаздывания ( $\tau = 120$  с) были получены только монотонно возрастающие решения или решения в виде затухающих колебаний. Возрастающие решения, не допускающие возникновения обратной связи p53–Mdm2, получены при значительном завышении параметра  $k_g$ . Этим решениям, в частности, могут соответствовать ситуации чрезмерного неконтролируемого роста уровня p53. При уменьшении  $k_g$  более чем на два порядка решение практически не изменяется, в результате чего фиксируется уровень p53 (он весьма близок к базальному), препятствующий нежелательному росту Mdm2. При достаточно больших значениях запаздывания  $\tau$  ситуация существенно меняется: константа диссоциации  $k_g$  становится бифуркационным параметром, при котором решение больше не имеет стационарных постоянных значений, и возникают периодические колебания уровней белков с постоянным периодом и амплитудой (в фазовом пространстве предельной траекторией становится предельный цикл). В частности, при  $\tau \approx 4000$  с бифуркация решения из предельной точки в предельный цикл происходит при  $k_g = 10k_g^{basal}$ , при  $\tau \approx 5000$  с – при  $k_g \approx 8.6k_g^{basal}$ , при  $\tau \approx 25000$  с –  $k_g \approx 7.3k_g^{basal}$ . Таким образом, в дополнение к уже известному бифуркационному параметру  $k_f$  установлен еще один пара-

метр  $k_g$  рассматриваемой математической модели, обеспечивающий запуск периодических колебаний в системе p53-Mdm2.

Подводя итог, проанализируем данные, представленные на рис. 5–10. На этих рисунках каждая из линий демонстрирует изменение во времени концентраций p53 ( $y_1$ ) и Mdm2 ( $y_2$ ) при конкретных значениях параметров: нулевые значения  $y_1, y_2$  соответствуют начальному состоянию системы, конечные точки линий показывают финальное состояние системы.

На рис. 11 все результаты собраны вместе для того, чтобы получить общую картину фазовых состояний системы в окрестности базального набора параметров. В частности, приведены все стационарные состояния, полученные в численных экспериментах при отклонении основных параметров системы  $s, a, b, c_1, c_2, k_f, k_g$  от значений (6). Установлено, что рассчитанные координаты неподвижных точек в фазовой плоскости ( $y_1, y_2$ ) с достаточно высокой точностью согласуются с аналитическим стационарным решением задачи (7) при соответствующих значениях  $s, a, b, c_1, c_2, k_f, k_g$ . Дополнительно на рис. 11 штриховыми линиями показаны кривые аналитического стационарного решения (7), полученного при изменении значений  $y_1$  и базальных значениях параметров (6). Отметим, что область значений  $y_1$  и  $y_2$ , где стационарное решение имеет особые точки, в настоящих расчетах не рассматривается вследствие нефизичности значительной части этих решений (отрицательные значения концентраций).

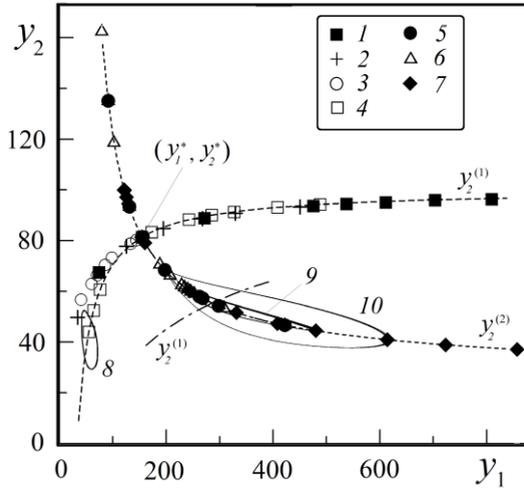


Рис. 11. Стационарное решение задачи при поочередном варьировании параметров  $s$  (1),  $a$  (2),  $b$  (3),  $k_f$  (4),  $c_1$  (5),  $c_2$  (6),  $k_g$  (7). Численное решение: маркеры 1 – 7 – неподвижные предельные точки решений; сплошные линии – предельные циклы (8 –  $k_f = 0.2k_f^{basal}$ ,  $\tau = 120\text{c}$ ; 9 –  $k_g = 7.3k_g^{basal}$ ,  $\tau = 25000\text{c}$ ; 10 –  $k_g = 10k_g^{basal}$ ,  $\tau = 4000\text{c}$ ). Аналитическое стационарное решение (7) (кривые  $y_2^{(1)}$ ,  $y_2^{(2)}$ ): штриховые линии с точкой пересечения  $(y_1^*, y_2^*) = (y_1^{basal}, y_2^{basal})$  – базальные (6) значения параметров; штрихпунктирные линии –  $k_g = 7.3k_g^{basal}$ .

Анализ этих данных показал, что неподвижные точки приближенных решений системы (1)–(6), полученных при варьировании коэффициентов  $s$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $k_f$  уравнения (1), образуют возрастающую кривую на фазовой плоскости  $(y_1, y_2)$  (см. семейство маркированных линий  $y_2^{(1)}$  на рис. 11), которая при

$y_1 \geq 100$  а.у. практически совпадает с соответствующей «базальной» кривой аналитического решения (7) (штриховая линия  $y_2^{(1)}$ ). Неподвижные точки приближенных решений, полученных при варьировании коэффициентов  $c_1, c_2, k_g$  уравнения (2), образуют в фазовой плоскости убывающую кривую (семейство маркированных линий  $y_2^{(2)}$  на рис. 11), весьма близкую к теоретической кривой  $y_2^{(2)}(y_1)$ , соответствующей решению (7) при базальных значениях параметров модели. Точка пересечения двух семейств кривых на рис. 11 соответствует неподвижной точке – стационарному решению при базальных условиях  $y_1^{basal}, y_2^{basal}$ .

*Отметим, что поскольку в п. 5 было показано, что решения математической модели находятся в согласии с данными лабораторных исследований в рассматриваемом диапазоне параметров, то и в ходе проведенного здесь качественного анализа было уместно высказать некоторые предположения о гипотетическом биомедицинском смысле полученных решений задач.*

## 7. О СВЯЗИ С МНОГОСТАДИЙНОЙ МОДЕЛЬЮ В ВИДЕ СИСТЕМЫ ОДУ

---

В главе 4 обсуждался вопрос о существовании связи решения модели (1)–(4) при нулевых начальных условиях с решением нелинейной системы ОДУ (4.8) достаточно большой размерности, а точнее – с первой и последней компонентами вектора ее решения. Напомним, что эта связь устанавливается исключительно благодаря следующим теоретическим фактам: для уравнения с запаздывающим аргументом с кусочно-

непрерывной функцией начальных условий  $\varphi(t)$  (заданной на интервале, равном величине запаздывания, с конечным числом точек разрыва, причем все разрывы первого рода) можно сформулировать последовательность задач Коши для системы ОДУ размерности  $n$  с компонентами вектора решения  $(x_1(t), \dots, x_n(t))$ , такую что последовательность последних компонент этого вектора  $\{x_n(t)\}$  при  $n \rightarrow \infty$  сходится равномерно к обобщенному решению исходного уравнения с запаздыванием.

Пусть в согласии с теорией исходная система уравнений (1)–(4) может быть заменена следующей системой ОДУ

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{y}_1}{dt} &= s - af(\tilde{y}_1, x_n) - b\tilde{y}_1, \\ \frac{dx_1}{dt} &= c_1g(\tilde{y}_1, x_n) - \frac{n-1}{\tau}x_1, \\ \frac{dx_i}{dt} &= \frac{n-1}{\tau}(x_{i-1} - x_i), \quad i = 2, \dots, n-1, \\ \frac{dx_n}{dt} &= \frac{n-1}{\tau}x_{n-1} - c_2x_n, \end{aligned} \quad (8)$$

где  $x_1(t), \dots, x_n(t)$  – дополнительные переменные, характеризующие состояние системы на гипотетических «промежуточных» стадиях передачи сигнала р53–Mdm2. Предполагается, что при начальных условиях

$$\tilde{y}_1(0) = 0, \quad x_i(0) = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (9)$$

первая  $\tilde{y}_1$  и последняя  $x_n$  компоненты решения задачи Коши для системы ОДУ (8) при  $n \rightarrow \infty$  сходятся равномерно к компонентам решения  $y_1(t)$  и  $y_2(t)$  задачи (1)–(5) (при  $\varphi_k(\theta) = 0$ ,  $\theta \in [-\tau, 0]$ ); функции  $f$  и  $g$  задаются формулами (3)–(4). Кроме того, должно также выполняться первое из условий (4.2). Со-

держание представленных здесь численных экспериментов более подробно изложено в [6].

Далее будут представлены в виде иллюстраций результаты численных экспериментов, в которых начальная задача для системы функционально-дифференциальных уравнений с запаздыванием (1)–(4) решается только один раз, а вот система (8)–(9) – многократно при разных  $n=4, 8, 16, 32, \dots$ . Таким образом сформируется последовательность задач Коши для системы ОДУ размерности  $n$  с компонентами вектора решения  $(x_1(t), \dots, x_n(t))$ . Нам предстоит убедиться, что последовательность последних компонент этого вектора  $\{x_n(t)\}$  при  $n \rightarrow \infty$  сходится в себе и к  $y_2(t)$ ; при этом также  $\{\tilde{y}_1(t)\}$  сходится к  $y_1(t)$ . Обязательно следует иметь в виду, что реализация в вычислительном эксперименте предельного перехода от исходной системы уравнений (1)–(4) с запаздыванием к системе ОДУ (8) связана с необходимостью интегрирования автономных систем уравнений на достаточно большом интервале времени и при достаточно больших  $n$ . Поэтому необходимо обратить особое внимание на выбор численных методов интегрирования, контроль точности и устойчивости численных решений (об эффективных методах решения этих задач мы говорили в главах 2 и 3 настоящего пособия).

Для иллюстрации «предельного» перехода на рис. 12–16 приведены результаты численных экспериментов, где всюду *зеленые линии* соответствуют решению модели с запаздыванием (1)–(4), а *черные* – решению системы ОДУ (8) при разных  $n=4, 8, 16, 32, \dots$  (*штриховой линией* отмечено решение, соответствующее наименьшему  $n$ ; во всех расчетах рассматривались системы ОДУ, размерность которых определяется значением  $n \in [4, 10^5]$ ). Здесь также следует различать два типа решений: при базальных значениях параметров (6) мы имеем решение, которое асимптотически выходит на стационар (т.е. не изменя-

ется со временем), а при изменении в наборе (6) только одного параметра  $k_f = 1.8$  решение становится периодическим. Вновь отметим, что других типов решений для системы (1)–(4) в биологически значимом диапазоне параметров обнаружено не было.

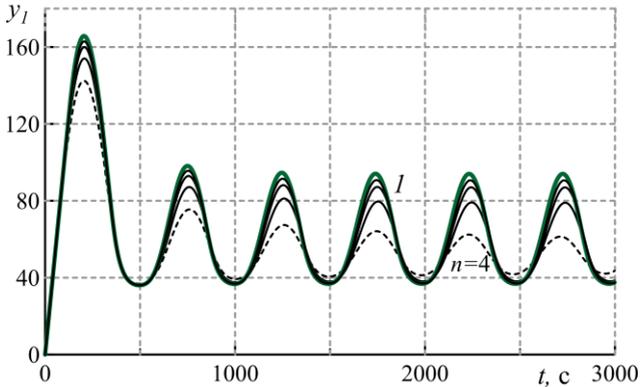


Рис. 12. Сходимость последовательности  $\{\tilde{y}_1(t)\}$  при  $n=4$  (штриховая линия), 8, 16, 32, ... к  $y_1(t)$  (зеленая линия 1) при  $k_f = 1.8$ .

Процесс сходимости наглядно представлен на рис. 12 на примере задачи с периодическим решением и компоненты  $\tilde{y}_1(t)$  вектора решения системы (8) (для  $x_n(t)$  картина выглядит примерно так же). Видно, что при относительно малых  $n$  основные погрешности сосредоточены на временном интервале  $(0, \tau]$ . И хотя при весьма малых значениях  $n$  наблюдается существенное отклонение решений системы ОДУ от «точного», с ростом числа «промежуточных» стадий  $n$  имеет место сходимость последовательности компонент  $\tilde{y}_1(t)$  и  $x_n(t)$  решений системы (8) к компонентам  $y_1(t)$  и  $y_2(t)$  решения системы с запаздыванием.

На рис. 13 показана сходимость фазовых траекторий, представляющих последовательности  $\{\tilde{y}_1(t)\}$  и  $\{x_n(t)\}$  - первой и последней компонент вектора решения системы ОДУ (8) при  $n=4, 8, 16, 32, 64, \dots$  (черные линии) к решению системы с запаздыванием (линии 1).

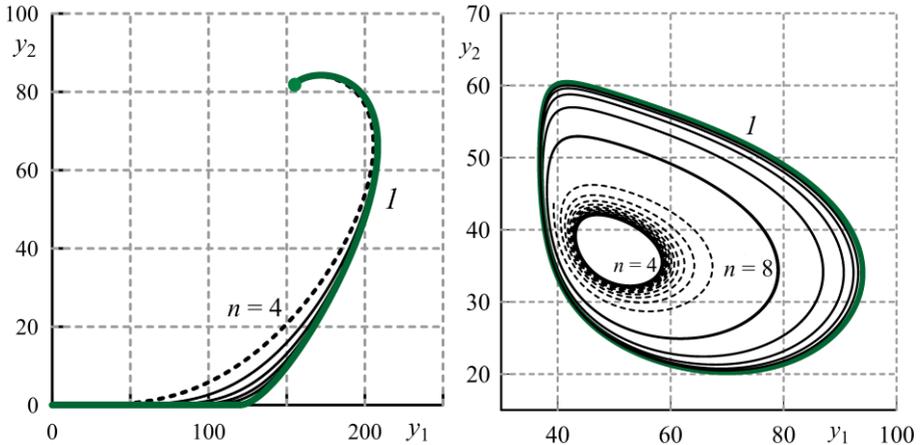


Рис. 13. Фазовые траектории. Сходимость последовательности решений системы (8) при  $n=4, 8, 16, 32, 64, \dots$  (черные линии) к решению системы с запаздыванием (линии 1) при  $k_f = 180$  (слева, неперiodическое решение) и при  $k_f = 1.8$  (справа, периодическое решение).

Здесь можно видеть, что при  $k_f = 180$  все фазовые траектории решений сходятся асимптотически в стационарной неподвижной точке, причем даже при самых малых  $n$ . А при  $k_f = 1.8$  при  $n=4, 8, 16, 32, 64, \dots$  мы получили вложенную последовательность предельных циклов, которые визуально достаточно близки к фазовой траектории решения системы с запаздыванием (1)-(4), т.е. к циклу 1 на рис. 13, лишь при  $n > 100$ .

Представляет также интерес, выполняется ли в нашем эксперименте условие сходимости для функций, описывающих состояние системы на промежуточных быстропротекающих (при достаточно большом количестве стадий  $n$ ) стадиях:  $\lim_{n \rightarrow \infty} x_i(t) \rightarrow 0$  (см. также (4.2), рис. 14).

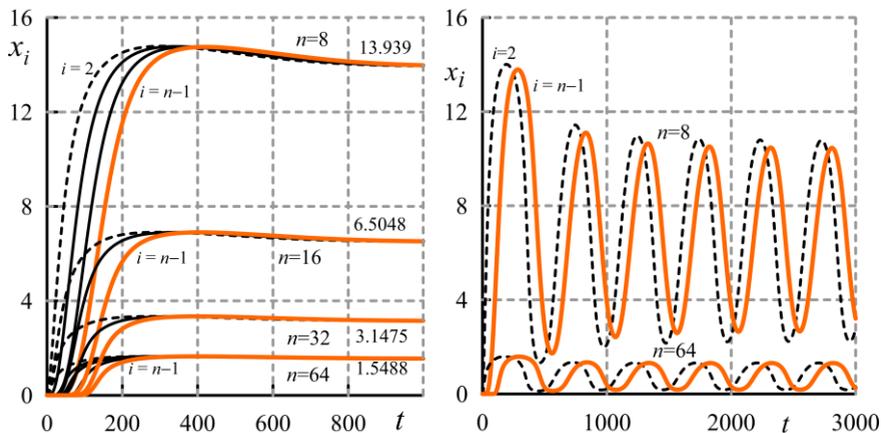


Рис. 14. Функции  $x_i(t)$  при  $k_f = 180$  (слева) и при  $k_f = 1.8$  (справа).

Линии соответствуют расчетам при  $n = 8, 16, 32, 64$ ; для каждого значения  $n$  представлено несколько линий, соответствующих разным стадиям  $i$ : пунктиры -  $i = 2$ , сплошные оранжевые линии -  $i = n - 1$ .

Расчеты показали, что  $\|x_i(t)\|_C$  и стационарные значения действительно сходятся к нулю на интервале  $t \in (0, T]$  с ростом  $n$ . На рис. 14 можно наблюдать начало этого процесса для двух наблюдаемых типов динамического поведения решения. Интересно также, что при каждом фиксированном значении  $n$  «движение» системы от начальной ( $i=2$ ) к финальной ( $i=n-1$ ) стадии связано с фазовым сдвигом компонент решения, и лишь совсем незначительно - с изменением амплитуды колебаний.

На рис. 15 показаны результаты более сложного анализа, связанного с оценкой близости качественных свойств решений модели с запаздыванием и модели на основе ОДУ. Дело в том, что с тех пор мы рассматривали два типа решений – решение, выходящее на стационар, и периодическое – независимо друг от друга. Т.е. для каждого из них проверялись условия сходимости типа (4.2). Но в ходе этих исследований мы установили, что тип решения меняется при изменении одного только параметра  $k_f$ . Более тщательное изучение решений привело к пониманию, что есть такое значение параметра  $k_f$ , при котором стационарное решение теряет устойчивость, и в системе возникают периодические колебания. Такое значение параметра и сам параметр называют *бифуркационными*, а само изменение решения – *бифуркацией Андронова–Хопфа*.

Сложность состоит в том, чтобы с достаточно высокой точностью найти *бифуркационное значение параметра* – и это стандартная задача нелинейной динамики. А с точки зрения нашей конкретной задачи (1)–(4) или (8) сложность состоит также в том, что это бифуркационное значение  $k_f$  зависит от значения параметра запаздывания  $\tau$ , которое тоже может изменяться в некотором допустимом диапазоне неотрицательных значений. Наконец, не забудем и о главной цели нашего эксперимента и зададимся вопросом: будут ли достаточно близкими бифуркационные значения  $k_f$  при каждом  $\tau$  для решений двух систем (1)–(4) и (8)?

Чтобы ответить на поставленные вопросы, для каждой системы дифференциальных уравнений в численных расчетах определяются пары бифуркационных значений  $(\tau, k_f)^{\text{bif}}$ . Эти пары  $(\tau, k_f)^{\text{bif}}$  образуют так называемые *линии нейтральности*, разделяющие плоскость параметров  $(\tau, k_f)$  на область, в которой стационарное решение асимптотически устойчиво (в об-

ласти больших значений  $k_f$ , «над» каждой линией нейтральности), и область периодических колебаний решений («под» каждой линией).

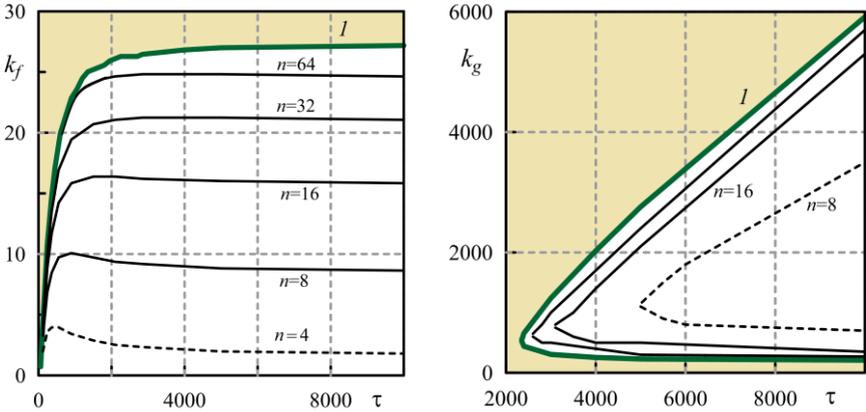


Рис. 15. Карта динамических режимов модели (1)–(4) в плоскости параметров  $(\tau, k_f)$  и  $(\tau, k_g)$ : окрашенные области – области стационарных решений, неокрашенные – области периодических решений; зеленые линии 1 – линии нейтральности. Черные линии – линии нейтральности решений системы ОДУ (8), полученные в расчетах при  $n = 4, 8, 16, 32, 64, \dots$

На рис. 15 линия нейтральности системы с запаздыванием (1)–(4) – зеленая линия (1) – образована парами  $(\tau, k_f)$  соответствующих бифуркационных значений параметров этой модели. Окрашенная область над зеленой линией – это «точная» область значений параметров  $k_f$  и  $\tau$ , которые приводят к стационарным решениям. Здесь же показано, что линии нейтральности решения систем ОДУ (8) при разных значениях  $n$  могут быть близки к линии 1 лишь при достаточно больших значениях

ях  $n \geq 100$  (для ясности напомним, что каждая такая система должна состоять из  $n+1$  ОДУ).

На самом деле, в нашей задаче есть еще один бифуркационный параметр –  $k_g$ . На рис. 15 линии нейтральности в плоскости параметров  $(\tau, k_g)$  отражают более сложную динамику решения задачи: при достаточно больших  $k_g$  и  $\tau$  можно указать интервал значений  $k_g$ , на котором при фиксированном  $\tau$  решение теряет устойчивость (здесь, как и ранее, неокрашенная область периодических решений располагается «внутри» линии нейтральности).

Таким образом, мы продемонстрировали сходимость последовательности линий нейтральности, полученных на основе анализа решений системы (8) при достаточно больших  $n$ , к линиям нейтральности (линии 1 на рис. 15) решения задачи (1)–(4). Погрешности перехода к модели с «промежуточными» стадиями (8) проявляются в сужении области значений  $k_f$  и  $k_g$ , при которых возможны периодические колебания.

Наконец, следует также оценить погрешности вычисления компонент  $\tilde{y}_1(t)$  и  $x_n(t)$  решений задачи Коши (8)–(9) по отношению к компонентам  $y_1(t)$ ,  $y_2(t)$  решения соответствующей задачи с запаздыванием (1)–(5) при нулевых начальных условиях, принятого в качестве «точного». Для оценки использовалась величина

$$\varepsilon_n = \max_{0 \leq i \leq N} [|y_1(t_i) - \tilde{y}_1(t_i)| + |y_2(t_i) - x_n(t_i)|]$$

(для краткости будем называть  $\varepsilon_n$  погрешностью «предельного» перехода, имея в виду также и то, что в численных экспериментах рассматриваются только конечные  $n$ ).

Заметим, что погрешности предельного перехода в нашем анализе отводится центральное место: в теории эта величина должна стремиться по степенному закону  $n^{-q}$  к нулю, где  $q > 0$ . В

главе 4 мы отметили, что в численных экспериментах такой закон может быть получен только при специальном выборе шага расчетной сетки  $h$ , запаздывания  $\tau$  и количества промежуточных стадий  $n$ , т.е. при условии  $h \leq C \tau / n$ . Это условие означает, что при проведении расчетов изменение  $n$  может повлечь за собой уменьшение шага сетки  $h$ , чтобы исключить негативное влияние погрешности вычисления решения задачи Коши.

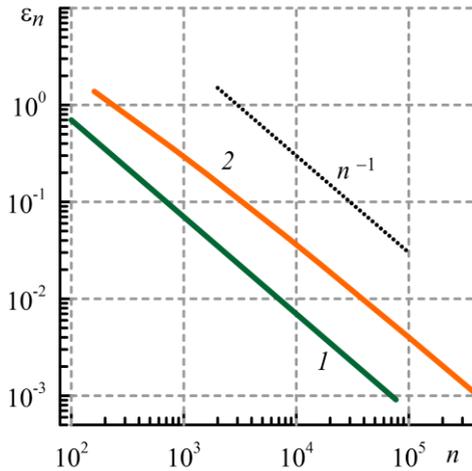


Рис. 16. Изменение погрешности «предельного» перехода  $\epsilon_n$  (сплошные линии 1, 2) в зависимости от количества промежуточных стадий  $n$  в системе ОДУ (8). Линия 1 – непериодическое решение; линия 2 – периодическое решение; пунктир – приближенная оценка.

На рис. 16 можно видеть, что в нашем численном эксперименте погрешность предельного перехода, как и предполагалось в теории, уменьшается по степенному закону с ростом  $n$ .

Таким образом, в ходе численного эксперимента, результаты которого представлены на рис. 12–16 (см. также [6]) удалось

- а) показать выполнение условий (4.2),
- б) исследовать асимптотическое поведение погрешности «предельного» перехода (здесь кавычки используются из-за конечности размерности системы ОДУ),
- в) показать, что сходимости имеет место не только на уровне интегральных кривых, но и на уровне качественных свойств решений двух моделей.

Это свидетельствует о наличии связи двух моделей – малоразмерной модели (1)–(4), включающей в себя дифференциальное уравнение с запаздывающим аргументом, и высокоразмерной модели в виде системы ОДУ (8) – при нулевых начальных условиях. Представляется, что эту связь можно рассматривать не только как интересный теоретический факт, но и как в достаточной мере тонкий инструмент и один из вариантов организации численных исследований динамических систем, который позволяет выйти за рамки одного класса дифференциальных уравнений.

## 8. ВЫВОДЫ

---

В настоящем разделе на основе нелинейной двухкомпонентной многопараметрической математической модели выполнено численное моделирование функционирования белка p53 и его регуляторов Mdm2 и Wip1, участвующих в исправлении дефектов ДНК и вовлеченных во многие жизненно важные процессы, включая образование опухолей, нейродегенерацию и старение.

Выполнены методические расчеты, проведено численное исследование зависимости решения от параметров и сопоставление с экспериментальными данными. Показано, что модель

описывает широкий диапазон состояний p53, наблюдаемых в лабораторных экспериментах при гамма-облучении раковых клеток.

Показана связь рассматриваемой малоразмерной модели с высокоразмерной моделью в виде системы ОДУ специального вида. Этот факт можно интерпретировать как возможность моделирования одного и того же многостадийного процесса на микро- и макроуровнях соответственно. Причем под микроуровнем следует понимать, как правило, некоторые относительно быстро протекающие промежуточные стадии, обеспечивающие адекватную функциональную взаимосвязь начального и последнего звеньев рассматриваемого процесса. При этом смысл и содержание самих промежуточных стадий можно проигнорировать. Тогда время запаздывания в малоразмерной модели имеет смысл суммарного времени протекания процесса или характерного времени передачи сигнала из начального состояния в конечное состояние.

Проведенные исследования позволяют сделать шаг к изучению важных для клинической практики аспектов функционирования сигнального пути p53, в том числе связанных с искусственным срывом взаимодействия p53–регулятор в терапевтических целях, а также с действиями по восстановлению базального состояния системы.

Таким образом, **теперь имеет смысл поэкспериментировать с готовой проверенной моделью**. Примеры экспериментов представлены в работе [7].

## ЛИТЕРАТУРА

---

1. Желтухин А. О., Чумаков П. М. Повседневные и индуцируемые функции гена p53 // Успехи биологической химии. 2010. Т. 50. С. 447–516.
2. Tiana G., Jensen M. H., Sneppen K. Time delay as a key to apoptosis induction in the p53 network // Eur. Phys. J. B. 2002. Vol. 29. P. 135–140.
3. Batchelor E., Mock C. S., Bhan I., Loewer A., Lahav G. Recurrent initiation: A mechanism for triggering p53 pulses in response to DNA damage // Molecular Cell. 2008. Vol. 30. № 3. P. 277–289.
4. Воропаева О. Ф., Шокин Ю. И. Численное моделирование обратной связи p53-Mdm2 в биологическом процессе апоптоза // Вычислительные технологии. 2012. Т. 17. № 6. С. 47–63.
5. Воропаева О. Ф., Шокин Ю. И., Непомнящих Л. М., Сенчукова С. Р. Математическое моделирование функционирования и регуляции биологической системы p53-Mdm2. М.: Изд-во РАМН. 2014. 176 с.
6. Воропаева О. Ф., Козлова А.О., Сенотрусова С. Д. Численный анализ перехода от уравнения с запаздыванием к системе ОДУ в математической модели сети онкомаркеров // Вычислительные технологии. 2016. Т. 21. № 2. С. 12–25.
7. Сенотрусова С. Д., Воропаева О. Ф., Шокин Ю. И. Применение минимальных математических моделей динамики сигнального пути белка p53-микроРНК к анализу лабораторных данных // Вычислительные технологии. 2020. Т. 25. № 6. С. 4–49.

