

МЕТОД ДЕКОМПОЗИЦИИ ОБЛАСТИ В МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ В КЛЕТОЧНЫХ МЕМБРАНАХ

А. О. Бурый

Белорусский государственный университет, г. Минск;

artsiom.bury@gmail.com;

науч. рук. – И. А. Тимощенко

В данной работе рассматривается обобщение метода декомпозиции области для решения уравнения аномальной диффузии. Особенность данного метода заключается в возможности его параллельной реализации на многопроцессорных вычислительных системах, поскольку для решения задачи об аномальной диффузии в таких сложных структурах, как мембрана клетки, необходимы достаточно трудоемкие для вычисления модели, требующие большого времени на расчет. Использование параллельных алгоритмов позволяет значительно сократить это время. В работе предложен алгоритм численного решения одномерного уравнения аномальной диффузии с частными производными дробного порядка как по времени, так и по пространству, исследована его устойчивость, проведено исследование времени вычисления от числа потоков, выполняемых параллельно.

Ключевые слова: математическое моделирование; метод декомпозиции области; разностные схемы; параллельные вычисления; аномальная диффузия.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Последние исследования [1] показывают, что в мембранах клеток наблюдается необычная латеральная диффузия. Среднеквадратичное отклонение диффундирующей частицы в таких экспериментах пропорционально времени в некоторой степени β ($0 < \beta < 1$), в то время как в обычной диффузии наблюдается прямая пропорциональность среднеквадратичного отклонения и времени.

Данные результаты свидетельствуют о том, что в мембранах клеток наблюдается аномальная латеральная диффузия. Данный вид диффузии описывается уравнением обычной диффузии в дробных производных (здесь и далее коэффициент диффузии будет полагаться равным 1 для удобства).

Для общности будем рассматривать уравнение с дробной производной как по времени, так и по пространству:

$$\begin{aligned}
& \left({}^C D_{0+,t}^\beta C \right) (x, y, z, t) = q \left(D_{a+}^\alpha C \right) (x, y, z, t) + (1 - q) \left(D_{b-}^\alpha C \right) (x, y, z, t), \\
& \left\{ \begin{aligned}
& \left({}^C D_{0+,t}^\beta C \right) (x, y, z, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^t \frac{C(x, y, z, \tau) d\tau}{(t-\tau)^\beta}, & 0 < \beta < 1, \\
& \left(D_{a+}^\alpha C \right) (x_i) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx_i^n} \int_a^x \frac{C(\xi) d\xi}{(x_i - \xi)^{\alpha+1-n}}, & n-1 < \alpha < n, \\
& \left(D_{b-}^\alpha C \right) (x_i) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx_i^n} \int_x^b \frac{C(\xi) d\xi}{(\xi - x_i)^{\alpha+1-n}}, & n-1 < \alpha < n,
\end{aligned} \right. \quad (1)
\end{aligned}$$

где, $\left({}^C D_{0+,t}^\beta C \right)$ – дробная производная Герасимова-Капуто по времени, $\left(D_{a+}^\alpha C \right)$, $\left(D_{b-}^\alpha C \right)$ – дробная левосторонняя и правосторонняя производные Римана-Лиувилля соответственно, C – концентрация, q – коэффициент, отвечающий за вклад левосторонней и правосторонней производных.

ПОСТРОЕНИЕ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ

Введем равномерную сетку:

$$\begin{aligned}
\bar{w}_h &= \{x_{i_1, \dots, i_p} = (i_1 h_1, \dots, i_p h_p) \in G, \quad i_r = \overline{0, N_r}, h_r = l_r / N_r, r = \overline{1, p}\}, \\
\bar{w}_\tau &= \{t_j = j\tau, j = 1, 2, \dots, J\}.
\end{aligned}$$

Произведем следующую разностную аппроксимацию [2] дробных производных, представленных в формуле (1):

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\tau^\beta} \sum_{k=0}^{s+1} g_{\beta,k} \left(y_i^{s+1-k} - y_i^0 \right) = \left({}^C D_{0+,t}^\beta C \right) (x, t) \Big|_{t=t_s} + O(\tau), \\
& \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{i+1} g_{\alpha,k} y_{i-k+1}^{s+1} = \left(D_{a+}^\alpha C \right) (x, t) \Big|_{x=x_i} + O(h), \\
& \frac{1}{h^\alpha} \sum_{k=0}^{N-i+1} g_{\alpha,k} y_{i+k-1}^{s+1} = \left(D_{b-}^\alpha C \right) (x, t) \Big|_{x=x_i} + O(h), \\
& g_{\alpha,k} = (-1)^k \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\alpha-k+1)}.
\end{aligned}$$

Особенность применения метода декомпозиции к задачам, содержащим дробные производные, состоит в том, что при расчете значения в каждом узле на новом временном слое неизвестной функции, необходимы значения со всех остальных узлов. При этом расчет в каждой подобласти происходит независимо от всех других подобластей. С учетом этого фактора, необходимо использовать значения функции на новом вре-

менном слое в слагаемых, которые содержатся в исследуемой подобласти, а в слагаемых, которые находятся в других подобластях использовать значения искомой функции на предыдущем временном слое.

Рассмотрим разбиение на подобласти. Пусть χ_p – это правая граница p -ой подобласти вдоль оси x_k . Разностная схема внутри подобласти $(\chi_{p-1}^k) < i_k < \chi_p^k$ строится следующим образом:

$$\frac{1}{\tau^\beta} \sum_{l=0}^{s+1} g_{\beta,l} (y_{i_1 i_2 i_3}^{s+1-l} - y_{i_1 i_2 i_3}^0) = \sum_{k=1}^3 \left(\frac{q_k}{h_k^{\alpha_k}} \left(\sum_{l=0}^{\chi_{p-1}^k-1} g_{\alpha_k, i_k-l+1} y_{i_k}^s + \sum_{l=\chi_p^k}^{i_k+1} g_{\alpha_k, k} y_{i_k}^{s+1} \right) + \right. \\ \left. + \left(\frac{1-q_k}{h_k^{\alpha_k}} \left(\sum_{l=i_k}^{\chi_p^k} g_{\alpha_k, i_k+l-1} y_{i_k}^{s+1} + \sum_{l=\chi_p^k+1}^{n_k} g_{\alpha_k, i_k+l-1} y_{i_k}^s \right) \right) \right),$$

где производная по времени оставлена без изменений, а левосторонняя и правосторонняя производные дополнительно разделены на две суммы, учитывающие находятся ли значения y внутри подобласти или вне.

На границах происходит «сшивка» решений путем усреднения значений исходной функции.

Граничные и начальные условия задаются следующим образом:

$$y^s|_\gamma = 0, \quad s = \overline{1, s_{\max}}; \quad y_{i_1 i_2 i_3}^0 = C(i_1 h_1, i_2 h_2, i_3 h_3, 0), \quad i_k = \overline{0, n_k}.$$

РЕЗУЛЬТАТЫ РЕШЕНИЯ

На рис. 1 показаны два примера численного расчета.

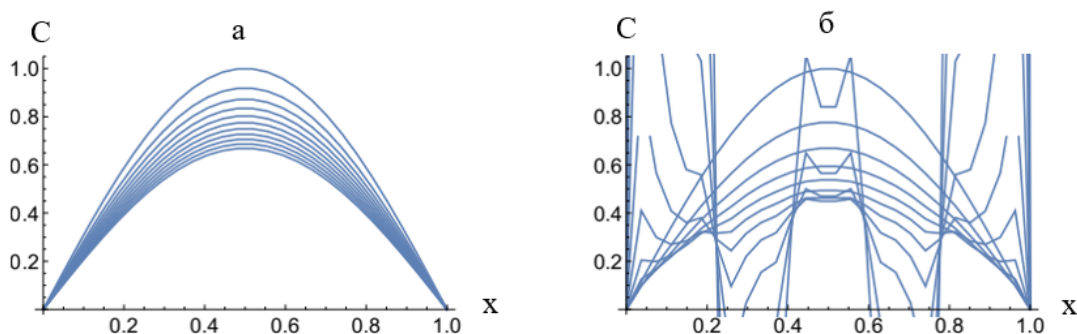


Рис. 1. Численное решение для одномерного случая

C – концентрация в отн. ед., x – координата в отн. ед., а – устойчивое решение, б – неустойчивое. Различным кривым соответствуют последовательные временные слои. Число подобластей 5, $\beta=0.5$, $\alpha=2$

Можно показать [3], что устойчивость и сходимость данного одномерного решения уравнения аномальной диффузии будет описываться следующим соотношением:

$$\frac{\tau^\beta}{\sqrt{h}} < \text{const.} \quad (2)$$

Для проверки этого соотношения проведем численный эксперимент, отображенный на рис. 2. Видно, что все устойчивые решения лежат по одну сторону от поверхности, удовлетворяющей уравнению (2), а неустойчивые – по другую сторону, что подтверждает формулу (2).

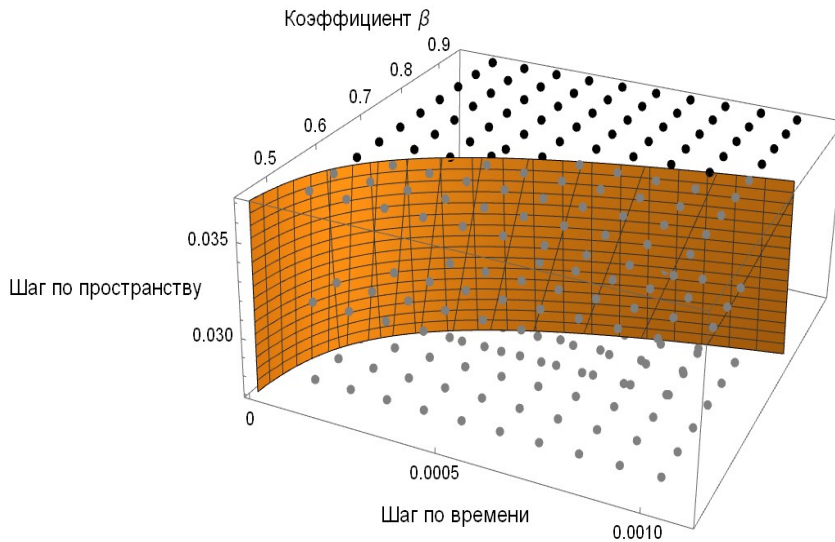


Рис. 2. Численный эксперимент

Устойчивые (черные) и неустойчивые (серые) решения. Поверхность удовлетворяет уравнению (2). По осям отложены шаги по пространству и времени, а также порядок β

Вычисления проводились на 4-ядерном процессоре (8 логических ядер). Результаты зависимости времени расчета от количества вычислительных потоков при разбиении исходной области на 16 подобластей приведены на рис. 3.

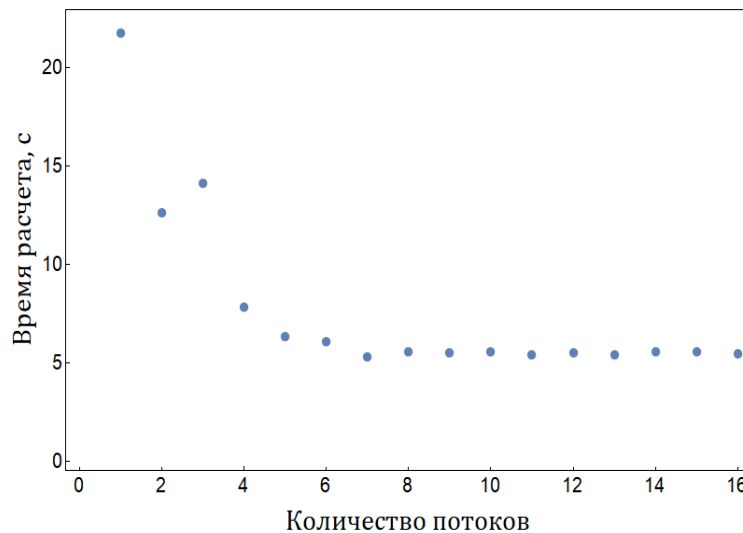


Рис. 3. Зависимость времени расчета от количества потоков

Из рис. 3 видно, что максимальное ускорение наблюдается при 8 потоках и далее ускорения времени расчета уже не происходит при увеличении количества потоков, что соответствует количеству логических ядер процессора. Время расчета при одном потоке составило 21,7 секунды, при 8 – 5,5 секунды. Таким образом, ускорение по времени при расчете в 3,94 раза. Данный результат согласуется с количеством физических ядер процессора (4 ядра), которые и ограничивают максимально возможное ускорение по времени.

Библиографические ссылки

1. Metzler R. Non-Brownian diffusion in lipid membranes: Experiments and simulations // BBA – Biomembranes. 2016. Vol. 1858, Is. 10. P. 2451–2467.
2. Лѣтниковъ А. В. Теорія дифференцированія съ произвольнымъ указателемъ // Матем. сб. 1868. Т. 3, № 1. С. 1–68.
3. Жадаева Н. Г., Самарская Е. А. Метод декомпозиции области решения сеточных параболических задач // Дифференциальные уравнения. 1999. Т. 35, № 2. С. 225–231.

ОЦЕНКА ЗНАЧИМОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В ГОМОГЕННОМ, ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ КАЛОРИМЕТРЕ CMS

А. В. Левкович

*Белорусский государственный университет, г. Минск;
alicelevkovichlev@gmail.com;
науч. рук. – А. С. Лобко, д-р физ.-мат. наук, проф.*

В электромагнитном калориметре CMS в качестве детекторов используются кристаллы PWO. Обычным инструментом расчета является Geant4, в нем все вещества считаются аморфными. Ранее, теоретически и экспериментально был показан значительный рост вероятности рождения электрон-позитронных пар гамма-квантами и возрастание интенсивности излучения гамма-квантов электронами и позитронами при движении с малыми углами (мрад) к главным осям кристалла. Кристаллические эффекты возникают только при очень маленьких углах движения вдоль главных осей кристалла, при больших углах движение мало отличается от движения в аморфном веществе. В работе проверяется, попадают ли частицы, летящие из области взаимодействия двух пучков, в углы, при которых существенны кристаллические эффекты, в условиях CMS.

Ключевые слова: кристаллические эффекты; электромагнитный калориметр CMS.

ВВЕДЕНИЕ

Кристаллы широко используются в детекторах ускорительных и не ускорительных экспериментов в качестве сцинтилляторов. Кристаллическая структура сцинтиллятора оказывает влияние на регистрацию высо-