

# Компьютерное моделирование

## Моделирование динамических систем.

### Черновик

Кафедра ИВТ и ПМ

2018

# План

## Прошлые темы

### Динамическая система

- Дифференциальные уравнения

- Формальное определение

### Моделирование динамических систем

- Динамические модели популяций

- Balance equations

- Модель Лотки — Вольтерры

## Уравнение учитывающие пространство и время

## Численное интегрирование

## Моделирование химических реакций

# Outline

## Прошлые темы

### Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

### Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

### Уравнение учитывающие пространство и время

### Численное интегрирование

### Моделирование химических реакций

# Прошлые темы

- ▶ Что такое динамическая система?
- ▶ Примеры?
- ▶ Динамическая система противопоставляется ... ?

# Прошлые темы

- ▶ Что такое динамическая система?
- ▶ Примеры?
- ▶ Динамическая система противопоставляется ... ?
- ▶ Примеры статических систем?

*Современная наука стала  
возможной тогда, когда  
было решено самое первое  
дифференциальное  
уравнение*

---

вольный перевод цитаты  
Дэвида Берлински

# Outline

## Прошлые темы

### Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

### Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

### Уравнение учитывающие пространство и время

### Численное интегрирование

### Моделирование химических реакций

# Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Моделирование химических реакций



# Дифференциальные уравнения

- ▶ Что такое дифференциальное уравнение?
- ▶ Что такое однородное дифференциальное уравнение (ОДУ)?

# Дифференциальные уравнения

- ▶ Что такое дифференциальное уравнение?
- ▶ Что такое однородное дифференциальное уравнение (ОДУ)?
- ▶ Простой пример ДУ?

# Дифференциальные уравнения

- ▶ Что такое дифференциальное уравнение?
- ▶ Что такое однородное дифференциальное уравнение (ОДУ)?
- ▶ Простой пример ДУ?

$$\frac{dv_x}{dt} = g$$

или

$$\dot{V}_x = g$$

# Дифференциальные уравнения

- ▶ Что является решением дифференциального уравнения?

# Дифференциальные уравнения

- ▶ Что является решением дифференциального уравнения?
- ▶ Какие решения бывают?

# Дифференциальные уравнения

- ▶ Что является решением дифференциального уравнения?
- ▶ Какие решения бывают?
- ▶ Что такое общее решение?
- ▶ Что такое частное решение?
- ▶ Как получить из общего решения частное?

# Дифференциальные уравнения

- ▶ Как представить общее решение ДУ графически?

# Дифференциальные уравнения

- ▶ Что такое численный метод?



# Дифференциальные уравнения

- ▶ Что такое численный метод?
- ▶ Как численно определить производную известной функции в точке?

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

# Outline

Прошлые темы

**Динамическая система**

Дифференциальные уравнения

**Формальное определение**

Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Моделирование химических реакций

# Динамическая система

- ▶ Изменяется с течением времени  $t$
- ▶ Состояния системы  $s(t)$
- ▶ Состояние системы может быть представлено вектором  $s(t) = (s_1(t), s_2(t), \dots, s_n(t))$
- ▶ Примеры: маятник, популяция животных, движение автомобиля, поток людей, ...

# Способы представления

- ▶ **Дискретная система**

$$s(t + \Delta t) = f(s(t))$$

где  $\Delta t$  - приращение времени,  $f$  - некоторая функция определяющая состояние системы на следующем шаге

- ▶ **Непрерывная система**

$$\dot{s} \equiv \frac{ds}{dt} = f(s(t))$$

Всегда ли первой производной достаточно?

## Состояние может зависеть от второй производной: непрерывная система

Предположим, что состояние системы зависит ещё и от второй производной

$$\dot{s} + \ddot{s} = f(s)$$

Обозначим

$$y = \dot{s}$$

$$\dot{y} = f(s) - y$$

Обозначим

$$u(t) \equiv f_1[s(t), y(t)]$$

$$\dot{u} = g(u)$$

Состояние может зависеть от второй производной:  
дискретная система

$$s(t + \Delta t) = f(s(t)) + s(t - \Delta t)$$

Аналогично непрерывной системе

$$y(t + \Delta t) = \dot{s}$$

$$s(t + \Delta t) = f(s(t)) + y(t)$$

Обозначим

$$u(t) \equiv f_1[s(t), y(t)]$$

$$u(t + \Delta t) = g(u(t))$$

## Состояние может зависеть от второй производной: непрерывная система

Если  $f$  явно зависит от  $t$

$$\dot{s} = f(s, t)$$

$$\dot{s} = f(s, y)$$

$$\dot{y} = 1$$

для  $y(0) = 0$

$$u(t) \equiv f_1[s(t), y(t)]$$

$$\dot{u} = g(u)$$



# Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Моделирование химических реакций

# Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Моделирование химических реакций

# Динамические модели популяций

**Популяция** (в биологии) - это совокупность особей одного вида, существующих в одно и занимающих определенную территорию.

В классической экологии рассматриваются взаимодействия нескольких типов:

- ▶ взаимодействие организма и окружающей среды;
- ▶ взаимодействие особей внутри популяции;
- ▶ взаимодействие между особями разных видов (между популяциями).

# Динамические модели популяций

Зачем это нужно?

- ▶ описание роста количества микроорганизмов
- ▶ предсказание численности популяций промысловых животных
- ▶ предсказание численности популяций диких животных
- ▶ предсказание численности населения <sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>см. модель World3

# Первая модель популяции

1202 г. Леонардо Пизанский

какое количество пар кроликов будет через год, кролики начинают размножаться со второго месяца и каждый месяц дают потомство в виде пары кроликов?

# Первая модель популяции

1202 г. Леонардо Пизанский

какое количество пар кроликов будет через год, кролики начинают размножаться со второго месяца и каждый месяц дают потомство в виде пары кроликов?

Ряд описывающий количество пар кроликов:

1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, ...

# Динамические модели популяций

- ▶ Число<sup>2</sup> особей в популяции -  $P(t)$
- ▶ При этом  $P(0) = 0$
- ▶ На размер популяции влияет только два процесса
  - ▶ рождение особей  $B(t)$
  - ▶ смерть особей  $D(t)$
- ▶ Тогда *изменение* популяции:

$$\dot{P}(t) = B(t) - D(t)$$

---

<sup>2</sup>вместо числа особей может использоваться плотность популяции и другие связанные с количеством особей величины

# Динамические модели популяций

## Модель Мальтуса

- ▶ Число родившихся особей можно задать как:

$$B(t) = r_b P(t)$$

- ▶ Число умерших особей можно задать как:

$$D(t) = r_d P(t)$$

$r_b$  - темп воспроизводства в расчете на одну особь;

$r_d$  - темп вымирания.



# Динамические модели популяций

## Модель Мальтуса

$$\dot{P}(t) = r_b P(t) - r_d P(t)$$

обозначим  $r = r_b - r_d$ ,

тогда

$$\dot{P} = rP(t)$$

Решение ДУ<sup>3</sup>:

---

<sup>3</sup>похожий закон роста описывает изменение вклада (сложные проценты) см. другие примеры: [en.wikipedia.org/wiki/Exponential\\_growth](https://en.wikipedia.org/wiki/Exponential_growth)

# Динамические модели популяций

## Модель Мальтуса

$$\dot{P}(t) = r_b P(t) - r_d P(t)$$

обозначим  $r = r_b - r_d$ ,

тогда

$$\dot{P} = rP(t)$$

Решение ДУ<sup>3</sup>:

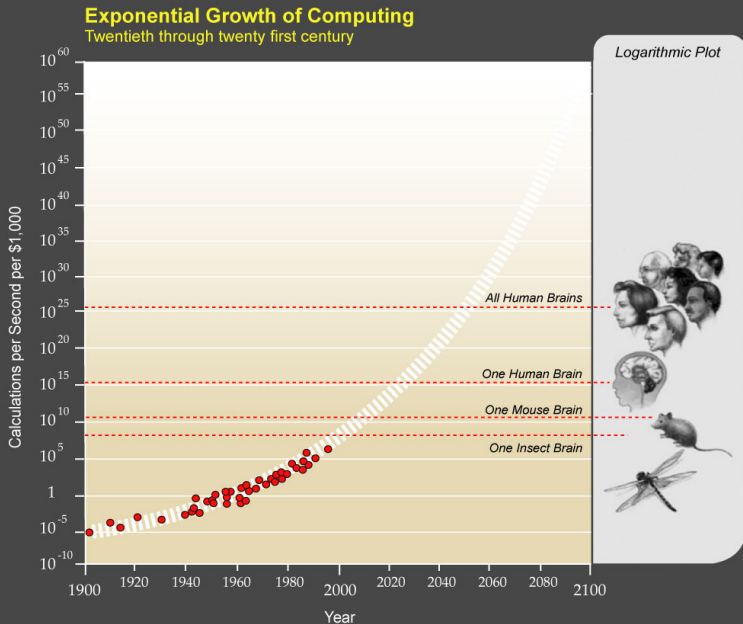
$$P(t) = P_0 e^{rt}$$

wikimedia: анимация роста бактерий согласно экспоненциальному закону

---

<sup>3</sup>похожий закон роста описывает изменение вклада (сложные проценты) см. другие примеры: [en.wikipedia.org/wiki/Exponential\\_growth](https://en.wikipedia.org/wiki/Exponential_growth)

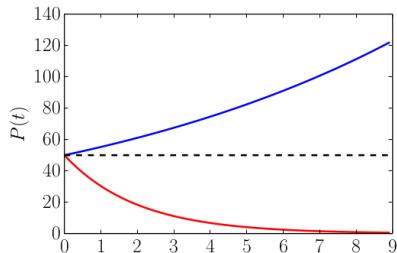
# Технологическая сингулярность?



# Динамические модели популяций

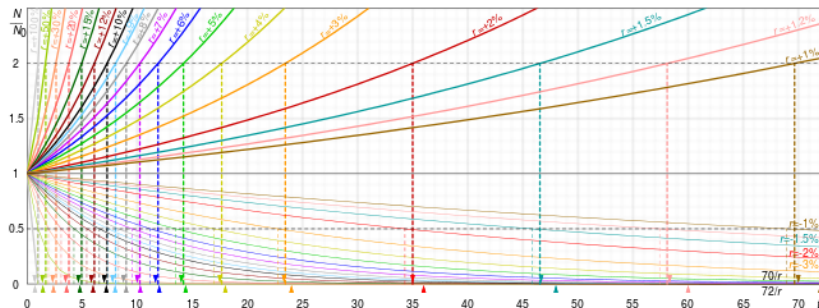
## Модель Мальтуса

- ▶  $r > 0$  экспоненциальный рост
- ▶  $r < 0$  экспоненциальное сокращение
- ▶  $r = 0$  численность постоянна



# Динамические модели популяций

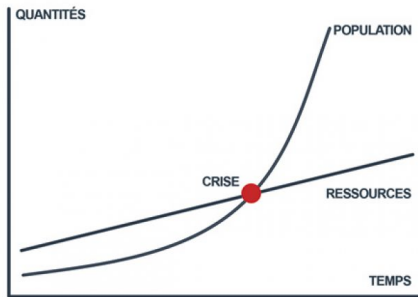
## Модель Мальтуса



Линейный рост воспроизводства и экспоненциальный рост популяции.

# Динамические модели популяций

## Модель Мальтуса



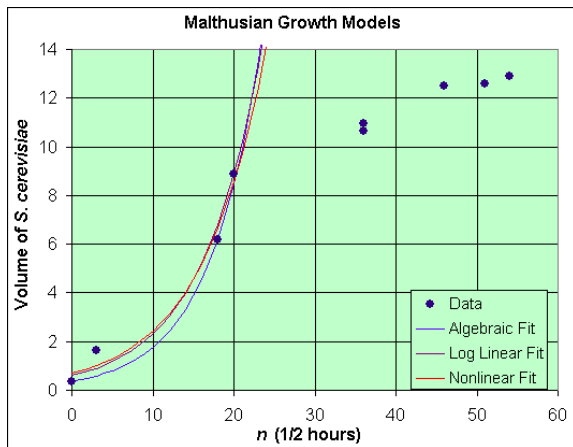
# Динамические модели популяций

## Модель Мальтуса

Недостатки модели Мальтуса?

# Динамические модели популяций

## Модель Мальтуса



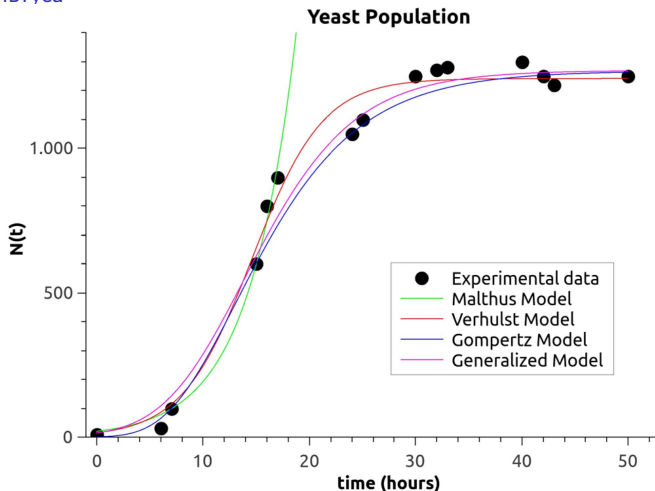
Рост популяции *Saccharomyces cerevisiae* (Пекарские дрожжи)

[jmahaffy.sdsu.edu/courses/f06/math636/lectures/competition/competition.html](http://jmahaffy.sdsu.edu/courses/f06/math636/lectures/competition/competition.html)



# Динамические модели популяций

## Модель Мальтуса



An attempt to unify some population growth models from first principles,  
Fabiano L. Ribeiro,

Rev. Bras. Ensino Fís. vol.39 no.1 São Paulo 2017 Epub Nov 21, 2016

# Динамические модели популяций

## Логистическая модель

- ▶ Необходимо ограничить предельный размер популяции
- ▶ Введём дополнительный параметр  $C$  - емкость среды.

**Предельная нагрузка** биологического вида на среду обитания (**ёмкость среды**) — максимальный размер популяции вида, который среда может безусловно стабильно поддерживать <sup>4</sup>

- ▶  $C$  - системный фактор (пища, убежища, хищничество, конкуренция с другими видами)

---

<sup>4</sup>В 2001 году в докладе ООН сообщалось, что две трети оценок ёмкости среды для человечества попадают в диапазон от 4 до 16 млрд (с неопределенным стандартным отклонением) с медианным значением в 10 млрд

# Динамические модели популяций

## Логистическая модель

- ▶ коэффициент регулирующий прирост (убыль) популяции

$$r = v \left( 1 - \frac{P}{C} \right)$$

- ▶ модель (уравнение популяционной динамики Ферхюльста (Verhulst equation)<sup>5</sup>:

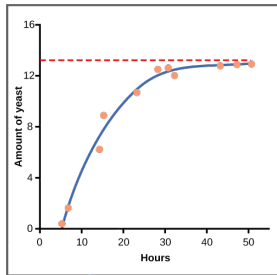
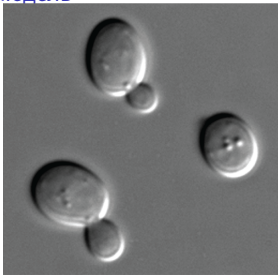
$$\dot{P} = v \left( 1 - \frac{P}{C} \right) P \quad (1)$$

---

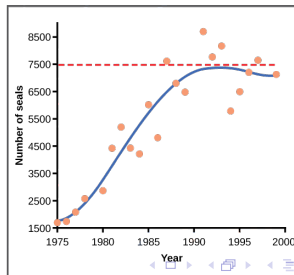
<sup>5</sup> логистическое уравнение

# Динамические модели популяций

## Логистическая модель



(a)



(b)

# Динамические модели популяций

## Логистическая модель

Решение ДУ, описывающего  
модель - логистическая  
функция

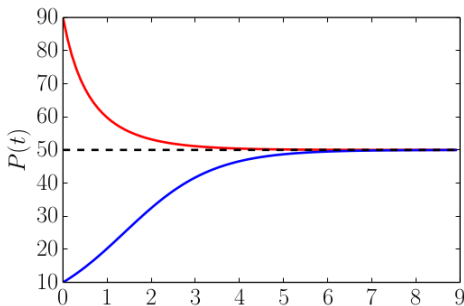
$$P(t) = \frac{C}{1 + \frac{C-P_0}{P_0} e^{-\nu t}}$$

Параметры модели:

$$C = 50, \nu = 1$$

Синяя кривая (логистическая  
кривая)  $P_0 = 10$

Красная кривая  $P_0 = 90$



# Динамические модели популяций

## Теория r/K-отбора

перепишем уравнение 1:

$$\dot{P} = rP - \delta P^2$$

- ▶ **r - стратегия:** организмы (так называемые «оппортунистические»), стремятся к максимально возможной скорости роста численности (параметр  $r$ ). Потомство таких видов с большой долей вероятности не доживает до зрелого возраста.
- ▶ **K-стратегии:** организмы («равновесные»), наоборот, находятся в состоянии равновесия со своими ресурсами и воспроизводят относительно мало, однако стремятся вложить в потомство как можно больше.

# Динамические модели популяций

## Теория $r/K$ -отбора

- ▶ Теория  $r/K$ -отбора хорошо описывает рост организмов без возрастной структуры
- ▶ к ним относятся бактерии, дрожжи, микроводоросли и др.

# Динамические модели популяций

## Логистическая модель

- ▶  $P_0 < C$  популяция растёт,  $P \rightarrow C$
- ▶  $P_0 > C$  популяция сокращается,  $P \rightarrow C$
- ▶  $P_0 = 0$  популяция не растёт  $P(t) = 0$ .
- ▶ Система имеет две фиксированных точки:  $C$  - к которой популяция стремится,  $0$  - от которой стремится популяция.
- ▶ Использование модели затруднено из-за того, что параметр  $r$  часто не известен или является объектом исследования.



# Динамические модели популяций

- ▶ Предыдущие модели хорошо описывают бесполое размножение
- ▶ На прирост популяции при половом размножении отличается:
- ▶ При малых  $P$  частота контактов  $b(P)$  пропорциональна  $P^2$
- ▶ При больших  $P$  частота контактов  $b(P)$  пропорциональна числу самок  $\alpha \frac{\beta P^2}{\beta + \gamma P}$

$$\dot{P} = \alpha \frac{\beta P^2}{\beta + \gamma P} - \tau P$$

# Динамические модели популяций

Учёт наименьшей критической численности

Особые точки уравнения?

# Динамические модели популяций

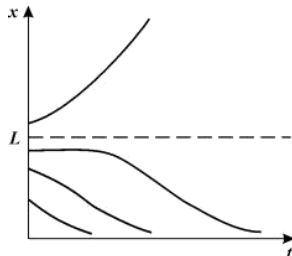
Учёт наименьшей критической численности

Особые точки уравнения?

$$P = 0$$

$$P = \dots = L$$

При  $P_0 > L$  популяция растёт, при  
 $P_0 < L$  погибает.



При падении численности популяции ниже критической величины из-за неблагоприятных условий, или в результате хищнического промысла, восстановление популяции становится невозможным

# Динамические модели популяций

## Учёт наименьшей критической численности

- ▶ Величина нижней критической плотности  $L$  различна для разных видов:
- ▶ это одна пара особей на тысячу квадратных километров в случае ондатры
- ▶ сотни тысяч особей для американского странствующего голубя.
- ▶ американский странствующий голубь вымер в начале XX века
- ▶ Для голубых китов критическая граница общей численности оказалась равной десяткам – сотням. Вид находится под угрозой вымирания.



# Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

**Balance equations**

Модель Лотки — Вольтерры

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Моделирование химических реакций

# Balance equations

Пример с популяцией (слайд 22 и далее) показывает, что при описании динамических моделей используются уравнения вида

$$\text{изменение величины} = \text{прирост} - \text{убыль}$$

или для непрерывной системы

$$\dot{s} = f(s) = \text{creation rate} - \text{destruction rate}$$

## Balance equations

Аналогично для дискретного случая:

$$s(t + \Delta t) - s(t) = (\text{creation rate} - \text{destruction rate})\Delta t$$

При  $\Delta t \rightarrow 0$  дискретный случай переходит в непрерывный, т.к.

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{s(t + \Delta t) - s(t)}{\Delta t} = \dot{s}$$

# Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Моделирование химических реакций



# Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)

- ▶  $a$  - популяция антилоп;  $c$  - популяция гепардов
- ▶ животные не иммигрируют и не эмигрируют
- ▶ Численность антилоп растёт экспоненциально (бесконечное количество еды)
- ▶ Шанс антилопы быть пойманной гепардом пропорционален вероятности их встречи
- ▶ Гепарды вымирают с голода экспоненциально
- ▶ Воспроизводство гепардов пропорционально их шансам поймать на охоте антилопу

# Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)

- ▶  $a$  - популяция антилоп;  $c$  - популяция гепардов
- ▶ животные не иммигрируют и не эмигрируют
- ▶ Численность антилоп растёт экспоненциально (бесконечное количество еды)
- ▶ Шанс антилопы быть пойманной гепардом пропорционален вероятности их встречи
- ▶ Гепарды вымирают с голода экспоненциально
- ▶ Воспроизводство гепардов пропорционально их шансам поймать на охоте антилопу

Как будут выглядеть дифференциальные уравнения описывающие такую модель?

# Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)

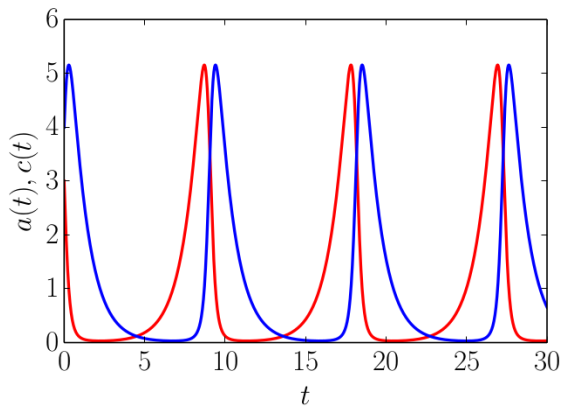
- ▶  $a$  - популяция антилоп;  $c$  - популяция гепардов
- ▶ животные не иммигрируют и не эмигрируют
- ▶ Численность антилоп растёт экспоненциально (бесконечное количество еды)
- ▶ Шанс антилопы быть пойманной гепардом пропорционален вероятности их встречи
- ▶ Гепарды вымирают с голода экспоненциально
- ▶ Воспроизводство гепардов пропорционально их шансам поймать на охоте антилопу

Как будут выглядеть дифференциальные уравнения описывающие такую модель?

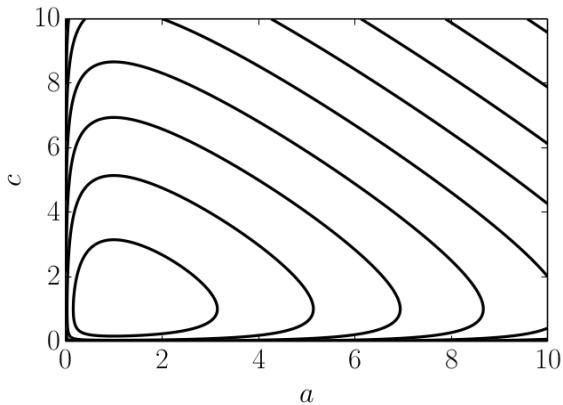
$$\frac{da}{dt} = k_a a(t) - k_{c,a} c(t) a(t)$$

$$\frac{dc}{dt} = -k_c c(t) + k_{a,c} c(t) a(t)$$

## Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)



# Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)



# Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)

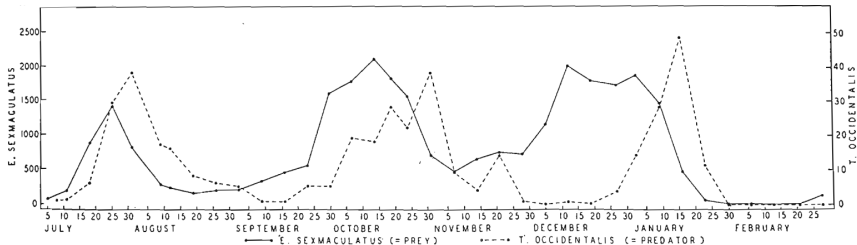
Хищные и травоядные клещи



*Typhlodromus occidentalis* (светлый клещ) атакует  
Большой клещ, не *Eotetranychus sexmaculaus*, это Красный плодовый клещ

# Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)

Хищные и травоядные клещи: экспериментальные данные



Huffaker's mite experiment, 1958

Лабораторный эксперимент (среда обитания смоделирована) с травоядным клещём *Eotetranychus sexmaculatus* и нападающего на него хищным *Typhlodromus occidentalis*.

# Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)

Канадская рысь и Американский беляк





# Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)

Канадская рысь и Американский беляк

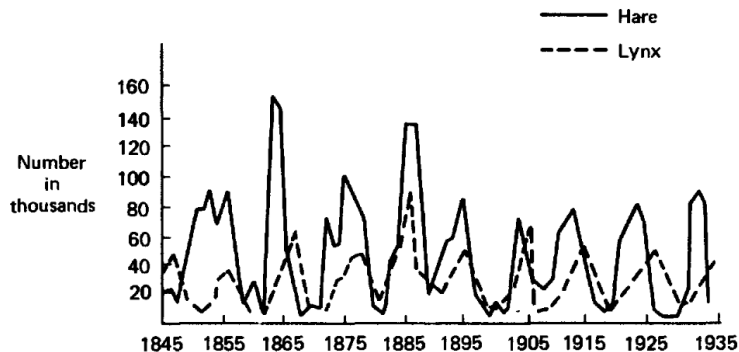


Figure 48-1 Oscillation observed in Canada of populations of lynx and hare (data from E. P. Odum, *Fundamentals of Ecology*, Philadelphia: W. B. Saunders, 1953).

# Другие модели

## Конкуренция видов

Используем логистическую модель:

$$\dot{P} = v \left( 1 - \frac{P}{C} \right) P$$

Рассмотрим популяции двух видов животных:  $P_1$  и  $P_2$ ;  
Каждая популяция имеет своё ёмкость среды:  $C_1$  и  $C_2$   
соответственно.

Выражение в скобках, определяющее прирост, должно  
учитывать потребление ресурса двумя видами:

$$\frac{P_1 + \alpha_{12} P_2}{C_1} \text{ и } \frac{P_2 + \alpha_{21} P_1}{C_2}$$

где  $\alpha_{12}$  - коэффициент учитывающий влияние популяции вида  
2 на вид 1 и  $\alpha_{21}$  соответственно наоборот

# Другие модели

## Конкуренция видов

Система ДУ описывающая конкуренцию двух видов

$$\dot{P}_1 = v \left( 1 - \frac{P_1 + \alpha_1 P_2}{C_1} \right) P_1$$

$$\dot{P}_2 = v \left( 1 - \frac{P_2 + \alpha_2 P_1}{C_2} \right) P_2$$

# Моделирование популяций

## Вопросы

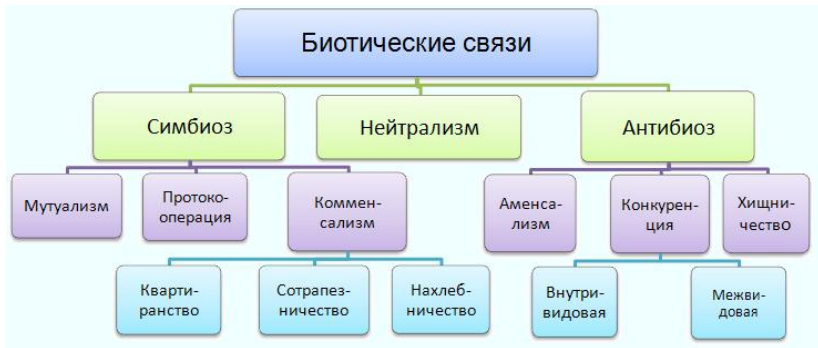
- ▶ Как учесть некоторый постоянный фактор уменьшающий прирост популяции? например в логистической модели
- ▶ Как учесть некоторый фактор уменьшающий прирост популяции, постоянно действующий в течении определённого интервала времени? например в логистической модели
- ▶ Какая система ДУ описывает популяции трёх видов  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$ , где  $Y$  охотится (потребляет) на  $X$ ,  $Z$  охотится (потребляет)  $Y$ ?
- ▶ Как решается система однородных дифференциальных уравнений первого порядка?
- ▶ Учитывает ли модель Лотки-Вольтерры возрастной фактор?
- ▶ Учитывает ли модель Лотки-Вольтерры распределение хищников и жертв в пространстве?
- ▶ Учитывает ли модель Лотки-Вольтерры внутривидовую конкуренцию?

## Другие виды отношений между видами

В каких ещё отношениях могут состоять биологические виды?

## Другие виды отношений между видами

В каких ещё отношениях могут состоять биологические виды?



# Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Моделирование химических реакций

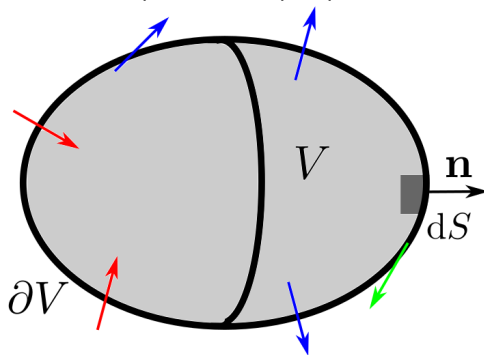
# Уравнение учитывающие пространство и время

- ▶ Предыдущие примеры не учитывали пространство, но часто это важно (распределение вещества, температуры и т.д.)
- ▶ Необходимо учесть движение чего-либо из некоторого объёма  $V$  через его поверхность  $\partial V$
- ▶ Причём отнести это движение к единице времени



# Уравнение учитывающие пространство и время

Рассмотрим объём пространства  $V$



входящий поток

исходящий поток

(на касательной к поверхности) - поток не покидающий данный объём  $V$

$dS$  (тёмно серый участок) - площадь поверхности  $\partial V$  с нормалью  $\mathbf{n}$

# Уравнение учитывающие пространство и время

- ▶  $\rho(t, x)$  - плотность исследуемой величины (массы, заряда, ...)

$$s(t) = \int_V \rho(t, x) dV$$

- ▶ Уравнение баланса:

$$\dot{s} = -\text{flux through surface} + \text{volumic creation/destruction rate}$$

знак минус в формуле выше появляется из-за того, что *выходящий* поток считается положительным, а он должен уменьшать некоторую величину внутри объёма  $V$ .

Обозначим поток (flux) как  $j$ ;

creation/destruction rate

$$\Sigma = \int_V \sigma dV$$

$$\dot{s} + \oint_{\partial V} j \cdot n dS = \Sigma$$

Согласно теореме Остроградского-Гаусса ...

Обозначим поток (flux) как  $j$ ;

creation/destruction rate

$$\Sigma = \int_V \sigma dV$$

$$\dot{s} + \oint_{\partial V} j \cdot n dS = \Sigma$$

Согласно теореме Остроградского-Гаусса ...



Обозначим поток как  $j$

$$\Sigma = \int_V \sigma dV$$

$$\dot{\Sigma} + \oint_{\partial V} j \cdot n dS = \Sigma$$

Согласно теореме Остроградского-Гаусса ...

$$\int_V \dot{\Sigma} dV + \int_V \nabla j \cdot n dV = \int_V \sigma dV$$

$$\dot{\Sigma} + \nabla j \cdot n = \sigma$$

# Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Моделирование химических реакций

# Численное интегрирование

Требуется проинтегрировать однородное дифференциальное уравнение

$$\dot{s} = f(s, t)$$

на интервале  $t_0 < t < t_f$  если известно  $s(t = t_0) = s_0$

Не все интегралы могут быть вычислены аналитически или аналитическое интегрирование может быть сложным.

Во время численного интегрирования важно знать об ошибке вычисления

# Численное интегрирование

Для примера возьмём ранее рассмотренную модель популяции

$$\dot{s} = f(s, t)$$

$$f(s, t) = v \left( 1 - \frac{P}{C} \right) s$$

Аналитическое решение:

$$P(t) = \frac{C}{1 + \frac{C - P_0}{P_0} e^{-vt}}$$

Далее сравним точное решение с численным.



# Численное интегрирование

Используем ряд Тейлора

$$s(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{s^{(k)}(t_0)}{k!} (t - t_0)^k$$

где  $s^{(k)}(t_0)$  означает производную  $k$ -го порядка.

Пусть  $t - t_0 = \Delta t$ , тогда

$$s(t_0 + \Delta t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{s^{(k)}}{k!} \Delta t^k$$

Выделим слагаемые для  $k = 0, 1$ :

$$s(t_0 + \Delta t) = s(t_0) + s'(t_0)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

# Численное интегрирование

Отбросим  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ :

$$s(t_1) = s(t_0) + \dot{s}(t_0)\Delta t$$

Заменяем  $\dot{s}(t_0) = f(s, t_0)$ :

$$s(t_1) = s(t_0) + f(s, t_0)\Delta t$$

# Численное интегрирование

## Явная схема Эйлера

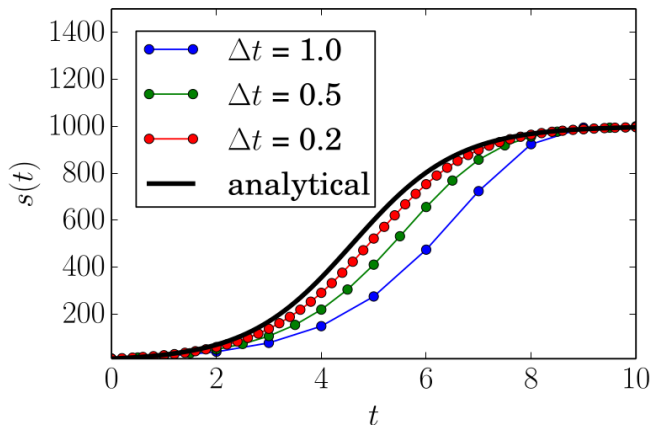
Тогда уравнение можно использовать для определения состояния  $s(t_i)$  в каждый следующий момент времени  $t_{i+1}$ :

$$s(t_{i+1}) = s(t_i) + f(s, t_i)\Delta t$$

где  $t_{i+1} - t_i = \Delta t$

- ▶ выражение дискретно по времени
- ▶ производную (но не саму функцию) можно выразить из дифференциального уравнения  $\dot{s}(t_0) = f(s, t_0)$ :
- ▶ аналитическое выражение для функции искать не нужно
- ▶ значение функции **явно** зависит только от известного значения функции в предыдущий момент времени и от производной

# Численное интегрирование



Сравнение численного решения и точного (слайд 67)

# Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Динамические модели популяций

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

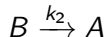
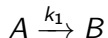
Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Моделирование химических реакций

# Моделирование химических реакций

Рассмотрим химическую реакцию в которой молекула (доля вещества)  $A$  превращается в молекулу  $B$  с интенсивностью  $k_1$ . Аналогичные превращения происходят с молекулой  $B$ .



# Моделирование химических реакций

Как будут выглядеть дифференциальные уравнения описывающие химическую реакцию (превращение одного вещества в другое)?

## Моделирование химических реакций

Как будут выглядеть дифференциальные уравнения описывающие химическую реакцию (превращение одного вещества в другое)?

Система однородных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_1 & k_2 \\ k_1 & -k_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

Решение:

$$A(t) = \frac{k_2}{k_1 + k_2} (A_0 + B_0) + \frac{A_0 k_1 - B_0 k_2}{k_1 + k_2} e^{-(k_1 + k_2)t}$$

$$B(t) = \frac{k_1}{k_1 + k_2} (A_0 + B_0) - \frac{A_0 k_1 - B_0 k_2}{k_1 + k_2} e^{-(k_1 + k_2)t}$$

При  $t \rightarrow \infty$ :



## Моделирование химических реакций

Как будут выглядеть дифференциальные уравнения описывающие химическую реакцию (превращение одного вещества в другое)?

Система однородных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_1 & k_2 \\ k_1 & -k_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

Решение:

$$A(t) = \frac{k_2}{k_1 + k_2} (A_0 + B_0) + \frac{A_0 k_1 - B_0 k_2}{k_1 + k_2} e^{-(k_1 + k_2)t}$$

$$B(t) = \frac{k_1}{k_1 + k_2} (A_0 + B_0) - \frac{A_0 k_1 - B_0 k_2}{k_1 + k_2} e^{-(k_1 + k_2)t}$$

При  $t \rightarrow \infty$ :

$$A \rightarrow A_\infty = \frac{k_2}{k_1 + k_2} (A_0 + B_0) \quad B \rightarrow B_\infty = \frac{k_1}{k_1 + k_2} (A_0 + B_0)$$

# Моделирование химических реакций

## Метод Монте Карло

Рассматриваемая реакция моделируется с помощью Динамического метода Монте Карло. Этот метод применяется для моделирования систем которые не находятся в равновесии.

- ▶ Время дискретно, с шагом  $\Delta t$
- ▶  $\Delta t$  следует выбрать таким, чтобы  $\Delta t k_1 < 1$  и  $\Delta t k_2 < 1$
- ▶ Величины  $\Delta t k_1$  и  $\Delta t k_2$  - вероятности превращения доли вещества А в вещество В и наоборот

# Моделирование химических реакций

## Метод Монте Карло

- ▶ Моделируя реакцию будем выбирать случайную молекулу (долю вещества) из всех  $N = A + B = \text{const}$
- ▶ Вероятности выбора соответствующей молекулы  $A$   $B$   $\frac{A}{A+B}$  и  $\frac{B}{A+B}$  соответственно  
например если  $\text{rand}(0,1) < \frac{A}{A+B}$  то выбирается молекула  $A$
- ▶ Если выбрана молекула  $A$ , то она превращается в молекулу  $B$  с вероятностью  $\Delta t k_1 < 1$   
Число молекул изменяется:  
 $A = A - 1$   
 $B = B + 1$
- ▶ Аналогично для молекулы  $B$

# Моделирование химических реакций

## Метод Монте Карло

- ▶ операция превращения (или не превращения) повторяется для всех  $N$  молекул
- ▶ После того как  $N$  молекул обработано время увеличивается на  $\Delta t$  и процесс повторяется заново
- ▶ Моделирование происходит пока  $t < t_{max}$

# Моделирование химических реакций

## Метод Монте Карло. Результат

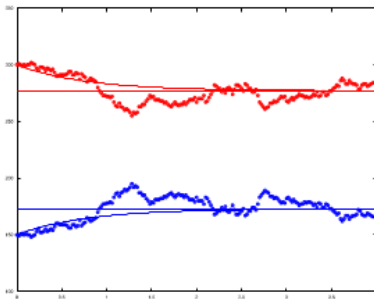


график построен для  $\Delta = 0.02$ ,  $k_1 = 0.5$ ,  $k_2 = 0.8$

Кривыми соответствующего цвета показаны аналитические решения.

Для получения более точного результата нужно провести моделирование несколько раз.

# Моделирование химических реакций

## Алгоритм Гиллиспи

- ▶ Для каждого из возможных событий  $i = 1..n$  заданы интенсивности  $r_1, \dots, r_n$ , с которой они происходят
- ▶ например  $r_i = kAB$  для химической реакции  $A + B \rightarrow C$
- ▶ введём накопленные интенсивности  $R_i = \sum_{j=1}^i r_j$
- ▶ Выберем одно из событий сгенерировав случайное число<sup>6</sup>  
 $s = \text{rand}(0, 1)$ :
- ▶ номер события будет определяться из соотношения  
 $R_{k-1} < sR_n < R_{k+1}$

---

<sup>6</sup>равномерно распределённое

# Моделирование химических реакций

## Алгоритм Гиллиспи

- ▶ после того как событие выбрано, оно происходит
- ▶ изменить время на  $\Delta t = \ln(\frac{1}{rand(0,1)})^7$
- ▶ В течении интервала времени  $t$  происходит только одно событие

---

<sup>7</sup>  $\Delta t$  будет иметь экспоненциальное распределение»

- ▶ «Жесткие» и «мягкие» математические модели,  
Арнольд В.



Использованы материалы курса Simulation and modeling of  
natural processes  
[coursera.org/learn/modeling-simulation-natural-processes/](https://coursera.org/learn/modeling-simulation-natural-processes/)

## Материалы курса

[github.com/ivtipm/computer-simulation](https://github.com/ivtipm/computer-simulation)