

# Компьютерное моделирование

## Моделирование динамических систем.

### Примеры динамических систем.

#### Черновик

Кафедра ИВТ и ПМ

2018

# План

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

- Модель Мальтуса

- Логистическая модель

- Учёт наименьшей критической численности

- Balance equations

- Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

### Экономика

- Влияние рекламы

- Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# Outline

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

Модель Мальтуса

Логистическая модель

Учёт наименьшей критической численности

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

### Экономика

Влияние рекламы

Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# Прошлые темы

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

# Прошлые темы

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

# Outline

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

Модель Мальтуса

Логистическая модель

Учёт наименьшей критической численности

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

### Экономика

Влияние рекламы

Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# 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, ...

# Outline

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

- Модель Мальтуса

- Логистическая модель

- Учёт наименьшей критической численности

- Balance equations

- Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

### Экономика

- Влияние рекламы

- Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# 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.

Например значения  $r_b = 0.1$ ,  $r_d = 0.07$  можно интерпретировать так: за единицу времени (год, месяц, ...) 7 особей из 100 умирают; на каждые 100 особей каждый год рождаются 10.

# 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>:

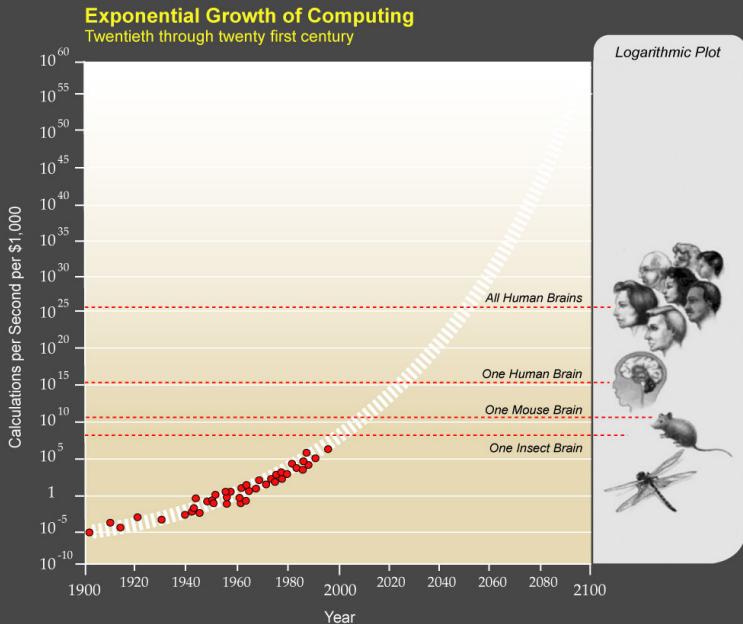
$$P(t) = P_0 e^{rt}$$

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?

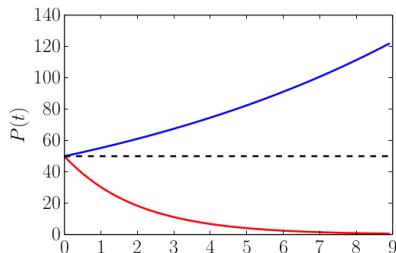




# Динамические модели популяций

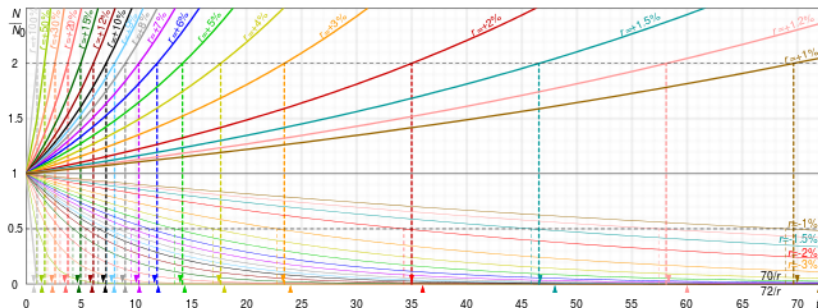
## Модель Мальтуса

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



# Динамические модели популяций

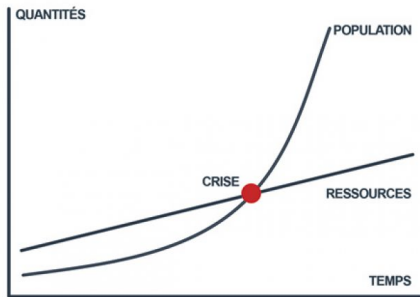
## Модель Мальтуса



Линейный рост воспроизводства и экспоненциальный рост популяции.

# Динамические модели популяций

## Модель Мальтуса



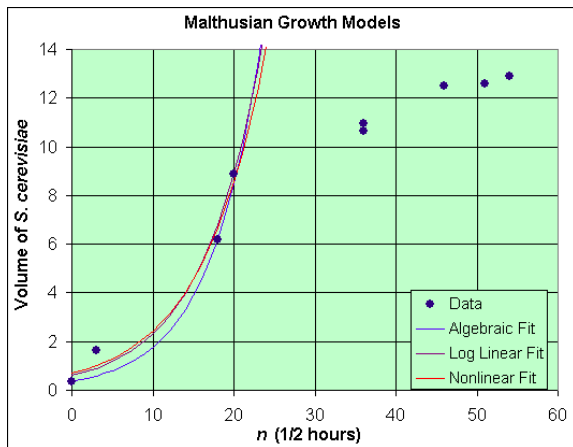
# Динамические модели популяций

## Модель Мальтуса

Недостатки модели Мальтуса?

# Динамические модели популяций

## Модель Мальтуса

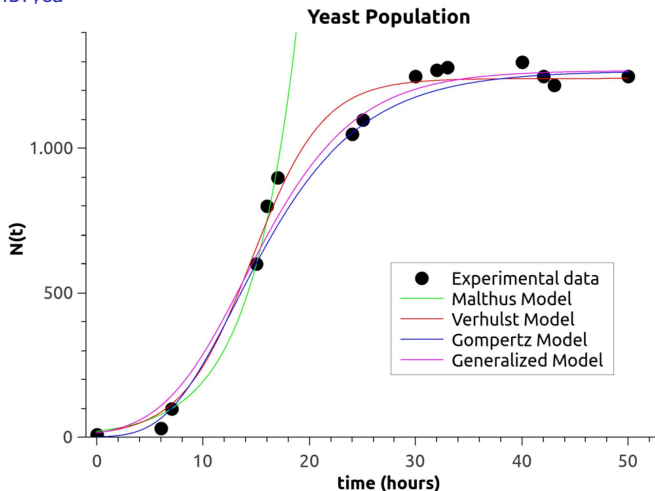


Рост популяции *Saccharomyces cerevisiae* (Пекарские дрожжи)

[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

# Outline

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

Модель Мальтуса

Логистическая модель

Учёт наименьшей критической численности

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

## Моделирование химических реакций

## Экономика

Влияние рекламы

Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# 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>:

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

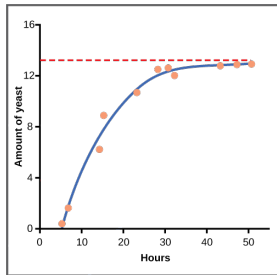
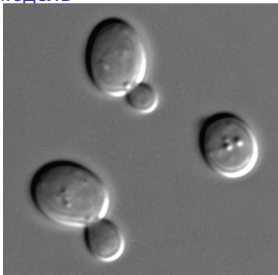
- ▶ слагаемое (если раскрыть скобки)  $-\frac{v}{C}P^2$  описывает внутривидовую конкуренцию

---

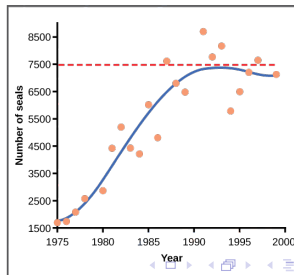
<sup>5</sup> логистическое уравнение

# Динамические модели популяций

## Логистическая модель



(a)



(b)

# Динамические модели популяций

## Логистическая модель

Решение ДУ, описывающего  
модель - логистическая  
функция

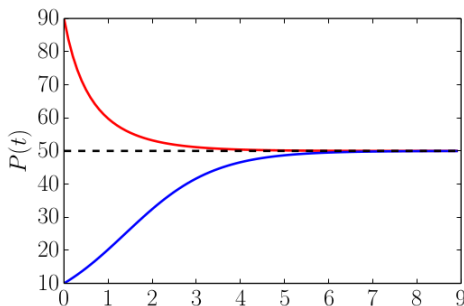
$$P(t) = \frac{C}{1 + \frac{C-P_0}{P_0} e^{-\nu t}}$$

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:

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

- ▶ **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
- ▶ Например для размножения бактерий не требуется искать партнёра
- ▶ На прирост популяции при половом размножении отличается:
- ▶ При малых  $P$  частота контактов (а значит и спаривания)  $b(P)$  пропорциональна  $P^2$
- ▶ Такой характер прироста справедлив для животных не образующих устойчивые пары (киты, некоторые виды полярных животных):

$$\dot{P} = BP^2 - r_d P \quad (3)$$

$B$  - положительная константа (как правило мала)

# Динамические модели популяций

- ▶ При больших  $P$  частота контактов  $b(P)$  пропорциональна числу самок  $\propto \frac{\beta P^2}{\beta + \gamma P}$

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



# Outline

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

Модель Мальтуса

Логистическая модель

Учёт наименьшей критической численности

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

### Экономика

Влияние рекламы

Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# Динамические модели популяций

Рассмотрим подробнее множитель, отвечающее за прирост популяции

$$\alpha \frac{\beta}{\beta + \tau P}$$

- ▶  $\tau$  - среднее время вынашивания плода
- ▶ обозначим
  - ▶  $T$  - среднее время между оплодотворениями
  - ▶  $t_{\text{ср}}$  - среднее время в течении которого может состояться оплодотворение
- ▶ тогда  $t_{\text{ср}} = T - \tau$
- ▶ Вероятность встречи ведущей к оплодотворению зависит от:  $t_{\text{ср}}/T$
- ▶ тогда коэффициент определяющий прирост популяции

$$r = \alpha \frac{t_{\text{ср}}}{T} = \alpha \frac{t_{\text{ср}}}{t_{\text{ср}} + \tau}$$

# Динамические модели популяций

$$r = \alpha \frac{t_{\text{cp}}}{T} = \frac{t_{\text{cp}}}{t_{\text{cp}} + \tau}$$

- ▶ с увеличением плотности популяции среднее время между оплодотворениями  $T$  уменьшается
- ▶ значит уменьшается и  $t_{\text{cp}}$
- ▶  $t_{\text{cp}} = \beta/P$
- ▶ тогда

$$r = \alpha \frac{\beta/P}{\beta/P + \tau} = \alpha \frac{\beta}{\beta + \tau P}$$

# Динамические модели популяций

Учёт наименьшей критической численности

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

Особые точки уравнения?

# Динамические модели популяций

Учёт наименьшей критической численности

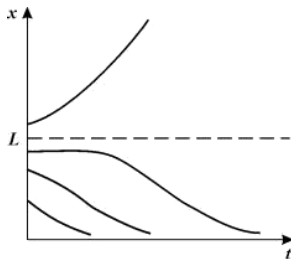
$$\dot{P} = \alpha \frac{\beta P^2}{\beta + \tau P} - \gamma P$$

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

### Динамические модели популяций

Модель Мальтуса

Логистическая модель

Учёт наименьшей критической численности

**Balance equations**

Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

### Экономика

Влияние рекламы

Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# Balance equations

Пример с популяцией (слайд 7 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.

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

# Динамические модели популяций

## Модель эксплуатируемых популяций

Рассмотрим логистическую модель:

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

Чтобы учесть фактор уменьшения скорости роста популяции, например промышленный лов рыбы, достаточно добавить в правую часть слагаемое со знаком "минус":

- ▶ абсолютная скорость ловли  $F$  (добыча за единицу времени) - вылавливаемое количество рыбы постоянно

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

- ▶ относительная скорость ловли  $fP$ , вылавливаемое количество рыбы зависит от её численности;  $f$  - доля вылавливаемой рыбы от всей популяции за ед. времени

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

# Outline

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

Модель Мальтуса

Логистическая модель

Учёт наименьшей критической численности

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

### Экономика

Влияние рекламы

Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# 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)

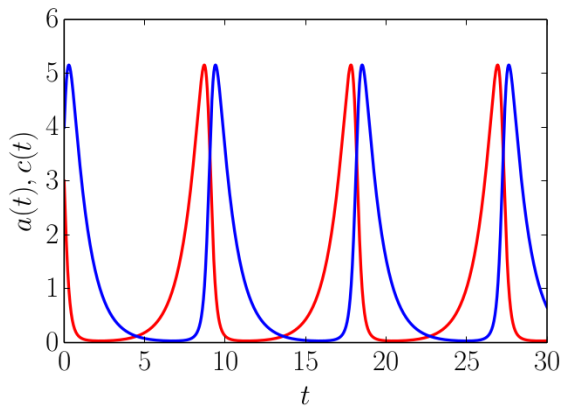
- ▶  $a$  - популяция антилоп;  $c$  - популяция гепардов
- ▶ животные не иммигрируют и не эмигрируют
- ▶ Численность антилоп растёт экспоненциально (бесконечное количество еды)
- ▶ Шанс антилопы быть пойманной гепардом пропорционален вероятности их встречи
- ▶ Гепарды вымирают с голода экспоненциально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

Как будут выглядеть дифференциальные уравнения описывающие такую модель?

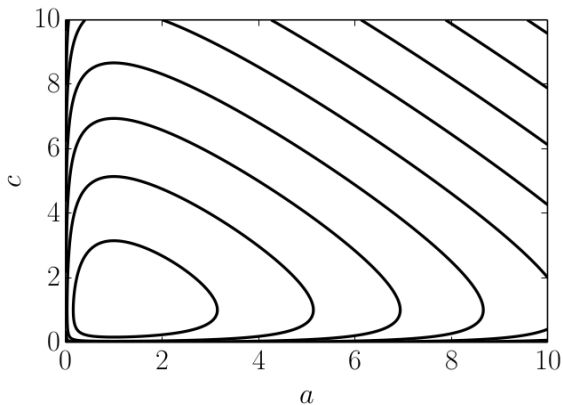
$$\frac{da}{dt} = k_a a(t) - k_{c,a} c(t) a(t)$$

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

## Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)



# Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)





# Модель Лотки — Вольтерры (хищник-жертва)

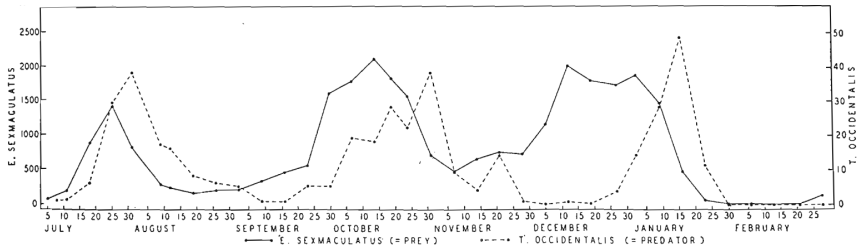
Хищные и травоядные клещи



*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

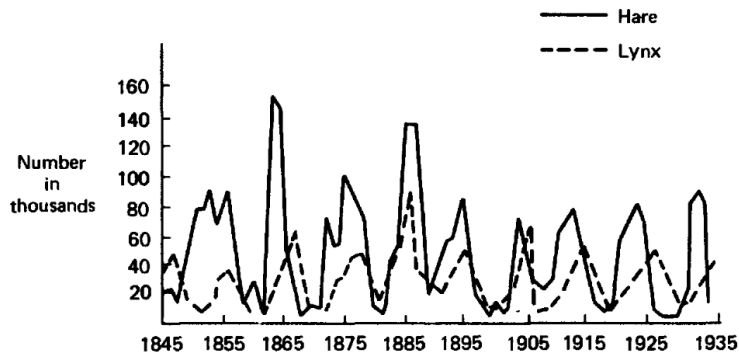


Figure 48-1 Oscillation observed in Canada of populations of lynx and hare (data from E. P. Odum, *Fundamentals of Ecology*, Philadelphia: W. B. Saunders, 1953).

# 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

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

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

## 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

### Динамические модели популяций

- Модель Мальтуса

- Логистическая модель

- Учёт наименьшей критической численности

- Balance equations

- Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

### Экономика

- Влияние рекламы

- Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# Моделирование популяций

## Вопросы

- ▶ Какие модели были рассмотрены?
- ▶ Какие допущения были сделаны для каждой из моделей?
- ▶ В каких моделях учитывается внутривидовая конкуренция?
- ▶ В каких моделях учитывается межвидовая конкуренция?
- ▶ В каких моделях учитывается ограниченность ресурсов (пропитания)?
- ▶ В каких моделях учитывается распределение особей по своему ареалу?
- ▶ Чем формально отличаются уравнения 2 и 3?
- ▶ Чем отличаются решения уравнений 2 и 3?

# 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?

# Задание

Подберите модель и её параметры для данных (см. ссылку) приведённых на слайде 17.

Для подбора параметров известной функции можно использовать функцию `curve_fit` из пакета `scipy`

При подборе параметров стоит особое внимание уделить разумным ограничениям для них

## Вопросы

- ▶ За какое время объём дрожжей достигнет оптимального значения, если начальный объём равен 1, 3 и 5?
- ▶ Как будет выглядеть кривая популяции для начального значения объёма 20?

# Outline

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

Модель Мальтуса

Логистическая модель

Учёт наименьшей критической численности

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

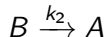
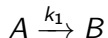
### Экономика

Влияние рекламы

Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# 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

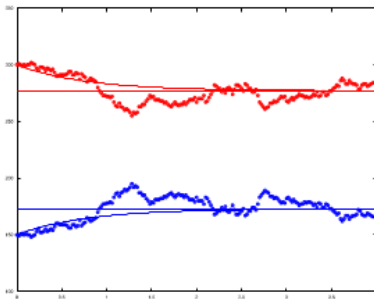


график построен для  $\Delta = 0.02$ ,  $k_1 = 0.5$ ,  $k_2 = 0.8$

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  $\Delta t = \ln\left(\frac{1}{\text{rand}(0,1)}\right)^7$
- ▶ В течении интервала времени  $t$  происходит только одно событие

---

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

# Моделирование химических реакций

Рассмотрим превращение двух веществ  $x$  и  $y$  в некоторое другое в результате их взаимодействия

Убывание количества каждого из веществ пропорционально вероятности их взаимодействия, т.о. чем больше молекул того и другого вещества, тем больше вероятность того, что они прореагируют.

$$\begin{cases} \dot{x} = -axy \\ \dot{y} = -bxy \end{cases}$$

Коэффициенты  $a, b > 0$  зависит от числа молекул данных веществ, вступающих в реакцию. Соотношение  $a/b$  легко находится из химической формулы реакции.



# Моделирование химических реакций

- ▶ Как решается такая система дифференциальных уравнений?
- ▶ Как выглядит решение?
- ▶ Решение (для любой из величин) похоже на уравнения описывающие другие приведённые здесь модели?

# Outline

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

Модель Мальтуса

Логистическая модель

Учёт наименьшей критической численности

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

## Экономика

Влияние рекламы

Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# Outline

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

Модель Мальтуса

Логистическая модель

Учёт наименьшей критической численности

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

## Экономика

Влияние рекламы

Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# Влияние рекламы

- ▶  $N$  - общее число потребителей
- ▶ – количество потребителей, которые знают о товаре
- ▶ прирост  $x(t)$  пропорционален количеству встреч знающих потребителей с незнающими

# Влияние рекламы

- ▶  $N$  - общее число потребителей
- ▶ – количество потребителей, которые знают о товаре
- ▶ прирост  $x(t)$  пропорционален количеству встреч знающих потребителей с незнающими

Как описать такую модель дифференциальным уравнением?

# Влияние рекламы

- ▶  $N$  - общее число потребителей
- ▶ – количество потребителей, которые знают о товаре
- ▶ прирост  $x(t)$  пропорционален количеству встреч знающих потребителей с незнающими

Как описать такую модель дифференциальным уравнением?

$$\dot{x} = ax(N - x)$$

# Outline

## Прошлые темы

### Динамические модели популяций

Модель Мальтуса

Логистическая модель

Учёт наименьшей критической численности

Balance equations

Модель Лотки — Вольтерры

## Вопросы

### Моделирование химических реакций

## Экономика

Влияние рекламы

Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

# Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

- ▶ Предполагается существование некоторого виртуального капитала, измеряемого в рублях, и называемого “покупательской расположенностью” (consumer's goodwill). Чем он больше, тем больше продажи товара.
- ▶ Увеличить его можно с помощью рекламы: сколько денег вложено в рекламу, но столько возрастает и расположенность.
- ▶ С другой стороны, капитал расположенности обесценивается со временем, поскольку покупатель забывает о данном товаре.



# Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

- ▶ Если  $x(t)$  - величина покупательской расположенности,
- ▶  $u(t)$  - количество вложенных денег в рекламу

то как описать модель?

# Модель Нерлофа-Эрроу расходов на рекламу

- ▶ Если  $x(t)$  - величина покупательской расположенности,
- ▶  $u(t)$  - количество вложенных денег в рекламу

то как описать модель?

$$\dot{x}(t) = u(t) - \beta x(t)$$

$\beta$  - фактор обесценивания

- ▶ «Жесткие» и «мягкие» математические модели, Арнольд В.
- ▶ `scipy` - Modeling a Zombie Apocalypse

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)