

Компьютерное моделирование

Моделирование динамических систем.

Дифференциальные уравнения.

Черновик

Кафедра ИВТ и ПМ

2018

План

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

Моделирование химических реакций

Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

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

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

Моделирование химических реакций

Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

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

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

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 Δt - 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

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

Моделирование химических реакций

Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

Моделирование химических реакций

Balance equations

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

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

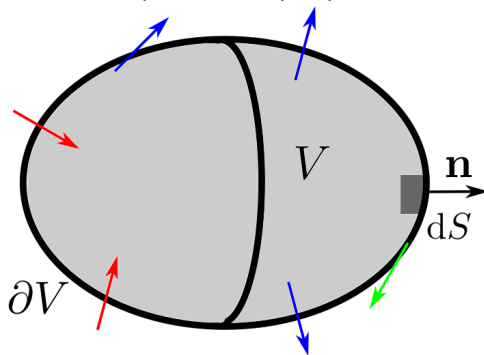
Моделирование химических реакций

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 ∂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 ∂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 равновесия:

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

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 ;

изменение исследуемой величины в заданном объёме
(creation/destruction rate) -

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

где σ - характеризует изменение s в заданном объёме

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

Согласно теореме Остроградского-Гаусса ...

Обозначим поток (flux) как j ;

изменение исследуемой величины в заданном объёме
(creation/destruction rate) -

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

где σ - характеризует изменение s в заданном объёме

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

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 ...

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

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

Пример

Уравнение диффузии

Уравнение диффузии для одномерного случая

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} c(x, t) + f(x, t),$$

где $c(x, t)$ концентрация диффундирующего вещества, а $f(x, t)$ — функция, описывающая источники вещества, $D = \text{const}$ коэффициент диффузии.

Пример

Уравнение диффузии

Уравнение диффузии для одномерного случая

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} c(x, t) + f(x, t),$$

где $c(x, t)$ концентрация диффундирующего вещества, а $f(x, t)$ — функция, описывающая источники вещества, $D = \text{const}$ коэффициент диффузии.

Чему равны значения \dot{s} , j и σ ?

Пример

Уравнение диффузии

Уравнение диффузии для одномерного случая

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} c(x, t) + f(x, t),$$

где $c(x, t)$ концентрация диффундирующего вещества, а $f(x, t)$ — функция, описывающая источники вещества, $D = \text{const}$ коэффициент диффузии.

Чему равны значения \dot{s} , j и σ ?

$$\dot{s} = \frac{\partial}{\partial t} c(x, t)$$

$$j = Dc(x, t)$$

$$\sigma = f(x, t)$$

Пример

Уравнение диффузии

Уравнение диффузии для трёхмерного случая

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{r}, t) = D \Delta c(\vec{r}, t) + f(\vec{r}, t),$$

где $\Delta = \nabla^2$

Пример

Уравнение теплопроводности

Уравнение диффузии для трёхмерного случая

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \Delta u = f(\mathbf{r}, t),$$

где a — положительная константа (число a^2 является коэффициентом температуропроводности), $\Delta = \nabla^2$ — оператор Лапласа и $f(\vec{r}, t)$ — функция тепловых источников.

Искомая функция $u = u(\vec{r}, t)$ задает температуру в точке с координатами \vec{r} в момент времени t .

Пример

уравнение Навье-Стокса

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \vec{f}$$

Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

Моделирование химических реакций

Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

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 (Explicit Euler Scheme)

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

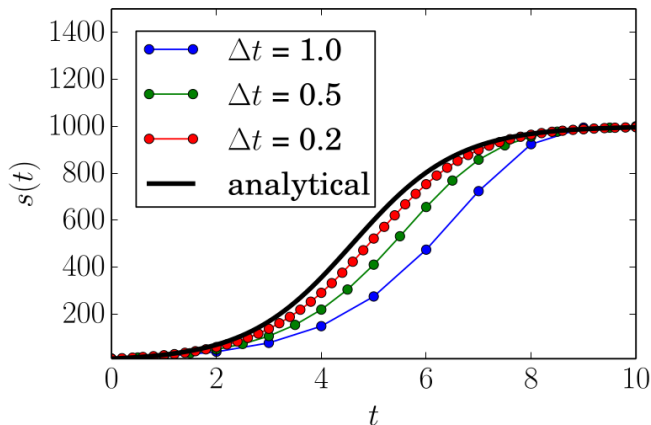
$$s(t_{i+1}) = s(t_i) + f(s, t_i)\Delta t$$

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

Явная схема Эйлера (Explicit Euler Scheme)

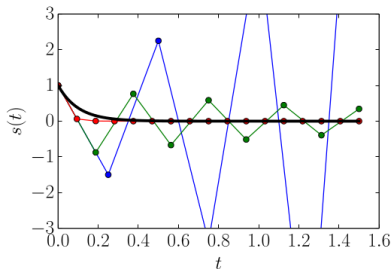


Сравнение численного решения и точного (слайд 36)

Численное интегрирование

Явная схема Эйлера (Explicit Euler Scheme)

- ▶ Возможно потеря устойчивости при решениях жёстких систем с большими значениями Δt
- ▶ Накопление ошибки



Численное интегрирование

явная схема Эйлера (Explicit Euler Scheme)

Явная схема:

$$s_{i+1} = s_i + f(s_i, t_i)\Delta t$$

Будем вычислять s_{i-1} вместо s_{i+1}

$$s_{i-1} = s_i - f(s_i, t_i)\Delta t$$

Выразим s_j :

$$s_i = s_{i-1} + \cdot f(s_i, t_i)\Delta t$$

тогда s_{i+1}

$$s_{i+1} = s_i + \cdot f(s_{i+1}, t_{i+1}) + \Delta t$$

Численное интегрирование

Неявная схема Эйлера (Explicit Euler Scheme)

Неявная схема Эйлера

$$s_{i+1} = s_i + f(s_{i+1}, t_{i+1})\Delta t$$

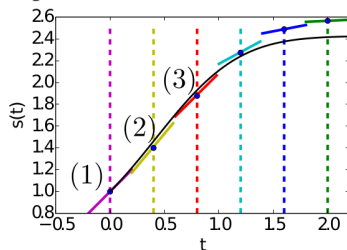
Явная схема Эйлера

$$s_{i+1} = s_i + f(s_i, t_i)\Delta t$$

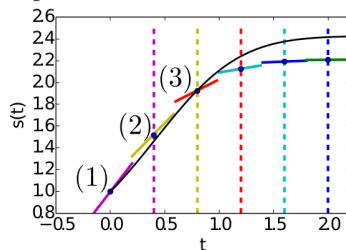
Численное интегрирование

Неявная схема Эйлера (Explicit Euler Scheme)

Explicit



Implicit



Численное интегрирование

Неявная схема Эйлера (Explicit Euler Scheme)

Пример: $\dot{s} = -10s(t)$, $t_0 = 0$, $s_0 = 1$

Решение:

Численное интегрирование

Неявная схема Эйлера (Explicit Euler Scheme)

Пример: $\dot{s} = -10s(t)$, $t_0 = 0$, $s_0 = 1$

Решение: $s = s_0 \exp(-10t)$

Явная схема

Численное интегрирование

Неявная схема Эйлера (Explicit Euler Scheme)

Пример: $\dot{s} = -10s(t)$, $t_0 = 0$, $s_0 = 1$

Решение: $s = s_0 \exp(-10t)$

Явная схема

$$s_{i+1} = s_i(1 - 10\Delta t)$$

Решение не устойчиво

Неявная схема

Численное интегрирование

Неявная схема Эйлера (Explicit Euler Scheme)

Пример: $\dot{s} = -10s(t)$, $t_0 = 0$, $s_0 = 1$

Решение: $s = s_0 \exp(-10t)$

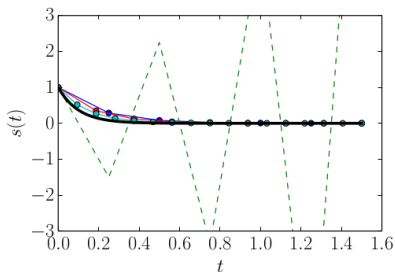
Явная схема

$$s_{i+1} = s_i(1 - 10\Delta t)$$

Решение не устойчиво

Неявная схема

$$s_{i+1} = s_i / (1 + 10\Delta t)$$



Пунктиром показано решение с помощью явной схемы

Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

Моделирование химических реакций

Пример: уравнение диффузии

Постановка задачи

Рассмотрим простое уравнений диффузии в одномерном пространстве, причем $f(x, t) = 0$

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}$$

$$t \in [t_0, t_f], x \in [x_0, x_f]$$

Граничные условия:

$$C(x_0, t) = C_0$$

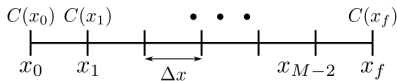
$$C(x_f, t) = C_1$$

Начальные условия:

$$C(x, t_0) = C_x$$

Пример: уравнение диффузии

Дискретизация пространства



- ▶ разделим пространство на $N + 1$ точек. $N = (x_f - x_0)/\Delta x$
- ▶ координата каждой следующей точки вычисляется:
 $x_{i+1} = x_0 + i\Delta x$, $x_f = x_N$
- ▶ концентрация в каждой точке $i \equiv C(x_i)$

Пример: уравнение диффузии

Дискретизация пространства

Используя ряд Тейлора запишем C_{i+1} и C_{i-1} с учётом первой и второй производной:

$$C_{i+1} = C_i + \Delta x \frac{\partial C_i}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2}$$

$$C_{i-1} = C_i - \Delta x \frac{\partial C_i}{\partial x} - \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2}$$

Сложим уравнения:

$$\frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} = \frac{C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}}{\Delta x^2}$$

Пример: уравнение диффузии

Дискретизация пространства

перепишем уравнение:

$$\frac{\partial^2 C_i(t)}{\partial x^2} = \frac{C_{i-1}(t) - 2C_i(t) + C_{i+1}(t)}{\Delta x^2}$$

Чтобы учесть множество x_i соответствующих одному значению t

$$\mathbf{C}(t) = (C(x_0, t), C(x_1, t), \dots, C(x_N, t))^T$$

Запишем рассматриваемое дифференциальное уравнение в матричном виде¹

$$\frac{\partial \mathbf{C}(t)}{\partial t} = \frac{D}{\Delta x^2} \mathbf{A} \mathbf{C}(t)$$

¹это будет соответствовать системе из дифференциальных уравнений

Пример: уравнение диффузии

Дискретизация пространства

$$\frac{\partial \mathbf{C}(t)}{\partial x} = \frac{D}{\Delta x^2} \mathbf{A} \mathbf{C}(t)$$

где

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Таким образом получено (матричное) однородное ДУ

Пример: уравнение диффузии

Дискретизация времени

Пример: уравнение диффузии

Пример вычислений

Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

Моделирование химических реакций

Outline

Прошлые темы

Динамическая система

Дифференциальные уравнения

Формальное определение

Моделирование динамических систем

Balance equations

Уравнение учитывающие пространство и время

Численное интегрирование

Однородные дифференциальные уравнения

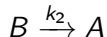
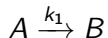
Дифференциальные уравнения в частных производных

Общая характеристика динамических систем

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 Δt
- ▶ Δt 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 Δt и процесс повторяется заново
- ▶ Моделирование происходит пока $t < t_{max}$

Моделирование химических реакций

Метод Монте Карло. Результат

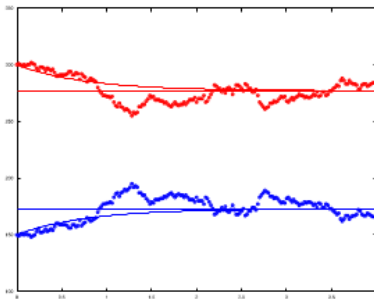


график построен для $\Delta = 0.02$, $k_1 = 0.5$, $k_2 = 0.8$

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 число² $s = \text{rand}(0, 1)$:
- ▶ номер события будет определяться из соотношения $R_{k-1} < sR_n < R_{k+1}$

²равномерно распределённое

Моделирование химических реакций

Алгоритм Гиллиспи

- ▶ после того как событие выбрано, оно происходит
- ▶ изменить время на $\Delta t = \ln\left(\frac{1}{\text{rand}(0,1)}\right)^3$
- ▶ В течении интервала времени t происходит только одно событие

³ Δt будет иметь экспоненциальное распределение»

- ▶ «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/

Материалы курса

github.com/ivtipm/computer-simulation