ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФГАОУ ВО НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

Факультет компьютерных наук
Образовательная программа «Прикладная математика и информатика»

УДК 004.94________

Отчет об исследовательском проекте

на тему “Компьютерный анализ биологической модели адаптивной динамики”

(промежуточный, этап 1)

Выполнил:
студент группы БПМИ195_ ____________________ А.К. Колчина______________
Подпись И.О. Фамилия

20.02.2021
Дата

Принял:
руководитель проекта Алексей Антонович Никитин_______________________
Имя, Отчество, Фамилия

доцент
Должность, ученое звание

ФЭН / департамента математики НИУ ВШЭ
Место работы (Компания или подразделение НИУ ВШЭ)

Дата проверки_________2021 10 ____________________
Оценка
(по 10-тибалльной шкале)
Подпись

Москва 2021

СОДЕРЖАНИЕ

ОСНОВНЫЕ ТЕРМИНЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Сосуществование видов – состояние системы, при котором численность данных видов организмов не равна нулю

Динамическая модель – модель, отображающая происходящие процессы в динамике, то есть с течением времени

Mean-field theory – теория, которая утверждает, что взаимодействие видов происходит пропорционально их плотности распространения на территории

IBM (individual-based model) – экологическая модель, учитывающая процессы, происходящие с каждым индивидом-участником сообщества

Момент $\boldsymbol{n}$-го порядка – функция, выражающая среднюю плотность $\boldsymbol{n}$ видов на заданном расстоянии друг от друга

Замыкание пространственных моментов – выражение момента через моменты более низких порядков

Competition-colonization trade-off (CCTO) – механизм сосуществования, при котором один вид сильнее доминирует, а второй вид распространяется на более дальние расстояния

Heteromyopia (HM) – механизм сосуществования, при котором предполагается, что межвидовая конкуренция происходит на меньших расстояниях, нежели внутривидовая

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность

Математические модели приближенно отражают действительность с помощью математики и широко находят свое применение во многих естественно-научных областях, в частности экологии и биологии, где реальные эксперименты бывают затруднительны. На данный момент не теряет актуальности задача исследования биологического сообщества, состоящего из нескольких видов организмов, находящихся на одном ареале. Экологам требуется понять, как с течением времени меняется численность популяции того или иного вида, и осознать, возможно ли их сосуществование [3]. Развитие информационных технологий и вычислительной техники позволило проводить компьютерные симуляции, отображающие стохастические процессы, происходящие в биологическом сообществе. Но подобные симуляции работают медленно и могут давать случайный шум, а потому экологи по-прежнему нуждаются в качественных аналитических моделях [4]. Такие модели уже были предложены учеными: например, знаменитая модель Лотки-Вольтерры воспроизводит сосуществование “хищников” и “жертв”. Данная модель не является достаточно точной, поскольку не учитывает пространственную структуру биологического сообщества, ведь индивиды могут быть рассредоточены неравномерно по ареалу. Также во многих моделях использовалась mean-field theory, не отражающая взаимодействие видов на близком расстоянии. Ричардом Лоу и Ульфом Дикманом была предложена динамическая IBM, решающая эту проблему: она отображает изменение пространственной структуры сообщества с течением времени. Труд этих ученых открыл огромное поле для исследований в области математической биологии, в частности, системы интегро-дифференциальных уравнений, неизбежно возникающие в модели, приводят к появлению численного метода для их решения.

Объект исследования

Объект исследования - модель Ульфа Дикмана (далее - модель) - построена на методе пространственных моментов. Опишем данную модель, основываясь на статьях [1] и [5].

Рассматривается $\boldsymbol{n}$-видовое биологическое сообщество растений, находящихся на некотором ареале площади $\boldsymbol{A}$. Введем функцию плотности $\boldsymbol{i}$-го вида:

$$\boldsymbol{p_i(x) = \sum_{x' \in X_t^i} \delta(x - x')},$$

где $\boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{x})$ – дельта-функция Дирака, $\boldsymbol{X}_{\boldsymbol{t}}^{\boldsymbol{i}}$ – множество точек, в которых присутствует индивид в момент времени $\boldsymbol{t}$.

Пусть $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}) = \big(\boldsymbol{p}_{\mathbf{1}}(\boldsymbol{x}), \dots, \boldsymbol{p}_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{x})\big)$ – пространственный паттерн - вектор функций плотностей $\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{x})$ для каждого вида $\boldsymbol{i}$, отражающий состояние системы в момент времени $\boldsymbol{t}$.

Первый момент – это средняя плотность вида $\boldsymbol{i}$ на площади $\boldsymbol{A}$:

$$\boldsymbol{N}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{p}) = \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{A}} \int \boldsymbol{p}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{d}\boldsymbol{x}$$

Второй момент – это плотность пар видов $\boldsymbol{i}$ и $\boldsymbol{j}$ на расстоянии $\boldsymbol{\xi}$ на площади $\boldsymbol{A}$:

$$\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{ij}}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{p}) = \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{A}} \int \boldsymbol{p}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{x}) \times \left[\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\xi}) - \boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{ij}} \times \boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\xi})\right] \boldsymbol{d}\boldsymbol{x}$$

Третий момент – это плотность троек видов: $\boldsymbol{i}$; $\boldsymbol{j}$ на расстоянии $\boldsymbol{\xi}$ от $\boldsymbol{i}$; $\boldsymbol{k}$ на расстоянии $\boldsymbol{\xi}'$ от $\boldsymbol{i}$ на площади $\boldsymbol{A}$:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{T}_{\boldsymbol{ijk}}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}', \boldsymbol{p}) = \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{A}} \int \{&\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{x}) \times \left[\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\xi}) - \boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{ij}} \times \boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\xi})\right] \\ &\times \left[\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\xi}') - \boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{ik}} \times \boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\xi}') - \boldsymbol{\delta}_{\boldsymbol{jk}} \times \boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}')\right]\} \boldsymbol{d}\boldsymbol{x}\end{aligned}$$

Пространственные паттерны случайны, поэтому в итоге окончательные моменты представляют собой матожидания в момент времени $\boldsymbol{t}$ по пространству паттернов:

$$\boldsymbol{N}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{t}) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{p}} \boldsymbol{N}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{p})$$

$$\boldsymbol{C}_{\boldsymbol{ij}}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{t}) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{p}} \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{ij}}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{p})$$

$$\boldsymbol{T}_{\boldsymbol{ijk}}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}', \boldsymbol{t}) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{p}} \boldsymbol{Tijk}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}', \boldsymbol{p})$$

Чтобы сделать модель динамической, рассмотрим стохастические процессы, происходящие с каждым индивидом по отдельности:

Движение – перемещение вида $\boldsymbol{i}$ в точку $\boldsymbol{x}'$ (предполагается, что растения стационарны, но могут распространяться при рождении):

$$\boldsymbol{M}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{p}) = \boldsymbol{m}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}),$$

где $\boldsymbol{m}_{\boldsymbol{i}}$ – параметр движения вида $\boldsymbol{i}$.

Рождение – новая особь появляется в точке $\boldsymbol{x}'$:

$$\boldsymbol{B_i(x,x',p) = \left(b_i + \sum_j \left[b_{ij} \int w_{ij}^{(b)}(x''-x) \times \left[p_j(x'') - \delta_{ij} \times \delta_x(x'')\right] dx''\right]\right) \times m_i^{(b)}(x'-x)},$$

где $\boldsymbol{b_i}$ – коэффициент рождаемости вида $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{b_{ij}}$ – влияние вида $\boldsymbol{j}$ на рождаемость вида $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{w_{ij}^{(b)}}$ – функция, добавляющая вклад вида $\boldsymbol{j}$ в рождаемость вида $\boldsymbol{i}$, $\mathbf{m_i^{(b)}}$- ядро рождаемости.

Смерть:

$$\boldsymbol{D_i(x,p) = d_i + \sum_j \left[d_{ij} \int w_{ij}^{(d)}(x'-x) \times \left[p_j(x') - \delta_{ij} \times \delta_x(x')\right] dx'\right]}$$

где $\boldsymbol{d_i}$ – коэффициент смертности вида $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{d_{ij}}$ – влияние вида $\boldsymbol{j}$ на смертность вида $\boldsymbol{i}$.

Объединяя метод моментов и вышеуказанные стохастические процессы, получаем следующую динамическую систему:

Первый момент:

$\boldsymbol{\frac{d}{dt} N_i = (b_i - d_i) \times N_i + \sum_j b_{ij} \times W_{ij}^{(b)} - \sum_j d_{ij} \times W_{ij}^{(d)}}$,

где

$$\boldsymbol{W_{ij}^{(b)} = \int w_{ij}^{(b)}(\xi') \times C_{ij}(\xi') d\xi'}$$

$$\boldsymbol{W_{ij}^{(d)} = \int w_{ij}^{(d)}(\xi') \times C_{ij}(\xi') d\xi'}$$

- весовые функции рождаемости и смертности соответственно.

Второй момент:

$$\boldsymbol{\frac{d}{dt} C_{ij}(\xi) = \delta_{ij} m_i(-\xi) N_i + \int m_i(\xi') C_{ij}(\xi + \xi') d\xi' - d_i C_{ij}(\xi) - \sum_k \int w_{ik}(\xi') T_{ijk}(\xi, \xi') d\xi}$$
$$\boldsymbol{- w_{ij}(\xi) C_{ij}(\xi)} + < i, j, \xi \to \boldsymbol{j, i - \xi} >,$$

где $< i, j, \xi \to \boldsymbol{j, i, -\xi} >$ - повторение всех предыдущих членов с точностью до данной замены.

В итоге получаем динамическую individual-based модель, как и требовалось. Но возникает проблема, связанная с тем, что система не является замкнутой из-за наличия третьего момента. По сути, моментов может быть и больше, от чего возрастает точность модели, но это значительно усложняет наше исследование, потому что момент $\boldsymbol{n}$-го порядка зависит от момента $\boldsymbol{n+1}$-го порядка, поэтому требуется избавиться от третьего момента путем замыкания. Можно найти несколько видов замыканий, вот один из них, который был предложен Ульфом Дикманом:

$$\boldsymbol{T_{ijk}(\xi, \xi') = \frac{C_{ij}(\xi) \times C_{ik}(\xi')}{N_i}}$$

Цель и задачи исследования

Цель моей работы: изучение многовидовой экологической модели, предложенной Ульфом Дикманом с помощью численного метода, компьютерных симуляций и сравнение результатов их работы.

Было поставлено несколько **задач:**

1) Изучить базовые статьи, необходимые для понимания модели

2) Научиться запускать компьютерные симуляции и численный метод с различными параметрами

3) Сравнить работу симуляций и численного метода в двухвидовом / трехвидовом случае

4) Исследовать равновесные положения популяции для ССТО и НМ [2] в разных размерностях при параметрах, указанных в работе Савостьянова [6, с. 30-36]:

4.1 попытаться выяснить, почему возникают артефакты на графике поверхностей первых моментов

4.2 понять, почему такая малая область преобладания второго вида на графике сосуществования [6, с. 30-32]

4.3 сравнить результаты с компьютерными симуляциями

5) Визуализировать полученные результаты работы в виде графиков

ОБЗОР И СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ИСТОЧНИКОВ

В моем распоряжении два мощнейших инструмента для исследования модели: это компьютерные симуляции и численный метод.

Компьютерные симуляции были написаны Е.Г. Галкиным, выпускником НИУ ВШЭ, впоследствии доработаны для исследования многовидовой модели студентом НИУ ВШЭ В.К. Зеленковым. Используется язык программирования R. Программа моделирует стохастические процессы, происходящие в сообществе, в зависимости от входных параметров. Вследствие моделирования случайных процессов компьютерные симуляции наиболее точно позволяют исследовать модель с течением времени. Проблема в том, что они долго работают, а также могут выдавать ошибку при подсчете второго момента. Также симуляции были написаны для трехвидовой модели, то есть исследование другого числа видов требует некоторой работы по изменению кода.

Автором алгоритма численного метода является выпускник НИУ ВШЭ А.С. Савостьянов, реализация на языке C++ была осуществлена В.К. Зеленковым. Численный метод, решающий системы интегро-дифференциальных уравнений, является практической реализацией модели Дикмана. Он работает быстрее и достаточно правдиво считает как первый, так и второй моменты, работает для любого количества видов. Недостатком является то, что в той версии численного метода, которую я изначально получила, отсутствовала возможность запускать метод по нескольким точкам. Я решила эту проблему, написав скрипт на Python.

Сравнивать компьютерные симуляции и численный метод непросто, и, пожалуй, не совсем корректно. Оба инструмента имеют и преимущества, и недостатки, и наилучшим образом пригодны при их совместном использовании, а именно путем сравнения результатов работы компьютерных симуляций и численного метода, что позволяет исследовать модель на предмет сосуществования видов, найти параметры, при которых оно возможно. Механизмы сосуществования подробно исследованы с помощью численного метода А.С. Савостьяновым в ВКР [6]. Тем не менее, достаточное количество невыясненного материала, а также некоторые результаты его работы порождают новые задачи, которые были поставлены выше. В моем случае требуется продолжить данное исследование, но уже с привлечением компьютерных симуляций.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Law R. and Dieckmann U.: A dynamical system for neighborhoods in plant communities – Ecology, 81(8), 2000, pp. 2137-2148 by the Ecological Society of America
2. Murrel D.J. and Law R.: Heteromyopia and the spatial coexistence of similar competitors – Ecology Letters, (2003) 6: 48-59
3. Velazquez J, Garrahan JP, Eichhorn MP (2014) Spatial Complementarity and the Coexistence of Species. PLoS ONE 9(12): e114979. doi:10.1371/journal.pone.0114979
4. Е.Г. Галкин, В.К. Зеленков, А.А. Никитин: Компьютерные симуляции и численные методы в двухвидовой модели пространственных сообществ, октябрь 2019
5. М.В. Николаев: Выпускная квалификационная работа на тему “Исследование нелинейного интегрального уравнения, возникающего в модели биологических сообществ”, МГУ им. М.В. Ломоносова, Факультет ВМиК, кафедра общей математики, Москва, 2019
6. А.С. Савостьянов: Выпускная квалификационная работа бакалавра на тему “Механизмы сосуществования стационарных биологических сообществ в пространствах разных размерностей”, НИУ ВШЭ, ФКН, ОП “Прикладная математика и информатика”, Москва 2017

ПРИЛОЖЕНИЕ – КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН РАБОТ НАД ПРОЕКТОМ

Март

Sun	Mon	Tue	Wed	Thu	Fri	Sat
	1	2	3	4	5	6 Запуск числ. метода + построение графиков для задачи 4
7	8	9	10	11	12	13 Получение новой версии симуляций
14	15	16	17	18	19	20
21	22	23	24	25	26	27 Адаптировать код симуляций под двухвидовую модель
28	29	30	31			

Апрель

Sun	Mon	Tue	Wed	Thu	Fri	Sat
				1	2	3 Запустить симуляции для задачи 4 + графики
4	5	6	7	8	9	10 Представить результаты числ. метода и симуляций в удобном для сравнения

						виде
11	12	13	14	15	16	17 КТ2
18	19	20	21	22	23	24 КТ2
25	26	27	28	29	30	

Май

Sun	Mon	Tue	Wed	Thu	Fri	Sat
						1 Исследовать трехвидовую модель числ. методом
2	3	4	5	6	7	8 Исследовать трехвидовую модель симуляциями
9	10	11	12	13	14	15 Визуализировать результаты
16	17	18	19	20	21	22 Сравнить и сделать выводы, обсудить с коллегами
23	24	25	26	27	28	29 Опционально – разобраться с параметром замыкания, используемого в симуляциях
30	31					

Июнь

Sun	Mon	Tue	Wed	Thu	Fri	Sat
		1	2	3	4	5 Финальные доработки
6	7	8	9	10	11	12 Оформить отчет, возможно в latex
13	14	15	16	17	18	19 Подготовка к защите
20	21	22	23	24	25	26 Защита
27	28	29	30			