

Національний університет “Києво-Могилянська академія”
Факультет інформатики
Кафедра математики

Марчук Іоанна Юріївна

Моделювання міграційних процесів біологічних видів

Курсова робота
студентки 5-го року навчання
за спеціальністю “ІІЗ”

Науковий керівник
доцент, кандидат технічних наук
ст.н.сп. Інституту надтвердих матеріалів
ім. В. М. Бакуля НАН України
Дутка Василь Ананійович

Завідувач кафедри

Олійник.Б.В

Київ 2021

Зміст

| | |
|--|----|
| ВСТУП | 2 |
| РОЗДІЛ 1 | 4 |
| ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ | 4 |
| 1.1 Вступ | 4 |
| 1.2 Міграція Тварин | 6 |
| 1.3 Поширення нервових імпульсів..... | 8 |
| 1.4 Транспортування крові по судинах | 10 |
| 1.5 Математичний опис міграційних процесів | 12 |
| Розділ 2 Принцип роботи та методика аналізу методу моделювання | 15 |
| 2.1 Диференційні рівняння..... | 15 |
| 2.2. Принцип роботи COMSOL Multiphysics | 20 |
| 2.3 Методика роботи з COMSOL Mutiphysics | 23 |
| 2.4 Оформлення задачі експериментального зразка..... | 24 |
| Розділ 3. Експериментальна частина | 27 |
| 3.1. Одновимірна модель поширення хвилі популяції..... | 27 |
| 3.2. Двовимірна модель поширення хвилі популяції. | 31 |
| ВИСНОВКИ..... | 33 |
| СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ..... | 34 |

ВСТУП

Математичне моделювання набуває все більшого значення в багатьох областях біології протягом останніх двох десятиліть.

Особливо актуальним стає моделювання процесу міграції. Міграція людей, міграція тварин, міграція бактерій - все це було під щільним дослідженням вчених, які в свою чергу збирали всі ці дані для поліпшення умов існування. Надалі ці дослідження перейшли у розріз математичних моделей. Це було зроблено для покращення процесу аналізу впливаючих факторів, що саме і як впливає на розвиток популяції або її вимирання. З процесом міграції біологічних видів тісно пов'язаний процес міграції клітин а отже і пандемій.

Процес міграції клітин важливий для розвитку, у фізіологічна реакція на хворобу. Це була інтенсивна область експериментальних досліджень протягом багатьох десятиліть, а в останні роки вона також стала особливо актуальним явищем.

Ціль для моделювання. Перші моделі були дуже рудиментарними. Клітинна біологія стала більш якісною та надані більш детальні дані, складність цих моделей вирости відразу. Прагнення до все об'ємних моделей міграції клітин, підживлюється бажанням краще розуміти внутрішню роботу клітин, але це також частково стало результатом притоки математиків, інженерів та фізиків в області кліткової біофізики. Таким чином багато з розроблених моделей їдуть корінням в матеріали, машино будівництва, або фізики. Такі моделі роблять вдосконалені прототипи для дослідників цих областей, але для середнього біолога вони часто незрозумілі.

Спалах нового коронавірусу під назвою COVID-19 в Китаї привернув велику увагу багатьох вчених, зокрема математики, займаються математичним моделюванням. Перші документи вже були опубліковані весною 2020 р. [1-4]. В даний час спалах COVID-19 вже поширилася по світу як пандемія.

В даний час існує велика кількість математичних моделей для опису епідемічних процесів. Їх можна знайти в будь-якій книзі, присвяченій математичним моделям в біології та медицині [5-7]. Вченими була [8] створена модель на основі трьох звичайних диференціальних рівнянь (ОДУ): яка в даний час називається моделлю SIR. [9,10].

Метою: аналіз існуючих алгоритмів математичного моделювання, використаних у медицині, біології, для подальшого удосконалення та застосування до моделювань розповсюдження COVID-19 у межах України.

Дана курсова робота несе теоретичний характер, а саме аналіз вже існуючих методів та виявлення актуальності математичного моделювання для подальшого створення та або доповнення математичних моделей для аналізу COVID-19 у межах України у межах дипломної роботи.

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1 Вступ

Спостерігаючи за історією людського розвитку і векторів розвитку - міграція є важливим компонентом демографічного розвитку, аж ніяк не менше ніж смертність або народжуваність[11]. Якщо спочатку йшлося про локальні переміщення в безпосередній близькості від центру переміщень, печери або хатини в рамках необхідних для існування полювання або збирання. Потім далі під час Великого переселення народів (германські племена, угорці, болгари, тюрки та ін.) - міграція стала головною в розвитку цих народів і заселення територій. Що було причиною міграції? Перш за все, боротьба за ресурси, ресурси постійно змінювався, в умовах нерівномірного зростання людських популяцій [11]. Смертність, народжуваність і міграційні процеси в реальному житті були і є досить переплетені. У розвиток цілих країн і народів міграції займає важливе місце, крім уже є дещо для нас основоположних елементів. Навіть наш сучасний світ можна поділити на три категорії країн: держави, в історії яких міграція - дуже значний вплив на чисельність і динаміку населення, країни в яких міграція не чинила значного впливу на розвиток населення, нарешті, та країни в яких мала велике значення внутрішня колонізація [11-12].

Міграція відбувається через географічні диспропорції попиту та пропозиції робочої сили. Там, де робочої сили недостатньо, заробіток вищий. У регіонах, де багато робочої сили, заробіток нижчий або незначний. Міграція дає можливість покращити матеріальний добробут і багатство людей [11-12]. Коли люди переїжджають у регіони з більш високим рівнем доходу, потоки капіталу відбуваються в зворотному напрямку або в райони, де робоча сила дешева. Міграція здебільшого виникає з країн, які відстають у модернізації. Модернізація, як видається, надзвичайно руйнівна для деяких країн. Чим сучасніша країна, тим дешевше надходить робоча сила іммігрантів. У

модернізованих країнах суспільства швидко трансформуються. Традиційні форми зайнятості зникають [11-14].

1.2 Міграція Тварин

Міграція Тварин так само схожа на міграцію людей. Тільки на відміну від людей яких в якості рабів (посилання) вивозили з Африки в інші країни. Звірі могли мігрувати тільки по причинах пошуках кращих умов життя [15].

Стандартними причинами міграцій тварин є:

1. Нашестя. Типові для регіонів з нестабільними кліматичними умовами, а також можуть бути викликані важкою екологічною катастрофою, дефіцитом продовольства, перенасиченням особин на квадратному кілометрі.
2. Розмноження
3. Клімат, тривалість світлового дня. Різноманітність і якість їжі для різних тварин визначається кліматичними зонами, температурними умовами.
4. Періодичність. Деякі тварини мігрують в залежності від фази місяця.

Міграція - широко поширене явище серед тварин.

За останні десятиліття величезна кількість була зібрана емпіричних даних для картування міграційних маршрутів, щоб описати моделі міграції, наприклад швидкість і час, використання пунктів зупинки в дорозі, а також для характеристики індивідуальні відмінності в міграційних стратегіях. Паралельно емпіричні розробки, значна частина теорія міграції сформована. Аналітичні моделі використовуються для отримання оптимальних рішень в одній подорожі [16]. Складні моделі одиночних подорожей, засновані на динамічних програмування, може досліджувати ефекти стохастичності в умовах пошуку їжі або польоту [16] просунуті моделі вивчають розміщення міграції в річному циклі [17]. Незважаючи на ці емпіричні та теоретичні досягнення, наша здатність передбачати міграційні рухи тварин все ще обмежена. Проте, глибоке розуміння його закономірностей і процесів стає все більш актуальним. важливість, як для антропогенних інтересів, таких як

авіаційна безпека, поширення інфекційних захворювань, шкідників і інвазивних видів, а також для збереження самих мігрантів. Знищення середовища існування та зміна клімату становлять серйозну загрозу для мігруючих видів, оскільки вони призводять не тільки до втрати середовища існування, але супутнього збільшення відстані між відповідними місцями або невідповідності часу між джерелами їжі у віддалених місцях. Моделі, які досліджують причини, наслідки, детермінанти та еволюцію міграційної поведінки, можуть суттєво покращити наше розуміння руху тварин, що має принципове значення для будь-яких зусиль із збереження [17].

1.3 Поширення нервових імпульсів

Нервова система ділиться на центральну і периферичну. Центральна нервова система (ЦНС) - являє собою головний та спинний мозок. Саме звідси по всьому тілу ідуть нервові волокна, а саме периферична нервова система (ПНС). ПНС з'єднує мозок з органами відчуття, органами-м'язами та залозами. Усе живе реагує на зовнішні подразники, а також на внутрішні свого організму. [18] Наприклад до зовнішніх подразників ми відносимо (світло, звук, запах, та інші) все це обробляють спеціальні чутливі клітини, а саме (рецептори) надалі у нервові імпульси, а це вже серію фізичних та хімічних змін у нервовому волокні. Нервові імпульси передаються по чутливих нервових волокнах у спинний та головний мозок [18]. Вже там починають оброблятися наступні командні імпульси, саме які передаються по моторних нервових волокнах до м'язів та залоз. Ці виконавчі органи (м'язи та залози) називаються ефекторами [18-20].

Завдяки нервовій системі забезпечується психічна діяльність людини. Основною властивістю нервових клітин є здатність до проведення нервового імпульсу - що розповсюджується по нервовим волокнам електричної хвилі. [21].

Велика увага науковців звернена до моделювання біологічно правдоподібних нейронних мереж, в яких відбуваються процеси генерації і поширення нервових імпульсів [22].

На основі динамічних механізмів роботи нейрона складені різні математичні моделі. Серед них є відносно прості, наприклад «Integrate and Fire», в якій нейрон представляється у вигляді паралельно підключених конденсатора, що відповідає за ємнісний струм мембрани, і резистора, що імітує витік іонів через іонні канали [23]. Створені і більш складні, біологічно правдоподібні моделі, наприклад, модель Ходжкіна-Хакслі [24], яка набагато складніше в

обчислювальному плані і в плані аналізу її динаміки, але вона набагато точніше описує динаміку мембранного потенціалу нейрона.

1.4 Транспортування крові по судинах

Багато аспектів фізичного і біологічного взаємодії між тими, циркулюючими клітинами і судинної мережею залишаються важкими для вивчення і неможливими для контролю в рамках систем *in vivo* (в живих організмах), особливо щодо геометрії судин і подій прикріплення дискретних циркулюючих пухлинних клітин (ЦПК), а також через присутність безліч заважають факторів, таких як еритроцити, динамічне артеріальний тиск і імунні реакції. [25] Навіть оцінка ефектів можливих впливають механічних сил, таких як динамічний потік рідини, потребує суттєвого спрощення сценарію *in vivo*. Моделі *in silico* (комп'ютерна модель\ симуляція), призначені для моделювання динаміки судинної рідини, пропонують один з небагатьох механізмів для дослідження фізіологічного кровотоку через складну судинну геометрію, щоб краще зрозуміти його вплив на переважне націлювання на тканини під час метастазування [26].

Розробка і перевірка цих моделей важливі для перевірки відкритих гіпотез про роль структури потоку, геометрії судин, податливості клітин і податливості тканин [27].

Звичайні мікрорідкі чіпи, які імітують судинну геометрію з використанням формованих каналів, не володіють більшістю важливих характеристик, які виявляються *in vivo*, таких як трубчасті канали та податливість судин, що сильно обмежує їх здатність відтворювати розширення і скорочення судин у відповідь на зміни тиску потоку, які знаходяться в біологічних системах. Традиційні мікрофлюїдні канали виготовляються з використанням Полідиметилсілоксан (ПДМС) і скла, що зазвичай вимагає покриття білків, що сприяють адгезії, для забезпечення прикріплення ендотеліальних клітин [28].

Дуже важливо розуміти, що використання біологічного моделювання може змінити життя багатьох лікарів.

Можна так само привести в приклад сегнетоелектричні тонкі плівки Ленгмюра-Блоджетт (ЛБ).

Сегнетоелектричні тонкі плівки Ленгмюра-Блоджетт (ЛБ), засновані на сополімеру полівініліденфторид (ПВДФ) і полі (вініліденфторидтрифторетілене) (ВДФ-ТрФЕ), демонструють явище перемикання поляризації на нанорівні з локальним перемиканням сегнетоелектричної поляризації на атомно-молекулярному рівні [29-31]. В даний час ці ЛБ-полімерні плівки широко досліджуються з використанням різних технік, включаючи вивчення методами атомної силової мікроскопії (АСМ) [32,33], як нові перспективні сегнетоелектричні наноматеріали. Області широкого застосування ПВДФ і П (ВДФ-ТрФЕ) - в нанотехнологіях і мікроелектроніці, пристроях зберігання інформації і нових енергонезалежних запам'ятовуючих пристроях [34].

В даний час ці полімерні плівки ЛБ широко досліджуються з використанням різних експериментальних методів, включаючи різні обчислювальні моделі [35,36].

Це показує як важливо застосування моделювання в біоінженерії.

1.5 Математичний опис міграційних процесів

Вивчення особливостей динаміки структурованих популяцій і співтовариств, представлених системами міграційно пов'язаних популяцій (метапопуляцій або метаспілок), є завданням, що включає як чисто біологічні аспекти пошуку причин і механізмів формування неоднорідного [37,38].

Нечаєвський Андрій Васильович описав значення слова модель наступним чином: «Слово «модель» походить від латинського слова «modulus», означає «міра», «зразок». Його перше значення було пов'язане з будівельним моделями, і майже у всіх європейських мовах його використовували для вказівки на спосіб, прообразу, або речі, подібною в якомусь відношенні з іншою річчю. Модель - це матеріальний або віртуальний (уявний) об'єкт, який в процесі дослідження можна використовувати замість об'єкта-оригінал так, що його безпосереднє вивчення дасть нові знання про об'єкт-оригіналі» [39].

Моделювання ефективний і практичний інструмент для вивчення практичних питань з наближеною боку. Моделювання завжди дозволяло при мінімальних витратах описувати теоретичні наслідки і варіанти вирішення проблем. Так само завжди можна міняти початкові дані тим самим опрацьовувати безліч варіантів, або навіть міняти їх в процесі експерименту [39].

Дуже важливо виділити те що моделювання використовується для прогнозів природних явищ планети таких як зміна клімату. У 21 столітті це має високу важливість так як наша земля страждає від глобальних змін, що несуть за собою високу ймовірність зміни ритму життя в гіршу сторону [39].

Для будь-якого об'єкта в залежності від мети дослідження може бути побудовано багато варіантів моделей. Основоположні спроби опису динаміки чисельності окремих популяцій і їх спільнот відносяться до 20-го сторіччя.

Сучасна ж математична біологія зароджувалася в 20-х роках нашого століття - саме в цей час в біологію почали проникати методи математики а так же ідеї моделювання. Математична біологія - це наука про відносини рослинних і тваринних організмів і створюваних ними спільнот, організацій між собою і з навколишнім середовищем на основі вивчення відповідних математичних моделей [39].

Як було зазначено Семериковим та Завизена у своїх матеріалах на конференції: «Можна написати сотні книг в яких будуть викладатися тільки питання описані біологічними моделями, книг же з відповідями набагато менше. Перед сучасною біологією з кожним роком тільки зростає кількість питань через невичерпного центру проблем - людство.

Наприклад такі як:

- Прогнозування природних катаклізмів і місць їх породження;
- Вибір стратегій вирішення проблем викликаних природними катаклізмів, міграціями і переміщення, а так само зникненням популяцій;
- Вплив вимирання тих чи інших біологічних видів;

і так далі.» [40].

Математичні моделі можна розділити на матеріальні (фізичні) і знакові (математичні).

Фізична модель являє собою фізичний об'єкт, «Призначений» моделлю іншого об'єкта. Будь-яка фізична модель володіє конкретними властивостями фізичного (в т.ч. біологічного) об'єкта. З одного боку, фізична модель може точніше передавати характеристики модельованого об'єкта. З іншого боку, фізична модель в дослідженні може бути настільки ж складна, як і об'єкт [41,42].

Математичні моделі описують цілий клас процесів або явищ, які мають подібними властивостями або є ізоморфними. Чим складнішими є об'єкти і

процеси, якими займається наука, тим важче знайти математичні абстракції, які підходять для опису цих об'єктів і процесів [41-42].

Комп'ютерні моделі являють собою підтип математичних моделей і містять «знання» про об'єкт у вигляді математичних формул, таблиць, графіків, баз даних. Вони дозволяють вивчати поведінку системи при зміні внутрішніх характеристик і зовнішніх умов, програвати сценарії, вирішувати завдання оптимізації. Однак кожна комп'ютерна реалізація відповідає конкретним, заданим параметрам системи [41,42].

Умовно всі математичні моделі біологічних систем можна розділити на регресивні, якісні та імітаційні [43,44].

Регресійні залежності - це формули, що описують зв'язок різних характеристик системи, але не претендують на пояснення фізичного або біологічного сенсу цих залежностей. Для побудови регресійної моделі досить статистично достовірних кореляцій між змінними або параметрами системи [43,44].

Імітаційне моделювання - це напрямок, який зобов'язаний бурхливому зростанню можливостей обчислювальної техніки. Суть імітаційного моделювання полягає в дослідженні складної математичної моделі за допомогою обчислювальних експериментів і обробки результатів цих експериментів. Як правило, творці імітаційної моделі намагаються максимально використовувати всю наявну інформацію про об'єкт моделювання, як кількісну, так і якісну [43,44].

Розділ 2 Принцип роботи та методика аналізу методу моделювання

2.1 Диференціальні рівняння

Диференціальні рівняння або різницеві рівняння дозволяють чітко розказувати про динаміку процесів саме в момент розрахунку. Інколи бувають труднощі у побудові диференціальних рівнянь, ці проблеми можуть бути технічного характеру. Сама головна проблема складається в тому, що дуже складно виводити рівняння коли є сумніви у напівемпіричних закономірностях. При роботі з системами більше десятка диференціальних рівнянь виникає думка, що простежити причинні зв'язку (не допустити помилок, інтерпретацій результату) в системі рівнянь також складно, як і в реальному екосистемі, що дискредитує саму процедуру моделювання.

Зрештою, виявляється, що неможливо дізнатися, чому зобов'язані отриманими результатами: реальному стану речей, помилок у вихідних даних, недоліків алгоритму або ще чого-небудь. Зазвичай систему спрощують, розглядаючи її як точкову (синхронність процесів у всіх частинах розглянутого обсягу), поведінка якої описують рівняннями в звичайних похідних.

Для розглянутого підходу наводиться вихідна формулювання і приклади ряду одержуваних в моделі біологічно інтерпретованих результатів. У різних біологічних системах в якості змінних виступають різні вимірювані величини: в біохімії-це концентрації речовин, в мікробіології-число мікроорганізмів, в екології-чисельність виду, в фармакокінетики-концентрації лікарських препаратів. В залежності від мети моделювання, можна виділити два типи моделей: дескриптивні моделі і моделі поведінки. Дескриптивна модель дозволяє отримати інформацію про взаємозв'язки між

найбільш важливими змінними біо- або екосистеми. Реалізується такий тип моделі методами стохастичного моделювання, заснованого на інструментах теорії ймовірностей і математичної статистики. Моделі поведінки описують системи під час перехідного періоду від одного стану до іншого.

Диференціальні рівняння дозволяють описувати динаміку чисельності (біомаси) кожної популяції, що входить в досліджувану систему. У загальному вигляді можна записати залежність

Часто в математичних моделях чисельність популяції позначають через $x(t)$. В загальному вигляді модель динаміки чисельності одного біологічного виду можна записати так:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), (x = x(t)), (1)$$

де $x(t)$ – чисельність популяції в момент часу t , $f(t, x)$ – явно задана функція від часу t і чисельності $x(t)$. Часто розглядають моделі, в яких функція f явно не залежить від часу, а тільки від чисельності популяції x

$$\frac{dx}{dt} = f(x), (x = x(t)), (2)$$

Диференціальне рівняння виду (2), права частина якого не залежить явно від незалежної змінної t , а залежить тільки від шуканої функції $x(t)$, називається автономним.

Розв'язки одного автономного диференціального рівняння з плином часу або прямують в нескінченність або прямують до деякого стаціонарного стану (стаціонарної точки). В стаціонарному стані (стаціонарній точці) певної системи (наприклад, біологічної системи) значення змінних в системі не

змінюються з часом. В термінах диференціальних рівнянь це означає, що похідна шуканої функції в стаціонарному стані дорівнює нулю

$$\frac{dx}{dt} = 0, \quad (3)$$

Звідси випливає, що для стаціонарного стану значення правої частини $f(x)$ автономного рівняння також дорівнює нулю. Таким чином, корені $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n$, ($n \in \mathbb{N}$ – множина натуральних чисел) рівняння

$$f(x) = 0$$

є стаціонарними точками диференціального рівняння (2).

Отже, стаціонарним станом (стаціонарною точкою, станом спокою, станом рівноваги, особливою точкою) автономного диференціального рівняння (2) називається таке значення \bar{x} шуканої функції $x = x(t)$, при якому ця функція не змінюється в часі.

Реальна біологічна система зазнає різних змін, відхилень, флуктуацій.

Внаслідок цих відхилень стан системи може прямувати до деякого стану рівноваги (стаціонарного стану) або віддалятися від нього. Якщо внаслідок невеликих відхилень від стану рівноваги стан системи знову прямує до цього стану рівноваги, то такий стан рівноваги називається стійким станом рівноваги.

Можна дати таке означення стійкого стану рівноваги (стійкої стаціонарної точки).

Стан рівноваги (або стаціонарна точка) називається стійким станом рівноваги (стійкою стаціонарною точкою) рівняння $\frac{dx}{dt} = f(x)$, якщо для довільного $\varepsilon > 0$ існує $\delta > 0$ таке, що якщо $|x(t_0) - \bar{x}| < \delta$, то $|x(t) - \bar{x}| < \varepsilon$ при $t > t_0$.

Таким чином, для *стійкого* стану рівноваги справджується твердження: якщо в початковий момент часу t_0 відхилення розв'язку $x(t_0)$ від стану рівноваги \bar{x} є малим ($|x(t_0) - \bar{x}| < \delta$), то в кожний наступний момент часу $t > t_0$ відхилення розв'язку від цього стану рівноваги також є малим $|x(t) - \bar{x}| < \varepsilon$.

Аналітичний спосіб дослідження стійкості стаціонарних точок автономного диференціального рівняння.

В процесі створення біологічних моделей та їх обрахунку, важливу частину рівняння складає дифузія. Слід про це поговорити трохи глибше[45,46].

Дифузія це явище, коли молекули однієї речовини проникають між молекулами іншої, причому це проникнення молекул відбувається взаємно. У групі частинок, наприклад, клітин, бактерій, хімічних сполук, тварин і так далі, кожна частка зазвичай рухається випадково. Група частинок розподіляється в просторі за рахунок нерегулярного руху її окремих складових. Поняття процесу дифузії можна використовувати, коли мікроскопічне нерегулярне рух призводить до макроскопічному або об'ємному регулярному руху. Звичайно, навколишнє середовище може впливати на частки, або вони можуть взаємодіяти один з одним. В такому випадку це вже не буде простою дифузією. Описати макроскопічне поведіння, знаючи індивідуальне мікроскопічну поведінку, занадто складно, тому до прикладу буде неперервне модельне рівняння глобальної поведінки системи в термінах щільності частинок або концентрації.

Проблема математичного опису просторово-часової динаміки одного або декількох взаємодіючих популяцій має багатий досвід вивчення. Центральне місце в ній займає завдання аналізу взаємодії міграційних популяційних процесів з демографічними. Під демографічними можна розуміти процеси народжуваності і смертності. Популяційні моделі, рахують тільки їх, широко відомі і досить добре розвинені. Це точкові моделі, основним допущенням яких є припущення про "нескінченно швидкому" перемішуванні особин на даному ареалі. Таке припущення справедливо, якщо модельований ареал

досить малий у порівнянні з "довжиною вільного пробігу" особин, або з радіусом індивідуальної активності. При порушенні цієї умови в популяційних. моделях необхідно враховувати міграцію. Найпростішим і широко використовуваним в даний час становищем є гіпотеза про випадковості "блукання" особин у просторі. Це припущення дозволяє обґрунтувати використання в якості інструменту моделювання рівняння типу реакція-дифузія, де в якості реакційної частини використовуються праві частини точкових моделей, а коефіцієнти дифузії (рухливість особин) вважаються постійним. В рамках цих моделей вдається пояснити такі ефекти, як хвилі поширення чисельності популяції при заселенні ареалу, а також існування складної просторово-часової динаміки чисельності. Проте, центральна гіпотеза таких моделей про випадковий характер переміщення особин по ареалу проживання має ряд питань з боку біологів.

Спостереження за поведінкою комах показують, що міграції є невід'ємною рисою екології. Ці міграції, в свою чергу, в залежності від чисельності мають різну інтенсивність і спрямованість. Так, специфіка просторового переміщення шовкопряда в лісових масивах дозволяє виявити ряд функціональних типів міграції, що відрізняються інтенсивністю і спрямованістю потоків.

Аналогічні явища спостерігаються, наприклад, в популяціях щурів.

Для обліку подібних феноменологічних спостережень за простору-часу динамікою чисельності популяцій необхідне введення міграційних членів, залежних від чисельності. Одним із способів обліку цього є введення в рівняння типу реакція-дифузія градієнтних членів, які враховують різні таксиси[45,46].

2.2. Принцип роботи COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics - це сучасний програмний комплекс, що включає інтерактивне середовище для моделювання та розрахункові модулі, що дозволяють проводити розрахункову оцінку більшості наукових і інженерних задач, заснованих на диференціальних рівняннях в частинних похідних (PDE) методом кінцевих елементів. Застосування розрахункових модулів не вимагає глибокого знання математичної фізики та методу кінцевих елементів - цей підхід реалізований завдяки вбудованим фізичним режимам, де коефіцієнт PDE задаються у вигляді зрозумілих фізичних властивостей і умов, таких як теплоємність, коефіцієнт тепловіддачі, об'ємна потужність і т. п. в залежності від обраного фізичного розділу. Перетворення цих параметрів в коефіцієнти математичних рівнянь відбувається автоматично.

Головна ідея – правильно сформулювати задачу, тільки тоді можна досягти найбільш правильних та приблизних до реальності результатів. За допомогою програми можна обрахувати задачі для яких майже неможливо дійти розв'язку через класичне вирішення диференціальних рівнянь.

Двома основними компонентами робочого середовища COMSOL є модель Конструктор та Конструктор додатків.

Конструктор моделей - це інструмент, де ви визначаєте модель та її компоненти, наприклад, як це вирішити, аналіз результатів та створення звітів. Ви робите це до побудова модельного дерева. Дерево моделей відображає основну структуру даних, об'єкт моделі, який зберігає стан моделі, включаючи параметри геометрії, сітка, фізика, граничні умови, дослідження, пост-обробка та візуалізації.

Конструктор додатків дозволяє швидко створити програму за допомогою спеціалізованого користувальницького інтерфейсу, що простий у використанні.

Додаток, як правило, базується на модель, створена за допомогою конструктора моделей.

Конструктор додатків надає два важливі інструменти для створення додатків: редактор форм та редактор методів.

Крім того, програма може мати рядок меню або стрічку. Редактор форм включає можливості перетягування та легкого доступу для легкого доступу та включення користувацького інтерфейсу такі компоненти, як поля введення, графічні вікна та кнопки.

Метод редактор - це середовище програмування, яке наприклад, дозволяє вам змінювати модель, представлена структурою даних об'єкта моделі. Ви також можете використовувати редактор методів для додавання логіки користувацького інтерфейсу та допоміжних функцій до застосування. Мова програмування Java, саме вона використовується для написання коду в Методі редактор - це означає, що можна використовувати всі синтаксис Java та бібліотеки Java.

У редакторі методів програмний код зберігається в методах.

Метод - це інша назва того, що в інших мовах програмування відомо як підпрограма, функція або процедура. Методи можуть бути використані для модифікації даних об'єкта моделі, структури у конструкторі моделей та конструкторі додатків.

Взаємодія з програмою можна реалізувати в стандартному для середовища MS Windows графічному інтерфейсі, крім того, комплекс пропонує можливість створення додаткових функцій, що відповідають вимогам користувача з використанням вбудованої мови скриптів - COMSOL Script. Для вирішення PDE COMSOL Multiphysics використовує метод кінцевих елементів (FEM).

Розрахункові модулі дозволяють застосовувати гнучкий підхід до конфігурації, типу і характеристикам кінцевого елемента, враховуючи

геометричну конфігурацію тіл. Так як багато фізичні закони виражаються в формі PDE, стає можливим моделювати широкий спектр наукових і інженерних явищ з багатьох областей фізики, таких як акустика, гідро- і термодинаміка, складні дифузії, електричні і електромагнітні явища, оптичні ефекти і багатьох інших.

2.3 Методика роботи з COMSOL Mutiphysics

Розглянемо основні особливості роботи з COMSOL Mutiphysics, необхідно

1. Вибрати тип створюваної моделі.
2. Визначити робочу область і задати геометрію моделі.
3. Вказати граничні умови моделі.
4. Прийняти теплофізичні властивості і початкові умови.
5. Поставити параметри сітки елементів і її побудова.
6. Визначити параметри вирішального пристрою і запустити розрахунок.
7. Налаштувати режим відображення результату розрахунків.
8. Провести аналіз отриманих результатів.

2.4 Оформлення задачі експериментального зразка

Для постановки задачі була взята як модель процес поширення температурних хвиль у плазмовому середовищі або популяційної хвилі деякого біологічного виду описується такою найпростішою моделлю [45, 46]

$$T_t = a(T^\sigma T_x)_x, \quad x > 0, \quad t > 0 \quad (4)$$

$$\text{при } t = 0: T(x, 0) = 0, \quad (5)$$

$$\text{при } x = 0: T(0, t) = T_0 t^n, \quad t > 0. \quad (6)$$

Тут $T(x, t)$ – температура, a, n, σ, T_0 – сталі додатні величини.

Розв'язок задачі (4) – (6) шукаємо у вигляді рухомої хвилі

$$T(x, t) = \Phi(vt - x) = \Phi(\eta), \quad (7)$$

де

$$\eta = vt - x, \quad (8)$$

v – швидкість руху температурного фронту.

Отже, у виразі для функції $T(x, t) = \Phi(vt - x)$ часова t і просторова x координати взаємозв'язані між собою. Тоді для того, щоб знайти шукану функцію $\Phi(vt - x)$, підставимо її в рівняння (4). А для цього потрібно обчислити похідні T_t і $(T^\sigma T_x)_x$:

$$T_t = \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\eta) = \frac{d}{d\eta} \Phi(\eta) \cdot \frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{d}{d\eta} \Phi(\eta) \cdot v = v\Phi'(\eta), \quad \frac{\partial \eta}{\partial t} = v, \quad \frac{\partial \eta}{\partial x} = -1; \quad (9)$$

$$T_x = \frac{\partial}{\partial x} \Phi(\eta) = \frac{d}{d\eta} \Phi(\eta) \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{d}{d\eta} \Phi(\eta) \cdot (-1) = -\Phi'(\eta);$$

$$(T^\sigma T_x)_x = \frac{\partial}{\partial x} (\Phi^\sigma \Phi'_x) = \frac{d}{d\eta} (\Phi^\sigma \cdot (-\Phi')) \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{d}{d\eta} (\Phi^\sigma \cdot (-\Phi')) \cdot (-1) = (\Phi^\sigma \cdot \Phi')'. \quad (10)$$

Після підстановки виразів (9) і (10) в рівняння (4) отримаємо звичайне нелінійне диференціальне рівняння другого порядку відносно шуканої функції $\Phi(\eta)$:

$$v\Phi' = (a\Phi^\sigma \Phi')'. \quad (11)$$

Множимо обидві частини рівняння (11) на $d\eta$ та інтегруємо:

$$\int v\Phi' d\eta = \int (a\Phi^\sigma \Phi')' d\eta. \quad (12)$$

В результаті отримаємо рівняння першого порядку

$$v\Phi + c_1 = a\Phi^\sigma \Phi'. \quad (13)$$

Тут c_1 – стала інтегрування.

При $t = 0, x = 0$ маємо із (5), (6):

$$T(0,0) = \Phi(0) = 0.$$

Тому із (13) отримаємо $c_1 = 0$ і диференціальне рівняння 1-го порядку відносно $\Phi(y)$:

$$v\Phi = a\Phi^\sigma \Phi' \quad \text{або} \quad \Phi^{\sigma-1} \Phi' = \frac{v}{a}$$

$$\Phi^{\sigma-1} \frac{d\Phi}{d\eta} = \frac{v}{a},$$

або

$$\Phi^{\sigma-1} d\Phi = \frac{v}{a} d\eta. \quad (14)$$

Інтегруємо (14):

$$\int \Phi^{\sigma-1} d\Phi = \frac{v}{a} \int d\eta \Rightarrow \frac{\Phi^\sigma}{\sigma} = \frac{v}{a} \eta + c_2.$$

Звідси:

$$\Phi^\sigma = \frac{v\sigma}{a} \eta + \sigma c_2. \quad (15)$$

$$\Phi^\sigma = \frac{v\sigma}{a} \eta, \quad \Phi = \left(\frac{v\sigma}{a} \eta \right)^{\frac{1}{\sigma}}$$

Використовуючи при $t = 0, x = 0$ умову $T(0,0) = \Phi(0) = 0$, із (15) отримаємо $c_2 = 0$ і вираз для розв'язку $\Phi(\eta)$:

$$\Phi(\eta) = \left(\frac{v\sigma}{a} \eta \right)^{\frac{1}{\sigma}} = \left(\frac{v\sigma}{a} \right)^{\frac{1}{\sigma}} (vt - x)^{\frac{1}{\sigma}} = \left(\frac{v^2\sigma}{a} \right)^{\frac{1}{\sigma}} (t - x/v)^{\frac{1}{\sigma}}$$

або

$$T(x, t) = \left(\frac{v^2\sigma}{a} \right)^{\frac{1}{\sigma}} \left(t - \frac{x}{v} \right)^{\frac{1}{\sigma}}. \quad (16)$$

Використавши граничну умову (6), отримаємо такий вираз для розв'язку $T(x, t)$:

$$T(x, t) = \begin{cases} T_0 \left(t - \frac{x}{v} \right)^{\frac{1}{\sigma}}, & x \leq vt, \\ 0, & x > vt. \end{cases} \quad (17)$$

Тут

$$T_0 = \left(\frac{v^2\sigma}{a} \right)^{\frac{1}{\sigma}}, \quad \sigma = \frac{1}{n}. \quad (18)$$

З (18) випливає, що якщо в умовах задачі задані величини a , σ і T_0 , то $n = \frac{1}{\sigma}$, а швидкість хвилі можна визначити з першого виразу (18) через ці задані величини.

Розділ 3. Експериментальна частина

3.1. Одновимірна модель поширення хвилі популяції.

Модель поширення теплових хвиль (4) – (6) у плазмовому середовищі [45]

$$T_t = a(T^\sigma T_x)_x, \quad x > 0, \quad t > 0 \quad (4)$$

$$\text{при } t = 0: T(x,0) = 0, \quad (5)$$

$$\text{при } x = 0: T(0,t) = T_0 t^n, \quad t > 0. \quad (6)$$

також можна розглядати як модель поширення популяційних хвиль [46]. Тому саме його було спочатку обрано, на першому кроці, для моделювання популяційних хвиль.

Нелінійна задача теплопровідності (4) – (6) має аналітичний розв’язок [45]:

$$T(x,t) = \begin{cases} T_0 \left(t - \frac{x}{v} \right)^{\frac{1}{\sigma}}, & x \leq vt, \\ 0, & x > vt. \end{cases} \quad (17)$$

де

$$T_0 = \left(\frac{v^2 \sigma}{a} \right)^{\frac{1}{\sigma}}, \quad \sigma = \frac{1}{n}. \quad (18)$$

З (18) випливає, що якщо в умовах задачі задані величини a , σ і T_0 , то $n = \frac{1}{\sigma}$, а швидкість хвилі можна визначити з першого виразу (18) через ці задані величини. Тобто між параметрами a , σ , v , n і T_0 для аналітичного розв’язку (17) існує зв’язок (18).

З метою відпрацювання розв’язання нелінійних задач поширення хвиль популяцій задачу (4) – (6) було розв’язано чисельно з використанням програмного комплексу COMSOL. Обчислення було виконано для значень параметрів, наведених в таблиці, де L – довжина посторової області зміни

координати x , ширину області вибрано рівною $0,1 L$. На рис. 3.1 наведено графіки теплової хвилі в моменти часу t від $t=0,1$ до $t=2,1$. Видно, що на межі фронту хвилі числовий розв'язок має незначні коливання. Похибка, з якою отримано числовий розв'язок, знаходиться в межах 1 % (рис. 3.1).

Таблиця. Значення параметрів для числового розв'язання задачі (4) – (6)

| Параметри | Значення для графіка 1 | Значення для графіка 2 |
|-----------|------------------------|------------------------|
| n | 0,5 | 10 |
| σ | 1/n | 1/n |
| a | 1 | 1 |
| v | 1 | 1 |
| L | 10 | 10 |

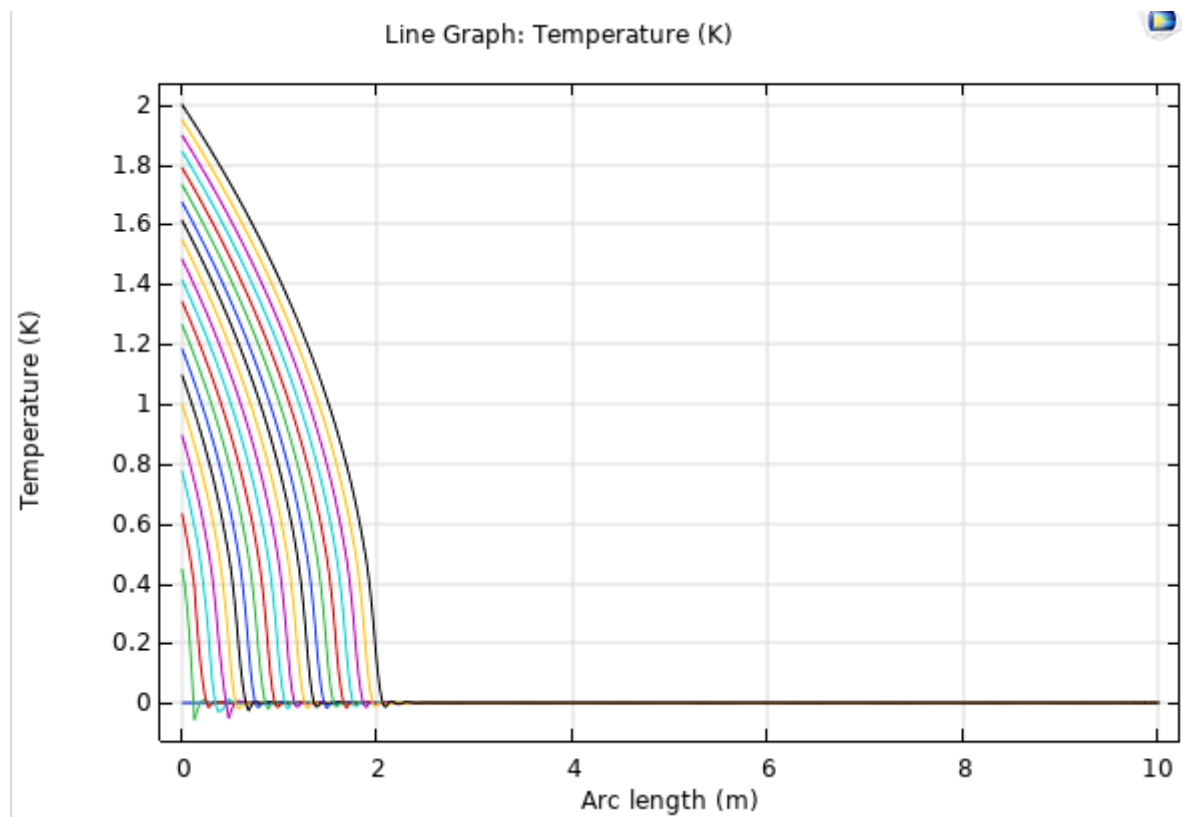


Рис. 3.1.

На рис. 3.2 наведено розподіл температури (густоти популяції) в момент часу $t=5$. З цих рисунків видно, що до моменту, коли теплова хвиля ще не дійшла до протилежної сторони просторової області $x=L$, числовий розв'язок практично співпадає з аналітичним.

На рис. 3.3 наведено розв'язок задачі (4) – (6) при $\sigma = 0,1$: видно, що порівняно з попереднім випадком, генерація тепла в точці $x=0$ відбувається менш інтенсивно і хвиля поширюється також набагато повільніше

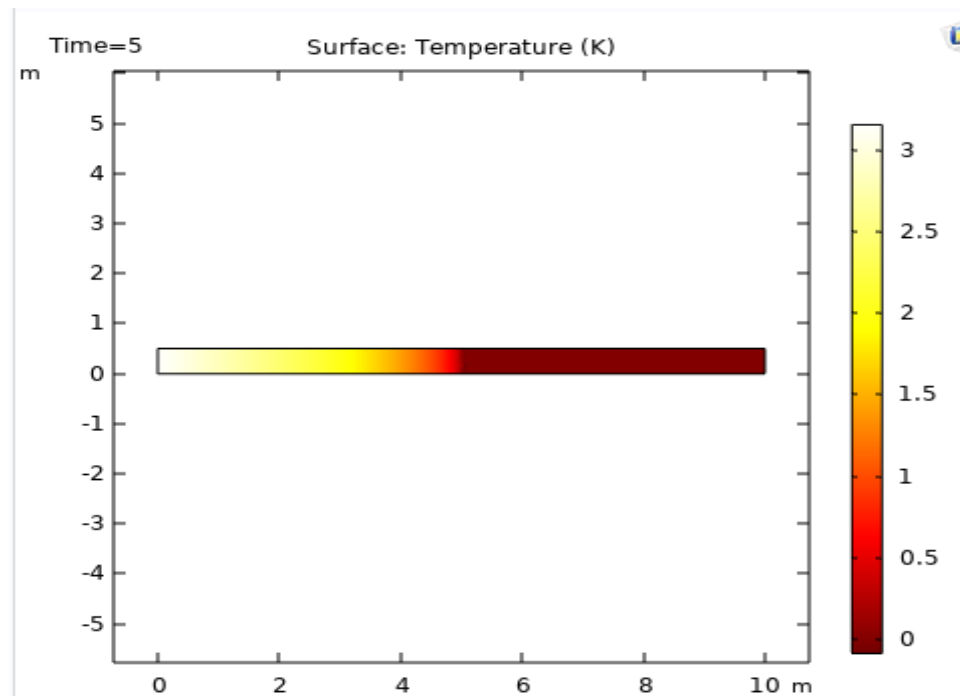


Рис. 3.2.

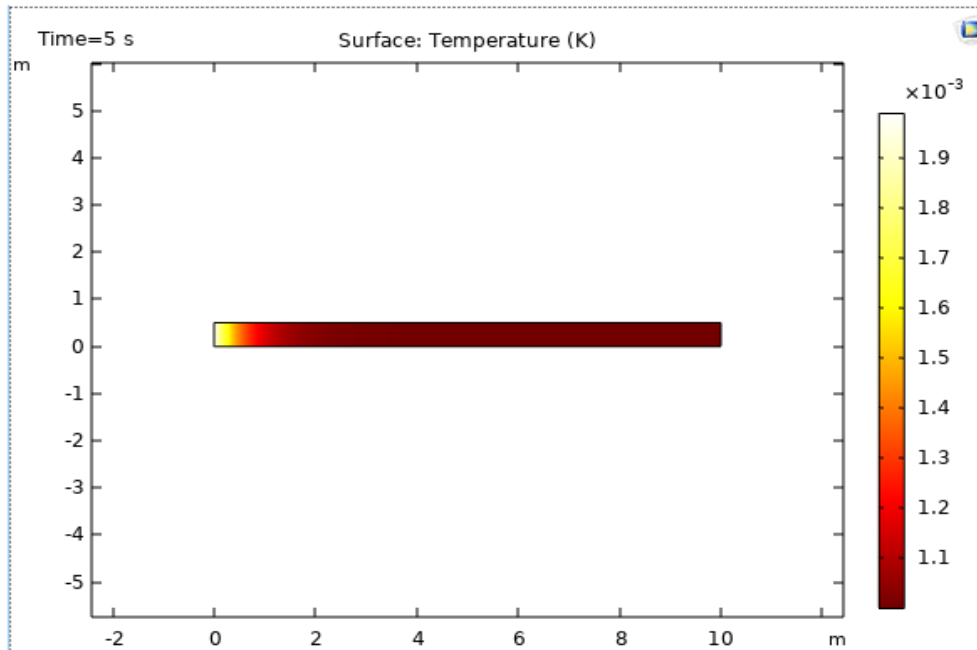


Рис. 3.3. Розв'язок задачі (4) – (6) при $\sigma = 0.1$.

3.2. Двовимірна модель поширення хвилі популяції.

На другому кроці була розглянута просторово двовимірна модель поширення популяції в квадратній області (рис. 3.4).

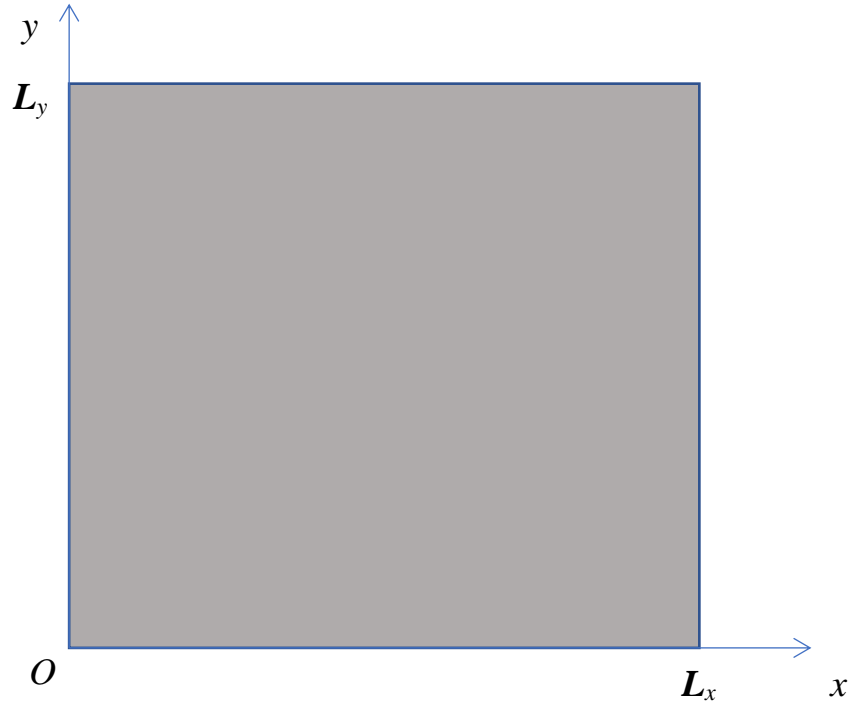


Рис. 3.4. Розрахункова просторова область.

Поширення популяції всередині області описується рівнянням

$$c(T)\rho \frac{\partial T}{\partial t} = a \left[\frac{\partial T}{\partial x} \left(T^\sigma \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial T}{\partial y} \left(T^\sigma \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right], \quad (19)$$

$$0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad t > 0.$$

В початковий момент в області нема популяції:

$$\text{при } t = 0 : T(x,0) = 0. \quad (20)$$

Джерело розмноження популяції задано на стороні $x = 0$:

$$\text{при } x = 0, \quad 0 < y < L_y : T(0,t) = T_0 t^n, \quad t > 0, \quad (21)$$

а на стороні $y = L_y$ існують умови, не придатні для існування популяції:

$$\text{при } y = L_x, \quad 0 < x < L_x : T = 0, \quad t > 0. \quad (22)$$

Межі $y = 0$ та $x = L_x$ закриті для міграції популяції:

$$\text{при } x = L_x, 0 < y < L_y : \frac{\partial T}{\partial x} = 0, t > 0, \quad (23)$$

$$\text{при } y = 0, 0 < x < L_x : \frac{\partial T}{\partial y} = 0, t > 0. \quad (24)$$

Чисельний розв'язок задачі (19) – (24), отриманий при тих самих параметрах, що і на кроці 1, наведено на рис. 3.5. Видно, що, як і в одновимірному випадку, в двовимірному випадку для цієї моделі також є характерним наявність поширення хвилі популяції: поширення відбувається від зони області з більшою густиною популяції (окіл точки (0; 0)) в зону з найменшою густиною популяції – окіл точки ($L_x; L_y$). Побудована модель (19) – (24) та її аналоги можуть бути використані для моделювання біологічного руху: поширення хвиль популяцій, епідемій і т.п.

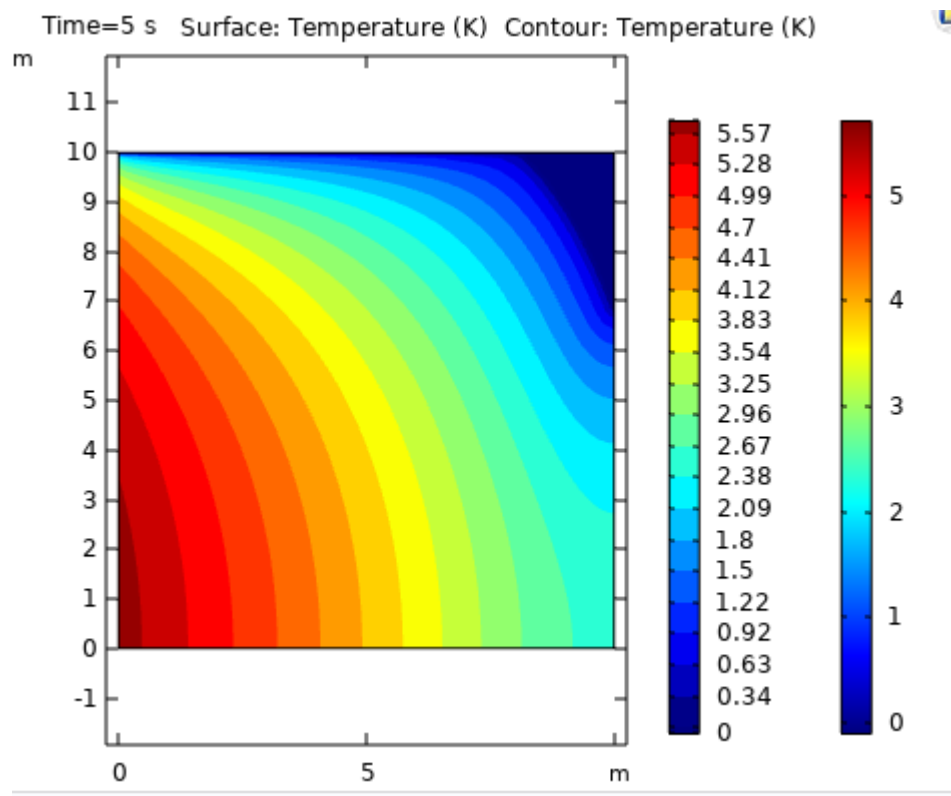


Рис. 3.5.

ВИСНОВКИ

Проведений аналізу матеріалу та побудована модель поширення хвилі популяції.

Досліджено вплив параметрів моделі на характер поширення хвилі популяції.

Побудована модель може бути використана для моделювання біологічного руху: поширення хвиль популяцій, епідемій і т.п.

В випадку міграцій можна було би вирішити багато екологічних практичних задач. Навіть зараз ситуація з COVID-19 викликає інтерес для наступних дослідів. Для отримання повної картини ми застосовуємо комп'ютерні 3D-моделі, які дозволяють виконати моделювання окремих хвиль тощо, це забезпечить можливість побачити розподіл хвилі на будь-якому етапі. Крім цього робота з комп'ютерними моделями дозволяє значно заощадити час на розрахунок конструкцій, а також розширює можливості експериментувати з матеріалами і умовами їх роботи. Саме тому це буде наступним кроком у дипломній роботі.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Luo, X.; Feng, S.; Yang, J.; Peng, X.L.; Cao, X.; Zhang, J.; Yao, M.; Zhu, H.; Li, M.Y.; Wang, H.; et al. Analysis of potential risk of COVID-19 infections in China based on a pairwise epidemic model. *Math. Comput. Sci.* 2020.
2. Peng, L.; Yang, W.; Zhang, D.; Zhuge, C.; Hong, L. Epidemic analysis of COVID-19 in China by dynamical modeling. *arXiv* 2020.
3. Shao, N.; Zhong, M.; Yan, Y.; Pan, H.; Cheng, J.; Chen, W. Dynamic models for Coronavirus Disease 2019.
4. Tian, J.; Wu, J.; Bao, Y.; Weng, X.; Shi, L.; Liu, B.; Yu, X.; Qi, L.; Liu, Z. Modeling analysis of COVID-19 based on morbidity data in Anhui, China. *MBE* 2020
5. Brauer, F.; Castillo-Chavez, C. *Mathematical Models in Population Biology and Epidemiology*; Springer: New York, NY, USA, 2012.
6. Keeling, M.J.; Rohani, P. *Modeling Infectious Diseases in Humans and Animals*; Princeton University Press: Princeton, NJ, USA, 2008.
7. Murray, J.D. *Mathematical Biology*; Springer: Berlin, Germany, 1989.
8. Kermack, W.O.; McKendrick, A.G. A contribution to the mathematical theory of epidemics. *Proc. Roy. Soc. A* 1927
9. Anderson, R.M.; May, R.M. Directly transmitted infectious diseases: Control by vaccination. *Science* 1982.
10. Dietz, K. *The Incidence of Infectious Diseases under the Influence of Seasonal Fluctuations*; *Lecture Notes in Biomathematics* 11; Springer: Berlin, Germany, 1976.
11. Прибыткова И. М. *Основи демографії. Підручник для студентів вищих навчальних закладів* / Ирина Михайловна Прибыткова., 1995.
12. Прибыткова И. М. *Социология: теория, методы, маркетинг* / Ирина Михайловна Прибыткова., 1999.

13. Hille B. Ionic channels of excitable membranes., 1992.
14. Imoto K. Ion channels: molecular basis of ion selectivity., 1993.
15. Фатеев К. Я. Миграции зверей / Константин Яковлевич Фатеев., 1969.
16. Gwinner E. Optimal Bird Migration: The Relative Importance of Time, Energy, and Safety / Eberhard Gwinner., 1982.
17. The consequences of climate-driven stop-over sites changes on migration schedules and fitness of Arctic geese [Электронный ресурс]. – 2008. – Режим доступа до ресурсу: <https://doi.org/10.1111/j.1365-2656.2008.01381.x>.
18. Асаенко И. С. Анатомия и физиология ЦНС / И. С. Асаенко, Д. А. Пархоменко, А. В. Копыток., 2011
19. FitzHugh R. Impulses and physiological states in theoretical model of nerve membrane. Biophys. J., 1961
20. FitzHugh R. Mathematical models of excitation and propagation in nerve. In: Schwan H.P. (Ed.) Biological Engineering, 1969
21. The mechanism of generation of nerve impulse and its features of propagation along the nerve fiber cells in living systems [Электронный ресурс]. – 2018. – Режим доступа до ресурсу: DOI: 10.15406/jabb.2018.05.00147
22. Чижов А.В, Турбин А.А. От моделей единичных нейронов к моделям популяций нейронов. Нейроинформатика. 2006
23. Jolivet R., Lewis T.J., Gerstner W. Generalized integrate-and-fire models of neuronal activity approximate spike trains of a detailed model to a high degree of accuracy. Journal of Neurophysiology. 2004.
24. Hodgkin A.L., Huxley A.F. A quantitative description of ion currents and its applications to conduction and excitation in nerve membranes. Journal of Neurophysiology. 1952.
25. Examining metastatic behavior within 3D bioprinted vasculature for the validation of a 3D computational flow model [Электронный ресурс]. – 2020. – Режим доступа до ресурсу: DOI: 10.1126/sciadv.abb3308.

26. M. Mitchell, M. King, Computational and experimental models of cancer cell response to fluid shear stress. *Front. Oncol.*, 2013.
27. Thomas, S. Wang, S. Sohrabi, C. Orr, R. He, W. Shi, Y. Liu, Characterization of vascular permeability using a biomimetic microfluidic blood vessel model., 2017.
28. K. Y. Chumbimuni-Torres, R. E. Coronado, A. M. Mfuh, C. Castro-Guerrero, M. F. Silva, G. R. Negrete, R. Bizios, C. D. Garcia, Adsorption of proteins to thin-films of PDMS and its effect on the adhesion of human endothelial cells. *RSC.*, 2011.
29. Tadros-Morgane R. and Kliem H. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2006.
30. Gruverman A. and Kholkin A. *Rep. Prog. Phys.* 2006.
31. Tolstousov A., Gaynutdinov R., Tadros-Morgane R., Judin S., Tolstikhina A., Kliem H., Ducharme S. and Fridkin V. *Ferroelectrics*. 2007.
32. Bystrov V.S., Bdikin I.K., Kiselev D.A., Yudin S.G., Fridkin V.M. and Kholkin A.L. *J. Phys.* 2007.
33. Kang S.J., Bae I., Shin Y.J., Park Y.J., Huh J., Park S.-M., Kim H.-C. and Park C. *NANO Letters*. 2011.
34. Bystrov V., Bystrova N., Kiselev D., Paramonova E., Kuehn M., Kliem H. and Kholkin A. *Integrated Ferroelectrics*. 2008.
35. Elashmawi I.S., Abdelrazek E.M., Ragab H.M. and Hakeem N.A. *Physica B*. 2010.
36. Mandal D., Henkel K., Muller K. and Schmeiber D. *Bull. Mater. Sci.* 2010.
37. Скоринкин А. И. Математическое моделирование биологических процессов / А. И. Скоринкин., 2015.
38. Г. М. Зуев, Е. Л. Сороко, Математическое описание миграционных процессов., 1978.
39. Нечаевский А. В. ИСТОРИЯ РАЗВИТИЯ КОМПЬЮТЕРНОГО ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ / Андрей Васильевич Нечаевский. // Системный анализ в науке и образовании. – 2013. – №2. – С. 2.

40. Семери́ков С. А. Математические модели в экологии / С. А. Семери́ков, Н. С. Завизена. // материалы Всеукраїнської конференції. – 1997. – №1.
41. Lawson D. An Introduction to Mathematical Modelling [Электронный ресурс] / D. Lawson, G. Marion. – 2008. – Режим доступа до ресурсу: https://people.maths.bris.ac.uk/~madjl/course_text.pdf.
42. Multi-Scale Modeling in Materials Science and Engineering [Электронный ресурс] // Dierk Raabe, Matthias Scheffler, Kurt Kremer, Walter Thiel, Jörg Neugebauer, Martin Jansen. – 2010. – Режим доступа до ресурсу: https://www.mpg.de/36458/cpt01_MultiscaleModeling-basetext.pdf.
43. Golberg M. A. Introduction to Regression Analysis / M. A. Golberg, H. A. Cho., 2010.
44. FOUNDATIONS OF SIMULATION MODELING [Электронный ресурс] // WAI KIN VICTOR CHAN. – 2011. – Режим доступа до ресурсу: DOI: 10.1002/9780470400531.eorms0336.
45. Самарский А.А., Галактионов В.А, Курдюмов С.П, Михайлов А.С. Режимы с обострением в задачах для квазилинейных параболических уравнений - М.; Наука, 1987, 467 с.
46. Белотелов Н.В. Лобанов А.И. Популяционные модели с нелинейной диффузией. – Математическое моделирование. – 1997. – Т. 9, № 12. – С. 43 – 56.