

TARTU ÜLIKOOL

MATEMAATIKA-INFORMAATIKATEADUSKOND

Matemaatika instituut

Matemaatika eriala

Marite Rammo

**Keemiliste reaktsioonide, südametöö ja häiritud liikumise
modelleerimine programmiga Stella**

Bakalaureusetöö (9 EAP)

Juhendaja: dots. Ella Puman

Tartu 2015

Keemiliste reaktsioonide, südametöö ja häiritud liikumise modelleerimine programmiga Stella

Bakalaureusetöö

Marite Rammo

Lühikokkuvõte. Käesolevas bakalaureusetöös käsitletakse keemiliste reaktsioonide, südametöö ja häiritud liikumise mudeleid koos ülesannete püstituste ja lahendustega modelleerimisprogrammi Stella abil. Esitatud on mudelitele vastavad põhivõrrandid, mudelite skeemid, tulemuste graafikud ja mudelite koodid. Keemiliste reaktsioonide modelleerimise põhimõtted on samad. Erinevad faktorid mõjutavad südame pumbatavat verekogust, kiirust ning vererõhku. Häirituse määra suurendades kasvab sihtpunktini jõudmise teekond.

Märksõnad. Keemiline reaktsioon, pöördreaktsioon, Brüsselaator, häiritud liikumine, katalüüsitud mudel, südametöö, Stella, matemaatiline modelleerimine.

Models of chemical reactions, heartbeat and disturbed movement with program Stella

Bachelor's thesis

Marite Rammo

Abstract. The subject of this Bachelor's thesis is models of chemical reactions, heartbeat and disturbed movement with tasks and solutions with program Stella. Presented are basic equations, diagrams, schemes and codes of models. The principles of modelling chemical reactions are the same. Different factors affect the amount of pumped blood from the heart, velocity and blood pressure. Increasing the rate of disturbed movement will increase the route length to destination.

Keywords. Chemical reaction, reversible reaction, Brusselator, catalyzed model, heartbeat, Stella, mathematical modelling.

Sisukord

Sissejuhatus	4
1. Keemiliste reaktsioonide mudelid.....	5
1.1. Üldised keemilised reaktsioonid.....	5
1.1.1. Ühesuunaline keemiline reaktsioon	6
1.1.2. Kahe produktiga keemiline reaktsioon.....	9
1.1.3. Pöördreaktsioon.....	13
1.2. Brüsselaator	17
1.3. Katalüüsitud produkti mudel	21
2. Südametöö mudel.....	28
2.1. Südame ehitus ja töötamise põhimõtted	28
2.2. Südametöö mudel	28
3. Häiritud liikumise mudel	36
3.1. Häiritud liikumise põhimudel.....	36
3.2. Häiritud liikumise mudeli arendus ühtlaselt liikuvale objektile järele jõudmiseks ...	41
Kokkuvõte	48
Kasutatud kirjandus.....	49
Lisad	50
Lisa 1. Ühesuunalise reaktsiooni programmikood Stellas.....	50
Lisa 2. Kahe produktiga keemilise reaktsiooni mudeli programmikood Stellas	50
Lisa 3. Pöördreaktsiooni programmikood Stellas.....	51
Lisa 4. Brüsselaatori programmikood Stellas.....	51
Lisa 5. Katalüüsitud produkti mudeli programmikood Stellas.....	52
Lisa 6. Südametöö mudeli programmikood Stellas.....	53
Lisa 7. Häiritud liikumise programmikood Stellas.....	54
Lisa 8. Ühtlaselt liikuvale objektile järele jõudmise mudeli programmikood Stellas.....	54

Sissejuhatus

Käesoleva töö eesmärk on tutvustada keemiliste reaktsioonide, südametöö ja häiritud liikumise mudeleid koos ülesannete püstituste ja lahendustega modelleerimisprogrammi Stella abil. Esitatud on mudelitele vastavad põhivõrrandid, mudelite skeemid, tulemuste graafikud ja lisatud on ka mudelite koodid.

Esimeses peatükis vaatleme erinevaid keemilisi reaktsioone ja võimalusi nende modelleerimiseks. Esimesena on toodud vajalikud põhiteadmised reaktsioonide kiiruste määramise kohta. Alustame kõige lihtsamast ühesuunalisest keemilise reaktsiooni mudelist ning läheme edasi keerulisematega.

Teises peatükis koostame mudeli inimese südame töö uurimiseks. Peatüki esimeses osas kirjeldame lühidalt südame ehitust ja südame töötamise põhimõtteid. Teises osas modelleerime südametöö mudeli lihtsustatud kujul ning uurime erinevate muutujate mõju südamele ja vererõhule.

Kolmandas peatükis vaatleme diskreetse ajaga mudelit, milleks on häiritud liikumise mudel, arendame seda edasi aeglaselt liikuva objektile järele jõudmise mudeliks ning uurime tulemusi erineva häirituse määra korral.

Südametöö mudel ja osa keemiliste reaktsioonide mudelitest põhinevad raamatul „Modeling Dynamic Biological Systems“ [1] ning häiritud liikumise mudel raamatul „Dynamic Modeling“ [2]. Mudelid on tõlgitud eesti keelde, läbi töötatud ja edasi arendatud.

1. Keemiliste reaktsioonide mudelid

Selles peatükis vaatleme keemilisi reaktsioone ja nende modelleerimist programmiga Stella. Alustame kõige lihtsama ühesuunalise reaktsiooniga, siis vaatame kahe produktiga reaktsiooni ning pöördreaktsiooni. Seejärel uurime Brüsselaatorit ja lõpetuseks katalüüsitud produkti mudelit.

Mõisted alapeatükis 1.1 põhinevad raamatul „Keemia alused: teekond teadmiste juurde“ [3] ja alapeatükis 1.2 raamatul „Kaoseraamat“ [4]. Üldiste keemiliste reaktsioonide mudelid põhinevad õppematerjalil [5], mille põhjal on koostatud ühesuunalise ja pöördreaktsiooni mudelid. Ühesuunalise reaktsiooni mudelist on iseseisvalt edasi arendatud kahe produktiga reaktsiooni mudel. Ühesuunalise, kahe produktiga ja pöördreaktsiooni juures on diferentsiaalvõrrandid lahendatud läbi ka analüütiliselt. Kõigi diferentsiaalvõrrandite süsteemide lahendamisel on kasutatud õpikut „Harilikud diferentsiaalvõrrandid“ [6].

Brüsselaatori ja katalüüsitud produkti mudel põhinevad raamatul „Modeling Dynamic Biological Systems“ [1].

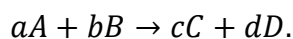
1.1. Üldised keemilised reaktsioonid

Keemiliste reaktsioonide algmaterjali nimetatakse lähteaineteks (ka reagentideks) ja tekkivaid aineid saadusteks (ka produktideks).

Keemias määratakse reaktsiooni kiirus selle kaudu, kui kiiresti kasutatakse ära lähteained või tekivad produktid. See tähendab, et vaatleme reaktsiooni kiirust kui ühe reagenti või produkti kontsentratsiooni muutust ajas.

Keemilises kineetikas näidatakse, kuidas leitakse reaktsioonikiirused keemiliste võrrandite kaudu. Selleks lähtume massitoimeseadusest, mis ütleb, et keemilise reaktsiooni kiirus on võrdeline lähteainete kontsentratsioonide korrutisega. Üleüldine valem reaktsioonikiiruste leidmiseks on järgmine (tegu on keemilise kineetika põhipostulaadiga, mis tuleneb massitoimeseadusest).

Olgu antud reaktsioon



Siis selle reaktsiooni kiirus avaldub järgmiselt:

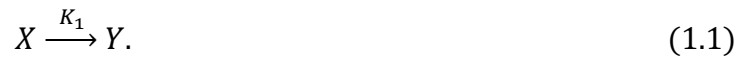
$$v = K[A]^a[B]^b,$$

kus K on reaktsiooni kiiruskonstant.

Keemilises kineetikas tähistavad nurksulud molaarset kontsentratsiooni mol/l .

1.1.1. Ühesuunaline keemiline reaktsioon

Vaatame kõigepealt lihtsat ühesuunalist keemilist reaktsiooni, kus reagentid (s.o lähteaine) X saab produkt Y . Olgu kiiruskonstant K_1 . Reaktsiooni skeem on järgmine:



Paneme kirja reaktsioonile (1.1) vastavad kiirused:

$$\frac{d[X]}{dt} = -K_1[X], \quad (1.2)$$

$$\frac{d[Y]}{dt} = K_1[X]. \quad (1.3)$$

Positiivne suurus näitab, et aine on reaktsiooni produkt, negatiivset suurust kasutatakse, kui aine on reaktsiooni reagent [3].

Lahendame võrrandisüsteemi. Tähistame aine X kontsentratsiooni $[X]$ ajahetkel t muutujaga x ja aine Y kontsentratsiooni $[Y]$ ajahetkel t muutujaga y . Kõigepealt lahendame võrrandi (1.2), eraldame muutujad:

$$\frac{dx}{dt} = -K_1x, \quad \Big| : x$$

$$\frac{1}{x} \frac{dx}{dt} = -K_1, \quad \Big| \cdot dt$$

$$\frac{dx}{x} = -K_1 dt.$$

Nüüd on tegu eraldatud muutujatega võrrandiga. Integreerides saame:

$$\ln|x| = -K_1 t + C_1,$$

järelikult

$$x = e^{-K_1 t + C_1}.$$

Leiame C_1 väärtuse, kuna alghetkel $x(0) = 1$, siis

$$1 = e^{-K_1 \cdot 0 + C_1} = e^{C_1}.$$

Siit saame, et

$$C_1 = 0.$$

Seega

$$x = e^{-K_1 t}. \quad (1.4)$$

Nüüd lahendame diferentsiaalvõrrandi (1.3)

$$\frac{dy}{dt} = K_1 x.$$

Asendame x väärtuse võrrandist (1.4), saame

$$\frac{dy}{dt} = K_1 e^{-K_1 t}, \quad | \cdot dt$$

$$dy = K_1 e^{-K_1 t} dt.$$

Muutujad on eraldatud, integreerime:

$$y = -\frac{K_1 e^{-K_1 t}}{K_1} + C_2.$$

Saame taandada kiiruskonstandi K_1 :

$$y = -e^{-K_1 t} + C_2.$$

Leiame C_2 väärtuse algtingimusel $y(0) = 0$:

$$0 = -e^{-K_1 \cdot 0} + C_2 = -1 + C_2.$$

Siit

$$C_2 = 1,$$

seega

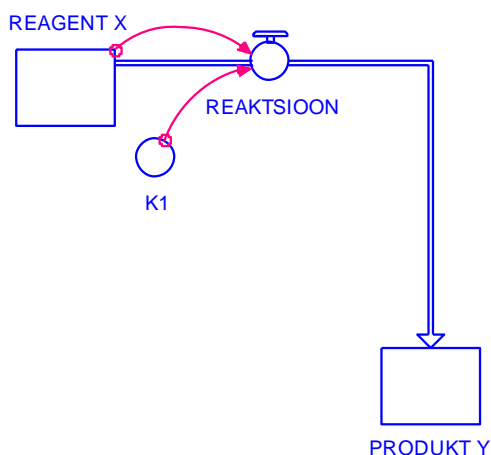
$$y = -e^{-K_1 t} + 1.$$

Oleme saanud diferentsiaalvõrrandite (1.1) ja (1.2) lahenditeks:

$$x = e^{-K_1 t}, \quad (1.5)$$

$$y = -e^{-K_1 t} + 1. \quad (1.6)$$

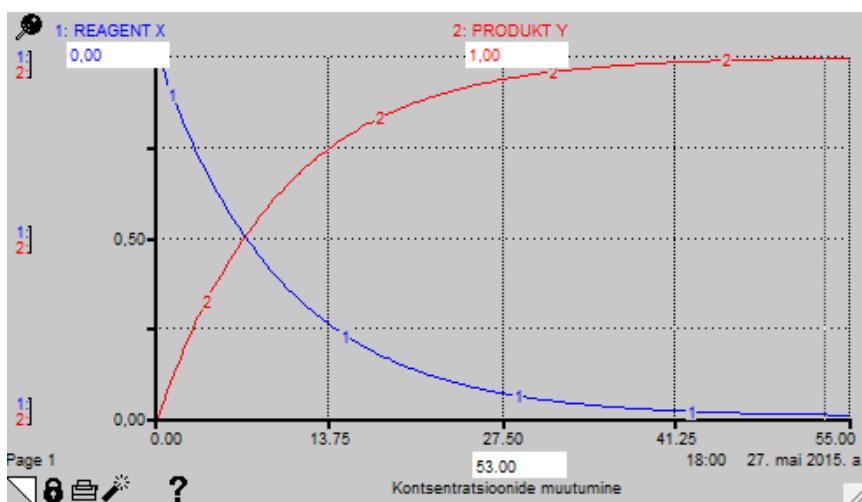
Koostame reaktsioonile vastava mudeli, mudeli skeem on toodud joonisel 1.1 ja programmikood lisas 1.



Joonis 1.1. Ühesuunalise keemilise reaktsiooni mudel

Reagendi algväärtus on $X(0) = 1$ ja produkti algväärtus on $Y(0) = 0$. Kiiruskonstandi väärtus on $K_1 = 0,1$. Juhtimine *REAKTSIOON* avaldub valemiga

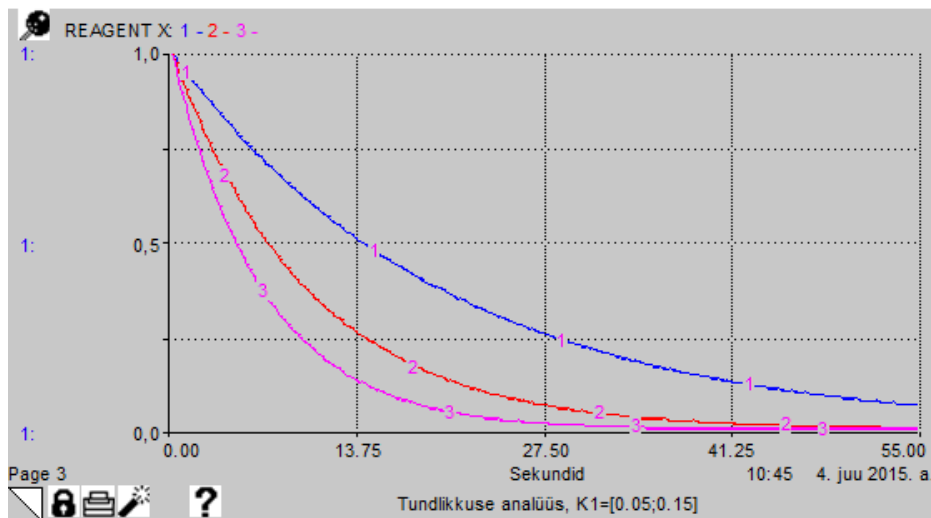
$$REAKTSIOON = K_1 \cdot REAGENT X.$$



Joonis 1.2. Keemilise reaktsiooni ainete kontsentratsioonide muutumine

Ainete kontsentratsioonide muutumist ajas näeme jooniselt 1.2. Alguses on produkti Y teke kiire, sest reagenti kontsentratsioon on kõrge. Kui reagent reageerib ära, siis produkti tekke kiirus väheneb. Reaktsioon lõpeb, kui reagent on ära reageerinud ja produkti on sama palju, kui reagenti alguses. Meie mudeli puhul reageerib reagent ära 53 sekundiga (joonis 1.2).

Teeme tundlikkuse analüüsi. Valime kiiruskonstandi K_1 väärtusteks 0,05; 0,1 ja 0,15.

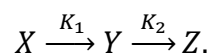


Joonis 1.3. Tundlikkuse analüüs, kui $K_1 = 0,05; 0,1; 0,15$

Joonisel 1.3 on näha reagenti kontsentratsiooni muutumise sõltuvus kiiruskonstandist. Näeme, et kiiruskonstandi K_1 suurendamine kiirendab reaktsiooni toimumise kiirust. Keemilise reaktsiooni kiiruse suurendamine võib näiteks toimuda temperatuuri tõstmisel.

1.1.2. Kahe produktiga keemiline reaktsioon

Arendame eelmist mudelit lisades juurde veel ühe produkti. Reaktsiooni skeem on järgmine:



Võrrandisüsteem saab kuju:

$$\frac{d[X]}{dt} = -K_1[X],$$

$$\frac{d[Y]}{dt} = K_1[X] - K_2[Y],$$

$$\frac{d[Z]}{dt} = K_2[Y].$$

Analoogiliselt eelmise mudeliga ainete kontsentratsioone tähistades saame diferentsiaalvõrrandite süsteemi järgmisel kujul:

$$\frac{dx}{dt} = -K_1x, \quad (1.7)$$

$$\frac{dy}{dt} = K_1x - K_2y, \quad (1.8)$$

$$\frac{dz}{dt} = K_2y. \quad (1.9)$$

Võrrandi (1.7) lahend on meil juba leitud, selleks on $x = e^{-K_1t}$. Asendame tulemuse võrrandisse (1.8) ja saame:

$$\frac{dy}{dt} = K_1e^{-K_1t} - K_2y,$$

$$\frac{dy}{dt} + K_2y = K_1 \cdot e^{-K_1t}. \quad (1.10)$$

Võrrand (1.10) on lineaarne mittehomoogeenne diferentsiaalvõrrand. Lahendame selle võrrandi konstandi varieerimise meetodil. Lahendamiseks peame eeldama, et $K_1 \neq K_2$. Kõigepealt lahendame võrrandile (1.10) vastava homogeense diferentsiaalvõrrandi:

$$\frac{dy}{dt} + K_2y = 0, \quad \left| \cdot \frac{dt}{y} \right. \quad (1.11)$$

$$\frac{dy}{y} = -K_2dt.$$

Integreerides saame:

$$\ln|y| = -K_2t + C_1.$$

Homogeense diferentsiaalvõrrandi (1.11) üldlahendiks on siis:

$$y = C_1e^{-K_2t}. \quad (1.12)$$

Otsime nüüd esialgse diferentsiaalvõrrandi (1.10) lahendit kujul

$$y = C_2(t)e^{-K_2t},$$

asendame konstandi C_1 uue otsitava funktsiooniga muutujast t . See lahend peab rahuldama ka diferentsiaalvõrrandit (1.10). Asendame lahendi võrrandisse (1.10) ja teeme järgmised teisendused:

$$\frac{d(C_2(t)e^{-K_2t})}{dt} + K_2C_2(t)e^{-K_2t} = K_1e^{-K_1t},$$

$$\frac{d(C_2(t))}{dt}e^{-K_2t} - K_2C_2(t)e^{-K_2t} + K_2C_2(t)e^{-K_2t} = K_1e^{-K_1t},$$

$$\frac{d(C_2(t))}{dt}e^{-K_2t} = K_1e^{-K_1t},$$

$$\frac{d(C_2(t))}{dt} = K_1e^{(K_2-K_1)t}.$$

Integreerides saame:

$$C_2(t) = \frac{K_1}{K_2 - K_1} e^{(K_2-K_1)t} + C_3,$$

kus C_3 on integreerimiskonstant.

Asendame saadud $C_2(t)$ võrrandisse (1.12), saame diferentsiaalvõrrandi (1.10) lahendi kujul:

$$y = \left(\frac{K_1}{K_2 - K_1} e^{(K_2-K_1)t} + C_3 \right) e^{-K_2t}. \quad (1.13)$$

Leiame C_3 väärtuse kasutades algtingimust $y(0) = 0$, saame:

$$C_3 = -\frac{K_1}{K_2 - K_1}.$$

Asendame saadud konstandi C_3 väärtuse võrrandisse (1.13) ja saame lahendiks:

$$y = \frac{K_1}{K_2 - K_1} (e^{-K_1t} - e^{-K_2t}).$$

Avaldame võrrandist (1.9) analoogiliselt muutuja z väärtuse, saame

$$z = \frac{K_2K_1}{K_2 - K_1} \left(\frac{e^{-K_1t}}{-K_1} + \frac{e^{-K_2t}}{K_2} \right) + 1.$$

Seega diferentsiaalvõrrandite süsteemi (1.7)-(1.9) lahenditeks saime:

$$x = e^{-K_1 t},$$

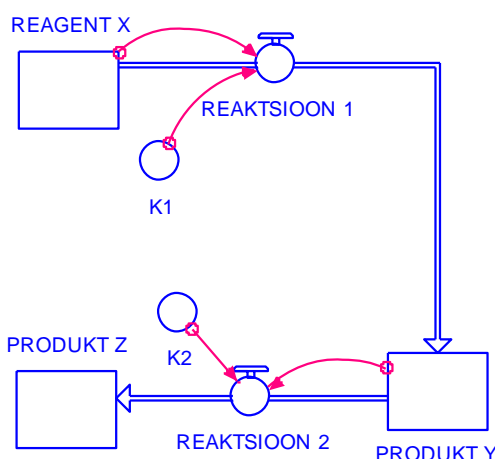
$$y = \frac{K_1}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}),$$

$$z = \frac{K_2 K_1}{K_2 - K_1} \left(\frac{e^{-K_1 t}}{-K_1} + \frac{e^{-K_2 t}}{K_2} \right) + 1.$$

Mudelile, mis on kujutatud joonisel 1.1, lisame juurde muutujad *PRODUKT Z* ja *REAKTSIOON 2*. Muutuja *PRODUKT Z* algväärtus on $Z(0) = 0$ ning juhtimine *REAKTSIOON 2* avaldub valemiga:

$$\text{REAKTSIOON 2} = K_2 \cdot \text{PRODUKT Y}.$$

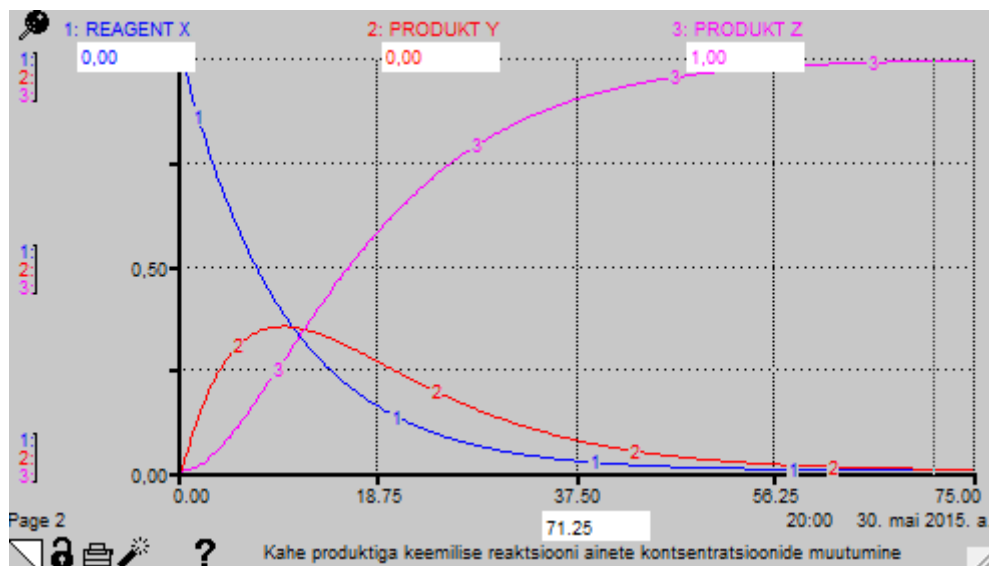
Kahe produktiga keemilise reaktsiooni mudeli skeem on toodud joonisel 1.4 ja programmikood lisas 2.



Joonis 1.4. Kahe produktiga keemiline reaktsioon

Mudelil kasutame kiiruskonstantide järgmisi väärtusi: $K_1 = 0,1$; $K_2 = 0,11$. Ainete kontsentratsioonide muutumine ajas on kujutatud joonisel 1.5.

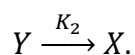
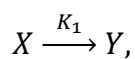
Alguses on reagenti *X* ära reageerimine ja produkti *Y* teke väga kiire, sest reagenti kontsentratsioon on kõrge. Produkti *Y* tekkimisel hakkab aine edasi reageerima produktiks *Z*. Reaktsioon lõpeb, kui reagent *X* ja produkt *Y* on otsas ning kogu ainest on saanud produkt *Z*. Meie mudelis juhtub see 71,25 sekundiga (vt joonis 1.5).



Joonis 1.5. Kahe produktiga keemilise reaktsiooni ainete kontsentratsioonide muutumine

1.1.3. Pöördreaktsioon

Arendame mudelit, lisades reaktsioonile (1.1) juurde vastassuunalise reaktsiooni. Olgu K_2 kiiruskonstant. Reaktsiooni skeem on järgmine:



Pöördreaktsioonile vastavad reagenti X ja produkti Y kiirused on järgmised:

$$\frac{d[X]}{dt} = K_2[Y],$$

$$\frac{d[Y]}{dt} = -K_2[Y].$$

Päri- ja vastassuunalise reaktsioonide kiirused kokku annavad järgmise diferentsiaalvõrrandite süsteemi:

$$\frac{dx}{dt} = -K_1x + K_2y, \quad (1.14)$$

$$\frac{dy}{dt} = K_1x - K_2y. \quad (1.15)$$

Saadud lineaarset homogeenet konstantsete kordajatega diferentsiaalvõrrandite süsteemi saame lahendada ühele diferentsiaalvõrrandile taandamise meetodil. Selleks diferentseerime süsteemi esimest võrrandit (1.14)

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -K_1 \frac{dx}{dt} + K_2 \frac{dy}{dt},$$

seejärel asendame teisest võrrandist (1.15) dy/dt :

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -K_1 \frac{dx}{dt} + K_2(K_1x - K_2y).$$

Võrrandist (1.14) avaldame K_2y , mille asendamisel eelnevasse võrrandisse saame

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -K_1 \frac{dx}{dt} + K_2 \left(K_1x - \frac{dx}{dt} - K_1x \right).$$

Oleme saanud teist järku lineaarse homogeenise konstantsete kordajatega diferentsiaalvõrrandi kujul

$$\frac{d^2x}{dt^2} + (K_1 + K_2) \frac{dx}{dt} = 0.$$

Saadud võrrandile vastav karakteristlik võrrand on

$$\lambda^2 + (K_1 + K_2)\lambda = 0.$$

Karakteristliku võrrandi lahendid on

$$\lambda_1 = 0; \lambda_2 = -(K_1 + K_2).$$

Seega saame avaldada muutuja x järgmiselt

$$x = C_1 + C_2 e^{-(K_1+K_2)t}.$$

Võrrandi (1.14) abil saame

$$y = \frac{K_1}{K_2} C_1 - C_2 e^{-(K_1+K_2)t}.$$

Algtingimuste $x(0) = 1$ ja $y(0) = 0$ korral saame avaldada integreerimiskonstandid järgmiselt

$$C_1 = 1 - \frac{K_1}{K_2 + K_1},$$

$$C_2 = \frac{K_1}{K_2 + K_1}.$$

Diferentsiaalvõrrandite süsteemi (1.14)-(1.15) lahendiks on

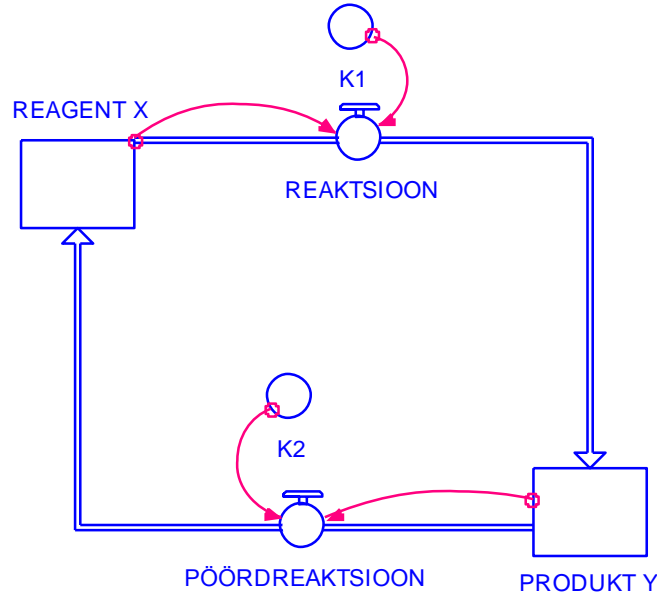
$$x = 1 - \frac{K_1}{K_2 + K_1} + \frac{K_1}{K_2 + K_1} e^{-(K_1+K_2)t},$$

$$y = \frac{K_1}{K_2} \left(1 - \frac{K_1}{K_2 + K_1} \right) - \frac{K_1}{K_2 + K_1} e^{-(K_1+K_2)t}.$$

Mudeli koostamiseks pöördreaktsioonile, mis koosneb päri- ja vastassuunalisest reaktsioonist, kasutame süsteemi (1.14)-(1.15). Mudelile, mis on kujutatud joonisel 1.1, lisame juurde juhtimise PÖÖRDREAKTSIOON, mis avaldub valemiga:

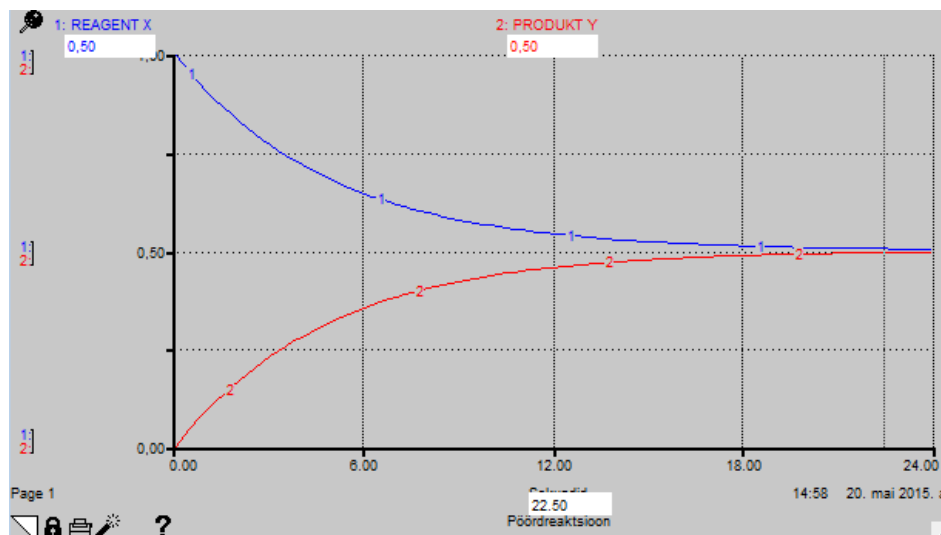
$$PÖÖRDREAKTSIOON = K_2 \cdot PRODUKT Y.$$

Mudeli skeem on toodud joonisel 1.6 ja programmikood lisas 3.



Joonis 1.6. Pöördreaktsiooni mudel

Mudelis kasutame kiiruskonstantide järgmiseid väärtusi: $K_1 = 0,1$; $K_2 = 0,1$. Joonisel 1.7 näeme pöördreaktsiooni ainete kontsentratsioonide muutumist.



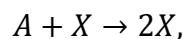
Joonis 1.7. Pöördreaktsiooni ainete kontsentratsioonide muutumine

Samamoodi nagu eelnevate reaktsioonide puhul, on ka siin alguses produkti teke väga kiire, sest reagenti kontsentratsioon on kõrge. Kui reagent reageerib järjest ära, siis produkti tekkimise kiirus väheneb. Kuna produkti tekib järjest juurde, siis tema lagunemise kiirus muudkui kasvab. Ühel hetkel muutuvad aeglustuva pärisuunalise reaktsiooni ja kiireneva vastassuunalise reaktsiooni kiirused võrdseteks. Siis saabub tasakaalumoment. Reagenti X tekib sama palju juurde kui laguneb ja sama kehtib ka produkti Y kohta. See tasakaal on dünaamiline, milles päri- ja vastassuunalise reaktsiooni kiirused on võrdsed. [3] Meie mudelis tekib tasakaalumoment 22,5 (joonis 1.7) sekundiga, kui mõlema aine kontsentratsioonid on saanud võrdseks 0,5.

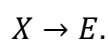
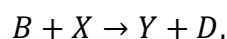
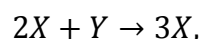
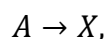
Näeme, et vastassuunalise reaktsiooni lisamine muudab täielikult reaktsiooni käitumist.

1.2. Brüsselaator

Üks oluline omadus reaalelu protsesside puhul on see, et süsteemi komponentide vahelised seosed on mittelineaarsed. Näide mittelineaarsusest keemilistes reaktsioonides on autokatalüütiline protsess



mille korral aine X kiirendab omaenda toodangut aine A abil. Sellisel autokatalüütilisel reaktsioonil võib olla mitu vahepealset protsessi, nagu näiteks kui X toodab ainet Y , mis omakorda kiirendab aine X tootmist. Üks selline reaktsioon on tuntud Brüsselaatori nime all. Seda reaktsiooni uuris Brüsselis grupp teadlasi eesotsas Ilya Prigoginega, kes oli Belgia-Ameerika keemik ning Nobeli preemia laureaat. Sellest tuleneb ka nimi Brüsselaator. See sisaldab järgnevaid reaktsioone:



Ainete A, B, D ja E kontsentratsioonid hoime konstantsetena, kui lisame järjepidevalt aineid A ja B ja eemaldame aineid D ja E . Kaks reagenti, mis meid nendes võrrandites huvitavad, on vaheühendid X ja Y , sest need ained on seotud autokatalüütilise protsessiga (tabelis 1.1 samm 2). Ainete X ja Y kontsentratsioonid on ajas muutuvad.

Järgnevas tabelis 1.1 on toodud Brüsselaatori reaktsioonide kiirused iga aine suhtes.

Tabel 1.1. Reaktsioonide kiirused iga aine suhtes [7]

Samm	Reaktsioon	Kiirused
1	$A \rightarrow X$	$\frac{d[A]}{dt} = -K_1[A]$ $\frac{d[X]}{dt} = K_1[A]$
2	$2X + Y \rightarrow 3X$	$\frac{d[X]}{dt} = K_2[X]^2[Y]$ $\frac{d[Y]}{dt} = -K_2[X]^2[Y]$

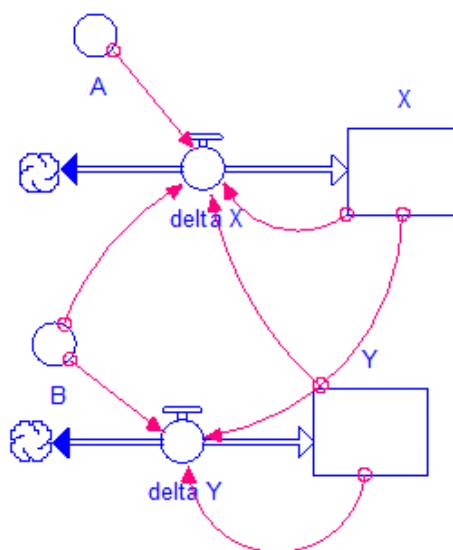
3	$B + X \rightarrow Y + D$	$\frac{d[B]}{dt} = -K_3[B][X]$ $\frac{d[X]}{dt} = -K_3[B][X]$ $\frac{d[Y]}{dt} = K_3[B][X]$ $\frac{d[D]}{dt} = K_3[B][X]$
4	$X \rightarrow E$	$\frac{d[X]}{dt} = -K_4[X]$ $\frac{d[E]}{dt} = K_4[X]$

Brüsselaatori reaktsioonide kiirus ainete X ja Y suhtes on summa vastava aine kiirustest erinevates reaktsioonides [8]. Seega saame mittelineaarse diferentsiaalvõrrandite süsteemi:

$$\frac{dX}{dt} = K_1A + K_2X^2Y - K_3BX - K_4X, \quad (1.16)$$

$$\frac{dY}{dt} = K_3BX - K_2X^2Y. \quad (1.17)$$

Süsteemile vastav Stella mudel on antud joonisel 1.8. Mudelis on kõik kiirusekonstandid K_1, K_2, K_3, K_4 võrdsed ühega. Lisaks oletame, etprodukte A, B, D ja E hoitakse konstantsetena (eemaldamise või lisamise ajal), see annab meile võimaluse modelleerida neidprodukte konstantidena.



Joonis 1.8. Brüsselaatori mudel

Reaktsiooni tulemused sõltuvad olulisel määral reaktsiooni kiirusest. Kui kiirus on 0, siis süsteem jõuab kiiresti tasakaaluasendisse. Kui aga kiirus on suur, siis ained X ja Y uhutakse anumast välja enne, kui nad on jõudnud reageerida. [4]

Leiame võrrandisüsteemi püsipunktid. Tähistame:

$$\begin{aligned}\frac{dX}{dt} &= f(X, Y) = A + X^2Y - BX - X, \\ \frac{dY}{dt} &= g(X, Y) = BX - X^2Y.\end{aligned}$$

Püsipunktis (X^*, Y^*) on kiirused nullid ehk kehtivad tingimused

$$\frac{dX}{dt} = 0; \quad \frac{dY}{dt} = 0,$$

seega

$$\begin{cases} f(X^*, Y^*) = 0, \\ g(X^*, Y^*) = 0 \end{cases}$$

ehk

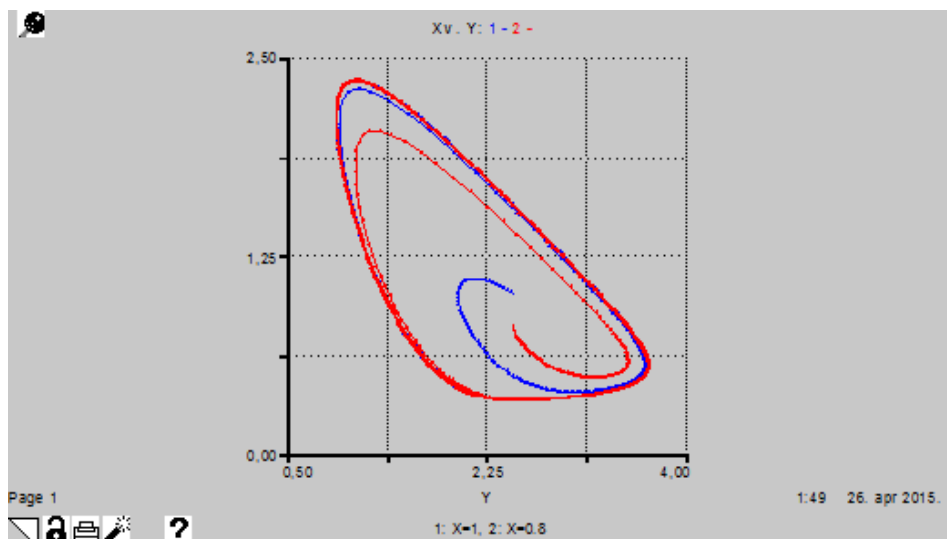
$$\begin{cases} A + X^{*2}Y^* - BX^* - X^* = 0, \\ BX^* - X^{*2}Y^* = 0. \end{cases}$$

Liidame esimese ja teise võrrandi ja saame, et $X^* = A$. Nüüd paneme X^* väärtuse teise võrrandisse ja saame, et $Y^* = B/A$. Seega püsipunkt on

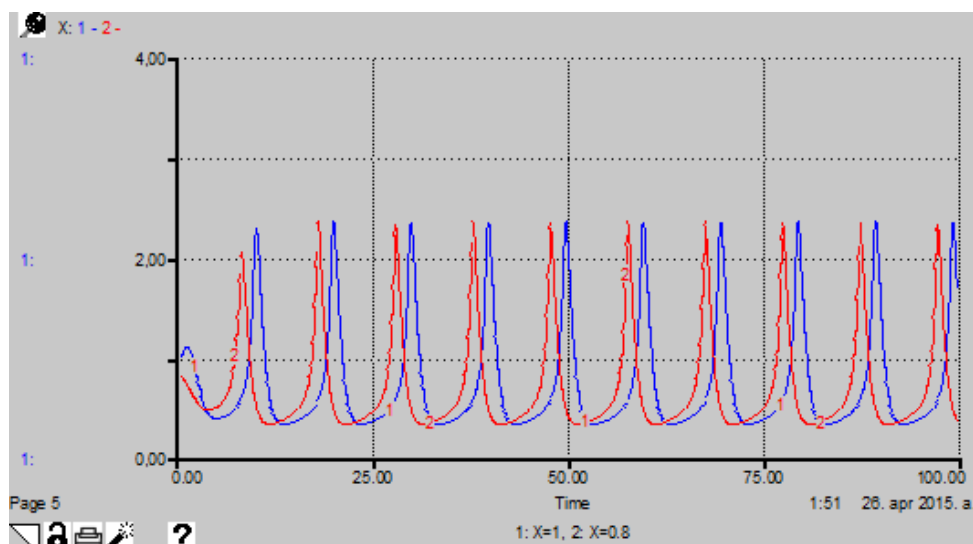
$$\begin{cases} X^* = A, \\ Y^* = \frac{B}{A}. \end{cases}$$

See on süsteemi ainus püsipunkt. [8]

Olgu $A = 0,7$ ja $B = 2$. Valime algtingimusteks $X(0) = A$ ja $Y(0) = B/A$ (püsipunktid) ja käivitame mudeli, kui $DT = 0,0625$ ja nii leiame süsteemi püsioleku. Tulemuseks saame, et $X = 0,7$ ja $Y = 2,857$. Käivitame mudeli kahe algtingimusega, mis on lähedased nendele püsioleku väärtustele, näiteks $X(0) = 1$ ja $X(0) = 0,8$ ning Y võtame mõlemal juhul $Y(0) = 2,5$. Tulemused on joonistel 1.9 ja 1.10.



Joonis 1.9. Ainete X ; Y kontsentratsioonide muutumine, kui 1: $X = 1$, 2: $X = 0,8$



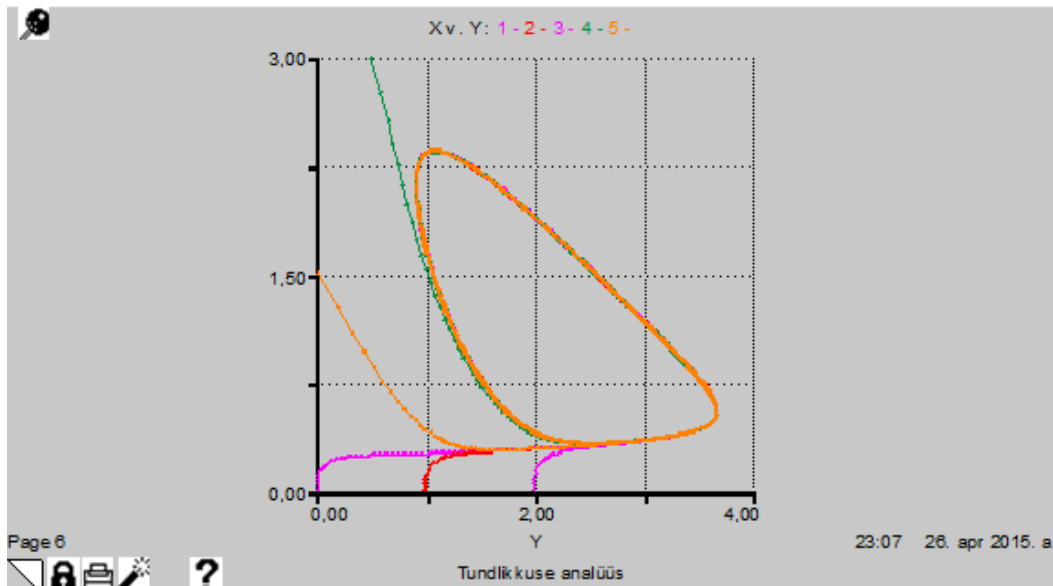
Joonis 1.10. Aine X kontsentratsiooni muutumine ajas, kui 1: $X = 1$, 2: $X = 0,8$

Teeme nüüd Stellas tundlikkuse analüüsi 5 erineva algtingimuse korral, mille väärtused on toodud tabelis 1.2.

Tabel 1.2. Algtingimused tundlikkuse analüüsiks

Nr	$X(0)$	$Y(0)$
1	0	0
2	0	1
3	0	2
4	3	0,5
5	1,5	0

Tulemused joonisel 1.11 näitavad, et sõltumata algtingimustest koondub süsteem samasse piirtsüklisse. Piirtsükkel on kinnine kõver, mis iseloomustab süsteemi perioodilist liikumist [4]. Tulemusena on süsteem säilitanud oleku, kus reagentid saavad kasutatud ja keemilised reaktsioonid peatuvad.



Joonis 1.11. Mudeli tundlikkuse analüüs tabelis 1.2 toodud algtingimuste korral

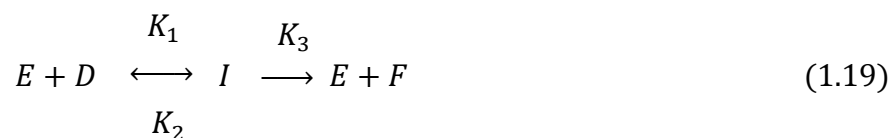
Teadlased väidavad, et tegelikult iga reaalmaailma süsteem on avatud ja iseloomustatud mittelineaarsusega. Iseseisvad organismid saavad materjali ja siseenergia oma ümbritsevatelt ja väljutavad üleliigsed produktid ja soojust. Sarnaselt suunab ka kogu ökosüsteem ained ja energia läbi nende süsteemide. Konstantne reagentide sissevool ja energia nendes süsteemides, ja pidev üleliigsete materjalide ja soojust eemaldamine, muudab võimalikuks nendel süsteemidel toimida.

1.3. Katalüüsitud produkti mudel

Selles mudelis käsitleme juhtumit, kus peale mitut reaktsiooni üks reagentidest tekib uuesti.

Sellised katalüüsitud reaktsioonid on tavalised bioloogilistes protsessides. Näide sellisest reaktsioonist on fruktoosi (F) tootmine dekstroosist (D). Selles protsessis ensüüm (E) lukustub mehaaniliselt substraadi molekuli, murrab ennast uude molekuli, fruktoosi, ja vabaneb uuesti peale keemilise reaktsiooni toimumist. Ensüümid on bioloogilised katalüsaatorid, mis modifitseerivad substraadi molekuli nii, et reaktsioon kiireneb [3].

Tähistame reaktsiooni kiiruskonstandid K_1, K_2 ja K_3 . Reaktsiooni võrrand on järgmine:



Valemis (1.19) ensüüm E siseneb keemilisse reaktsiooni, mille käigus tekib vahesaadus I . Vahesaadus I siseneb uude reaktsiooni, kust E vabastatakse muutmata kujul koos uue ainega F . Lisaaine, mis on aktiivne selles protsessis, on substraat D , mis on muundatud ainesse F ensüümi E toimetel.

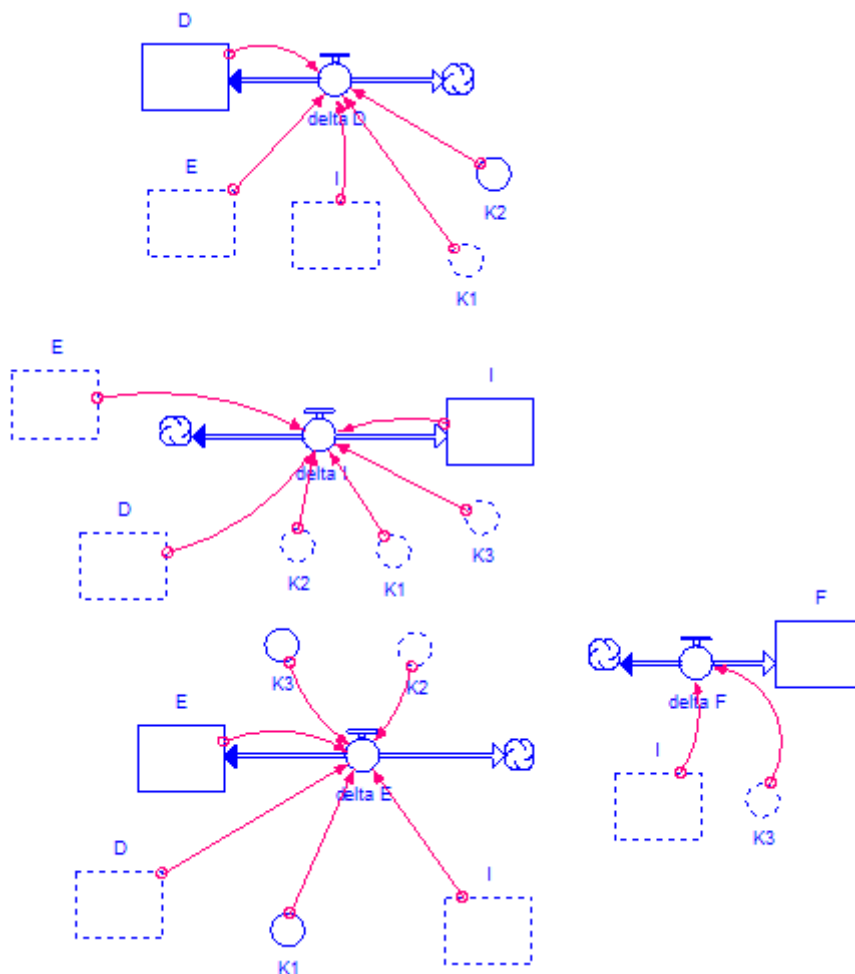
Tabelis 1.3 on toodud katalüüsitud produkti reaktsiooni kiirused iga aine suhtes.

Tabel 1.3. Kiiruste tabel

Samm	Reaktsioon	Kiirus
1	$E + D \rightarrow I$	$\frac{d[E]}{dt} = -K_1[D][E]$ $\frac{d[D]}{dt} = -K_1[D][E]$ $\frac{d[I]}{dt} = K_1[D][E]$
2	$I \rightarrow E + D$	$\frac{d[I]}{dt} = -K_2[I]$ $\frac{d[E]}{dt} = K_2[I]$ $\frac{d[D]}{dt} = K_2[I]$
3	$I \rightarrow E + F$	$\frac{d[I]}{dt} = -K_3[I]$ $\frac{d[E]}{dt} = K_3[I]$ $\frac{d[F]}{dt} = K_3[I]$

Diferentsiaalvõrrandite süsteem, mis väljendab keemilise reaktsiooni kiirust on järgmine:

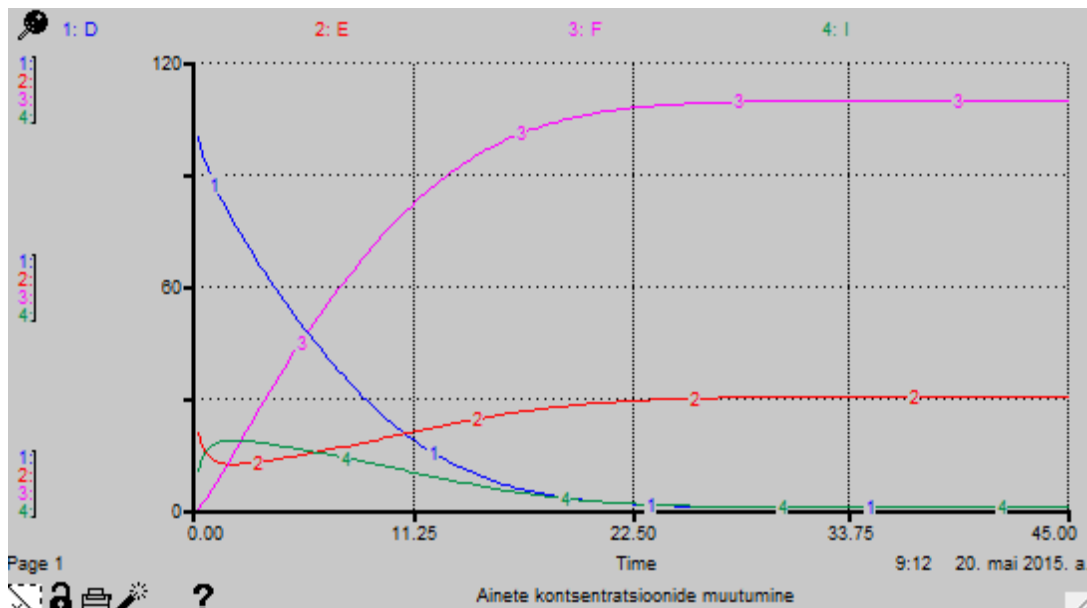
$$\begin{aligned} \frac{dD}{dt} &= -K_1DE + K_2I, \\ \frac{dI}{dt} &= K_1DE - (K_2 + K_3)I, \\ \frac{dE}{dt} &= -\frac{dI}{dt} \\ \frac{dF}{dt} &= K_3I. \end{aligned} \tag{1.20}$$



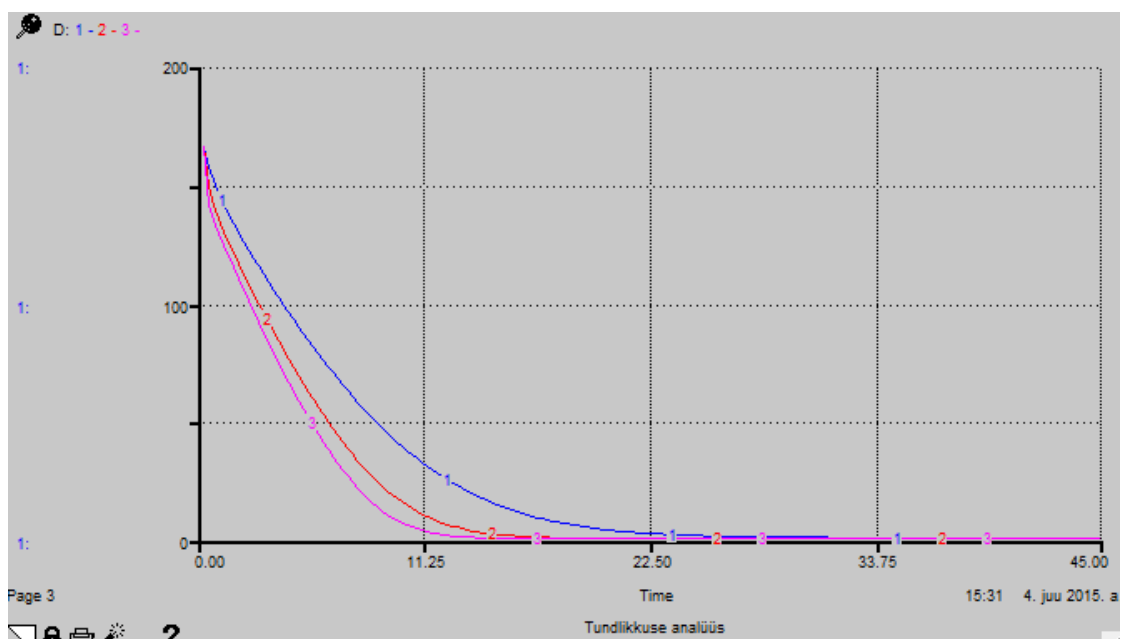
Joonis 1.12. Katalüüsitud produkti mudel

Võrrandisüsteemi (1.20) põhjal on koostatud mudel (joonis 1.12). Mudelis olevate põhimuutujate algväärtused on $D(0) = 100$, $E(0) = 20$, $F(0) = 0$, $I(0) = 10$ ning kiiruskonstantide väärtused on $K_1 = 0,01$, $K_2 = 0,01$, $K_3 = 0,5$. Mudeli programmikood on lisas 5.

Mudelis vaadeldakse kõikide ainete kontsentratsioone, mis osalevad keemilises reaktsioonis. Ainete kontsentratsioonide muutumine on näha joonisel 1.13. Jooniselt näeme ensüümi E kontsentratsiooni ajutist langust, kui ta lukustub aine I tootmisesse. Vahepealse aine I kontsentratsiooni langusega lõppsaaduse F moodustamisel hakkab E kontsentratsioon uuesti tõusma. Substraadi D kontsentratsioon on reaktsiooni alguses 100 mooli kuupmeetri kohta ja see kahaneb reaktsiooni käigus kuni reaktsiooni lõpuks jõuab 0. Kui substraat D saab otsa, siis rohkem reaktsioone ei toimu ja süsteemis jäävad ainete E ja F kontsentratsioonid püsivaks.

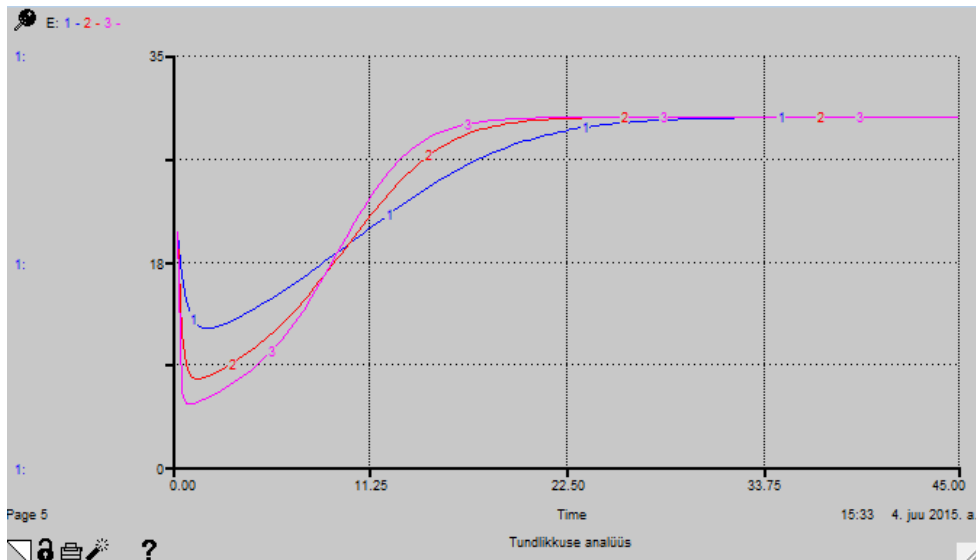


Joonis 1.13. Ainete kontsentratsioonide muutumine



Joonis 1.14. K_1 muutmise mõju ainele D

Teeme tundlikkuse analüüsi. Muudame kiiruskonstandi K_1 väärtuseid järgmiselt: 0,01, 0,02, 0,03. Joonistelt 1.14 ja 1.15 näeme, et kiiruskonstandi K_1 suurendamine kiirendab reaktsiooni toimumist.



Joonis 1.15. K_1 muutmise mõju ainele E

Süsteemist (1.20) on võimalik elimineerida ainete E ja D kontsentratsioonid. Tähistame algtingimused järgmiselt:

$$E(0) = E_0; I(0) = I_0; D(0) = D_0.$$

Lahendame kõigepealt süsteemi (1.20) kolmanda võrrandi, integreerides saame:

$$E = -I + E_0 + I_0.$$

Asendame saadud avaldise süsteemi (1.20) esimesse ja teisse võrrandisse, saame süsteemi järgmisel kujul

$$\begin{aligned} \frac{dD}{dt} &= -K_1 D(E_0 + I_0 - I) + K_2 I, \\ \frac{dI}{dt} &= K_1 D(E_0 + I_0 - I) - (K_2 + K_3) I, \\ \frac{dF}{dt} &= K_3 I. \end{aligned} \tag{1.21}$$

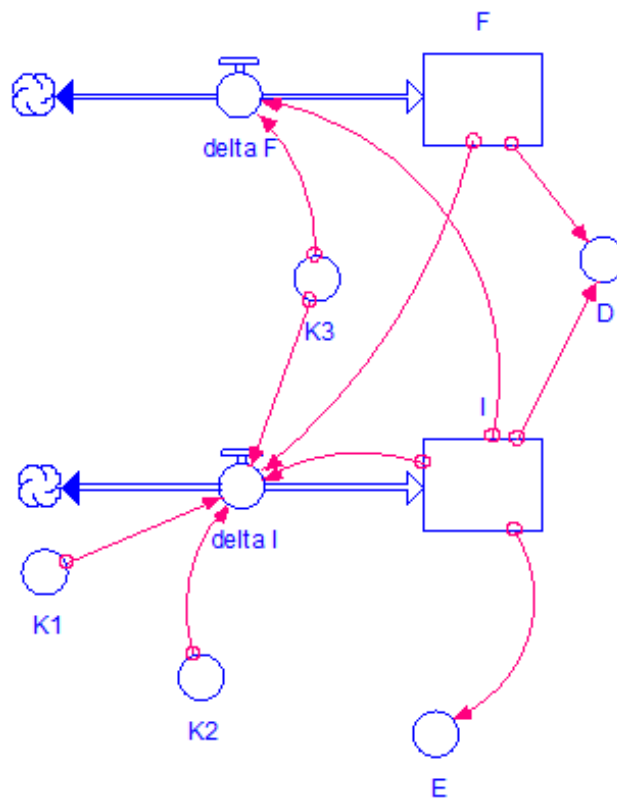
Liites kokku süsteemi (1.21) kaks esimest võrrandit ja asendades kolmanda, saame avaldada aine D kontsentratsiooni järgmiselt:

$$D = -I - F + D_0 + I_0 + F_0.$$

Seega oleme saanud süsteemi:

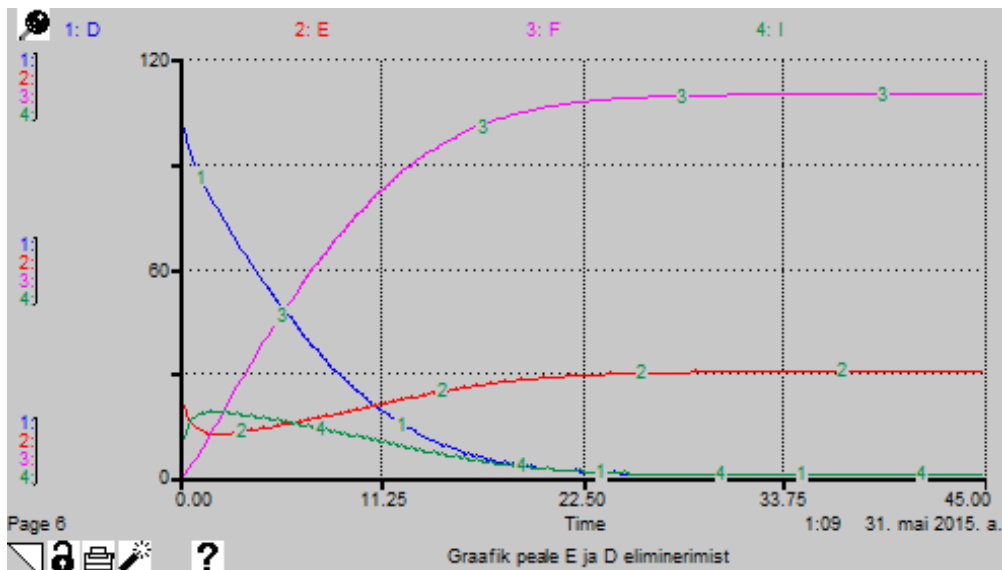
$$\begin{aligned} \frac{dI}{dt} &= K_1(-I - F + D_0 + I_0 + F_0)(E_0 + I_0 - I) - (K_2 + K_3)I, \\ \frac{dF}{dt} &= K_3I. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Kontrollime saadud tulemust ka mudeli abil. Elimineerime mudelist muutujad D ja E , saame mudeli, mis on toodud joonisel 1.16.



Joonis 1.16. Katalüüsitud produkti mudel peale ainete E ja D kontsentratsioonide elimineerimist

Võrreldes jooniseid 1.13 ja 1.17 näeme, et ainete D ja E elimineerimine ei mõjutanud ainete kontsentratsioonide muutumist.

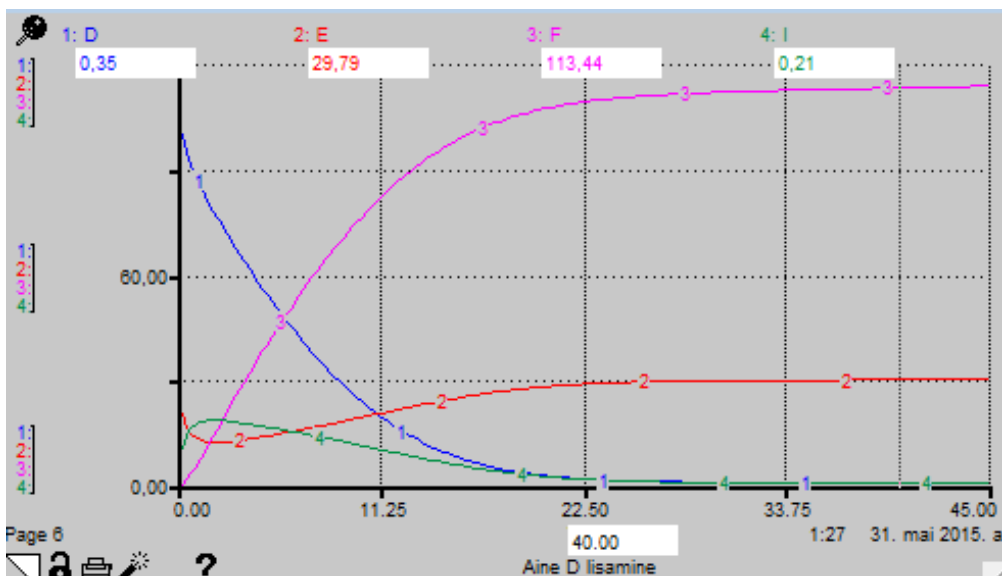


Joonis 1.17. Katalüüsitud produkti mudeli graafik peale ainete E ja D elimineerimist

Vältimaks reaktsioonide lõppemist aine D kontsentratsiooni muutumisel nulliks, muudame mudelit nii, et lisame esimesse diferentsiaalvõrrandisse igal ajasammul väikese kontsentratsiooni ainet D juurde ehk juhtimine avaldub järgmiselt

$$\Delta D = -K_1DE + K_2I + 0,1.$$

Sellisel juhul saame aine D kontsentratsiooniks ajahetkel $t = 40$ $D = 0,35$ (vt joonis 1.18).



Joonis 1.18. Aine D lisamisel saadav tulemus

2. Südametöö mudel

Südametöö mudel põhineb raamatul „Modeling Dynamic Biological Systems“ [1].

2.1. Südame ehitus ja töötamise põhimõtted

Neljakambriline süda on organ inimese kehas, mis pumpab verd. Kõigepealt kirjeldame südame tööd, et mudelit paremini ette kujutada. Hapnikuvaene veri organismi kudedest tuuakse läbi õõnesveeni paremasse kotta. Paremast kojast voolab veri läbi hõlmase klapi paremasse vatsakesse, mis pumpab vere kopsuarteri kaudu kopsudesse. Kopsudes varustatakse veri hapnikuga. Kopsudest liigub veri kopsuveeni kaudu vasakusse kotta. Vasakust kojast voolab veri läbi hõlmase klapi vasakusse vatsakesse. Ning lõpuks pumbatakse hapnikurikas veri läbi aordi keha ülejäänud osadesse.

Pumpamise kiirust kontrollib südamestimulaator. Spetsiaalsed rakud mõlemas kodade kambris edastavad elektrilisi impulsse, mis põhjustavad kodade kokkutõmbeid. Sama impulsi mõjul, mis viiakse atrioventrikulaarsesse (AV) sõlme, toimub vatsakese kokkutõmme. Tulemuseks on kõigepealt kodade kokkutõmme ja siis paar millisekundit hiljem vatsakeste kokkutõmme. Joonisel 2.1 on toodud südame ehitus lihtsustatud kujul.

2.2. Südametöö mudel

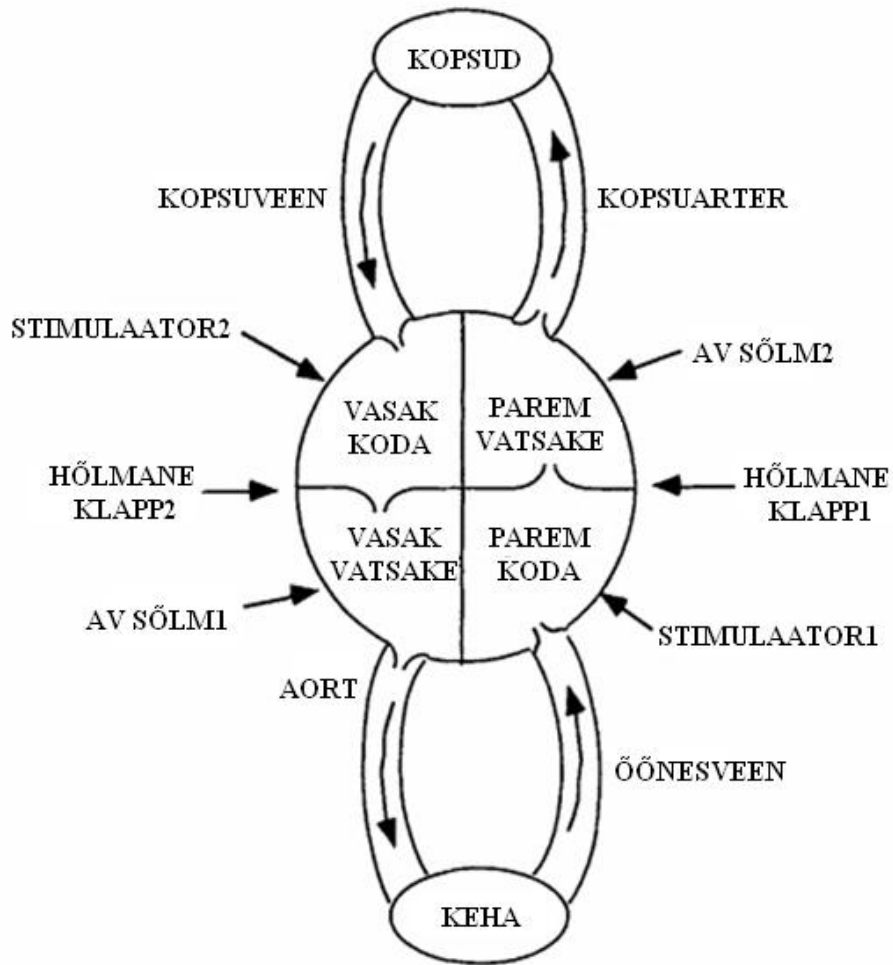
Modelleerime inimese südame töö lihtsustatud kujul. Mudeli skeem on toodud joonisel 2.2 ja programmikood lisas 6.

Meie mudel neljakambrilisest südamest on koostatud eesmärgiga, et reageerida verevajaduse muutustele ja haigustele. Veri pumbatakse läbi kõigi nelja südamekambriga. Mudeli tuumaks on kaks südamestimulaatorit, mõlemad saadavad vere pumpamiseks signaale, põhjustades vere voolu ühest kambrist teise:

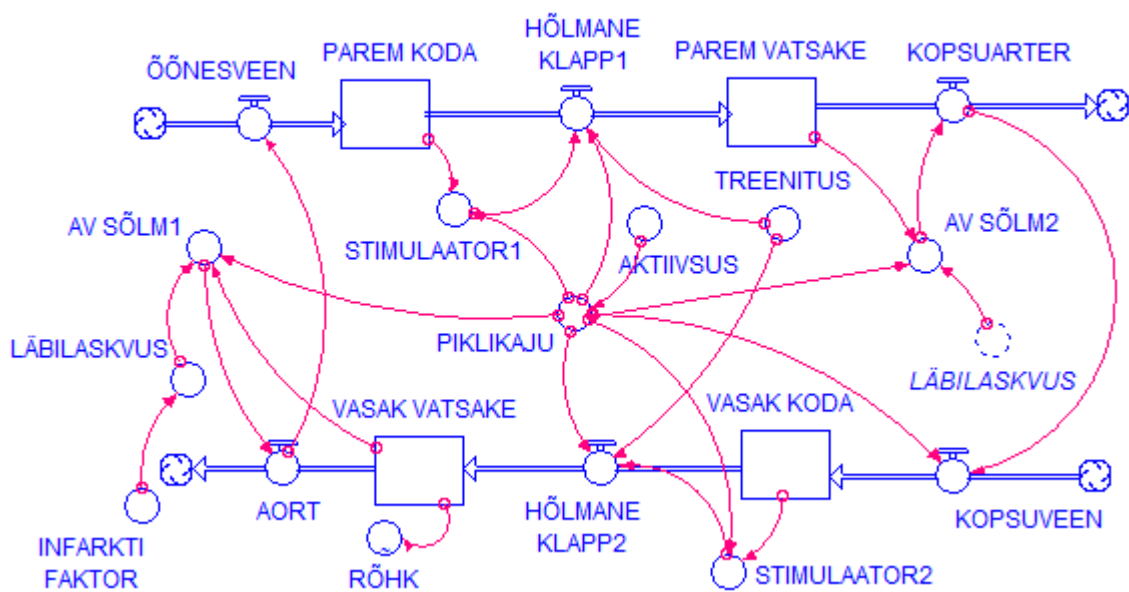
$$STIMULAATOR1 = PULSE(PAREM\ KODA, 1, PIKLIKAJU),$$

$$STIMULAATOR2 = PULSE(VASAK\ KODA, 1, PIKLIKAJU).$$

Vere pumpamise modelleerimiseks kasutame programmis Stella olevat funktsiooni $PULSE(suurus[, esimene, intervall])$, mis tekitab ühe või mitu hüpet antud suuruse võrra. Argumentideks on: *suurus*, mis määrab hüppe kõrguse; *esimene*, mis määrab esimese hüppe aja; *intervall*, mis määrab järjestikuste hüpete vaheaja.



Joonis 2.1. Idealiseeritud südame ehitus



Joonis 2.2. Südametöö mudel

Pulsi löögisagedust kontrollib piklikaju, see on aju osa, mis stimuleerib mõningaid kehafunktsioone nagu näiteks hingamine ja südamelöögid. Piklikaju tegevuse modelleerime funktsioonina südameaktiivsusest:

$$PIKLIKAJU = 8 \cdot AKTIIVSUS.$$

Kui $AKTIIVSUS = 1$, siis on tegu puhkava inimesega, kui $AKTIIVSUS < 1$, siis tegutseva inimesega. Suurenenud aktiivsus suurendab südamestimulaatori töö kiirust. Lisaks kasutame mudelis funktsiooni $TREENITUS$. Mida paremini on inimene treenitud, seda efektiivsemalt pumpab süda verd.

Modelleerime lühikese pausi kodadest ja vatsakestest verevoolu vahel Stella funktsiooni $DELAY$ abil:

$$KOPSUARTER = DELAY(AV S\ddot{O}LM2, 1),$$

$$AORT = DELAY(AV S\ddot{O}LM1, 1).$$

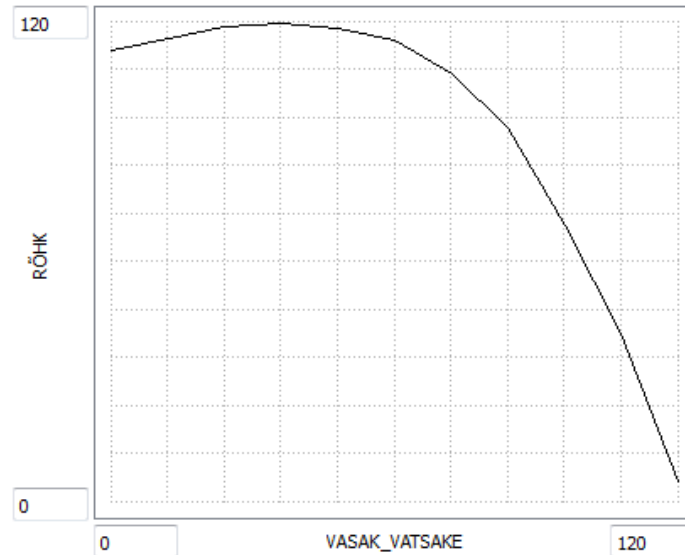
Funktsioon $DELAY(sisend, aeg)$ annab funktsiooni $sisend$ eelmised väärtused ajahetkedel, mis on antud argumendiga aeg .

Verevoolu realistlikumaks kirjeldamiseks kasutame Stella funktsiooni $SMTH1(a, x)$. Funktsioon $SMTH1(a, x)$ arvutab muutuja a suhtes 1. järku eksponentsiaalse sileda (lõpmatult diferentseeruva) funktsiooni, kasutades aega x . Selle funktsiooni abil saame modelleerida vere järk-järgulist voolamist kambrite vahel. Verevoolu kirjeldamiseks defineerime juhtimised $H\ddot{O}LMANE KLAPP1$ ja $H\ddot{O}LMANE KLAPP2$, mis ühendavad vastavalt vasaku ja parema kambri koja ja vatsakese, $SMTH1$ funktsiooni abil järgnevalt:

$$H\ddot{O}LMANE KLAPP1 = SMTH1(STIMULAATOR1 \cdot TREENITUS, PIKLIKAJU \cdot 0.1),$$

$$H\ddot{O}LMANE KLAPP2 = SMTH1(STIMULAATOR2 \cdot TREENITUS, PIKLIKAJU \cdot 0.1).$$

Vererõhu jaoks kasutame muutujat $R\ddot{O}HK$. Meie mudelis on vererõhk antud graafilise sõltuvusega verekogusest vasakus vatsakeses (vt joonis 2.3).



Joonis 2.3. Vererõhu graafiline defineerimine

Südamehaiguse lisame mudelisse muutujaga *INFARKTI FAKTOR*. See suurus näitab südame koe kahjustuse ulatust. Suurenenud kahjustus mõjutab elektrilise impulsi läbilaskvust:

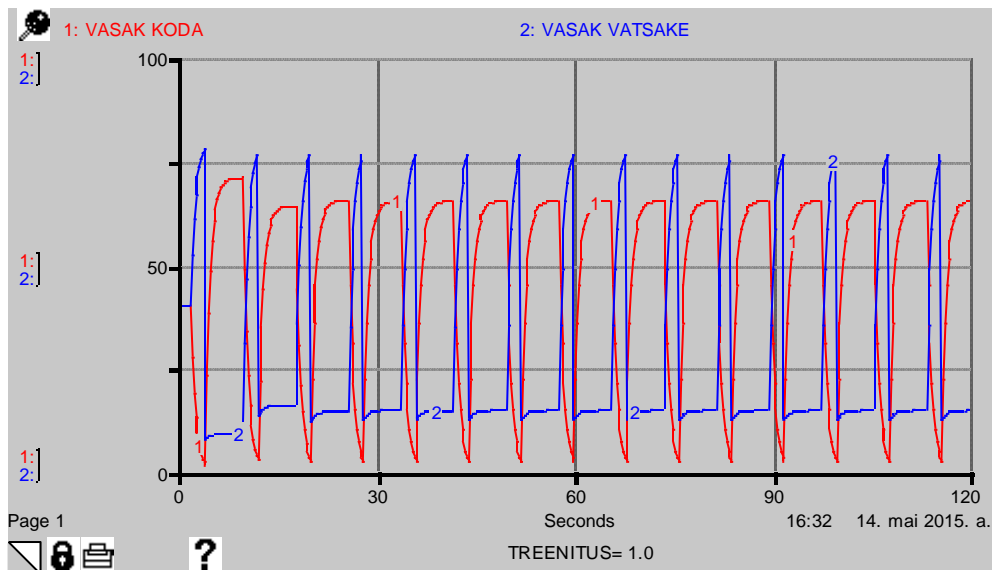
$$LÄBILASKVUS = 2 \cdot INFARKTI FAKTOR.$$

Atrioventrikulaarsõlmed defineerime järgnevalt:

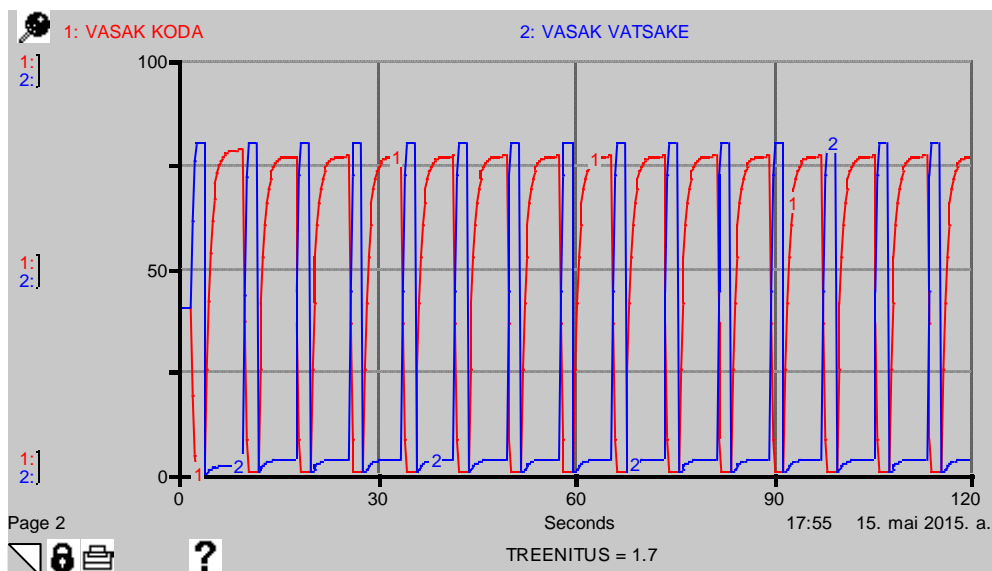
$$AV SÕLM1 = PULSE(VASAK VATSAKE, LÄBILASKVUS, PIKLIKAJU),$$

$$AV SÕLM2 = PULSE(PAREM VATSAKE, LÄBILASKVUS, PIKLIKAJU).$$

Mudelis on kodades ja vatsakestes oleva vere hulga algväärtusteks võetud 40 ml. Mudelis saadud tulemused on kujutatud joonistel 2.4-2.10. Joonised 2.4 ja 2.5 näitavad vasaku koja ja vatsakese verekoguse muutumist ajas kahe erineva treenituse väärtuse korral. Joonisel 2.4 on kujutatud tulemused, kui *TREENITUS* = 1, joonisel 2.5 on *TREENITUS* = 1,7. Suurendades treenitust suureneb südame töö efektiivsus ehk süda pumpab korraga rohkem verd. Võrreldes jooniseid, näeme, et kui suurendame treenitust, siis koja ja vatsakese verekoguse minimaalsed ja maksimaalsed väärtused saavad võrdsemateks.

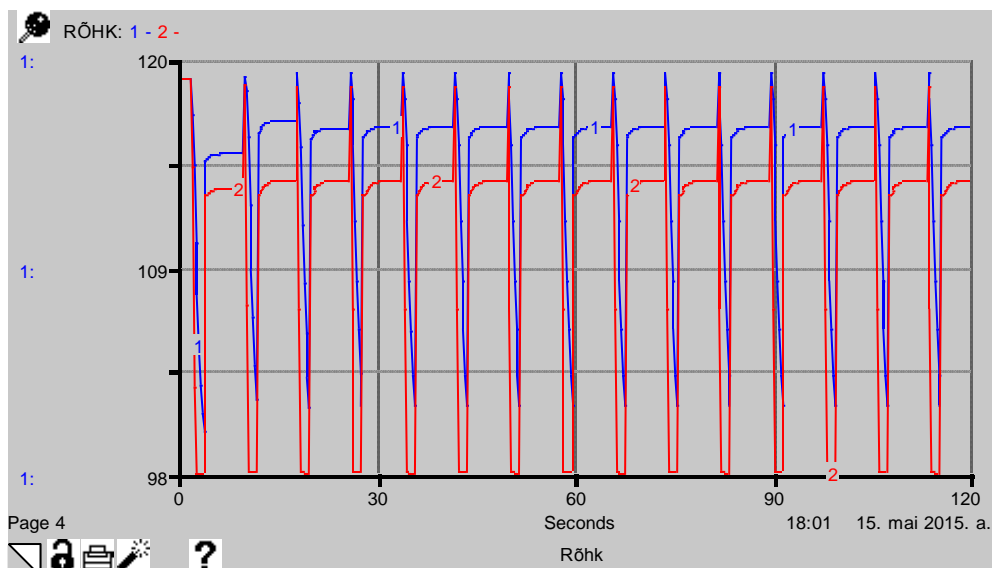


Joonis 2.4. Vasaku koja ja vatsakese verekogus, kui treenitus on 1



Joonis 2.5. Vasaku koja ja vatsakese verekogus, kui treenitus on 1,7

Vererõhk vasakus vatsakeses kahe erineva treenituse väärtuse korral on toodud joonisel 2.6. Jooniselt näeme, et vererõhk on suurema treenituse korral kogu aeg madalam. Esimene katse on tehtud, kui $TREENITUS = 1$ (sinine joon), teine katse, kui $TREENITUS = 1,7$ (punane joon).

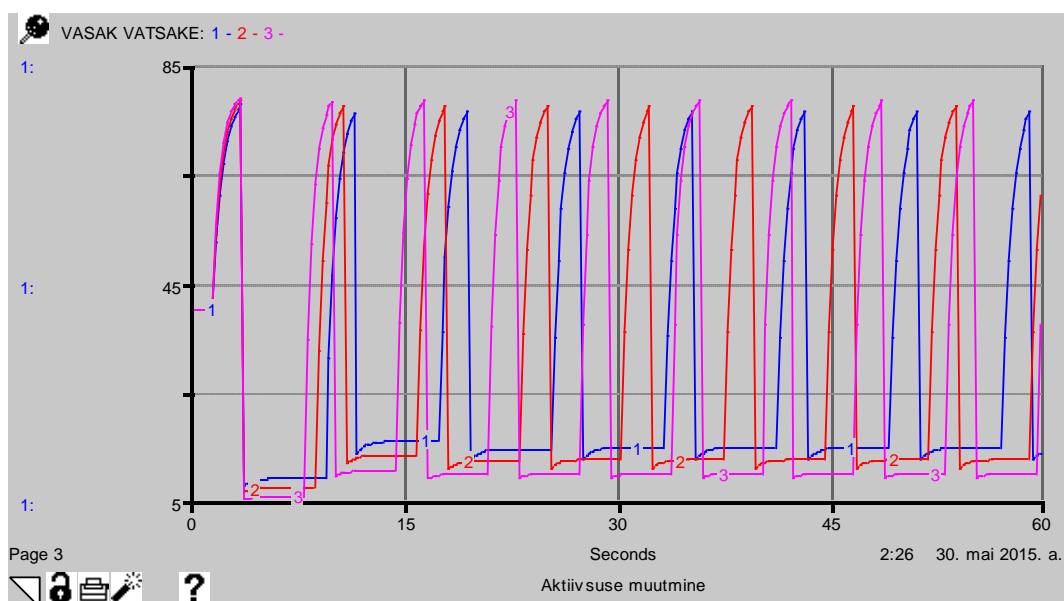


Joonis 2.6. Vererõhu muutumine sõltuvalt treenitusest

Arendame mudelit, muutes aktiivsust nii, et esialgu magav inimene ärkab järk-järgult. Selleks muudame muutajat *AKTIIVSUS* järgmiselt:

Tabel 2.1. Muutuja *AKTIIVSUS* väärtused

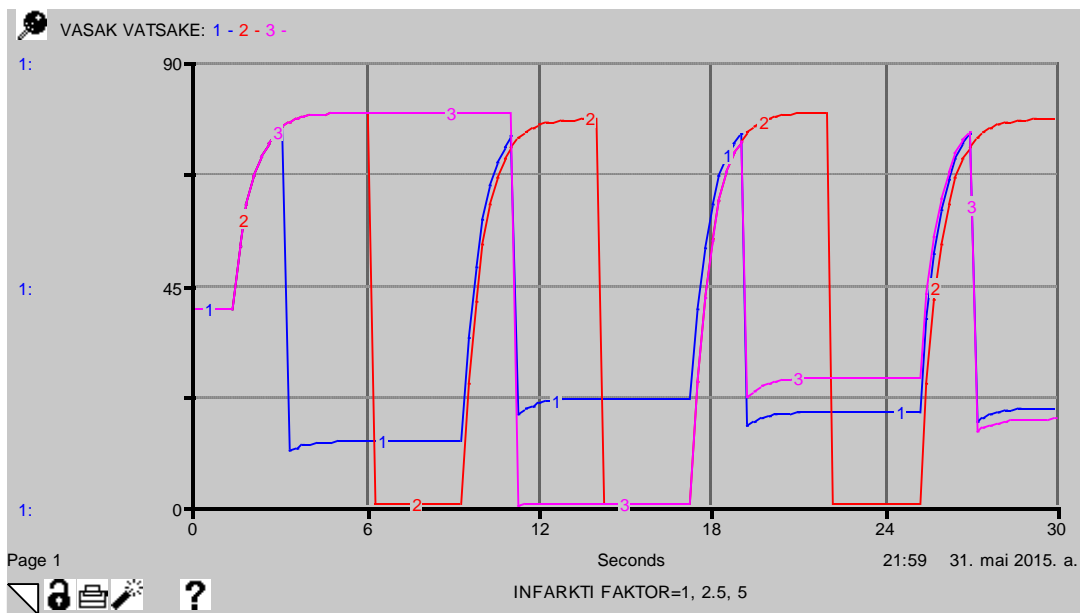
Nr	<i>AKTIIVSUS</i>
1	1
2	0,9
3	0,8



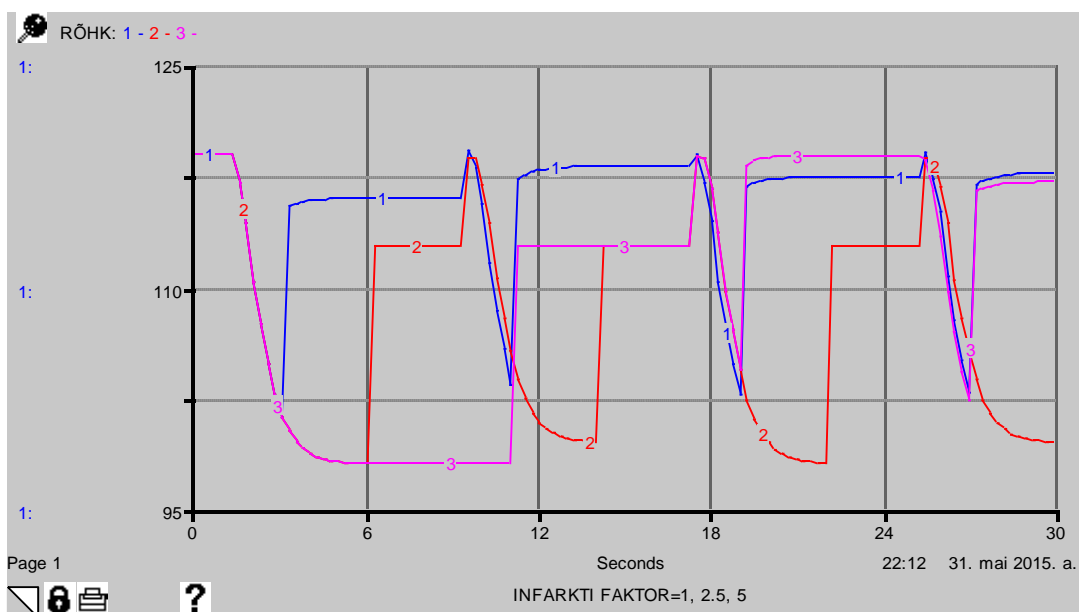
Joonis 2.7. Muutuja *AKTIIVSUS* muutmise mõju vasakule vatsakesele

Jooniselt 2.7 näeme, et ärkamisel südame töötamise kiirus tõuseb. Mida aktiivsemaks inimene muutub, seda kiiremini süda lööb ning rohkem verd pumpab. Meie mudelis tähendab see seda, et kui muutujat *AKTIIVSUS* muuta väiksemaks, siis ka *PIKLIKAJU* väärtus muutub väiksemaks ning seega hakkavad südamestimulaatorid ja atrioventrikulaarsõlmed verd tihemini pumpama.

Vaatame, kuidas *INFARKTI FAKTOR* mõjutab südametööd. Võtame muutuja *INFARKTI FAKTOR* väärtusteks 1; 2,5 ja 5.



Joonis 2.8. Infarkti faktori mõju vasakule vatsakesele



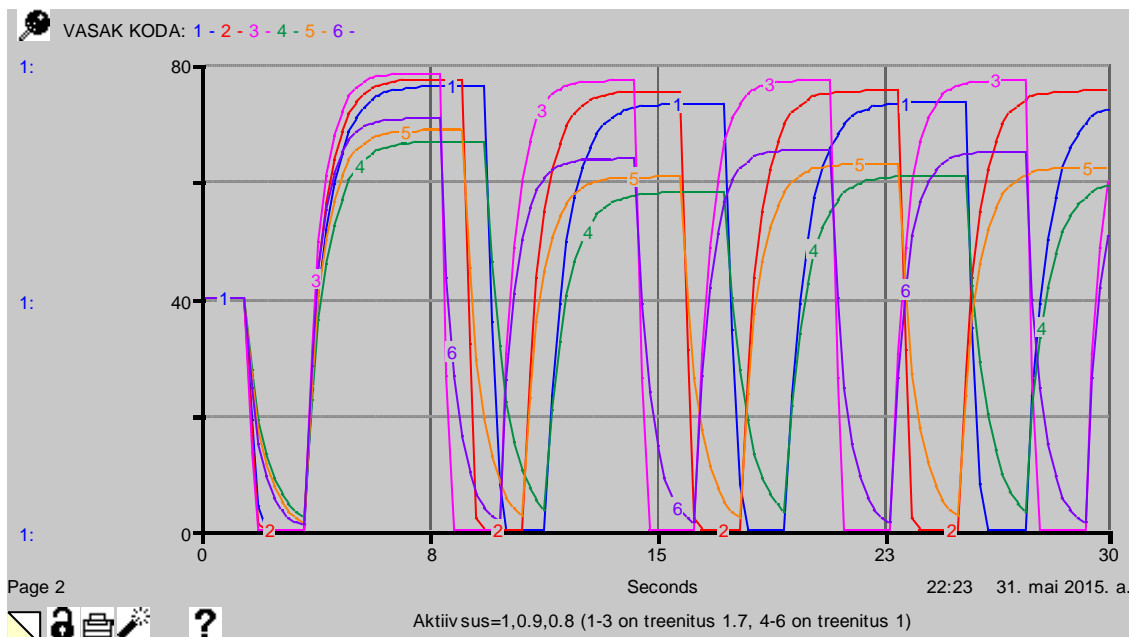
Joonis 2.9. Infarkti faktori mõju vererõhule

Joonistelt 2.8 ja 2.9 näeme, et muutuja *INFARKTI FAKTOR* suurendamine tekitab rütmihäireid vere pumpamisel ja kaob korrapära vererõhul. Süda peab siiski pumpama verd korrapärases rütmis, seega südamekoe kahjustuse suurenemine mõjub südametööle negatiivselt.

Vaatame, kuidas muutujad *AKTIIVSUS* ja *TREENITUS* üksteist mõjutavad. Teeme tundlikkuse analüüsi, kus on järgnevad algväärtused:

Tabel 2.2. Tundlikkuse analüüsi algväärtused

Nr	<i>AKTIIVSUS</i>	<i>TREENITUS</i>
1	1	1,7
2	0,9	1,7
3	0,8	1,7
4	1	1
5	0,9	1
6	0,8	1



Joonis 2.10. Aktiivsuse muutmisel erineva treenitusega saadud tulemused vasaku koja jaoks

Kui võrrelda vasaku koja tööd erinevatel aktiivsuseperioodidel ja erineva treenituse korral, saame tulemused, mis on kujutatud joonisel 2.10. Jooniselt 2.10 on näha, et treenitud inimese süda aktiivse liikumise puhul jaksab rohkem verd pumbata, kui treenimata inimese süda aktiivse liikumise korral.

3. Häiritud liikumise mudel

Selles peatükis käsitleme häiritud liikumise põhimudelit ning seejärel edasiarendust ühtlaselt liikuvale objektile järele jõudmiseks. Põhimudel koos kirjeldusega ning edasiarenduse idee põhinevad raamatul „Dynamic Modeling“ [2].

3.1. Häiritud liikumise põhimudel

Koostame mudeli, mille eesmärgiks on läbida teekond alguspunktist sihtpunkti. Iga tehtud sammu järel muutub liikumissuund ja sammu pikkus. Algasendi koordinaadiks on punkt (0; 0) ning eesmärgiks on jõuda punkti (0; 100), jooksva punkti koordinaadid tähistame (X; Y). Olgu sammu pikkuseks 1 meeter.

Sammu pikkuse ja suuna standardhälbed on samad, neid iseloomustab häiritus. Nimetame seda häirituse määraks ja mida väiksem see määr on, seda väiksem on ka häiritus.

Häiritud liikumist võib ette tulla, kui inimene kõnnib libedal või ebaühtlasel teel, puhub tugev muutuva suunaga tuul, esineb terviserike või on inimene näiteks alkoholihoobes.

Sammu pikkus on normaaljaotusega juhuslik suurus, mille keskvärtus on 1 ja standardhälve on võrdne häirituse määraga, st

$$SAMMU PIKKUS = NORMAL(1, HÄIRITUSE MÄÄR)$$

Kui standardhälvet ehk häirituse määra suurendada, siis see muudab sammu pikkuste hajuvuse suuremaks ehk aina rohkem hakkavad esinema keskvärtusest (antud juhul 1) lühemad ja pikemad sammud. Üle poole sammu pikkustest erinevad keskvärtusest vähem kui standardhälbe võrra ehk kui häirituse määr on näiteks 0,95, siis üle poole sammu pikkustest (täpsemalt 68%) on lõigus $[1 - 0,95; 1 + 0,95] = [0,05; 1,95]$ [9].

Vajalik liikumissuund sõltub asukohast antud ajamomendil ja avaldub järgmise valemiga

$$VAJALIK LIIKUMISSUUND = \begin{cases} \arctan \frac{Y - 100}{X}, & X < 0, \\ \arctan \frac{Y - 100}{X} + \pi, & X \geq 0. \end{cases}$$

Kui inimene on millestki häiritud, siis tõenäoliselt ta ei liigu alati mööda vajalikku liikumissuunda. Tema tegelik liikumise suund on normaaljaotusega juhuslik suurus, mille keskvärtus on vajalik liikumissuund ja standardhälve on häirituse määr, st

TEGELIK LIIKUMISSUUND = NORMAL(VAJALIK LIIKUMISSUUND, HÄIRITUSE MÄÄR).

Tegelik liikumine eesmärgi suunas on defineeritud vastavalt:

$$LIIKUMINE Y = SAMMU PIKKUS \cdot \sin(TEGELIK LIIKUMISSUUND),$$

$$LIIKUMINE X = SAMMU PIKKUS \cdot \cos(TEGELIK LIIKUMISSUUND).$$

Juhtimiste *LIIKUMINE X* ja *LIIKUMINE Y* jaoks on lubatud nii kasvamine kui kahanemine ning ka negatiivsed väärtused, sest võib juhtuda, et inimene liigub hoopis sihtpunktist kaugemale ja/või koguni negatiivsete väärtustega piirkonda.

Kogu teekond on kõikide sammude jooksul läbitud teekondade koguväärtus. Peame oleme tähelepanelikud kõikide sammu pikkuste kokku liitmisel, kuna tuleb arvestada sellega, kas samm tehakse sihtpunkti suunas (positiivsed sammu pikkused) või sihtpunktist eemale (negatiivsed sammu pikkused). Selleks kasutame sammude kokku liitmisel absoluutväärtust:

$$ABS SAMMU PIKKUS = |SAMMU PIKKUS|.$$

Kogu teekond, mille läbib inimene liikudes alguspunktist sihtpunktini, on kõigi sammude absoluutväärtuste summa ehk

$$KOGU TEEKOND = \sum ABS SAMMU PIKKUS.$$

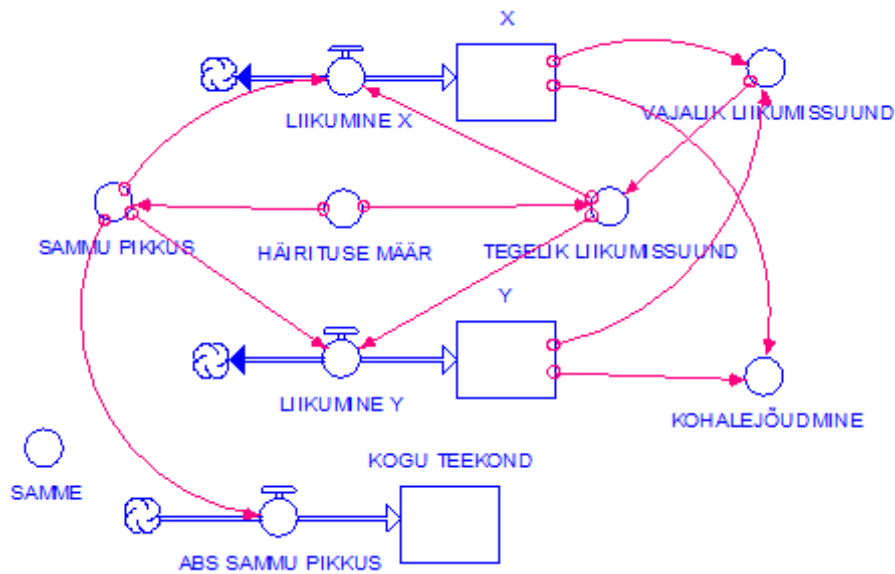
Viimane osa mudelist seisneb selles, et kui inimene on jõudnud piisavalt lähedale oma sihtpunktile, siis ta lõpetab liikumise. Peatame mudeli töö siis kui inimene on vähemalt poole meetri kaugusel sihtpunkti koordinaatidest. Selleks kasutame Stella funktsiooni *PAUSE*. Defineerime kohale jõudmise valemiga:

$$KOHALE JÕUDMINE = \begin{cases} PAUSE, & |X| \leq 0,5 \text{ ja } |100 - Y| \leq 0,5, \\ 0, & \text{muu.} \end{cases}$$

Lisame mudelisse ka funktsiooni (juhtimismuutuja), mis mõõdab sammude arvu ehk mudeli töötamise aega:

$$SAMME = TIME.$$

Tegemist on diskreetse ajaga mudeliga, kus simulatsiooni ajasammuks on liikuja poolt tehtud samm. Valmis mudelit näeme jooniselt 3.1 ning programmikood on toodud lisas 7.

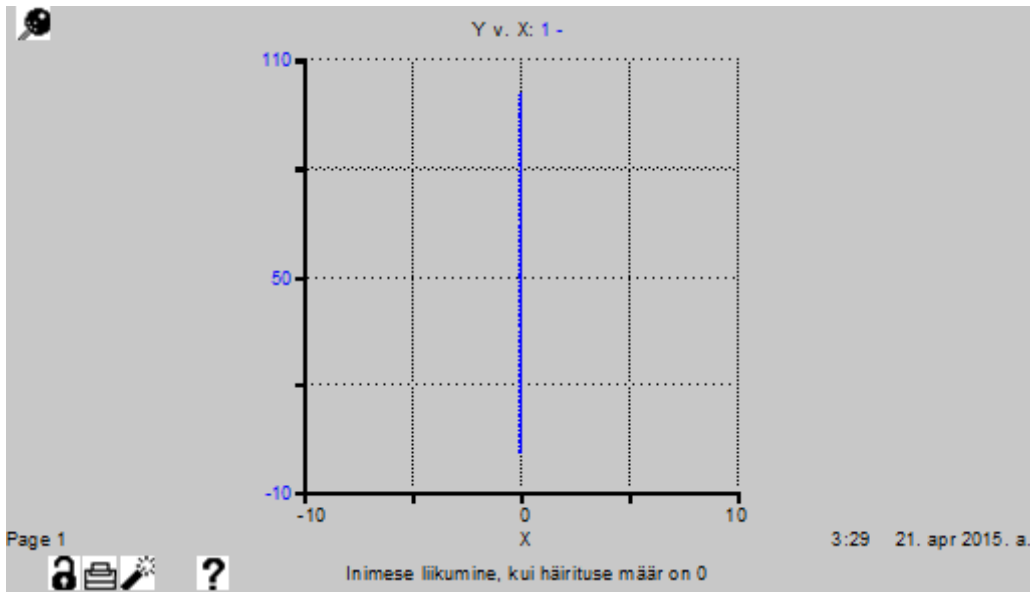


Joonis 3.1. Häiritud liikumise mudel

Kui käivitame mudeli ja inimene on jõudnud sihtpunktile küllalt lähedale, siis Stella peatab mudeli. Edasi saame valida, kas lõpetame mudeli töö või jätkame simulatsiooni. Kui valime mudeli jätkamise, siis võime näha, et inimene võib ajutiselt liikuda sihtpunktist eemale kuni ta jõuab sellele uuesti piisavalt lähedale.

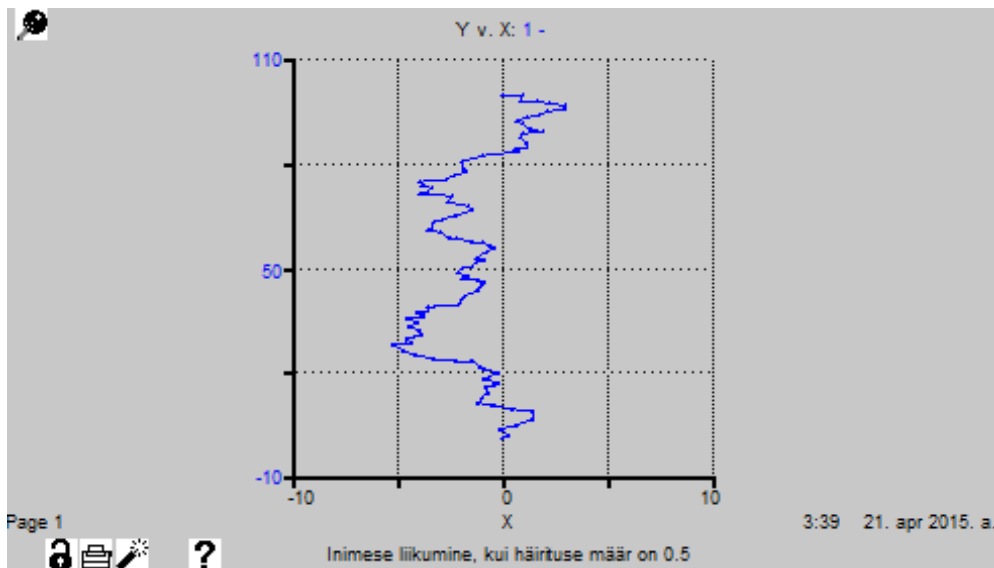
Järgnevalt teeme katseid erinevate häirituse määradega. Näeme, et kui inimene ei ole häiritud või on väga vähe häiritud (häirituse määr on 0 või lähedane nullile), siis tee on sirge või lähedane sirgele joonele. Mida suurem häirituse määr on, seda rohkem inimene liigub eemale sirgest. Ta võib vahepeal liikuda isegi tagurpidi ja aina rohkem kulub aega kohale jõudmiseks. Tehes katseid, on näha, et kui häirituse määr on nullist suurem, siis tee on alati erineva kujuga ja tüüpiliselt on häirituse määra suurendades sammude arv (mudeli töötamise aeg) sihtpunktini jõudmiseks aina pikem.

Esiteks vaatame mudelit, millel häiritust ei ole ehk häirituse määr on 0. Tulemuseks on sirgjooneline liikumine ja sihtpunkti jõudmiseks kulub täpselt 100 sammu. Kuna sammu pikkuse ja tegeliku liikumissuuna standardhälbed on nullid, siis iga sammu pikkus on täpselt 1 meeter ning inimene liigub täpselt mööda vajalikku liikumissuunda. Tulemust on näha joonisel 3.2.



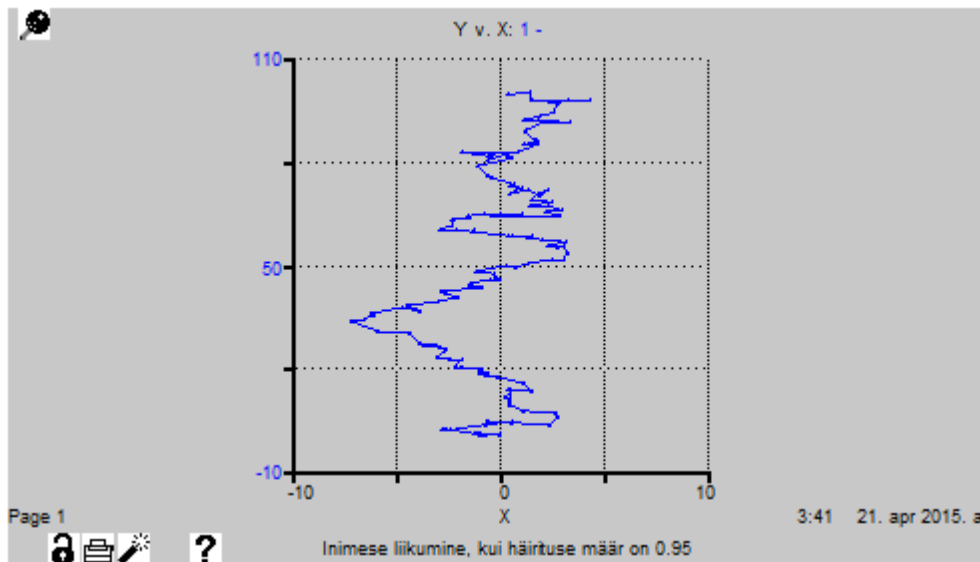
Joonis 3.2. Inimese liikumine, kui häirituse määr on 0

Teiseks teeme katse, kui häirituse määr on 0,5. Järelikult suurendame standardhälbeid ning sammu pikkus ja liikumissuund hakkavad oma keskväärtusest erinema. Sel juhul kulub sihtpunkti jõudmiseks 118,24 meetrit ning samme 119. Liikumise teekond on näha joonisel 3.3.



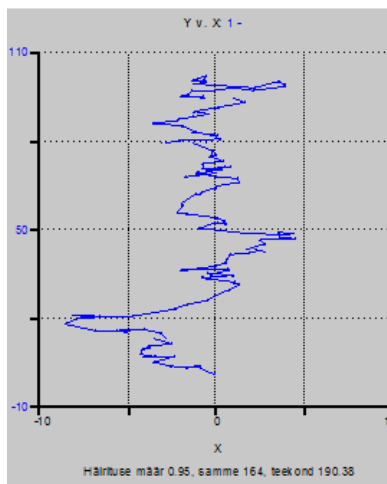
Joonis 3.3. Inimese liikumine, kui häirituse määr on 0,5

Viimaseks võtame häirituse määraks 0,95. Sel juhul on teekonna pikkus 181,98 meetrit ja tehakse 159 sammu. Teekond on joonisel 3.4.

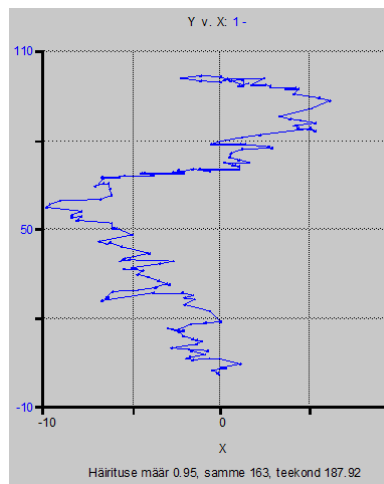


Joonis 3.4. Inimese liikumine, kui häirituse määr on 0,95

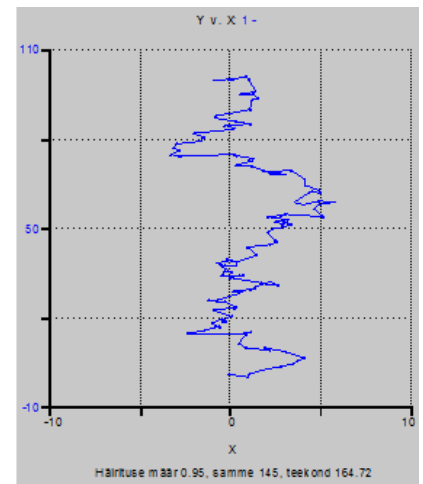
Kui häirituse määr on nullist suurem, siis igal mudeli käivitusel tulevad teekonnad erineva pikkuse, suuna ja kujuga, sest tegu on juhusliku liikumisega. Näitame seda ka jooniste kaudu. Teeme 3 katset, kui häirituse määr on 0,95. Saame järgnevad teekonnad:



Joonis 3.5. Samme 164,
teekond 190,38



Joonis 3.6. Samme 163,
teekond 187,92



Joonis 3.7. Samme 145,
teekond 164,72

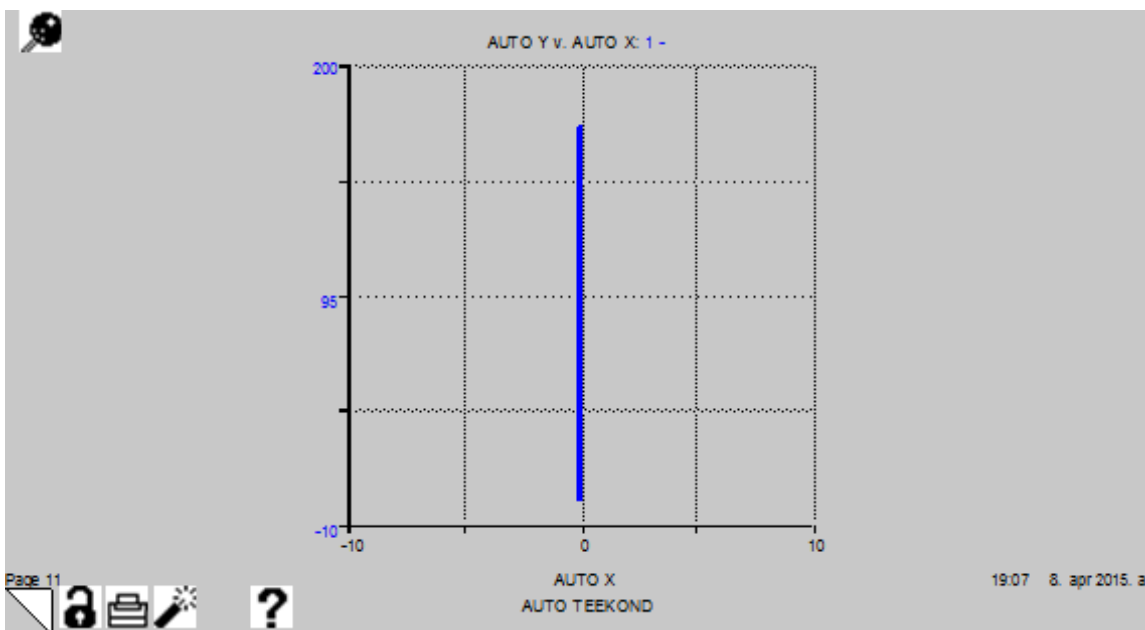
Näeme joonistelt 3.5-3.7, et tõepoolest iga katse erineb eelmisest.

3.2. Häiritud liikumise mudeli arendus ühtlaselt liikuvale objektile järele jõudmiseks

Teeme edasiarenduse häiritud liikumise mudelile. Lisame mudelile auto, mis liigub ühtlaselt ja sirgjooneliselt y -telje sihis. Inimene liigub auto järel ja üritab selleni jõuda. Auto alustab liikumist punktist $(0; 0,1)$ ja inimene punktist $(0; 0)$.

Lisame häiritud liikumise mudelile auto liikumisega seotud muutujad. Auto asukoha koordinaadid tähistame muutujatega $(autoX; autoY)$.

Kuna auto liigub edasi ainult y -telje sihis (vt joonis 3.8), siis auto kiirust muudame juhtimise $AUTO\ KIIRUS\ Y$ kaudu ja auto kiirus x -telje sihis on 0. Juhtimine $AUTO\ KIIRUS\ Y$ võrdub konstantse kiirusega. Auto kiiruse ühik on m/s. Auto liikumise teekond on toodud joonisel 3.8.



Joonis 3.8. Auto teekond

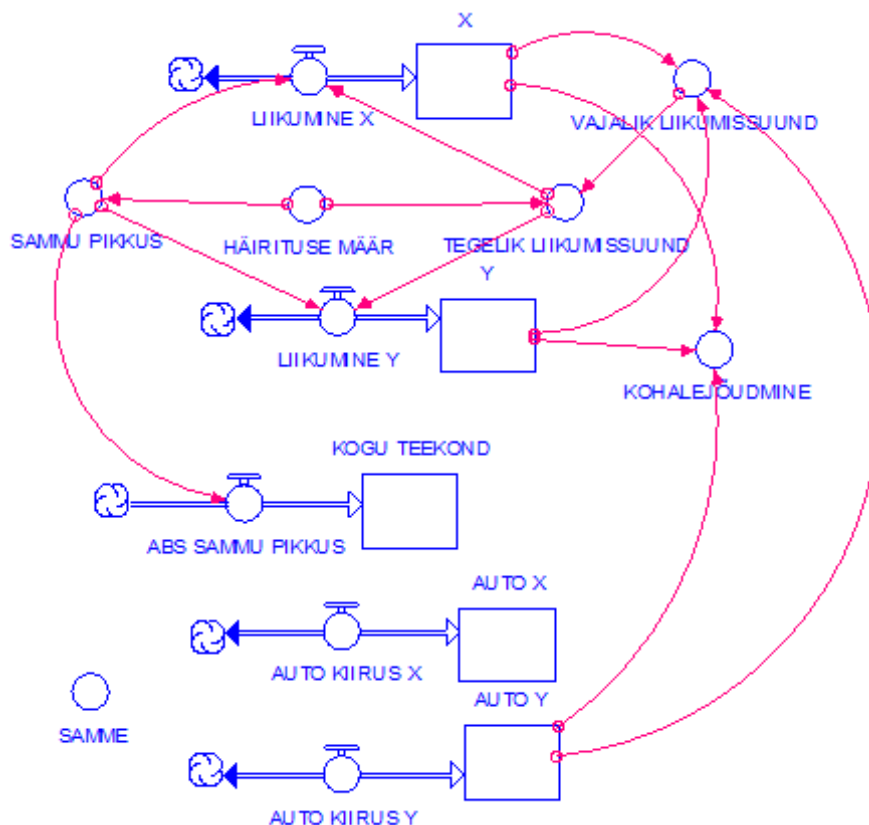
Vajalik liikumissuund sõltub auto y -koordinaadist ning inimese asukohast antud ajamomendil:

$$VAJALIK\ LIIKUMISSUUND = \begin{cases} \arctan \frac{Y - autoY}{X}, & X < 0, \\ \arctan \frac{Y - autoY}{X} + \pi, & X \geq 0. \end{cases}$$

Muutma peame ka sihtpunkti jõudmise tingimusi. Kohalejõudmise kontrollimisel on vaja võrrelda $autoY$ koordinaadiga liikuja y koordinaati. Inimese loeme kohale jõudnuks, kui ta on autost x -telje sihis 0,5 m ja y -telje sihis 0,15 m kaugusel. Tingimusi saab alati muuta endale sobivaks, oleneb kui täpselt kohale jõudmist hinnata tuleb.

$$KOHALE JÕUDMINE = \begin{cases} PAUSE, & |X| \leq 0,5 \text{ ja } |Y - autoY| \leq 0,15, \\ 0, & \text{muu.} \end{cases}$$

Täiendatud mudeli programmikood on toodud lisas 8 ning mudeli skeem joonisel 3.9.



Joonis 3.9. Mudeli arendus ühtlaselt liikuvale objektile järele jõudmiseks

Samamoodi nagu eelmise häiritud liikumise mudeli puhul, tulevad ka sellel mudelil igal käivitusel teekonnad erineva suuna ja pikkusega. Lisaks sõltub kohale jõudmine auto kiirusest, mida saame ise määrata. Kui auto kiirus on liiga suur, siis inimene ei pruugigi autoni jõuda.

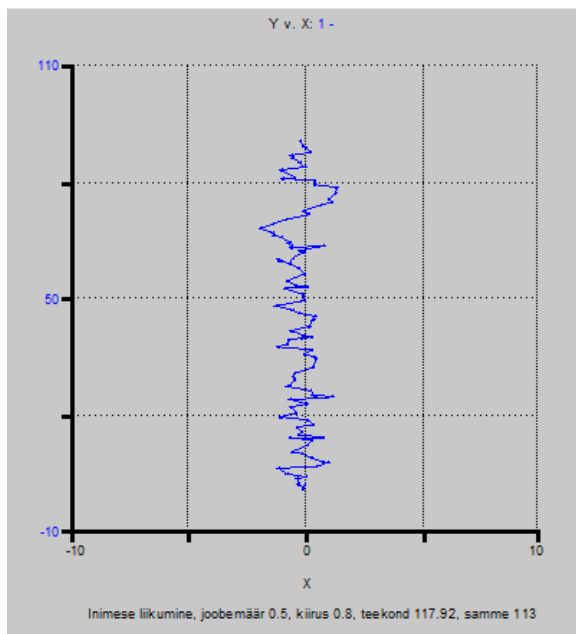
Võtame eesmärgiks otsida autole kiirus, mille korral 0,5 häirituse määraga inimene jõuab vähemalt 250 sammuga autoni. Tehes katseid erinevate auto kiirustega, saame, et umbes

0,8 m/s ehk 2,88 km/h on kõige kiirem kiirus, mille korral inimene jõuab vähemalt 10 järjestikusel katsel (vt tabel 3.1) autoni.

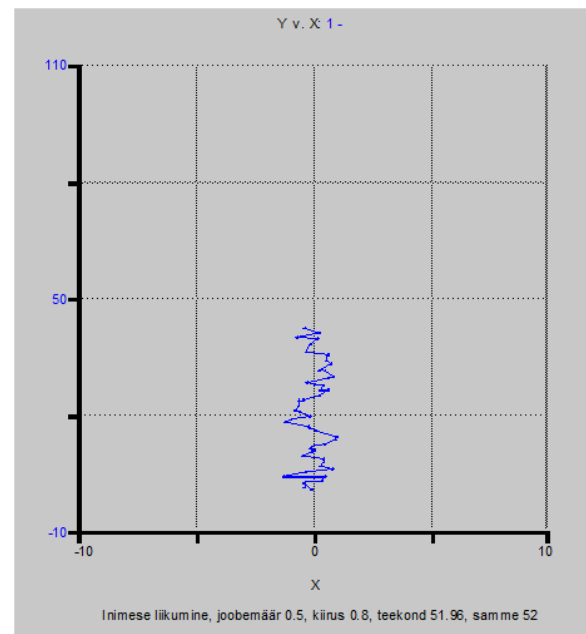
Tabel 3.1. Katsed, kui häirituse määr on 0,5 ja auto kiirus 0,8

Katsed	Teekond	Samme
1.	51,98	52
2.	9,21	7
3.	27,27	28
4.	9,86	7
5.	72,12	71
6.	107,82	116
7.	12,70	11
8.	117,92	112
9.	170,75	169
10.	163,98	155

Nagu näeme tabelist 3.1 on iga katse erineva teekonna pikkuse ning sammude arvuga, varieerudes 9,21 meetrist 170,75 meetrini ning 7 sammust 169 sammuni. Joonistel 3.10 ja 3.11 on võrdluseks toodud katsete 8 ja 1 teekonnad.



Joonis 3.10. Katse 8: inimese liikumine, teekond 117,92, samme 112

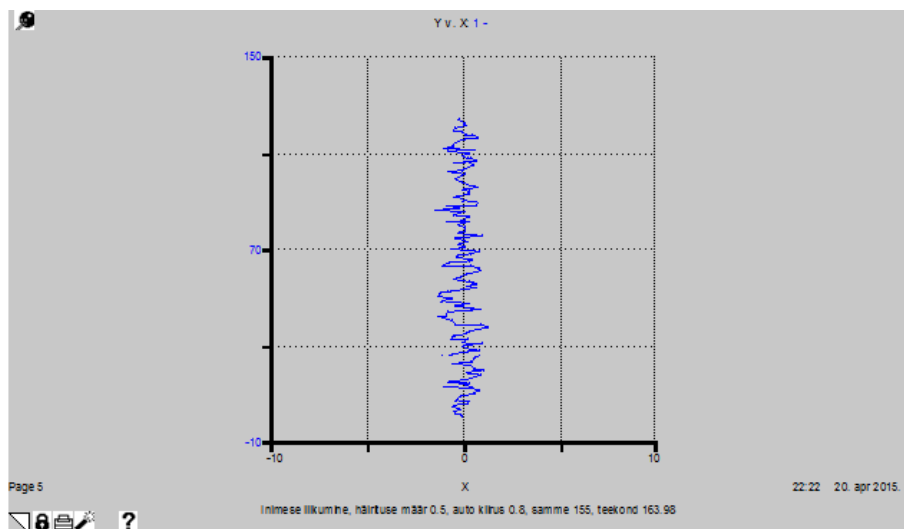


Joonis 3.11. Katse 1: inimese liikumine, teekond 51,98, samme 52

Vaatame näiteks 10. katset. Kui inimene jõuab autoni, siis on ta läbinud 163,98 meetrit. Selle ajaga teeb ta 155 sammu ning on algpunktist 123,96 meetri kaugusel (vt joonis 3.12). Auto teekond on kogu aeg sirgjooneline (vt joonis 3.8) ning inimese teekond on toodud joonisel 3.13.

KOGU TEEKOND	163.98
SAMME	155.0
AUTO Y	124.10
Y	123.96

Joonis 3.12. 10. katse tulemused

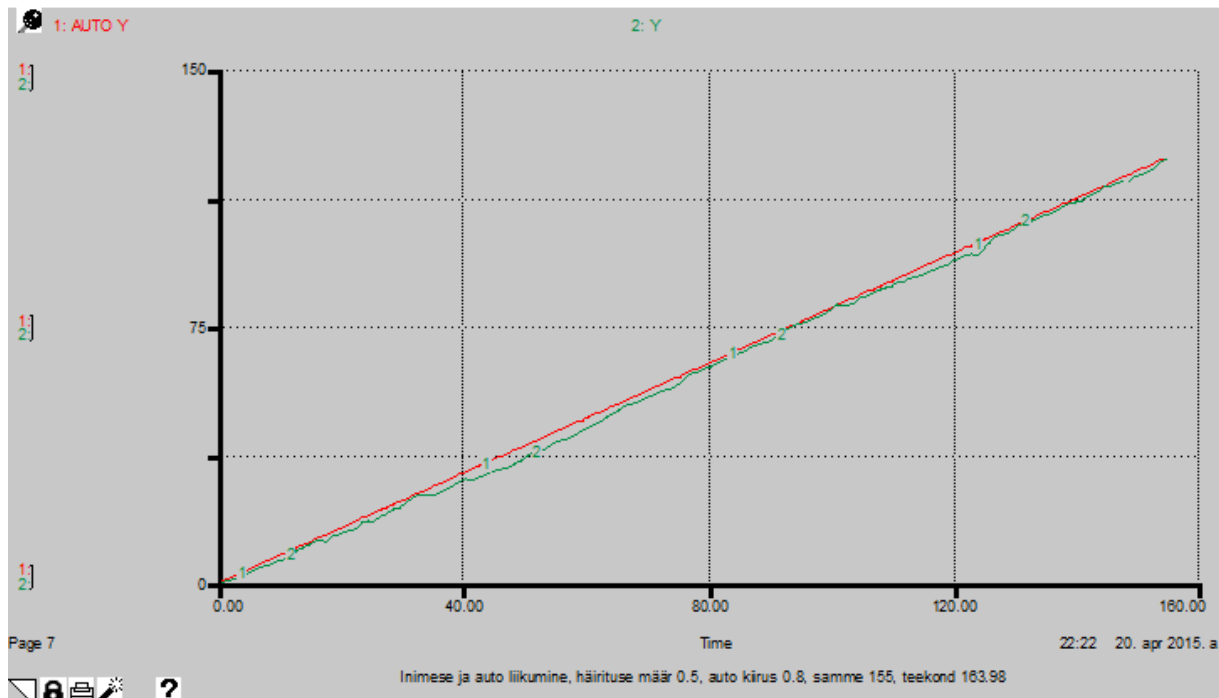


Joonis 3.13. Inimese liikumine, teekond 163,98, samme 155

Kontrollime kohalejõudmise tingimusi. y -telje sihis peab inimene olema autost vähemalt 0,15 meetri kaugusel, lisaks peame arvestama, et auto alustas liikumist inimesest 0,1 meetrit eestpoolt. Mudeli peatumise ajaks on auto oma algpunktist 124,10 meetri ning inimene 123,96 meetri kaugusel. Vaadates lõpp-punkte, näeme, et nende vahe on 0,14 meetrit ning lisaks oli inimene algselt 0,1 meetrit kaugemal kui auto. Seega auto ja inimene on üksteisest 0,15 meetri kaugusel ja kohalejõudmise tingimus kehtib.

Tabelites 3.2 ja 3.3 on toodud inimese ja auto liikumise koordinaadid ning kogu teekonna pikkused simulatsiooni jaoks.

Joonisel 3.14 on toodud auto ja inimese liikumine ajas. Punane joon on auto liikumine, mis on sirgjooneline ning roheline inimese liikumine, mis on kõverjooneline ning juhuslik. Jooned lõppevad punktis, kus auto ja inimene kohtuvad.



Joonis 3.14. Inimese ja auto liikumine, teekond 163,98, samme 155

22:22 20. apr 2015. a. Table 1 (häirituse määr 0.5, auto kiirus 0.8, samme 155, teekond 163.98)

Time	KOGU TEEK	X	Y	AUTO Y	AUTO X
0	0,00	0,00	0,00	0,10	0,00
1	0,25	-0,07	0,24	0,90	0,00
2	0,97	-0,38	0,89	1,70	0,00
3	1,77	-0,42	1,69	2,50	0,00
4	2,44	-0,03	2,23	3,30	0,00
5	3,25	-0,18	3,03	4,10	0,00
6	4,32	-0,46	4,06	4,90	0,00
7	4,67	-0,41	4,40	5,70	0,00
8	5,64	0,24	5,12	6,50	0,00
9	6,65	0,34	6,14	7,30	0,00
10	7,43	-0,32	6,54	8,10	0,00
11	8,84	-0,14	7,94	8,90	0,00
12	9,98	0,55	8,85	9,70	0,00
13	10,78	0,65	9,65	10,50	0,00
14	11,81	0,88	10,65	11,30	0,00
15	12,68	0,52	11,45	12,10	0,00
16	14,30	-0,91	12,19	12,90	0,00
17	15,79	0,54	11,83	13,70	0,00
18	17,42	-0,13	13,33	14,50	0,00
19	17,94	0,32	13,59	15,30	0,00
20	19,13	-0,69	14,23	16,10	0,00
21	20,13	0,15	14,78	16,90	0,00
22	20,93	0,43	15,53	17,70	0,00
23	22,74	0,99	17,25	18,50	0,00
24	23,60	0,32	17,79	19,30	0,00
25	23,68	0,25	17,84	20,10	0,00
26	25,24	1,13	19,13	20,90	0,00
27	26,07	0,65	19,80	21,70	0,00
28	27,40	0,44	21,11	22,50	0,00
29	28,53	-0,47	21,78	23,30	0,00
30	29,99	0,55	22,84	24,10	0,00
31	31,07	0,63	23,92	24,90	0,00
32	32,38	0,88	25,20	25,70	0,00

Tabel 3.2. 10. katse tulemuste tabel, kui $t=[0;32]$

22:22 20. apr 2015. a. Table 1 (häirituse määr 0.5, auto kiirus 0.8, samme 155, teekond 163.98)

Time	KOGU TEEK	X	Y	AUTO Y	AUTO X	
123	128,51	0,66	95,80	98,50	0,00	
124	128,69	0,63	95,62	99,30	0,00	
125	130,45	0,01	97,27	100,10	0,00	
126	132,33	-0,37	99,12	100,90	0,00	
127	134,24	0,16	100,95	101,70	0,00	
128	135,50	-0,72	101,85	102,50	0,00	
129	136,33	-0,01	102,28	103,30	0,00	
130	137,00	0,10	102,95	104,10	0,00	
131	138,70	0,61	104,57	104,90	0,00	
132	140,12	0,42	105,97	105,70	0,00	
133	140,99	-0,40	105,70	106,50	0,00	
134	142,39	0,75	106,49	107,30	0,00	
135	143,32	0,43	107,35	108,10	0,00	
136	143,69	0,28	107,70	108,90	0,00	
137	144,62	0,04	108,59	109,70	0,00	
138	145,84	0,37	109,76	110,50	0,00	
139	147,16	-0,71	110,52	111,30	0,00	
140	148,71	0,65	111,27	112,10	0,00	
141	150,35	-0,92	111,71	112,90	0,00	
142	151,12	-0,50	112,36	113,70	0,00	
143	152,29	-0,41	113,53	114,50	0,00	
144	153,41	-0,20	114,63	115,30	0,00	
145	154,61	0,14	115,78	116,10	0,00	
146	155,35	0,83	116,01	116,90	0,00	
147	156,14	0,79	116,81	117,70	0,00	
148	156,57	0,49	117,13	118,50	0,00	
149	156,93	0,21	117,34	119,30	0,00	
150	158,44	-0,00	118,84	120,10	0,00	
151	159,11	-0,45	119,34	120,90	0,00	
152	159,97	-0,39	120,20	121,70	0,00	
153	160,93	0,22	120,94	122,50	0,00	
154	162,40	0,14	122,41	123,30	0,00	
Final	163,98	-0,15	123,96	124,10	0,00	

Tabel 3.3. 10. katse tulemuste tabel jätkub, $t=[123;155]$

Kokkuvõte

Esimeses peatükis tegeletakse keemiliste reaktsioonide matemaatilise modelleerimisega. Kõigi keemiliste reaktsioonide mudelite juures vaadeldakse reaktsiooni kiiruseid ning lahendatakse diferentsiaalvõrrandid analüütiliselt. Alustatakse kõige lihtsamast ühesuunalisest reaktsioonist ning seejärel lisatakse mudelile juurde veel üks produkt. Alguses on reagenti ära reageerimine ja uue aine teke väga kiire, kuid edaspidi reaktsioon aeglustub ja lõpeb siis, kui kogu ainest on saanud lõpp-produkt. Pöördreaktsiooni puhul jäävad ainete kontsentratsioonid tasakaalu – mõlemat ainet tekib juurde sama palju kui laguneb. Iseseisva tööna on lahendatud diferentsiaalvõrrandite süsteemid analüütiliselt ja koostatud mudel kahe produktiga keemilise reaktsiooni jaoks.

Brüsselaator sisaldab nelja reaktsiooni. Meie uurime vaid kahte vaheühendit, mis on seotud autokatalüütilise protsessiga. Leitakse püsipunkt ja tehakse tundlikkuse analüüs erinevate algtingimuste korral. Jõutakse järeldusele, et kasutatud algtingimuste korral koondub süsteem samasse piirtsükklisse.

Katalüüsitud produkti mudel sisaldab nelja reaktsiooni. Selles mudelis vaadeldakse kõiki reaktsioonis osalevaid aineid. Iseseisva tööna on koostatud reaktsioonidele vastav kiiruste tabel, mudelist on elimineeritud kaks ainet ja veendutakse, et see ei mõjuta ainete kontsentratsioonide muutumist. Iseseisvalt on tehtud mudeli arendus selleks, et reagent otsa ei lõppeks, lisades seda igal ajasammul juurde.

Teises peatükis uuritakse inimese südame tööd. Uuritakse, kuidas mõjuvad erinevad faktorid pumbatavale verekogusele, südame kiirusele ning vererõhule. Treenitus kasvatab südametöö efektiivsust ning muudab vererõhu madalamaks. Magava inimese südame töö on aeglasem ja pumbatav verekogus madalam kui liikuva inimese näitajad. Südamekoe kahjustus muudab südamerütmi korrapäratuks. Treenitud inimese süda aktiivse liikumise puhul jaksab rohkem verd pumbata, kui treenimata inimese aktiivse liikumise korral. Iseseisva tööna on tehtud mudeli tundlikkuse analüüsid erinevate treenituse ja aktiivsuse jaoks.

Kolmandas peatükis koostatakse häiritud liikumise mudel ning seejärel iseseisva tööna on tehtud edasiarendus ühtlaselt liikuvale objektile järele jõudmiseks. Mudelisse lisatakse auto liikumisele vastavad põhimuutujad. Eesmärk on inimesel autoni jõuda. Teekonna pikkus, suund ja kuju on igal mudeli käivitusel erinev, kuna mudelis kasutatakse juhuslikke suurusi. Kui häirituse määra suurendada, siis teepikkus sihtpunktini jõudmiseks kasvab.

Kasutatud kirjandus

- [1] B. Hannon, M. Ruth, *Modeling Dynamic Biological Systems*, Springer-Verlag, New York, 1997.
- [2] B. Hannon, M. Ruth, *Dynamic Modeling*, Springer-Verlag, New York, 1994.
- [3] P. Atkins, L. Jones, toimetanud P. Burk, *Keemia alused: teekond teadmiste juurde*, Tartu Ülikooli Kirjastus, Tartu, 2012.
- [4] Ü. Lepik, J. Engelbrecht, *Kaoseraamat*, Teaduste Akadeemia Kirjastus, 1999.
- [5] Isee systems - *Reversible Reactions*
http://www.iseesystems.com/XMILE/index.php?route=product/product&path=59_64&product_id=92 (viimati vaadatud 28.05.2015).
- [6] A. Pedas, G. Vainikko, *Harilikud diferentsiaalvõrrandid*, Tartu Ülikooli Kirjastus, Tartu, 2011.
- [7] IDEA, *Brusselator Model of Oscillating Chemical Reactions*
<http://www.idea.wsu.edu/OscilChem/#Brusselator Model> (viimati vaadatud 3.06.2015).
- [8] M. Smith, *The Mathematics of the Brusselator*
<http://meyerhoff.goucher.edu/verge1/submissions/SmithFIN.pdf> (viimati vaadatud 28.05.2015).
- [9] K. Pärna, *Tõenäosusteooria algkursus*, Tartu Ülikooli Kirjastus, Tartu, 2013.

Lisad

Lisa 1. Ühesuunalise reaktsiooni programmikood Stellas

- $\text{PRODUKT_Y}(t) = \text{PRODUKT_Y}(t - dt) + (\text{REAKTSIOON}) * dt$
INIT $\text{PRODUKT_Y} = 0$
INFLOWS:
 - $\text{REAKTSIOON} = K1 * \text{REAGENT_X}$
- $\text{REAGENT_X}(t) = \text{REAGENT_X}(t - dt) + (- \text{REAKTSIOON}) * dt$
INIT $\text{REAGENT_X} = 1$
OUTFLOWS:
 - $\text{REAKTSIOON} = K1 * \text{REAGENT_X}$
- $K1 = 0.1$

Lisa 2. Kahe produktiga keemilise reaktsiooni mudeli programmikood Stellas

- $\text{PRODUKT_Y}(t) = \text{PRODUKT_Y}(t - dt) + (\text{REAKTSIOON_1} - \text{REAKTSIOON_2}) * dt$
INIT $\text{PRODUKT_Y} = 0$
INFLOWS:
 - $\text{REAKTSIOON_1} = K1 * \text{REAGENT_X}$OUTFLOWS:
 - $\text{REAKTSIOON_2} = \text{PRODUKT_Y} * K2$
- $\text{PRODUKT_Z}(t) = \text{PRODUKT_Z}(t - dt) + (\text{REAKTSIOON_2}) * dt$
INIT $\text{PRODUKT_Z} = 0$
INFLOWS:
 - $\text{REAKTSIOON_2} = \text{PRODUKT_Y} * K2$
- $\text{REAGENT_X}(t) = \text{REAGENT_X}(t - dt) + (- \text{REAKTSIOON_1}) * dt$
INIT $\text{REAGENT_X} = 1$
OUTFLOWS:
 - $\text{REAKTSIOON_1} = K1 * \text{REAGENT_X}$
- $K1 = 0.1$
- $K2 = 0.11$

Lisa 3. Pöördreaktsiooni programmikood Stellas

- $\text{PRODUKT_Y}(t) = \text{PRODUKT_Y}(t - dt) + (\text{REAKTSIOON} - \text{PÖÖRDREAKTSIOON}) * dt$
INIT $\text{PRODUKT_Y} = 0$
INFLOWS:
 - $\text{REAKTSIOON} = K1 * \text{REAGENT_X}$OUTFLOWS:
 - $\text{PÖÖRDREAKTSIOON} = K2 * \text{PRODUKT_Y}$
- $\text{REAGENT_X}(t) = \text{REAGENT_X}(t - dt) + (\text{PÖÖRDREAKTSIOON} - \text{REAKTSIOON}) * dt$
INIT $\text{REAGENT_X} = 1$
INFLOWS:
 - $\text{PÖÖRDREAKTSIOON} = K2 * \text{PRODUKT_Y}$OUTFLOWS:
 - $\text{REAKTSIOON} = K1 * \text{REAGENT_X}$
- $K1 = 0.1$
- $K2 = 0.1$


Lisa 4. Brüsselaatori programmikood Stellas

- $X(t) = X(t - dt) + (\text{delta_X}) * dt$
INIT $X = 1$
INFLOWS:
 - $\text{delta_X} = A + X^2 * Y - B * X - X$
- $Y(t) = Y(t - dt) + (\text{delta_Y}) * dt$
INIT $Y = 2.5$
INFLOWS:
 - $\text{delta_Y} = B * X - X^2 * Y$
- $A = 0.7$
- $B = 2$

Lisa 5. Katalüüsitud produkti mudeli programmikood Stellas

- $D(t) = D(t - dt) + (- \text{delta_D}) * dt$
INIT D = 100 {moole kuupmeetri kohta}
OUTFLOWS:
 - ↔ $\text{delta_D} = K1 * D * E - K2 * I$
- $E(t) = E(t - dt) + (- \text{delta_E}) * dt$
INIT E = 20 {moole kuupmeetri kohta}
OUTFLOWS:
 - ↔ $\text{delta_E} = K1 * D * E - (K2 + K3) * I$
- $F(t) = F(t - dt) + (\text{delta_F}) * dt$
INIT F = 0 {moole kuupmeetri kohta}
INFLOWS:
 - ↔ $\text{delta_F} = K3 * I$
- $I(t) = I(t - dt) + (\text{delta_I}) * dt$
INIT I = 10 {moole kuupmeetri kohta}
INFLOWS:
 - ↔ $\text{delta_I} = K1 * D * E - (K2 + K3) * I$
- K1 = 0.01
- K2 = 0.01
- K3 = 0.5

Lisa 6. Südametöö mudeli programmikood Stellas

- $PAREM_KODA(t) = PAREM_KODA(t - dt) + (\ddot{O}ONESVEEN - H\ddot{O}LMANE_KLAPP1) * dt$
 INIT PAREM_KODA = 40
 INFLOWS:
 - $\ddot{O}ONESVEEN = AORT$
 OUTFLOWS:
 - $H\ddot{O}LMANE_KLAPP1 = SMTH1(STIMULAATOR1 * TREENITUS, PIKLIKAJU * 1)$
 - $PAREM_VATSAKE(t) = PAREM_VATSAKE(t - dt) + (H\ddot{O}LMANE_KLAPP1 - KOPSUARTER) * dt$
 INIT PAREM_VATSAKE = 40
 INFLOWS:
 - $H\ddot{O}LMANE_KLAPP1 = SMTH1(STIMULAATOR1 * TREENITUS, PIKLIKAJU * 1)$
 OUTFLOWS:
 - $KOPSUARTER = DELAY(AV_S\ddot{O}LM2, 1)$
 - $VASAK_KODA(t) = VASAK_KODA(t - dt) + (KOPSUVEEN - H\ddot{O}LMANE_KLAPP2) * dt$
 INIT VASAK_KODA = 40
 INFLOWS:
 - $KOPSUVEEN = SMTH1(KOPSUARTER, PIKLIKAJU * 1)$
 OUTFLOWS:
 - $H\ddot{O}LMANE_KLAPP2 = SMTH1(STIMULAATOR2 * TREENITUS, PIKLIKAJU * 1)$
 - $VASAK_VATSAKE(t) = VASAK_VATSAKE(t - dt) + (H\ddot{O}LMANE_KLAPP2 - AORT) * dt$
 INIT VASAK_VATSAKE = 40
 INFLOWS:
 - $H\ddot{O}LMANE_KLAPP2 = SMTH1(STIMULAATOR2 * TREENITUS, PIKLIKAJU * 1)$
 OUTFLOWS:
 - $AORT = DELAY(AV_S\ddot{O}LM1, 1)$
 - AKTIIVSUS = 1
 - $AV_S\ddot{O}LM1 = PULSE(VASAK_VATSAKE, L\ddot{A}BILASKVUS, PIKLIKAJU)$
 - $AV_S\ddot{O}LM2 = PULSE(PAREM_VATSAKE, L\ddot{A}BILASKVUS, PIKLIKAJU)$
 - INFARKTI_FAKTOR = 1.1
 - $L\ddot{A}BILASKVUS = 2 * INFARKTI_FAKTOR$
 - $PIKLIKAJU = 8 * AKTIIVSUS$
 - $STIMULAATOR1 = PULSE(PAREM_KODA, 1, PIKLIKAJU)$
 - $STIMULAATOR2 = PULSE(VASAK_KODA, 1, PIKLIKAJU)$
 - TREENITUS = 1
 - R\ddot{O}HK = GRAPH(VASAK_VATSAKE)
-  (0.00, 113), (12.0, 116), (24.0, 119), (36.0, 119), (48.0, 118), (60.0, 115), (72.0, 107), (84.0, 93.6), (96.0, 69.0), (108, 42.0), (120, 5.00)

Lisa 7. Häiritud liikumise programmikood Stellas

- $KOGU_TEEKOND(t) = KOGU_TEEKOND(t - dt) + (ABS_SAMMU_PIKKUS) * dt$
INIT KOGU_TEEKOND = 0
INFLOWS:
 - ↔ $ABS_SAMMU_PIKKUS = ABS(SAMMU_PIKKUS)$
- $X(t) = X(t - dt) + (LIKUMINE_X) * dt$
INIT X = 0
INFLOWS:
 - ↔ $LIKUMINE_X = SAMMU_PIKKUS * COS(TEGELIK_LIKUMISSUUND)$
- $Y(t) = Y(t - dt) + (LIKUMINE_Y) * dt$
INIT Y = 0
INFLOWS:
 - ↔ $LIKUMINE_Y = SAMMU_PIKKUS * SIN(TEGELIK_LIKUMISSUUND)$
- HÄIRITUSE_MÄÄR = 1
- KOHALEJÕUDMINE = IF (ABS(X)<0.5) AND (ABS(100-Y)<0.5) THEN PAUSE ELSE 0
- SAMME = TIME
- SAMMU_PIKKUS = NORMAL(1,HÄIRITUSE_MÄÄR)
- TEGELIK_LIKUMISSUUND = NORMAL(VAJALIK_LIKUMISSUUND,HÄIRITUSE_MÄÄR)
- VAJALIK_LIKUMISSUUND = IF X<0 THEN ARCTAN((Y-100)/(X)) ELSE ARCTAN((Y-100)/(X)) + PI

Lisa 8. Ühtlaselt liikuva objektile järele jõudmise mudeli programmikood Stellas

- $AUTO_X(t) = AUTO_X(t - dt) + (AUTO_KIIRUS_X) * dt$
INIT AUTO_X = 0
INFLOWS:
 - ↔ $AUTO_KIIRUS_X = 0$
- $AUTO_Y(t) = AUTO_Y(t - dt) + (AUTO_KIIRUS_Y) * dt$
INIT AUTO_Y = 0.1
INFLOWS:
 - ↔ $AUTO_KIIRUS_Y = 0.8$
- $KOGU_TEEKOND(t) = KOGU_TEEKOND(t - dt) + (ABS_SAMMU_PIKKUS) * dt$
INIT KOGU_TEEKOND = 0
INFLOWS:
 - ↔ $ABS_SAMMU_PIKKUS = ABS(SAMMU_PIKKUS)$
- $X(t) = X(t - dt) + (LIKUMINE_X) * dt$
INIT X = 0
INFLOWS:
 - ↔ $LIKUMINE_X = SAMMU_PIKKUS * COS(TEGELIK_LIKUMISSUUND)$
- $Y(t) = Y(t - dt) + (LIKUMINE_Y) * dt$
INIT Y = 0
INFLOWS:
 - ↔ $LIKUMINE_Y = SAMMU_PIKKUS * SIN(TEGELIK_LIKUMISSUUND)$
- HÄIRITUSE_MÄÄR = 0.5
- KOHALEJÕUDMINE = IF (ABS(X)<0.5) AND (ABS(Y-AUTO_Y)<0.15) THEN PAUSE ELSE 0
- SAMME = TIME
- SAMMU_PIKKUS = NORMAL(1,HÄIRITUSE_MÄÄR)
- TEGELIK_LIKUMISSUUND = NORMAL(VAJALIK_LIKUMISSUUND,HÄIRITUSE_MÄÄR)
- VAJALIK_LIKUMISSUUND = IF X<0 THEN ARCTAN((Y-AUTO_Y)/(X)) ELSE ARCTAN((Y-AUTO_Y)/(X)) + PI

Lihtlitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja lõputöö üldsusele kättesaadavaks tegemiseks

Mina, Marite Rammo (02.04.1993),

1. annan Tartu Ülikoolile tasuta loa (lihtlitsentsi) enda loodud teose „Keemiliste reaktsioonide, südametöö ja häiritud liikumise modelleerimine programmiga Stella“, mille juhendaja on Ella Puman;
 - 1.1. reprodutseerimiseks säilitamise ja üldsusele kättesaadavaks tegemise eesmärgil, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace lisamise eesmärgil kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni;
 - 1.2. üldsusele kättesaadavaks tegemiseks Tartu Ülikooli veebikeskkonna kaudu, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace kaudu kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni.
2. olen teadlik, et punktis 1 nimetatud õigused jäävad alles ka autorile.
3. kinnitan, et lihtlitsentsi andmisega ei rikuta teiste isikute intellektuaalomandi ega isikuandmete kaitse seadusest tulenevaid õigusi.

Tartus, 05.06.2015