Разработка программного инструмента для построения стохастических траекторий модели Селькова-Строгаца

Арцыбашев Г.И., МЕН 300206

25.12.2022

Содержание

1 Введение

Данная работа посвящена разработке программы для построения стохастических траекторий модели Селькова-Строгаца.

Рассматриваемая модель описывает колебания в химических реакциях диоксида хлора, иода и малоновой кислоты. Эти колебания носят название гликолиза: распад глюкозы и других сахаров. В 1994 году Строгац предложил динамическую модель, состоящую из двух дифференциальных уравнений для описания динамики реагентов.

2 Описание и анализ модели

Математическая форма записи модели Селькова-Строгаца выглядит следующим образом

$$\begin{cases} \dot{x} = -x + \alpha y + x^2 y \\ \dot{y} = \beta - \alpha y - x^2 y. \end{cases}$$

Здесь переменные x и y — концентрации, соответственно, продукта и субстрата, α и β — положительные кинетические параметры.

Система имеет одну точку покоя с координатами

$$\begin{cases} \bar{x} = \beta, \\ \bar{y} = \frac{\beta}{\alpha + \beta^2} \end{cases}$$

Здесь и далее мы зафиксируем параметр $\alpha = 0.1$ и будем рассматривать динамику системы в зависимости от параметра β. Тогда точка покоя $(\bar{x}, \bar{y})$ имеет четыре возможных типа:

- $0 < \beta \leq 0.161975$ и $\beta \geq 2.381$ — устойчивый узел
- $0.161975 < \beta < 0.419992$ и $0.789688 < \beta < 2.381$ — устойчивый фокус
- $\beta = 0.419992$ и $\beta = 0.789688$ — центр
- $0.419992 < \beta < 0.789688$ — неустойчивый фокус

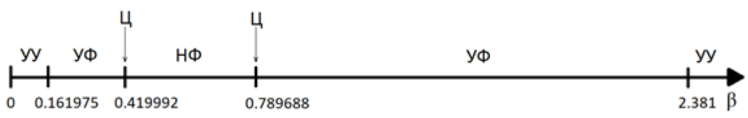

Рис. 1: Тип точки покоя в зависимости от параметра β (УУ – устойчивый узел, УФ – устойчивый фокус, НФ – неустойчивый фокус, Ц – центр)

В дальнейшем будет рассматриваться следующая стохастическая система

$$\begin{cases} \dot{x} = -x + 0.1y + x^2 y + \varepsilon \dot{w}_1 \\ \dot{y} = \beta - 0.1y - x^2 y + \varepsilon \dot{w}_2, \end{cases}$$

где ε — интенсивность случайных возмущений, а $w_1(t)$ и $w_2(t)$ — независимые винеровские процессы.

3 Численный метод решения систем дифференциальных уравнений

3.1 Определения

Прежде чем переходить к компьютерному моделированию стохастических траекторий, необходимо рассмотреть численный метод решения СДУ.

Рассмотрим задачу Коши для системы дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, y) \\ \dot{y} = g(x, y) \end{cases}$$

с начальными условиями

$$x(0) = x_0$$
$$y(0) = y_0.$$

Пусть пара функций $x(t)$, $y(t)$ является решением этой задачи Коши. Для дискретизации временного отрезка $[t_0, t_0 + T]$ разобьем его на N частей узлами $t_0 < t_1 < ... < t_N = t_0 + T$ с шагом $h = \frac{T}{N} : t_{m+1} = t_m + h$.

Для дискретизации функций обозначим через x_m, y_m приближенное значение для неизвестного точного решения $x(t_m)$, $y(t_m)$ в момент t_m. Для расчета x_m, y_m будем использовать метод Рунге — Кутта.

3.2 Метод Рунге — Кутта четвертого порядка

Расчет приближенных значений ведется по формулам:

$$
\begin{gathered}
x_{m+1} = x_m + \tfrac{1}{6}\left(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4\right) \\
y_{m+1} = y_m + \tfrac{1}{6}\left(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4\right) \\
K_1 = hf(x_m, y_m),\ L_1 = hg(x_m, y_m) \\
K_2 = hf\left(x_m + \tfrac{K_1}{2}, y_m + \tfrac{L_1}{2}\right),\ L_2 = hg\left(x_m + \tfrac{K_1}{2}, y_m + \tfrac{L_1}{2}\right) \\
K_3 = hf\left(x_m + \tfrac{K_2}{2}, y_m + \tfrac{L_2}{2}\right),\ L_3 = hg\left(x_m + \tfrac{K_2}{2}, y_m + \tfrac{L_2}{2}\right) \\
K_4 = hf\left(x_m + K_3, y_m + L_3\right),\ L_4 = hg\left(x_m + K_3, y_m + L_3\right)
\end{gathered}
$$

```
function [xInc, yInc] = calcNumericalSchemeRungeKutt( ...
    paramB, ...
    point, ...
    h)
    %   Численная схема метода Рунге — Кутта четвертого порядка
    K1 = h * f(point.X, point.Y);
    L1 = h * g(point.X, point.Y, paramB);
    K2 = h * f(point.X + K1 / 2, point.Y + L1 / 2);
    L2 = h * g(point.X + K1 / 2, point.Y + L1 / 2, paramB);
    K3 = h * f(point.X + K2 / 2, point.Y + L2 / 2);
    L3 = h * g(point.X + K2 / 2, point.Y + L2 / 2, paramB);
    K4 = h * f(point.X + K3, point.Y + L3);
    L4 = h * g(point.X + K3, point.Y + L3, paramB);
    xInc = (K1 + 2 * K2 + 2 * K3 + K4) / 6;
    yInc = (L1 + 2 * L2 + 2 * L3 + L4) / 6;
end
```

Рис. 2: Код численной схемы метода Рунге — Кутта четвертого порядка

```
function [val] = f(x, y)
    val = -x + 0.1 * y + x * x * y;
end

function [val] = g(x, y, b)
    val = b - 0.1 * y - x * x * y;
end
```

Рис. 3: Код функций f и g, описывающих систему с зафиксированным параметром $\alpha = 0.1$ ($f(x,y) = -x + 0.1 \cdot y + x \cdot x \cdot y$, $g(x,y,\beta) = \beta - 0.1 \cdot y - x \cdot x \cdot y$)

4 Компьютерное моделирование стохастических траекторий

Рассмотрим систему со случайными возмущениями

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x,y) + \varepsilon \dot{w}_1 \\ \dot{y} = g(x,y) + \varepsilon \dot{w}_2, \end{cases}$$

где ε — интенсивность случайных возмущений, а $w_1(t)$ и $w_2(t)$ — независимые винеровские процессы.

Расчет приближенных значений на основе метода Рунге — Кутта четвертого порядка ведется по формулам

$$x_{m+1} = x_m + \tfrac{1}{6}\left(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4\right) + \varepsilon \Delta w_{1,m}$$
$$y_{m+1} = y_m + \tfrac{1}{6}\left(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + L_4\right) + \varepsilon \Delta w_{2,m},$$

где $\Delta w_{1,m}$, $\Delta w_{2,m}$ — приращения винеровских процессов — можно получить по формулам

$$\Delta w_{1,m} = \sqrt{-2h\ln(r_{1,m})}\,\sin(2\pi r_{2,m})$$
$$\Delta w_{2,m} = \sqrt{-2h\ln(r_{1,m})}\,\cos(2\pi r_{2,m}),$$

где $r_{1,m}, r_{2,m}$ — независимые случайные величины, равномерно распределенные на отрезке $[0,1]$.

```
function [w1, w2] = generateIncrementsOfWienerProcesses(h)
    %   генерирует приращения винеровских процессов
    r1 = rand();
    r2 = rand();
    w1 = sqrt(-2 * h * log(r1)) * sin(2 * pi * r2);
    w2 = sqrt(-2 * h * log(r1)) * cos(2 * pi * r2);
end
```

Рис. 4: Код функции, генерирующей приращения винеровских процессов

```
function [pointsX, pointsY] = generatePointsOfStochasticTrajectories( ...
    paramB, ...
    startPoint, ...
    quantity,...
    intensity, ...
    h)
    %   Генерирует точки графика стохастической траектории
    pointsX = zeros(1, quantity, 'double');
    pointsY = zeros(1, quantity, 'double');
    pointsX(1, 1) = startPoint.X;
    pointsY(1, 1) = startPoint.Y;
    point = startPoint;
    for i = 2:quantity
        [xInc, yInc] = calcNumericalSchemeRungeKutt(paramB, point, h);
        [w1, w2] = generateIncrementsOfWienerProcesses(h);
        nextX = point.X + xInc + intensity * w1;
        nextY = point.Y + yInc + intensity * w2;
        pointsX(1, i) = nextX;
        pointsY(1, i) = nextY;
        point = Point(nextX, nextY);
    end
end
```

Рис. 5: Код функции, генерирующей точки графика стохастической траектории

5 Работа с программой

5.1 Интерфейс

Интерфейс программы позволяет задавать следующие входные параметры:

- параметр β
- количество точек в траектории
- шаг численной схемы Рунге — Кутта
- интенсивность шума
- стартовую точку

При нажатии кнопки "Построить"программа по входным параметрам строит стохастическую траекторию модели Селькова-Строгаца при $\alpha = 0.1$.

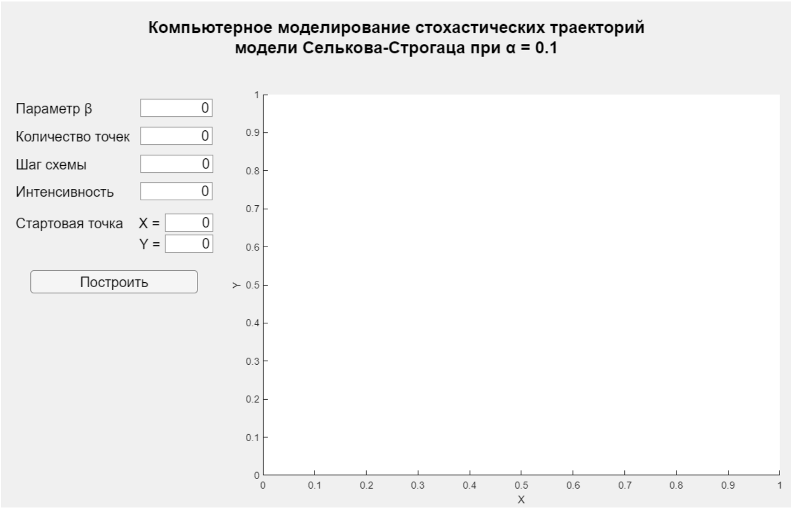

Рис. 6: Интерфейс программы

```
paramB = double(app.ParamB.Value);
quantity = int32(app.Quantity.Value);
h = double(app.Step.Value);
intensity = double(app.Intensity.Value);
startPoint = Point( ...
    double(app.PointX.Value), ...
    double(app.PointY.Value));
[X, Y] = generatePointsOfStochasticTrajectories( ...
    paramB, ...
    startPoint, ...
    quantity, ...
    intensity, ...
    h);
plot(app.Graph, X, Y);
```

Рис. 7: Код, выполняющийся при нажатии кнопки "Построить"

5.2 Примеры работы программы

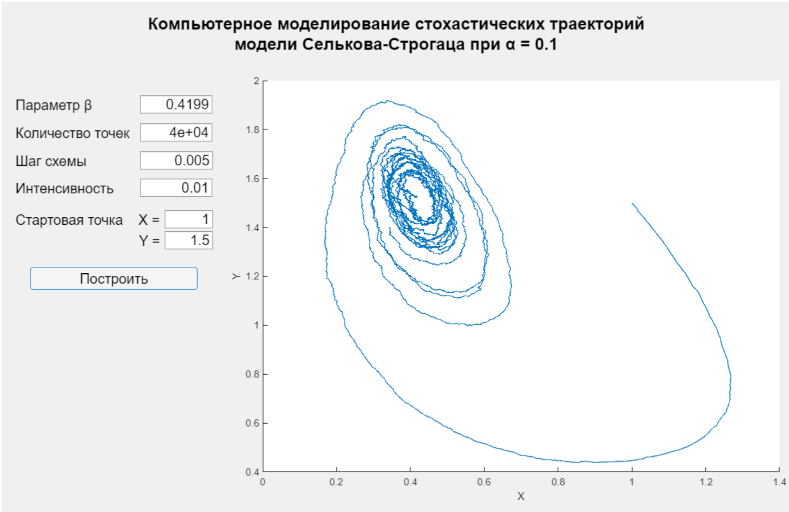

Рис. 8: Пример работы программы

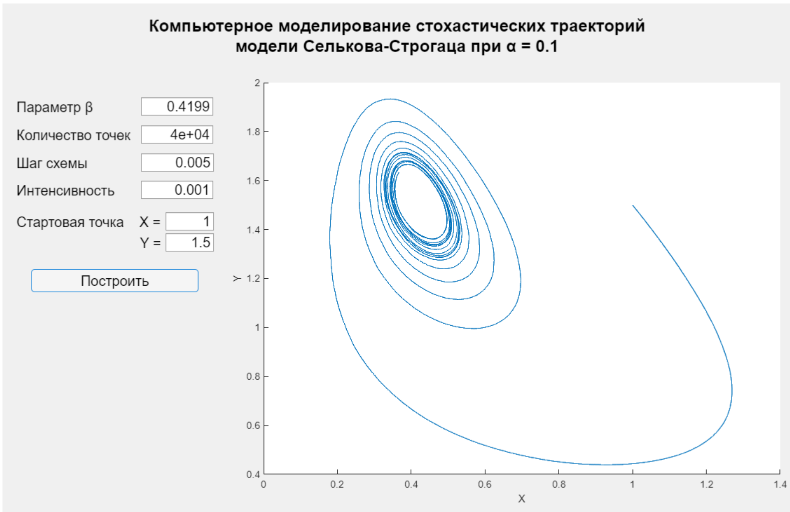

Рис. 9: Пример работы программы

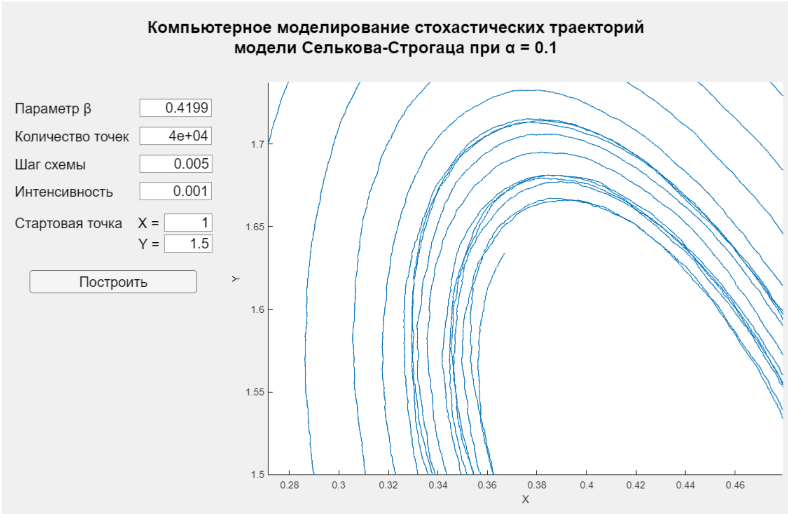

Рис. 10: Пример работы программы

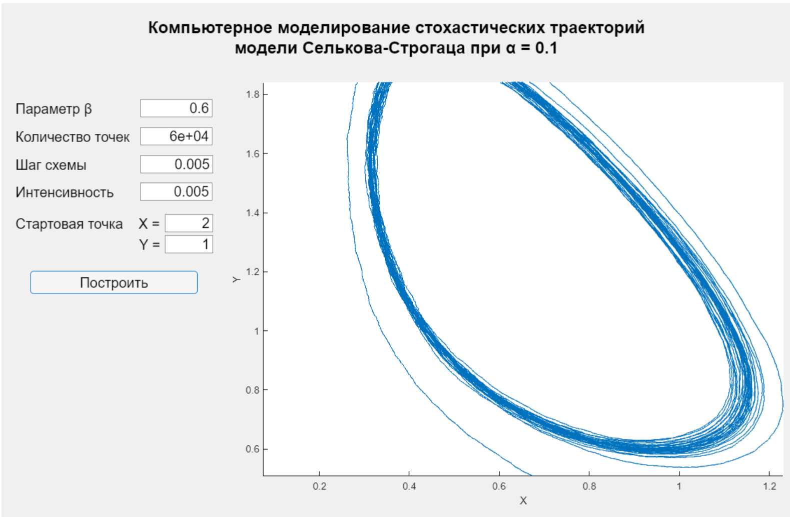

Рис. 11: Пример работы программы

6 Заключение

Результатом выполнения работы является работающая программа, выполненная в среде MATLAB, позволяющая строить стохастические траектории модели Селькова-Строгаца. Дальнейшим развитием работы может быть улучшение данной программы (например, обработка некорректного ввода входных параметров).