

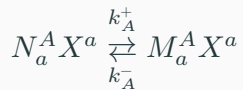
Символьно-численный подход для исследования кинетических моделей

Демидова Е. А., Беличева Д. М.

19 февраля 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Уравнения химической кинетики



$$s_A^+ = k^+ \prod_a x^a N_a$$

$$s_A^- = k^- \prod_a x^a M_a$$

x^a – концентрация вещества X^a

$$\begin{aligned}\partial_t p(\mathbf{x}, t) = \sum_A [(s_A^-(\mathbf{x} + r^A)p(\mathbf{x} + r^A, t) - s_A^+(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t)) + \\ + (s_A^+(\mathbf{x} - r^A)p(\mathbf{x} - r^A, t) - s_A^-(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t))],\end{aligned}$$

$$\mathbf{r}^A = \mathbf{M}^A - \mathbf{N}^A$$

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x^n)^T$$

$$\begin{aligned}\partial_t p(\mathbf{x}, t) = & \sum_A \left[\sum_j \left(\frac{(r^A \nabla)^j}{j!} s_A^-(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t) \right) + \right. \\ & \left. + \sum_j \left(\frac{(-r^A \nabla)^j}{j!} s_A^+(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t) \right) \right].\end{aligned}$$

$$\partial_t p(\mathbf{x}, t) = -\partial_a [A^a(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)] + \frac{1}{2} \partial_a \partial_b [B^{ab}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)], \quad a = \overline{1, n}, b = \overline{1, n},$$

где

$$A^a(\mathbf{x}) = r_a^A [s_A^+(\mathbf{x}) - s_A^-(\mathbf{x})],$$

$$B^{ab}(\mathbf{x}) = r_a^A r_b^A [s_A^+(\mathbf{x}) - s_A^-(\mathbf{x})].$$

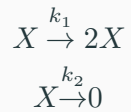
$$dx = a(x)dt + b(x)dW,$$

где W – n -мерный винеровский процесс, коэффициенту a соответствует коэффициент A ,

$$B = bb^T$$

Система ДУ:

$$\frac{dx}{dt} = r_a^A [s_A^+(x) - s_A^-(x)].$$



$$r^1 = 1, \quad r^2 = -1.$$

$$s_1^+ = k_1^+ x,$$

$$s_2^+ = k_2^+ x.$$

$$A(x) = r^1 s_1^+ + r^2 s_2^+ = k_1^+ x - k_2^+ x = (k_1 - k_2)x$$

$$B(x) = r^1(r^1)s_1^+ + r^2(r^2)s_2^+ = (k_1 + k_2)x$$

$$dx = (k_1 - k_2)xdt + \sqrt{(k_1 + k_2)x}dW$$

Модель Мальтуса (экспоненциальный рост)

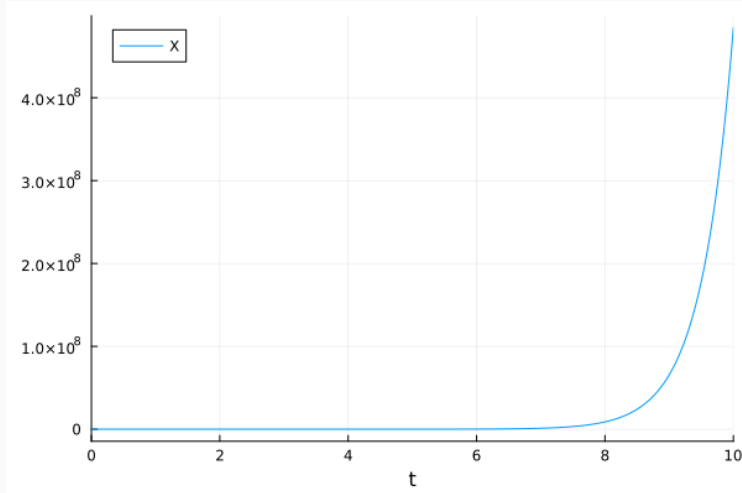
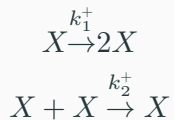


Рис. 1: Модель Мальтуса при $k_1 = 5.0$, $k_2 = 3.0$



$$r^1 = 1, \quad r^2 = -1$$

$$s_1^+ = k_1^+ x^1,$$

$$s_2^+ = k_2^+ x^2,$$

$$A(x) = r^1 s_1^+ + r^2 s_2^+ = k_1^+ x - k_2^+ x^2$$

$$B(x) = r^1 (r^1)^T s_1^+ + r^2 (r^2)^T s_2^+ = k_1^+ x + k_2^+ x^2$$

$$dx = (k_1^+ x - k_2^+ x^2)dt + \sqrt{(k_1^+ x + k_2^+ x^2)}dW$$

Модель Ферхюльста (логистическая кривая)

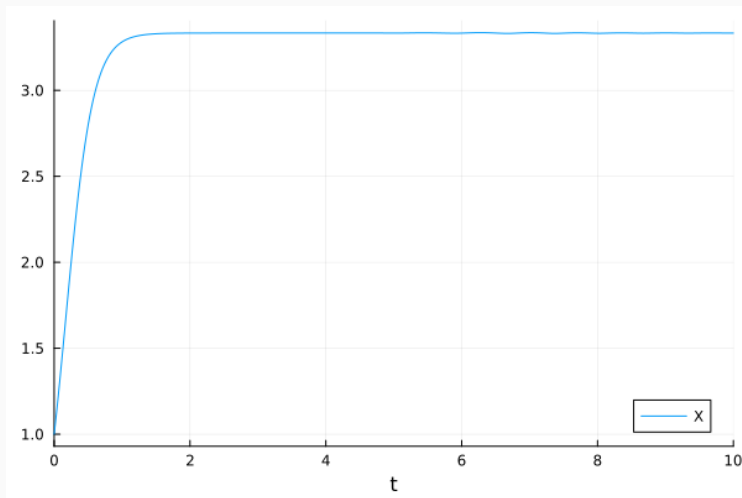
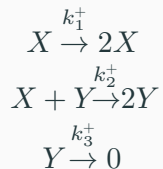


Рис. 2: Модель Ферхюльста при $k_1 = 5.0, k_2 = 3.0$



$$r^1 = (1, 0)^T, \quad r^2 = (-1, 1)^T, \quad r^3 = (0, -1)^T$$

$$\begin{aligned} s_1^+ &= k_1^+ x, \\ s_2^+ &= k_2^+ xy, \\ s_3^+ &= k_3^+ y, \end{aligned}$$

$$A(x, y) = r^1 s_1^+ + r^2 s_2^+ + r^3 s_3^+ = \begin{pmatrix} k_1^+ x - k_2^+ xy \\ k_2^+ xy - k_3^+ y \end{pmatrix}$$

$$B(x, y) = r^1 (r^1)^T s_1^+ + r^2 (r^2)^T s_2^+ + r^3 (r^3)^T s_3^+ = \begin{pmatrix} k_1^+ x + k_2^+ xy & -k_2^+ xy \\ -k_2^+ xy & k_2^+ xy + k_3^+ y \end{pmatrix}$$

$$d \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_1^+ x - k_2^+ xy \\ k_2^+ xy - k_3^+ y \end{pmatrix} dt + b(x, y) d \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \end{pmatrix}$$

Модель Лотки-Вольтерры (система хищник-жертва)

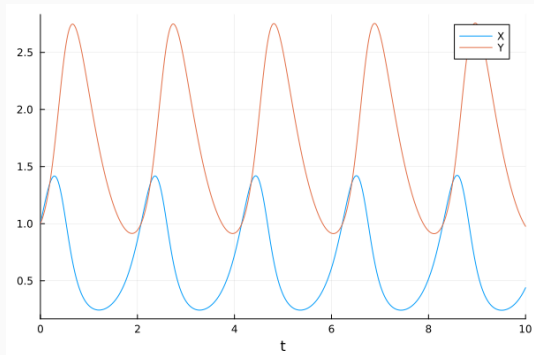


Рис. 3: Модель Лотки-Вольтерры при $k_1 = 5.0, k_2 = 3.0, k_3 = 2.0$

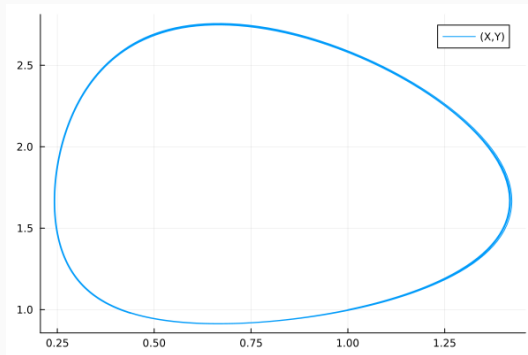


Рис. 4: Модель Лотки-Вольтерры при $k_1 = 5.0, k_2 = 3.0, k_3 = 2.0$

- Catalyst.jl превосходит в плане производительности BioNetGen, COPASI, GillesPy2, Matlab и SimBiology
- Простая и понятная запись реакций
- Модели могут быть преобразованы в символьные модели ОДУ, СДУ и стохастической химической кинетики (скачкообразные процессы).
- Поддерживаются нецелочисленные коэффициенты интенсивности реакций