

Численное решение уравнения модели гликолиза

А. Л. Лукашевич

МФТИ, 476 гр.

Аннотация

В данной работе описан численный способ решения уравнения модели гликолиза с помощью методов Рунге-Кутты.

Введение

[3] Классическим примером колебательной биохимической реакции является гликолиз. В процессе гликолиза осуществляется распад глюкозы и других сахаров, при этом соединения, содержащие шесть молекул углерода, превращаются в трикарбоновые кислоты, включающие три молекулы углерода. За счет избытка свободной энергии в процессе гликолиза на одну молекулу шестиуглеродного сахара образуются две молекулы АТФ. Основную роль в генерации наблюдаемых колебаний концентраций компонентов реакции: фруктозо-6-фосфата, фруктозо-1,6-фосфата и восстановленного НАД (никотинамидинуклеотид) играет ключевой фермент гликолитического пути - фосфофруктокиназа (ФФК). Упрощенная схема реакций представлена на рис. 1

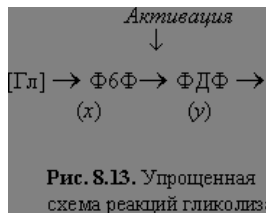


Рис. 1: Простейшая схема гликолиза.

1 Модель процесса

Систему уравнений, моделирующую процесс гликолиза можно свести к следующему виду:

$$\begin{cases} \dot{x} = 1 - xy \\ \dot{y} = \alpha y \left(x - \frac{1+\beta}{y+\beta} \right), \end{cases} \quad (1)$$

где α и β - некие константы.[1]

2 Начальное приближение, параметры системы и жесткость системы

2.1 Числовые характеристики

- Начальное приближение: $x = 1, y = 0.001$
- Параметры системы: $\alpha = 1000, \beta = 10$ и $\alpha = 2.5, \beta = 4.5$

2.2 Оценка спектра

Проведем оценку спектра. Выпишем матрицу Якоби данной системы:

$$\begin{pmatrix} -y & -x \\ \alpha y & \alpha x + \frac{1+\beta}{(y+\beta)^2} \end{pmatrix}$$

Проведя нехитрые вычисления, получим выражения для собственных значений:

$$\lambda = \frac{1}{2} \left(-y + \alpha x + \frac{1+\beta}{(y+\beta)^2} \pm \sqrt{(y - \alpha x - \frac{1+\beta}{(y+\beta)^2})^2 + 4y \frac{1+\beta}{(y+\beta)^2}} \right)$$

Учитывая особенности начального приближения, имеет смысл пренебречь некоторыми величинами и получить следующие выражения (с уже подставленными значениями x и y) для собственных значений:

$$\lambda_1 \approx \alpha + \frac{1}{1+\beta} + \frac{0.004}{\alpha(1+\beta)+1}$$

$$\lambda_2 \approx -\frac{0.004}{\alpha(1+\beta)+1}$$

Отсюда легко видеть, что при больших значениях α задача является жесткой по определению. Показатель жесткости системы определяется порядком α

3 Методы решения

3.1 Методы Рунге-Кутты

- Для решения задачи с параметрами $\alpha = 1000$ и $\beta = 10$ применялся неявный двухстадийный метод второго порядка аппроксимации со следующей таблицей Бутчера:

$$\begin{array}{c|cc} 5/8 & 5/8 & 0 \\ 1/4 & -1/2 & 3/4 \\ \hline & 2/3 & 1/3 \end{array}$$

Данный метод был предложен в первой задаче на контрольной работе по вычислительной математике для 3 курса в группах В. Б. Пирогова в варианте 4.

- Для решения задачи с параметрами $\alpha = 2.5$ и $\beta = 4.5$ применялся явный метод Эйлера:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline & 1 \end{array}$$

3.2 Выбор шага интегрирования

Выбор шага осуществлен адаптивно в соответствии с правилом Рунге – для минимизации ошибки вычислений на каждом шаге. Подробнее см.[4]

4 Решения

4.1 Жесткая система

В данном случае $\alpha = 1000$, $\beta = 10$, решение проводилось на отрезке $[0, 15]$ по времени, шаг интегрирования менялся от 10^{-3} до 10^{-5} . Далее приведены графики зависимостей каждой из компонент от времени, их производных по времени и поведение решения на фазовой плоскости:

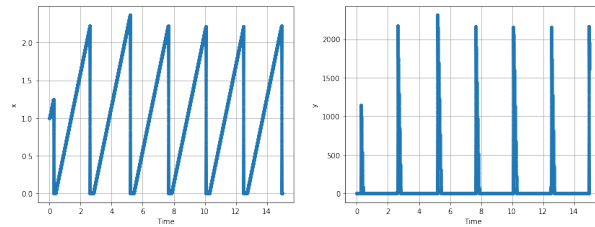


Рис. 2: $x(t)$, $y(t)$ жесткая задача

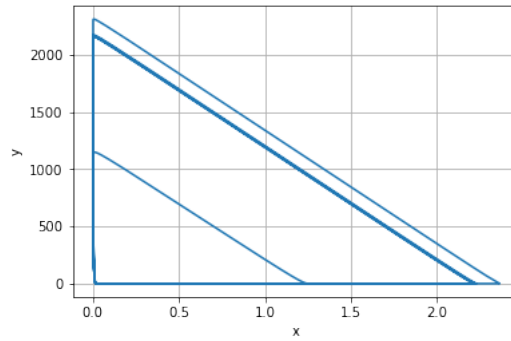


Рис. 3: $y(x)$ жесткая задача

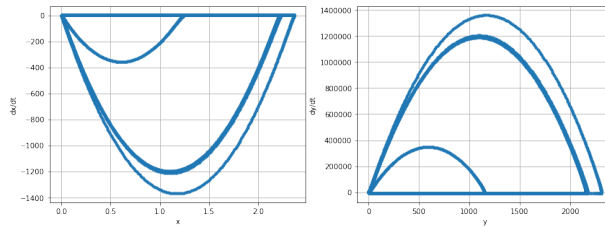


Рис. 4: $\dot{x}(t)$, $\dot{y}(t)$ жесткая задача

4.2 Нежесткая система

В данном случае $\alpha = 2.5$, $\beta = 4.5$, решение проводилось на отрезке $[0, 120]$ по времени, шаг интегрирования менялся от 10^{-1} до 10^{-3} . Далее приведены графики зависимостей каждой из компонент от времени, их производных по времени и поведение решения на фазовой плоскости:

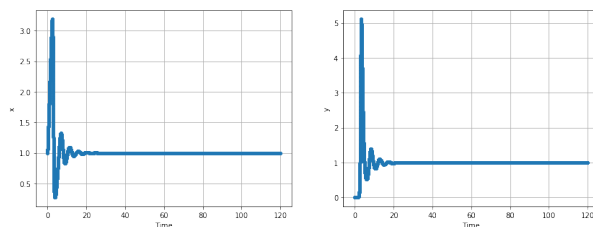


Рис. 5: $x(t)$, $y(t)$ нежесткая задача

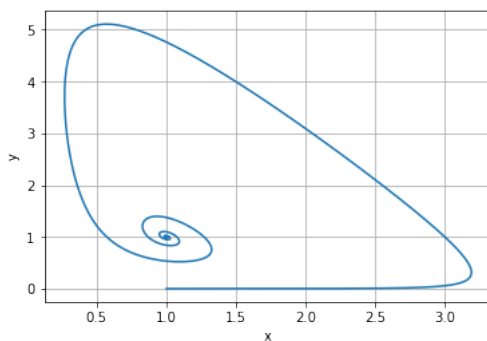


Рис. 6: $y(x)$ нежесткая задача

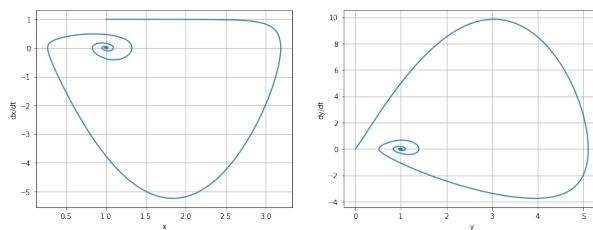


Рис. 7: $\dot{x}(t)$, $\dot{y}(t)$ нежесткая задача

5 Вывод

Было построено численное решения модели гликолиза с помощью методов Рунге-Кутты, были рассмотрены особенности поведения шага интегрирования при различной степени жесткости системы.

Список литературы

- [1] Е. Н. Аристова и А. И. Лобанов, *Практические занятия по вычислительной математике в МФТИ. Часть II* 2015.
- [2] И. В. Цыбулин, *Слайды по вычислительной математике*
<http://compmathgroup.github.io/compmath-slides/>, 2017.
- [3] Г. Ю. Ризниченко, *Лекции по математическим моделям в биологии. КОЛЕБАНИЯ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ*
<http://library.biophys.msu.ru/LectMB/lect08.htm>
- [4] И. Б. Петров, А. И. Лобанов, *Лекции по вычислительной математике*, 2006