

# Vývoj programového vybavenia pre analýzu komplexných reakčných systémov

Boris Fačkovec

Školiteľ: prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

25. november 2011

Ústav chemického inžinýrství, Vysoká škola  
chemicko-technologická v Praze

# Úvod a zadanie úlohy

- ▶ Komplexné reakčné siete stretáme pri štúdiu metabolizmu, mechanizmoch chemických reakcií, chemických reaktoroch atd. <sup>1</sup>
- ▶ Modelujeme sústavou obyčajných diferenciálnych rovníc, ktorá je určená stechiometriou siete

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{S}\mathbf{v} \quad (1)$$

kde  $\mathbf{S}$  je stechiometrická matica a  $\mathbf{v}$  vektor reakčných rýchlostí.

- ▶ Priestor reakčných rýchlostí v stacionárnom stave je nulovým priestorom  $\mathbf{x}$ .
- ▶ Iba jeho časť v kladnom ortante  $\rightarrow$  rozklad na elementárne podsiete

---

<sup>1</sup>Stability of complex reaction networks. Clarke B.L., Adv. Chem. Phys., 1980, 43, 1

# Určenie stability siete

- ▶ Pri určovaní stability študujeme maticu linearizácie

$$\mathbf{J} = \mathbf{S}(\text{diag}(\mathbf{v}_s))\kappa^T(\text{diag}(\mathbf{x}_s))^{-1} \quad (2)$$

kde kappa je kinetická matica, ktorej prvky sú definované

$$\kappa_{ij} = \frac{\partial \ln v_j(\mathbf{x}_s)}{\partial \ln x_i} \quad (3)$$

- ▶ Skúmame všetky hlavné subdeterminanty  $\mathbf{B}$ .

$$\mathbf{B} = -\mathbf{S}(\text{diag}(\mathbf{v}_s))\kappa^T \quad (4)$$

Ak je jediný záporný, sieť je nestabilná.

# Dekompozícia na podsiete - implementácia

- ▶ Algoritmus Schilinga, Letschera a Palssona <sup>2</sup>
- ▶ 2-kroky v každej iterácii, iterácií ako počet zložiek
- kombinácia
- odstránenie redundantných riadkov
- ▶ Iteratívna implementácia druhého kroku - zásadne zníži výpočtovú náročnosť

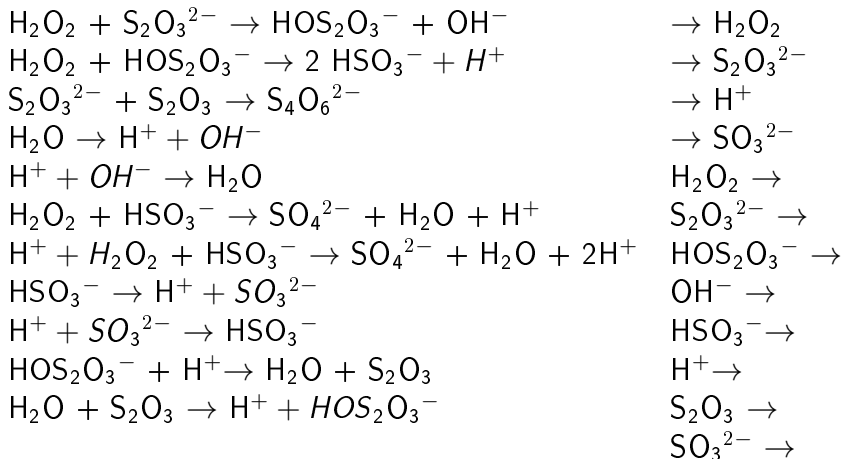
---

<sup>2</sup>Theory for the Systemic Definition of Metabolic Pathways and their use in Interpreting Metabolic Function from a Pathway-Oriented Perspective, Schilling C.H., Letscher D., Palsson B.O., J. theor. Biol. 2000, 203, 229-248

# Určenie stability kombinácie 2 sietí - implementácia

- ▶ Stena definovaná analyticky ako kladná lineárna kombinácia 2 hrán.
- ▶ Skonstruuje sa matica - symbolický zápis
- ▶ Subdeterminantami sú polynómy - numerická interpolácia
- ▶ Ak má polynóm kladný koreň alebo je v ľubovoľnej kladnej hodnote záporný, sieť je nestabilná
- ▶ Problém v robustnosti

# Modelový systém



3

<sup>3</sup>Chaotic pH Oscillations in the Hydrogen Peroxide-Thiosulfate-Sulfite Flow System, Rabai G., Hanazaki I., J. Phys. Chem. A 1999, 103, 7268-7273

# Stabilné a nestabilné podsiete

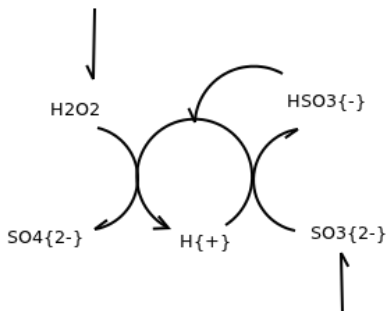
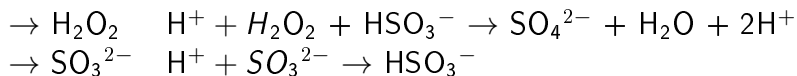


Figure: Príklad nestabilnej podsiete

# Primárna nestabilita 2D steny

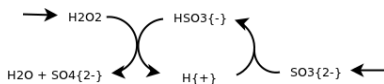


Figure: Stabilná podsieť 1

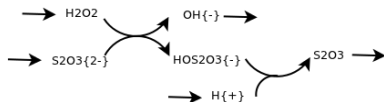


Figure: Stabilná podsieť 2

- Kombinácia stabilných podsietí môže byť nestabilná



# Ďalší vývoj

- ▶ Uživatelské prostredie
- ▶ Nástroje na interpretáciu
- ▶ Spolu s implementáciou práca na samotných algoritmoch