

Отталкиваясь от данного решения, для вязких несжимаемых жидкостей был получен достаточно большой класс частных решений задачи.

Сложности появляются при радиальном движении между параллельными пластинами (при возникновении турбулентности на параллельном потоке, рис. 2). Это незначительное изменение влечет за собой конвекцию – вследствие чего получаем нелинейность [2, 3].

$$\frac{d^2 f}{dz^2} + Rf^2 = -1; \quad f(0) = f(1) = 0$$

При достаточно больших числах Рейнольдса получим нестационарное решение. Данная проблема по сей день не решена.

Зона применений системы обширна. Примером может служить работа по исследованию фильтрационных характеристик пластов. Решение задачи позволяет построить модель порового пространства и дает возможность оценки характеристик горных пород с помощью продольных волн. В основу такой оценки положен следующий физический механизм.

При распространении упругой волны на ее фронте происходят фильтрационные перетоки порового флюида, приводящие к изменению упругих свойств среды. Модули упругости сухой и насыщенной пористых сред могут отличаться более чем на четверть. Следствием существования эффекта фильтрационных перетоков на фронте упругой волны является возможность получить изменение ее кинематических и динамических параметров, зависящих от проницаемости среды и свойств жидкости, через изменение входных параметров волны (амплитуды и частоты). Использование идеализированных моделей деформации скелета пористой среды и фильтрационных течений в порах дает возможность учесть взаимодействие указанных процессов [1].

Для описания многих динамических процессов используют уравнение Навье-Стокса. Для того чтобы решить это уравнение, можно воспользоваться высокоточным численным анализом. Но и на этом пути исследователей встречаются многочисленные трудности. Если же эту систему решить аналитически, то многие проблемы могут быть сняты.

### Литература

1. Пат. 2132560 РФ., Способ оценки проницаемости горных пород /В.Ш. Халилов, Р.Р. Гафуров, К.В. Антонов и др. - № 97104988; Заявлено 24.03 97.
2. Князев Д.В. Вращательно-симметричные движения вязкой жидкости с пространственным ускорением. - Пермь. 2007.
3. D. Razafinralandy, A. Hamdouni, Consequences of Symmetries on the Analysis and Construction of Turbulence Models, 2006.
4. Лажыженская О.А., Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости. - М: Наука, 1970.

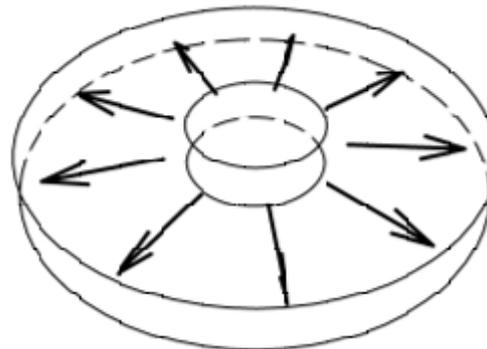


рис. 2

## ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

**Чухутина О.В.**

Белорусский государственный университет, г. Минск

### 1. Введение

Исследование систем высокой сложности является одной из главных целей на современном этапе развития науки. Без него немислимо развитие таких естественно-научных областей, как физика, химия, биология. Поскольку, как правило, нет простых формул, описывающих поведение модели, а стало быть, и объекта, который описывается моделью, то единственный путь – свести дело к вычислениям, применению численных методов решения задач.

В настоящей работе рассмотрено построение аналитических и имитационных моделей в применении к задачам биохимии. При решении задач, связанных с динамикой биохимических процессов, часто возникает необходимость предсказания временной зависимости количества различных реагентов во времени. При этом условия реально проводимых экспериментов очень сложны, что в большинстве случаев не позволяет получить указанные зависимости в аналитическом виде. Кроме того, малое количество молекул реагентов, которое зачастую участвует в биохимических реакциях, не позволяет адекватно описать процесс системой непрерывных дифференциальных уравнений, поскольку процесс становится дискретным. Все это говорит об актуальности исследований в направлении построения имитационных моделей биохимических процессов.

В рамках работы были реализованы несколько алгоритмов имитационного моделирования, в частности: прямой метод Гиллеспи, метод первой реакции [1],  $\tau$ -leap метод [2]. Правильность моделей тестировалась на простейших реакциях с помощью аналитического моделирования. Реализованные алгоритмы были применены для моделирования процесса актин-полимеризации – важного клеточного процесса, обуславливающего подвижность клеток, в том числе и раковых [3].

## 2. Теория

В каждый временной шаг система находится в определенном состоянии. В данном состоянии системы для исполнения выбирается то превращение, которое считается наиболее вероятным. Ключевым является выбор случайных чисел, используя машинный генератор случайных чисел и их использование для выбора превращений.

Первый из методов, предложенных Гиллеспи [1], получил название «прямой метод». Он однозначно вычисляет, какая реакция произойдет следующей и когда она произойдет. Второй предложенный метод Гиллеспи назвал «методом первой реакции». Краткая суть метода заключается в генерации для каждой из реакций (в нашем случае:  $A+B \rightarrow C$ ;  $C \rightarrow A+B$ ) предполагаемого времени наступления реакции ( $t$ ), затем выбирается реакция с наименьшим  $t$  («первая реакция») и выполняется данная реакция ( $\mu$ ) в момент времени  $t$ . Позднее был предложен метод  $\tau$ -leap [2], который дает наибольший выигрыш во времени и поэтому доказал высокую эффективность стохастического подхода к моделированию биохимической кинетики, ниже кратко приведен его алгоритм.

1. Сложная реакция раскладывается на простые, однонаправленные.

2. Вводятся постоянные реакции,  $k_i$  не зависящие от концентрации, и временной интервал  $\tau$ .

3. Генерирование количества реакций, произошедших за  $\tau$ , с помощью потока Пуассона.

## 3. Описание моделирования

В данной работе посредством пакета MATLAB были реализованы методы, разработанные Гиллеспи, под названием прямой метод, метод первой реакции, метод  $\tau$ -leap, а также модифицированный метод первой реакции с дискретным временем.

Для реализации была выбрана система двух простых реакций:



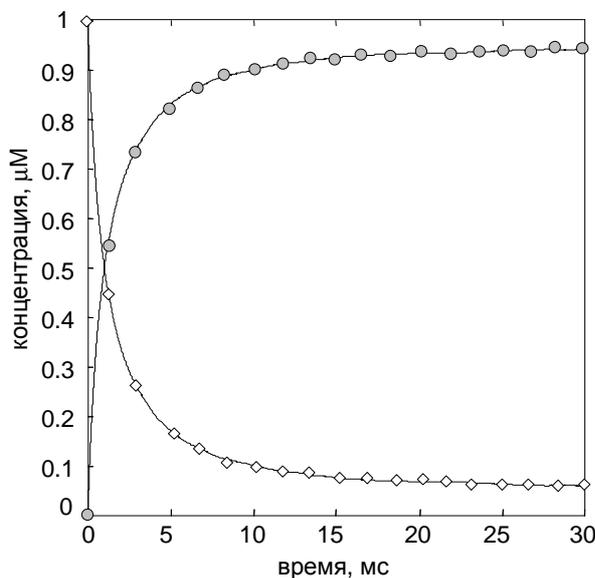
Задачей было проанализировать быстродействие имитационных методов и сравнить полученные решения с аналитическим. Была записана система обыкновенных дифференциальных уравнений, которая успешно решена в системе Mathcad.

При имитационном моделировании использовался объем  $8 \mu\text{M}^{-3}$ , концентрация молекул  $C$  в начальный момент времени равнялась 0. Постоянные скорости реакции  $k_1$  и  $k_2$  равнялись  $0.3 \mu\text{M}^{-1}\text{s}^{-1}$  и  $0.1 \text{s}^{-1}$  соответственно. Следует отметить, что данное и все последующие моделирования проводились посредством пакета MATLAB 6.5 под опера-

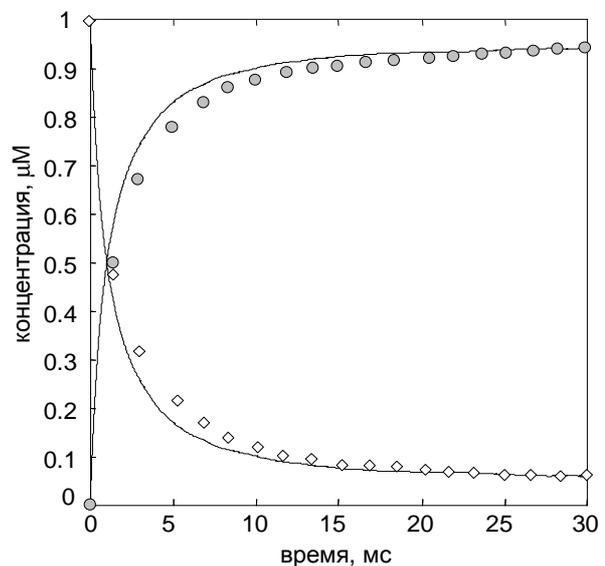
ционной системой Windows XP на процессоре Athlon AMD 3800+ X2(Dual Core). Поскольку временной шаг в прямом методе и методе первой реакции не является дискретным и зависит от постоянных реакции и числа реагирующих молекул, полученные результаты невозможно сравнить с аналитическим решением. Для устранения данной проблемы можно ввести дискретный временной шаг, на который бы делился временной интервал наступления реакции.

На рисунке 1 представлено решение, полученное одним из таких реализованных методов – модифицированным методом первой реакции с дискретным временем, и сравнено данное решение с аналитическим. Поскольку поведение концентрации А и В аналогично представлено только поведение концентрации вещества А.

На рисунке 2 произведено сравнение аналитического решения с методом  $\tau$ -leap. Из рисунка 2 видно, что метод  $\tau$ -leap не дает такого совпадения с аналитическим решением, как методы рассмотренные выше. Сравнительный анализ показывает, что при приближении к стационарному состоянию (~20 мс), концентрации веществ практически аналогичны, однако до этого момента различия в поведении концентраций весьма очевидны.



**Рис. 1. Сравнение аналитического и имитационного моделирования методом первой реакции для реакций (1). Линии – результат аналитического моделирования (пунктир – концентрация А, сплошная – С). Кружки и ромбы – результат имитационного моделирования**



**Рис. 2. Сравнение аналитического и имитационного моделирования методом  $\tau$ -leap (1). Линии – результат аналитического моделирования (пунктир – концентрация А, сплошная – С). Кружки и ромбы – результат имитационного моделирования**

Все методы были также сравнены по быстродействию. Результаты (времена выполнения на компьютере  $T$ ) представлены ниже:

- для прямого метода  $T=1.81$  с;
- для метода первой реакции  $T=2.17$  с;
- для метода первой реакции с дискретным временем  $T=3.01$  с;
- для метода  $\tau$ -leap  $T=2.3 \times 10^{-4}$  с.

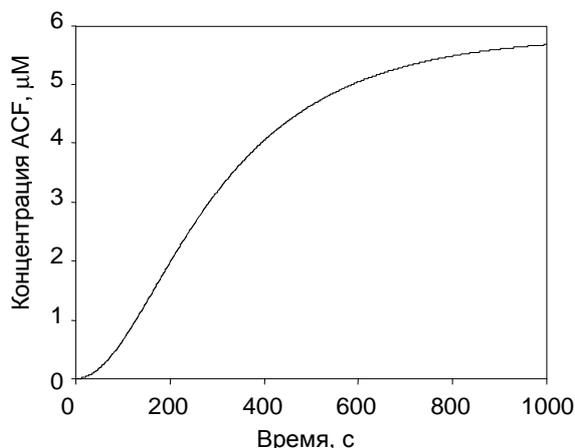
Видно, что метод  $\tau$ -leap обладает наибольшим быстродействием.

#### 4. Актин-полимеризация

Была рассмотрена самая простая модель актин-полимеризации [3], которая включает три реагента: F-актины (обозначим как АCF), G-актины (ACG) и концы филамент (FIB), где возможны три реакции: нуклеации, диссоциации, и элонгации. В этих обозначениях была построена система простейшей модели актин-полимеризации:



Если филамента после реакции диссоциации оказывается состоящей из трех мономеров, она распадается с образованием трех частиц G-актина. С помощью метода первой реакции была реализована система (2). Начальные условия были взяты следующими: объем – куб со стороной 4  $\mu\text{м}$ , начальная концентрация F-актинов 0  $\mu\text{М}$ , G-актинов 6  $\mu\text{М}$ , постоянные скорости реакции нуклеации, диссоциации, и элонгации взяты соответственно:  $k_{nuc}=10^{-8}\mu\text{М}^{-2}\text{с}^{-1}$ ,  $k_{ass}=10\mu\text{М}^{-1}\text{с}^{-1}$ ,  $k_{diss}=1\text{с}^{-1}$ . Посредством реализованной модели в пакете MATLAB проанализировано поведение F-актинов со временем. Временной интервал был взят от 0 до 1000с. Результаты моделирования представлены на рисунке 3.



**Рис.3. Поведение концентрации F-актина в системе с реакциями (2), полученное с помощью метода первой реакции**

Таким образом, было проведено сравнение скорости моделирования различными методами. Метод  $\tau$ -leap показал наилучший результат по скорости, однако он является приближенным и дает значительное расхождение с аналитической моделью в области нестационарного состояния. Реализованные алгоритмы были применены для моделирования процессов актин-полимеризации.

### Литература

1. Gillespie, D.T., *Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions*. J. Phys. Chem., 1977. **81**(25): p. 2340-2361.
2. Gillespie, D.T., *Approximate accelerated stochastic simulation of chemically reacting systems*. J. Chem. Phys., 2001. **115**(4): p. 1716-1733.
3. Pollard, T.D., *Rate constants for the reactions of ATP- and ADP-actin with the ends of actin filaments*. J. Cell Biol., 1986. **103**: p. 2747-2754.