

## Stochastické modelování chemických reakcí

Václav Klika

Katedra matematiky, FJFI, ČVUT v Praze

(vaclav.klika@fjfi.cvut.cz)

V současné době jsou dva různé přístupy k matematickému modelování chemických reakcí či interakcí mezi molekulami a to deterministické a stochastické modely. Kromě odlišnosti v zápisu (deterministické jsou popsány soustavou obyčejných diferenciálních rovnic, kdežto stochastické zahrnují i pravděpodobnost uskutečňování jednotlivých reakcí) se mohou lišit i v předpovědi chování popisovaných systémů. Ukazuje se, že stochastické modely poskytují detailnější pochopení reakčních i reakčně-difuzních procesů a v některých případech je dokonce nutné používat výhradně pravděpodobnostní popis (například v systémech, kde je malé množství molekul či tam, kde dochází k přepínání mezi stavy).

V rámci práce bychom se zaměřili na tyto kroky:

- Seznámení se s pravděpodobnostní a jak lze pomocí ní předeepsat rovnice popisující průběh chemických reakcí.
- Seznámení se s Gillespie algoritmem, který umožní chemické reakce simulovat.
- Vyzkoušet si výše uvedené na jednoduchých reakcích.
- Spočítat rozdělení pravděpodobnosti v rovnovážném stavu, tj. jaké budou předpovídané pravděpodobnosti pro různé hodnoty koncentrací v rovnovážném stavu
- Spočítat průměr (a zkusit porovnat s deterministickým přístupem) a případně provést další výpočty (jako například průměrný čas přeskočení)

Rozdíl mezi deterministickým a stochastickým popisem si pak budete/me moci vysvětlit na VŠ, ale je možné již v rámci této práce poodhalit některé z nich.