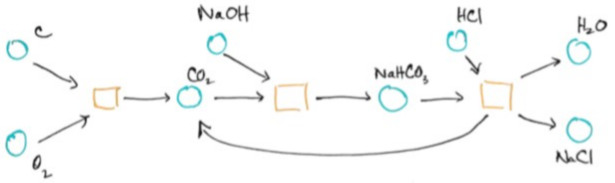
Zastosowanie teorii kategorii w praktyce

Alan Kubit
Karolina Stanko
08.02.2019r.

Problem: Sieć reakcji chemicznych

Reakcje chamiczne jako sieć Petriego z oszacowaniem (statyczne połączenie możliwych do osiągnięcia stanów, obrazowa reprezentacja zbioru równań różniczkowych opisujących układ). Sieć powstaje poprzez oddziaływanie ze sobą ogromnej ilości połączonych ze sobą grafów - takich jak ten przedstawiony poniżej.



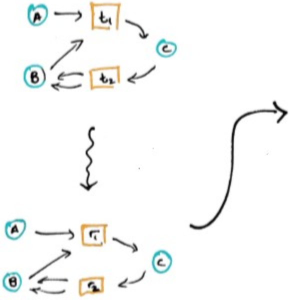
Kolorem niebieskim zostały oznaczone reagenty, natomiast pomarańczowym typy reakcji.

- Każdej reakcji przypisane jest odpowiednie oszacowanie np. szybkości, wydajności z jaką reakcja biegnie

Opisanie układu za pomocą równań różniczkowych

siec Petriego →

siec Petriego z oszacowaniem →

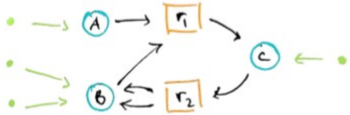


$$\frac{dA}{dt} = -r_1 AB$$

$$\frac{dB}{dt} = -r_1 AB + 2r_2 C$$

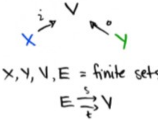
$$\frac{dC}{dt} = r_1 AB - r_2 C$$

Niektóre wielkość w trakcie trwania procesu mogą napływać lub odpływać z układu co jest nazywane otwartą siecią Petriego.

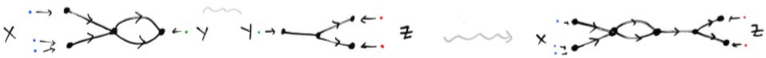


- Celem jest wykorzystanie obserwacji w jaki sposób reakcja może biec i jakie składowe mają na nią wpływ
- Istnieje możliwość stworzenia grafów zależności - otrzymujemy kategorię monoidalną
- W czasie trwania reakcji, składowe mające na nią wpływ mogą ulegać zmianie - co świadczy o tym, że mamy do czynienia z układem dynamicznym
- Układ jest także otwarty, ponieważ duże znaczenie na reakcję odgrywają wpływy z otoczenia

Otrzymujemy zbiór skończonych elementów



- V jest zbiorem reagentów biorących udział w reakcji
- V może być powiększone o specjalne struktury i tworzyć mapy docelowe
- Powstaje kategoria z elementami $X, Y, \ldots,$ i morfizmem $X \to Y$
- Złożenie dane jest poprzez „pushout" - zlepianie grafów ze sobą (identyczność $X \to X$ jest zbiorem pustym)



Co więcej, wykazać można, że ta kategoria ma symetryczną, monoidalną strukturę - przyjęcie rozłącznego związku grafów.

Podsumowanie:

Otrzymujemy symetryczną, monoidalną kategorię Petriego, gdzie:

- Obiekty są skończonymi elementami $X, Y, \ldots$
- Morfizm $X \to Y$ jest siecią Petriego z oszacowaniem

$$\begin{tikzcd} & V & \\ X \arrow[ur, "i"] & & Y \arrow[ul, "o"'] \end{tikzcd}$$

Istnieje symetryczny funktor monoidalny Petri -> Dynam , który wysyła sieć Petriego do odpowiedniego systemu dynamicznego

$$\square(f \circ g) = \square f \circ \square g$$
$$\square(f \otimes g) = \square f \otimes \square g$$

Co oznacza, że jeśli chcemy zrozumieć otwarty, dynamiczny system układu sieci Petriego, musimy znaleźć jedynie rozwiązania dla każdego z podstawowych podzespołów i na ich podstawie połączyć je razem ze sobą.

Dziękujemy za uwagę!