Hands-On

Davide Cozzi, Fabio Pirovano, Viola Rillosi

04/05/2022

Formule

$$a_\mu(X(t)) = c_\mu h_\mu(t),\ a_0(X) = \sum_{\mu=1}^{M} a_\mu(X),\ \tau = \frac{1}{a_0(X)} \ln \frac{1}{r_1}$$

Reagenti	h_μ
S_j	$h_\mu = X_j$
$S_j + S_k,\ j \neq k$	$h_\mu = X_j X_k$
$2S_j$	$h_\mu = \frac{X_j(X_j-1)}{2}$

Esercizio

Sia dato il seguente sistema con 3 specie e 4 reazioni:

$$\mathcal{S} = \{S_1, S_2, S_3\}$$

#	**Reagenti**	**Prodotti**	**Costanti**
R_1	$S_1 + S_1$	S_2	$c_1 = 1.0$
R_2	S_2	$S_1 + S_1$	$c_2 = 0.1$
R_3	$S_2 + S_2$	S_3	$c_3 = 0.5$
R_4	$S_1 + S_3$	S_2	$c_4 = 10.0$

Con quindi i seguenti *state-change vector*:

- $v_1 = (-2, +1, 0)$
- $v_2 = (+1, -1, 0)$
- $v_3 = (0, -2, +1)$
- $v_4 = (-1, +1, -1)$

Si ha la simulazione di 5 step di simulazione tramite *SSA* partendo dallo stato iniziale:

$$X(0) = (10, 0, 0)$$

i) **al tempo t = 0** si calcolano, avendo $X = X(0) = (10, 0, 0)$:

- $a_1(X) = c_1 h_1(t) = 1.0 \cdot \frac{10(10-1)}{2} = 45$
- $a_2(X) = c_2 h_2(t) = 0.1 \cdot 0 = 0$
- $a_3(X) = c_3 h_3(t) = 0.5 \cdot \frac{0(0-1)}{2} = 0$
- $a_4(X) = c_4 h_4(t) = 10.0 \cdot 10 \cdot 0 = 0$

Si ha quindi:

$$a_0(X) = 45 + 0 + 0 + 0 = 45$$

Si procede quindi generando i due numeri pseudocasuali:

- $r_1 = 0.35$
- $r_2 = 0.84$

Si calcola τ:

$$\tau = \frac{1}{45} \ln \frac{1}{0.35} = 0.02$$

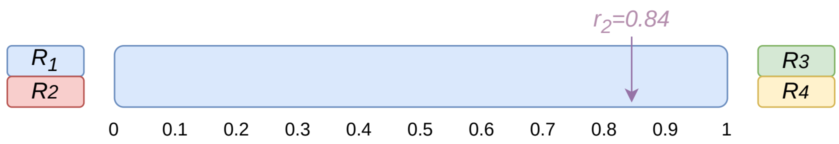
Avendo quindi che il tempo t viene aggiornato come:

$$t = 0 + 0.02 = 0.02$$

Si calcolano i vari $\frac{a_\mu(X)}{a_0(X)}$:

- $\frac{a_1(X)}{a_0(X)} = \frac{45}{45} = 1$
- $\frac{a_2(X)}{a_0(X)} = \frac{0}{45} = 0$
- $\frac{a_3(X)}{a_0(X)} = \frac{0}{45} = 0$
- $\frac{a_4(X)}{a_0(X)} = \frac{0}{45} = 0$

Avendo quindi:



E quindi si avrà, avendo $r_2 = 0.84$:

$$\mu = 1$$

E quindi si aggiorna lo stato X:

$$X(0) = (10, 0, 0) \Rightarrow X(0.02) = (10 - 2, 0 + 1, 0) = (8, 1, 0)$$

ii) **al tempo $\mathbf{t = 0.02}$** si calcolano, avendo $X = X(0.02) = (8, 1, 0)$:

- $a_1(X) = c_1 h_1(t) = 1.0 \cdot \frac{8(8-1)}{2} = 28$
- $a_2(X) = c_2 h_2(t) = 0.1 \cdot 1 = 0.1$
- $a_3(X) = c_3 h_3(t) = 0.5 \cdot \frac{1(1-1)}{2} = 0$
- $a_4(X) = c_4 h_4(t) = 10.0 \cdot 8 \cdot 0 = 0$

Si ha quindi:

$$a_0(X) = 28 + 0.1 + 0 + 0 = 28.1$$

Si procede quindi generando i due numeri pseudocasuali:

- $r_1 = 0.04$
- $r_2 = 0.20$

Si calcola τ:

$$\tau = \frac{1}{28.1} \ln \frac{1}{0.04} = 0.11$$

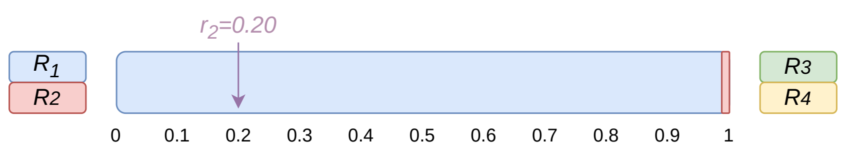
Avendo quindi che il tempo t viene aggiornato come:

$$t = 0.02 + 0.11 = 0.13$$

Si calcolano i vari $\frac{a_\mu(X)}{a_0(X)}$:

- $\frac{a_1(X)}{a_0(X)} = \frac{28}{28.1} = 0.996$
- $\frac{a_2(X)}{a_0(X)} = \frac{0.1}{28.1} = 0.004$
- $\frac{a_3(X)}{a_0(X)} = \frac{0}{28.1} = 0$
- $\frac{a_4(X)}{a_0(X)} = \frac{0}{28.1} = 0$

Avendo quindi:



E quindi si avrà, avendo $r_2 = 0.20$:

$$\mu = 1$$

E quindi si aggiorna lo stato X:

$$X(0.02) = (8, 1, 0) \Rightarrow X(0.13) = (8 - 2, 1 + 1, 0) = (6, 2, 0)$$

iii) **al tempo** $\mathbf{t = 0.13}$ si calcolano, avendo $X = X(0.13) = (6, 2, 0)$:

- $a_1(X) = c_1 h_1(t) = 1.0 \cdot \frac{6(6-1)}{2} = 15$
- $a_2(X) = c_2 h_2(t) = 0.1 \cdot 2 = 0.2$
- $a_3(X) = c_3 h_3(t) = 0.5 \cdot \frac{2(2-1)}{2} = 0.5$
- $a_4(X) = c_4 h_4(t) = 10.0 \cdot 6 \cdot 0 = 0$

Si ha quindi:

$$a_0(X) = 15 + 0.2 + 0.5 + 0 = 15.7$$

Si procede quindi generando i due numeri pseudocasuali:

- $r_1 = 0.73$
- $r_2 = 0.85$

Si calcola τ:

$$\tau = \frac{1}{15.7} \ln \frac{1}{0.73} = 0.02$$

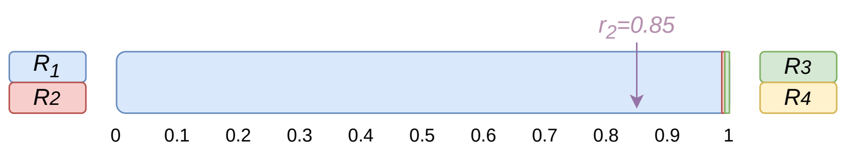
Avendo quindi che il tempo t viene aggiornato come:

$$t = 0.13 + 0.02 = 0.15$$

Si calcolano i vari $\frac{a_\mu(X)}{a_0(X)}$:

- $\frac{a_1(X)}{a_0(X)} = \frac{15}{15.7} = 0.96$
- $\frac{a_2(X)}{a_0(X)} = \frac{0.2}{15.7} = 0.01$
- $\frac{a_3(X)}{a_0(X)} = \frac{0.5}{15.7} = 0.03$
- $\frac{a_4(X)}{a_0(X)} = \frac{0}{15.7} = 0$

Avendo quindi:



E quindi si avrà, avendo $r_2 = 0.85$:

$$\mu = 1$$

E quindi si aggiorna lo stato X:

$$X(0.13) = (6, 2, 0) \Rightarrow X(0.15) = (6 - 2, 2 + 1, 0) = (4, 3, 0)$$

iv) **al tempo** $\mathbf{t = 0.15}$ si calcolano, avendo $X = X(0.13) = (4, 3, 0)$:

- $a_1(X) = c_1 h_1(t) = 1.0 \cdot \frac{4(4-1)}{2} = 6$
- $a_2(X) = c_2 h_2(t) = 0.1 \cdot 3 = 0.3$
- $a_3(X) = c_3 h_3(t) = 0.5 \cdot \frac{3(3-1)}{2} = 1.5$
- $a_4(X) = c_4 h_4(t) = 10.0 \cdot 4 \cdot 0 = 0$

Si ha quindi:

$$a_0(X) = 6 + 0.3 + 1.5 + 0 = 7.8$$

Si procede quindi generando i due numeri pseudocasuali:

- $r_1 = 0.11$
- $r_2 = 0.44$

Si calcola τ:

$$\tau = \frac{1}{7.8} \ln \frac{1}{0.11} = 0.28$$

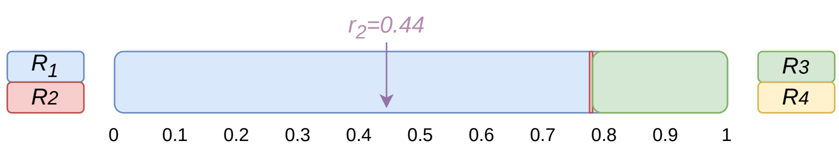
Avendo quindi che il tempo t viene aggiornato come:

$$t = 0.15 + 0.28 = 0.43$$

Si calcolano i vari $\frac{a_\mu(X)}{a_0(X)}$:

- $\frac{a_1(X)}{a_0(X)} = \frac{6}{7.8} = 0.77$
- $\frac{a_2(X)}{a_0(X)} = \frac{0.3}{7.8} = 0.04$
- $\frac{a_3(X)}{a_0(X)} = \frac{1.5}{7.8} = 0.19$
- $\frac{a_4(X)}{a_0(X)} = \frac{0}{7.8} = 0$

Avendo quindi:



E quindi si avrà, avendo $r_2 = 0.44$:

$$\mu = 1$$

E quindi si aggiorna lo stato X:

$$X(0.15) = (4, 3, 0) \Rightarrow X(0.43) = (4 - 2, 3 + 1, 0) = (2, 4, 0)$$

v) **al tempo t = 0.43** si calcolano, avendo $X = X(0.13) = (2, 4, 0)$:

- $a_1(X) = c_1 h_1(t) = 1.0 \cdot \frac{2(2-1)}{2} = 1$
- $a_2(X) = c_2 h_2(t) = 0.1 \cdot 4 = 0.4$
- $a_3(X) = c_3 h_3(t) = 0.5 \cdot \frac{4(4-1)}{2} = 3$
- $a_4(X) = c_4 h_4(t) = 10.0 \cdot 2 \cdot 0 = 0$

Si ha quindi:

$$a_0(X) = 1 + 0.4 + 3 + 0 = 4.4$$

Si procede quindi generando i due numeri pseudocasuali:

- $r_1 = 0.56$
- $r_2 = 0.30$

Si calcola τ:

$$\tau = \frac{1}{4.4} \ln \frac{1}{0.56} = 0.13$$

Avendo quindi che il tempo t viene aggiornato come:

$$t = 0.43 + 0.13 = 0.56$$

Si calcolano i vari $\frac{a_\mu(X)}{a_0(X)}$:

- $\frac{a_1(X)}{a_0(X)} = \frac{1}{4.4} = 0.23$
- $\frac{a_2(X)}{a_0(X)} = \frac{0.4}{4.4} = 0.09$
- $\frac{a_3(X)}{a_0(X)} = \frac{3}{4.4} = 0.68$
- $\frac{a_4(X)}{a_0(X)} = \frac{0}{4.4} = 0$

Avendo quindi:

E quindi si avrà, avendo $r_2 = 0.30$:

$$\mu = 3$$

E quindi si aggiorna lo stato X:

$$X(0.43) = (2, 4, 0) \Rightarrow X(0.46) = (2, 4 - 2, 0 + 1) = (2, 2, 1)$$