

1. Cel
2. Algorytm Gillespie

Celem laboratorium było zasymulowanie procesów reakcji z wykorzystaniem równań typu Master oraz algorytmu Gillespie. Równania master to:

$$\Gamma_1(t) = k_1$$

$$\Gamma_2(t) = k_2$$

$$\Gamma_3(t) = k_3 x_1 x_2$$

$$\Gamma_4(t) = k_4 x_3,$$

które odpowiadały odpowiednio produkcji cząstki x_1 lub x_2 , reakcji tworzenia x_3 oraz degradacji x_3 .

Symulowane procesy to:

$$\frac{dx_1}{dt} = -k_3 x_1 x_2 + k_1 \implies \frac{dx_1}{dt} = -\Gamma_3(t) + \Gamma_1(t)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -k_3 x_1 x_2 + k_2 \implies \frac{dx_2}{dt} = -\Gamma_3(t) + \Gamma_2(t)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = k_3 x_1 x_2 - k_4 x_3 \implies \frac{dx_3}{dt} = \Gamma_3(t) - \Gamma_4(t)$$

Algorytm Gillespie polega na zasymulowanie wybranego procesu:

$$\Gamma_{max} = \sum_{i=1}^n \Gamma_i \quad (1)$$

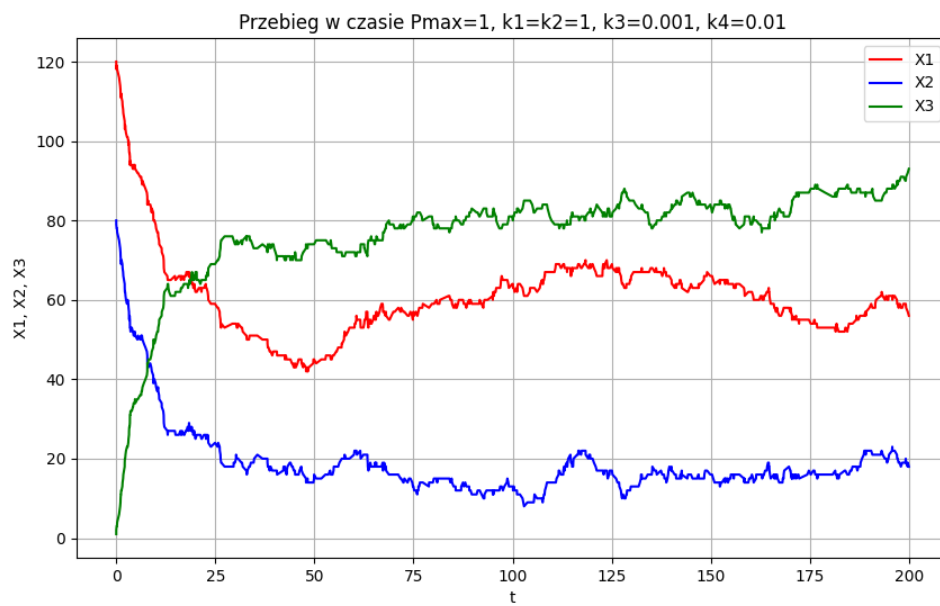
$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma_{max}} \ln(U_1), U_1 \sim U(0, 1), \quad (2)$$

$$m = \min \left\{ s; \frac{\sum_{i=1}^s \Gamma_i}{\Gamma_{max}} > U_2, \quad s = 1, 2, \dots, n \right\}, U_2 \sim U(0, 1), \quad (3)$$

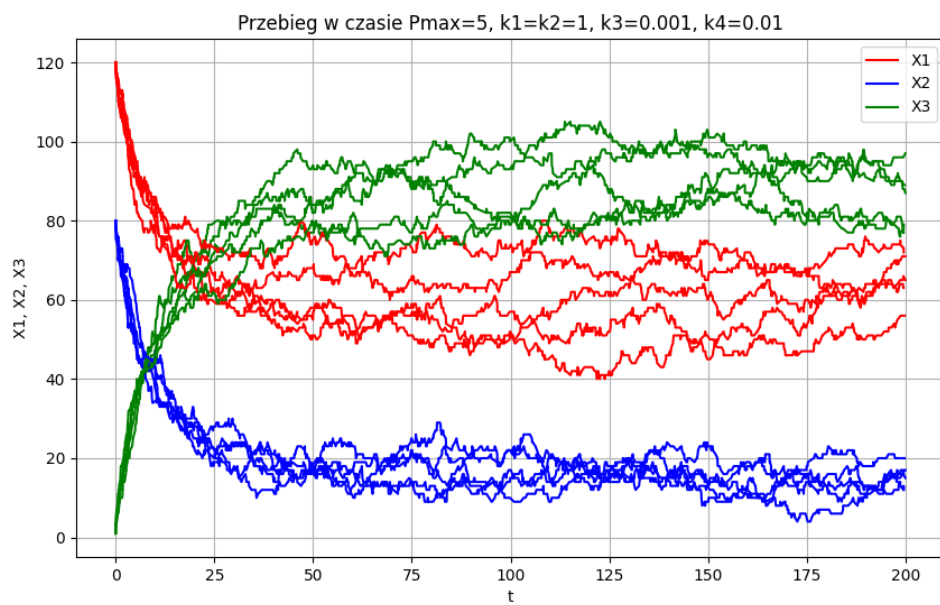
gdzie indeks m wskazuje wybrany proces.

3. Wyniki

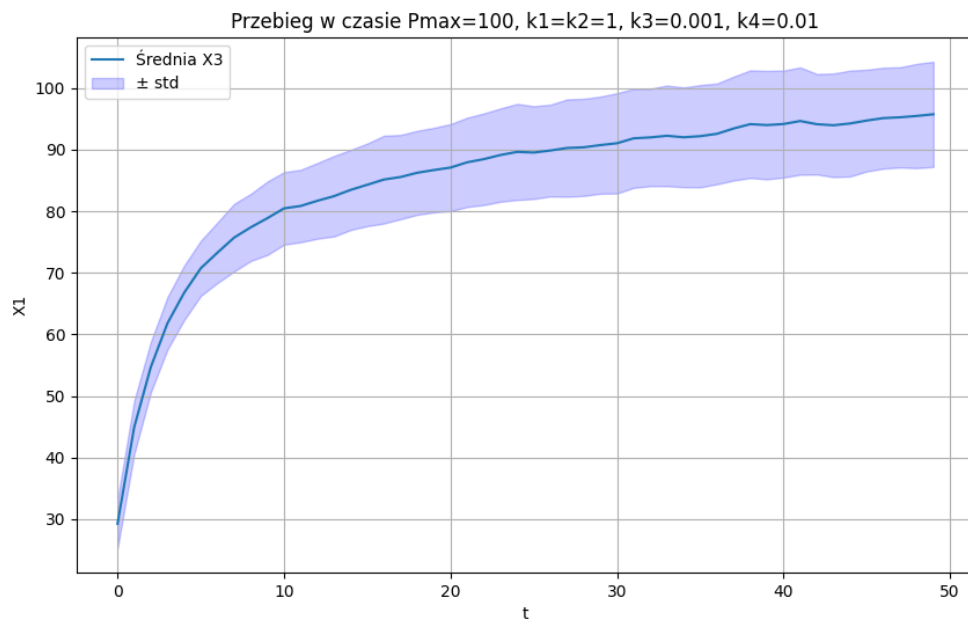
W trakcie laboratorium zasymulowano proces powtarzając całość raz, 5 razy albo 100 razy, w ostatnim przypadku wyliczając wartość średniej oraz odchylenia standardowego. Ponieważ krok czasowy w każdym z przypadków był różny, w celu uśrednienia wyników oraz zbudowania wspólnego indeksu, zmienna niezależna (czas) została przeskalowana i zrównana do 50 punktów pomiarowych.



Rys 1. Wykresy x_1 , x_2 , x_3 przy jednej iteracji.



Rys 2. Wykresy x_1 , x_2 , x_3 przy pięciu iteracjach.



Rys 3. Wykres x_3 przy stu iteracjach.

4. Wnioski

Przebiegi wyglądają dość podobnie, jednakże w zadanym zakresie nie biegają do jednej wartości. Również po osiągnięciu względnej i szybkiej stabilności widoczna była przez cały czas znaczna fluktuacja. Najważniejszą obserwacją jest brak zmniejszania się błędu wraz z wydłużaniem czasu symulacji - zarówno wartość średniej jak i błędu ustabilizowały się na pewnych wartościach.