

Computer Science II

L1: SSA

Marco S. Nobile, Ph.D.

Bachelor's Degree in Engineering Physics

Ca' Foscari University of Venice

A.Y. 2022-2023



Università
Ca' Foscari
Venezia

Today

- Estendere la funzione combinatoria h di SSA
- Implementare e simulare i seguenti modelli:
 - Cinetica enzimatica Michaelis-Menten
 - Il modello di Schlögl
 - Il modello di Lotka-Volterra

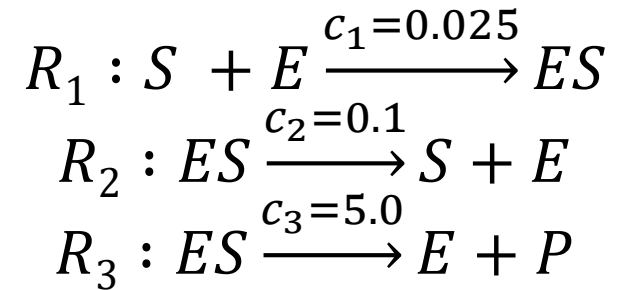
Estendere la funzione combinatoria h

- Nel codice presente su Moodle c'è una funzione chiamata `_get_h(index)`
 - La funzione prende come argomento l'indice della reazione e determina l'ordine della reazione sulla base della stechiometria dei reagenti di quella reazione
- Ora supporta solo reazioni di ordine 0 (ad es., $\emptyset \rightarrow S_j$) o ordine 1 (ad es., $S_j \rightarrow S_k$)
- Implementate reazioni di **ordine superiore** sulla base della tabella:

$\ast \rightarrow \text{reaction products,}$		$h_\mu = 1,$
$S_j \rightarrow \text{reaction products,}$		$h_\mu = X_j,$
$S_j + S_k \rightarrow \text{reaction products}$	$(j \neq k),$	$h_\mu = X_j X_k,$
$2S_j \rightarrow \text{reaction products,}$		$h_\mu = X_j(X_j - 1)/2,$
$S_i + S_j + S_k \rightarrow \text{reaction products}$	$(i \neq j \neq k \neq i)$	$h_\mu = X_i X_j X_k,$
$S_j + 2S_k \rightarrow \text{reaction products}$	$(j \neq k),$	$h_\mu = X_j X_k(X_k - 1)/2,$
$3S_j \rightarrow \text{reaction products.}$		$h_\mu = X_j(X_j - 1)(X_j - 2)/6$

Modello di Michaelis-Menten

- L'abbiamo già visto a lezione. Sono tre reazioni e quattro specie chimiche:



- Implementate il modello e simulatelo utilizzando questo stato iniziale:
S=500, E=100, ES=0, P=0

Modello di Schlögl

- Implementate e simulate il modello 50 volte
- Infine, plottate la dinamica della specie X in tutte simulazioni
- NB: le specie A e B devono mantenere costante il loro valore (come si fa? modificate il codice opportunamente)

3 The Schlögl system

The Schlögl system [3,4] is one of the simplest prototypes of chemical systems presenting a bistable dynamical behavior, i.e., the capacity of switching between two different stable steady states in response to some chemical signaling (see, e.g., [5–7] and references therein). The Schlögl model consists of 4 chemical reactions and 3 molecular species, listed in Table 4. The initial molecular amounts used in this work are given in Table 5.

Table 4. The Schlögl model

<i>No.</i>	<i>Reactants</i>	<i>Products</i>	<i>Stochastic constant</i>
r_1	$A + 2X$	$3X$	$3 \cdot 10^{-7}$
r_2	$3X$	$A + 2X$	$1 \cdot 10^{-4}$
r_3	B	X	$1 \cdot 10^{-3}$
r_4	X	B	3.5

Table 5. Initial molecular amounts in the Schlögl model

<i>Molecular species</i>	<i>Initial amount</i>
A	$*1 \cdot 10^5$
B	$*2 \cdot 10^5$
X	250

*The amounts of species A, B are kept constant during the execution of simulations. All molecular amounts are expressed as number of molecules.

Lotka-Volterra

- Il modello Lotka-Volterra è anche noto come preda-predatore
 - è un modello di un ecosistema in cui interagiscono solo due specie animali: un predatore (coyote) e la sua preda (tradizionalmente, coniglietti)
 - Assunzioni: i predatori possono solo nutrirsi delle prede; la quantità di cibo consumata dai predatori è proporzionale al numero possibile di incontri (=mass-action!); i predatori muoiono dopo un po'
- Implementate il modello Lotka-Volterra:
 - $R_1: y_1 + x \xrightarrow{c_1=10} 2y_1 + x$
 - $R_2: y_1 + y_2 \xrightarrow{c_2=0.01} 2y_2$
 - $R_3: y_2 \xrightarrow{c_3=10} \emptyset$

Initial conditions: $x = 1, y_1 = y_2 = 1000$

Diagramma delle fasi

- Plottate la dinamica di Lotka-Volterra mettendo sull'asse delle x il numero di coniglietti e sull'asse delle y il numero di coyote

