

Projekt 7: symulacja procesów rzadkich przy pomocy równania typu Master, algorytm Gillespie.

Kacper Połuszejko, 412183

1 Wstęp

Rozważamy układ do którego dodawane są substraty: x_1 ze stałą szybkością k_1 oraz x_2 ze stałą k_2 . Cząsteczki x_1 i x_2 wchodzi ze sobą w reakcję tworząc trzeci składnik x_3 z szybkością k_3



składnik x_3 usuwany jest z szybkością zależną od ilości x_3 skalowanej pewną stałą k_4 . Dynamikę zachodzących procesów zapiszemy za pomocą układu równań różniczkowych

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 + x_2 \xrightarrow{k_3} x_3 \\ x_3 \xrightarrow{k_4} 0 \end{array} \right\} \implies \frac{dx_3}{dt} = k_3 x_1 x_2 - k_4 x_3 \implies \frac{dx_3}{dt} = \Gamma_3(t) - \Gamma_4(t) \quad (2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 \xrightarrow{\Gamma_3} 0 \\ 0 \xrightarrow{k_1} x_1 \end{array} \right\} \implies \frac{dx_1}{dt} = -k_3 x_1 x_2 + k_1 \implies \frac{dx_1}{dt} = -\Gamma_3(t) + \Gamma_1(t) \quad (3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x_2 \xrightarrow{\Gamma_3} 0 \\ 0 \xrightarrow{k_2} x_2 \end{array} \right\} \implies \frac{dx_2}{dt} = -k_3 x_1 x_2 + k_2 \implies \frac{dx_2}{dt} = -\Gamma_3(t) + \Gamma_2(t) \quad (4)$$

Każde równanie ma postać równania typu Master. W układzie zapisanym po prawej stronie uwzględniliśmy częstości zachodzących procesów $\Gamma_i(t)$, widzimy że zależą one nie tylko od ustalonych wartości k_i , ale również od aktualnej ilości substratów w układzie $x_1(t)$ oraz $x_2(t)$. Z porównania dostajemy zależności:

$$\Gamma_1(t) = k_1 \quad (5)$$

$$\Gamma_2(t) = k_2 \quad (6)$$

$$\Gamma_3(t) = k_3 x_1 x_2 \quad (7)$$

$$\Gamma_4(t) = k_4 x_3 \quad (8)$$

Zakładamy, że ilości poszczególnych składników x_1, x_2, x_3 w układzie są niewielkie i opisywane niewielkimi liczbami naturalnymi, a zmiany zachodzące w układzie zmieniają te wartości w sposób dyskretny i losowy, np. jak poniżej:

$$\Gamma_1 : x_1 \rightarrow x_1 + 1 \quad (9)$$

$$\Gamma_2 : x_2 \rightarrow x_2 + 1 \quad (10)$$

$$\Gamma_3 : x_1 \rightarrow x_1 - 1, \quad x_2 \rightarrow x_2 - 1, \quad x_3 \rightarrow x_3 + 1 \quad (11)$$

$$\Gamma_4 : x_3 \rightarrow x_3 - 1 \quad (12)$$

Zmiana stanu układu może wiązać się ze zmianą ilości pojedynczego składnika, jak również kilku składników, w zależności od charakteru zdarzenia. Mamy zatem do czynienia ze złożonym procesem stochastycznym, w którym fluktuacje mogą silnie wpływać na jego dynamikę. Do rozwiązania problemu użyjemy algorytmu Gillespie.

Algorytm Gillespie

Zakładamy, że dynamika rozważanego procesu ma charakter losowy, a szybkości zachodzących zmian opisywane są za pomocą odpowiadających im częstości (liczba realizacji danego stanu na jednostkę czasu): $\{\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_n\}$. Dynamikę zmian możemy symulować przy użyciu algorytmu Gillespie, który ma charakter iteracyjny. W każdej iteracji obliczamy kolejno:

1. sumę częstości wszystkich procesów

$$\Gamma_{\max} = \sum_{i=1}^n \Gamma_i \quad (13)$$

2. losujemy przedział czasu Δt , w którym nie zachodzą zmiany w układzie

$$U_1 \sim U(0, 1) \quad \rightarrow \quad \Delta t = -\frac{1}{\Gamma_{\max}} \ln(U_1) \quad (14)$$

3. po czasie oczekiwania Δt następuje zmiana stanu układu, w sposób losowy określamy numer zdarzenia m

$$U_2 \sim U(0, 1) \quad \rightarrow \quad m = \min \left\{ s; \sum_{i=1}^s \frac{\Gamma_i}{\Gamma_{\max}} > U_2, \quad s = 1, 2, \dots, n \right\} \quad (15)$$

4. na podstawie informacji o numerze zdarzenia, określamy jego rodzaj i dokonujemy zmiany stanu układu
5. daną iterację kończymy zmieniając aktualny czas symulacji

$$t \leftarrow t + \Delta t \quad (16)$$

6. symulację kończymy, gdy zachodzi warunek: $t > t_{\max}$, w trakcie wykonywania algorytmu rejestrujemy potrzebne informacje dotyczące aktualnego stanu układu $x_1(t), x_2(t), x_3(t)$

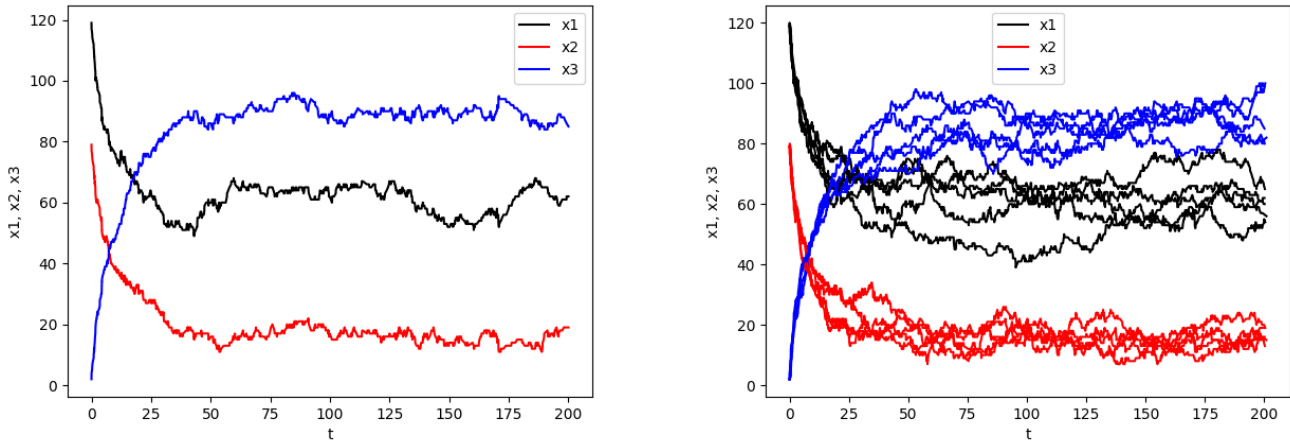
2 Metodyka

1. Przyjęto parametry symulacji

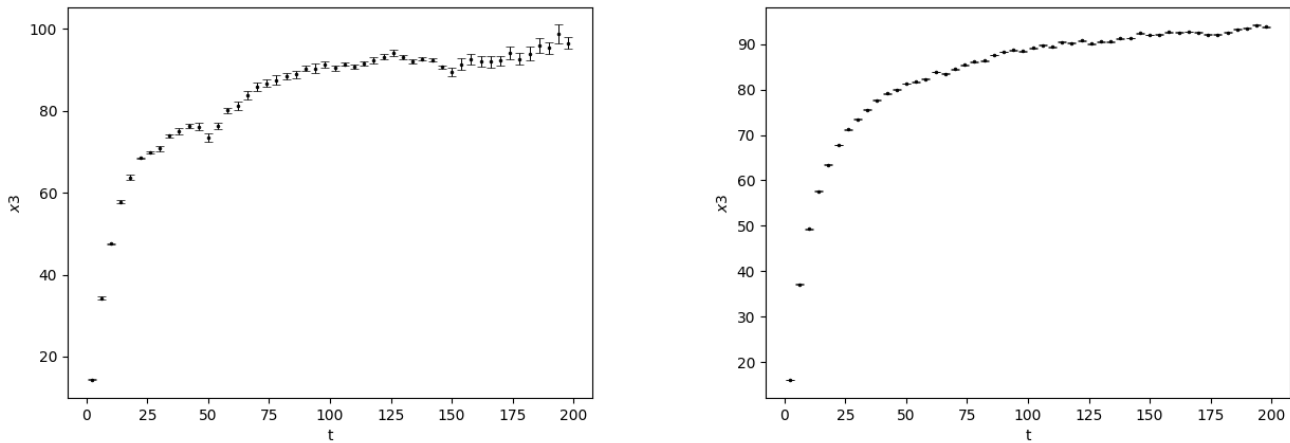
$$\begin{aligned} k_1 &= 1 \\ k_2 &= 1 \\ k_3 &= 0.001 \\ k_4 &= 0.01 \\ x_1(t=0) &= 120 \\ x_2(t=0) &= 80 \\ x_3(t=0) &= 1 \\ t_{\max} &= 200 \\ N &= 50 \\ P_{\max} &= 1, 5, 100 \end{aligned}$$

gdzie N to liczba komórek w histogramie, a P_{max} to liczba powtórzeń symulacji. Powtarzanie całego procesu pozwala na wyznaczenie wartości średnich w danych przedziałach czasowych. Liczbę przedziałów określa właśnie liczba N .

2.1 Wyniki



Rys. 1: Stan układu $(x_1(t), x_2(t), x_3(t))$ dla jednej (po lewej) oraz pięciu (po prawej) realizacji algorytmu Gillespie.



Rys. 2: Wartość średnia $\bar{x}_3 t$ dla $P_{max} = 5$ (po lewej) oraz $P_{max} = 100$ (po prawej).

Widzimy zatem, że x_3 zdecydowanie rośnie, podczas gdy x_1 oraz x_2 maleją z czasem. Układ jednak nie stabilizuje się w pełni, ale wyraźnie fluktuuje. Dopiero wykonanie większej ilości powtórzeń sprawia, że wyznaczone wartości są dokładniejsze.