

# پروژه های پیشنهادی شبیه سازی

در این گزارش کوتاه به معرفی مدل سازی های مختلف و ساده در پدیده ها فیزیکی و فیزیک اقتصاد می پردازیم.

## ۱ مدل جداسازی شلینگ<sup>۱</sup>

در بسیاری از شهرها و جوامع امروزه آمیختگی نژادی و طبقاتی وجود دارد. و رفتار مردمان در این جوامع در مواجهه با نژادی مختلف و یا طبقه اجتماعی و اقتصادی متفاوت میتواند تحت تاثیر عوامل مختلفی قرار گیرد، و به مرور دینامیک ایجاد شده چهره برهمکنش دو گروه مختلف را تغییر میدهد. مدل جداسازی شلینگ یک مدل بسیار ساده است که به این مسئله میپردازد. فرض کنیم که دو گروه مختلف از جمعیت را داریم (این دو گروه میتوانند از دو نژاد مختلف و یا طبقه اقتصادی اجتماعی مختلف باشند). این دو گروه تحت اثر هیچ عامل خارجی نیستند و ممکن است حتی قابلیت تحمل بسیار خوبی در مقابل یک دیگر را داشته باشند. مدل شلینگ نشان میدهد که اگر در این جامعه هر گروه تنها تحت تاثیر میل درونی خود که در کنار درصدی مشخص از گروه مربوط به خود قرار گیرد، حتی اگر که این ترجیح بسیار کم باشد با گذر زمان شاهد جداسازی دو جامعه خواهیم بود.

### ۱.۱ چگونگی مدل سازی

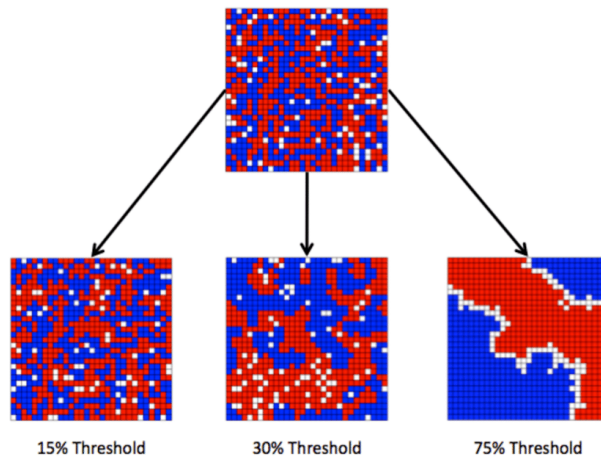
یک صفحه شطرنجی را در نظر بگیرید که به شکل رندم دو گروه را در آن پخش میکنیم هر خانه میتواند یا خالی باشد و یا توسط گروه  $M_1, M_2$  پر شده باشد. فرض میکنیم که خوشحالی هر آدم یا مامور در هر خانه به درصد همسایگان مربوط به گروه خود بستگی دارد (در اینجا از همسایگی مور<sup>۲</sup> استفاده میکنیم. به نوعی که هر خانه هشت همسایه دارد). اگر نسبت کمینه تحمل را با  $B_m$  نشان دهیم آنگاه در صورتی که نسبت همسایگان یکسان مامور به کل همسایگانش (بدون در نظر گرفتن خانه های خالی) از نسبت کمینه بیشتر باشد،  $B_m \leq B$ ، مامور راضی است و در این صورت در خانه خود باقی می ماند. در غیر این صورت ناراضی در نظر گرفته شده و به خانه خالی دیگری میرود که میتواند به شکل رندم و یا انتخاب نزدیک ترین خانه خالی باشد. توجه کنیم که جابجایی به شکل همزمان برای تمام مامورانی که ناراضی هستند رخ میدهد.

این جابجایی تا جایی رخ میدهد که تمام ماموران (در صورت امکان) راضی باشند و اینگونه سیستم به تعادل میرسد. بعد از رسیدن به تعادل میتوان مشاهده کرد که دو گروه با شکل دادن خوشه هایی از یکدیگر

<sup>1</sup>Schelling's Model of Segregation

<sup>2</sup>Moore neighborhood

جدا میشوند. در اینجا اگر که دو مامور از یک گروه همسایه نزدیک هم باشند (به تعریف همسایه عادی باز میگردیم) آنگاه آن دو را متعلق به یک خوشه میدانیم. که اندازه این خوشه ها به عواملی مانند نسبت خانه های خالی، نسبت کمینه تحمل  $B_M$  بستگی دارد. ۱



شکل ۱: تشکیل خوشه ها بعد از رسیدن به تعادل برای نسبت تحمل های متفاوت

اگر اندازه خوشه  $c$  را با  $n_c$  نمایش دهیم. آنگاه میتوان مقدار  $\frac{n_c}{N_{tot}}$  را وزن هر خوشه  $c$  تعریف کرد. همانگونه که در درسامه تراوش مشاهده کردیم میانگین اندازه خوشه بعد از رسیدن به تعادل را به شکل زیر تعریف میکنیم:

$$S = \sum_{\{c\}} n_c p_c$$

پس از یک ساز و میانگین گیری از روی نمونه های مختلف با پارامترهای یکسان،  $\rho$ ،  $N$ ،  $B_m$  که درواقع  $\rho$  چگالی خانه های خالی است به ضریب جداسازی<sup>۳</sup> زیر میرسیم:

$$\langle s \rangle = \frac{2}{(N^2(1 - \rho))^2} \sum_{\{c\}} n_c^2$$

## ۲.۱ خواسته ها

- یک شبکه به طول  $N \times N$ ،  $N = 60$  بسازید و مدل شلینگ را با پارامتر دلخواه بر آن پیاده کنید و در هر قدم جابجایی تغییرات را نشان داده و به شکل gif ذخیره کنید. سعی کنید که مقادیر  $B_M$ ،  $\rho$  را به گونه ای انتخاب کنید که سیستم به تعادل رسیده و جداسازی در آن مشهود باشد.
- برای  $B_M$  های مختلف میانگین دفعات جابجایی را بدست آورده و نمودار آن را رسم کنید.

<sup>3</sup>Segregation coefficient

• نمودار مورد قبل را برای  $B_M$  ثابت و  $\rho$  متفاوت برحسب تعداد دفعات جابجایی رسم کنید.

• نمودار  $\langle s \rangle$  را برحسب  $B_M$  های مختلف و برای  $\rho$  متفاوت رسم کنید.

توجه کنید که در تمام خواسته‌های بالا نسبت دو گروه یکسان باشد.

## ۲ مدل سلولی پاتس

### ۱.۲ مدل پاتس

این مدل که برای اولین بار توسط رنفری پاتس ارائه شد در واقع گسترش مدل آیزینگ است. در مدل آیزینگ هر اسپین تنها میتواند در دو حالت بالا یا پایین باشد اما در مدل پاتس در واقع هر نقطه از شبکه میتواند در حالت‌های  $\{0, 1, 2, \dots, N\}$  قرار گیرد. در این صورت همیلتونی سیستم را به شکل زیر میتوان نوشت:

$$H = -J_P \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{s_i, s_j}$$

در ادامه به توضیح مدل میپردازیم:

#### ۱.۱.۲ چگونگی شبیه سازی این مدل

شبیه سازی این مدل شباهت بسیاری به مدل آیزینگ دارد. یک شبکه به طول  $L$  را درست میکنیم و به هر خانه مقدار رندم عدد از 1 تا  $N$  را اختصاص میدهم. و اینگونه شرایط اولیه را میسازیم. در مرحله بعد برای دینامیک سیستم به شکل رندم یک خانه را انتخاب کرده و نام آن را خانه کنترل قرار میدهم و سپس از بین همسایگان آن نیز به شکل رندم یکی را انتخاب میکنیم. و نام آن را خانه هدف قرار داده انتخاب اینکه بتوانیم حالت کنترل را بر حالت هدف کپی کنیم با روش متروپلیس صورت میگیرد.

$$P = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta H < 0 \\ e^{-\frac{\Delta H}{k_B T}} & \text{if } \Delta H \geq 0 \end{cases}$$

همانگونه که بیان شد این مدل و شبیه سازی آن همانند مدل آیزینگ است اما بسته به  $N$  تغییر فاز آن ممکن است گسسته و یا پیوسته باشد. اهمیت این مدل برای مدل سازی رشد تومور سرطانی و دیگر برهمکنش های سلولی است که با مدل سلولی پاتس<sup>۴</sup> شناخته میشود.

### ۲.۲ مدل سلولی پاتس

مدل سلولی پاتس یک مدل برای بررسی رفتار جمعی و یا منفرد سلول ها، گسترش سلول های سرطانی است. در این مدل فرض میشود که سلول ها اجسامی با حجم و اندازه مشخص اند که شکلشان قابل تغییر نیست و توانایی چسبیدن به سلول و یا بستر کشت را دارند. همیلتونی این مدل را میتوان براساس چسبندگی بین سلول ها، توانایی جابجایی، اندازه سلول تشکیل شده و موارد دیگر نوشت اما برای سادگی توضیح در این گزارش تنها به دو اندازه حجمی و چسبندگی بسنده میکنیم و موارد دیگر را به شکل تکمیلی می آوریم.

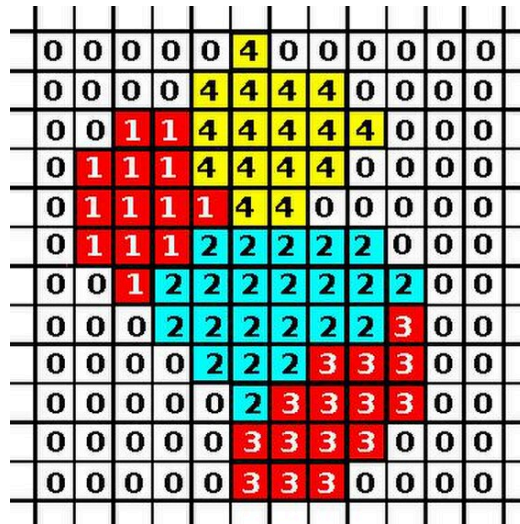
<sup>4</sup>Cellular Potts model

## ۱.۲.۲ توصیف مدل

یک شبکه مربعی را در نظر بگیرید. درون این شبکه هر خانه میتواند توسط یکی از شناسه های سلولی پر شود و یا اینکه خالی بماند .

$$c_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{Background} \\ 1 & \text{cell with Identity 1} \\ 2 & \text{cell with Identity 2} \\ \text{etc.} \end{cases}$$

خانه هایی با شناسه سلولی مشابه یک سلول را میسازند. بنابراین بر خلاف مدل آیزینگ و پاتس که شرایط اولیه را به شکل رندم قرار میدادیم در اینجا شبکه به گونه ای پر میشود که خانه های پر شده با شناسه سلول مشابه بهم چسبیده باشند. و تعداد این خانه ها در واقع حجم سلول را مشخص میکند. شکل ۲



شکل ۲: شرایط اولیه شبکه

دینامیک مدل سلول پاتس تغییر میکند زیرا هر سلول سعی میکند که سلول همسایه اش را و یا خانه ای خالی را فتح کند و قلمرو خود را افزایش دهد. این اتفاق به گونه ای رندم اما با قوانین آماری رخ میدهد به گونه ای که تغییرات منجر به کم کردن همیلتنی سیستم شود. بنابراین باید ابتدا همیلتنی سیستم را ساخت

## ۲.۲.۲ همیلتنی مدل سلولی پاتس

این همیلتنی از بخش های متفاوتی تشکیل شده که هر کدام مربوط به یکی از رفتارهای سلولی است:

- چسبندگی خانه ها و یا پیکسل هایی با شناسه یکسان تلاش میکنند که به یکدیگر بچسبند و انرژی مربوط به دو سلول متفاوت در کنار یکدیگر مثبت است و انرژی سیستم را افزایش میدهد:

$$H_{adhesion} = \sum_{i,j} J((c_i), (c_j))(1 - \delta_{c_i, c_j})$$

در عبارت بالا  $J$  پارامتری است که چسبندگی بین دو سلول کنار هم  $c_i, c_j$  را حساب میکند.

- حجم همانگونه که بالاتر ذکر شده تعداد خانه های با شناسه سلولی یکسان حجم سلول را تشکیل میدهد. هر سلولی یک حجم هدفی دارد که برای زنده ماندن نیاز دارد حجم آن ثابت بماند. از آنجایی که دینامیک سیستم ما به گونه ای تغییر میکند که شناسه هر خانه ممکن است تغییر کند بنابراین حجم سلول نیز یا بزرگ میشود و یا کمتر. اضافه کردن این مسئله به همیلتونی باعث میشود که یک سلول به شکل غیر قابل کنترلی بزرگ و یا نابود نشود.

$$H_{volume} = \lambda_V (V_\sigma - V_\sigma^0)^2$$

در عبارت بالا  $V_\sigma$  حجم سلول در زمان حال و  $V_\sigma^0$  حجم ایده آل سلول است.

بنابراین میتوان همیلتونی سیستم را به شکل زیر نوشت:

$$H_{tot} = H_{adhesion} + H_{volume}$$

البته میتوان برای واقع بینانه تر کردن شبیه سازی ویژگی های دیگر سلولی مانند جابجایی، تقسیم و مرگ سلولی. تحول سیستم توسط شرط متروپولیس رخ میدهد.

## ۳.۲ مرتب سازی سلولی<sup>۵</sup>

در شبیه سازی این پروژه به مرتب سازی سلولی میپردازیم. فرض کنیم که مخلوطی از سلول های مختلف داریم در آزمایشگاه میتوان با انجام فرایندهای به مرتب سازی سلول ها پرداخت به گونه ای که سلول هایی از یک نوع و یا اندازه و غشا پروتئینی یکسان کنار هم قرار گرفته و یک خوشه بزرگ تشکیل دهند. این کار برای انجام تحقیقات و تشخیص بیماری اهمیت دارد. در این پروژه تلاش میکنیم که فرایند مرتب سازی سلولی را با استفاده از مدل سلولی پاتس شبیه سازی کنیم. برای اینکار دو نوع سلول A, B را در نظر میگیریم. همانگونه که گفتیم خانه هایی با شناسه یکسان یک سلول را تشکیل میدهند. و هر سلول با شناسه  $c_{i,j}$  میتواند از نوع A, B باشد.  $(\tau(c_{i,j}) \in \{A, B\})$  در این مدل به شکل رندم سلول های را کنار یکدیگر قرار میدهیم و با استفاده از همیلتونی زیر و تغییرات آن شرط متروپولیس را چک میکنیم.

$$H_{tot} = \sum J(\tau(c_{i,j}), \tau(n_{i,j})) (1 - \delta_{(c_{i,j}, n_{i,j})}) + \lambda \sum (V_{\sigma_{i,j}} - V_{\tau(\sigma_{i,j})}^0)^2$$

در عبارت بالا  $V_{\tau(\sigma_{i,j})}$  مربوط به مقدار حجم مورد انتظار سلول نوع  $\tau(\sigma_{i,j})$  است و  $J$ . را انرژی مربوط به چسبندگی بین سلول ها و سلول-زمینه کشت مینامیم: همچنین  $n_{i,j}$  مربوط به شناسه همسایگان خانه  $i, j$  است. ۱. پس از گذشت تعداد قدم های متروپولیس مناسب مشاهده میکنیم که چینش سلول ها از حالت رندم خارج شده و سلول های یکسان کنار هم قرار میگیرند.

توجه شود که سلول ها با شناسه مختلف میتوانند از یک نوع باشند.

یک راه برای اندازه گیری کمیت مخلوط و یا جدا بودن سلول ها محاسبه طول مرزی است که درواقع طول اشتراک بین سلول ها از نوع مختلف را اندازه گیری میکند الگوریتم آن را میتوان به شکل ساده زیر نوشت :

<sup>5</sup>Cell sorting

Medium	Cell type B	Cell type A	
$J_{AM}$	$J_{AB}$	$J_{AA}$	Cell type A
$J_{BM}$	$J_{BB}$	$J_{BA}$	Cell type B

Table 1: کشت زمینه و های سلول میان چسبندگی پارامتر

```

create the 2D lattice size  $N$  and set initial conditions
make a dictionary that maps cell IDs to cell types
Set the boundary length between 2 type cells as zero:  $AB\_length = 0$ 
for  $i \in N$  do
  for  $j \in N$  do
    Get  $cell\_id$  of  $lattice_{i,j}$ 
    Get  $Cell\_type$  of  $cell\_id$ 
    for  $n_{i,j} \in \text{neighbors of } lattice_{i,j}$  do
      Get the  $neighbor\_id$ 
      if  $neighbor\_id == 0$  or  $neighbor\_id = cell\_id$  then
        break
      end if
      Get  $neighbor\_cell\_type$ 
      if  $neighbor\_cell\_type \neq cell\_type$  then
        ++  $AB\_length$ 
      end if
    end for
  end for
end for

```

## ۴.۲ خواسته‌ها

- با استفاده از پارامتر های مناسب مرتب سازی سلولی را برای دو نوع سلول و زمینه کشت شبیه سازی کنید و انیمیشن آن را درست کنید. و در نهایت عکس جدا سازی سلول ها را پس از اتمام قدم های مونت کارلو با دو رنگ کردن سلول ها نشان دهید.
- نمودار انرژی (همیلتونی) بر حسب قدم های مونت کارلو را رسم کنید
- باتوجه به توضیحات بالا نمودار طول مرزی برای قدم های مونت کارلو رسم نموده (برای هر دو سلول)