



UPPSALA  
UNIVERSITET

## Problemlösning 2 - Stokastisk simulering

Daniel Elfverson  
`daniel.elfverson@it.uu.se`

Division of Scientific Computing  
Uppsala University  
Sweden

# Simulering av kemiska system

## Deterministisk modell

Bygger på att kvantiteterna är så stora att reaktioner alltid sker. A, B, och C tolkas som koncentrationen

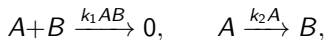
$$\frac{dA}{dt} = -k_1AB - k_2A,$$

$$\frac{dB}{dt} = -k_1AB + k_2A - k_3B,$$

$$\frac{dC}{dt} = +k_3B - k_4C.$$

## Stokastisk modell

Om antalet molekyler är litet ( $\leq 1000$ ). Ovanstående analyseras som enskilda reaktioner. A, B, och C tolkas som antal molekyler (heltalsvärden).



# Stökiometri

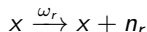
Reaktioner kan beskrivas som

r	Reaktion	Propensitet
1	A och B förbrukas	$\omega_1 = k_1 AB$
2	A blir B	$\omega_2 = k_2 A$
3	B blir C	$\omega_3 = k_3 B$
4	C förbrukas	$\omega_4 = k_4 C$

eller beskrivas i en stökiometri-matris/vektor.

$$N = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad n_r = N(r, :).$$

En reaktion kan då skrivas som



# Gillespies algoritm for stokastiska simuleringar

---

**Algorithm 1** Gillespies algoritm

---

- 1: Initialvilkor: sätt tillståndsvektorn  $x = x_0$ , starttid,  $t = t_0$  och stopp tid  $T$ .
  - 2: **while**  $t < T$  **do**
  - 3:     Sampla  $\tau$ , när nästa reaktion inträffar.
  - 4:     Hitta vilken reaktion som inträffar.
  - 5:     Uppdatera tillståndsvektorn.
  - 6:      $t = t + \tau$ .
  - 7: **end while**
-

```
1 function x = ssa(N, x0, t0, tFinal, ...)  
2  
3 x = x0;  
4 t = t0;  
5 while t < tFinal  
6     ...  
7     tau = ... (Tid till kommande reaktion?)  
8     r = ... (Vilken reaktion sker?)  
9     x = x + N(r,:);  
10    t = t + tau;  
11 end
```

- Er uppgift är att skriva klart algoritmen. Se Gillespies algoritm på sidan 21 i kompendiet.

# Tips

## Tiden till nästa reaktion?

Tiden till nästa reaktion är exponentiellt fördelad. Slumpa tider från exponentialfördelningen, genom *inverse transform sampling*. (TAVLA)

## Vilken reaktion händer?

Hitta sannorlighet för den olika reaktionerna. (TAVLAN)

- Matlab, `cumsum(x)`, `find(logiskt uttryck)`

## Anmärkning

Vi vet inte på förhand hur många tidssteg som behövs. Matlabs dynamiska minnesallokering är SJUKT långsam. Men gissa på (ca 250 000) hur mycket minne som behövs allokeras i förväg.