4. Übung - Gillespie-Algorithmus

Theoretische Physik
Universität des Saarlandes
Prof. Dr. Heiko Rieger

(Abgabe und Besprechung am 06.12.2018 um 14:00 im CIP-Pool)

1. [*2 Punkte*] **Tower Sampling**
Schreiben Sie ein Programm, welches Zufallszahlen aus einer diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilung mittels Tower Sampling generiert. Das Programm soll Ihnen dabei helfen, eine mögliche Freizeitbeschäftigung für Ihren Samstagabend zu finden. Betrachten Sie dabei folgende Aktivitäten mit jeweils der Wahrscheinlichkeit p_i: Lernen ($p_1 = 0.02$), Freunde treffen ($p_2 = 0.35$), Kino ($p_3 = 0.1$), Buch lesen ($p_4 = 0.2$), Sport treiben ($p_5 = 0.05$), DVD anschauen ($p_6 = 0.15$), Kochen ($p_7 = 0.13$). Würfeln Sie 10^3 bzw. 10^6 mal eine Freizeitaktivität aus und überzeugen Sie sich von der korrekten Arbeitsweise Ihres Programms.

2. [*8 Punkte*] **Chemischer Oszillator**
Gegeben sei die folgende autokatalytische Reaktion:

$$2A + B \xrightarrow{c_1} 3A, \qquad \emptyset \underset{c_3}{\overset{c_2}{\rightleftarrows}} A, \qquad \emptyset \xrightarrow{c_4} B \tag{1}$$

(a) Implementieren Sie Gillespies Algorithmus für beliebige Geschwindigkeitskonstanten c_1, c_2, c_3, c_4 und Anfangsteilchenzahlen N_A, N_B.
Hinweis: Achten Sie darauf die richtige Anzahl möglicher Reaktanden-Kombinationen h_i bei der Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeit (oder Reaktionsraten) $a_i = h_i c_i$.

(b) Leiten Sie das zugehörige System von deterministischen Differentialgleichungen her. Schreiben Sie ein Programm zur Lösung des Gleichungssystems für beliebige Konstanten c_1, c_2, c_3, c_4 und Anfangsteilchenzahlen N_A, N_B. Nutzen Sie ihre Erkenntnisse aus Übungsblatt 1 (oder einschlägige Softwarebibliotheken).

(c) Untersuchen Sie den Fall
  i. $c_1 = 4 \times 10^{-5}$, $c_2 = 50$, $c_3 = 10$, $c_4 = 25$
  ii. $c_1 = 4 \times 10^{-5}$, $c_2 = 50$, $c_3 = 10$, $c_4 = 75$

mit Anfangsteilchenzahlen $N_A = 10$, $N_B = 10$. Simulieren Sie bis zur Zeit $t = 100$. Mitteln Sie die Trajektorien $N_A(t)$ und $N_B(t)$ über 100 Durchläufe und berechnen Sie deren Varianz $\sigma_A^2(t)$ und $\sigma_B^2(t)$. Vergleichen Sie die Resultate der Monte-Carlo-Simulationen mit der Lösung des Differentialgleichungssystems. Plotten Sie hierfür $\langle N_A \rangle$ und $\langle N_B \rangle$ zusammen mit σ_A^2 und σ_B^2 als Funktion der Zeit t (benutzen Sie eventuell eine logarithmische Skala für die N-Achse). Betrachten Sie ausserdem die Trajektorien im Phasenraum (N_A, N_B). Diskutieren Sie die Ergebnisse.
Hinweis: Lassen Sie sich nicht davon abschrecken, daß stochastische und deterministische Resultate eventuell nicht übereinstimmen.

3. [*4 Punkte*] *Zusatzaufgabe:* **"Next-Event-Sampling"**
In der Vorlesung haben Sie Gillespies Algorithmus für konstante Reaktionsraten a_i kennengelernt, d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_i(t)$ für ein isoliertes Event i ist dort gegeben durch eine Exponentialverteilung mit Parameter a_i. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_{next}(t)$ für das nächste Event ist gegeben durch eine Exponentialverteilung mit dem Parameter $a = \sum_i a_i$. Die Korrektheit des Gillespie Algorithmus knüpft nicht an diese spezielle Form der Dichten. Dies soll Ihnen mithilfe dieser Aufgabe verdeutlicht werden.
Gegeben seien dazu N beliebige Wahrscheinlichkeitsdichten $\rho_i : \mathbb{R}_0^+ \to \mathbb{R}_0^+$ $(i = 1, ..., N)$ mit zugehörigen Verteilungsfunktionen $F_i(t)$.

(a) Erläutern Sie, warum

$$\varrho(i,t) = \rho_i(t) \prod_{j \neq i} (1 - F_j(t)) \tag{2}$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte (in Eventart und Zeit) ist, dass zum Zeitpunkt t das erste Event stattfindet und vom Typ i ist und damit

$$\rho_{next}(t) = \sum_i \varrho(i,t) \tag{3}$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte (in der Zeit) für das erste Event zum Zeitpunkt t ist.

(b) Begründen Sie, dass nachstehender Gillespie Algorithmus korrekt Tupel (i, t) gemäß $\varrho(i, t)$ erzeugt.

- Generiere für $j = 1, \ldots, N$ Zufallszeiten τ_j gemäß ρ_j
- Wähle kleinste Zeit $\tau = \min\{\tau_j\}$ und den zugehörigen Index $i = \arg\min_j\{\tau_j\}$
- Tupel (i, τ) für nächste Reaktion

Bei Fragen E-Mail an: a.wysocki@lusi.uni-sb.de