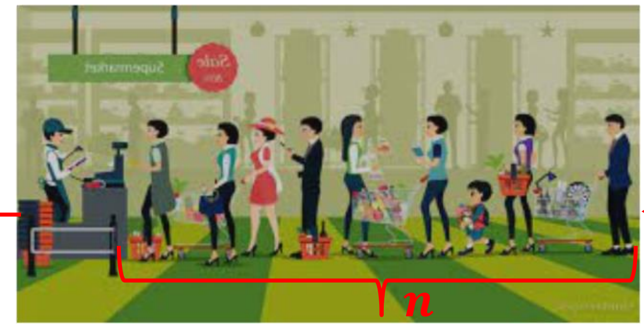
Master egyenlet egzakt és közelítő megoldási módszerei - I

Következő két előadás: elsősorban stacionárius állapotok meghatározása

Rekurziós (felgöngyölítéses) módszer

Master egyenlet $P_n(t)$-re,
az n hosszúságú sor valószínűségére

w_{ki} $\leftarrow$  $\leftarrow$ w_{be}

$$\dot{P}_n(t) = -(q+1)\,P_n(\mathrm{t}) + q\,P_{n-1}(\mathrm{t}) + P_{n+1}(\mathrm{t})$$

$$\dot{P}_0(t) = -q\,P_0(\mathrm{t}) + P_1(\mathrm{t})$$

$$q = w_{be}/w_{ki}$$

Stacionárius állapot, P_n^e:

$$\boxed{0 = -(q+1)P_n^e + q\,P_{n-1}^e + P_{n+1}^e} \qquad n > 0$$

$$\boxed{0 = -q\,P_0^e + P_1^e}$$

$\downarrow n = 1$

Rekurzió
általános n-re

Felgöngyölítés: $P_1^e = q\,P_0^e \longrightarrow P_2^e = q^2\,P_0^e$ $\qquad$ $P_n^e = q^n\,P_0^e$

Honnan jön P_0^e?
Normalizáció:

$$1 = \sum_{n=0}^{\infty} P_n^e = \sum_{n=0}^{\infty} q^n\,P_0^e = \frac{P_0^e}{1-q} \rightarrow P_0^e = 1\text{-}q \rightarrow \boxed{P_n^e = q^n(1-q)}$$

Összehasonlítás a generátor-függvény eredménnyel

Stacionárius állapot:

Felgöngyölítés:

$$\boxed{P_n^e = q^n(1-q)}$$

Generátor függvény:

$$\boxed{G_{(st)}(s) = \frac{1-q}{1-qe^{-s}}}$$

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n P_n^e$$

$$\langle n^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n^2 P_n^e$$

Bármit számolhatunk

$$\langle f \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n) P_n^e$$

Mintha a generátor függvény kevesebbet tudna?!

De: Eloszlásfüggvény számolása a generátor függvényből.

$$P_n^e = q^n(1-q)$$

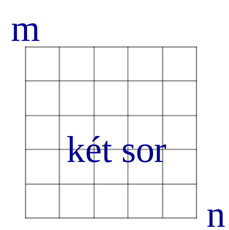
$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-sn} P_n^e = G_{(st)}(s) = \frac{1-q}{1-qe^{-s}} = (1-q)\sum_{n=0}^{\infty} q^n e^{-sn} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-sn}(1-q)q^n$$

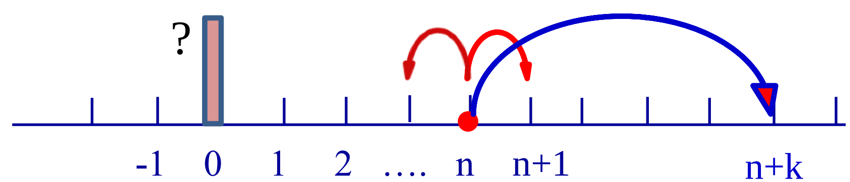
Problémák a rekurziós módszerrel:

i) δn ugrások nagysága

ii) változók száma n,m

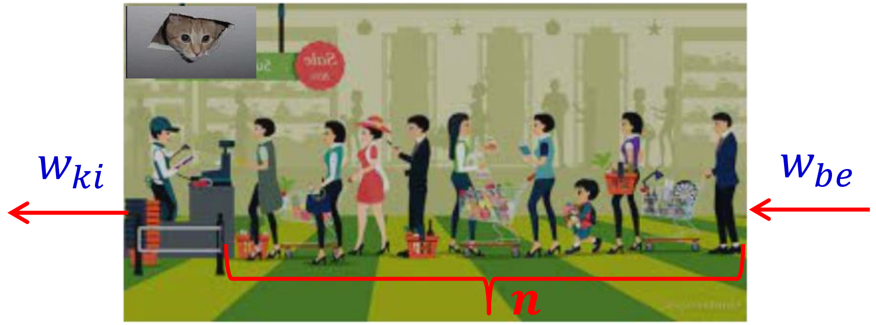
iii) határfeltételek





Születési-kihalási folyamatok

Kis paraméterek és sorfejtések



A pénztáros gyorsít hosszú sor esetén – modellépítés (feltételezés):

$$w_{ki} = w_{ki}^{0}(1 + \alpha n)$$

Dimenzió nélküli (kis) szám (elvileg mérhető) -- a parametrizálás problematikája.

Kérdés: Hogyan változik a sor átlagos hossza és szórása. Feltételezzük, hogy pl. kis α-ra:

$$\langle n\rangle_{\alpha} - \langle n\rangle_{0} = \alpha F(q) \ !?$$

Master egyenlet:

$$\dot{P}_n(t) = -[\, w_{be} + w_{ki}^{0}(1 + \alpha n)]\, P_n(\mathrm{t}) + w_{be}\, P_{n-1}(\mathrm{t}) + w_{ki}^{0}\big(1 + \alpha(n+1)\big)P_{n+1}(\mathrm{t}) \qquad n > 0$$

$$\dot{P}_0(t) = -w_{be}\, P_0(\mathrm{t}) + w_{ki}^{0}(1 + \alpha)\, P_1(\mathrm{t})$$

$$\Downarrow \quad q = w_{be}/w_{ki}^{0} \qquad t = t'/w_{ki}^{0}$$

$$\boxed{\dot{P}_n(t) = -(q + 1 + \alpha n)\, P_n(\mathrm{t}) + q\, P_{n-1}(\mathrm{t}) + \big(1 + \alpha(n+1)\big)P_{n+1}(\mathrm{t})} \qquad n > 0$$

$$\boxed{\dot{P}_0(t) = -q\, P_0(\mathrm{t}) + (1 + \alpha)\, P_1(\mathrm{t})}$$

Stacionári állapot:

$$\dot{P}_n(t) = 0$$

$$P_1^e = \frac{q}{1+\alpha}\, P_0^e$$

$$P_{n+1}^e = \frac{(q + 1 + \alpha n)P_n^e - qP_{n-1}^e}{1 + \alpha(n+1)}$$

A rekurzió működni látszik.

Rekurzió vége

- $P_1^e = \frac{q}{1+a} P_0^e$
- $P_{n+1}^e = \dfrac{(q+1+\alpha n)P_n^e - qP_{n-1}^e}{1+\alpha(n+1)}$

$$\boxed{P_n^e = \frac{q^n}{(1+\alpha)(1+2\alpha)\dots(1+n\alpha)} P_0^e}$$

$n = 2$ $$P_2^e = \frac{(q+1+\alpha)P_1^e - q P_0^e}{1+2\alpha} = \frac{(q+1+\alpha)q - q(1+\alpha)}{(1+\alpha)(1+2\alpha)} P_0^e = \frac{q^2}{(1+\alpha)(1+2\alpha)} P_0^e$$

P_0^e a normalizációból:

$$P_0^e = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^n}{(1+\alpha)(1+2\alpha)\dots(1+n\alpha)}\right]^{-1}$$

Elvileg elég jó számítógéppel numerikusan minden számolható.

Sorfejtés α-ban

$$P_0^e = \left[\sum_{n=0}^{\infty} q^n - \alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n(n+1)}{2} q^n\right]^{-1} = \left[\frac{1}{1-q} - \alpha \frac{q}{(1-q)^3}\right]^{-1} = 1 - q + \alpha \frac{q}{1-q}$$

$$P_n^e = q^n \left(1 - \alpha \frac{n(n+1)}{2}\right)\left(1 - q + \alpha \frac{q}{1-q}\right) = q^n (1-q)\left[1 + \alpha\left(\frac{q}{(1-q)^2} - \frac{n(n+1)}{2}\right)\right]$$

Átlagos sorhossz α rendig

$$P_n^e = q^n(1-q)\left[1+\alpha\left(\frac{q}{(1-q)^2}-\frac{n(n+1)}{2}\right)\right]$$

$$\langle n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} nP_n^e = (1-q)\sum_{n=0}^{\infty} nq^n + \alpha(1-q)\sum_{n=0}^{\infty} nq^n\left(\frac{q}{(1-q)^2}-\frac{n(n+1)}{2}\right)$$

$$\langle n\rangle_{\alpha=0} = \frac{q}{1-q} \qquad \sum_{n=0}^{\infty} nq^{n+1} = \frac{q^2}{(1-q)^2} \qquad \sum_{n=0}^{\infty}\frac{n^2(n+1)}{2}q^n = \frac{q(2q+1)}{(1-q)^4}$$

$$\boxed{\langle n\rangle = \langle n\rangle_{\alpha=0} - \alpha\frac{q(q+1)}{(1-q)^3}}$$

Ha a cél: $\langle n\rangle_0 = 2 \ \rightarrow \ q = 2/3$

$$\langle n\rangle = 2 - \underset{?}{\underline{30\alpha}} + O(\alpha^2)$$

$30\alpha \ll 2$

Tanulságok:

i) Első rendig a sorfejtés nagyobb erőfeszítés nélkül elvégezhető.

ii) Várható eredmény, a korrekció azonban nagy tud lenni.

iii) Ilyenkor magasabb (legalább másod) rendig kellene számolni (ami már nehezebb).

Fluktuációk: $$\langle n^2\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n^2P_n^e = \langle n^2\rangle_0 + \alpha(\dots) \qquad \sigma = \sqrt{\langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2} = \sigma_0 + \alpha(\dots)$$

+50

Master egyenlet egzakt és közelítő megoldási módszerei - II

Egyenletek alacsony rendű momentumokra – átlagtér közelítés

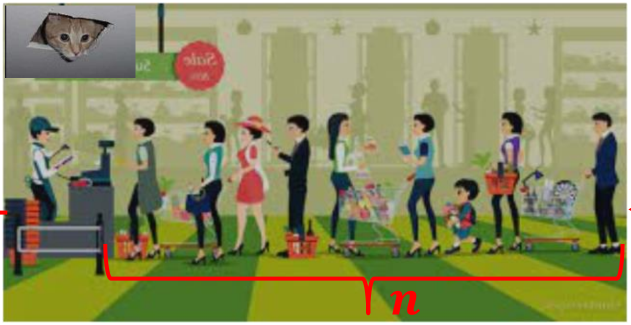
Általában az átlag ⟨n⟩ és az átlag körüli fluktuációk ⟨n²⟩-⟨n⟩² a fontosak.
A master egyenletből kiindulva, deriváljunk egyenleteket ezekre a mennyiségekre.

Példa: Sorbanállás

$$\langle n\rangle_t = \sum_{n=0}^{\infty} n\, P_n(t)$$

$$\langle n^2\rangle_t = \sum_{n=0}^{\infty} n^2 P_n(t)$$

w_{ki}



w_{be}

$q = w_{be}/w_{ki}$

Master egyenlet:

$$\dot{P}_n(t) = -(q+1)\, P_n(\mathrm{t}) + q\, P_{n-1}(\mathrm{t}) + P_{n+1}(\mathrm{t}) \qquad \dot{P}_0(t) = -q\, P_0(\mathrm{t}) + P_1(\mathrm{t})$$

Egyenlet az 1. momentumra:

$$\langle \dot{n}\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} n\, \dot{P}_n = -(q+1)\sum_{n=1}^{\infty} nP_n + q\sum_{n=1}^{\infty} nP_{n-1} + \sum_{n=1}^{\infty} nP_{n+1} = q - 1 + P_0(t)$$

$$-(q+1)\langle n\rangle$$

$$q\sum_{n=1}^{\infty}(n-1+1)P_{n-1} = q\langle n\rangle + q$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}(n+1-1)P_{n+1} = \langle n\rangle - P_1 - (1 - P_0 - P_1)$$

Egyenletek alacsony rendű momentumokra – a zártság problémája

$$\boxed{\langle \dot{n} \rangle = q - 1 + P_0(t)}$$

$P_0(t) -$ t nem ismerjük, az egyenlet nem zárt $\langle n \rangle -$ re.

Viszont P_0 stacionárius értéke megkapható: $\langle \dot{n} \rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \underline{P_0^e = 1 - q}$

Egyenlet a 2. momentumra:

$$\langle \dot{n^2} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \dot{P}_n = -(q+1) \sum_{n=1}^{\infty} n^2 P_n + q \sum_{n=1}^{\infty} n^2 P_{n-1} + \sum_{n=1}^{\infty} n^2 P_{n+1}$$

$$-(q+1)\langle n^2 \rangle \qquad q[\,\langle n^2 \rangle + 2\langle n \rangle + 1\,] \qquad \langle n^2 \rangle - 2\langle n \rangle + 1 - P_0(t)$$

$$q \sum_{n=1}^{\infty} [(n-1)^2 + 2(n-1) + 1] P_{n-1} = q[\,\langle n^2 \rangle + 2\langle n \rangle + 1\,]$$

$$\boxed{\langle \dot{n^2} \rangle = 2(q-1)\langle n \rangle + 1 + q - P_0(t)}$$

Az egyenletek $\langle n \rangle$ és $\langle n^2 \rangle$-re továbbra sem zártak.

$\langle n \rangle$ stacionárius értéke számolható: $\left.\begin{aligned} \langle \dot{n^2} \rangle &= 0 \\ P_0^e &= 1 - q \end{aligned}\right\} \rightarrow \underline{\langle n \rangle_e = \dfrac{q}{1-q}}$

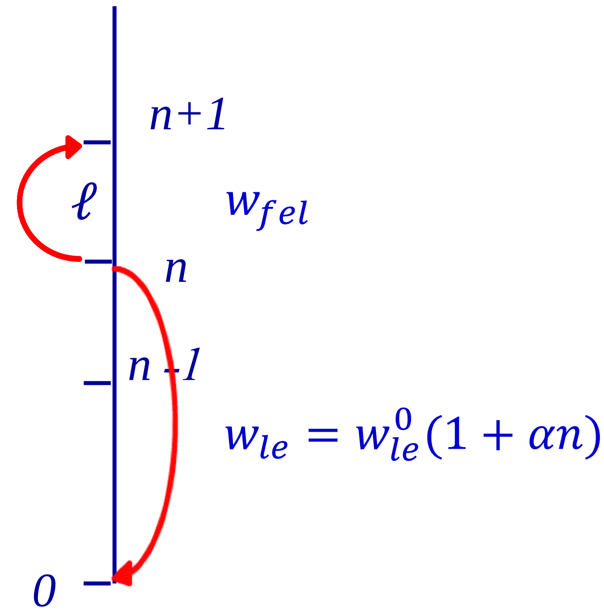
$$\boxed{\langle \dot{n^3} \rangle = \cdots} \quad \rightarrow \quad \langle \dot{n^3} \rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \underline{\langle n^2 \rangle_e = \cdots}$$

Hegymászó példája – master egyenlet

w_{fel} felfelé lépés rátája

$w_{le} \equiv w_{le}^0(1+\alpha n)$ lezuhanás rátája

minél magasabban annál inkább zuhan



Master egyenlet:

$$\dot{P}_n(t) = -[\,w_{fel} + w_{le}^0(1+\alpha n)]\,P_n(\mathrm{t}) + w_{fel}\,P_{n-1}(\mathrm{t})$$

$$\dot{P}_0(t) = -w_{fel}\,P_0(\mathrm{t}) + w_{le}^0 \sum_{n=1}^{\infty}(1+\alpha n)P_n(t) \qquad n = 0$$

$$\Downarrow \quad q = w_{fel}/w_{le}^0 \qquad t = t'/w_{le}^0$$

$$\dot{P}_n(t) = -(q + 1 + \alpha n)\,P_n(\mathrm{t}) + qP_{n-1}(\mathrm{t}) \qquad n > 0$$

$$\dot{P}_0(t) = -qP_0(\mathrm{t}) + \sum_{n=1}^{\infty}(1+\alpha n)P_n(t) \qquad n = 0$$

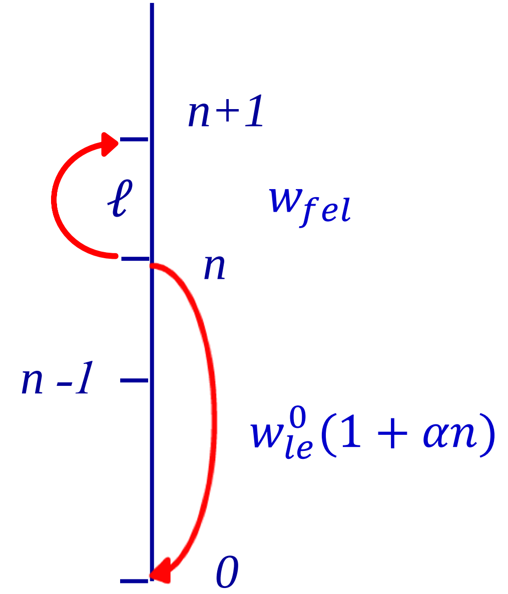
$$\sum_{n=1}^{\infty} P_n(t) + \alpha \sum_{n=1}^{\infty} nP_n(t) = 1 - P_0(t) + \alpha\langle n\rangle$$

Hegymászás – egyenletek a momentumokra

$$\dot{P}_n(t) = -(q + 1 + \alpha n)\, P_n(t) + q P_{n-1}(t) \qquad n > 0$$

$$\dot{P}_0(t) = -(q+1)P_0(t) + 1 + \alpha\langle n\rangle \qquad n = 0$$

$$q = \frac{w_{fel}}{w_{le}^0}$$



Egyenlet az 1. momentumra:

$$\langle \dot{n}\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} n\,\dot{P}_n = -(q+1)\sum_{n=1}^{\infty} nP_n - \alpha\sum_{n=1}^{\infty} n^2P_n + q\sum_{n=1}^{\infty} nP_{n-1}$$

$$\langle \dot{n}\rangle = -(q+1)\langle n\rangle - \alpha\langle n^2\rangle + q(\langle n\rangle + 1)$$

$$\boxed{\langle \dot{n}\rangle = q - \langle n\rangle - \alpha\langle n^2\rangle}$$

Probléma: az 1. momentumra egyenlete tartalmazza a 2.-at.

Egyenlet a 2. momentumra:

$$\langle \dot{n^2}\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} n^2\,\dot{P}_n = -(q+1)\sum_{n=1}^{\infty} n^2P_n - \alpha\sum_{n=1}^{\infty} n^3P_n + q\sum_{n=1}^{\infty} n^2P_{n-1}$$

$$\boxed{\langle \dot{n^2}\rangle = -(q+1)\langle n^2\rangle - \alpha\langle n^3\rangle + q\langle n^2\rangle + 2\mathrm{q}\langle n\rangle + \mathrm{q}}$$

2. mom. egyenlete tartalmazza a 3. mom-ot: általában magasabb rendű momentumok jelennek meg

Átlagtér közelítés

Feltételezés I: a fluktuációk kicsik: $\boxed{\langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2 \approx 0}$

$$\boxed{\langle \dot{n}\rangle = q - \langle n\rangle - \alpha\langle n^2\rangle} \longrightarrow \langle \dot{n}\rangle = q - \langle n\rangle - \alpha\langle n^2\rangle + \alpha\langle n\rangle^2 - \alpha\langle n\rangle^2$$

$$\boxed{\langle \dot{n^2}\rangle = q + 2\mathrm{q}\langle n\rangle - \langle n^2\rangle - \alpha\langle n^3\rangle}$$

$$\downarrow$$

$$\langle \dot{n}\rangle = q - \langle n\rangle - \alpha(\underbrace{\langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2}_{\boxed{\approx 0}}) - \alpha\langle n\rangle^2$$

Feltételezés II: Mindkét egyenletet megtartjuk, $\langle n^3\rangle$-t közelítjük.

(I) esetén: $\langle n^2\rangle \to \langle n\rangle^2$

Lehetséges közelítés most: $\langle n^3\rangle \to \langle n\rangle^3$

$$\boxed{\langle \dot{n}\rangle = q - \langle n\rangle - \alpha\langle n^2\rangle}$$

$$\boxed{\langle \dot{n^2}\rangle = q + 2\mathrm{q}\langle n\rangle - \langle n^2\rangle - \alpha\langle n\rangle^3}$$

Zárt egyenletrendszer $\langle n\rangle$ és $\langle n^2\rangle$ -re

Zárt egyenlet $\langle n\rangle$ –re

$$\downarrow$$

$$\boxed{\langle \dot{n}\rangle = q - \langle n\rangle - \alpha\langle n\rangle^2}$$

Stacionárius állapot:

$$0 = q - \langle n\rangle_e - \alpha\langle n\rangle_e^2$$

$$\langle n\rangle_e = \frac{1}{2\alpha}\left[-1 \pm \sqrt{1+4\alpha q}\right] \qquad > 0$$

Finomabb közelítések, pl. Gaussi fluktuációk: harmadik kumuláns =0 feltétel:

$$\kappa_3 = \langle n^3\rangle - 3\langle n\rangle\langle n^2\rangle + 2\langle n\rangle^3 = 0$$

Alkalmazások

Hogyan kontrollálódik a szőrök hossza?

Length control of long cell protrusions: rulers, timers and transport
S Patra, D Chowdhury, F Jülicher
arXiv:2203.11867v1 [physics.bio-ph] 22 Mar 2022

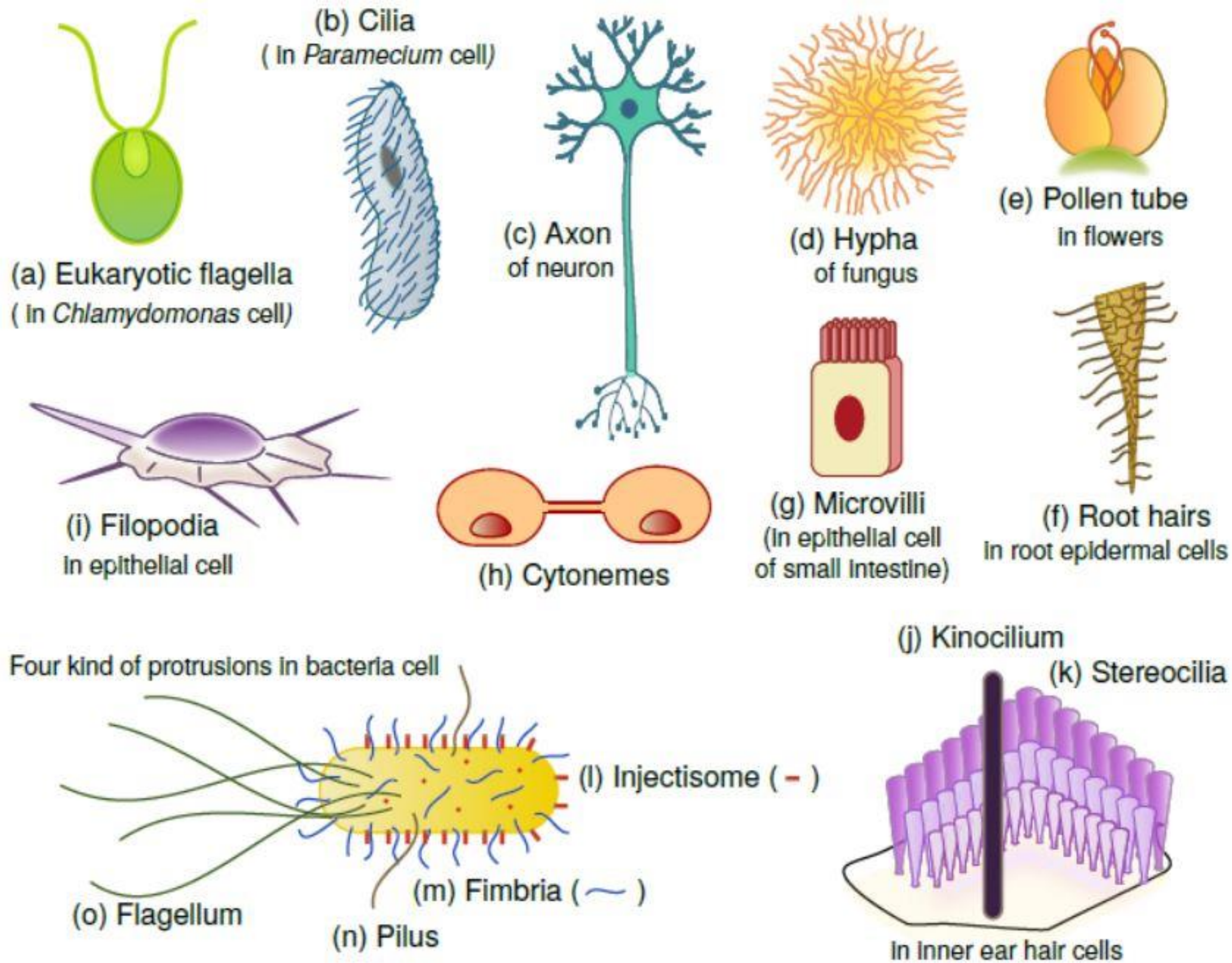
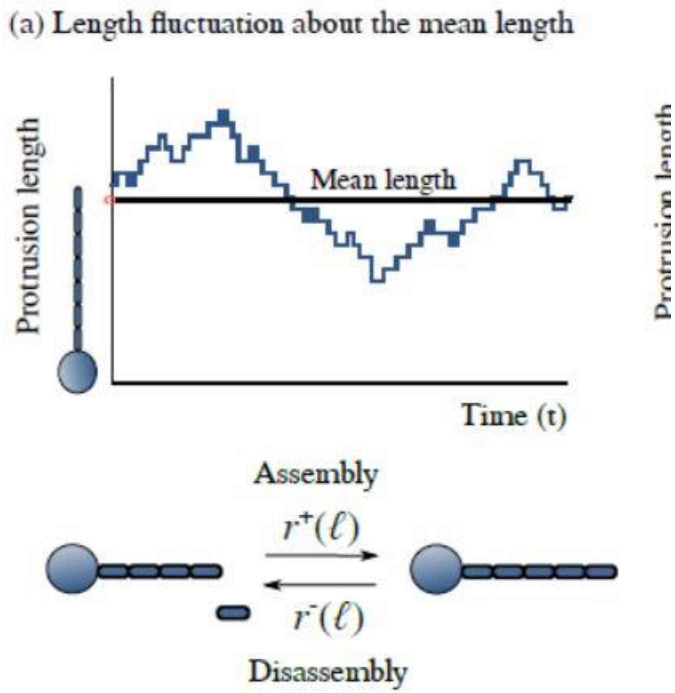
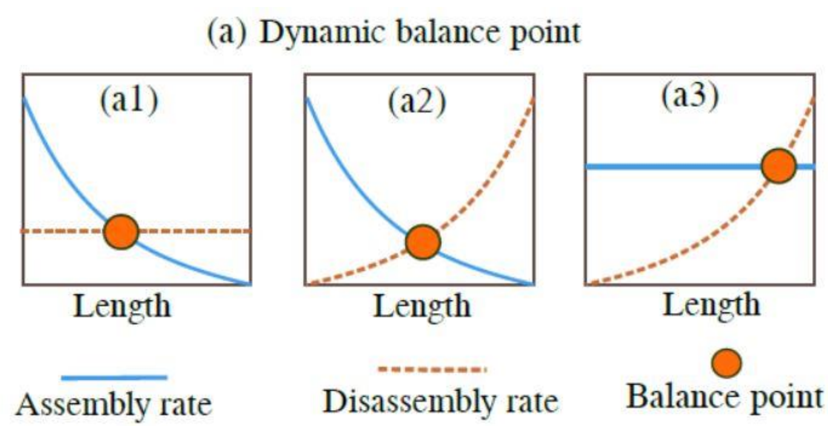


FIG. 1. **Long protrusions of living cells and unicellular microorganisms:** Protrusions of (a-k) eukaryotic and (l-o) prokaryotic cells.

Simple models





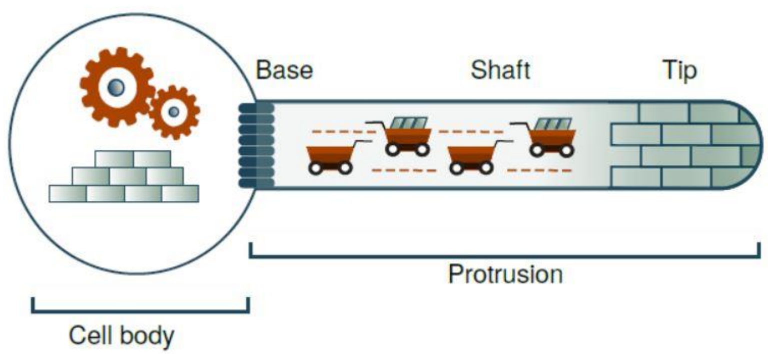


FIG. 3. **Architectural design of a cell protrusion:** Three major compartments of the protrusion are base, shaft and tip. Transport logistics facilitate exchange of materials between the cell body and the protrusion.