

Projeto Computacional

Computação IV - Data de entrega: **17/07/2022**

O objetivo deste projeto é fazer algumas simulações computacionais para reações (bio-)químicas estocásticas. Um resumo da teoria é apresentado em [1] e no Capítulo 6 de [2]. Deverão ser implementados o algoritmo *Stochastic Simulation Algorithm* (ver [1] e o Capítulo 6 de [2]) para a *Chemical Master Equation* e o algoritmo de Euler-Maruyama (ver [1] e [3]) para a *Chemical Langevin Equation*.

As implementações devem ser feitas em Python 3.x. Use-as para simular os casos descritos em todas as seções do Capítulo 7 de [2]. Procure reproduzir as figuras. Para cada algoritmo, calcule a média e a variância amostrais e a distribuição empírica de probabilidade em uma coleção de instantes de tempo, usando dados de muitas simulações independentes. Com essas informações, compare os algoritmos entre si.

O projeto deve ser desenvolvido em grupos de 3 a 4 estudantes.

Referências

- [1] Desmond J. Higham. “Modeling and Simulating Chemical Reactions”. Em: *SIAM Review* 50.2 (2008), pp. 347–368.
- [2] Darren J. Wilkinson. *Stochastic Modelling for Systems Biology*. Third Edition. Taylor & Francis Group, LLC, 2019.
- [3] Desmond J. Higham. “An Algorithmic Introduction to Numerical Simulation of Stochastic Differential Equations”. Em: *SIAM Review* 43.3 (2001), pp. 525–546.