Université Pierre et Marie Curie
Parcours MSA
Processus Stochastiques Année 2013 - 2014

TD N°6 : Développement de Van Kampen

Modèle à trois états d'une enzyme

On considère d'abord une enzyme unique qui peut être trouvée dans trois différents états A, B or C. Les transitions entre ces différents états sont données par :

$$\mathrm{A} \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \mathrm{B}$$

$$\mathrm{B} \underset{k_{-2}}{\overset{k_2}{\rightleftharpoons}} \mathrm{C}$$

$$\mathrm{C} \underset{k_{-3}}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} \mathrm{A}$$

1) Ecrire les équations maîtresses pour les probabilités de trouver l'enzyme dans les états A, B, ou C au temps t, que l'on appellera respectivement $p_A(t)$, $p_B(t)$ and $p_C(t)$.

On considère maintenant un système fermé contenant un nombre total fixe N d'enzymes du type ci-dessus.

2) Ecrire l'équation maîtresse satisfaite par la probabilité $p_{n_A,n_B,n_C}(t)$ d'avoir n_A enzymes dans l'état A, n_B enzymes dans l'état B et n_C enzymes dans l'état C au temps t (sans tenir compte de la contrainte $N = n_A + n_B + n_C$). On prendra bien soin de lister l'ensemble des situations conduisant, par les diverses transitions possibles, à la configuration (n_A, n_B, n_C).

3) Justifier, sans effectuer de calcul, que la solution de cette équation maîtresse doit être de la forme suivante :

$$p_{n_A,n_B,n_C}(t) = \frac{N!}{n_A!\, n_B!\, n_C!} p_A(t)^{n_A} p_B(t)^{n_B} p_C(t)^{n_C}. \tag{1}$$

4) Déduire de l'expression (1), la valeur moyenne et la variance des variables aléatoires n_i en fonction de $p_i(t)$ où $i = \{A, B, C\}$. Calculer aussi la covariance entre n_i et n_j.

5) On souhaite maintenant effectuer un calcul des fluctuations autour des concentrations moyennes des différentes espèces d'enzymes dans un développement dans la taille du système. On écrit donc :

$$n_i = \Omega\, C_i(t) + \sqrt{\Omega}\, \xi_i$$

où Ω est le volume du système, $C_i(t)$ est la concentration moyenne de l'espèce i, et ξ_i est une variable aléatoire qui décrit les fluctuations de la variable n_i, $i = \{A, B, C\}$.

On écrit alors la probabilité $p_{n_A,n_B,n_C}(t)$ sous la forme :

$$
\begin{aligned}
p_{n_A,n_B,n_C}(t) &= p\left(\Omega\, C_A(t) + \sqrt{\Omega}\,\xi_A, \Omega\, C_B(t) + \sqrt{\Omega}\,\xi_B, \Omega\, C_C(t) + \sqrt{\Omega}\,\xi_C, t\right) \\
&= \Pi(\xi_A, \xi_B, \xi_C, t)
\end{aligned}
$$

a) Calculer $\partial\Pi(\xi_A, \xi_B, \xi_C, t)/\partial t$ en fonction de $\partial p_{n_A,n_B,n_C}(t)/\partial t$, des $\partial\Pi(\xi_A, \xi_B, \xi_C, t)/\partial\xi_i$ et des $\partial C_i(t)/\partial t$ avec $i = \{A, B, C\}$.

b) Déterminer les expressions, dans la limite de grand volume Ω et à l'ordre $1/\Omega$, des probabilités (par exemple : $p_{n_A+1,n_B-1,n_C}(t)$) intervenant dans l'équation maîtresse dérivée au **2)** en fonction des $\Pi(\xi_A, \xi_B, \xi_C, t)$ et de leurs dérivées premières et secondes par rapport aux ξ_i.

c) Déduire des questions précédentes le développement de l'équation maîtresse à l'ordre $\sqrt{\Omega}$ et montrer que l'on retrouve un résultat attendu.

6) Effectuer alors le développement à l'ordre suivant, Ω^0, et en déduire une équation de Fokker-Planck dans les variables ξ_A, ξ_B et ξ_C, qui approxime l'équation maîtresse initiale. Quel type de solution s'attend-on à avoir pour cette équation ?