

Biyokimyasal Reaksiyon Sistemlerinin Matematiksel Modellenmesi

Derya ALTINTAN

Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Matematik Bölümü

E-Posta : altintan@selcuk.edu.tr

ÖZET

Biyolojik ve kimyasal reaksiyonların dinamiklerini incelemek için iki popüler yaklaşım bulunmaktadır. En yaygın olarak kullanılan deterministik yaklaşım bu süreçlerin dinamiklerini Reaksiyon Oran Denklemleri (RRE) adı verilen Adi Diferansiyel Denklemler (ODE) ile modeller [1]. Bu yaklaşımda reaksiyon sistemlerinin zamana bağlı değişiminin sürekli ve deterministik olduğu kabul edilir. Bu geleneksel yaklaşım birçok sistem için geçerli olmasına rağmen, gen modeli ve bulaşıcı hastalıkların yayılma modeli gibi sistem içerisinde yer alan bazı türlerin yoğunluklarının çok düşük olduğu ya da stokastik dalgalanmaların sistem dinamiklerini etkilediği durumlarda uygun değildir. Bu sorunları çözebilmek için stokastik modelleme yaklaşımı önerilmiştir [2]. Deterministik yaklaşımdan farklı olarak, bu yaklaşım sistemin dinamiklerinin kesikli ve stokastik olduğunu kabul eder. Stokastik yaklaşıma göre, sistemin konum vektörü Rastgele Zamanlı Değişim Modeli (RTCM) ya da Kimyasal Langevin Denklemi (CLE) ile tanımlanır. Ayrıca, olasılık fonksiyonunun zamana bağlı türevi Temel Kimyasal Denklemi (CME) ya da Fokker-Planck Denklemi (FPE) sağlar [3,4].

Konuşmamızda, stokastik modelleme yaklaşımının temellerini ve bu yaklaşımın geleneksel deterministik yaklaşım ile bağlantılarını anlatacağız. Aynı zamanda, deterministik ve stokastik modelleme yaklaşımlarını birleştiren sıçramalı difüzyon yaklaşımının kısa bir özetini vereceğiz [5].

Anahtar Kelimeler : Deterministik Yaklaşım, Stokastik Yaklaşım, Rastgele Zamanlı Değişim Modeli, Kimyasal Langevin Denklemi, Temel Kimyasal Denklemi, Fokker-Planck Denklemi.

ABSTRACT

There are two popular approaches to analyze the dynamical behavior of the biological and chemical reactions. The deterministic approach, which is the most common approach, assumes that the dynamics of these processes can be modelled by the Ordinary Differential Equations (ODEs), called the Reaction Rate Equations (RREs) [1]. In this approach, it is accepted that the time evolution process of the reaction systems is continuous and deterministic. Although this traditional approach is appropriate for many systems, it is not suitable when the concentrations of some species are low or the stochastic fluctuations affect the dynamics of the system such as the gene regulation model and the separation of infection model. In order to unravel the underlying challenges, stochastic modelling approach is proposed [2]. Different from the deterministic approach, this approach assumes that the dynamics of the system is discrete and stochastic. According to the stochastic approach, the state of the system is defined by the Random Time Change Model (RTCM) or the Chemical Langevin Equation (CLE). Furthermore, time derivative of the probability function satisfies the Chemical Master Equation (CME) or the Fokker Planck Equation (FPE) [3,4].

In this talk, we will explain the basics of the stochastic modelling approach and its relations with the traditional deterministic modelling approach. Also, we will give a brief summary of the jump diffusion approximation which combines the deterministic and the stochastic modeling approaches [5].

Keywords: Deterministic Approach, Stochastic Approach, Random Time Change Model, Chemical Langevin Equation, Chemical Master Equation, Fokker Planck Equation