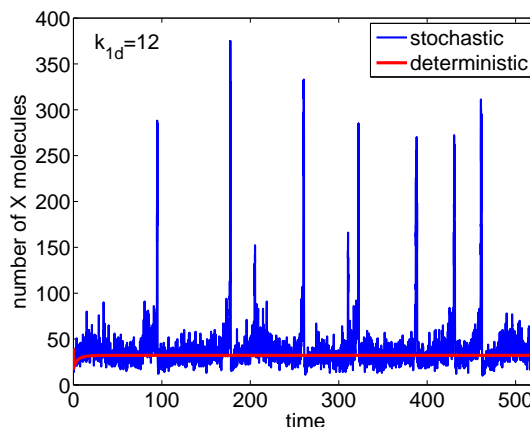


# NABÍDKA DIPLOMOVÉ PRÁCE

## Deterministické a stochastické modelování v molekulární a buněčné biologii

V této diplomové práci se budeme zabývat matematickými modely biochemických procesů, které se odehrávají v živých buňkách. Jejich klasický (deterministický) popis založený na soustavě **obyčejných diferenciálních rovnic** (ODR) selhává. Důvodem je, že množství některých klíčových bílkovin nebo mRNA se v buňkách měří na řádově jednotky molekul a pak lze těžko mluvit o koncentracích. Proto se používají různé **stochastické simulační algoritmy** jako například molekulární simulace a Gillespieho stochastický algoritmus. Při modelování biochemických procesů v buňkách můžeme pozorovat kvalitativně rozdílné chování deterministických a stochastických modelů (viz obrázek). Příkladem jsou modely **genetické regulace** [3, 4], **buněčného cyklu** [5] nebo **cirkadiálních rytmů** [6].



Z pohledu matematického modelování jde o velmi bohatou oblast s celou řadou otevřených problémů. Problematiku lze zkoumat z různých směrů pomocí různých matematických a výpočetních nástrojů. Je možné se věnovat vývoji a analýze stochastických simulačních algoritmů pomocí vhodných **parciálních diferenciálních rovnic** (PDR) – například tzv. **Fokker-Planckovy** rovnice. Z numerického řešení těchto PDR lze získat některé praktické informace o studovaném systému, například periodu oscilací, střední čas změny stavu, apod. Je možné porovnávat a analyzovat různé deterministické (ODR) a stochastické modely. Nejzajímavější je studium jejich **bifurkací**. Stochastické simulační algoritmy sice dávají podrobnější informaci o studovaném systému, ale jsou velmi náročné na počítačový čas. Proto je třeba vyvíjet **efektivní numerické metody**.

Student, který by se této problematice chtěl věnovat, se bude muset seznámit s deterministickými a stochastickými modely chemických systémů [2]. Měl by být schopen naprogramovat jednoduché modely a porovnat výsledky, podobně jako v [1]. Konkrétní zaměření diplomové práce bude upřesněno podle individuálních zájmů studenta. Lze se věnovat **numerickým metodám pro PDR, matematickému modelování, analýze PDR** nebo **stochastické analýze**.

Externími konzultanty této diplomové práce by byli Dr. Radek Erban z university v Oxfordu (Velká Británie) a další spolupracovníci. Během práce na tomto tématu by bylo možné zrealizovat pracovní návštěvu vědecké skupiny Dr. Erbana na universitě v Oxfordu.

<http://people.maths.ox.ac.uk/erban/>

**Kontakt:** RNDr. Tomáš Vejchodský, Ph.D., Matematický ústav AV ČR, v.v.i., Žitná 25, 115 67 Praha 1, e-mail: [vejchod@math.cas.cz](mailto:vejchod@math.cas.cz), tel.: 222 090 713. <http://www.math.cas.cz/vejchod/>

### Literatura

- [1] R. Erban, J. Chapman, I. Kevrekidis, T. Vejchodský, SIAM J. Appl. Math. 70(3), pp. 984–1016, 2009
- [2] R. Erban, J. Chapman, P. Maini, Lecture Notes, <http://arxiv.org/abs/0704.1908>, 35 p., 2007
- [3] T. Kepler, T. Elston, Biophysical J. 81, pp. 3116–3136, 2001
- [4] R. Erban, I. Kevrekidis, D. Adalsteinsson, T. Elston, J. Chemical Phys. 124(8), 084106, 17 p., 2006
- [5] S. Kar, W. Baumann, M. Paul, J. Tyson, Proc. Nat. Acad. Sci. USA 106, pp. 6471–6476, 2009
- [6] J. Villar, H. Kueh, N. Barkai, S. Leibler, Proc. Nat. Acad. Sci. USA 99, pp. 5988–5992, 2002