

Wyznaczanie parametrów ścieżek metabolicznych za pomocą rozproszonej metody Monte Carlo.

Paweł Lebioda

Przedstawiony referat dotyczy wyznaczania parametrów ścieżek metabolicznych za pomocą rozproszonej metody Monte Carlo. Ścieżki metaboliczne są to ciągi reakcji chemicznych mających miejsce w komórkach. Ścieżki mogą się w pewnym stopniu pokrywać, tworzyć rozgałęzienia lub cykle. Istniejące schematy ścieżek zawierają tysiące reakcji chemicznych.

Każdą reakcję chemiczną charakteryzuje się przez pewne równanie różniczkowe. W przypadku ścieżek metabolicznych trzeba stworzyć układy równań różniczkowych składających się z dużej liczby parametrów. Ze względu na wielkość układu jak i ograniczone informacje o modelu, wyznaczanie parametrów równań nie jest trywialne, nie można ich wyliczyć albo otrzymać, na przykład z danych eksperymentalnych.

Jednym ze sposobów rozwiązania problemu jest zastosowanie metody Monte Carlo. Stosując tą metodę wyznacza się parametry równań różniczkowych tak, aby wyniki symulacji modelu jak najlepiej odpowiadały danym eksperymentalnym. Ze względu na ogromną liczbę parametrów i równań różniczkowych należy się posłużyć obliczeniami rozproszonymi.

Podczas referatu przedstawione zostaną wyniki dla model cyklu Krebsa (kwasu cytrynowego).