Posudek vedoucího diplomové práce

J. Lipková: Stochastické modelování reakčně-difuzních procesů v biologii

Práce se zabývá studiem reakčně-difuzních mechanismů v souvislosti s tzv. Turingovými vzory. Základní otázka, která je zde kladena, se týká možnosti vzniku nestability soustav parciálních diferenciálních rovnic reakce-difuze "způsobené" difuzním členem, tedy případu, kdy homogenní stacionární řešení soustavy bez difuzního členu stabilní vůči malých poruchám se stane nestabilním v přítomnosti difuzního členu. Autorka se zabývá podrobným zkoumáním tohoto jevu analyticky i numericky.

Práce je členěna do pěti kapitol (včetně úvodu) a dodatku. Kapitola 2 se zabývá odvozením deterministických a stochastických modelů (demonstrovaných na příkladech), je zde odvozená soustava rovnic pro přechodové pravděpodobnosti stochastické dynamiky počtu molekul látky a popsán Gillespieho algoritmus simulující tento náhodný proces. V kapitole 3 je pak zavedena příslušná soustava reakčně-difuzních rovnic, jsou definovány pojmy Turingovy nestability a Turingových vzorů a jsou uvedeny a dokázány dvě obecné věty, formulující nutnou a postačující podmínku pro Turingovu nestabilitu. Tyto výsledky jsou pak aplikovány ve speciálnějším prípadě na zkoumaný model chemické reakce. Další část se zabývá simulacemi a diskutuje vlivy různých parametrů (např. velikosti oblasti) na tvoření vzorů. Simulačními algoritmy se pak zabývají do hloubky kapitoly 4 a 5 - v kapitole 4 je to kompartmentový stochastický simulační algoritmus, který je vyvinut za předpokladu, že oblast je rozčleněna do kompartmentů, kdy reakce se může objevovat pouze mezi částicemi ze stejného kampartmentu a postulát o dostatečném mixování je rovněž oslaben - to nemusí probíhat mezi různými kompartmenty. V kapitole 5 zkoumaný model je dále zjemněn a předpokládá se, že dynamika pohybu molekul je dána renormalizovaným Wienerovým procesem. Jádrem je je zde model druhého řádu z ref [6] (Erbanův-Chapmanův) a některé další. Poté je sestaven simulační algoritmus a jsou uvedeny některé výsledky.

Autorka postupovala z mého hlediska zcela samostatně a to do té míry, že nemám na dosažených výsledcích vůbec žádný podíl. Pokud je mi známo, spolupracovala s Dr. Erbanem a některými dalšími kolegy z Oxfordské univerzity. Problematika se ukázala velmi nosnou, takže na zamýšlené studium stochastických reakčně-difuzních rovnic ani nedošlo, to však není nikterak na závadu věci. Mám za to, že bylo dosaženo velmi pěkných a zajímavých výsledků a za velký klad celé práce považuji aktuálnost a matematickou i aplikační důležitost zkoumané problematiky, kterou se v ČR doposud, pokud vím, nikdo příliš nezabýval.

Mám-li poukázat na některé nedostatky, tak podle mého názoru je v některých místech práce napsána až příliš volným jazykem, což by se mohlo interpretovat i jako nedostatečný stupeň přesnosti. To se týká nepříliš pořádně uvedených definic a zčásti i formulací vět. Fyzikální postuláty sloužící k zavedení modelu by mohly být jasněji odděleny od matematických předpokladů. Jasněji také měly být vymezeny vlastní výsledky práce. Příkladů je více, tak třeba u "chemical master equation" na str. 10 by mohlo být jasně řečeno, z jaké množiny se berou parametry A, B, C. Definice 2 a 3 na str. 18 by měly být matematicky přesnější, obzvláště u nelineárních rovnic existuje více než jeden běžně zkoumaných konceptů stability či nestability. Ve větách sekce 3.3, nenašel jsem nikdy podmínku o hladkosti f (automaticky se pracuje s její derivací), dále pak tam autorka někdy pracuje s pojmy, které pořádně nezavedla (a nepracuje s těmi, které zavedla). Jedná se však většinou o drobnosti, byť ztěžující četbu práce každému, kdo nepracuje v tomto úzkém oboru a neovládá jeho jazyk.

Jinak je problematika velmi zajímavá a může mít i zajímavá rozšíření do různých oblastí (třeba popsaná Turingova nestabilita patrně hodně souvisí s destabilizací šumem pro obyčejné stochastické diferenciální rovnice, tvoření vzorů by bylo možná zajímavé dát do souvislosti s efektem "tunelování" pro stochastické reakčně-difuzní rovnice, atp.).

Celkově považuji práci za zdařilou a zajímavou a doporučuji, aby byla uznána jako diplomová.

V Praze, dne 8.9.2011

Bohdan Maslowski