

Szimuláció vs. matematikai modellezés

Figyelemre méltó, ahogyan növekszik a program bonyolultsága a modell-világ idealizációjának csökkenésével. Ugyanis a modellezés hagyományos, szintén univerzális eszköze: a matematika, csak lényeges bonyolódások árán tudja követni a modellel szembeni feltevéseink csökkentését, míg a programozás alapú nem. Jól ismert a populáció-genetika, következő, valóságot egyre jobban megközelítő modellsorozata. Legyenek a modell objektumai a genetikai információt hordozó gének, amelyek a populáció egyedeit testesítik meg. A génekre ható erők jelentik a törvényszerűségeket, amiket egyre közelítünk a valóságoshoz. Így a model család tagjai a következő szabályokkal lesznek felvértezve (több témavonulattal):

Mutáció	Szelekció	Génáramlás
M1. egy-lokuszos, két-allélos, egyirányú mutáció ↓	Sz1. nemfüggetlen, fenotípusosan ható (pl. ...) ↓	Á1. imigráció ↓
M2. egy-lokuszos, két-allélos, kétirányú mutáció ↓	Sz2. nemtől függő (nemi kromoszómás) rátermettség, genotípusosan ható (pl. ... betegség) ↓	Á2. emigráció ↓
M3. egy-lokuszos, sok-allélos, kétirányú mutáció	Sz3. sok-lokuszos, additív tulajdonság (pl. magasság)	Á3. kétirányú migráció

Mindegyikhez társuló további kérdés: a vizsgált hatóerő *folytonosan* és változatlan jellemzőkkel működik, vagy *adott időnként*, esetleg adott függvény szerint *változva* az időben. Biológiai szempontból további vizsgálandó: a *genetikai sodródás*, azaz a populáció genetikai elszegényedésének jelensége a központi hatóerő függvényében. És ami igazán érdekes: teszi: hogyan hatnak *együttesen* a populáció genotípusainak arányaira.

Könnyű belátni, hogy pl. a mutációs M1 modell matematikai vizsgálata esetén egy *lineáris differenciálegyenlettel* adható meg. (Némi gondolkozás árán a differenciálegyenlet megoldása helyett *közvetlenül is megkaphatjuk* a megoldásként szolgáló exponenciális függvény képletét.)

Feltételek, jelölések:

- A, B a két allél
- Kellően nagy méretű populáció
- $P(A \rightarrow B) = \mu$ generációnkénti átalakulás valószínűsége, és $\mu(t) = \text{konstans}$
- $\Delta N = 0$, azaz a populáció mérete változatlan

Ekkor az állapotváltozás egyenlete:

$$\frac{dN}{dt} = -\mu N, N(0) = N_0$$

Azaz az M1 modell megoldása az ún. kezdeti érték problémára vezet.

1. ábra: Egy irányú mutáció matematikai modellje (M1)

Az M2-M3 modellezése *lineáris differenciálegyenlet-rendszer* megoldását kívánja. Persze ha megelégszünk az egyensúlyi állapot meghatározásával, akkor egy egyenlet megoldása is célhoz vezet.

Feltételek, jelölések:

- A, B a két állél
- Kellően nagy méretű populáció
- $P(A \rightarrow B) = \mu$, $P(B \rightarrow A) = \nu$ generációnkénti átalakulás valószínűsége, és $\mu(t), \nu(t) = \text{konstans}$
- $\Delta N = 0$, azaz a populáció mérete változatlan

Ekkor az állapotváltozás egyenlete:

$$\frac{dN_A}{dt} = -\mu N_A + \nu N_B, N_A(0) = N_A^0, \quad \frac{dN_B}{dt} = -\nu N_B + \mu N_A, N_B(0) = N_B^0.$$

Az egyensúly feltétele: $-\mu N_A + \nu N_B = 0$

Bevezetve az össz-egyedszámra: $N = N_A + N_B$, kapjuk a megoldást $N_A = \frac{\nu}{\mu + \nu} N, N_B = \frac{\mu}{\mu + \nu} N$.

2. ábra: Két-irányú mutáció matematikai modellje (M2)

A modell kezelhetőségébe roppant nagy változás áll be, amint a populáció mérete kicsinyre csökken, vagy a rendszerre ható erők a modellparaméterek egyikét-másikat nem „konstans módon”, hanem valamilyen függvény szerint, pláne ha nem valamely „szép”, folytonos függvény által leírhatóan változtatja. A leszűkült populációs méret a *sodródás* jelenségét hozza be, s az eddig elvárttól totálisan eltérő eredményre is vezethet. Ennek leírása már *valószínűségi számítási* eszközöket igényel. A mutációs nyomás modelljét lazítva az említett paraméterfüggvénnyel már csak az ún. *születési-halálozási folyamatok* (a sztochasztikus folyamatok egyik speciális folyamatának az) eszköztárával formalizálhatjuk. A paraméterfüggvények kezelhetőségét növelendő, generációs lépésközlőként téve változóvá (azaz az értelmezési tartományát **N**-né „barátságosítva”) jutunk el a Markov-láncokhoz, egy újabb matematikai formalizmushoz.

Ha az előbb említett matematikai modellek mellé tettük volna a szimulációs program lényegi magját, akkor megállapíthattuk volna:

1. az első programmag némileg hosszabb, hiszen itt kell az alapokat felépíteni,
2. a továbbiak bonyolódása azonban minimális, még az összeépítésre is egyfajta linearitás jellemző.