



뇌 신경화학 시뮬레이션

생물물리학적 모델링 및 해석 (Biophysical Modeling & Analysis)

DNA Helix • Navier-Stokes • Burgers Eq • Quantum Tunneling

모델 개요 (Model Overview)

다학제적 접근 (Multidisciplinary Approach)

본 시뮬레이션은 뇌의 신경화학적 작용을 단순한 생물학적 관점이 아닌, 물리학과 화학의 기본 원리를 통합하여 모델링하였습니다.

Integration of Biology, Fluid Dynamics, & Quantum Mechanics

유체 역학을 통한 신경전달물질의 흐름부터, 양자 터널링에 의한 전자 이동까지 포괄적인 계산 모델을 제시합니다.



유전체 구조 기하학 (DNA Geometry)

이중 나선 구조 (Double Helix)

각 뇌 영역의 고유한 유전적 특성을 시각화하기 위해 매개변수 방정식(Parametric Equations)을 사용하여 DNA 구조를 생성합니다.

$$\begin{aligned}x &= x_0 + r \cdot \cos(\theta) \\ y &= y_0 + r \cdot \sin(\theta) + k \cdot i\end{aligned}$$

여기서

θ

는 회전각,

i

는 염기서열 인덱스를 나타내며,

A
T

및



유체 역학 (Navier-Stokes)

신경전달물질의 확산 모델링

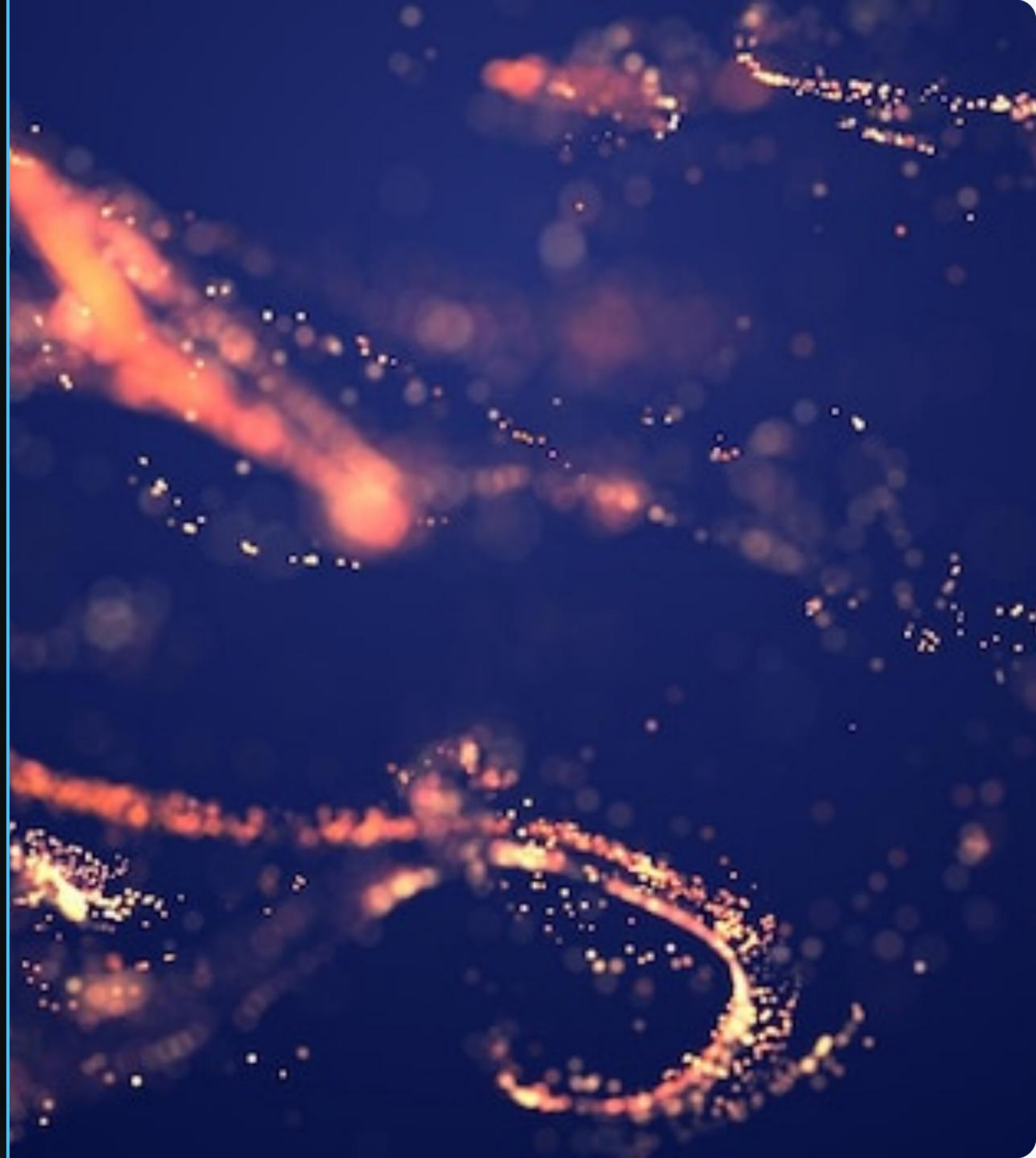
시냅스 간극에서의 신경전달물질 이동은 점성 유체의 운동 방정식인 나비에-스토크스(Navier-Stokes) 방정식을 통해 계산됩니다.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}$$

좌변은 관성력(가속도)을, 우변은 압력 구배(

∇p

)의 점성 확산(



비선형 동역학 (Burgers' Equation)

충격파 및 농도 변화 (Shockwaves)

Burgers 방정식은 대류(Advection)와 확산(Diffusion)이 결합된 비선형 편미분 방정식입니다. 약물 투여 시 급격한 농도 변화와 충격파 (Shockwave) 현상을 시뮬레이션합니다.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

비선형 대류항

$$u \frac{\partial u}{\partial x}$$

은 농도의 쏠림 현상을, 확산항

$$v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

은 이를 부드럽게 퍼뜨리는 역할을 합니다.

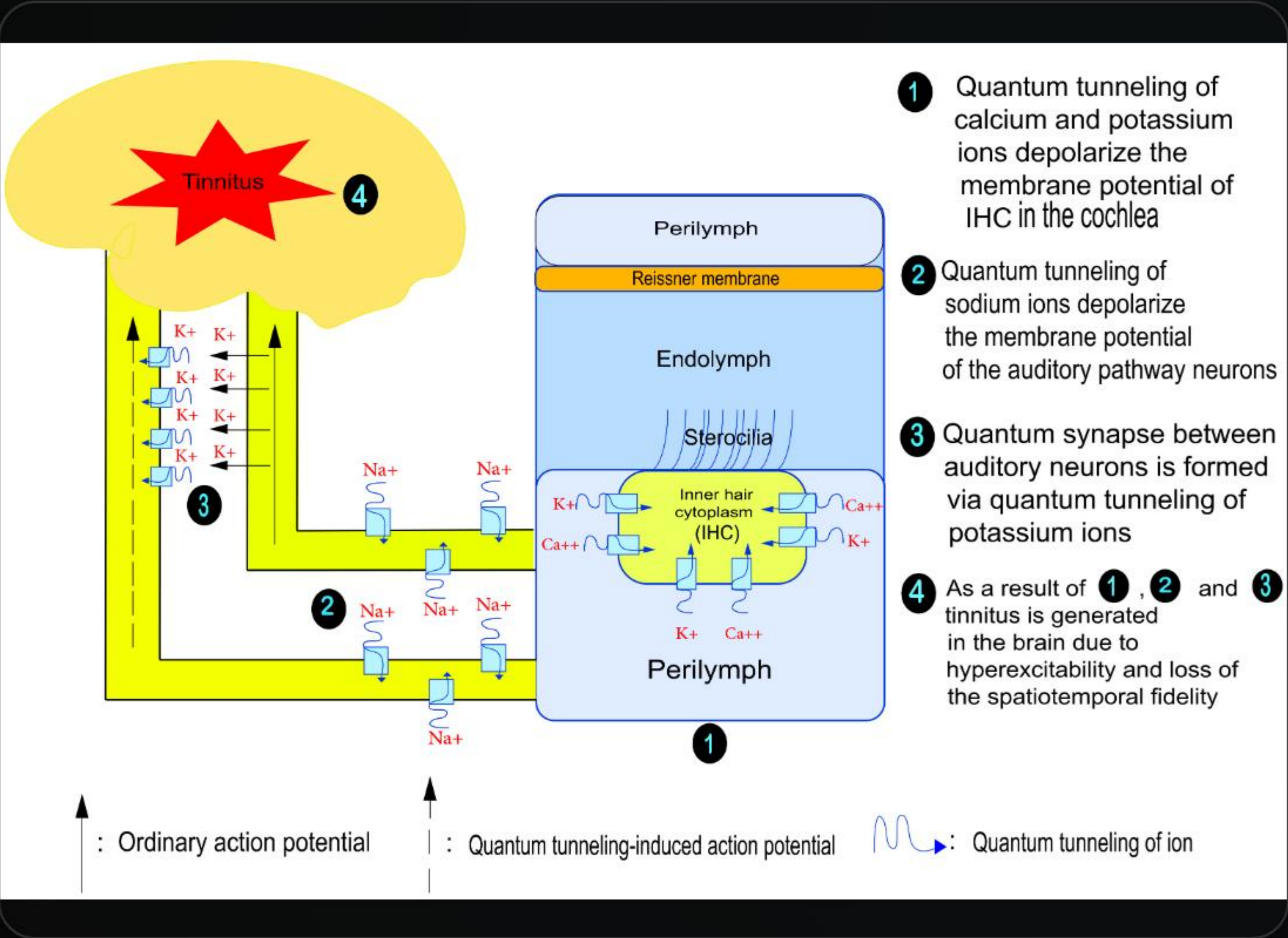
양자 터널링 (Quantum Tunneling)

전자의 확률적 이동

고전 역학적으로는 넘을 수 없는 에너지 장벽(시냅스 간극 등)을 전자가 확률적으로 통과하는 현상을 모델링합니다.

$$T \approx \exp\left(-\frac{2Kd}{\hbar}\right)$$

여기서 T 는 투과 확률, d 는 장벽의 두께입니다. 입자의 에너지가 장벽보다

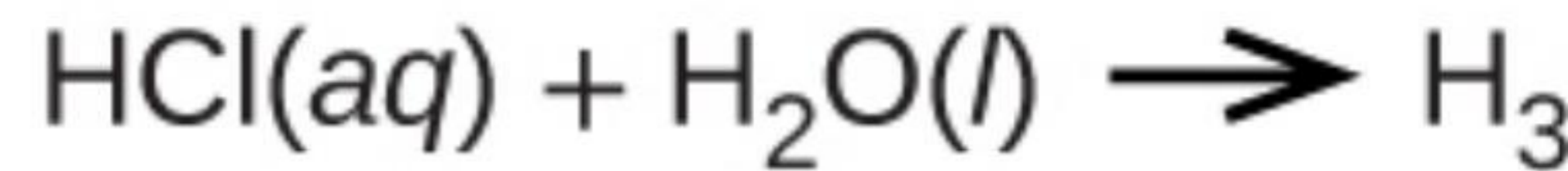


산-염기 화학 (Acid-Base)

pH에 따른 약물 이온화

뇌 환경의 pH 변화에 따른 약물의 이온화 상태를 헨더슨-하셀바흐(Henderson-Hasselbalch) 방정식으로 계산하여 약물의 흡수율을 예측합니다.

$$\text{pH} = \text{pK}_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]}$$



열역학 및 통계역학 (Thermodynamics)



Boltzmann 분포

입자의 에너지 상태 분포를 결정합니다.

$$P_{\text{exp}} \left(\frac{E}{kT} \right)$$



확산 (Diffusion)

가우시안 분포를 따르는 입자의 무작위 운동입니다.

$$\frac{\sigma}{\sqrt{2Dt}}$$



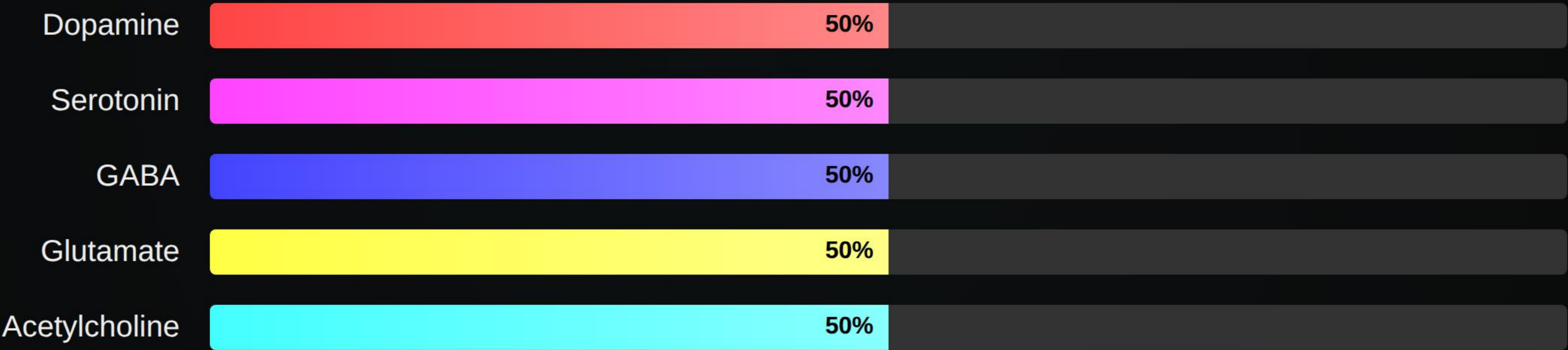
파동 함수

슈뢰딩거 방정식을 단순화한 확률 밀도 함수입니다.

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{-ikx}$$

신경전달물질 프로파일 (Neurotransmitters)

정상 상태(Normal State)에서의 주요 신경전달물질 기본 농도 비율



* 약물 투여 시 위 수치는 실시간으로 변동됩니다.

결론 및 활용 (Conclusion)

본 시뮬레이션 모델은 복잡한 뇌 신경화학 작용을 물리적 법칙(유체역학, 양자역학)과 결합하여 시각화함으로써, 약물 작용 기전과 뇌의 반응을 직관적으로 이해하는 데 기여합니다.

Q & A

질문이 있으신가요?

Image Sources



https://static.vecteezy.com/system/resources/previews/070/852/075/large_2x/visualization-of-human-brain-neural-network-activity-with-glowing-synapses-and-vibrant-electric-impulses-highlighting-complex-cognitive-functions-and-connections-photo.jpg

Source: www.vecteezy.com



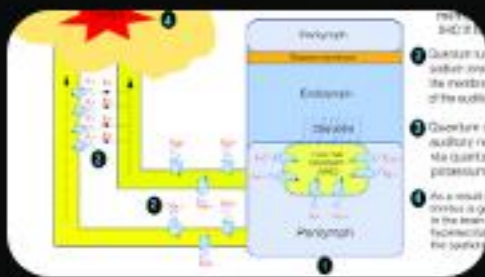
https://img.freepik.com/premium-photo/3d-dna-structure-lavender-purple-color-black-background-scientific-medical-background-healthcare-technology-presentation-cover-advertisement_316239-242.jpg

Source: www.freepik.com



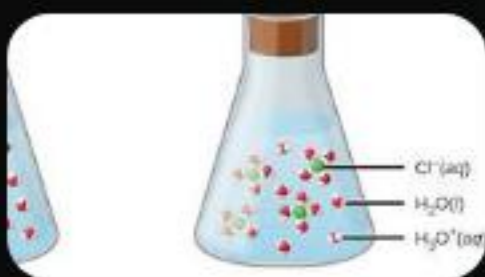
https://img.freepik.com/premium-photo/golden-particle-stream-digital-data-flow-creative-abstract-background-dynamic-pattern-with-fluid-simulation-light-seamless-loop_697634-51.jpg

Source: www.freepik.com



https://pub.mdpi-res.com/brainsci/brainsci-12-00426/article_deploy/html/images/brainsci-12-00426-ag.png?1648031830

Source: www.mdpi.com



https://pressbooks.bccampus.ca/chem1114langaracollege/wp-content/uploads/sites/387/2018/04/CNX_Chem_04_02_HClSoln-3.jpg

Source: openoregon.pressbooks.pub