

Modellierung und Simulation in der Biochemie

Ursula Kummer

Vorlesung 10

Dynamik 2

Übersicht

- kurze Wdh.
- Komplexe Dynamik
- Analyse der Dynamik

Wdh. Bestimmung des Steady States

- Für lineare Systeme gibt es immer eine analytische Lösung
- Für nichtlineare Systeme kann man nur bis ca. 4-dim. eine exakte Lösung finden

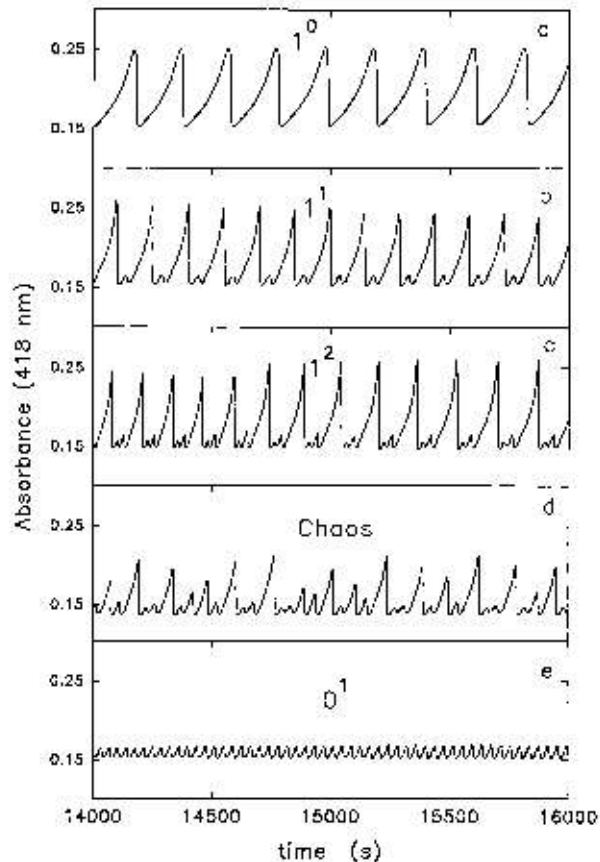
--> Näherungsverfahren, z.B. Newton
beruht auf Taylorentwicklung um den Fixpunkt

Wdh. Stabilität

- Die Stabilität des steady state wird ebenfalls durch eine Taylorentwicklung um diesen untersucht
- Wichtig dabei die Bestimmung der Jacobi-Matrix
- Die Eigenwerte der Jacobi-Matrix bestimmen das Verhalten des Systems

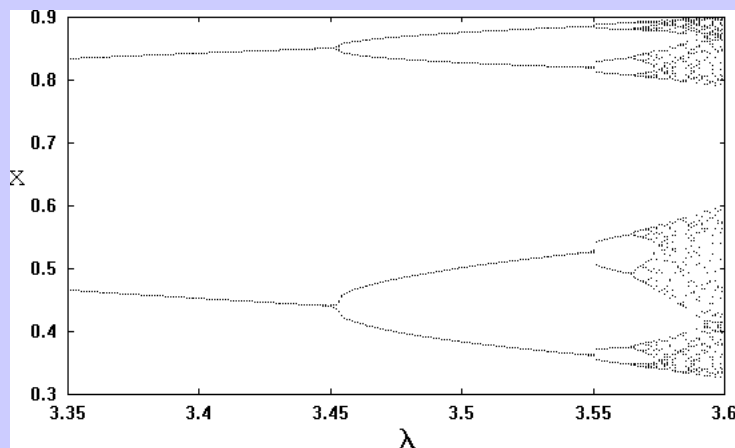
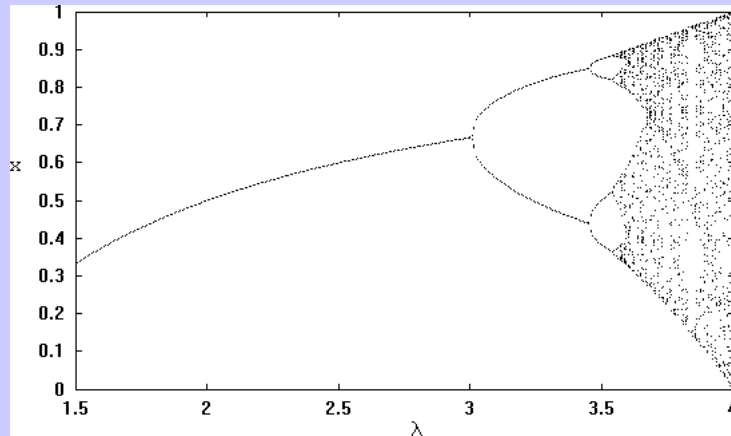
Komplex periodisches Verhalten

2086 *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 119, No. 9, 1997



Man spricht von Periode 2, 3 etc. je nachdem nach wievielen Oszillationen sich die Periodizität wiederholt.

Bifurkationsdiagramme

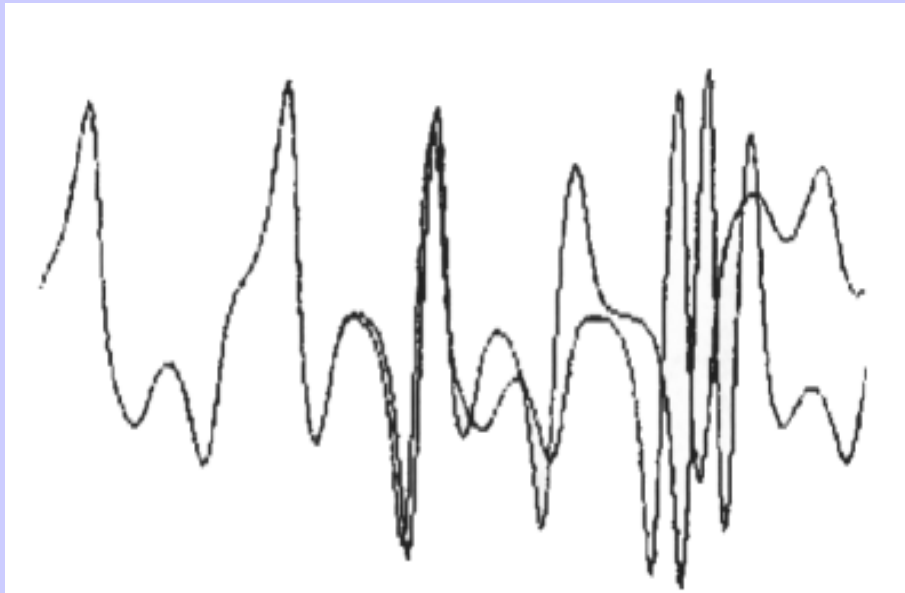


Period-doubling Route

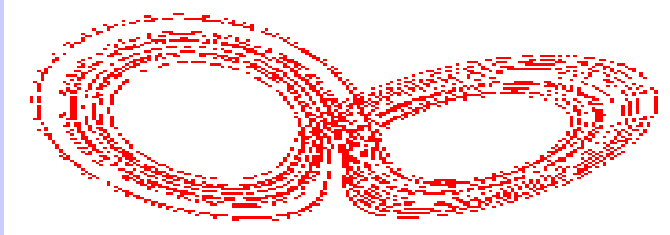
- Auch bei Vergrößerungen ist das Szenario der Periodenverdoppelung beobachtbar
- Die Parameterregion, in der komplexperiodische Lösungen beobachtbar sind, ist um so kleiner, je komplexer die Periodizität ist.
- Es gibt auch einige andere Wege in's Chaos

Der Schmetterlingseffekt

- Chaos ist deterministisch
- Extreme Sensitivität gegenüber der Ausgangsbedingungen



Chaotische Attraktoren

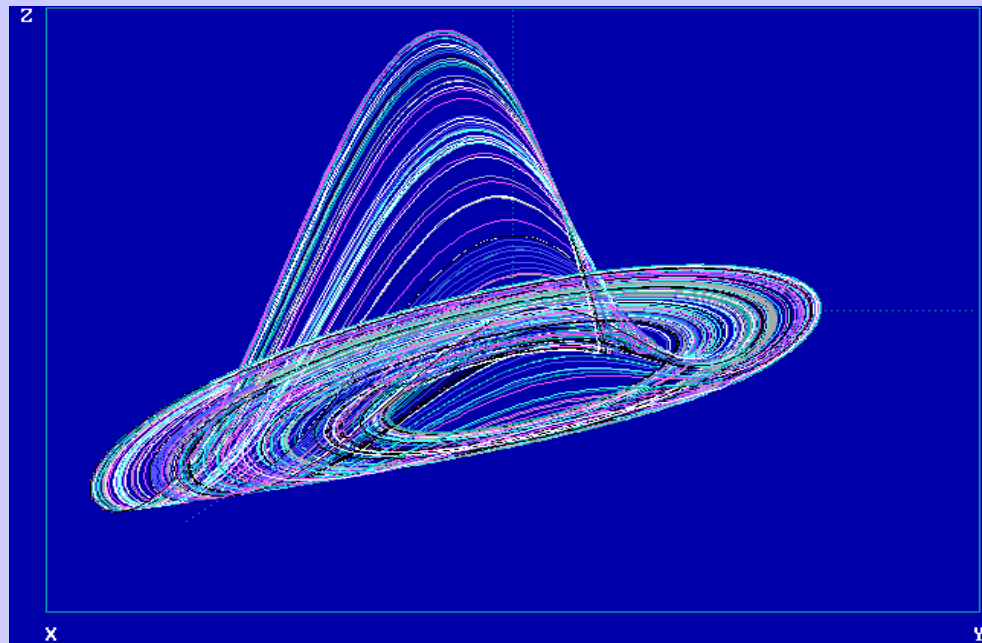


Lorenz

$$\begin{aligned} dx &= (-\sigma x + \sigma z) dt \\ dy &= (rx - y - xz) dt \\ dz &= (-bz + xy) dt \end{aligned}$$

Rössler

$$\begin{aligned} dx &= -y - z \\ dy &= x + ay \\ dz &= b + xz - cz \end{aligned}$$



Chaos in der Biologie?

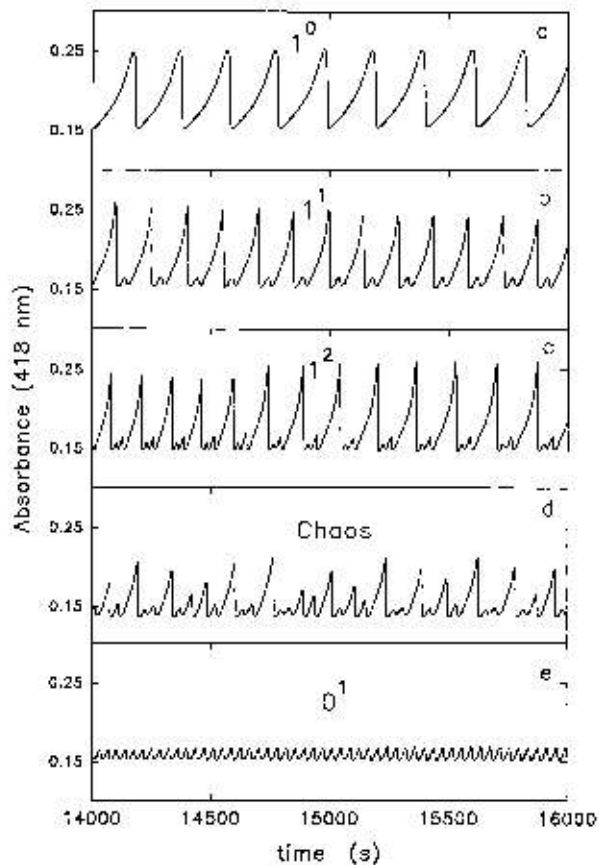
- Ist nicht immer eindeutig zu indentifizieren, da (wie oben
- erläutert) dazu lange Zeitreihen nötig sind

Einge wirklich bewiesene Beispiele:

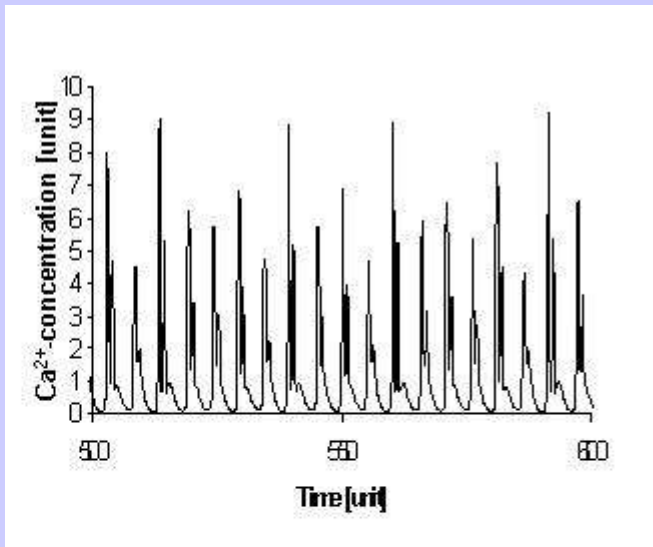
- Herzschlag ist bei gesunden Menschen chaotisch
- Enzymatische Reaktionen können chaotische Dynamik zeigen

Chaos in der Peroxidase-Oxidase Reaktion

2086 *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 119, No. 9, 1997



Chaos bei der Calcium-Signaltransduktion?



Gibt es gute Hinweise, aber es ist schwer lang andauernde, experimentelle Zeitreihen zu produzieren.

Next-Amplitude Map

- Die Maxima (oder Minima) aufeinanderfolgender Amplituden werden gegeneinander aufgetragen.
- Macht deterministische Zusammenhänge sichtbar (Chaos)

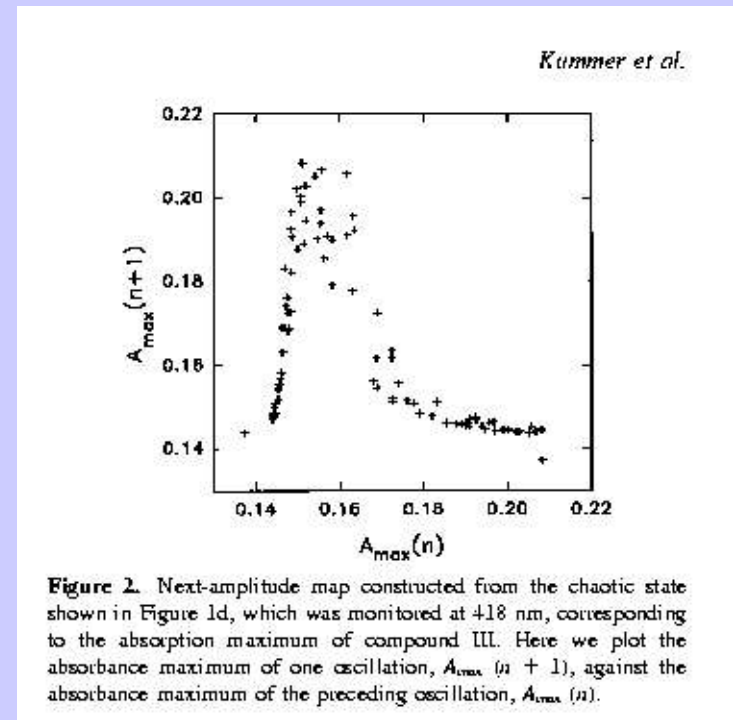
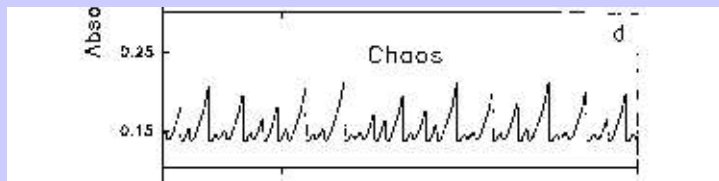


Figure 2. Next-amplitude map constructed from the chaotic state shown in Figure 1d, which was monitored at 418 nm, corresponding to the absorption maximum of compound III. Here we plot the absorbance maximum of one oscillation, $A_{\max}(n+1)$, against the absorbance maximum of the preceding oscillation, $A_{\max}(n)$.

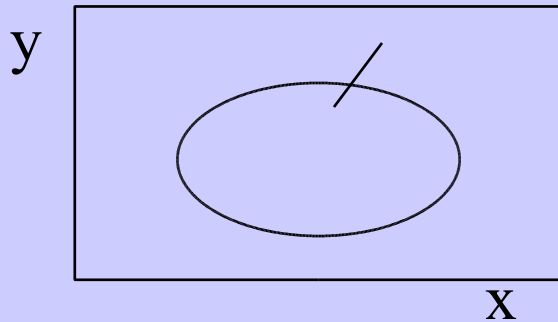
Poincaré-Schnitt

- Untersuchung nichtlinearer Phänomene durch “stroboskopische” Betrachtung des Systems
- Die Trajektorie wird geschnitten, so daß eine diskrete Abbildung entsteht
- Der Schnitt muß nicht planar sein, aber er muß transvers zum Fluß liegen
- Benannt nach dem Mathematiker Jules Henri Poincaré

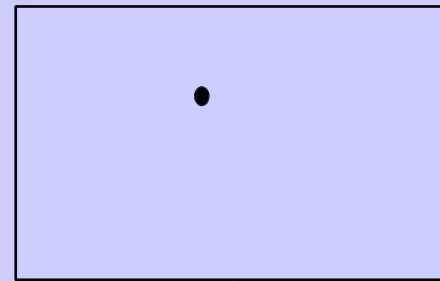
Poincaré-Schnitt

Poincaré-Schnitte für eine periodische Oszillation:

Phasenraum: Grenzyklus

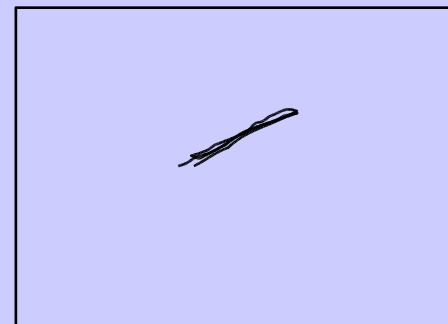
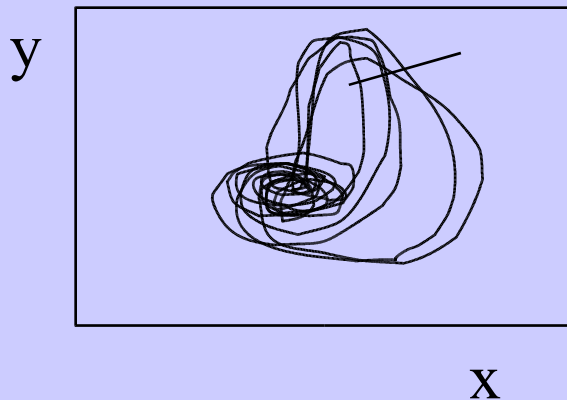


Poincaré

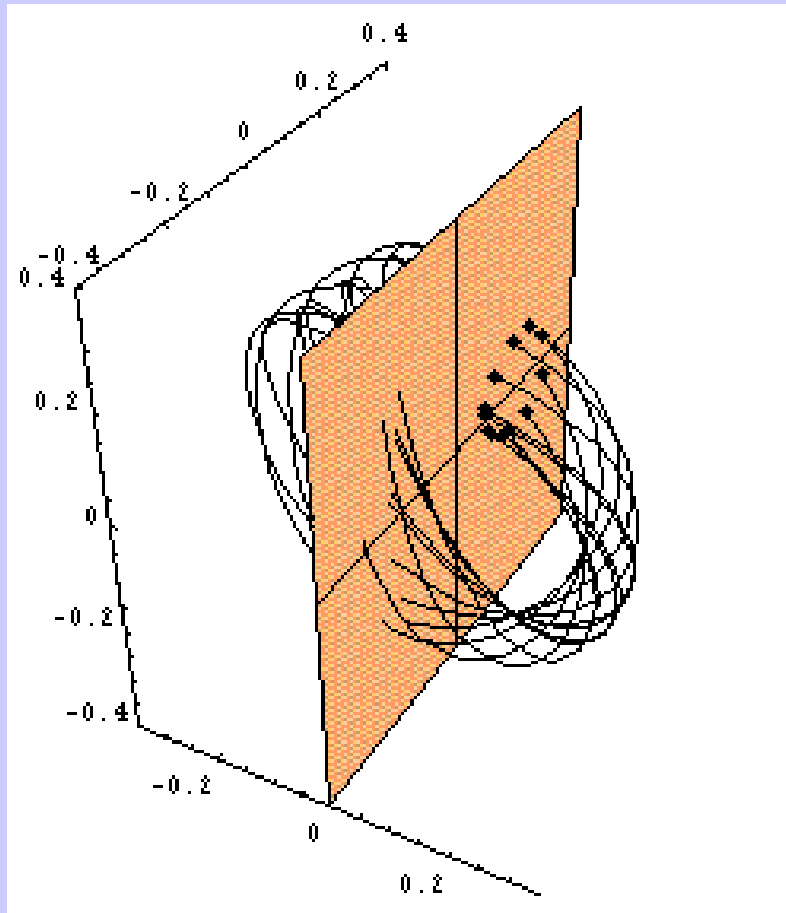


Poincaré-Schnitt für eine chaotische Oszillation:

Phasenraum: Chaotischer Attraktor



Poincaré-Schnitt

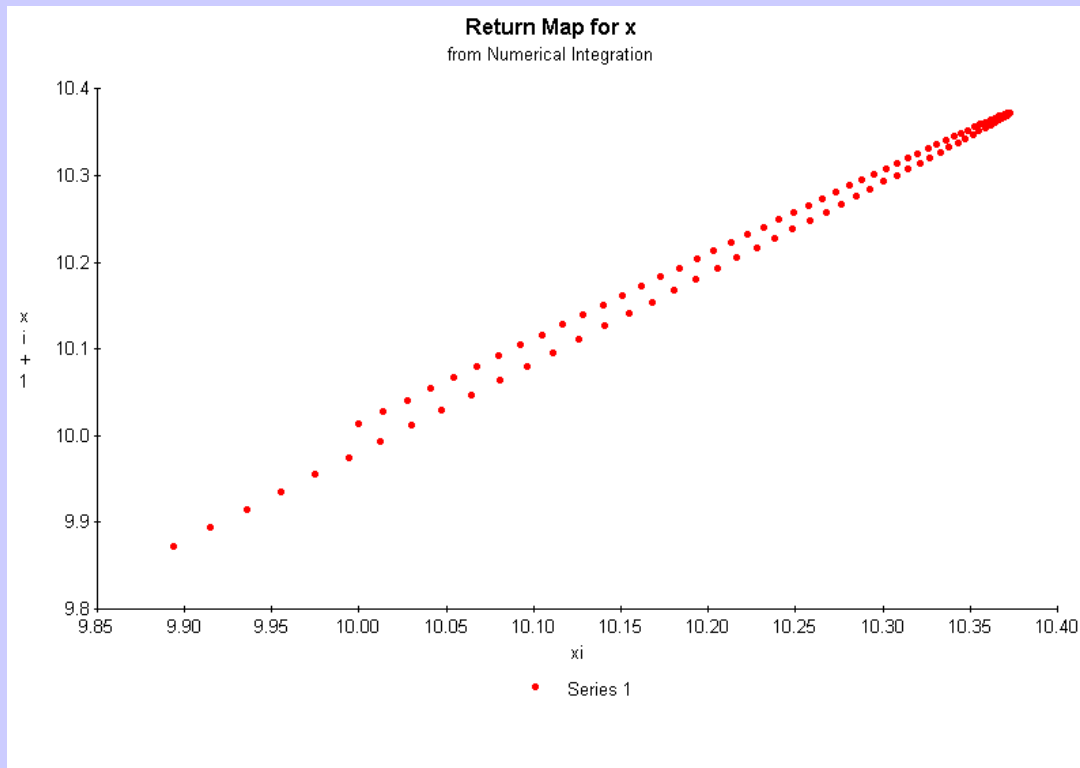


Wenn ein Torus geschnitten wird (Quasiperiodizität!) entsteht eine/zwei kugelförmige Punktwolken

Eindimensionale Abbildung

- Wird aus dem Poincaré-Schnitt konstruiert
- Ermöglicht die Darstellung von komplexer Dynamik in einer einzigen Dimension
- Man wählt eine Koordinate der Schnittebene und trägt die Werte dieser Koordinate für aufeinanderfolgende Durchstoßpunkte gegeneinander auf
- Insgesamt wird damit ein kontinuierliches dynamisches System auf eine diskontinuierliche rekursive Abbildung reduziert

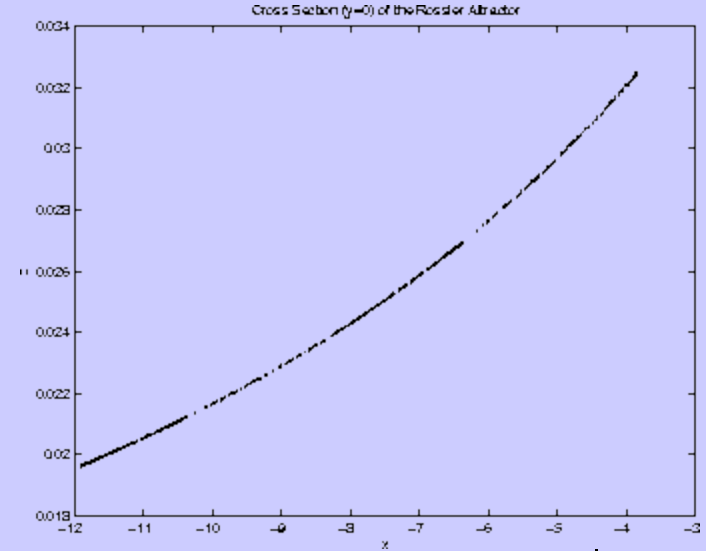
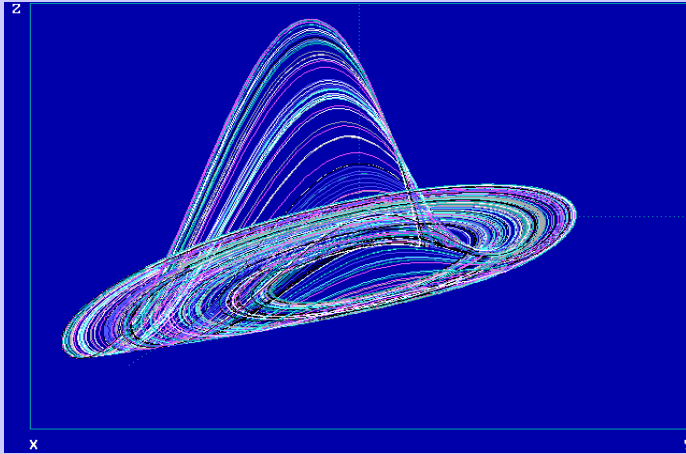
Beispiel einer Return-Map



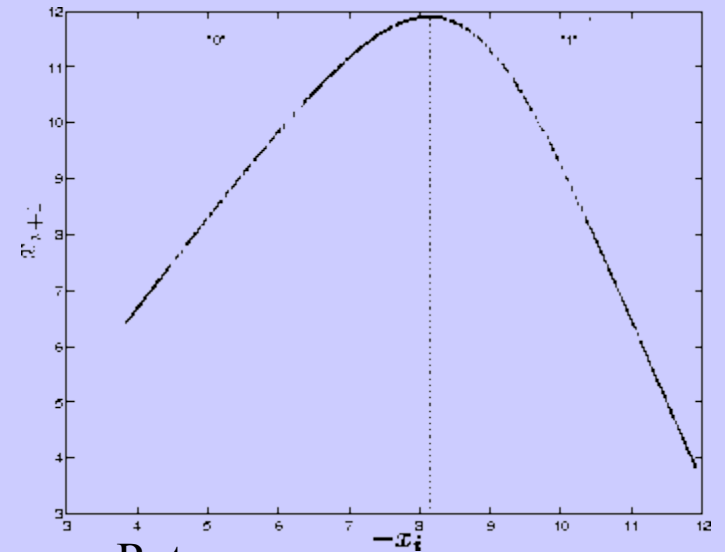
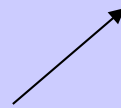
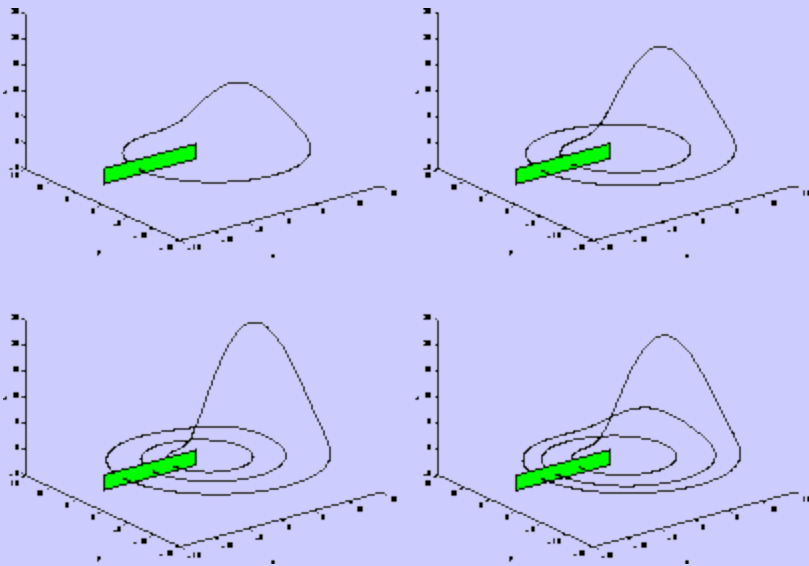
Beispielsystem ist hier die BZ-Reaktion (oszillierende chemische Reaktion) -> Funktionaler Zusammenhang sichtbar

Analyse des Rössler-Attraktors

$$\begin{aligned} dx &= -y - z \\ dy &= x + ay \\ dz &= b + xz - cz \end{aligned}$$

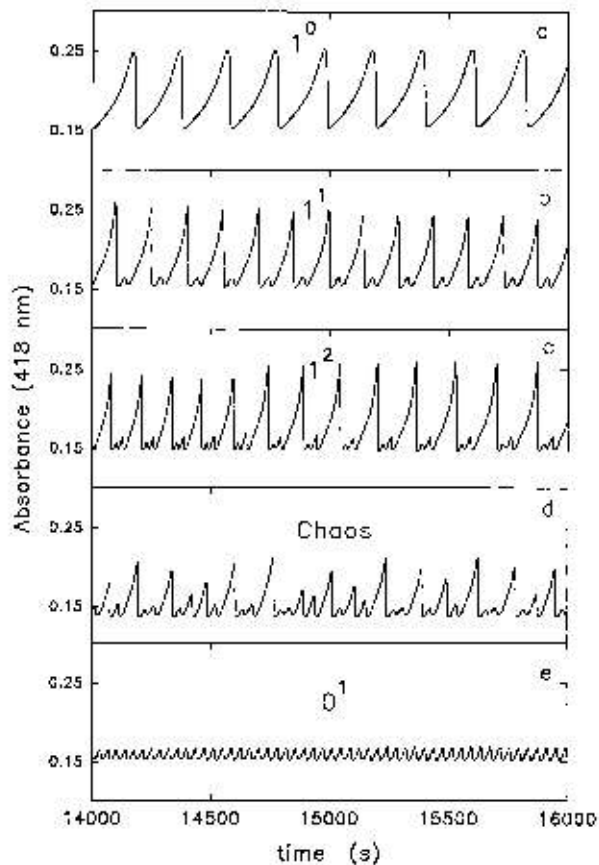


Poincare



Beispiel: Peroxidase-Oxidase Reaktion

2086 *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 119, No. 9, 1997



Kummer et al.

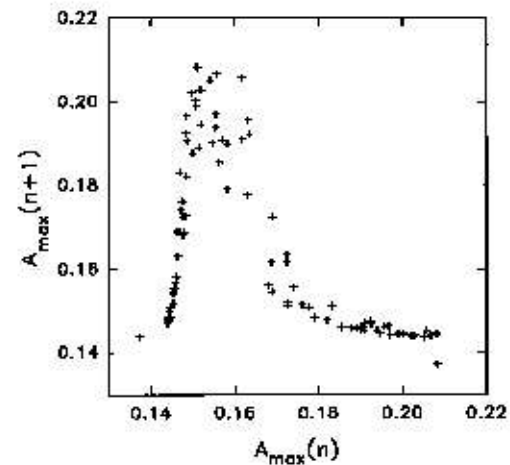
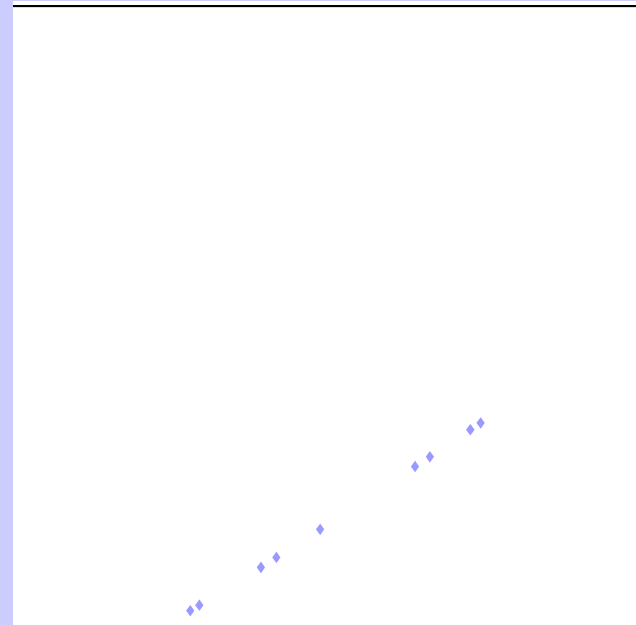
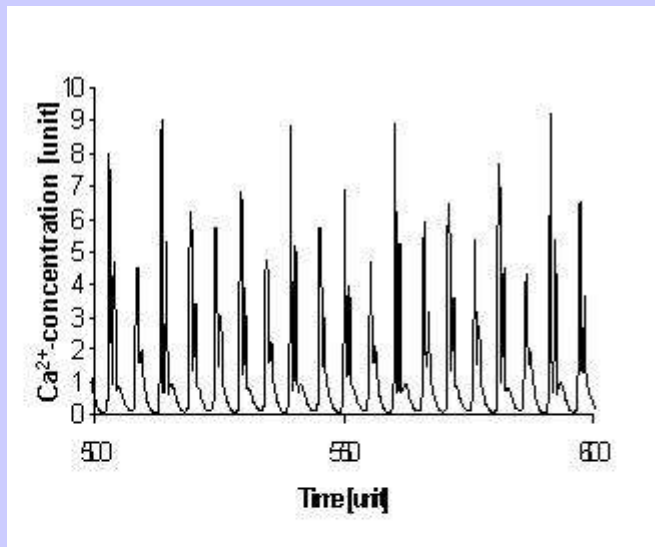


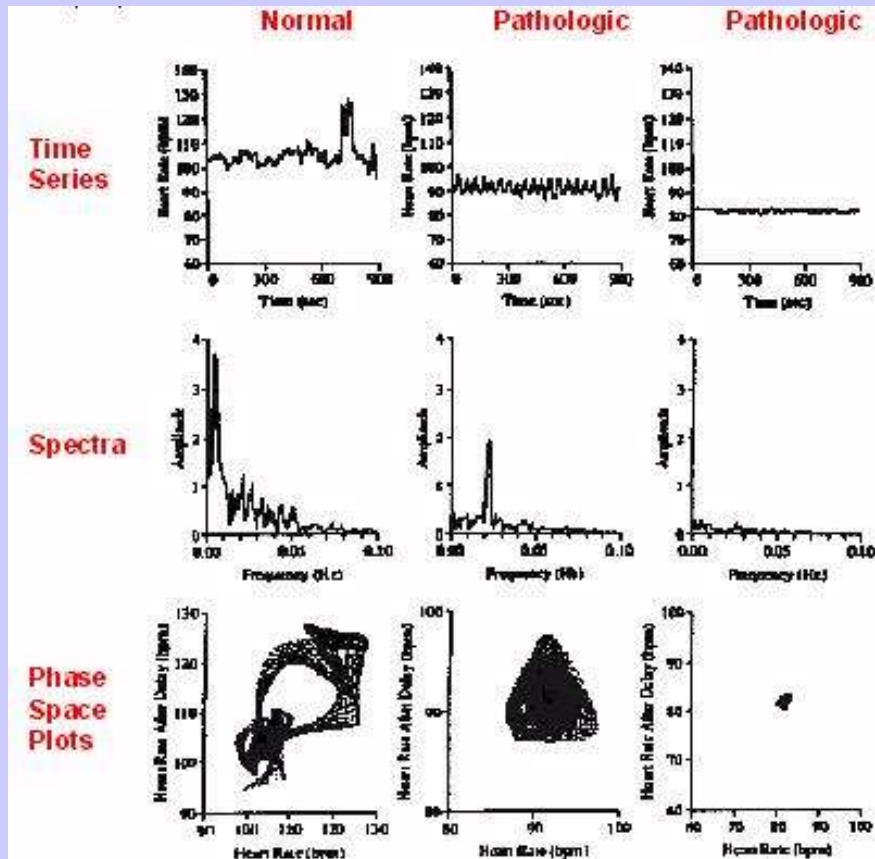
Figure 2. Next-amplitude map constructed from the chaotic state shown in Figure 1d, which was monitored at 418 nm, corresponding to the absorption maximum of compound III. Here we plot the absorbance maximum of one oscillation, $A_{\max}(n+1)$, against the absorbance maximum of the preceding oscillation, $A_{\max}(n)$.

Beispiel: Calcium-Signaltransduktion



Problem: Meist nur relativ kurze Zeitreihen

Beispiel: Herzschlag



Frequenzspektrum als
weitere Analysetool

Software

- Momentan wenig “nette” Software zur Analyse von Dynamik vorhanden! (In Zukunft soll COPASI das beinhalten)
- Dynamical Software (läuft nur unter DOS :-))
- Einige nette Programme für spezifische Aufgaben, z.B. Poincare package (<http://lie.uwaterloo.ca/poincare.htm>)
- Continuation durch z.B. XPPAUT, CONTENT

