

Beszámoló a *Fonalas szerkezetek a biomechanikában* című, F 42476 számú OTKA pályázatról

Dr. Károlyi György

2007. február 28.

1. Előzmények

A kutatás során két területen foglalkoztunk fonalas, szálas szerkezetek biomechanikai alkalmazásaival. Az egyik terület a hidrodinamikai áramlásokban sodródó populációkkal (pl. plankton), a másik terület a rudakkal, rúdláncokkal modellezhető fonalas biológiai alakzatokkal (pl. gombák, DNS) kapcsolatos.

Már korábban is ismert volt, hogy az időben változó áramlásba helyezett sodródó részecskék nagyon bonyolult mozgást képesek végezni még akkor is, ha az áramlás maga nagyon egyszerű. Még alacsony Reynolds szám esetén is, amikor az áramlás időben periodikus, a sodródó részecskék mozgása tipikusan kaotikus. Az ilyen kaotikus sodródást mutató áramlások egy széles osztályát alkotják a nyílt áramlások, amikor a folyadék mozgását egy kis tartományban vizsgáljuk, ahová az áramlás beszállítja a sodródó részecskéket, ebben a tartományban a részecskék komplikált mozgást végeznek, majd az áramlás tovább sodorja őket a megfigyelési tartományon kívülre. Korábban megmutattuk, hogy ilyenkor a sodródó részecskék bonyolult mozgásának oka egy fraktál halmaz felbukkanása az áramlásban: ez a fraktál olyan instabil „csapda” pályák összessége, amelyek nagyon nagy számú sodródó részecskét hosszú időre csapdába ejtenek, vagyis a csapdába ejtett részecskék egy fonalas fraktálon gyűlnek össze.

Korábban kimutattuk, hogy ha ezek a részecskék kémiai vagy biológiailag aktívak, a fraktál struktúrák megváltoztatják a kémiai reakciókat leíró tradicionális egyenleteket, illetve módosítják a populációdinamikai egyenleteket. A kaotikus viselkedés hatására a kémiai egyenletekben felbukkannak a kaotikus viselkedést leíró paramétereket (fraktál dimenzió, Ljapunov exponens). Kimutattuk, hogy ennek az egyenletnek lényeges szerepe lehet a populációdinamikára is, és ennek segítségével sikerült a biológia két régóta megválaszolatlan kérdésére is lehetséges választ adni: a plankton paradoxonra, illetve a korai evolúció 22-es csapdjára. Mindegyik kérdés az egymással versengő fajok együttélésének lehetőségét vizsgálja, és korábban az okozta a problémát, hogy tökéletes keveredést feltételezve lehetetlennek látszott a versengő fajok együttélése.

Ezeket a jelenségeket korábban időben periodikus nyílt áramlásokban vizsgáltuk, a pályázat egyik célja az eredmények kiterjesztése volt általánosabb esetekre is, például időben nem periodikus illetve zárt tartományban, tartályban történő áramlás esetére is. Azt is meg akartuk vizsgálni, hogy a korábban vizsgálttól eltérő kémiai reakció illetve biológiai aktivitás esetén módosulnak-e

korábbi eredményeink, azaz például bizonyítható-e az egymással versengő fajok együttélésének lehetősége áramlásokban, ha a versengő fajok egymással ciklikus, nem hierarchikus kompetícióban vannak. Felmerült az a kérdés is, hogy ha a sodródó egyedek tehetetlenségét nem hanyagoljuk el, akkor változik-e a helyzet, vagy az együttélés ekkor is bizonyítható-e.

A másik kutatási területünk a rudak és rúdláncok, illetve az ilyen modellekkel leírható szálas struktúrájú biológiai rendszerek vizsgálata volt. Korábban megmutattuk, hogy a rúdláncok egyensúlyi helyzeteinek jellemzésére bevezethető a dinamikai rendszerek elméletében alkalmazott szimbolikus dinamika. Erre az adott lehetőséget, hogy a rúdlánc kihajlási feladatának, ami matematikai formában egy peremérték-feladat, megfeleltethető egy kezdetiérték-feladat, ami kaotikus. A kezdetiérték-feladat alakja megegyezik a peremérték-feladattal, csak nem peremfeltételek vannak rá kiróva, hanem kezdőfeltételek. A rúdlánc kihajlási feladatának megfelelő kezdetiérték-feladat a standard leképezés, ami az egyik legismertebb kaotikus rendszer. Például az Euler-feladat esetén, ami egy folytonos rúd kihajlási feladata, a megfelelő kezdetiérték-feladat az inga egyenlete, ami nem kaotikus; az Euler-feladat nem is mutat olyan gazdag viselkedést, mint a rúdlánc kihajlása. A megoldások jellemzésére alkalmazott szimbolikus dinamika segítségével sikerült az összes megoldás osztályozása. Ezt továbbgondolva, a kutatás során arra kerestük a választ, hogy a bifurkációs diagramokon az egyensúlyi utak címkézésére általában alkalmazott klasszikus invariánsok (például a zérushelyek száma, a stabilitási és a szimmetria tulajdonságok) vajon milyen összefüggésben vannak a szimbolikus dinamikával. A dinamikai rendszerek elméletének eszköztárát továbbra is felhasználva meg kívántuk vizsgálni, hogy mikor lehet egy peremérték-feladat megoldásait „kaotikusnak” nevezni, hogyan dönthető el, hogy egy bonyolult kihajlási alak jellemezhető-e „térbeli káoszként”.

Az elméleti vizsgálatokkal párhuzamosan a rúdláncok vizsgálata során gyűjtött tapasztalatokat biológiai rendszerek modellezésében kívántuk hasznosítani. Például a gombafonalak, szálas mikroorganizmusok növekedésének leírását olyan kétdimenziós modell segítségével kívántuk megvalósítani, ahol a szál kerületét egy feszültségek hatására növekedő rugalmas rúd alkotja. Az áramlások kapcsán kidolgozott, a fraktálgeometria módszereit alkalmazó vizsgálati módszert pedig mikroorganizmus telepek növekedési jellemzőinek megértésére kívántuk felhasználni.

2. A kutatás módszerei

A kutatás során elméleti és numerikus modellezési feladatokat kellett megoldani. A hidrodinamikai áramlásokban sodródó, biológiailag aktív részecskéket rácsmodellek segítségével vizsgáltuk: ez elűt a szokásos folytonos, koncentrációkat használó leírástól. Bizonyos szempontból annál egyszerűbb, hiszen így diszkrét modellhez jutunk, de egyben a folytonos modelleknél jobb leírását adhatják a véges méretű élőlényeknek. A rúdláncok esetében felbukkanó térbeli káosz vizsgálata során felhasználtuk a dinamikai rendszerek elméletének eszköztárát, a hagyományosan eddig csak kaotikus dinamikai rendszerek elméletében alkalmazott jellemzők (Ljapunov exponens, topológikus entrópia, szimbolikus dinamika) nyújtottak segítséget a kutatás során. A szálas mikroorganizmusok filamentumainak növekedésére általános kinematikai egyenleteket írtunk fel, majd ezt biológiai megfigyelésekkel egészítettük ki. A szálas mikroorganizmus-telepek növekedésének modellezése során az elméleti megfontolásokat elágazásos, részben önelkerülő véletlen bolyongáson

alapuló számítógépes szimulációval ellenőriztük.

3. Eredmények

A hidrodinamikai áramlásokban zajló kémiai aktivitás vizsgálata során először azt ellenőriztük, hogy a korábban időben periodikus nyílt áramlásokban kapott reakcióegyenlet megváltozik-e, ha az áramlás időben nem periodikus. Megmutattuk, hogy véletlen fluktuációt tartalmazó nyílt áramlásokban zajló autokatalitikus reakciók esetén a korábban levezetett egyenlet csak kis mértékben módosul. Most is igaz marad, hogy a reakciótermékek szálas struktúrát rajzolnak ki, és ennek az eloszlásnak a fraktáldimenziója megjelenik a reakcióegyenletben [4]. Zárt áramlásokban zajló reakciók esetében megmutattuk, hogy a reakciótermékek által kirajzolt mintázatot jellemző effektív fraktáldimenzió időben változik, és az időbeli változást megadó egyenlet csatolódik a reakciótermék mennyiségének időbeli változását leíró egyenlethez [8,14]. Az új egyenletek tekinthetők a régebbi, nyílt áramlásban felírt egyenletek általánosításának. Az elméleti eredményeket számítógépes szimulációkkal ellenőriztük. Ezeket, és a korábbi eredményeket egy terjedelmes összefoglaló cikkben összegeztük [10].

A versengő fajok együttélése kapcsán azt tapasztaltuk, hogy azok akkor is képesek együtt élni, ha köztük ciklikus kiszorítási kapcsolat van [9]. Ilyen kapcsolat esetén az egyes fajok, a kő-papír-olló játékhoz hasonlóan, képesek bizonyos versengő fajokat kiszorítani, legyőzni, de nincs abszolút győztes: minden fajnak van rátermettebb vetélytársa, aki őt tudja kiszorítani. Ilyen típusú versengés esetén megmutattuk, hogy az áramlásban való sodródás, keveredés kedvez az együttélésnek [9]. Azt is megvizsgáltuk, hogy tiszta (nem ciklikus) versengés esetén segíti-e az együttélést, ha figyelembe vesszük a versengő egyedek inerciáját. A korábbi vizsgálatok az egyedeket inercia nélkül, passzívan sodródó részecskéknek tekintették. Számítógépes szimulációk segítségével megmutattuk, hogy a tehetetlenséget is figyelembe véve az egyes versengő fajok eltérő szálas struktúrákon foglalnak helyet, és ez csökkenti köztük a versengést, növeli az összes faj együttélési esélyeit [13].

A rúdláncok bonyolult egyensúlyi helyzeteinek osztályozására korábban bevezetett, szimbolikus dinamikán alapuló címkézés segítségével sikerült meghatároznunk a klasszikusan az egyensúlyi helyzetek osztályozására alkalmazott invariánsokat. Megmutattuk, hogy a szimbolikus dinamika alapján igen egyszerűen meghatározhatók az egyes egyensúlyi helyzeteket jellemző stabilitási kritériumok, a szimmetria tulajdonságok és a zérushelyek száma [1]. Tovább vizsgálva a rúdláncok lehetséges egyensúlyi helyzeteinek számát, azt tapasztaltuk, hogy a megoldások száma exponenciálisan növekszik a vizsgált rúdlánc hosszának növekedésével. E megfigyelés alapján megfogalmaztuk, hogy akkor lesz egy peremérték-feladat „térben kaotikus”, ha megoldásainak száma exponenciálisan nő az értelmezési tartomány méretének növelésével [2,11]. Ez az eredmény azon alapul, hogy a peremérték-feladatnak megfeleltethető kezdetiérték-feladat topologikus entrópiája összefügg a peremérték-feladat megoldásainak számával [11]. Megmutattuk, hogy ez az eredmény még akkor is igaz marad, ha a szerkezet terhei nem konzervatívak [6], és tetszőleges terhelés és nemlinearitás esetén is hasonló viselkedést kapunk [11].

Szálas mikroorganizmusok (gombák és baktériumok) egyes szálainak növekedését úgy modelleztük, hogy a hosszmeteszet kontúrját növekedésre képes, rugalmas rúdnak tekintettük. Felírtuk az általános kinematikai egyenleteit a növekvő rudaknak, majd egyszerű biológiai megfigyelések

felhasználásával a szálak alakjára a valódihoz igen közel álló alakot kaptunk [5]. A teljes mikroorganizmus telepek növekedésének modellezésére felhasználtuk azt a megfigyelést, hogy a telep alakja időben változó fraktáldimenzióval írható le. Ennek segítségével egy egyszerű, de általános modellt adtunk a mikroorganizmus telep növekedésére [7].

Az áramlásokban sodródó populációk növekedését és a szálas mikroorganizmus telepek növekedését hasonló törvényszerűségek jellemzik, ezt egy konferenciakiadványban mutattunk be [3]. A (részben a pályázat során született) eredményekből egy jelenleg elbírálás alatt álló MTA nagydoktori értekezés készült [12].

A [zárójeles] hivatkozások a publikációs lista megfelelő elemeire utalnak.

4. Az eredmények alkalmazási lehetőségei

Az áramlásokban zajló kémiai illetve biológiai aktivitással kapcsolatos eredmények számos területen alkalmazhatóak. A környezeti áramlások közül a légköri kémiai folyamatok, például ózonreakciók, megértéséhez elengedhetetlen az áramlásokban zajló aktív folyamatok minél pontosabb megértése. Hasonlóan, a szén körforgásában rendkívül fontos óceáni planktonpopulációk viselkedése is igen élénk kutatási terület világszerte. De igen fontos alkalmazási terület lehet a véráramlásban zajló biokémiai folyamatok megértése is, jelenleg a University of Aberdeen (Skócia) fizikus és biokémikus kutatóival azt vizsgáljuk, hogy hogyan alkalmazhatóak elméleti eredményeink egyes vérkeringéssel kapcsolatos betegségek előrejelzésére.

A térbeli káosszal kapcsolatos eredmények alapul szolgálhatnak egyrészt numerikus számítási módszerek továbbfejlesztéséhez, másrészt olyan alkalmazások kidolgozásához, amelyek további biológiai példákkal kapcsolatosak. Ez utóbbiak közé tartozik például a fehérjék és DNS felcsavarodásának vizsgálata, ez a világszerte élénken kutatott terület.

A szálas mikroorganizmusok kutatásának fontosságát az adja, hogy a gyógyászatban alkalmazott antibiotikumok túlnyomó többségét ilyen szálas alakú egyedek növesztésével nyerik. A növekedés vizsgálata, törvényszerűségeinek megismerése javíthatja a növesztési eljárások hatékonyságát.