

ÖNÁLLÓ TANULMÁNY

A BIOKIBERNETIKA NÉHÁNY AKTUÁLIS KÉRDÉSE

GÁSPÁR REZSŐ és DAMJANOVICH SÁNDOR

Debreceni Orvostudományi Egyetem Biofizikai Intézete, Debrecen

A biokibernetika napjaink egyik gyorsan fejlődő tudományága, amelynek művelése komplex interdiszciplináris megközelítés nélkül elképzelhetetlen. Bonyolítja a biokibernetikai adatok, új eredmények áttekinthetőségét az is, hogy a biológia úgyszólván minden területére kiterjeszhető és emiatt a legkülönbözőbb szakfolyóiratokban találhatunk biokibernetikai témájúnak minősíthető közleményeket. Teljes áttekintést adni a biokibernetika jelenlegi helyzetéről emiatt szinte lehetetlen. Ahhoz, hogy valamennyire megközelíthessük célunkat és az aktuális biokibernetikai kutatási irányokról legalább közelítő képet kapjunk, szelektálnunk kellett. Az első táblázat mutatja négy olyan biokibernetikai szempontból kiemelkedően fontos folyóirat, mint a *Biological Cybernetics*, a *J. of Theoretical Biology*, a *Bulletin of Mathematical Biology* és a *Computers in Biomedical Research* 1976-ban és 1977 első felében megjelent cikkeinek egy összeállítását. A két „par excellence” kibernetikai folyóiratnak valamennyi cikkét feldolgoztuk, míg a *J. Theor. Biol.* és a *Bull. of Math. Biologynak* csak azokat a cikkeket válogattuk ki, amelyek biztosan a biokibernetika tárgykörébe sorolhatók. A cikkeket — elsősorban biológiai alapon — 17 csoportba rendeztük és ennek alapján már az így kiválasztott nézőpontból képet alkothatunk, hogy melyek a legintenzívebben művelt kutatási területek. A felosztást biológiai alapon végeztük, így táblázatunk nem ad felvilágosítást arról, hogy melyek azok a biokibernetikai módszerek, amelyek napjainkban a leggyorsabban fejlődnek, ill. a leggyakoribb alkalmazást nyerik (I. táblázat). A közlemények rendezése és áttekintése során azonban az a benyomásunk alakult ki, hogy a jelfelismerés, a jelgenerálás és ezek stabilitása feltétlenül azon kérdések közé tartoznak, amelyek fontosak és általános érdeklődésre tarthatnak számot. Három témát érintünk jelen közleményünkben, amelyek egymással látszólag csak távoli kapcsolatban vannak, de összeköti őket a jelfelismerés és generálás problematikája.

Az első a THOM által 1968-ban megalkotott topologikus bifurkációs elmélet. Ez az elmélet manapság egyre szélesebb körben alkalmazást talál és a „katasztrófaelmélet” elnevezéssel vált ismertté a szakirodalomban. THOM strukturális stabilitás leírásával foglalkozó matematikai elmélete elősegíti a biológia reprodukív folyamatai nagyfokú stabilitásának megértését, továbbá

I. Táblázat

Biokibernetikai közlemények téma szerinti megoszlása

Folyóirat	Témák																
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	R
Biological Cybernetics	10	Ø	34	29	4	Ø	Ø	7	Ø	Ø	5	3	4	Ø	Ø	Ø	1
Journal of Theoretical Biology	11	10	11	1	Ø	4	4	2	2	5	Ø	Ø	18	23	2	1	3
Bulletin of Mathematical Biology	8	Ø	7	3	1	5	1	Ø	1	1	Ø	Ø	Ø	4	1	Ø	5
Computers in Biomedical Research	Ø	Ø	8	1	Ø	16	Ø	Ø	Ø	Ø	Ø	1	Ø	5	Ø	6	Ø
Összesen: 268	29	10	60	34	5	25	5	9	3	6	5	4	22	32	3	7	9

A: Általános és elméleti vonatkozások

C: Neuronok és neuron-hálózatok

E: Hallás, hallórendszer

G: Hormonreguláció, immunválaszok

I: Homeosztázis autonóm szabályozása

K: Feltételes reflexek

M: Magatartás-kutatás, pszichológia

O: Környezeti hatások, dózis-szintek

R: Egyéb

B: Intracelluláris kontroll, információ feldolgozás

D: Látás

F: Szív, keringés, gáztranszport

H: Motorikus rendszerek

J: Növekedés

L: Memória

N: Sejt, populáció-genetika

P: Orvosi kezelés optimális ellenőrzése és segítése

egzakt módon tárgyalhatóvá tesz számos korábban ilyen szempontból szinte megközelíthetetlennek látszó kérdést (16).

A második kérdéscsoport a jelfelismeréssel, nevezetesen azzal foglalkozik, hogy lehetne felismerni vagy megjósolni objektumok nagy csoportjának valamely rejtett tulajdonságát, ha ismereteink csak az objektumokon végzett indirekt mérések eredményeire támaszkodnak.

Közleményünk harmadik részében bemutatjuk, hogy egy molekuláris enzimkinetikai modell milyen mintafelismerési problémát von maga után.

I.

A természeti jelenségek matematikai modellel történő leírása, azaz a természeti törvények egzakt formába öntése sokszor zátonyra fut a jelenségek kvantitatív leírására alkalmas matematikai módszerek hiánya vagy alkalmazhatóságának bonyolultsága miatt. Ilyenkor csak kvalitatív módszerek vezethetnek célra, segíthetnek a nagy mennyiségű felhalmozódott adat kiértékelésében. Még a fizika jelenségeinek értelmezésében, egyes törvényeinek megfogalmazásában is sokszor csak az intuitív, fenomenologikus közelítés vezetett célra a jelenségek kvantitatív elemzésével szemben. Elsőként POINCARÉ kísérelte meg geometrikus szemléletmód alapján komplex rendszerek kvalitatív leírását (10). Munkássága nyomán fejlődésnek indult a geometria egy új ága, a

topologia. THOM francia matematikus 1968-ban a topologia intuitív geometrikus jellegére alapítva fejtette ki elméletét, melyet a „Stabilité Structurelle et Morphogenese” című könyvében írt le részletesen (16). Ezt az elméletet katasztrófaelméletnek nevezte el. THOM katasztrófaelmélete a maga nemében nem tekinthető egyedülállónak, hasonló topologikus elméletet írnak le THOMPSON és HUNT (17). Mindkét elmélet az önszervező struktúrák kutatására kidolgozott matematikai-fizikai módszerek speciális vetületeként fogható fel. Az önszervező struktúrák elméletét a közelmúltban magyar nyelven megjelent átfogó közlemény ismerteti így a szóban forgó közleményre való utalással az elmélet részletezésétől eltekintünk (7).

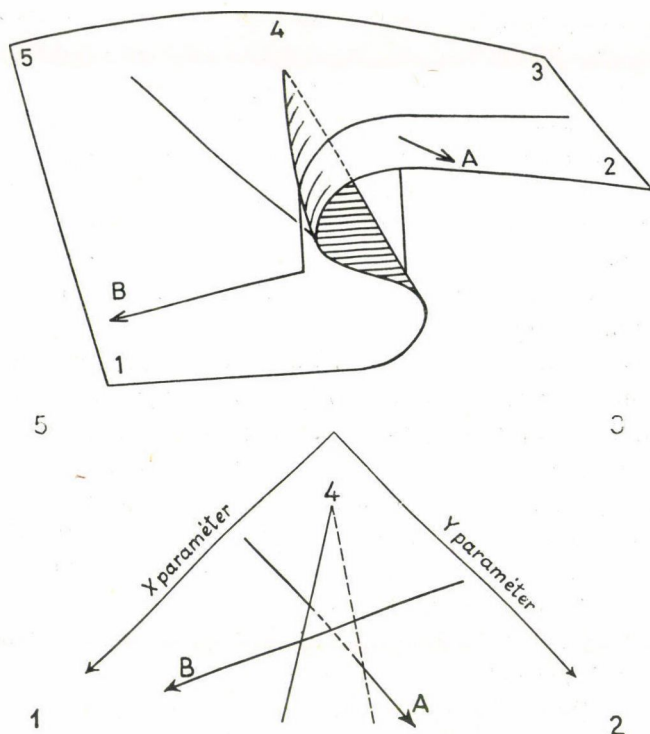
A katasztrófaelmélet lényege igen egyszerűen megvilágítható. (A katasztrófaelmélet részletes leírását megtalálhatja az érdeklődő GÜTTINGER 1974-ben közölt munkájában (6).) A természet alapvető erői sima felületekkel írhatók le egyensúly esetén, amikor azonban az egyensúly megbomlik — bekövetkezik a katasztrófa — és az erők hirtelen egy új szinten kerülnek egyensúlyba. ZEEMAN nyomán, aki a katasztrófaelmélet könnyebb analizálhatósága végett katasztrófagépet is szerkesztett, THOM elgondolásait az alábbi példákon lehet nagyon demonstratíván szemléltetni (19).

Konrad Lorenz, az etológia egyik megalapítója szerint az állatok agresszív viselkedését két tényezőnek, a dühnek és a félelemnek az egyensúlya szabja meg. Ha az egyensúly megbomlik, az állat viselkedése támadásba vagy menekülésbe csap át. Ha a szokásos matematikai leírást alkalmazzuk a düh és a félelem azonos mennyisége közömbösítené egymást. A valóság ezzel szemben az, hogy a düh és a félelem közel azonos volta esetén az állat teljesen váratlanul menekülésbe vagy támadásba mehet át.

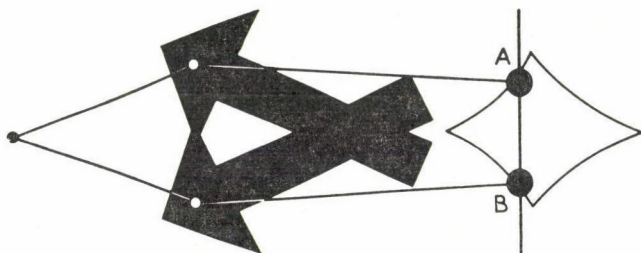
E bonyolult folyamatok matematikai leírására THOM felületeket használ. Mint az 1. ábra mutatja a düh és a félelem, a két ellentétes reakció ábrázolható egy hajlított felületen. Az állat magatartását a két érzelem együttesen befolyásolja, de amikor az egyik túlsúlyba jut, akkor katasztrófaszerűen bekövetkezik az állat magatartás változása. Az ábra világosan mutatja, hogy a menekülési ill. támadási reakció hogyan függ a düh és a félelem érzéstől.

ZEEMAN a katasztrófaelmélet könnyebb szemléltethetősége kedvéért ún. katasztrófagépet szerkesztett. A gépen bemutatható (2. ábra), hogy egy adott paraméter (a gumiszalag végén levő gomb helyzetének) folytonos változtatására egy ideig folyamatosan változó másik paraméter (a mutató végének helye) hogyan változik ugrásszerűen ha az első paraméter változása egy bizonyos értéket elér.

THOM a kontroll felületeken nyerhető azon felületi vonalvetületek alapján amelyekkel a katasztrófa jellemezhető hét elemi katasztrófát különböztetett meg: ezek két csoportba, a csúcsos és a bemélyedő csoportba oszthatók. A csúcsosba tartozik a redő, csúcs, fecskefark és pillangó katasztrófa, míg a bemélyedőbe a hiperbolikus, elliptikus és parabolikus.



1. ábra. Az állatok agresszív viselkedését leíró (a) katasztrófafelület, valamint a hozzá tartozó (b) vezérlőszik. Amennyiben az X paramétert a félelemérzettel az Y paramétert a düh mértékével azonosítjuk az A útvonal mentén bekövetkező katasztrófa az állat támadását, a B útvonal mentén bekövetkező pedig annak menekülését magyarázza



2. ábra. Zeeman katasztrófagépének működőképes modellje. Az adott elrendezésben a „katasztrófa” a kontrollfelület A és B pontjainál következik be

Ezekkel az elemi katasztrófákkal pszichológiai folyamatok, mint pl. önsajnálát és düh, közgazdasági folyamatok, embriogenezis, szívverés, idegimpulzus terjedése, fizikai folyamatok mint például lökés hullámok terjedése, kémiai rendszerek nem lineáris oszcillációi, elaszticitás stb. egyaránt modellezhető.

Mint a bevezetés is hangsúlyozta, a jelfelismerésre ill. -generálásra próbálunk koncentrálni, így röviden megemlítjük SCHULMAN idevonatkozó munkáját (12). SCHULMAN, ZEEMAN katasztrófagépét alkalmazta betűk — azaz jelek — generálására úgy, hogy a katasztrófagép mutatójához tollat rögzített hozzá és a mutató mozgását mozgó papírhengeren regisztrálta. A valóságban a különböző variánsokat úgy tanulmányozta, hogy ezeket az analóg tulajdonságokat computerbe táplálta és annak a segítségével vizsgálta, hogy a jelgenerálás mennyire stabil. Megállapította, hogy a jelgenerálás a legkülönbözőbb perturbációkkal szemben nagy stabilitást mutat. A stabilitást csak az veszélyeztette, ha a perturbáció vetülete a THOM féle kontroll felület katasztrófa vonalait átlépte. A jelfelismerés a jelgenerálás inverz folyamata. Tehát ennek a fordítottja is elmondható, hogy egy minta addig tartozik felismerhetően egy speciális osztályba, amíg a generálás során a fenti perturbációs hibával, a kontroll felület katasztrófa vonalát át nem léptük. Természetesen bonyolult jelek (pl. az embriogenezis) generálása csak sokdimenziós katasztrófatorozatokkal írható le, amelyeket távolról sem olyan egyszerű modellezni, de a katasztrófaelmélet ezekre is lehetőséget ad.

II.

A jelfelismerés elmélete a matematikai kibernetikának egy napjainkban igen gyorsan fejlődő ága. Problémaköre a következő módon fogalmazható meg KOWALSKI nyomán (9). Lehetséges-e felismerni vagy megjósolni objektumok nagy csoportjának valamely rejtett tulajdonságát ha tudásunk csak az objektumokon végzett indirekt mérések eredményeire korlátozódik? Mint módszer a jelfelismerést, eredetileg elektromérnökök dolgozták ki nagy adathalmazokban rejlő információ tartalom koncentrációja céljából. A digitális jelekből álló adathalmazokra kidolgozott eljárásokból olyan általánosan alkalmazható módszer fejlődött ki, mely sok reménnyel kecsegtet a kísérleti biológia, a kísérleti kémia, a pszichológia és más egyéb kutatási területek adatfeldolgozási és kiértékelési problémáinak megoldását illetően. A jelfelismerés technikáját már sikeresen alkalmazták többek között a következő kutatási területeken: beszéd felismerés, légi- és mikrofényképezés, a köd, buborék és szikrakamrákban történő nyomkiértékelés, szeizmikus jelek detektálása valamint robbanás észlelés, az EKG és EEG hullámok regisztrálása és az automatikus fehérvérsejt felismerés.

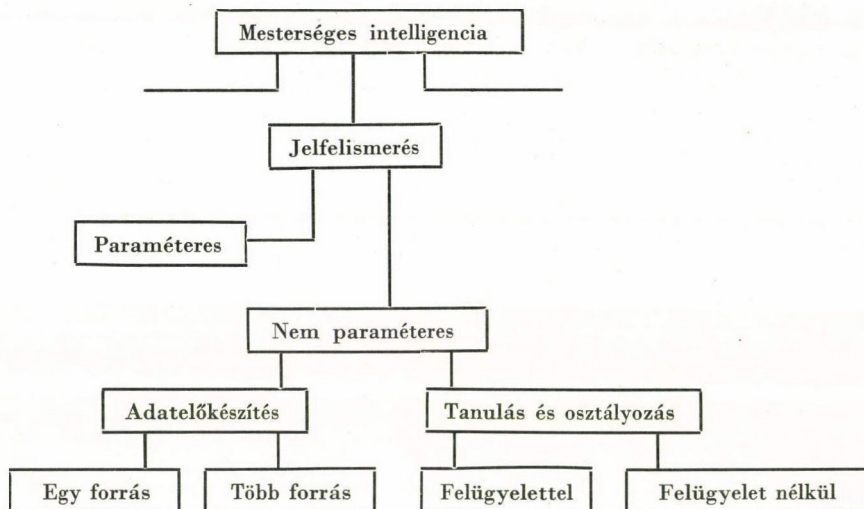
A jelfelismerés technikájának széles körű elterjedése erősen a digitális számítógépek létehez kötött. Érdemes megjegyezni, hogy jelenleg már létezik két olyan programcsomag, melyek bárki számára hozzáférhetőek és 32K byte központi memóriával valamint megfelelő perifériákkal rendelkező számítógépen lehetővé teszik a fenti technika minden előnyének és részletének kihasználását. Az ARTHUR nevű programcsomagot KOWALSKI és munkatársai fejlesztették

ki a washingtoni egyetem kémiai fakultásán, a *RECOG* nevű programcsomagot pedig a Lawrence Livermore Laboratory munkatársai dolgozták ki (2, 11).

A mesterséges intelligencia problémaköréből kiindulva a jelfelismerési technikák funkcionális származtatását szemlélteti következő sémánk: (II. táblázat).

II. Táblázat

A jelfelismerési technikák funkcionális származtatása



A jelfelismerés paraméteres változata feltételezi, hogy az adatok mögött rejlő valószínűségi sűrűségfüggvényt ismerjük vagy legalábbis jól megbecsülhetjük. Nyilvánvaló, hogy ez nem minden esetben lehetséges így ezen módszer alkalmazása számos nehézséget támaszthat alkalmazójával szemben. A továbbiakban ezért csak a nem-paraméteres jelfelismeréssel kívánunk foglalkozni. Ebben az esetben már a kezdet kezdetén két kérdésre választ kell adnunk:

1. Mit akarunk az objektumról megtudni?
2. A mérési adatok a helyes formában állnak-e rendelkezésünkre?

A két kérdés nyilván nem független egymástól.

Az adatelőkészítés az adatokon (mérések eredményein) végrehajtott numerikus operáció(kat) jelent, melyek során az adatok által tartalmazott információ reprezentációját befolyásoljuk. Az adatelőkészítés után a tanulás és az osztályozás műveletei következnek, melyek egyenesen a kívánt eredményeket szolgáltatják.

Különbséget kell még tennünk egy forrásból (egy műszer) származó adatok feldolgozása, valamint több forrásból származó adatok feldolgozása között. A tanulás folyamata történhet felügyelettel, valamint felügyelet nélkül.

A jelfelismerés folyamatának részletes ábrázolása céljából feleltessük meg objektumainkat egy N -dimenziós euklideszi tér egyes pontjainak, ahol N legyen egyenlő az egyes objektumokon végrehajtott mérések számával. Természetesen a mérések száma minden egyes objektum esetében azonos. A jelfelismerés folyamata során igen fontos, hogy definiáljunk egy mérőszámot, mely a fenti pontok „hasonlóságát” leírja. Ez a mérőszám legegyszerűbben a két pont között az N dimenziós térben mért euklideszi távolság lehet és ezzel feltételezzük, hogy a térbeli közelség egyben a megfelelő tárgyak hasonlóságának jó mértéke. Az X_i és X_j tárgyak hasonlóságának mérőszáma így:

$$d_{ij} = \left\{ \sum_{k=1}^N (X_{ik} - X_{jk})^2 \right\}^{1/2}.$$

Aktuálisan d_{ij} a hasonlóság reciprok mérőszáma, így szokás helyette az

$$S_{ij} = 1 - d_{ij} ((d_{ij})_{\text{MAX}})^{-1}$$

direkt mérőszámot bevezetni, ahol $(d_{ij})_{\text{MAX}}$ a két pont közötti legnagyobb távolság. A hasonlóság mértékének fogalma és aktuális megfogalmazása igen fontos része a jelfelismerésnek. A tanulás és osztályozás folyamata jelen esetben az N dimenziós euklideszi tér pontjain végrehajtott operációkat jelent.

Felügyelettel végrehajtott jelfelismerés esetén az N dimenziós térben ismert tulajdonságú, tehát már eleve osztályozott pontok (mérési eredmények) állnak rendelkezésre, ezek alkotják az ún. „tanuló készletet”. Elsődlegesen tehát olyan szabályokat kell származtatnunk, melyek ezeket a pontokat az őket megillető „helyes” osztályba sorolják be. Az így megállapított szabályok segítségével történik azután az ismeretlen tulajdonságú pontok osztályozása.

A felügyelet nélküli jelfelismerés esetében csak arra szorítkozhatunk, hogy az N dimenziós térben sűrűsödéseket találjunk, melyek az egyes különálló pontok (mérések) mögött rejlő összefüggésre világítanak rá. Könnyen belátható, hogy a felügyelettel végrehajtott jelfelismerés esetében mérési adatainkon bonyolultabb transzformációk végrehajtása is szükséges lehet, (pl. Fourier transzformáció) míg a felügyelet nélküli esetben csak az ún. skálázás művelete a megengedett. Ezen utóbbi folyamat általában minden jelfelismerési rendszerben fellelhető.

A továbbiakban igen fontos az is, hogy az N dimenziós térben megjelenő és az ember által vizuálisan meg nem figyelhető említett sűrűsödéseket a lehetőségekhez képest hűen, közelítő módon két dimenziós térben ábrázoljuk és vizsgáljuk. Ezt a célt szolgálja a nemlineáris térképezés módszere. Ha ezt a módszert alkalmaztuk akkor az N dimenziós térben már értelmezett d_{ij} távolságot a kétdimenziós térben is igyekezzük megőrizni, azaz:

$$d_{ij}^* = \{(X_i - X_j)^2 + (Y_i - Y_j)^2\}^{1/2} \equiv d_{ij}$$

az összes i, j pontpárokra. Nyilvánvalóan ez csak egy bizonyos H hiba bevezetése esetén lehetséges, mely a következő alakban definiálható:

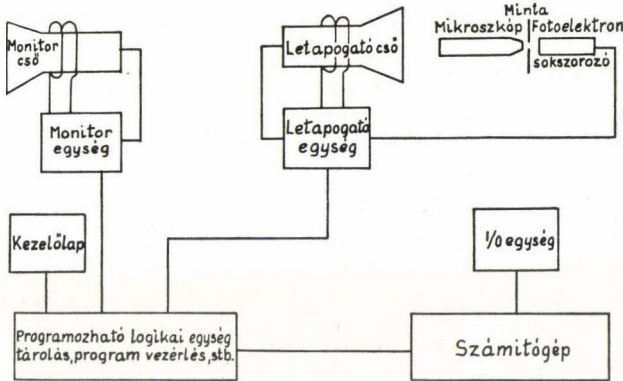
$$H = \frac{1}{\sum_{i>j} d_{ij}^*} \sum_{i>j} \frac{(d_{ij}^* - d_{ij})^2}{d_{ij}^*}$$

Láthatóan ez a függvény $2N$ ismeretlenben ($N =$ pontok száma) nemlineáris. A fenti hibafüggvény minimalizálása során jutunk a legjobb közelítő kétdimenziós nemlineáris térképhez.

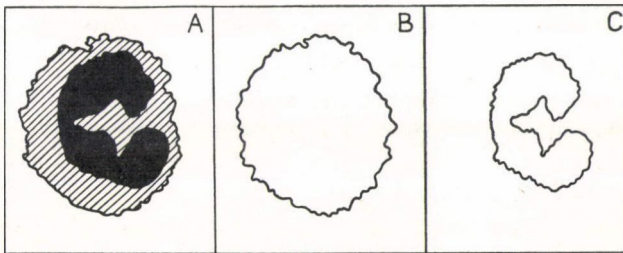
A számítógépek a fenti feladatok végrehajtása mellett igen előnyösen felhasználhatók arra a célra, hogy az N dimenziós térben tájékozódjanak, megtalálják a pontok létező sűrűségeit, valamint besorolják az ismeretlen pontokat a már korábban definiált osztályokba. Nyilvánvaló, hogy ez olyan feladat, melyet az ember csak N igen kicsiny értékei mellett képes elvégezni. Ezen utóbbi feladatok esetében is a már korábban említett hasonlóság kritériumnak döntő szerep jut. A számítógép a hasonlóság kritérium alapján fedi fel a pontok mögött rejlő sűrűségeket és végzi el az osztályozás feladatát.

A fenti elméleti ismertetés után vizsgáljuk meg részletesen a jelfelismerési technika egy konkrét alkalmazását, az ún. „flying-spot” mikroszkópot, melyet a Chelsea College Biofizikai Laboratóriumában ROSEN és munkatársai fejlesztettek ki (3, 4). Rendszerük tartalmaz egy általános célú, valamint egy speciális célú számítógépet mely utóbbi a mikroszkóp vezérlésére szolgál. Az aktuális mérő összeállítást a 3. ábra mutatja. A rendszer tipikusan mondható működése a következőkben foglalható össze:

A kereső cső a mikroszkóp segítségével képes a beállított tárgyat rendszerűen letapogatni és a tárgy túoldalán levő fotoelektron-sokszorozón észlelhetjük a preparátumon átjutó fény intenzitását. A számítógép vezérlésével a beállított látóteret a berendezés automatikusan letapogatja addig, amíg egy tárgyat nem talál, melynek jelenlétét az átjutó fény intenzitásának csökkenése jelzi. Ekkor a letapogató programról a berendezés automatikusan átvált kereső üzemmódra és meghatározza az illető tárgy kontúrját (4. ábra). A kontúrnak megfelelő információt a számítógép tárolja. Ha a kontúrt meghatározta a program, akkor választás elé állítja az operátort, aki egy következő tárgy keresését kérheti, vagy pedig a kontúr belüli terület részletes elemzését. ROSEN és mtsai a fenti eljárás előnyeként említik, hogy a hagyományos eljárásokkal szemben, amikor is a teljes látóteret letapogatásával nyert információ tárolása után végeznek csak jelfelismerést, módszerük lényegesen kisebb számítógép kapacitással és a hagyományos módszer időigényének töredékei alatt elvégezhető. 12 K byte memória már alkalmas a berendezés üzemeléséhez. A felismerendő sejtek száma a gyakorlatban igen nagy lehet, így az időfaktor is lényeges szempontként említhető.



3. ábra. A sejtek alakjának felismerésre kifejlesztett „flying-spot” mikroszkóp blokk-vázlata



4. ábra. A „flying-spot” mikroszkóp jelfelismerési folyamata. A környezettől eltérő optikai tulajdonságokat mutató objektumhoz (A) érve a mikroszkóp annak kontúráját (B) meghatározza, majd az adott vezérlési utasítás esetén a kontúrban belüli terület elemzését is elvégzi (C)

III.

A jelfelismerési probléma molekuláris biológiai, konkrétan enzimatikus szinten is jelentkezhet, nem is említve a molekuláris genetika széles körben ismert felismerési kérdéseit.

1971 és 75 között számos közlemény jelent meg, amelyekben SOMOGYI és DAMJANOVICH fokozatosan kidolgozták molekuláris enzimkinetikai modellüket (1, 13, 14). A molekuláris enzimkinetikai modell (MEKM) egyik fontos tulajdonsága, hogy az enzim-szubsztrát-produktum kölcsönhatás értelmezését úgy közelíti meg, hogy a folyadék környezet molekuláinak és az enzim-szubsztrát (ES) ill. enzim-produktum (EP) komplexeknek a hőmozgás révén létrejövő ütközését kvantitatíven tárgyalja.

Ez a megközelítés lehetővé teszi egyrészt azt, hogy a Michaelis—Menten kinetikából jól ismert fenomenológikus kinetikai konstansok molekuláris értelmezést nyerjenek, másrészt egy új, a mintafelismerési problémakörhöz közel álló szabályozási mechanizmust tár fel.

A mechanizmus lényege a következőkben fogalmazható meg. Általában minden ES komplex nagyon dinamikus és kölcsönös energia cserét folytat környezetével. Ennek révén jön létre, pl. a translációs hőmérsékleti csatolás. Az enzimhatásmechanizmus ismert elméletei, (proximitás, strain, induced fit, orbital steering stb. (18)) az enzim környezetéből származó energia felvételét nem vizsgálják eléggé. Ez érvényes még az ütközési elméletekre is, amelyek csak a szubsztrát és az enzim ütközési energia cseréjét vizsgálják, ill. a GREEN—Ji féle EMC (elektro-mechano-kémiai) elméletre is, amely kész tényként elfogadja az enzimek viszonylag lassú frekvenciájú fluktuációját (5).

Nagy molekulák is képesek felvenni környezeti energiát elsősorban a kis molekulákkal történő ütközésekkor létrejövő translációs vibrációs ($T \rightarrow V$) átmenetek révén. Ez az energia a hőmérsékleti egyensúlyra való törekvés miatt nyilván előbb-utóbb kicsatolódik a környezet atomjaira, molekuláira. A kicsatolódásig eltelt idő alatt az energia vándorolhat a globuláris proteinek közel szilárd anyagnak tekinthető nukleuszában (8). Az energiavándorlás során időlegesen erősítések és kioltások is létrejöhetnek a találkozó vibrációs hullámok között. Lehetséges tehát, hogy az energia egy tört hányada akkumulálódjon és orientált energiátörnszfer révén eljusson az aktív vagy a regulatorikus központokba. Még akkor is ha a relatíve gyenge translációs-vibrációs átmeneteket vesszük a fehérjén belüli energiavándorlás alapjául, az orientált energiátörnszfer számottevő energiát szállíthat. Ezt a mechanizmust nevezük energiátörnszfernek. Az energiátörnszfer mechanizmus, amit az enzim és a környezet közötti kölcsönös energia cserére alapozunk, a szabályozásnak egy új formáját teszi lehetővé. Elméleti fizikai megfontolások előírják, hogy a translációs vibrációs energia átmenetek kellő valószínűséggel csak akkor jöhetnek létre, ha rövid a taszító potenciáltérben megteendő távolság, nagy az ütköző kis molekula sebessége és viszonylag lassú a nagy molekula gerjesztendő részének a vibrációja (15). A küszöbsebesség előírása, a környezeti hőenergia Maxwell—Boltzmann eloszlásából következően maga után vonja azt is, hogy a környezeti tömegeloszlás befolyásolja az enzimműködést. Ez kézenfekvő, mivel az átlagosan kisebb tömegű partikulák kinetikus energia egyenlőség esetén nagyobb sebességet képviselnek, ami a küszöbenergia szempontjából kedvezőbb. A $T \rightarrow V$ átmenetek nagy számát eleve feltételezzük még viszonylag kis bekövetkezési valószínűség esetén is, mivel az enzim általában sokkal nagyobb az ütköző környezeti molekuláknál. Ez magyarázza azt is, hogy az enzimek miért nem lehetnek kis molekulák. Mivel a $T \rightarrow V$ átmenet a fehérjemolekula nem minden részén egyformán valószínű, az aktivációt előidéző ütközési mintát kell feltételeznünk, amelynek az előfordulási valószínűsége egyaránt függ az ütköző molekulák tömegeloszlásától és az enzim specifikus szerkezetétől. Így az enzimműködés egy az eddig ismert kísérleti tényekkel teljesen összeegyeztethető, ugyanakkor az általános mechanizmusból legtöbbet megmagyarázó modellje a MEKM, egy tipikus mintafelismerési probléma.

A mintafelismerés ill. mintagenerálás problémája tárgyalható a katasztrófaelmélet alapján is. Természetesen, még a legegyszerűbb enzimreakció tárgyalásához sem elegendő az első fejezetben bemutatott háromdimenziós felület. Az enzimreakció során számos katasztrófaféleként felfogható lépés van (pl. $ES \rightarrow ES^* \rightarrow EP \rightarrow E + P$ stb.). A legszükségesebb vezérlő ill. jel paraméterek figyelembevétele is sokdimenziós felületeket eredményez. Ennek ellenére érdemesnek látszik a katasztrófaelmélet alkalmazása az enzimreakciók általános leírására, mivel ez az enzim-szubsztrát-produktum kölcsönhatáson kívül képes figyelembe venni az enzim és a folyadékkörnyezet közötti kölcsönhatásokat is. Természetesen ezek vizsgálatára csak számítógépes technika alkalmazásával lehet gondolni. Erre vonatkozó munkáink jelenleg már folyamatban vannak.

IRODALOM

1. DAMJANOVICH, S., SOMOGYI, B.: *J. Theor. Biol.* **41**, 567 (1973).
2. DUEWER, D. L., KOSKINEN, J. R., KOWALSKI, B. R.: ARTHUR programcsomag. Kérésre küldi: B. R. Kowalski, Laboratory for Chemometrics, Department of Chemistry BG-10, University of Washington, Seattle, 98195.
3. ECCLES, M. J., MCCARTHY, B. D., PROFFITT, D., ROSEN, D.: *J. Microscopy* **106**, 33 (1976).
4. ECCLES, M. J., MCCARTHY, B. D., PROFFITT, D., ROSEN, D.: *J. Microscopy* **106**, 43 (1976).
5. GREEN, D. E., JI, S.: *Proc. natn. Acad. Sci. U. S. A.* **70**, 904 (1973).
6. GÜTTINGER, W.: *Physics and Mathematics of the Nervous System* (Szerk. M. Conrad, W. Güttinger, M. Dal Cin) Springer-Verlag, New York **4**, 2 (1974).
7. HAKEN, H.: *Fizikai Szemle* **27**, 132 (1977).
8. KLAPPER, M. H.: *Biochim. biophys. Acta* **229**, 557 (1971).
9. KOWALSKI, B. R., BENDER, C. F.: *J. Amer. Chem. Soc.* **94**, 5632 (1972).
10. POINCARÉ, H.: *Sur les courbes définies par une équation différentielle*, Oevres Completes, Vol. I, Paris (1881).
11. PRITCHARD, R. H., BENDER, C. F.: *RECOG Pattern Recognition Analysis of Generalized Data Sets*. Felhasználói kézikönyv. Lawrence Livermore Laboratory, Rept. UCID-16443 (1973).
12. SCHULMAN, L. S.: *J. Theor. Biol.* **57**, 453 (1976).
13. SOMOGYI, B., DAMJANOVICH, S.: *Acta biochim. biophys. Acad. Sci. Hung.* **6**, 353 (1971).
14. SOMOGYI, B., DAMJANOVICH, S.: *J. Theor. Biol.* **51**, 393 (1975).
15. STRETTON, J. L.: *Transfer and Storage of Energy by Molecules* (Szerk. G. M. Burnett és A. M. North) Wiley, New York **2**, 59 (1969).
16. THOM, R.: *Stabilité Structurale et Morphogenese*. Benjamin, New York (1971).
17. THOMPSON, J. M. T., HUNT, G. W.: *A general theory of elastic stability*, Wiley, New York (1973).
18. WELCH, G. R.: *Prog. Biophys. molec. Biol.* **32**, 103 (1977).
19. ZEEMAN, E. C.: *Sci. American* **234**, 65 (1976).