

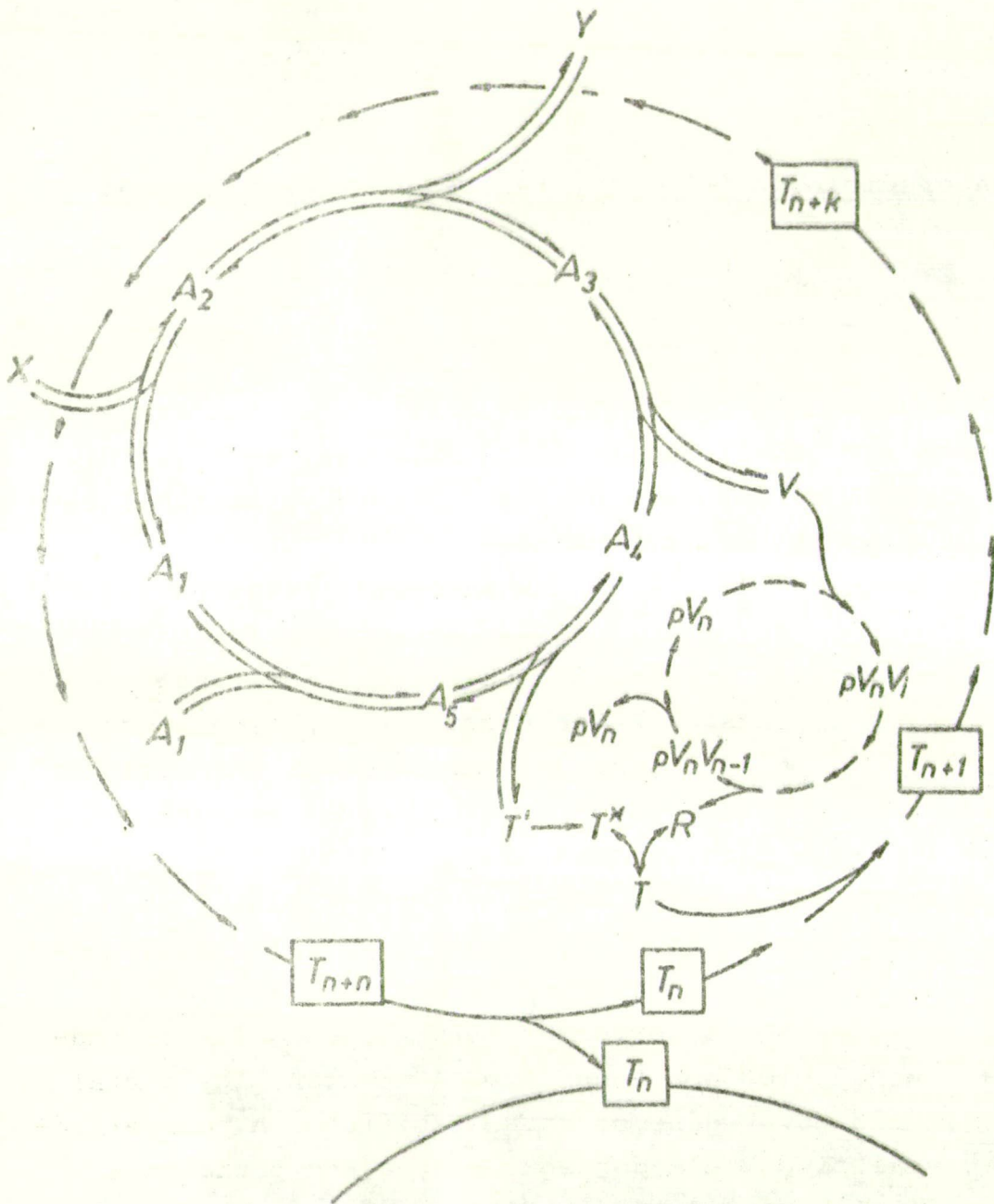
JATE Kibernetikai Laboratórium

A prebiológiai chemoton számítógépes szimulációja

Csendes Tibor

A chemoton a Gánti (1),(2) által definiált minimál-
-élőrendszer, absztrakt elméleti biológiai modell. Ugy
képzeltük el könnyen, ha egy egyszerű egysejtűből el-
hagyjuk mindazt, ami nélkül még élő maradhat. Így kiesik
az enzimrendszer is. Végül egy autokatalitikus kémiai
körfolyamatot, egy információhordozó polimerizálódott
szálat, és egy az egészet magába foglaló membránt kapunk.
Mindezek az alrendszerek természetesen funkcionálisan
összefüggők, például a körfolyamat termeli a membrán és
a szál alapanyagát. A chemoton működésének magyarázatá-
hoz az 1. ábrán látható sémát szokás alkalmazni.

A nagybetűk egy-egy belső anyagot jelölnek. A_i a
körfolyamat eleme, X a tápanyag, Y a salakanyag, és
 V a szál alapanyaga. Miközben V ül le a szálra, R
hasad le róla, ami a körfolyamatban képződő T' -vel rea-
gálva T -t ad - és ebből épül fel a membrán. Így a szál
és a membrán növekedése szorosan összefügg. A polimerizá-
lódott szál olyan tulajdonságu, hogy a két párhuzamos
lánc az oldószer hőmozgása hatására időnként kissé fel-
nyílik /lélegző mechanizmus/. Ha V koncentrációja /ami
anyagmennyiség per térfogat/ elég nagy, akkor nagy annak
a valószínűsége, hogy egy V molekula kötődjön a fel-
nyílt szálra, és bizonyos ideig ott is maradjon. Ezalatt
a szál nem tud visszazáródni, és a lemásolás gyorsan vég-
bemehet. Mivel az első /inicializáló/ lépéshez képest az



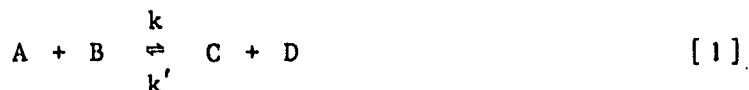
1. ábra

utána következő láncnövelő lépések gyorsak a tapasztalat szerint, így a reakció irreverzibilisnek tekinthető.

Ezek után a chemoton működését úgy képzelhetjük el, hogy az autokatalitikus kémiai körfolyamat /a "kémiai motor"/ fölszaporítja az összes belső anyagot - ez addig tart, amíg a V koncentrációja az említett kritikus V értéket meg nem haladja. Ezután a kémiai motor tovább működik, de közben a fölhalmozódott V mennyiség leül a pVn-re, a polimerizálódott szálra. Eközben az R-ből éppannyi keletkezik, amennyi V kellett a szál lemásolásához. Ezekkel aztán a fölhalmozódott T'-k T-vé reagálnak, amik beépülnek a membránba. Az autokatalitikus kémiai körfolyamat közben megkettőzte a belső anyagok mennyiségét. A T beépülése miatt a membrán felülete is megduplázódott. Kétszeres felület esetén azonban a gömbalaku test térfogata nem kétszeres lesz - így az ozmotikus nyomás hatására a membrán betüremkedik, és a chemoton kettéosztódik. Ezután az egész működés hasonló módon újra kezdődik.

Ennek a strukturának realizációja az ősléggöri körülmények között a Hidvégi (4) által megadott prebiológiai chemoton, melyben a fenti alrendszereket a formóz ciklus, ősi RNS és imidazol alapu membrán képviseli. Ez a rendszer csak olyan szerves vegyületek jelenlétét igényli, amelyeknek spontán, abiogén keletkezése igazolt.

A matematikai modell alapja egy változó együtthatós nemlineáris közönséges differenciálegyenlet rendszer (3). Az



kémiai reakcióhoz a következő differenciálegyenlet rendszer tartozik:

$$\begin{aligned} \frac{d[A]}{dt} &= -k[A][B] + k'[C][D] \\ &\vdots \\ \frac{d[D]}{dt} &= k[A][B] - k'[C][D] \end{aligned} \quad [2]$$

Ha több ilyen kémiai reakcióból áll a hálózat, akkor a megfelelő előjelekkel ellátott tagok az illető jobboldalakhoz adódnak. A jelenlegi absztrakt modellben 14, a prebiológiaiban 95 dimenziós az állapotter. Mivel az analitikus megoldás általános paraméterezés esetén nem állitható elő elemi függvényekkel, így számítástechnikai eszközöket kell használni. A matematikai modellhez tartozik az a feltétel-, és algebrai műveletrendszer, amely a peremfeltételek figyelését, a térfogatszámítást és egyéb paraméterek /például a generációs idő/ meghatározását végzi.

A számítógépes program 4 részből áll: a főprogramból /FO/, és három szubrutinból /RUKUS, FUGGV, OUTF/. A főprogram specifikálja a kezdeti értékeket, a paramétereket, a modellezés feltételeit; az input-output műveleteket végzi, és felhívja a RUKUS rutint, ami a differenciálegyenlet rendszer megoldását szolgáltatja. Ez ehhez egy automatikus lépésköz-változtatással ellátott, negyedrendű, Gil által módosított Runge-Kutta eljárást használ. A RUKUS hívja meg a FUGGV és OUTF rutinokat. A FUGGV tartalmazza a differenciálegyenlet rendszer jobboldalának leírását. Ezt a RUKUS minden integrálási lépéshez négyszer hívja meg. Az OUTF rutin kezeli a RUKUS hibajelzéseit, és megvalósítja a modell algebrai jellegű műveleteit. Az OUTF-ra minden olyan lépés után kerül a vezérlés, amely megfelel az adott pontossági követelményeknek. Ez különö-

sen a peremfeltételek figyelése szempontjából fontos. Egy külön program valósítja meg az eredmények X-Y rajzolására való megjelenítését.

A prebiológiai chemoton szimulációjával kapcsolatos számítástechnikai problémák elsősorban a modell méretéből adódtak: 95 állapotváltozót és 126 kémiai reakciót vetünk figyelembe. A PL/1 nyelvű program automatikusan kezeli a felül-, és alulcsordulásokat. Ugyanigy gondoskodik arról is, hogy olyan kis lépésközzel történjen a közelítés, amely mellett nem kaphatunk irreális negatív koncentrációt egyik anyagra sem. Az állapotváltozók értéke közötti több nagyságrendnyi eltérés szükségessé tette azt is, hogy a Runge-Kutta eljárás hibavizsgálatát az addigi abszolút értelműről relativára változtassuk. Ezzel elkerülhető lett a kisebb abszolút értékű változókban mutatkozó nagy relatív hiba.

Az absztrakt modell vizsgálata során meghatározásra kerültek azok a külső feltételek, amelyek mellett a chemoton megfelelően működik: növekszik, szaporodik. Bizonyítást nyert, hogy ha az információhordozó-, és a membránrendszer között nincs funkcionális kapcsolat, akkor a paraméterek semmilyen választása esetén sem kapunk helyes működést. Megadható az a struktúra, amely a leggyorsabban szaporodó chemont határozza meg azonos külső feltételek között. Az absztrakt chemoton a rá nézve káros környezeti hatást /például a tápanyag-koncentráció csökkenést/ kompenzálni tudta belső anyagai átcsoportosításával.

A jelen szimuláció célja volt megadni olyan paramétereket és környezeti feltételeket, melyek mellett a prebiológiai chemoton rendelkezik az absztrakt chemotonban már igazolt tulajdonságokkal. Kiderült, hogy a következő feltételeknek kell teljesülniük:

1. a szál és a membrán monomerjének képződési sebessége közel egyenlő kell hogy legyen,

2. a szál négy monomerjének keletkezési sebessége nem térhet el több nagyságrenddel egymástól,

3. a tápanyagoknak a membránon való áthaladása reverzibilis kell hogy legyen,

4. a formaldehid koncentrációjának több nagyságrenddel nagyobbak kell lenni, mint a többi tápanyagénak.

A fenti feltételek teljesülése mellett nemcsak helyes működést produkál a prebiológiai chemoton, hanem képes a belső anyagok nélküli rendszer hálózata feltöltődni, pusztán a tápanyagokra támaszkodva.

Ezek után megállapítható, hogy a prebiológiai chemoton a fenti feltételekkel szimulált őslégtörői körülmények között képes a megadott, abiogén módon spontán keletkező tápanyagok segítségével kiépíteni és fenntartani struktúráját, növekedni, osztódni, szaporodni - ilyen értelemben tehát élő rendszerként viselkedik.

Irodalomjegyzék

- (1) Gánti T.: Az élet principiuma, Gondolat, Budapest, 1978.
- (2) Gánti, T.: A theory of biochemical supersystems and its application to the natural and artificial biogenesis. University Park Press, Baltimore, 1979.
- (3) Békés, F., Hidvégi, M., Korpádi, M.: Computer simulation of time dependent behaviour of chemotons, chemical supersystems having the criteria of life. Congress on System-Simulation in Biology and Medicine, Prague, 1978., pp. 94-102.

- (4) Békés, F., Hidvégi, M., Csendes, T., Gánti, T.:
Simulation of the functioning of the first
living systems - the probiotic chemotons.
Congress on System-Simulation in Biology
and Medicine, Prague, 1980., In press.