

Modellierung eines Chemischen Integrators

Seminar *Molekulare Algorithmen* SS2015

Eric Bach

July 6, 2015

Aufgabenstellung

Modellierung eines chemischen Integrators

- gegeben sei ein Signal $f(t)$ $f(t) = \sin(t)$, $f(t) = mt + n$
- Approximation des Integrals $F(t)$

Simulation verschiedener Integrale mit COPASI ¹

1. konstante Funktionen
2. lineare Funktionen
3. Winkelfunktionen (\sin , \cos)
4. Exponentialfunktion

¹<http://copasi.org>

Ablauf des Vortrags

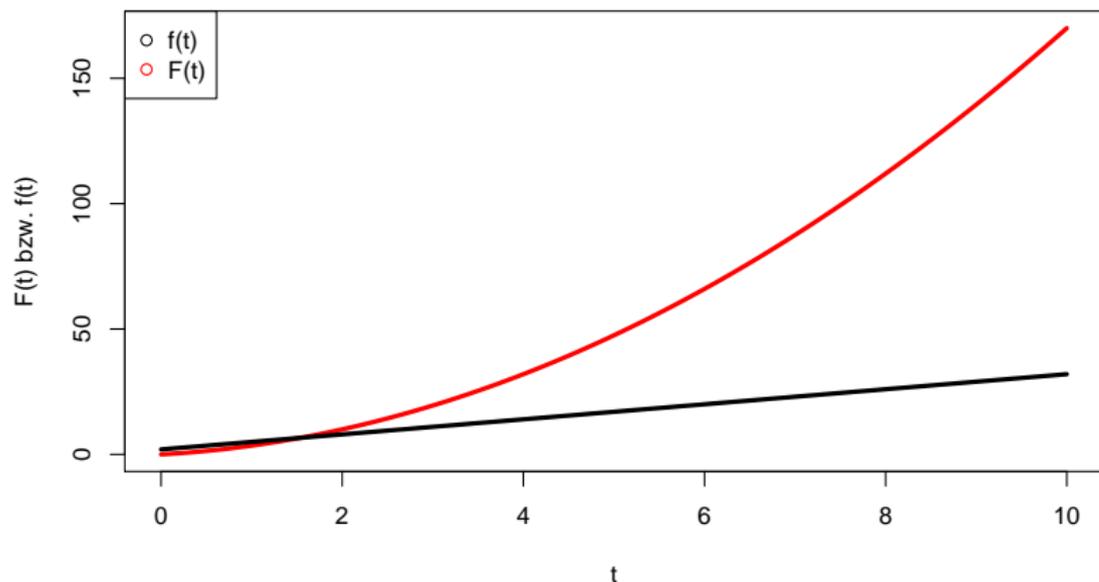
Modellierung

Simulation mit COPASI

Zusammenfassung

Approximation eines Integrals

Integral einer linearen Funktion

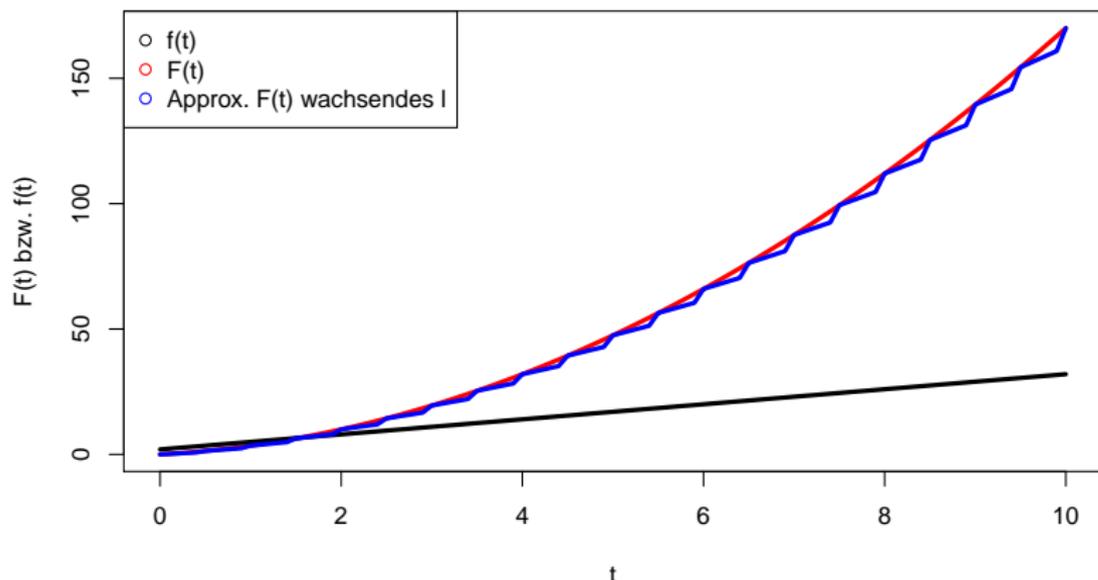


Lineare Funktion

$$f(t) = 3t + 2 \quad \Rightarrow \quad F(t) = \frac{3}{2}t^2 + 2t + C$$

Approximation eines Integrals

Integral einer linearen Funktion

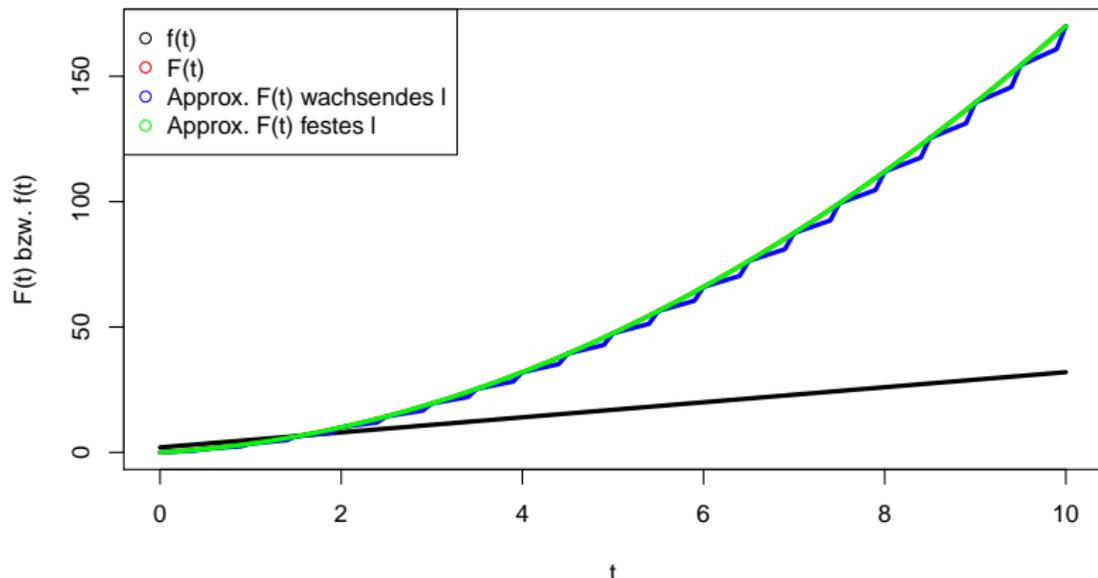


Approximation mit variierender Anzahl der Stützstellen

$$F(t) = \int_0^t f(\tau) d\tau \approx \frac{\tau}{|T|} \sum_{\tau \in T} f(\tau), \text{ mit } T = \text{seq}(0, t, \text{by} = 0.1)$$

Approximation eines Integrals

Integral einer linearen Funktion



Approximation mit fester Anzahl der Stützstellen

$$F(t) = \int_0^t f(\tau) d\tau \approx \frac{\tau}{|T|} \sum_{\tau \in T} f(\tau) \quad , \text{ mit } T = \text{seq}(0, t, \text{len} = 10)$$

Approximation eines Integrals

Probleme mit der Anzahl der Stützstellen

- variierend (also wachsend): vergrößert Anzahl der chemischen Spezies kontinuierlich
- fest: Reaktionsgeschwindigkeit muss kontinuierlich abnehmen, da ein immer längeres *Gedächtnis* erzeugt werden muss

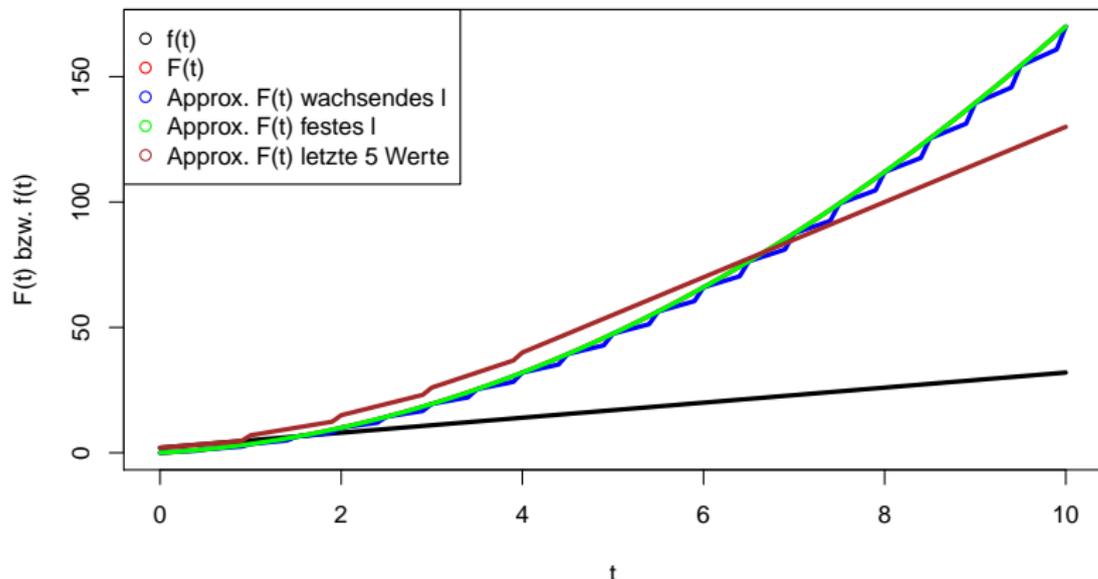
Lösung des Problems ²

- feste Anzahl chemischer Spezies und feste Länge des Gedächtnisses
- ⇒ Integralapproximation durch die letzten l Funktionswerte

²vgl. hierfür: *Computer der Natur*, Thomas Hinze, S. 48/49

Approximation eines Integrals

Integral einer linearen Funktion

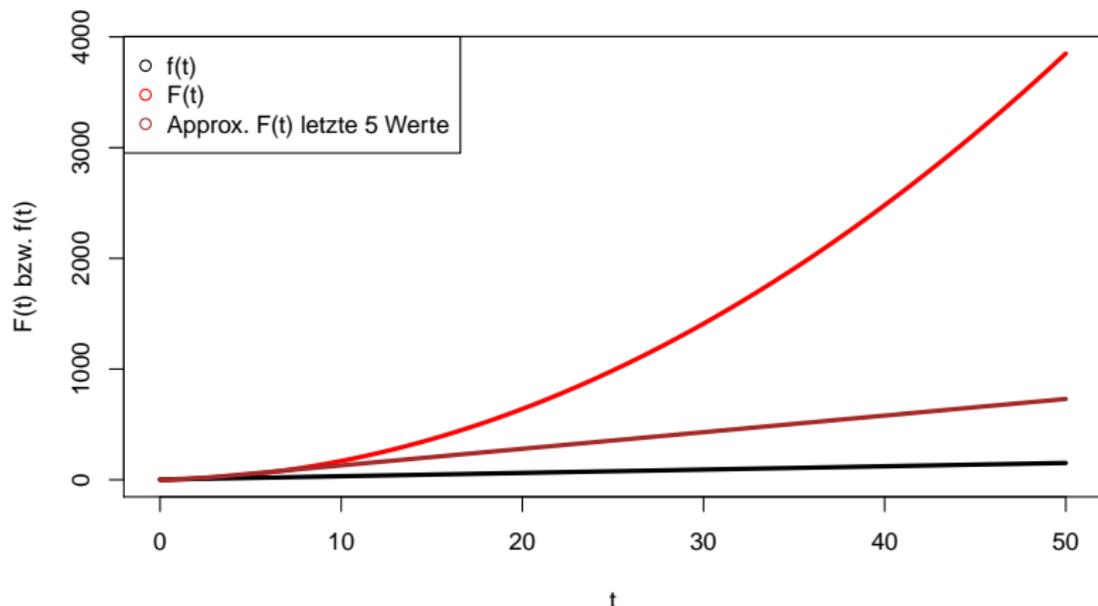


Approximation durch die letzten $l = 5$ Funktionswerte

$$F(t) = \int_0^t f(\tau) d\tau \approx \sum_{\tau \in T} f(\tau) \quad , \text{ mit } T = \text{seq}(t-4, t, \text{by} = 1)$$

Approximation eines Integrals

Integral einer linearen Funktion

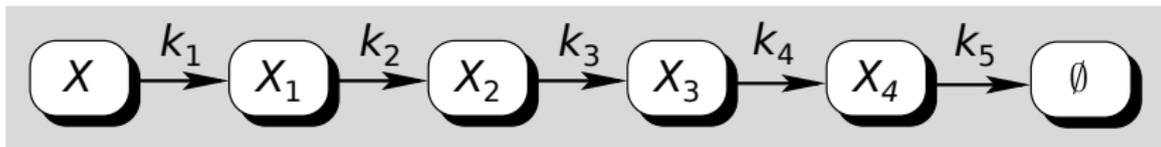


Approximation durch die letzten $l = 5$ Funktionswerte

kann schlecht werden

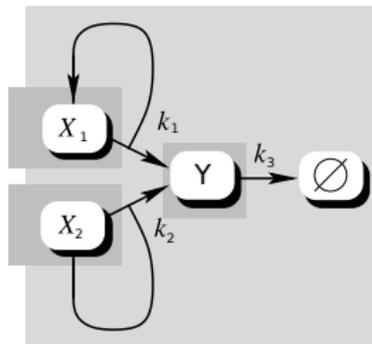
Chemisches Reaktionsbausteine zur Integralapproximation ²

Reaktionskaskade als 5 stufiges Gedächtnis



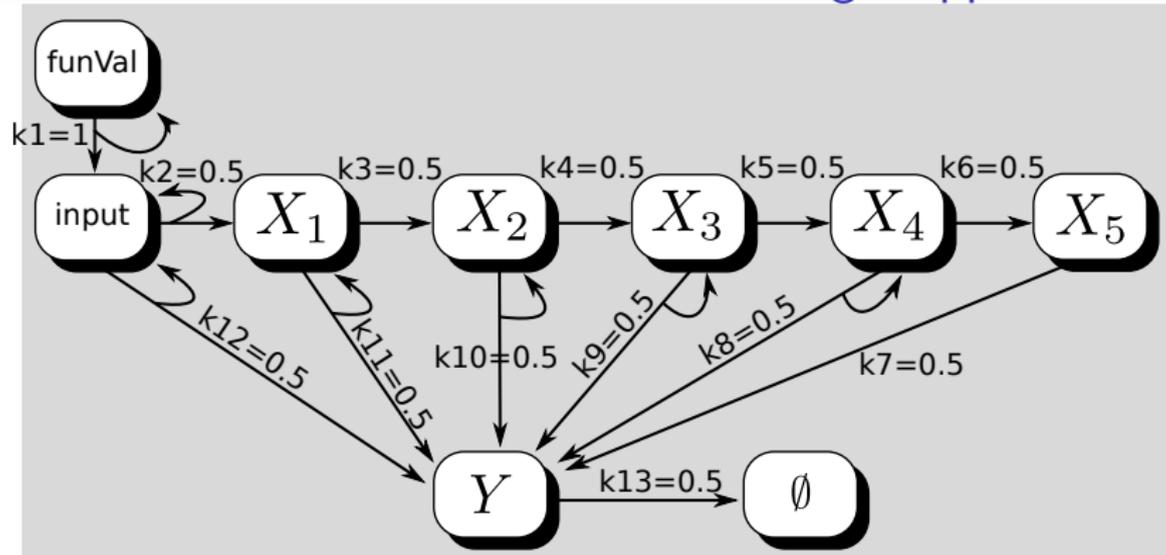
Speicherung der letzten 5 Funktionswerte durch Verzögerung in der Kaskade

Addition zur Integration



²Grafiken aus: *Computer der Natur*, Thomas Hinze, S. 38, 46

Chemisches Reaktionsnetzwerk zur Integralapproximation

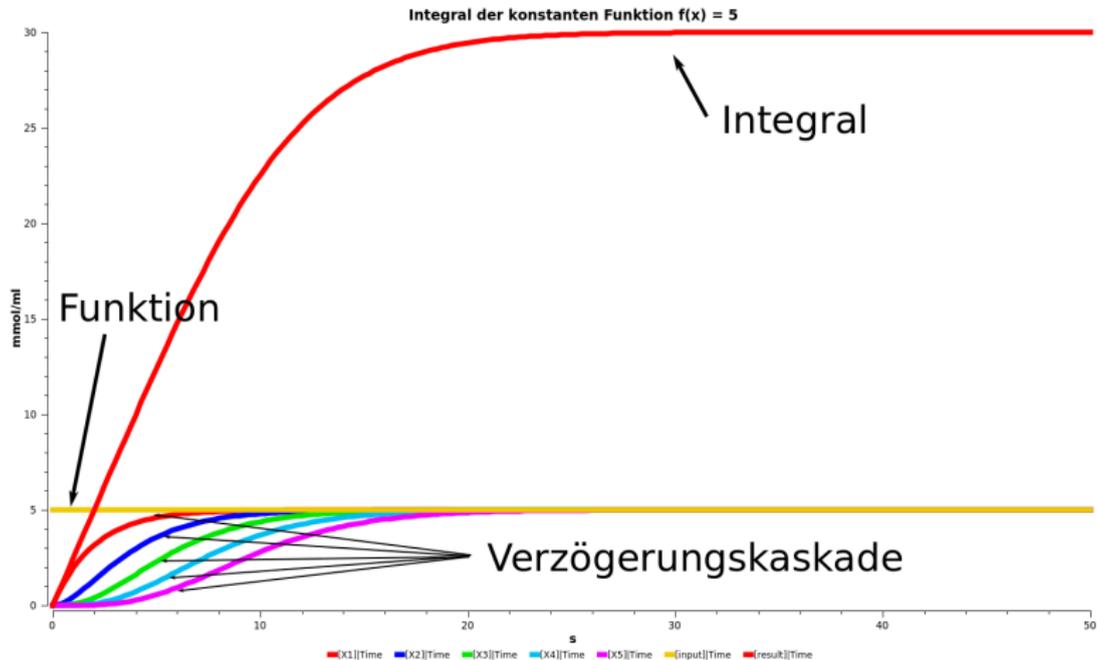


Netzwerk

- 9 Spezies
- 11 Reaktionen
- Verzögerungskaskade mit 6 Gliedern

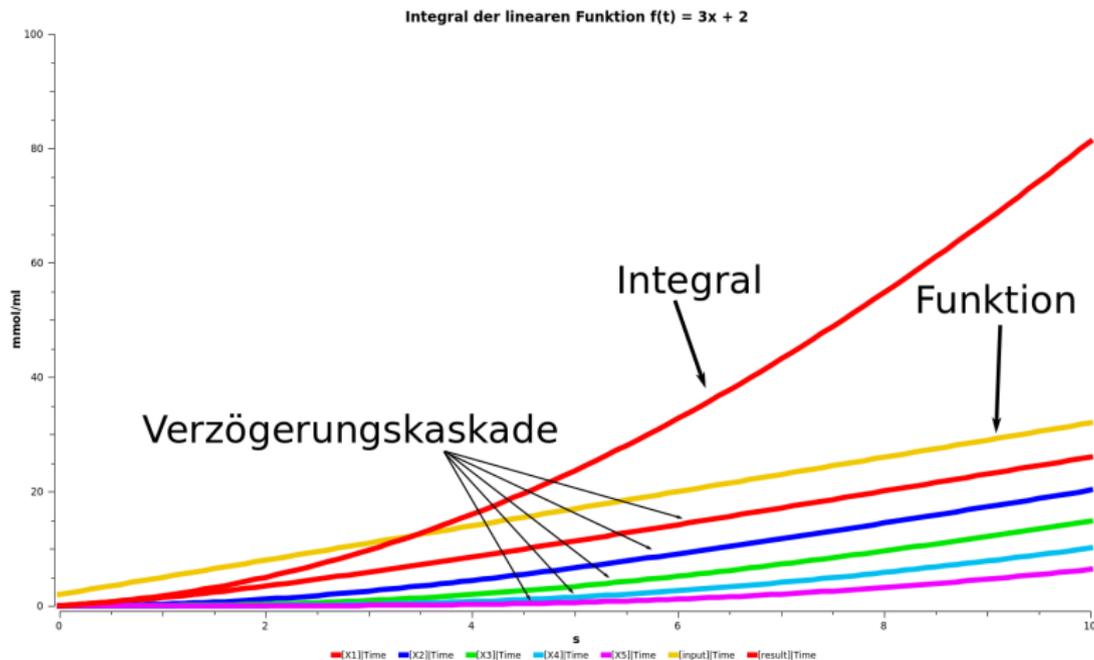
Integral der konstanten Funktion $f(t) = 5$

- korrektes Integral von f ist $F(t) = 5t + C$
- [result] anfangs linearer Verlauf dann Übergang in Sättigung



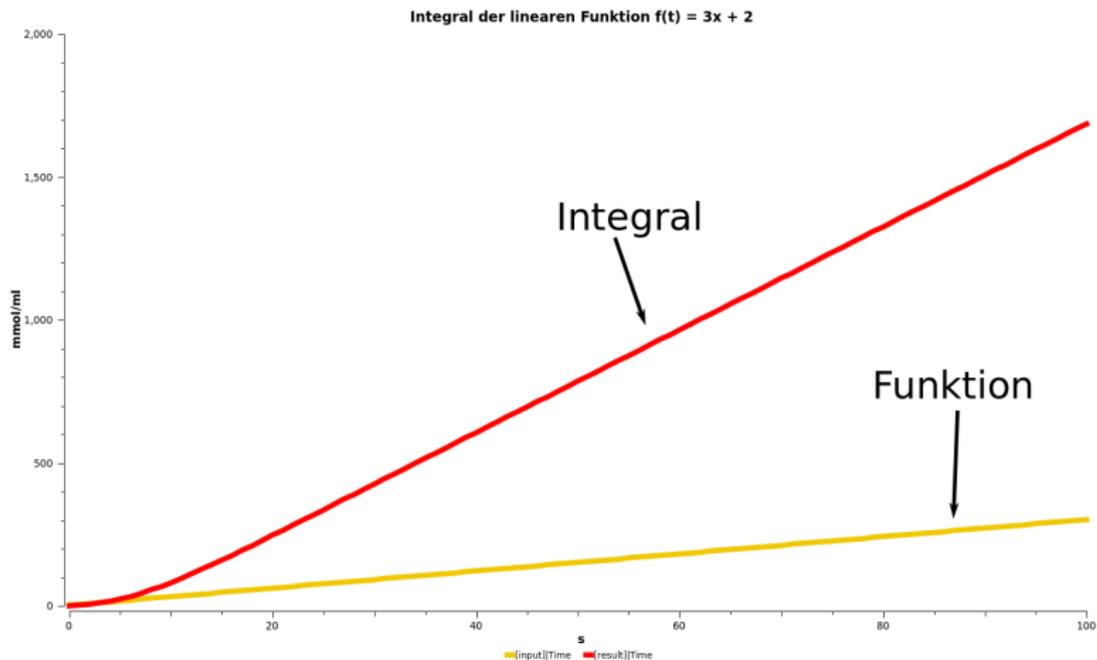
Integral der linearen Funktion $f(t) = 3t + 2$

- korrektes Integral von f ist $F(t) = \frac{3}{2}t^2 + 2t + C$
- quadratisches Verhalten erkennbar



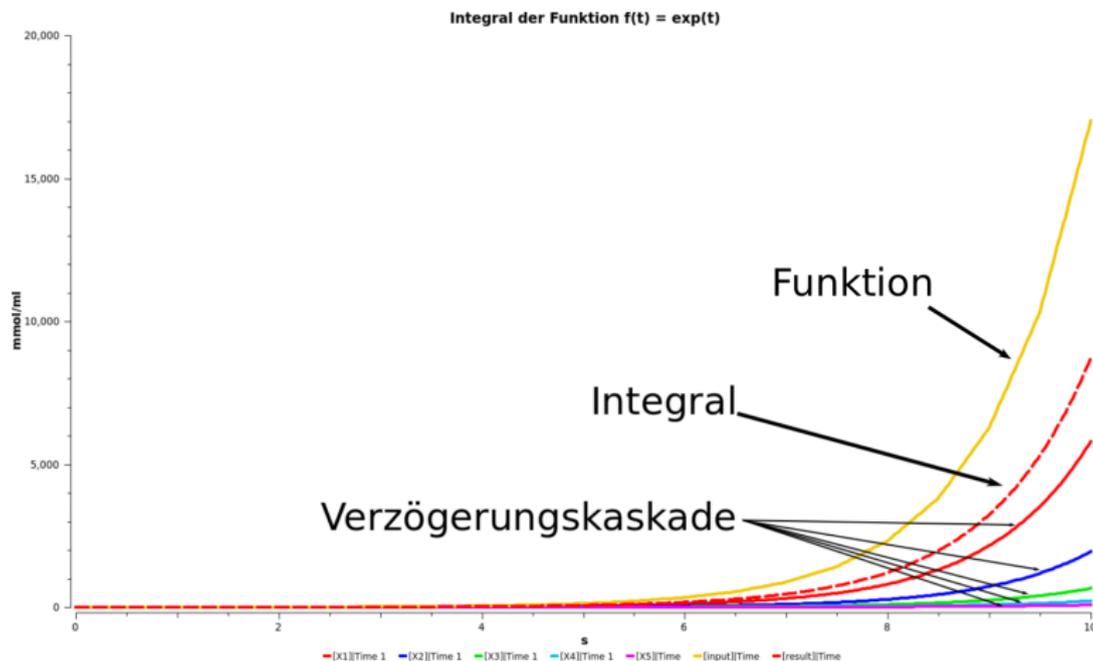
Integral der linearen Funktion $f(t) = 3t + 2$

- korrektes Integral von f ist $F(t) = \frac{3}{2}t^2 + 2t + C$
- große Abweichung von korrektem Integral für größeres t



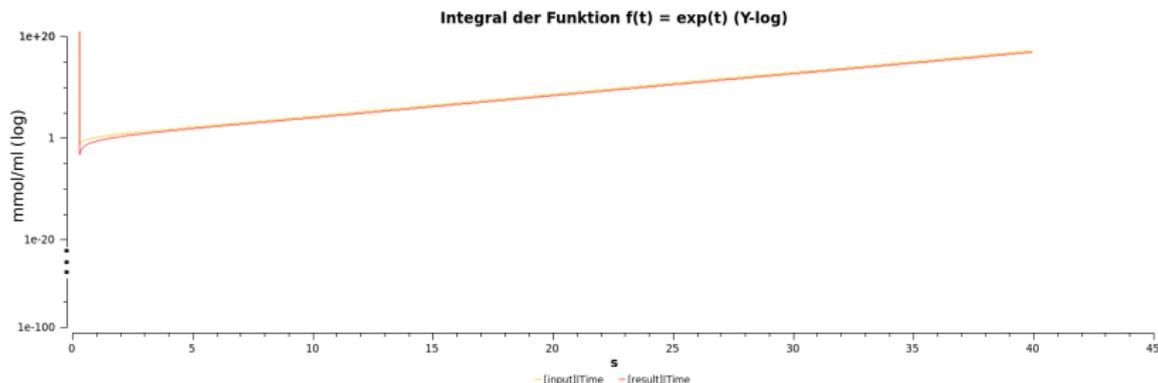
Integral der Exponentialfunktion

- korrektes Integral von $f(t) = \exp(t)$ ist $F(t) = \exp(t) + C$
- exponentiales Verhalten erkennbar



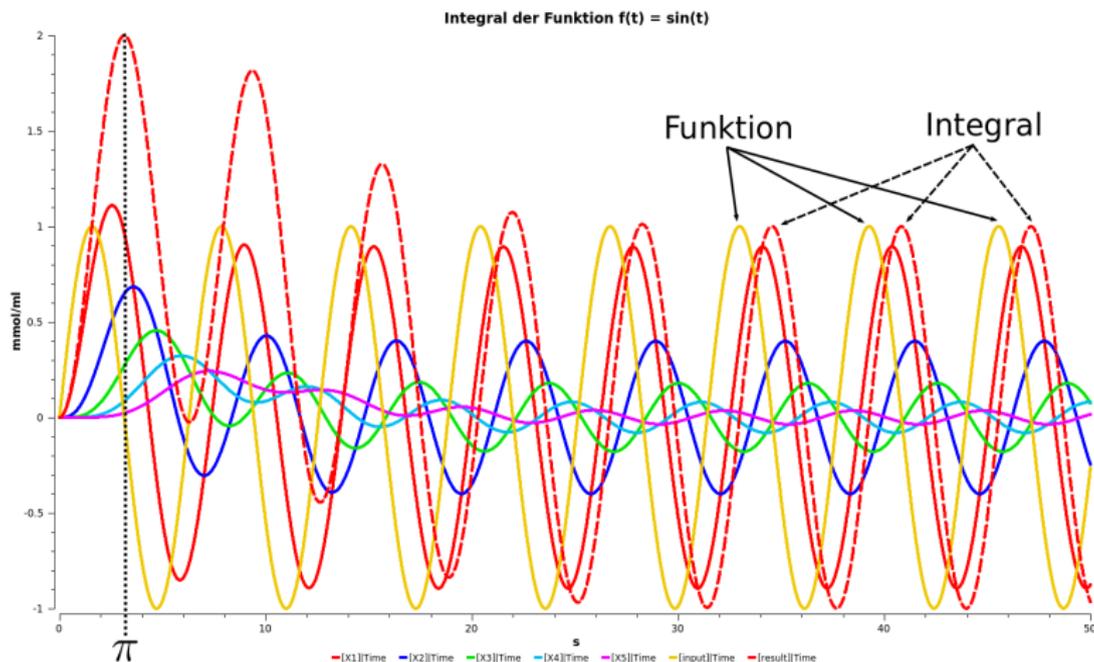
Integral der Exponentialfunktion

- korrektes Integral von f ist $F(t) = \frac{3}{2}x^2 + 2x + C$
- exponentiales Verhalten konstant über die Zeit



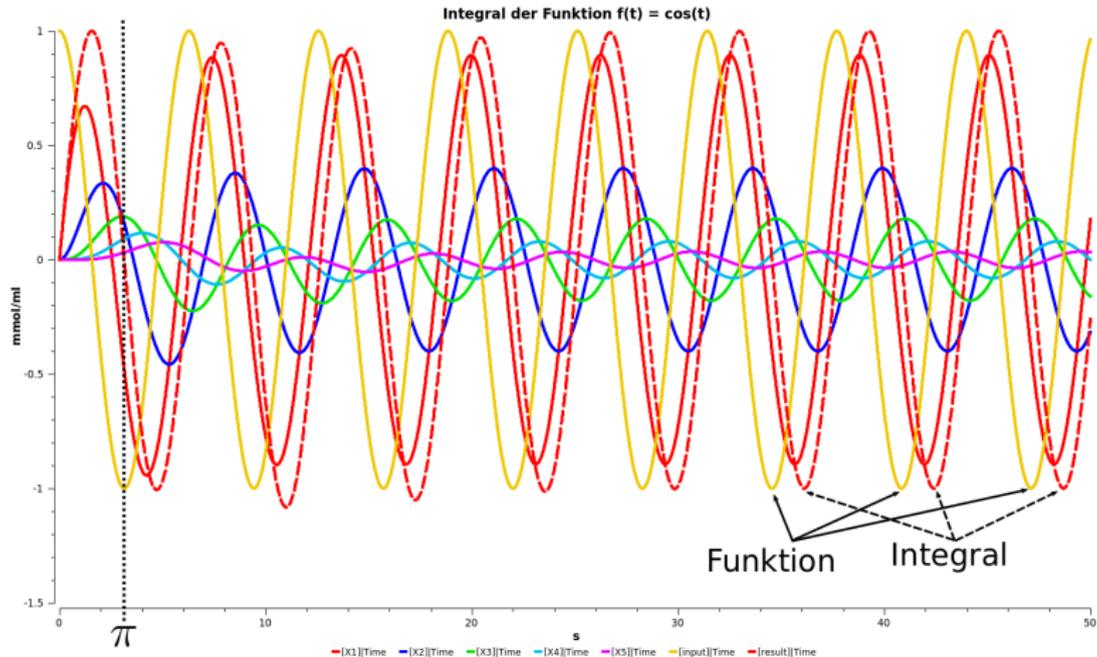
Integral der Sinusfunktion

- korrektes Integral von $f(t) = \sin(t)$ ist ein um $\frac{\pi}{2}$ verschobener Sinus
- Approximation des Integrals nach kurzer Einschwingphase



Integral der Cosinusfunktion

- korrektes Integral von $f(t) = \cos(t)$ ist $F(t) = \sin(t)$
- Approximation des Integrals nach kurzer Einschwingphase



Zusammenfassung

- Reaktionsnetzwerk zur Bestimmung eines Integrals wird durch *Reaktionskaskade* und *Addierer* realisiert.
- Nur Approximation möglich, da Reaktionskaskade endliche Länge hat.
- Approximation für konstante und lineare Funktionen weniger gut
- Exponential-, Sinus- und Cosinusfunktion können gut approximiert werden.

Questions?



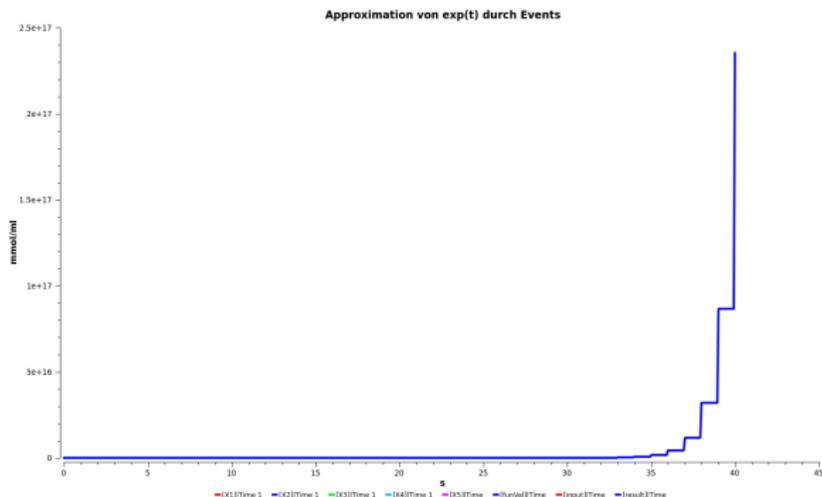
Exponential-, Sinus- und Cosinusfunktion in COPASI

Events in COPASI

- *Trigger Expression*
- *Target*
- *Expression*

 $\exp(t)$

(Model) Time = 4

 funVal
 e^{Time}


Exponential-, Sinus- und Cosinusfunktion in COPASI

Angepasste Massenwirkungskinetik in COPASI $\cos(t)$

- erstelle eigene *Function* Cosinus mit: $-\sin(s)$
- s ist dabei die Modellzeit
- setze bei einer Reaktion *Rate Law*

The screenshot shows the COPASI 'Function' editor. The 'Formula' field contains the expression $-\sin(s)$. The 'Parameters' table below is as follows:

Parameters	Name	Description	Unit
<input checked="" type="checkbox"/>	s	Time	s

Annotations in the image:

- An arrow points from the text "eigene Funktion" to the formula field.
- Another arrow points from the text "Parameter: Modellzeit" to the parameter 's' in the table.

Exponential-, Sinus- und Cosinusfunktion in COPASI

Angepasste Massenwirkungskinetik in COPASI $\cos(t)$

- erstelle eigene *Function* Cosinus mit: $-\sin(s)$
- s ist dabei die Modellzeit
- setze bei einer Reaktion *Rate Law* auf eigene Funktion

The screenshot shows the COPASI interface with the following details:

- Reaction:** $\text{funVal} \rightarrow \text{funVal} + \text{input}$
- Rate Law:** Cosinus
- Flux (mmol/s):** 0
- Symbol Definition Table:**

Role	Name	Mapping	Value	Unit
Time	s		s	

An arrow points from the text "eigene Funktion als Massenwirkungskinetik" to the "Cosinus" dropdown menu in the Rate Law field.

Exponential-, Sinus- und Cosinusfunktion in COPASI

Angepasste Massenwirkungskinetik in COPASI

$\cos(t)$

- erstelle eigene *Function*
- s ist dabei die Modellzeit
- setze bei einer Reaktion *Rate Law* auf eigene Funktion
- Anpassung der Ratenkonstanten $k_2 = 1$ und $k_{12} = 1$

Cosinus mit: $-\sin(s)$