

# STRUKTUR DER NATUR

Viele wesentliche Vorgänge in der Natur sind bis dato wenig erforscht, weil sich Beobachtungen als schwierig gestalten. Ein neues mathematisches Modell könnte spannende Aufschlüsse über Biokatalyse, Stoffwechsel oder Zellteilung liefern.

VON DAGMAR EKLAUDE

## STRUCTURE OF NATURE

Many important natural processes have yet to be sufficiently investigated as empirical observations are too time-consuming and costly. The mathematician Bao Quoc Tang has now developed a model that can afford a small insight into a number of complex processes, from biocatalysis to cell division. He has compared his calculations with data obtained from experiments. For the first time, the mathematical method covers processes that take place on the surface and inside an object under investigation, describing how they interact. It also predicts how long a reaction will last and what steps in the process are really relevant. The model can be applied to a large class of biological, biochemical and chemical problems.

Aus Einzellern haben sich komplexe Lebewesen gebildet, aus einer befruchteten Eizelle wächst ein neues Individuum heran, aus Stammzellen entstehen differenzierte Gewebe und Organe. Diesen Entwicklungen zugrunde liegt die asymmetrische Zellteilung, ein Mechanismus, der noch immer nicht vollständig erforscht ist. Die empirische Beobachtung des Vorganges ist nämlich aufwändig und zeitintensiv. Prognosen darüber, wie sich Zellen verhalten und ausdifferenzieren, wären für die Wissenschaft interessant. Der Mathematiker Dr. Bao Quoc Tang hat ein Modell erstellt, das zumindest einen kleinen Einblick in die komplexen Vorgänge geben kann. Es lässt sich auch auf viele andere Bereiche der Biologie anwenden. Bevor sich eine Stammzelle teilt, lagern sich verschiedene Eiweiße aus ihrem Inneren einseitig an der Membran an. „Bei der asymmetrischen Teilung entsteht je eine Stamm- und eine neue Zelle, die sich aufgrund dieser angelagerten Proteine weiterentwickelt. Da ist es wichtig zu wissen, welche Stoffe wo landen und aufgrund welcher Faktoren“, beschreibt Tang. Der junge Wissenschaftler hat sich im Zuge seiner Dissertation als erster in Graz der mathematischen Modellierung dieser Thematik angenommen. „Um die Einflüsse der verschiedenen Schlüsselprozesse zu verstehen, habe ich zunächst das Verhalten der biologischen Systeme untersucht, etwa einzelne Schritte der Zellteilung in den Larven der Fruchtfliege *Drosophila*“, erklärt der Forscher. Die Berechnungen hat er dann mit Daten aus Experimenten verglichen.

**Die Chemie simulieren.** Im Rahmen eines neuen Projekts erweitert Tang nun gemeinsam mit seinem Doktorvater Univ.-Prof. Dr. Klemens Fellner die mathematischen Methoden, um sie für eine große Klasse naturwissenschaftlicher Problemstellungen anwendbar zu machen – etwa für die Ladungsgeneration in Solarzellen oder die Veränderung der Größe und der Verbreitung biologischer Populationen. „In der anorganischen Chemie geht man da-

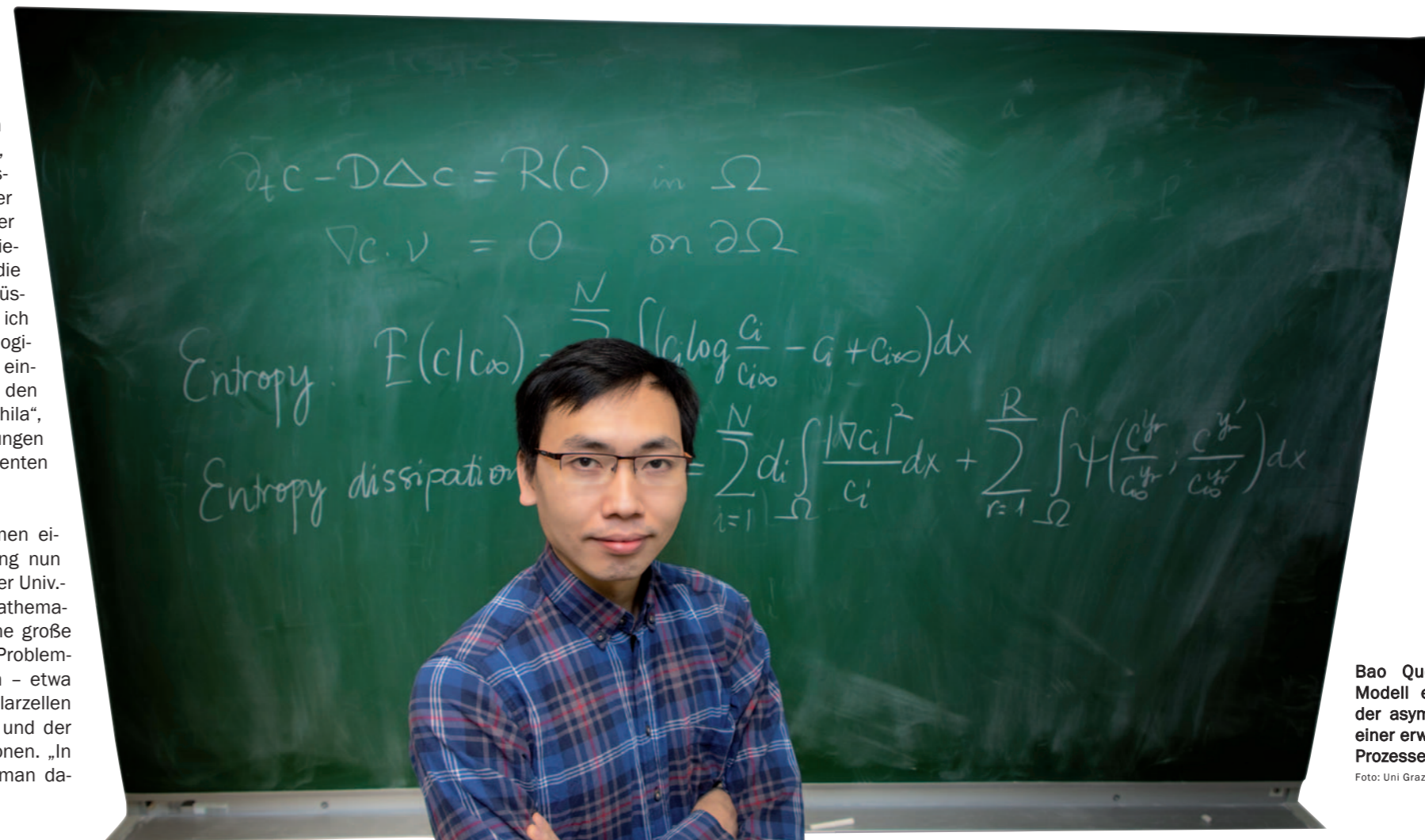
von aus, dass alle Reaktionen schließlich zu einem Zustand führen, in dem sich die Bildung und die Auflösung von Verbindungen gegenseitig ausgleichen“, führt der Wissenschaftler aus. In der Biochemie hingegen beobachtet man immer wieder, dass sich Prozesse scheinbar im Kreis drehen. „Solche zirkulären Reaktionen sind etwa verantwortlich für unseren Tag-Nacht-Rhythmus, die Verdauung oder die Energiezufuhr in den Zellen“, erklärt Fellner. Die Mathematik soll nun zeigen, ob eine Reaktion zu einem Gleichgewichtszustand führt und wie lange es dauert, bis dieser erreicht wird. „Das ist wichtig, weil manche Prozesse so langsam verlaufen, dass man in Versuchen den Eindruck gewinnt, sie fänden gar nicht statt“, schildert Tang. Bei sehr schnellen Reaktionen wiederum wird überprüft, ob diese zur besseren Handhabung

des Modells auch vereinfacht beschrieben werden können. „Möchte man beispielsweise eine Substanz herstellen und benötigt dazu einen sehr schnellen Zwischenschritt, ist man geneigt, diesen abzukürzen“, veranschaulicht der Mathematiker. Er kalkuliert vorab, ob sich dadurch unerwünschte Konsequenzen ergeben. In der Praxis ist das beispielsweise relevant für eine Vielzahl an Reaktionen, bei denen Enzyme als Katalysatoren wirken.

**Breite Basis.** Für seine Methode hat das Duo Prinzipien der Physik und biochemischer Reaktionen als Grundlage herangezogen sowie einfachere Modelle untersucht, die jeweils nur einzelne Aspekte der chemischen Vorgänge berücksichtigen. „Die Herausforderung für uns war, die große Komplexität der Reaktionsdynamik miteinzubeziehen“, erklärt Tang. Eine weitere Schwierigkeit liegt darin, dass zum Beispiel zellbiologische Abläufe Prozesse an der Oberfläche und im Inneren umfassen, die in ihrem Zusammenspiel analysiert werden müssen.

In der Biologie gelangen bereits extrem genaue Messungen, folglich können auch mathematische Modelle der zu untersuchenden Vorgänge immer bessere Erkenntnisse liefern. Die Grundlagenforschung von Fellner und Tang lässt sich außerdem auf eine große Anzahl von Phänomenen in der Natur übertragen.

„Interessanterweise haben kanadische WissenschaftlerInnen ein ganz ähnliches Modell verwendet, um das Verhalten von Wölfen zu simulieren. Für dasselbe mathematische Prinzip gibt es also eine Vielzahl von Anwendungsmöglichkeiten“, berichtet Tang. Diese Fülle und das dafür notwendige Fingerspitzengefühl begeistern den gebürtigen Vietnamesen, den die Forschungsarbeit von Klemens Fellner vor fünf Jahren nach Graz gelockt hat. Er bewarb sich damals erfolgreich um eine ausgeschriebene Stelle im Doktoratskolleg „Optimization and Numerical Analysis for Partial Differential Equations with Nonsmooth Structures“ und forscht seit seinem Abschluss 2015 als Universitätsassistent am Institut für Mathematik und wissenschaftliches Rechnen.



Bao Quoc Tang hat ein mathematisches Modell erstellt, das einen Schlüsselprozess der asymmetrischen Zellteilung beschreibt. In einer erweiterten Version lässt es sich auf viele Prozesse in der Natur anwenden.

Foto: Uni Graz/Lunghammer