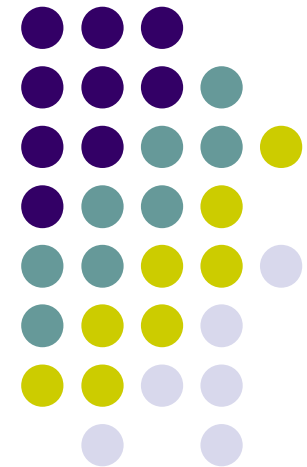


Eigenova a Schustrova teória molekulárneho darwinizmu

Michal Moravčík
Evolučné algoritmy
2.3.2006



Eigenova a Schustrova teória molekulárneho darvinizmu



- | Úroveň biomakromolekúl
- | Metódy umelej chémie
- | Kinetika popísaná diferenciálnymi rovnicami
- | Odozva na Spiegelmanove *in-vitro* experimenty s evolúciou RNA



Eigenove replikátory

- | Manfred Eigen
 - | *Self organization of matter and the evolution of biological macro molecules*
- | *Replikátory*
 - | Hypotetické biomakromolekuly
 - | Schopnosť replikovať sa
- | Darwinovská evolúcia na molekulárnej úrovni
- | Eigen, Schuster - zovšeobecnenie
 - | *Hypercycles: A principle of Natural Evolution*



Eigenove replikátory (pokr.)

Replikátory X_1, X_2, \dots, X_n

Chemické reakcie

Replikácia $X_i \xrightarrow{k_i} X_i + X_i \quad (i = 1, 2, \dots, n)$

Zánik $X_i \xrightarrow{\phi} \emptyset \quad (i = 1, 2, \dots, n)$

Dynamika systému $\dot{x}_i = x_i (k_i - \phi) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$

$0 \leq x_i \leq 1$ koncentrácia molekuly X_i

Zdieľovací tok $\sum \dot{x}_i = 0$

$$\dot{x}_i = x_i \left(k_i - \sum_{j=1}^n k_j x_j \right) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

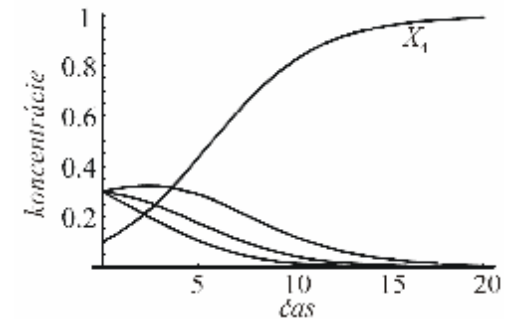


Eigenove replikátory (pokr.)

I Riešenie diferenciálnych rovníc

- I preživa molekula s maximálnou rýchlostnou konštantou

$$\lim_{t \rightarrow \infty} x_i(t) = \begin{cases} 1 & (\text{pre } k_i = k_{max} = \max\{k_1, \dots, k_n\}) \\ 0 & (\text{ostatné prípady}) \end{cases}$$



I Typ molekuly

- I Biologický druh s fitness = rýchlostná konštantá k

Eigenove replikátory s mutáciami



- | Mutácia $X_j \xrightarrow{k_{ji}} X_j + X_i \quad (i, j = 1, 2, \dots, n)$
 - | k_{ji} – rýchlostná konštanta reakcie
- | **K** - matica rýchlostných konštánt
 - | Dominantné diagonálne elementy

$$K = \begin{pmatrix} 0.1 & 10^{-3} & 0 & 0 \\ 10^{-7} & 0.55 & 10^{-7} & 0 \\ 0 & 10^{-11} & 0.8 & 10^{-11} \\ 0 & 0 & 10^{-7} & 1.0 \end{pmatrix}$$

Eigenove replikátory s mutáciami (pokr.)



- I Dynamika systému

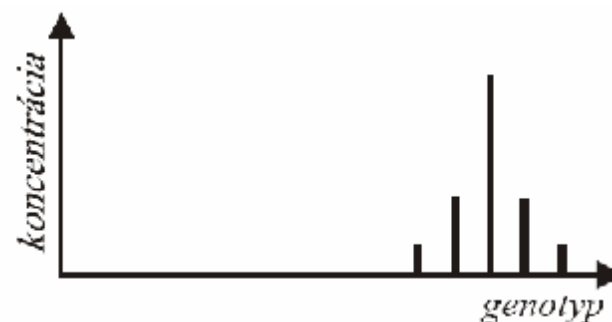
$$\dot{x}_i = x_i (k_{ii} - \phi) + \sum_{j \neq i} k_{ji} x_j \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

- I Zried'ovací tok $\phi = \sum_{i,j=1}^n k_{ij} x_j$

- I Asymptotická situácia $t \rightarrow \infty$



- I Bez mutácií



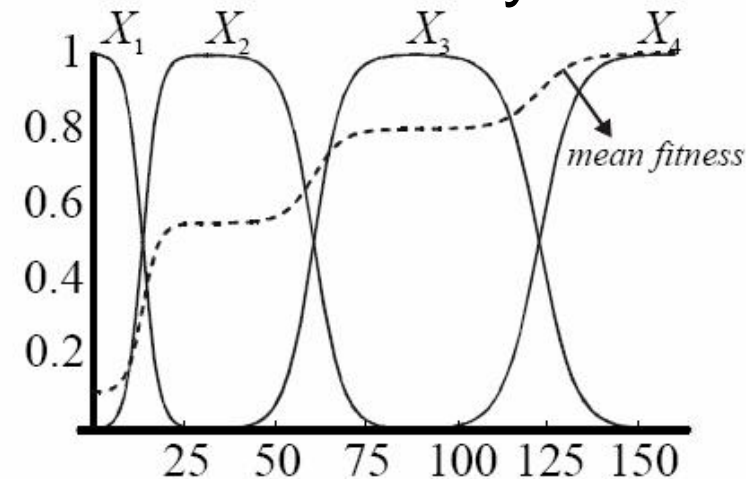
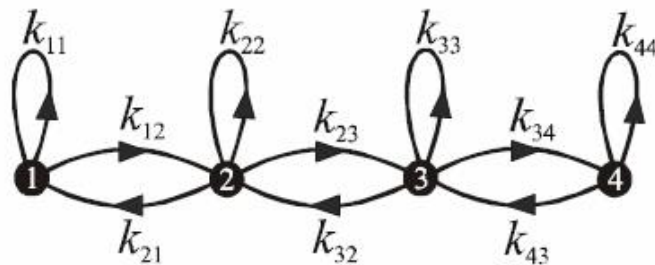
- I S mutáciami

Replikátory a molekulová Darwinova evolúcia



I Replikátory s mutáciou

- I Simulácia molekulárnej Darwinovej evolúcie
- I Chybná replikácia – produkcia susedných replikátorov



- I Koncentračné vlny v priebehu evolúcie

Replikátory a molekulová Darwinova evolúcia (pokr.)



- I Prejav molekulovej Darwinovej evolúcie
 - I Fitnes druhov – diagonálne rýchlostné konštanty
 - I Príležitostne vzniká nasledujúci replikátor
 - I Nasledujúci replikátor zvíťazí, $k_{11} < k_{22}$
- I Priebeh priemerného fitnes $\bar{k} = k_{11}x_1 + \dots + k_{44}x_4$
 - I Neklesajúca skoková funkcia typická pre Darwinovu evolúciu



Sumarizácia

- | Eigenov systém replikátorov simuluje Darwinovu evolúciu keď
 - | Diagonálne rýchlostné konštanty sú navzájom dobre separované
 - | Suma „vychádzajúcich“ rýchlostných konštánt musú byť podstatne menšia ako suma vchádzajúcich rýchlostných konštánt



Teória hypercyklov

- | Vysvetľuje vznik života pomocou siete replikujúcich sa molekúl RNA
 - | I – molekuly RNA
 - | E – enzýmy

