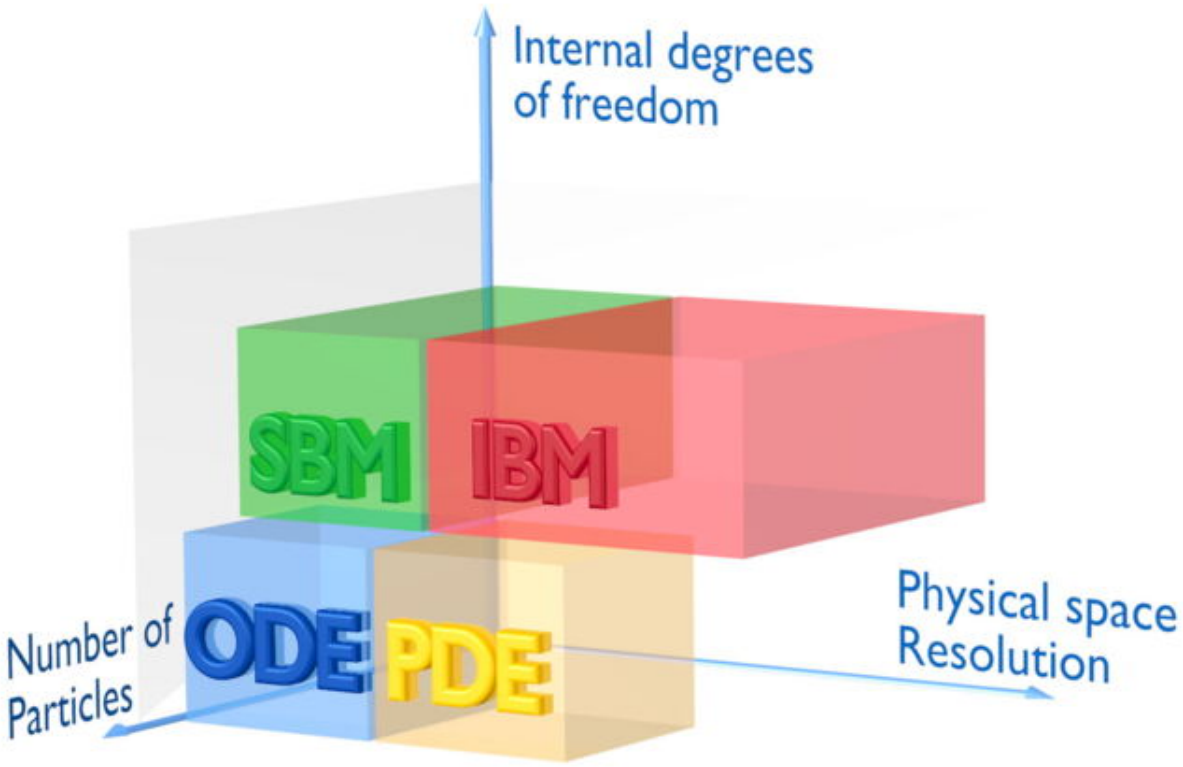
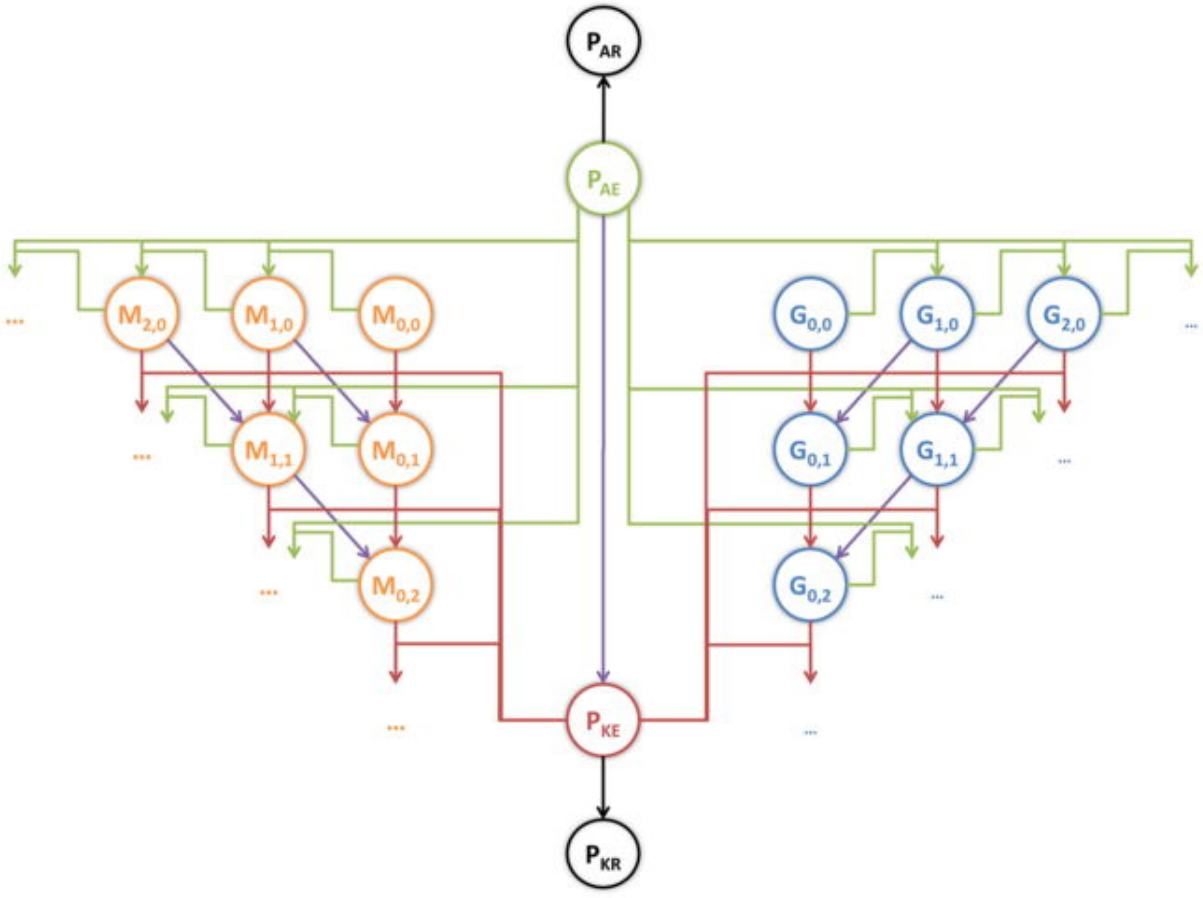
Mathematische Modellierung und Computersimulationen von dynamischen Systemen

Mathematische Modellierung wird heutzutage in verschiedensten Wissenschaftsfeldern verwendet, um ausgehend von einer Abstraktion realer Prozesse hilfreiche Vorhersagen des Systemverhaltens zu erhalten, die wiederum neue zielführende Experimente einleiten können. Um sachdienliche Vorhersagen machen zu können, müssen die Parameter der mathematischen Modelle präzise angepasst werden. Hierbei bilden Bilddaten eine unabdingbare Grundlage, um diese virtuellen Infektionsmodelle zu erstellen. Eine Schätzung von Parametern aus Bilddaten reduziert einerseits die Berechnungsdauer auf dem Computer, da diese Parameter ansonsten durch zahlreiche numerische Simulationen angepasst werden müssten. Andererseits können Parameter, die experimentell nicht erfassbar sind, durch Computersimulationen der mathematischen Modelle variiert werden, um somit das Verhalten des Systems unter verschiedenen Bedingungen zu testen und zu unterstützen.

-

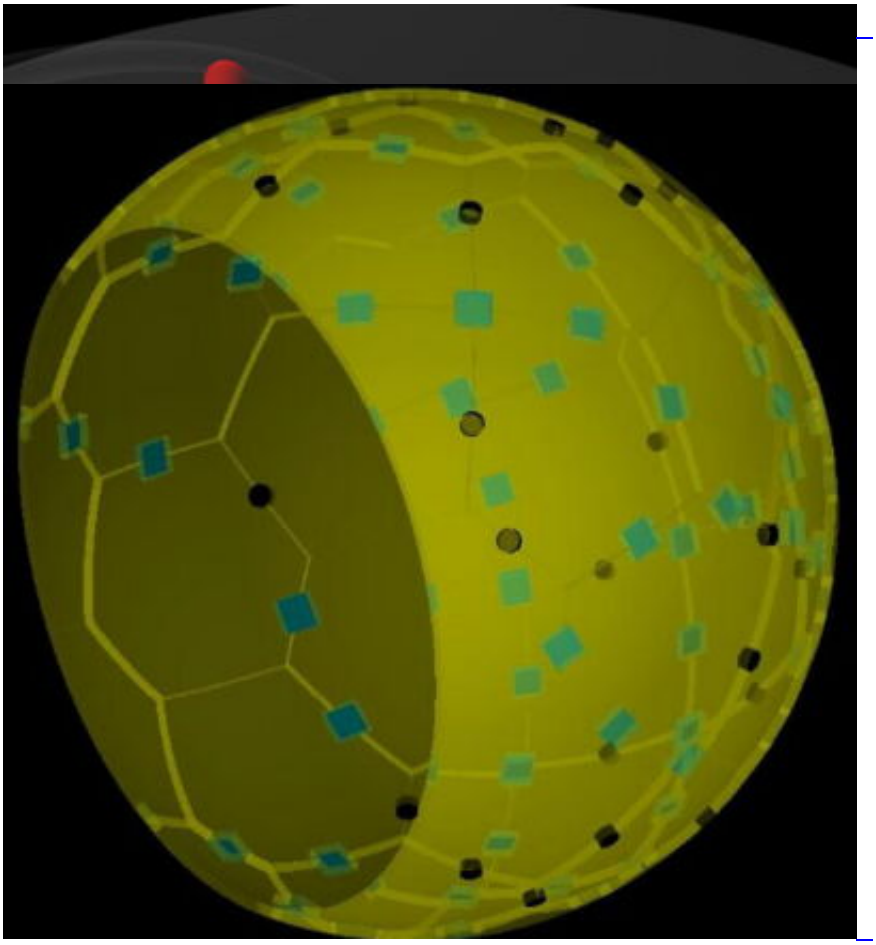

Internal degrees
of freedom
SBM
IBM
ODE
PDE
Number of
Particles
Physical space
Resolution

-


P_{AR}
P_{AE}
$M_{2,0}$
$M_{1,0}$
$M_{0,0}$
$M_{1,1}$
$M_{0,1}$
$M_{0,2}$
$G_{0,0}$
$G_{1,0}$
$G_{2,0}$
$G_{0,1}$
$G_{1,1}$
$G_{0,2}$
P_{KE}
P_{KR}

Es gibt verschiedene Möglichkeiten biologische Systeme durch raum-zeitliche Modelle, die jeweils unterschiedliche Stufen der Komplexität erfassen, nachzubilden. Die Wahl der Technik hängt dabei einerseits von der Fragestellung an das Modell ab, sowie andererseits vom Umfang und Typ der Eingabedaten. Falls der betrachtete biologische Prozess viele Bestandteile enthält, die es uns erlauben das System deterministisch zu modellieren, so bieten sich Differentialgleichungsmodelle an. Diese sind relativ einfach zu implementieren und benötigen eine geringe Berechnungsdauer sowie relativ wenig Arbeitsspeicher. In Fällen, in denen einzelne Objekte und deren stochastische Interaktionen betrachtet werden müssen, bieten sich wiederum zustandsbasierte Modelle an. So entwickelten wir beispielsweise ein zustandsbasiertes Modell zur Erfassung der Vollblutinfektion durch *Candida albicans* und quantifizierten Mechanismen von Immuneffektorzellen durch Parameterschätzung, welche mit der Methode der „simulierten Abkühlung“ auf Basis eines Metropolis Monte Carlo Algorithmus durchgeführt wurde. Darüber hinaus benutzen wir agentenbasierte Modelle, um beispielsweise die frühe Immunreaktion von Fresszellen auf inhalierte Konidien des Pilzes *Aspergillus fumigatus* in Lungenbläschen zu simulieren. Hierbei entwickeln wir auch hybride Techniken, so dass einerseits die Bewegung der Agenten auf Zellebene und anderseits die Ausschüttung von Botenstoffen auf Molekülebene unter Benutzung der Diffusionsgleichung simuliert werden kann.

-

- 

Abschließend lässt sich sagen, dass virtuelle Infektionsmodelle, die auf Bilddaten basieren, benutzt werden, um Vorhersagen zu treffen, die in experimentellen Bilddaten nicht direkt beobachtbar sind und somit gewinnbringende neue Experimente initiieren können.