

ZUSAMMENFASSUNG

Es gibt eine Reihe von Fortschritten in der Chemie und Biologie, die auf den klassischen Vorhersagen der nichtlinearen Dynamik beruhen. In den letzten Jahrzehnten wurden musterbildende Prozesse in vielen lebenden Systemen beobachtet. Dabei basiert die klassische nichtlineare Dynamik auf kontinuierlichen räumlich homogenen Modella Ansätzen. Diese Ansätze kontrastieren mit einer realistischeren Beschreibung von lebenden Systeme, die häufig durch stark heterogene oder gar diskrete nichtlinearen Medien gegeben sind. Hier entwickeln wir neue Werkzeuge für heterogene räumliche Reaktions-Diffusions-Systemen, insbesondere für die Anwendung auf biologische Systeme.

Der erste Teil dieser Arbeit betrachtet die Ableitung und Validierung einer Effektiven-Medium-Theorie. Effektive Diffusionskoeffizienten und Reaktionsraten von zunächst räumlich heterogenen nichtlinearen Reaktions-Diffusions-Medien werden berechnet. Die Gültigkeit der Theorie wird dabei auch Vergleich mit ausführlichen Simulationen der Wellenausbreitung in erweiterten Systemen mit räumlich variierenden Koeffizienten getestet.

Der zweite Teil betrachtet einige Anwendungen der Theorie des effektiven Mediums auf Chemie und Biologie. Chemische Musterbildung in der Belousov-Zhabotinsky-Reaktion in einer Aerosol OT (AOT) -Wasser-in-Öl-Mikroemulsion wird untersucht. Simulationen mit dem effektiven System reproduzieren viele der auftretenden Muster qualitativ. Die Wellenausbreitung im Herzen ist von diskrete Natur. Sie wird von diskreten interzellulären Verbindungen, Gap Junctions, vermittelt. Wir sehen dass Wellen, die sich in einen heterogenen Bereich des Herzgewebes bewegen, zu unregelmäßigen Mustern zerfallen, sofern der Anteil an nichtleitenden Verbindungen in der Nähe der Perkolationschwelle des Zellennetzes ist.

ABSTRACT

There are many recent advances in chemistry and biology which are based on the classical predictions of nonlinear science. In the last decades, pattern formation processes have been observed in a large number of living systems. However, classical nonlinear science is based on continuum approaches which are often in contrast to a more realistic description of nonlinear living systems, based on a highly heterogeneous nonlinear extended media. Here we develop new tools for heterogeneous reaction-diffusion systems with applications specifically to biological systems.

The first part of this work describes the derivation and validation of an effective medium theory for such heterogeneous systems. Effective diffusion coefficients and effective reaction rates are calculated from initially spatially heterogeneous nonlinear reaction-diffusion media. The validity of the effective medium theory is tested by comparison with simulations of wave propagation in extended systems with spatially varying reaction rates and diffusion constants.

The second part of the work considers the application of the effective medium theory and heterogeneous reaction-diffusion systems to chemistry and biology. Chemical patterns in the Belousov-Zhabotinsky reaction in an aerosol OT (AOT)-water-in-oil microemulsion is studied. Simulations with the effective system qualitatively reproduce many patterns observed in experiments. On the other hand, electrical wave propagation in the heart has a discrete nature. It is mediated by discrete intercellular connections, known as gap junctions. We found for example that wave crossing a heterogeneous region of cardiac tissue can disintegrate into irregular patterns, provided the fraction of nonconducting links is close to the percolation threshold of the cell network.