



# CEPLAS

## Cluster of Excellence on Plant Sciences

### **Planter's Punch #2 2020**

#### **Deutsche Untertitel**

#### **Covid-19 und Pflanzen aus Sicht der computergestützten Biologie**

Hast du jemals eine Grafik gesehen, die die Ergebnisse eines mathematischen Modells zeigt und gedacht: Wie cool ist das? Und dann angefangen zu denken: Was könnten wir noch modellieren? Oder umgekehrt, du fragst dich, wozu all diese Mathematik, die wir in der Schule gelernt haben, überhaupt gut ist. Wenn ja, dann ist dieses Video definitiv etwas für dich.

Ich bin Forscherin an der Universität Düsseldorf, und zusammen mit meinen Kolleginnen und Kollegen gewähren wir dir einen kleinen Einblick in unsere Welt der computergestützten Biologie.

Wie ihr sicher wisst, erleben wir derzeit eine Pandemie. COVID-19 hat sich überall ausgebreitet, und wir haben Modelle gesehen zur Ausbreitung der Krankheit, zur Wirkung der Kontaktsperre oder 3-dimensionalen Simulationen, wie weit sich ein Husten ausbreiten kann. Hier möchten wir dir zeigen, dass diese Modelle auf ähnlichen Prinzipien beruhen wie die, die wir an unserem Institut für Quantitative und Theoretische Biologie verwenden, einschließlich unserer pflanzenwissenschaftlichen Arbeiten im Rahmen von CEPLAS.

Ein Beispiel sind Differentialgleichungen, die sowohl in unserem Institut als auch von den Epidemiologen verwendet werden, um die Ausbreitung des Corona-Virus vorherzusagen zu können. In einfachen Worten, dieser mathematische Ansatz wird verwendet, um die Entwicklung einer Menge im Laufe der Zeit zu untersuchen. SIR-Modelle sind ein hervorragendes Beispiel für einfache, aber dennoch aussagekräftige Modelle zur Untersuchung der Ausbreitung einer Infektionskrankheit in der Bevölkerung. Indem eine Population in eine von drei Kategorien unterteilt wird: Anfällig für COVID-19, Infiziert und Geheilt, und indem wir den Übergang von Menschen von einer Kategorie in die nächste verfolgen, können wir die Zahl der infizierten Menschen zu einem bestimmten Zeitpunkt in der Zukunft vorherzusagen.

Mit solchen Modellen können wir nun jeden beliebigen Parameter systematisch verändern und seine Auswirkungen auf die Bevölkerung beobachten. Daher wissen wir, dass die Kontaktsperre die Anzahl der infizierten Personen vermindert hat.

Ähnlich wie man die Wirkung eines bestimmten Parameters auf die Dynamik einer Infektionskrankheit vorherzusagen kann, verwenden wir theoretische Methoden, um zu untersuchen, wie Pflanzen durch ihre Umwelt beeinflusst werden. Was kann aus dieser Perspektive wichtiger zu untersuchen sein, als die Photosynthese?

Aus der Schule wissen wir, dass Pflanzen durch Photosynthese nicht nur Energie für sich selbst assimilieren, um zu wachsen, sondern auch Sauerstoff produzieren, der für uns lebenswichtig ist. Deshalb haben wir ein Differentialgleichungsmodell erstellt, das gute Lichtverhältnisse mit einer hohen Sauerstoffproduktion in Verbindung setzt, was zum Wachstum der Pflanze führt.

Auf dieser Grafik sehen wir, dass anfangs, je mehr Licht auf eine Pflanze fällt, desto mehr Sauerstoff produziert wird. Aber an einem bestimmten Punkt, der für jede Pflanze anders ist,

führt eine Zunahme des Lichts nicht zu einer höheren Sauerstoffproduktion. Dann können wir sagen, dass die Pflanze ihre maximale photosynthetische Produktivität erreicht hat. Die Stärke unseres Modells ist, dass wir zusätzlich andere Parameter einsetzen können, zum Beispiel die Dauer der Belichtung. Auf diesem Weg können wir untersuchen, welche Prozesse eine höhere maximale photosynthetische Produktivität ermöglichen. So wie Differentialgleichungen verwendet werden, um die Entwicklung im Laufe der Zeit zu vergleichen, berücksichtigen Modelle, die auf partiellen Differentialgleichungen basieren, zusätzlich die Variation im Raum.

Ein Aspekt, den alle mathematischen Modelle gemeinsam haben, ist, dass sie nie ideale Darstellungen der Welt sind, sondern Vereinfachungen, die uns helfen, die wichtigsten Teile zu verstehen.

Hier sehen wir ein räumliches Modell des Zuckertransports in einem Blatt. Sieht das Modell wie ein Blatt aus? Enthält es alle Prozesse, die in einem Blatt ablaufen? Sicher nicht. Es enthält nur eine sehr einfache Darstellung der Photosynthese und des Transports von Zucker durch das Blatt. Aber ist das schlecht? Nein, denn dieses Modell hat es uns ermöglicht, die optimale Anordnung von Adern im Blatt vorherzusagen, und genau das hat uns in erster Linie interessiert. Modelle müssen also keine perfekten Abbilder der Realität sein, sondern nur nützliche. Aber sind mathematische Modelle nur für die Epidemiologie und Pflanzenforschung nützlich?

Nun, so wie der Zucker durch die Adern des Blattes gepumpt wird, brauchen auch die Menschen Zucker zur Versorgung von Muskeln und Organen. Diese Zucker (Glucose), sind in größeren Molekülen, die Glykogen genannt werden gespeichert. Es gibt einige Krankheiten, bei denen entweder die Speicherung durcheinandergerät oder die Weiterleitung. Mit unseren Modellen können wir dazu beitragen, Wege zu finden, diese Krankheiten zu bekämpfen.

In dieser Animation siehst du, wie die Glucose-Moleküle zusammengestapelt werden, um Glykogen zu bilden, ein Molekül, das aus Ketten und Verzweigungen besteht. Diese Art der 3D-Simulation erlaubt es uns, die Struktur zu untersuchen, aber auch nachzuahmen, was bei Krankheiten im Zusammenhang mit Glykogen passiert und so zu versuchen, Strategien dagegen zu entwickeln.

Wir hoffen, dass du beim Anschauen des Videos sicher und gesund bleibst und mit unserem Planter's Punch etwas Neues lernen konntest.

Marvin van Alst

Rachel Denley Bowers

Cilperic Foko Kuate

Anna Matuszyńska

Adélaïde Raguin

Yvan Rousset



# CEPLAS

## Cluster of Excellence on Plant Sciences

### **Planter's Punch #2 2020**

#### **English Subtitles**

#### **Covid-19 and plants from a computational perspective**

Have you ever seen a graph showing the results of a mathematical model and thought: how cool is that? And then started thinking: what else could we model? Or quite opposite, you are wondering what is all this maths we learnt at school good for anyway? If so, this video is definitely for you.

I am a researcher at the University of Dusseldorf and together with my colleagues we are granting you a sneak peek into our world of computational biology.

It's not news to any of you that we are currently experiencing a pandemic. COVID-19 has been all over the place, and we have seen models of the disease spread, effect of social distancing, 3dimensional simulations of how far a cough can travel. We would like to show you that these models are based on similar principles to the ones used by us at QTB, including our work on plant science done within CEPLAS.

For instance, one method used both in our institute and by the epidemiologists predicting the spread of the coronavirus, is differential equations. In simple words, this mathematical approach is used to study the evolution of a quantity over time. SIR models are an excellent example of simple, yet informative, models to study how an infectious disease spreads in the population. By dividing a population into one of three categories: Susceptible to the COVID-19, Infected and Recovered, and by following the transition of people from one category to the next one, we can predict the number of infected people at a given time in future.

With such models we can now systematically change any given parameter and observe its effect on the population. That's how we know social distancing is slowing down the number of infected people.

Similarly to how one can predict the effect of a particular parameter on the dynamics of an infectious disease, we use theoretical tools to study how plants are affected by their environment. In that perspective, what can be more key to investigate than photosynthesis? From school we remember that through photosynthesis plants do not only assimilate energy for themselves, to leave and grow, but also produce oxygen, that is vital to us. So, we built a differential equation model, which associates good light conditions with high production of oxygen, leading to plant's growth.

On this graph, we see that initially the more light is shone on a plant, the more oxygen is produced. But, at a certain point, which is different for every plant, an increase of light doesn't lead to higher oxygen production. Then, we can say that the plant has reached its maximal photosynthetic productivity. The strength of our model is that we can additionally play other parameters, for instance the duration of the lightning. This way, we can investigate which process would enable higher maximal photosynthetic productivity. Just as differential equations are used to compare evolution over time, models based on partial differential equations, additionally consider variation in space.

One aspect that all mathematical models share is that they are never ideal representations of the world, but simplifications that help us understand the important parts. Here you can see a spatial model of sugar transport in a plant leaf.

Does the model look like a leaf? Does it incorporate all the processes that happen in a leaf? Most certainly not. It only incorporates a very simple representation of photosynthesis and the movement of sugar through the leaf. But is that bad?

No, because what this model did was to allow us to predict the optimal placements of veins in the leaf, which was what we were interested in in the first place. So models do not need to be perfect representations of reality, they only need to be useful ones. But are mathematical models only useful for epidemiology and plant research?

Well, the same as the sugar is pumped through the veins of the leaf, humans also need sugar to fuel muscles and organs. These sugars are stored in larger molecules called glycogen, and there are some diseases where either the storage is messed up or the routing. With our models we can help find ways to fix it. In this animated picture you can see how the glucose molecules are stacked together to form glycogen, a molecule made of chains and branches. This kind of 3D simulation allows us to investigate the structure, but also to mimic what happens in glycogen related diseases, and to try to develop intervention strategies.

We hope that as you watch it you stay safe and healthy and you could learn something new with our Planters Punch.

Marvin van Alst

Rachel Denley Bowers

Cilperic Foko Kuate

Anna Matuszyńska

Adélaïde Raguin

Yvan Rousset