



Datenbankgestützte Erstellung kinetischer Biomodelle

In der Systembiologie ist die rechnergestützte Modellierung biologischer Vorgänge sehr wichtig, um beispielsweise die Entstehung von Krankheiten oder die Wirkung von Medikamenten besser verstehen zu können. Um ein biologisches System in ein Computermodell abzubilden, muss zunächst die Struktur des Reaktionssystems in ein maschinenlesbares Format überführt werden. Die erstellten Modelle bestehen also aus Listen von Stoffen sowie aus Reaktionen, an denen diese Stoffe teilnehmen. Anschließend werden für jede Reaktion kinetische Gleichungen benötigt, die die Reaktionsgeschwindigkeiten beschreiben. Zur Erstellung solcher kinetischer Gleichungen kann das Programm SBMLsqueezer verwendet werden. Die Konzentrationsverläufe der Stoffe eines kinetischen Modells können dann mit Hilfe von SBMLsimulator simuliert werden

In dieser Arbeit soll SBMLsqueezer um eine Verbindung zu der Datenbank SABIO-RK erweitert werden. In dieser Datenbank kann man für eine gegebene Reaktion nach experimentell ermittelten kinetischen Gleichungen sowie zugehörigen Parameterwerten suchen.

Dem Benutzer sollen in einer grafischen Benutzeroberfläche vielfältige Einstellungen zur Auswahl von kinetischen Gleichungen aus SABIO-RK, die dann zu einem Modell hinzugefügt werden, zur Verfügung stehen. Die Bedienung muss auch kommandozeilenorientiert mit allen Einstellungen möglich sein. Mit dem bereit gestellten SBMLsimulator soll anhand vorgegebener Modelle am Ende der Arbeit getestet werden, ob die mit Hilfe der neu implementierten Erweiterung bearbeiteten Modelle sinnvolle Simulationsergebnisse liefern.

Kontakt

Roland Keller
Sand 1, Raum A305
Tel. (07071) 29-78987
roland.keller@uni-tuebingen.de

