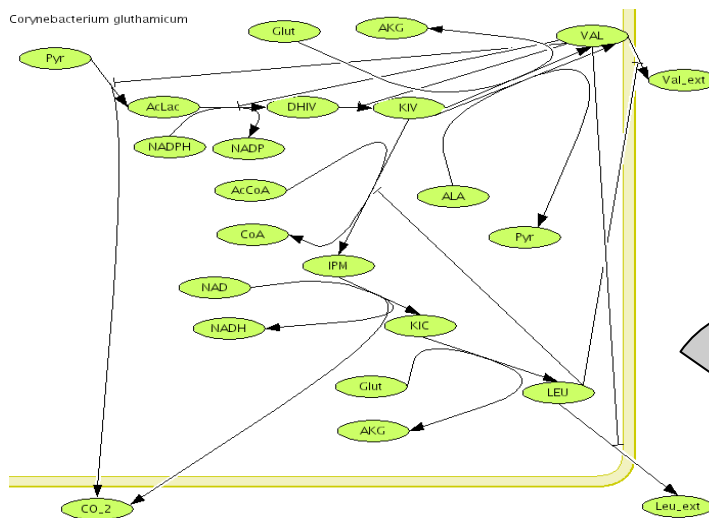




Automatische Generierung kinetischer Gleichungen aus Stöchiometrien

Zur Modellierung zellulärer Systeme werden sowohl für Signaltransduktions-, Genregulations- als auch metabolische Netze Differentialgleichungssysteme angewendet. Bei gegebener Stöchiometrie können diese Gleichungssysteme durch Anwendung des Massenwirkungsgesetzes sowie enzymkinetischer Betrachtungen hergeleitet werden, wobei Hintergrundwissen über den Reaktionsmechanismus einbezogen werden muss. Für größere biologische Systeme, die häufig im SBML-Format gespeichert und simuliert werden, ist es erforderlich, die zugehörigen Differentialgleichungssysteme automatisch zu generieren. In dieser Arbeit soll ein Werkzeug konzipiert und implementiert werden, das zu im SBML-Format gegebenen Reaktionssystemen die zugehörigen Gleichungen erstellt und so simulierbare SBML-Dateien erzeugt. Diese Einzelanwendung soll mit dem CelleratorTM verglichen werden, der in einer Pipeline dreier Werkzeuge und dem Computeralgebrasystem Mathematica[®] ebenfalls solche Gleichungen generieren kann.



Das Ziel der Arbeit ist ferner die Benutzung dieses Programms zur Erzeugung eines Zellmodells für *Corynebacterium glutamicum*, wobei gegebenes Wissen aus *online* Datenbanken ebenfalls integriert werden soll.

$$\begin{aligned} \frac{d[\text{DHIV}]}{dt} &= k_{+2} \cdot [\text{AcLac}] \cdot (0,04 - [\text{NADP}]) - k_{-2} [\text{DHIV}] \cdot [\text{NADP}] - k_{+3} \cdot [\text{DHIV}] + k_{-3} [\text{KIV}] \\ \frac{d[\text{2IPM}]}{dt} &= k_{+7} [\text{KIV}] - k_{-7} [\text{2IPM}] - k_{+8} [\text{NAD}] \cdot [\text{2IPM}] + k_{-8} [\text{KIC}] \cdot (0,8 - [\text{NAD}]) \\ \frac{d[\text{AcLac}]}{dt} &= k_{+1} [\text{Pyr}]^2 - k_{-1} [\text{AcLac}] - k_{+3} [\text{DHIV}] + k_{-3} [\text{KIV}] \\ \frac{d[\text{Val}]}{dt} &= k_{+4} \cdot [\text{Glut}] [\text{KIV}] - k_{-4} [\text{AKG}] [\text{Val}] + k_{+5} [\text{Ala}] [\text{KIV}] - k_{-5} [\text{Pyr}] [\text{Val}] - k_{+6} [\text{Val}] \\ \frac{d[\text{Leu}]}{dt} &= k_{+9} [\text{Glut}] - k_{-9} [\text{AKG}] [\text{Leu}] - k_{+10} [\text{Leu}] \\ \frac{d[\text{KIV}]}{dt} &= k_{+3} [\text{DHIV}] - k_{-3} [\text{KIV}] - k_{+4} [\text{Glut}] [\text{KIV}] + k_{-4} [\text{AKG}] [\text{Val}] \\ &\quad - k_{+5} [\text{Ala}] [\text{KIV}] + k_{-5} [\text{Pyr}] [\text{Val}] - k_{+7} [\text{KIV}] + k_{-7} [\text{2IPM}] \\ \frac{d[\text{KIC}]}{dt} &= k_{+8} [\text{NAD}] [\text{2IPM}] - k_{-8} [\text{KIC}] \cdot (0,8 - [\text{NAD}]) - k_{+9} [\text{Glut}] + k_{-9} [\text{AKG}] [\text{Leu}] \end{aligned}$$

Kontakt

Andreas Dräger
Sand 1, Raum C303
Tel. (0 70 71) 29-70 4 36
andreas.draeger@uni-tuebingen.de