



Implementierung des AMUSE-Verfahrens

Das AMUSE-Verfahren (engl. *Automated Modeling Using Specialized Enzyme kinetics*) erstellt für ein gegebenes Reaktionssystem automatisch ein thermodynamisch zulässiges dynamisches Modell, das die zeitliche Änderung aller im Modell enthaltenen Stoffe erklärt. Dieser Algorithmus wurde im Rahmen einer Diplomarbeit am Lehrstuhl Rechnerarchitektur als ein zwei-stufiges Verfahren entwickelt.

Im ersten Schritt, der Vorverarbeitung, wird für das System eine Gleichgewichtskonfiguration bestimmt und ein initiales Modell konstruiert, dessen dynamische und strukturelle Eigenschaften bestimmt werden.

Darauf aufbauend schließt sich im zweiten Schritt die iterative Optimierung des Modells an, wobei einerseits Modellparameter geschätzt sowie andererseits in einem *Greedy*-Verfahren die mathematische Struktur des zugehörigen Differentialgleichungssystems alterniert wird.

Sobald weitere Modellveränderungen die Messdaten nicht mehr besser beschreiben können, endet die Iteration und das finale Modell wird zurückgegeben. Die meisten Teilschritte dieses Verfahrens wurden bereits in Java™ implementiert. Manche Teile liegen bislang in MATLAB™-Code vor.

Die Aufgabe dieser Arbeit besteht darin, die einzelnen Schritte des Verfahrens miteinander zu verbinden und über eine nutzerfreundliche Bedienung zugänglich zu machen.

Voraussetzungen: Kenntnisse im Programmieren mit Java und über Differentialgleichungssysteme sowie Interesse für biochemische Modellierung.

Kontakt

Dr. Andreas Dräger
Sand 1, Raum A313
Tel. (0 70 71) 29-70436
andreas.draeger@uni-tuebingen.de

