



Implementierung einer Flussbilanzanalyse in Java

In den letzten Jahren hat die rechnergestützte Modellierung biochemischer Systeme stark an Bedeutung gewonnen. Dabei werden bekannte Stoffwechselfade in ein mathematisches Modell überführt, das alle darin ablaufenden Reaktionen sowie Metabolite, also in Zellen vorkommenden Stoffe, enthält. Eine besondere Bedeutung wird dem biologischen Fließgleichgewichtszustand beigemessen, also einer Situation, in dem der Zellstoffwechsel völlig ausgeglichen abläuft. In dieser Situation bleiben alle Stoffkonzentrationen konstant, da sich alle durch metabolische Reaktionen hervorgerufenen Änderungen gegenseitig ausgleichen.

Mittels der Flussbilanzanalyse (FBA) können die Flussraten in diesem Szenario ermittelt werden. Eine solche Analyse liefert weiterhin sämtliche Gleichgewichtskonzentrationen der beteiligten Stoffe sowie die Gleichgewichtskonstanten einer jeden Reaktion. Die resultierende Gleichgewichtskonfiguration des Systems erlaubt eine eindeutige Beschreibung des Fließgleichgewichtszustandes, in der alle Parameter vollständig determiniert sind. Durch ihre Eigenschaft, eine rein strukturelle Analyse zu sein, benötigt die Durchführung einer FBA keine weiteren Messdaten.

Jegliche Flüsse im biologischen System unterliegen thermodynamischen Beschränkungen: Keine Reaktion kann ohne Kopplung an eine energieliefernde Reaktion gegen den energetischen Gradienten ablaufen. Daher sollte die Gibbsenergie einer jeden Reaktion in die Berechnung einbezogen werden.

In dieser Arbeit soll ein FBA in Java implementiert werden, wobei thermodynamische Beschränkungen einbezogen werden sollen.

Voraussetzungen: Kenntnisse im Programmieren mit Java™, lineare Algebra und Biochemie, sowie Modellierung mit SBML

Kontakt

Dr. Andreas Dräger
Sand 1, Raum A313
Tel. (0 70 71) 29-7 89 82

andreas.draeger@uni-tuebingen.de

