

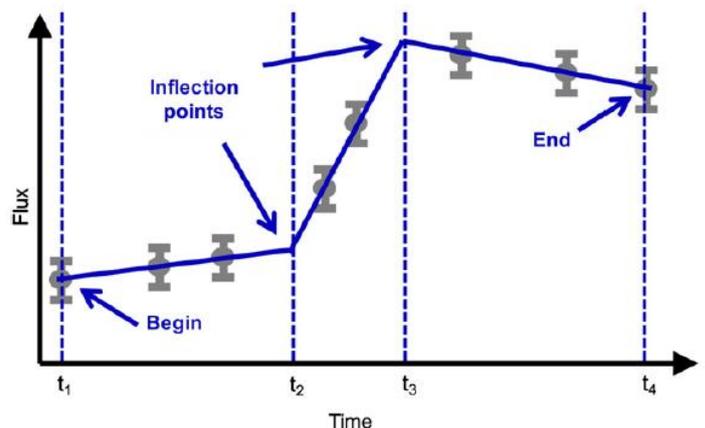


Integration der dynamischen Flussbilanzanalyse in den SBMLsimulator

In den letzten Jahren hat die rechnergestützte Modellierung biochemischer Systeme stark an Bedeutung gewonnen. Dabei werden bekannte Stoffwechselwege in ein mathematisches Modell überführt, das alle darin ablaufenden Reaktionen sowie Metabolite 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. Neben der einfachen FBA gibt es die Weiterentwicklung der dynamischen FBA (Mahadevan *et al.*, 2002; Leighty *et al.*, 2011), die v.a. auf die Änderungen der Fließgleichgewichte abzielt. Die Literatur bietet hierfür 2 Ansätze die einerseits als lineares Optimierungsproblem (LP) und andererseits als nichtlineares Optimierungsproblem (NLP) formuliert werden können. Für beide Varianten gibt es Vor- und Nachteile. Es soll zunächst nur eine Variante implementiert werden.

Vorhergehende Arbeiten haben bereits die einfache FBA für den SBMLsimulator inklusive graphischer Nutzeroberfläche entwickelt. Hier sollen nun noch Methoden implementiert werden um die dynamische FBA sowohl konsolenbasiert als auch GUI-basiert zu realisieren.



Kontakt

Stephanie Tscherneck, Roland Keller

Sand 1, Raum 305

Tel. (07071) 29-78987

Stephanie.tscherneck@uni-tuebingen.de

Roland.keller@uni-tuebingen.de