

Masterarbeit

Simulation der Reaktions-Diffusions-Gleichung

Zellen stecken voller Schaltkreise: Netzwerke aus Genen sorgen dafür, dass die richtigen Proteine zur richtigen Zeit hergestellt werden und eine Zelle auf äußere Reize reagieren, sich teilen und wachsen oder besondere Aufgaben erfüllen kann. Dafür wird die Information der beteiligten Gene dynamisch von der DNS abgelesen. Dieser Prozess wird über regulatorische Proteine, die Produkte anderer Gene, gesteuert, wobei es aktivierende und inhibitorische Verknüpfungen gibt. Die Regulationsvorgänge laufen auf molekularer Ebene ab, so dass es aufgrund der Brownschen Molekularbewegung zu Stochastizität und damit assoziiertem Rauschen im Netzwerk kommt.

Unsere Gruppe entwickelt hybride stochastisch-deterministische Algorithmen, um das zeitliche Verhalten komplexer Gennetzwerke mit allen molekularen Details zu simulieren. Dafür kombinieren wir Monte-Carlo Verfahren mit analytischen Lösungen biochemischer Reaktionen.

Eine chemische Reaktion wird üblicher Weise mit gewöhnlichen Differentialgleichungen beschrieben. Dabei wird angenommen, dass alle Stoffe im Reaktionsvolumen gleichmäßig verteilt sind. Die Reaktions-Diffusions-Gleichung berücksichtigt inhomogene Konzentrationen für die Berechnung der Reaktionskinetik. Berühmte Beispiele für Ergebnisse der Reaktions-Diffusions-Gleichung sind Solitonen und die Selbstorganisation in der Embryogenese.

Das Ziel dieser Masterarbeit ist es, realistische, diffusionsbasierte Reaktionskinetiken in die Netzwerksimulationen zu integrieren. Dafür entwickeln Sie numerische Lösungen partieller Differentialgleichungen und binden diese in das Simulationsprogramm ein. Anschließend wenden Sie das Programm auf ein biologisches Modellsystem an.

Bei Interesse und für weitere Fragen melden Sie sich bitte bei Christof Gebhardt (christof.gebhardt@uni-ulm.de) oder Johannes Hettich (johannes.hettich@uni-ulm.de).