

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Systembiologie	1
1.2	Systembiologie aus einer Informatikperspektive	2
1.3	Datenbanken	3
1.4	Integration	4
1.5	Modellierung	5
2	Biologische Grundlagen	7
2.1	Das Humangenomprojekt	7
2.2	Zellen und Organismen	9
2.3	Genome, Chromosomen und DNA	10
2.3.1	Chemische Bindungen	10
2.3.2	Aufbau und Funktion der DNA	12
2.4	Proteine	14
2.4.1	Aminosäuren	15
2.4.2	Struktur von Proteinen	16
2.4.3	Arten und Funktionen von Proteinen	17
2.5	Genexpression	19
2.6	Enzymatische Reaktionen	22
2.7	Biologische Netzwerke	28
2.7.1	Genregulatorische Netzwerke	29
2.7.2	Signaltransduktionsnetzwerke	31
2.7.3	Metabolische Netzwerke	35
2.7.4	Proteininteraktionsnetzwerke	42
2.8	Zusammenfassung	43
3	Molekularbiologische Datenbanken und Austauschformate	45
3.1	Molekularbiologische Datenbanken	45
3.1.1	Sequenzdatenbanken	49
3.1.2	Strukturdatenbanken	52
3.1.3	Genexpressionsdatenbanken	53
3.1.4	Datenbanken über Proteinfunktionen	54

3.1.5	Interaktionsdatenbanken	56
3.1.6	Datenbanken für organismusbezogene Informationen	59
3.1.7	Portale und Integrationsansätze	60
3.1.8	Spezifische Merkmale molekularbiologischer Datenbanken	67
3.2	Austauschformate	71
3.2.1	SBML (Systems Biology Markup Language)	73
3.2.2	CellML	77
3.2.3	CSML (Cell Systems Markup Language)	81
3.2.4	Vergleich der Austauschformate	85
3.3	Datenakquirierung	88
3.3.1	Digitale Bibliotheken	89
3.3.2	Information-Retrieval und Text-Mining	90
3.4	Zusammenfassung	93
4	Informationsintegration	95
4.1	Integrationsansätze	95
4.1.1	Integrationsansätze in der Molekularbiologie	97
4.2	Grundlagen d. semantischen Integration	101
4.2.1	Ontologien	101
4.2.2	Beschreibungslogiken	104
4.2.3	Resource Description Framework (RDF)	108
4.2.4	RDF-Schema	112
4.3	OWL	114
4.3.1	Klassen, Eigenschaften und Individuen	116
4.3.2	Header, Namensräume und Einbindung anderer Ontologien	119
4.3.3	Unterschiede zwischen OWL Lite, OWL DL und OWL Full	121
4.3.4	OWL 2	121
4.4	Ontologien in der Molekularbiologie	123
4.4.1	Gene Ontology	123
4.4.2	Die „Open Biomedical Ontologies“-Initiative	127
4.4.3	BioPAX	129
4.5	Ontosync	134
4.5.1	Abbildung von Datenbankschemata auf Ontologien	135
4.5.2	Annotation von Ontologien	139
4.5.3	Ontologievisualisierung	142
4.5.4	Synchronisation von Ontologie und Datenbankschema	143
4.5.5	Anfragebearbeitung	145
4.5.6	Fazit	147
4.6	Zusammenfassung	150

5	Modellierung und Analyse biologischer Netzwerke	153
5.1	Einleitung	153
5.2	Graphen	155
5.2.1	Grundlagen	156
5.2.2	Graphenmodelle	158
5.2.3	Topologische Eigenschaften	161
5.3	Rekonstruktion biologischer Netzwerke	164
5.4	Netzwerkanalyse	170
5.4.1	Genregulatorische Netzwerke	171
5.4.2	Signaltransduktionsnetzwerke	175
5.4.3	Metabolische Netzwerke	178
5.4.4	Proteininteraktionsnetzwerke	179
5.5	Stöchiometrische Analyse	181
5.5.1	Elementary Flux Modes	183
5.5.2	Extreme Pathways	184
5.5.3	Flux Balance Analysis	185
5.6	Modellierungsansätze im Überblick	186
5.6.1	Modellierungsdimensionen	187
5.6.2	Einordnung von Modellierungsansätzen	189
5.6.3	Modellierungssprachen und ihre Anwendung in der Biologie	193
5.7	Zusammenfassung	205
6	Biologische Netzwerke als Petri-Netze	207
6.1	Grundlegende Definitionen	208
6.2	Strukturelle Eigenschaften	212
6.3	Dynamische Eigenschaften	214
6.4	Analyse von Petri-Netzen	218
6.5	Besonderheiten biologischer Petri-Netze	219
6.5.1	Metabolische Netzwerke	219
6.5.2	Signaltransduktionsnetzwerke	223
6.5.3	Analyse biologischer Petri-Netze	229
6.5.4	Modellierung von Systemgrenzen	230
6.6	Petri-Netz-Erweiterungen	232
6.6.1	Gefärbte Petri-Netze	232
6.6.2	Funktionale Petri-Netze	234
6.6.3	Zeitbehaftete Petri-Netze	235
6.6.4	Petri-Netze mit Fuzzy-Logik	237
6.7	Modellierungsansätze	238
6.7.1	Qualitative vs. quantitative Modellierung	239
6.7.2	Manuelle Erstellung von Petri-Netzen vs. automatische Generierung	239
6.8	Zusammenfassung und Literaturhinweise	242

Literaturverzeichnis	245
Sachverzeichnis	263

Informationsmanagement in der Systembiologie

Datenbanken, Integration, Modellierung

Eckstein, S.

2011, X, 268 S. 139 Abb., 35 Abb. in Farbe., Hardcover

ISBN: 978-3-642-18233-4