

Ordnerstruktur für jedes Protein

- Beschreibung (als R-Markdown file)
 - Link zu Originalartikel
 - Spreadsheet mit den drei Spalten „Parameterwert“, „Quelle“, „Kommentar“
 - Information über Limits, Gültigkeit, Annahmen
- Unterordner „*cps*“
 - Copasi-File, in dem eine Spezies „Ca_cyt“ (cytosolisches Calcium) sein sollte
- Unterordner „*R*“
 - R-Files
- Unterordner „*src*“
 - C-Files, etc.

R-Funktion coupleProtein

„*coupleProteinXY*(d, param =param, p1=NULL, p2=NULL,...)

Minimal Input:

- d: Dataframe mit mindestens time (in s) und Ca_cyt (Ca in nM)
- param: Liste mit Parametern (Initial Values, Reaktionsraten, Volumen). Der Benutzer muss keine vollständige Liste übergeben. Wenn keine Liste übergeben wird, bzw. auch für die Werte, die nicht in der Liste enthalten sind, werden die Defaultparameter verwendet.
- p1, p2,...: Die Parameter aus der Liste können durch den Nutzer noch einzeln überschrieben werden.

Minimal Output:

- dataframe mit mindestens time und XY_act (active fraction)

Parameter-Übergabe – Umsetzung in R:

- für die Parameter-Liste gibt es einen Default, der eingesetzt wird, wenn der Benutzer nichts angibt
- schauen, ob eine Liste übergeben wurde
 - wenn ja, die Liste durchgehen und die enthaltenen Parameter überschreiben, Parameter die nicht in der Liste sind, bleiben auf Default
- schauen, ob einzelne Parameter übergeben wurden
 - wenn ja, diese überschreiben (auch wenn sie zuvor schon durch die Angaben aus der Liste überschrieben wurden)

Einheiten

Variable	Einheit
time	[s]
Ca_cyt	[nM]
XY_act	[-] (fraction)
vol	[L]