

2013 ECell Sprint

2013.09.11

Yuki Sakamoto

今回やった事

- Rule-based modeling front-end
 - SBML converter
 - Simulator との連携
 - グラフの描画(これは多分今後使わない)

Rule-based modeling

- BioNetGenを触っている人にはおなじみ
- 反応系内に始めに存在するSeed Speciesに、ドメインの修飾状態などをもとにしたReactileRule(=反応の起こる条件)を適用してReaction-Networkを生成する。

Example

- Seed Species
 - $\text{egfr}(l, r, Y1068=Y, Y1148=Y)$
 - $\text{egf}(r)$
- ReactionRule
 - $\text{egfr}(l, r) + \text{egf}(r) == \text{egfr}(l^{\wedge}l, r).\text{egf}(r^{\wedge}l)$
- このReactionRuleをSeed Speciesに適用すると、
 - $\text{egfr}(l, r, Y1068=Y, Y1148=Y) + \text{egf}(r) == \text{egfr}(l^{\wedge}l, r, Y1068=Y, Y1148=Y).\text{egf}(r^{\wedge}l)$

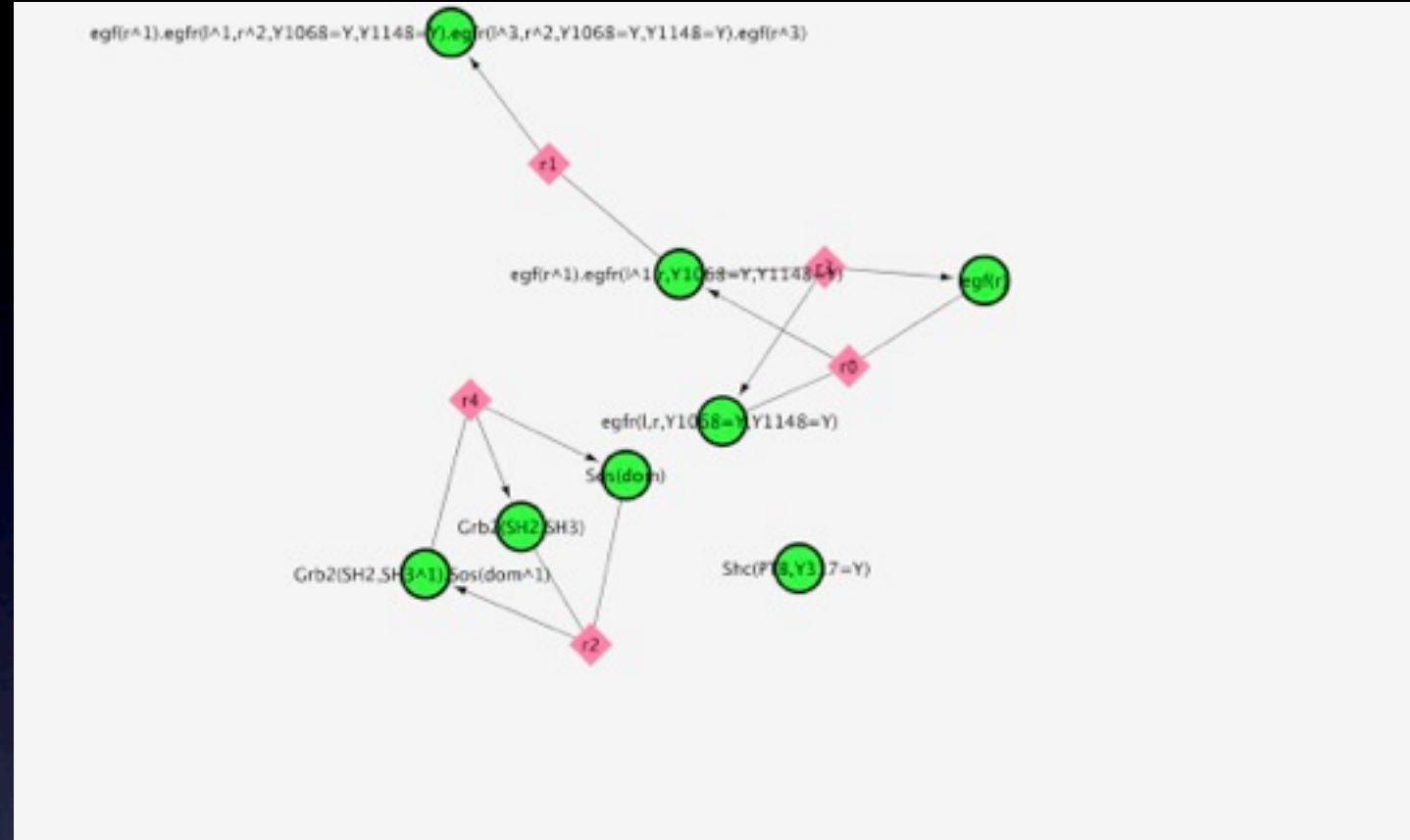
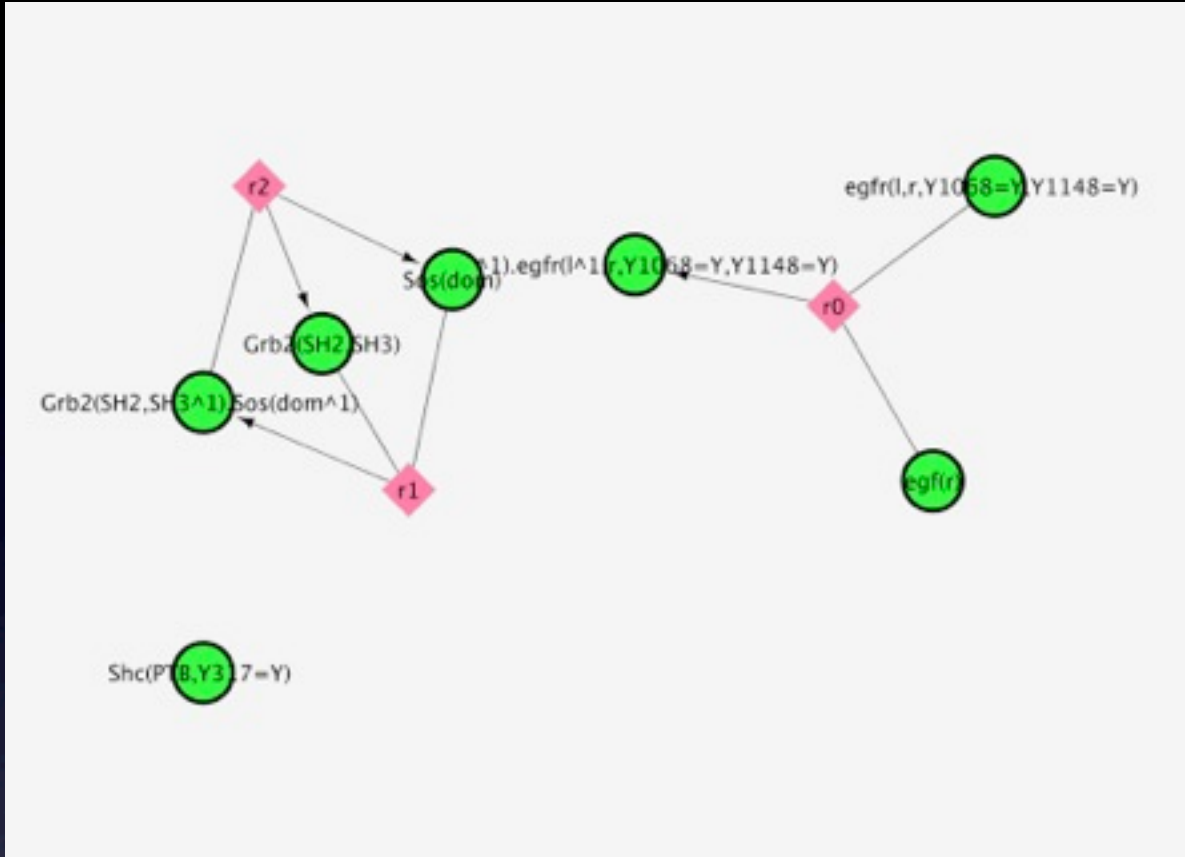
SBML Converter

- このようなルールの適用を繰り返していくと無数の反応が生成されることになる。
- SBML(System Biology Markup Language)へ出力する事で反応ネットワークを可視化
- SBMLは業界標準。ECe4でのリソースを有効利用するためにもコンバータは必要。

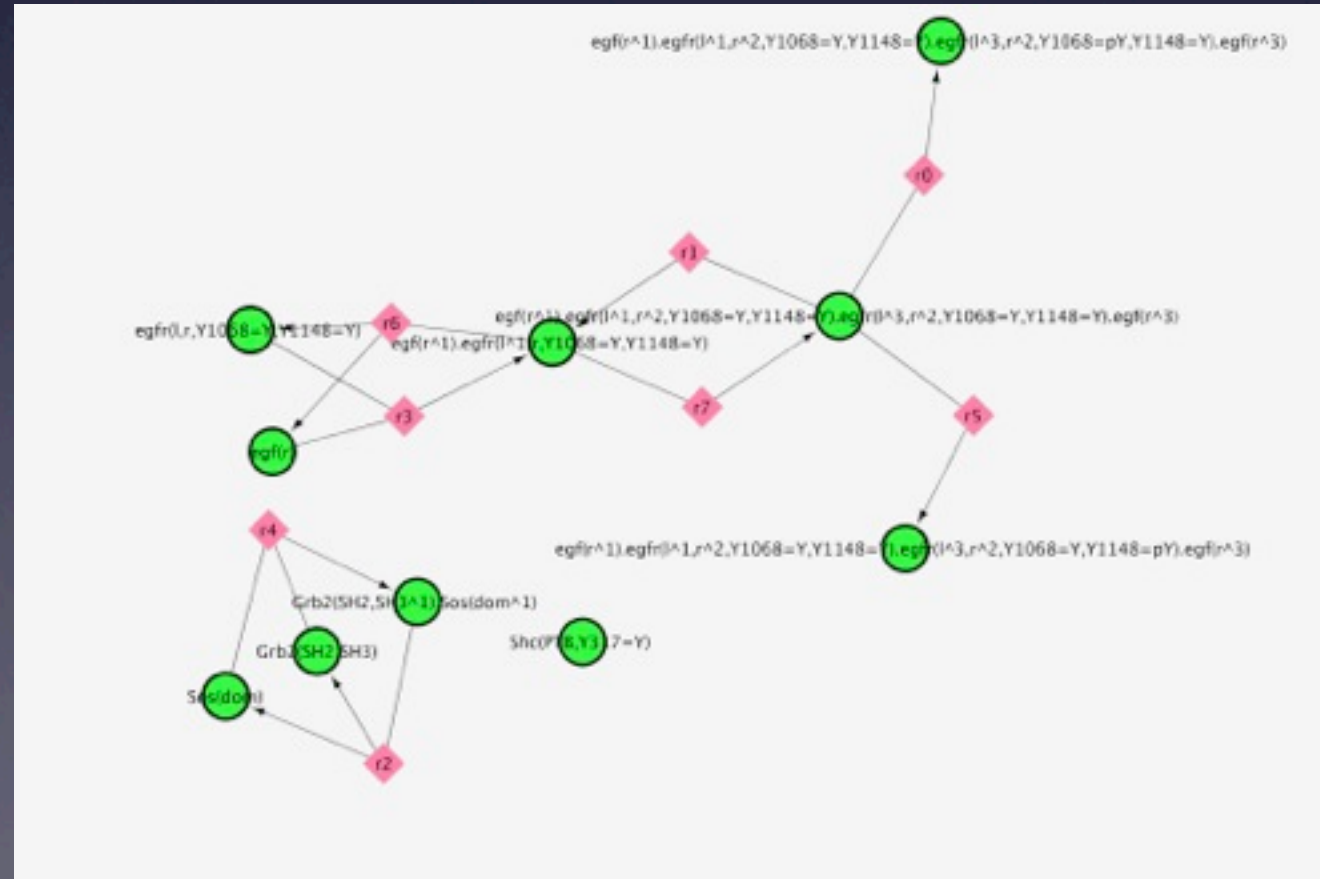
EGF signaling pathwayを展開してみる

n = 1

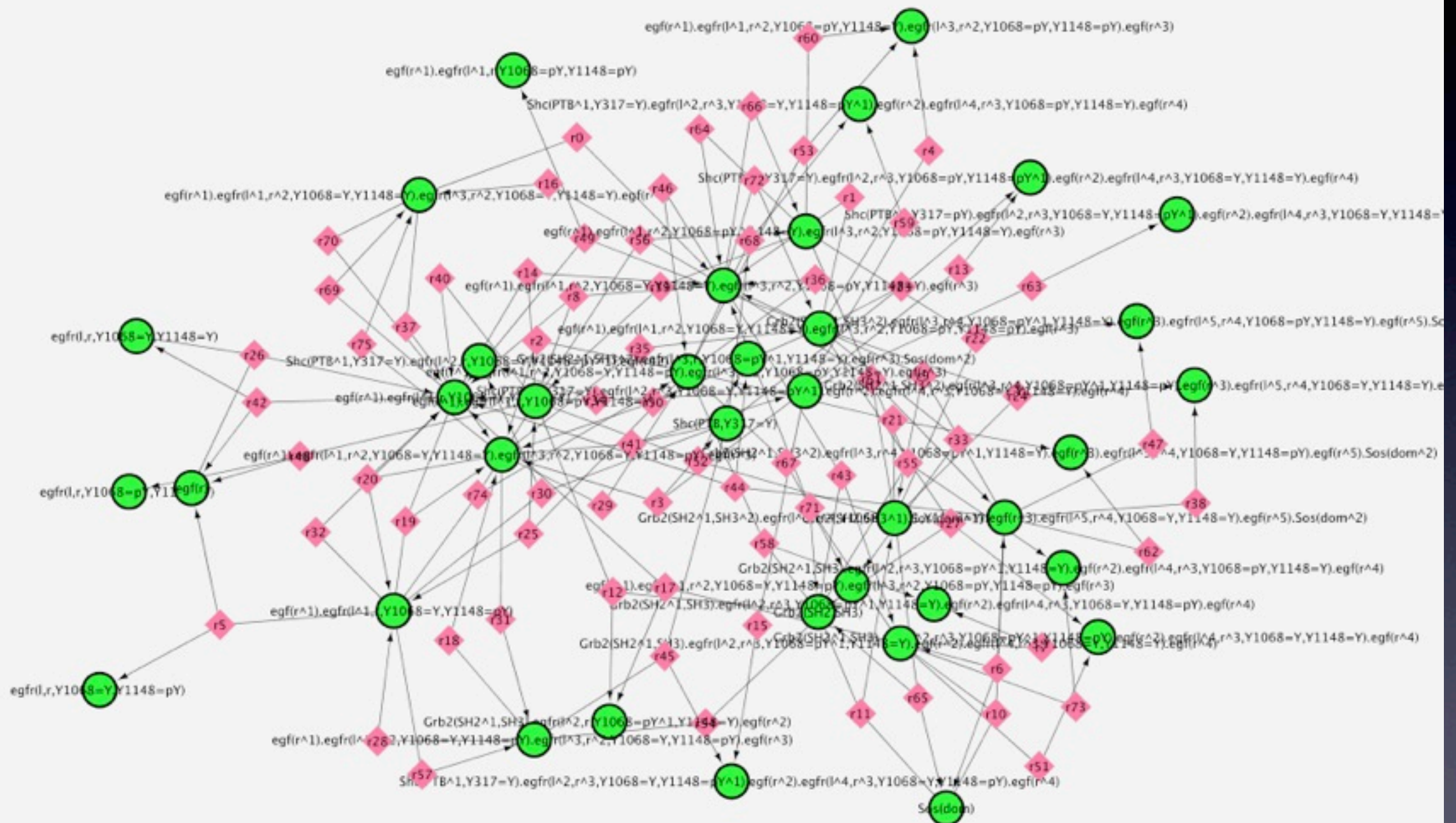
n = 2



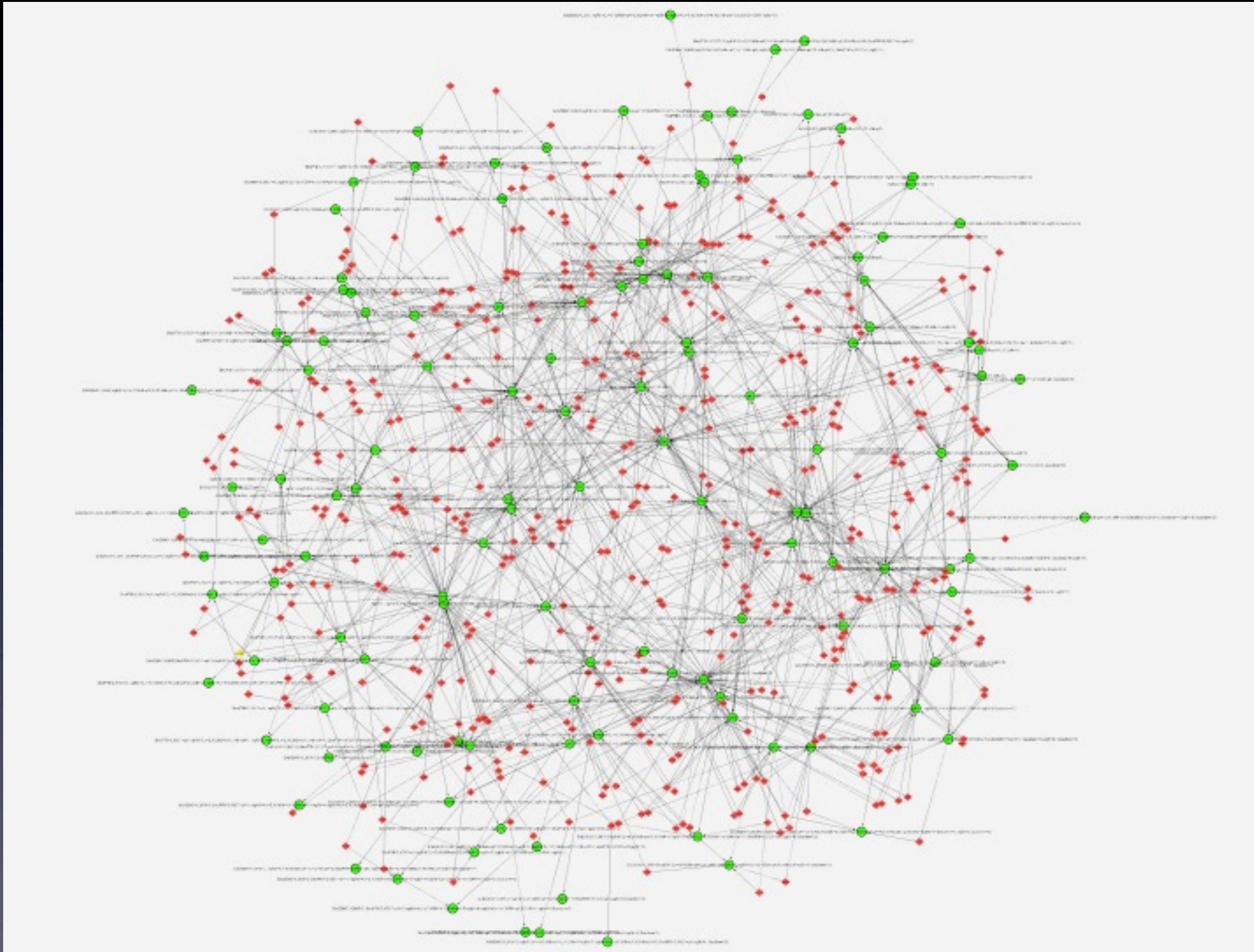
n = 3



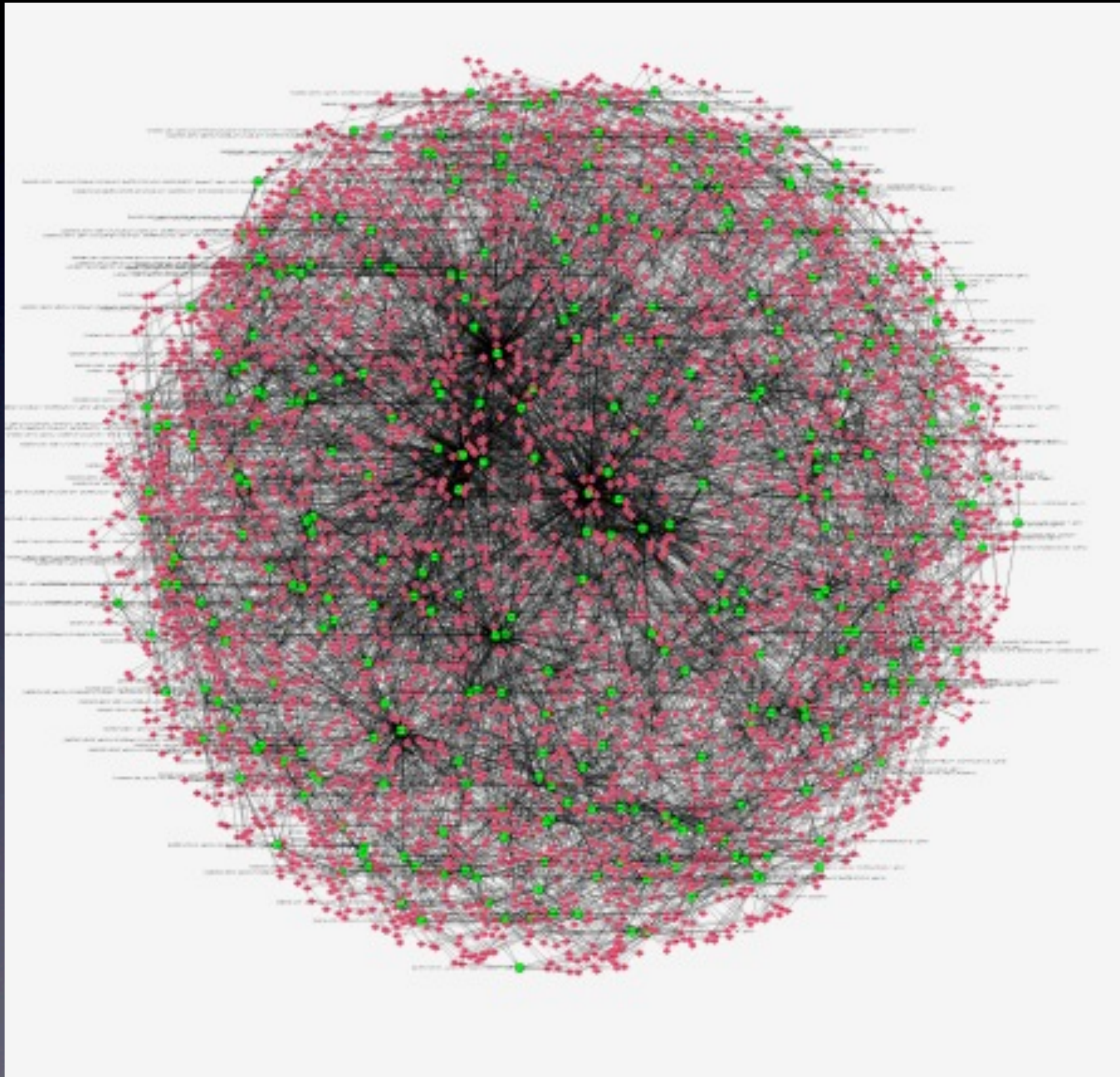
$n = 5$



$n = 7$



$n = 10$

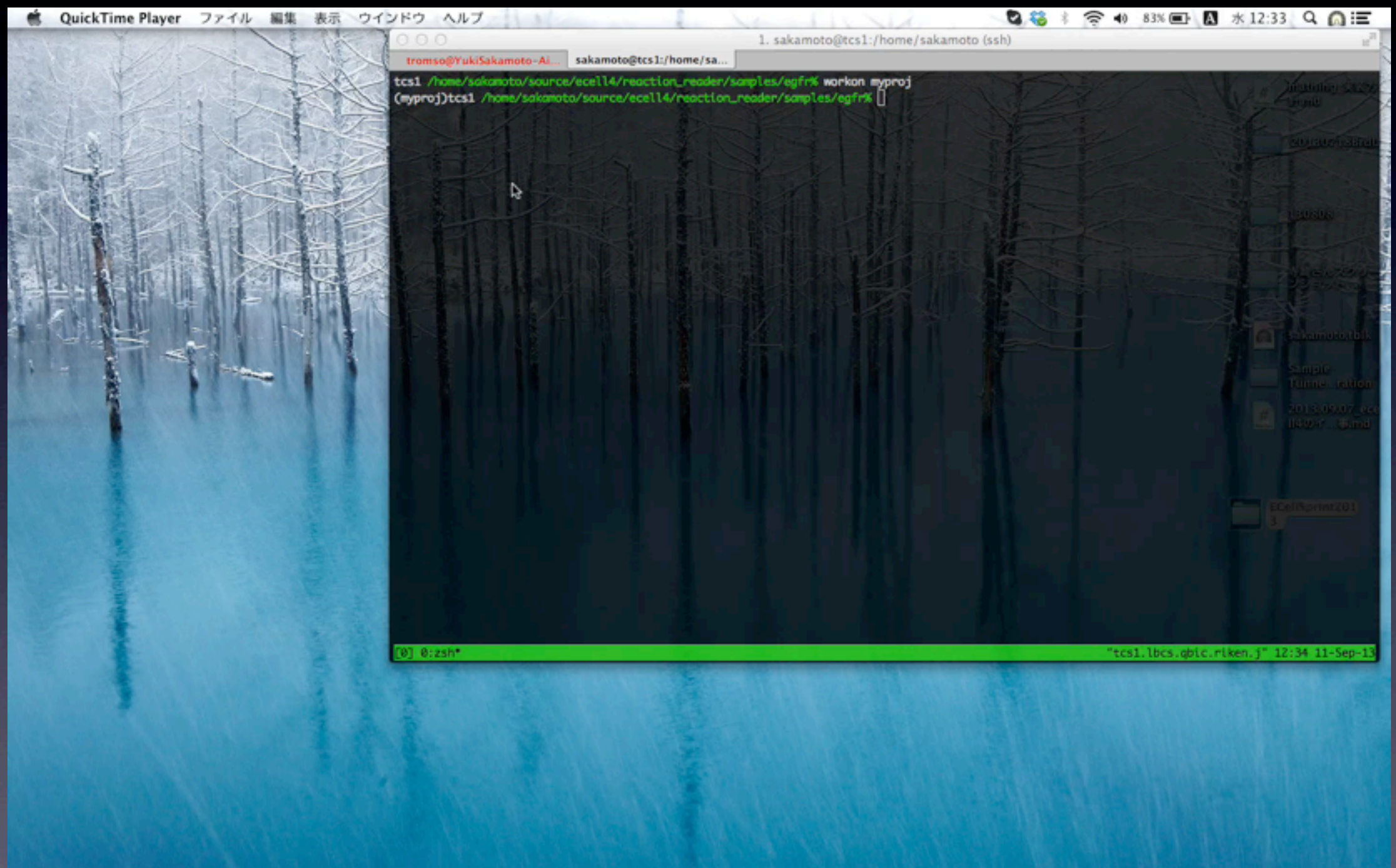


4105 nodes
10498 edges

Simulatorとの連携

- 実は今までは反応ネットワークをgenerateすることまでしか出来なかった（=モデルだけあってシミュレーションができなかった）
- とりあえずSolverを走らせたい
- ついでにSimulationするならグラフも描きたい

とりあえずこんな感じ

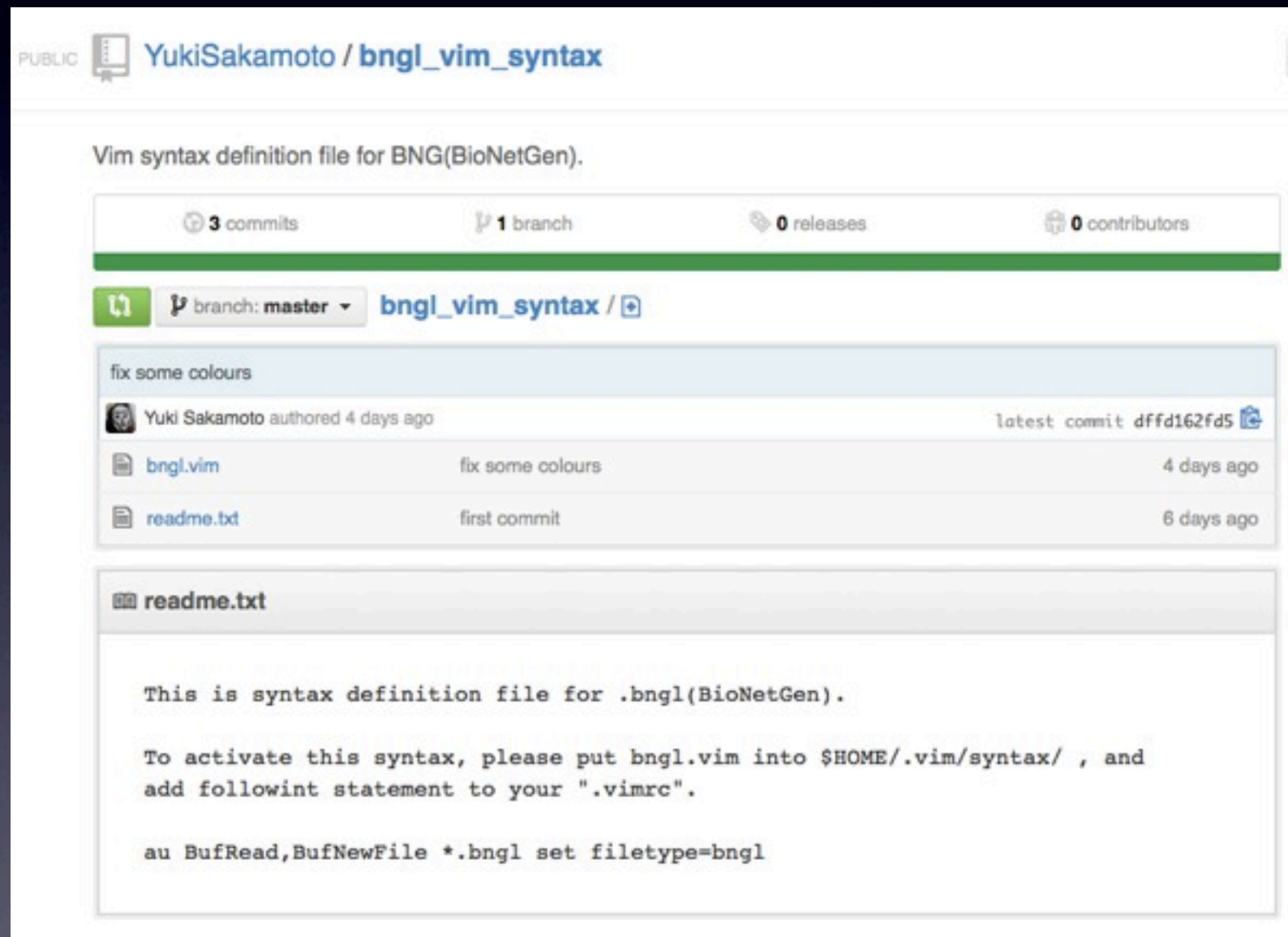


今後やること

- Visualizer
- RulebaseのNetworkGeneratorをC++に移植
- etc...

おまけ：SFCでは少数派なVimmerの皆様

BioNetGenのvimのカラーリングの設定を書きました。



https://github.com/YukiSakamoto/bnagl_vim_syntax

興味があれば使ってください