

# KiNET – ВЕБ-ОРИЕНТИРОВАННАЯ БАЗА КИНЕТИЧЕСКИХ ДАННЫХ БИОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ ДЛЯ *E.coli*

Ермак Т., Акбердин И.<sup>1</sup>, Тимонов В.<sup>2</sup>, Хлебодарова Т.М.<sup>1</sup>, Лихошвай В.А.<sup>1,2</sup>

Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики,  
Новосибирск, Россия

<sup>1</sup>Институт цитологии и генетики СО РАН, Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

*Мотивация и цель:* Одной из основных задач современной системной биологии является задача создания «электронной (виртуальной) клетки», так называемой *in silico cell*. «Электронная клетка» – информационно-компьютерный ресурс, позволяющий моделировать полный метаболизм клетки с учетом процессов генетической регуляции и механизмов клеточного роста и деления. Компьютерный ресурс должен позволять также проводить компьютерные эксперименты для подтверждения ранее выдвинутых гипотез и прогнозов, основанных на математическом моделировании. Для достижения этой цели требуется разработка адекватных математических моделей, например, описывающих метаболические пути синтеза основных «строительных элементов» клетки прокариот – ДНК, РНК и аминокислот. В свою очередь, для создания математических моделей необходимо накапливать и анализировать опубликованные кинетические данные из источников, содержащих информацию о работе клетки.

Предыдущая версия базы KiNET была разработана в ИЦиГ СО РАН [1]. KiNET – база кинетических данных биохимических реакций для *E.coli*. База содержит опубликованные кинетические данные, накапливаемые в Институте за последние 7 лет. Но ранее база была не доступна для широкого круга исследователей.

*Методы и Алгоритмы:* Веб-приложение разрабатывается на платформе Java с использованием веб-фреймворка Vaadin (<http://vaadin.com>).

*Результаты:* Разработана веб-ориентированная база кинетических данных биохимических реакций для *E.coli*, имеющая дружелюбный интерфейс пользователя для легкого доступа и представления данных.

*Заключение:* Мы предоставляем необходимые для математического моделирования кинетические данные биохимических реакций (условия экспериментов, значения кинетических данных, ферментов клетки и т.д.) посредством веб-базы данных. Ученые со всего мира получают возможность сократить время, требуемое для разработки математических моделей биохимических процессов, их анализа и обработки. KiNET будет полезен для проведения крупномасштабных *in silico* экспериментов.

*Благодарности:* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ [10-01-00717-а], интеграционного проекта Президиума СО РАН №80, грантами научной школы № 5278.2012.4, программ Президиума РАН (6.8), (30.29).

## Литература

1. Khlebodarova T.M *et al.*, Information sources for modeling *Escherichia coli* metabolic pathways// Proc. of the 5th BGRS International Conference, Vol. 2, pp. 19-24.