

## VOM EXPERIMENT ZUR VORHERSAGE BIOCHEMISCHER SYSTEME



## INA KOCH

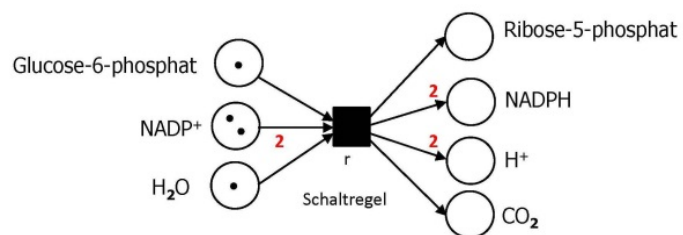
Ina Koch, geboren 1958 in Berlin-Friedrichshain, wollte schon immer Naturwissenschaftlerin werden. Sie studierte Chemie mit der Spezialisierung Theoretische Chemie an der Universität Leipzig, wo sie in der Quantenchemie bei Cornelius Weiss diplomierte. Danach war sie am Institut für Kybernetik und Informationsprozesse der Akademie der Wissenschaften in Berlin tätig, wo sie sich mit der Anwendung und Entwicklung graphentheoretischer Methoden zur Proteinstrukturanalyse beschäftigte. Von 1992 bis 1996 arbeitete sie als Wissenschaftlerin an der GMD – Gesellschaft für Datenverarbeitung - in St. Augustin. Sie promovierte mit einem neuen Algorithmus zum paarweisen und multiplen Proteinstrukturvergleich im Fach Theoretische Informatik. Von 1997 bis 2000 arbeitete sie am Max-Delbrück-Zentrum für Molekulare Medizin in Berlin in der Gruppe von Jens Reich. Dort begann sie systembiologische Fragestellungen zu verfolgen. 2000 wechselte sie in die Gruppe von Martin Vingron am Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik. 2002 wurde sie zur Professorin für Bioinformatik an die Beuth-Hochschule in Berlin berufen. Dort baute sie unter anderem einen der ersten Masterstudiengänge im Fach Bioinformatik in Deutschland auf. Ca. 80 % der Absolventen haben promoviert, zwei Professoren sind bisher aus diesem Studiengang berufen. Gleichzeitig war sie Gastwissenschaftlerin am MPI für Molekulare Genetik. 2005 nahm sie eine W3-Vertretungsprofessur an der Friedrich-Schiller-Universität in Jena an. Seit 2010 ist sie Universitäts-Professorin am Institut für Informatik im Fachbereich Informatik und Mathematik der Goethe-Universität Frankfurt. 2013 erhielt sie ein Forschungsstipendium des Trinity-Colleges in Cambridge, UK.

Frau Koch ist mit einem Quantenchemiker verheiratet und hat zwei erwachsene Kinder (promovierte Ärztin und Chemiker) und einen Enkel. Sie liest viel und begeistert sich für gute Musik jeglicher Art, von Klassik bis Hardrock. Sie ist Ausdauersportlerin (Inline-Skating, Marathon und Halbmarathon) und fährt Motorrad. Außerdem geht sie gerne in die Berge, im Sommer wie im Winter.

Das faszinierende sowohl an der theoretischen Chemie (Quantenchemie) als auch an der theoretischen Biologie (Bioinformatik) ist die Möglichkeit, Struktureigenschaften und Systemverhalten vorherzusagen, ohne ein Nass-Experiment durchzuführen. Dadurch lassen sich nicht nur Hypothesen leicht verifizieren, sondern auch Tierexperimente einsparen. Aufgrund der riesigen Datenmengen, die derzeit in der experimentellen Biologie und Medizin generiert werden, wird die Bioinformatik, die sich mit der Aufarbeitung solcher Daten beschäftigt, immer bedeutsamer. Fragestellungen, wie nach den genetischen Ursachen von Krankheiten oder die Auswirkungen von Arzneimitteln auf bestimmte Stoffwechselforgänge, lassen sich mit Hilfe von mathematischen Modellen beantworten. Hierbei sind nicht nur schnelle Computer notwendig, sondern auch die Entwicklung neuer computergestützter Methoden.

Wir beschäftigen uns mit der Entwicklung von Algorithmen, um mathematischen Modelle aus experimentellen Rohdaten zu erstellen, zu verifizieren und zu simulieren. Dazu verwenden wir mathematische Formalismen, wie z.B. Petrinetze, die es uns ermöglichen, unterschiedlichste Daten und Konzepte miteinander zu verknüpfen. Wir modellieren metabolische Systeme, Signaltransduktionsnetzwerke und auch genregulatorische Netzwerke.

Uns interessiert insbesondere die mathematische Modellierung von Proteinkomplex-Assemblierungsprozessen unter Berücksichtigung von Strukturinformationen. Hierbei betrachten wir Proteinkomplexe der Atmungskette, die bei mitochondrialen Erkrankungen eine wesentliche Rolle spielen.



Ein einfaches klassisches Petrinetz, das die Summenformel des Pentosephosphatwegs darstellt. Die Kreise, *Plätze* genannt, stellen die passiven Elemente, hier die Metaboliten, und die Rechtecke die aktiven Elemente (*Transitionen*), hier die enzymkatalysierten chemischen Umwandlungsreaktionen, des Netzes dar. Die schwarzen Punkte sind bewegliche Objekte (*Marken*), die in biochemischen Systemen Stoffeinheiten repräsentieren können. Durch die Anwendung einer Umwandlungsvorschrift (*Schaltregel*) bewegen sich die Marken von einem Platz auf einen anderen. Die Zahlen an den Pfeilen (*Kanten*) entsprechen hier den stöchiometrischen Faktoren.