

Diplomarbeit

Simulation des Verhaltens von Zellkomponenten in biologischen Netzwerken mit Hilfe von Workflow Technologie

Beginn: Ab sofort

Hintergrund

Seit kurzem gibt es Bestrebungen, wissenschaftliche Berechnungen, Experimente und Simulationen mithilfe von Workflows zu realisieren, um die Vorteile der Workflowtechnologie auch in diesem Bereich auszunutzen (z.B. Automatisierung, Robustheit). In diesem Zusammenhang spricht man von wissenschaftlichen Workflows oder Simulationsworkflows. Im Rahmen von SimTech arbeitet das IAAS an einem Workflow Management System für Simulationen. Ein Aspekt einer solchen Simulationsumgebung ist das Bereitstellen von Simulationswerkzeugen als Web Services und die Komposition dieser Services.

Am Institut für Systemtheorie und Regelungstechnik (IST) werden Theorien für komplexe Systeme entwickelt, um beispielsweise das interaktive Verhalten von Zellkomponenten in biologischen Netzwerken besser verstehen zu können. Wir verwenden statistische Methoden für die Modellidentifikation aus experimentellen Daten und die modellgetriebene Experimentplanung, mit einem Fokus sowohl in der Anwendung wie auch Weiterentwicklung existierender Methoden.

Aufgaben

Ziel dieser Arbeit ist die automatisierte Ausführung der für optimale Experimentplanung benötigten Simulationen auf Basis eines Workflows. Dazu müssen die Programme als Web Service verfügbar gemacht und die Ergebnisdaten einer Anwendung so transformiert werden, dass sie als Eingabedaten weiterer Anwendung genutzt werden können. Ein weiterer Aspekt ist die Beschleunigung des Simulationsablaufs durch unterschiedliche Parallelisierungsmethoden. Die Arbeit erfolgt in enger Kooperation mit dem IST.

Voraussetzungen

Es wird empfohlen, die Vorlesungen am IAAS besucht zu haben (v.a. Workflow Management, Web Services). Da die Simulationsprogramme häufig in C, C++ oder Fortran geschrieben sind, sind Grundkenntnisse in diesen Sprachen oder in Simulationsumgebungen wie etwa Matlab hilfreich. Für das Erstellen von Web Services aus dem Legacy-Code sind Java-Kenntnisse nützlich.

Literatur

- [1] Taylor et al.: Workflows for e-Science: Scientific Workflows for Grids. Springer, 2007.
- [2] Jens Rutschmann: Generisches Web Service Interface um Simulationsanwendungen in BPEL-Prozesse einzubinden, Diplomarbeit Nr. 2895, 2009.
- [3] Christoph Müller: Development of an Integrated Database Architecture for a Runtime Environment for simulation Workflows, Diplomarbeit Nr. 2984, 2010.
- [4] Andrei Kramer, Jan Hasenauer, Frank Allgöwer, Nicole Radde: Computation of the posterior entropy in a Bayesian framework for parameter estimation in biological networks, SimTech Pre-print 2010-10, <http://www.simtech.uni-stuttgart.de/publikationen/preprints10.php>.

Kontakt

Dipl.-Math. Michael Reiter
Raum: 1.037
Tel.: 0049-711-7816-416
E-Mail: Michael.Reiter@iaas.uni-stuttgart.de

Prüfer

Dr.-Ing. Dimka Karastoyanova, Juniorprofessor