

Gelelektrophoresesimulation mithilfe von NetLogo

Justin Jakull
Molekulare Algorithmen
Thomas Hinze
SoSe 2026

1. Inhaltsverzeichnis

1. Inhaltsverzeichnis.....	2
2. Einführung.....	3
Gelelektrophorese	3
NetLogo	3
3. Technische Dokumentation	4
Problembeschreibung	4
Analyse der Formel.....	4
Vereinfachungen und Optimierungen.....	5
Einschränkungen der Simulation.....	5
4. Nutzeranleitung	7
lokale Bedienelemente	7
globale Bedienelemente.....	8
Simulationsbeispiele	9
5. Literatur	10

2. Einführung

Gelelektrophorese

Gelelektrophorese ist eine Methode zum Auftrennen von DNA-Fragmenten. Die DNA wird hierbei in den Taschen eines Gels injiziert. Das Gel kann hierbei entweder aus Agarose oder aus Polyacrylamid bestehen. An den Enden des Gels befinden sich zwei Elektroden, über diese wird eine Spannung angelegt, welche ein elektrisches Feld erzeugt. Die DNA-Fragmente werden durch das elektrische Feld in Richtung der positiven Elektrode gezogen. DNA-Fragmente mit höherem Gewicht werden durch die Porenstruktur gebremst und ziehen langsamer durch das Gel. Dadurch erfolgt eine Trennung der DNA-Fragmente nach ihrer Länge in verschiedene Banden. ^[1]

Dieser Prozess kann zur Sortierung von DNA-Fragmenten verwendet werden. Außerdem kann man so auch die Länge von DNA-Fragmenten überprüfen. Dies kann beispielsweise für den Nachweis erfolgreicher Gen-Insertion in DNA genutzt werden. Auch für verschiedene Anwendung im DNA-Computing spielt Gelelektrophorese eine wichtige Rolle. ^[2]

NetLogo

NetLogo ist eine agentenbasierte Simulationsplattform. ^[3] Sie wurde 1999 von Uri Wilensky entwickelt. Sie ist inspiriert von der Sprache Logo. Die Plattform wird von der Northwestern University in Evanston, Illinois weiterentwickelt. ^[4] Agenten in NetLogo tragen den Namen „turtles“ ebenfalls inspiriert von Logo. NetLogo soll eine einfache und zugängliche Möglichkeit bieten, komplexe Systeme zu simulieren. Gleichzeitig soll NetLogo eine möglichst umfangreiche Simulation ermöglichen, deshalb wird es nach dem Ethos: „low threshold, high ceiling“ entwickelt. ^[4] Die Turtles und Ihre Interaktion mit der Umgebung, welche mithilfe der pixelähnlichen aber sehr anpassbaren „patches“ dargestellt wird, können umfangreich manipuliert und angepasst werden.

3. Technische Dokumentation

Problembeschreibung

Ziel ist es eine Gelelektrophorese in NetLogo zu simulieren. Hierzu soll der Nutzer bis zu 4 Lanes mit bis zu 10 DNA-Fragmentlängen bestücken. Die Anzahl der Fragmente pro Lane/Länge kann von dem Nutzer beliebig gewählt werden und spiegeln sich in der Breite der DNA-Banden wider. Des Weiteren kann der Nutzer die Spannung in Volt, den Elektrodenabstand in Zentimetern und die Laufzeit in Sekunden angeben. Die Simulation soll nach dem Start die Bewegung der DNA-Banden durch ein Agarosegel zeigen.

$s(m, t) = G \cdot \frac{E}{\eta} \cdot \frac{1}{m^{\frac{1}{3}}} \cdot t$ Bei der Umsetzung soll mithilfe der in der Vorlesung gezeigten Formel For. 1 die Bewegung der

For. 1: Bewegung der DNA im Agarosegel

DNA im Gel berechnet werden.

Die Simulation soll am Ende ähnlich des Beispiels in Abb. 1

gestaltet sein, neben den 4 Lanes soll auch eine

Einteilung der Achsen zum einfachen Ablesen der DNA-Fragmentlängen und Lanes erfolgen.

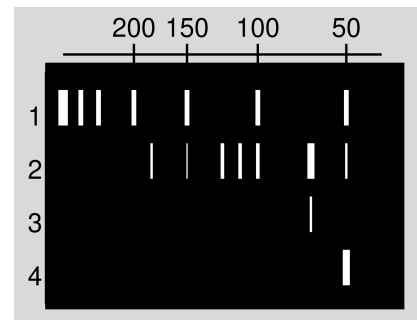


Abb. 1: Beispielgrafik für DNA-Gel-Simulation

Analyse der Formel

$$s(m, t) = G \cdot \frac{E}{\eta} \cdot \frac{1}{m^{\frac{1}{3}}} \cdot t$$

For. 1: Bewegung der DNA im Agarosegel

Die Formel For. 1 besteht aus mehreren Komponenten. Beginnend bei G , dies ist ein globaler Skalierungsfaktor. E beschreibt die elektrische Feldstärke und berechnet sich folgendermaßen: $E = \frac{U}{l}$. Hierbei ist U die Spannung in Volt und l die Distanz der Elektroden in cm. Beide Werte werden durch den Nutzer vergeben

η ist die Viskosität des Gels. Da die Viskosität eines Agarosegels vom verwendeten Puffer TAE oder TBE abhängig ist, kann diese Simulation nicht für alle Puffer gleichwertig verwendet werden. In dieser Simulation ist ein klassisches TAE Agarosegel,

mit einer Viskosität von $10.0 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ eingestellt. Ein TBE Agarosegel hätte eine Viskosität von $14.5 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.^[6]

m beschreibt die Masse der DNA-Fragmente. Diese wächst proportional zur Länge der DNA-Fragmente. Unter der Annahme, dass alle Basen der DNA gleich verteilt sind, kann man die Masse der DNA-Fragmente mit $m = \#bp \cdot 654 \text{ g/mol}$ berechnen.^[5] Wobei $\#bp$ die Anzahl der Basenpaare darstellt.

Der letzte Faktor in der Formel t beschreibt die vergangene Zeit in Sekunden.

Vereinfachungen und Optimierungen

Zur Vereinfachung der Berechnung und der Beschleunigung der Simulation werden einige Vereinfachungen und Optimierungen vorgenommen.

Die bedeutendste Optimierung ist die Skalierung der Zeit. Da die Formel eine einfache Multiplizierung mit der verstrichenen Zeit t beinhaltet, kann man die Zeiteinheit von Sekunden auf die Simulationszeiteinheit von NetLogo, die „ticks“, umstellen.

Dies würde bedeuten, dass ein Tick einer verstrichenen Sekunde entspricht. Durch diese Vereinfachung ist das neu Berechnen der vollständigen Formel nicht mehr für jede Turtle und jeden Tick nötig. Anstelle dessen, wird die Turtle jeden Tick um die Distanz $G \cdot \frac{E}{\eta} \cdot \frac{1}{m^{\frac{1}{3}}}$ nach vorne bewegt. Dies entspricht einer Multiplikation mit den

ticks als Einheit t .

Dies führt zur Reduktion des Simulationsaufwandes, da die Berechnung der Formel nur einmalig für jede Turtle, im Schritt der Kalibrierung, notwendig ist. Dies führte in praktischen Tests allerdings auch zu einem sehr ruckartigem und groben Simulationsmuster. Um dieses zu vermeiden, wurde die Formel um den globalen Skalierungsfaktor $G = 0.001$ erweitert. Die Anpassung des Skalierungsfaktors führt dazu das nun ein Tick nicht mehr einer Sekunde, sondern einer Millisekunde entspricht. Somit bewegen sich die Turtles deutlich flüssiger und die Simulation ist deutlich angenehmer zu beobachten.

Einschränkungen der Simulation

Die Simulation ist in ihrer Umsetzung nicht vollständig der Aufgabenstellung gerecht. Es gibt drei wesentliche Einschränkungen.

Die erste bezieht sich auf die Simulationsdauer und Größe. Schon bei einer Simulationsdauer von nur 5.000ticks also fünf Sekunde erreichen Fragmente in der Größe von 100bp in realistischen Bedingungen das Ende der Simulationsfläche. Würde es sich also um ein echtes Gel handeln wäre dieses nur sehr wenige Zentimeter lang.

Da eine weitere Vergrößerung der Simulationsfläche aber auch einer Verkleinerung der Simulationselemente wie Turtles und Labeln entsprechen würde, ist eine Vergrößerung der Simulationsfläche nicht sinnvoll. Da aufgrund der Möglichkeiten von NetLogo das exportieren der Position allerdings nicht möglich ist, und es auch mit bestehenden Größenverhältnissen zu einer guten und klaren Auftrennung der Banden kommt ist eine Anpassung auch nicht notwendig.

Die zweite Einschränkung bezieht sich auf die Anzahl der Fragmente pro Lane/ Länge. Hier wurde zur Einsparung von Rechenkapazitäten eine strikte Zuteilung von einer Strichstärke pro 100 Fragmenten getroffen. Die Erweiterung erfolgt durch das hinzufügen mehrerer Turtles mit der gleichen Geschwindigkeit in engem Abstand. Dies führt dazu, dass alles über 1.000 Fragmenten eine sehr breite, unrealistische Bande wird. Es werden also nur Werte zwischen 1 und 1.000 Fragmenten empfohlen. Die Software überprüft dies allerdings nicht um dem Nutzer maximale Flexibilität in der Simulation zu bieten.

Die letzte Einschränkung betrifft die Darstellung. Anders als in Abb. 1 gezeigt, ist ein festes Zuordnen von Längen zu Positionen auf der Simulationsfläche nicht möglich. Da die Positionen sich im Laufe der Simulation verändern, muss diese Beschriftung dynamisch sein. Hierfür wurde das etablierte Modell aus der Biologie übernommen.

Hier wird zusätzlich zu den Versuchproben auch eine sog. „Ladder“ mit auf das Gel gegeben, welche feste, bekannte Größen hat. Durch diese können dann die Längen der einzelnen Fragmente bestimmt werden.

In der Simulation wurde dies durch eine einstellbare Ladder-Größe erreicht. Diese wird in 10 größer werdende Segmente geteilt, welche dann gestaffelt in Lane 0 über das Gel laufen. Hierbei sind die Segmente 1, 5 und 10 mit ihrer jeweiligen Länge beschriftet um dem Nutzer die Einordnung der Längen zu erleichtern.

4. Nutzeranleitung

lokale Bedienelemente



Abb. 2: Bedienelemente der Simulation

Die ersten zwei Bedienelemente, die Auswahlbox „lane“ und der Schieberegler „lane-length“ sind zur Auswahl der Lane (1-4) sowie dem Speicherslot der Lane, jede Lane hat 10 Speicherpositionen (1-10). Darunter mit dem Eingabefeld „lane-length-size“ kann die Länge der Fragmente in dieser Speicherposition eingestellt werden. Hierbei sind keine technischen Einschränkungen vorhanden. Das bedeutet, dass ein Nutzer jede ihm als sinnvoll erscheinende Länge eingeben kann. Es kann eine Länge auch auf beliebig vielen Speicherslots gespeichert werden. Diese sind in der Simulation allerdings nicht unterscheidbar übereinander gelagert.

Als nächstes folgt das Eingabefeld „lane-length-count“ welches die Anzahl der Fragmente und damit die Breite der Banden bestimmt. Hierbei wird die Bande pro 100 Fragmenten um ein Segment erweitert. Es wird empfohlen ein Maß zwischen 1 und 1000 zu wählen, aber auch

hier kann der Nutzer eine Wahl entsprechende seiner Bedürfnisse treffen.

Als nächstes folgen die Hauptsteuerelemente. Der „show“, „save“, „calibrate“ und „go“ Knopf. Der „show“-Knopf zeigt die auf dem aktuellen Speicherslot der Lane gespeicherte Konfiguration an. Hierbei wird die Anzahl der Stränge auf die nächste hunderter Stelle aufgerundet.

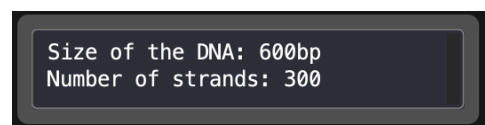


Abb. 3: Konfiguration eines Slots

Der „save“-Knopf speichert die aktuellen Einstellung auf dem aktuellen Speicherslot. Frühere Werte auf dem Speicherslot werden überschrieben und bestehende Turtles dieses Speicherslots werden gelöscht. Alle anderen Turtles bleiben erhalten. Der „calibrate“-Knopf. Dieser berechnet die Bewegungsgeschwindigkeiten der Turtles und speichert sie. Der „go“-Knopf startet und stoppt die Simulation. Bevor dieser gedrückt werden kann muss die Kalibrierung durchgeführt werden.

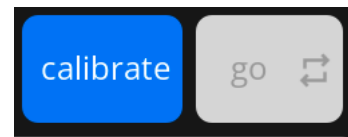


Abb. 4: Ausgegrauter „go“-Knopf

globale Bedienelemente

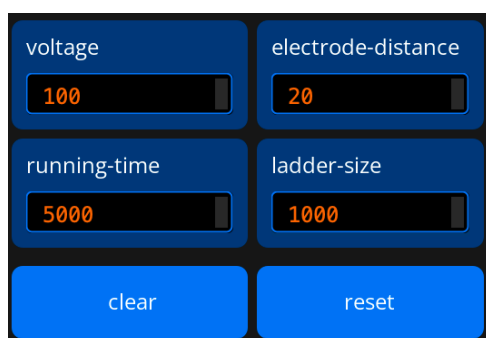


Abb. 5: globale Bedienelemente

Die Anpassung dieser Bedienelemente verändert das Verhalten aller Turtles.

Die Voltage und Electrode Distance stellen die jeweiligen Parameter für die oben aufgeführte Formel ein. Auch hier kann der Nutzer die Werte entsprechend seiner Bedürfnisse frei wählen, ohne technische Einschränkungen. Damit dem Nutzer eine größerer Experimentationsrahmen

geschaffen wird. Es wird empfohlen sich nach den

Richtwerten für klassische Gelelektrophorese zu richten. ^[1] Nach jeder Änderung der Parameter muss die Simulation neu kalibriert werden, andernfalls ist keine Veränderung des Verhaltens zu beobachten.

Die „running-time“ stellt die Laufzeit des Experiments in Millisekunden ein. Es wird empfohlen die erste Simulation ohne Laufzeitgrenze (0) durchzuführen und manuell durch erneutes betätigen des „go“-Schalters zu stoppen um bei späteren Durchläufen die erhaltene Laufzeit als „running-time“ zu verwenden.

Die „ladder-size“ bestimmt die Größe der Ladder. Dieser Wert wird durch 10 geteilt und dann als zehn aufsteigende Segmente dargestellt. Das erste, fünfte und zehnte Segment sind mit ihrer Länge beschriftet. Es wird empfohlen die „ladder-size“ auf die Länge des längsten Segments zu setzen, erneut ist der Nutzer technisch aber nicht eingeschränkt.



Abb. 6: Ladder der Länge 1.000 nach 4.000ticks

Als letztes die „clear“ und „reset“-Knöpfe. Der „clear“-Knopf löscht sofort alle Elemente und ist mit Vorsicht zu genießen. Der „reset“-Knopf setzt alle Banden auf Ihre Startpositionen zurück. Sollten keine Veränderungen vorgenommen werden, kann die Simulation mit dem „go“-Schalter sofort neu gestartet werden. Sollten Veränderungen vorgenommen werden, mit Ausnahme der Anpassung der „running-time“, muss jedes Mal erneut kalibriert werden.

Simulationsbeispiele

Hier ein paar Beispielbilder einer erfolgreichen Simulation:



Abb. 7: Konfiguration vor der Simulation.

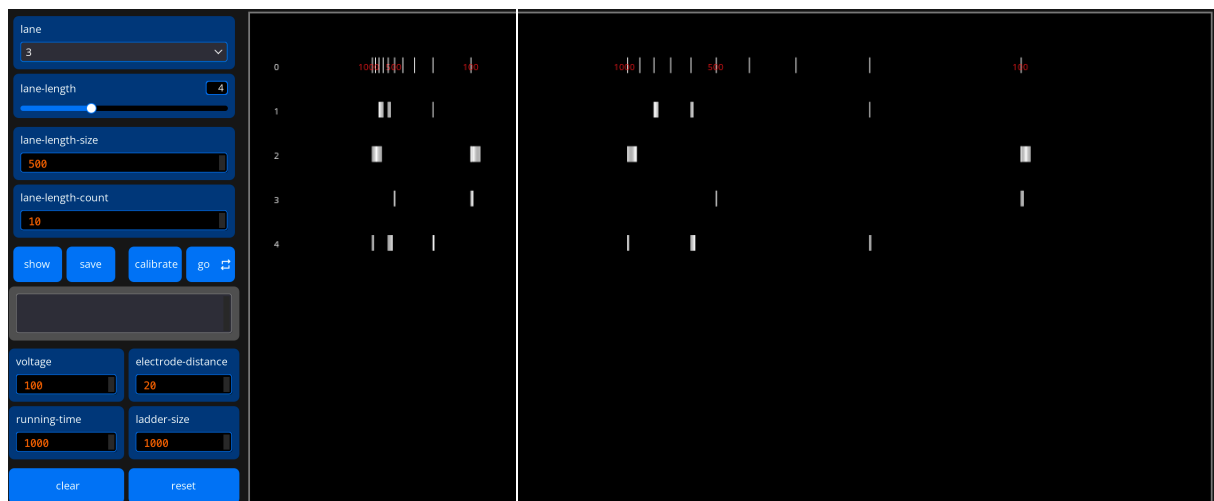


Abb. 8: Erfolgreiche Simulation nach 1.000 ticks

Abb. 9: (verlängert) selbe erfolgreiche Simulation nach 4.000 ticks

5. Literatur

- [1] „Steps in Nucleic Acid Gel Electrophoresis - DE“. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.thermofisher.com/de/de/home/life-science/cloning/cloning-learning-center/invitrogen-school-of-molecular-biology/na-electrophoresis-education/na-electrophoresis-workflow.html>
- [2] T. Hinze, „Molekulare Algorithmen - DNA-Computing – Algorithmen zur Lösung kombinatorischer Suchprobleme, universelle Parallelprogrammierung“, 1994.
- [3] „About NetLogo“. Zugegriffen: 27. Juli 2026. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.netlogo.org/about/>
- [4] „NetLogo - Wikipedia“. Zugegriffen: 27. Juli 2026. [Online]. Verfügbar unter: <https://en.wikipedia.org/wiki/NetLogo>
- [5] „DNA and RNA Molecular Weights and Conversions - DE“. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.thermofisher.com/de/de/home/references/ambion-tech-support/rna-tools-and-calculators/dna-and-rna-molecular-weights-and-conversions.html>
- [6] D. Sarkozy und A. Guttman, „Capillary Sodium Dodecyl Sulfate Agarose Gel Electrophoresis of Proteins“, Gels, Bd. 8, Nr. 2, S. 67, Jan. 2022, doi: 10.3390/gels8020067.