

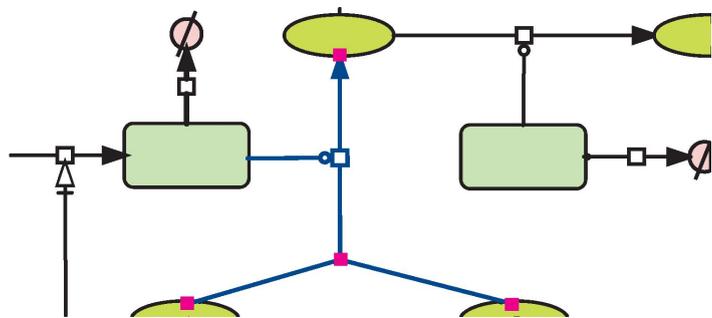
Entwicklung eines interaktiven graphischen Editors für systembiologische Modelle

Einführung

Durch den zunehmenden Paradigmenwechsel der Biologie von einer beschreibenden hin zu einer prädiktiven Wissenschaft haben sich in den letzten Jahren quantitative Modelle zu einem wesentlichen Werkzeug der Forschung entwickelt. Diese haben mittlerweile eine Vielzahl von Anwendungsgebieten, von der reinen Visualisierung biochemischer Prozesse bis hin zur dynamischen Simulation räumlicher und zeitlicher Änderungen zellulärer Bestandteile [1]. Bis vor einigen Jahren setzte die quantitative Modellierung fundierte mathematische und physikochemische Kenntnisse voraus. Heutzutage, möchten auch experimentell arbeitende Forscher in der Lage sein solche Modelle zu erstellen. Den Grundstein dafür legen standardisierte Datenformate wie SBML, SBGN, SED-ML etc., die gebündelt in ZIP-Archiven als OMEX-Dateien gespeichert werden können [2]. Die direkte Arbeit mit diesen meist XML-basierten Formaten wird von den Autoren ausdrücklich nicht empfohlen. Stattdessen sollen spezialisierte Editoren genutzt werden um quantitative Modelle in diesen Standardformaten zu erzeugen. Existierende Programme unterstützen häufig nur einen Teil des jeweiligen Standards oder weisen keine intuitive oder eine gar unzureichende Benutzerführung auf.

Zielsetzung

In dieser Arbeit soll ein graphischer Editor für SBML-Dateien entwickelt werden, der Nutzern ermöglicht, Modelle zu betrachten, zu erstellen und zu editieren. Bestandteil der Software soll ein SBGN-Editor zur graphischen Erstellung der Modelle sein basierend auf einer geeigneten Graphen-Bibliothek wie yFiles. Die Software soll über eine erweiterbare Infrastruktur verfügen, damit sich zusätzliche Funktionalität wie Simulatoren als Plugins laden lassen. Auch wenn in diesem Projekt SBML im Vordergrund steht, soll das Datenmodell von Anfang an im Hinblick auf eine mögliche Einbettung in Arbeitsabläufe (die in SED-ML definiert werden können) und eine Bündelung in OMEX-Dateien konzipiert werden. Zu Testzwecken sollen erstellte Modelle in der Cytoscape App Cy3SBML [3] analysiert werden.



Voraussetzungen

Grundlegendes Verständnis von Modellierungsstandards wie SBML,

Kenntnisse in Programmiersprachen, die durch die JVM interpretiert werden können, wie Java™ 9 mit JavaFX oder Kotlin; Interesse an komplexen Datenstrukturen sowie effizienter und skalierbarer Software-Entwicklung.

Literatur

- [1] Dräger, Andreas, and Bernhard Ø Palsson. 2014. "Improving Collaboration by Standardization Efforts in Systems Biology." *Fronti in Bioeng 2* (61): 1–20. [doi:10.3389/fbioe.2014.00061](https://doi.org/10.3389/fbioe.2014.00061).

- [2] Hucka, Michael, David Phillip Nickerson, Gary Bader, Frank T Bergmann, Jonathan Cooper, Emek Demir, and Alan Garny. 2015. "Promoting Coordinated Development of Community-Based Information Standards for Modeling in Biology : The COMBINE Initiative Promoting Coordinated Development of Community-Based Information Standards for Modeling in Biology : The COMBINE Initiative." [doi:10.3389/fbioe.2015.00019](https://doi.org/10.3389/fbioe.2015.00019).
- [3] König, Matthias, Andreas Dräger, and Hermann Georg Holzhütter. 2012. "CySBML: A Cytoscape Plugin for SBML." *Bioinform* 28 (18): 2402–3. [doi:10.1093/bioinformatics/bts432](https://doi.org/10.1093/bioinformatics/bts432).