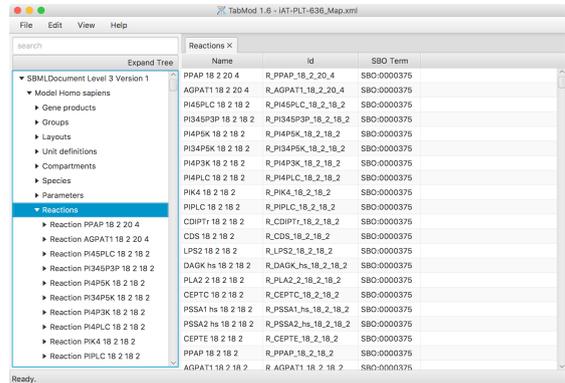


Entwicklung eines Editors für großskalige biochemische Modelle

Hintergrund

Durch die Entwicklung von Hochdurchsatz-Messverfahren wurden in den letzten Dekaden große Mengen biologischer Daten gewonnen. Die Systembiologie verfolgt das Ziel, diese in einen Gesamtheitlichen Kontext zu setzen und analytisch zu nutzen. Dazu ist es notwendig, zunächst alle im Organismus von Interesse stattfindenden biochemischen Reaktionen zu sammeln und in einem Computermodell zusammenzutragen. Für vielfältige Anwendungen wurden inzwischen spezielle Programme entwickelt, mit denen sich solche Modelle auf unterschiedliche Weise erstellen, bearbeiten oder explorieren lassen. Als Dateiformat für Modelle hat sich SBML mittlerweile fest etabliert und wird für den Austausch, Dokumentation und Archivierung von Modellen genutzt. Allerdings deckt jeder SBML-Editor nur bestimmte Funktionen des Formats ab. Häufig greifen Anwender zu einer Reihe verschiedener Programme, die für unterschiedliche Teile im Verlauf der Modellerstellung genutzt werden. Oft müssen proprietäre Formate zu SBML konvertiert werden. Ein wesentliches Problem besteht darin, dass Software z. T. unspezifisch ist oder ursprünglich nicht für systembiologische Modellierung entwickelt wurde. Allerdings wurde aufgrund der allgemeinen Beliebtheit von Tabellenkalkulationsprogrammen der Standard "STab" entwickelt, dessen Spezifikation sehr gut für die Erstellung einer Benutzerschnittstelle geeignet ist.



Name	ID	SBO Term
PPAP 18 2 20 4	R_PPAP_18_2_20_4	SBO:0000375
AGPAT1 18 2 20 4	R_AGPAT1_18_2_20_4	SBO:0000375
PI4SPK 18 2 18 2	R_PI4SPK_18_2_18_2	SBO:0000375
PI34SP3P 18 2 18 2	R_PI34SP3P_18_2_18_2	SBO:0000375
PI4PSK 18 2 18 2	R_PI4PSK_18_2_18_2	SBO:0000375
PI34PSK 18 2 18 2	R_PI34PSK_18_2_18_2	SBO:0000375
PI4PK 18 2 18 2	R_PI4PK_18_2_18_2	SBO:0000375
PI4PLC 18 2 18 2	R_PI4PLC_18_2_18_2	SBO:0000375
PIK4 18 2 18 2	R_PIK4_18_2_18_2	SBO:0000375
PIPLC 18 2 18 2	R_PIPLC_18_2_18_2	SBO:0000375
CDIPT1 18 2 18 2	R_CDIPT1_18_2_18_2	SBO:0000375
CDS 18 2 18 2	R_CDS_18_2_18_2	SBO:0000375
LPS2 18 2 18 2	R_LPS2_18_2_18_2	SBO:0000375
DAGK hs 18 2 18 2	R_DAGK_hs_18_2_18_2	SBO:0000375
PLA2 18 2 18 2	R_PLA2_18_2_18_2	SBO:0000375
CEPTC 18 2 18 2	R_CEPTC_18_2_18_2	SBO:0000375
PSSA1 hs 18 2 18 2	R_PSSA1_hs_18_2_18_2	SBO:0000375
PSSA2 hs 18 2 18 2	R_PSSA2_hs_18_2_18_2	SBO:0000375
CEPT 18 2 18 2	R_CEPT_18_2_18_2	SBO:0000375
PPAP 18 2 18 2	R_PPAP_18_2_18_2	SBO:0000375
AGPAT1 18 2 18 2	R_AGPAT1_18_2_18_2	SBO:0000375

Zielsetzung

Im Hinblick auf großskalige Modellierungsprojekte soll in diesem Projekt daher eine erweiterbare Lösung entwickelt werden. Indem dies als Plugin des bestehenden InSilico-Frameworks angelegt wird, soll einerseits die langfristige Wartung als auch die funktionale Integrität mit anderen Plugins sichergestellt werden. Konkret soll erstens das kürzlich entwickelte Modell des Pathogens *Treponema pallidum* als Beispiel dienen, um zu zeigen, dass der in dieser Arbeit entwickelte Editor den Prozess der Modellerstellung vereinfacht, und zweitens eine Integration mit einem anderen InSilico-Plugin für graphische Modellierung ermöglicht.

Anforderungen

Erfahrungen im Programmieren mit Java und JavaFX, grundlegendes Verständnis von biochemie und Interesse in systembiologischer Modellierung, Ausdauer und Leidenschaft für Detailarbeit.

Literatur

- [1] M. Hucka, F. T. Bergmann, A. Dräger, S. Hoops, S. M. Keating, N. Le Novère, C. J. Myers, B. G. Olivier, S. Sahle, J. C. Schaff, L. P. Smith, D. Waltemath, D. J. Wilkinson. The Systems Biology Markup Language (SBML): Language Specification for Level 3 Version 1 Core. *Journal of Integrative Bioinformatics*, 26. April 2018. [doi:10.1515/jib-2017-0080](https://doi.org/10.1515/jib-2017-0080)
- [2] T. Lubitz, J. Hahn, F. T. Bergmann, E. Noor, E. Klipp, W. Liebermeister. STab: a flexible table format for data exchange in systems biology. *Bioinformatics*. 8. April 2016. [doi:10.1093/bioinformatics/btw179](https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btw179)
- [3] E. Brunk, S. Sahoo, D. C. Zielinski, A. Altunkaya, A. Dräger, N. Mih, F. Gatto, A. Nilsson, G. A. Preciat Gonzalez, M. K. Aurich, A. Prlić, A. Sastry, A. D. Danielsdottir, A. Heinken, A. Noronha, P. W. Rose, S. K. Burley, R. M. T. Fleming, J. Nielsen, I. Thiele, B. O. Palsson. Recon3D enables a three-dimensional view of gene variation in human metabolism. *Nature Biotechnology*, 19 Februar 2018. [doi:10.1038/nbt.4072](https://doi.org/10.1038/nbt.4072)