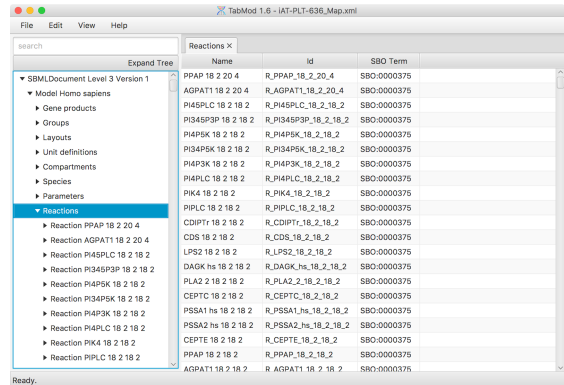


Entwicklung eines Editors für großskalige biochemische Modelle

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_CCEPTC_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_CCEPT_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)