

Gruppentreffen zum Thema Proteindatenbank

*zu weiten Teilen übernommen von Sarahs Aufschrieb (23.11.2015)

Sortierung der Files

Überordner XY (Proteinname): R-Markdown Dokumentationsfile (html; Template schicke ich im Anschluss an das Treffen)

- **General Information** (Gegenstand des Modells, Modellstruktur, abgebildete Mechanismen,...)
- **Modell Limitations and Assumptions** (z.B. nur gültig f. eine Isoform, Parameter nicht eindeutig identifizierbar, etc.)
- **Reactions and Kinetics** (Spreadsheet mit Reaktionsgleichungen)
- **Default Parameters** (Spreadsheet mit allen Parametern inkl. Einheit, Quelle und erklärendem Kommentar)
- **Glossary !** (Erklärung aller benutzten Abkürzungen – vor allem Species)
- **References** (alle relevanten Quellen (**BibTeX**) für das Modell mit Links zu Veröffentlichungen)

Unterordner cps: COPASI-File des Modells

- Species haben die gleichen Namen wie in Markdown und weiteren Modell-Files
- Definition einer Global Quantity (oder Species) "active fraction" (XY_{act} / XY_{tot})
- Definition eines Reports für die Task "Time course" (Modellzeit plus Konz. aller Species plus active fraction), Output-File hat denselben Namen wie das Model (plus „.txt“), im Header Liste mit den angewandten Parameterwerten
- Definition aller Parameter als Global Quantities – dadurch genauere Benennung der Parameter

Unterordner R: an C-Files gekoppelte R-Files (evtl. eigenständiges R-Modell sofern vorhanden)

- Beinhaltet Liste mit Parametern (param; Anfangskonzentrationen, Volumen, Reaktionsraten, Hillkoeffizienten, Km-Werte,...); wenn Parameter nicht definiert, Abruf aus Default-Liste (bei den C-gekoppelten Files in der *coupleProtein-Function* in R hinterlegt)
- Calciuminput als dataframe (Zeit plus Calciumkonz.)
- Output als dataframe (Modellzeit plus Konz. aller Species plus active fraction)

Unterordner src: C-File (gekoppelt an R-Files)

- Auf Rundungsfehler bei der Parameterübergabe achten

Allgemeines:

- Standardeinheiten f. die Modelle sind [s], [nM] und [L]
- Zeit = time; Cytosol. Calcium = Ca_cyt; aktiviertes Protein = XY_act; inaktiviertes Protein = XY_inact
- Code soll klar strukturiert sein, vor allem Abweichungen vom Template gut kommentieren

Nächste Schritte:

- Teilen des Beispiels (Template – gemeinsamer GitHub-Ordner)
- Änderungsvorschläge aufnehmen und einbinden
- Anpassung weiterer Proteinmodelle (Clara, Martin, Sarah, Sonja, Yujiang)
- Veröffentlichung der Datenbank auf GitHub
- Publikation (Thema: Vorstellung der Datenbank plus Analyse der Proteinmodelle)

(gerne kümmere ich mich um einen einheitlichen Code nach einer erklärenden Markdown-Dokumentation)