

# Vorbereitung eines webbasierten Tools für die Interaktomanalyse zwischen Medikament und biologische Ziele

## Hintergrund:

In einem industriellen Gemeinschaftsprojekt haben wir zuvor ein webbasiertes COmparison of INteractomeS (COINS) unter Verwendung des R Shiny Dashboards entwickelt. Das Tool bietet eine interaktive Umgebung zur Visualisierung bioaktiver Verbindungen und ihrer biologischen Ziele aus natürlichen Arzneimitteln. Wir planen, die App mit automatisierten Modulen für die Erstellung von Arzneimittelinteraktomen aus verschiedenen hochmodernen öffentlichen Datenbanken sowie für die Analyse von Arzneimittelinteraktomen in verschiedenen Krankheitskontexten zu erweitern. Die App wird von dem Unternehmen verwendet, um Entscheidungen über neue Arzneimittelformulierungen zu treffen, ohne dass die Wirksamkeit des Medikaments beeinträchtigt wird. Ein Beispiel für eine Schnittstelle ist in Abbildung 1 unten dargestellt:

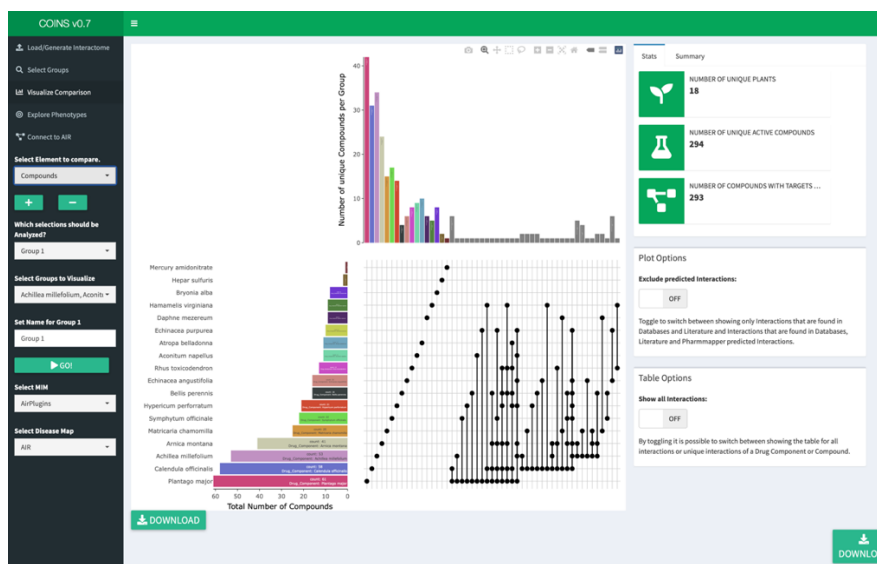


Abbildung 1: Ein Schnappschuss der mit R Shiny Dashboard entwickelten COINS-App.

Der Arbeitsablauf der aktuellen COINS-App-Implementierung ist in Abbildung 2 unten dargestellt:

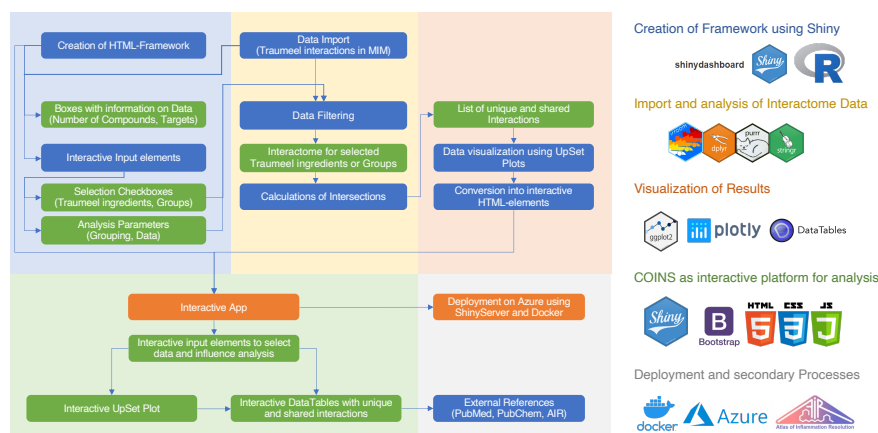


Abbildung 2: Der Arbeitsablauf bei der Entwicklung der COINS-App. Auf der rechten Seite sind verschiedene R-Pakete, Bibliotheken und Frameworks dargestellt, die zur Vorbereitung der COINS-App verwendet werden.

**Motivation:**

Die COINS-App kommuniziert mit verschiedenen anderen Anwendungen, die in unserer Abteilung entwickelt wurden, darunter der Atlas of Inflammation Resolution (AIR). Die aktuelle Backend-Quelldatei wurde über zwei Jahre hinweg ohne angemessene Dokumentation erstellt; daher muss der Code besser strukturiert werden. Wir sind gerade dabei, unsere Tools auf die neueste Python-Umgebung zu migrieren. Daher wird das Team, das an diesem Softwareprojekt arbeitet, über eine gebrauchsfertige Vorlage verfügen, die in R entwickelt wurde, und an dem neuen Visualisierungsschema in Python arbeiten, wobei es häufig mit unseren Industriepartnern zusammenarbeitet. Das Team wird nicht nur an der Programmierung beteiligt sein, sondern auch den Einsatz der Anwendung in einer industriellen Umgebung erlernen.

**Voraussetzungen:**

Grundkenntnisse in der Programmiersprache Python und/oder R. Interesse an Softwareentwicklungsprojekten in einer kollaborativen Umgebung.

**Lernziele:**

- Sie werden lernen, ein Dashboard mit Python und Dash zu erstellen.
- Sie lernen, eine API für verschiedene webbasierte Ressourcen zu Verbindungen und ihren Zielen zu entwickeln.
- Sie lernen verschiedene statistische Methoden und deren Implementierung in Python zur Datenintegration und -analyse kennen.
- Sie lernen den Prozess der Softwaredokumentation kennen und verstehen die Kundenerwartungen während des Lebenszyklus der Softwareentwicklung.
- Sie lernen den Einsatz der Anwendung auf einem Webserver und/oder einer Cloud-Computing-Plattform.

**Kontakt:**

Shailendra Gupta	<a href="mailto:Shailendra.gupta@uni-rostock.de">Shailendra.gupta@uni-rostock.de</a>
Kristian Schultz	<a href="mailto:Kristian.schultz@uni-rostock.de">Kristian.schultz@uni-rostock.de</a>
Olaf Wolkenhauer	<a href="mailto:Olaf.wolkenhauer@uni-rostock.de">Olaf.wolkenhauer@uni-rostock.de</a>

## Preparation of a web-based tool for drug-biological target interactome analysis

### Background:

In a collaborative industrial project, we have previously developed a web-based COmparison of INteractomeS (COINS) using the R Shiny dashboard. The tool provides an interactive environment to visualize bioactive compounds and their biological targets from natural medicines. We plan to upgrade the app with automated modules for creating drug-interactome from various state-of-the-art public databases along with the analysis of drug interactomes in various disease-context. The app is used by the company to make decisions on new drug formulas without losing drug efficacy. A sample interface is shown in Figure 1 below:

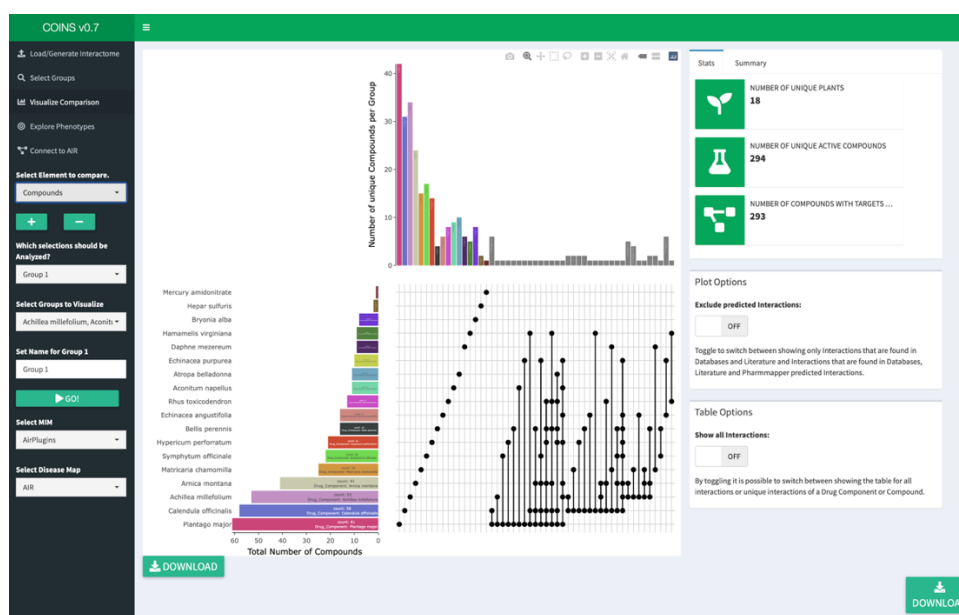


Figure 1: A snapshot of the COINS app developed using R Shiny Dashboard.

The workflow of the current COINS app implementation is shown in Figure 2 below:

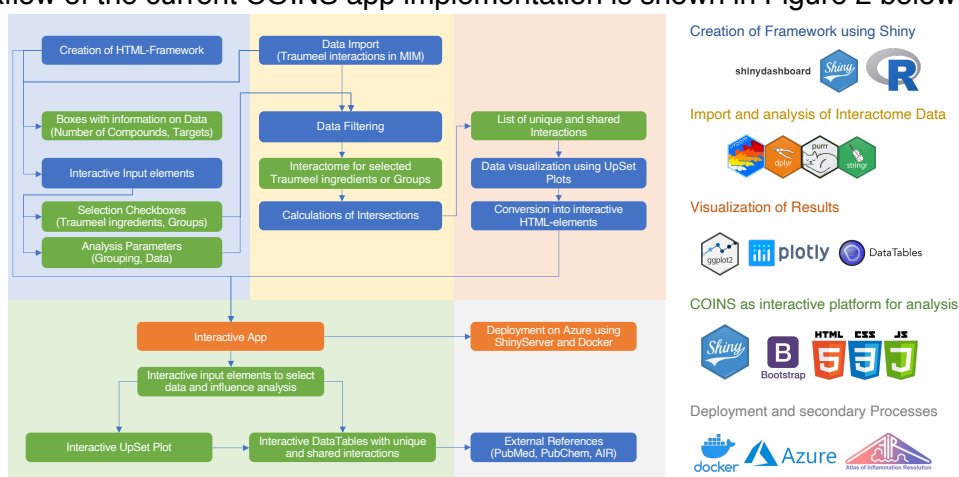


Figure 2: The COINS app development workflow. Various R packages, libraries, and frameworks used to prepare the COINS app are shown on the right.

### Motivation:

The COINS app communicates with various other applications developed in our department, including the Atlas of Inflammation Resolution (AIR). The current backend source file has been generated over 2 years without proper documentation; thus, the code needs to be better

structured. We are in the process of migrating our tools to the latest Python environment. Thus, the team working on this software project will have a ready-to-use template developed in R and work on the new visualization schema in Python with frequent interactions with our industrial partners. The team will not only be involved in the programming but also learn the deployment of the application in an industrial environment.

**Requirement:**

Basic knowledge of Python and/or R programming language. Interest in software development projects in a collaborative environment.

**Learning Goals:**

- You will learn to build a dashboard using Python and Dash.
- You will learn to develop API for various web-based resources on compounds and their targets.
- You will learn various statistical methods and their implementation in Python for data integration and analysis.
- You will learn the software documentation process and understand client expectations during the software development life cycle.
- You will learn the deployment of the application on a web server and/or cloud computing platform.

**Contact:**

Shailendra Gupta	<a href="mailto:Shailendra.gupta@uni-rostock.de">Shailendra.gupta@uni-rostock.de</a>
Kristian Schultz	<a href="mailto:Kristian.schultz@uni-rostock.de">Kristian.schultz@uni-rostock.de</a>
Olaf Wolkenhauer	<a href="mailto:Olaf.wolkenhauer@uni-rostock.de">Olaf.wolkenhauer@uni-rostock.de</a>