

X-Letter

21

SYBIT

Hilfe bei Datenverwaltung
und Entwicklung neuer
Programme

01

DYNAMIX

Darstellung dynamischer
Prozesse dank innovativer
Technologien

04

NEUROCHOICE

Verfahren ermöglicht
Darstellung neuronaler
Aktivität

07

SyBIT – Systembiologie IT und mehr



Das fast vollständige SyBIT Team, anlässlich des ersten SyBIT Retreats auf der Rigi.

Bild: Peter Kunszt

Peter Kunszt, Projektleiter SyBIT
Alle kennen den Large Hadron Collider (LHC) am CERN und viele haben schon von den unglaublich grossen Datenmengen gehört, die in den riesigen Detektoren 100 Meter unter der Erde bei Genf produziert werden. Die Physiker haben mehrere Jahre gebraucht, um für die Analyse dieser Datenflut eine als Worldwide LHC Computing Grid (WLCG) bezeichnete Infrastruktur aufzubauen. Praktisch alle Rechenzentren für Hochenergiephysik in der ganzen Welt sind an diesem Projekt beteiligt.

Die Nadel im Heuhaufen

Auf nationaler Ebene hat SystemsX.ch mit der Aussicht auf eine ähnlich grosse Daten-

menge eine vergleichbare Herausforderung wie das CERN. Das Problem in der Biologie ist in vieler Hinsicht jedoch komplizierter als jenes in der Physik. Am CERN erhalten die Forscher von vier Instrumenten ähnliche, gut verstandene Datensätze. Im Vergleich dazu produziert bei SystemsX.ch eine Vielzahl verschiedener Instrumente (darunter sogar experimentelle Neuentwicklungen) unterschiedliche, häufig noch nicht gut verstandene Daten. Ein Grossteil der Forschung von SystemsX.ch befasst sich mit der Auswertung dieser Daten, um die ihnen zugrundeliegenden biologischen Prozesse zu verstehen.

In der Physik versucht man, in der Datenflut einige sehr seltene und interessante Ereignisse zu finden – vergleichbar mit der

Fortsetzung auf Seite 2

Wird die Biologie zu einer Computerwissenschaft?

Ralph Schlapbach, Functional Genomics Center Zürich

Um das menschliche Genom zu entschlüsseln, haben Technologien genügt, die aus heutiger Sicht nicht sehr komplex waren, viele manuelle Prozesse einschlossen, in ihren Abläufen beinahe mechanisch anmuteten und dabei eine nur geringe Datenmenge produzierten.

Demgegenüber lassen ihre heutigen Hightech Nachfolger einen automatisierten Ablauf hochparalleler Analyseprotokolle zu und produzieren Daten in bis vor kurzem unvorstellbaren Mengen und von hoher Komplexität. Deren Verwaltung, Verarbeitung, Analyse und Interpretation stellt eine enorme Herausforderung dar. Eine Problematik, die heute gleichermassen auf viele in den Biowissenschaften angewandte Technologien und Methoden zutrifft. Denn immer häufiger werden beispielsweise schnelle bildgebende Verfahren mit quantitativer Massenspektrometrie kombiniert oder breit angelegte funktionelle Tests mit Messungen von Stoffwechselprodukten verknüpft - jede beliebige Kombination molekularer und funktioneller Daten ist heutzutage denk- und auch weitgehend machbar.

Erst die Verbindung des Fachwissens der Biologen mit dem

Fortsetzung auf Seite 3

Fortsetzung von Seite 1



SyBIT
SystemsX.ch
Biology IT

berühmten Suche nach der Nadel im Heuhaufen.

Ganz anders in der Systembiologie: man sucht komplexe Muster mit Hilfe diverser statistischer und rechengesteuerter Methoden, um neue Theorien und Modelle zu entwickeln oder um bestehende Modelle zu überprüfen.

Umfassender Service

Das SyBIT Projekt hat, ähnlich wie das WLCG, das Ziel, die Wissenschaftler in ihrer datenintensiven Arbeit zu unterstützen – von der Datenproduktion am Instrument über die Validation, Analyse und Auswertung der Daten, bis hin zur Publikation. Zwar ist die Grundidee von SyBIT nicht neu, aber es ist das erste Projekt das sich ausschliesslich mit Systembiologie befasst und gesamtschweizerisch agiert. SyBIT ist keine neue eigenständige Organisation, sondern ein Projekt, das eng mit allen Gruppen zusammenarbeitet, die solchen Support zu einem grossen Teil vor Ort leisten (siehe Box). SyBIT ist eine angegliederte Partnergruppe des Swiss Institute of Bioinformatics (SIB), das bereits in der ganzen Schweiz institutsübergreifend

vorhanden ist. Daher profitiert das Projekt von vielen bestehenden Strukturen.

SyBIT baut auf dem Wissen und der Erfahrung seiner Partner auf und befähigt sie, die Probleme von SystemsX.ch gemeinsam anzugehen und gegenseitig Wissen auszutauschen. Eine Kernaufgabe von SyBIT ist es deshalb, die Kommunikation zwischen den Gruppen aufrechtzuerhalten und sicherzustellen, dass die nötige Infrastruktur, Werkzeuge und Programme überall vorhanden sind. Gleichzeitig soll vermieden werden, dass diese von jeder Gruppe einzeln und unabhängig voneinander bereitgestellt werden. Vielmehr sollen die Gruppen voneinander profitieren und sich gegenseitig helfen.

SyBIT platziert die Mitarbeiter jeweils direkt in den Teams der lokalen Gruppen, welche bereits eng mit den zu unterstützenden Wissenschaftlern zusammenarbeiten.

Arbeiten nach Mass

Um sicherzustellen, dass die Werkzeuge und Programme, die SyBIT bereitstellt und unterstützt, von den Wissenschaftlern effektiv genutzt werden können, werden die SyBIT Projekte jeweils gemeinsam mit den beteiligten Forschungsgruppen aufgesetzt. In diesen Projekten geben die

Wissenschaftler den Ton an: sie legen fest, was für sie gemacht werden muss und sie bewerten die Resultate direkt, weil sie die Programme sofort verwenden können. Im ersten Jahr wurden in SyBIT gezielt nur Projekte mit einer kurzen Laufzeit (3-5 Monate) aufgesetzt. Somit konnten die wichtigsten Probleme fokussiert angegangen und die vielseitigen Bedürfnisse der Wissenschaftler evaluiert werden. Dieser Ansatz war sehr erfolgreich. Dadurch konnte erörtert werden, wo zusätzliche Leute nötig sind und gleichzeitig wurden wertvolle Kontakte zu den Wissenschaftlern geknüpft. In der Folge wurden schweizweit rund 10 neue IT-Fachleute angestellt.

Gute Erfahrungen

Die ersten Projekte haben gezeigt, dass es sehr sinnvoll ist, die Benutzer je nach verwendeten Technologien in Gruppen einzuteilen. Wir haben im November letzten Jahres anlässlich des SystemsX.ch-Tages in Bern mehrere kurze Diskussionen geführt, welche den einzelnen Technologien gewidmet waren: Proteomik, Genomik, Screening und Modellierung. Ausser im Fall der Modellierung zeigte sich, dass vielerorts tatsächlich dieselben Technologien und Programme verwendet werden und dass

alle an einer Standardisierung und dem Austausch von Informationen interessiert sind. Seitdem haben wir bereits einige «Community-Projekte» angefangen, die die Probleme von mehr als einem Institut von SystemsX.ch lösen sollten (siehe SyBIT Werkzeuge).

Wichtiger Partner

Aber SyBIT ermöglicht noch einiges mehr: Wir helfen bei der Planung und Bereitstellung der nötigen lokalen Computer-Infrastruktur. Zudem stellt SyBIT seine Dienste zur Verfügung, um die Zusammenarbeit örtlich getrennter Gruppen zu erleichtern. Dazu gehören beispielsweise E-mail-Listen, Wiki-Seiten, öffentliche und gruppeninterne Webseiten etc. SyBIT ist auch verantwortlich für die Zusammenarbeit mit ZORA, dem «Zürich Open Repository and Archive» der Universität Zürich, bei dem im Sinne von Open Access die Forschungsergebnisse von SystemsX.ch weltweit offen zugänglich gemacht werden.

Die Leistung von SyBIT lässt sich wie folgt auf den Punkt bringen: SyBIT ist ein wichtiger Partner für die Forschungsgruppen, der die wissenschaftlichen Arbeiten ermöglicht, unterstützt und für die Zukunft sicherstellt.

Fortsetzung auf Seite 3

SyBIT Fakten

Mehr unter: <https://wiki.systemsx.ch/display/sybit>

SyBIT ist ein Projekt, das von SystemsX.ch ins Leben gerufen wurde. Es ist kein klassisches Forschungs- oder Entwicklungsprojekt, sondern ein unterstützendes Supportprojekt. SyBIT hat in der Periode von 2009 bis 2011 6.9 Millionen CHF zur Verfügung.

Dieses Budget wird vor allem für Personal in den mitwirkenden Instituten aufgewendet. Zudem soll damit die Infrastruktur von SystemX.ch unterstützt werden. Die Institute in SyBIT sind (alphabetisch aufgelistet):

- Bioinformatics and Biostatistics Core Facility – EPFL in Lausanne
- Biozentrum – Universität Basel und SIB
- Center for Information Science and Databases – ETH Zürich, D-BSSE Departement in Basel
- Friedrich Miescher Institut in Basel
- Functional Genomics Center Zurich – Universität Zürich und ETH Zürich
- Institut für Molekulare Systembiologie – ETH Zürich

- Light Microscopy Center – ETH Zürich
- Vital-IT – Swiss Institute of Bioinformatics in Lausanne

Diese Liste wird wahrscheinlich noch wachsen, je nachdem wie viele neue Gruppen SystemsX.ch noch beitreten werden. Die SyBIT Projektleitung teilt ihren Sitz mit dem SystemsX.ch Management Office in Zürich. Der Projektleiter, Peter Kunszt, und seine Stellvertreterin, Ela Hunt, sind sehr häufig an den SyBIT Partner-Instituten in Basel, Lausanne und Zürich anzutreffen.

Das SyBIT Team, zu dem wir alle Personen zählen, die auf SyBIT Projekten arbeiten, zählt über 20 Leute. Nicht alle werden von SyBIT bezahlt, manche sind direkt bei unseren Partnern angestellt oder gehören zu den anderen SystemsX.ch Projekten. Das gesamte Team trifft sich vierteljährlich, um über Probleme zu diskutieren, sich auf dem Laufenden zu halten und um neueste Trends zu besprechen.

SYSTEMSX.CH NEWS

Neue «Interdisciplinary Pilot Projects» (IPP) und «Bridge to Industry Projects» (BIP) bestätigt

Der Wissenschaftliche Führungsausschuss von Systems.ch hat die sieben im Januar 2010 eingereichten IPP begutachtet. Folgendes Projekt wurde ausgewählt und erhält für ein Jahr finanzielle Unterstützung:

«Multidimensional genome organization: correlating 5C and SIM» von Susan Gasser (FMI) und Andrzej Stasiak (Unil)

Zudem wurde das am 1. Februar 2010 eingereichte «Bridge to Industry» - Projekt anerkannt. Dieses Projekt trägt den Titel

«Development and Application of CHIP-LC-MS Technology for Systems Biology Research»,

läuft ein Jahr und wird in Zusammenarbeit von Bernd Wollscheid (ETHZ) und Agilent Technologies durchgeführt.

Eine Entscheidung seitens des Schweizer Nationalfonds bezüglich der 21 im Januar eingereichten «IPhDs» wird auf Juli 2010 erwartet.

Fortsetzung von Seite 2

SyBIT Werkzeuge

Wir stellen den Wissenschaftlern in SystemsX.ch mehrere Werkzeuge und Programme zur Verfügung. Dazu gehört sowohl kommerzielle als auch «open source» (also frei zugängliche) Software. Wir unterstützen nur Programme, für die genug Bedarf seitens der SystemsX.ch Forschungsgruppen besteht. Häufig gibt es viele verschiedene konkurrierende Programme mit identischer Funktionalität – wir versuchen jeweils die besten auszuwählen, wobei wir nicht nur auf Funktionalität, sondern auch auf eine möglichst einfache Verwendung und unkomplizierten Support Wert legen.

Wir stellen kurz zwei Programme aus unserer «Werkzeugkiste» vor: Einerseits die verwendeten Datenverwaltungs-Systeme, um die Übersicht über Rohdaten zu behalten und mit Anmerkungen zu versehen (openBIS), andererseits ein Werkzeug, mit dem Screening-Daten automatisch ausgewertet werden können (iBRAIN). Beide Programme existierten schon vor der Gründung von SyBIT.

OpenBIS wurde am «Center for Information and Science Databases» (CISD) der ETH Zürich in Basel entwickelt. Es wird be-

reits in mehreren SystemsX.ch Projekten und Partnerinstituten bei der täglichen Datenverwaltung verwendet. Dies ist das Resultat mehrerer SyBIT Projekte. SyBIT unterstützt die Entwicklung von openBIS mit mehreren Personen vor Ort am CISD. Dadurch wird ermöglicht, dass das System an die verschiedenen Bedürfnisse der SystemsX.ch Institute angepasst wird. OpenBIS ist sehr flexibel in der Konfiguration sowie im Ausbau und kann deshalb in vielen Projekten für verschiedene Arten von Daten verwendet werden. Es findet in den Bereichen der Proteomik, Metabolomik, Screening und Genomik bereits Anwendung. An einer Konfiguration für Cytometrie und Mikroskopie wird noch gearbeitet.

iBRAIN System wurde von Berend Snijder, einem Doktoranden von Prof. Lukas Pelkmans an der ETH Zürich entwickelt. Mehrere andere Institute haben bereits ihr Interesse an diesem Programm angemeldet, das täglich in Prof. Pelkmans' Gruppe Verwendung findet. iBRAIN ist jedoch sehr spezifisch auf die Gegebenheiten dieser Gruppe zugeschnitten und kann nicht einfach in einem anderen Institut installiert werden. Das ist recht häufig bei Programmen der Fall, die von den Wissenschaftlern

selbst entwickelt werden. Zudem schliesst Berend Snijder seine Doktorarbeit in Kürze ab und kann somit das System nicht weiter betreuen. SyBIT arbeitet nun daran, eine einfach zu installierende iBRAIN Version zu entwickeln, die zudem auch von uns betreut werden kann. Ausserdem wird das neue iBRAIN so ausgelegt sein, dass auch zukünftige Analysen einfach hinzugefügt werden können, ohne grosse Neugestaltung des Systems. SyBIT arbeitet dabei eng mit allen Laboratorien zusammen, die Interesse an dem Projekt zeigen und es verwenden

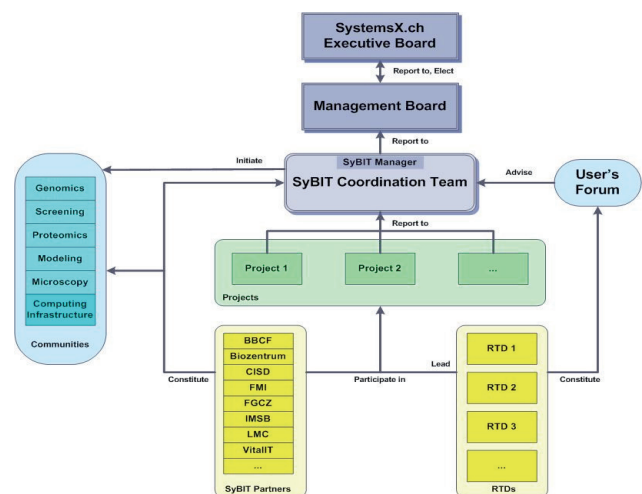
Fortsetzung von Seite 1

Wird die Biologie...

der Computer- und Informationswissenschaftler erlaubt es, die riesigen Datenmengen sinnvoll zu verarbeiten und zu analysieren, um schliesslich die zugrundeliegenden Mechanismen und die Schlüsselfaktoren eines biologischen Systems verstehen zu können. Auch wenn die Biologie nie zu einer reinen Computerwissenschaft wird, kann die Komplexität biologischer Prozesse nur durch die computergestützte Integration der molekularen und funktionellen Ebenen verstanden werden.

möchten.

Die «Werkzeugkiste» von SyBIT ist erweiterbar und passt sich stets den Bedürfnissen der Forscher an. Neue Programme können jederzeit aufgenommen werden, insbesondere wenn mehrere SystemsX.ch Institute Interesse daran zeigen. Wie im Fall von iBRAIN sind wir auch gerne bereit, bestehende Programme, die von den Wissenschaftlern selbst geschrieben wurden und für die ein Interesse seitens weiterer Forscher besteht, aufzuwerten, weiterzuentwickeln und der gesamten Forschergemeinde zur Verfügung zu stellen.



Die Projektstruktur von SyBIT. SyBIT und die SystemsX.ch RTD-Projekte bilden die SyBIT Projektteams, die von den Wissenschaftlern geleitet werden. Das Koordinationsteam besteht aus den lokalen Teamleitern und dem SyBIT Projektleiter. Die Communities (links) und das Benutzerforum (rechts) sind dazu da, um zu gewährleisten, dass SyBIT optimal mit den Wissenschaftlern vernetzt und ihre Prioritäten möglichst wirksam umgesetzt werden. Grafik: Peter Kunszt