

TEME SEMINARSKIH NALOG S PODROČJA RAČUNSKE BIOLOGIJE

SPLOŠNA NAVODILA

Izdelava seminarских nalog poteka v skupinah (na 2. stopnji v skupinah treh študentov, na 3. stopnji pa v skupinah dveh študentov), ki ste jih oblikovali na predavanjih. Seminarske naloge obsegajo sledeče aktivnosti:

- analiza relevantne literature,
- programiranje in testiranje razširitvenih modulov za orodje *Computational Biology Workspace (CBW)*,
- vzpostavitev testnih modelov,
- analiza simulacijskih rezultatov na podlagi vzpostavljenih modelov,
- pisanje poročila.

Oddana seminarska naloga naj vsebuje:

- poročilo (cca. 20 strani),
- ustrezno dokumentirano izvorno kodo sprogramiranih modulov,
- ustrezno dokumentirano izvorno kodo vzpostavljenih modelov,
- predstavitev v PowerPointu (10 minut).

Poročilo seminarske naloge naj vsebuje:

- opis problema s ključnimi izsledki iz pregledane literature,
- opis implementirane rešitve oziroma sprogramiranih modulov,
- navodila za uporabo sprogramiranih modulov,
- možne razširitve sprogramiranih modulov,
- opis demonstracijskega problema,
- primerjava z rezultati iz pregledane literature,
- zaključki.

Rok za oddajo seminarske naloge za vse skupine je 10.1.2013 (do 8:00 zjutraj). Zagovori seminarских nalog bodo potekali v okviru laboratorijskih vaj.

TEME SEMINARSKIH NALOG

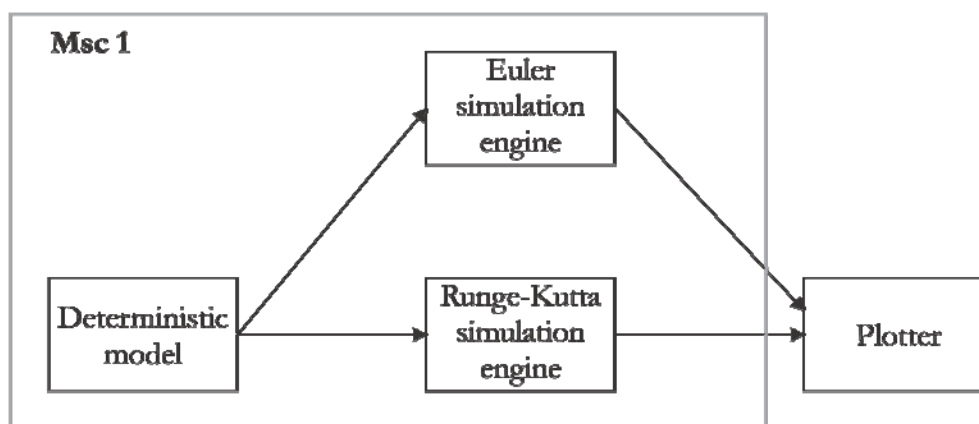
Teme seminarских nalog na 2. stopnji so označene z **MSc**, na 3. stopnji pa s **PhD**.

MSc 1 RAZŠIRITEV PODPORE ZA DETERMINISTIČNO SIMULIRANJE BIOLOŠKIH SISTEMOV (ZIDAR, BINDAS, MAJCEN)

- preučite osnovno literaturo s področja determinističnega modeliranja bioloških sistemov,
- razširite že implementirane gradnike v orodju CBW, tako da bodo podpirali možnost vključitve enačb različnih tipov (npr. Hilllove enačbe, Michaelis-Menten kinetika...) v deterministične modele
- razširite simulacijsko okolje, da bo podpiralo poganjanje simulacij na osnovi teh modelov,
- razširite simulacijsko okolje, da bo podpiralo reševanje diferencialnih enačb tako z Eulerjevo metodo kot tudi z metodo Runge-Kutta (metodi naj bosta implementirani v ločenih modulih: gradnika "Euler Simulation Engine" in "Runge-Kutta Simulation Engine").
- implementirani gradniki naj bodo kompatibilni z že obstoječimi gradniki v orodju CBW (*Plotter*).

Osnovno gradivo:

- M. Moškon, *Modeli in metrike dinamike preklopa v enostavnih bioloških sistemih za potrebe računalniških struktur prihodnosti* (2012). Doktorska disertacija na voljo na naslovu: <http://eprints.fri.uni-lj.si/1804/>
- U. Alon, *An Introduction to Systems Biology: Design Principles of Biological Circuits*, Chapman & Hall/CRC Mathematical & Computational Biology, 2007.



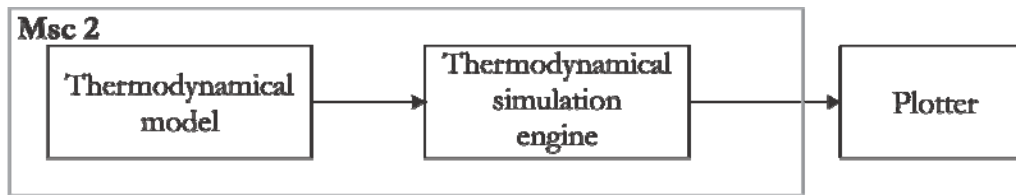
MSc 2 VGRADNJA PODPORE ZA TERMODINAMIČNO MODELIRANJE (BEŠIR, PETRUNOV)

- preučite osnovno literaturo s področja termodinamičnega modeliranja bioloških sistemov,
- v orodju CBW implementirajte gradnik, ki omogoča vzpostavitev termodinamičnih modelov,

- v orodju CBW implementirajte gradnik "Thermodynamic Simulation Engine", ki naj omogoča poganjanje simulacij nad termodinamičnimi modeli (jedro metode naj bo implementirano v jeziku C)
- implementirani gradniki naj bodo kompatibilni z že obstoječimi gradniki v orodju CBW (*Plotter*).

Osnovno gradivo:

- A. Ay, D. N. Arnosti, *Mathematical modeling of gene expression: a guide for the perplexed biologist*. Crit Rev Biochem Mol Biol. 2011;46(2):137-151.

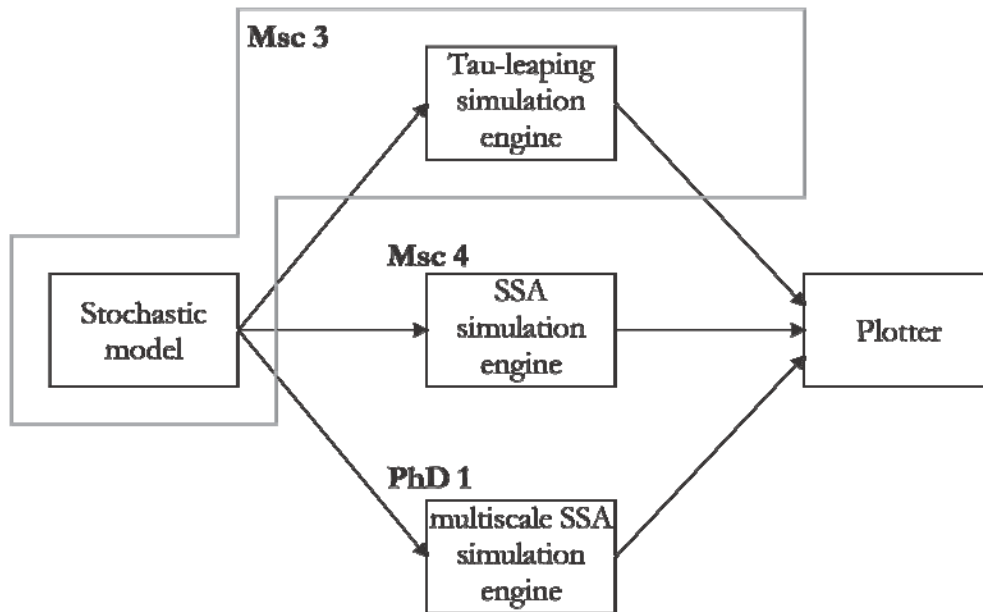


MSc 3 VGRADNJA OGRODJA ZA STOHAŠTIČNO SIMULIRANJE (CIGAN, HARTMAN, RADOVAN)

- preučite osnovno literaturo s področja stohastičnega modeliranja bioloških sistemov,
- v orodju CBW implementirajte gradnik, ki omogoča vzpostavitev stohastičnih modelov,
- v orodju CBW implementirajte gradnik "Tau-leaping simulation engine", ki naj vsebuje implementacijo metode tau-leaping (jedro metode naj bo implementirano v jeziku C)
- implementirani gradniki naj bodo kompatibilni z že obstoječimi gradniki v orodju CBW (*Plotter*).

Osnovno gradivo:

- H. Samad, M. Khammash, L. Petzold and D. Gillespie, *Stochastic modelling of gene regulatory networks*, Int. J. Robust Nonlinear Control 2005; 15:691–711.
- M. Moškon, *Modeli in metrike dinamike preklopa v enostavnih bioloških sistemih za potrebe računalniških struktur prihodnosti* (2012). Doktorska disertacija na voljo na naslovu: <http://eprints.fri.uni-lj.si/1804/>



MSc 4 VGRADNJA PODPORE ZA STOHAŠTIČNO SIMULIRANJE Z ALGORITMOM SSA (RIBIČ, POMPE, MEŽIK)

- preučite algoritem za stohastično simuliranje SSA,
- v orodju CBW implementirajte gradnik "SSA simulation engine", ki naj vsebuje implementacijo metode SSA (jedro metode naj bo implementirano v jeziku C),
- gradnik naj bo kompatibilen z gradnikom za vzpostavitev stohastičnih modelov (glej nalogo MSc 2 in že obstoječimi gradniki v orodju CBW (Plotter)).

Osnovno gradivo:

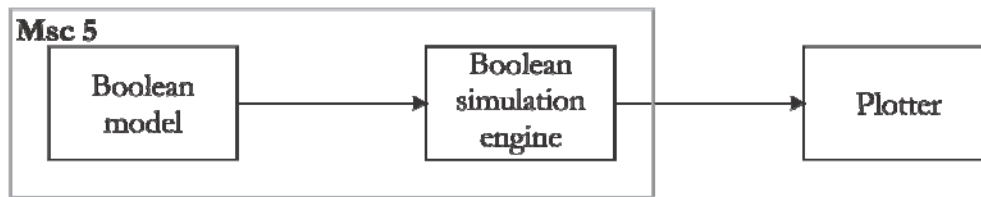
- H. Samad, M. Khammash, L. Petzold and D. Gillespie, *Stochastic modelling of gene regulatory networks*, Int. J. Robust Nonlinear Control 2005; 15:691–711.
- M. Moškon, *Modeli in metrike dinamike preklopa v enostavnih bioloških sistemih za potrebe računalniških struktur prihodnosti* (2012). Doktorska disertacija na voljo na naslovu: <http://eprints.fri.uni-lj.si/1804/>

MSc 5 VGRADNJA PODPORE ZA SIMULIRANJE BIOLOŠKIH SISTEMOV Z BOOLEOVIMI MREŽAMI (ELSNER, MIJUŠKOVIČ, JAGODNIK)

- preučite osnovno literaturo s področja modeliranja bioloških sistemov z Booleovimi mrežami,
- v orodju CBW implementirajte gradnik, ki omogoča vzpostavitev modelov z Booleovimi mrežami,
- v orodju CBW implementirajte gradnik "Boolean simulation engine", ki omogoča poganjanje simulacij nad Booleovimi mrežami (jedro metode naj bo implementirano v jeziku C)
- implementirani gradniki naj bodo kompatibilni z že obstoječimi gradniki v orodju CBW (Plotter).

Osnovno gradivo:

- R.S. Wang, A. Saadatpour and R. Albert, Boolean modeling in systems biology: an overview of methodology and applications, *Phys Biol.* 2012; 9(5).
- H. Jong, *Modeling and Simulation of Genetic Regulatory Systems: A Literature Review*, *Journal of Computational Biology.* 2002; 9(1).

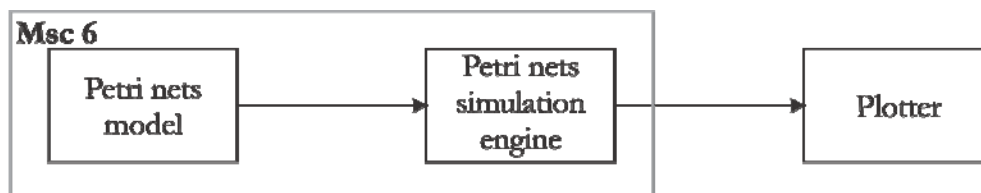


MSC 6 VGRADNJA PODPORE ZA SIMULIRANJE BIOLOŠKIH SISTEMOV S PETRIJEVIMI MREŽAMI (KLEMENC, ŠKERJANC, ROLIH)

- preučite osnovno literaturo s področja modeliranja bioloških sistemov s Petrijevimi mrežami,
- v orodju CBW implementirajte gradnik, ki omogoča vzpostavitev modelov na podlagi Petrijevih mrež,
- v orodju CBW implementirajte gradnik "Petri nets simulation engine", ki omogoča poganjanje simulacij nad Petrijevimi mrežami (jedro metode naj bo implementirano v jeziku C)
- implementirani gradniki naj bodo kompatibilni z že obstoječimi gradniki v orodju CBW (*Plotter*).

Osnovno gradivo:

- C. Chaouiya, *Petri net modelling of biological*, *Briefings in Bioinformatics.* 2007; 8(4).
- L. J. Steggles, R. Banks, O. Shaw and A. Wipat, *Qualitatively modelling and analysing genetic regulatory networks: a Petri net approach*, *Bioinformatics.* 2007; 23(3).



PhD 1 VGRADNJA PODPORE ZA MULTI-TIME-SCALE STOHAŠTIČNO SIMULIRANJE Z ALGORITMOM SSA (---)

- preučite algoritem za stohastično simuliranje SSA in njegovo razširitev za simuliranje v različnih časovnih skalah,
- v orodju CBW implementirajte gradnik, ki omogoča vzpostavitev multi-time-scale stohastičnih modelov
- v orodju CBW implementirajte gradnik "multiscale SSA simulation engine", ki naj vsebuje implementacijo metode SSA z možnostjo simuliranja v različnih časovnih skalah (jedro metode naj bo implementirano v jeziku C),
- implementirani gradniki naj bodo kompatibilni z že obstoječimi gradniki v orodju CBW (*Plotter*).

Osnovno gradivo:

- H. Samad, M. Khammash, L. Petzold and D. Gillespie, *Stochastic modelling of gene regulatory networks*, Int. J. Robust Nonlinear Control 2005; 15:691–711.
- W. E, D. Liu, E. Vanden-Eijnden, *Nested stochastic simulation algorithms for chemical kinetic systems with multiple time scales*, Journal of Computational Physics 2007; 221(1), 158-180.

PhD 2 VGRADNJA PODPORE ZA STABILNOSTNO ANALIZO (BASTL, PAVLIN)

- preučite osnovno literaturo s področja modeliranja bioloških sistemov in literaturo iz področja stabilnostne analize,
- v orodju CBW implementirajte gradnik z implementacijo bifurkacijske analize po Hopfovi metodi (za vsako metodo svoj gradnik),
- gradnik naj bo kompatibilen z determinističnimi modeli,
- računsko zahtevni deli naj bodo napisani v C kodi.

Osnovno gradivo:

- M. Moškon, *Modeli in metrike dinamike preklopa v enostavnih bioloških sistemih za potrebe računalniških struktur prihodnosti* (2012). Doktorska disertacija na voljo na naslovu: <http://eprints.fri.uni-lj.si/1804/>
- J. Bordon, *Kvalitativna analiza bioloških oscilatorjev kot procesnih gradnikov* (2011). Diplomsko delo na voljo na naslovu: <http://eprints.fri.uni-lj.si/1487/>

PhD 3 VGRADNJA PODPORE ZA OBČUTLJIVOSTNO ANALIZO (JANKOVIČ, NAGELJ)

- preučite osnovno literaturo s področja modeliranja bioloških sistemov in literaturo iz področja občutljivostne analize,
- v orodju CBW implementirajte gradnik z implementacijo lokalne občutljivostne analize po metodi "Direct differential method",
- v orodju CBW implementirajte gradnik z implementacijo globalne občutljivostne analize po metodi "Multi-parametric sensitivity analysis (MPSA)",
- računsko zahtevni deli naj bodo napisani v C kodi,
- gradnika naj bosta kompatibilna z determinističnimi modeli.

Osnovno gradivo:

- Z. Zi, *Sensitivity analysis approaches applied to systems biology models*, IET Systems Biology, 5(6), 2011, 336-6

PhD 4 VGRADNJA PODPORE ZA AVTOMATSKO VREDNOTENJE PARAMETROV (SIMČIČ, LONČAR)

- preučite osnovno literaturo s področja modeliranja bioloških sistemov in literaturo iz področja vrednotenja parametrov,
- v orodju CBW implementirajte gradnik, ki omogoča avtomatsko vrednotenje parametrov glede na želeni odziv modela – uporabite genetske algoritme,

- računsko zahtevni deli naj bodo napisani v C kodi,
- implementirani gradnik naj bo kompatibilen z že obstoječimi gradniki v orodju CBW (*Plotter*).

Osnovno gradivo:

- M. Stražar, N. Zimic, M. Mraz, M. Moškon, *A synthetic approach towards building a custom biological circuit*, submitted to Natural Computing (in review)
- J. Sun, J. M. Garibaldi, C. Hodgman, *Parameter Estimation Using Metaheuristics in Systems Biology: A Comprehensive Review*, Computational Biology and Bioinformatics, IEEE/ACM Transactions on , 9(1), 2012, 185-202.

