

BIOLAYOUT Express 3D

BioLayout Express3D ist eine Anwendung speziell entwickelt für die Integration, Visualisierung und Analyse von Großen Netzwerkdiagrammen basierend auf biologischen Daten. Das Programm besitzt die Fähigkeit, große Graphen zu clustern und anzuzeigen im zwei- und dreidimensionalen Raum, wobei die Graphen in einen hochinteraktiven Format gerendert werden. Das Programm unterstützt den Import und die Anzeige von verschiedenen Datenformaten. Eine seiner einzigartigen Fähigkeiten ist die Netzwerkanalyse von Genexpressionsdaten. Des Weiteren kann das Programm die Graphen, die aus verschiedenen Datentypen erzeugt wurden, manipulieren. Es ist plattformunabhängig und läuft auf Windows, Apple Mac oder Unix-Systemen. Es kann Graphen rendern mit bis zu 30000 Knoten und 2-3 Millionen Kanten und erlaubt die Anzeige der Informationen in einem effektiveren Sichtbereich.

Funktionalität und Charakteristika:

Verwendet wird ein Hardware-beschleunigtes OpenGL-Framework, kombiniert mit einem optimierten Layout-Algorithmus und der Fähigkeit des Graphen-Clusterings. Es unterstützt auch die Eingabe von Daten in unterschiedlichen Standartgraphen-Formaten. Die entsprechenden Daten aus beliebigen Quellen können visualisiert werden. Des Weiteren transformiert es Genexpressionsdaten in einen Netzwerk-Graphen, der wiederum auf einem Korrelationsnetzwerk basiert. Große Graphen werden in zwei-oder dreidimensionalem Raum angezeigt und geclustert. Visualisierung von Netzwerken in drei Dimensionen bietet eine schnelle und leistungsfähige Schnittstelle, um die oft komplexen Zusammenhänge zwischen den in der Grafik dargestellten Entitäten zu verstehen.

Tools:

Benutzt wird das Markov-Clustering-Algorithmus und die Programmiersprache Java 1.6. OOP wird für die Graph-Modellierung und Verarbeitung verwendet. Für 2D/3D Graphenpositionierung und Darstellung wird das modifizierte Fruchtermann-Rheingold Layout Algorithmus verwendet. Ferner wird MCL, ein allzweck-Cluster-Algorithmus verwendet. Es stellt einen leistungsfähigen Ansatz zur Unterteilung von Graphen in diskrete Stücke von Genen. Es verwendet die allgemeinen Eigenschaften von Clustern und basiert auf der stochastischen Simulationsfluss in den Graphen und ist sowohl schnell als auch skalierbar.

Das Programm wird benutzt für die Identifikation für orthologen Gruppen, Proteinkomplexen und für die Erforschung von molekularen Pathways.

Formate:

Als Formate werden normalerweise Text-Dateien verwendet, die in der Regel Spalten von Daten repräsentieren. Die Datenpunkte sind durch Tabulatoren getrennt. Jeder Knoten hat eine eindeutige Kennung. Texteingaben werden durch Zitate eingeschlossen (z.B. "Protein Kinase Alpha") Kommentare in der Datei werden nach "///" gesetzt.

Inputformate sind z.B.:

Einfaches mehrspaltige Format (.layout, TXT), das „Reactome OWL-Format“ (.owl), das „Cytoscape SIF-Format“ (SIF), Matrix Dateien (.matrix) und GraphML (.graphml)

Ziel der Arbeit:

Die Netzwerkgraphen repräsentieren die Coexpressionsbeziehungen innerhalb eines Datensatzes. Durch das Clustern der Graphen werden sie in Module von co-exprimierten Genen unterteilt. Mit dem Programm können Biologen den Grad der differentiellen Expression unter unterschiedlichen experimentellen Bedingungen bestimmen. Gene, die die gleiche Funktion haben und eng koexprimiert werden (Ribosomen), formen „Cluquen“ innerhalb eines Netzwerks. Durch das herabsetzen der Korrelationsschwelle wird der Graph immer größer. Mit dem Programm wird eine Schnittstelle für die Exploration und Integration von Daten gestellt.

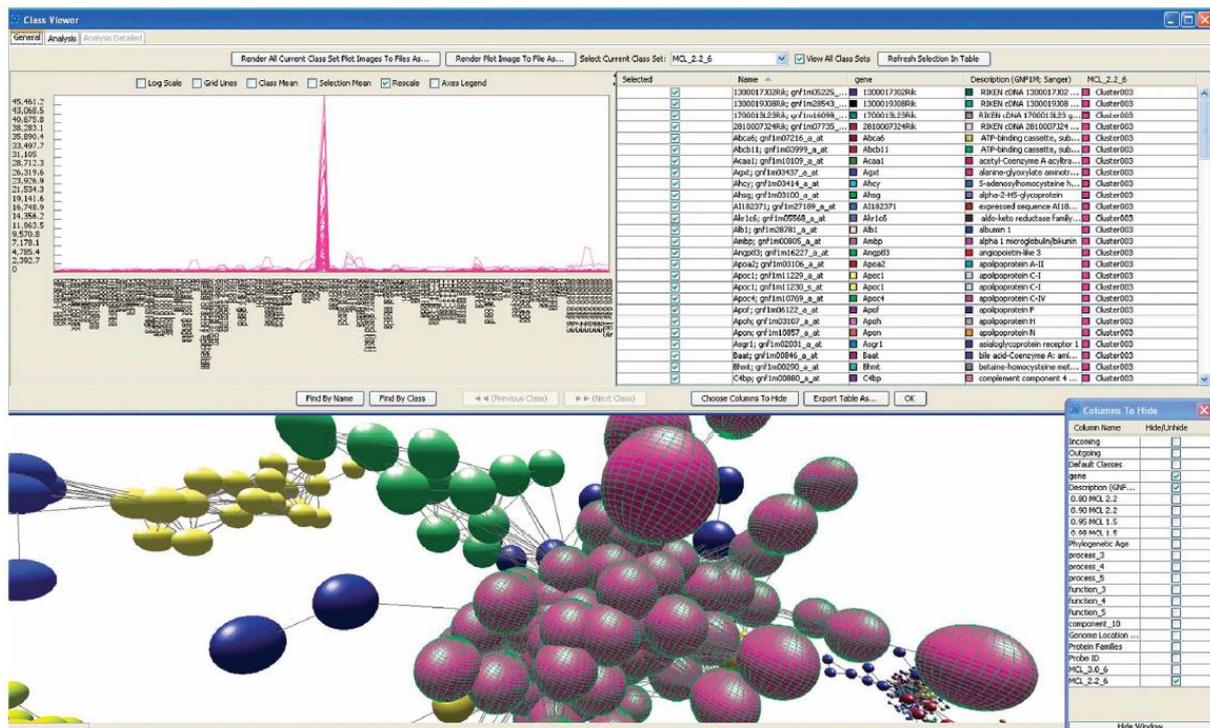


Abbildung 1: Der Class-Viewer

Abschließend lässt sich sagen, dass die Visualisierung von großen Datensets gut funktioniert. Das Netzwerk ist meistens gut navigierbar und die 3D Visualisierung ist nützlich und funktioniert sehr gut. Die Installation auf dem Windowsplattform ist sehr einfach. Die Software ist aber fast ausschließlich für Wissenschaftler geeignet.

Quellen

Paper:

[Theocharidis A., van Dongen S., Enright A.J. and Freeman T.C. Network Visualisation and Analysis of Gene Expression Data using BioLayout Express^{3D}. Nature Protocols 2009; Vol.4 No.10:1535-50.](#)

Internet:

http://www.biobay.com/wp-content/uploads/2013/01/Theocharidis_BioLayoutExpress3D_Protocol_Nature_Protocols_2009.pdf