Webserver und Vorhersage-Tools

Die Speicherung experimenteller Daten wird so organisiert, dass sie so schnell wie möglich und auch langfristig für verschiedene Forschungsgruppen im HKI wie auch von Kooperationspartnern nutzbar gemacht werden zur Modellierung molekularer Netzwerke und somit für die Ableitung wissenschaftlicher Hypothesen und Planung künftiger Experimente. Dafür wird ein "Data warehouse" weiterentwickelt, genutzt und und gewartet für das Management von Daten und Wissen, für die Sammlung, Speicherung, Vorverarbeitung und schließlich standardisierte Primäranalyse von experimentellen Daten, einschließlich von Genom-, Transkriptom- und Proteomdaten sowie biochemischen, mikrobiologischen und klinischen Daten.

VirMiner 147.8.185.62/VirMiner ist ein Software-Tool, das ausführliche, vergleichende Informationen über Phagen in metagenomischen Daten liefert: 1) es identifiziert Phagen-Contigs mit Hilfe eines zuverlässigen, vorab trainierten Modells; 2) es erhält eine vollständige funktionale Annotation für diese Phagen-Contigs; 3) es sagt mögliche Phagen-Wirt-Beziehungen mit Hilfe bestehender Tools voraus; 4) wenn Benutzer zwei Gruppen von metagenomischen Proben hochladen, wird eine nachgeschaltete Analyse zum Vergleich zwischen den verschiedenen Gruppen durchgeführt.

COMAN (**CO**mprehensive **M**etatranscriptome **AN**alysis Webserver): COMAN (<u>sbb.hku.hk/COMAN</u>) ist ein integrierter Webserver für die umfassende funktionelle Untersuchung von Metatranskriptom-Daten. Der Server übersetzt enorme Mengen an Sequenzierereignissen in Tabellen und qualitativ hochwertige Abbildungen. Er erleichtert somit die Beantwortung von biologischen Fragestellungen mit Bezug auf die Mikrobiota für Wissenschaftler mit geringer bioinformatischer Erfahrung. Auch die Auswertung von RNA-Seq-Daten von Mikrobiota wird vereinfacht.

MESSI (Metabolic Engineering Target Selection and Best Strain Identification Tool): MESSI (sbb.hku.hk/MESSI) ist ein Webserver, der effiziente Rahmen und regulatorische Komponenten für biotechnologische Produktionsprozesse mit Hefen vorhersagt. Der Server bietet dem Benutzer eine integrative Plattform für die Analyse von frei verfügbaren high-throughput Metabolomik-Daten. Diese werden dann in Stoffwechselwege umgewandelt, um die leistungsfähigsten S. cerevisiae-Stämme zur Produktion der gewünschten Substanz zu identifizieren.

NutriChem verfügbar unter <u>147.8.185.62/services/NutriChem-2.0</u>, ist eine Datenbank, die durch Textmining von 21 Millionen MEDLINE-Abstracts nach Informationen erstellt wurde, die

pflanzliche Lebensmittel mit ihren niedermolekularen Bestandteilen und menschlichen Krankheitsphänotypen verbinden. NutriChem enthält durch Textmining gewonnene Daten für 18478 Paare von 1772 pflanzlichen Lebensmitteln und 7898 Phytochemikalien sowie 6242 Paare von 1066 pflanzlichen Lebensmitteln und 751 Krankheiten. Darüber hinaus enthält es vorhergesagte Assoziationen für 548 Phytochemikalien und 252 Krankheiten.

FungiFun Charakteristische Muster in Kandidatenlisten werden häufig durch eine Untersuchung der Anreicherung (*enrichment analysis*) ermittelt. FungiFun ist ein benutzerfreundliches Web Tool für die funktionelle Anreicherungsanalyse von Pilzgenen und -proteinen. Das neue Tool FungiFun2 verwendet ein vollständig überarbeitetes Datenmanagementsystem und ermöglicht dadurch Analysen für 298 Pilzstämme, die derzeit in gängigen Datenbanken veröffentlicht sind. FungiFun2 bietet eine moderne Internetschnittstelle und erzeugt interaktive Tabellen, Diagramme und Abbildungen, welche die Nutzer direkt ihren Bedürfnissen entsprechend anpassen können. FungiFun2 sowie Beispiele und Anleitungen sind öffentlich zugänglich unter: https://elbe.hki-jena.de/fungifun/fungifun.php.

DAnIEL (Describing, Analyzing and Integrating fungal Ecology to effectively study the systems of Life): DAnIEL (https://sbi.hki-jena.de/daniel) ist ein Webserver für die Analyse von Pilzgemeinschaften mithilfe des Genom-Markers ITS (Internal transcribed spacer). Eigene Nukleotidsequenzen können hochgeladen und mit bestehenden Projekten ergänzt werden. Anschließend werden automatisch Diagramme zur Häufigkeit und Diversität der Pilze in den Proben erzeugt, welche sich interaktiv individualisieren lassen. Korrelationsnetzwerke und Maschinelles Lernen ergänzen die Analyse. Signifikante Taxa werden für die biologische Interpretation mit einer manuell kuratieren Datenbank annotiert.