

# Abstract

## German

Proteine sind essentielle Elemente in metabolische Prozessen und zellulären Signalkaskaden. Wird die Abfolge der Aminosäuren eines Wildtyp Proteins verändert entsteht ein so genanntes Mutein, welches sich in Struktur und folglich in Selektivität und Funktionalität von seinem Wildtyp unterscheidet. Dies bildet die Grundlage für die Entwicklung von Muteinen, welche individuell für bestimmte katalytische Reaktionen geschaffen werden. Aufgrund des immer größer werdenden Interesses an *maßgeschneiderten* Enzymen im industriellen und medizinischen Bereich, bedarf es einer Applikation, welche es erlaubt Informationen über Muteineigenschaften zu sammeln, zu verwalten und aufzubereiten.

Im Zuge dieser Arbeit wurde unter den Aspekten der Modellgetriebenen Softwareentwicklung eine dreischichtige Java Enterprise Webapplikation entwickelt, welche es ermöglicht die spezifische Aktivität von Enzymen bei der Umsetzung eines bestimmten Substrats in ein oder mehrere Produkte zu erfassen, zu analysieren, zu verwalten und zu präsentieren. Verschiedene Suchmechanismen erlauben es, gezielt nach bestimmten Enzymen und den damit verbundenen katalytischen Reaktionen zu suchen. Aus den Ergebnissen lassen sich einfach jene Enzyme extrahieren, welche ein bestimmtes Substrat am besten katalysieren.

Die dreischichtige Applikation setzt sich aus einer Oracle Datenbank in der Datenehaltungsschicht und dem Anwendungsserver JBoss in der Logikschicht zusammen. Die Präsentationsschicht, die Benutzeroberfläche basiert auf JavaServer Faces, AJAX und JBoss Seam.

**Stichwörter:** Protein, Mutein, Katalyse, Drei-Schichten-Architektur, MDA, JEE

# Abstract

## English

Proteins are essential elements in metabolic processes and cellular signalling cascades. Modifications of their constituting amino acid sequences can have serious effects on structure and hence on selectivity and overall functionality of an enzyme. Proteins with changes in their sequential amino acid order are called muteins. In recent years the interest of the medical science community and biotechnology companies in tailor-made muteins for particular catalytic reactions increased dramatically. Therefore, an application was needed that enables storage, maintenance and retrieval of mutein related properties.

In the course of this thesis a three tiered Java Enterprise web application for the management of mutein data was developed based on the model driven software development paradigm. The application provides features for data collecting, maintenance, analysis and presentation of specific activities related to protein as well as mutein data related to the catalysis of a particular substrate into at least one product. Different search mechanisms simplify retrieval specific of enzymes and their related catalyses. Enzymes which catalyse a reaction best can be easily extracted from the search result.

The three tiered Java Enterprise application comprises an Oracle database at the back end and a JBoss application server at the business layer. Business logic is encapsulated in EJB3 and the web interface is built on JavaServer Faces, AJAX and JBoss Seam.

**Keywords:** Protein, Mutein, Catalysis, Three-Tier-Architecture, MDA, JEE