

Prof. Dr. Knut Reinert

Dr. Roland Krause

Matthias Winkelmann

Patrick Pett

Institut für Informatik

AG Algorithmische Bioinformatik

Algorithmische Bioinformatik

11. Übungsblatt WS 11/12

Abgabe am 9. Februar 2012

Name:

Matrikelnummer:

Übungsgruppe:

1 2 3

Aufgabe 1: Levinthal-Paradox

Good news everyone! Wir haben eine Methode gefunden, die Genauigkeit einer vorhergesagten Proteinstruktur exakt zu berechnen. Wir wollen nun die bisher unbekannte Struktur einer Aminosäuresequenz der Länge 50 finden. Dazu enumerieren wir alle möglichen Strukturen. Für jeden Residue variieren wir dazu die beiden Winkel ϕ und ψ in jeweils 4 Stufen.

Wie lang müssen wir rechnen, wenn unser Algorithmus für jede Struktur eine Sekunde benötigt?

Aufgabe 2: Sequenz und Struktur

Gegeben sind die Sequenzen

TTYKLILNLKQAKEEAIKELVDAGTAEKYIKLIANAKTVEGVWTLKDEIKTFTVTE und

TTYKLILNLKQAKEEAIKEAVDAGTAEKYFKLIANAKTVEGVWTYKDEIKTFTVTE.

- Berechnen Sie die Manhattan-Distanz der Sequenzen. Welche Vermutung ergibt sich über die Strukturen dieser Proteine? Schreiben Sie Ihre Vermutung auf.
- Suchen Sie anschließend in der Protein Database nach Strukturen zu diesen Sequenzen. Zu welchen Folds gehören die beiden Sequenzen.

c) Vergleichen Sie diese mit Ihrer Vorhersage.

Aufgabe 3: Sekundärstrukturvorhersage

Finden Sie die Struktur 3C9L in der Protein Database¹.

- a) Um welches Protein handelt es sich? Welcher Funktion dient es und wo ist es in der Zelle lokalisiert?
- b) Laden Sie die Sequenz herunter und erstellen Sie Kyte-Doolittle-Plots mit verschiedenen Fenstergrößen. Welche Fenstergröße müssen Sie wählen, damit eine Helix die Zellmembran durchspannen kann? Wählen Sie ein gutes Fenster und einen geeigneten Cutoff, um das Protein in hydrophobe und hydrophile Bereiche einzuteilen.
- c) Laden Sie die Struktur im pdb-Format herunter und öffnen Sie sie in einem Betrachter wie PyMol ². Färben Sie Ihre hydrophoben und hydrophilen Teilstücke verschieden ein. Beurteilen Sie Ihre Vorhersagegenauigkeit.

Aufgabe 4: FoldIt

Foldit³ ist ein Spiel zur Proteinstrukturvorhersage mittels des weltbesten Mustererkennungssystems: des menschlichen Gehirns. Installieren Sie die Software und legen Sie ein Benutzerkonto an. Absolvieren Sie das Tutorium und spielen Sie eines der aktuellen Puzzle, bis Sie keine Verbesserung mehr erreichen.

Fügen Sie in Ihren Bericht Links zu Ihren Benutzerseiten ein und beschreiben Sie kurz die Ergebnisse.

¹<http://pdb.org>

²<http://sourceforge.net/projects/pymol/files/Legacy/>

³<http://fold.it>