

Übungen zur Vorlesung Algorithmische Bioinformatik

Freie Universität Berlin, WS 2016/17

Martin Vingron · Annalisa Marsico · Alena van Bömmel · Edgar Steiger · Thimo Wellner

Blatt 14 · Ausgabe am 30.1.2017

Abgabe am 6.2.2017 vor Beginn der Vorlesung

Name:

Matrikelnummer:

Übungsgruppe:

Aufgabe 1 (*35 Punkte; Theorie*). Sie möchten ein theoretisches Spektrum des Peptids

ACLHVR

konstruieren. Nehmen Sie an, dass alle Fragmente eine Ladung von +1 haben.

1. Nehmen Sie an, dass es zwei Peaks mit nominalen m/z -Werten von 172 und 343 im Spektrum gibt. Können diese Peaks vom selben Peptid kommen? Begründen Sie Ihre Antwort.
2. Zeichnen Sie die theoretisch möglichen Bruchstellen, die zu den a -, b -, c - und x -, y -, z -Fragmenten führen, in die Peptid-Strukturformel ein.
3. Berechnen Sie die *mass-to-charge ratios* der folgenden Ionen: $a_3, b_2, b_5, c_4, y_3, y_4$. Nutzen Sie dazu folgende *nominal residual masses*: A: 71, C: 103, L: 113, H: 137, V: 99, R: 156, N-terminale Gruppe: 1, C-terminale Gruppe: 17. Nehmen Sie außerdem an, dass A Residue 1 ist.

Aufgabe 2 (*15 Punkte; Theorie*). Nehmen Sie an, Sie haben folgende Torsionswinkel (ϕ, ψ) einer Sekundärstruktur gegeben:

$(-70, -20), (-72, 60), (-70, 120), (-60, 170), (-65, 125),$
 $(-100, 45), (-100, -65), (-105, -66), (-100, -60)$

1. In der Vorlesung haben Sie eine graphische Veranschaulichung kennengelernt, mit der Sie anhand der Torsionswinkel abschätzen können, ob es sich um eine realistische Struktur handelt. Wie heißt sie? Beschreiben Sie kurz das Prinzip.
2. Welche der oben aufgelisteten Torsionswinkelpaare könnten in einer α -Helix oder in einem β -Strang liegen?

Aufgabe 3 (20 Punkte; Theorie). Gegeben seien zwei 2D-Strukturen A und B mit den folgenden Koordinaten:

$$\begin{aligned} A: & (1,4), (4,1), (4,4) \\ B: & (0,0), (2,0), (3,2) \end{aligned}$$

Die Spalten seien dabei die äquivalenten Punkte in den Strukturen.

1. Berechnen Sie die RMSD zwischen den beiden Strukturen.
2. Berechnen Sie die Massenzentren der beiden Strukturen und verschieben Sie sie so, dass die Massenzentren auf dem Koordinatenursprung liegen. Stellen Sie die neuen Koordinaten in einem Plot graphisch dar.
3. Berechnen Sie nun erneut die RMSD.
4. Welche Möglichkeiten gibt es, um die RMSD weiter zu verringern?

Aufgabe 4 (30 Punkte; Programmieren). Wir möchten nun die Strukturen zweier Proteine¹² vergleichen.

1. Schauen Sie im Kopf der PDB-Dateien oder mit Hilfe der Identifier nach, um welches Protein es sich handelt. Was ist der Unterschied zwischen den beiden PDBs?
2. Implementieren Sie eine Funktion, die den Namen einer PDB-Datei erhält und aus dieser Datei die Koordinaten der C_α -Atome einliest.
3. Sie möchten nun das Massenzentrum des Moleküls zum Koordinatenursprung verschieben. Implementieren Sie dazu eine Funktion, die diese Translation auf den eingelesenen Daten ausführt.
4. Vergleichen Sie nun die beiden Strukturen, indem Sie die RMSD zwischen den C_α -Atome der gleichen Aminosäuren berechnen.

¹Material1: <https://www.molgen.mpg.de/3732991/1a3n.txt>

²Material2: <https://www.molgen.mpg.de/3732999/1gzx.txt>