

Vorträge

1. Sequenzierung
2. Massenspektrometrie
3. Sequence Alignment
4. Multiple Sequence Alignment
5. FASTA und BLAST
6. Fragment Assembly
7. physische und genetische Karten
8. Phylogenetische Bäume
9. Microarrays: Datengewinnung und Vorverarbeitung
10. Analyse von Microarray-Daten: Clustern
11. Röntgenkristallographie und NMR-Spektroskopie
12. Vorhersage von Proteinstrukturen
13. Protein-Chips
14. Der genetische Fingerabdruck
15. Soziale und ethische Aspekte der Bioinformatik

1 Literatur

1. Sequenzierung

Inhalt Erklären der üblichen Verfahren zur Sequenzierung von DNA und RNA (chemische Methode, Kettenabbruchmethode) und der Aminosäuresequenzierung. Beschreiben der Funktionsweise der Gelelektrophorese. Weitere eventuelle Themen: 2D-gelelektrophorese und PAGE

Literatur [Alp98]

2. Massenspektrometrie

Inhalt Vorstellung der Verfahrensweise, Normierung und Analyse, sowie Eingehen auf Festkörper- und hochauflösende Massenspektrometrie und MALDI-MS-Verfahren

Literatur *allgemeine Einführung*
[Boc74] *zum genaueren Nachlesen*
[Leh96] [Bud80]

3. Sequence Alignment

Inhalt Vorstellen der Algorithmen zur Berechnung von lokalen und globalen optimalen Alignments zwischen zwei Sequenzen

Literatur [Gus97] [Len96]: Absch. 6.3; [Gri92]: S. 90-114;
ev. [Wat95]: Kap. 9;

4. Multiples Sequenzalignment

Inhalt Vorstellen der Algorithmen zur Approximation von lokalen und globalen Alignments zwischen mehr als zwei Sequenzen

Literatur [Set97]: Kap. 3.4; [Wat95]: Kap. 10

5. FASTA und BLAST

Inhalt Vorstellen von Sequenzdatenbanken sowie PAM und BLOSSUM und genaue Erläuterung des Sequenzvergleiches, der dort angewendet wird

Literatur [Set97];[Gus97]

6. Fragmentassemblierung

Inhalt Zusammensetzen von Teilsequenzen eines größeren DNA-Stücks unter Berücksichtigung von Fehlern sowie unter Annahme der Korrektheit

Literatur [Set97]: Kap. 4;[Cas]; [Hua96]

7. Genetische und physikalische Karten

Inhalt	Zusammensetzen von größeren DNA-Teilen nur auf Grund ihrer Länge unter Berücksichtigung von Fehlern sowie unter Annahme der Korrektheit
Literatur	[Cas]; [Wat95]: Kap. 6; [Set97]: Kap. 1.5 und 5; [Gus97]: Teil aus Kap. 16
Weitere Links	http://www.forschung-berlin.de/genom/p6.html http://www.uni-hohenheim.de/ipswww/350c/mapping

8. Phylogenetische Bäume

Inhalt	Ermitteln von Stammbäumen, die dabei auftretenden Problem und approximative Lösungen dafür
Literatur	[Set97]: Kap. 6; [Gus97]; [Wat95]

9. Microarrays: Datengewinnung und Vorverarbeitung

Inhalt	Vorstellung verschiedener Arten von Microarrays, ihrer Herstellung und der Datengewinnung. Erläuterung eines genetischen Algorithmus' zur Bestimmung von Sonden
Literatur	[Bow99]; [PB99]; [Kel98]; [Hac99]; Das Affymetrix Benutzerhandbuch
Weitere Links	www.affymetrix.com

10. Analyse von Microarrays: Clustern

Inhalt	Vorstellung von verschiedenen Clusterverfahren - Selbstorganisierende Karten (SOMs) sowie hierarchisches und partielles Clustern
Literatur	<i>Clustern allgemein:</i> Ein Buch übers Clustern <i>Anwendungen:</i> [Tam99]; [Eis98]; [Slo00] <i>tiefer gehend vom Erfinder der SOMs:</i> [Koh95];

11. Röntgenkristallographie und NMR-Spektroskopie

Inhalt	Erläuterung des physikalischen Hintergrunds und der Funktionsweisen beider Möglichkeiten der Ermittlung von Proteinstrukturen
Literatur	<i>Röntgenkristallographie, Einleitung:</i> [Atk90], [Rad87] <i>Röntgenkristallographie, Ausführlicher Überblick:</i> [Mas94] <i>NMR-Spektroskopie</i> [Gal88] [Fri92]

12. Vorhersage von Proteinstrukturen

Inhalt	Allgemein das Problem der Vorhersage einer Struktur aus einer bekannten Sequenz und aktuelle Lösungsansätze (homology modeling, fold recognition, ab initio)
--------	--

Literatur *Biochemische Hintergünde:*
[Bro69]
Allgemein zur Vorhersageproblematik:
[Kön97]; [TL96]
[Fas90]: Kap. 17; [Gla95]: Kap. 9.III
Genetische Algorithmen:
[TC92] [Jon97]

Weitere Links www.tcm.phy.cam.ac.uk/mmlk2/report13/report13.html

13. Protein-Chips

Inhalt Herstellung, Hintergründe und Probleme von diesen Chips.

Literatur [SRP01], [BBH01], [GM00]
und vor allem: das Internet

14. Genetischer Fingerabdruck

Inhalt über die Herstellung eines gent. Fingerabdrucks und die Möglichkeiten

Literatur Ein Buch über Humangenetik;
das Internet

15. Soziale und ethische Aspekte

Inhalt Diskussion (auch interaktiv) über obiges Thema

Literatur www.ornl.gov/hgmis/publicat/genechoice/yourgenes.pdf

Literatur

- [Alp98] L. Alphey: *DNA-Sequenzierung*, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, 1998.
- [Atk90] P. Atkins: *Physikalische Chemie*, VCH, Weinheim, 1990.
- [BBH01] P. O. B. B. Haab, M. J. Dunham: *Protein microarrays for highly parallel detection and quantitation of specific proteins and antibodies in complex solutions*, *Genome Biology*, Bd. 1, 2001.
- [Boc74] R. Bock: *Methoden der analytischen Chemie, Eine Einführung, Band 2*, Verlag Chemie, Weinheim, 1974.
- [Bow99] D. Bowtell: *Options available - from start to finish - for obtaining expression data by microarray*, *Nature Review Genetics*, Bd. 21, 1999, S. 25–32.
- [Bro69] W. J. Browne, A. C. T. North, D. C. Phillips: *A Possible Three-dimensional Structure of Bovine α -Lactalbumin based on that of Hen's Egg-White Lysozyme*, *Journal of Molecular Biology*, Bd. 42, 1969, S. 65–86, Historisches Paper mit handgemachter Homologievorhersage, Drahtmodell und Stereophotos.

- [Bud80] H. Budzikiewicz: *Massenspektrometrie, Eine Einführung*, Verlag Chemie, Weinheim, 1980.
- [Cas] D. Casey: *Primer on Molecular Genetics*, <http://www.ornl.gov/hgmis/publicat/primer/intro.html>.
- [Eis98] M. B. Eisen, P. T. Spellman, P. O. Brown, D. Botstein: *Cluster analysis and display of genome-wide expression patterns*, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, Bd. 95, 1998, S. 14863–14868.
- [Fas90] G. D. Fasman (Hrsg.): *Prediction of protein structure and the principles of protein conformation*, Plenum Press, 1990, Einführung in warum-Proteine-wie-falten, blickt über mehrere Proteinstrukturvorhersagemethoden.
- [Fri92] H. Friebolin: *Ein- und Zweidimensionale NMR-Spektroskopie*, VCH Verlagsgesellschaft mbH Weinheim, 1992.
- [Gal88] H.-J. Galla: *Spektroskopische Methoden in der Biochemie*, Georg-Thieme-Verlag Stuttgart, New York, 1988.
- [Gla95] J. A. Glasel (Hrsg.): *Introduction to biophysical methods for protein and nucleic acid research*, Academic Press, 1995, Physikalische Beschreibung von Röntgenstrukturanalyse und Beschreibung von Faltungsvorhersage.
- [GM00] S. S. G. MacBeath: *Printing Proteins as Microarrays for High-Throughput Function Determination*, *Science*, Bd. 289, 2000, S. 1760–1763.
- [Gri92] M. Gribskov, J. Devereux (Hrsg.): *Sequence analysis primer*, UWBC biotechnical resource, Oxford University Press, 1992, Gründliche Einführung in die Sequenzanalyse.
- [Gus97] D. Gusfield: *Algorithms on Strings, Trees and Sequences: Computer Science and Computational Biology*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [Hac99] J. Hacia: *Resequencing and mutational analysis using oligonucleotide microarrays*, *Nature Genetics*, Bd. 21, 1999, S. 42–47.
- [Hua96] X. Huang: *An Improved Sequence Assembly Program*, *Genomics*, Bd. 33, 1996, S. 21–31.
- [Jon97] G. Jones, P. Willett, R. C. Glen, A. Leach, R. Taylor: *Development and Validation of a Genetic Algorithm for Flexible Docking*, *Journal Molecular Biology*, Bd. 267, 1997, S. 727–748.
- [Kel98] A. Kel, A. Ptitsyn, V. Babenko, S. Meier-Ewert, H. Lehrach: *A genetic algorithm for designing gene family-specific oligonucleotide sets used for hybridization: the G protein-coupled receptor protein superfamily*, *Bioinformatics*, Bd. 14, Nr. 3, 1998, S. 259–270.
- [Koh95] T. Kohonen: *Self-Organizing Maps*, Springer verlag, 1995.
- [Kön97] R. König, T. Dandekar: *Computational methods for the prediction of protein folds*, *Biochemica et Biophysica acta*, Bd. 1343, Nr. 1, 1997, S. 1.
- [Leh96] W. D. Lehmann: *Massenspektrometrie in der Biochemie*, Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg, 1996.
- [Len96] T. Lengauer: *Molekulare Bioinformatik*, in I. Wegener (Hrsg.): *Highlights aus der Informatik*, Springer, Berlin, Heidelberg, 1996, S. 83–111.
- [Mas94] W. Massa: *Kristallstrukturbestimmung*, B. G. Teubner, Stuttgart, 1994.

- [PB99] D. B. P.O. Brown: *Exploring the new world of the genome with DNA microarrays*, *Nature Genetics*, Bd. 21, 1999, S. 33–37.
- [Rad87] P. Rademacher: *Strukturen organischer Moleküle*, VCH, Weinheim, 1987.
- [Set97] J. Setubal, J. Meidanis: *Introduction to Computational Molecular Biology*, PWS Publishing, Boston, Mass., 1997.
- [Slo00] D. K. Slonim, P. Tamayo, J. P. Mesirov, T. R. Golub, E. S. Lander: *Class prediction and discovery using gene expression data*, in *Proceedings of the Annual International Conference on Computational Molecular Biology (RECOMB)*, 2000, S. 263–272.
- [SRP01] M. J. D. S. R. Pennington: *Proteomics, from sequence to function*, BIOS Scientific Publishers Limited, 2001.
- [Tam99] P. Tamayo, D. Slonim, J. Mesirov, Q. Zhu, S. Kitareewan, E. Dmitrovsky, E. S. Lander, T. R. Golub: *Interpreting patterns of gene expression with self-organizing maps: Methods and application to hematopoietic differentiation*, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, Bd. 96, Nr. 6, 1999, S. 2907–2912.
- [TC92] W. Z. T. Coleman, D. Shalloway: *Isotropic Effective Energy Simulated Annealing Searches for Low Energy Molecular Cluster States*, 92-113, 1992.
- [TL96] R. Z. T. Lengauer, R. Thiele: *Modellierung von Proteinstrukturen*, *Der GMD-Spiegel*, Bd. 2/3, 1996, S. 14–18.
- [Wat95] M. S. Waterman: *Introduction to Computational Biology: Maps, Sequences and Genomes*, Chapman & Hall, London, 1995.