

Εργαστηριακές Ασκήσεις Βιοπληροφορικής

‘Ασκηση 8η “C, μέρος τρίτο”

Ονοματεπώνυμο :

Αριθμ. Μητρώου :

‘Υλη ασκήσεως :

- Ανάλυση του προγράμματος υπολογισμού μοριακών βαρών πρωτεΐνων.
 - Τροποποίηση του προγράμματος υπολογισμού μοριακών βαρών ώστε να υπολογίζεται το άθροισμα των δεικτών υδροφοβικότητας των αμινοξέων μιας πρωτεΐνης.
 - Τροποποίηση του προηγούμενου προγράμματος ώστε να παρουσιάζει τους δείκτες υδροφοβικότητας ανά αμινοξύ (και ανά γραμμή εξόδου).
 - Περαιτέρω τροποποίηση του προγράμματος υδροφοβικότητας ώστε να παρουσιάζει στην έξοδο μια γραφική απεικόνιση της κατανομής υδροφοβικότητας για ολόκληρη την πρωτεΐνη.
 - Χρήση του τελευταίου αυτού προγράμματος για τον προσδιορισμό του αριθμού και της θέσεως υδρόφοβων τμημάτων (διαμεμβρανικών α-ελίκων) στην Βακτηριοροδοφίνη.
-

Δημιουργήστε τον υποκατάλογο `practicals/8/` και κάντε τον τον τρέχοντα κατάλογο σας.

Αντιγράψτε από τον κατάλογο `/c0d4/people/biologic/nglykos/pract/` τα αρχεία με τα ονόματα `mw.c`, `bacteriorhodopsin` και `hydro.dat` στον τρέχοντα κατάλογο σας (δηλ. στον κατάλογο `practicals/8/`).

Χρησιμοποιήστε τον κειμενογράφο αρεσκείας σας για να εξετάσετε το περιεχόμενο του αρχείου `mw.c` και προσπαθήστε να κατανοήσετε τον τρόπο λειτουργίας αυτού του προγράμματος [το οποίο υλοποιεί μια μέθοδο υπολογισμού του μοριακού βάρους πρωτεΐνων με βάση την πρωτοταγή τους αλληλουχία, για περισσότερες πληροφορίες δείτε (μέσω netscape) τις διαφάνειες που αρχίζουν από τη σελίδα http://aspera.admin.uoi.gr/html/c_03/sld043.htm].

Μεταγλωτίστε το πρόγραμμα που περιέχεται στο `mw.c` και μετονομάστε το προκύπτον εκτελέσιμο αρχείο σε `MWcalc` (από `a.out` που ήταν, βέβαια, το αρχικό του όνομα).

Χρησιμοποιήστε το πρόγραμμα `MWcalc` για να υπολογίσετε το μοριακό βάρος της πρωτεΐνης βακτηριοροδοφίνης της οποίας η αλληλουχία περιέχεται στο αρχείο `bacteriorhodopsin`. Ποιά εντολή χρησιμοποιήσατε και ποιο το αποτέλεσμα του υπολογισμού ;

Το μοριακό βάρος αυτής της πρωτεΐνης είναι 28256 Daltons. Σε τι νομίζετε ότι οφείλεται η διαφορά των 18 Daltons από την τιμή που υπολογίσατε με το πρόγραμμα `MWcalc` ; Πως θα πρέπει να τροποποιηθεί το `mw.c` ώστε να διορθωθεί αυτή η απόκλιση ;

Αντιγράψτε τα περιεχόμενα του αρχείου `mw.c` σε ένα αρχείο με το όνομα `hydro1.c` (στον τρέχοντα κατάλογο σας).

Χρησιμοποιήστε την εντολή `more` ή `cat` για να εξετάσετε το περιεχόμενο του αρχείου `hydro.dat` το οποίο περιέχει (στην τελευταία του στήλη) μια αριθμητική προσέγγιση (σε κανονικοποιημένη λογαριθμική κλίμακα) των συντελεστών (ή δεικτών) υδροφοβικότητας των 20 L-αμινοξέων (όπου όσο μεγαλύτερη η τιμή, τόσο πιο υδρόφοβο είναι το αμινοξύ, και όσο μικρότερη, τόσο πιο υδρόφιλο).

Τροποποιήστε το πρόγραμμα `hydro1.c` με τέτοιο τρόπο ώστε αντί για το άθροισμα των μοριακών βαρών των αμινοξέων, να υπολογίζει το άθροισμα των συντελεστών υδροφοβικότητας. Μεταγλωττίστε το `hydro1.c` και μετονομάστε το προκύπτον εκτελέσιμο αρχείο σε `hydro1` (από `a.out` που ήταν, βέβαια, το αρχικό του όνομα).

Χρησιμοποιήστε το πρόγραμμα `hydro1` για να υπολογίσετε το άθροισμα των συντελεστών υδροφοβικότητας της βακτηριοροδοφίνης. Ποιά είναι η τιμή του αθροίσματος;

Αντιγράψτε τα περιεχόμενα του αρχείου `hydro1.c` σε ένα αρχείο με το όνομα `hydro2.c` (στον τρέχοντα κατάλογο σας).

Τροποποιήστε το πρόγραμμα `hydro2.c` με τέτοιο τρόπο ώστε αντί να υπολογίζει το άθροισμα των συντελεστών υδροφοβικότητας να τυπώνει (στην καθιερωμένη έξοδο) τα σύμβολα των αμινοξέων ακολουθούμενων από τις τιμές των συντελεστών υδροφοβικότητας τους (ένα αμινοξύ ανά γραμμή εξόδου), όπως φαίνεται παρακάτω :

M	0.738
L	0.943
E	0.043
L	0.943
L	0.943
P	0.711
.....	
T	0.450
S	0.359
D	0.028

Μεταγλωττίστε το τροποποιημένο `hydro2.c`, μετονομάστε το προκύπτον εκτελέσιμο αρχείο σε `hydro2` (από `a.out` που ήταν, βέβαια, το αρχικό του όνομα), και επιβεβαιώστε ότι οι τροποποιήσεις σας είχαν το επιθυμητό αποτέλεσμα (χρησιμοποιώντας την αλληλουχία της βακτηριοροδοφίνης ως πηγή δεδομένων).

Αντιγράψτε τα περιεχόμενα του αρχείου hydro2.c σε ένα αρχείο με το όνομα hydro3.c (στον τρέχοντα κατάλογο σας).

Τροποποιήστε το πρόγραμμα hydro3.c με τέτοιο τρόπο ώστε η έξοδος του για την ακολουθία της βακτηριοροδοφίνης να είναι ανάλογη με αυτό που φαίνεται παρακάτω :

```
* *.* : * . : * . : ****: * . : * : * : * . : * : * : * . : * : * : * . : * : * : * .  
*: * : : ***: * : *** . : *** * ; *** : : * ; * : : * ; * : * . : * , * : *** ; * . : * : * .  
***** ; * . : . : * : . * * * * . : * ; * : * * * : . : * ; * : * * . : * ; * : * * .  
*: * : : : : : : : :
```

όπου, το νόημα των συμβόλων είναι :

- Κενό : τιμή υδροφοβικότητας μικρότερη ή ίση του 0.30.
- Τελεία : τιμή υδροφοβικότητας μεγαλύτερη του 0.30 και μικρότερη ή ίση του 0.50.
- Άνω-Κάτω τελεία : τιμή υδροφοβικότητας μεγαλύτερη του 0.50 και μικρότερη ή ίση του 0.75.
- Αστέρι : τιμή υδροφοβικότητας μεγαλύτερη του 0.75.

Σημειώστε ότι το σημείο αλλαγής γραμμών στην έξοδο από το πρόγραμμα σας θα εξαρτάται από το μέγεθος του παραθύρου σας (δηλαδή το πρόγραμμα σας θα αλλάζει γραμμή αφού θα έχει γεμίσει την προηγούμενη γραμμή).

Μεταγλωτίστε το hydro3.c, μετονομάστε το προκύπτον εκτελέσιμο αρχείο σε hydro3 (από a.out που ήταν, βέβαια, το αρχικό του όνομα), και επιβεβαιώστε ότι οι τροποποιήσεις σας είχαν το επιθυμητό αποτέλεσμα (χρησιμοποιώντας την αλληλουχία της βακτηριοροδοφίνης ως πηγή δεδομένων).

Αντιγράψτε τα περιεχόμενα του αρχείου hydro3.c σε ένα αρχείο με το όνομα Hydro.c (στον τρέχοντα κατάλογο σας).

Τροποποιήστε το πρόγραμμα Hydro.c με τέτοιο τρόπο ώστε η έξοδος του για την ακολουθία της βακτηριοροδοφίνης να είναι πανομοιότυπη με αυτό που φαίνεται στην επόμενη σελίδα :

10	20	30	40	50
----	----	----	----	----

```
 :* **:. :*. . *.: : ****:*: .: *::*. **** : :*. .
 : **;*..**;*:*. ;**.;**;*:*. ;*:***: *: **
 *..:**** *:*** : .**;**; : *:*. :**;*. **.* ***
 *:*. :****:*****:*. . : . : *:. * ** * .****. :* *
 ****;. :*:***: * * .***:*** *.: *;*:**** . :**; : :*
 :..: :::::.
```

όπου, το νόημα των συμβόλων είναι το ίδιο με πριν.

Σημειώστε ότι το σημείο αλλαγής γραμμών στην έξοδο από το πρόγραμμα σας αυτή τη φορά είναι καθορισμένο (μετά από πενήντα χαρακτήρες πρέπει να υπάρχει αλλαγή γραμμής).

Μεταγλωτίστε το Hydro.c, μετονομάστε το προκύπτον εκτελέσιμο αρχείο σε Hydro (από a.out που ήταν, βέβαια, το αρχικό του όνομα), και επιβεβαιώστε ότι οι τροποποιήσεις σας είχαν το επιθυμητό αποτέλεσμα (χρησιμοποιώντας την αλληλουχία της βακτηριοροδοψίνης ως πηγή δεδομένων).

Μπορείτε με βάση τη γραφική απεικόνιση που παράγει το πρόγραμμα σας, να προσδιορίσετε τον αριθμό και τη θέση των υδρόφοβων τμημάτων (διαμεμβρανικών α-ελίκων με ελάχιστο μήκος 18 αμινοξέων) στην βακτηριοροδοψίνη ;

Ο έλεγχος των προγραμμάτων σας θα γίνει κατευθείαν από τους καταλόγους practicals/8/ των περιοχών σας. Αυτοί θα πρέπει να περιέχουν όλα τα αρχεία της άσκησης, δηλαδή τα : bacteriorhodopsin hydro.dat mw.c MWcalc hydro1.c hydro1 hydro2.c hydro2 hydro3.c hydro3 Hydro.c Hydro

Σημειώστε ότι :

1. Τα permissions τόσο των καταλόγων όσο και των αρχείων που περιέχονται σε αυτούς, θα πρέπει να είναι τέτοια ώστε ένας χρήστης που ανήκει στους κατηγορία "other" να μπορεί να διαβάζει (και στην περίπτωση των εκτελέσιμων αρχείων, να εκτελεί) τα αρχεία σας και καταλόγους σας (πάντα για το practicals/ ...).
2. Τα αρχεία αυτής της άσκησης πρέπει να υπάρχουν (με τα σωστά permissions) στις περιοχές όλων ανεξαιρέτως (εάν εργαζόσασταν ανά δύο, θα πρέπει ο δεύτερος να αντιγράψει όλα τα αρχεία στην περιοχή του και να τους δώσει τα σωστά permissions).

ΕΑΝ Ο ΕΛΕΓΧΟΣ ΤΩΝ ΑΡΧΕΙΩΝ ΤΗΣ ΑΣΚΗΣΗΣ ΚΑΤΑΣΤΕΙ ΑΔΥΝΑΤΟΣ, Ο ΙΔΙΟΚΤΗΤΗΣ ΤΟΥΣ ΘΑ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΘΕΙ ΜΕ ΒΑΘΜΟ ΙΣΟ ΜΕ ΤΟ ΧΑΜΗΛΟΤΕΡΟ ΒΑΘΜΟ ΠΟΥ ΕΧΕΙ ΔΩΘΕΙ ΣΤΟ ΠΑΡΕΛΘΟΝ ΓΙΑ ΤΑ ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ ΑΥΤΟΥ ΤΟΥ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ.