

# *Inhalt*

<i>Vorwort</i> .....	<i>ix</i>
<b><i>I: Einleitung</i></b> .....	<b><i>1</i></b>
<b><i>1: Biologie im Computerzeitalter</i></b> .....	<b><i>3</i></b>
Wie wird die Informatik die Biologie verändern? .....	4
Beschäftigt sich die Bioinformatik wirklich nur mit Datenbanken? .....	9
Welche Bedeutung hat die Informatik für Biologen? .....	13
Welche Herausforderungen bietet die Biologie den Informatikern? .....	13
Welche Fähigkeiten sollte ein Bioinformatiker besitzen? .....	14
Warum Biologen einen Computer benutzen sollten .....	15
Wie man einen PC für die Bioinformatik einrichtet .....	17
Welche Informationen und welche Software sind verfügbar? .....	18
Muß man eine objektorientierte Sprache lernen? .....	19
Wie bekomme ich Informationen aus dem Web? .....	20
Wie liest man Sequenzalignments? .....	21
Wie schreibt man ein Programm für das Alignment von biologischen Sequenzen? .....	21
Wie kann man die Struktur eines Proteins aus seiner Sequenz vorhersagen? ..	22
Welche Fragen kann die Bioinformatik beantworten? .....	22
<b><i>2: Computergestützte Lösungsansätze für biologische Probleme</i></b> .....	<b><i>23</i></b>
Das zentrale Dogma der Molekularbiologie .....	23
Wie Biologen Modelle entwerfen .....	28

Warum Modellierung für Biologen wichtig ist . . . . .	33
Computergestützte Methoden, die in diesem Buch behandelt werden . . . . .	34
Computergestützte biologische Experimente . . . . .	40

**II: Die Bioinformatik-Workstation . . . . . 47**

**3: Das Einrichten Ihrer Workstation . . . . . 49**

Die Arbeit auf einem Unix-System . . . . .	49
Das Einrichten einer Linux-Workstation . . . . .	52
Die Software zum Laufen bringen . . . . .	58
Welche Software wird benötigt? . . . . .	64

**4: Dateien und Verzeichnisse unter Unix . . . . . 67**

Grundlagen von Dateisystemen . . . . .	67
Befehle für den Umgang mit Verzeichnissen und Dateien . . . . .	74
Arbeiten in einer Multi-User-Umgebung . . . . .	82

**5: Die Arbeit auf einem Unix-System . . . . . 91**

Die Unix-Shell . . . . .	91
Befehle auf einem Unix-System . . . . .	93
Anzeigen und Editieren von Dateien . . . . .	98
Umwandlungen und Filter . . . . .	105
Dateistatistiken und Vergleiche . . . . .	112
Die Sprache der regulären Ausdrücke . . . . .	114
Unix-Shell-Skripten . . . . .	117
Kommunikation mit anderen Computern . . . . .	118
Mit anderen in einer gemeinsamen Umgebung arbeiten . . . . .	123

**III: Bioinformatik-Tools . . . . . 137**

**6: Biologische Recherche im World Wide Web . . . . . 139**

Arbeiten mit WWW-Suchmaschinen . . . . .	140
Auf der Suche nach wissenschaftlichen Artikeln . . . . .	142
Die öffentlichen biologischen Datenbanken . . . . .	147
Suche in biologischen Datenbanken . . . . .	154
Einreichen von Daten in die öffentlichen Datenbanken . . . . .	161

---

Biologie-Software im Internet . . . . .	162
Kriterien der Informationsqualität . . . . .	163
<b>7: Sequenzanalyse, paarweises Alignment und Datenbankabfragen . . . . .</b>	<b>167</b>
Die Chemie biologischer Moleküle . . . . .	169
Der Aufbau von DNA und RNA . . . . .	169
Watson und Crick, die Entdecker der DNA-Struktur . . . . .	171
Die Entwicklung der DNA-Sequenziermethoden . . . . .	173
Genvorhersage und die Entdeckung charakteristischer Abschnitte in der DNA . . . . .	177
DNA-Translation . . . . .	180
Paarweiser Sequenzvergleich . . . . .	182
Auf der Suche nach Sequenzen in biologischen Datenbanken . . . . .	192
Multifunktionale Tools für die Sequenzanalyse . . . . .	199
<b>8: Multiple Alignments, Bäume und Profile . . . . .</b>	<b>201</b>
Von der Morphologie zum Molekül . . . . .	201
Multiple Sequenzalignments . . . . .	203
Phylogenetische Analyse . . . . .	209
Profile und Motive . . . . .	216
<b>9: Visualisierung von Proteinstrukturen und die Berechnung von Struktureigenschaften . . . . .</b>	<b>227</b>
Ein Wort zu Proteinstrukturdaten . . . . .	228
Proteinchemie . . . . .	229
Proteinstruktur-Tools im Web . . . . .	242
Visualisierung von Strukturen . . . . .	244
Strukturklassifikation . . . . .	255
Strukturalignment . . . . .	261
Strukturanalyse . . . . .	265
Lösungsmittelzugänglichkeit und Wechselwirkungen . . . . .	268
Die Berechnung physikalisch-chemischer Eigenschaften . . . . .	273
Strukturoptimierung . . . . .	275
Ergänzende Protein-Datenbanken . . . . .	279
Eine kurze Zusammenfassung . . . . .	280

<b>10: Vorhersage der Proteinstruktur und -funktion anhand der Sequenz</b> .....	<b>285</b>
Proteinstrukturbestimmung .....	286
Proteinstrukturvorhersage .....	291
Von 3D zu 1D .....	293
Die Detektion von charakteristischen Merkmalen in Proteinsequenzen .....	294
Sekundärstrukturvorhersage .....	295
3D-Strukturvorhersage .....	301
Wie man alles zusammenfügt: Ein Projekt zur Proteinmodellierung .....	306
Zusammenfassung .....	311
<b>11: Techniken für Genom- und Proteomanalyse</b> .....	<b>313</b>
Vom Sequenzieren der Gene zum Sequenzieren der Genome .....	315
Sequenz-Assemblierung .....	320
Genomdaten im WWW .....	322
Annotation und Analyse ganzer Genome .....	326
Funktionelle Genomik: Neue Herausforderungen für die Datenanalyse .....	329
Proteomik .....	335
Datenbanken biochemischer Reaktionswege .....	340
Modellierung der Kinetik und der Physiologie .....	344
Zusammenfassung .....	346
<b>IV: Datenbanken und Visualisierung</b> .....	<b>347</b>
<b>12: Automatisieren der Datenauswertung mit Perl</b> .....	<b>349</b>
Warum gerade Perl? .....	349
Perl-Grundlagen .....	351
Reguläre Ausdrücke und Mustererkennung .....	357
Parsen der BLAST-Ausgabe mit Perl .....	358
Anwendungen von Perl in der Bioinformatik .....	363
<b>13: Das Erstellen biologischer Datenbanken</b> .....	<b>369</b>
Datenbank-Typen .....	370
Datenbank-Software .....	378
Einführung in SQL .....	380
Installation von MySQL .....	386

Datenbankdesign . . . . .	390
Webbasierte Tools zum Zugriff auf Datenbanken . . . . .	395
<b><i>14: Visualisierung und Data Mining</i></b> . . . . .	<b><i>403</i></b>
Vorbereitung der Daten . . . . .	404
Graphiken betrachten . . . . .	405
Visualisierung von Sequenzdaten . . . . .	406
Visualisierung von Netzwerken und Stoffwechselwegen . . . . .	409
Mit numerischen Daten arbeiten . . . . .	411
Visualisierung: Zusammenfassung . . . . .	417
Data Mining und biologische Informationen . . . . .	418
<b><i>15: Bibliographie</i></b> . . . . .	<b><i>425</i></b>
<b><i>Index</i></b> . . . . .	<b><i>431</i></b>