

1. Python

Code mit zwei geschachtelten Schleifen analysieren.

```
a = 1
b = 5
while a < 5:
    for c in range(6):
        b+=1
    a+=1
print(b)
```

Ausgabe?

2. Python

Was gibt das folgende Python Programm aus?

```
#!/usr/bin/python3

y=10
elemente = ["Calcium", "Magnesium", "Kohlenstoff", "Schwefel", "Phosphor", "Wasserstoff",
" Sauerstoff", "Stickstoff", "Neon", "Helium"]
for element in elemente:
    z= y % 2
    if(z==0):
        print(element)
    y+=1
```

3. Python

Aus einem String mithilfe eines Indizes Charaktere in einen neuen String schreiben und ausgeben.

```
a ="Van der Waals Kraefte sind schwach"
c=""
for i in [8, 23, 6, 26, 27, 28, 29, 11, 16, 18, 5, 2]:
    c= c + a[i]
print(c)
```

4. Python

Mithilfe **einer** Schleife Summe von 10 bis 18 (10 und 18 einschließlich) und 35 bis 48 (35 und 48 nicht einschließlich) berechnen.

5. Wirkstoffsuche

- a. Wie finde ich heraus, wann ein Wirkstoff zum ersten Mal in der Literatur beschrieben wurde, und wieviele Publikationen pro Jahr erschienen sind?
- b. Wo finde ich Informationen zu den molekularen Wechselwirkungen des Wirkstoffs?

6. Machine Learning

In einem Textkorpus medizinischer Fachliteratur sollen die IUPAC Namen von Kleinmolekülen erkannt werden. Im Korpus sind 42 IUPAC Namen vorhanden. Der Algorithmus erkennt 28, identifiziert aber weitere 4 Wörter, die keine IUPAC Namen sind.

- a. Berechnen sie die Präzision des Tests und erklären sie den Begriff.
- b. Berechnen sie die Sensitivität des Tests und erklären sie den Begriff.
- c. Erklären sie den Begriff der Spezifität und erläutern sie, warum die Berechnung in diesem Fall wenig sinnvoll ist.

7. Graphentheorie

- a. Geben sie die Konektivität des Graphen an.
- b. Welche Eigenschaften erfüllen in der Regel typische biologische Netzwerke? Entspricht das abgebildete Netzwerk diesen Kriterien?
- c. Biologische Netzwerke sind in der Regel relativ ausfallsicher (fail-safe) bzw. robust. Was könnte der biologische Grund dafür sein?

8. Cheminformatics

- a. Zeichnen Sie das Molekül zu folgendem SMILES:
FC1=CC=CC(=C1)C2OC(=O)CC=C2
- b. Wie könnte man ein potenzielles Target für dieses Molekül finden? Skizzieren Sie eine mögliche Vorgehensweise.

9. Molecular Libraries

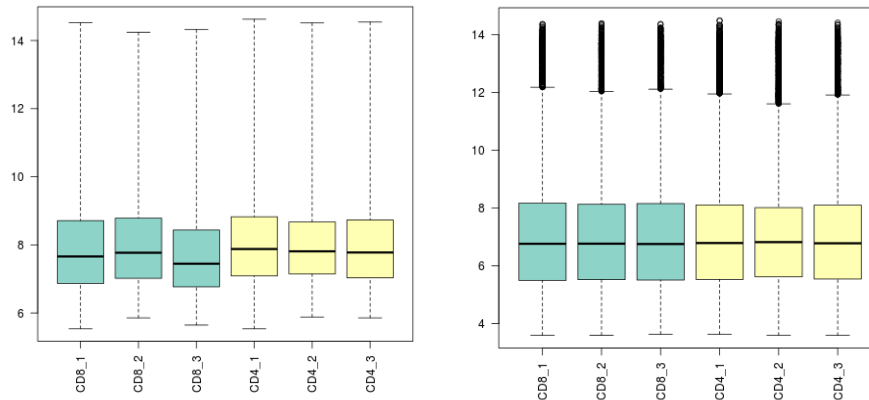
Tabelle mit Daten einer Gruppe von Kleinmolekülen (Molecular Weight, H-Brücken-Donatoren/-Akzeptoren, Verteilungskoeffizient Octanol/H₂O, Komplexität, etc.)

- a) Erklären, wie man die Drug-likeness dieser Moleküle erhöhen könnte
→ [Rule of Five](#) → Molekulargewicht geringer machen, weniger H-Brücken-Donatoren/-Akzeptoren, eventuell Komplexität (chirale Kohlenstoffatome/alle Kohlenstoffatome) niedriger machen
- b) Für welche Bindungstaschen sind komplexe Moleküle (= hoher Anteil chiraler Zentren) geeignet?
→ Bindungstaschen, die eine niedrige "Druggability" besitzen (Bindungstaschen sind hydrophil und größer/flacher)

10. Analyse eines Microarray-Experiments

- a. [Boxplot](#) beschriften (Median, oberes und unteres 25%-Quartil, Ausreißer)
- b. Schritte zur Analyse der Rohdaten eines Microarray-Experiments
- c. Zeichnen von Boxplots vor und nach der Normalisierung mit z.B. Robust Multi-array Average (RMA)
→ zwei Boxplots davor und danach reichen; Mediane, Quartile und Whisker werden

angepasst, hier Beispiele aus der Übung:



11. Molekulare Wechselwirkungen

- Zeichnen Sie vier verschiedene Substituenten (an einen Benzolring) ein, welche für eine Proteinwechselwirkung wichtig sein können. Geben Sie dann die Namen von 2 Aminosäuren an, die für die Interaktion in Frage kommen. Benennen Sie außerdem den Typ der Wechselwirkung zwischen den Substituenten und der jeweiligen Aminosäure.
- Nennen Sie zwei Methoden um vorhergesagte Bindungen zwischen einem Ligand und einem Protein experimentell zu überprüfen.

12. Homologiemodellierung

- Nennen Sie drei wichtige Schritte, die normalerweise bei einer Homologiemodellierung eines Proteins durchgeführt werden.
- Nennen Sie einen Server, der Homologiemodelle vollautomatisch erzeugt.
- Was zeigt der Ramachandran-Plot? Wofür können Sie ihn nutzen? Wofür stehen Punkte, die Ausreißer sind.

13. Flux Balance Analysis

- Erklären Sie den grundsätzlichen Aufbau eines SBML-Modells.
- Wovon ist die Aussagekraft von Flux Balance Analysen (FBA) abhängig?
- Wozu dienen in einem FBA-Modell Metabolite, die der *boundaryCondition* zugeordnet werden?
- Wie würden sie vorgehen, um mittels FBA herauszufinden, welcher von 2 Organismen besser geeignet ist, um eine bestimmte Stoffklasse zu produzieren?

14. Struktur eines Transkriptionsfaktors, eingefärbt in konservierte und nicht konservierte Teile sowie in positive und negative Ladung.

- Nennen Sie zwei Ursachen, welche die unterschiedliche Einfärbung auf der linken Seite erklären können.
- Erklären Sie, wie Sie den Konservierungsgrad von einzelnen Aminosäuren bestimmen können.

- c. Das Protein zeigt einen Transkriptionsfaktor. Zeichnen Sie in der rechten Abbildung ein, wo wahrscheinlich die DNA-Bindung stattfindet. Begründen Sie warum.
- d. Nennen Sie zwei Aminosäuren, die häufig mit der DNA interagieren. Begründen Sie warum.