

# Softwarewerkzeuge der Bioinformatik

## Projektbericht

Der Abschlussbericht spiegelt die Ergebnisse wider und stellt daher die Grundlage der Bewertung dar. Grundsätzlich sollte ein Bericht so verfasst werden, dass man die Vorgehensweise, Ergebnisse und Diskussion **leicht nachvollziehen** kann, ohne weitere Quellen nutzen zu müssen. Alle Abschlussberichte müssen die folgenden Richtlinien einhalten.

### 1 Allgemeines

**Sprache:** Der Projektbericht kann in **Deutsch** oder **Englisch** geschrieben werden.

**Text:** Der Bericht sollte als Fließtext mit vollständigen Sätzen unter Beachtung der jeweiligen Rechtschreibung, Grammatik, Satzstellung usw. verfasst werden.

**Format:** Es müssen **keine** bestimmten Schriftgrößen, Zeilenabstände usw. eingehalten werden. Stellen Sie aber sicher, dass der Bericht gut strukturiert und übersichtlich ist.

**Aufgabenaufteilung:** In einer Gruppe können Sie natürlich die Aufgaben aufteilen. Sprechen Sie sich aber ab, sodass Sie die gleichen Vorgehen für ähnliche Aufgaben verwenden und stellen Sie sicher, dass Ihr fertiger Projektbericht konsistent formatiert ist. Das heißt auch, wenn eine bestimmte Information in mehreren Aufgaben relevant ist, sollte diese Information **nicht** auf drei verschiedene Arten beschafft und präsentiert werden, und schon gar nicht drei unterschiedliche Resultate liefern.

**Länge:** Der Projektbericht sollte alle benötigten Informationen enthalten, nicht mehr und nicht weniger. Dabei kann die Länge des Berichtes von Projekt zu Projekt unterschiedlich sein. Es gibt keine Bonuspunkte für besonders lange Berichte, und überlange Berichte stellen einen erhöhten Arbeitsaufwand für alle Beteiligten dar. Deswegen ist es besser, sich kurz und präzise auszudrücken. Es ist möglich, jede Aufgabe in ca. 0,25 bis 2 Seiten reinen Fließtext (ohne Abbildungen oder Tabellen) vollständig zu beantworten.

**Abbildungen und Tabellen:** Abbildungen und Ergebnisse sollten im Text enthalten und nicht nur verlinkt sein. Die Abbildungen und Tabellen müssen eine ausreichende Qualität aufweisen und lesbar sein. Alle verwendeten Abbildungen und Tabellen müssen nummeriert sein, einen Untertitel haben, und auch im Text referenziert und ausreichend besprochen werden.

Bitte beachten Sie, dass Tabellen und Abbildungen wichtig sind, um Lesern einen guten Überblick über die Ergebnisse zu verschaffen, aber **nicht** eine textuelle Zusammenfassung der Ergebnisse, einen Vergleich oder eine Diskussion ersetzen.

**Screenshots:** Screenshots sind wie Abbildungen zu behandeln, und es sollten nur die relevanten Bereiche präsentiert werden. Das heißt, reichen Sie **nicht** einen Screenshot einer ganzen Seite ein. Bevor Sie einen Screenshot in Ihren Bericht einfügen, fragen Sie sich, ob dies wirklich notwendig ist. Ein Bericht wird sehr schnell unübersichtlich, wenn für eine Aufgabe mehrere Screenshots eingefügt werden. Statt zum Beispiel einen Screenshot der PRINTS oder UniProt Webseite einzufügen, fassen Sie die relevante Informationen in einer Tabelle oder 1–2 Sätzen zusammen.

**Softwaretools und Datenbanken:** Wenn möglich und nicht anders angegeben, sollen die Softwaretools und Datenbanken aus der Übung verwendet werden. Schauen Sie sich dementsprechend die relevanten Übungsblätter an.

**Plagiate:** Alle Texte müssen mit eigenen Worten verfasst werden. Abschnitte, die von anderen Gruppen, dem Internet oder alten Abgaben kopiert wurden, werden mit 0 Punkten bewertet.

**Fragen:** Fragen können im Tutorium oder beim verantwortlichen Tutor per **E-Mail** gestellt werden. Die jeweilige E-Mailadresse ist in dem Projekt angegeben.

**Abgabe:** Die Berichte müssen als **PDF**-Datei **vor** der Abgabefrist, die in dem jeweiligen Projekt angegeben ist, bei dem jeweils angegebenen Tutor via E-Mail abgegeben werden. Dies sollte als Anhang geschehen, nicht als Link. Jeder Bericht sollte den Namen des Projekts, die Gruppennummer sowie die Namen, Matrikelnummern und E-Mailadressen der Gruppenmitglieder enthalten.

## 2 Aufbau

Dokumentieren und begründen Sie in Ihrem Abschlussbericht Ihr Vorgehen mit Angabe der von Ihnen verwendeten Softwaretools (inklusive Parameterwahl), Datenbanken (inklusive Accession Nummern) und anderen Informationsquellen. Präsentieren und diskutieren Sie zudem Ihre Ergebnisse wie von der jeweiligen Aufgabe gefordert.

Für jede Aufgabe sollte daher grundsätzlich die folgende Vorgehensweise befolgt werden:

### 2.1 Einleitung

In 1–2 Sätzen soll das Ziel der Aufgabe beschrieben werden. Zum Beispiel:

- In diesem Aufgabenteil beschäftigten wir uns mit...
- Das Ziel dieser Aufgabe war es...

## 2.2 Vorgehensweise

Beschreiben Sie Ihre Vorgehensweise gewissenhaft. Geben Sie an, welche Softwaretools, Datenbanken und Webseiten Sie verwendet haben. Dabei muss auch angegeben werden, mit welchen Einstellungen und Parametern Sie diese benutzt haben, damit Ihr Vorgehen reproduzierbar ist. Weiterhin sollten Sie immer die Accessionnummer der von Ihnen untersuchten Proteinen, Motiven, Strukturen usw. angeben. Zum Beispiel:

- Zum Lösen dieser Aufgabe verwendeten wir das Tool X unter Eingabe unseres Proteins (YYYYYY) mit Standardeinstellungen.
- Als Schranke wählten wir einen *E-value* von 0.0001.

## 2.3 Darstellung der Ergebnisse

Ergebnisse müssen **übersichtlich** und **nachvollziehbar** dargestellt werden. Alle Ergebnisse und Behauptungen müssen mit dem beschriebenen Vorgehen **reproduzierbar** sein und wenn angebracht in Tabellen oder Abbildungen als Überblick zusammengefasst werden. Zum Beispiel müssen die genauen Sequenzpositionen, auf die sich bezogen wird, angegeben und in Abbildungen gekennzeichnet werden (z.B. Motiven in Sequenzalignments). Weiterhin müssen die relevanten Kernaussagen im Text angesprochen werden, dabei muss immer klar sein, **worauf sich der Text gerade bezieht**. Zum Beispiel sollte es nicht den Lesern überlassen werden, die Transmembranhelices in einer Abbildung zu zählen.

Nach Bedarf sollte natürlich auch eine **sinnvolle Auswahl** getroffen werden, die beschrieben wird (z.B. 3–5 Proteine von 200).

## 2.4 Diskussion und Vergleiche

In manchen Aufgabenteilen wird eine Diskussion oder ein Vergleich der Ergebnisse gefordert. Dabei sollte sich nur auf die dargestellten Ergebnisse bezogen werden, d.h. was nicht als Ergebnis dargestellt ist, kann folglich auch nicht diskutiert oder verglichen werden.

# 3 Beispiel

## 3.1 Aufgabe

Vergleichen Sie die PRINTS- und PROSITE-Motive Ihres Proteins miteinander.

### 3.2 Lösungsvorschlag

In diesem Aufgabenteil haben wir uns mit den Motiven des gegebenen Proteins (P123456) beschäftigt. Die gefundenen Motive haben wir anschließend miteinander verglichen. Zum Auffinden der Motive verwendeten wir PRINTS und PROSITE. Dabei folgten wir den Links auf der UniProtKB Seite unseres Proteins.

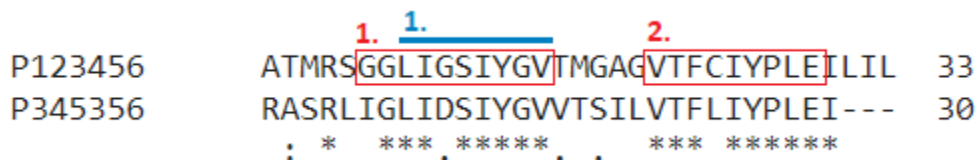
Für das gegebene Protein wurden mit Hilfe von PRINTS und PROSITE mehrere Motive gefunden. Dabei ergab eine Suche bei PRINTS zwei Motive unter der Accession XXXX, während die Suche bei PROSITE nur ein Motiv mit der Accession YYYYY lieferte. Die Motive, die jeweils für PRINTS und Prosits gefunden wurden, sind in Tabelle 1 dargestellt.

	PRINTS	Pos.	PROSITE	Pos.
<b>Accession</b>	XXXX		YYYY	
<b>Motiv 1</b>	GGLIGSIYGV	6-15	L-x(2)-S-I-x-[FYGWIV]-{K}	8-15
<b>Motiv 2</b>	VTFCIYPLE	21-29		

**Tabelle 1:** Darstellung der gefundenen Motive für unser Protein (P123456) mittels PRINTS und PROSITE mit ihren Positionen in der Proteinsequenz.

Das PRINTS-Motiv 1 weist eine Länge von zehn Aminosäuren auf, während das PROSITE-Motiv im Vergleich dazu um zwei Aminosäuren verkürzt ist. Weiterhin hat das PRINTS-Motiv 2 eine Länge von neun Aminosäuren.

Vergleicht man das PRINTS-Motiv 1 mit dem PROSITE-Motiv, kann man eine Übereinstimmung feststellen. Dabei stimmen die Positionen 3-10 vom PRINTS-Motiv 1 (**GGLIGSIYGV**) mit dem gesamten PROSITE-Motiv (**L-x(2)-S-I-x-[FYGWIV]-{K}**) überein. Das PRINTS-Motiv 2 unterscheidet sich von dem gefundenen PROSITE-Motiv. Dies spiegelt sich auch in ihren Positionen in der Proteinsequenz wieder (Tabelle 1), die wir zur Verdeutlichung in dem Sequenzalignment aus Aufgabe 1 markiert haben (Abbildung 1).



**Abbildung 1:** Sequenzalignment unseres Proteins (P123456). Markiert sind die vollkommen (Sternchen), hoch (Doppelpunkt) und leicht (Punkt) konservierten Bereiche. Die beiden PRINTS Motive unseres Proteins sind in rot markiert und das PROSITE Motiv in blau. [Im tatsächlichen Projektbericht sollten natürlich mehr Sequenzen für ein Sequenzalignment benutzt werden.]