

---

## KAPITEL 6 Zusammenfassung

---

Verschiedene Methoden zur Funktions- und Strukturvorhersage ausgehend von der Primärstruktur wurden vorgestellt.

Ein adaptiv kodierendes Neuronales Netz (ACN) ist entwickelt worden, mit dem es möglich ist, die charakteristischen physikochemischen Eigenschaften in Proteinsequenzen zu bestimmen. Hiermit ist es möglich, 96% der experimentell verifizierten Schnittstellen von humanen sekretorischen Proteinen vorherzusagen. Bisher waren nur Vorhersagen mit einer Genauigkeit von bis zu 68% möglich. Außerdem können mit den ACN Mutationen in den Schnittstellenregionen humaner sekretorischer Proteine korrekt vorhergesagt werden. Es wurde somit erfolgreich gezeigt, wie aus der Sequenzinformation auf eine Funktion geschlossen werden kann.

Die Vorhersage der Konformation von Peptidylprolylbindungen ist mit dem vorliegenden Datensatz nicht zufriedenstellend lösbar. Für eine erfolgversprechende Analyse müßte die 10- bis 20-fache Menge an Daten vorliegen. Trotzdem konnte gezeigt werden, daß die MHC-I Proteine eine charakteristische *cis*-Prolingruppe besitzen, die eine Unterscheidung von anderen Proteinen erlaubt.

Die Simulierte Molekulare Evolution wurde erfolgreich zum Entwurf zellprotektiver Peptide angewendet. Ein Algorithmus zum Design inhibitorischer Proteine, basierend auf der Analyse von Protein-Protein-Wechselwirkungen, wurde entwickelt und erfolgreich auf zellprotektive Experimente getestet.

---

---

## KAPITEL 7    Summary

---

Several methods were presented for the prediction of function and structure based on the primary structure of proteins.

An adaptive coding artificial neural network (ACN) was developed that characterizes the physico chemical features in protein sequences. It is now possible to identify 96% of experimentally verified cleavage sites in human secretory proteins. Hitherto only 68% of an independent test data were correctly identified. Furthermore mutations within the cleavage site region of human secretory proteins are correctly predicted. It is shown how to use ACN to build up a sequence activity relation.

It was not possible to predict the conformation of the peptidyl prolyl bond using the available data. However there should be 10 - 20 times more non-homologues sequence data to make reliable predictions. Nevertheless, it was possible to show that MHC-I proteins have a characteristic *cis*-proline group that can be used to distinguish those proteins from others.

The simulated molecular evolution was successfully applied to design cell protective peptides against the Human Rhinovirus. An algorithm for the design of inhibitory peptides using the structural information of the receptor protein has been developed. Using this method other peptides were designed. All peptides were experimentally tested, showing that theoretical and practical results are in agreement.

---

