

1. Z bazy danych PDB pobierz co najmniej dwa dowolne pliki ze strukturą przestrzenną białka w formacie pdb. Przy czym przynajmniej jeden z plików musi zawierać więcej niż jeden model, jeden przynajmniej musi mieć długość większą od 1000aa i jeden musi zawierać więcej niż dwa łańcuchy. Proponuje użyć: <http://www.pdb.org/pdb/files/3GAU.pdb> i [2KYV](#).
Do pobrania plików można wykorzystać polecenie wget.
2. Zapoznaj się z formatem PDB poprzez otworzenie plików w edytorze tekstowym (np. w vi) i poprzez zapoznanie się z jego specyfikacją:

<http://www.wwpdb.org/documentation/format33/v3.3.html>

Teraz zobacz jak wygląda numeracja aminokwasów w pliku: 2BB2 – szczególnie zwróć uwagę na numer aminokwasu dla atomu 1 i numer aminokwasu dla atomu 245.

3. Dla pobranego pliku PDB:
 - a. Zlicz liczbę wszystkich atomów (z pominięciem heteroatomów):
 - i. Wykorzystując do tego następujące polecenia: grep i wc. Całe polecenie należy zapisać w pojedynczej linii
 - ii. Powtórz powyższe ćwiczenie pisząc krótki skrypt w AWK.
 - b. Podaj liczbę modeli zapisanych w pojedynczym pliku. Jakich poleceń do tego użyjesz?
 - c. Dla każdego modelu w pliku PDB wypisz identyfikatory poszczególnych łańcuchów (każdy identyfikator tylko raz) wykorzystując do tego celu AWK i opcjonalnie polecenie sort.
 - d. Zamień w pliku wszystkie histydyny z his na hsd (to może się przydać, gdy będziesz uruchamiać symulację np. w NAMD). Spróbuj użyć do tego sed-a lub m4 (albo AWK)
 - e. Wypisz sekwencję aminokwasową na podstawie rekordów ATOM w postaci notacji jednoliterowej jako pojedynczy ciąg znaków. Dla przypomnienia:
alanine - ala - A, arginine - arg - R, asparagine - asn - N, aspartic acid - asp - D, cysteine - cys - C, glutamine - gln - Q, glutamic acid - glu - E, glycine - gly - G, histidine - his (hsd) - H, isoleucine - ile - I, leucine - leu - L, lysine - lys - K, methionine - met - M, phenylalanine - phe - F, proline - pro - P, serine - ser - S, threonine - thr - T, tryptophan - trp - W, tyrosine - tyr - Y, valine - val - V

Materiały pomocnicze:

<http://www.ibm.com/developerworks/linux/library/l-bash/index.html>

<http://www.ibm.com/developerworks/linux/library/l-sed1/index.html>

<http://www.ibm.com/developerworks/linux/library/l-awk1/index.html>

<http://www.thegeekstuff.com/2009/03/15-practical-unix-grep-command-examples/>