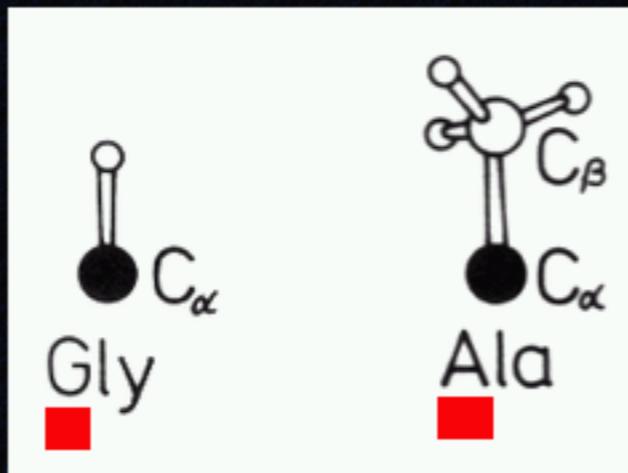


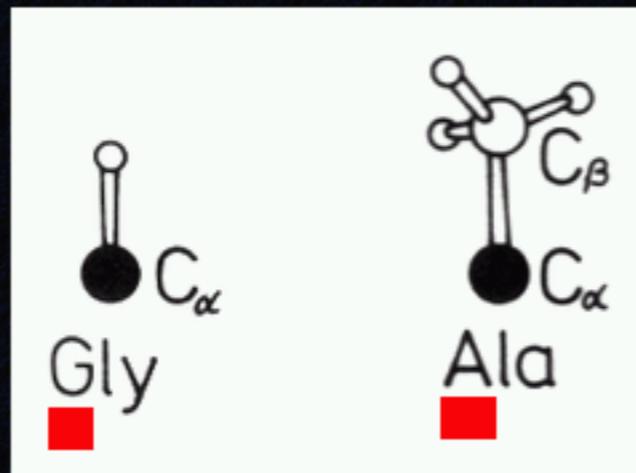
Βιοτληροφορική

Gly (G), Ala (A)



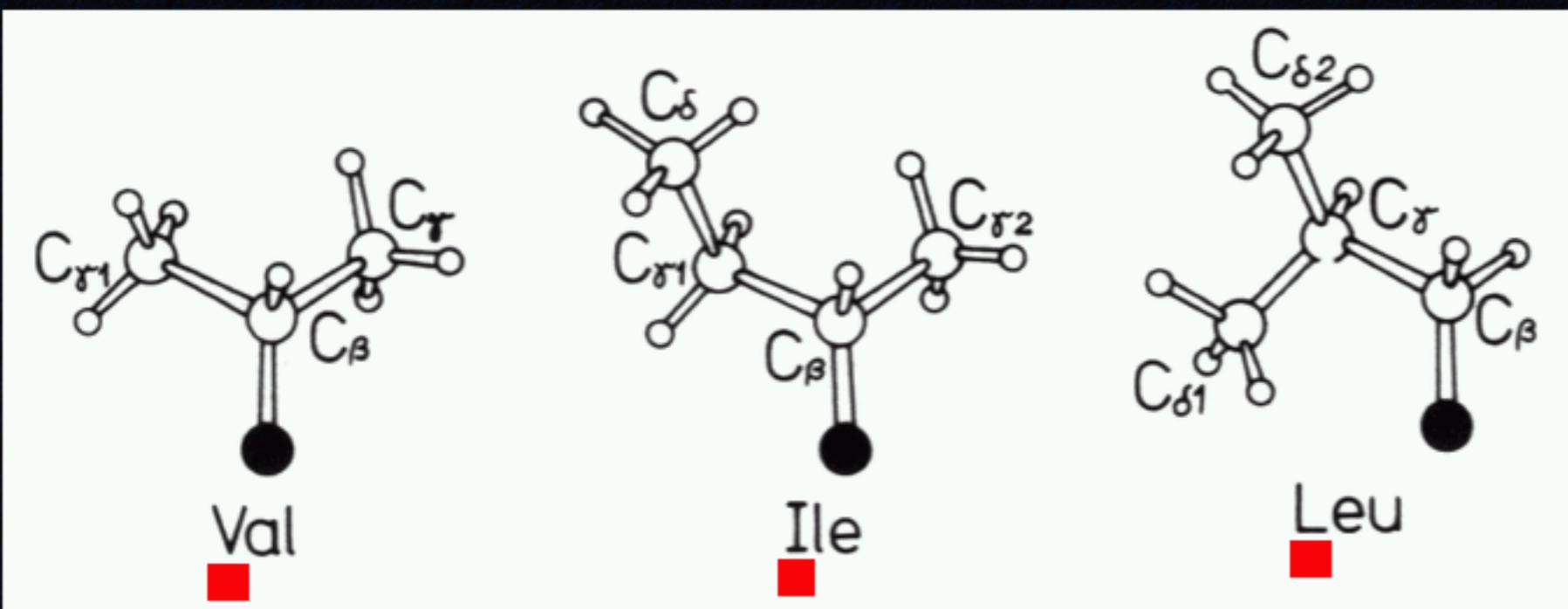
Η γλυκίνη είναι το μοναδικό αμινοξύ χωρίς πλευρική ομάδα (μόνο ένα άτομο υδρογόνου). Η απουσία πλευρικής ομάδας (και συνεπώς η απουσία στερεοχημικών παρεμποδίσεων με την κυρίως αλυσίδα) της επιτρέπουν να υιοθετεί διαμορφώσεις οι οποίες είναι ενεργειακά ανέφικτες για τα υπόλοιπα αμινοξέα (π.χ. απότομες μεταβολές στη διεύθυνση της πολυπεπτιδικής αλυσίδας ('σπασίματα', kinks)). Για το λόγο αυτό οι εξελικτικά συντηρημένες γλυκίνες είναι αρκετά συχνές.

Gly (G), Ala (A)



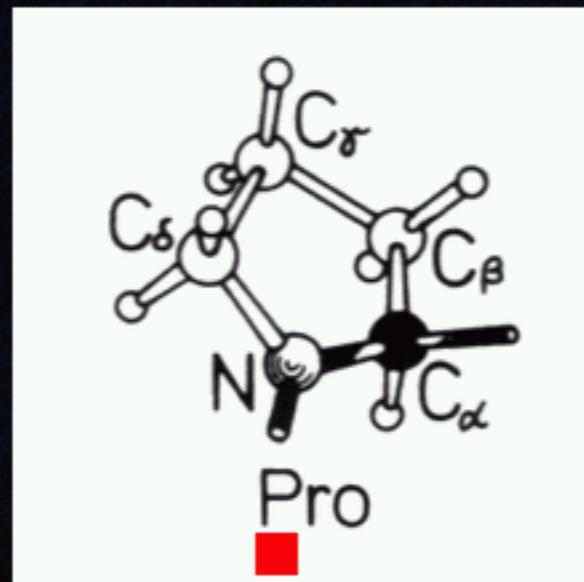
Η αλανίνη έχει τη δεύτερη μικρότερη πλευρική ομάδα, μια μεθυλομάδα. Είναι ένα μη πολικό κατάλοιπο το οποίο παρ'όλα αυτά απαντάται αρκετά συχνά και στην επιφάνεια των πρωτεϊνών. Η συχνότητα της Ala στις πρωτεϊνικές αλληλουχίες είναι αρκετά υψηλή, ίσως λόγω του μικρού ενεργειακού κόστους σύνθεσης της.

Val (V), Ile (I), Leu (L)



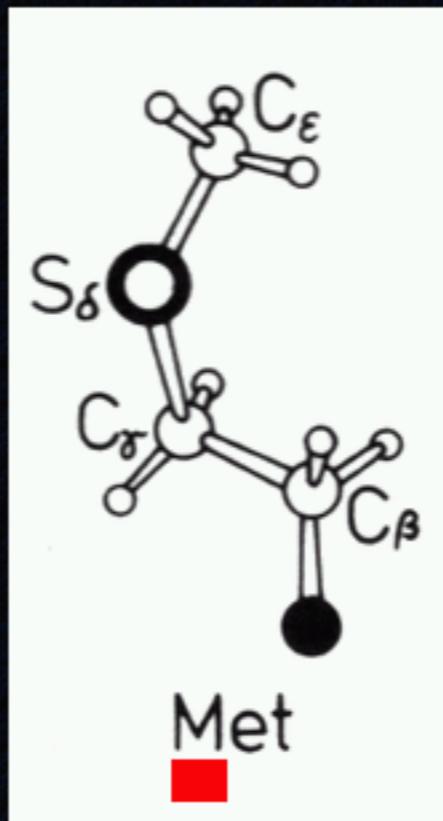
Αυτά είναι και τα τρία υδρόφοβα αμινοξέα τα οποία χαρακτηρίζονται από την διακλαδιζόμενη πλευρική τους αλυσίδα. Η ύπαρξη διακλάδωσης (ιδιαίτερα για τις Val και Ile που διακλαδίζονται στο C_β) περιορίζει αισθητά τις προτιμώμενες διαμορφώσεις τους (γνωστές ως rotamers).

Pro (P)



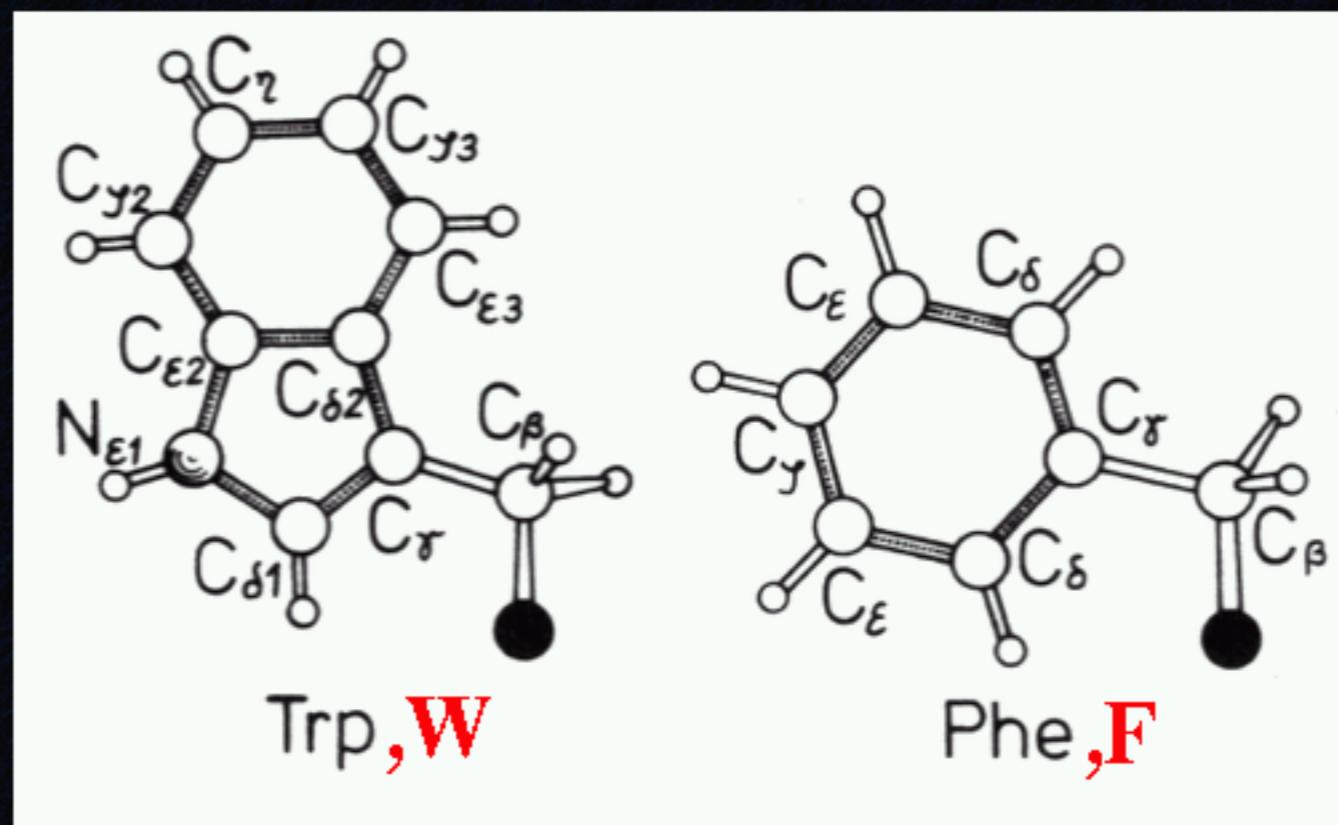
Η προλίνη είναι ένα ιδιαίτερο αμινοξύ : Η πλευρική ομάδα επιστρέφει και συνδέεται ομοιοπολικά με το σκελετό της πρωτεΐνης. Η πιο άμεση συνέπεια είναι ότι αυτή η πλευρική ομάδα είναι πρακτικά ακίνητη (ο μοναδικός βαθμός ελευθερίας βρίσκεται στη διαμόρφωση του δακτυλίου). Η δεύτερη συνέπεια είναι ότι η δίεδρη γωνία ανάμεσα στο NH και το Cα περιορίζεται σε ένα πολύ μικρό εύρος ενεργειακά αποδεκτών τιμών.

Met (M)



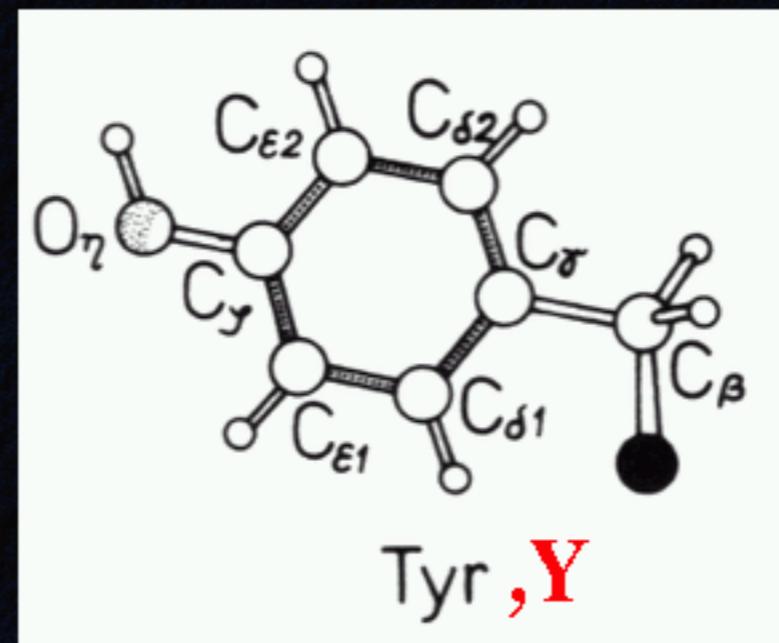
Η μεθιονίνη έχει μια μάλλον ευκίνητη πλευρική με ένα άτομο θείου σε θειο-αιθερικό δεσμό. Η διαφορά ηλεκτραρνητικότητας ανάμεσα στο θείο και τους άνθρακες οδηγεί στην δημιουργία διπολικής ροπής. Ως επί το πλείστον απαντάται στο εσωτερικό των πρωτεΐνικών δομών.

Trp (W), Phe (F)



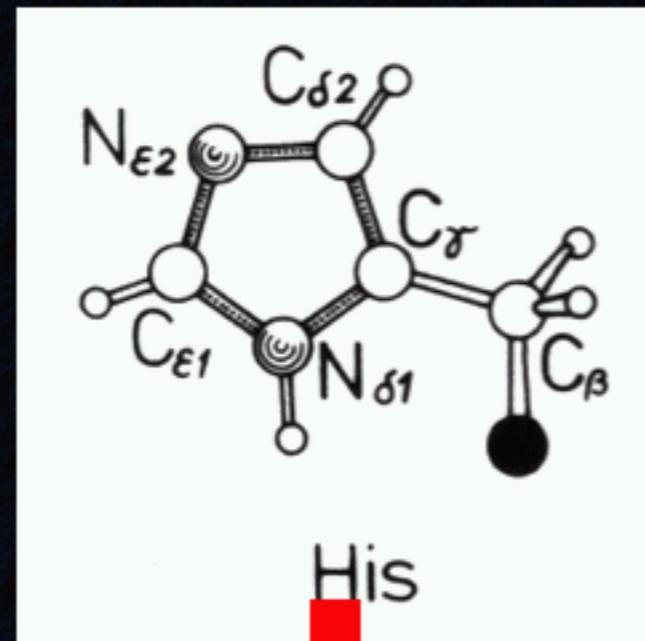
Η τρυπτοφάνη και η φαινυλαλανίνη είναι από τα πλέον υδρόφοβα αμινοξέα και ως εκ τούτου απαντώνται κατά κύριο λόγο στο εσωτερικό των πρωτεΐνων, αν και η πλευρική ομάδα της τρυπτοφάνης είναι ελαφρά πτολική λόγω του ετεροκυκλικού ινδολικού δακτυλίου.

Tyr (Y)



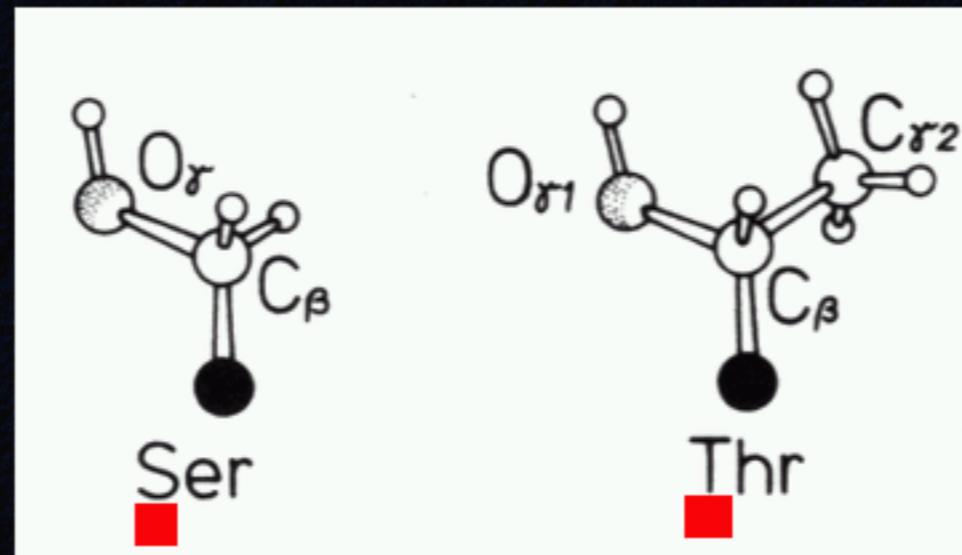
Η τυροσίνη έχει την ιδιαιτερότητα ότι αν και έχει αρωματικό δακτύλιο, έχει επίσης μια υδροξυλομάδα (με pK 10.1) η οποία την κατατάσσει στα πολικά αμινοξέα (και μάλιστα με δυνητικά ισχυρούς υδρογονικούς δεσμούς). Όπως τα περισσότερα αφόρτιστα αλλά πολικά αμινοξέα, η τυροσίνη μπορεί να βρεθεί τόσο στο εσωτερικό όσο και στην επιφάνεια των πρωτεΐνών.

His (H)



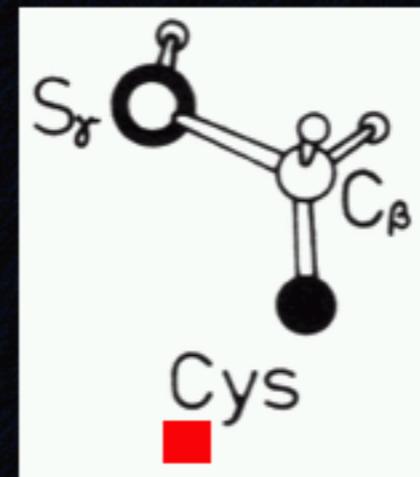
Η ιστιδίνη έχει ένα ετεροκυκλικό αρωματικό δακτύλιο με μία χαρακτηριστική ιδιαιτερότητα : το pK της είναι 6, το οποίο σημαίνει ότι στα φυσιολογικά (ενδοκυτταρικά) pH, οι ιστιδίνες μπορούν να είναι είτε αφόρτιστες ($pH > 6$) ή φορτισμένες ($pH < 6$). Επειδή, δε, η ακριβής τιμή του pK εξαρτάται (και μπορεί να ρυθμιστεί) από το περιβάλλον της ιστιδίνης, αυτό είναι ένα από τα συνηθέστερα αμινοξέα σε ενζυμικά καταλυτικά κέντρα.

Ser (S), Thr (T)



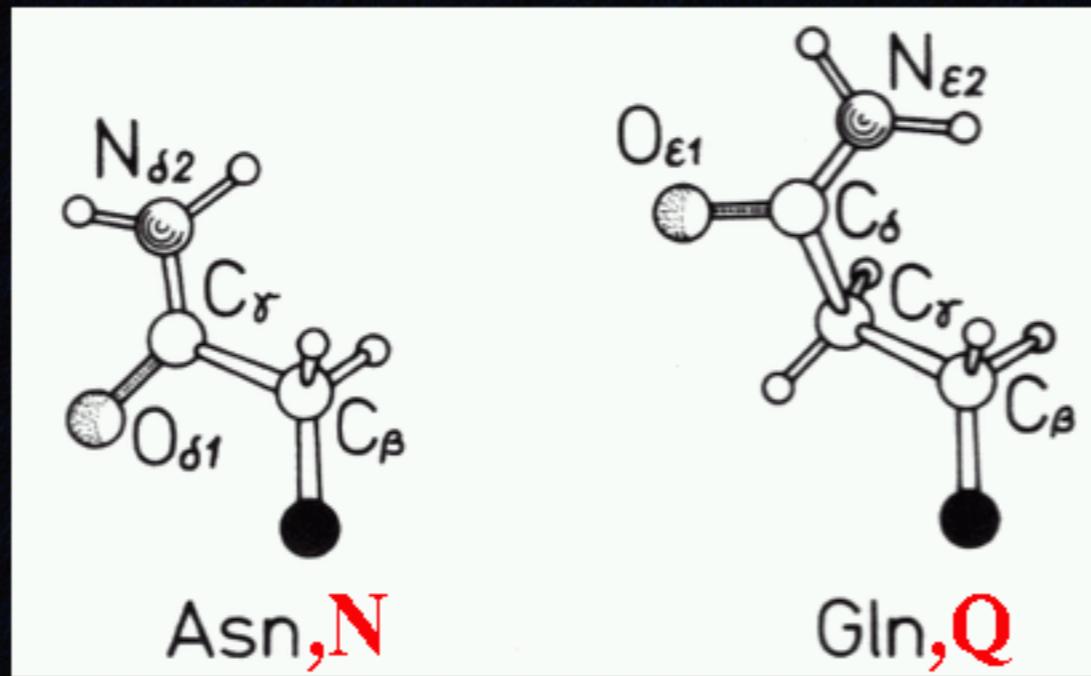
Η σερίνη και η θρεονίνη είναι τυπικά αφόρτιστα-πολικά κατάλοιπα. Έχουν και οι δύο υδροξυλομάδες οι οποίες μπορούν να συμμετάσχουν στο σχηματισμό υδρογονικών δεσμών. Το C_β της θρεονίνης είναι ασύμμετρο (και όπως συνήθως, μόνο το ένα ισομερές απαντάται σε φυσικές πρωτεΐνες).

Cys (C)



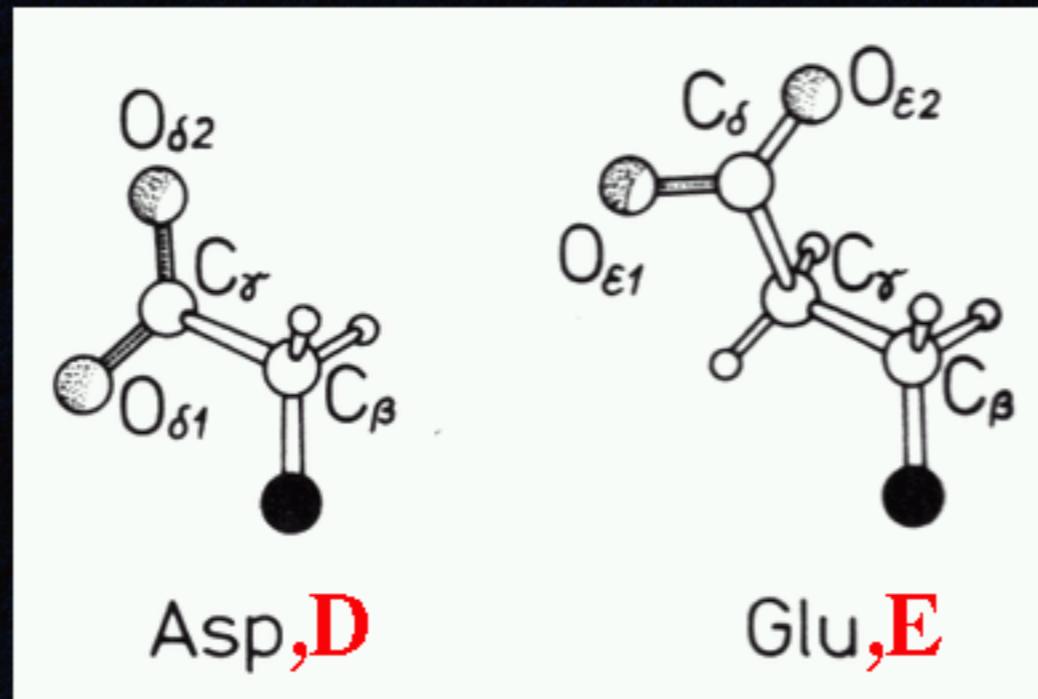
Η κυστεΐνη είναι η μοναδική πλευρική ομάδα η οποία (μέσω της οξείδωσης της σε κυστίνη) μπορεί να δημιουργήσει ομοιοπολικούς δεσμούς οι οποίοι είναι ειδικοί και χαρακτηριστικοί για μια συγκεκριμένη πρωτεΐνική δομή. Οι δισουλφιδικές γέφυρες σταθεροποιούν την τρισδιάστατη δομή και είναι ιδιαίτερα συνηθισμένες σε εξωκυτταρικές (εκκρινόμενες) πρωτεΐνες.

Asn (N), Gln (Q)



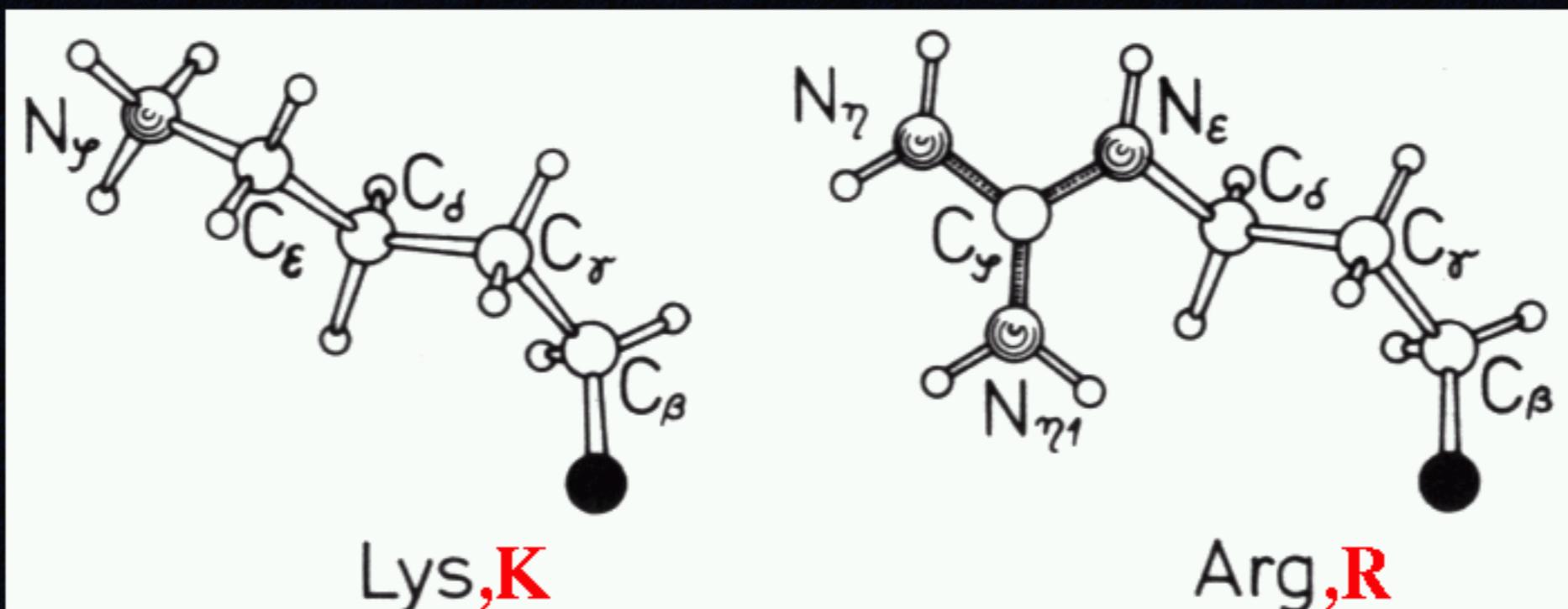
Η ασπαραγίνη και η γλουταμίνη έχουν την ιδιαιτερότητα ότι μπορούν ταυτόχρονα να είναι δότες (αμιδική ομάδα) και δέκτες (καρβονυλική ομάδα) υδρογονοδεσμών. Είναι σχετικά ευκίνητες πλευρικές ομάδες (ιδιαίτερα της γλουταμίνης) οι οποίες όταν βρίσκονται στο εσωτερικό πρωτεΐνων σχεδόν πάντα εμπλέκονται στο σχηματισμό δεσμών υδρογόνου.

Asp (D), Glu (E)



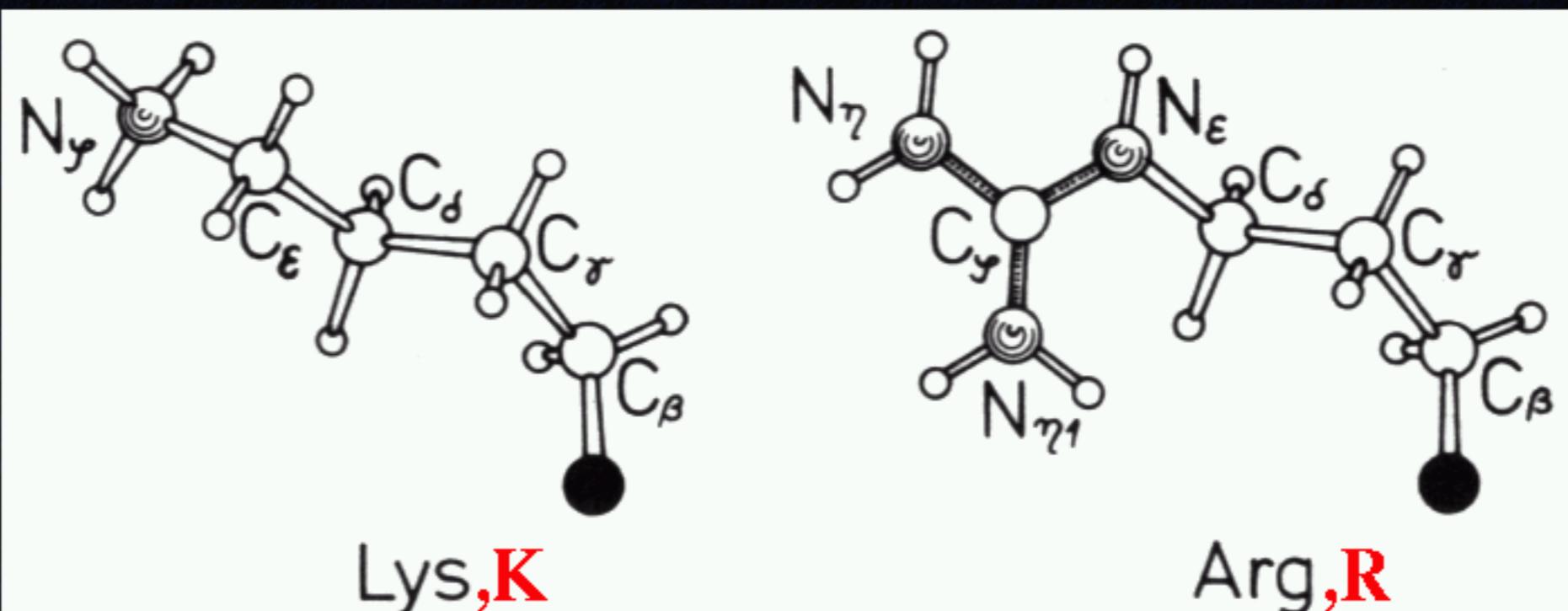
Το ασπαρτικό οξύ και το γλουταμικό οξύ είναι αρνητικά φορτισμένα αμινοξέα (σε φυσιολογικά pH: τα pK είναι 3.9 και 4.3 αντίστοιχα). Η σχετικά μικρή πλευρική ομάδα του ασπαρτικού μειώνει το εύρος των πιθανών διαμορφώσεων του και το κάνει πιο συνηθισμένο σε ενεργά κέντρα ενζύμων.

Lys (K), Arg (R)



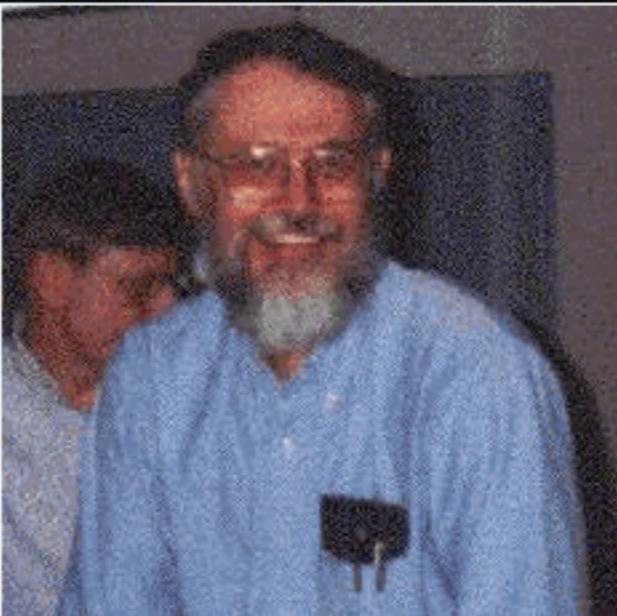
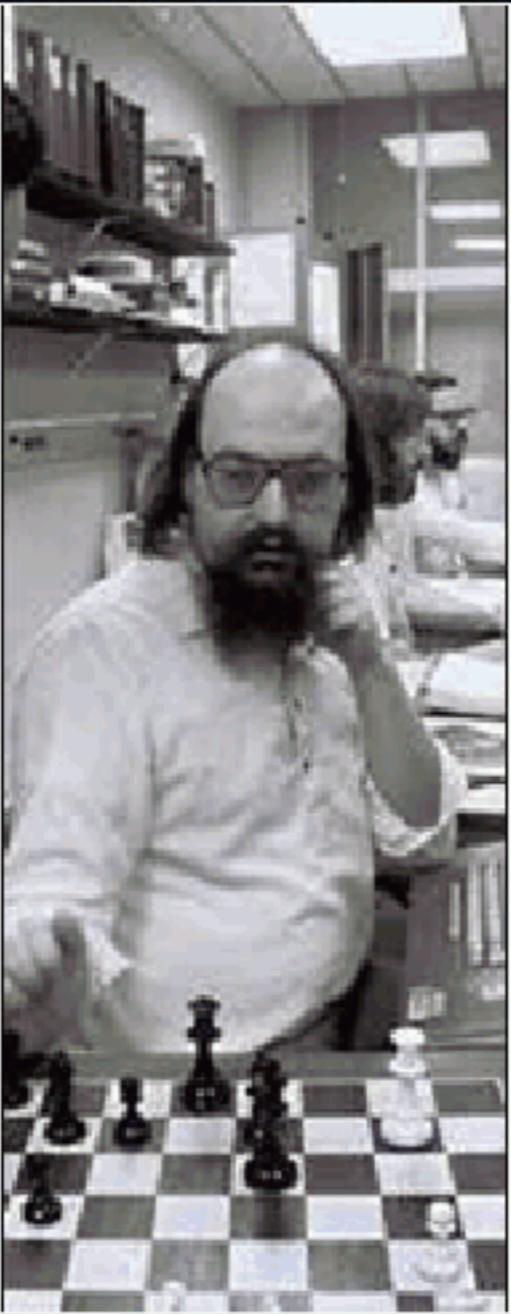
Η λυσίνη και η αργινίνη είναι θετικά φορτισμένα αμινοξέα (σε φυσιολογικά pH : τα pK είναι 10.5 και 12.5 αντίστοιχα). Είναι από τις πλέον ευκίνητες επιφανειακές πλευρικές ομάδες των πρωτεΐνων, σε τέτοιο βαθμό ώστε συνηθέστατα να μην υπάρχει πληροφορία για τη διαμόρφωση τους (τουλάχιστον από κρυσταλλογραφικά πειράματα).

Lys (K), Arg (R)



Παρ'όλα αυτά, μερικές φορές μπορούν να λάβουν μέρος σε γέφυρες άλατος (στο εσωτερικό των πρωτεΐνων) ή να είναι τμήματα του καταλυτικού κέντρου ενζύμων (για παράδειγμα, στις οψίνες το χρωμοφόρο συνδέεται ομοιοπολικά με μια λυσίνη).

Unix vs. Windows ?



Βιοτληροφορική: ορισμοί (ΝΙΗ)

Η έρευνα, ανάπτυξη ή εφαρμογή υπολογιστικών εργαλείων και προσεγγίσεων για την επέκταση της χρήσεως των βιολογικών δεδομένων καθώς και για τη συλλογή, αποθήκευση, οργάνωση, αρχειοθέτηση, ανάλυση και οπτικοποίηση αυτών των δεδομένων.

Υπολογιστική βιολογία : η ανάπτυξη και εφαρμογή αναλυτικών και θεωρητικών μεθόδων, μαθηματικών μοντέλων και τεχνικών υπολογιστικών προσομοιώσεων για τη μελέτη βιολογικών συστημάτων.

Θέση στη μοριακή βιολογία

1. Προσδιορισμός αλληλουχίας DNA

- Χαρτογράφηση
- Fragment assembly

2. Ανάλυση αλληλουχίας DNA

- Εύρεση γονιδίων, κωδικοποιούσας περιοχής
- Πολλαπλή στοίχιση αλληλουχιών
- Φυλογενετικά δένδρα

3. Ανάλυση πρωτεΐνικής αλληλουχίας

- Στοιχίσεις
- Εξελικτικές σχέσεις
- Πρόβλεψη δευτεροταγούς δομής
- Πρόβλεψη τριτοταγούς δομής ?

Θέση στη μοριακή βιολογία

4. Ανάλυση αλληλεπιδράσεων

- Μεταξύ πρωτεΐνων
- Μεταξύ πρωτεΐνων και ligands.

5. Ανάλυση έκφρασης πρωτεΐνων και γονιδίων

- Microarrays

6. Εύρεση και ανάλυση πιθανών φαρμάκων ?

ΒΙΟΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚή ή βιοΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗ ;

- Για τη μεγάλη πλειοψηφία των βιολόγων, η βιοπληροφορική είναι εργαλείο δουλειάς και αυτό που προέχει είναι η ικανότητα τους να κρίνουν τη βιολογική σημασία των αποτελεσμάτων που προκύπτουν από την εφαρμογή των υπολογιστικών εργαλείων.
- Για τη μεγάλη πλειοψηφία των εμπλεκόμενων μη βιολόγων (μαθηματικοί, επιστήμης υπολογιστών, ...), η βιοπληροφορική είναι το καθ'αυτό ερευνητικό αντικείμενο (και όχι μέσο προς σκοπό).

BΙΟπληροφορική λοιπόν, αλλά ...

Η κρίση των αποτελεσμάτων από την εφαρμογή υπολογιστικών εργαλείων, απουσία γνώσης των μεθόδων (αλγορίθμων) που κρύβονται πίσω από αυτά τα εργαλεία, είναι δύσκολη.

Η αλληλεπίδραση με ένα υπολογιστικό εργαλείο (π.χ. εισαγωγή ή αλλαγή παραμέτρων), απουσία γνώσης του πως δουλεύει αυτό το εργαλείο, είναι αδύνατη.

BΙΟΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚή ΛΟΙΠΤόν, αλλά ...

Επιπλέον, η προσήλωση στην "πρακτική" εφαρμογή, δημιουργεί την ψευδαίσθηση της ουσιαστικής γνώσης, όταν στην πραγματικότητα εκπαιδεύει μόνο την τεχνική δεξιότητα (μετρούμενη σε CPR, "clicks per minute").

Άρα, το ζητούμενο του μαθήματος ΔΕΝ είναι να εκπαιδευτείτε ως χρήστες όσων το δυνατόν περισσότερων προγραμμάτων και εργαλείων βιοπληροφορικής υπάρχουν διαθέσιμα, αλλά η σε βάθος περιγραφή μερικών από τους 'εκ των ουκ άνευ' αλγόριθμους και των εφαρμογών τους στη λύση βιολογικών προβλημάτων.

Αλγόριθμοι

Ορισμός : Αλγόριθμος ενός προβλήματος είναι η αναλυτική περιγραφή της ακολουθίας των βημάτων που απαιτούνται για την επίλυση του προβλήματος.

Πιο απλά είναι η αναλυτική περιγραφή της μεθόδου επίλυσης ενός προβλήματος.

Ειδικά για τον προγραμματισμό υπολογιστών, ο αλγόριθμος είναι μια περιγραφή της λογικής του προγράμματος.

Αλγόριθμοι : παραδείγματα

Εύρεση της θέσης ενός μοτίβου σε μια αλληλουχία :

Έστω μια αλληλουχία χαρακτήρων $D[n]$ (π.χ. μια αλληλουχία DNA ή πρωτεΐνης) και μια μικρότερη σε μήκος υπακολουθία χαρακτήρων $S[m]$ (με $m \leq n$).

Το πρόβλημα είναι να προσδιορίσουμε (εάν υπάρχει) τη θέση (ή τις θέσεις) της αλληλουχίας D στην οποία υπάρχει η υπακολουθία S .

Αλγόριθμοι : παραδείγματα

Υπάρχει, και εάν ναι, που, η υπακολουθία "FLARE"
στην κάτωθι αλληλουχία :

MGLPPLLSP SNSAPRSLGR VETPPEVVDF MVSLAEAPRG GRVLEPACAH
GPFLRAFREA HGTGYRFVGV EIDPKALDLP PWAEGILADF LLWEPGEAFD
LILGNPPYGI VGEASKYPIH VFKAVKDLYK KAFSTWKGKY NLYGAFLEKA
VRLLKPGGVL VFVVPATWLV LEDFALLREF LAREGKTSVY YLGEVFPQKK
VSAVVIRFQK SGKGLSLWDT QESESGFTPI LWAEYPHWEG EIIRFETEET
RKLEISGMPL GDLFHIFRAA RSPEFKKHPA VRKEPGPGLV PVLTGRNLKP
GWVDYEKNHS GLWMPKERAK ELRDFYATPH LVVAHTKGTR VVAAWDERAY
PWREEFHLLP KEGVRLDPSS LVQWLNSEAM QKHVRTLYRD FVPHLTML
ERLPVRREYG FHTSPESARN F

Αλγόριθμοι : παραδείγματα

- Για κάθε θέση (*i*) της αλληλουχίας *D* :
- Για κάθε θέση (*k*) της αλληλουχίας *S* :
Ισχύει $D[i+k] == S(k)$ για κάθε (*k*) ?
 - * Εάν _ναι_ : η θέση (*i*) είναι λύση
 - * Εάν _όχι_ : αύξησε το (*i*) κατά 1
και επανέλαβε (μέχρι το τέλος της
αλληλουχίας *D*) .

Αλγόριθμοι : παραδείγματα

```
for ( i=0 ; i < μήκος(D) ; i++ )
{
    for ( k=0 ; k < μήκος(S) ; k++ )
        if ( D[i+k] != S[k] )
            break;

    if ( k == μήκος(S) )
        τύπωσε "Λύση για τη θέση (i)"
}
```

Προγράμματα υπολογιστών

Ορισμός : Ένα πρόγραμμα είναι ένας αλγόριθμος κωδικοποιημένος σε μια γλώσσα προγραμματισμού.

Γλώσσα προγραμματισμού είναι ένα σύνολο εντολών κατανοητών από ηλεκτρονικό υπολογιστή. Υπάρχουν πολλές τέτοιες γλώσσες (π.χ. assembly, C, C++, FORTRAN, Perl, ...), κάθε μια με τα δικά της ιδιοτυπικά χαρακτηριστικά.

Διάκριση ανάμεσα σε κώδικα μηχανής (εκτελέσιμο πρόγραμμα) και το ίδιο πρόγραμμα γραμμένο σε κάποια υψηλού επιπέδου γλώσσα προγραμματισμού.

Βιοπληροφορική & προγράμματα

Για πολλά χρόνια το κυρίαρχο μοντέλο ήταν το "get the program & run", δηλαδή, ο κάθε χρήστης ήταν υποχρεωμένος να βρίσκει και να εγκαθιστά τα διάφορα προγράμματα στον υπολογιστή του.

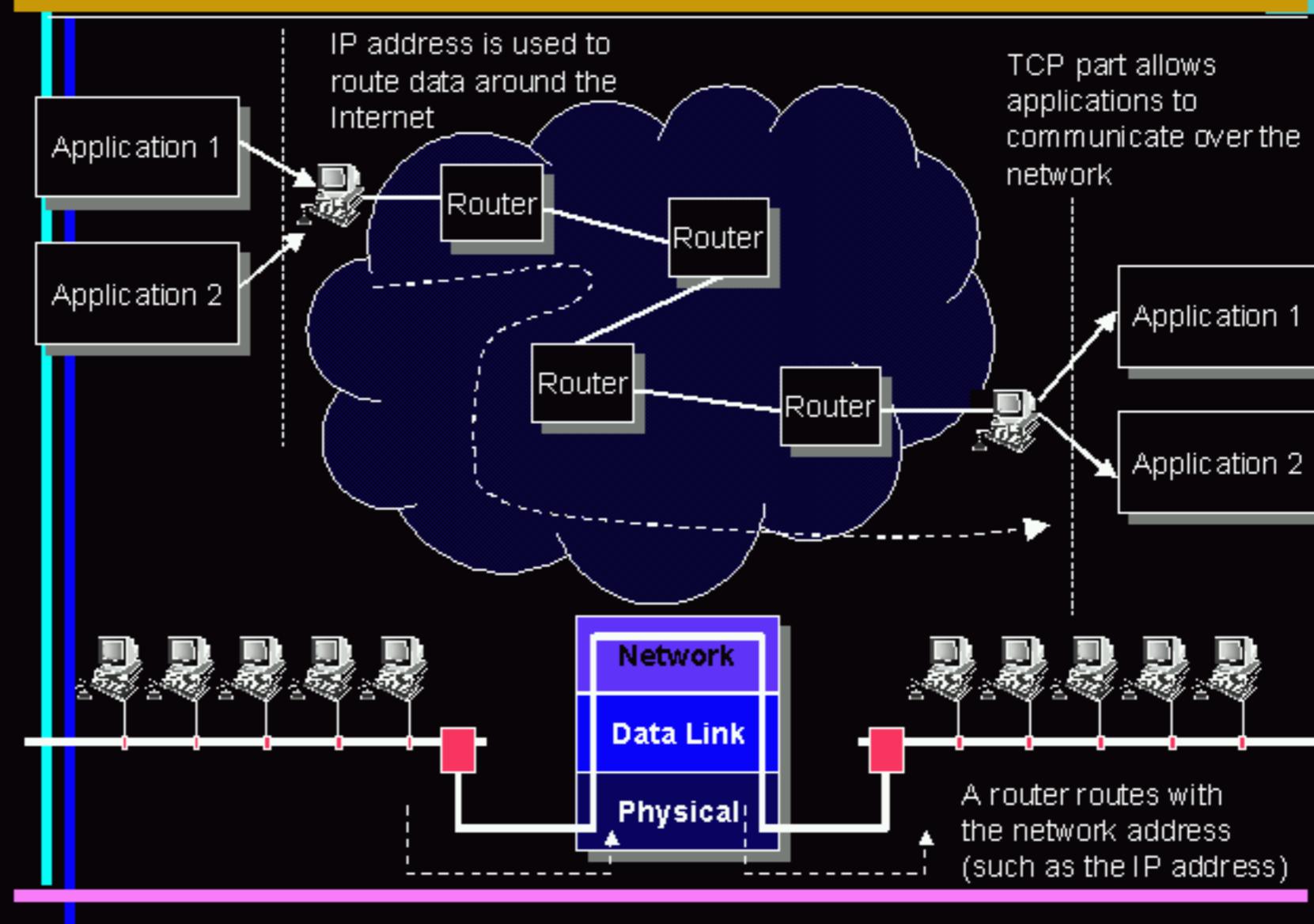
Η έλευση του δικτύου άλλαξε άρδην το κυρίαρχο μοντέλο : the client-server model.

The client-server model

Το πρόγραμμα αυτό καθ'αυτό είναι απροσπέλαστο και εκτελείται (αδιαφανώς για τον χρήστη) στο υπολογιστικό σύστημα αυτού που παρέχει την υπηρεσία. Ο χρήστης βλέπει μόνο ένα user interface (π.χ. μια φόρμα σε κάποια ιστοσελίδα), και τα αποτελέσματα από την εφαρμογή του προγράμματος. Ο φορέας για τη ροή πληροφορίας ανάμεσα στο χρήστη και το πρόγραμμα είναι το δίκτυο.

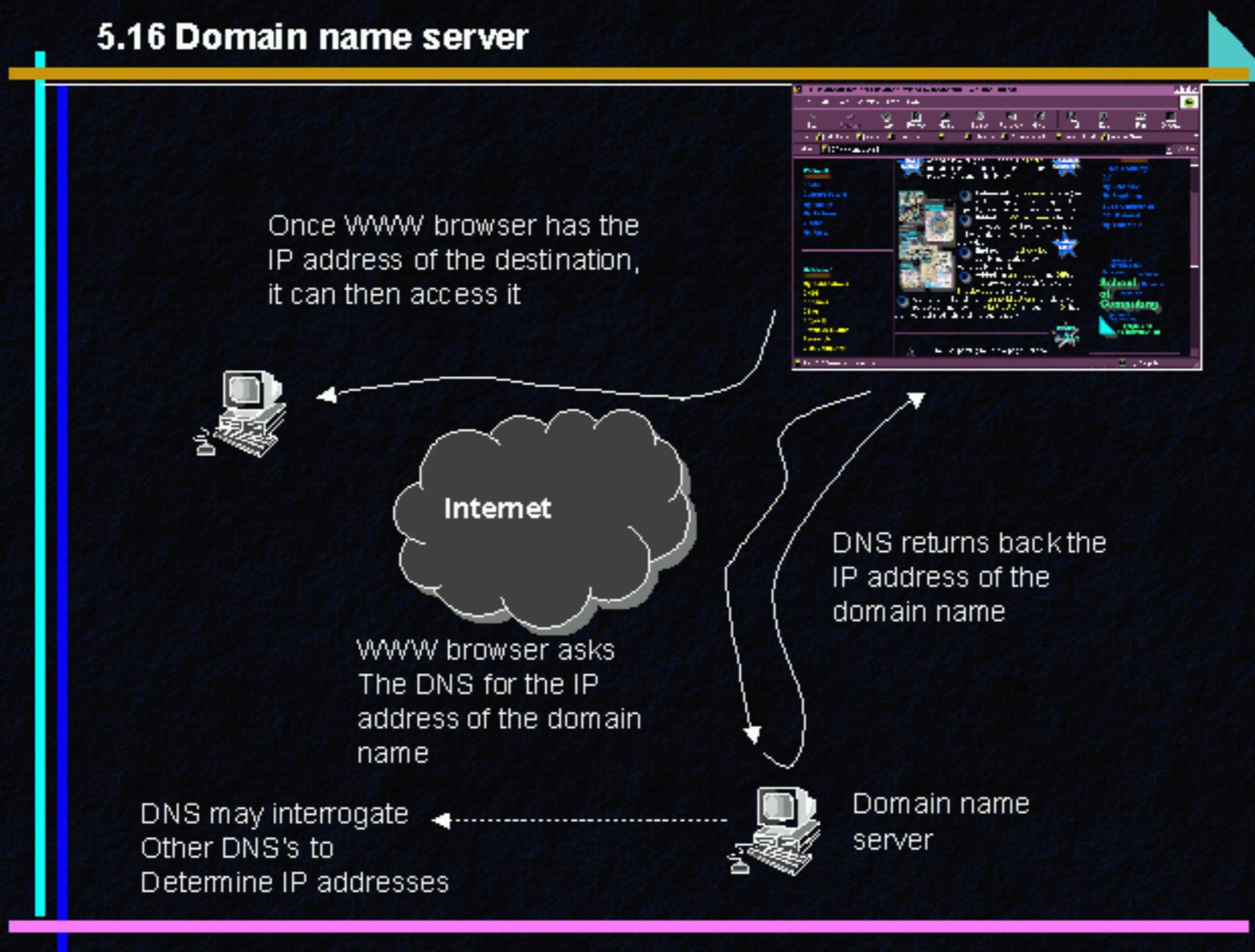
Παρένθεση : TCP/IP

5.2 IP and TCP



Παρένθεση : TCP/IP

5.16 Domain name server



The client-server model

Πλεονεκτήματα :

- Χρονοβόροι υπολογισμοί γίνονται εφικτοί για όλους μέσω της δημιουργίας λίγων αλλά ισχυρών εξυπηρετητών (servers).
- Υπολογισμοί που χρησιμοποιούν μεγάλες βάσεις δεδομένων γίνονται εφικτοί για όλους χωρίς να απαιτείται η (περιττή) δημιουργία πολλαπλών αντιγράφων των ίδιων δεδομένων.
- Οι τελικοί χρήστες αποφεύγουν όλες τις τεχνικές δυσκολίες εγκατάστασης και συντήρησης των προγραμμάτων, καθώς και τα έξοδα υλικού (hardware) που πιθανό να απαιτούνται.

The client-server model

Πλεονεκτήματα :

- Οι τελικοί χρήστες αποφεύγουν όλες τις τεχνικές δυσκολίες εγκατάστασης και συντήρησης των βάσεων δεδομένων, καθώς και τα έξοδα υλικού (hardware) που πιθανό να απαιτούνταν.
- "Ασφαλέστερο" περιβάλλον εργασίας για τους νέους χρήστες μέσω καλά σχεδιασμένων ιστοσελίδων (online help, forms with default values, ...).

The client-server model

Μειονεκτήματα :

- No internet ? No party.
- Αδυναμία των έμπειρων χρηστών να ελέγξουν ή και να τροποποιήσουν τα προγράμματα (μη ελεύθερο λογισμικό).
- Εξάρτηση από τους παρέχοντες την υπηρεσία.
- Πιθανότητα έξωθεν ελέγχου και παρακολούθησης των πεπραγμένων ενός χρήστη.

The client-server model

Μειονεκτήματα :

- No internet ? No party.
- Αδυναμία των έμπειρων χρηστών να ελέγξουν ή και να τροποποιήσουν τα προγράμματα (μη ελεύθερο λογισμικό).
- Εξάρτηση από τους παρέχοντες την υπηρεσία.
- Πιθανότητα έξωθεν ελέγχου και παρακολούθησης των πεπραγμένων ενός χρήστη.

Βάσεις δεδομένων

Βάσεις δεδομένων

Ανάλογα με τον τρόπο αποθήκευσης των δεδομένων μπορεί να είναι απλές συλλογές αρχείων (flat-file), σχεσιακές (relational) ή και αντικειμενοστραφείς (object-oriented databases).

Αυτή η διάκριση αφορά τους μηχανισμούς αποθήκευσης και διαχείρισης των δεδομένων και όχι τον τύπο των βιολογικών δεδομένων που περιέχουν (αλληλουχίες, μοτίβα, δομές, ...).

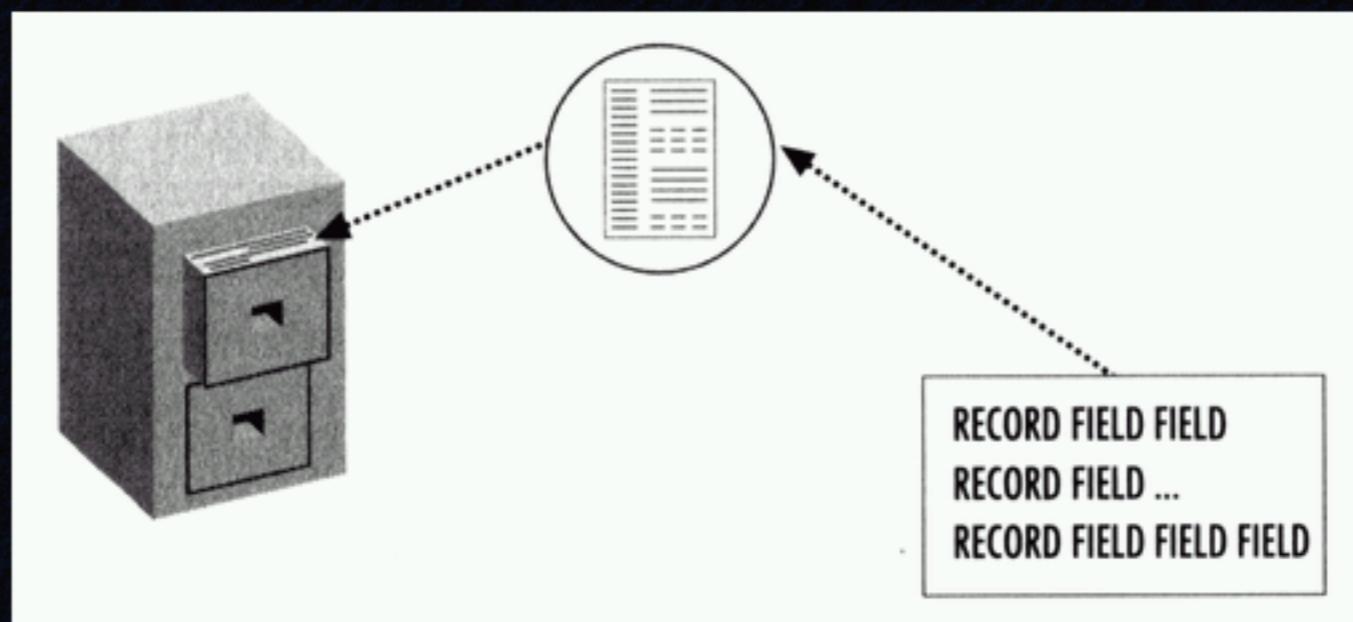
Η μεγάλη πλειοψηφία από τις γνωστότερες βάσεις δεδομένων είναι (ή παρουσιάζονται στον τελικό χρήστη σαν να είναι) του τύπου flat-file (π.χ. GenBank, Swiss-Prot, PDB, Prosite, ...).

Βάσεις τύπου flat-file

Πρόκειται για οργανωμένες συλλογές αρχείων με καθορισμένη (για κάθε αρχείο) μορφή (format).

Βάση => Αρχεία => Εγγραφές => Πεδία

Η αναζήτηση πληροφοριών σε αυτού του τύπου τις βάσεις πραγματοποιείται μέσω της χρήσης δεικτών.



Βάσεις τύπου flat-file

Παράδειγμα PDB καταχώρησης.

JRNL	AUTH	S. KLIMASAUSKAS, S. KUMAR, R. J. ROBERTS, X. CHENG	1MHT
JRNL	TITL	HHAI METHYLTRANSFERASE FLIPS ITS TARGET BASE OUT OF	1MHT
JRNL	TITL	2 THE DNA HELIX	1MHT
JRNL	REF	CELL (CAMBRIDGE, MASS.) V. 76 357 1994	1MHT
JRNL	REFN	ASTM CELLB5 US ISSN 0092-8674 0998	1MHT
REMARK	1		1MHT
REMARK	1	REFERENCE 1	1MHT
REMARK	1	AUTH X. CHENG, S. KUMAR, J. POSFAI, J. W. PFLUGRATH, R. J. ROBERTS	1MHT
REMARK	1	TITL CRYSTAL STRUCTURE OF THE HHAI DNA METHYLTRANSFERASE	1MHT
REMARK	1	TITL 2 COMPLEXED WITH S-ADENOSYL-L-METHIONINE	1MHT
REMARK	1	REF CELL (CAMBRIDGE, MASS.) V. 74 299 1993	1MHT
REMARK	1	REFN ASTM CELLB5 US ISSN 0092-8674 0998	1MHT
ATOM	1	N MET A 1 -31.051 33.174 72.182 1.00 18.75	1MHT
ATOM	2	CA MET A 1 -29.948 32.944 71.220 1.00 19.58	1MHT
ATOM	3	C MET A 1 -30.533 33.023 69.837 1.00 22.57	1MHT
ATOM	4	O MET A 1 -31.738 33.171 69.691 1.00 32.38	1MHT
ATOM	5	CB MET A 1 -29.249 31.598 71.463 1.00 17.84	1MHT

Σχεσιακές βάσεις δεδομένων

Σε αυτές, τα δεδομένα είναι οργανωμένα σε πίνακες. Κάθε πίνακας περιέχει πληροφορία για ένα αυτοτελές τμήμα της καταχώρησης (π.χ. ατομικές θέσεις, βιβλιογραφικές αναφορές, ...). Οι πίνακες με την σειρά τους είναι οργανωμένοι σε γραμμές (το αντίστοιχο των εγγραφών για τις flat-file) και οι γραμμές σε πεδία. Κάθε πεδίο πρέπει να περιέχει μία διακριτή πληροφορία (δεν μπορεί, για παράδειγμα, να είναι ένας κατάλογος από ονόματα).

Σχεσιακές βάσεις δεδομένων

mmCIF καταχώρηση : Πίνακας αναφορών

```
loop_
_citation.id
_citation.title
_citation.journal_abbrev
_citation.journal_volume
_citation.page_first
_citation.page_last
_citation.year
_citation.journal_id_ASTM
_citation.country
_citation.journal_id_ISSN
_citation.journal_id_CSD
_citation.book_publisher
_citation.pdbx_database_id_PubMed
primary 'HhaI methyltransferase flips its target base out of the DNA helix.'
Cell 76 357 369 1994 CELLB5 US 0092-8674 0998 ? 8293469
1
;Crystal Structure of the HhaI DNA Methyltransferase Complexed with SAM
;
'Cell (Cambridge, Mass.)' 74 299 ? 1993 CELLB5 US 0092-8674 0998 ? ?
```

Σχεσιακές βάσεις δεδομένων

mmCIF καταχώρηση : Πίνακας συγγραφέων

```
loop_
_citation_author.citation_id
_citation_author.name
primary 'Klimasauskas, S.'
primary 'Kumar, S.'
primary 'Roberts, R.J.'
primary 'Cheng, X.'
1      'Cheng, X.'
1      'Kumar, S.'
1      'Posfai, J.'
1      'Pflugrath, J.W.'
1      'Roberts, R.J.'
```

Σχεσιακές βάσεις δεδομένων

mmCIF καταχώρηση : Πίνακας ατομικών θέσεων

```
loop_
_atom_site.group_PDB
_atom_site.id
_atom_site.type_symbol
_atom_site.label_atom_id
_atom_site.label_alt_id
_atom_site.label_comp_id
_atom_site.label_asym_id
_atom_site.label_entity_id
_atom_site.label_seq_id
_atom_site.pdbx_PDB_ins_code
_atom_site.Cartn_x
_atom_site.Cartn_y
_atom_site.Cartn_z
_atom_site.occupancy
_atom_site.B_iso_or_equiv
ATOM   1    P P      . G   A 1 1    ? -22.481 25.283 100.660 1.00 56.36
ATOM   2    O OP1     . G   A 1 1    ? -21.792 25.069 102.003 1.00 56.38
```

Πρωτοταγείς βάσεις

Ανάλογα με τον τύπο των δεδομένων, οι βάσεις διακρίνονται σε πρωτοταγείς και δευτεροταγείς. Οι πρωτοταγείς βάσεις περιέχουν την πειραματικά προσδιορισμένη πληροφορία, για παράδειγμα τις αλληλουχίες νουκλεϊκών οξέων και πρωτεΐνων. Οι πλέον γνωστές πρωτοταγείς βάσεις νουκλεϊκών οξέων είναι οι : EMBL (European Molecular Biology Laboratory, Ευρώπη), GenBank (NCBI, Αμερική) και DDBJ (Ιαπωνία). Οι πλέον γνωστές πρωτοταγείς βάσεις πρωτεΐνικών αλληλουχιών είναι η SWISS-PROT, η PIR (Protein Information Resource), η TrEMBL (Translated EMBL), ...

Σύνθετες πρωτοταγείς βάσεις

Η πληθώρα των πρωτοταγών βάσεων δεδομένων, μαζί με την ετερογένεια του τρόπου αποθήκευσης των πληροφοριών σε αυτές, οδήγησε στην ανάγκη δημιουργίας σύνθετων βάσεων δεδομένων. Αυτές (όπως μαρτυρεί και το όνομα τους) είναι βάσεις οι οποίες χρησιμοποιούν πληροφορία από πολλές άλλες πρωτοταγείς βάσεις, την φιλτράρουν (για να αφαιρεθούν πολλαπλές παρουσίες των ίδιων δεδομένων) και την παρουσιάζουν στον τελικό χρήστη με έναν ενιαίο τρόπο. Παραδείγματα τέτοιων είναι οι : OWL(SWISS-PROT, PIR, GenBank, NRL-3D), NRDB, UniProt (SWISS-PROT+TrEMBL).

Δευτεροταγείς βάσεις

Οι δευτεροταγείς βάσεις περιέχουν πληροφορία η οποία προήλθε από την ανάλυση των πρωτοταγών βάσεων. Παραδείγματα τέτοιων βάσεων για π.χ. την εύρεση μοτίβων (με βάση πολλαπλές στοιχίσεις) είναι :

PROSITE	SWISS-PROT	Patterns
Profiles	SWISS-PROT	Weighted Matrices
PRINTS	OWL	Fingerprints
BLOCKS	PROSITE/PRINTS	Aligned motifs

Όπως και για τις πρωτοταγείς, έτσι και για τις δευτεροταγείς υπάρχουν σύνθετες βάσεις (π.χ. ProWeb).

Βάσεις, τολλές βάσεις ...

Data Banks Available at EMBL-Heldelberg

03-Oct-2003 16:35

Data Bank	Release No	Entries	Indexing Date	Group	Availability
SWISSPROT	122564	04-Apr-2003	Sequence	ok	
SWISSNEW	51725	11-Sep-2003	Sequence	ok	
NRDB	1324752	20-Sep-2003	Sequence	ok	
SWALL	1241995	11-Sep-2003	Sequence	ok	
TREMBLNEW	232563	20-Sep-2003	Sequence	ok	
TREMBL	1533261	21-Sep-2003	Sequence	ok	
SPTREMBL	944868	09-Jul-2003	Sequence	ok	
SPTREMBLNEW	195509	15-Sep-2003	Sequence	ok	
REMTREMBL	90492	09-Jul-2003	Sequence	ok	
PIR	283346	09-Sep-2003	Sequence	ok	
WORMPEP	19538	01-Oct-2003	Sequence	ok	
DROSOPHILA	14100	05-Apr-2003	Sequence	ok	
EMBLNEW	2664786	10-Jun-2003	Sequence	ok	
EMBL	9246940	17-Sep-2003	Sequence	ok	
EMBLEST	18001332	19-Sep-2003	Sequence	ok	
GENBANK	8497982	24-Jul-2003	Sequence	ok	

Δηλαδή, ττολλές βάσεις.

GENBANKEST	17026746	26-Jul-2003	Sequence	ok
REFSEQP	19804	11-Sep-2003	Sequence	ok
SUBTILIST	1	07-Apr-2003	Sequence	ok
PROSITE	1649	11-Sep-2003	SeqRelated	ok
PROSITEDOC	1213	11-Sep-2003	SeqRelated	ok
BLOCKS	4034	07-Apr-2003	SeqRelated	ok
EPD	1375	07-Apr-2003	SeqRelated	ok
ENZYME	4173	21-Aug-2003	SeqRelated	ok
PRINTS	865	07-Apr-2003	SeqRelated	ok
TFSITE	4342	07-Apr-2003	TransFac	ok
TFFACTOR	1799	07-Apr-2003	TransFac	ok
TFCELL	816	07-Apr-2003	TransFac	ok
TFCLASS	27	07-Apr-2003	TransFac	ok
TFMATRIX	246	07-Apr-2003	TransFac	ok
TFGENE	1035	07-Apr-2003	TransFac	ok
PDB	21838	29-Jul-2003	Protein3DStruct	ok
DSSP	20140	29-Jul-2003	Protein3DStruct	ok
HSSP	19838	29-Jul-2003	Protein3DStruct	ok
PDBFINDER	22448	15-Sep-2003	Protein3DStruct	ok
NRL3D	6063	07-Apr-2003	Protein3DStruct	ok

Δηλαδή, ττολλές βάσεις.

FLYGENES	7556	07-Apr-2003	Genome	ok
FLYREFS	0	07-Apr-2003	Genome	ok
OMIM	12322	07-Apr-2003	Mutations	ok
REPTILIA	8134	21-Aug-2003	Others	ok

The screenshot shows a Microsoft Internet Explorer window with a yellow title bar and a blue menu bar. The address bar contains the URL "file:///home/glykos/teach/biolinf2/biochemical_networks_web.html". The main content area displays a table titled "Biochemical networks - Internet resources". The table has a caption "Specialized Databases" and five rows. The columns represent the name of the database, its URL, a brief description, and the author's name.

Biochemical networks - Internet resources				
Specialized Databases				
SRS	http://srs.ebi.ac.uk/	Sequence Retrieval System	a collection of specialized databases	
KEGG metabolic pathways	http://www.genome.ad.jp/kegg/	Kyoto Encyclopaedia of Genes and Genomes	Metabolic pathways	Minoru Kanehisa
KEGG regulatory pathways	http://www.genome.ad.jp/kegg/regulation.html	Kyoto Encyclopaedia of Genes and Genomes	Regulatory pathways, signal transduction	Minoru Kanehisa
EMP	http://www.bibbase.com/EMP http://srs.ebi.ac.uk/		Enzyme function	
WIT - MPW	http://www.cme.msu.edu/WIT http://witmcg.anl.gov/WIT2/wit.html		Metabolic Pathways	

Βάσεις, αυξανόμενες βάσεις ...

Data Banks Available at EMBL-Heldelberg

03-Oct-2003 16:35

Data Bank	Release No	Entries	Indexing Date	Group	Availability
SWISSPROT		122564	04-Apr-2003	Sequence	ok
SWISSNEW		51725	11-Sep-2003	Sequence	ok
NRDB		1324752	20-Sep-2003	Sequence	ok
SWALL		1241995	11-Sep-2003	Sequence	ok
TREMBLNEW		232563	20-Sep-2003	Sequence	ok
TREMBL		1533261	21-Sep-2003	Sequence	ok
SPTREMBL		944868	09-Jul-2003	Sequence	ok
SPTREMBLNEW		195509	15-Sep-2003	Sequence	ok
REMTREMBL		90492	09-Jul-2003	Sequence	ok
PIR		283346	09-Sep-2003	Sequence	ok
WORMPEP		19538	01-Oct-2003	Sequence	ok
DROSOPHILA		14100	05-Apr-2003	Sequence	ok
EMBLNEW		2664786	10-Jun-2003	Sequence	ok
EMBL		9246940	17-Sep-2003	Sequence	ok
EMBLEST		18001332	19-Sep-2003	Sequence	ok
GENBANK		8497982	24-Jul-2003	Sequence	ok

Βάσεις, αυξανόμενες βάσεις ...

Data Banks Available at EMBL-Heldelberg

26-Oct-2005 10:35

Data Bank	Release No	Entries	Indexing Date	Group	Availability
SWISSPROT		163235	10-Jun-2005	Sequence	ok
SWISSNEW		75960	26-Oct-2005	Sequence	ok
NRDB		2116230	11-Oct-2005	Sequence	ok
SWALL		2612174	6-Oct-2005	Sequence	ok
TREMBLNEW		35463	09-Oct-2005	Sequence	ok
TREMBL		2576118	04-Oct-2005	Sequence	ok
SPTREMBL		1449374	6-Jun-2005	Sequence	ok
SPTREMBLNEW		143140	17-Jun-2005	Sequence	ok
REMTREMBL		92182	20-Jun-2005	Sequence	ok
PIR		283416	6-Jun-2005	Sequence	ok
WORMPEP		19538	16-Jun-2005	Sequence	ok
DROSOPHILA		14100	16-Jun-2005	Sequence	ok
EMBLNEW		3016836	19-Aug-2005	Sequence	ok
EMBL		18544391	19-Sep-2005	Sequence	ok
EMBLEST		28770984	18-Sep-2005	Sequence	ok
GENBANK		17810569	13-Jul-2005	Sequence	ok

Βάσεις, αυξανόμενες βάσεις ...

SWISSPROT	122564	04-Apr-2003	Sequence	ok
SWISSPROT	163235	10-Jun-2005	Sequence	ok
SWISSPROT	399749	14-Oct-2008	Sequence	ok
SWISSPROT	540958	16-Oct-2013	Sequence	ok

Παραδείγματα καταχωρήσεων

GenBank

LOCUS AF111785 5925 bp mRNA PRI 01-SEP-1999
DEFINITION Homo sapiens myosin heavy chain IIx/d mRNA, complete cds.
ACCESSION AF111785
VERSION AF111785.1 GI:4808814
KEYWORDS .
SOURCE Homo sapiens (human)
ORGANISM Homo sapiens
Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi;
Mammalia; Eutheria; Primates; Catarrhini; Hominidae; Homo.
REFERENCE 1 (bases 1 to 5925)
AUTHORS Weiss,A., McDonough,D., Wertman,B., Acakpo-Satchivi,L.,
Montgomery,K., Kucherlapati,R., Leinwand,L. and Krauter,K.
TITLE Organization of human and mouse skeletal myosin heavy chain gene
clusters is highly conserved
JOURNAL Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 96 (6), 2958-2963 (1999)
MEDLINE 99178997
PUBMED 10077619
REFERENCE 2 (bases 1 to 5925)
AUTHORS Weiss,A., Schiaffino,S. and Leinwand,L.A.
TITLE Comparative sequence analysis of the complete human sarcomeric
myosin heavy chain family: implications for functional diversity
JOURNAL J. Mol. Biol. 290 (1), 61-75 (1999)
MEDLINE 99318869
PUBMED 10388558
REFERENCE 3 (bases 1 to 5925)
AUTHORS Weiss,A. and Leinwand,L.A.
TITLE Direct Submission
JOURNAL Submitted (09-DEC-1998) MCDB, University of Colorado at Boulder,
Campus Box 0347, Boulder, Colorado 80309-0347, USA

Παραδείγματα : GenBank

FEATURES	Location/Qualifiers
source	1..5925 /organism="Homo sapiens" /mol_type="mRNA" /db_xref="taxon:9606" /chromosome="17" /map="17p13.1" /tissue_type="skeletal muscle"
CDS	1..5820 /note="MyHC" /codon_start=1 /product="myosin heavy chain IIx/d" /protein_id="AAD29951.1" /db_xref="GI:4808815" /translation="MSSDSEMAIFGEAAPFLRKSERERIEAQNKPFDAKTSVFVVDPK ESFVKATVQSREGGKVTAKEAGATVTVKDDQVFPMNPPKYDKIEDMAMMTHLHEPAV LYNLKERYAAWMIYTYSGLFCVTVPYKWLKVYNAEVVTAYRGKKRQEAPPHIFSISD ----- GLRKHERKVKELETYQTEEDRKNILRLQDLVDKLQAKVKSYKRQAEEAEQSNVNLSKF RRIQHELEEAERADIAESQVNKLRVKSREVHTKIISSEE"

BASE COUNT 1890 a 1300 c 1613 g 1122 t

ORIGIN

```
1 atgagttctg actctgagat gccatTTTT gggaggctg ctccTTTcct ccgaaagtct
 61 gaaagggagc gaattgaagc ccagaacaag cttttgatg ccaagacatc agtctttgtg
121 gtggacccta aggagtccct tgtgaaagca acagtgcaga gcagggagg ggggaagggtg
181 acagctaaga ccgaagctgg agctactgta acagtgaaag atgaccaagt cttccccatg
-----  
5821 ttatctaac tgctgaaagg tgaccaaaga aatgcacaaa atgtgaaaat ctttgtcact
5881 ccattttgta cttatgactt ttggagataa aaaatttatac tgcca
```

//

Παραδείγματα : GenBank

Η εμφάνιση της ίδιας καταχώρησης μέσω ενός browser δεν είναι σημαντικά διαφορετική [με την εξαίρεση της ύπαρξης ενεργών συνδέσεων προς άλλες βάσεις δεδομένων].

The screenshot shows a web browser window displaying the NCBI Sequence Viewer. The URL in the address bar is file:///home/glykos/teach/bioinf2/genbank.html. The page title is "NCBI Sequence Viewer". The main content area shows the GenBank record for AF111785. The record details are as follows:

AF111785. Homo sapiens myosin heavy chain IIx/d mRNA, complete cds.

LOCUS AF111785 5925 bp mRNA linear PRI 01-SEP-1999
DEFINITION Homo sapiens myosin heavy chain IIx/d mRNA, complete cds.
ACCESSION AF111785
VERSION AF111785.1 GI:4808814
KEYWORDS
SOURCE Homo sapiens (human)
ORGANISM Homo sapiens
Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi;
Mammalia; Eutheria; Primates; Catarrhini; Hominidae; Homo.
REFERENCE 1 (bases 1 to 5925)
AUTHORS Weiss,A., McDonough,D., Wertman,B., Acakpo-Satchivi,L.,
Montgomery,K., Kucherlapati,R., Leinwand,L. and Krauter,K.
TITLE Organization of human and mouse skeletal myosin heavy chain gene
clusters is highly conserved
JOURNAL Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 96 (6), 2958-2963 (1999)
MEDLINE 99178997
PUBMED 10077619
REFERENCE 2 (bases 1 to 5925)

Παραδείγματα : GenBank

LOCUS AF111785 5925 bp mRNA PRI 01-SEP-1999

- Κωδικός καταχώρησης (AF111785)
- Μήκος αλληλουχίας σε ζεύγη βάσεων (5925 bp)
- Τύπος μορίου (DNA, RNA)
- Κωδικός τμήματος της βάσης (EST για Expressed Sequence Tags, HTG για High Throughput Genome sequences, ...)
- Ημερομηνία δημοσιοποίησης της αλληλουχίας (01-SEP-1999)

Παραδείγματα : GenBank

DEFINITION Homo sapiens myosin heavy chain IIx/d mRNA, complete cds.

Σύνοψη της βιολογίας της καταχώρησης. Το συντακτικό της για mRNA είναι :

- Γένος είδος (Homo sapiens)
- Όνομα προϊόντος, σύμβολο γονιδίου (myosin heavy chain IIx/d)
- Ακολουθείται από "mRNA, complete cds.", όπου το cds σημαίνει "coding sequence".

Παραδείγματα : GenBank

ACCESSION AF111785

VERSION AF111785.1 GI:4808814

Χαρακτηριστικός κωδικός της καταχώρησης (AF111785) και έκδοση της (AF111785.1 GI:4808814).

Παραδείγματα : GenBank

SOURCE	Homo sapiens (human)
ORGANISM	Homo sapiens Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi; Mammalia; Eutheria; Primates; Catarrhini; Hominidae; Homo.

Οργανισμός προέλευσης και ταξινομική του.

Παραδείγματα : GenBank

REFERENCE	1 (bases 1 to 5925)
AUTHORS	Weiss,A. , McDonough,D. , Wertman,B. , Acakpo-Satchivi,L. , Montgomery,K. , Kucherlapati,R. , Leinwand,L. and Krauter,K.
TITLE	Organization of human and mouse skeletal myosin heavy chain gene clusters is highly conserved
JOURNAL	Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 96 (6) , 2958-2963 (1999)
MEDLINE	99178997
PUBMED	10077619

Αναφορά για την καταχώρηση με συγγραφείς, τίτλο άρθρου, περιοδικό (με τόμο, τεύχος, σελίδες και έτος). Οι κωδικοί "MEDLINE" και "PUBMED" είναι συνδέσεις (για το εν λόγω άρθρο) στις αντίστοιχες βιβλιογραφικές βάσεις δεδομένων.

Παραδείγματα : GenBank

FEATURES	Location/Qualifiers
source	1..5925 /organism="Homo sapiens"
CDS	1..5820 /note="MyHC"

Η λέξη-κλειδί "FEATURES" σηματοδοτεί την έναρξη ενός πίνακα με περιγραφές χαρακτηριστικών της καταχώρησης. Ο πίνακας αυτός χωρίζεται σε ενότητες [όπως "source", "CDS" (αρχικά του coding sequence), "Gene", "RNA"]. Κάθε μια από αυτές τις ενότητες χωρίζεται με τη σειρά της σε υπο-ενότητες που σηματοδοτούνται από λέξεις-κλειδιά [όπως "/organism=", "/mol_type=", "/chromosome=", "/codon_start=", ...].

Παραδείγματα : GenBank

FEATURES	Location/Qualifiers
source	1..5925 /organism="Homo sapiens" /mol_type="mRNA" /db_xref="taxon:9606" /chromosome="17" /map="17p13.1" /tissue_type="skeletal muscle"

Χαρακτηριστικά της πηγής της καταχώρησης (οργανισμός, τύπος μορίου, χρωμόσωμα, χαρτογραφική θέση, τύπος ιστού). Η καταχώρηση "/db_xref="taxon:9606" είναι ένα παράδειγμα σύνδεσης με μια άλλη βάση δεδομένων, σε αυτή την περίπτωση, ταξινομική.

Παραδείγματα : GenBank

CDS

```
1..5820
/note="MyHC"
/codon_start=1
/product="myosin heavy chain IIx/d"
/protein_id="AAD29951.1"
/db_xref="GI:4808815"
/translation="MSSDSEMAIFG.....
.....
....AEERADIAESQVNKLRLVKSREVHTKIIISSEE"
```

Χαρακτηριστικά κωδικοποιούσας αλληλουχίας. Δίδονται θέση (1..5820), μια σημείωση ("MyHC" για Myosin Heavy Chain), πλαίσιο ανάγνωσης (codon_start=1), όνομα προϊόντος (myosin heavy chain IIx/d), κωδικός αναγνώρισης του προϊόντος (protein_id="AAD29951.1"), μια σύνδεση για το προϊόν (db_xref="GI:4808815") και η αλληλουχία του προϊόντος (translation="MSS...EE").

Παραδείγματα : GenBank

BASE COUNT 1890 a 1300 c 1613 g 1122 t

ORIGIN

1 atgagttctg actctgagat ggccatttt
.....
5881 cttatgactt ttggagataa aaaatttatac tgcca

//

Η καθ'αυτό καταχώρηση. Δίδονται οι συχνότητες των βάσεων (1890-Α,1300-Κ,1613-Γ,1122-Τ), και η αλληλουχία το τέλος της οποίας σηματοδοτείται από το σύμβολο "//". Η λέξη-κλειδί "ORIGIN" (σε αυτό το παράδειγμα κενή) χρησιμοποιείται για να σημειωθεί η θέση στο γονιδίωμα της αλληλουχίας που ακολουθεί.

Παραδείγματα καταχωρήσεων

Swiss-Prot

ID GRAA_HUMAN STANDARD; PRT; 262 AA.

AC P12544;

DT 01-OCT-1989 (Rel. 12, Created)

DT 01-OCT-1989 (Rel. 12, Last sequence update)

DT 28-FEB-2003 (Rel. 41, Last annotation update)

DE Granzyme A precursor (EC 3.4.21.78) (Cytotoxic T-lymphocyte proteinase 1) (Hanukkah factor) (H factor) (HF) (Granzyme 1) (CTL tryptase) (Fragmentin 1).

GN GZMA OR CTLA3 OR HFSP.

OS Homo sapiens (Human).

OC Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi; Mammalia; Eutheria; Primates; Catarrhini; Hominidae; Homo.

OX NCBI_TaxID=9606;

RN [1]

RP SEQUENCE FROM N.A.

RC TISSUE=T-cell;

RX MEDLINE=88125000; PubMed=3257574;

RA Gershenfeld H.K., Hershberger R.J., Shows T.B., Weissman I.L.;

RT "Cloning and chromosomal assignment of a human cDNA encoding a T cell- and natural killer cell-specific trypsin-like serine protease.";

RL Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 85:1184-1188(1988).

RN [2]

RP SEQUENCE FROM N.A.

RC TISSUE=Blood;

RA Strausberg R.;

RL Submitted (OCT-2001) to the EMBL/GenBank/DDBJ databases.

Παραδείγματα : Swiss-Prot

RN [3]
RP SEQUENCE OF 1-23 FROM N.A.
RA Goralski T.J., Krensky A.M.;
RT "The upstream region of the human granzyme A locus contains both
RT positive and negative transcriptional regulatory elements.";
RL Submitted (NOV-1995) to the EMBL/GenBank/DDBJ databases.
RN [4]
RP SEQUENCE OF 29-53.
RX MEDLINE=88330824; PubMed=3047119;
RA Poe M., Bennett C.D., Biddison W.E., Blake J.T., Norton G.P.,
RA Rodkey J.A., Sigal N.H., Turner R.V., Wu J.K., Zweerink H.J.;
RT "Human cytotoxic lymphocyte tryptase. Its purification from granules
RT and the characterization of inhibitor and substrate specificity.";
RL J. Biol. Chem. 263:13215-13222(1988).
RN [5]
RP SEQUENCE OF 29-40, AND CHARACTERIZATION.
RX MEDLINE=89009866; PubMed=3262682;
RA Hameed A., Lowrey D.M., Lichtenheld M., Podack E.R.;
RT "Characterization of three serine esterases isolated from human IL-2
RT activated killer cells.";
RL J. Immunol. 141:3142-3147(1988).
RN [6]
RP SEQUENCE OF 29-39, AND CHARACTERIZATION.
RX MEDLINE=89035468; PubMed=3263427;
RA Kraehenbuhl O., Rey C., Jenne D.E., Lanzavecchia A., Groscurth P.,
RA Carrel S., Tschopp J.;
RT "Characterization of granzymes A and B isolated from granules of
RT cloned human cytotoxic T lymphocytes.";
RL J. Immunol. 141:3471-3477(1988).

Παραδείγματα : Swiss-Prot

RN [7]
RP 3D-STRUCTURE MODELING.
RX MEDLINE=89184501; PubMed=3237717;
RA Murphy M.E.P., Moult J., Bleackley R.C., Gershenfeld H.,
RA Weissman I.L., James M.N.G.;
RT "Comparative molecular model building of two serine proteinases from
RT cytotoxic T lymphocytes.";
RL Proteins 4:190-204 (1988).
CC -!- FUNCTION: This enzyme is necessary for target cell lysis in cell-
CC mediated immune responses. It cleaves after Lys or Arg. May be
CC involved in apoptosis.
CC -!- CATALYTIC ACTIVITY: Hydrolysis of proteins, including fibronectin,
CC type IV collagen and nucleolin. Preferential cleavage: Arg-|-Xaa,
CC Lys-|-Xaa >> Phe-|-Xaa in small molecule substrates.
CC -!- SUBUNIT: Homodimer; disulfide-linked.
CC -!- SUBCELLULAR LOCATION: Cytoplasmic granules.
CC -!- SIMILARITY: Belongs to peptidase family S1. Granzyme subfamily.
CC -----
CC This SWISS-PROT entry is copyright. It is produced through a collaboration
CC between the Swiss Institute of Bioinformatics and the EMBL outstation -
CC the European Bioinformatics Institute. There are no restrictions on its
CC use by non-profit institutions as long as its content is in no way
CC modified and this statement is not removed. Usage by and for commercial
CC entities requires a license agreement (See <http://www.isb-sib.ch/announce/>
CC or send an email to license@isb-sib.ch).
CC -----

Παραδείγματα : Swiss-Prot

DR EMBL; M18737; AAA52647.1; - .
DR EMBL; BC015739; AAH15739.1; - .
DR EMBL; U40006; AAD00009.1; - .
DR PIR; A28943; A28943.
DR PIR; A30525; A30525.
DR PIR; A30526; A30526.
DR PIR; A31372; A31372.
DR PDB; 1HF1; 15-OCT-94.
DR MEROPS; S01.135; - .
DR Genew; HGNC:4708; GZMA.
DR MIM; 140050; - .
DR InterPro; IPR001254; Ser_protease_Try.
DR Pfam; PF00089; trypsin; 1.
DR SMART; SM00020; Tryp_SPc; 1.
DR PROSITE; PS50240; TRYPSIN_DOM; 1.
DR PROSITE; PS00134; TRYPSIN_HIS; 1.
DR PROSITE; PS00135; TRYPSIN_SER; 1.
KW Hydrolase; Serine protease; Zymogen; Signal; T-cell; Cytolysis;
KW Apoptosis; 3D-structure.

Παραδείγματα : Swiss-Prot

FT	SIGNAL	1	26	
FT	PROPEP	27	28	ACTIVATION PEPTIDE.
FT	CHAIN	29	262	GRANZYME A.
FT	ACT_SITE	69	69	CHARGE RELAY SYSTEM (BY SIMILARITY).
FT	ACT_SITE	114	114	CHARGE RELAY SYSTEM (BY SIMILARITY).
FT	ACT_SITE	212	212	CHARGE RELAY SYSTEM (BY SIMILARITY).
FT	DISULFID	54	70	BY SIMILARITY.
FT	DISULFID	148	218	BY SIMILARITY.
FT	DISULFID	179	197	BY SIMILARITY.
FT	DISULFID	208	234	BY SIMILARITY.
FT	CARBOHYD	170	170	N-LINKED (GLCNAC...) (POTENTIAL).
FT	STRAND	30	30	
FT	STRAND	33	34	
FT	TURN	37	38	
FT	TURN	41	42	
FT	TURN	234	235	
FT	TURN	237	238	
FT	STRAND	241	245	
FT	TURN	246	249	
FT	HELIX	252	260	
SQ	SEQUENCE	262 AA;	28968 MW;	DA87363A0D92BAF4 CRC64;
SQ		MRNSYRFLAS	SLSVVVSLLL	IPEDVCEKII GGNEVTPHSR PYMVLLSLDR KTICAGALIA
SQ		KDWVLTAAC	NLNKRSQLVIL	GAHSITREEP TKQIMLVKE FPYP CYDPAT REGDLKLLQL
SQ		TEKAKINKYV	TILHLPKKGD DVKG PGTM CQV AGWGRTHNSA SWSDTLREVN ITI IDR KVCN	
SQ		DRNHYNFNPV	IGMNMVCAGS LRGG RDSCNG DSGS PLLCEG VFRGVTSFGL ENKCGD PRGP	
SQ		GVYILL SKKH	LNWI IIMTIKG AV	

//

Παραδείγματα : Swiss-Prot

ID GRAA_HUMAN STANDARD ; PRT ; 262 AA.
AC P12544 ;

Περιγραφικός κωδικός καταχώρησης, κατάσταση καταχώρησης (PRELIMINARY ή STANDARD), τύπος μορίου (PRT για PRoTein), αριθμός αμινοξικών καταλοίπων (262 Amino-Acids).

Το AC είναι ο σειριακός αριθμός καταχώρησης.

Παραδείγματα : Swiss-Prot

DT 01-OCT-1989 (Rel. 12, Created)
DT 01-OCT-1989 (Rel. 12, Last sequence update)
DT 28-FEB-2003 (Rel. 41, Last annotation update)

Ημερομηνίες δημιουργίας και μεταβολών της καταχώρησης.

Παραδείγματα : Swiss-Prot

DE Granzyme A precursor (EC 3.4.21.78) (Cytotoxic T-lymphocyte proteinase 1) (Hanukkah factor) (H factor) (HF) (Granzyme 1)
DE (CTL tryptase) (Fragmentin 1).

Συνοπτική περιγραφή της καταχώρησης. Συνήθως αρκεί για την πλήρη ταυτοποίηση της πρωτεΐνης.

Παραδείγματα : Swiss-Prot

GN GZMA OR CTLA3 OR HFSP.

Το όνομα του γονιδίου που κωδικοποιεί για την πρωτεΐνη που περιγράφεται στην καταχώρηση (GN για Gene Name).

Παραδείγματα : Swiss-Prot

OS Homo sapiens (Human).
OC Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi;
OC Mammalia; Eutheria; Primates; Catarrhini; Hominidae; Homo.
OX NCBI_TaxID=9606;

Οργανισμός προέλευσης, ταξινομική του, σύνδεση με εξωτερική βάση ταξινομικών δεδομένων (Organism Species, Organism Classification, Organism taxonomy).

Παραδείγματα : Swiss-Prot

RN [1]
RP SEQUENCE FROM N.A.
RC TISSUE=T-cell;
RX MEDLINE=88125000; PubMed=3257574;
RA Gershenfeld H.K., Hershberger R.J., Shows T.B., Weissman I.L.;
RT "Cloning and chromosomal assignment of a human cDNA encoding a T
cell- and natural killer cell-specific trypsin-like serine
protease.";
RL Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 85:1184-1188(1988).

Πεδία βιβλιογραφικών αναφορών. Δίδονται αύξων αριθμός αναφοράς (RN, Reference Number), η εργασία που εκτελέστηκε (RP, Reference Position), σχόλια (RC, Reference Comment), συνδέσεις με βιβλιογραφικές βάσεις (RX, Reference cross-reference), συγγραφείς (RA, Reference Author), τίτλος (RT, Reference Title), περιοδικό (RL, Reference Location).

Παραδείγματα : Swiss-Prot

RN [7]
RP 3D-STRUCTURE MODELING.
RX MEDLINE=89184501; PubMed=3237717;
RA Murphy M.E.P., Moult J., Bleackley R.C., Gershenson H.,
RA Weissman I.L., James M.N.G.;
RT "Comparative molecular model building of two serine proteinases
RT from cytotoxic T lymphocytes.";
RL Proteins 4:190-204 (1988) .

Πεδία βιβλιογραφικών αναφορών. Δίδονται αύξων αριθμός αναφοράς (RN, Reference Number), η εργασία που εκτελέστηκε (RP, Reference Position), σχόλια (RC, Reference Comment), συνδέσεις με βιβλιογραφικές βάσεις (RX, Reference cross-reference), συγγραφείς (RA, Reference Author), τίτλος (RT, Reference Title), περιοδικό (RL, Reference Location).

Παραδείγματα : Swiss-Prot

CC -!- FUNCTION: This enzyme is necessary for target cell lysis in cell-mediated immune responses. It cleaves after Lys or Arg.
CC May be involved in apoptosis.

CC -!- CATALYTIC ACTIVITY: Hydrolysis of proteins, including fibronectin, type IV collagen and nucleolin. Preferential cleavage: Arg-|-Xaa, Lys-|-Xaa >> Phe-|-Xaa in small molecule substrates.

CC -!- SUBUNIT: Homodimer; disulfide-linked.

CC -!- SUBCELLULAR LOCATION: Cytoplasmic granules.

CC -!- SIMILARITY: Belongs to peptidase family S1.
CC Granzyme subfamily.

Σχόλια για την καταχώρηση. Αυτά είναι οργανωμένα σε θέματα όπως ALLERGEN, ALTERNATIVE PRODUCTS, BIOTECHNOLOGY, CATALYTIC ACTIVITY, COFACTOR, DISEASE, DOMAIN, FUNCTION, INDUCTION, ...

Παραδείγματα : Swiss-Prot

DR EMBL; M18737; AAA52647.1; -.
DR EMBL; BC015739; AAH15739.1; -.
DR EMBL; U40006; AAD00009.1; -.
DR PIR; A28943; A28943.
DR PIR; A30525; A30525.
DR PIR; A30526; A30526.
DR PIR; A31372; A31372.
DR PDB; 1HF1; 15-OCT-94.
DR MEROPS; S01.135; -.
DR Genew; HGNC:4708; GZMA.
DR MIM; 140050; -.
DR InterPro; IPR001254; Ser_protease_Try.
DR Pfam; PF00089; trypsin; 1.
DR SMART; SM00020; Tryp_SPc; 1.
DR PROSITE; PS50240; TRYPSIN_DOM; 1.
DR PROSITE; PS00134; TRYPSIN_HIS; 1.
DR PROSITE; PS00135; TRYPSIN_SER; 1.

Αναφορές σε εξωτερικές βάσεις δεδομένων. Δίδονται η κωδική ονομασία βάσης και οι κωδικοί καταχώρησης.

Παραδείγματα : Swiss-Prot

KW Hydrolase; Serine protease; Zymogen; Signal; T-cell; Cytolysis;
KW Apoptosis; 3D-structure.

Λέξεις-κλειδιά για την καταχώρηση. Αυτές επιλέγονται από έναν προϋπάρχοντα κατάλογο πιθανών λέξεων-κλειδιών (ορίζονται από την Swiss-Prot).

Παραδείγματα : Swiss-Prot

FT	SIGNAL	1	26	
FT	PROPEP	27	28	ACTIVATION PEPTIDE.
FT	CHAIN	29	262	GRANZYME A.
FT	ACT_SITE	69	69	CHARGE RELAY SYSTEM (BY SIMILARITY).
FT	ACT_SITE	114	114	CHARGE RELAY SYSTEM (BY SIMILARITY).
FT	ACT_SITE	212	212	CHARGE RELAY SYSTEM (BY SIMILARITY).
FT	DISULFID	54	70	BY SIMILARITY.
FT	DISULFID	148	218	BY SIMILARITY.
FT	DISULFID	179	197	BY SIMILARITY.
FT	DISULFID	208	234	BY SIMILARITY.
FT	CARBOHYD	170	170	N-LINKED (GLCNAC...) (POTENTIAL).
FT	STRAND	30	30	
FT	STRAND	33	34	

Πίνακας με χαρακτηριστικά γνωρίσματα της αλληλουχίας όπως : μετά-μεταφραστικές τροποποιήσεις, κατάλοιπα ενεργού κέντρου, στοιχεία δευτερογούς δομής, ...

Παραδείγματα : Swiss-Prot

SQ SEQUENCE 262 AA; 28968 MW; DA87363A0D92BAF4 CRC64;
MRNSYRFLAS SLSVVVSLLL IPEDVCEKII GGNEVTPHSR PYMVLLSLDR KTICAGALIA
KDWVLTAACN NLNKRSQVIL GAHSITREEP TKQIMLVKKE FPYPYCYPAT REGDLKLLQL
TEKAKINKYV TILHLPKKGD DVKGPGTMCQV AGWGRTHNSA SWSDTLREVN ITI IDRKVCN
DRNHYNFNPV IGMNMVCAGS LRGGRDSCNG DSGSPLLCEG VFRGVTSFGL ENKCGDPRGP
GVYILLSKKH LNWIIMTIKG AV

//

Η καθ'αυτό αλληλουχία. Η πρώτη γραμμή δίδει :
αριθμό καταλοίπων, μοριακό βάρος (σε D) και,
τέλος, το αποτύπωμα της αλληλουχίας (CRC για
Cyclic Redundancy Check) για λόγους επιβεβαίωσης
της ορθότητας της αλληλουχίας.

Παραδείγματα : Swiss-Prot

Ενδιάμεσοι εξυπηρετητές όπως το SRS ή Entrez, διαμορφώνουν τις καταχωρήσεις ώστε να είναι αναγνώσιμες (σε απλά Αγγλικά) ...

The screenshot shows a web browser window with the following details:

- Toolbar:** File, Edit, View, Go, Bookmarks, Tools, Window, Help.
- Address Bar:** file:///home/glykos/teach/bioinf2/swiss-nice.html
- Menu Bar:** Home, Radio, Bookmarks, Members, WebMail, Connections, BizJournal, SmartUpdate, Marketplace.
- Title Bar:** Entry Page
- Content Area:**
 - Text Entry | SwissEntry | NiceProt**
 - Entry Information:** Entry from: SWALL (SPTR)
 - Entry Options:** Launch analysis tool: BlastP; Link to related information; Save entry; View: Printer Friendly.
 - General information:** Entry name: GRAA_HUMAN; Accession number: P12544; Created: Rel. 12, 1-OCT-1989; Sequence update: Rel. 12, 1-OCT-1989; Annotation update: Rel. 42, 15-SEP-2003.
 - Description and origin of the Protein:** Description: Granzyme A precursor (EC 3.4.21.78) (Cytotoxic T-lymphocyte protein factor) (HF) (Granzyme 1) (CTL tryptase) (Fragmentin 1); Gene name(s): GZMA OR CTLA3 OR HFSP; Organism source: Homo sapiens (Human); Taxonomy: Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi; Nematoda; Catarrhini; Hominidae; Homo; NCBI TaxID: 9606.
 - Links:** General, Description, References, Comments, Links, Keywords, Features.

Παραδείγματα : Swiss-Prot

... και όχι μόνο (δείτε active links για βιβλιογραφικές αναφορές).

The screenshot shows the UniProtKB entry page for protein P12544, GRAA_HUMAN. The page has a green header with the EMBL-EBI logo and search fields. On the left, there's a sidebar with 'Entry Information' (from UniProtKB), 'Entry Options' (analysis tool NCBI BLASTP, link to related info, save entry, printer friendly), and a 'Reset' button. The main content area has tabs for General, Description, References, Comments, Links, Keywords, Features, and Sequence. The 'General' tab is selected, showing details like Entry name (GRAA_HUMAN), Accession number (P12544, Q6IB36), Integrated date (01-OCT-1989), Sequence update (01-OCT-1989), Annotation update (23-SEP-2008), UniSave (P12544, Q6IB36), UniRef100 (UniRef100_P12544), and UniParc (UPI0000128A6E). The 'Description and origin of the Protein' section includes a table with rows for Description, Recommended (Full=Granzyme A; EC=3.4.21.78), Synonym (Full=Granzyme-1; Full=Cytotoxic T-lymphocyte proteinase 1; Full=Hanukkah factor; Short=H factor; Short=HF; Full=CTL tryptase; Full=Fragmentin-1), Flags (Precursor), Gene name(s) (GZMA), Synonym(s) (CTLA3 HFSP), Organism source (Homo sapiens (Human)), Taxonomy (Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi; Mammalia; Eutheria; Euarchontoglires; Primates; Haplorrhini; Catarrhini; Hominidae; Homo), and NCBI TaxID (9606). The 'References' section is at the bottom.

Παραδείγματα καταχωρήσεων

Prosite

Η Prosite είναι μια βάση πρωτεΐνικών μοτίβων. Πρόκειται για μια δευτερογενή βάση δεδομένων, πρωτογενής πηγή της οποίας είναι η Swiss-Prot. Είναι μια flat-file βάση, με την ιδιαιτερότητα ότι σε κάθε καταχώρηση αντιστοιχούν δύο αρχεία. Το πρώτο αρχείο περιέχει μια αναλυτική περιγραφή του μοτίβου, μαζί με λεπτομέρειες για τη βιολογική του σημασία και σχετικές βιβλιογραφικές αναφορές. Το δεύτερο αρχείο περιέχει το καθ'αυτό μοτίβο.

Παραδείγματα : Prosite (doc)

```
{PDOC00211}
{PS00238; OPSIN}
{BEGIN}
*****
* Visual pigments (opsins) retinal binding site *
*****
```

Visual pigments [1,2] are the light-absorbing molecules that mediate vision. They consist of an apoprotein, opsin, covalently linked to the chromophore cis-retinal. Vision is effected through the absorption of a photon by cis-retinal which is isomerized to trans-retinal. This isomerization leads to a change of conformation of the protein. Opsins are integral membrane proteins with seven transmembrane regions that belong to family 1 of G-protein coupled receptors (see <PDOC00210>).

In vertebrates four different pigments are generally found. Rod cells, which mediate vision in dim light, contain the pigment rhodopsin. Cone cells, which function in bright light, are responsible for color vision and contain three or more color pigments (for example, in mammals: red, blue and green).

In Drosophila, the eye is composed of 800 facets or ommatidia. Each ommatidium contains eight photoreceptor cells (R1-R8): the R1 to R6 cells are outer cells, R7 and R8 inner cells. Each of the three types of cells (R1-R6, R7 and R8) expresses a specific opsin.

Παραδείγματα : Prosite (doc)

Proteins evolutionary related to opsins include:

- Squid retinochrome, also known as retinal photoisomerase, which converts various isomers of retinal into 11-cis retinal.
- Mammalian opsin 3 (Encephalopsin) that may play a role in encephalic photoreception.
- Mammalian opsin 4 (Melanopsin) that may mediate regulation of circadian rhythms and acute suppression of pineal melatonin.
- Mammalian retinal pigment epithelium (RPE) RGR [3], a protein that may also act in retinal isomerization.

The attachment site for retinal in the above proteins is a conserved lysine residue in the middle of the seventh transmembrane helix. The pattern we developed includes this residue.

-Consensus pattern: [LIVMFWAC]-[PSGAC]-x(3)-[SAC]-K-[STALIMR]-[GSACPNV]-
[STACP]-x(2)-[DENF]-[AP]-x(2)-[IY]
[K is the retinal binding site]

-Sequences known to belong to this class detected by the pattern: ALL.

-Other sequence(s) detected in Swiss-Prot: 2.

-Last update: December 2001 / Pattern and text revised.

[1] Applebury M.L., Hargrave P.A.
Vision Res. 26:1881-1895(1986).

[2] Fryxell K.J., Meyerowitz E.M.
J. Mol. Evol. 33:367-378(1991).

[3] Shen D., Jiang M., Hao W., Tao L., Salazar M., Fong H.K.W.
Biochemistry 33:13117-13125(1994).

{END}

Παραδείγματα : Prosite (patterns)

```
ID OPSIN; PATTERN.
AC PS00238;
DT APR-1990 (CREATED); DEC-2001 (DATA UPDATE); DEC-2001 (INFO UPDATE).
DE Visual pigments (opsins) retinal binding site.
PA [LIVMFWAC]-[PSGAC]-x(3)-[SAC]-K-[STALIMR]-[GSACPNV]-[STACP]-x(2)-[DENF]-
PA [AP]-x(2)-[IY].
NR /RELEASE=41.25,134803;
NR /TOTAL=193(192); /POSITIVE=189(188); /UNKNOWN=0(0); /FALSE_POS=4(4);
NR /FALSE_NEG=1; /PARTIAL=4;
CC /TAXO-RANGE=?E??
CC /MAX-REPEAT=1;
CC /SITE=5,retinal;
DR Q9H1Y3, OPN3_HUMAN, T; Q9WUK7, OPN3_MOUSE, T; Q9UHM6, OPN4_HUMAN, T;
DR Q9QXZ9, OPN4_MOUSE, T; P22269, OPS1_CALVI, T; P06002, OPS1_DROME, T;
DR P28678, OPS1_DROPS, T; Q25157, OPS1_HEMSA, T; P35360, OPS1_LIMPO, T;
DR O15973, OPS1_PATYE, T; Q94741, OPS1_SCHGR, T; P08099, OPS2_DROME, T;
DR O14718, OPSX_HUMAN, T; O35214, OPSX_MOUSE, T; P23820, REIS_TODPA, T;
DR P47803, RGR_BOVIN, T; P47804, RGR_HUMAN, T;
DR P17645, OPS3_DROVI, P; O18911, OPSG_ODOVI, P; O18914, OPSR_CANFA, P;
DR O18912, OPSR_HORSE, P;
DR Q9Z2B3, RGR_MOUSE, N;
DR Q9CL24, OADB_PASMU, F; P22056, POLS_ONNVG, F; Q99NF8, RP17_MOUSE, F;
DR P09009, TERM_BPPRD, F;
3D 1BOJ; 1BOK; 1F88; 1HZX; 1JFP; 1KPN; 1KPW; 1KPx; 1LN6;
DO PDOC00211;
//
```

Παραδείγματα : Prosite (patterns)

ID OPSIN; PATTERN.

AC PS00238;

DT APR-1990 (CREATED) ; DEC-2001 (DATA UPDATE) ; DEC-2001 (INFO
UPDATE) .

Χαρακτηριστικό όνομα για την πρωτεΐνική οικογένεια (ID), κωδικός καταχώρησης (AC, accession number), και ημερομηνίες κατάθεσης και τροποποιήσεων.

Παραδείγματα : Prosite (patterns)

DE Visual pigments (opsins) retinal binding site.

Σύντομη περιγραφή της οικογένειας (εκτενής περιγραφή στο doc αρχείο που αντιστοιχεί στο μοτίβο).

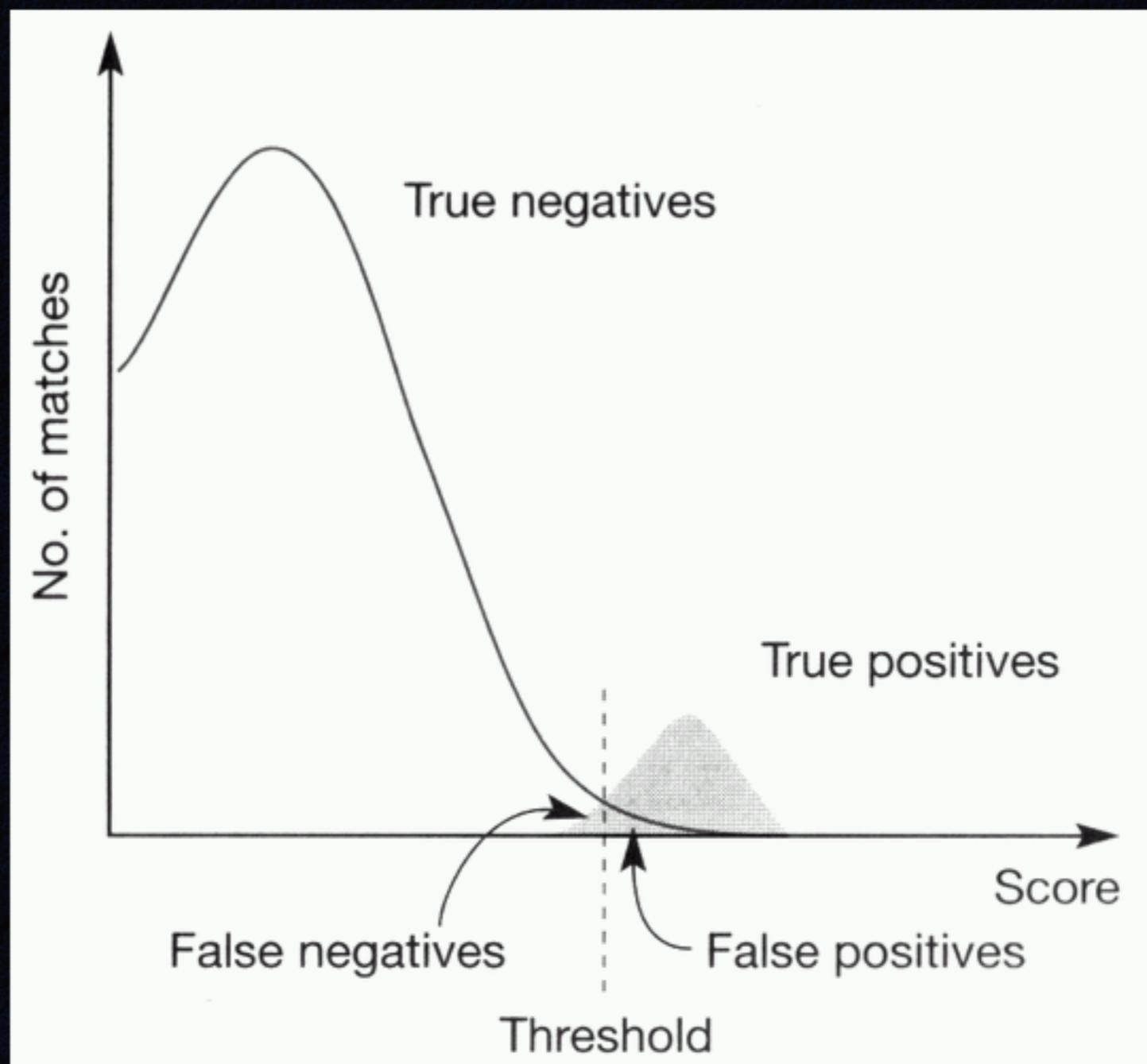
Παραδείγματα : Prosite (patterns)

PA [LIVMF^WA^C] - [PSGAC] - x(3) - [SAC] - K - [STALIMR] - [GSACP^N]
PA [STACP] - x(2) - [DENF] - [AP] - x(2) - [IY].

Το μοτίβο. Τα κεφαλαία γράμματα αντιστοιχούν σε αμινοξέα (ένα γράμμα - ένα αμινοξικό κατάλοιπο) με βάση τον κώδικα του ενός γράμματος. Οι αγκύλες περικλείουν αμινοξέα αποδεκτά για την θέση στην οποία αντιστοιχούν. Τα "x" σημαίνει ότι οποιοδήποτε αμινοξύ μπορεί να βρίσκεται στην εν λόγω θέση [x(N) σημαίνει ότι N διαδοχικά αμινοξέα είναι αόριστα].

Παραδείγματα : Prosite (patterns)

```
NR  /RELEASE=41.25,134803;  
NR  /TOTAL=193 ...  
NR  /FALSE_POS=4 ...  
NR  /FALSE_NEG=1 ...
```



Παραδείγματα : Prosite (patterns)

```
CC  /TAXO-RANGE=??E??; /MAX-REPEAT=1;  
CC  /SITE=5,retinal;
```

Συστηματική πρωτεΐνικής οικογένειας (Ε για Eucaryotic),
μέγιστος αριθμός επαναλήψεων του μοτίβου,
πληροφορία για λειτουργικά κέντρα της οικογένειας
(στη συγκεκριμένη περίπτωση πρόκειται για μία λυσίνη
στην οποία προσδένεται το χρωμοφόρο).

Παραδείγματα : Prosite (patterns)

DR Q9H1Y3, OPN3_HUMAN,T; Q9WUK7, OPN3_MOUSE,T; Q9UHM6, OPN4_HUMAN,T;
DR Q9QXZ9, OPN4_MOUSE,T; P22269, OPS1_CALVI,T; P06002, OPS1_DROME,T;

Κωδικοί καταχώρησης της Swiss-Prot (accession, ID),
και αποτέλεσμα εφαρμογής του μοτίβου :

T : αληθώς θετικό (True positive)

F : ψευδώς θετικό (False positive)

N : ψευδώς αρνητικό (false Negative)

P : πιθανώς θετικό ('Possible' match), κυρίως
για την περίπτωση ελλειπών αλληλουχιών.

Παραδείγματα : Prosite (patterns)

3D 1BOJ; 1BOK; 1F88; 1HZX; 1JFP; 1KPN; 1KPW; 1KPx; 1LN6;
DO PDOC00211;

Αναφορές στην PDB (βάση δομών) για μέλη της οικογένειας, και κωδικός καταχώρησης του αρχείου που περιέχει την αναλυτική περιγραφή της οικογένειας (DO για document).

Παραδείγματα : Prosite

Ενδιάμεσοι εξυπηρετητές όπως το SRS ή Entrez, διαμορφώνουν τις καταχωρήσεις ώστε να είναι αναγνώσιμες (σε απλά Αγγλικά) ...

The screenshot shows a web browser window with the following details:

- Toolbar:** File, Edit, View, Go, Bookmarks, Tools, Window, Help.
- Address Bar:** file:///home/glykos/teach/bioinf2/prosite-niceview.html
- Menu Bar:** Home, Radio, Bookmarks, Members, WebMail, Connections, BizJournal, SmartUpdate, Marketplace.
- Title Bar:** NiceSite View of PROSITE: PDOC00211
- Navigation Bar:** ExPASy Home page, Site Map, Search ExPASy, Contact us, PROSITE. Hosted by NCSC US. Mirror sites: Bolivia, Canada, China, Korea, Switzerland, Taiwan.
- Search Bar:** Search PROSITE for [input field] Go Clear
- Main Content:**
 - PROSITE cross-reference(s):** PS00238; OPSIN. Retrieve an alignment of Swiss-Prot true positive hits:
[Clustal format, color, condensed view] [Clustal format, color] [Clustal format, plain text] [Fasta format]
 - Documentation:** Visual pigments [1,2] are the light-absorbing molecules that mediate vision. They consist of an apoprotein, opsin, covalently linked to the chromophore cis-retinal. Vision is effected through the absorption of a photon by cis-retinal which is isomerized to trans-retinal. This isomerization leads to a change of conformation of the protein. Opsins are integral membrane proteins with seven transmembrane regions that belong to family 1 of G-protein coupled receptors (see <[PDOC00210](#)>).

Παραδείγματα : Prosite

... και όχι μόνο ...

ExPASy Home page Site Map Search ExPASy Contact us PROSITE Swiss-Prot
Search Swiss-Prot/TrEMBL for Go Clear

prosite

Home ScanProsite ProRule Documents Downloads Links Funding

Sequence logo for Visual pigments (opsins) retinal binding site (PS00238)

PS00238 / #=223

Number of UniProtKB/Swiss-Prot true positive hits used to build the logo: 223 [More details]

ExPASy Home page Site Map Search ExPASy Contact us PROSITE Swiss-Prot
Hosted by CBR Canada | Mirror sites: Australia | Brazil | China | Korea | Switzerland |

Βάσεις δομικής βιολογίας

Στη δομική βιολογία τα πράγματα είναι απλούστερα : υπάρχει μία μόνο πρωτοταγής βάση δομών επιπέδου ατομικών μοντέλων, η PDB (Protein Data Bank). Τα προϊόντα της ανάλυσης και ταξινόμησης αυτών των δομών εμπεριέχονται σε μία πληθώρα δευτεροταγών βάσεων.

Protein Data Bank (PDB)

Είναι η μοναδική πρωτοταγής βάση δεδομένων της δομικής βιολογίας. Είναι φαινομενικά μια flat-file βάση, αν και στην πραγματικότητα είναι σχεσιακή. Στις επόμενες διαφάνειες θα παρουσιαστεί η μορφή μιας καταχώρησης της.
Η διεύθυνση της βάσης είναι :

<http://www.pdb.org/>

PDB : Ταράδειγμα

HEADER TRANSCRIPTION REGULATION 16-JAN-99 1B6Q
TITLE ALANINE 31 PROLINE MUTANT OF ROP PROTEIN
COMPND MOL_ID: 1;
COMPND 2 MOLECULE: ROP;
COMPND 3 CHAIN: NULL;
COMPND 4 SYNONYM: ROM;
COMPND 5 ENGINEERED: YES;
COMPND 6 MUTATION: A31P;
COMPND 7 BIOLOGICAL_UNIT: HOMODIMER
SOURCE MOL_ID: 1;
SOURCE 2 ORGANISM_SCIENTIFIC: ESCHERICHIA COLI;
SOURCE 3 CELLULAR_LOCATION: CYTOPLASM;
SOURCE 4 PLASMID: COLE1;
SOURCE 5 GENE: ROP;
SOURCE 6 EXPRESSION_SYSTEM: ESCHERICHIA COLI;
SOURCE 7 EXPRESSION_SYSTEM_STRAIN: 71/72 (71/18 PLUS PCI857);
SOURCE 8 EXPRESSION_SYSTEM_PLASMID: PEX43

PDB : ΤΤΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

KEYWDS TRANSCRIPTION REGULATION
EXPDTA X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR N. GLYKOS, G. CESARENI, M. KOKKINIDIS
REVDAT 1 09-JUL-99 1B6Q 0
JRNL AUTH N. M. GLYKOS, G. CESARENI, M. KOKKINIDIS
JRNL TITL PROTEIN PLASTICITY TO THE EXTREME: CHANGING THE
JRNL TITL 2 TOPOLOGY OF A 4-ALPHA-HELICAL BUNDLE WITH A SINGLE
JRNL TITL 3 AMINO-ACID SUBSTITUTION
JRNL REF STRUCTURE (LONDON) V. 7 597 1999
JRNL REFN ASTM STRUE6 UK ISSN 0969-2126 2005
REMARK 1
REMARK 1 REFERENCE 1
REMARK 1 TITL MEANINGFUL REFINEMENT OF POLY-ALANINE MODELS USING
REMARK 1 TITL 2 RIGID-BODY SIMULATED ANNEALING : APPLICATION TO
REMARK 1 TITL 3 THE STRUCTURE DETERMINATION OF THE A31P ROP MUTANT
REMARK 1 REF ACTA CRYSTALLOGR., SECT.D V. 55 1301 1999
REMARK 1 REFN ASTM ABCRE6 DK ISSN 0907-4449 0766

PDB : ΤΤΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

REMARK 2 RESOLUTION. 1.80 ANGSTROMS.

REMARK 3

REMARK 3 REFINEMENT.

REMARK 3 PROGRAM : X-PLOR 3.851

REMARK 3 AUTHORS : BRUNGER

REMARK 3

REMARK 3 DATA USED IN REFINEMENT.

REMARK 3 RESOLUTION RANGE HIGH (ANGSTROMS) : 1.80

REMARK 3 RESOLUTION RANGE LOW (ANGSTROMS) : 40.825

REMARK 3 DATA CUTOFF (SIGMA(F)) : 0.0

REMARK 3 DATA CUTOFF HIGH (ABS(F)) : NULL

REMARK 3 DATA CUTOFF LOW (ABS(F)) : NULL

REMARK 3 COMPLETENESS (WORKING+TEST) (%) : 99.9

REMARK 3 NUMBER OF REFLECTIONS : 5103

REMARK 3

REMARK 3 FIT TO DATA USED IN REFINEMENT.

REMARK 3 CROSS-VALIDATION METHOD : THROUGHOUT

REMARK 3 FREE R VALUE TEST SET SELECTION : RANDOM

REMARK 3 R VALUE (WORKING SET) : 0.189

REMARK 3 FREE R VALUE : 0.240

REMARK 3 FREE R VALUE TEST SET SIZE (%) : 5.0

REMARK 3 FREE R VALUE TEST SET COUNT : 286

PDB : ΤΤΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

REMARK 3 FIT IN THE HIGHEST RESOLUTION BIN.

REMARK 3 TOTAL NUMBER OF BINS USED : 8

REMARK 3 BIN RESOLUTION RANGE HIGH (A) : 1.80

REMARK 3 BIN RESOLUTION RANGE LOW (A) : 1.88

REMARK 3 BIN COMPLETENESS (WORKING+TEST) (%) : 99.9

REMARK 3 REFLECTIONS IN BIN (WORKING SET) : 588

REMARK 3 BIN R VALUE (WORKING SET) : 0.332

REMARK 3 BIN FREE R VALUE : 0.400

REMARK 3 BIN FREE R VALUE TEST SET SIZE (%) : 5.0

REMARK 3 BIN FREE R VALUE TEST SET COUNT : 31

REMARK 3 ESTIMATED ERROR OF BIN FREE R VALUE : NULL

REMARK 3

REMARK 3 NUMBER OF NON-HYDROGEN ATOMS USED IN REFINEMENT.

REMARK 3 PROTEIN ATOMS : 489

REMARK 3 NUCLEIC ACID ATOMS : 0

REMARK 3 HETEROGEN ATOMS : 0

REMARK 3 SOLVENT ATOMS : 56

REMARK 3

PDB : ΤΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

REMARK 3 B VALUES.

REMARK 3 FROM WILSON PLOT (A**2) : 28.9

REMARK 3 MEAN B VALUE (OVERALL, A**2) : 26.0

REMARK 3 OVERALL ANISOTROPIC B VALUE.

REMARK 3

REMARK 3 ESTIMATED COORDINATE ERROR.

REMARK 3 ESD FROM LUZZATI PLOT (A) : 0.23

REMARK 3 ESD FROM SIGMAA (A) : NULL

REMARK 3 LOW RESOLUTION CUTOFF (A) : 40.825

REMARK 3

REMARK 3 CROSS-VALIDATED ESTIMATED COORDINATE ERROR.

REMARK 3 ESD FROM C-V LUZZATI PLOT (A) : NULL

REMARK 3 ESD FROM C-V SIGMAA (A) : NULL

REMARK 3

REMARK 3 RMS DEVIATIONS FROM IDEAL VALUES.

REMARK 3 BOND LENGTHS (A) : 0.007

REMARK 3 BOND ANGLES (DEGREES) : 0.909

REMARK 3 DIHEDRAL ANGLES (DEGREES) : NULL

REMARK 3 IMPROPER ANGLES (DEGREES) : NULL

PDB : Ταράδειγμα

REMARK 200 EXPERIMENTAL DETAILS

REMARK 200 EXPERIMENT TYPE : X-RAY DIFFRACTION

REMARK 200 DATE OF DATA COLLECTION : NULL

REMARK 200 TEMPERATURE (KELVIN) : 293

REMARK 200 PH : 4.3

REMARK 200 NUMBER OF CRYSTALS USED : 1

REMARK 200

REMARK 200 SYNCHROTRON (Y/N) : N

REMARK 200 RADIATION SOURCE : NULL

REMARK 200 BEAMLINE : NULL

REMARK 200 X-RAY GENERATOR MODEL : SEALED TUBE

REMARK 200 MONOCHROMATIC OR LAUE (M/L) : M

REMARK 200 WAVELENGTH OR RANGE (Å) : 1.5418

REMARK 200 MONOCHROMATOR : GRAPHITE MONOCHROMATOR

REMARK 200 OPTICS : MONOCHROMATOR

REMARK 200

PDB : ΤΤΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

REMARK 200 DETECTOR TYPE : DIFFRACTOMETER
REMARK 200 DETECTOR MANUFACTURER : ENRAF-NONIUS
REMARK 200 INTENSITY-INTEGRATION SOFTWARE : CAD4 SOFTWARE
REMARK 200 DATA SCALING SOFTWARE : CAD4 SOFTWARE
REMARK 200
REMARK 200 NUMBER OF UNIQUE REFLECTIONS : 5103
REMARK 200 RESOLUTION RANGE HIGH (Å) : 1.80
REMARK 200 RESOLUTION RANGE LOW (Å) : 40.825
REMARK 200 REJECTION CRITERIA (SIGMA(I)) : NONE
REMARK 200

PDB : ΤΤΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

REMARK 200 OVERALL.

REMARK 200 COMPLETENESS FOR RANGE (%) : 99.9

REMARK 200 DATA REDUNDANCY : 1.0

REMARK 200 R MERGE (I) : NULL

REMARK 200 R SYM (I) : NONE

REMARK 200 <I/SIGMA(I)> FOR THE DATA SET : 12.4

REMARK 200

REMARK 200 IN THE HIGHEST RESOLUTION SHELL.

REMARK 200 HIGHEST RESOLUTION SHELL, RANGE HIGH (A) : 1.80

REMARK 200 HIGHEST RESOLUTION SHELL, RANGE LOW (A) : 1.86

REMARK 200 COMPLETENESS FOR SHELL (%) : 99.6

REMARK 200 DATA REDUNDANCY IN SHELL : 1.0

REMARK 200 R MERGE FOR SHELL (I) : NULL

REMARK 200 R SYM FOR SHELL (I) : NONE

REMARK 200 <I/SIGMA(I)> FOR SHELL : 2.48

REMARK 200

PDB : Ταράδειγμα

REMARK 350 GENERATING THE BIOMOLECULE
REMARK 350 COORDINATES FOR A COMPLETE MULTIMER REPRESENTING THE KNOWN
REMARK 350 BIOLOGICALLY SIGNIFICANT OLIGOMERIZATION STATE OF THE
REMARK 350 MOLECULE CAN BE GENERATED BY APPLYING BIOMT TRANSFORMATIONS
REMARK 350 GIVEN BELOW. BOTH NON-CRYSTALLOGRAPHIC AND
REMARK 350 CRYSTALLOGRAPHIC OPERATIONS ARE GIVEN.
REMARK 350
REMARK 350 APPLY THE FOLLOWING TO CHAINS: NULL
REMARK 350 BIOMT1 1 -1.000000 0.000000 0.000000 0.000000
REMARK 350 BIOMT2 1 0.000000 1.000000 0.000000 0.000000
REMARK 350 BIOMT3 1 0.000000 0.000000 -1.000000 40.70000

PDB : Ταράδειγμα

REMARK 999 SEQUENCE

REMARK 999 1B6Q SWS P03051 57 - 63 NOT IN ATOMS LIST

DBREF 1B6Q 1 56 SWS P03051 ROP_ECOLI 1 56

SEQADV 1B6Q PRO 31 SWS P03051 ALA 31 ENGINEERED MUTATION

SEQRES 1 63 MET THR LYS GLN GLU LYS THR ALA LEU ASN MET ALA ARG

SEQRES 2 63 PHE ILE ARG SER GLN THR LEU THR LEU LEU GLU LYS LEU

SEQRES 3 63 ASN GLU LEU ASP PRO ASP GLU GLN ALA ASP ILE CYS GLU

SEQRES 4 63 SER LEU HIS ASP HIS ALA ASP GLU LEU TYR ARG SER CYS

SEQRES 5 63 LEU ALA ARG PHE GLY ASP ASP GLY GLU ASN LEU

FORMUL 2 HOH *56(H2 O1)

HELIX 1 1 LYS 3 GLU 28 1 26

HELIX 2 2 PRO 31 ALA 54 1 24

CRYST1 30.400 42.100 81.400 90.00 90.00 90.00 C 2 2 21 8

ORIGX1 1.000000 0.000000 0.000000 0.000000

ORIGX2 0.000000 1.000000 0.000000 0.000000

ORIGX3 0.000000 0.000000 1.000000 0.000000

SCALE1 0.032895 0.000000 0.000000 0.000000

SCALE2 0.000000 0.023753 0.000000 0.000000

SCALE3 0.000000 0.000000 0.012285 0.000000

PDB : Ταράδειγμα

ATOM	1	N	MET	1	-2.053	13.510	-6.199	1.00	47.14
ATOM	2	CA	MET	1	-1.894	13.110	-4.767	1.00	49.45
ATOM	3	C	MET	1	-0.688	12.186	-4.582	1.00	47.94
ATOM	4	O	MET	1	-0.774	10.982	-4.841	1.00	51.90
ATOM	5	CB	MET	1	-3.163	12.402	-4.276	1.00	51.84
ATOM	6	CG	MET	1	-3.059	11.814	-2.871	1.00	57.35
ATOM	7	SD	MET	1	-4.121	12.669	-1.683	1.00	62.43
ATOM	8	CE	MET	1	-2.938	13.041	-0.373	1.00	61.79
ATOM	9	N	THR	2	0.434	12.748	-4.134	1.00	42.11
ATOM	10	CA	THR	2	1.636	11.954	-3.914	1.00	34.48
ATOM	11	C	THR	2	1.551	11.168	-2.615	1.00	32.97
ATOM	12	O	THR	2	0.726	11.447	-1.749	1.00	32.39

Άλλες βάσεις : PIR

Η PIR (Protein Information Resource) είναι μία πρωτοταγής βάση πρωτεΐνικών αλληλουχιών η οποία ανάλογα με την ποιότητα των δεδομένων και την πληρότητα σχολιασμού τους (annotation), χωρίζεται σε τέσσερα τμήματα, PIR1 μέχρι και PIR4. Η PIR1 περιέχει πλήρως ταξινομημένες και σχολιασμένες καταχωρήσεις. Η PIR2 περιέχει καταχωρήσεις που βρίσκονται σε προκαταρκτικό στάδιο και δεν έχουν εξεταστεί ενδελεχώς. Η PIR3 περιέχει καταχωρήσεις που δεν έχουν εξεταστεί καθόλου. Η PIR4 περιέχει υποθετικές αλληλουχίες που προκύπτουν από τη (θεωρητική) μετάφραση DNA αλληλουχιών.

Άλλες βάσεις : TrEMBL

Η TrEMBL (Translated EMBL) είναι μία πρωτοταγής βάση πρωτεΐνικών αλληλουχιών η οποία περιέχει μεταφράσεις όλων των κωδικοποιουσών αλληλουχιών (CDS, coding sequences) της EMBL. Αποτελείται από δύο τμήματα : To SP-TrEMBL (Swiss-Prot TrEMBL) περιέχει αλληλουχίες οι οποίες είναι υπό ένταξη στην Swiss-Prot. To REM-TrEMBL περιέχει αλληλουχίες οι οποίες δεν πρόκειται να ενταχθεί στη Swiss-Prot και περιλαμβάνει ανοσοσφαιρίνες, T-cell receptors, αλληλουχίες μικρότερες από 8 αμινοξέα, συνθετικές αλληλουχίες, αλληλουχίες που καλύπτονται από ευρεσιτεχνίες, κοκ.

Άλλες βάσεις : NR

Η NR (Non-Redundant protein DataBase) είναι μια σύνθετη βάση πρωτεΐνικών αλληλουχιών η οποία προκύπτει από το συνδυασμό των PDB, Swiss-Prot, PIR, GenPept (η οποία προκύπτει από την αυτόματη μετάφραση των CDS της GenBank), SPupdate (εβδομαδιαίες προσθήκες της Swiss-Prot) και GenPeptupdate (ημερήσιες προσθήκες της GenBank). Είναι από τις πλέον πλήρεις και ενημερωμένες βάσεις, αλλά περιέχει πληθώρα επαναλαμβανόμενων καταχωρήσεων.

Άλλες βάσεις :

UniProt: Swiss-Prot + TrEMBL

Είναι μια σύνθετη βάση πρωτεΐνικών αλληλουχιών.
Προκύπτει από το συνδυασμό της Swiss-Prot με
την TrEMBL. Θεωρείται σαν μία από τις πλέον
πλήρεις και μη επαναλαμβανόμενες (non-redundant)
βάσεις.

Αναζήτηση πληροφοριών

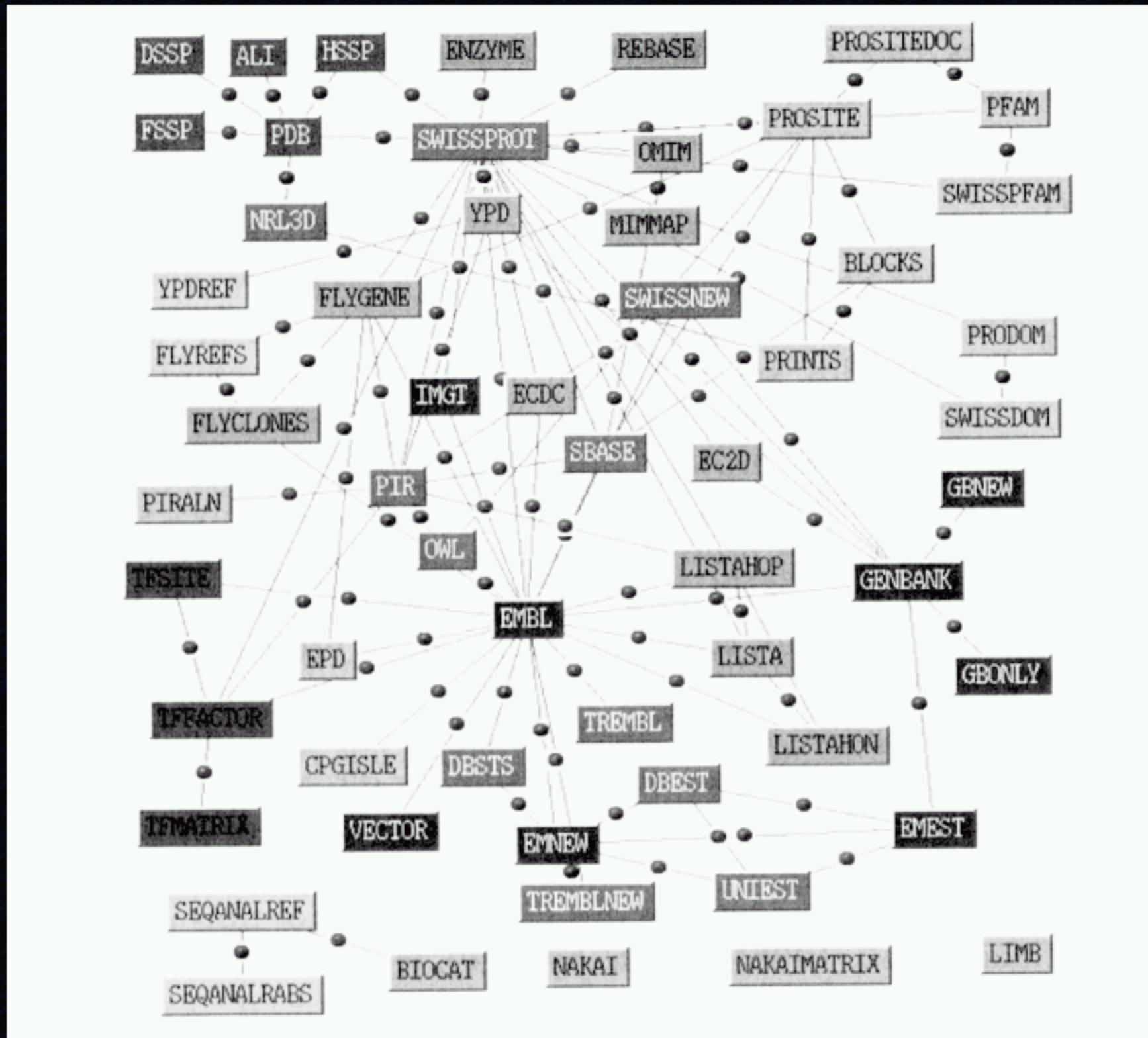
Το βασικό πρόβλημα είναι η εύρεση ενός ενιαίου τρόπου αναζήτησης πληροφοριών μέσα στο πλήθος των διαθέσιμων βάσεων δεδομένων. Το πρόβλημα μεγεθύνεται από το ότι

- Σχεδόν κάθε βάση έχει το δικό της τρόπο οργάνωσης των δεδομένων για κάθε καταχώρηση (entry format).
- Το συντακτικό αναζήτησης πληροφοριών (query language) επίσης διαφέρει από βάση σε βάση.

Αναζήτηση πληροφοριών : SRS

To SRS (Sequence Retrieval System) είναι η Ευρωπαϊκή απότειρα (μέσω του EMBnet) να δημιουργηθεί ένας ηλεκτρονικός μεσολαβητής ανάμεσα στην πληθώρα των βάσεων δεδομένων και τον τελικό χρήστη. To SRS επιτρέπει την αρχειοθέτηση οποιαδήποτε flat-file βάσης και την διασύνδεση της με τις υπόλοιπες βάσεις. Ο τελικός χρήστης μπορεί να αναζητήσει με έναν ενιαίο τρόπο πληροφορία που μπορεί να προέρχεται από οποιαδήποτε από τις δεκάδες βάσεις που υποστηρίζει το SRS χωρίς να χρειάζεται να θυμάται λεπτομερώς τις δομές δεδομένων που χρησιμοποιούν.

Αναζήτηση πληροφοριών : SRS



Avaζήτηση πληροφοριών : SRS

User interface

The screenshot shows the SRS (Searchable Resource Server) web interface. At the top left is the SRS@EMBL-EBI logo. The top navigation bar includes links for Quick Search, Library Page, Query Form, Tools, Results, Projects, Views, Databanks, and HELP. A large blue "SRS" logo is centered above a green header bar. Below the header, a sidebar on the left contains sections for "Start a Permanent Project", "Tips", and "News and Announcements". The "Tips" section lists several items with yellow star icons. The main content area features a "Quick Text Search" form with dropdown menus for "Get" (set to "Nucleotide Sequences") and "matching", a search input field, and a "Search" button. Below this is a "News and Announcements" box containing a red "Important notes to users" section with a single bullet point about EMBL Release 76.

SRS

[Start a Permanent Project](#)

Tips

Want to know more about using SRS?
- go to the [Help Center](#) where you'll find all the searchable online help you need.

Where is the old library page?
- Click on the 'Library Page' tab on the menu bar.

Linking to SRS?
- Please read this [document](#) for important information regarding linking to our SRS server.

Problems with SRS?
- please email the [SRS administrator](#)

Quick Text Search [Search Tips](#)

Get matching :

Searches Databanks: EMBL 

News and Announcements [Search Tips](#)

Important notes to users.

- 05.09.03 - EMBL Release 76 is now on-line.

Αναζήτηση πληροφοριών : NCBI

Το NCBI (National Center for Biotechnology Information) έχει δημιουργήσει το Entrez, ένα δικτυακό εργαλείο αναζήτησης και ανάκτησης πληροφοριών από βάσεις δεδομένων βιολογικού περιεχομένου. Όπως και το SRS, το Entrez επιτρέπει την με ενιαίο τρόπο αναζήτηση σε αλληλουχίες DNA (GenBank, EMBL, DDBJ), πρωτεΐνικές αλληλουχίες (Swiss-Prot, PIR, PDB, μεταφρασμένες DNA αλληλουχίες), δεδομένα χαρτογράφησης χρωμοσωμάτων και γονιδιωμάτων, δομές μακρομορίων (από την PDB), και κυριότερα, βιβλιογραφικές αναφορές από την PubMed.

Αναζήτηση πληροφοριών : NCBI

Ιδιαίτερα σε ότι αφορά τις βιβλιογραφικές αναζητήσεις, το Entrez επιτρέπει συγγενή άρθρα που ανήκουν σε διαφορετικές βάσεις να συνδεθούν μεταξύ τους ακόμα και σε περιπτώσεις που δεν υπάρχουν άμεσες αναφορές από το ένα άρθρο στο άλλο.

Αναζήτηση πληροφοριών : NCBI

User interface

The screenshot shows the NCBI Entrez search interface. At the top left is the NCBI logo. To its right is a large green 'e' icon with the text "Entrez, The Life Sciences Search Engine". Below the header is a navigation bar with links for HOME, SEARCH, SITE MAP, PubMed, Entrez, Human Genome, GenBank, Map Viewer, and BLAST. A search bar labeled "Search across databases" is followed by "GO", "CLEAR", and "Help" buttons. The main content area is titled "Welcome to the new Entrez cross-database search page". It lists various databases in two columns:

Database Icon	Database Name	Description	Help
	PubMed	biomedical literature citations and abstracts	?
	PubMed Central	free, full text journal articles	?
	Journals	detailed information about journals in Entrez	?
	Books	online books	?
	OMIM	online Mendelian Inheritance in Man	?
	Site Search	NCBI web and FTP sites	?
	Nucleotide	sequence database (GenBank)	?
	Protein	sequence database	?
	Genome	whole genome sequences	?
	Structure	three-dimensional macromolecular structures	?
	Taxonomy	organisms in GenBank	?
	SNP	single nucleotide polymorphism	?
	UniGene	gene-oriented clusters of transcript sequences	?
	CDD	conserved protein domain database	?
	3D Domains	domains from Entrez Structure	?
	UniSTS	markers and mapping data	?
	PopSet	population study data sets	?
	GEO	expression and molecular abundance profiles	?
	GEO DataSets	experimental sets of GEO data	?

At the bottom, instructions state: "Enter terms and click 'GO' to run the search against ALL the databases, OR Click Database Name or Icon to go directly to the Search Page for that database, OR Click Question Mark for a short explanation of that database."