Βιοπληροφορική

Διάλεξη 2η :

Βάσεις δεδομένων : Δομή και αναζήτηση πληροφοριών, οι πλέον γνωστές βάσεις δεδομένων.

Βάσεις δεδομένων

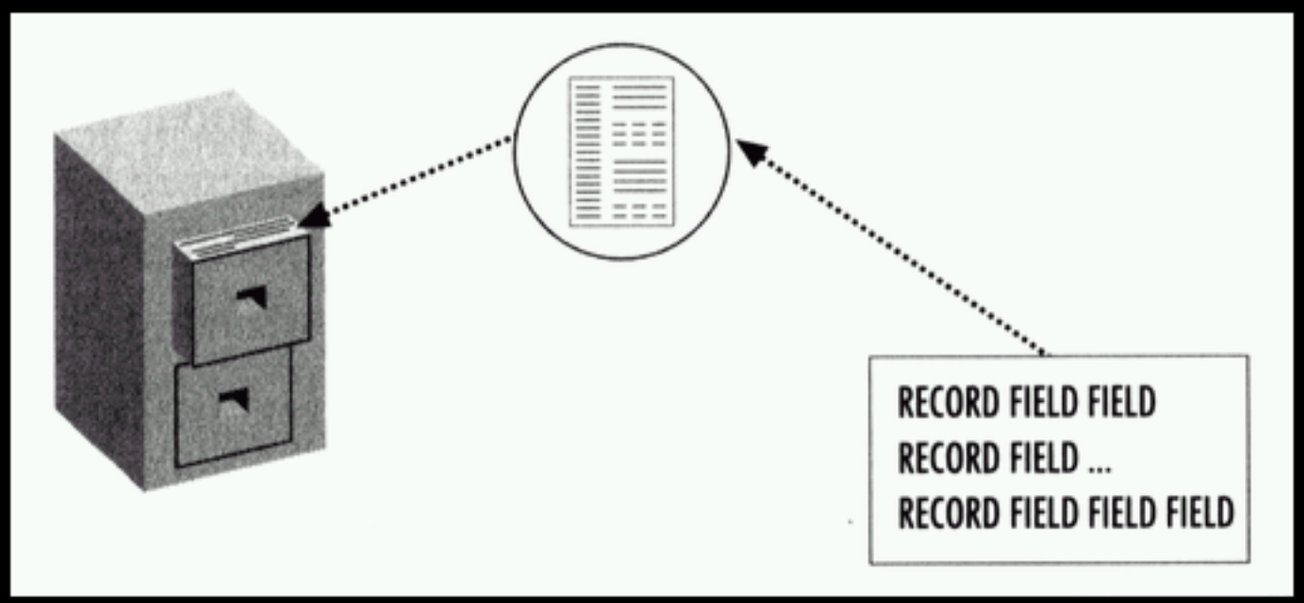
Ανάλογα με τον τρόπο αποθήκευσης των δεδομένων μπορεί να είναι απλές συλλογές αρχείων (flat-file), σχεσιακές (relational) ή και αντικειμενοστραφείς (object-oriented databases).
Αυτή η διάκριση αφορά τους μηχανισμούς αποθήκευσης και διαχείρισης των δεδομένων και όχι τον τύπο των βιολογικών δεδομένων που 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 πρωτεϊνών. 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 πρωτεϊνικών 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, 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 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. Τόσο η PDB, όσο και οι προκύπτουσες δευτεροταγείς βάσεις θα αναφερθούν στα πλαίσια του μαθήματος της δομικής βιολογίας.

Βάσεις, πολλές βάσεις ...

Data Banks Available at EMBL-Heldelberg

03-Oct-2003 16:35

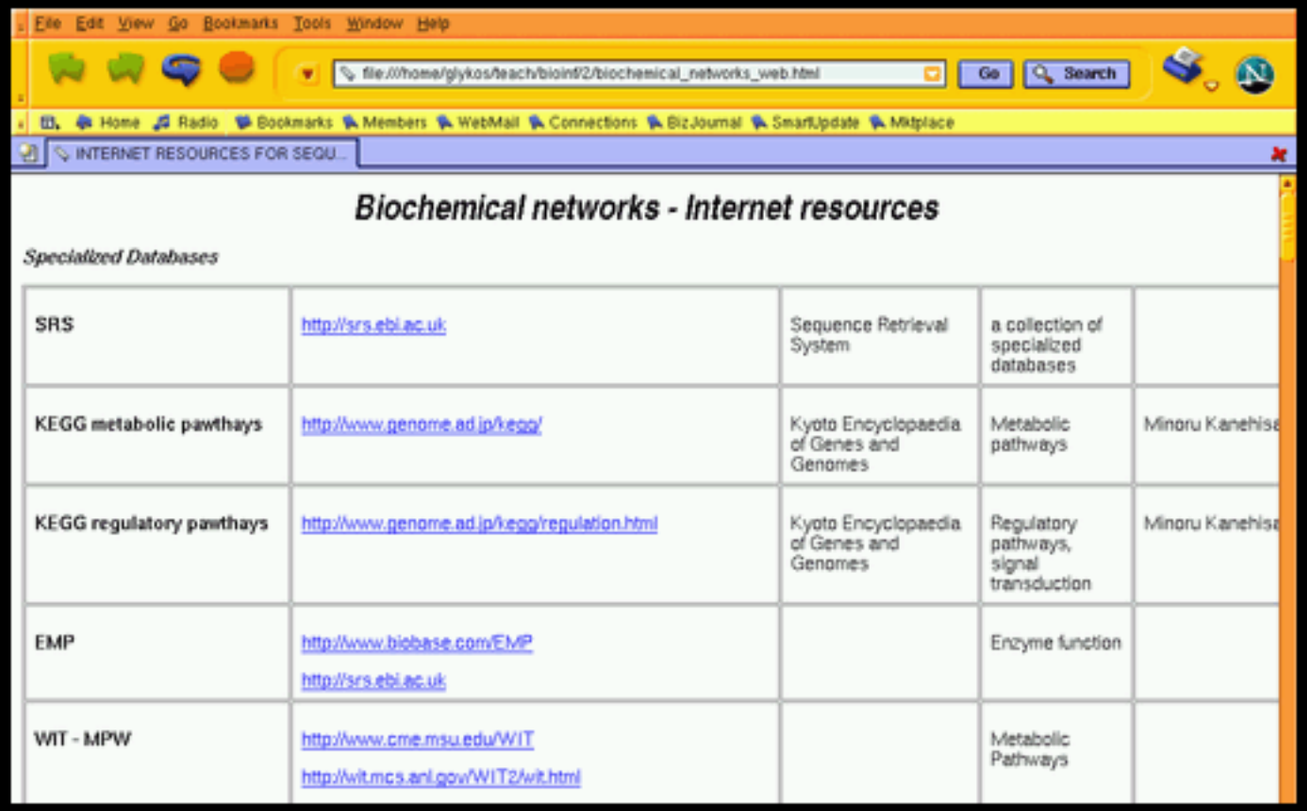
Data Bank	Release No Entries	Indexing Date	Group	Availability
SWISSPROT	122564	04-Apr-2003	Sequence	ok
SWISSNEW	51725	11-Sep-2003	Sequence	ok
NRDB	1324752	20-Sep-2003	Sequence	ok
SWALL	1241995	11-Sep-2003	Sequence	ok
TREMBLNEW	232563	20-Sep-2003	Sequence	ok
TREMBL	1533261	21-Sep-2003	Sequence	ok
SPTREMBL	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, πολλές 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, πολλές 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



Παραδείγματα καταχωρήσεων

GenBank

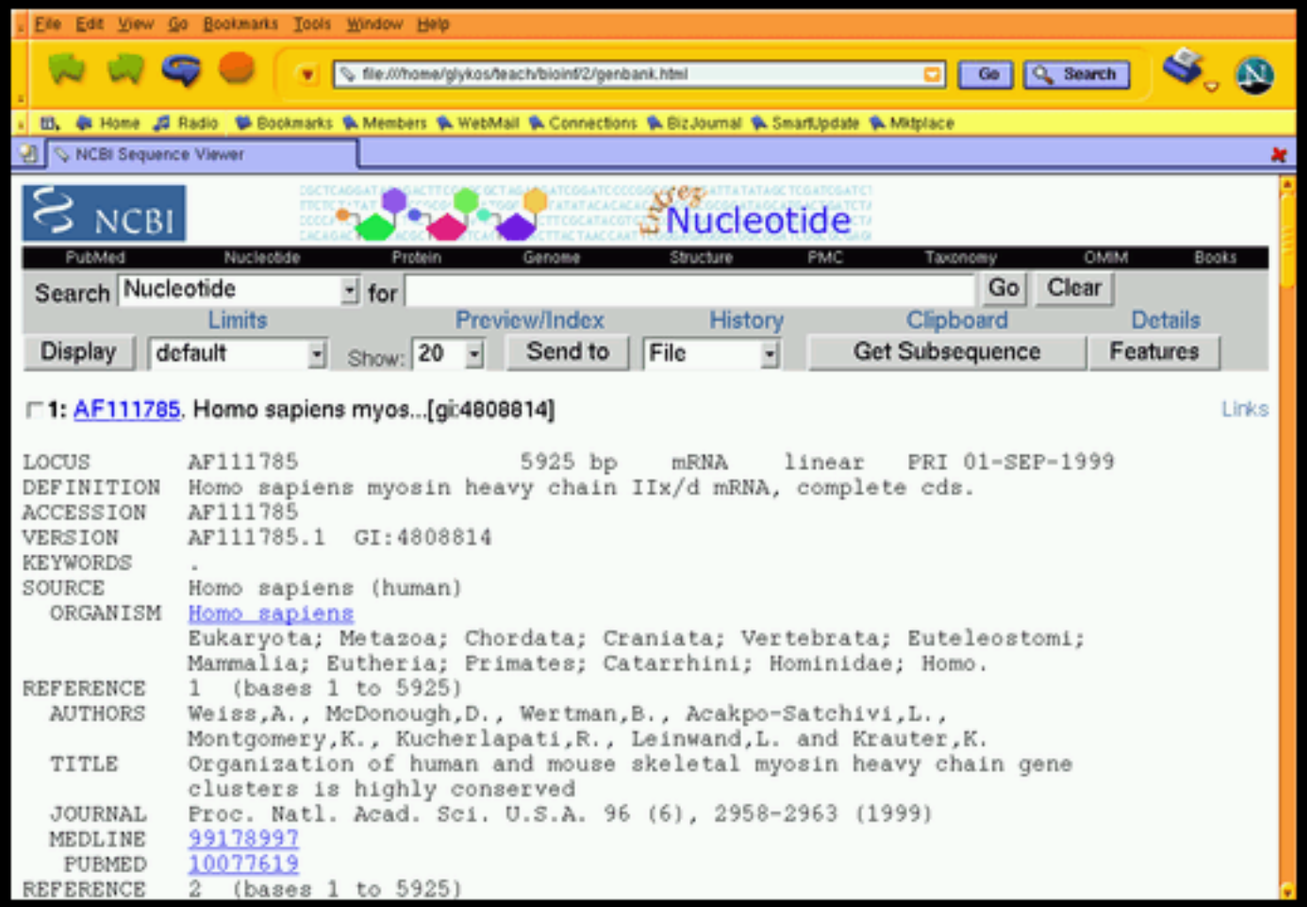
```
LOCUS       AF111785               5925 bp    mRNA      PRI 01-SEP-1999
DEFINITION  Homo sapiens myosin heavy chain IIx/d mRNA, complete cds.
ACCESSION   AF111785
VERSION     AF111785.1  GI:4808814
KEYWORDS    .
SOURCE      Homo sapiens (human)
  ORGANISM  Homo sapiens
            Eukaryota; Metazoa; 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
                     ESFVKATVQSREGGKVTAKTEAGATVTVKDDQVFPMNPPKYDKIEDMAMMTHLHEPAV
                     LYNLKERYAAWMIYTYSGLFCVTVNPYKWLPVYNAEVVTAYRGKKRQEAPPHIFSISD
                     ..........................................................
                     GLRKHERKVKELTYQTEEDRKNILRLQDLVDKLQAKVKSYKRQAEEAEEQSNVNLSKF
                     RRIQHELEEAEERADIAESQVNKLRVKSREVHTKIISEE"
BASE COUNT     1890 a   1300 c   1613 g   1122 t
ORIGIN
        1 atgagttctg actctgagat ggccattttt ggggaggctg ctcctttcct ccgaaagtct
       61 gaaagggagc gaattgaagc ccagaacaag ccttttgatg ccaagacatc agtctttgtg
      121 gtggacccta aggagtcctt tgtgaaagca acagtgcaga gcagggaagg ggggaaggtg
      181 acagctaaga ccgaagctgg agctactgta acagtgaaag atgaccaagt cttccccatg
      ..........................................................
     5821 tttatctaac tgctgaaagg tgaccaaaga aatgcacaaa atgtgaaaat ctttgtcact
     5881 ccattttgta cttatgactt ttggagataa aaaatttatc 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].



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.........
                ..................................
                ....AEERADIAESQVNKLRVKSREVHTKIISEE"
```

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 ggccattttt ..........
  ..........................................
     5881 .... cttatgactt ttggagataa aaaatttatc tgcca
//
```

Η καθ'αυτό καταχώρηση. Δίδονται οι συχνότητες των βάσεων (1890-A,1300-C,1613-G,1122-T), 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
DE   1) (Hanukkah factor) (H factor) (HF) (Granzyme 1) (CTL tryptase)
DE   (Fragmentin 1).
GN   GZMA OR CTLA3 OR HFSP.
OS   Homo sapiens (Human).
OC   Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi;
OC   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
RT   cell- and natural killer cell-specific trypsin-like serine
RT   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 &gt;&gt; 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;
     MRNSYRFLAS SLSVVVSLLL IPEDVCEKII GGNEVTPHSR PYMVLLSLDR KTICAGALIA
     KDWVLTAAHC NLNKRSQVIL GAHSITREEP TKQIMLVKKE FPYPCYDPAT REGDLKLLQL
     TEKAKINKYV TILHLPKKGD DVKPGTMCQV AGWGRTHNSA SWSDTLREVN ITIIDRKVCN
     DRNHYNFNPV IGMNMVCAGS LRGGRDSCNG DSGSPLLCEG VFRGVTSFGL ENKCGDPRGP
     GVYILLSKKH LNWIIMTIKG 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
DE   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
RT   cell- and natural killer cell-specific trypsin-like serine
RT   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., Gershenfeld 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
CC       cell-mediated immune responses. It cleaves after Lys or Arg.
CC       May be involved in apoptosis.
CC   -!- CATALYTIC ACTIVITY: Hydrolysis of proteins, including
CC       fibronectin, type IV collagen and nucleolin. Preferential
CC       cleavage: Arg-|-Xaa, Lys-|-Xaa >> Phe-|-Xaa in small
CC       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 δευτεροταγούς δομής, ...

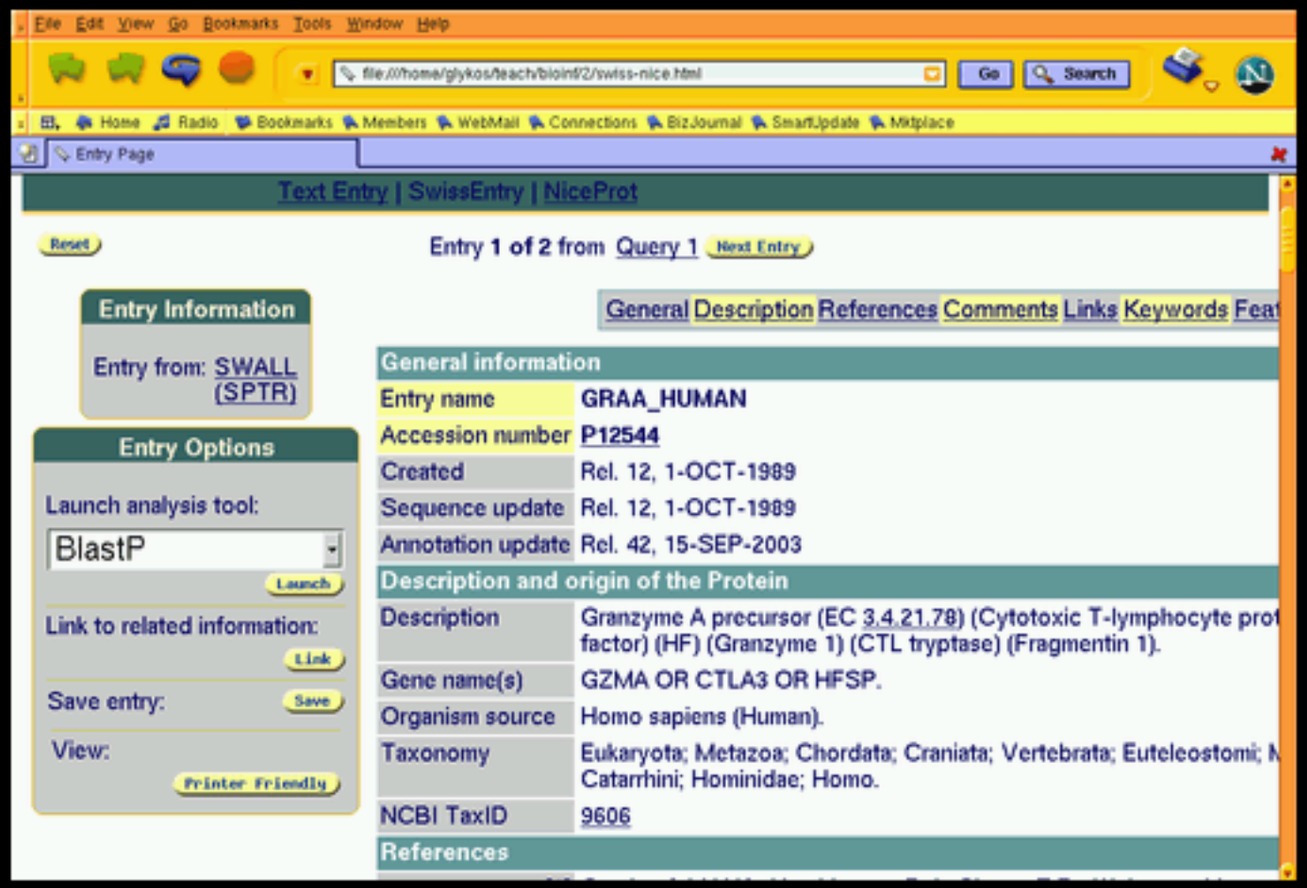
Παραδείγματα : Swiss-Prot

```
SQ   SEQUENCE   262 AA;  28968 MW;  DA87363A0D92BAF4 CRC64;
     MRNSYRFLAS SLSVVVSLLL IPEDVCEKII GGNEVTPHSR PYMVLLSLDR KTICAGALIA
     KDWVLTAAHC NLNKRSQVIL GAHSITREEP TKQIMLVKKE FPYPCYDPAT REGDLKLLQL
     TEKAKINKYV TILHLPKKGD DVKPGTMCQV AGWGRTHNSA SWSDTLREVN ITIIDRKVCN
     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).



Παραδείγματα καταχωρήσεων

Prosite

Η Prosite είναι μια βάση πρωτεϊνικών 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??; /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 πρωτεϊνική 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).

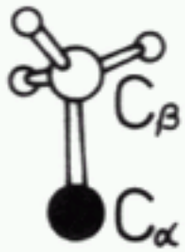
Παραδείγματα : Prosite (patterns)

```
PA   [LIVMFWAC]-[PSGAC]-x(3)-[SAC]-K-[STALIMR]-[GSACPNV]-
PA   [STACP]-x(2)-[DENF]-[AP]-x(2)-[IY].
```

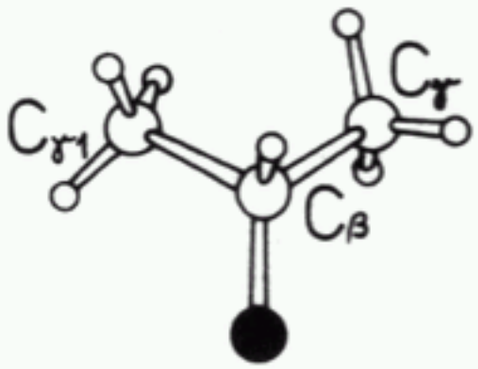
Το μοτίβο. Τα κεφαλαία γράμματα αντιστοιχούν σε αμινοξέα (ένα γράμμα - ένα αμινοξικό κατάλοιπο) με βάση τον κώδικα του ενός γράμματος. Οι αγκύλες περικλείουν αμινοξέα αποδεκτά για την θέση στην οποία αντιστοιχούν. Τα "x" σημαίνει ότι οποιοδήποτε αμινοξύ μπορεί να βρίσκεται στην εν λόγω θέση [x(N) σημαίνει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

Μία παρένθεση : 1-letter code

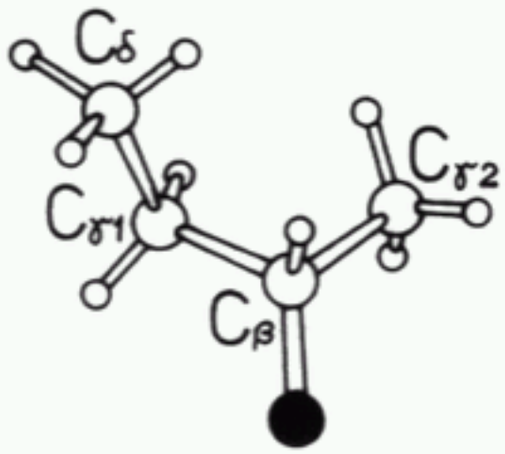
Gly



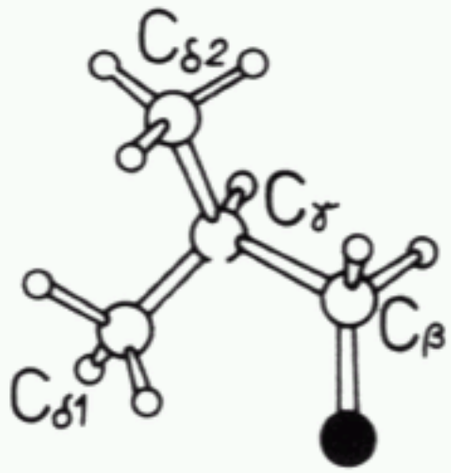
Ala



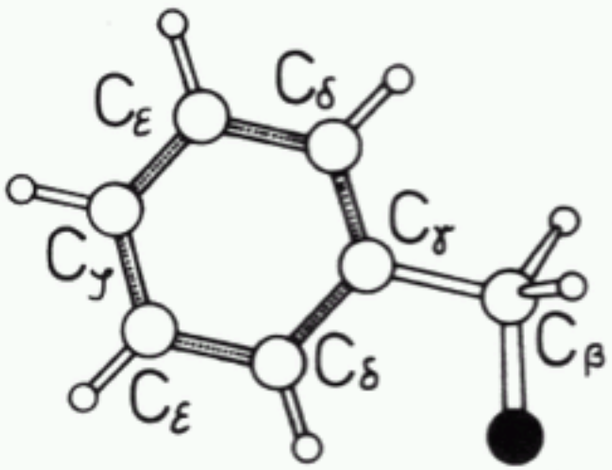
Val



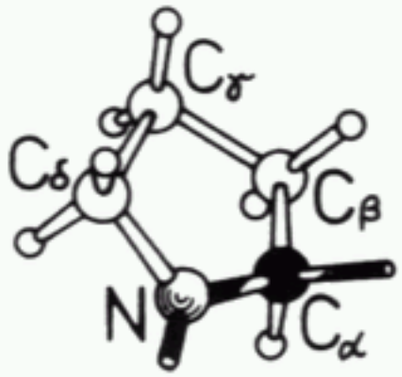
Ile



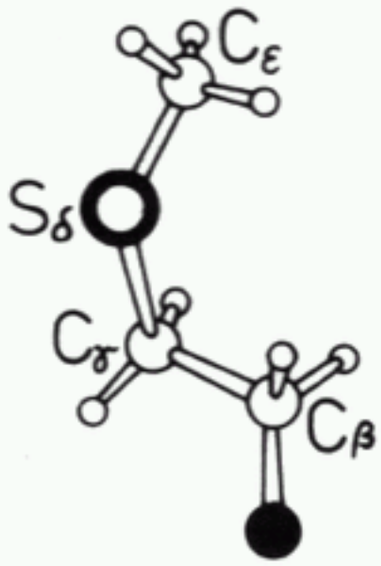
Leu



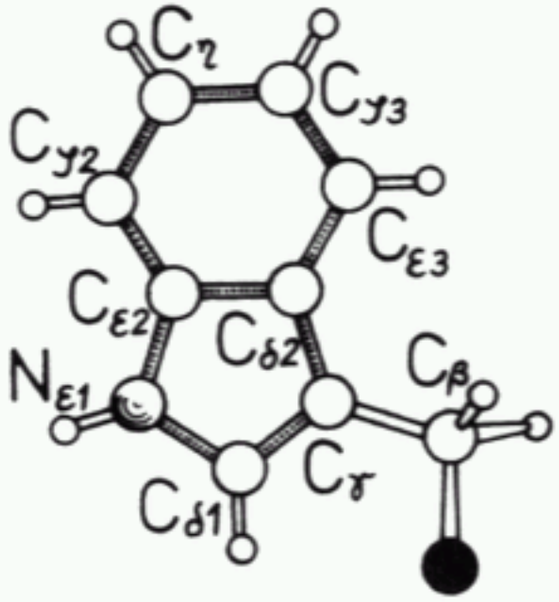
Phe,**F**



Pro

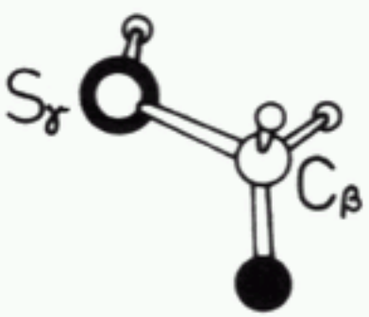


Met

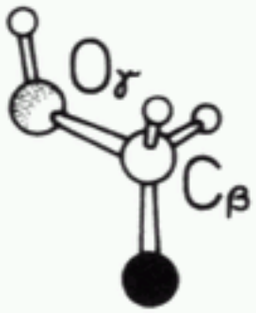


Trp,**W**

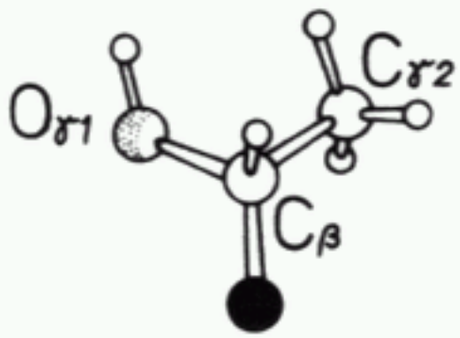
Μία παρένθεση : 1-letter code



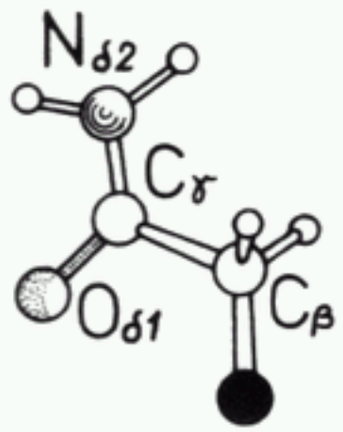
Cys



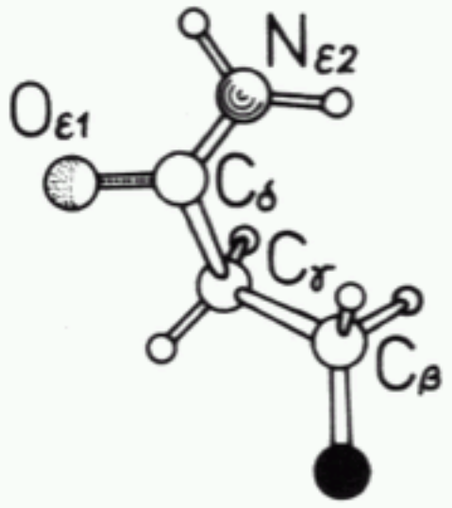
Ser



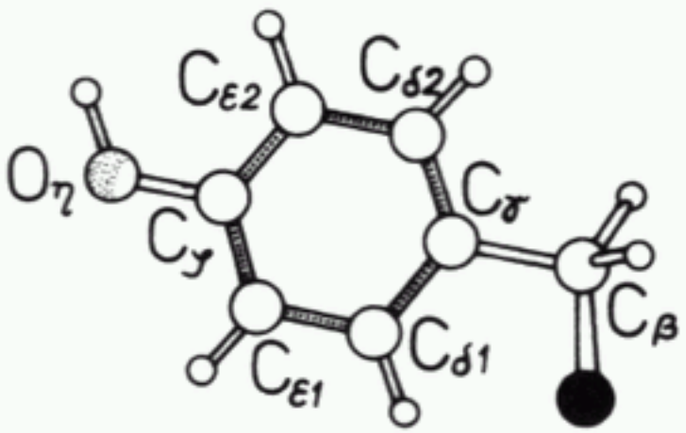
Thr



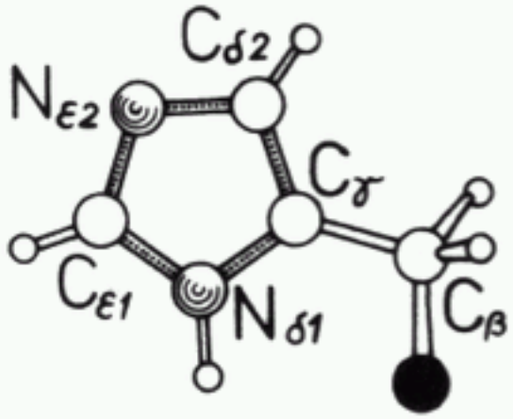
Asn,**N**



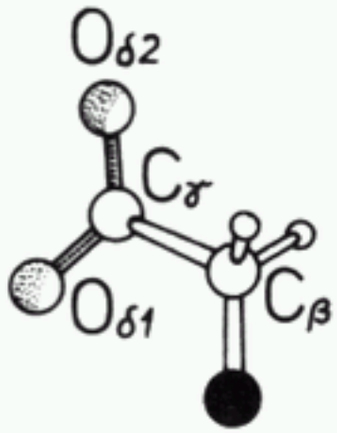
Gln,**Q**



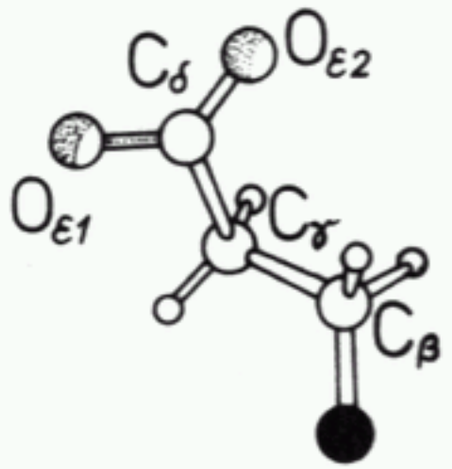
Tyr ,**Y**



His

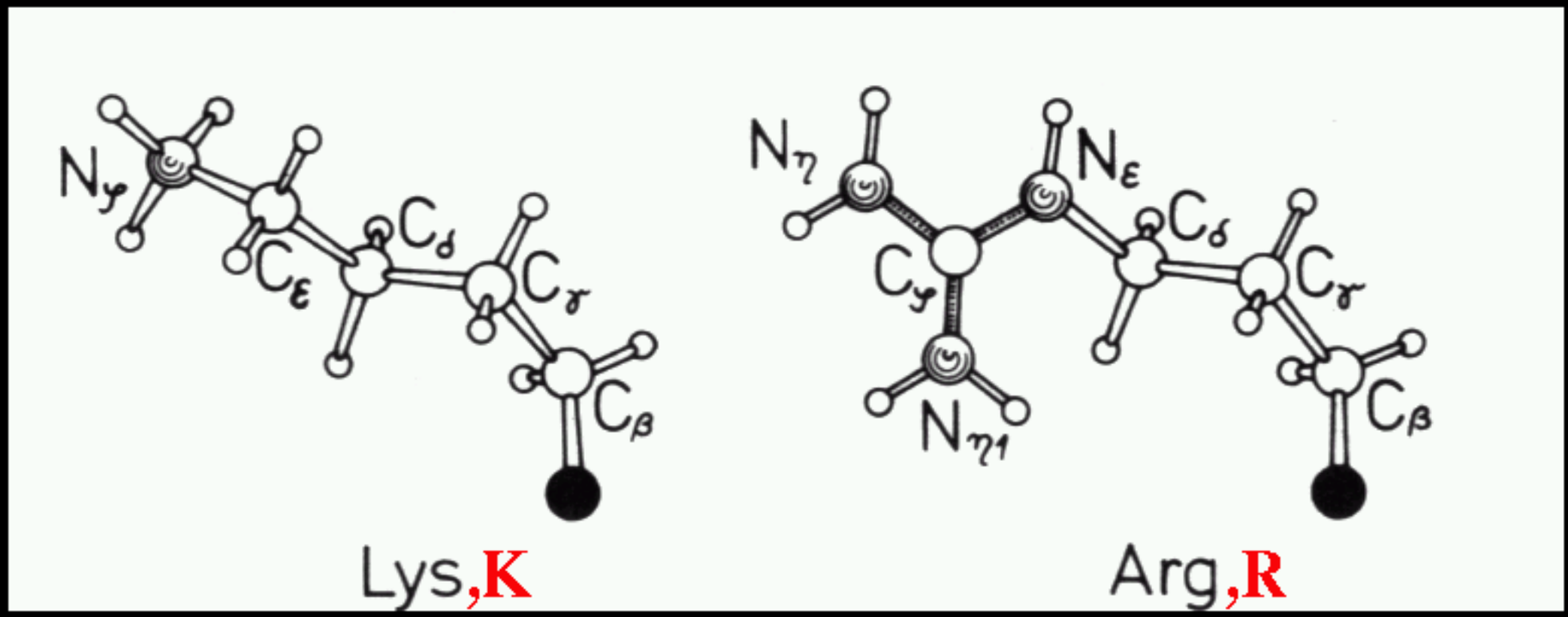


Asp,**D**



Glu,**E**

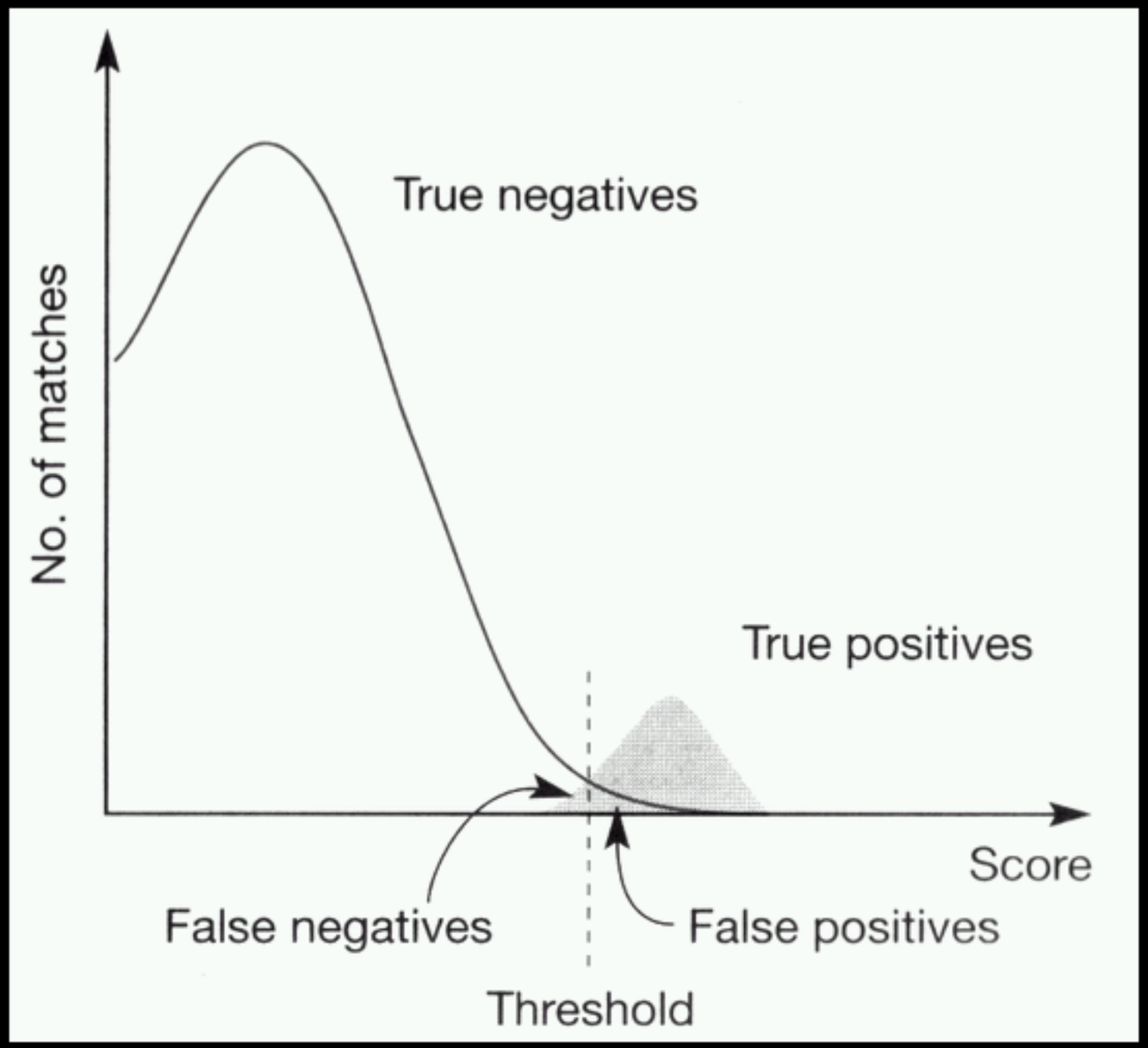
Μία παρένθεση : 1-letter code



Lys,**K** Arg,**R**

Παραδείγματα : Prosite (patterns)

```
NR   /RELEASE=41.25,134803;
NR   /TOTAL=193(192); /POSITIVE=189(188); /UNKNOWN=0(0);
NR   /FALSE_POS=4(4);
NR   /FALSE_NEG=1; /PARTIAL=4;
```



Παραδείγματα : Prosite (patterns)

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

Συστηματική πρωτεϊνικής οικογένειας (E 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.

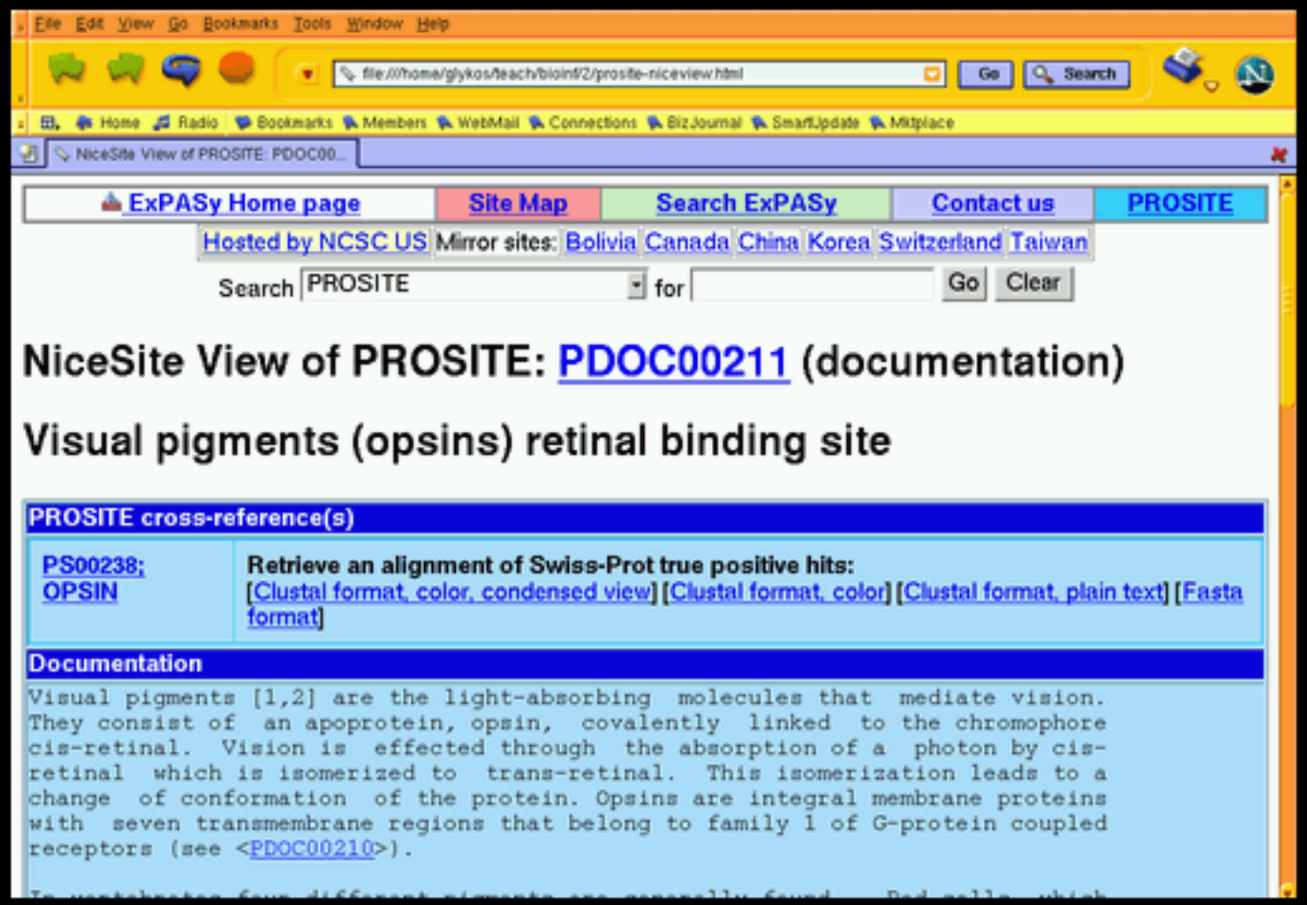
Παραδείγματα : Prosite (patterns)

```
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).



Άλλες βάσεις : PIR

Η PIR (Protein Information Resource) είναι μία πρωτοταγής βάση πρωτεϊνικών αλληλουχιών η οποία ανάλογα με 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 πρωτεϊνικών αλληλουχιών η οποία περιέχει μεταφράσεις όλων των κωδικοποιουσών αλληλουχιών (CDS, coding sequences) της EMBL. Αποτελείται από δύο τμήματα : Το SP-TrEMBL (Swiss-Prot TrEMBL) περιέχει αλληλουχίες οι οποίες είναι υπό ένταξη στην Swiss-Prot. Το 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 : NRDB

Η NRDB (Non-Redundant DataBase) είναι μια σύνθετη βάση πρωτεϊνικών 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 : Swiss-Prot + TrEMBL

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

Άλλες βάσεις : NRL-3D

Περιέχει τις αλληλουχίες πρωτεϊνών των οποίων η δομή έχει προσδιοριστεί και κατατεθεί στην PDB (Protein Data Bank). Λόγω του μικρού αριθμού πρωτεϊνών με γνωστή δομή (σε σύγκριση με το πλήθος των πρωτεϊνών με γνωστή αλληλουχία), αυτή η βάση δεδομένων είναι η λιγότερο πλήρης, αλλά ταυτόχρονα είναι αυτή με την πλέον άμεση σύνδεση με τη δομική βιολογία.

Αναζήτηση πληροφοριών

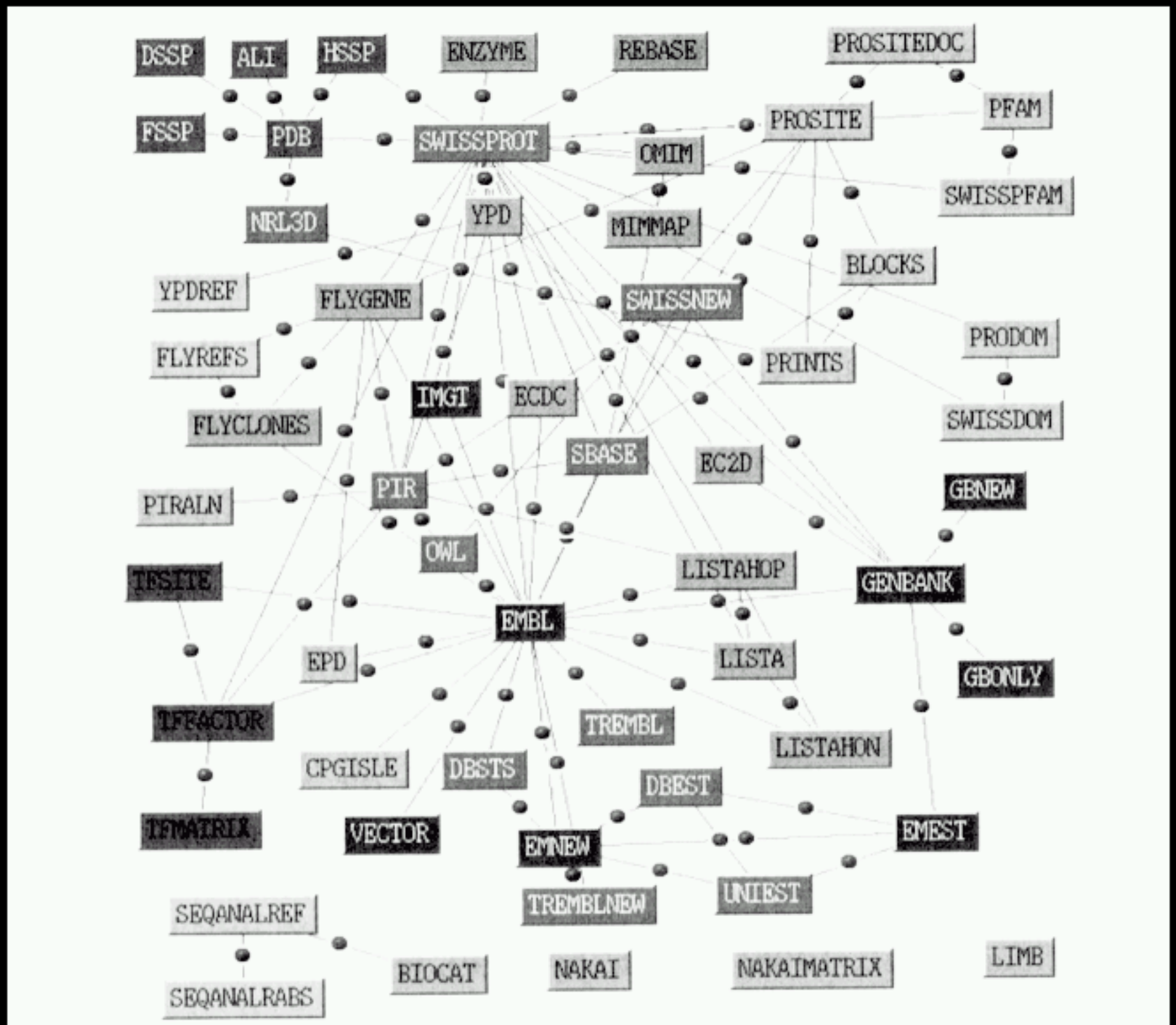
Το βασικό πρόβλημα είναι η εύρεση ενός ενιαίου τρόπου αναζήτησης πληροφοριών μέσα στο πλήθος των διαθέσιμων βάσεων δεδομένων. Το πρόβλημα μεγεθύνεται από το ότι

- 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

Το SRS (Sequence Retrieval System) είναι η Ευρωπαϊκή απόπειρα (μέσω του EMBnet) να δημιουργηθεί ένας ηλεκτρονικός μεσολαβητής ανάμεσα στην πληθώρα των βάσεων δεδομένων και τον τελικό χρήστη. Το SRS επιτρέπει την αρχειοθέτηση οποιασδήποτε 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



Αναζήτηση πληροφοριών : SRS

User interface

SRS@EMBL-EBI

Quick Search | Library Page | Query Form | Tools | Results | Projects | Views | Databanks | HELP

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: Nucleotide Sequences — matching :

Searches Databanks: EMBL

Search

News and Annoucements — 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), πρωτεϊνικές 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

NCBI

Entrez, The Life Sciences Search Engine

HOME | SEARCH | SITE MAP | PubMed | Entrez | Human Genome | GenBank | Map Viewer | BLAST

Search across databases [ ] GO CLEAR Help

Welcome to the new Entrez cross-database search page

- **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

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.