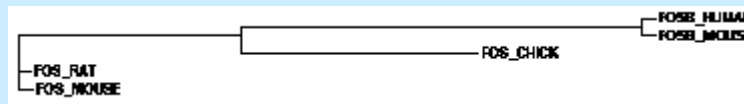




ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑΚΕΣ ΣΗΜΕΙΩΣΕΙΣ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΗΣ ΒΙΟΜΕΤΡΙΑΣ-ΒΙΟΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ

```
FOS_RAT      KPTGGFNIDYELSSGRCSSLSPLEDSLSTYFSPADSPSSDQSPKPTQDFPCLDLSTVSSLNF 60
FOS_MOUSE   KPTGGFNIDYELSSGRCSSLSPLEDSLSTYFSPADSPSSDQSPKPTQDFPCLDLSTVSSLNF 60
FOS_CHICK   KPTGGFNIDYELSSGRCSSLSPLEDSLSTYFSPADSPSSDQSPKPTQDFPCLDLSTVSSLNF 60
FOS_HUMAN   -KPTGGFNIDYELSSGRCSSLSPLEDSLSTYFSPADSPSSDQSPKPTQDFPCLDLSTVSSLNF 60
FOS_MOUSE   -KPTGGFNIDYELSSGRCSSLSPLEDSLSTYFSPADSPSSDQSPKPTQDFPCLDLSTVSSLNF 60
```



ΗΛΙΑΣ ΖΙΝΤΖΑΡΑΣ, M.Sc., Ph.D.
ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ
ΒΙΟΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ-ΒΙΟΜΕΤΡΙΑΣ

ΧΡΥΣΟΥΛΑ ΔΟΞΑΝΗ, MD, MSC, Ph.D.
Ακαδημαϊκός Υπότροφος

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

- Σχέση Βιοπληροφορικής και Βιομετρίας
- Βασική Βιολογία
- Πληροφοριακά συστήματα Γονιδιώματος
- Ζευγαρωτή αντιστοιχία αλληλουχιών
- Πολλαπλή αντιστοιχία αλληλουχίας
- Πηγές δεδομένων για πρωτεΐνες
- Δευτεροταγείς βάσεις δεδομένων
- Σύνθετες βάσεις δεδομένων αλληλουχιών πρωτεϊνών
- Σύγκριση δομών πρωτεϊνών
- Βάσεις δεδομένων δομών
- Γενετικές μελέτες συσχέτισης
- Φαρμακογενωμικές μελέτες

Τί είναι Βιοπληροφορική

- Η βιοπληροφορική είναι η υπολογιστική διαχείριση και στατιστική ανάλυση βιολογικών αλληλουχιών (DNA, RNA, πρωτεΐνες) και δεδομένων που αναφέρονται σε τρισδιάστατες απεικονίσεις πρωτεϊνών.

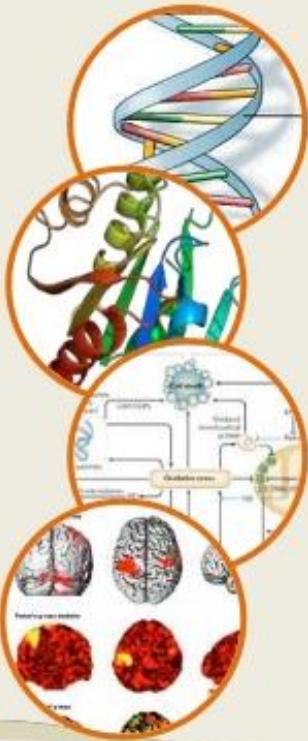
Η Βιοπληροφορική ασχολείται με:

- Τη δημιουργία βάσεων δεδομένων για την αποθήκευση και διαχείριση μεγάλου όγκου δεδομένων.
- Την ανάπτυξη αλγορίθμων και βιομετρικών μεθόδων για τον προσδιορισμό σχέσεων μεταξύ αλληλουχιών ή δομών που ανήκουν σε μεγάλα σύνολα δεδομένων.
- Την στατιστική ανάλυση και ερμηνεία των διαφορετικών τύπων δεδομένων (DNA, RNA, πρωτεϊνική αλληλουχία και δομή).

“Bioinformatics is the field of science in which biology, computer science, and information technology merge to form a single discipline.”

National Center for Biotechnology Information
(NCBI)

Areas where bioinformatics is applied



Genomics

- Genomic feature prediction
- Sequencing data analysis

Proteomics








- Protein 3D structure modeling
- Drug design

Systems Biology

- Gene set enrichment
- Pathway analysis

Phenotype

- Image analysis
- Integration

		Breadth: Homologs, Large-scale Surveys, Informatics—			
			pairwise comparison, sequence & structure alignment	multiple alignment, patterns, templates, trees	databases, scoring schemes, censuses
		1	2	3-100	100+
Depth: Rational Drug Design (physics) →	Genome Sequence	atc gatc gatattgggattgggga	atc gatc gatattgggattgggga atc gatc gatattgggattgggga	atc gatc gatattgggattgggga atc gatc gatattgggattgggga atc gatc gatattgggattgggga atc gatc gatattgggattgggga atc gatc gatattgggattgggga	atc gatc gatattgggattgggga atc gatc gatattgggattgggga atc gatc gatattgggattgggga atc gatc gatattgggattgggga atc gatc gatattgggattgggga atc gatc gatattgggattgggga
	gene finding	↓			
	Protein Sequence	ALMNAKKKPPQRT	ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT	ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT	ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT ALMNAKKKPPQRT
	structure prediction	↓			
	Protein Structure				
	geometry calculation	↓			
	Protein Surface				
	molecular simulation	↓			
	Force Field				
	structure docking	↓			
Ligand Complex					

Βάσεις Δεδομένων

Μια Βάση Δεδομένων (ΒΠ) είναι μια υπολογιστική αποθήκη από δεδομένα που παρέχει ένα προτυποποιημένο τόπο ανάκτησης, προσθήκης, διαγραφής και αλλαγής δεδομένων.

Υπάρχουν δύο μεγάλες κατηγορίες βάσεων πληροφοριών :

- οι σχεσιακές και
- οι αντικειμενοστραφείς.
 - Οι σχεσιακές ΒΠ τοποθετούν τα δεδομένα σε πίνακες όπου κάθε γραμμή αναφέρεται σε συγκεκριμένο δεδομένο και κάθε στήλη αναφέρεται σε συγκεκριμένο χαρακτηριστικό των δεδομένων. Για τους πίνακες αυτούς δημιουργούνται δείκτες και συσχετίζονται μεταξύ τους, έτσι ώστε κάθε δεδομένο στη ΒΠ να έχει ένα μοναδικό σύνολο χαρακτηριστικών που να το προσδιορίζουν.

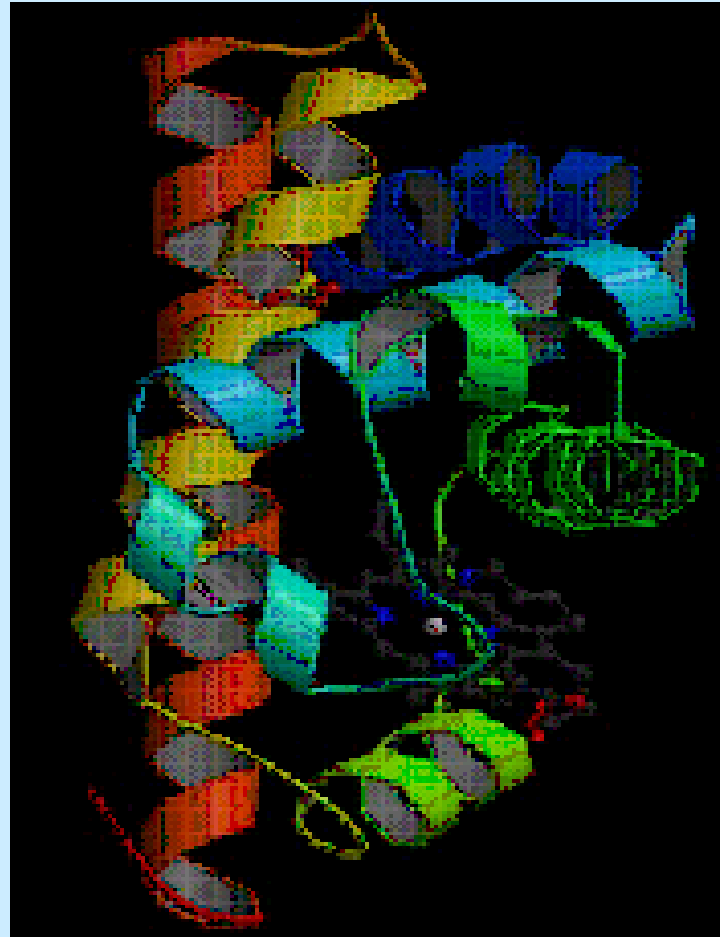
	Name
Protein1	
Protein2	
Protein3	
Protein4	

	Sequence	Polarity
Protein1		
Protein2		
Protein3		
Protein4		

	a-helices	b-strands	residues
Protein1			
Protein2			
Protein3			
Protein4			

- Η αντικειμενοστραφής ΒΠ αποτελείται από αντικείμενα (γονίδια ή πρωτεΐνες) που το καθένα έχει ένα συσχετιζόμενο σύνολο από τυποποιημένα εργαλεία για ανάλυση και αναπαράσταση του αντικειμένου και ένα σύνολο από χαρακτηριστικά όπως ένα όνομα που να το προσδιορίζει ή μια παραπομπή.

- Myoglobin



Το Διαδίκτυο

- Το Διαδίκτυο είναι ένα παγκόσμιο δίκτυο υπολογιστών που συνδέει δημόσια, εκπαιδευτικά και ιδιωτικά ιδρύματα.
- Η μετάδοση της πληροφορίας επιτυγχάνεται με τη βοήθεια ενός πρωτοκόλλου γνωστού ως TCP/IP, το οποίο προσδιορίζει τον τρόπο με τον οποίο:
 - 1) τα δεδομένα χωρίζονται σε πακέτα,
 - 2) τα πακέτα φτάνουν στον προσδιορισμό τους και
 - 3) τα πακέτα συναρμολογούνται.
- Το είδος αυτής της επικοινωνίας επιτρέπει διαφορετικά είδη υπολογιστών και λειτουργικών συστημάτων το «μιλήσουν» μεταξύ τους με έναν κοινό τρόπο.

Διευθύνσεις IP

- Για να μπορέσουν οι υπολογιστές σε ένα δίκτυο να επικοινωνήσουν, δίνεται σε κάθε υπολογιστή ένας μοναδικός αριθμός (IP διεύθυνση), ο οποίος κωδικοποιείται με μια μορφή δεκαδικής τελείας (π.χ. ένας υπολογιστής στο Διαδίκτυο μπορεί να έχει την IP Διεύθυνση 147.30.32.50).
 - Επειδή η μορφή διευθύνσεων δεν είναι και πολύ φιλική στον άνθρωπο, σε κάθε τέτοια διεύθυνση έχει δοθεί ένα όνομα, το οποίο προσδιορίζει
 - έναν συγκεκριμένο υπολογιστή,
 - τον τόπο που ο υπολογιστής αυτός βρίσκεται, και τέλος
 - το διαδικτυακό μέρος στο οποίο ανήκει αυτός ο τόπος
- (η παραπάνω διεύθυνση αντιστοιχεί στο όνομα ebi.ac.uk: Το Ευρωπαϊκό Ινστιτούτο Βιοπληροφορικής (European Bioinformatics Institute) είναι ένας ακαδημαϊκός τόπος του ευρύτερου διαδικτυακού τόπου UK).

Παγκόσμιος Προσδιοριστής Πόρων (ΠΠΠ) (URL)

- Ο Παγκόσμιος Ιστός βασίζεται στο ότι κάθε ιστοσελίδα υπερκειμένου έχει έναν Παγκόσμιο Προσδιοριστή Πόρων (Uniform Resource Locator-URL). Ο ΠΠΠ περιέχει διάφορα μέρη, τα οποία προσδιορίζουν
 - το πρωτόκολλο επικοινωνίας (http – hypertext transfer protocol),
 - τον διακομιστή ιστοσελίδων,
 - τον κατάλογο και τέλος
 - την ιστοσελίδα.

Για παράδειγμα :

- Ο <http://www.ebi.ac.uk/hinxton/hinxton.html> προσδιορίζει σαν
 - πρωτόκολλο επικοινωνίας το http, σαν
 - Διακομιστή Ιστοσελίδων το (ebi) και σαν
 - κατάλογο το hinxton και τέλος σαν
 - ιστοσελίδα την hinxton.html.

Διαδικτυακοί Τόποι Βιοπληροφορικής

- Τρεις τόποι για να αρχίσει κανείς την αναζήτηση βιοπληροφοριών στο Διαδίκτυο είναι οι εξής :
- <http://www.expasy.ch/>: The ExPASy (Expert Protein Analysis System) Molecular Biology Server. Ο συγκεκριμένος διαδικτυακός τόπος διατηρείται από το Ελβετικό Ίδρυμα Βιοπληροφορικής. Περιέχει συνδέσμους, ΒΠ και λογισμικό για την ανάλυση πρωτεϊνικών αλληλουχιών και δομών.
- <http://www.ebi.ac.uk/>: The EMBL European Bioinformatics Institute outstation. Ο τόπος αυτός αποτελεί μία συλλογή ΒΠ με βιολογικό περιεχόμενο και παρεμφερές λογισμικό.
- <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>: The National Center for Biotechnology Information. Ο τόπος περιέχει συλλογή δημοσίων ΒΠ , εργαλείων για βιοπληροφορική και διαφόρων εφαρμογών. Παρέχει επίσης συνδέσμους σε πολλούς χρήσιμους διαδικτυακούς τόπους και συνδέσμους για λογισμικό βιοπληροφορικής.



- Ένα άλλο παράδειγμα ιστοσελίδας που είναι η διεπαφή μιας ΒΠ για πρωτεΐνες και μπορούμε να προσπελάσουμε με την βοήθεια του Internet Explorer βρίσκεται στο <http://au.expasy.org/sprot/sprot-top.html>.
- Επιλέγοντας το “at EBI” που είναι ένας υπερσύνδεσμος και επιτρέπει να συνδεθούμε στην ιστοσελίδα του Ευρωπαϊκού Ινστιτούτου Βιοπληροφορικής.

Αρχείο Επεξεργασία Προβολή Ιστορικό Σελιδοδείκτες Εργαλεία Βοήθεια

University of Thessaly School o... x Microsoft Word - Bioinformati... x UniProtKB/Swiss-Prot x +

web.expasy.org/docs/swiss-prot_guideline.html

Πιο συχνά αναγνωσμέ... m Ξεκινώντας G θεση ειδικότητας αιμα... Suggested Sites Web Slice Gallery

  **ExpASY**
Bioinformatics Resource Portal

Documents [Home](#) | [Contact](#)

UniProtKB/Swiss-Prot

UniProtKB/Swiss-Prot is the manually annotated and reviewed section of the UniProt Knowledgebase (UniProtKB). It is a high quality annotated and non-redundant protein sequence database, which brings together experimental results, computed features and scientific conclusions. Since 2002, it is maintained by the [UniProt consortium](#) and is accessible via the [UniProt website](#).

[List of UniProtKB/Swiss-Prot \(reviewed\) entries.](#)
[Download - UniProt FTP sites.](#)
[Statistics.](#)

Additional information:

- [Why is UniProtKB composed of 2 sections, UniProtKB/Swiss-Prot and UniProtKB/TrEMBL?](#)
- [Biocuration in UniProt.](#)
- [How do we manually annotate a UniProtKB entry?](#)
- [UniProt manual annotation program.](#)
- [UniProt general documentation.](#)
- [FAQ.](#)

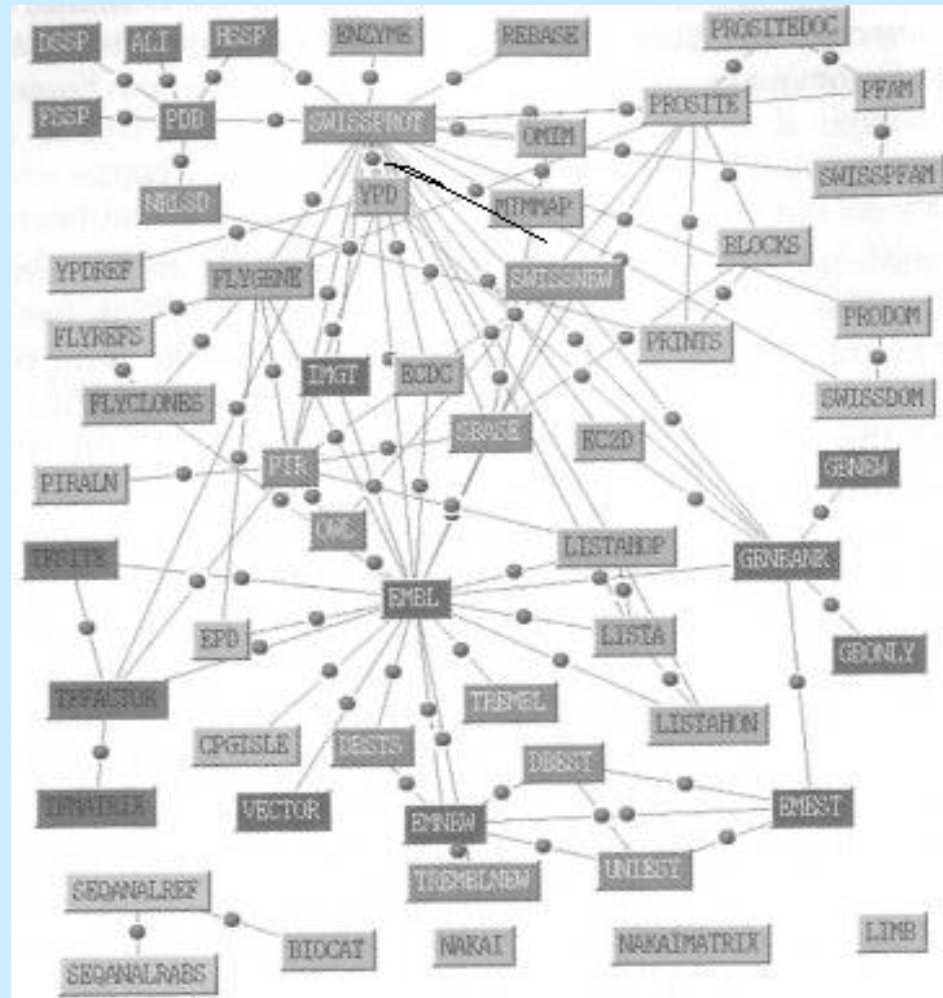
Around UniProtKB/Swiss-Prot

[NextProt](#) - Exploring the universe of human proteins.
[Viralzone](#) - A portal to viral UniProtKB/Swiss-Prot entries.
[HAMAP](#) - High-quality Automated and Manual Annotation of Proteins.
[SwissVar](#) - A portal to Swiss-Prot diseases and variants.
[UniPathway](#) - A metabolic door to UniProtKB/Swiss-Prot.
[Enzyme](#) - A repository of information relative to the nomenclature of enzymes.

[Swiss-Shop](#) - A service that allows you to automatically obtain (by email) new UniProtKB/Swiss-Prot entries relevant to your field(s) of interest.

EN 11:20 PM 3/14/2016

- Καθένας από τους παραπάνω διαδικτυακούς τόπους έχει πολλούς συνδέσμους σε άλλους παρόμοιους τόπους βιοπληροφορικής.
- Ένα δίκτυο από πηγές βιοπληροφόρησης παρουσιάζεται στο παρακάτω διάγραμμα



Μηχανές Αναζήτησης (Search Engines)

- Για να βρούμε οποιοδήποτε είδος πληροφορίας βιολογικού ενδιαφέροντος στο Διαδίκτυο , θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε μηχανές αναζήτησης πληροφορίας. Οι μηχανές αναζήτησης ψάχνουν στις σελίδες του Διαδικτύου για συγκεκριμένες λέξεις κλειδιά και συγκεκριμένες φράσεις. Μια τέτοια μηχανή αναζήτησης είναι το Google. Για να χρησιμοποιήσουμε το Google, γράφουμε www.google.com στο Internet Explorer.
- Αν πληκτρολογήσουμε πχ τη λέξη κλειδί “protein structure”, εμφανίζονται σελίδες που περιέχουν πληροφορίες σχετικά με την λέξη κλειδί.