



# Βιοπληροφορική

## Ενότητα 18:

## Δομική Βιοπληροφορική, 1 ΔΩ

Τμήμα: **Βιοτεχνολογίας**

Όνομα καθηγητή: **Τ. Θηραίου**



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης





# Μαθησιακοί Στόχοι

- ανάλυση των απαιτήσεων μοριακής οπτικοποίησης.
- κατανόηση της χρησιμότητας σύγκρισης πρωτεϊνικών δομών.
- παρουσίαση χαρακτηριστικών βάσεων δεδομένων ταξινόμησης πρωτεϊνικών δομών.

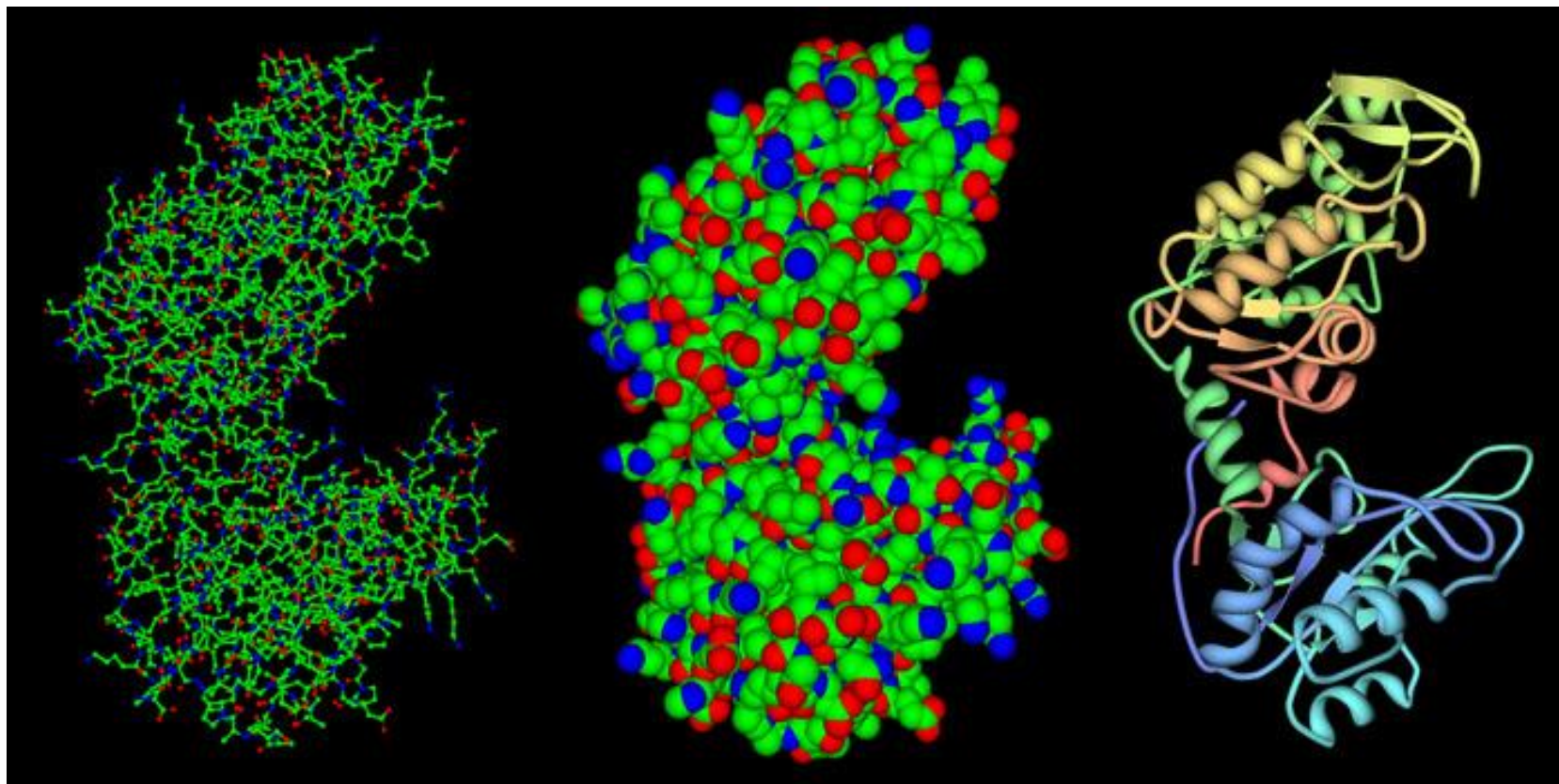


# Λέξεις Κλειδιά

- Λέξεις κλειδιά: Μοριακή οπτικοποίηση, Δομική σύγκριση, Ταξινόμηση πρωτεϊνικών δομών.
- Key words: Molecular visualization, Structure comparison, Structural Classification of Proteins.



# Μοριακή Οπτικοποίηση 1/4





# Μοριακή Οπτικοποίηση 2/4

- μελέτη αλληλεπιδράσεων
- προσδιορισμός στόχων για κατευθυνόμενη μεταλλαξιγένεση
- σύγκριση δομών



# Μοριακή Οπτικοποίηση 3/4

- τρόπος σύνδεσης (connectivity) των ατόμων
- εικονικό τρισδιάστατο περιβάλλον - αίσθηση του βάθους
- τυποποιημένες αναπαραστάσεις που αναδεικνύουν τη συνολική τοπολογία ή άλλες ιδιότητες των πρωτεϊνών
- εμφάνιση υποομάδας ατόμων επιλεγμένων από το χρήστη
- χρωματισμός των ατόμων βάσει κάποιας παραμέτρου



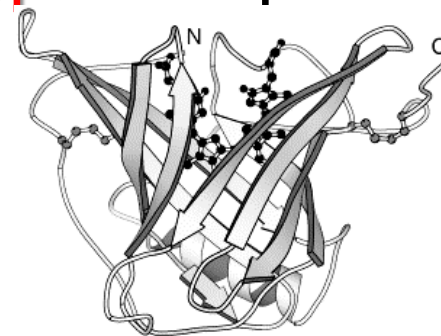
# Μοριακή Οπτικοποίηση 4/4

- PyMOL <http://www.pymol.org/>
- RasMol [www.umass.edu/microbio/rasmol/](http://www.umass.edu/microbio/rasmol/)
- VMD [www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/](http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/)
  - διεπαφή προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής
- DeepView - Swiss-PdbViewer  
<http://spdbv.vital-it.ch/>
  - υπέρθεση δομών, υπολογιστικές μεταλλάξεις κ.α.
- Jmol <http://jmol.sourceforge.net/>



# Δομική Σύγκριση 1/5

- Η δομή είναι **περισσότερο συντηρημένη** από την ακολουθία.
  - π.χ. λιποκαλίνες
- μελέτη εξελικτικών σχέσεων
- αναγνώριση σχέσεων δομής/λειτουργίας
- πρόβλεψη λειτουργίας
- ανάλυση στερεοδιαταξικών αλλαγών  
π.χ. κατά την πρόσδεση υποκαταστατών
- αξιολόγηση υπολογιστικά προσδιορισμένων δομών
- ταξινόμηση δομών

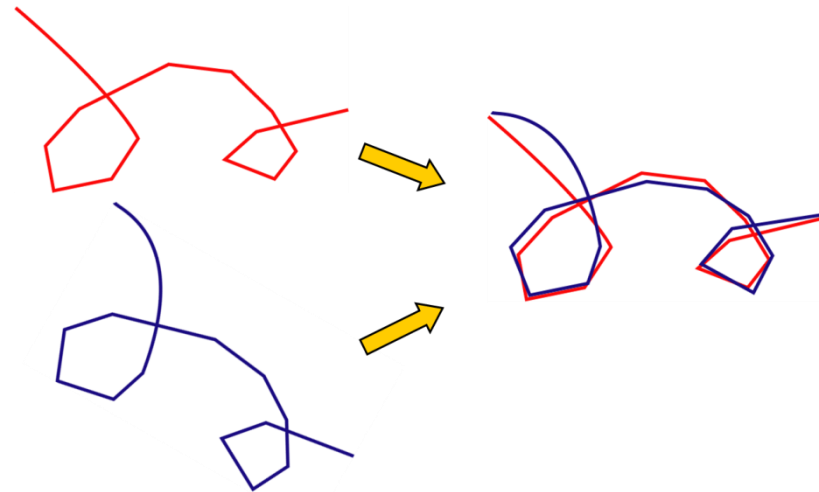




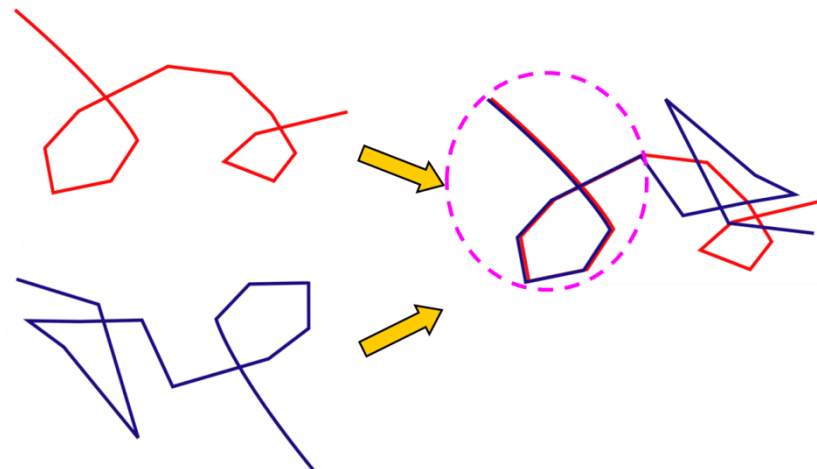


# Δομική Σύγκριση 2/5

- Ολική Στοίχιση



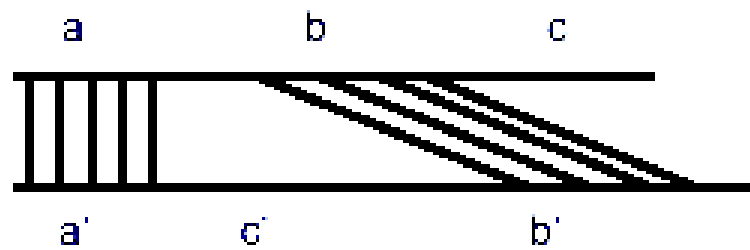
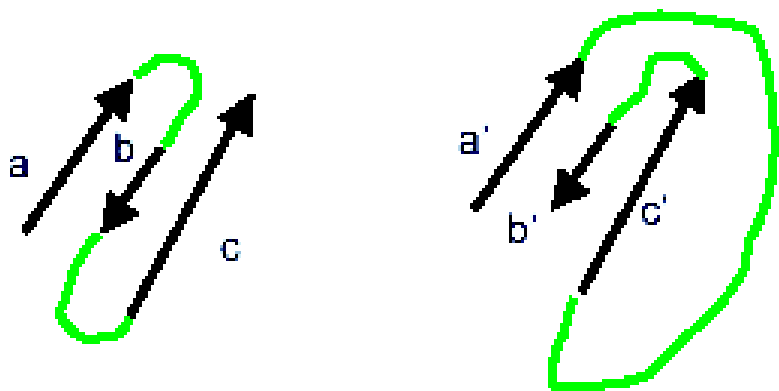
- Τοπική Στοίχιση





# Δομική Σύγκριση 3/5

- Αναπαράσταση πρωτεϊνών
  - Ενδομοριακές αποστάσεις
  - Στοιχεία δευτεροταγούς δομής
- Εντοπισμός κοινών περιοχών μεταξύ των δομών
- Βελτιστοποίηση της στοίχισης των δομών

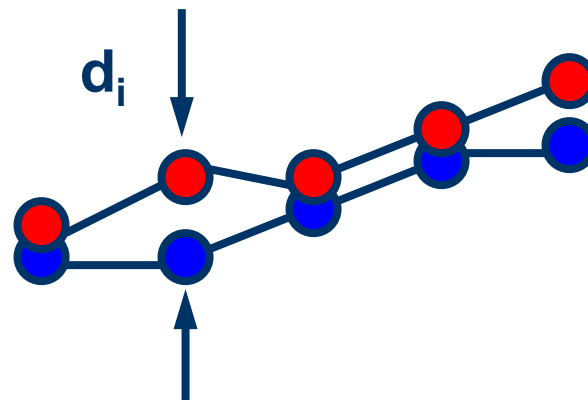




# Δομική Σύγκριση 4/5

- Βαθμολόγηση της στοίχισης

$$RMSD = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N d_i^2}$$



- Εκτίμηση στατιστικής σημαντικότητας
  - Z-score
  - p-value



# Δομική Σύγκριση 5/5

- DaliLite [http://ekhidna.biocenter.helsinki.fi/dali\\_lite/start](http://ekhidna.biocenter.helsinki.fi/dali_lite/start)
- CE <http://source.rcsb.org/jfatcatserver/ceHome.jsp>
- STRUCTAL <http://molmovdb.mbb.yale.edu/align/>
- VAST <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/VAST/vast.shtml>
- MAMMOTH-mult  
<http://ub.cbm.uam.es/software/mammothm.php>
- FATCAT <http://fatcat.burnham.org/>
- MISTRAL <http://eole2.lsce.ipsl.fr/ipht/mistral/protein.php>



# Ταξινόμηση Πρωτεϊνικών Δομών 1/3

- CATH <http://www.cathdb.info/>
  - Class
    - βάσει στοιχείων δευτεροταγούς δομής
    - mostly alpha, mostly beta, mixed alpha/beta
  - Architecture
    - προσανατολισμός των στοιχείων δευτεροταγούς δομής
  - Topology (fold family)
    - προσανατολισμός και διασύνδεση των στοιχείων δευτεροταγούς δομής
  - Homologous superfamily
    - κοινή εξελικτική καταγωγή



# Ταξινόμηση Πρωτεϊνικών Δομών 2/3

- SCOP <http://scop.mrc-lmb.cam.ac.uk/scop/>
  - Class
    - βάσει στοιχείων δευτεροταγούς δομής
    - all-α, all-β, α/β, α+β
  - Fold
    - δομική ομοιότητα λόγω της φυσικοχημείας των πρωτεϊνών
  - Superfamily
    - πιθανή κοινή εξελικτική προέλευση
  - Family
    - ξεκάθαρη εξελικτική σχέση



# Ταξινόμηση Πρωτεϊνικών Δομών 3/3

- FSSP <http://srs.ebi.ac.uk/srsbin/cgi-bin/wgetz?-page+LibInfo+-id+5Ti2u1RffMj+-lib+FSSP>
  - αυτόματη μη-ιεραρχική ταξινόμηση πρωτεϊνικών δομών
    - βάσει δομικών στοιχίσεων των πρωτεϊνών της PDB με τη χρήση του αλγορίθμου DALI



# Βιβλιογραφία

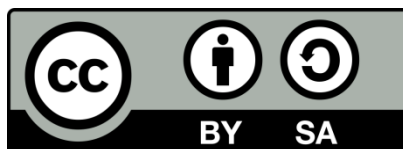
- David Mount, "Bioinformatics: Sequence and Genome Analysis", Cold Spring Harbor Laboratory Press; 2nd edition (March 12, 2013)
- Jonathan Pevsner, "Bioinformatics and Functional Genomics", Wiley-Blackwell; 2nd edition (May 4, 2009)
- Andreas D. Baxevanis, B. F. Francis Ouellette, "Bioinformatics: A Practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins", Wiley-Interscience; 3rd edition (October 29, 2004)
- Jenny Gu, Philip E. Bourne, "Structural Bioinformatics", Wiley-Blackwell; 2nd edition (March 16, 2009)





# Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδεια χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.





# Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα Γεωπονικού Πανεπιστημίου Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ  
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ  
*επένδυση στην κοινωνία της γνώσης*  
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ  
2007-2013  
πρόγραμμα για την ανάπτυξη  
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



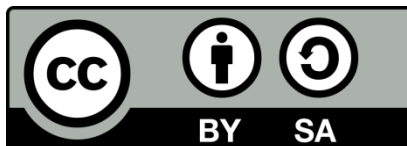
# Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών 2015. Τμήμα Βιοτεχνολογίας, Θηραίου Τριάς. «Βιοπληροφορική». Έκδοση: 1.0. Αθήνα 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:  
<https://mediasrv.aua.gr/eclass/courses/OCDB100/>



# Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Παρόμοια Διανομή 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων, π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



Η άδεια αυτή ανήκει στις άδειες που ακολουθούν τις προδιαγραφές του Ορισμού Ανοικτής Γνώσης [2], είναι ανοικτό πολιτιστικό έργο [3] και για το λόγο αυτό αποτελεί ανοικτό περιεχόμενο [4].

[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>

[2] <http://opendefinition.org/okd/ellinika/>

[3] <http://freedomdefined.org/Definition/EI>

[4] <http://opendefinition.org/buttons/>



# Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
  - το Σημείωμα Αδειοδότησης
  - τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
  - το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)
- μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.