

Funkcjonalność serwisów PDB

PDB, PDBe, PDBj

Paulina Gajda, Joanna Gładczak, Damian Rusyn

7 lutego 2017r

Spis treści

Wprowadzenie	3
Główne założenia serwisów	4
Analiza funkcjonalności	5-16
Pierwsze wrażenie odwiedzającego	5-7
Czas ładowania strony głównej.....	8
Podstawowy układ strony głównej	8
Typografia.....	9
Przeszukiwanie, wyszukiwanie informacji.....	9-10
Nawigowanie	10-11
Przyjazność dla nowych użytkowników.....	12-13
Informacje kontaktowe	13-14
Logowanie się w witrynie	15
Reklamy	15
Depozytowanie danych	15-16
Wyświetlane wyniki	16
Zestawienie otrzymanych wyników	17
Podsumowanie	19
Bibliografia	20

Wprowadzenie

Baza danych jest narzędziem służącym do zbierania i organizowania informacji. Kiedy tymi informacjami są dane biologiczne, mówimy o bioinformatycznych bazach danych. Ich tworzenie jest jednym z najważniejszych zastosowań bioinformatyki.

Wyniki eksperymentów biologicznych oraz rezultaty przetwarzania tych wyników gromadzone są od wielu lat w różnych repozytoriach danych. Z czasem ilość posiadanych informacji jest coraz większa, wtedy pojawia się potrzeba stworzenia efektywnego systemu, który pozwoli na ich szybkie wyszukiwanie i analizę. Bioinformatyczne bazy danych pozwalają na przeszukiwanie dostępnych w repozytoriach informacji, przetwarzanie ich, a często również i przesyłanie nowych danych.

Każdego roku liczba baz danych wzrasta, a ich większość jest dostępna darmowo i bez ograniczeń. Korzystają z nich również osoby, które nie posiadają wykształcenia informatycznego, przez co charakteryzują się prostym i intuicyjnym interfejsem, a także często wyposażone są w oprogramowanie, które umożliwia wstępną analizę danych.

Bioinformatyka znajduje zastosowanie w niezliczonej ilości zadań, jednym z nich jest identyfikacja, klasyfikacja oraz analiza funkcjonalna białek. Stąd też białkowe bazy danych pełnią bardzo istotną rolę jako repozytoria, w których możliwe jest deponowanie odkrytych białek, ich struktury, umieszczanie informacji na temat ich funkcji oraz udostępnianie zgromadzonej wiedzy szerokiemu środowisku naukowemu. Przykładem takiej bazy danych jest PDB (Protein Data Bank). Klasyfikuje ona struktury białek w oparciu o ich ewolucyjne pokrewieństwo i reguły, które determinują ich trójwymiarową strukturę.

Główne założenia serwisów

PDB: (Protein Data Bank) www.rcsb.org

Ta baza jest zasilana przez archiwalne informacje Protein Data Bank'u. 3-wymiarowe kształty białek, kwasów nukleinowych oraz złożonych związków mają na celu pomóc zrozumieć studentom i badaczom wszystkie kwestie biomedycyny i rolnictwa – od syntezy białek po stany zdrowia i choroby.

RCSB PDB (Research Collaboratory for Structural Bioinformatics of Protein Data Bank) jako członek wwPDB (worldwide Protein Data Bank) organizuje i objaśnia dane bazy PDB.

RCSB PDB opiera się na danych poprzez tworzenie narzędzi i zasobów do badań i edukacji w molekularnej, strukturalnej i obliczeniowej biologii oraz innych.

PDBe: (Protein Data Bank in Europe) www.ebi.ac.uk/pdbe

PDBe to europejski zasób do zbierania, organizowania oraz rozpowszechniania danych o makromolekularnych strukturach biologicznych. We współpracy z wwPDB oraz EMDB (Electron Microscopy Data Bank) zajmuje się segregowaniem, utrzymywaniem oraz dostarczaniem dostępu do tych światowych przechowalni makromolekularnych struktur.

Jej celem jest również dostarczanie zintegrowanych zasobów wysokiej jakości makromolekularnych struktur oraz powiązanych z nimi danych i udostępnienie ich biomedycznej społeczności poprzez intuicyjny interfejs.

PDBj: (Protein Data Bank Japan) www.pdbj.org

PDBj utrzymuje scentralizowane archiwa PDB odnoszące się do makromolekularnych struktur oraz dostarcza zintegrowane narzędzia współpracując z RCSB, BMEB w USA i PDBe w Europie. Jest wspierana przez JST-NBDC i instytut badań nad białkami IPR, Osaka University.

Ze strony PDBj każdy ma dostęp do makromolekularnych struktur, może zdeponować eksperymentalne dane jak i użyć różnorodnych internetowych serwisów bioinformatyki strukturalnej.

Jest członkiem wwPDB, a jej usługi głównie bazują na XML-owskich plikach zwanych PDBML i PDBMadd.

Analiza funkcjonalności

1. Pierwsze wrażenie odwiedzającego

The screenshot displays the RCSB PDB website interface. At the top, a navigation bar includes links for Deposit, Search, Visualize, Analyze, Download, Learn, and More, along with a MyPDB Login button. Below this is a large search bar with the text 'Search by PDB ID, author, macromolecule, sequence, or ligands' and a Go button. The main content area is divided into several sections: a 'Welcome' sidebar with navigation icons, a 'A Structural View of Biology' section with descriptive text, a 'January Molecule of the Month' section featuring a 'Nuclear Pore Complex' structure, and a 'Latest Entries' section showing a protein structure (5IP0). A 'Features & Highlights' section lists various tools and resources available on the site. The footer contains links for 'PDB at a Glance', statistics, and contact information.

PDB: Protein Data Bank

Protein Data Bank in Europe
Bringing Structure to Biology

Search:

Complex:

EMCAT HUMAN

PDBe home | Deposition | PDBe services | PDBe training | Documentation | About PDBe

Share | Feedback

PDBe is the European resource for the collection, organisation and dissemination of data on biological macromolecular structures.
[Read more about PDBe.](#)

Featured structure
Ebola GP2 fusion loop 1st January 2017

This featured structure explores the molecule from PDBe's 2017 calendar for January. The image shows a fragment of a protein from Ebola virus, based on PDB entry 2m5f, which is critical for the virus to infect its host.

[Read more...](#)

[Previous featured structures](#)

News

EM archives to be mirrored in China
19 January, 2017

Looking back on 2016
16 January, 2017

Electron density for all
9 January, 2017

Upgrade Electron Density Server to be refined
13 December, 2016

[More news](#)

Events

Data Visualisation for Biology: a practical workshop in design, techniques and tools
Hinxton, UK
30 Jan 2017 to 3 Feb 2017

Wellcome: Visualising protein structures online
EBI
22 Feb 2017

[Show User Meeting](#)
Newcastle, UK
29 Mar 2017

[More events](#)

Publications

New insights into the G2E2 complex explain the controversy between coding structural models.
Carroni M, De Marchi M, Medagli S, Krastanova I, Taylor IA, Ammendt H, Araki H, Pisani FM, Patwardhan A, Onesti S.
Scientific reports Volume 7 (2017) p.40188

EMDataBank unified data resource for 3D-M.
Lawson CL, Patwardhan A, Baker ML, Hryc C, Garcia ES, Hudson BP, Lagerstedt I, Ludtke SJ, Pintilie G, Sala R, Westbrook JD, Berman HM, Khayyat G, Chiu W.
Nucleic acids research Volume 44 (2016) p.D396-403

Synthesis of Chlorophyll-binding Proteins in a Fully Sequenced *Agrobacterium* Strain of the *Chlorobacterium* *Synchrocytis* (CC-BEED).
Hollingshead S, Kopecká J, Armstrong DR, Buřinská L, Jackson PJ, Chen GE, Dickman MJ, Williamson MH, Sobolka R, Hunter CN.
Frontiers in plant science Volume 7 (2016) p.292

[More publications](#)

Latest archive statistics
As of 25 January 2017 the PDB contains 126278 entries (latest PDB entries: chemistry, biology) and EMDB contains 4492 entries (latest map releases, latest header releases, latest updates).

Connect with us

Facebook | YouTube
Twitter | RSS

Feeds by @PDBEurope

Protein Data Bank
Followed

EMBL-EBI Training @...
Videos that open the book of life

[Embed](#) [View on Twitter](#)

Chaperone

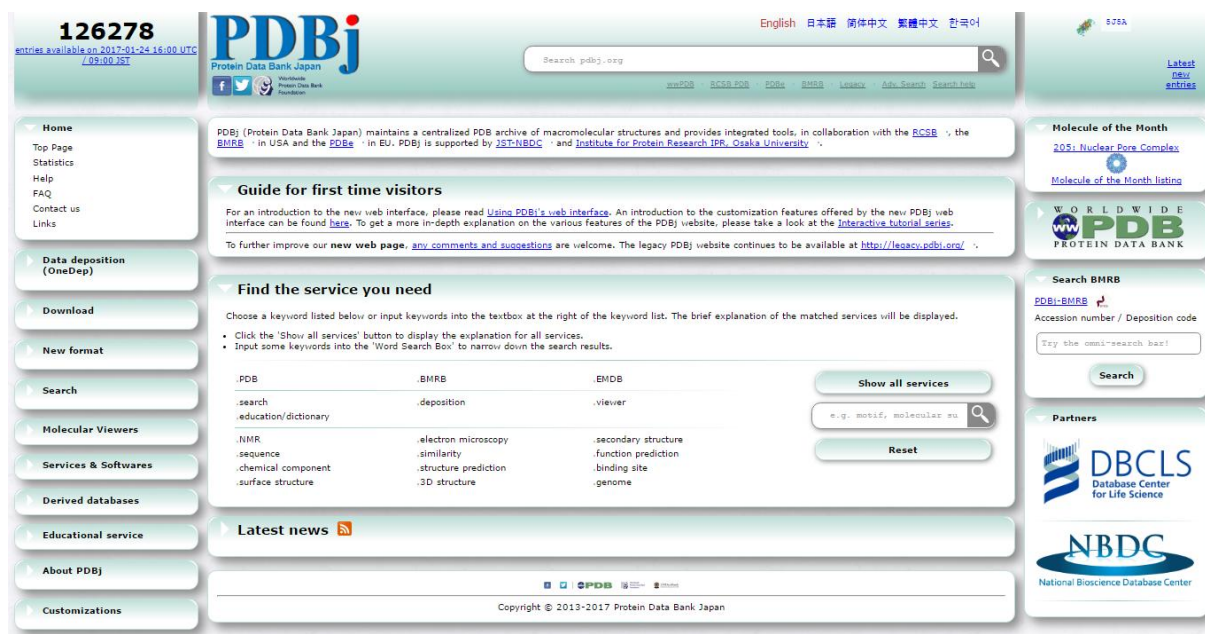
Chaperone transcription factors
Interactively explore this remarkable protein in our latest Chaperone article.
[More Chaperone articles](#)

EMBL-EBI is a member of EMBL, EBI, Wellcome, and Hinxton.

EMBL-EBI	Services	Research	Training	Industry	Access us
News	By topic	Overview	Overview	Overview	Overview
Brochures	By name (A-Z)	Publications	Team at EBI	Members Area	Leadership
Contact us	Help & Support	Research groups	Train outside EBI	Workshops	Funding
Intranet		Postdocs & PhDs	Train online	SME Forum	Background
			Contact	Collaboration	Jobs
			organisers	Industry programme	People & groups
					News
					Events
					Visit us
					Contact us

EMBL-EBI, Wellcome Genome Campus, Hinxton, Cambridgeshire, CB10 1SD, UK | +44 (0)1223 49 44 44
Copyright © EMBL-EBI 2017 | EBI is an outstation of the European Molecular Biology Laboratory | Terms of use

PDB: Protein Data Bank in Europe



PDBj: Protein Data Bank Japan

Powiedzenie "nie oceniaj książki po okładce" zdecydowanie nie sprawdza się w przypadku stron internetowych. Najważniejsze jest tutaj bowiem pierwsze wrażenie - to od niego zależy czy odwiedzający postanowi zagłębić się w treść strony czy też po pierwszych kilku sekundach wciśnie "x" w prawym rogu ekranu. To właśnie od tego aspektu chcielibyśmy rozpocząć naszą analizę - jakie odczucia budzą strony PDB przy pierwszej wizycie.

1. Na każdej stronie możemy od razu zauważyć intuicyjną, funkcjonalną wyszukiwarkę. Każda baza posiada wiele możliwości wyszukiwania, wizualizowania oraz depozytowania danych struktur molekularnych.
2. PDB oraz PDBj posiadają rozwijane zakładki, co znacznie ułatwia poruszanie się po nich, jednak zdecydowanie najbardziej przejrzystą bazą jest baza PDB, co zwiększa łatwość poruszania się i korzystania z niej.
3. Na każdej stronie głównej witryn znajdziemy zakładkę z nowościami oraz ostatnio dodanymi danymi.
4. PDB oraz PDBj wyświetlają cząsteczkę miesiąca, natomiast PDBe QUIP („Quite Interesting PDB Structures”), które są krótkimi ciekawymi artykułami.
5. Wszystkie serwisy posiadają konta na Facebooku i Twitterze, a PDB dodatkowo na Youtube, co czyni je bardziej ogólnodostępnymi.

RCSB Protein
Data Bank
@RCSBPDB

Protein Data
Bank in Europe
(PDBe)
@proteindatabank

Protein Data
Bank
Japan (PDBj、
日本蛋白質構造
データバンク)
@PDBjapan

2. Czas ładowania strony głównej

Po pobieżnym ocenie strony głównej należy przyjrzeć się długości czasu jej ładowania. Jeśli bowiem dana strona główna działa zbyt wolno, odwiedzający założy, że również z pozostałej części witryny korzystać się będzie w sposób dość uciążliwy, więc bez większego zastanowienia będzie szukał dla niej alternatywy.

PDB: czas ładowania w próbach wahał się pomiędzy 1.21s – 1.78s, a w tym średnio:

- 77.1 ms ładowania	- 152.5 ms renderowania	- 175.2 ms innych działań
- 595.0 ms skryptowania	- 4.3 ms obrazowania strony	- 769.1 ms bezczynności

PDBe: czas ładowania w próbach wahał się pomiędzy 1.88s – 2.24s, a w tym średnio:

- 102.9 ms ładowania	- 423.7 ms renderowania	- 172.7 ms innych działań
- 1016.1 ms skryptowania	- 16.0 ms obrazowania strony	- 171.3 ms bezczynności

PDBj: czas ładowania w próbach wahał się pomiędzy 2.71s – 3.76s, a w tym średnio:

- 26.2 ms ładowania	- 125.6 ms renderowania	- 202.0 ms innych działań
- 357.9 ms skryptowania	- 39.7 ms obrazowania strony	- 1956.0 ms bezczynności

Wnioski: najkrótszy czas ładowania strony uzyskała baza PDB, zaś najdłuższy PDBj, jednakże wszystkie uzyskały czasy akceptowalne dla przeciętnego użytkownika.

3. Podstawowy układ strony głównej

W ocenie strony internetowej na szczególną uwagę zasługują to jaki rozmiar ma dana strona główna na ekranie oraz w jakim stopniu będzie się ona dostosowywać do różnych rozmiarów okien.

1. Długość stron

PDB: 2 ekrany

PDBe: 3 ekrany

PDBj: 2,5 ekranu

Długość strony głównej jak powyżej jest w pełni satysfakcjonująca. Wszystkie ważne funkcje są widoczne ponad „linią zanurzenia” strony.

2. Układ strony i wersje mobilne

PDB:

PDBe:

PDBj:

responsywny układ strony

responsywny układ strony

responsywny układ strony

Witryny dostosowują się do wyświetlania na różnych urządzeniach. Całość wygląda czytelnie zarówno na dużych ekranach stacjonarnych komputerów, jak i na małych ekranach telefonów czy tabletów.

Wszystkie wyżej wymienione strony posiadają płynny układ zawartości, który będzie się automatycznie dopasowywał do rozmiaru okna przeglądarki użytkownika. Pozwala to na pełne docenienie zawartości witryny przez użytkowników zarówno większych jak i mniejszych monitorów, gwarantując im możliwość powiększenia okna do takich rozmiarów, jakich chcą.

4. Typografia

Istotną kwestią podczas tworzenia tekstu na stronach WWW jest zadbanie o jego czytelność - jednolita czcionka, stonowana kolorystyka. Mniejszą rangę posiada sprawa różnic w kolorze stron odwiedzonych w zestawieniu ze stronami nieodwiedzonymi.

Kolor tekst podstawowego:

- PDB – czarny
- PDBe – ciemnoszary
- PDBj – czarny

Rozmiar tekstu podstawowego:

- PDB – 14px
- PDBe – 12/13px
- PDBj – 13px

Rodzaj czcionek:

- PDB – Helvetica Neue, Helvetica, Arial, sans-serif
- PDBe – Verdana, Sans-serif
- PDBj – Verdana, Meiryo, Sans-serif, Arial Unicode MS, Cambria Math

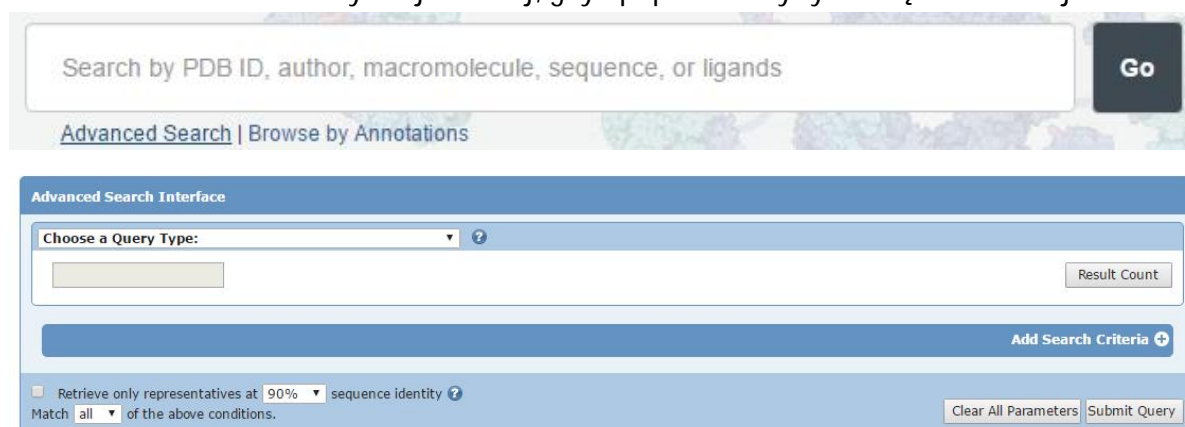
Kolory nieodwiedzonych/odwiedzonych hiperłączy:

- PDB – niebieski/niebieski
- PDBe – niebieski/szary
- PDBj – niebieski/chwilowo czerwony, później niebieski

5. Przeszukiwanie, wyszukiwanie informacji

Wyszukiwarka jest niezbędnym elementem każdej strony internetowej. Taka, która została dobrze zaprojektowana i działa w sposób sprawny jest kluczem do sukcesu. Jeśli czas poszukiwań użytkownika przeciągnie się do kilku długich minut, a co się z tym wiąże - będą mu towarzyszyły nieustannej trudności ze znalezieniem szukanej przez siebie pozycji, opuści on w mgnieniu oka daną stronę internetową. Wielce prawdopodobne, że taki odwiedzający nieprędko (bądź w ogóle) powróci na dany serwis.

PDB – dysponuje bardzo rozbudowaną wyszukiwarką, która daje aż 8 opcji wyszukiwania. Są to wyszukiwania za pomocą kategorii (organizm, typ polimeru, systematyka itp.), sekwencji, ligand, białek modyfikowanych przez leki, nieopublikowanych i ostatnich haseł, komentarzy, statystyk oraz zaawansowanych metod względem kategorii. Ta bardzo bogata różnorodność możliwości wyszukiwania informacji daje szansę na znalezienie ich znacznie szybciej i łatwiej, gdy np. posiadamy tylko część informacji.



The image shows two parts of the PDB search interface. The top part is a simple search bar with the placeholder text "Search by PDB ID, author, macromolecule, sequence, or ligands" and a "Go" button. Below it are links for "Advanced Search" and "Browse by Annotations". The bottom part is a more complex "Advanced Search Interface" with a dropdown menu for "Choose a Query Type:", a search input field, a "Result Count" button, and an "Add Search Criteria" button. At the bottom, there are checkboxes for "Retrieve only representatives at 90% sequence identity" and "Match all of the above conditions", along with "Clear All Parameters" and "Submit Query" buttons.

PDBe – dysponuje znacznie bardziej ubogą w funkcje wyszukiwarką, w której możemy jedynie wpisywać m.in. id genu, organizm, nazwę białka, czy nazwę genu, ale także autora badań. Posiada 38 głównych kategorii, z których najczęściej korzystamy w trakcie wyszukiwania (np. gatunek, typ molekuly, nazwy genów, autorów itd.), co czyni ją funkcjonalną, lecz mniej przejrzystą.



Advanced EMDb search

You can search the EMDb archive using this service. Use the form below to specify your query. When you press submit, the service will display a table with summary information for the EMDb entries that satisfy your query, in a separate tab. Use the "Configure search results" section below to select the sort order for the search results, and which fields are to be displayed. There is a "Download" button on the search results page which can be used to download the search results as a text or XML file for further analysis.

All text ?
EMDB codes ?
Fitted PDB codes ?
Authors ?
Resolution: highest Å lowest Å ?
Molecular weight: min MDa max MDa ?

PDBj – posiada 14 wyszukiwarek, które dają możliwość wyszukiwania za pomocą, m.in. autora, id białka, nazwy białka, daty zdeponowania, daty wydania, jak również wyszukiwanie związków o podobnych strukturach, czy obrazów 3D białek. Posiada również kategorię wielkich struktur, które przekraczają limit oryginalnego formatu plików PDB, ale są publikowane jako jeden plik w formacie PDBx, bądź XML, po to aby nie dzielić ich na kilka wpisów, co znacznie utrudniałoby pracę.



6. Nawigowanie

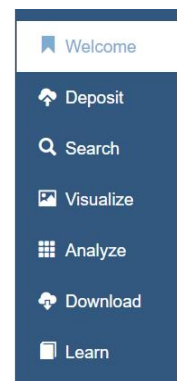
Fundamentem każdej strony internetowej jest dobra nawigacja. To ona bowiem decyduje o tym czy informacje, które zostały przygotowane przez założyciela zostaną odnalezione przez odbiorcę. Odpowiednia nawigacja prowadzi odwiedzających przez wszystkie części strony internetowej, tak by nie musieli oni poszukiwać dodatkowej pomocy.

PDB:



Strona główna bazy dysponuje paskiem nawigacyjnym umiejscowionym z lewej części ekranu, jednak posiada również górny pasek nawigacyjny, który w trakcie

przewijania strony, przesuwa się razem z użytkownikiem. Co więcej jest on dostępny ciągle podczas przeszukiwania witryny, dzięki czemu użytkownik ma stały dostęp do głównych i najczęściej używanych funkcji serwisu. Dodatkowo dostępne jest dolne łącze nawigacyjne w stylu stopki dla takich łączy jak o stronie, pomoc, czy strony partnerskie bazy.



PDBe:



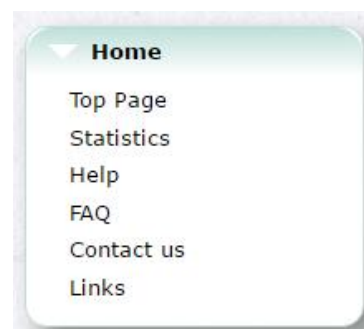
Górne menu nawigacyjne jest dostępne na stronie głównej oraz we wszelkiego rodzaju artykułach zamieszczonych w serwisie. W tym drugim przypadku widoczne jest również pasek nawigacyjny z prawej strony, dzięki czemu zmienianie kategorii przeglądanych informacji jest bardzo łatwe i szybkie. Te funkcje nie są jednak dostępne w trakcie przeszukiwania struktur umieszczonych w bazie, co oznacza uniemożliwia użytkownikowi bezpośrednie przejście do innej kategorii zawartości strony. Ta sama sytuacja jest z paskiem nawigującym w stopce, który zawiera takie informacje jak usługi strony, badania, czy łącza informacyjne i kontaktowe.



PDBj:



Baza ta oferuje użytkownikom lewy pasek nawigacyjny, który jest stale dostępny w trakcie poruszania się po serwisie. Dzięki temu mamy nieograniczony dostęp do wszystkich możliwości oferowanych przez bazę. Stopka jest jednak bardzo uboga i zawiera jedynie grafiki będące hipertłaczami do stron partnerskich oraz mediów społecznościowych.



7. Przyjazność dla nowych użytkowników

Wchodząc pierwszy raz na daną stronę internetową można poczuć się zagubionym. Stworzenie strony internetowej dostosowanej do potrzeb użytkownika, przejrzystej, o intuicyjnym interfejsie nie jest łatwym zadaniem. Zapoznanie się z serwisami PDB, PDBe oraz PDBj jest ułatwione dzięki dostępnym na nich instrukcjom użytkownika.

PDBj: Już na stronie głównej, jedną z pierwszych rzeczy jaką spostrzeże nowy użytkownik jest przewodnik korzystania ze strony.

Guide for first time visitors

For an introduction to the new web interface, please read [Using PDBj's web interface](#). An introduction to the customization features offered by the new PDBj web interface can be found [here](#). To get a more in-depth explanation on the various features of the PDBj website, please take a look at the [interactive tutorial series](#).

To further improve our **new web page**, [any comments and suggestions](#) are welcome. The legacy PDBj website continues to be available at <http://legacy.pdbj.org/>.

Znajdziemy tutaj wymagania względem oprogramowania wraz z odnośnikami do stron, na których można zainstalować albo zaktualizować potrzebne programy. Dostępne są tu również interaktywne samouczki (jak korzystać ze strony głównej czy wyszukiwarki) oraz instrukcja, która przedstawia jak można dostosować wygląd strony do własnych potrzeb (jak przesuwać i związać zakładki, powiększyć czcionkę, zmienić ułożenie strony). Na stronie głównej łatwo dostępne są również zakładki "Help" i "FAQ", na których znajdziemy odpowiedzi na dręczące nas pytania.

PDBe: Aby znaleźć poradniki i tutoriale korzystania z serwisu PDBe trzeba kliknąć najpierw w zakładkę "PDBe training", a następnie wybrać "Tutorials".

Service tutorials

These tutorials offer instruction on how to use PDBe services

- [How to search the PDB](#)
- [PDBeChem: Ligand-chemistry-based structure searches](#)
- [PDBeFold: Structure similarity and fold comparison](#)
- [PDBePISA: Prediction of likely quaternary structure assemblies](#)
- [PDBeMotif: Detailed tutorial on motifs and sites](#)

Mini tutorials

Many of the [Quips](#) articles have accompanying mini-tutorials that demonstrate practical use of various PDBe browsers, tools and services. These can be used on their own or read in conjunction with the associated [Quips](#) article. The mini-tutorials are worked examples that show how PDBe equips you to answer specific questions in structural biology.

- [How to search the entire PDB for structural homologues of a protein using PDBeFold](#)
- [How to use PDBePISA to build and interpret likely biological assemblies of a PDB entry](#)
- [How to superimpose and compare several members of a structural family using PDBeFold](#)
- [How to use PDBeMotif to investigate and explore ligands and ligand-binding sites](#)
- [How to search for small molecules and small molecule fragments in the PDB archive](#)

Webinars

PDBe webinars provide a walk through one or several of our services and are available through our [YouTube channel](#).

- [Introduction to search and entry pages](#)
- [Exploring EMDB](#)

Znaleźć tu możemy 5 instrukcji użytkowania PDBe (jak korzystać z wyszukiwarek PDB, PDBeChem, PDBeMotif oraz narzędzi PDBePISA i PDBeFold) oraz 5 mini-tutoriali, które pokazują jak wykorzystać narzędzia PDBe do rozwiązania konkretnych problemów. Udostępnione są również 2 filmiki na Youtubie, dzięki którym nowy użytkownik jeszcze lepiej pozna możliwości serwisu.

PDB: Znalezienie jakiegokolwiek instrukcji użytkowania serwisu PDB wymaga większego wysiłku niż na stronie PDBj czy PDBe. Mimo, iż PDB utworzył podstronę "Getting started" kierowaną do nowych użytkowników, odnośnik do niej nie znajduje się w żadnym widocznym miejscu. Sposobów na dotarcie do tej strony jest wiele. Najłatwiejszym z nich jest znalezienie zakładki "Help" w stopce strony głównej i wybranie "Website FAQ". Znajdziemy się wtedy na stronie, która zawiera najczęściej zadawane pytania przez użytkowników. Jednym z nich jest właśnie pytanie dotyczące instrukcji korzystania ze strony internetowej PDB.

[~] Do you have a tutorial on how to use this site?

A overview of the RCSB PDB site is available at http://www.rcsb.org/pdb/static.do?p=general_information/getting_started/index.html.

A tutorial demonstrating how to use the Advanced Search is available at <http://www.rcsb.org/pdb/static.do?p=help/advancedSearch.html>.

Narrated screencasts demonstrate different features of the RCSB PDB website and tools, including Chemical Structure Search, widgets, and a tour of the left hand menu.

W odpowiedzi, nowy użytkownik dostaje 2 odnośniki:

1. do strony "Getting started", na której zwięźle opisano sposób korzystania ze strony internetowej (m. in. jak się po niej poruszać, jak korzystać z wyszukiwarki oraz jakie jest wymagane oprogramowanie)
2. do szczegółowej instrukcji korzystania z wyszukiwarki "Advanced Search"

Mimo trudnych pierwszych kroków na stronie PDB, opcja pomocy jest bardzo rozbudowana. Dzięki zakładce "Help topics" bez trudu można znaleźć rozwiązania na wiele problemów. Po rozwinięciu zakładki "Learn" i wybraniu "Guide to PDB Data", znajdziemy się na platformie edukacyjnej PDB-101, na której bardzo dokładnie opisane jest jak interpretować i analizować wyszukane wyniki.

8. Informacje kontaktowe

W poszukiwaniu odpowiedzi na nurtujące pytania, podczas chęci przekazania uwag dotyczących treści bądź funkcjonowania strony czy też w innych kwestiach, odwiedzający poszukują bezpośredniego kontaktu z założycielami. To właśnie dlatego tak istotne jest umieszczenie w jednej z zakładek danych teleadresowych lub bezpośredniego formularza kontaktowego.

PDB: W zakładce 'More' widnieje opcja 'Contact Us'. Po wejściu w nią ukazują się informacje odnośnie kontaktu mailowego, adresu placówek, które kierują bazą oraz notkę dotyczącą obsługi użytkownika. W obsłudze użytkownika dostępny jest formularz kontaktowy, który bezpośrednio z witryny wysyła zapytanie, a odpowiedzi przez członka personelu należy się spodziewać pod podanym adresem mailowym w ciągu 1-2 dni roboczych. Pozostałe informacje kontaktowe to:

e-mail: pdb-l@sdsc.edu

dane adresowe zarządców strony:

Rutgers, The State University
of New Jersey
Center for Integrative Proteomics Research
174 Frelinghuysen Rd
Piscataway, NJ 08854-8076

San Diego Supercomputer Center (SDSC)
and Skaggs School of Pharmacy and
Pharmaceutical Sciences
University of California, San Diego (UCSD)
9500 Gilman Drive
La Jolla, CA 92093-0537

PDBe: Zakładka kontaktowa znajduje się w zakładce 'About PDBe'. Uzyskamy w niej informacje na temat adresu, adresów mailowych oraz telefonów pod którymi można uzyskać pomoc. Są to:

e-mail i nr telefonu:

- pdbehel@ebi.ac.uk – odnośnie pytań na temat używania narzędzi oraz serwisu

- pdbe@ebi.ac.uk, +44 (0)1223 494 550 – odnośnie depozytowania danych, przetwarzania ich i aktualizacji

- emdep@ebi.ac.uk, +44 (0)1223 494 550 – odnośnie depozytów map EMDB, ich przetwarzania oraz aktualizacji

adres:

Protein Data Bank in Europe
EMBL-EBI
Wellcome Genome Campus Hinxton
Cambridge CB10 1SD United Kingdom
telefon: +44 (0)1223 492 698
fax: +44 (0)1223 494 468

PDBj: W zakładce 'Home' znajdujemy 'Contact Us', a w niej 3 formularze kontaktowe. Brak jakichkolwiek innych danych.

Wnioski: Najbardziej rozwinięte informacje kontaktowe ma baza PDB, za względu na największą różnorodność danych. Mianowicie znajdziemy tam adres, adres e-mail oraz intuicyjny formularz kontaktowy. Brakuje jednak numeru telefonu do informacji, co jest zdecydowaną zaletą bazy PDBe, która z kolei nie posiada formularza kontaktowego. Najbardziej ubogą w informacje kontaktowe, jest baza PDBj, która posiada jedynie formularze kontaktowe, które co prawda są pożyteczne, jednakże nie gwarantują szybkiej odpowiedzi.

9. Logowanie się w witrynie

Możliwość założenia spersonalizowanego konta należy do niewątpliwych zalet strony internetowej. Witryna powinna zachęcać użytkowników na tyle przyjaźnie, by chcieli zarejestrować się w niej tak szybko, jak to tylko możliwe, nie ograniczając jednocześnie zbyt wielu użytkowników nie posiadających własnych kont.

Jedynie baza PDB posiada możliwość zalogowania się do strony. Funkcja ta nosi nazwę MyPDB. Z opisu wynika, że pozwala ona użytkownikom na spersonalizowanie wersji RCSB PDB, która jest dostępna z każdego komputera.



MyPDB pozwala przechowywać osobiste komentarze i notatki o przeglądanych strukturach. Zalogowany użytkownik zyskuje również opcję dodawania struktur do listy ulubionych. Pozwala to na bardzo szybki dostęp do oznakowanych struktur i notatek. Dodatkowo przechowywane są informacje zapytań odnośnie szukanych informacji, takich jak np. słowa kluczowe, sekwencje itp., do których można z łatwością powrócić. Informacje personalne są przechowywane prywatnie i bezpiecznie.

10. Reklamy

Na witrynie żadnej z trzech baz nie znajdziemy reklam wewnętrznych, czy też zewnętrznych. Ich układu i przejrzystości nie zaśmiecają niepotrzebne afisze, co świadczy o profesjonalności witryn i nie zaburza ich naukowego charakteru.

11. Depozytowanie danych

PDB: Zakładka deponowania podzielona jest na 2 kategorie – opcje deponowania oraz dokumentację. W pierwszej znajdziemy kolejne etapy deponowania danych tj. przygotowanie danych (głównie zapisanie plików we właściwym formacie), walidację danych (wymagana jest ocena jakości danych i porównanie ich do archiwalnych struktur), deponowanie struktur makromolekularnych w 3D do PDB oraz mocno rozwiniętą pomoc. Każda informacja jest odnośnikiem do zewnętrznej, właściwej strony do konwersji plików, bądź zapisu danych na serwer.

Jest najlepiej rozbudowaną bazą pod względem deponowania danych oraz intuicyjności obsługi.

PDBe: W odnośniku do depozytów znajdziemy 2 zakładki - depozytowanie struktur makromolekularnych w 3D do PDB oraz EM (obrazów elektromikroskopowych) do bazy EMDB, walidację danych oraz notkę prawną odnośnie systemu depozytowania. Obie zakładki prowadzą do oddzielnych stron, na których zapisujemy na serwerach bazy kolejno zebrane dane i ich udokumentowanie - walidację.

Dostępna jest również pomoc dotycząca depozytowania danych.

PDBj: W pomocy znajdziemy odnośniki do poszczególnych stron na których uzyskamy pomoc, zdeponujemy dane, czy dokumentację. Jest to zdecydowanie najłatwiej rozbudowana baza w porównaniu z wcześniejszymi.

Wszystkie bazy w celu depozytowania danych przenoszą na serwery wwPDB OneDep System jednakże na różne strony w zależności od lokalizacji – strona PDB obsługuje region obu Ameryk oraz Australii i Oceanii, PDBe Europy, Afryki oraz Rosji, natomiast PDBj pozostałej części Azji. Strona do zamieszczania udokumentowań (walidacji) prac jest jednakowa dla wszystkich baz. Również wszystkie bazy przenoszą nas do głównej strony wwPDB z pomocą.

12. Wyświetlane wyniki

Porównanie wyświetlanych informacji dla struktur.

„+” jeżeli informacja pojawia się w danej bazie, „-” gdy w bazie nie znajdziemy takiej informacji

	PDB	PDBe	PDBj
opis (autora)	+	+	+
data zdeponowania	+	-	+
data opublikowania	+	+	+
data modyfikacji	+	-	+
identyfikator EMDataBank	+	+	+
autorzy	+	+	+
grafika	+	+	+
wizualizacja 3D	+	+	+
organizm pochodzenia	+	+	+
uprawomocnienie	+	+	+
waga struktury	+ (dokładna)	+ (przybliżona)	+ (dokładna)
długość molekuł	+	+	+
możliwość przeglądu sekwencji	+	-	+
podział na ligandy	+	+	+
cytaty/referencje	+	+	+
ilość składników/części struktury	+	+	+
metoda eksperymentu	+	+	+
możliwość pobrania grafik i plików (jpg, pdb, fasta, itp.)	+	+	+

Zestawienie otrzymanych wyników

	PDB	PDBe	PDBj
Pierwsze wrażenie odwiedzającego	Wszystkie trzy strony główne są przejrzyste, zawierają intuicyjną przeglądarkę oraz system nawigowania. Ponadto serwisy te posiadają konta na Facebooku i Twitterze, a PDB dodatkowo na Youtube.		
Czas ładowania strony głównej	1.21s – 1.78s	1.88s – 2.24s	2.71s – 3.76s
	czasy akceptowalne dla przeciętnego użytkownika.		
Podstawowy układ strony głównej	2 ekrany	3 ekrany	2,5 ekranu
	Witryny dostosowują się do wyświetlania na różnych urządzeniach. Płynny układ zawartości, który będzie się automatycznie dopasowywał do rozmiaru okna przeglądarki użytkownika		
Typografia	Tekst podstawowy w kolorze czarnym/ciemnoszarym zapewnia przejrzystość strony, natomiast odmienny kolor hipertącza - niebieski gwarantuje, że użytkownicy nie będą zastanawiać się, z czym mają do czynienia.		
Przeszukiwanie, wyszukiwanie informacji	Najbardziej rozbudowana wyszukiwarka PDB.		
Nawigowanie	Menu górne oraz boczne (po lewej stronie)	Menu górne oraz boczne (po prawej stronie)	Menu boczne (po lewej stronie)
Przyjazność dla nowych użytkowników	"Getting started" dostępne po kliknięciu "Help" w stopce strony głównej, następnie "Website FAQ" i "Do you have a tutorial on how to use this site?" Platforma edukacyjna PDB-101	Poradniki i tutoriale (wraz z dwoma filmikami na Youtube) dostępne po kliknięciu w "PDBe training", a następnie "Tutorials".	Informacja o przewodniku (bogatym w interaktywne samouczki) korzystania ze strony na stronie głównej. Zakładki "Help" i "FAQ" w menu.
Informacje kontaktowe	formularz kontaktowy, dane teleadresowe (mail, adres zarządców strony)	dane teleadresowe (mail, adres, telefon)	trzy formularze kontaktowe, brak bezpośrednich danych
Logowanie się w witrynie	MyPDB	brak możliwości	
Reklamy	brak		
Depozytowanie danych	Najlepiej rozbudowaną bazą pod względem deponowania danych oraz intuicyjności obsługi jest PDB, natomiast najslabiej PDBj. PDBe posiada również pomoc dotyczącą depozytowania danych.		
Wyświetlane wyniki	Wszystkie trzy bazy wyświetlają podobne wyniki.		

Po przetestowaniu stron i porównaniu otrzymanych wyników, nasuwają się pewne wnioski. W ogólnym wrażeniu estetycznym oraz funkcjonalnym baza PDB zdecydowanie góruje nad pozostałymi. Strona wizualna serwisów nie jest najważniejszym aspektem, jest nim zdecydowanie ich zawartość, jednak może ona zachęcić, bądź zniechęcić nowych użytkowników do ponownych odwiedzin. Aby temu zapobiec strony powinny być przygotowywane starannie, z dbałością o przejrzystość, jak i również odpowiednia kolorystykę i grafikę, dobór czcionek, czy układ zawartości. Na docenienie zdecydowanie najbardziej zasługuje wspomniana wcześniej baza, ze względu na bardzo dużą przejrzystość i czytelność, a także łatwość/intuicyjność poruszania się po całym serwisie. Pozostałe bazy, tj. PDBe oraz PDBj nie wywołują negatywnego pierwszego wrażenia, ale porównując je do PDB tracą na jakości wizualnej.

Przechodząc do głównego celu pracy, jakim jest funkcjonalność wymienionych serwisów, należy zauważyć, że również na tym polu PDB spisywało się lepiej. Dane przechowywane na serwerach wszystkich baz są bardzo zbliżone, o ile nie jednakowe, natomiast różnią się sposobem wyświetlania. Możliwość wizualizacji 3D, na którą pozwalają nam PDB oraz PDBe, jest również istotną zaletą, gdyż m.in. sprawia to, że łatwiej możemy sobie wyobrazić jak wygląda konkretna struktura. Przodowanie w wyszukiwaniu informacji ponownie przypada PDB, a jest to spowodowane bardzo intuicyjną oraz przejrzystą, zaopatrzoną w miniaturki kategorii wyszukiwarką. Jest to baza zdecydowanie bardzo dobrze przystosowana dla użytkowników ze środowiska nieinformatycznego. Kolejnym argumentem przemawiającym za prowadzeniem PDB nad PDBe i PDBj jest łatwiejszy proces deponowania danych, a to jest jednym z głównych celów witryny (deponowanie oraz rozpowszechnianie). Dodatkowym atutem jest możliwość założenia konta, które będzie przechowywało najbardziej interesujące użytkownika informacje takie jak ulubione struktury, notatki i komentarze oraz poprzednie zapytania w wyszukiwarce.

Jako kolejną bazę można by uznać PDBe, nie wynika to jednak tylko z jej wyższości funkcjonalnej nad PDBj, lecz również z większej chaotyczności bazy PDBj. Faktem jest, że PDBe posiada artykuły, newsy itp., czego zdecydowanie brak w PDBj, jednak wyświetlane wyniki mogą być nawet mniej dokładne lub może ich zwyczajnie brakować. Szalę zwycięstwa przechyla z niekorzyścią dla serwisu PDBj jego mniejsza przejrzystość oraz początkowe trudności dla potencjalnego nowego użytkownika.

Podsumowanie

Serwisy PDB jako bazy danych niewątpliwie spełniają swoje funkcje, takie jak możliwość deponowania odkrytych białek, ich struktur, umieszczanie informacji na temat ich funkcji oraz udostępnianie zgromadzonej wiedzy szerokiemu środowisku naukowemu. Oprócz wszelakich informacji o zdeponowanych strukturach posiadają różnorodne w treści artykuły, newsy czy ciekawostki. Jednak to głównym ich zadaniem jest wspomniane przechowywanie zebranych z całego globu danych i udostępnianie ich. Ma to na celu ułatwienie pracy oraz jeszcze szybszy rozwój bioinformatyki, biologii oraz pokrewnych dziedzin nauki korzystających z bogatych zasobów takich serwisów jak PDB. Dzięki temu, każdego roku, liczba zgromadzonych informacji szybko się powiększa, co jest potwierdzeniem na potrzebę i funkcjonalność właśnie takich serwisów jak PDB, PDBe, czy PDBj.

Niewątpliwą ich zaletą są m.in. proste w obsłudze, intuicyjne interfejsy oraz różnorakie możliwości wyszukiwania danych. Powodują one, że korzystają z nich również osoby nieposiadające wykształcenia informatycznego, co przyczynia się do wzrostu zainteresowania i propagowania dziedziny nauki jaką jest bioinformatyka oraz zachęca do prowadzenia badań i dzielenia się nimi z innymi badaczami.

Omawiane w pracy serwisy (PDB, PDBe, PDBj) posiadają bardzo podobną zawartość jako serwisy głównej bazy wwPDB. Ich główną różnicą są obszary geograficzne dla jakich są przeznaczone/przystosowane. Są one określone w nazwie baz (Europe, Japan -> Asia). Ma to na celu lepsze dostosowanie pod użytkowników, jak np. język witryny (PDBj posiada 4 warianty językowe – angielski, japoński, chiński oraz koreański) oraz rozłożenie korzystających na 3 różne, lecz współpracujące serwisy. Różnice jakie w nich występują oczywiście wpływają na wybór serwisu, którego może dokonać użytkownik, lecz nowo zdeponowane informacje, szybko znajdują się również w pozostałych bazach.

Prekursorem badań bioinformatycznych są głównie Stany Zjednoczone. Nie trudno się więc dziwić, że najbardziej rozwiniętą jest baza PDB, „obsługująca” tereny Ameryk. Ma ona zdecydowanie przyjemniejszy i łatwiejszy w obsłudze dla nowego użytkownika interfejs, a wyświetlane dane są pogrupowane w przejrzysty sposób. Nie odbiera to jednak funkcjonalności pozostałym serwisom, które są również niezwykle przydatne i pomocne przy realizacji badań, bądź prac naukowych, a użytkownicy mogą korzystać z dobytku wszystkich serwisów.

W XXI wieku korzystanie z dostępnych źródeł internetowych może znacznie przyspieszyć pracę, jak i zwiększyć jej efektywność. Nieodłącznym elementem życia stały się również serwisy społecznościowe. Obecność więc w takich serwisach baz białkowych propaguje, rozpowszechnia oraz zachęca kolejne pokolenia do zainteresowania się tematami biologicznymi i bioinformatycznymi. Wskazuje także na wysokie dostosowanie się serwisów PDB do potrzeb społeczeństwa, co jest ich niewątpliwie kolejną wielką zaletą.

Mając na uwadze dalszy rozwój nauk biologicznych, serwisy takie jak PDB, PDBe, PDBj powinny się stale rozbudowywać oraz rozwijać, tak aby na bieżąco spełniać wymagania społeczeństwa, do czego niewątpliwie dążą.

Bibliografia

1. Nielsen J, Tahir M. Funkcjonalność stron www. 50 witryn bez sekretów. Gliwice: Wydawnictwo Helion; 2006.
2. Gruca A. Wydawnictwo PJWSTK. *Bioinformatyczne bazy danych*. Warszawa: Wydawnictwo PJWSTK; 2010.