

SeqGen

Marko Raina

COLLABORATORS

	<i>TITLE :</i> SeqGen		
<i>ACTION</i>	<i>NAME</i>	<i>DATE</i>	<i>SIGNATURE</i>
WRITTEN BY	Marko Raina	June 8, 2025	

REVISION HISTORY

NUMBER	DATE	DESCRIPTION	NAME

Contents

1	SeqGen	1
1.1	SeqGen ohjeet	1
1.2	Copyright & disclaimer	1
1.3	Ohjelman käyttöönotto	2
1.4	Ohjelman käynnistys	2
1.5	SeqGenin käyttötarkoitus	3
1.6	Pääikkuna	4
1.7	Pepscan-metodi	5
1.8	Epitooppi	5
1.9	Epitope mapping	5
1.10	Tiedostotyypit	6
1.11	Antigeeni	7
1.12	Vasta-aineet	7
1.13	Aminohapot	7
1.14	Esimerkki ohjelman toiminnasta	8
1.15	Tietoja ohjelman tekijästä	9
1.16	Kiitokset	9
1.17	Projektivalikko	9
1.18	Projekti/Avaa	10
1.19	Projekti/Tyhjennä	10
1.20	Projekti/Tallenna	10
1.21	Projekti/Tallenna nimellä	10
1.22	Projekti/Tallenna formaatilla	10
1.23	Projekti/Tulosta formaatilla	10
1.24	Projekti/Tietoja	10
1.25	Projekti/Apua	10
1.26	Project/Ikonisoi	11
1.27	Projekti/Lopeta	11
1.28	Editointivalikko	11
1.29	Editointi/Leikkaa	11

1.30	Editointi/Kopioi	11
1.31	Editointi/Liimaa	11
1.32	Editointi/Valitse kaikki	12
1.33	Editointi/Poista	12
1.34	Aminohapot-valikko	12
1.35	Aminohapot/Muokkaa	12
1.36	Aminohapot/Avaa	13
1.37	Aminohapot/Tallenna	13
1.38	Asetukset	13
1.39	Asetukset/Yleiset	13
1.40	Asetukset/Formaatti	14
1.41	Asetukset/Avaa	15
1.42	Asetukset/Tallenna	15
1.43	Asetukset/Tallenna Ikoni?	15

Chapter 1

SeqGen

1.1 SeqGen ohjeet

SeqGen 1.0-ohjeet

Yleistä:

Copyright & disclaimer	Tärkeää
Ohjelman käyttöönotto	Ohjelman sijoitus levyille
Ohjelman käynnistys	Shell ja WB
Ohjelman kuvaus	Mihin ohjelmaa käytetään
Pääikkuna	Gadgetit, näppäimistö, hiiri
Tietoja tekijästä	Yhteystiedot

Valikot:

Projektivalikko	Tiedostot ja tulostus
Editointivalikko	Leikekirjatoiminnot
Aminohapot-valikko	Aminohappotaulukot
Asetukset-valikko	Editointi- ja tulostusasetukset

© Marko Raina 1996

1.2 Copyright & disclaimer

Tämä on SeqGen 1.0. Ohjelman tekijä ja kopiointioikeudet © Marko Raina -96. Ohjelmaa saa levittää vapaasti, kunhan tämä arkiston sisältöä ei muuteta eikä sen levittämisestä oteta maksua (Freeware).

Käytät ohjelmaa omalla vastuullasi! Tekijä ei ota vastuuta tärkeiden tietojen menetyksestä, eikä muustakaan harmista ja mielipahasta, mitä ohjelma kenties käyttäjälle tuottaa.

Edellä mainitusta huolimatta otan mielelläni vastaan havainnot mahdollisista ohjelmointivirheistä, ehdotuksia ohjelman tulevaisuutta varten ynnä muuta.

1.3 Ohjelman käyttöönotto

SeqGen 1.0:n asennus onnistuu yksinkertaisesti purkamalla arkisto komennolla "lha e SeqGen.lha". Arkisto sisältää SeqGen-hakemiston ikoneineen. Ohjelman käyttöön tarvitaan ainoastaan systeemikirjastot. Huomattavaa on, että ifffparse ja asl.library ovat välttämättömiä, lisäksi ohjelma käyttää amigaguide- ja locale.librarya, jos ne ovat järjestelmän käytettävissä.

Arkiston sisältämät tiedostot ovat

```
SeqGen (dir)
  Config (dir)
    def_app.info                def_seq.info
    NormalAcids.aa             SeqGen.prefs
  catalogs (dir)
    suomi (dir)
      SeqGen.catalog
  Sequences (dir)
    Little.seq                  Little.seq.info
  develop (dir)
    SeqGen.cd
  Config.info                  PepScan.ilbm
  ReadMe.first                 ReadMe.first.info
  SeqGen                       SeqGen.guide
  SeqGen.guide.info            SeqGen.info
  SeqGenFinn.guide             SeqGenFinn.guide.info
  Sequences.info
  SeqGen.info
```

Jos haluat käyttää suomalaista AmigaGuide-manuaalia ohjelmasta käsin, poista englanninkielinen manuaali ja nimeä SeqGenFinn.guide SeqGen.guide:ksi.

SeqGenin pitäisi toimia, jos OS-versio on 2.04 tai uudempi. WB2.1:ssä ja uudemmissa oleva lokalisointi toimii SeqGen:ssä. Ohjelman mukana toimitetaan suomenkielinen .catalog-tiedosto, joka voi olla arkiston omassa hakemistossa (Catalogs/suomi/SeqGen.catalog). Ohjelman mukana tulee myös .cd-tiedosto, jonka avulla ohjelman voi lokalisoida muillekin kielille. Lisäksi tarvitaan CatComp-tyyppinen lokalisointiohjelma, joita liikkuu mm. Aminetissa.

SeqGenin poisto levyiltä on myös helppoa: poista koko SeqGenin hakemisto sisältöineen komennolla "delete SeqGen all".

1.4 Ohjelman käynnistys

SeqGen voidaan käynnistää sekä Shellistä että Workbenchistä. Ohjelma pyrkii lataamaan omasta hakemistostaan aminohappotaulukon NormalAcids.aa ja asetustiedoston SeqGen.prefs. Mikäli näitä ei löydy, käyttää ohjelma oletusasetuksia.

1. Käynnistys Shellistä

Komentorivin argumenttikaava (kts. AmigaDOS-manuaali) on

SEQUENCE, ACIDS/K, SETTINGS/K, PUBSCREEN/K, BUFFER/N/K

Kaikki argumentit ovat vapaaehtoisia. Selitykset:

SEQUENCE - avattava sekvenssitiedosto
ACIDS - avattava happotiedosto
SETTINGS - avattava asetustiedosto
PUBSCREEN - pääikkuna avataan tälle ruudulle
BUFFER - sekvenssipuskurin koko happoina (vähintään 100)

Esimerkiksi:

```
SeqGen
  ohjelma käynnistetään, oletustiedostot avataan
SeqGen file.seq
  oletusasetustiedostot ja sekvenssitiedosto file.seq avataan
SeqGen file.seq settings abnormal.prefs
  kuten edellinen, asetustiedostoksi ladataan abnormal.prefs
```

2. Käynnistys Workbenchistä

Käynnistys on mahdollista sekä ohjelman että sekvenssitiedoston ikonista. Tooltype't ovat samat kuin komentorivin argumenttikaavassa lukuunottamatta SEQUENCE-argumenttia. Tooltype'jä voi muuttaa valitsemalla ensin ikoni ja sitten Workbenchin Icons-valikon Information-vaihtoehto. Käyttämättömät tooltyper ovat suluissa. Seuraavassa esimerkissä ohjelma käynnistyy ja lataa käyttöönsä abnormal.prefs-asetustiedoston:

```
(ACIDS=<name>)
SETTINGS=abnormal.prefs
```

1.5 SeqGenin käyttötarkoitus

SeqGen on proteiinien aminohappojärjestyksen ts. -sekvenssin editoimiseen, tulostamiseen ja tallentamiseen tarkoitettu ohjelma. SeqGen:llä voi proteiininrakenteen syöttää joko yksikirjainlyhenteinä suoraan näppäimistöltä tai yksikirjain / monikirjainlyhenteinä ikkunassa olevan painonappien avulla. Jos rakenne on levyllä esimerkiksi haettuna tietokannasta, se voidaan siirtää leikekirjan (clipboard) välityksellä (katso esimerkki).

Ohjelman avulla voi tehdä tiedostoja, jotka ovat yhteensopivia esimerkiksi Commonwealth Serum Laboratories'n Pepscan-suunnitteluun tarkoitettun MS-DOS-tietokoneohjelman (v3.20, 1987) kanssa. CSL:n ohjelma ei ole kovin miellyttävä käyttää, ja ongelmia syntyy varsinkin jos proteiinin rakenne halutaan syöttää käsin tai osapeptidien välinen askel halutaan suuremmaksi kuin 1. SeqGenin avulla nämä tehtävät voidaan suorittaa helposti. Sekvenssi syötetään tai siirretään SeqGenin editointialueelle, ja kun halutaan luoda lopullinen CSL:n ohjelman tiedosto, tallennetaan sekvenssi tai sen osa formaattiasetuksissa muotoiltua formaattia käyttäen. Tallennettu tiedosto voidaan sitten ladata CSL:n ohjelmaan esimerkiksi BNET-synteesiin. Samoilla formaattiasetuksilla voidaan sekvenssi myös tulostaa paperille.

1.6 Pääikkuna

Pääikkunan rakenne on seuraava:

```

+-----+
| Siirry:          Etsi:          |
|                  Symbolit      |
| -----          -----      |
| |001:editointi| | @ Lyhennemuoto | |
| |010:alue      | | -----      |
| |              | | happo1 happo2 happo3 |
| |              | | happo4 ...      |
| |              | | -----      |
+-----+

```

Sekvenssin editointi tapahtuu editointialueella, joka on ikkunassa vasemmalla puolella. Sekvenssiä voidaan syöttää, kun editointialue on aktiivinen; tämän merkinä alueella näkyy kursori. Aktivointi tapahtuu hiiren avulla osoittamalla ja painamalla hiiren vasenta nappia.

Gadgetit

- Siirry** Kun halutaan siirtää kursori tietyn aminohapon kohdalle, kirjoitetaan haluttu järjestysnumero tähän gadgetiin.
- Etsi** Kun halutaan löytää tietty aminohappojono, kirjoitetaan se tähän gadgetiin. Etsintä alkaa kursorin alla olevasta aminohaposta. Väliviivan voi jättää pois.
- Symbolit** Tästä voi valita editointialueelle ja leikekirjaan tulostuvien aminohappojen muodon (lyhyt/pitkä).
- Hapot** Näitä gadgeteja painamalla voi syöttää sekvenssiä ilman näppäimistöä. Editointialueen tulee olla aktiivinen. Jos happogadgeteja ei ole ollenkaan, aminohappotaulukko on tyhjä.

Näppäimistö

- Hapot** Kun editointialue on aktiivinen, voi aminohapon lisätä sekvenssiin. Näppäimistön avulla: tällöin aminohapon lyhennekirjainta painamalla sekvenssiin lisätään kursorin kohdalle kyseinen aminohappo. Tämä toimii riippumatta siitä, onko aminohappojen tulostusmuotona lyhyt vai pitkä muoto.
- Kursori** Kursorinäppäimillä voi siirtyä rivin ylös- tai alaspäin sekä aminohapon verran oikealle tai vasemmalle. SHIFT-näppäimen kanssa vastaavasti siirrytään näytöllinen ylös tai alas tai rivin alkuun / loppuun riippuen kursorinäppäimestä. Näytön vierittäminen käy editointialueen oikealla puolella olevan

vierityspalkin ja -nuolien avulla.

Delete Happon poisto onnistuu Backspace- ja DEL-näppäimillä. Edellinen poistaa hapon kursorin vasemmalta puolelta, jälkimmäinen kursorin alta. Suurempia alueita voi poistaa valitsemalla alue hiirellä ja valitsemalla valikoista Editointi/Poista.

Help HELP-näppäintä painamalla saadaan näkyviin tämän manuaalin pääikkunaan liittyvä sivu. Jos valitset jonkin toiminnon valikosta ja painat samalla HELP-näppäintä, avautuu tätä toimintoa vastaava manuaalin sivu.

Hiiri

Hiirellä voidaan kursori siirtää halutun aminohapon kohdalle osoittamalla kyseistä happoa ja painamalla hiiren vasenta nappia. Hiirellä on myös mahdollista valita suurempi joukko happeja editointivalikon toimintoja varten painamalla hiiren vasen nappi pohjaan ja liikuttamalla sitä haluttuun suuntaan.

1.7 Pepscan-metodi

Pepscan-metodi on H. Geysenin tutkimusryhmineen 80-luvulla kehittämä menetelmä¹, jonka avulla voidaan syntetisoida suuria määriä lyhyitä peptidejä eli useasta aminohaposta koostuvia polymeerejä. Peptidit "kasvatetaan" muovista valmistetun puikon eli pinnan pinnalle. Pinniä voidaan käyttää useita kertoja serologisissa tutkimuksissa. Yhteen pinniin tulee useita kopioita samasta peptidistä. Menetelmää voidaan käyttää ns. epitooppikartoituksessa.

Kuvaa Pepscan-proseduurista voit katsoa Display-ohjelmalla (< WB 3.0) tai Multiviewillä. Ensin mainittu linkki toimii vain luettaessa tätä manuaalia ohjelman ulkopuolelta.

¹ Geysen et al: Use of peptide synthesis to probe viral antigens for epitopes to a resolution of a single amino acid. Proc Natl Acad Sci 81: 3998-4002, 1984)

1.8 Epitooppi

Epitooppi on se kohta antigeenissa, jota vastaan elimistön immuuni- eli puolustusjärjestelmä varsinaisesti reagoi. Se on usein tietty kohta esimerkiksi viruksen jossakin proteiinissa. Useimmiten taudinaiheuttajalla on monta tällaista vasta-aineen muodostuksen aiheuttavaa kohtaa.

1.9 Epitope mapping

Epitooppikartoituksella tarkoitetaan proteiinin epitooppien etsimistä. Pepscan-menetelmällä voidaan etsiä B-soluepitooppeja eli vasta-aineiden muodostuksen aiheuttavia antigeenin osia. Peptidien lyhyiden (8-10 aminohappoa) vuoksi havaitaan vain lineaarisia epitooppeja. Epäjatkuvat epitoopit, jotka muodostuvat proteiinin taipumisessa kolmiulotteiseen muotoonsa, vaativat muita menetelmiä.

Esimerkki

Proteiinin rakenne on vaikkapa A-C-D-E-F-G-H (kirjaimet tarkoittavat aminohappoja). Jos oletetaan, että epitooppi on vaikkapa 4 aminohapon pituinen, syntetisoidaan pinneihin seuraavat peptidit 1 aminohapon askeleella ja käytetään niitä kartoituksessa:

```
Pinni1: A-C-D-E
Pinni2:  C-D-E-F
Pinni3:   D-E-F-G
Pinni4:    E-F-G-H
```

Synteessin jälkeen pinnejä inkuboidaan kyseisen viruksen tai bakteerin aiheuttaman taudin sairastaneen potilaan seerumissa, jolloin seerumin vasta-aineet tarttuvat niihin peptideihin, joita vastaan ne ovat syntyneet. Mittaamalla vasta-aineiden sitoutuminen voidaan löytää epitooppikohdat proteiineissa eli ne kohdat, jotka eniten sitovat vasta-aineita. Näitä kohtia proteiineissa voidaan valmistaa muilla keinoilla ja käyttää niitä esimerkiksi kyseisen taudin diagnostiikassa.

1.10 Tiedostotyypit

SeqGen tuottaa kolmenlaisia tiedostoja: sekvenssi-, aminohappotaulu- ja asetustiedostoja. Tässä niistä joitain tietoja.

1. Sekvenssitiedosto

Tähän tiedostoon tallennetaan editoitava sekvenssi Projekti/Tallenna - valikkotoiminnolla. Tiedostoon tallennetaan myös formaattiasetukset ja käytetyn aminohappotaulukon nimi. Normaalisti tiedoston nimessä on ".seq"-päätte.

2. Aminohappotiedosto

Tämä on aminohappojen lyhyiden ja pitkien nimien muodostama taulukko. Ohjelman mukana toimitettavassa "config/NormalAcids.aa"-tiedostossa on luonnon proteiineissa esiintyvien 20 aminohapon määrittely. Normaalisti tiedostonimessä on päätte ".aa". Kun SeqGen käynnistetään, ohjelma yrittää avata tiedoston "config/NormalAcids.aa".

3. Asetustiedosto

Tähän tiedostoon tallennetaan editointi-, formaatti- ja ikkunan kokoasetukset. Tiedostonnimillä on normaalisti päätte ".prefs". SeqGen-ohjelmaa käynnistettäessä se yrittää avata tiedoston "config/SeqGen.prefs". Ikkuna-asetukset luetaan vain ohjelmaa käynnistettäessä.

1.11 Antigeeni

Antigeeni on mikä tahansa rakenne, jota elimistön immuuni- eli puolustusjärjestelmä pitää vieraina ja hyökkää sitä vastaan. Antigeeneja voivat olla bakteerien, sienien tai virusten osat, lääkeaineet, ja jopa ihmisen elimistön omat rakenteet.

1.12 Vasta-aineet

Vasta-aineet ovat B-imusolujen tuottamia pieniä proteiineja, jotka voivat kiinnittyä tautia aiheuttavaan mikrobiin. Muut immuunijärjestelmän osat voivat tämän jälkeen tuhota mikrobin.

Sekundaarivasta-aineet ovat muihin vasta-aineisiin kiinnittyviä vasta-aineita, jotka on valmistettu laboratoriokäyttöön. Niihin voidaan liittää jokin merkkiaine, esimerkiksi väriä tuottava entsyymi, ja käyttää niitä sitten ihmisen vasta-aineiden havaitsemiseen.

1.13 Aminohapot

Aminohapot ovat pieniä molekyyliä, joissa on ainakin yksi karboksyyli-ryhmä (-COOH) ja aminoryhmä (-NH₂). Aminohappojen erikoiset kemialliset ominaisuudet mahdollistavat niiden polymeroitumisen lyhyiksi ketjuiksi eli peptideiksi ja hyvinkin pitkiksi ketjuiksi eli proteiineiksi. Sekä peptidit että proteiinit ovat oleellinen osa elollista luontoa.

Luonnossa proteiineissa esiintyviä aminohappoja on 20 kpl. Ohjelman mukana toimitettava NormalAcids.aa -tiedosto sisältää nämä aminohapot. Kansainvälisen standardin mukaisesti kullakin aminohapolla on yhden kirjaimen pituinen lyhenne, joiden avulla voidaan pitkätkin proteiinit kuvata tiiviisti. Ihmismuistille selkeämpiä ovat vastaavat kolmikirjaimiset lyhenteet. SeqGen-ohjelmassa voidaan proteiinin aminohapposekvenssiä käsitellä sekä 1-kirjain- että kolmikirjainmuodossa. Luonnon proteiinien aminohapot ovat:

Lyhenne	3-lyhenne	Koko nimi
A	Ala	Alaniini
C	Cys	Kysteiini
D	Asp	Aspartaatti
E	Glu	Glutamaatti
F	Phe	Fenylalaniini
G	Gly	Glysiini
H	His	Histidiini

I	Ile	Isoleusiini
K	Lys	Lysiini
L	Leu	Leusiini
M	Met	Metioniini
N	Asn	Asparagiinihappo
P	Pro	Proliini
Q	Gln	Glutamiinihappo
R	Arg	Arginiini
S	Ser	Seriini
T	Thr	Treoniini
V	Val	Valiini
W	Trp	Tryptofaani
Y	Tyr	Tyrosiini

1.14 Esimerkki ohjelman toiminnasta

Esimerkkinä kuvataan 94 peptidiä sisältävän peptiditiedoston luominen. Peptidit ovat proteiinin alusta, kymmenen aminohapon pituisia ja kolmen aminohapon askeleella.

1. Sekvenssin syöttö

Proteiinin aminohappojärjestys saatiin tietokannasta PC-levyllä ja se siirrettiin Amigan levyille CrossDOSin avulla. Tekstieditorilla otsikkotiedot ja aminohappojen numerot poistettiin ja jäljelle jäänyt sekvenssi leikattiin leikekirjaan. Sekvenssi liimattiin sitten SeqGenin editointipuskuriin.

2. Formaatin suunnittelu

CSL:n ohjelma tallentaa peptiditiedostonsa seuraavaan muotoon:

- * Erilaisten peptidien määrä
- * Peptidil (1-kirjainlyhenteet, ei väliviivoja)
- * Syntetisoitavien peptidil:en lkm
- * Peptidi2
- * Syntetisoitavien peptidi2:en lkm
- * ...
- * Peptidi "määrä"
- * Syntetisoitavien peptidien "määrä" lkm

Tämän perusteella formaattiasetukset olivat:

- * Alkuteksti : 94\n
- * Formaatti : %s\n\1\n
- * Lopputeksti :
- * Peptidien pituus : 10
- * Askel : 3

valittiin "Lyhyet hapot" ja "Tulosta vain",
poistettiin "Väliviiva"

- * Peptidien lkm : 94
 - * alkaen (haposta) : 1
-

3. Peptiditiedoston luonti levyille ja jatkokäsittely

Valittiin valikosta Projekti/Tallenna formaatilla... ja annettiin sopiva nimi. Tiedosto siirrettiin takaisin PC-levyllä. Tämän jälkeen tiedosto ladattiin CSL:n PepScan-ohjelmaan BNET-synteesin pohjaksi.

1.15 Tietoja ohjelman tekijästä

Tämän ohjelman on tehnyt

Marko Raina
Ilmarinkatu 23 D 37
33500 Tampere

Email:
blmara@uta.fi

Otan mielelläni vastaan kommentteja, bugiraportteja, ehdotuksia jne. Ohjelma on vielä hyvin suppea, hyviä laajennuksia olisi ehkä AREXX-portti. parempi GUI (nykyinen on puoli-fonttisensitiivinen) jne. Koska Enforceria ei ole ollut käytettävissä, kaipailen erityisesti tietoja Enforcer-SeqGen-yhteistoiminnasta!

Ohjelma on kehitetty A500/3MB/WB2.1 + A590/20MB-yhdistelmällä ja DICE C v.2.07.56R:llä. Kiitossivun voit lukea painamalla tästä.

1.16 Kiitokset

Kiitokset niille monille henkilöille, joiden tekemiä ohjelmia olen käyttänyt tämän ohjelman suunnittelussa ja toteutuksessa:

- * Jan van der Baard GadToolsBox 2.0c - käyttöliittymän editori
- * Matthew Dillon DICE 2.07.56R - C-kääntäjä
- * Edd Dumbill Heddley 1.1 - Amigaguide-editori
- * Dietmar Eilert GoldEd 3.13 - tekstieditori
- * David Zvekic FixHeddley 1.2 - Heddley fixer

1.17 Projektivalikko

Projektivalikko:

Avaa...
Tyhjennä

Tallenna
Tallenna nimellä...

Tallenna formaatilla...
Tulosta formaatilla

Tietoja...

Apua

Ikonisoi

Lopeta

1.18 Projekti/Avaa

Lukee muistiin SeqGen:llä talletetun sekvenssitiedoston levyltä.

1.19 Projekti/Tyhjennä

Tyhjentää sekvenssin. Jos sitä ei ole tallennettu, varmistaa ensin.

1.20 Projekti/Tallenna

Tallentaa sekvenssin levyille.

1.21 Projekti/Tallenna nimellä

Kysyy tiedoston nimen ja tallentaa sekvenssin.

1.22 Projekti/Tallenna formaatilla

Tallentaa sekvenssin formaattiasetuksien mukaisessa muodossa.

1.23 Projekti/Tulosta formaatilla

Tulostaa sekvenssin formaattiasetuksien mukaisesti kirjoittimelle.
Tulostuksen voi keskeyttää painamalla tulostusikkunan "Pysäytä"-nappia.

1.24 Projekti/Tietoja

Kertoo perustietoja ohjelmasta, sekvenssistä ja aminohapoista.

1.25 Projekti/Apua

Avaa tämän dokumentin (tiedoston "SeqGen.guide" ohjelman hakemistossa).

1.26 Project/Ikonisoi

Ikonisoi ikkunan eli sulkee sen ja sijoittaa Workbenchiin appikonin. Tätä appikonia napauttamalla (kahdesti) avautuu ikkuna uudelleen. Appikonin kuva otetaan tiedostosta "config/def_app.info".

1.27 Projekti/Lopeta

Päättää ohjelman suorituksen.

1.28 Editointivalikko

Editointivalikko:

Leikkaa

Kopioi

Liimaa

Valitse kaikki

Poista

1.29 Editointi/Leikkaa

Siirtää hiirellä tai Editointi/Valitse kaikki-toiminnolla valitun alueen sekvenssistä leikekirjaan (clipboard). Alue voidaan tämän jälkeen kopioida toiseen paikkaan sekvenssissä tai esimerkiksi tekstinkäsittelyohjelmaan.

1.30 Editointi/Kopioi

Kopioi hiirellä tai Editointi/Valitse kaikki-toiminnolla valitun alueen sekvenssistä leikekirjaan (clipboard). Valittua aluetta ei poisteta sekvenssistä kuten Leikkaa-toiminrossa.

1.31 Editointi/Liimaa

Liimaa leikekirjan sisällön sekvenssiin kursorin kohdalle. Leikekirjan sisältö tulkitaan muodostuneeksi joko lyhyistä tai pitkistä haponnimistä riippuen pääikkunan Symbolit-gadgetista. Väliviivat, välilyönnit, rivinvaihdot ja muut kontrollimerkit ohitetaan. Mikäli leikkeen sisällössä on tuntematon haponnimi (esimerkiksi kirjoitusvirhe), antaa ohjelma virheviestin eikä liimausta tapahdu.

1.32 Editointi/Valitse kaikki

Valitsee koko sekvenssin seuraavaa editointivalikon toimintoa varten.

1.33 Editointi/Poista

Poistaa hiirellä tai Editointi/Valitse kaikki-toiminnolla valitun alueen sekvenssistä. Ole varovainen; tätä toimintoa ei voi peruuttaa.

1.34 Aminohapot-valikko

Aminohapot-valikko:

Muokkaa...

Avaa...

Tallenna...

1.35 Aminohapot/Muokkaa

Avaa aminohappotaulukon muokkausikkunan.

Tässä ikkunassa on mahdollista muokata editoinnissa ja tulostuksessa käytettävää aminohappovalikoimaa eli ns. aminohappotaulukkoa. Kullakin aminohapolla täytyy olla pitempi nimi (tällä hetkellä korkeintaan 5 kirjainta) ja yksikirjaiminen lyhenne. Lyhenne kannattaa valita standardin mukaisesti. "Help"-näppäimellä saadaan tämä sivu näkyviin.

Esim. pitkä lyhenne

Ala A

Tyr Y

...

Ikkunassa olevassa listassa (listview) näkyvät aminohappojen "pitkät" nimet. Kutakin happoa vastaavan lyhyen nimen saa näkyviin valitsemalla hiirellä halutun pitkän nimen; lyhyt nimi ilmestyy Lyhenne-gadgetiin.

Gadgetien selitykset

Lisää Kun haluat lisätä uuden hapon aminohappotaulukkoon, paina tätä gadgetia. Listan alapuolella olevassa gadgetissa voit editoida kysymysmerkin '?' tilalle haluamasi pitkän haponnimen. Return- tai TAB-näppäimellä pääset Lyhenne-gadgetiin.

Poista Tällä poistetaan valittu aminohappo taulukosta.

Ylös Siirtää valittua happoa listassa ylöspäin.

Alas Siirtää valittua happoa listassa alaspäin.

Lyhenne Tähän annetaan pitkää haponnimeä vastaava lyhenne. Lyhenteeksi käyvät kaikki kirjoittuvat merkit paitsi väliviiva '-', joka on varattu aminohappojen erottimeksi.

Käytä Tätä nappia painaessasi hyväksyt tehdyt muutokset aminohappotaulukkoon.

Peruuta Tällä napilla voit peruuttaa tehdyt muutokset aminohappotaulukkoon.

1.36 Aminohapot/Avaa

Lukee aminohappotaulukon levyltä.

1.37 Aminohapot/Tallenna

Tallentaa aminohappotaulukon levyille.

1.38 Asetukset

Asetukset-valikko:

Yleiset...
Formaatti..

Avaa...
Tallenna...

Tallenna ikoni?

1.39 Asetukset/Yleiset

Avaa yleisasetuksien muokkausikkunan.

Nämä asetukset vaikuttavat editointialueen ulkonäköön. "Help"-näppäimellä saadaan tämä sivu näkyviin.

Gadgetit

Happoja/rivi Montako haponnimeä editointialueen riville enintään tulostetaan. Vähimmäismäärä on yksi; jos määrä on suurempi kuin mitä editointialueelle mahtuu, tulostetaan vain mahtuva määrä.

Numeron pituus Montako numeroa (max. 10) käytetään kuvaamaan hapon numeroa editointirivin alussa.

Väliviiva Jos tämä on valittu, tulostetaan editoinnissa sekä Editointi/Leikkaa ja Editointi/Kopioi -valikkotoiminnoissa väliviiva '-' happojen väliin.

1.40 Asetukset/Formaatti

Avaa formaattiasetuksien muokkausikkunan.

Nämä asetukset vaikuttavat vain formaattitoimintoihin. Esimerkki formaatin käytöstä on toisaalla. "Help"-näppäimellä saadaan tämä manuaalisivu näkyviin.

Gadgetit

Alkuteksti Tämä rivi sellaisenaan tulostetaan formaattitallenteen tai formaattitulosteen alkuun. Rivin voi jakaa useammaksi rivinvaihtomerkillä '\n'. Kenoviivan saa kirjoittamalla kaksi kenoviivaa '\\'. Esimerkiksi rivi "Otsikko" tulostuu, kun alkutekstiksi on määritelty "Otsikko\n". Tässä EI pidä käyttää %s-, %lu- tai vastaavia kontrollikoodeja, sillä ne voivat kaataa koneen.

Formaatti Tähän gadgetiin tulee antaa printf-tyylinen formaattijono, jonka perusteella kukin sekvenssin peptidi tallennetaan tai tulostetaan. Sallittuja ovat normaalin kirjainmerkistön lisäksi rivinvaihtomerkki '\n' ja kenoviivamerkki '\\' sekä seuraavat kontrollijonot (Esimerkiksi rivin "020: PEPT" formaattiriviksi annetaan "%03.lu: %s".):

jono	tulostuu
%%	%
%s	peptidi - tämä pitää aina olla ja vain kerran
%lu	peptidin ensimmäisen hapon numero (right justified) Voit käyttää myös muotoa %-lu, jolloin numero tulostuu left justified-tyyliin. Lisäksi %LEV.lu ja %-LEV.lu-muodolla voit määritellä numerokentän leveyden LEV kpl merkiksi. %4.lu ja %04.lu eroavat siten, että täyte-merkkinä edellisessä on välilyönti, jälkimmäisessä 0. Hapon numeron voi jättää formaatista pois.

Lopputeksti Tämä rivi sellaisenaan tulostetaan formaattitallenteen tai -tulosteen loppuun samalla periaatteella kuin aikaisempi alkuteksti.

Peptidin pituus Formaattitallennuksessa ja -tulostuksessa tulostettavan peptidin pituus.

Askel Peptidien ensimmäisten happojen välinen etäisyys eli ns. offset. Jos halutaan esimerkiksi peptidejä yhden aminohapon

välein, on askel 1.

Tulosta osa Jos tämä on valittu, tulostetaan vain määritelty lukumäärä peptidejä alkaen annetusta aminohaposta.

1.41 Asetukset/Avaa

Lukee asetustiedoston levyltä.

1.42 Asetukset/Tallenna

Tallentaa asetukset levyille.

1.43 Asetukset/Tallenna Ikoni?

Jos tämä on valittu, SeqGen tallentaa projekti-ikonin samalla kun se tallentaa sekvenssin. Ikonin kuva otetaan tiedostosta config/def_seq.info.