
Графид д.о.о.

Chemistry Add-in for Word и Bio Extension for Excel

Водичи за кориснике

The Outercurve Foundation



Бања Лука, 2013

Chemistry Add-in for Word и Bio Extension for Excel

Превео и приредио:
Димитрије Д. Чвокић

Технички уредник:
Димитрије Д. Чвокић

Прелом текста и обрада слика:
Димитрије Д. Чвокић

Издавач:
Графид д.о.о., Бања Лука

За издавача:
Срђан Иванковић

Е-издање

© 2011 The Outercurve Foundation.

Напомена: Овај документ је дат „онакав какав јесте“. Информације и ставови изнесени у овом документу, укључујући URL адресе и друге Интернет референце, могу се променити без претходног обавјештења. Корисник сам сноси ризик употребе. Овај документ не пружа законска права ни на какву интелектуалну својину у било ком Microsoft-овом производу. Дозвољено је умножавати и користити овај документ за ваше интерне сврхе. Дистрибуирано под дозволом Creative Commons Attribution 3.0 Unported License. Опис дозволе на адреси: <http://creativecommons.org/licenses/by/3.0/rs/>

Microsoft и Windows су регистровани заштићени називи фирме Microsoft Corporation. Сви остали заштићени и регистровани заштићени називи који нису наведени су власништво одговарајућих компанија или особа.

CIP - Каталогизација у публикацији
Народна и универзитетска библиотека
Републике Српске, Бања Лука

004.4:54(035)
004.4:51(035)

CHEMISTRY Add-in for Word i Bio Extension for
Excel [Elektronski izvor] : vodiči za korisnike /
[prevodilac i priređivač Dimitrije Čvokić]. -
Banja Luka : Grafid, 2013

Način dostupa (URL):
<https://www.dropbox.com/s/j02jt2uruapqky1/chem4word%2Bbio4excel.pdf>. - Tekst ćir. i lat.

ISBN 978-99955-89-23-3
1. The Outercurve Foundation

COBISS.BH-ID 4010264

Предговор

Током уводних информатичких курсева на студијским програмима за биологију и хемију, на ПМФ у Бањој Луци, студенти се упознавају са различитим намјенским софтвером који се користи у датим струкама. *Chemistry Add-in for Word* и *Bio Extension for Excel* представљају проширења/додатке постојећем најпопуларнијем канцеларијском софтверском пакету – Microsoft Office-у, чиме је омогућено доста лакше и природније надограђивање претходно стечених вјештина обраде текста и табеларних прорачуна.

Пред вама се налази превод два званична водича за дате додатке MS Office-у. *Chemistry Add-in for Word* омогућава студентима и истраживачима у области хемије да уносе и модификују хемијску информацију, као што су то нпр. етикете, формуле, 2-D депкције, а све то унутар MS Word-а. С друге стране, *Bio Extension for Excel* представља готов производ развијен у оквиру .NET технологије, усмјерен на биогенетику, конкретно табеларну обраду геномски секвенци помоћу MS Excel-а.

Димитрије Д. Чвокић

Садржај

Chemistry Add-in for Word

Увод.....	7
Почетак	8
Предуслови	8
Системски захтјеви	8
Инсталација.....	8
Преглед корисничког прочеља.....	9
Формирање и руковање хемијским зонама	10
Одређивање изгледа хемијске зоне.....	11
Промјена етикета зоне.....	12
Уметање зоне из Хемијске галерије	14
Уметање хемијске зону са веба	14
Руковање зонама у Хемијској галерији	16
Руковање хемијским зонама помоћу Chemistry Navigator-а	16
Измјена 2-D структура	18
Управљачки објекти 2-D Редактора	19
Означавање атома ради измјене.....	20
Уређење појединачних атома.....	22
Delete Selection	22
Change Atom Type.....	23
Set Label/Remove Label	24
+e/-e.....	24
Undo/Redo.....	24
+H ⁺ /-H ⁺	24
+H [•] /-H [•]	25
Set Isotope/Remove Isotope	25
Мијењање међуатомских веза.....	25
Мијењање структуре дијаграма.....	26
Обртање дијаграма.....	26
Премјештање атома или група	26
Ротирање атома или група	27
Брисање атома или група.....	28
Извори	29
Додатак 1: Основе CML-а	30
Похрањивање CML-података	30
Додатак 2: Како су CML-подаци похрањени у документу.....	31

.NET Bio Extension for Excel

Увод.....	36
Инсталација .NET Bio Extension-а.....	37

Преглед корисничког прочеља.....	38
Унос података (читање датотеке).....	39
Упис података (секвенци) у датотеку	41
Поравнавања секвенци	42
Агрегација секвенци	43
Слање секвенце BLAST Веб-сервисима	43
Формирање графикана расподјеле нуклеотида ДНК.....	46
Руковање интервалним геномским подацима	47
Приказ Венових дијаграма на основу интервалних геномских података	51
Промјена конфигурационих опција	54
Додатак А: Подржане секвенце и формати датотека.....	55
FASTA: Секвенце података.....	55
FASTQ: Квалитативне секвенце података	55
GenBank: Формат за базе података нуклеотидних секвенци.....	55
GFF: Generic Feature Format.....	56
Browser Extensible Data (BED) Format	56
Додатак Б: Одобравање макроа	56

Chemistry Add-in for Word

Сажетак

Описано је коришћење софтверског додатка за Microsoft Word званог Chemistry Add-in for Word, који омогућује једноставан и елегантан унос хемијских структура и података разних врста у Ворд-документ.

Напомена:

- Већина разматраних ствари долази са инсталационим пакетом Chemistry Add-in. За цјеловиту листу докумената и разматраног софтвера, погледајте одјељак „Извори“.
- За новости и унапријеђене верзије софтвера Chemistry Add-in посјетите: <http://chem4word.codeplex.com> или <http://research.microsoft.com/chem4word/>
- За општа питања и дискусије о Chemistry Add-in for Word-у, посјетите страницу друштвене мреже Фејсбук: http://www.facebook.com/home.php?sk=group_186300551397797

Увод

Chemistry Add-in омогућује да се на једноставан и елегантан начин уносе хемијске структуре и подаци у Ворд-документ.

Са Chemistry Add-in-ом може се:

- **Направити унутар текста „хемијска зона” ради представљања хемијских података.**

Хемијске зоне су управљачки објекти који садрже информације о молекулу, при чему се сами молекули могу приказивати на више различитих начина. Основни подаци се похрањују као Chemical Markup Language (CML) документи, то јест као једна од најчешће кориштених XML схема за представљање хемијских података. Подаци обично садрже, како уобичајене (тривијалне) називе, тако и називе према стандарду организације International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC), затим молекуларну формулу и податке потребне за приказ одговарајуће 2-D структуре.

- **Приказати хемијска информација на разне начине.**

Све што је засновано на CML-у може се приказати у хемијској зони. Са неколико кликова могуће је пребацити се са тривијалног назива једињења на молекуларну формулу или пак на 2-D приказ.

- **Приказати 2-D хемијску структуру у високој резолуцији.**

Хемијске зоне омогућују приказ молекула у облику 2-D структурних дијаграма. Chemistry Add-in такође укључује и редактор који омогућује измјену саме структуре молекула. Дијаграм је уметнут у документу као PNG-слика, тако да га и други корисници могу видјети, без обзира на то да ли имају Chemistry Add-in. Наравно, могуће је начинити и PDF-документ у чијој изради се користио Chemistry Add-in.

- **Радити са хемијским подацима различитих облика.**

Могуће је формирати „хемијску зону“ куцајући уобичајене називе као што је нпр. „water“¹, а затим, користећи Chemistry Add-in, преобразити је у жељени облик.

- **Убацити CML датотеке са веб-сервиса.**

Користећи **Load From** опцију на ленти, могу се потражити постојеће познате молекуларне структуре у базама података NCBI-овог PubChem-а (<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) или пак OPSIN-овог Unilever Centre-а (<http://opsin.ch.cam.ac.uk/>).

- **Руковати скоро свим приказима молекула.**

Са Chemistry Add-in-ом се може руковати са било којим молекулом (тј. његовом приказом), ако је постоје одговарајући CML-подаци. Сам Chemistry Add-in укључује CML-податке за неколико хиљада најпознатијих молекула. С

¹ Под тривијалним називима се сматрају тривијални називи на енглеском језику.

друге стране, за допуњавања Chemistry Add-in-а новим молекулима, просто треба написати или преузети одговарајућу CML-датотеку и убацити је у документ.

- **Похрањивати и излагати хемијске информације на семантички богат начин.**

Chemistry Add-in омогућује приказ и у одређеном дијелу истраживање података (енгл. data-mining scenarios) за ауторе, читаоце и издаваче хемоинформатичке заједнице.

У наставку овај документ описује како се може користити Chemistry Add-in да бисте убадили хемијске информације у Ворд-документ.

Почетак

Ово поглавље описује почетне кораке у раду са Chemistry Add-in-ом.

Предуслови

Потребно је имати основно знање о:

- Microsoft Word-у
- Номенклатури елемената и хемијским дијаграмима

Такође, пожељно је разумјевање CML-а, али није неопходно.

Системски захтјеви

Хардверски захтјеви

Било који рачунар који омогућује рад апликација Office 2007 или Office 2010.

Софтверски захтјеви

Ваш рачунар мора посједовати пратећи софтвер:

- Било која верзија Windows-а која може покренути Office 2007 или Office 2010, што укључује Windows XP SP3 и све касније верзије Windows-а.
- Word 2007 или Word 2010

У поглављу „Извори” при крају овог документа, налази се више информација о системским захтјевима које се тичу пакета MS Office.

Инсталација

Chemistry Add-in је спакован у датотеци названој ChemistryAddinforWordv1.zip који садржи пратеће документе:

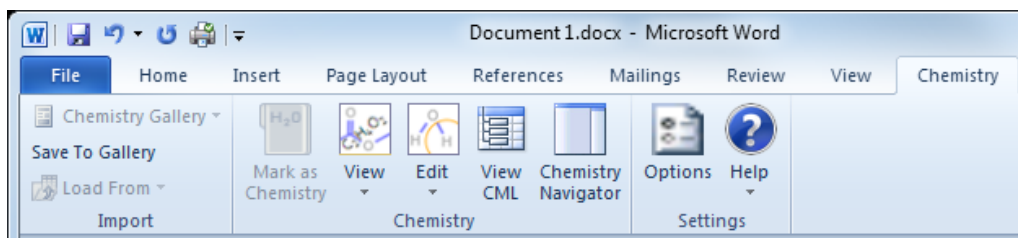
- Setup.exe
- Chem4Word.Setup.msi

Инсталација Chemistry Add-in-а

1. Затворите све Ворд-документе.

2. Пребаците Chemistry Add-in.zip на магнетни диск.
3. Распакујте садржај .zip-датотеке на неки директоријум.
4. Са тог директоријума покрените Setup.exe, који покреће стандардног чаробњака MSI инсталације.
5. Уз помоћу чаробњака, пратите упутства за инсталацију Chemistry Add-in-a.

За проверу успешности инсталације после покретања Ворда, лента би требала да садржи картицу Chemistry, као што је приказано на Слици 1.

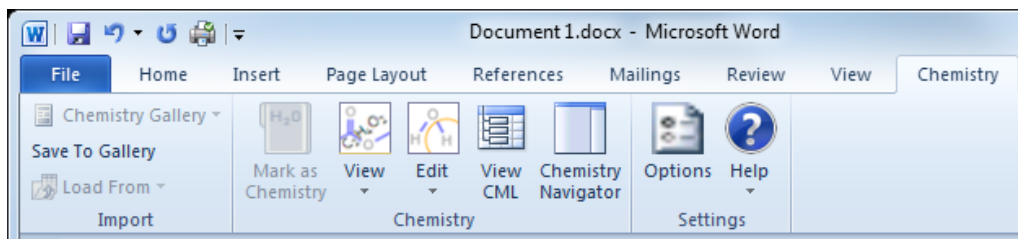


Слика 1. Лента у Ворду се картицом Chemistry

Савјет: Биће вам лакше да пратите упутства из документа, уколико прво поставите Chemistry Add-in.

Преглед корисничког прочеља

Картица Chemistry садржи примарно корисничко прочеље за Chemistry Add-in, као што је то приказано на Слици 2.



Слика 2. Картица Chemistry

Картица обухвата три групе наредби:

Import

За убацивање и снимање хемијских података:

- **Chemistry Gallery** приказује галерију хемијских зона које се могу уметнути у документ.
- **Save To Gallery** снима хемијску зону у Chemistry Gallery за лакшу каснију употребу у неким другим документима.
- **Load From** убацује датотеку са CML-подацима и додаје их документу.

Chemistry

За руковање хемијским зонама:

- **Mark as Chemistry** обиљежава одабрани текст као хемијску зону.

- **View** омогућује избор приказивања молекула.
- **Edit** приказује опције **Edit 2D** и **Edit Labels** које омогућују измјену 2-D структуре или текста који је придружен зони.
- **Chemistry Navigator** показује листу која садржи све постојеће хемијске зоне у том документу.

Settings

За руковање различитим хемијски-оријентисаним аспектима документа:

- **Options** омогућује подешавања Chemistry Add-in-a.
- **Help** приказује команде **Help-a** и **Check for updates-a**.

Формирање и руковање хемијским зонама

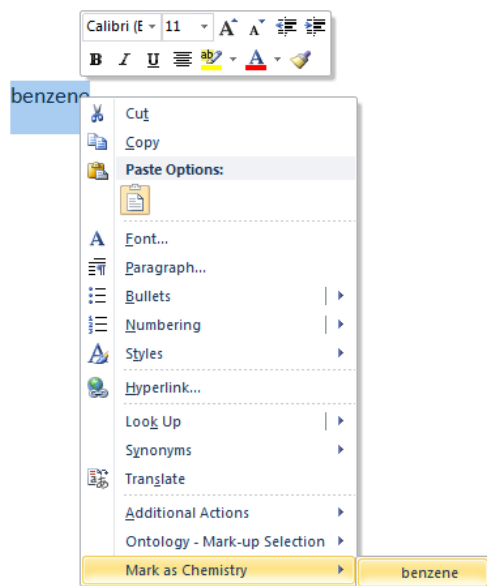
Хемијска зона приказује податке конкретног молекула, засноване на његовим CML-подацима. Постоје двије врсте хемијских зона: *текстовне* и *2D*. Текстовне хемијске зоне су засноване на зонама математичких једначина (Equations) и имају слично корисничко прочеље. С друге стране, 2D зоне користе и управљачки објекат за сликовни садржај.

У овом поглављу се говори о коришћењу команди из групе **Chemistry** да би се начиниле хемијске зоне и руковало са њима.

Грубо гледано, хемијска зона је прост управљачки објекат која садржи одабрани дио текста.

Формирање хемијске зоне на основу текста

1. Одаберите (осијенчите) ријеч или фразу коју желите укључити у зону и кликните на њу.
2. Кликните на **Mark as Chemistry**, а потом на одговарајући текст на изборнику да начините хемијску зону за осијенчени текст, као што је приказано на Слици 3.



Слика 3. Формирање хемијске зоне.

Ако прелазите преко хемијске зоне, Ворд је посвјетљује. Ако кликнете на посвјетљени дио текста, Ворд ће приказати корисничко прочеље зоне, са Chemistry-етикетом на основу које се и идентификује као хемијска зона. За разлику од зона за математичке једначине, графичко прочеље хемијске зоне не приказује падајући изборник, него само приказује тип зоне и њено подручје.

Свака хемијска зона је заснована на одређеном CML-у који је укључен у документ. Обиљежавање текста као хемијске зоне аутоматски сачињава CML-датотеку, која у том случају садржи само осигенчени текст као хемијски појам непознатог типа.

Одређивање изгледа хемијске зоне

Кликом на **Mark as Chemistry** додаје се одговарајући CML молекула документу, што укључује:

- Једну или више текстовних етикета (молекуларни CML-подаци најчешће укључују назив по IUPAC-у и један или више тривијалних назива).
- Молекуларну формулу (нпр. C_6H_6).
- 2-D структурне податке.

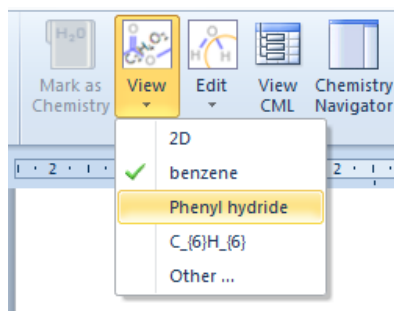
Бензенев CML садржи двије етикете – IUPAC назив (benzene) и тривијални назив (phenyl hydride) – молекуларну формулу и скуп одговарајућих 2-D података.

Сама унутрашња структура CML-а препознаје све називе бензена као и његову молекуларну формулу, па се било који од њих може искористити за унос

бензена у документ и стварање хемијске зоне. Након што се начини одговарајућа хемијска зона „benzene“, доста лако је мијењати изглед самог бензена, ако је то потребно.

Промјена изгледа хемијске зоне

1. Кликните на зону да бисте је одабрали.
2. У **Chemistry** групи кликните на **View**, након чега ће се отворити падајући изборник са листом могућности које су подржане на основу CML-података молекула. Слика 4 приказује изборник за бензен.
3. Одаберите жељени приказ са листе.



Слика 4. View и падајући изборник

„2D” опција приказује структурну формулу, као што је приказано на Слици 5.



Слика 5. Бензенова 2-D структурна формула.

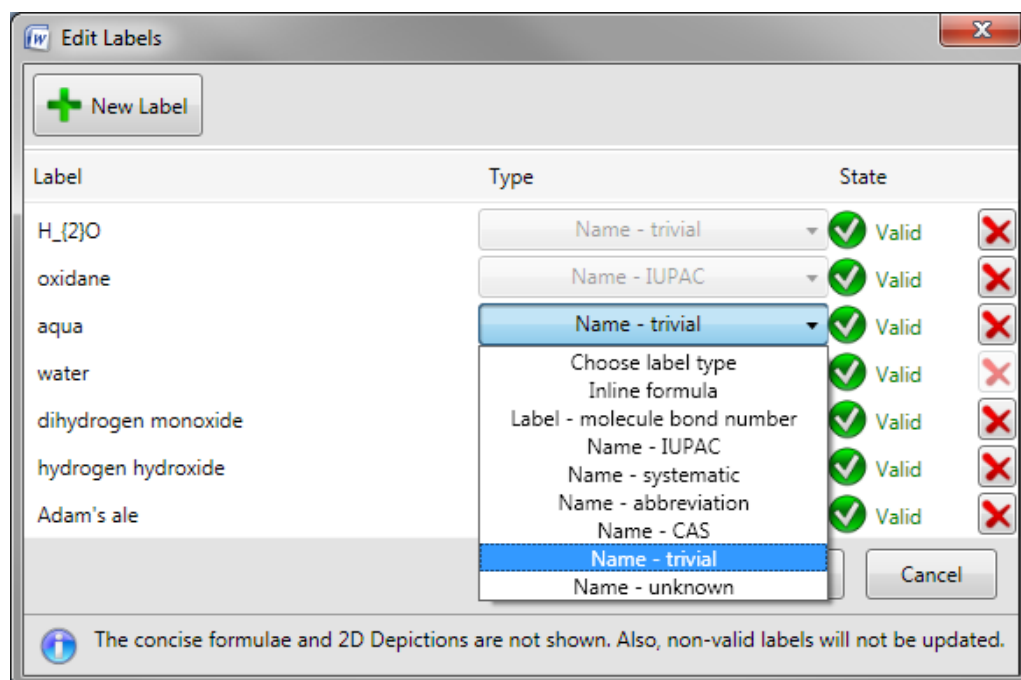
Промјена етикета зоне

CML-подаци молекула могу укључивати једну или више етикета. На примјер, CML -подаци за бензен садрже двије етикете, док за воду садрже седам етикета. Етикете је могуће мијењати опцијом **Edit Labels**.

Измјена етикета зоне

1. Одаберите зону.
2. Кликните на **Edit**, а затим на **Edit Labels**.

Слика 6. приказује **Edit Labels** дијалошко окно за воду.



Слика 6. Дијалошко окно Edit Labels за воду.

Chemistry Add-in омогућује додавање или уклањање етикета (уколико нису кориштене у документу), као и измјену њихових атрибута.

Додавање етикете

1. Кликните на **New Label**. Приказаће се празно поље за етикету, испод посљедње етикете на текућем радном листу.
2. Укуцајте име нове етикете у празно поље.
3. Одаберите тип етикете из **Choose label type** падајуће листе десно од назива. Етикета може бити једног од типова приказаних на Слици 6.
4. Кликните **OK** да додате нову етикету CML-у хемијске зоне.

Етикете се могу уклонити и измијенити.

- Да уклоните етикету, кликните на X у горњем десном дијелу етикете.
- Да измијените текст етикете, кликните на поље за текст и измијените га.
- Да измијените тип етикете, одаберите нови тип са падајуће листе.

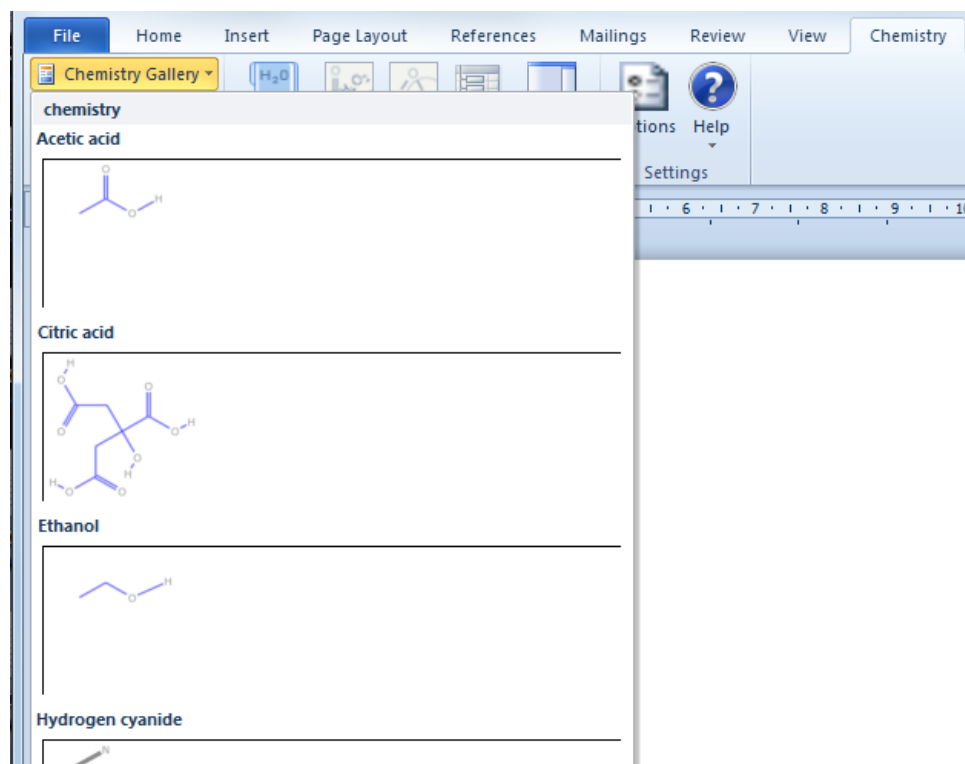
По завршетку, кликните на **OK** да бисте потврдили измјене.

Дате измјене се односе само на одабрани CML-податак зоне – онај који је похрањен у документу, као и на зависне хемијске зоне. Не односе се на CML-датотеку која се користила да се начини хемијска зона. Ако се користи претходни поступак да се начини нова хемијска зона за воду, она ће опет имати претходно подразумјевани скуп етикета. О зависним зонама биће ријечи касније.

Уметање зоне из Хемијске галерије

Алтернативни начин за убацивање хемијске зоне у документ јесте додавањем из **Chemistry Gallery-a** (Хемијске галерије) – садржи колекцију зона које можете уметнути непосредно у документ.

Слика 7 показује првих пет зона **Chemistry Gallery-a** које су укључене у Chemistry Add-in пакет.



Слика 7. Хемијска галерија

Уметање хемијске зоне у документ из Хемијске галерије

1. Помјерите курсор на одговарајуће мјесто у документу.
2. Кликните на **Chemistry Gallery** да би вам се приказала галерија.
3. Кликните одговарајући молекул да бисте уметнули одговарајућу хемијску зону у документ.
4. Према жељи промијените приказ зоне (молекула).

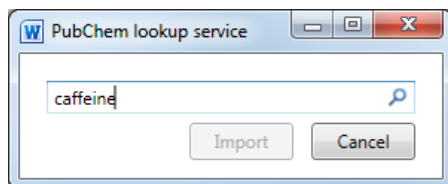
Уметање хемијске зону са веба


Иако се add-in испоручује са неколико хиљада CML-датотека, поред тога могуће је искористити сљедеће веб-засноване базе података и уметнути непосредно са веба потребне хемијске структуре:

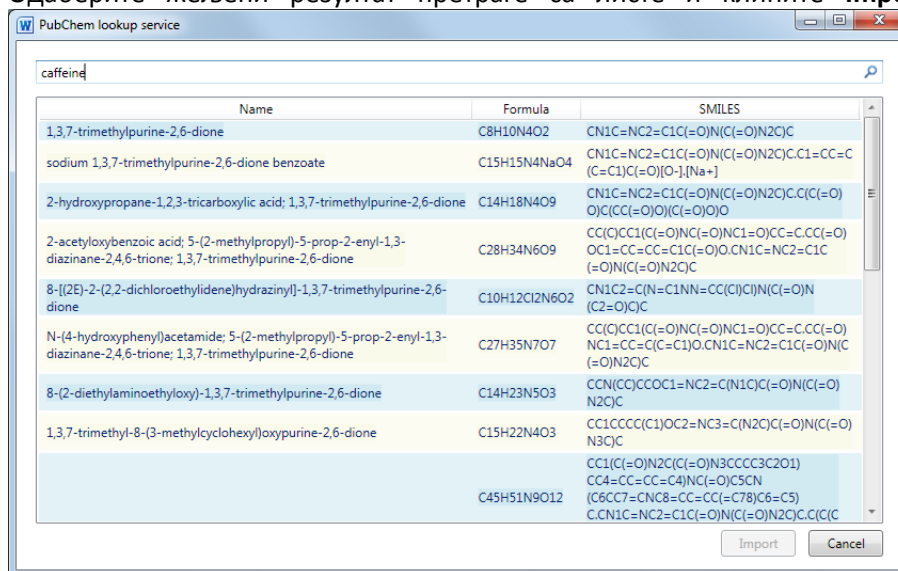
- PubChem
 - <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
 - PubChem је база података разних хемијских структура коју одржава National Center for Biotechnology Information (NCBI), као органак U.S. National Library of Medicine.
- OPSIN
 - <http://opsin.ch.cam.ac.uk/>
 - OPSIN је база података коју одржава Универзитет у Кембриџу и која претвара имена по IUPAC-у у семантичну хемијску информацију укључујући табелу веза.

Уметање хемијске зоне са Веба

1. Поставите курсор на одговарајуће мјесто у документу.
2. Кликните на **Load From** у одјељку Import.
3. Одаберите нпр. **PubChem**



4. Укуцајте ваш термин за претрагу, а затим кликните на лупу. 
5. Одаберите жељени резултат претраге са листе и клините **Import**.



Руковање зонама у Хемијској галерији

Chemistry Gallery је могуће прилагодити неком конкретном пројекту или групи корисника додавањем нових зона на један од два начина:

- уметањем зоне са свог рачунара.
- убацивањем CML-датотеке ради додавања зона које већ нису укључене у Chemistry Add-in.

Ове опције су објашњене у дијелу текста „Како уносити хемијске податаке“.

Додавање зоне Хемијској галерији

1. Означите прикладну 2D хемијску зону.
2. Кликните на **Save to Gallery**.
3. Наведите назив зоне и кликните на **OK** за додавање нове зоне галерији.

Галерији је могуће једино додати 2D зону.

Свака ставка у **Chemistry Gallery**-у представља одређену хемијску зону, при чему се то не мора односити само на један молекул. Нпр. ако промијените бензенову зону додавањем нове ознаке или промјеном 2-D приказа, могуће је ту зону додати галерији као посебну ставку.

Помијерање или брисање зоне

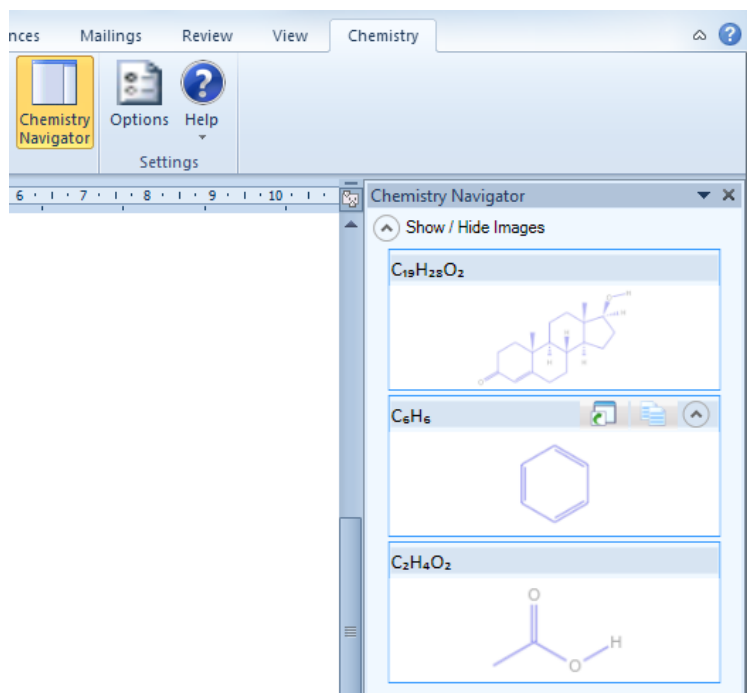
1. Отворите **Chemistry Gallery** и десним кликом одаберите зону да се прикаже контекстни изборник **Chemistry Gallery-a**.
2. Кликните на **Organize and Delete** да би се отворило дијалошко окно **Building Blocks Organizer**.
3. Користећи дијалошко окно измијените редослијед зона, или их пак обришите.

Chemistry Gallery зоне су у галерији **Custom 5**.

Руковање хемијским зонама помоћу Chemistry Navigator-a

Chemistry Navigator (Хемијски навигатор) помаже при руковању са хемијским зонама документа. Да бисте га покренули, кликните на дугме **Chemistry Navigator**, после чега ће се приказати панел **Chemistry Navigator-a** на десној страни документа.

Панел приказује сваку хемијску зону у документу према њиховом редослиједу у документу: са лијева на десно, одозго на доле, као што је приказано на Слици 8.



Слика 8. Chemistry Navigator панел

Ставке су представљене у панелу, свака на одабрани жељени начин, праћен 2-D приказом гдје је могуће.

Овдје се налазе два типа зона:

- **Неповезане зоне:** независни ентитети са сопственим CML-подацима.
Промјена приказа неповезане зоне, промијена њених етикета или 2-D структуре, нема утицаја на било које друге зоне, без озбира да ли оне представљају исти молекул.
- **Повезане зоне:** колекција зона заснованих на истим CML-подацима.
Промјена приказа одређене повезане зоне или промијена њене 2-D структуру јавља се у свим зонама из исте колекције.

Chemistry Navigator се може искористити за уметање повезаних или неповезаних зона користећи тастер са десне стране одговарајуће молекуларне формуле, као што је приказано у другој инстанци молекула C_6H_6 на Слици 8.

Уметање повезаних зона

1. Поставите курсор на одговарајуће мјесто у документу.
2. Кликните на иконицу са повезницом (лијево) ради уметања зоне.
3. Одаберите жељени изглед у документу са падајућег изборника.

Нова повезана зона се појављује у **Chemistry Navigator**-у на одговарајућем мјесту у документу.

Напомена: Морате формирати први примјерак повезане зоне користећи раније предочене технике. Тек након тога, можете користити Chemistry Navigator за убацивање осталих инстанци.

Уметање неповезаних зона

1. Поставите курсор на одговарајуће мјесто у документу.
2. Кликните на „неповезану” иконицу (десно) да уметнете зону.
3. Одаберите жељени изглед у документу са падајућег изборника.

Нова неповезана зона се појављује у **Chemistry Navigator**-у на одговарајућем мјесту у документу.

Измјена 2-D структура

CML-датотеке садрже структурне информације за *xu*-позицију атома. Када се одабере 2-D приказ који ће се користити у документу, Chemistry Add-in користи дате податке да начини и прикаже 2-D дијаграм. Такође, Chemistry Add-in омогућује измјену 2-D приказа зоне, обично из једног од сљедећих разлога:

- промјена позиције атома да би се дијаграм учинио лакшим за читање.
- измјена састава молекула замјеном једног или више атома или пак промјеном његовог костура.
- додавање етикета атомима.

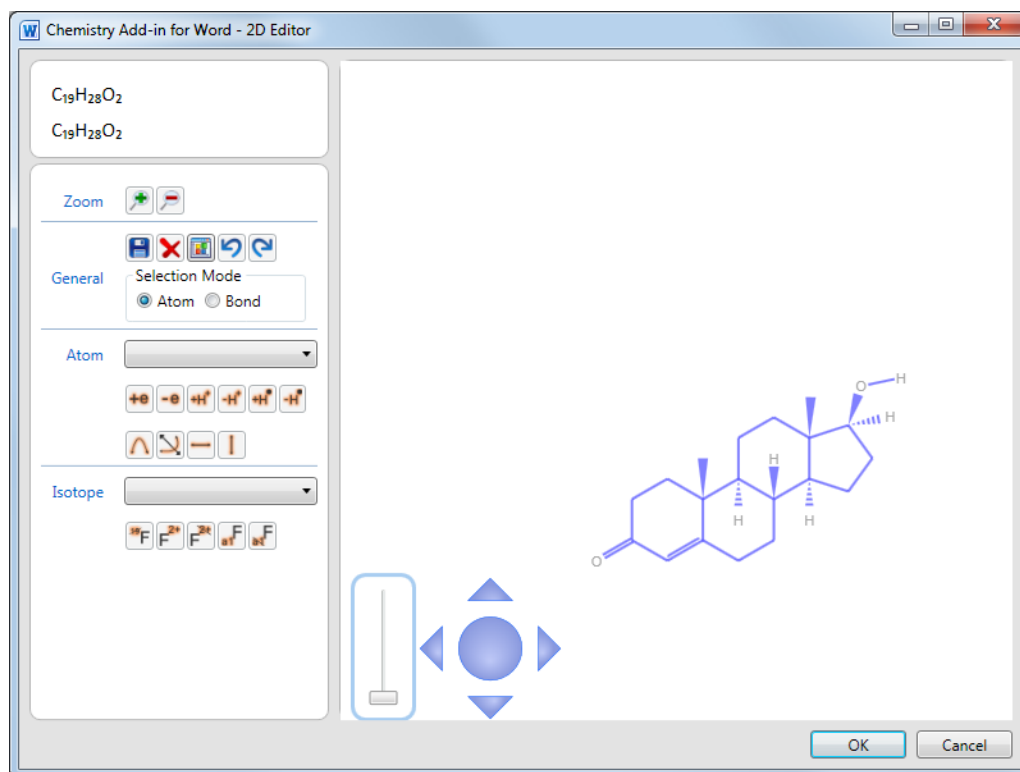
Напомена: Тренутни 2D редактор може измијенити геометрију или састав постојећих структура. Ипак, његове могућности да дограђује структуру су ограничене, а такође не можете ни од чега направити структуру.

Уређивање 2-D структуре

1. Одаберите хемијску зону.
2. Кликните на **Edit 2D** (доступан на доњем дијелу команде **Edit** на ленти), што отвара 2-D редактор у одвојеном прозору. 2-D редактор је доступан само као опција када зона представљена у документу има на избору и 2D структуру.

Слика 9 приказује молекул тестостерона у 2-D редактору. Прозор је модални, тако да се мора затворити прије него што се крене радити било шта друго са документом.

3. Уредите дијаграм, као што је описано у наредним пасусима.



Слика 9. 2-D редактор

Кликом на **ОК** да се затвори редактор, CML-подаци зоне се ажурирају и нови дијаграм бива приказан (наравно и у свим повезаним зонама).

Важно: Када мијењате молекул од вас ће се тражити да обришете или промијените етикете. Наравно, можете користити **Edit Labels** да придружите нове етикете измијењеном молекулу.

Дијаграм приказан у документу је PNG-слика, која је произведена на основу CML-података и уметнута у документ. Стога, други корисници могу читати документ у коме је аутор користио *Chemistry Add-in*, чак и са ранијим верзијама Ворда као што је Word 2003. Уколико гледате хемијски документ са верзијом Ворда која не посједује додаток *Chemistry Add-in*, Ворд ће приказати слику, а игнорисаће уграђене CML-податке.

Управљачки објекти 2-D Редактора

2-D редактор укључује два управљачка објекта за мијењање дијаграма: *zoom клизач* и *оквир*.

- **Zoom клизач:** кликните и вуците клизач да повећате или умањите дијаграм.

- **Оквир:** кликните на једну од четири црте оквира да бисте развукли дијаграм у жељеном правцу. Кликните и превуците центар оквира (дијаграма) да бисте помакнули дијаграм на жељено мјесто.

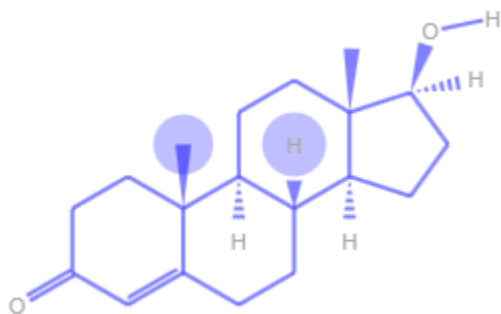
Означавање атома ради измјене

Прије него што се крене са измјенама, мора се означити атом или група атома са којима се намјерава радити.

Појединачно бирање атома

1. Поставите курсор на одговарајући атом.
Програм приказује наранџасту кружну линију када је курсор добро позициониран.
2. Кликните на наранџасту кружну линију да се одабере атом.
Наранџаста кружна линија промијениће се у наранџасти круг, а затим у плави круг по склањању курсора.
3. За одабир више атома, притиснути тастер CTRL и поновити кораке 1 и 2.
Ако тастер CTRL није притиснут, понављањем корака један и два бира се један по један атом. CTRL + клик на већ одабрани атом ће поништити његов претходни избор.

Слика 10 приказује тестостерон са два означена атома.



Слика 10. Означавање појединачних атома

Редактор подржава два приступа за одабир групе атома у једној операцији – *одабир оквиром (marquee-select)* и *гестурно*.

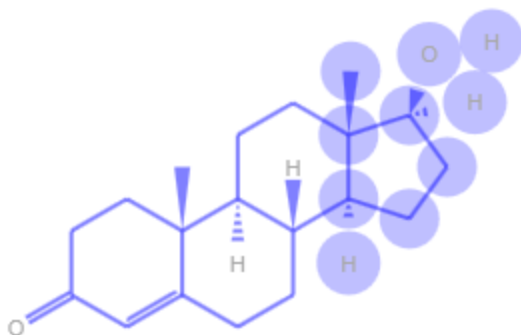
Одабир оквиром (marquee-select)

1. Поставити курсор на „угао“ групе атома које желите означити.
Овим приступом се означавају сви атоми унутар правугаоника (оквира). Даље, овај корак дефинише један угао правоугаоника.
2. Кликнути и држати притиснутим лијеви тастер, па повући курсор тако да правугаоник садржи атоме жељене групе.

Одабир оквиром се заснива на позицијама самих атома, а не на њиховим етикетама.

3. Отпустите тастер миша.

Атоми у групи су наглашени плавим круговима, као што је означено на Слици 11.



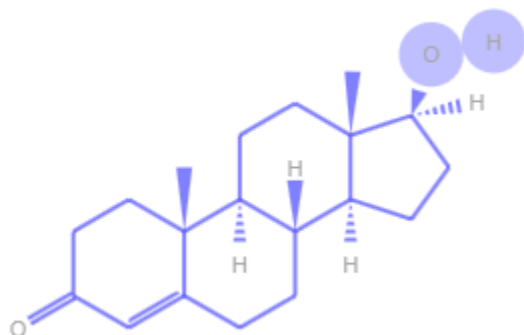
Слика 11. Одабир оквиром (marquee-select)

Гестурно бирање

1. Поставити курсор на структурну грану молекула.
2. Кликнути и држати притиснутим лијеви тастер миша.
3. Помицати курсор у смјеру одабира.
4. Отпустити тастер миша да би се одабрали сви атоми који су „низводно”.

Савјет: Зелена стрелица се појављује да покаже смијер бирања. Враћањем назад ка центру ивице стрелица ће нестати и у суштини ништа неће бити одабрано по отпуштању тастера миша.

Хидроксилна група на Слици 12 је означена гестурним бирањем дуж структурне гране молекула угљеник-диоксида.



Слика 12. Гестурно бирање

Савјет: Понекад је zgodно да премјестити молекул на другу локацију у редактору. Да би се то урадило, молекул се одабере у цјелини и превуче на нову локацију.

Уређење појединачних атома

Преласком показивача миша преко одабраног атома, редактор приказује модални прозор као што је приказано на Слици 13, што омогућује мијењање атома на више различитих начина. За приказ наредби потребно је само задржати показивач изнад иконице.

Наредбе **Rotate** и **Flip** се не могу користити, јер се односе само на групе атома.

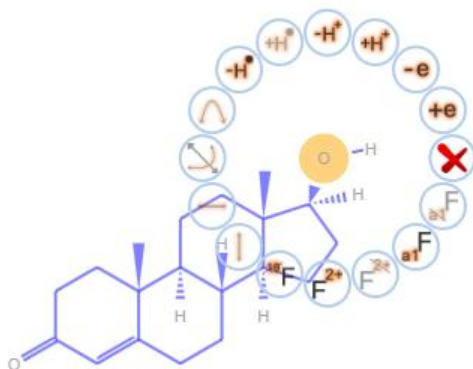


Figure 13. Уређивачки модлани прозор

Кликом на одговарајућу опцију/наредбу мијења се карактеристика одабраног атома. Дата радња обично избацује модални прозор у коме су дате алтернативе за конкретну наредбу. Остатак овог дијела објашњава како се користе различите наредбе за манипулацију својствима атома.

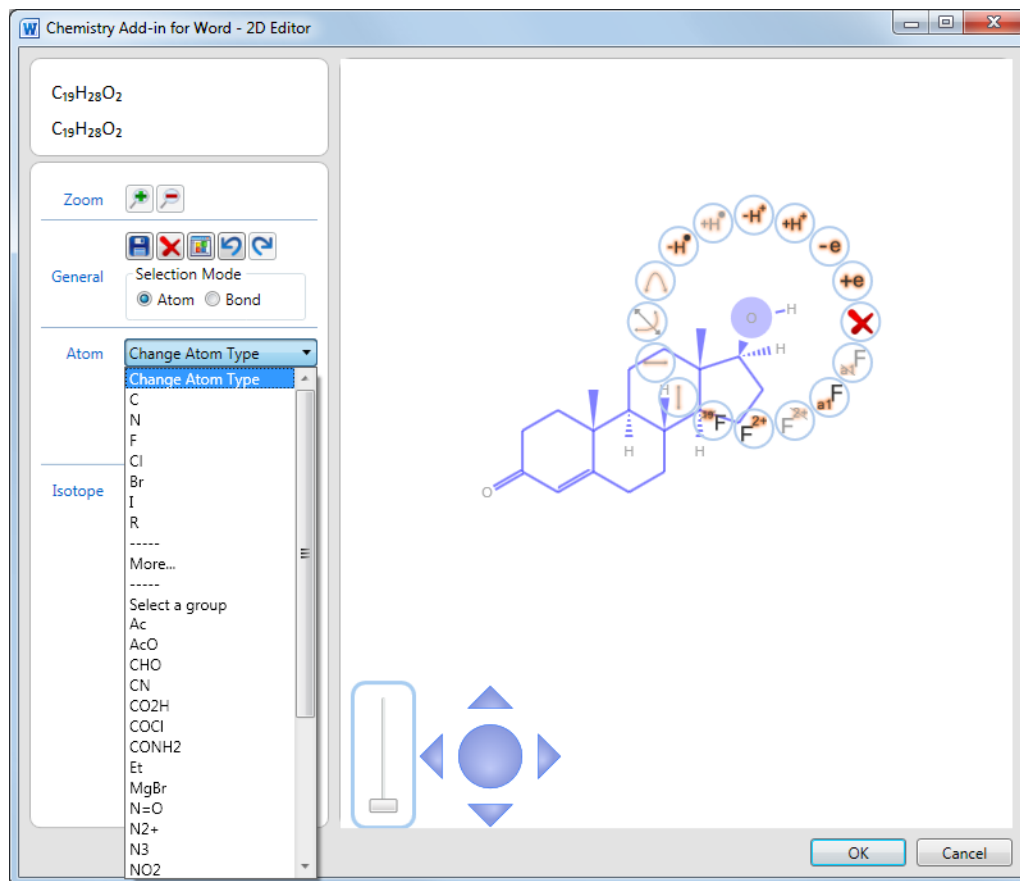
Важно: 2-D редактор настоји да пружи смијернице доступним хемијски ваљаним алтернативама, али вас не принуђује на њихово спровођење. На примјер, **Set Isotope** модални прозор наводи највјероватније бројеве изотопа за кисеоник, али је и даље могуће подесити број самог изотопа на 42.

Delete Selection

Delete Selection уклања атом из дијаграма, а такође настоји да уклони и зависне атоме. На примјер, уклањањем одабраног атома кисеоника, као на Слици 13, редактор ће такође уклонити и придружене атоме водоника. Уклањањем неког атома се кидају и све везе са њим. Резултујуће непопуњене валенце биће попуњене исправним додавањем броја водоникових атома, осим у случају молекула H_2 .

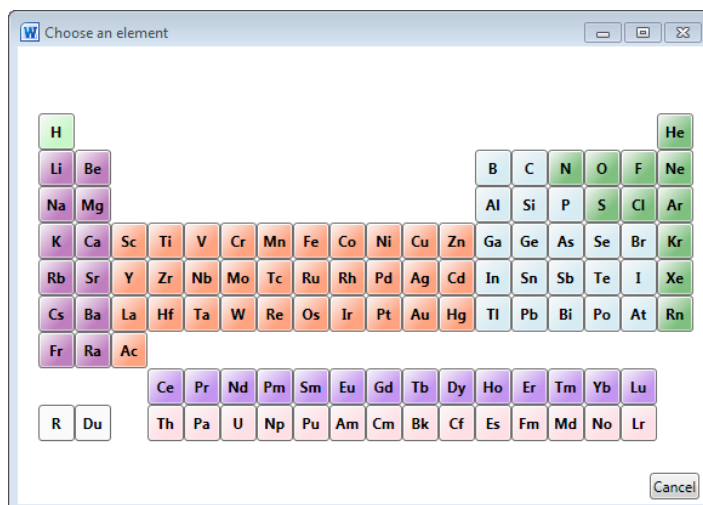
Change Atom Type

Ова наредба мијења атом који је придружен одабраном мјесту у дијаграму. Када кликнете на **Change Atom Type**, редактор ће приказати падајући изборник који омогућује избор алтернативног атома или пак групе атома.



Слика 14. Change Atom Type падајући изборник

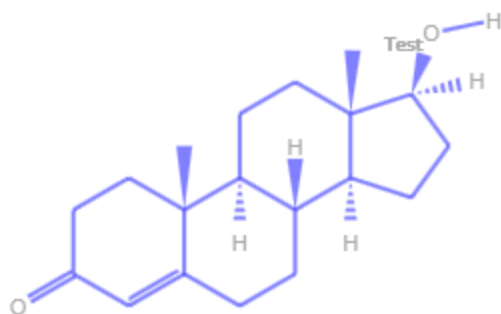
Први дио листе показује замјене појединачног атом, а други дио одабрани скуп атомских група које могу погодно замијенити кисеоник у тренутном хемијском окружењу. Редактор додаје или уклања прикачене водоникове атоме који су неопходни. Ипак, могуће је уметнути било који атом кликом на **More**. Ова ставка приказује периодни систем елемената (слика 15) из кога можете одабрати било који атом (елемент) простим кликом на њега.



Слика 15. Периодни систем елемената

Set Label/Remove Label

Ове наредбе омогућују да мијењате етикету атома придруживањем произвољне ниске, која је приказана с доње лијеве стране етикете. Слика 16 приказује атом кисеоника из претходних примјера, са додатом етикетом „Тест“.



Слика 16. Додавање етикете атому.

+e/-e

Ове двије наредбе додавају или уклањају електроне атома, при чему приказују ново стање с горње десне стране етикете атома.

Undo/Redo

Ове наредбе поништавају или обнављају учињене промјене, почињући са посљедњом.

+H⁺/-H⁺

Ове наредбе додавају или уклањају протон из означеног атома.

+H[•]/-H[•]

Ове наредбе додавају или уклањају атом водоника из означеног молекула.

Set Isotope/Remove Isotope

Падајући изборник **Set Isotope** се користи да се одабере број изотопа. Приказан је на горњој лијевој страни етикете атома.

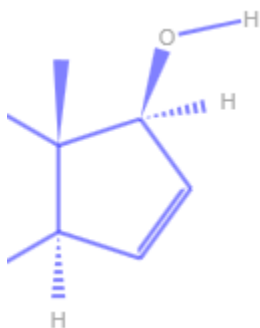
Мијењање међуатомских веза

Могуће је додати једну или више веза на већ постојећу, или пак промијенити групу везе.

Измјена везе

1. Десни клик било гдје на дијаграму и одабрати **Bond Mode**.
2. Одаберите везу у дијаграму. Приказује се модални прозор везе.
3. Искористите падајући изборник **Select bond order** да додате једну или више веза на већ означену везу.
4. Искористите падајући изборник **Select bond group** да додате групу веза већ одабраној вези.
5. Искористите падајући изборник **Select bond stereo** да задате стерео-хемију атома.

Слика 17 показује горњи десни дио молекула тестостерона након што је додата двострука веза на крајње десни прстен. Примијетићете да је редактор уклонио два атома водоника, као компензацију.



Слика 17. Додавање веза

Мијењање структуре дијаграма

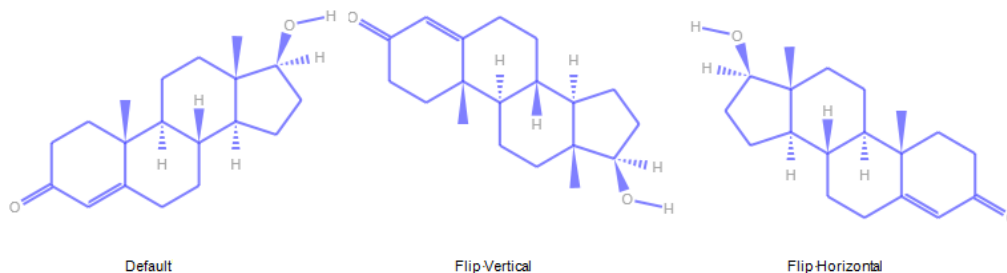
Постоји неколико начина којима се дијаграм може преобликовати и тиме га, по потреби, учинити читљивијим.

Обртање дијаграма

Дијаграм се обрће помоћу наредбе Flip:

- **Flip Vertical:** обрће дијаграм око усправне осе.
- **Flip Horizontal:** обрће дијаграм око водоравне осе.
- **Flip About Bond:** обрће одабране атоме око правца изабране спољне везе.

За обртање дијаграма потребно је одабрати неки атом и кликнути на одговарајуће дугме (наредбу). Слика 18 приказује стандардни дијаграм тестостерона, затим како се мјења помоћу **Flip Vertical** и **Flip Horizontal** наредби.

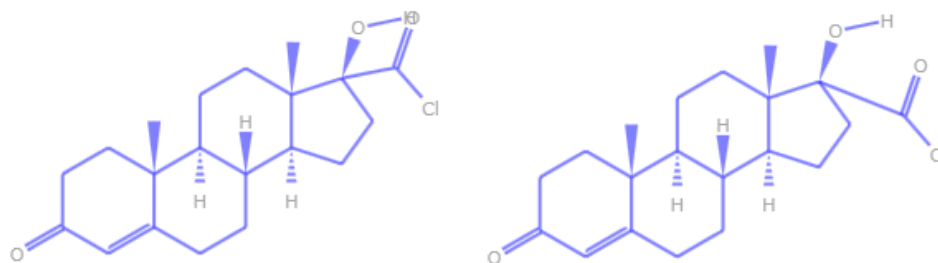


Слика 18. Обртање дијаграма.

Премјештање атома или група

Изглед стандардног дијаграма је довољан за већину потреба, али понекад је корисно промијенити изглед – углавном ради читљивости – тако што ћете промијенити мјесто атома или пак читаве групе атома. На примјер, када замијените атом са групом атома, можете добити згуснут дијаграм са преклапањима.

Да бисте промијенили структуру, одаберите атом или групу атома коју желите премјестити и превуците их на ново мјесто. Редактор ће прилагодити одговарајуће везе. Лијева страна слике 19 показује дијаграм након додавања SOCl групе.



Слика 19. Премјештање атома или групе атома

Када направите ову измјену, атом кисеоника завршиће директно на врху атома водоника. Један начин да направите дијаграм читљивијим је да помјерите COCl групу. Ситуација на неки начин постала компликована преклапањем атома кисеоника и водоника, што отежава означавање COCl групе. Наредна процедура показује један начин за рјешавање овог проблема и приказује дијаграм који се налази на десној страни слике 19.

Премјештање Cl и O

1. Означите гестурно COCl групу уз саму везу, прикључујући групу прстену.
Гестурно бирање омогућује означавање COCl групе без укључивања атома водоника.
2. Превуците COCl групу на боље мјесто.

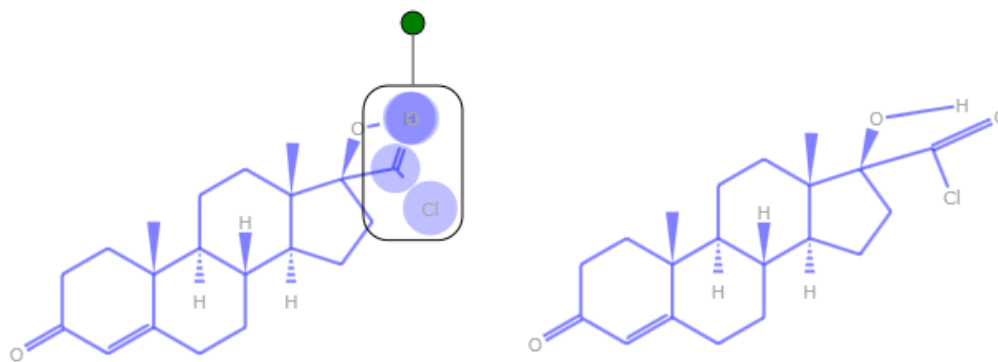
Ротирање атома или група

Премјештање атома или група, као што је приказано у претходном дијелу просто транслира атоме. То понекад може направити поприлично необичан дијаграм. Другачији начин за побољшање читљивости је да ротирате групу у комбинацији са транслацијом.

Ротирање групе

1. Означите групу.
2. Кликните на **Rotate** на модалном прозору.
3. Превуците зелено дугме да ротирате групу како вам одговара.

Десна страна слике 20 показује исти дијаграм слике 19, након означавања COCl групе и клика на **Rotate**. Десна страна приказује дијаграм након што је COCl група ротирана у смјеру супротном од кретања казаљки на часовнику.



Слика 20. Ротирање група

Брисање атома или група

Као додаток наредби **Delete** на модалном прозору, редактор такође укључује и **Delete** дугме, на лијевој страни прозора. Ово дугме се може користити за непосредно уклањање атома или група атома.

Извори

Овај дио садржи хипервезе на странице са додатним информацијама о Chemistry Add-in-y.

2007 Microsoft Office system requirements

<http://office.microsoft.com/en-us/products/HA101668651033.aspx>

2010 Microsoft Office system requirements

[http://technet.microsoft.com/en-us/library/ee624351\(office.14\).aspx](http://technet.microsoft.com/en-us/library/ee624351(office.14).aspx)

cml.sourceforge.net - OpenSource Site for CML

<http://cml.sourceforge.net/>

Ecma Office Open XML File Formats overview

<http://office.microsoft.com/en-us/products/HA102058151033.aspx>

ISO Standard

http://www.iso.org/iso/iso_catalogue.htm

Open XML Formats

<http://www.openxmldeveloper.org>

JUMBO FAQ

<http://www.ch.ic.ac.uk/omf/cml/doc/jumbo/faq.html>

Office Development with Visual Studio Developer Center

<http://msdn.microsoft.com/en-us/vsto/default.aspx>

PubChem

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

Додатак 1: Основе CML-а

CML је XML-заснован формат за представљање хемијских података широког спектра. Chemistry Add-in користи подскуп CML-а, конвенције која укључује подршку за:

- IUPAC и друге називе
- хемијску структуру
- формуле.

Наредни податак показује CML-податке за воду.

```
<?xml version="1.0" ?>
<cm1 convention="conventions:molecular"
  xmlns="http://www.xml-cml.org/schema"
  xmlns:conventions="http://www.xml-cml.org/convention/"
  xmlns:nameDict="http://www.xml-cml.org/dictionary/cml/name/">
<molecule id="m1">
  <name dictRef="nameDict:trivial">H2O</name>
  <name dictRef="nameDict:iupac">oxidane</name>
  <name dictRef="nameDict:trivial">aqua</name>
  <name dictRef="nameDict:trivial">water</name>
  <name dictRef="nameDict:systematic">dihydrogen monoxide</name>
  <name dictRef="nameDict:systematic">hydrogen hydroxide</name>
  <name dictRef="nameDict:trivial">Adam's ale</name>
  <formula concise="H 2 O 1" />
  <atomArray>
    <atom id="a1" elementType="O"
      x2="-1.5950000286102295" y2="1.1549999713897705" />
    <atom id="a2" elementType="H"
      x2="-0.05500002861022946" y2="1.1549999713897705" />
    <atom id="a3" elementType="H"
      x2="-2.3650000286102295" y2="2.4886790932178062" />
  </atomArray>
  <bondArray>
    <bond id="b1" atomRefs2="a1 a2" order="1" />
    <bond id="b2" atomRefs2="a1 a3" order="1" />
  </bondArray>
</molecule>
</cm1>
```

Податак је типичан за Chemistry Add-in молекуле и укључује:

- IUPAC назив
- неколико тривијалних и системских назива
- податке о 2-D структури, укључујући и позиције атома и детаље о међуатомским везама.

За садржај често употребљаваних CML-елемената у молекуларној конвенцији, погледати <http://www.xml-cml.org/convention/>. За детаље о CML-у, укључујући тренутну схему, као и одговарајућа оруђа погледати <http://www.xml-cml.org/> и „cml.sourceforge.net – OpenSource Site for CML.”

Похрањивање CML-података

Chemistry Add-in похрањује CML-податке на следеће начине:

- Chemistry Add-in Smart Tag директоријум садржи CML-податке за неколико стотина најпознатијих молекула.

Ради поједностављења стварања хемијске зоне, многи молекули су представљени помоћу „паметних индикатора” (енгл. smart tags), као што је објашњено у наредном одјељку. Одговарајући податак за сваки молекул је у .cml-датотеци у директоријуму add-in-овом директоријуму Smart Tag, што је углавном на сљедећој путањи C:\Program Files\Chem4Word\Smart Tag.

- Хемијска галерија је Ворд-галерија која садржи колекцију хемијских зона.

Галерија обично омогућује корисницима да брзо пронађу и убаце зону у сам документ. Најчешће садржи малу колекцију молекула који се највише користе, али корисници могу подесити колекцију према својим хтијењима. Хемијска Галерија има властиту резервну копију података; скуп .cml-датотека и add-in-ов директоријум C:\Program Files\Chem4Word\data.

- Када корисник убаци хемијску зону у документ, одговарајући CML-податак је сачуван у документу.

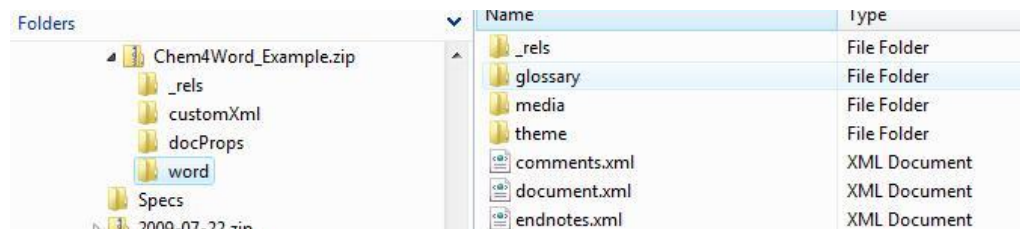
Неке наредбе мијењају уграђене CML-податке на различите начине, као што је додавање тривијалних имена или измјене 2-D структуре. Ипак, ове наредбе утичу само на податке који су сачувани у документу.

Додатак 2: Како су CML-подаци похрањени у документу

Ворд-документ је у основи структурирана колекција датотека, похрањена у ZIP-компатибилном формату Open Package Convention (OPC). Иако документ има .docx екстензију, Windows Explorer се може користити за прегледање садржаја документа тако што ће му се промијенити екстензија у .zip.

Савјет: Иако можете да видите садржај .zip-документа у Windows Explorer-у, са садржајем ћете лакше радити ако га прво пребаците на неки директоријум.

Слика 21 показује садржај документа који се зове Chem4Word_Example, који је снимљен након формирања хемијске зоне „benzene”.



Слика 21. Структура Ворд-документа

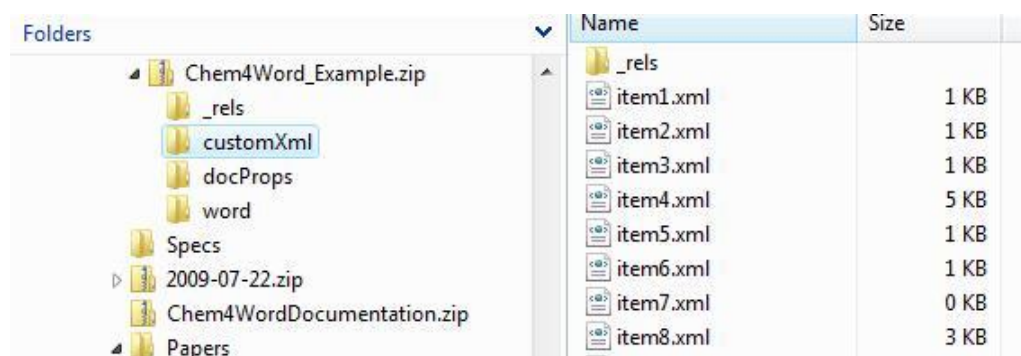
Документ је као прво колекција XML-датотека. слика 21 приказује директоријум word који садржи примарне датотеке документа. Конкретно, document.xml садржи главни дио документа у Office OpenXML (OOXML) формату. За више

информација о формату OOXML погледати „Ecm Office Open XML File Formats overview.”

Хемијске зоне су представљене у document.xml-у помоћу (<w:sdt>). Chemistry Add-in идентификује XML-блок као хемијску зону подешавајући **alias** елементовог **val** атрибута на „chemistry”. Сљедећи примјер приказује XML хемијске зоне за бензен:

```
<w:sdt>
<w:sdtPr>
<w:alias w:val="chemistry"/>
<w:id w:val="23589811"/>
<w:placeholder>
<w:docPart w:val="DefaultPlaceholder_22675703"/>
</w:placeholder>
</w:sdtPr>
<w:sdtContent>
<m:oMath>
<m:r>
<m:rPr>
<m:sty m:val="p"/>
</m:rPr>
<w:rPr>
<w:rFonts w:ascii="MS ChemSans" w:hAnsi="MS ChemSans"/>
</w:rPr>
<m:t>benzene</m:t>
</m:r>
</m:oMath>
</w:sdtContent>
</w:sdt>
```

Зонски CML-подаци су похрањени одвојено, у документу customXmlfolder. Зонски **id** елемент повезује зону са одговарајућом CML-датотеком. Слика 22 приказује дио Chem4Word_Example-овог customXml директоријума. Датотека itemN.xml садржи различите типове XML-података, укључујући и CML-податке. Нумерацијска шема се не односи на садржај датотеке. На примјер, бензенови CML-подаци су у item8.xml.



Слика 22. Директоријум customXml

Бензенова хемијска зона је направљена са smart tag-ом тако да item8.xml садржи CML-форматиране податке из бензенове CML-датотеке у Smart Tag директоријуму, 241.cml.

```
<cml xmlns="http://www.xml-cml.org/schema"
xmlns:nameDict="http://www.xml-cml.org/dictionary/cml/name/"
xmlns:cmlDict="http://www.xml-cml.org/dictionary/cml/"
xmlns:conventions="http://www.xml-cml.org/convention/"
convention="conventions:molecular">
<molecule id="m1" formalCharge="0" spinMultiplicity="1">
<name dictRef="nameDict:iupac">benzene</name>
<name dictRef="nameDict:trivial">Phenyl hydride</name>
<formula concise="C 6 H 6"/>
<atomArray>
<atom id="a1" elementType="C" x2="-1.924" y2="-5.774"/>
<atom id="a2" elementType="C" x2="-3.258" y2="-6.544"/>
<atom id="a3" elementType="C" x2="-3.258" y2="-8.085"/>
<atom id="a4" elementType="C" x2="-1.924" y2="-8.855"/>
<atom id="a5" elementType="C" x2="-0.591" y2="-8.085"/>
<atom id="a6" elementType="C" x2="-0.591" y2="-6.544"/>
<atom id="a7" elementType="H" x2="-1.924" y2="-4.234"/>
<atom id="a8" elementType="H" x2="-4.592" y2="-5.774"/>
<atom id="a9" elementType="H" x2="-4.592" y2="-8.855"/>
<atom id="a10" elementType="H" x2="-1.924" y2="-10.395"/>
<atom id="a11" elementType="H" x2="0.742" y2="-8.855"/>
<atom id="a12" elementType="H" x2="0.742" y2="-5.774"/>
</atomArray>
<bondArray>
<bond id="b1" atomRefs2="a1 a2" order="S" />
<bond id="b2" atomRefs2="a2 a3" order="D" />
<bond id="b3" atomRefs2="a3 a4" order="S" />
<bond id="b4" atomRefs2="a4 a5" order="D" />
<bond id="b5" atomRefs2="a5 a6" order="S" />
<bond id="b6" atomRefs2="a1 a6" order="D" />
<bond id="b7" atomRefs2="a1 a7" order="S" />
<bond id="b8" atomRefs2="a2 a8" order="S" />
<bond id="b9" atomRefs2="a3 a9" order="S" />
<bond id="b10" atomRefs2="a4 a10" order="S"/>
<bond id="b11" atomRefs2="a5 a11" order="S"/>
<bond id="b12" atomRefs2="a6 a12" order="S"/>
</bondArray>
</molecule>
</cml>
```

Овај скуп података садржи информације о бензену:

- IUPAC назив (benzene).
- Тривијални назив (phenyl hydride).
- Емпиријску (молекуларну) формулу (C₆H₆).
- Подаци помоћу којих се може начинити 2-D структурни дијаграм.

.NET Bio Extension for Excel

Сажетак

Описана је употреба додатка .NET Bio Extension for Excel за Microsoft® Office Excel 2007 и Excel 2010 који омогућује једноставан и елегантан рад са геномским секвенцама, метаподацима и интервалним подацима у Excel-документу.

Неке од могућности .NET Bio Extension-а су засноване на радном оквиру .NET Bio Framework, као нпр.: скуп парсера за уобичајене формате геномских датотека, скуп секвенционих алгоритама за формирање секвенце усаглашености ДНК, скуп (софтверских) прикључака на неколико Basic Local Alignment Search Tool (BLAST) веб-сервиса за геномску идентификацију, као и интервалне геномске функције које омогућују коришћење BED датотека у Excel-у. Сам додатак .NET Bio Extension може се и програмски проширити ради искориштавања неких додатних опција NET Bio Framework-а.

Веб-адреса за преузимање .NET Bio Extension-а је <http://bio.codeplex.com/>.

Увод

.NET Bio Extension for Excel је намијењен биолозима који су заинтересовани или већ користе Microsoft Office Excel у својим истраживањима. Флексибилност Excel-а допушта формирање и уграђивање модула посебне намјене, као и формирање одговарајућег прочеља самог модула – картице на ленти – у овом случају картице „.NET Bio”. Додатак, сам по себи, не утиче на остале могућности Excel-а, тј. све уобичајене функције Excel-а остају на располагању, при чему је сад, конкретно, биолозима обезбијеђено још мало радног оруђа, изричито усмјереног на биоинформатику.

Програмерски је могуће додатно прошиrivати .NET Bio Extension користећи, као што је већ споменуто, .NET Bio Framework, а и неки други одговарајући биоинформатички радни оквир. Могуће је, на примјер, програмски развити специфичне биоинформатичке апликације користећи библиотеке .NET Bio Framework-а и додати одговарајуће графичке елементе везане за апликације корисничком прочељу Biology Extension-а.

Генерално, Biology Extension омогућује:

- **Коришћење датотека које садрже податке о геномским секвенцама.**

Подржани формати датотека су:

BED GenBank
FASTA GFF
FASTQ

- **Поравнавање читавих или пак дјелимичних геномских секвенци.**

Подржани алгоритми су:

MUMmer 3.0 Pairwise-Overlap (Reference Implementation)
Needleman-Wunsch Smith-Waterman
NUCmer 3.0

- **Формирање приказа секвенце усаглашености на основу вишеструког поравнавања геномских секвенци.**

- **Слање приказа секвенце усаглашености биолошким веб-сервисима на идентификацију.**

Подржани сервиси су:

NCBI QBLAST
EBI WU-BLAST

- **Измјену и упис геномских секвенци у датотеке.** Подржани формати датотека за упис су:

FASTA
FASTQ
GenBank

- **Руковање и приказ података о геномским секвенцама:**

- Руковање интервалним геномским подацима у формату UCSB BED.
- Извршавање операција као што су Merge (унија), Intersect (пресјек) и Subtract (разлика) на интервалним геномским подацима.

- Формирање графикана са подацима о геномским секвенцама.
- Приказ Венових дијаграма интервалних геномских података користећи NodeXL за Excel.

За више информација, консултовати следећу документацију радног оквира .NET Bio Framework:

Bio\Doc: An Overview [.NET Bio Overview.docx]
Programming Guide [.NET Bio Programming_Guide.docx]

Такође, погледати и Прилог А – „Подржане секвенце и формати датотека”

Инсталација .NET Bio Extension-a

На почетку су описани предуслови, системски захтјеви и кораци за поставку (инсталацију) .NET Bio Extension-a.

Предуслови

Потребна су елементарна знања о:

- избору опсега ћелија у Excel-у.
- методама и номенклатури у геномици и биоинформатици.

Системски захтјеви

.NET Bio Extension се може поставити на сваки рачунар који може покренути Microsoft Office 2007, што је сажето у чланку на адреси

<http://office.microsoft.com/en-us/products/HA101668651033.aspx>

На самом рачунару се мора налазити следећи софтвер:

- било која верзија оперативног система Windows® који може покренути Office 2007, укључујући Windows XP Service Pack (SP) 3 и све новије верзије Windows-a
- Microsoft Office Excel 2007 или Excel 2010
- NodeXL шаблон за Excel, доступан на <http://www.codeplex.com/NodeXL>
- Microsoft .NET Framework Version 4.0, доступан на <http://www.microsoft.com/downloads/details.aspx?FamilyID=9cfb2d51-5ff4-4491-b0e5-b386f32c0992>

Инсталација

Програм за поставку .NET Bio Extension-a је доступан на веб-адреси <http://bio.codeplex.com/>.

Након успјешне поставке .NET Bio Extension се појављује у **Add and Remove Programs** као „.NET Bio Extension for Excel.”

За инсталацију .NET Bio Extension for Excel

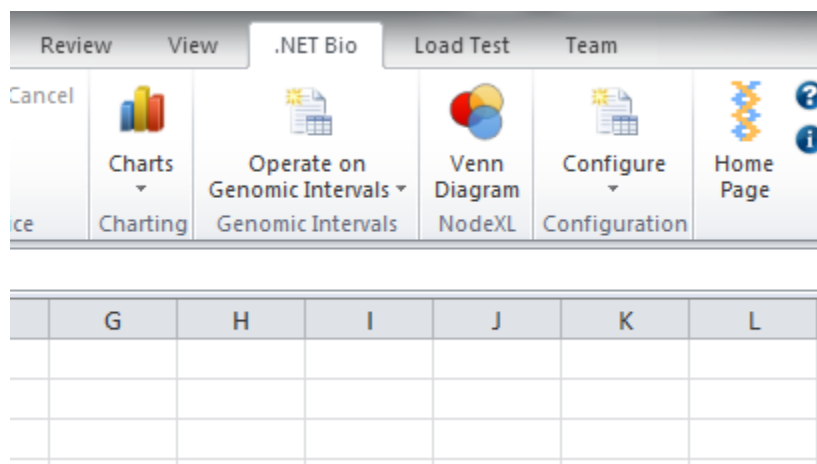
1. Затворите све Excel-документе.
2. Умножите .NET Bio Extension for Excel програм за поставку на неком од директоријума (магнетног диска).
3. Отворите директоријум, а затим двапут кликните на **BioExcel.msi**, што ће покренути тзв. чаробњака (који ће вас водити кроз остатак поставке).

4. Пратите упутства чаробњака да завршите поставку Biology Extension-a.

Потврда успјешности инсталације

- Покрените Excel 2007 или Excel 2010.

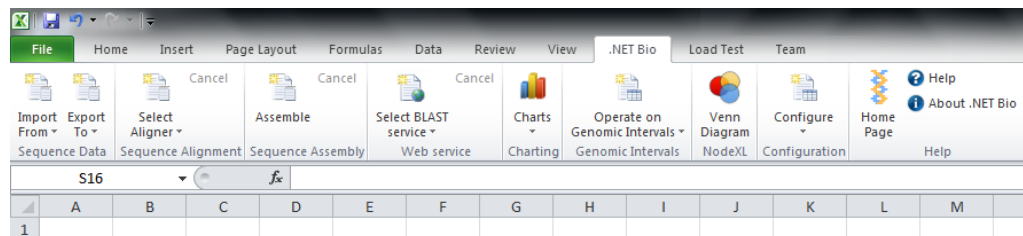
Лента би сада требало да садржи **.NET Bio** картицу, као што је приказано на Слици 1.



Слика 1. Лента Ексела са .NET Bio картицом.

Преглед корисничког прочеља

.NET Bio картица, као што је приказано на Слици 2, садржи главно корисничко прочеље за Biology Extension.



Слика 2. .NET Bio картица

.NET Bio картица садржи седам група наредби:

Sequence Data

Убацавање и дистрибуција геномских секвенци кроз (подржане) формате датотека (наведени у Прилогу А).

Sequence Alignment

Поравнавање цјелокупних или пак дјелимичних геномских секвенци одговарајућим (подржаним) алгоритмима.

Sequence Assembly

Састављање двије или више геномских секвенци у приказ (секвенце) усаглашености.

Web Service

Слање приказа (секвенце) усаглашености веб-сервисима ради идентификације.

Charting

Приказ графикана расподјеле сваког нуклеотида у ДНК ланцима.

Genomic Intervals

Руковање интервалним геномским подацима у формату UCSB BED помоћу наредби (операција) као што су Merge (унија), Intersect (пресјек), Subtract (разлика).

NodeXL

Приказ Венових дијаграма на основу поравнавања секвенци.

Configuration

Дефинисање слједећих опција у Biology Extension-у:

- промјена ширине колоне-оквира за податке о геномским секвенцама.
- измјена шеме за бојење ДНК, РНК и протеинских молекула.

Унос података (читање датотеке)

.NET Bio Extension подржава слједеће типове и формате записа геномских података:

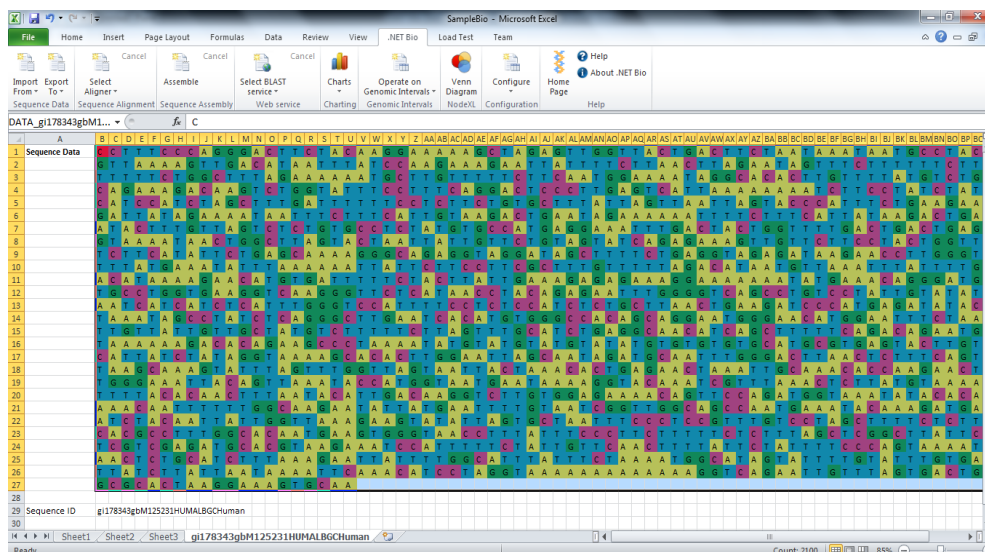
Тип	Формат
ДНК, РНК или протеинске секвенце	FASTA, FASTQ, GenBank
Метаподаци о секвенцама	GFF
Интервални геномски подаци	BED

Подаци се по уносу (читању датотеке) могу преуређивати, мијењати, слати BLAST веб-сервису, или пак уписивати у нове датотеке.

За унос ДНК, РНК или протеинских секвенци

1. Кликните на **Import From** (Убаците из..) са **.NET Bio** ленте.
2. Одаберите један од формата геномских података: **FASTA**, **FASTQ**, или **GenBank**.
3. Пронађите и одаберите жељену датотеку изабраног формата.
4. Кликните на **Open**.

Секвенца је унешена у нови радни лист, као на слједећој слици.

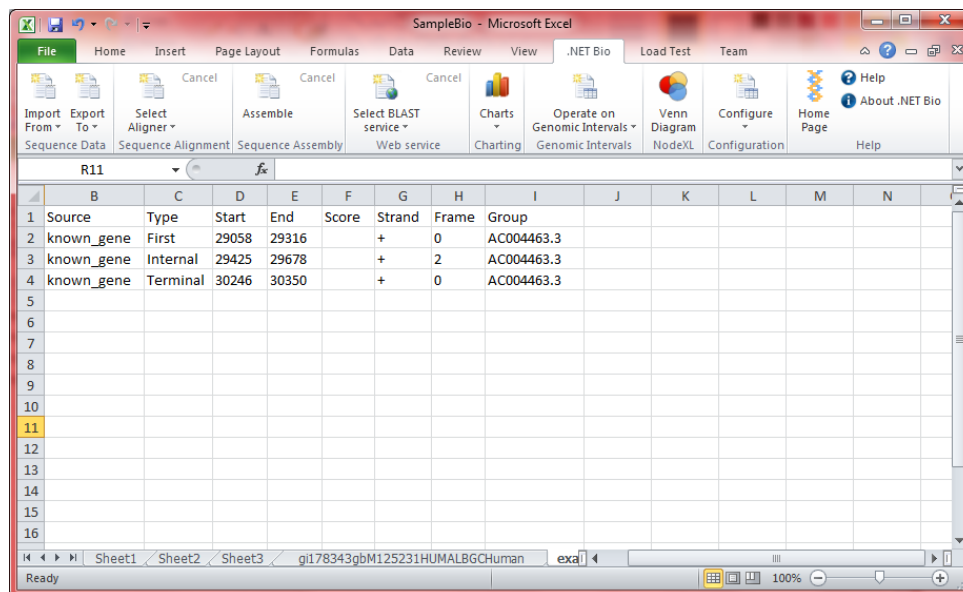


FASTA секвенца података у Excel-у

За унос GFF метаподатака о секвенцама

1. Кликните на **Import From** са **.NET Bio** ленте.
2. Кликните на **GFF** да одаберете формат GFF.
3. Пронађите и одаберите жељену датотеку изабраног формата.
4. Кликните на **Open**.

GFF метаподаци су унешени у нови радни лист, као на следећој слици.



GFF метаподаци о секвенцама у Excel-у.

За унос BED интервалних геномских података

1. Кликните на **Import From** са **.NET Bio** ленте.
2. Одаберите формат BED.

3. Пронађите и одаберите датотеку са интервалним подацима изабраног формата.
4. Кликните на **Open**.

Интервални подаци су унешени у нови радни лист, као на следећој слици.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1													
2		Chromosome	Start	Stop	Name	Score	Strand	ThickStart	ThickEnd	ItemRGB	BlockCount	BlockSizes	BlockStart
3		BonoboDELChr1											
4		chr1	8000	32000									
5		chr1	69000	167280									
6		chr1	217281	253000									
7		chr1	357583	462706									
8		chr1	609000	762296									
9		chr1	762296	785000									
10		chr1	797000	877715									
11		chr1	887000	909000									
12		chr1	12771000	12977029									
13		chr1	12986000	13015218									
14		chr1	13065218	13200000									
15		chr1	13213000	13234653									
16		chr1	13352469	13425000									
17		chr1	13434000	13454652									
18		chr1	16573000	16674128									
19		chr1	16720000	16763702									
20		chr1	16788000	16831037									

BED interval data in Excel

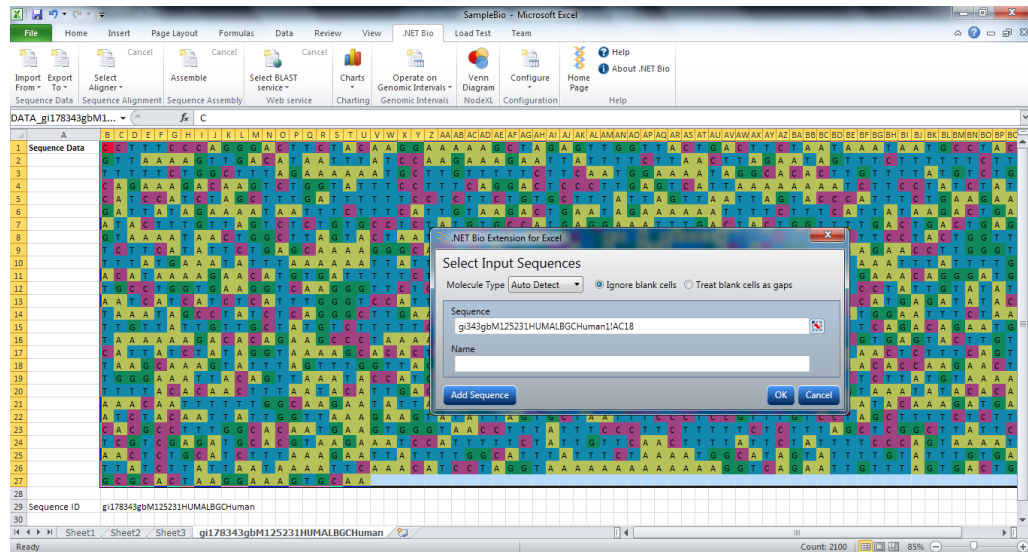
Упис података (секвенци) у датотеку

.NET Bio Extension подржава упис ДНК, РНК или протеинских секвенци у датотеке FASTA, FASTQ и GenBank формата.

Након уноса података, могуће их је мијењати, поравнавати, слати на BLAST веб-сервис, или пак уписивати у неке друге датотеке.

За упис ДНК, РНК или протеинских секвенци у датотеку

1. Кликните на **Import From** са **.NET Bio** ленте.
2. Кликните на жељени формат записа секвенци: **FASTA**, **FASTQ** или **Genbank**.
3. Пронађите и одаберите датотеку изабраног формата.
4. Кликните на **Open**.
5. Направите жељене измјене у датотеци и кликните на **Export To** (Упиши у).
6. Помоћу дијалошког окна **Select Input Sequences** (Изаберите секвенце за упис), као што је приказано на следећој слици, одаберите цијелу или дио секвенце и кликните на **OK**.



Дијалогско окно Select Input Sequences

- Кликните на **Save As** на **File** картици и снимите датотеку са новим називом.

Поравнавања секвенци

ДНК, РНК и протеинске секвенце се могу поравнавати према следећим алгоритмима:

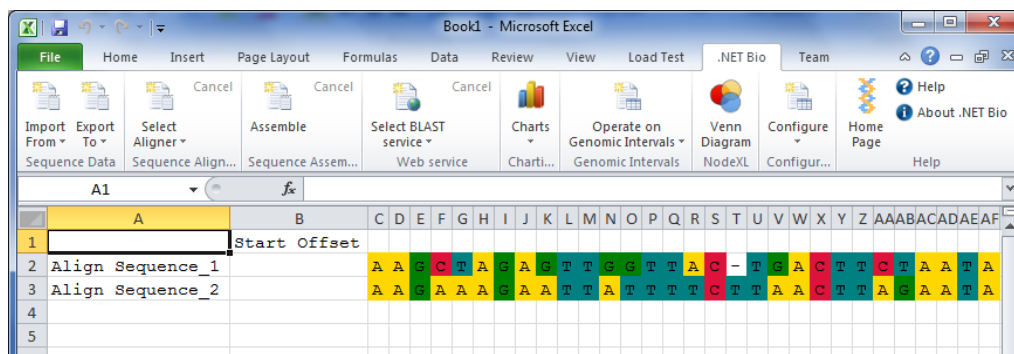
MUMmer 3.0 Pairwise-Overlap
Needleman-Wunsch Smith-Waterman
NUCmer 3.0

По одабиру алгоритма и двију или више секвенци, подешавате параметре за поравнавање који укључују и одабир матрице сличности. Резултат поравнавања бива приказан у новом радном листу.

За поравнавање секвенци

- Убаците двије или више секвенци истог типа, као што је описано у поглављу „Унос података (читање датотеке)” претходно у овом документу.
- Кликните на **Select Aligner** (Изаберите поравнавање) са **.NET Bio** ленте.
- Одаберите двије или више секвенци у дијалогском окну **Select Input Sequences**, а потом кликните на **OK**.
- Подесите параметре за поравнавање у дијалогском окну **Align Inputs Parameters** (Улазни параметри поравнавања) и кликните на **OK**.

Резултат поравнавања је приказан у новом радном листу, као на следећој слици.



Поравните FASTA секвенце

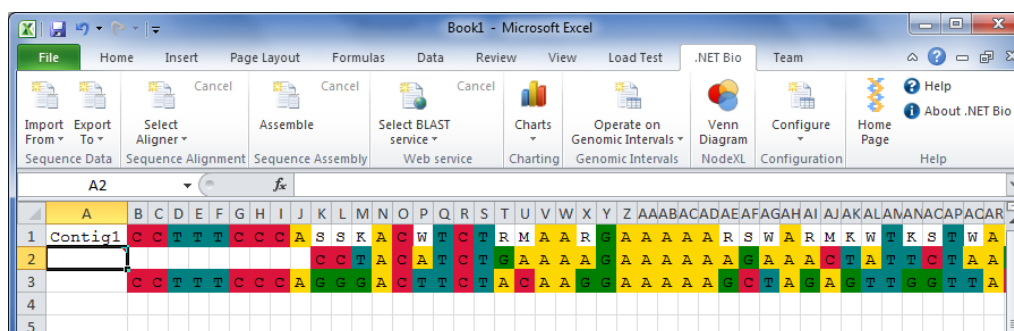
Агрегација секвенци

ДНК, РНК и протеинске секвенце могу бити агрегиране у тзв. приказе (секвенце) усаглашености.

Након одабира двију или више секвенци истог типа, подешавајте параметре за агрегацију и бирате алгоритам поравнавања. Резултат агрегације је приказан у новом радном листу.

За агрегирање секвенци

1. Унесите двије или више секвенци истог типа како је то описано у „Упис података (секвенци) у датотеку” претходно у овом документу.
2. Кликните на **Assemble** (Агрегирај) са **.NET Bio** ленте.
3. Додајте унесене секвенце помоћу дијалошког окна **Select Input Sequences**, а затим кликните на **OK**.
4. Подестите параметре за поравнавање у дијалошком окну **Align Inputs Parameters**, па потом кликните на **OK**.



Поравните FASTA секвенце

Слање секвенце BLAST Веб-сервисима

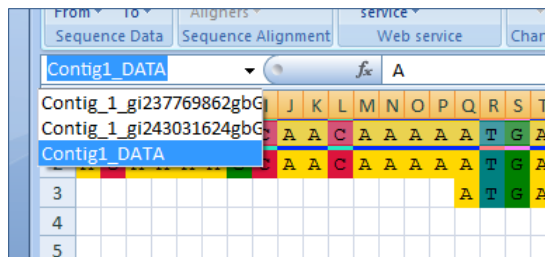
.NET Bio Extension се може искористити за слање приказа (секвенце) усаглашености, после вишеструких поравнавања, следећим биолошким веб-сервисима на провјеру:

EBI WU-BLAST
NCBI QBLAST

Након одабира цијелокупне или пак дијела секвенце и самог сервиса, подешаваате параметре захтјева, који се разликују за сваки тип услуге. Резултат бива приказан у новом радном листу.

За слање цијелокупне секвенце BLAST-сервису

- Одаберите секвенцу кликом на **Contig1_DATA** у падајућем изборнику **Name Box-а** (Називи поља), као што је приказано на сљедећој слици.



Одабир consensus view двије секвенце

- Кликните на **Select BLAST Service** (Изаберите BLAST-сервис) са **.NET Bio** ленте.
- Кликните на одговарајући BLAST-сервис ради формирања захтјева.
- Подесите параметре захтјева у прозору **BLAST WebService** (BLAST Веб-сервис) и кликните на **OK**.

Резултати су приказани у новом радном листу, као на сљедећој слици.

QueryId	SubjectId	Identity	Alignment	Length	Q.Start	Q.End	S.Start	S.End	E-Value	Score	Gaps
EM_PAT:JA017890		80	80	6000	80	1	3326	3405	6.04E-09	66.0654	
EM_PAT:JA017891		80	80	6000	80	1	2481	2560	6.04E-09	66.0654	
EM_PAT:JA017892		80	80	6000	80	1	893	972	6.04E-09	66.0654	
EM_PAT:DD097891		80	80	19002	80	1	81	160	6.58E-09	66.0654	
EM_PAT:DI084222		80	80	19002	80	1	81	160	6.58E-09	66.0654	
EM_PAT:DM161102		80	80	19002	80	1	81	160	6.58E-09	66.0654	
EM_PAT:GP444432		80	80	19002	80	1	81	160	6.58E-09	66.0654	
EM_PAT:GX400578		80	80	19002	80	1	81	160	6.58E-09	66.0654	
EM_HUM:M12523		80	80	19002	80	1	81	160	6.58E-09	66.0654	
EM_PAT:I55948		80	80	19011	80	1	81	160	6.58E-09	66.0654	
EM_HUM:EF649953		80	80	21070	80	1	329	408	6.60E-09	66.0654	
EM_PAT:GC701796		80	80	21204	80	1	345	424	6.60E-09	66.0654	
EM_HTG:AP002911		80	80	112830	80	1	4286	4365	6.78E-09	66.0654	
EM_HUM:AC108157		80	80	167001	80	1	68481	68560	6.80E-09	66.0654	
EM_HTG:AC008076		80	80	200000	1	80	151176	151255	6.80E-09	66.0654	
EM_PAT:AX345002		72	80	5728	80	1	3245	3324	1.10E-05	55.2625	
EM_HTG:AC136193		75	80	192450	80	1	114254	114328	1.66E-05	54.8124	

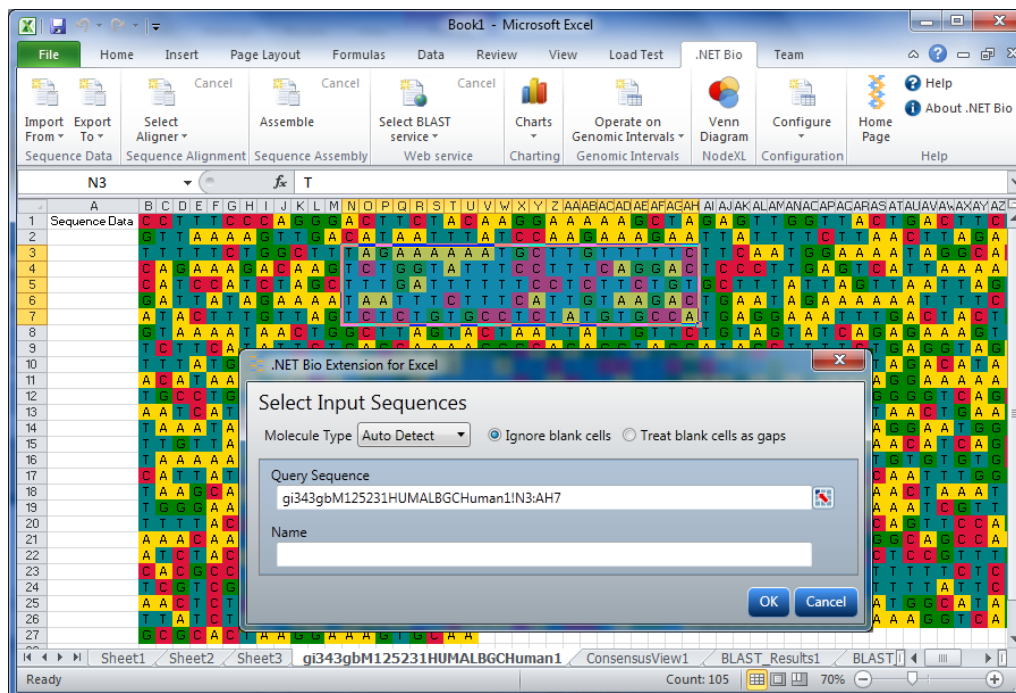
Резултати EBI-WU захтјева користећи приказ (секвенце) усаглашености за двије секвенце

За слање дијела секвенце BLAST-сервису

- Одаберите, показивачем, одређене ћелије секвенце.
- Кликните на **Select BLAST Service** у **.NET Bio** ленти и одаберите BLAST-услугу.

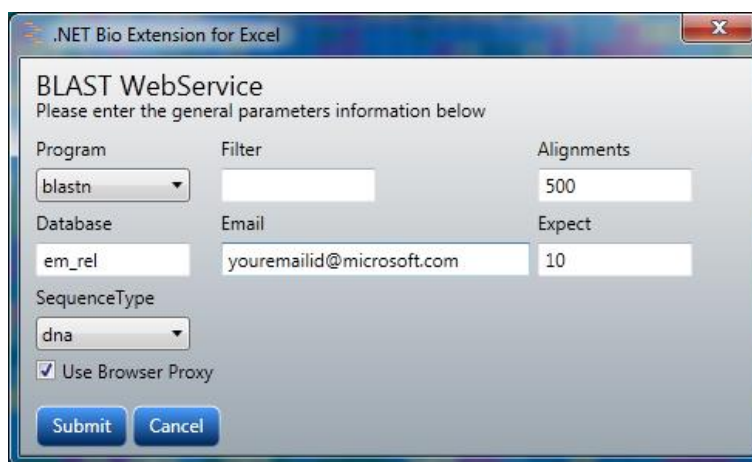
Дијалошко окно **Select Input Sequences** приказује одабир у пољу **Query Sequence** (Секвенца захтјева), као што је приказано на сљедећој слици.

Примијетите да су посљедњи знаци ниске захтјева у ствари референце на изабране ћелије: **N3:AH7**.



Дијалошко окно **Select Input Sequences**

3. Подесите параметре захтјева у дијалошком окну **BLAST WebService** и кликните на **Submit**, као што је приказано на сљедећој слици.

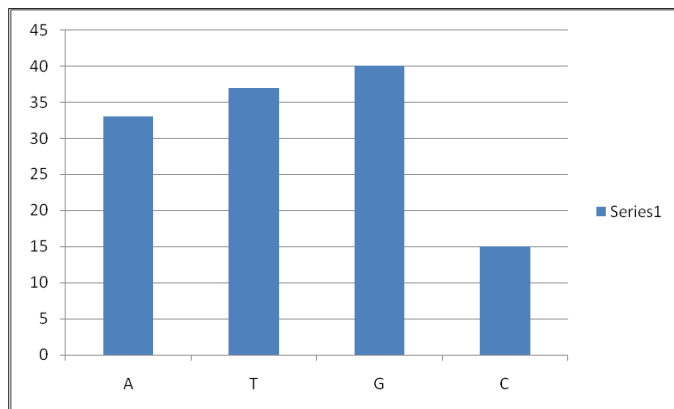


Дијалошко окно **BLAST WebService** за EBI WU-BLAST

Ако је обрада захтјева успешна, резултат ће бити приказан у новом радном листу.

Формирање графикана расподјеле нуклеотида ДНК

Charting-функцијом могуће је направити графикон расподјеле нуклеотида ДНК на основу података из секвенце, као што је то приказано на Слици 3.



Слика 3. График расподјеле нуклеотида ДНК

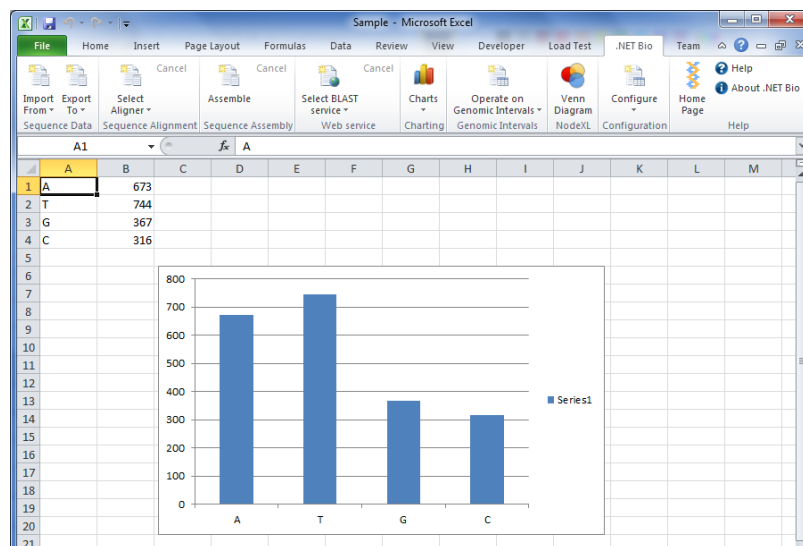
Да би могли користити Charting-функцију, морате омогућити макрое у Excel-у и додати одговарајући Excel-макро радном листу који користите са Biology Extension-ом. Назив макроя је DisplayDNASequenceDistribution.bas и долази уз инсталацију .NET Bio Framework-a.

Важно: Слиједите процедуру из Прилога Б „Одобравање макроя“ прије коришћења оруђа **Charts** (Графикони).

За приказ графикана ДНК секвенце

1. Отворите Excel-ову радну свеску у којој су допуштени макрои и која садржи макро **DisplayChart** (Прикажи графикон).
2. Одаберите радни лист који садржи податке о нисци.
3. Кликните на **Charts** иконицу са **.NET Bio** картице, а затим кликните на **DNA Sequence Distribution Table** (Табела расподјеле ДНК секвенце).

График је приказан у новом радном листу, као на сљедећој слици.



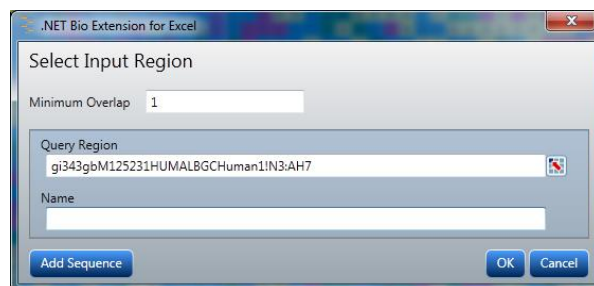
Нови радни лист са графиконом

Руковање интервалним геномским подацима

Опцијом **Operate on Genomic Intervals** (Рад са геномским интервалима), могуће је извршити три основне (скуповне/интервалне) операције: **Merge** (унија), **Intersect** (пресјек) и **Subtract** (разлика). Користећи датотеке у формату BED, можете дефинисати један или више захтјева користећи опсеге ћелија радног листа, а затим изабрати једну од наведене три операције. Одабрани опсези садрже једну или више базних парова координата хромозома. По обављеној операцији, резултат је уписан у нови радни лист.

Унија преклапајућих интервала захтјева

1. Кликните **Import From** и кликните на **BED**.
2. Одаберите једну или више датотека и кликните на **Open**.
3. Одаберите радни лист и кликните на **Operate on Genomic Intervals**.
4. Кликните на **Merge**. Приказано је дијалошко окно **Select Input Sequences Ranges** као на сљедећој слици.



Прозор Select Input Sequence Ranges

5. Кликните на иконицу за избор, која се налази уз десну страну поља **Reference Sequence** (Референтна секвенца) и изаберите опсег базних парова. Примјетите да су у примјеру на сљедећој слици одабране четири колоне.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1													
2		Chromosome	Start	Stop	Name	Score	Strand	ThickStart	ThickEnd	ItemRGB	BlockCour	BlockSize	BlockStarts
3		chr1	69000	167280									
4		chr1	217281	253000									
5		chr1	357583	462706									
6		chr1	609000	762296									
7		chr1	762296	785000									
8		chr1	887000	909000									
9		chr1	12771000	12977000									
10		chr1	12986000	13015218									
11		chr1	13065218	13200000									
12		chr1	13213000	13234653									
13		chr1	13352469	13425000									
14		chr1	13434000	13454652									
15		chr1	16573000	16674128									
16		chr1	16720000	16763702									
17													

Избор опсега базних парова

- Клините на иконицу за избор у прозору **Selection Helper** (Помоћ око избора) или притисните **Enter** да бисте се вратили на прозор **Select Input Sequences Ranges**.
- Унесите назив захтјева и кликните на OK.

Genomic Data Identification Wizard (Чаробњак за идентификацију геномских података) се приказује, као на слици.

Чаробњак за идентификацију геномских података

- Помоћу падајућих изборника подесите називе колона за четири изабране колоне — B, C, D, и E — потом кликните на OK.

Речултати су приказани у новом радном листу под називом **Merged_Sheet1**, као што је приказано на слици.

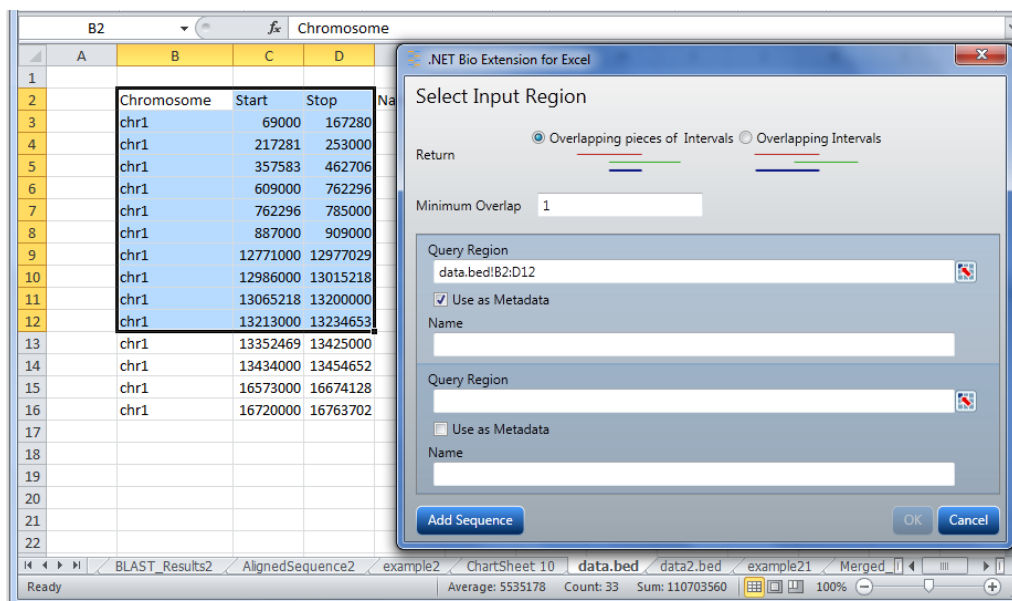
	Chromosome	Start	Stop	Base Pair Count	No. of Ranges	Base Pair Count	No. of Ranges	Common
1								
2								
3								
4								
5	chr1	69000	167280	98280	1	98280	1	0
6	chr1	217281	253000	35719	1	35719	1	0
7	chr1	357583	462706	105123	1	105123	1	0
8	chr1	609000	762296	153296	1	153296	1	0
9	chr1	762296	785000	22704	1	22704	1	0
10	chr1	887000	909000	22000	1	22000	1	0
11	chr1	12771000	12977029	206029	1	206029	1	0
12	chr1	12986000	13015218	29218	1	29218	1	0
13	chr1	13065218	13200000	134782	1	134782	1	0
14	chr1	13213000	13234653	21653	1	21653	1	0
15	chr1	13352469	13425000	72531	1	72531	1	0
16	chr1	13434000	13454652	20652	1	20652	1	0
17	chr1	16573000	16674128	101128	1	101128	1	0
18	chr1	16720000	16763702	43702	1	43702	1	0
19								
20								
21								
22								

Резултат уније

- Кликните на вриједности (хипервезе) у колони **No. of Ranges** да бисте видјели који су опсеги из првобитног радног листа обухваћени унијом.

Пресјек интервала два захтјева

- Кликните на **Import From** и одаберите **BED**.
- Означите једну или више датотека и кликните на **Open**.
- Означите радни лист и кликните на **Operate on Genomic Intervals**.
- Кликните на **Intersect** и помоћу прозора **Select Input Sequences Ranges** за избор два опсега базних парова: **Query Region** (Захтјев опсега), као што је приказано на сљедећој слици.



Секвенца захтјева и референтна секвенца

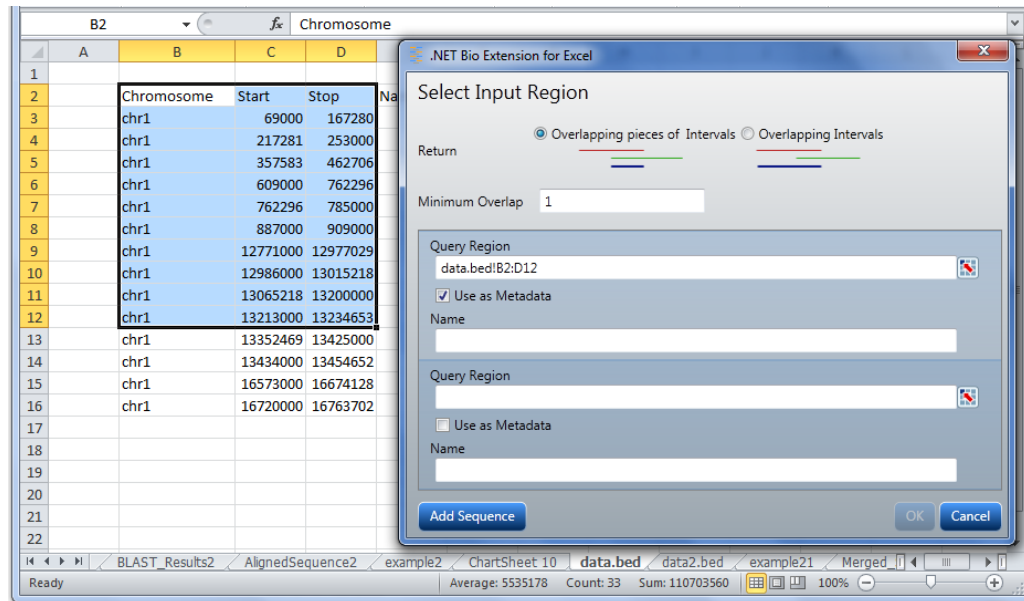
У овом примјеру се користе два радна листа, за сваку секвенцу по један.

Савјет: Додавањем заглавља избору (суб)секвенце, можете заобићи чаробњака за идентификацију геномских података. .NET Bio Extension аутоматски попуњава вриједности колоне.

- Кликните на **OK**. Резултати ће бити приказани у новом радном листу под именом **Intersect_Sheet1**.

Разлика интервала два захтјева

- Кликните на **Import From** и означите BED.
- Означите једану или више датотека и кликните на **Open**.
- Означите радни лист и кликните на **Operate on Genomic Intervals**.
- Кликните на **Intersect** и користите прозор **Select Input Sequences Ranges** за избор два опсега базних парова: **Query Region**, као што је приказано на сљедећој слици.



Секвенца захтева и референтна секвенца

- Кликните на **OK**. Резултати ће бити приказани у новом радном листу под називом **Subtract_Sheet1**.

Приказ Венових дијаграма на основу интервалних геномских података

Опцијом **Venn Diagram** (Венов дијаграм), можете направити дво- или тро-обласне Венове дијаграме на основу интервалних геномских података у формату BED, што омогућује визуелизацију односа међу областима, као и визуелизацију преклапања података.

Напомена: Venn Diagram захтијева NodeXL шаблон за Excel 2007 или Excel 2010, доступан на <http://www.codeplex.com/NodeXL>.

За формирање дво-обласног Веновог дијаграма

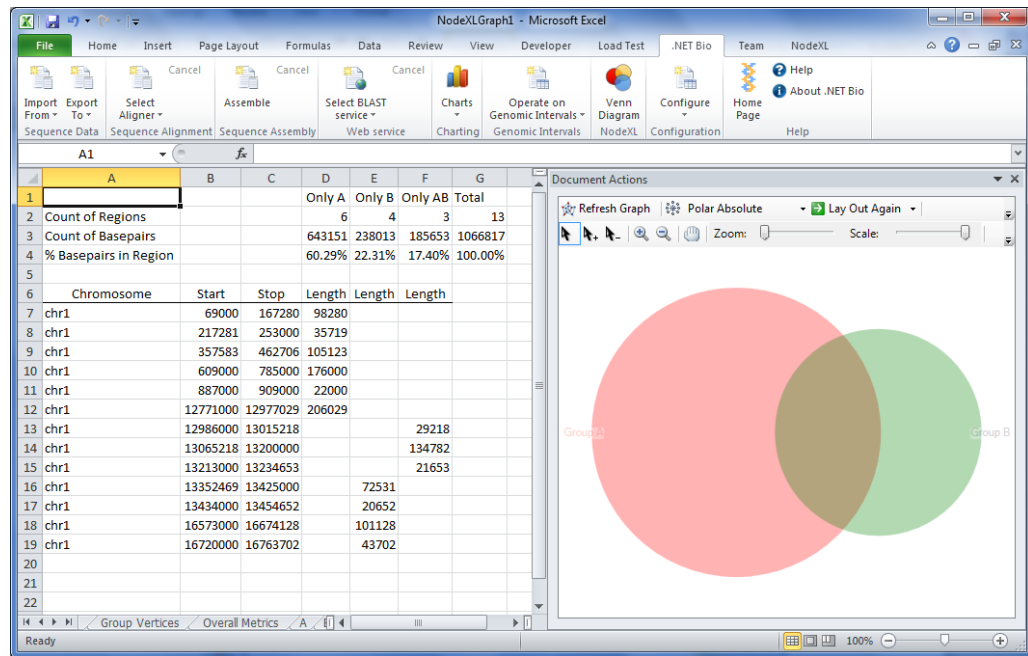
- Кликните на **Import From** и одаберите **BED**.
- Означите једну или више датотека и кликните на **Open**.
- Означите радни лист и кликните на **Venn Diagram**.
- Користите прозор **Select Input Sequence Ranges**, као што је приказано на следећој слици, да изаберете два опсега базних парова.

ВАЖНО: Опсежи базних парова се морају преклапати. Нпр. коришћење Chr1 за геноме горила и људи.



Дијалогско окно Select Input Sequence Ranges

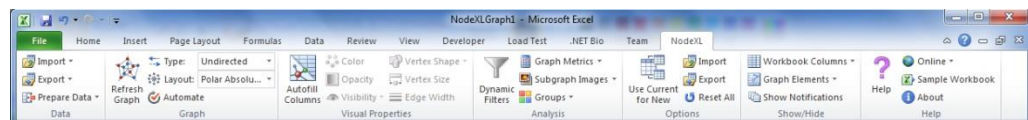
- Резултујући Венов дијаграм је приказан у новој радној свесци под називом **NodeXLGraph1**, као што се може видјети на сљедећој слици.



Венов дијаграм генома Chr1код људи и горила

- Кликните на изборник NodeXL да бисте видјели ленту NodeXL, као што је приказано на сљедећој слици.

Документација ових наредби се налази на адреси <http://www.codeplex.com/NodeXL>

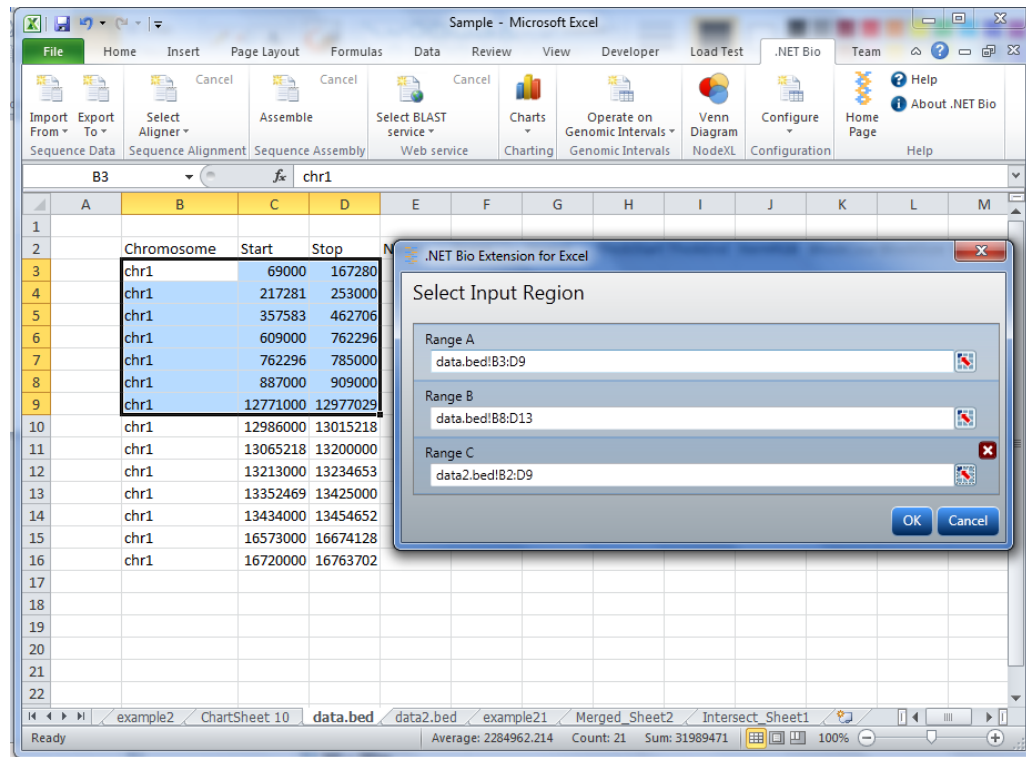


NodeXL лента

За формирање тро-обласног Веновог дијаграма

- Кликните на **Import From** и одаберите **BED**.
- Означите једну или више датотека и кликните на **Open**.
- Означите радни лист и кликните на **Venn Diagram**.
- Користећи прозор **Select Input Sequence Ranges**, као што је приказано на сљедећој слици, изаберите три опсега базних парова и кликните на **OK**.

У овом примјеру, изабрана три опсега базних парова се преклапају.



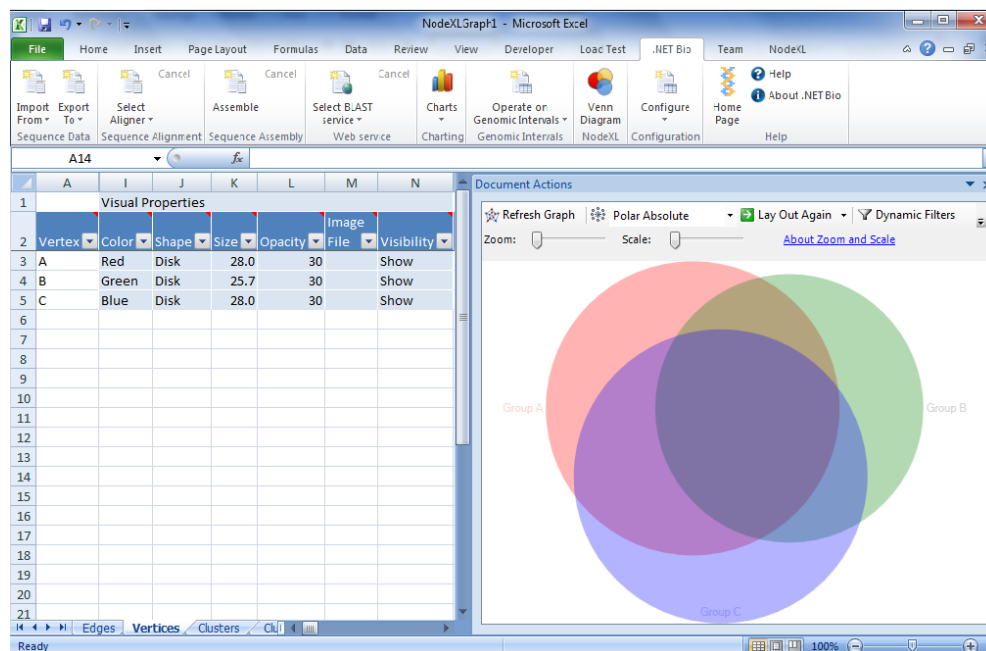
Три опсега базних парова који се преклапају

- Подесите вриједност колона помоћу чаробњака **Genomic Data Identification Wizard**, као што је приказано на сљедећој слици, и кликните на **OK**.



Чаробњак за идентификацију геномских података

- Резултати Веновог дијаграма су приказани у новој радној свесци под називом **NodeXLGraph1**, као што можемо видјети на сљедећој слици.



Тро-обласни Венов дијаграм

Промјена конфигурационих опција

.NET Bio Extension има двије конфигурационе опције:

- број колона-оквира за податке о геномским секвенцама;
Мијења се начин на који Excel показује податке о секвенцама. Подразумјевани оквир је 80, а максимална вриједност је 16 000.
- шема за бојење молекула секвенце;
Сваком молекулу се може придружити боја ради јасније представе секвенце. Само пет молекула, подразумевано, има одређену боју: A, T, C, G, и U.

За конфигурисање колоне-оквира

- Кликните на **Configure** на ленти **.NET Bio**.
- Кликните на колону **Sequence Data Wraparound** (Оквир података секвенце).
- Унесите нову вриједност у поље **Enter the maximum number of columns** (Унесите максималан број колона).

За конфигурисање шеме боја

- Кликните на **Configure** на ленти **.NET Bio**.
- Кликните на **Change Color Scheme for Molecules** (Измјена шеме за бојење молекула).
- Кликните на дугме **Change Color** (Промијени боју) у дијалошком окну **Configure Color**.
- Означите боју у дијалошком окну **Format Cells** (Формати ћелија) и кликните на **OK**.

- Кликните на **ОК** у прозору **Configure Color** да снимите промјене.

Додатак А: Подржане секвенце и формати датотека

У овом додатку су описани подржани формати .NET Bio радног оквира, са одговарајућим хипервезама ка референцама за више информација.

FASTA: Секвенце података

Једноставан текстовни формат за представљање пептидних или нуклеотидних ланаца, а да је при том анализа и манипулација секвенцама доста лака помоћу скрипти написаних на језику као што је Iron Python.

Формат је у ствари низ линија од, најчешће, 80 слова по линији, али никако не више од 120.

Технички опис

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/blast/fasta.shtml>

Извори

Википедијина страница http://en.wikipedia.org/wiki/FASTA_format – садржи општи преглед, хипервезе ка конверторима формата и још неке битне референце.

FASTQ: Квалитативне секвенце података

Текстовни формат који похрањује биолошке секвенце и Phred quality бодове у једну датотеку. Често се сматра *de facto* стандардом за похрану хеуристичких и бодовних података високо-пропусног анализатора (High-Troughput Computing).

Формат је одређен са четири линије датотеке које чине слог (слог одговара једној геномској нисци).

Уобичајне екстензије датотека су: **.fq**, **.fastq**, **.txt**.

Технички опис

FASTQ формат спецификација
<http://maq.sourceforge.net/fastq.shtml>

Извори

Википедијина страница http://en.wikipedia.org/wiki/FASTQ_format – садржи општи преглед, хипервезе ка конверторима формата и још неке битне референце.

GenBank: Формат за базе података нуклеотидних секвенци

Flat-file формат који описује нуклеотиде и секвенце нуклеотида из GenBank-а – базе података са слободним приступом.

Технички опис

“Chapter 1, GenBank: The Nucleotide Sequence Database,” Ilene Mizrahi; *NCBI Handbook*, 2007

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/bookres.fcgi/handbook/ch1.pdf>

Извори

Веб-сајт NCBI базе података за опште информације о GenBank-у

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez?db=nucleotide>

Википедијина страница <http://en.wikipedia.org/wiki/GenBank> – садржи општи преглед, хипервезе ка конверторима формата и још неке битне референце.

GFF: Generic Feature Format

Линијски формат који користи tab-размаке за раздвајање података. Намијењен је за представљања слогова у геномској бази података. GFF слог представља субсеквенцу неке биолошке секвенце, као што је то ген или протеинска секвенца, истовремено дозвољавајући „умјерено детаљна“ образложења.

Екстензија за овај тип датотека је **.gff**.

Раније спецификације су преводиле акроним као Gene-Finding Format.

Технички опис

Садашња верзија је n2. Формат су првобитно осмислили Richard Durbin и David Haussler, а посљедња верзија садржи измјене које су предложили Lincoln Stein, Suzanna Lewis, Anders Krogh и други.

<http://www.sanger.ac.uk/resources/software/gff/spec.html>

Извори

Сајт института Wellcome Trust Sanger за општи преглед

http://www.sanger.ac.uk/Software/formats/GFF/GFF_Spec.shtml

UCSC сајт пројекта Encode, такође за општи преглед

<http://genome.ucsc.edu/goldenPath/help/customTrack.html#GFF>

Browser Extensible Data (BED) Format

Формат BED обезбјеђује флексибилан начин за дефинисање линија које приказују у дијелу за образложење. BED се састоји од главне датотеке са пољима одвојеним tab-размацима и слоговима раздвојеним простим празнинама.

Екстензија за овај тип датотека је **.bed**.

FAQ

Browser Extensible Data (BED) Format FAQ

<http://genome.ucsc.edu/FAQ/FAQformat.html#format1>

Извори

UCSS-ов сајт са општим прегледом базе података Genome Browser Database

<http://users.soe.ucsc.edu/~kent/gbd.html#BED>

Додатак Б: Одобравање макроя

Да бисте користили Charting функцију, морате одобрити макрое у Excel-у и додати Excel-макро радним свескама које користите у Biology Extension-у. Назив макроя је DisplayDNASequenceDistribution.bas, и долази инсталиран уз .NET Bio радни оквир.

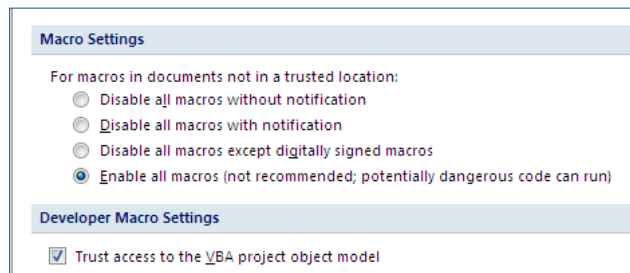
Одобравање макроа у Excel-у

1. Уз текућу отворену радну свеску, кликните на **Office Button** у Excel-у и кликните на **Excel Options**.
2. Кликните на **Show Developer tab in the Ribbon**, а онда на **OK**.
3. Кликните на картицу **Developer** на ленти, као што је приказано на следећој слици.



Developer картица

4. Кликните на **Macro Security** у ленти **Developer**.
5. Кликните на **Macro Settings** у прозору **Trust Center**.
6. Кликните на **Enable all macros** и означите **Trust access to the VBA project object model** као што је приказано на следећој слици.

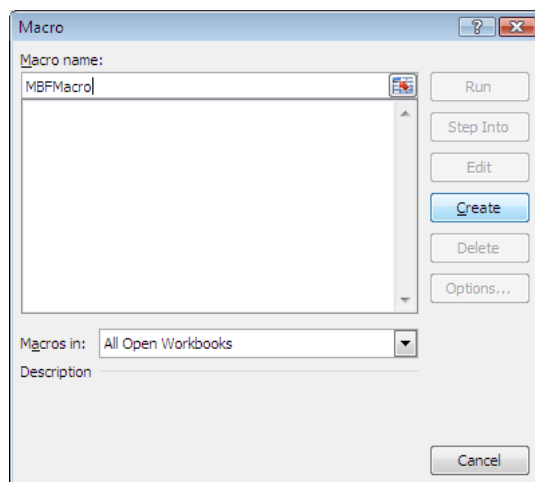


Macro Settings

7. Кликните на **OK**.
8. Затворите и опет отворите радну свеску да би промјене ступиле на снагу.

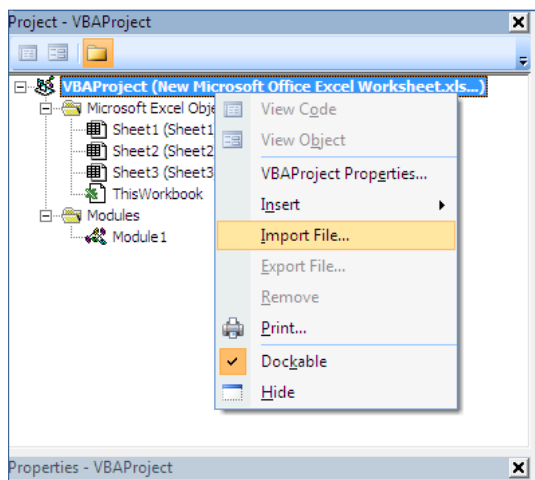
За додавање графikon-макроа

1. Кликните на картицу **Developer** на траци и кликните на **Macros**.
2. Унесите име макроа као што је „BioMacro” у поље **Macro name** у прозору **Macro**, као што је приказано на слици и кликните на **Create**.



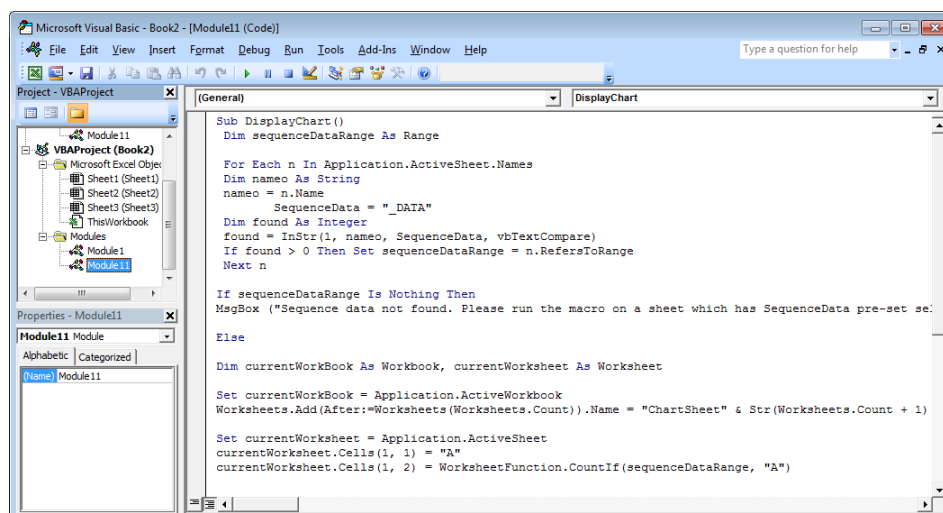
Макро прозор

3. Десни клик на **VBAProject** у прозору **Microsoft Visual Basic**, а онда кликните на **Import File...** као што је приказано на слици.



Наредба Import File...

4. Идите у C:\Program Files (x86)\.NET Bio\1.0\Tools\.NET Bio Extension for Excel. Означите **DisplayDNASequenceDistribution.bas** и кликните на **Open**.
5. Двоструким кликом миша на **Module 11** да се прикаже макро, као што је приказано на слици.



Макро DisplayChart

6. Кликните **Save** (Сачувај) и сачувајте документ типа **Excel Macro-Enabled Workbook (*.xlsm)**.

Сада, када сте допустили макрое у Excel-у и додали марко DisplayDNASequence-Distribution.bas, можете користити Charting функцију у Biology Extension-у.