

Python w bioinformatyce

Bartek Wilczyński bartek@mimuw.edu.pl http://regulomics.mimuw.edu.pl/

Wydział Matematyki, Informatyki i Mechaniki Uniwersytet Warszawski



Pystok #37



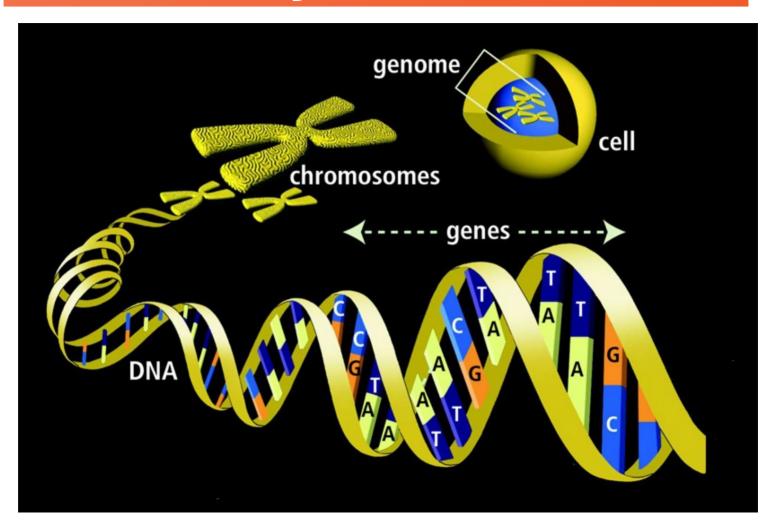
16. stycznia 2019



Bioinformatics is a discipline devoted to studying of information processes in biotic systems

P. Hogeweg (1978)

Informacja w DNA

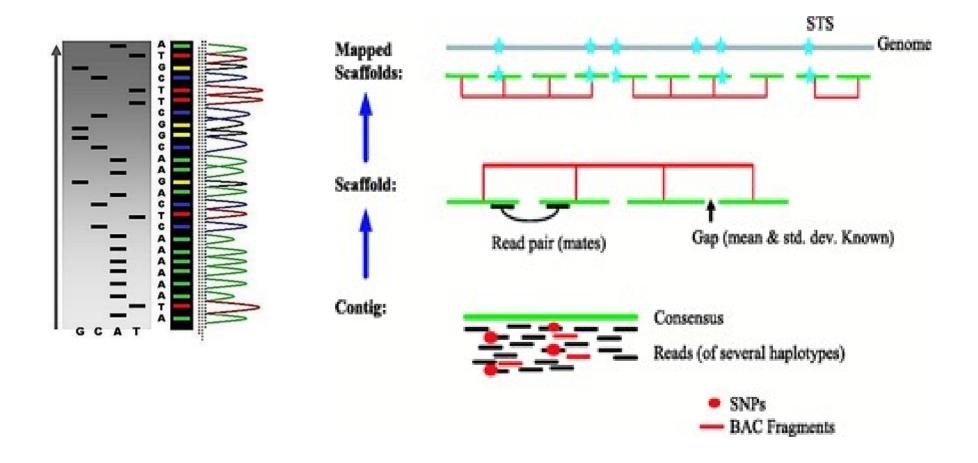


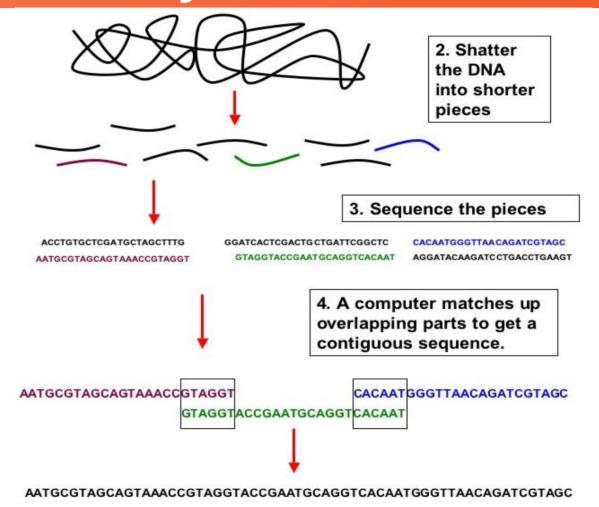
Human Genome Project

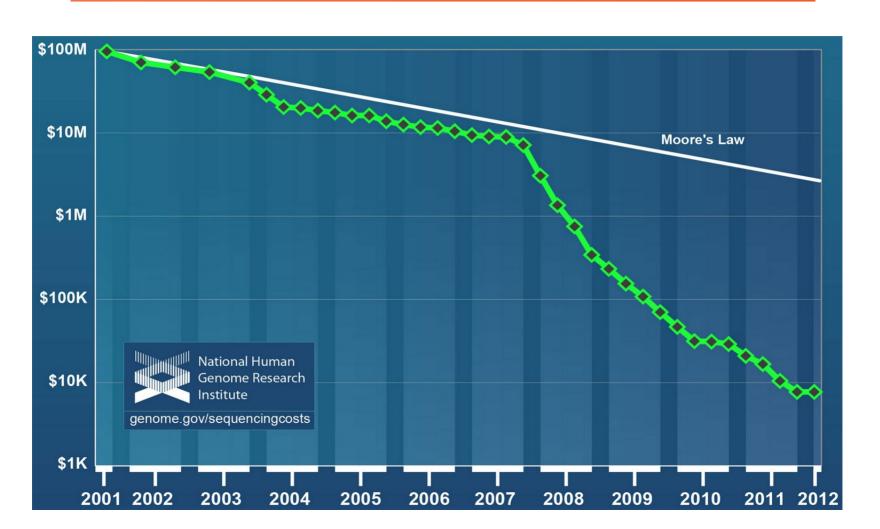
- · Ogromny projekt rządu USA
- · 3 miliardy dolarów
- · 15 lat badań

· Celera genome project

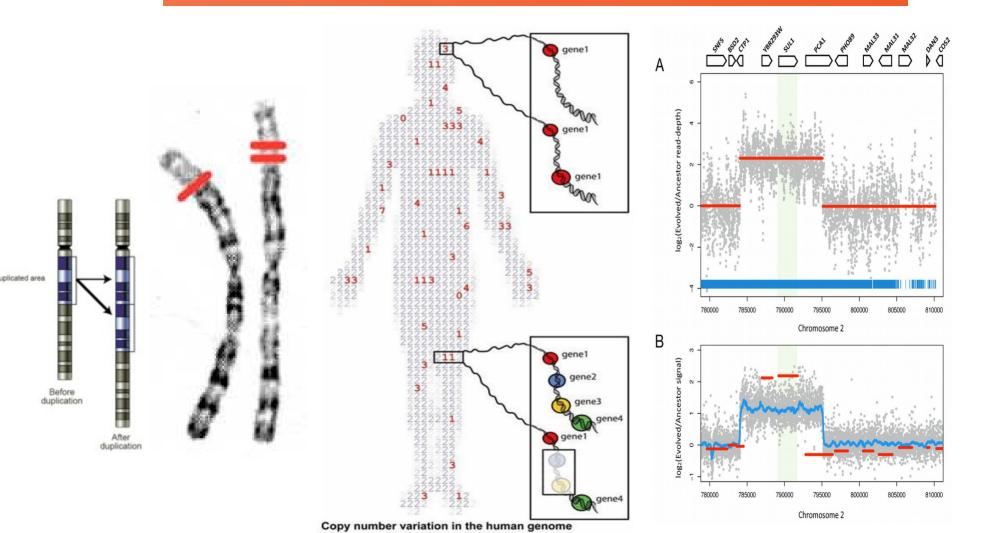
- · Konkurencyjny projekt komercyjny
- · 300 milionów dolarów
- · 2-3 lata badań



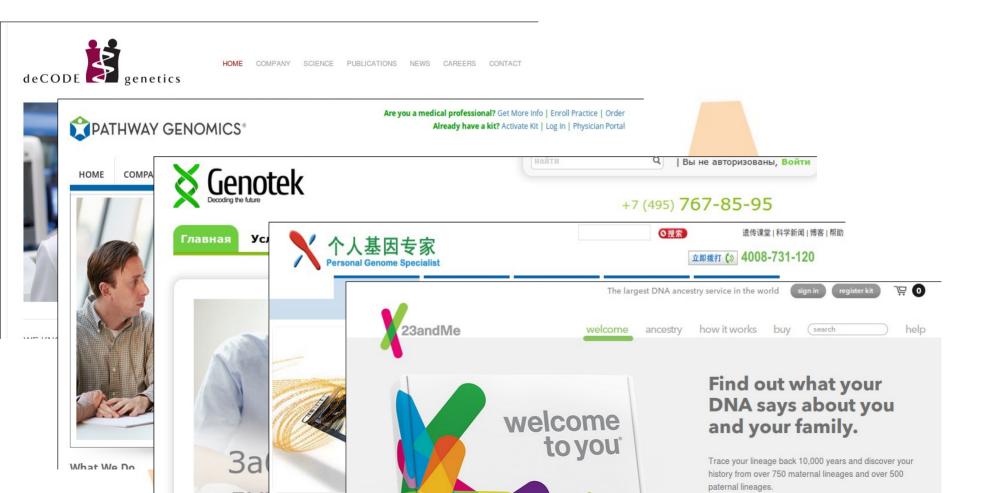




Mutacje interesują pacjentów

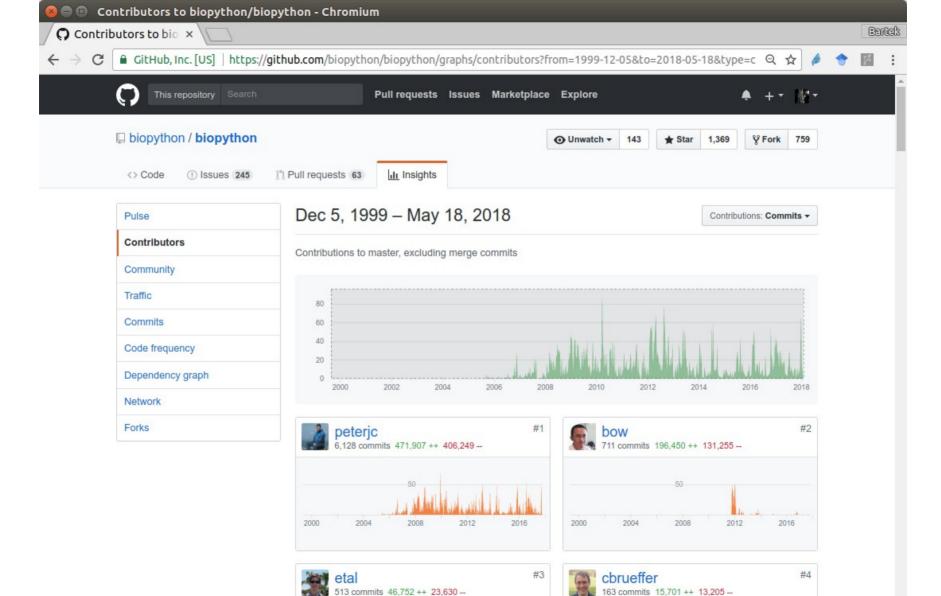


Komercjalizacja genomu



Krótka historia biopythona

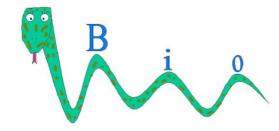
- 1999 Jeff Chang i Andrew Dalke tworzą biopython'a na podstawie bioperl'a
- 2002 pierwsze wydanie
- 2003-4 Brad Chapman kieruje pracami
- 2005- Peter Cock przejmuje kierownictwo
- 2009 publikacja
- 2010 przeniesienie rozwoju na git/github setki ludzi, miliony linii kodu, tysiące funkcji, dziesiątki tysięcy użytkowników

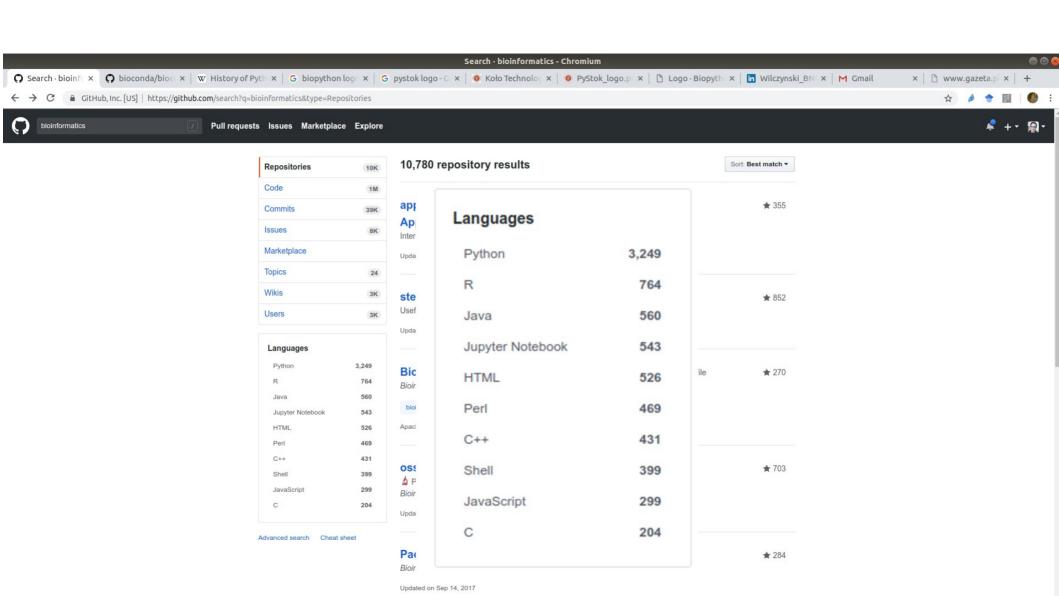


Promocja biopython'a w 2003:)

$$Open-Bio + Python = Biopython$$

- Official blurb: international association of developers of freely available Python tools for computational molecular biology; established in 1999.
- http://biopython.org
- Library of functionality for dealing with common problems biologists programming in python might face.





Co można w biopythonie

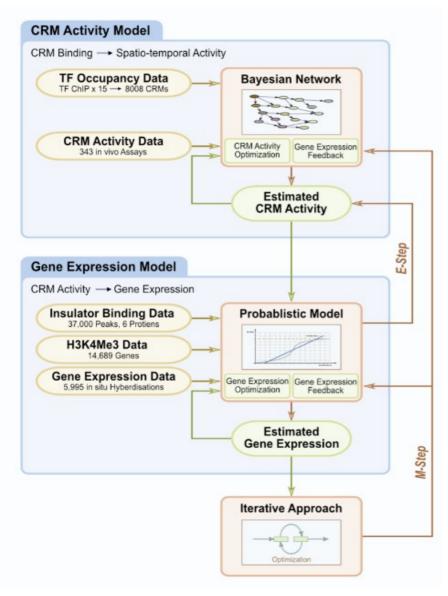
- I/O dla wielu formatów plików,
- Porównywanie sekwencji i struktur,
- Podstawowe algorytmy bioinformatyczne

 Ja np. Prowadzę cały semestralny kurs "Wstęp do Biologii obliczeniowej" dla Informatyków

Przykładowy projekt

- Kilka tysięcy genów
- Kilka tkanek
- Kilka faz rozwoju zarodkowego
- Kilkanaście zmiennych powiązanych

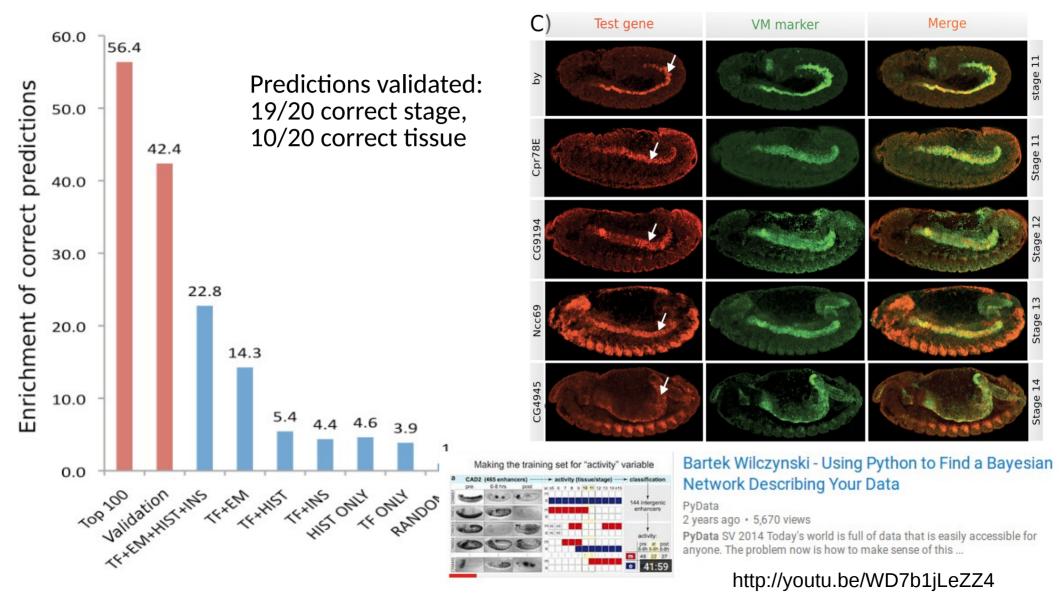
Kto jest aktywny kiedy, gdzie i dlaczego?



- 8008 enhancers compiled from 15 ChIP experiments (almost 20k binding peaks)
- Activity data for ~140 enhancers divided into
 - 3 tissues (MESO, VM, SM)
 - 5 stages (4-6,7-8,9-10,1112,13-16)
- Gene expression data for 5082 genes from the BDGP database

Wilczynski et al.PLoS Comp.Biol 2012

```
def learn(self,genes, g exp,dist,binding,crm act,promoters):
   crm bind=binding.select(ids=crm act.elems)
   f=crm bind.to bnf(crm act.get column(crm act.header[0]))
   d=data.dataset().fromNewFile(f)
   sc,g,subp=d.learn(score="BDE",data factor=DATA FACT,prior=None,verbose=True,n min=NET LIM,
   self.cpd=d.to cpd(g.weighted edges(subp,MIN EDGE W))
def predict(self,testing,dist test,binding,promoters):
   bind test=binding.select(ids=crms test)
    f=bind test.to bnf()
   d=data.dataset().fromNewFile(f)
   crm class=d.classify list(self.cpd,prob=1)
   res=[]
   for a in testina:
        r=1.0
       for c, dist in dist test[g]:
            r*=(1-crm class[c,"Class"])
        res.append((1.0-r)*promoters[g])
   return res
```



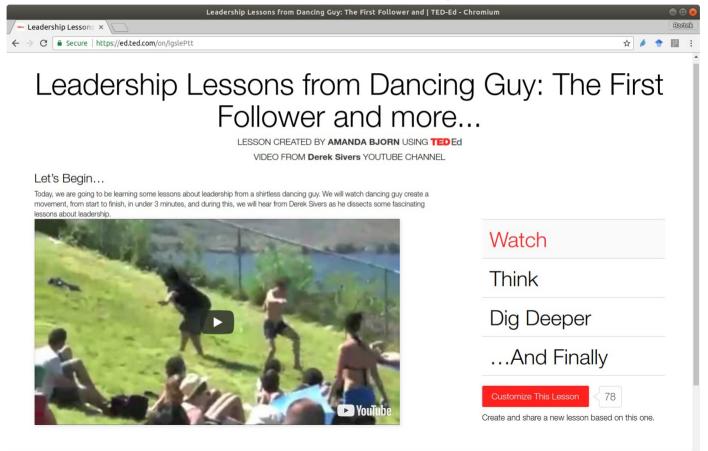
Typowy zestaw bibliotek w projekcie bioinformatycznym (w mojej grupie)

- * biopython basic I/O
- * pandas reprezentacja danych tablicowych
- * **scikit-learn** (albo BNfinder) uczenie maszynowe
- * matplotlib/seaborn wizualizacja danych

OpenSource – czy warto?

- Zawsze pisząc program można się czegoś nauczyć...
- Jeśli udostępnimy to innym, to może ktoś to przeczyta i coś nam podpowie...
- Jeśli go to zainteresuje, może dołączy do projektu...
- Jeśli projekt okaże się sukcesem, może stać się ważnym dla szerszej społeczności...

Czasem warto mądrze przyłączać się, zamiast robić wszystko od nowa



- Paweł Bednarz
- Ilona Grabowicz
- Julia Herman-Iżycka
- Magdalena Machnicka
- Ania Macioszek
- Marlena Osipowicz
- Agnieszka Podsiadło
- Irina Tuszyńska
- Rafał Zaborowski
- Eileen Furlong (EMBL)
- Mara Dierssen (CRG)
- Minna Kaikonnen (UEF)
- Carla Margulies (LMU)









NARODOWE CENTRUM NAUKI









