

Bases de Datos Relacionales y SQL: Una Introducción

José María Fernández González Nodo de Coordinación, INB Life Sciences Department, BSC











Sumario

- ¿Qué es una base de datos? Estructura interna.
- SQL (Structured Query Language). Conceptos.
- Manipulación de datos: consulta, inserción, actualización y borrado
- Tablas: creación, definición de restricciones y borrado
- Pistas de cómo diseñar una BD
- Interfaces de programación
- Usuarios de base de datos

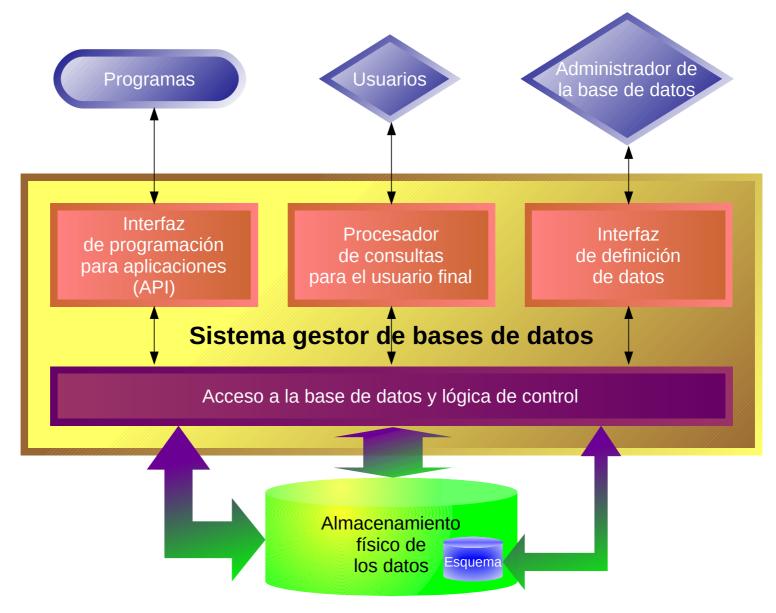


¿Qué es una base de datos?

- Una base de datos es una colección organizada de información.
 - Un Sistema Gestor de Base de Datos Relacional (SGDBR), es un software que gestiona el uso de las bases de datos relacionales, y optimiza y controla el acceso al contenido de las mismas.
 - El almacenamiento físico de los datos lo gestiona <u>única y exclusivamente</u> el gestor de la base de datos.
 El usuario sólo debe preocuparse de la estructura lógica de los mismos.
- La manipulación de la estructura y contenido de una base de datos relacional se realiza mediante el lenguaje de consultas SQL (Structured Query Language)



Estructura interna de un SGBD

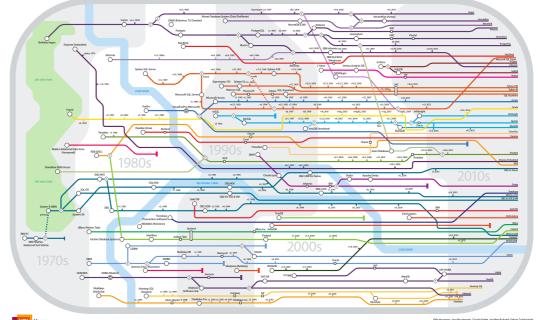




Algunos SGBDR

- Actualmente existen decenas de sistemas gestores de bases de datos relacionales:
 - Gestores open source: PostgreSQL, MySQL/MariaDB, SQLite...
 - Gestores de pago: Oracle, Sybase, DB2, ...

http://www.hpi.de/naumann/projects/rdbms_genealogy.html Genealogy of Relational Database Management Systems





Structured Query Language

 Es el idioma 'estándar' que se emplea para consultar y modificar bases de datos relacionales.

A pesar de los estándares SQL, los desarrolladores de cada gestor de bases de datos suele además añadir extensiones propias al estándar, por lo cuál nos encontramos con muchos 'dialectos' SQL muy parecidos entre sí a nivel semántico, pero sintácticamente incompatibles.



Partes del lenguaje SQL

- DML (Data Manipulation Language): Es la parte del lenguaje SQL que se ocupa de las operaciones de inserción, borrado, actualización y consulta de datos.
- DDL (Data Definition Language): Es la parte del lenguaje que se ocupa de la gestión de la base de datos: creación y borrado de los usuarios, tablas, vistas, etc...; gestión del control de acceso; manipulación de la estructura de las tablas; optimización del acceso a los datos; tipos de datos...



¿Que conceptos hay modelados en estas base de datos?

Tipos de datos.
 INTEGER, VARCHAR, DATE, R

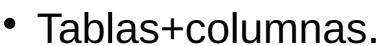








Datos, organizados en tuplas.









Usuarios.





Restricciones.







Índices y otros elementos.







Tablas: Introducción

Una base de datos relacional está compuesta de varias tablas relacionadas entre sí

AccNumber CHAR(6) PRIMARY KEY	Identificador VARCHAR(256) NOT NULL	Descripción VARCHAR(4096)
A1WWE5	ACP_HALHL	Acyl carrier protein
A8ESU2	RS10_ARCB4	30S ribosomal protein S10
Q9X2A1	ASSY_THEMA	Argininosuccinate synthase
A8FEJ8	TRPB_BACP2	Tryptophan synthase beta chain
A1JJ31	AMPA_YERE8	Probable cytosol aminopeptidase
Q83EL7	KGUA_COXBU	Guanylate kinase
P48307	TFPI2_HUMAN	Tissue factor pathway inhibitor 2
Q1CC21	MALK_YERPA	Maltose/maltodextrin import ATP-binding protein MalK
A9SU70	U4976_PHYPA	UPF0497 membrane protein 6

Tabla Proteína

Cada tabla tiene un nombre, está estructurada en una o más columnas, y puede tener una o más restricciones asociadas a la misma.



Tablas: Tuplas y Columnas

AccNumber	Identificador	Descripción	
CHAR(6) PK	VARCHAR(25) NOT NULL	VARCHAR(4096)	
A1WWE5	ACP_HALHL	Acyl carrier protein	

- Cada columna tiene nombre, y un tipo de datos.
- Cada columna puede participar en una o varias restricciones.
- Las restricciones básicas de una columna son: de contenido nulo, de restricciones de contenido.
- Se puede asignar a una columna una expresión por omisión. Se emplea cuando se guarda una tupla en la que no se haya dado explícitamente un valor a esa columna.
- Una entrada de datos de una tabla es una tupla, y está compuesta por los valores asociados a cada columna de la tabla.
- En cada tupla, una columna puede tener asociado a lo sumo un valor.



Tablas: Tipos y Valores SQL

INTEGER 🔧, -2

CHAR SSKP

• VARCHAR GOLF

• BOOLEAN TRUE

• TIMESTAMP Fri Nov 21 18:51:39 CEST 2014

DATE 2013-11-29

• TIME 17:25:38

• NUMERIC 0.03156

• REAL >, 1415

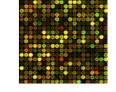
CLOBs

BLOBs

En un lugar de la Mancha de cuyo nombre no quiero acordarme vivía un hidalgo de los de espada y rocín, conocido como

NULL







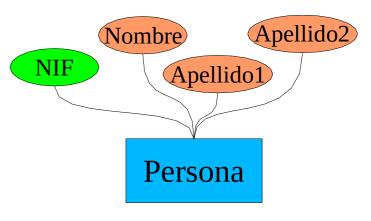
SQL: Creación de tablas

```
CREATE TABLE SWISSTABLE (
     id VARCHAR(10) NOT NULL,
     accnumber VARCHAR(7) NOT NULL,
     secuencia TEXT NOT NULL,
     molweight NUMERIC(8,2),
     description VARCHAR(255),
     PRIMARY KEY (accnumber),
     UNIQUE(id)
CREATE TABLE REL_SWISS_PDB (
     accnumber_r VARCHAR(7) NOT NULL,
     pdbcode VARCHAR(8) NOT NULL,
     FOREIGN KEY TOSWISS (accnumber_r) REFERENCES
          SWISSTABLE (accnumber)
          ON DELETE CASCADE ON UPDATE CASCADE,
     FOREIGN KEY TOPDB (pdbcode) REFERENCES
          PDB_TABLE (pdb_id)
          ON DELETE RESTRICT ON UPDATE CASCADE
```



Tabla: Restricciones

- Una restricción es una premisa que siempre se debe cumplir. Por ello, los datos almacenados en una tabla siempre deben cumplir todas las restricciones de dicha tabla.
- Existen varios tipos de restricciones
 - De columna (explicado anteriormente)
 - De clave única
 - De clave primaria
 - De clave externa
 - Otras...





Restricción de Clave Única

 Esta restricción se construye sobre una o más columnas, y obliga a que los valores asociados a esas columnas sean únicos. Por ejemplo:

(nombre, apellido1, apellido2)

podría definir una clave única, de forma que no pudiese haber dos personas con el mismo nombre y apellidos.

 Una tabla puede tener más de una restricción de clave única. Por ejemplo, una clave única sobre el NIF y otra sobre el número de pasaporte.



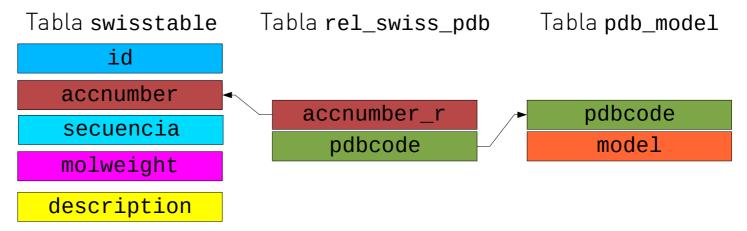
Restricción de Clave Primaria

- Este tipo de restricciones es similar en concepto a las de clave única. Adicionalmente, los valores que toman las columnas de la clave primaria en cada tupla se emplean para identificar dicha tupla de forma lógica.
- Sólo se puede definir una clave primaria por tabla. En caso de existir varios candidatos a clave primaria, lo más conveniente es elegir el más representativo para el contexto de uso.
 - Por ejemplo, para un coche, tanto la matrícula como el nº de bastidor se podrían emplear como clave primaria.



Restricción de Clave Externa

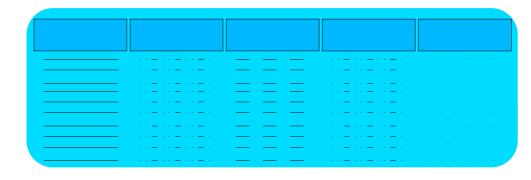
 Las restricciones de clave externa sirven para mantener la coherencia entre los datos almacenados en distintas tablas. Se establecen desde los campos de una tabla a los campos de clave primaria de otra.



Por ejemplo, una base de datos con la tabla swisstable y la tabla pdb_model, que relacionan sus contenidos a través de la tabla rel_swiss_pdb. Para mantener la coherencia, los cambios en el accnumber de alguna entrada de swisstable o bien estarán prohibidos, o bien provocarán un cambio automático en las entradas de rel_swiss_pdb con el mismo accnumber_r.



Borrado de tablas. Permisos



DROP TABLE REL_SWISS_PDB;

GRANT SELECT, INSERT, UPDATE, DELETE ON SWISSTABLE TO pepe;

REVOKE SELECT ON SWISSTABLE TO PUBLIC;



Manipulación de datos

 Una vez definida la estructura de la base de datos, podremos insertar, actualizar, borrar y consultar datos.

 De todas ellas, las consultas serán las operaciones más realizadas, tanto para recuperar información previamente almacenada, como para calcular estadísticas o extraer conclusiones de los datos almacenados.

 Un conjunto de operaciones de manipulación de datos se puede realizar en transacción, para garantizar la coherencia de las mismas.

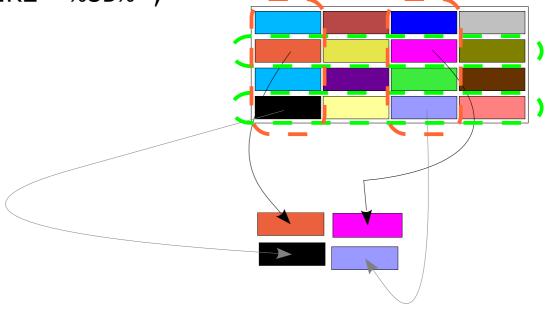


SQL: Recuperando datos (I)

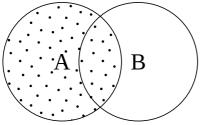
Consulta normal

SELECT p.pdbcode, s.id AS "Swissprot ID"
FROM rel_swiss_pdb p, swisstable s
WHERE p.accnumber = s.accnumber

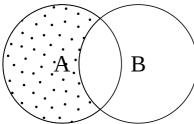
AND description LIKE '%3D%';



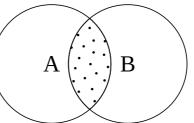
SQL: Recuperando datos (II) **SQL** Joins



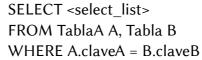
SELECT <select list> FROM TablaA A LEFT JOIN TablaB B ON A.claveA = B.claveB

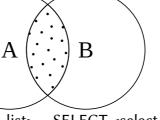


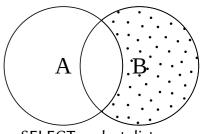
SELECT <select list> FROM TablaA A LEFT JOIN TablaB B ON A.claveA = B.claveB WHERE B.claveB IS NULL



SELECT <select list> FROM TablaA A INNER JOIN TablaB B ON A.claveA = B.claveB







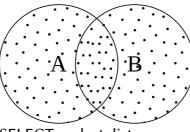
SELECT <select list>

RIGHT JOIN TablaB B

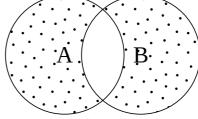
ON A.claveA = B.claveB

FROM TablaA A

SELECT <select list> FROM TablaA A RIGHT JOIN TablaB B ON A.claveA = B.claveB WHERE A.claveA IS NULL



SELECT <select list> FROM TablaA A FULL OUTER JOIN TablaB B ON A.claveA = B.claveB



SELECT <select list> FROM TablaA A FULL OUTER JOIN TablaB B ON A.claveA = B.claveB WHERE A.claveA IS NULL OR B.claveB IS NULL

(inspirado en http://commons.wikimedia.org/wiki/File:SQL Joins.svg)



SQL: Recuperando datos (III)

Consulta de agregación simple

SELECT COUNT(*)
FROM SWISSTABLE
WHERE LENGTH(secuencia)

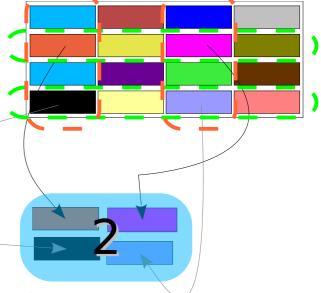
WHERE LENGTH(secuencia) > 100;

Consulta agregación con join

SELECT COUNT(*)

FROM rel_swiss_pdb p, swisstable s
WHERE p.accnumber_r = s.accnumber

AND description LIKE '%3D%';



SQL: Recuperando datos (IV)

Consulta de agregación ampliada

SELECT s.id, COUNT(p.pdbcode)

FROM rel_swiss_pdb p, swisstable s
WHERE p.accnumber_r = s.accnumber
AND description LIKE '%3D%')

GROUP BY 1;

Id	COUN	
Id_A	2	
ld_B	1	
ld C	3	

Id	Accnumber Secuencia Molweight Description					
Id_A		A	QWEF	38	Blah 3D	
ld_B		В	ADSFQ	174	3D Bleh	
ld_C		C	SGF	23	BI 3D ih	
ld_D		D	WEWH	229	Bloh	
ld_E		E	NMEGY	151	Bluh	
ld F		F	PEUUH	79	Jaia 3D 2	

Tabla swisstable

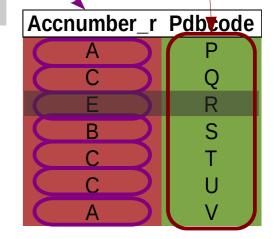


Tabla rel_swiss_pdb



SQL: Manipulación de datos

Inserción

Borrado

```
DELETE FROM SWISSTABLE
WHERE accnumber LIKE 'P98%';
```

Actualización

```
UPDATE SWISSTABLE SET
     molweight = molweight + 1.0
WHERE description IS NULL;
```



¿Cuál es el mejor SGBDR?

Si buscáis el mejor SGBDR, la respuesta es otra pregunta: ¿para qué lo queréis usar?

- En Bioinformática, tanto PostgreSQL como MySQL/MariaDB se han vuelto muy populares. Ello es debido a que pueden ser instalados prácticamente en cualquier plataforma hardware sin ningún coste adicional (la licencia de uso es gratuita), salvo el esfuerzo de instalarlo.
- El principal éxito de PostgreSQL: la simplicidad y muchas de las características, potencia y escalabilidad de los SGBDR de pago.
- El principal éxito de MySQL/MariaDB: su gran simplicidad y su velocidad de acceso para consultas sencillas.
- ¿Y SQLite? Al ser un gestor embebido no hay que disponer de un servidor dedicado. Por su rendimiento y bajos requisitos de memoria, se usa cada vez más, de forma general, en todo. Pero no es la implementación más correcta.



Interfaces de programación

- Toda base de datos suele estar rodeada de una serie de programas que consultan y mantienen los datos que alberga, enfocados al motivo por la que se creó.
- Según el lenguaje de programación en el que se encuentre escrito cada programa, habrá que usar uno u otro interfaz de acceso a la base de datos.
- No todos los interfaces están disponibles para todos los SGBDRs y plataformas.
- Interfaces clásicos son: ODBC, JDBC (Java), DBI (Perl y Ruby), ADO, DB-API (python), CREOLE (php), etc...



Diseño de una base de datos ¿Arte o Ciencia?

- El diseño de la base de datos influye tanto en qué se puede almacenar y consultar, como en los métodos de consulta.
- Existe multitud de herramientas para realizar el diseño a bajo y alto nivel de una base de datos. Adicionalmente, existen varias metodologías de diseño, que proporcionan las directrices básicas.
- El diseñador debe conocer tanto el dominio del problema, como el dominio de uso de la futura base de datos.



Recomendaciones de Diseño

- La base de datos tiene que tener una estructura con la complejidad necesaria: ni más ni menos.
- La base de datos tiene que ser funcional: servir para lo que se ha diseñado.
- El diseñador debe tomarse su tiempo para sopesar los pros y los contras del diseño que ha realizado. Es más fácil cambiar la estructura de una base de datos cuando no tiene datos :-)



Pasos a la hora de diseñar una base de datos relacional

- 1) Enumerar los conceptos que se quieren almacenar en la base de datos.
- 2) Clasificar esos conceptos en tablas o atributos de tabla.
- 3) Identificar las tablas que están relacionadas entre sí, la direccionalidad y cardinalidad.
- 4) Asignar cada concepto etiquetado como atributo a las tablas con las que estén relacionados.
- 5) Identificar qué atributos pueden actuar como claves únicas o primaria, y elegir la clave primaria.
- 6) Crear los atributos correspondientes a las claves externas en las tablas que están siendo apuntadas por otras. Esos atributos vienen de copiar los atributos etiquetados como clave primaria.
- 7) Ver si el esquema resultante hace lo que debe hacer. Si no, ir al paso 1.



Usuarios de una Base de Datos

 Los sistemas gestores de bases de datos cliente / servidor (y algunas embebidas) permiten tener usuarios con distintos privilegios de acceso a los contenidos.

 Los usuarios de una base de datos no están necesariamente ligados con los usuarios del sistema.

 Un 'administrador' crea los usuarios, y les otorga o deniega privilegios (operaciones que pueden realizar): crear, modificar o borrar una tabla; consultar, insertar, borrar o modificar los datos de una tabla; consultar o crear una vista; crear usuarios o grupos; otorgar privilegios; etc...



Referencias

- Prácticas: https://bbddmasterisciii.github.io/
- Manual de SQL de SQLite: http://www.sqlite.org/lang.html
- Manual de PostgreSQL 12.1: https://www.postgresql.org/docs/12/index.html
- MariaDB "Introduction to relational databases": https://mariadb.com/kb/en/mariadb/introduction-to-relational-databases/
- "Structured Query Language" wikibook: https://en.wikibooks.org/wiki/Structured_Query_Language
- Carpentry "Databases and SQL": https://swcarpentry.github.io/sql-novice-survey/
- "Mastering SQL", Martin Gruber, Ed. Sybex
- "SQL for Smarties", Joe Celko, Ed. Morgan Kaufmann