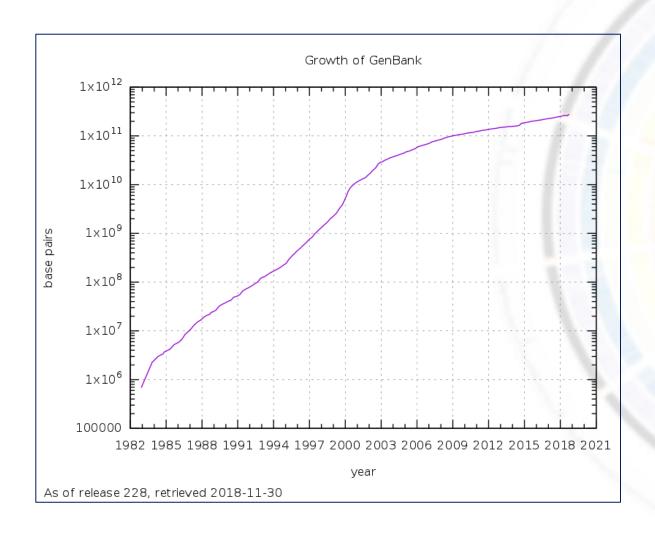
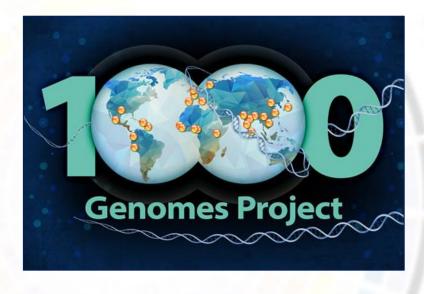
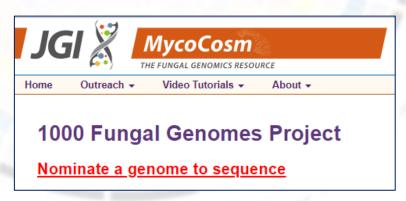
# Noções gerais de trabalho em ambiente Linux e em linha de comando

Dra Desirrê Petters-Vandresen

# Grande volume de dados disponíveis, em constante crescimento...





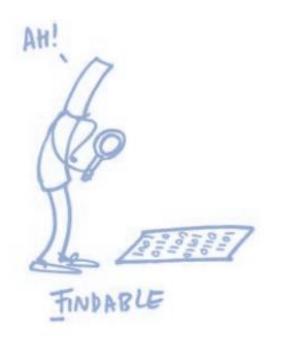


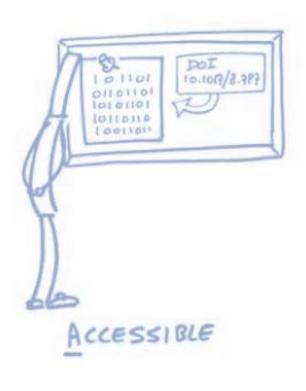
#### **Desafios**

- Como lidar com o crescente volume de dados que surge a partir das mais variadas técnicas e estudos?
- Como acessar, organizar, gerenciar e processar estes grandes conjuntos de dados?
- Como explorar totalmente o potencial dos conjuntos de dados, especialmente em situações de grande demanda computacional?
- Como comparar novos dados com estudos prévios e permitir que esses dados sejam comparados com estudos futuros?

## Princípios FAIR

FAIR DATA PRINCIPLES









## Findable / Localizáveis

- (Meta)dados devem ter identificadores globais, persistentes e identificáveis
- Dados devem ser descritos com metadados ricos
- (Meta)dados devem ser registrados e/ou indexados em recursos que permitam buscas
- Metadados devem especificar o identificador dos dados



#### Acessible / Acessíveis

 (Meta)dados devem recuperáveis pelos seus identificadores usando um protocolo de comunicação padronizado

 O protocolo deve ser aberto, gratuito e universalmente implementável



#### Acessible / Acessíveis

 O protocolo deve permitir procedimentos de autenticação e autorização quando necessário

 (Meta)dados devem ser acessíveis, mesmo quando os dados não estão mais disponíveis



## Interoperable / Interoperáveis

 (Meta)dados devem usar uma linguagem formal, acessível, compartilhada e amplamente aplicável para a representação do conhecimento

 (Meta)dados devem usar vocabulários que seguem os princípios FAIR

• (Meta)dados devem incluir referências qualificadas para outros (meta)dados



## Reusable / Reutilizáveis

 (Meta)dados devem ter atributos com pluralidade de precisão e serem relevantes

 (Meta)dados devem ser liberados com licenças de uso de dados claras e acessíveis



## Reusable / Reutilizáveis

 (Meta)dados devem estar associados à sua proveniência

 (Meta)dados devem estar alinhados com padrões relevantes ao seu domínio



D	Е
Jan	January
Feb	Febuary
Mar	Maruary
Apr	Apruary
May	Mayuary
Jun	Junuary
Jul	Juluary
Aug	Auguary
Sep	Sepuary
Oct	Octuary
Nov	Novuary
Dec	Decuary



jxf@mastodon.social @jxxf

Optimist: The glass is  $\frac{1}{2}$  full.

Pessimist: The glass is ½ empty.

**Excel:** The glass is January 2nd



#### **BMC Bioinformatics**



Correspondence

**Open Access** 

Mistaken Identifiers: Gene name errors can be introduced inadvertently when using Excel in bioinformatics

Barry R Zeeberg<sup>†1</sup>, Joseph Riss<sup>†2</sup>, David W Kane<sup>3</sup>, Kimberly J Bussey<sup>1</sup>, Edward Uchio<sup>4</sup>, W Marston Linehan<sup>4</sup>, J Carl Barrett<sup>2</sup> and John N Weinstein<sup>\*1</sup>

		2	¥ &.	ď		\$	À 4.	33 43			
	de la la co	- No. of the	of State of	ÿ	serie é	Series Constitution of the series of the ser	de Paris	Ş	Se	de la	got south
_	710	20	20		<b>*</b>				40	20	80
0	00			-	ex	cel.gene2dat					
<b>&gt;</b>	A	В	C	D	E	F	G	Н		J	K
1	APR-1	35885	1-Apr		OCT-1	36068	1-Oct		SEP2	36039	2-Sep
2	APR-2	35886	2-Apr		OCT-2	36069	2-0ct		SEP3	36040	3-Sep
3	APR-3	35887	3-Apr		OCT-3	36070	3-0ct		SEP4	36041	4-Sep
4	APR-4	35888	4-Apr		OCT-4	36071	4-0ct		SEP5	36042	5-Sep
5	APR-5	35889	5-Apr		OCT-6	36073	6-Oct		SEP6	36043	6-Sep
6	DEC-1	36129	1-Dec		OCT1	36068	1-0ct		SEPT1	36038	1-Sep
7	DEC-2	36130	2-Dec		OCT11	36078	11-0ct		SEPT2	36039	2-Sep
_	The state of the s										

#### Genome Biology

COMMENT Open Access

## Gene name errors are widespread in the scientific literature



Mark Ziemann<sup>1</sup>, Yotam Eren<sup>1,2</sup> and Assam El-Osta<sup>1,3\*</sup>

The problem of Excel software (Microsoft Corp., Redmond, WA, USA) inadvertently converting gene symbols to dates and floating-point numbers was originally described in 2004 [1]. For example, gene symbols such as SEPT2 (Septin 2) and MARCH1 [Membrane-Associated Ring Finger (C3HC4) 1, E3 Ubiquitin Protein Ligase] are converted by default to '2-Sep' and '1-Mar', respectively. Furthermore, RIKEN identifiers were described to be automatically converted to floating point numbers (i.e. from accession '2310009E13' to '2.31E+13'). Since that report, we have uncovered further instances where gene symbols were converted to dates in supplementary data of recently published papers (e.g. 'SEPT2' converted to '2006/09/02'). This suggests that gene name errors continue to be a problem in supplementary files accompanying articles. Inadvertent gene symbol conversion is problematic because these supplementary files are an important resource in the genomics community that are frequently reused. Our aim here is to raise awareness of the problem.

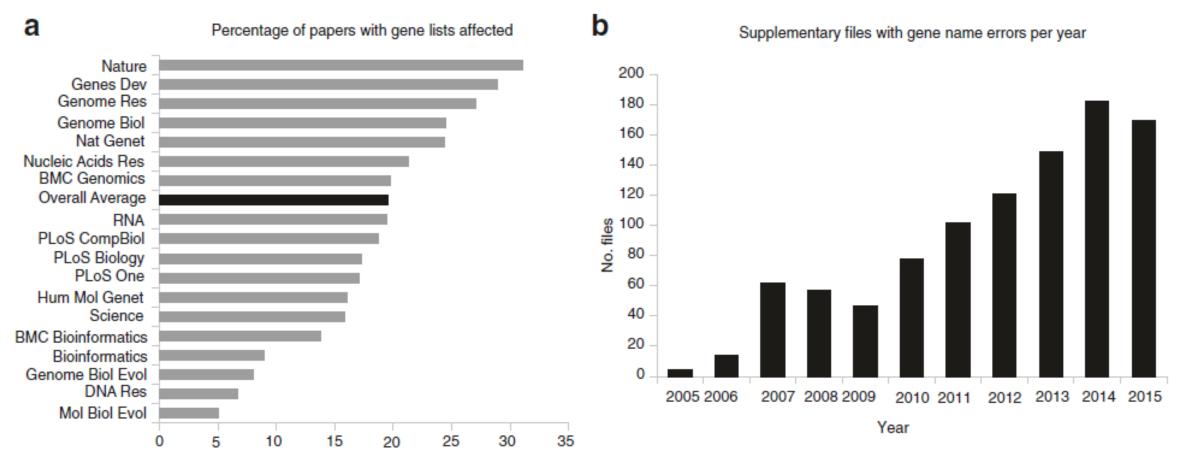


Fig. 1 Prevalence of gene name errors in supplementary Excel files. a Percentage of published papers with supplementary gene lists in Excel files affected by gene name errors. b Increase in gene name errors by year





The Microsoft Word doc after you move one image.







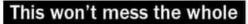








This won't mess the whole document up, right?





## Flat text file (texto simples)

- Informação armazenada em arquivo de texto simples
- Texto é estruturado (em função do tipo de dado armazenado)
- Vantagens:
  - Maior legibilidade
  - Possibilidade de acesso automático (especialmente importante no contexto de scripts e análises)
  - Fácil leitura por humanos e máquinas
- Exemplos: CSV, TXT, FASTA, GenBank, GFF3

## Flat text file (texto simples)

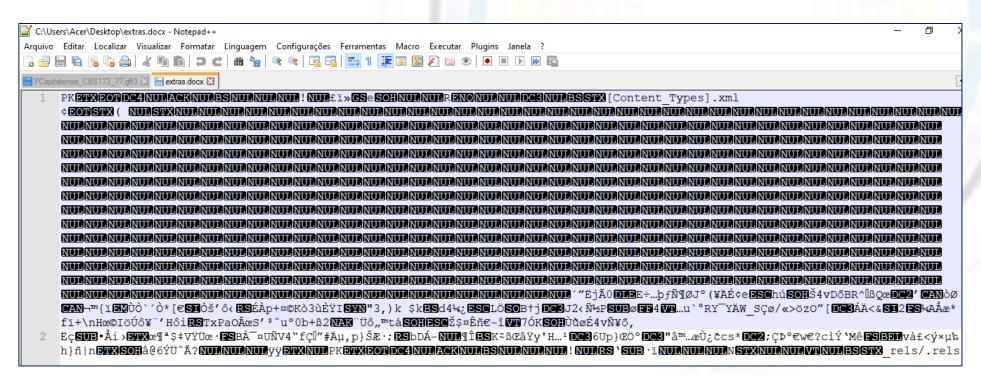
```
C:\Users\Acer\Documents\Google Drive\(2011-2018) - BioGeMM\(2018-2022) - PhD\Gene Annotation\GFF3 files from EVM\PCapitalensis_CBS173_77.qff3 - Notepad++
Arquivo Editar Localizar Visualizar Formatar Linguagem Configurações Ferramentas Macro Executar Plugins Janela ?
7) 🚅 🔚 🖺 🥦 🦓 🦓 🖟 | 🕹 🖍 🏗 🏗 | 🕽 cc | 🚓 🐪 | 🤏 🔍 🔍 📑 📑 1 | 🍱 🗷 💹 🖊 🗀 📀 | 🗉 🗉 🕟
PCapitalensis_CBS173_77.gff3 🔀
                                                               ID=evm.TU.scaffold 10.1; Name=EVM%20prediction%20scaffold 10.1
     scaffold 10 EVM gene
     scaffold 10 EVM mRNA
                                2697
      ID=evm.model.scaffold 10.1;Parent=evm.TU.scaffold 10.1;Name=EVM%20prediction%20scaffold 10.1
     scaffold 10 EVM exon
                                2697
                                                               ID=evm.model.scaffold 10.1.exon1; Parent=evm.model.scaffold 10.1
                                                          ID=cds.evm.model.scaffold 10.1; Parent=evm.model.scaffold 10.1
     scaffold 10 EVM CDS 2697
     scaffold 10 EVM exon
                                                               ID=evm.model.scaffold 10.1.exon2; Parent=evm.model.scaffold 10.1
                                3145
                                          . + 2 ID=cds.evm.model.scaffold 10.1; Parent=evm.model.scaffold 10.1
     scaffold 10 EVM CDS 3145
                                                               ID=evm.model.scaffold 10.1.exon3; Parent=evm.model.scaffold 10.1
      scaffold 10 EVM exon
                                         4438 . + .
                                4068
                                                          ID=cds.evm.model.scaffold 10.1; Parent=evm.model.scaffold 10.1
      scaffold 10 EVM CDS 4068
                                    4438
```

PCapitalensis_CBS173_77.gff3 - Bloco de Notas —									
Arquivo Editar	ormatar E	Exibir Ajuda							
scaffold_10	EVM	gene	2697	4438		+		ID=evm.TU.scaffold_10.1;Name=EVM%20prediction%20scaffold_10.1	
scaffold_10	EVM	mRNA	2697	4438		+		ID=evm.model.scaffold_10.1;Parent=evm.TU.scaffold_10.1;Name=EVM%20prediction	
%20scaffold_1	0.1								
scaffold_10	EVM	exon	2697	3078		+		<pre>ID=evm.model.scaffold_10.1.exon1;Parent=evm.model.scaffold_10.1</pre>	
scaffold_10	EVM	CDS	2697	3078		+	0	<pre>ID=cds.evm.model.scaffold_10.1;Parent=evm.model.scaffold_10.1</pre>	
scaffold_10	EVM	exon	3145	4023		+		<pre>ID=evm.model.scaffold_10.1.exon2;Parent=evm.model.scaffold_10.1</pre>	
scaffold_10	EVM	CDS	3145	4023		+	2	ID=cds.evm.model.scaffold_10.1;Parent=evm.model.scaffold_10.1	
scaffold_10	EVM	exon	4068	4438		+		<pre>ID=evm.model.scaffold_10.1.exon3;Parent=evm.model.scaffold_10.1</pre>	
scaffold_10	EVM	CDS	4068	4438		+	2	ID=cds.evm.model.scaffold_10.1;Parent=evm.model.scaffold_10.1	

## E se não for um arquivo de texto simples?

 Contém outras informações além do texto simples que exigem o uso de softwares específicos para leitura

• Aplicabilidade reduzida no contexto de bioinformática



## Formato FASTA

- Extensões: .fasta, .fas, .fna, .ffn, .faa, .frn, .fa
- Linha 1: identificador da sequência após o sinal de maior (>)
- Linha 2 até que o próximo sinal de maior seja encontrado: sequência
- Pode conter sequências de DNA ou proteínas
  - 1 >scaffold\_1
  - 2 CCATGGCTGTCTTGCGATTGTCCAGGGCAGTCTTGACAGCAGGGGCCAAGTTGCGCCGCCGCCCGTCCCTT
  - 3 CTCAGTGTCTTCGAAGTTGAGGGAGACGATGACCCTGGTGTTGATGGGACTGTTGGTGTTCGCCGTGGAA
  - 4 GCTTCGTCCTTCTTGCGCTTGGAGCCGGCCGACGCCGCCTTCTTGCGCTTGGCAATCTCCTCGGGATGCG
  - 5 TGAGAATCTCTTCAATTTTTGCCATGAAGGCGTTCTCTTTCTCGATTTACGAGCGAACTTCCTCGTAGAA
  - 6 TGCCGTGGCTACGCTTGACTCGGTCTTGAAGATGTTGTGGAGAGCCTTGCGGGTGGTCGTTCACGACGAA
  - 7 GATGCAGAGAGGGCGCGGTCGTGGTTCTGCGCGATGGCGTTGCGGGTTGTCTTCGTCTTGTTGAACCAGT
  - 8 TGCCGAACTGAATTACGTCGTCTTTCTTTGCCATCTTTTCCTCGGAGCTCATCGCTTCGATGGTGGCGGC
  - 9 GTCATCCTTGCGCTTTTCGGCGGTCTCGTTTTTCTTCGTCTGGGTGACTTGCAGAAGTGCCTTTGCCCTC
  - 10 AAAGCACTCATTCGGCGACTCTCCTGTTCCGCATCGACGACCTGGCGCCCATTCCTGTGACGCATCGCTCA

## Formato GenBank

• Extensão: .gbk

- Header (Cabeçalho)
  - Código de acesso
  - Organismo
  - Publicações associadas

```
LOCUS
                NC 045512
                                        29903 bp ss-RNA
                                                             linear
                                                                      VRL 18-JUL-2020
   DEFINITION
                Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 isolate Wuhan-Hu-1,
                complete genome.
                NC 045512
   ACCESSION
   VERSION
                NC 045512.2
                BioProject: PRJNA485481
   DBLINK
   KEYWORDS
                RefSeq.
                Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2)
   SOURCE
                Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2
     ORGANISM
                Viruses; Riboviria; Orthornavirae; Pisuviricota; Pisoniviricetes;
                Nidovirales; Cornidovirineae; Coronaviridae; Orthocoronavirinae;
                Betacoronavirus; Sarbecovirus.
   REFERENCE
                1 (bases 1 to 29903)
     AUTHORS
                Wu, F., Zhao, S., Yu, B., Chen, Y.M., Wang, W., Song, Z.G., Hu, Y.,
15
                Tao, Z.W., Tian, J.H., Pei, Y.Y., Yuan, M.L., Zhang, Y.L., Dai, F.H.,
16
                Liu, Y., Wang, Q.M., Zheng, J.J., Xu, L., Holmes, E.C. and Zhang, Y.Z.
                A new coronavirus associated with human respiratory disease in
     TITLE
                China
                Nature 579 (7798), 265-269 (2020)
     JOURNAL
                32015508
      PUBMED
                Erratum: [Nature. 2020 Apr; 580 (7803): E7. PMID: 32296181]
     REMARK
```

## Formato GenBank

- Extensão: .gbk
- Feature Table (Tabela de características)
  - Informações sobre o indivíduo sequenciado
  - Anotações na sequência: gene, mRNA, CDS, regiões 5' e 3' UTR, sequência de aminoácidos de proteínas presentes na sequência, domínios conservados

72	FEATURES	Logation/Opelifions
		Location/Qualifiers
73	source	129903
74		/organism="Severe acute respiratory syndrome coronavirus
75		2"
76		/mol_type="genomic RNA"
77		/isolate="Wuhan-Hu-1"
78		/host="Homo sapiens"
79		/db_xref="taxon:2697049"
80		/country="China"
81		/collection date="Dec-2019"
82	5'UTR	1265
83	gene	26621555
84		/gene="ORF1ab"
85		/locus tag="GU280 gp01"
86		/db xref="GeneID:43740578"
87	CDS	join(26613468,1346821555)
88		/gene="ORF1ab"
89		/locus tag="GU280 gp01"
90		/ribosomal slippage
91		/note="pplab; translated by -1 ribosomal frameshift"
92		/codon start=1
93		/product="ORF1ab polyprotein"
94		/protein id="YP 009724389.1"
95		/db xref="GeneID:43740578"
96		/translation="MESLVPGFNEKTHVQLSLPVLQVRDVLVRGFGDSVEEVLSEARQ
97		HLKDGTCGLVEVEKGVLPQLEQPYVFIKRSDARTAPHGHVMVELVAELEGIQYGRSGE
98		TLGVLVPHVGEIPVAYRKVLLRKNGNKGAGGHSYGADLKSFDLGDELGTDPYEDFQEN
99		~
		WNTKHSSGVTRELMRELNGGAYTRYVDNNFCGPDGYPLECIKDLLARAGKASCTLSEQ
100		LDFIDTKRGVYCCREHEHEIAWYTERSEKSYELQTPFEIKLAKKFDTFNGECPNFVFP
101		LNSIIKTIQPRVEKKKLDGFMGRIRSVYPVASPNECNQMCLSTLMKCDHCGETSWQTG

## Formato GenBank

• Extensão: .gbk

#### Origin

 Sequência de DNA ou proteína propriamente dita

#### Final do arquivo

Sempre termina com "//"

```
ORIGIN
691
             1 attaaaggtt tataccttcc caggtaacaa accaaccaac tttcgatctc ttgtagatct
692
            61 gttctctaaa cgaactttaa aatctgtgtg gctgtcactc ggctgcatgc ttagtgcact
693
           121 cacqcaqtat aattaataac taattactqt cqttqacaqq acacqaqtaa ctcqtctatc
694
           181 ttctgcaggc tgcttacggt ttcgtccgtg ttgcagccga tcatcagcac atctaggttt
695
           241 cgtccgggtg tgaccgaaag gtaagatgga gagccttgtc cctggtttca acgagaaaac
696
           301 acacgtccaa ctcagtttgc ctgttttaca ggttcgcgac gtgctcgtac gtggctttgg
697
           361 agactccgtg gaggaggtct tatcagaggc acgtcaacat cttaaagatg gcacttgtgg
698
           421 cttagtagaa gttgaaaaag gcgttttgcc tcaacttgaa cagccctatg tgttcatcaa
699
           481 acgttcggat gctcgaactg cacctcatgg tcatgttatg gttgagctgg tagcagaact
700
           541 cgaaggcatt cagtacggtc gtagtggtga gacacttggt gtccttgtcc ctcatgtggg
```

```
1179
          29281 catcaaattq qatqacaaaq atccaaattt caaaqatcaa qtcattttqc tqaataaqca
1180
          29341 tattgacgca tacaaaacat tcccaccaac agagcctaaa aaggacaaaa agaagaaggc
1181
          29401 tgatgaaact caagccttac cgcagagaca gaagaaacag caaactgtga ctcttcttcc
1182
          29461 tgctgcagat ttggatgatt tctccaaaca attgcaacaa tccatgagca gtgctgactc
1183
          29521 aactcaggcc taaactcatg cagaccacac aaggcagatg ggctatataa acgttttcgc
1184
          29581 ttttccgttt acgatatata gtctactctt gtgcagaatg aattctcgta actacatagc
1185
          29641 acaagtagat gtagttaact ttaatctcac atagcaatct ttaatcagtg tgtaacatta
1186
          29701 gggaggactt gaaagagcca ccacattttc accgaggcca cgcggagtac gatcgagtgt
1187
          29761 acagtgaaca atgctaggga gagctgccta tatggaagag ccctaatgtg taaaattaat
1188
          29821 tttagtagtg ctatccccat gtgattttaa tagcttctta ggagaatgac aaaaaaaaa
1189
          29881 aaaaaaaaaa aaaaaaaaaa aaa
1190
1191
```

## Sugestões – Editores de Texto



## Por que trabalhar com softwares livres?

- Possibilidades para o usuário:
  - Executar o software para qualquer propósito
  - Estudar o software e adaptar conforme necessidades
  - Redistribuir (mantendo a configuração original)
  - Modificar e redistribuir