Technische documentatie

Door Dyogo Borst, Richard Jansen, LysanneRosaria en Roel van de Wiel

Projectgroep 1

Klas Bi1A

Docent E. Kok

Inhoud

- Inleiding
- Werking van de applicatie
- Software architectuur
- Texstscripts en resultaten
- Referenties

Inleiding

Het doel van onze web-applicatie is dat je aan de hand van een van de sequenties het desbetreffende BLAST-resultaat kan op halen uit onze database. Dit is zeer handig om snel van een sequentie de desbetreffende resultaten op te zoeken.

Het verslag is geschreven voor mensen die niet zo veel van informatica snappen en dus m.b.v. deze handleiding de database zouden kunnen gebruiken. Ook zit er een stuk bij in het verslag wat advies geeft hoe de server onderhouden moet worden en wat de systeemeisen zijn.

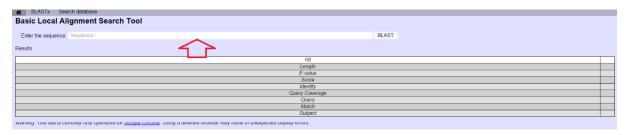
Werking van de applicatie

Voer onderstaande URL in:

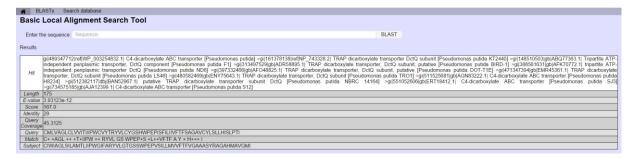
http://ithurtswhenip.nl:666/pg1/blast.psp



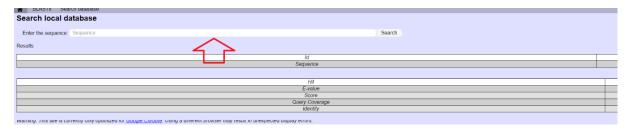
Als u op het kopje BLASTx drukt komt u op onderstaande pagina waarin je een BLAST uit kunt voeren zoals u hieronder kunt zien.



Voer in de balk de sequentie in, hierna zult u een poosje moeten wachten en krijgt u het volgende resultaat



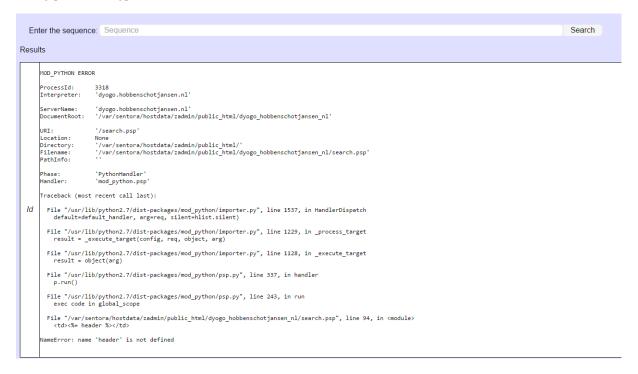
Als u een sequentie heeft en u wilt zien of hij in onze database staat en wat voor waardes deze heeft ga dan naar de "Search Database" optie. Je komt op onderstaande pagina terecht en voer in de zoekbalk de sequentie in.



Bij een Juist resultaat krijgt u dit:



En bij geen hit krijgt u dit:



Deze error zouden we eigenlijk nog met exception handling weg kunnen werken.

Sofwarearchitectuur

SearchRow1.py

Input main

Een input in de vorm van een sequentie, accession-code of een woord in de parameter invoer. Invoer heeft een default a die global is zodat het script werkt zonder client die input invoert.

Process main

Aanroepen van de functie reqex met het variabel invoer erin. Exceptionhandling.

Output main

Alleen als er in het programma en fout optreed.

Input regex

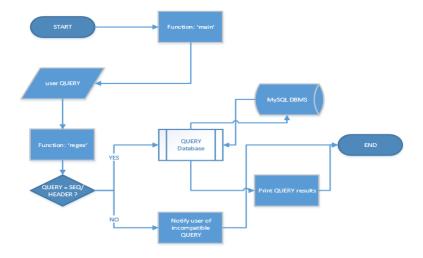
Een input in de vorm van een sequentie, accession-code of een woord in de parameter zoek.

Process regex

Dmv conditionele controle en regular expressions bepalen of zoek een sequentie, accession-code of een woord is. Is dit niet het geval, dan wordt er een melding gegeven. Is zoek een sequentie, wordt het opgezocht in de kolom "nucleotide-sequence" in de database. Is het er iets gevonden, dan worden de eerste resultaten uit deze rij terug gegeven. Is er niks gevonden dan zorgt dit voor een melding. Is zoek een accession-code, wordt dit opgezocht in de kolommen "seq-id" en "result(1-10)-accession-code" in de database. Is het er iets gevonden, dan worden de eerste resultaten uit deze rij terug gegeven. Is er niks gevonden dan zorgt dit voor een melding. Is zoek een woord, wordt dit opgezocht kolommen "result(1-10)-accession-code" in de database. Is het er iets gevonden, dan worden de eerste resultaten uit deze rij terug gegeven. Is er niks gevonden dan zorgt dit voor een melding.

Output regex

Melding wanneer input client niet voldoet aan sequentie, accession-code of woord eisen. Melding wanneer input niet in de database gevonden is.



Singleblast.py

Input main

Eensequentie seq eneen action "sb" - Sequence Blast of "csb" - Complement Sequence Blast

Process main

Input action bekijken en bepalen welke functie er vervolgens aangeroepen moet worden, andere soort action wordt opgevangen met een melding en daarnaast staat in deze functie ook de exceptionhandling voor errors die tijdens het runnen van het programma kunnen ontstaan. "sb" roept blastOld aan met seq, "csb" roept blastNew aan met seq.

Output main

Melding bij een andere action dan "sb" of "csb" Meldingen bij errors door de exception handling.

Input blastOld

En sequentie in de parameter old. Main stopt hier het variabel seg in.

Process blastOld

Aanroepen van de functie checkdb met variabel old erin.

Output blastOld

Niets.

Input blastNew

Eensequentie in parameter old. Main stopt hier het variabel seg in.

Process blastNew

Aanroepen van de functie toComplement met variabel old erin. List geretourneerd uit deze functie stoppen in variabel Complement. Vervolgens aanroepen van turnAround met variabel complement erin. String geretourneerd uit deze functiestoppen in variabel new. Aanroepen functie checkdb met argument new erin.

Output blastNew

Weergave van de complementair omgedraaide sequentie.

Input toComplement

Een sequentie in parameter reverse. BlastNew stopt hier het variabel old in.

Process toComplement

lijst seqF maken met de complementaire sequentie waarbij iedere nucleotide een item in de lijst is. A wordt T, T wordt A, G wordt C en C wordt G.

Output toComplement

retourneerd de lijst seqF naar blastNew.

Input turnAround

Eensequentie in parameter list. BlastNew stopt hier het variabel complement in.

Process turnAround

Dmv list wordt per item vanaf de achterste een string f aangevuld. Hierdoor ontstaat in string f de omgekeerde volgorde van de list. Steeds laatste nucleotide uit list in een nieuwe string f zetten om uiteindelijk de omgekeerde list sequentie in f te hebben staan.

Output turnAround

retourneerd de string naar blastNew.

Input checkdb

Een sequentie in parameter zoek. BlastNew stopt hier het variabel new in, blastOld het variabel old.

Process checkdb

De deze functie wordt er ten eerste er bepaald hoeveel rijen er al in de database staan die overeenkomen met een seq id dat de naam seqwebapp bevat, dit komt in variabel count. Met een regular expression wordt gecontroleerd of het wel echt een DNA sequentie is. Is dit niet zo levert dit een melding op. Is dit wel het geval, wordt de sequentie opgezocht in de database. Staat het in de database, verschijnt er een melding. Staat het niet in de database, dan wordt de functie blast aangeroepen met de variabelen zoek en count erin.

Output checkdb

Sql querys om te controleren. Melding wanneer sequentie geen DNA is. Melding wanneer sequentie al in database staan. Aangeven dat blast begint.

Input blast

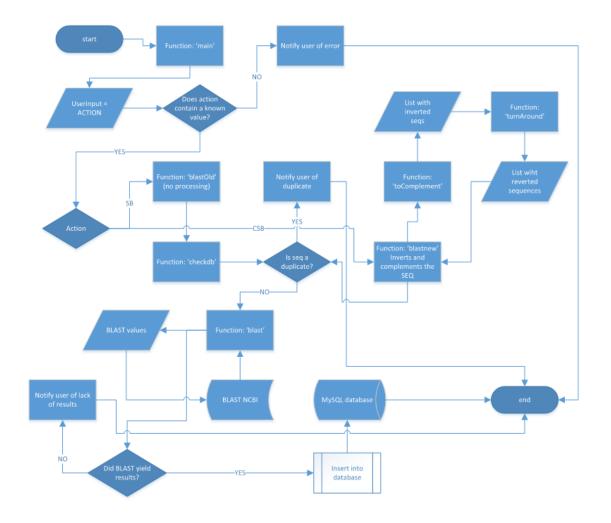
Een sequentie in parameter seq, een aantal in parameter count. Checkdb stopt hier het variabel zoek en count in.

Process blast

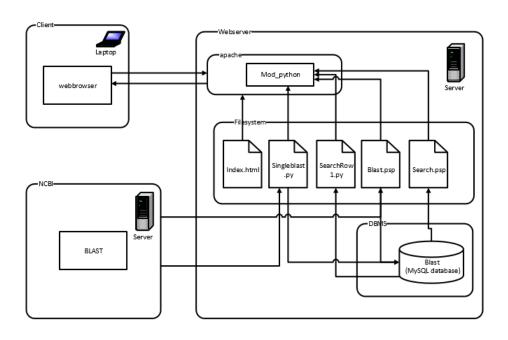
Dmv de modules NCBIWWW en NCBIXML uit Bio.Blast kan een blastx worden uitgevoerd tegen de nr database, e-value threshold van 0.001, score-matrix BLOSUM62. Uit de xml output hiervan worden interessante waarden gehaald en daarmee wordt de database geupdate.

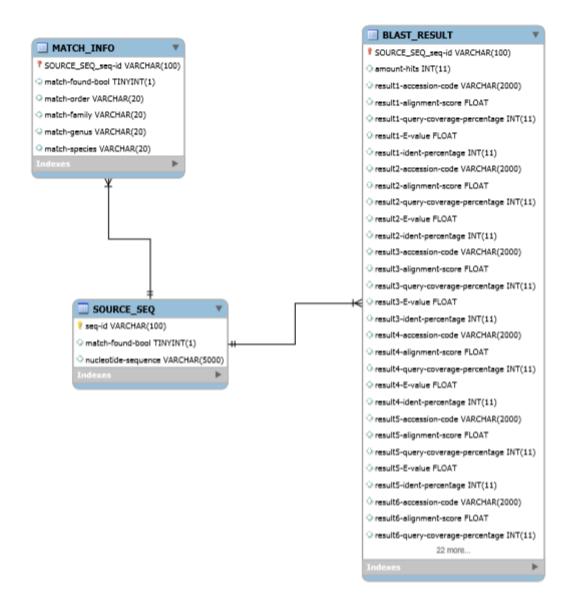
Output blast

Niets.



Schematische tekening





SOURCE_SEQ

- Seq-id (header van de reads, om sequentie en resultaten te identificeren)
- Match-found-bool (Boolean om de sequenties met resultaat makkelijk te filteren)
- Nucleotide-sequence (bevat de reads van het sequencen)

BLAST RESULT

- SOURCE_SEQ_seq-id (foreignkey die verwijst naar de seq-id in de SOURCE_SEQ table)
- amount-hits (integer met het aantal gevonden resultaten per sequence)
- result(1-10) (colommen met daarin de resultaten van het blastscript)

MATCH INFO

• Heeft nog geen praktisch nut, is een idee voor in de toekomst

Testscripts en resultaten

STAP	Instructie	Verwacht resultaat	Feitelijk resultaat	Opmerking
1	Ga naar dyogo.hobbenschotjansen.nl en ga naar Search database, voer "ATCG" in.	Je krijgt een hit	Klopt	Hij geeft maar 1 sequence aan terwijl het er waarschijnlijk meer kunnen zijn
2	Voer "atcg" in.	Je krijgt een hit, of een error.	Een hit	Bij het zoeken maakt het niet uit of je grote of kleine letters gebruikt
3	Voer "FCTK" in.	Een error of foutmelding	EenMod_Python error	Dit kan nog beter afgevangen worden met exception handling.
4	Ga naar de BLASTx pagina en voer een sequentie van de database in	Je krijgt een uitslag terug	Klopt	Alle resultaten kloppen
5	Voer nu een gedeelte van een sequentie uit de database terug	Je krijgt een uitslag of een error	Je krijgt een uitslag terug	Het heeft het zelfde resultaat als dat ik de sequentie helemaal zou blasten

Referenties

Oracle (MySQL) (z.d.). MySQL 5.5 Reference Manual. Geraadpleegd voor het laatst op 15 Juni 2015, van http://dev.mysql.com/doc/refman/5.5/en/

Python (Laatst geupdate, 27 Mei 2015). Python 2.7.10 documentation. Geraadpleegd voor het laatst op 22 Juni 2015, van https://docs.python.org/2/

W3schools (z.d.). HTML Element Reference. Geraadpleegd voor het laatst op 21 Juni 2015, van http://www.w3schools.com/tags/

BLAST (z.d.). BLAST documentation. Geraadpleegd voor het laatst op 22 Juni 2015, van http://blast.ncbi.nlm.nih.gov/blast/Blast.cgi?CMD=Web&PAGE_TYPE=BlastDocs