## Орг. вопросы

- Сайт http://intbio.org/bioinf2018
- **Вводный опросник** – дедлайн 19 февраля 23:59.
- **Форма отчетности:** дифф. зачет с оценкой (!)
- **Контроль успеваемости**: посещение всех лекций + онлайн контрольные работы + вводный опросник = возможность получить отл. и зачет автомат.
- Пропуск лекции без ув. причины, невыполнение работ в срок = оценка не выше 4 баллов.
- **Контроль посещаемости** – способы будут меняться.

## Контроль посещаемости сегодня

Заполнить форму по адресу
**http://intbio.org/2**
Возможность закрывается в 10:50!

либо
Записаться в список на перерыве

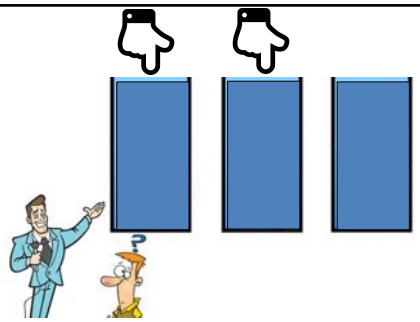
# ВВЕДЕНИЕ В БИОИНФОРМАТИКУ
# Лекция №2

Природа, передача и хранение информации. Базы данных. Биологические БД. Базы данных NCBI.

Алексей Константинович Шайтан, к.ф.-м.н.

Сайт курса: http://intbio.org/bioinf2018

19 февраля 2018



- В результате игрок получает **0.67 бита информации**
- Если бы ведущий открыл дверь в самом начале – только **0.58 бита информации**

https://en.wikipedia.org/wiki/Monty_Hall_problem

## Природа информации

## Информация

ИНФОРМАЦИЯ, 1. Сведения об окружающем мире и протекающих в нем процессах, воспринимаемые человеком или специальным устройством.


… универсального определения информации не только нет, но и быть не может из-за широты этого понятия.

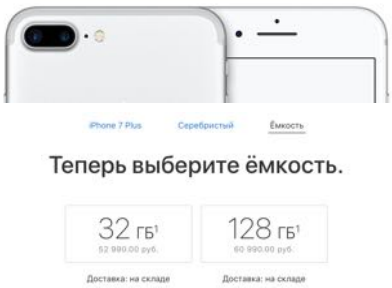
Н.Н. Моисеев

Information is information, not matter or energy.

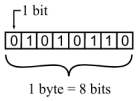
**Norbert Wiener**

http://www.aselibrary.ru/press_center/journal/irr/2007/number_3/number_3_6/number_3_6571/

# Информация



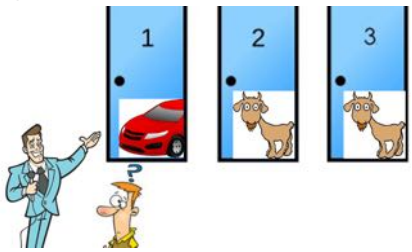

# Измерение информации




| | Измерения в байтах | | | |
|---|---|---|---|---|
| ГОСТ 8.417—2002 | | | Приставки СИ | |
| Название | Обозначение | Степень | Название | Степень |
| байт | Б | $10^0$ | - | $10^0$ |
| килобайт | кбайт | $10^3$ | кило- | $10^3$ |
| мегабайт | Мбайт | $10^6$ | мега- | $10^6$ |
| гигабайт | Гбайт | $10^9$ | гига- | $10^9$ |
| терабайт | Тбайт | $10^{12}$ | тера- | $10^{12}$ |
| петабайт | Пбайт | $10^{15}$ | пета- | $10^{15}$ |
| эксабайт | Эбайт | $10^{18}$ | экса- | $10^{18}$ |
| зеттабайт | Збайт | $10^{21}$ | зетта- | $10^{21}$ |
| иоттабайт | Ибайт | $10^{24}$ | иотта- | $10^{24}$ |

| Decimal | Binary |
|---|---|
| 0 | 0000 |
| 1 | 0001 |
| 2 | 0010 |
| 3 | 0011 |
| 4 | 0100 |
| 5 | 0101 |
| 6 | 0110 |
| 7 | 0111 |
| 8 | 1000 |
| 9 | 1001 |

Вероятность того, что машина за этой дверью: 1/3 1/3 1/3




- Сколько информации нужно, чтобы закодировать положении машины?

**1.5849625007211563... бит**

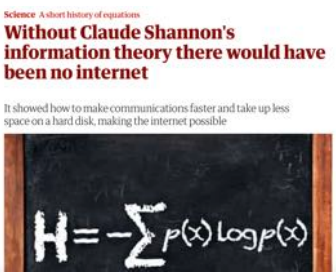
# Теория информации

"the father of information theory"

**Claude Elwood Shannon**
(April 30, 1916 – February 24, 2001)

https://youtu.be/z2Whj_nL-x8

# Теория информации





Введена мера информации(!)

кг, метр, секунда + БИТ

1948

https://www.khanacademy.org/computing/computer-science/informationtheory/info-theory/v/intro-information-theor

# Информационная энтропия

Клод Шеннон предположил, что прирост информации равен утраченной неопределённости, и задал требования к её измерению:

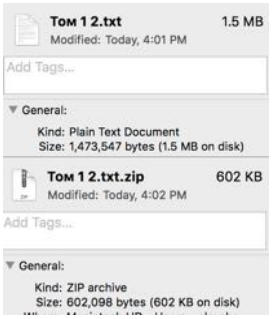
1.мера должна быть непрерывной; то есть изменение значения величины вероятности на малую величину должно вызывать малое результирующее изменение функции;

2.в случае, когда все варианты (буквы в приведённом примере) равновероятны, увеличение количества вариантов (букв) должно всегда увеличивать значение функции;

3.должна быть возможность сделать выбор (в нашем примере букв) в два шага, в которых значение функции конечного результата должно являться суммой функций промежуточных результатов.

$H=-\sum p(x)\log p(x)$

## Сжатие информации


Буква в тексте не независимы – одни встречаются чаще других в разных контекстах.

## Сжатие информации

### Кодирование длин серий

`WWWWWWWWWWWWBWWWWWWWWWWWWBBBWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWBWWWWWWWWWWWWWW`

Посчитаем количество повторяющихся символов:

1. 12 символов «W»;
2. 1 символ «B»;
3. 12 символов «W»;
4. 3 символа «B»;
5. 24 символа «W»;
6. 1 символ «B»;
7. 14 символов «W».

Итого найдено 7 серий. Заменим серии на число повторов и сам повторяющийся символ:

`12W1B12W3B24W1B14W`

https://ru.wikipedia.org/wiki/Кодирование_длин_серий

## Информационная энтропия

$$H = -\sum p(x) \log p(x)$$


$$H = -\frac{1}{3}log_2\frac{1}{3} - \frac{1}{3}log_2\frac{1}{3} - \frac{1}{3}log_2\frac{1}{3} = -log_2\frac{1}{3}$$

**1.5849625007211563... бит**

## Энтропия

Информационная и физическая энтропии имеют глубинную связь

$$H \stackrel{\text{def}}{=} \int P(\ln P)\, d^3v = \langle \ln P \rangle$$

В термодинамике и кинетической теории, H - теорема, полученная Больцманом в 1872 году, описывает неубывания энтропии идеального газа в необратимых процессах, исходя из уравнения Больцмана.

$$S \stackrel{\text{def}}{=} -NkH,$$

Ludwig Eduard Boltzmann

https://ru.wikipedia.org/wiki/H-теорема

## Передача информации

## Передача информации

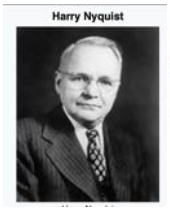
- Комплексная область: **теоретические**, **практические**, физические аспекты
- Вопросы сжатия данных
- Вопросы надежности
- Вопросы **шифрования и защиты данных** (особенно в медицине и биологии)

https://en.wikipedia.org/wiki/The_Imitation_Game

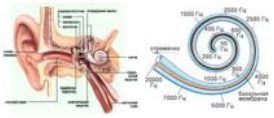
# Передача информации

**Связь частоты сигнала и пропускной способности**


1908 - 2005




1889 – 1976



**Теорема Котельникова-(Найквиста-Шенона)**

«любую функцию F(t), состоящую из частот от 0 до f, можно непрерывно передавать с любой точностью при помощи чисел, следующих друг за другом через 1/(2f) секунд

44.1 кГц – частота дискретизации при записи звука

https://ru.wikipedia.org/wiki/Теорема_Котельникова

# Передача информации

**Связь частоты сигнала и пропускной способности**


1888 – 1970

$$C = B\log_2\left(1+\frac{S}{N}\right),$$

где

$C$ — пропускная способность канала, бит/с;
$B$ — полоса пропускания канала, Гц;
$S$ — полная мощность сигнала над полосой пропускания, Вт или В²;
$N$ — полная шумовая мощность над полосой пропускания, Вт или В²;
$S/N$ — отношение мощности сигнала к шуму (SNR).

Теорема Шеннона-Хартли

https://ru.wikipedia.org/wiki/Теорема_Шеннона_—_Хартли

# Передача информации

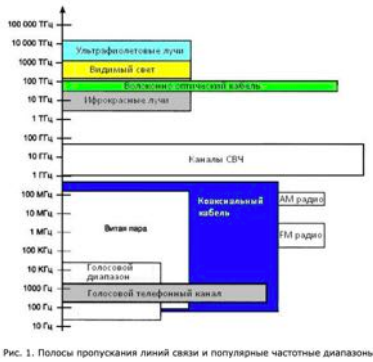



Рис. 1. Полосы пропускания линий связи и популярные частотные диапазоны

Оптоволокно

Антенны КНЧ

https://ru.wikipedia.org/wiki/Связь_с_подводными_лодками

# Каналы связи

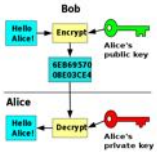

Карта подводных кабелей

https://habrahabr.ru/company/rootwelt/blog/305634/

# Шифрование информации


https://en.wikipedia.org/wiki/Public-key_cryptography

# Криптосистемы с открытым ключом

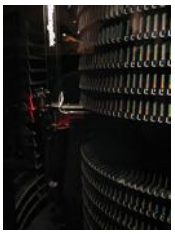

Необратимая Хэш функция

```
mbptb:~ alexsha$ md5 -s 'Hello world!!!'
MD5 ("Hello world!!!") = 87ee732d831690f45b8606b1547bd09e
```

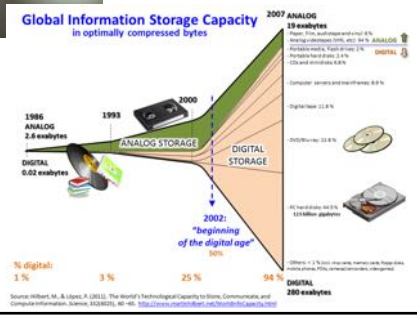
https://en.wikipedia.org/wiki/Public-key_cryptography

Хранение информации

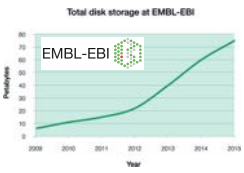
## Хранение информации

## Хранение информации




## Большие данные в биомедицине




NIH Big Data to Knowledge (BD2K)

2013-2021
~$400 млн

**Table 1. Four domains of Big Data in 2025.** In each of the four domains, the projected annual storage and computing needs are presented across the data lifecycle.

| Data Phase | Astronomy | Twitter | YouTube | Genomics |
|---|---|---|---|---|
| Acquisition | 25 zetta-bytes/year | 0.5–15 billion tweets/year | 500–900 million hours/year | 1 zetta-bases/year |
| Storage | 1 EB/year | 1–17 PB/year | 1–2 EB/year | 2–40 EB/year |
| Analysis | In situ data reduction | Topic and sentiment mining | Limited requirements | Heterogeneous data and analysis |
| | Real-time processing | Metadata analysis | | Variant calling, ~2 trillion central processing unit (CPU) hours |
| | Massive volumes | | | All-pairs genome alignments, ~10,000 trillion CPU hours |
| Distribution | Dedicated lines from antennae to server (600 TB/s) | Small units of distribution | Major component of modern user's bandwidth (10 MB/s) | Many small (10 MB/s) and fewer massive (10 TB/s) data movement |

Big Data: Astronomical or Genomical?. PLOS 2015

## Источники больших данных в биомедицине

- Омиксные технологии
  - Секвенирование, геномика, транскриптомика, протеомика, метаболомика и т.д.
  - Коннектом мозга
- Медицинская информация
  - Электронные медицинские карты, результаты клинических исследований и т.д.
  - Медицинские изображения, МРТ и т.д.
- Структурная биология и моделирование
  - Данные с лазеров на свободных электронах (XFEL)
  - Моделирование структуры и динамики белков.

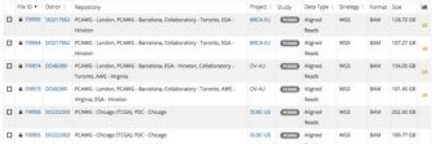
## Данные секвенирования, пример Геномы раковых опухолей

International Cancer Genome Consortium

Геном человека ~ 3.3 Gb
x100 секвенирование ~300Gb



25000 образцов опухолей
Международный проект, данные распределены по миру



## Централизованные репозитории омиксных данных

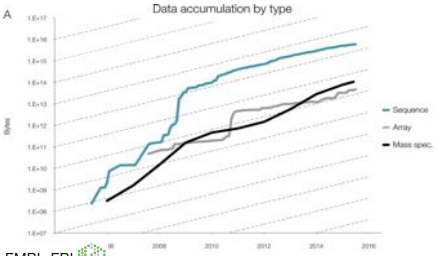
National Center for Biotechnology Information NCBI

EMBL EBI European Bioinformatics Institute

DDBJ

China National GeneBank CNGB 国家基因库

华大基因 BGI




EMBL-EBI European Bioinformatics Institute

## Genomes en masse

برنامج الجينوم البشري السعودي Saudi Human Genome Program

5 years ~ 100 000 genomes

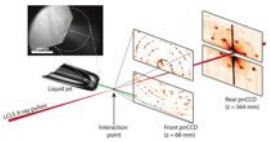


华大基因 BGI

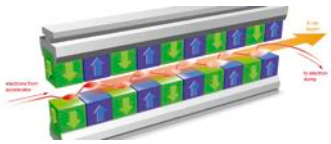
China National GeneBank CNGB 国家基因库

## Структурная биология и моделирование

European XFEL, Hamburg



27000 импульсов в секунду



## Передача больших данных

Выделенные научно-образовательные сети 100Gbit/s

Figure 1: Asia Pacific Ring (APR)


Программные решения

aspera an IBM® company

globus toolkit

## Базы данных

## Базы данных

- Реляционные базы данных, объектно-ориентированные, RDF
- Системы управления базами данных СУБД
- Языки и стандарты SQL, SPARQL, RDF

Oracle Corporation

Larry Ellison


Larry Ellison in 2016

## Реляционные базы данных

*Клиент*

| Id _кл | Фамилия | Имя | Отчество |
|---|---|---|---|
| 15 | Иванов | Иван | Иванович |
| 16 | Петров | Петр | Петрович |
| 17 | Николаев | Николай | Николаевич |

*Товар*

| Id_тов | Название |
|---|---|
| 1 | Шкаф |
| 2 | Стул |
| 3 | Стол |

*Заказ*

| Id_зак | Клиент | Товар | Дата | Количество |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 15 | 1 | 15.09.2003 | 1 |
| 2 | 17 | 1 | 17.09.2003 | 2 |
| 3 | 15 | 2 | 20.09.2003 | 12 |

**SQL**

**Целостность данных**

**Транзакции**

**Атомарность**

**Изолированность**

**Надежность**

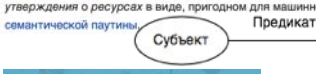
**Соответствие требованиям ACID**

https://aws.amazon.com/ru/relational-database/

## Resource Description Framework

Язык SPARQL

**Resource Description Framework** (RDF, «среда описания ресурса»[1]) — это разработанная консорциумом Всемирной паутины модель для представления данных, в особенности — метаданных[2]. RDF представляет *утверждения о ресурсах* в виде, пригодном для машинной обработки. RDF является частью концепции семантической паутины.





Select all human UniProt entries with a sequence variant that leads to a 'loss of function'

https://ru.wikipedia.org/wiki/Resource_Description_Framework/

## Биологические базы данных

## Biology is a data-intensive science!

- Нужно уметь хранить данные
- Нужно уметь обрабатывать данные
- Нужно уметь обмениваться данными
- Данные должны быть максимально открыты и доступны научному сообществу.
- Data provenance (”происхождение данных”)

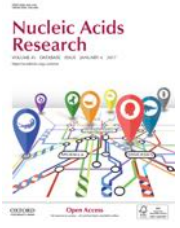
**Data provenance** [ edit ]

Scientific research is generally held to be of good provenance when it is documented in detail sufficient to allow reproducibility.[27][28] Scientific workflow systems assist scientists and programmers with tracking their data through all transformations, analyses, and interpretations. Data sets are reliable when the process used to create them are

- Кризис воспроизводимости результатов в науке!?

## Базы данных для биологии

- На данный момент количество не возможно сосчитать – очень много – важно не запутаться и не потеряться при их использовании
- Надежные источники информации о базах данных – научные журналы





Annual Database Issue – информация о ~200 БД каждый год.

## Базы данных для биологии

- Бесплатные vs Платные (по подписке)
- Свободно доступные vs Ограниченно доступные
- Большие ресурсы (NCBI, EBI/EMBL, etc.) интегрирующие многие базы данных - поддерживаются государстом
- Коллаборации между университетами (напр. PDB)
- Коммерческие компании
- Локальные базы данных, поддерживаемые силами научных групп
- База данных vs Web Server – граница размыта.
- Хорошие БД - информационные ресурсы с возможностями сложного поиска и моделирования.

## Крупные центры биологических БД

National Center for Biotechnology Information NCBI

- Bethesda, MD USA
- Более 60 БД включая PubMed, GenBank, DBGap, SRA

EMBL-EBI

- European Bioinformatics Institute, Cambridge, UK + Switzerland

## Что храниться?

- БД статей, абстрактов, патентов
- Последовательности ДНК
- Последовательности белков
- 3D структуры молекул
- Геномы
- Данные экспрессии
- Сырые данные с секвенаторов
- Информация о химических соединениях и их активности
- Информация о болезнях, информация о пациентах
- Информация о видах живых организмов
- Информация о метаболических и сигнальных путях
- Информация о взаимодействии молекул
- Много производной информации: базы гомологичных последовательностей, аннотация отдельных классов белков и т.д.

## План

- **Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)**
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии

## Реферативные базы данных

**Clinical/Biomedical**

**PubMed** – US National Library of Medicine database (Medline); refers to >25M articles from 5600 biomedical journals, 1940s to present, with some older items, in medicine, nursing, dentistry, veterinary medicine, allied health & pre-clinical sciences
- bibliographic database with author-provided abstracts, added indexing terms from **MeSH** (Medical Subject Headings) thesaurus, & links to other resources

www.pubmed.gov

NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE

FREE

## Реферативные базы данных

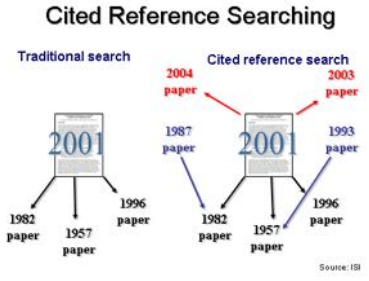
**Clinical/Biomedical**

**Embase** – European based, includes all of Medline (database behind PubMed) and more; > 29M records, >8,500 journals, 1940s to present; includes coverage of more basic science journals & pre-clinical topics - especially useful for drug pipeline information, biotechnology, medical devices, conference coverage, toxicology, health policy/management, & alternative/complementary medicine
EMTREE thesaurus includes almost twice as many terms as PubMed

https://www.elsevier.com/solutions/embase-biomedical-research

ELSEVIER **PAID**

## Реферативные базы данных



## Реферативные базы данных

### Общенаучные базы данных цитирований

**Web of Science** - covers >12,000 journals from 1900 to present; useful for cited reference, **conference information** & **affiliations** (institutions)

https://webofknowledge.com/

THOMSON REUTERS

PAID

**Scopus** – covers >18,500 journals from 1823 to present, complete citation counts for indexed articles 1996 to present; a general science database, not a specialized database – useful for cited reference, **conference information** & **affiliations** (institutions)

https://www.scopus.com/

ELSEVIER

PAID

## Реферативные базы данных

### Общенаучные базы данных цитирований


Elibrary.ru/РИНЦ

## Реферативные базы данных

### Общенаучные базы данных цитирований

Google Scholar

Articles Case law

Recommended articles

Exploring DNA dynamics within oligonucleosomes with coarse-grained simulations: SIRAH force field extension for protein-DNA complexes
A Brandner, A Schüller, F Melo, S Pantano - Biochemical and biophysical research ..., 2017

## Базы данных диссертаций

Open DOAR http://www.opendoar.org/index.html ;
OpenThesis http://www.openthesis.org/ ;
BASE – Bielefeld Academic Search Engine - http://www.base-search.net/
> refine search result > document type > theses

ProQuest Dissertations & Theses Database http://www.proquest.com/products-services/pqdt.html - from 1743 to present; some fulltext since 1990; **fee** with some free search capability

## Базы данных патентов


http://www.lens.org/lens/biological_search – поиск ДНК последовательностей

Google Patents

Include non-patent literature (Google Scholar)

Search and read the full text of patents from around the world.

## План

- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- **Базы данных последовательностей ДНК**
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии

## Базы данных нуклеотидных последовательностей

Нуклеотидные БД – это хранилища, принимающие данные от научного сообщества и представляющие их широкой общественности. Различные БД отличаются по источнику последовательностей, их надежности, широте аннотирования и т.д. В идеале БД должна содержать все известные последовательности.

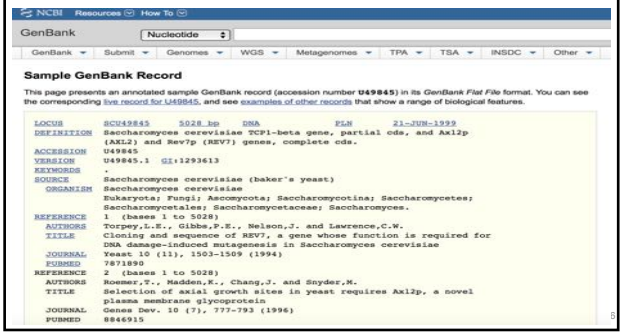
The **International Nucleotide Sequence Database Collaboration** – совместный проект EMBL-Bank в Европейском Институте Биоинформатики (EBI), японского банка данных ДНК (DDBJ) в Центре Информационной Биологии (CIB) и GenBank в Национальном Центре Биотехнологической Информации (NCBI).

EMBL NUCLEOTIDE SEQUENCE DATABASE · DDBJ · NCBI · INSDC

55

## База данных GenBank

Открытая БД нуклеотидных последовательностей, учреждена в 1982 г.
2017: > 300 000 организмов, ~ 203 млн. последовательностей,
~ 240 млрд. пар оснований




## База данных GenBank. Структура файла

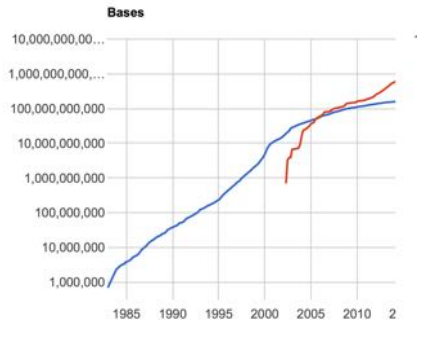
```
...
FT          /translation="MGQPGNGSAFLLAPNGSHAPDHDVTQQRDEVWVVGMGIVMSLIVL
FT          AIVFGNVLVITAIAKFERLQTVTNYFITSLACADLVMGLAVVPFGAAHILMKMWTFGNF
FT          WCEFWTSIDVLCVTASIETLCVIAVDRYFAITSPFKYQSLLTKNKARVIILMVWIVSGL
FT          TSFLPIQMHWYRATHQEAINCYANETCCDFFTNQAYAIASSIVSFYVPLVIMVFVYSRV
FT          FQEAKRQLQKIDKSEGRFHVQNLSQVEQDGRTGHGLRRSSKFCLKEHKALKTLGIIMGT
FT          FTLCWLPFFIVNIVHVIQDNLIRKEVYILLNWIGYVNSGFNPLIYCRSPDFRIAFQELL
FT          CLRRSSLKAYGNGYSSNGNTGEQSGYHVEQEKENKLLCEDLPGTEDFVGHQGTVPSDNI
FT          DSQGRNCSTNDSLL«
FT variation      46
FT          /gene="ADRB2«
FT          /replace="a«
FT          /note="Arg16 to Gly polymorphism«
XX
...
```

57

## База данных GenBank. Структура файла

```
...
SQ Sequence 1242 BP; 275 A; 331 C; 326 G; 310 T; 0 other;
atggggcaac ccgggaacgg cagcgccttc ttgctggcac ccaatggaag ccatgcgccg   60
gaccacgacg tcacgcagca aagggacgag gtgtgggtgg tgggcatggg catcgtcatg  120
tctctcatcg tcctggccat cgtgttttggc aatgtgctgg tcatcacagc cattgccaag  180
ttcgagcgtc tgcagacggt caccaactac ttcatcactt cactggcctg tgctgatctg  240
gtcatgggcc tggcagtggt gccctttggg gccgcccata ttcttatgaa aatgtggact  300
tttggcaact tctggtgcga gttttggact tccattgatg tgctgtgcgt cacggccagc  360
attgagaccc tgtgcgtgat cgcagtggat cgctactttg ccattacttc acctttcaag  420
taccagagcc tgctgaccaa gaataaggcc cgggtgatca ttctgatggt gtggattgtg  480
tcaggcctta cctccttctt gcccattcag atgcactggt accgggccac ccaccaggaa  540
gccatcaact gctatgccaa tgagacctgc tgtgacttct tcacgaacca agcctatgcc  600
attgcctctt ccatcgtgtc cttctacgtt cccctggtga tcatggtctt cgtctactcc  660
agggtctttc aggaggccaa aaggcagctc cagaagattg acaaatctga gggccgcttc  720
catgtccaga accttagcca ggtggagcag gatgggcgga cggggcatgg actccgcaga  780
tcttccaagt tctgcttgaa ggagcacaaa gccctcaaga cgttaggcat catcatgggc  840
actttcaccc tctgctggct gcccttcttc atcgttaaca ttgtgcatgt gatccaggat  900
aacctcatcc gtaaggaagt ttacatcctc ctaaattgga taggctatgt caatttctgt  960
ttcaatcccc ttatctactg ccggagccca gatttcagga ttgccttcca ggagcttctg 1020
tgcctgcgca ggtcttcttt gaaggcctat gggaatggct actccagcaa cggcaacaca 1080
ggggagcaga gtggatatca cgtggaacag gagaaagaaa ataaactgct gtgtgaagac 1140
ctcccaggca cggaagactt tgtgggccat caaggtactg tgcctagcga taacattgat 1200
tcacaaggga ggaattgtag tacaaatgac tcactgctgt aa              1242
//
```

58




**GenBank and WGS Statistics**

https://www.ncbi.nlm.nih.gov/genbank/statistics/

Genbank – is an archive! Contains everything.

**Nicotiana tabacum chloroplast JLA region, sequence 2**

GenBank: Z71230.1
FASTA Graphics

```
FEATURES             Location/Qualifiers
     source          1..124
                     /organism="Nicotiana tabacum"
                     /organelle="plastid:chloroplast"
                     /mol_type="genomic DNA"
                     /isolate="Cuban cahibo cigar, gift from President Fidel
                     Castro"
                     /db_xref="taxon:4097"
```

RefSeq – is a reference sequence database!

RefSeq – is a reference sequence database!


Если нужен список последовательностей всех генов человека – это вопрос к RefSeq, а не GenBank!

План

- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- **Базы данных последовательностей белков**
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии

GenBank/RefSeq is nucleotide centric, but

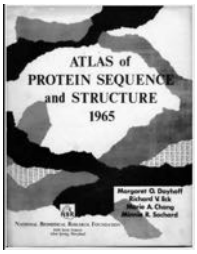
...

```
...
FT                   /translation="MGQPGNGSAFLLAPNGSHAPDHDVTQQRDEVWVVGMGIVMSLIVL
FT                   AIVFGNVLVITAIAKFERLQTVTNYFITSLACADLVMGLAVVPFGAAHILMKMWTFGNF
FT                   WCEFWTSIDVLCVTASIETLCVIAVDRYFAITSPFKYQSLLTKNKARVIILMVWIVSGL
FT                   TSFLPIQMHWYRATHQEAINCYANETCCDFFTNQAYAIASSIVSFYVPLVIMVFVYSRV
FT                   FQEAKRQLQKIDKSEGRFHVQNLSQVEQDGRTGHGLRRSSKFCLKEHKALKTLGIIMGT
FT                   FTLCWLPFFIVNIVHVIQDNLIRKEVYILLNWIGYVNSGFNPLIYCRSPDFRIAFQELL
FT                   CLRRSSLKAYGNGYSSNGNTGEQSGYHVEQEKENKLLCEDLPGTEDFVGHQGTVPSDNI
FT                   DSQGRNCSTNDSLL«
FT   variation       46
FT                   /gene="ADRB2«
FT                   /replace="a«
FT                   /note="Arg16 to Gly polymorphism«
XX
...
```

Protein sequences are annotate within GB records



Protein Centric Sequence Databases




Margaret Oakley Dayhoff

1925-1983

Margaret Dayhoff, a founder of the field of bioinformatics

Invented one-letter amino acid code, substitution matrices, etc.

https://en.wikipedia.org/wiki/Margaret_Oakley_Dayhoff

Protein Centric Sequence Databases

PIR Protein Information Resource

http://pir.georgetown.edu

In 2002, PIR along with its international partners, EBI (European Bioinformatics Institute) and SIB (Swiss Institute of Bioinformatics), were awarded a grant from NIH to create UniProt, a single worldwide database of protein sequence and function, by unifying the PIR-PSD, Swiss-Prot, and TrEMBL databases. As of 2010, PIR offers a wide variety of resources mainly oriented to assist the propagation and standardization of protein annotation: PIRSF,[8] iProClass, and iProLINK.

The Protein Ontology (PRO) is another popular database released by the Protein Information Resource.[9][10]

Белковые базы данных

UniProt


БД последовательностей (первичная) (2002)

На июль 2012:

536 789 последовательностей из 12 838 видов

**UniProt** – наиболее всеобъемлющий каталог информации о белках, объединяющий в себе данные из UniProtKB/Swiss-Prot, UniProtKB/TrEMBL и PIR.

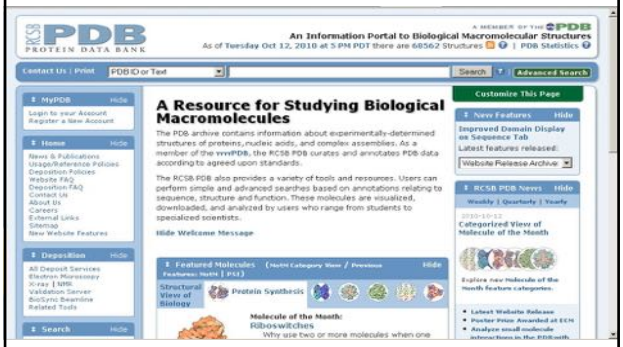
## Белковые базы данных

Качественно аннотированную информацию о белках нужно искать в **UniProtKB**

## План

- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- **Базы данных 3D структур**
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии

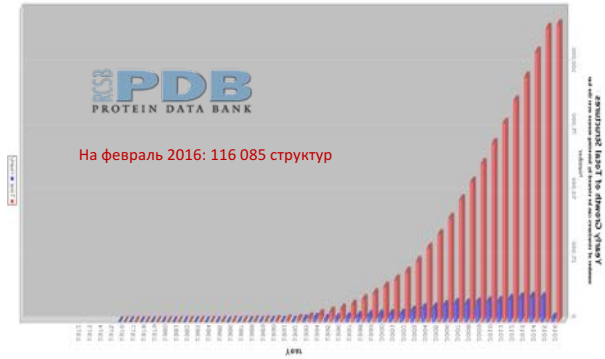
## Структурные базы данных



PDB – содержит информацию об экспериментально определенных структурах белков, нуклеиновых кислот и различных комплексов.

69

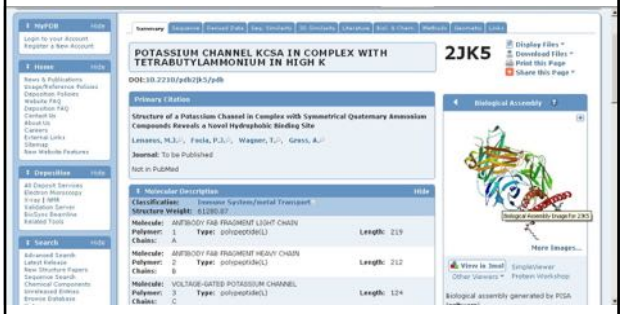
## Структурные базы данных




70

## Структурные базы данных

POTASSIUM CHANNEL KCSA IN COMPLEX WITH TETRABUTYLAMMONIUM IN HIGH K



71

## Структурные базы данных

POTASSIUM CHANNEL KCSA IN COMPLEX WITH TETRABUTYLAMMONIUM IN HIGH K

72

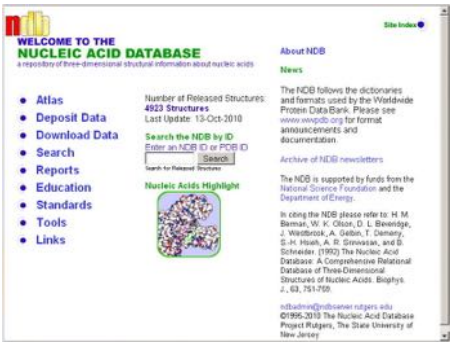
## База данных PDB. Структура файла

```
HEADER    IMMUNE SYSTEM/METAL TRANSPORT           15-AUG-08   2JK5
TITLE     POTASSIUM CHANNEL KCSA IN COMPLEX WITH TETRABUTYLAMMONIUM
TITLE    2 IN HIGH K
COMPND    MOL_ID: 1;
COMPND    2 MOLECULE: ANTIBODY FAB FRAGMENT LIGHT CHAIN;
COMPND    3 CHAIN: A;
COMPND    4 ENGINEERED: YES;
COMPND    5 MOL_ID: 2;
...
KEYWDS    IMMUNE SYSTEM METAL TRANSPORT COMPLEX, QUATERNARY AMMONIUM,
...
EXPDTA    X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR    M.J.LENAEUS,P.J.FOCIA,T.WAGNER,A.GROSS
REVDAT    1   17-NOV-09 2JK5    0
JRNL        AUTH   M.J.LENAEUS,P.J.FOCIA,T.WAGNER,A.GROSS
JRNL        TITL   STRUCTURE OF A POTASSIUM CHANNEL IN COMPLEX WITH
JRNL        TITL 2 SYMMETRICAL QUATERNARY AMMONIUM COMPOUNDS REVEALS
JRNL        TITL 3 A NOVEL HYDROPHOBIC BINDING SITE
JRNL        REF    TO BE PUBLISHED
JRNL        REFN
REMARK    2
REMARK    2 RESOLUTION.    2.4  ANGSTROMS.
REMARK    3
REMARK    3 REFINEMENT.
REMARK    3   PROGRAM     : REFMAC 5.5.0051
...
```

73

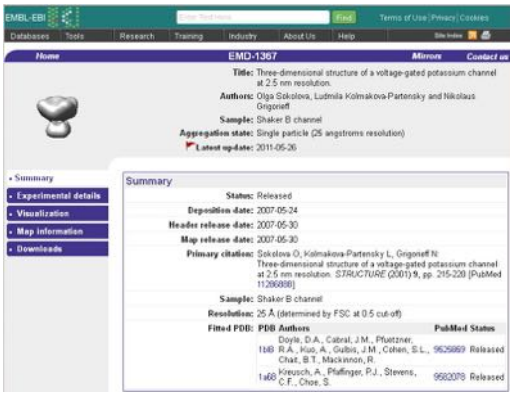
## Структурные базы данных

NDB – основана в 1992 г. для сбора и распространения информации о структуре нуклеиновых кислот. Формат хранения данных идентичен PDB.



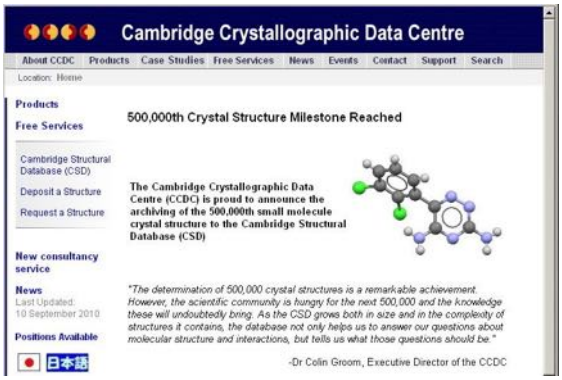

74

## Структурные базы данных




75

## Структурные базы данных




76

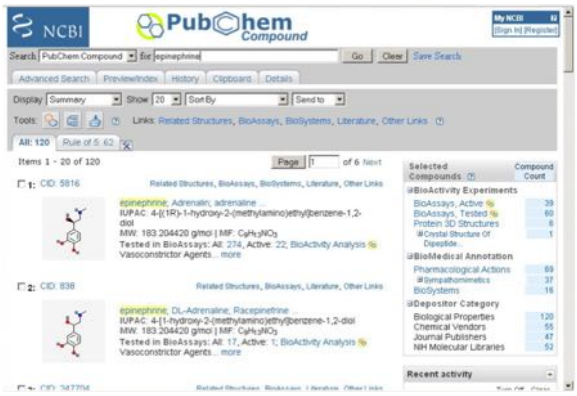
## План

- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- **Базы данных хим. соединений**
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии

## Базы данных химических соединений


78

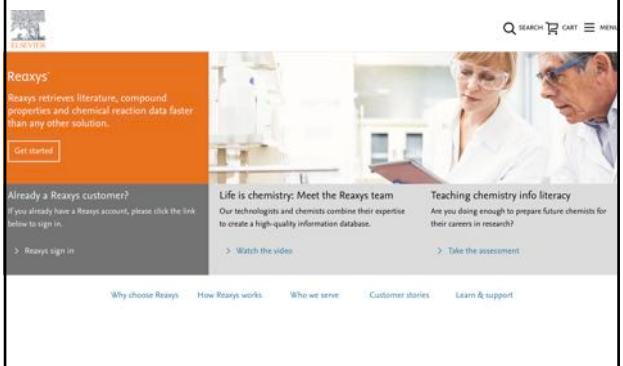
## Базы данных химических соединений




## Базы данных химических соединений

Chemical Abstract Service – в регистре содержится 130 млн соединений (2018)


## Базы данных химических соединений




81

## Базы данных углеводов

For 2017:

7005 publications for 18924 compounds from 8859 organisms


82

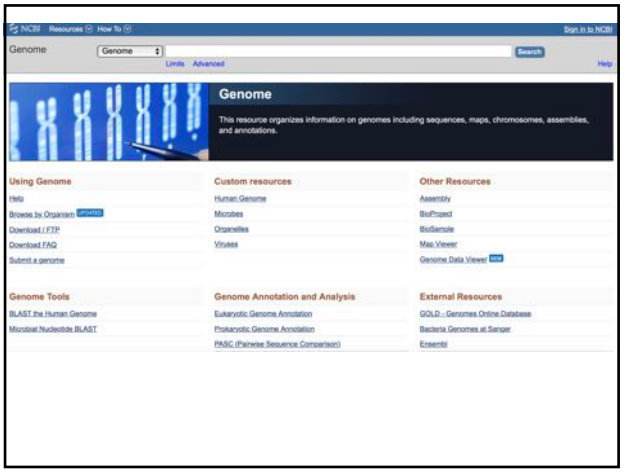
## Структурные базы данных

7009 структур липидов и сходных соединений – не поддерживается в настоящее время ☹

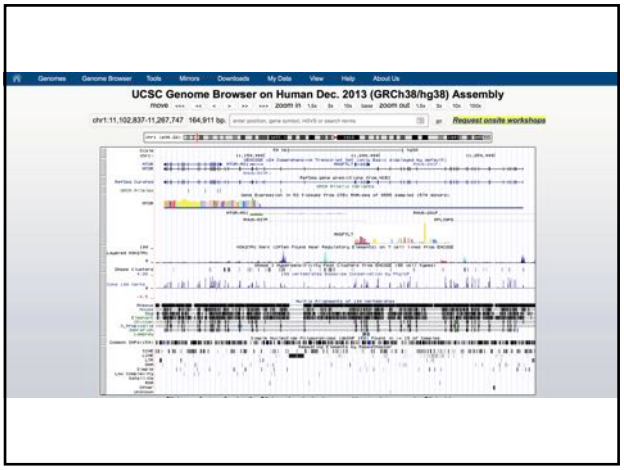

83

## План

- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- **Базы данных геномов и аннотаций**
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии

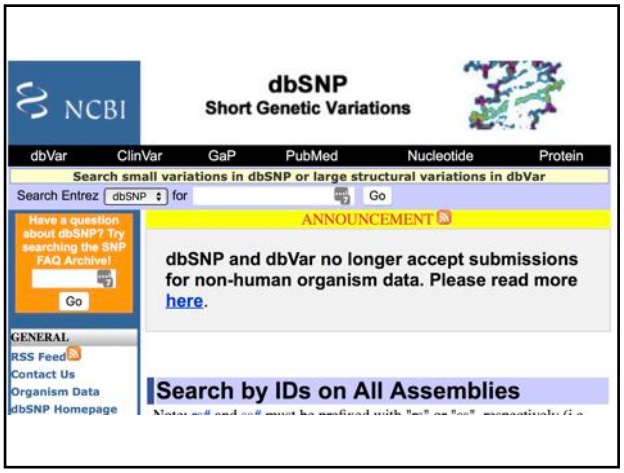


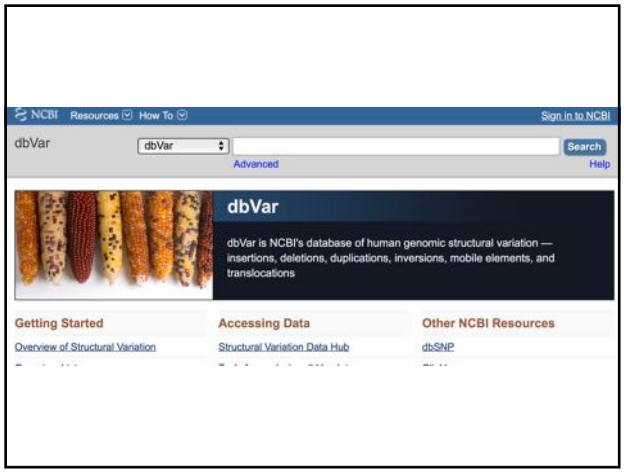


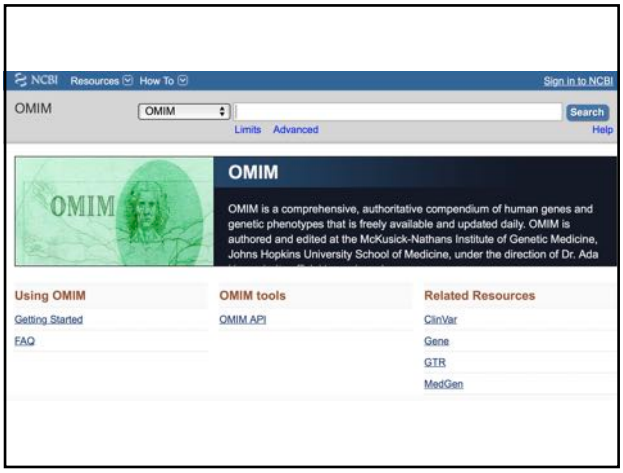


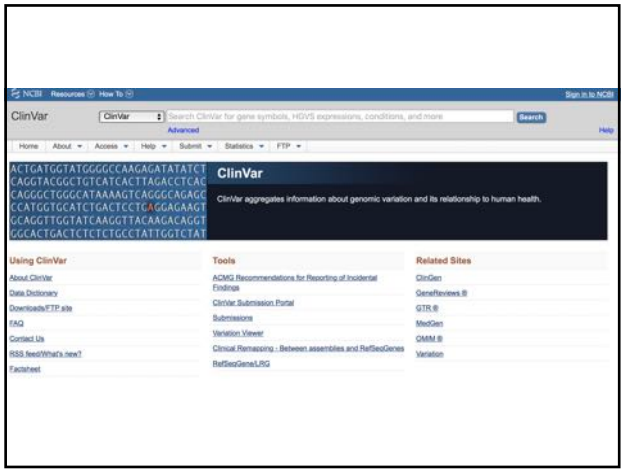

План

- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- **Базы данных вариаций генома**
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии



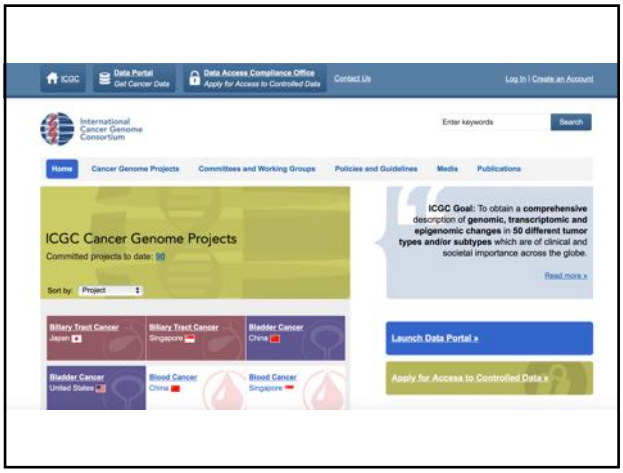






План

- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- **Базы данных геном-фенотип**
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии

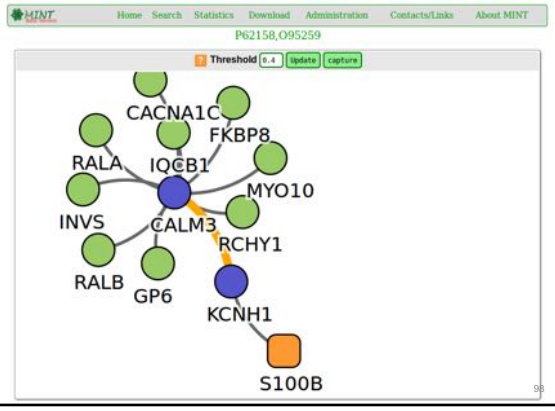

План

- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- **Базы данных взаимодействий**
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии

## Базы данных взаимодействий

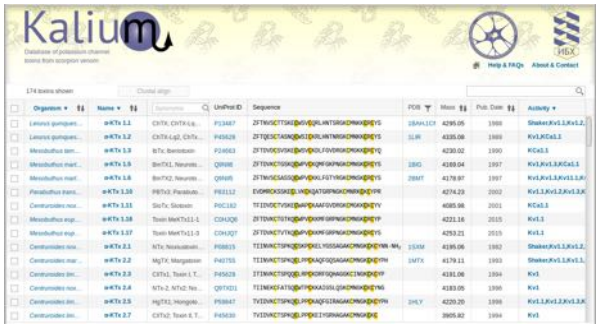

97

## Базы данных взаимодействий



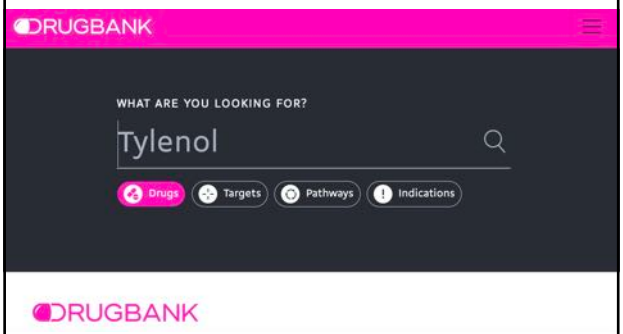

98

## Базы данных взаимодействий




99

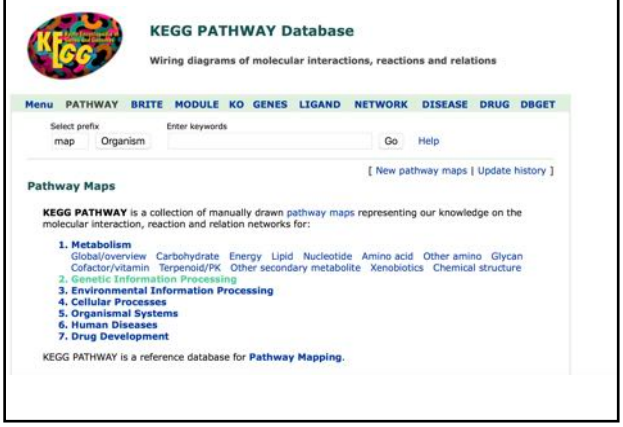
## Базы данных химических соединений



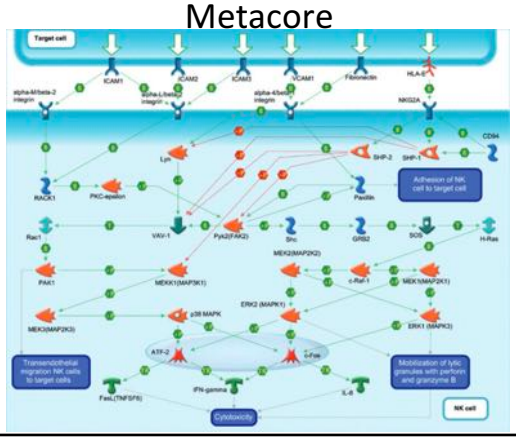

100

## План

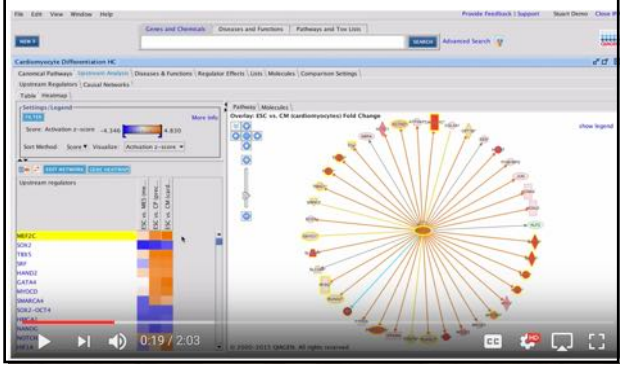
- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- **Базы данных сигнальных/метаболических путей**
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии

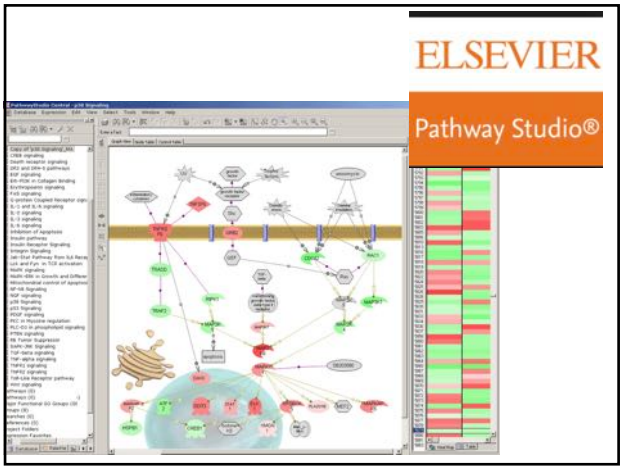


## Metacore



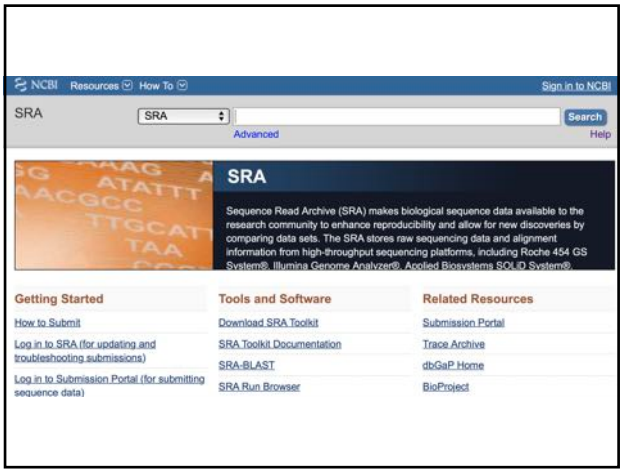
## Ingenuity Pathway Analysis





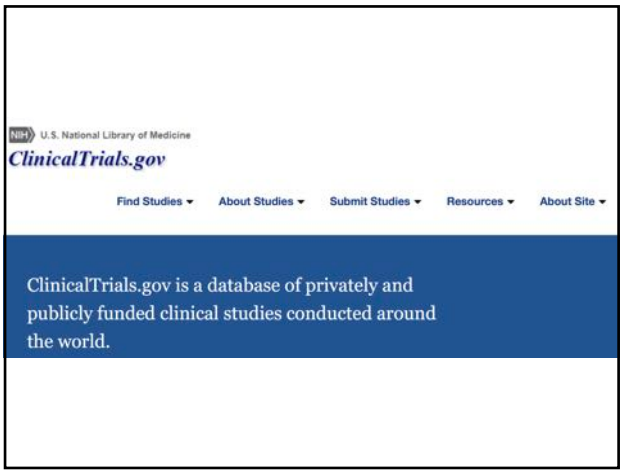

План

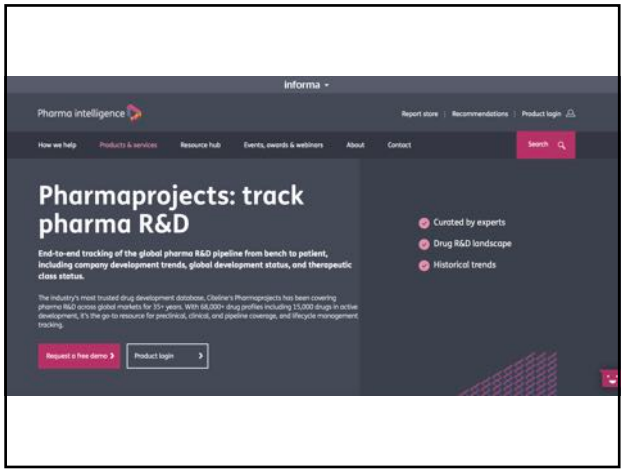
- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- **Базы данных секвенирования**
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии




План

- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- **Базы данных клинических исследований и лекарств**
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- Базы данных по таксономии

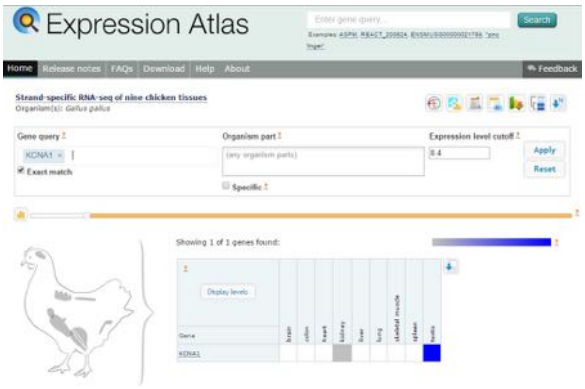


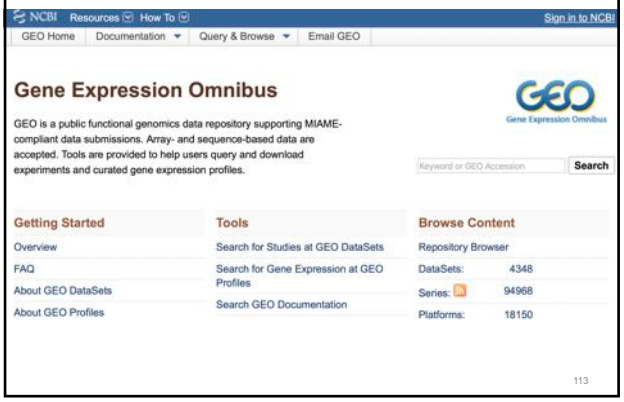

План

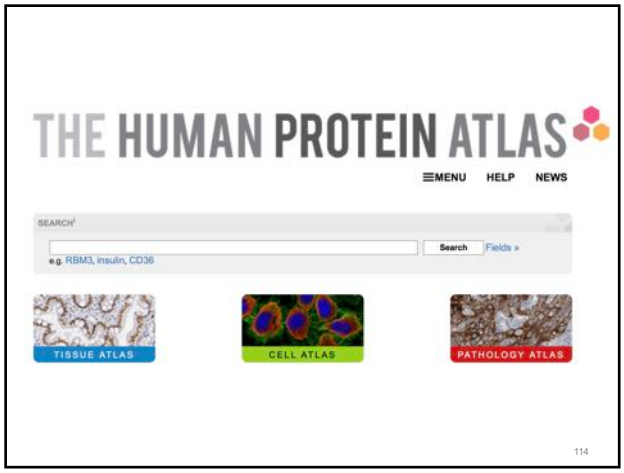
- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- **Базы данных по экспрессии генов/гистологии**
- Базы данные по таксономии

Базы данных экспрессии генов




Базы данных экспрессии генов



## План

- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы данных вариаций генома
- Базы данных геном-фенотип
- Базы данных взаимодействий
- Базы данных сигнальных путей
- Базы данных секвенирования
- Базы данных заболеваний и медицинской информации
- Базы данных по экспрессии генов/гистологии
- **Базы данных по таксономии**

## Таксономические базы данных

**Taxonomy Browser** – знаменитая таксономическая БД, имеющая иерархическую структуру, основанную на анализе последовательностей и призванная упорядочить классификацию организмов, для которых известна хотя бы одна последовательность ДНК или белка.


## Видовые базы данных

Содержат таксономическую, библиографическую, географическую, визуальную и прочую информацию


## Видовые базы данных
## https://plant.depo.msu.ru