Introducción a Bases de Datos (BD) Biológicas Curso de Bioinformática

Luis E. Garreta U

Pontificia Universidad Javeriana – Cali Facultad de Ingeniería - Carrera de Biología

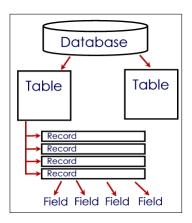
6 de agosto de 2018



Conceptos de BD

Qué es una Bases de Datos ?

- ► Una BD es una colección estructurada de información.
- ► La información o datos están organizados en **Tablas**.
- Las unidades básicas de una tabla son llamadas registros.
- Cada registro consiste de varios campos.
- Cada campo representa una información de ese registro.
- ► Cada registro tiene un identificador único.



Ejemplo: Base de Datos en forma de tabla

- ► Una BD se puede ver como una tabla donde:
 - ► Las filas corresponden a los registros
 - ► Las columnas corresponden a los campos

	Campos					
	Field Record	Name	Length	Sequence	Enzyme	
S	QA001	MTGA	243	MYQWI	yes	
Registros	QA002	Ribosomal protein L9	267	MAAPV	no	
200	QA003	Flagellin	374	GSSIL	no	
	QA004	GDPMH	157	MFLRQ	yes	

Identificador

► Número de Acceso (**Accession Number**): Son los identificadores únicos de cada registro de la BD

Organización de los datos en BD

- ► Archivos de texto planos
- ► BDs relacionales

Archivos de texto Planos

- Originalmente, todas las bases de datos utilizaban un formato de archivo de texto plano, sin formato.
- No contiene instrucciones ocultas para las computadoras.
- No se puede realizar búsquedas inteligentes por campos o por registros.

LOCUS	AAL93223 348 aa linear VRT 02-0CT-2003				
DEFINITION	NADH dehydrogenase subunit 2 [Ictalurus punctatus].				
ACCESSION	AAL93223				
VERSION	AAL93223.1 GI:19702261				
DBSOURCE	accession AF482987.1				
KEYWORDS					
SOURCE	mitochondrion Ictalurus punctatus (channel catfish)				
ORGANISM	Ictalurus punctatus				
	Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi;				
	Actinopterygii; Neopterygii; Teleostei; Ostariophysi; Siluriformes;				
	Ictaluridae; Ictalurus.				
REFERENCE	1 (residues 1 to 348)				
AUTHORS	Waldbieser, G.C., Bilodeau, A.L. and Monneman, D.J.				
TITLE	Complete sequence and characterization of the channel catfish				
	mitochondrial genome				
COMMENT	Method: conceptual translation supplied by author.				
ORIGIN					
1	mspyvitill sslglgtalt fmsshwllaw mgleintlai lplmaqhhhp raveattkyf				
61	laqaaaaati lfastinawt tgewniycls hpaatilitm alalkvglap vhfwmppvmq				
121	gltlttglim atwqklapfa liiqmapfth plllttlgll svfiggwggl nqtqlrkila				
181	yssiahlgwm iivtqykpql tvlvlityii mtsatfltfk lmattkintl amswakvpti				
241	tamaalalis iggippitgf mpkwliiqel tmqglpitat mmtlsalisi yfylricyam				
301	tltispntnn ssapwrlqnt qataplatlm imtllllplt plaqtltn				
11					

BDs Relacionales

- ► Contienen tanto los registros de datos como también las conexiones visibles e invisibles entre ellos.
- ► Esta organización facilitar la ejecución de las consultas complejas.

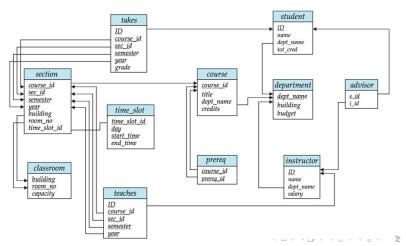
		lable for movie			
Title	Year	Director			
The man who shot Liberty Valance	1962	per001	4		
The Grapes of Wrath	1940	per001			
Pulp Fiction	1994	per002			
The matrix	1999	per003			
Cidade de Deus	2002	per004			
	The man who shot Liberty Valance The Grapes of Wrath Pulp Fiction The matrix	The man who shot Liberty Valance 1962 The Grapes of Wrath 1940 Pulp Fiction 1994 The matrix 1999 Cidade de Deus 2002	The man who shot Liberty Valance 1962 per001 The Grapes of Wrath 1940 per001 Pulp Fiction 1994 per002 The matrix 1999 per003 Cidade de Deus 2002 per004		

		relation			
	Table for person				
	ID	Name	Surname	Origin	
↳	per001	John	Ford	USA	
	per002	Quentin	Tarantino	USA	
	per003		Wachowski	USA	
	per004	Fernando	Mirelles	Brazil	

Table for movie

Esquema de una BD Relacional

► Muchas tablas, con muchos registros, con muchos campos y muchas conexiones



BDs Biológicas

Tipos de Secuencias en las BDs Biológicas

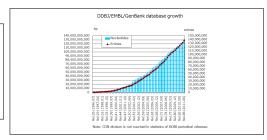
- ► Secuencias de ADN, ARN, Proteínas, b:
 - ► **Nucleótidos**: orígenes, secuencias codificantes, genes, etc.
 - Aminoácidos: proteínas
 - ► Estructuras 3D: estruc
 - Genomas: secuencias completas para organismos
 - ► Publicaciones: artículos científicos
- Información adicional relacionada con las secuencias (Datos derivados):
 - ► Expresión asociada
 - Anotaciones funcionales
 - Relaciones entre secuencias



Crecimiento de las BDs Biólogicas



Existen approximadamente 286,730,369,256 registros de secuencias en las divisiones tradicionales del GenBank (2011).



Crecimiento por Divisiones del GenBank

Medida en pares de bases de nucleótidos (bp)

Table 1. Growth of GenBank Divisions (nucleotide base-pairs)

Division	Description	Release 173 (8/2009)	Release 179 (8/2010)	Increase (%)
TSA	Transcriptome shotgun data	39 829 979	398 676 845	900.9
ENV	Environmental samples	1 091 072 890	1 723 286 428	57.9
PAT	Patented sequences	5 592 927 651	8 519 294 473	52.3
BCT	Bacteria	4 107 328 206	5 333 010 385	29.8
VRL	Viruses	779 481 462	970 125 245	24.5
PHG	Phages	36 100 172	43 456 808	20.4
MAM	Other mammals	576 977 646	679 274 390	17.7
INV	Invertebrates	1 734 996 371	2 036 240 836	17.4
WGS	WGS data	148 165 117 763	169 253 846 128	14.2
GSS	Genome survey sequences	16 738 219 857	18 442 479 673	10.2
PLN	Plants	3 695 552 256	4 038 424 961	9.3
SYN	Synthetic	131 361 806	142 548 355	8.5
VRT	Other vertebrates	2 366 300 257	2 533 789 261	7.1
EST	ESTs	34 522 977 161	36 803 930 321	6.6
HTC	High-throughput cDNA	636 472 189	659 355 057	3.6
PRI	Primates	5 751 413 009	5 943 029 356	3.3
ROD	Rodents	4 206 718 960	4 298 354 944	2.2
HTG	High-throughput genomic	23 895 733 886	24 276 862 305	1.6
UNA	Unannotated	119 348	120 289	0.8
STS	Sequence tagged sites	629 573 650	634 263 196	0.7
TOTAL	All GenBank sequences	254 698 274 519	286 730 369 256	12.6

Registros de un BD Biológica

► Ejemplo de un registro en formato GenBank

```
LOCUS
            AAL93223
                                     348 aa
                                                       linear
                                                                VRT 02-0CT-2003
DEFINITION
           NADH dehydrogenase subunit 2 [Ictalurus punctatus].
ACCESSION
            AAL93223
VERSION
           AAL93223.1 GT:19702261
DBSOURCE
            accession AF482987.1
KEYWORDS
           mitochondrion Ictalurus punctatus (channel catfish)
SOURCE
 ORGANISM Ictalurus punctatus
            Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi;
            Actinopterygii; Neopterygii; Teleostei; Ostariophysi; Siluriformes;
            Ictaluridae: Ictalurus.
REFERENCE
            1 (residues 1 to 348)
 AUTHORS
           Waldbieser, G.C., Bilodeau, A.L. and Nonneman, D.J.
 TITLE
            Complete sequence and characterization of the channel catfish
            mitochondrial genome
COMMENT
            Method: conceptual translation supplied by author.
ORIGIN
        l mspyvitill sslqlgtalt fmsshwllaw mgleintlai lplmaqhhhp raveattkyf
       61 lagaaaaati lfastinawt tgewniycls hpaatilitm alalkvglap vhfwmppvmg
      121 gltlttglim atwcklapfa liigmapfth plllttlgll svfiggwggl ngtglrkila
      181 yssiahlqwm iivtqykpql tvlvlityii mtsatfltfk lmattkintl amswakvpti
      241 tamaalalis lgglppltgf mpkwlilgel tmgglpltat mmtlsalisl yfylricyam
      301 tltispntnn ssapwrlgnt qataplatlm imtllllplt plaqtltn
```

Campos Esenciales en un registro de una BD biológica

- ► La secuencia
- ► El número de acceso o *Accession Number* (AC)
- Datos taxonómicos
- Referencias
- Palabras clave (keywords)
- Documentación/ Anotaciones/Curación (curation)
 - ► Grupos de investigación (sumisión directa)
 - ► información literatura sumplementaria
 - Intitutos de secuenciación
 - Patentes



El Formato de los registros necesita ser consistente dentro de la BD

Un entrada en la BD de proteínas SwissProt en formato FASTA:

>sp|P01588|EP0_HUMAN Erythropoietin OS=Homo sapiens OX=9606 GN=EP0 PE=1 SV=1

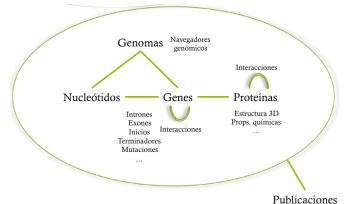
MGVHECPAWLWLLLSLLSLPLGLPVLGAPPRLICDSRVLERYLLEAKEAENITTGCAE HCSLNENITVPDTKVNFYAWKRMEVGQQAVEVWQGLALLSEAVLRGQALLVNSSQ PWEPLQLHVDKAVSGLRSLTTLLRALGAQKEAISPPDAASAAPLRTITADTFRKLFRV YSNFLRGKLKLYTGFACRTGDR



onceptos BD Biológicas Acceso Tipos Compendio BDs

Importancia de las BDs Biológicas?

- ► El propósito de estas BD va más allá de simplemente almacenar datos de forma organizada.
- ► Se buscá también permitir una recuperación de datos **inteligente**.





Recuperación de Información a travéz de Consultas o Queries

- Un query o consulta es el método para recuperar información de la BD.
- Especialmente las consultas sobre los campos, debido a la organización de los registros con base a campos.



Tipos de BDs Biológicas

Tipos de BDs Biológicas

- ► BDs Primarias
- ► BDs Secundarias
- ► BDs Especializadas

BDs Primarias

- ► Contienen datos biológicos originales
- Secuencias crudas o datos estructurales sometidos por la comunidad científica
- ► Estas son:
 - GenBank: mantenida por el NCBI (National Center for Biotechnology Information)
 - ► EMBL: mantenida por el EBI (European Bioinformatics Institure)
 - DDBJ: DNA Database of Japan
 - PDB: Protein Data Bank mantenida por el RCSB (Research Collaboratory for Structural Bioinformatics)



BDs Secundarias

- ► Las BD secundarias contienen información procesada computacional o manualmente por un experto, a partir de información original de las bases de datos primarias
- ► Las BD de secuencias traducidas de proteínas que contienen anotaciones funcionales pertenecen a esta categoría
- ► Algunos ejemplos son:
 - UniProt: un recurso completo, de alta calidad y de libre acceso de secuencias proteicas e información funcional
 - ► PIR (Protein Information Resources) que es sucesor del Atlas of Protein Sequence and Structure

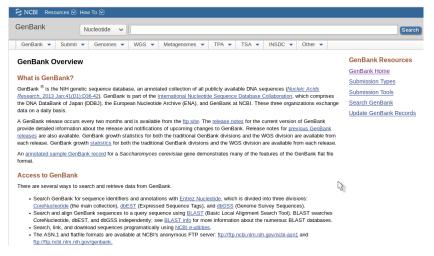


BDs Especializadas

- ► Las BD especializadas son aquellas dedicadas un interés de investigación particular
- ► Por ejemplo:
 - ► Flybase: Una BD de genes y genomas de Drosófila
 - ► HIV sequence database,
 - ► Ribosomal Database Project
 - ▶ ..

BD GenBank:

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



BD EMBL-EBI:

https://www.ebi.ac.uk/



We are EMBL-EBI

The European Bioinformatics Institute (EMBL-EBI) is part of EMBL, Europe's flagship laboratory for the life sciences. More about EMBL-EBI and our impact.

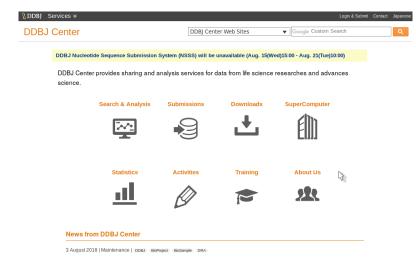
Data resources

Explore our open data resources to enrich your research. Browse data, perform analyses or share your own results.

Research Research

Find out about our research groups, postdoctoral schemes and PhD Programme >

DDBJ: https://www.ddbj.nig.ac.jp



BD Biológicas Tipos

PDB:



Deposit

Q Search

✓ Visualize

III Analyze

♠ Download

Learn

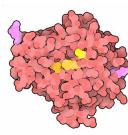
the 3D shapes of proteins, nucleic acids, and complex assemblies that helps students and researchers understand all aspects of biomedicine and agriculture, from protein synthesis to health and disease.

As a member of the wwPDB, the RCSB PDB curates and annotates RDB data.

The RCSB PDB builds upon the data by creating tools and resources for research and education in molecular biology, structural biology, computational biology, and beyond.

Award-Winning Videos on Antibiotic Resistance





Ejercicio: Realizar búsquedas en todas las BD primarias

Buscar los términos:

"early-onset breast cancer human brca2"

► BRCA2 y BRCA2 son el gen y su proteína, respectivamente para el gen relacionado con el cancer de mama.

Como debería ser una "buena BD" biológica

- ► Completa, pero fácil de realizar búsquedas
- ► Anotada, pero no "demasiado anotada"
- Simple y fácil de entender su estructura
- ► Con referencias cruzadas (*cross-referenced*)
- Redundancia mínima
- ► Fácil recuperación de los datos



Problemas con las BD Generales (Primarias)

BDs que se esfuerzan por una "amplitud enciclopédica" son demasiado grandes y se vuelven inmanejables:

- ► Propensas a ser bastante redundantes
- ► Secuencias inadecuadas:
 - Viejas
 - ► Parcialmente anotadas
 - Inconsistentes y anotaciones viejas
 - Secuencias con errores o de baja calidad
 - Contaminaciones
 - Secuencias anónimas



Compendio de BDs Biológicas

The Molecular Biology Database Collection: an online compilation of relevant database resources

Andreas D. Baxevanis

Nucleic Acids Research, Volume 28, Issue 1, 1 January 2000, Pages 1–7, https://doi.org/10.1093/nar/28.1.1

Published: 01 January 2000



Abstract

The Molecular Biology Database Collection represents an effort geared at making molecular biology database resources more accessible to biologists. This online resource, available at http://www.oup.co.uk/nar/Volume_28 /Issue_01/html/gkdn15_gml.html, is intended to serve as a searchable, up-to-date, centralized jumping-off point to individual Web sites. An emphasis has also been placed on including databases where new value is added to the underlying data by virtue of curation, new data connections, or other innovative approaches.

Issue Section: Article

Compendio: Major Sequence Repositories

GenBank	http://www.ncbi.nlm.nih.gov /Web/Genbank/	All known nucleotide and protein sequences; International Nucleotide Sequence Database Collaboration
EMBL Nucleotide Sequence Database	http://www.ebi.ac.uk/embl.html	All known nucleotide and protein sequences; International Nucleotide Sequence Database Collaboration
DNA Data Bank of Japan (DDBJ)	http://www.ddbj.nig.ac.jp	All known nucleotide and protein sequences; International Nucleotide Sequence Database Collaboration
Genome Sequence Database (GSDB)	http://www.ncgr.org/gsdb	All known nucleotide and protein sequences



Ultimas BDs (2018)

Updated descriptions of databases most recently published elsewhere

Database	URL	Brief description ^a
BioMuta and BioExpress	https://hive.biochemistry.gwu.edu/biomuta	Cancer SNVs and gene expression
BioStudies	https://www.ebi.ac.uk/biostudies/	Data of all kinds relating to a single study
iSyTE	$\underline{http://research.bioinformatics.udel.edu/iSyTE}$	integrated Systems Tool for Eye gene discovery
miRandola	http://mirandola.iit.cnr.it/	Extracellular and circulating non-coding RNAs
mirDIP	http://ophid.utoronto.ca/mirDIP/	microRNA Data Integration Portal
MNDR	http://www.rna-society.org/mndr/	Mammal ncRNA-Disease Repository
NLSdb	https://rostlab.org/services/nlsdb/	Nuclear Localization Signals
PAGER 2.0	http://discovery.informatics.uab.edu/PAGER/	Pathway, Annotated-list, and Gene-signature Electronic Repository
ProteomicsDB	https://www.ProteomicsDB.org	Mass spectrometry of the human proteome
PULDB	http://www.cazy.org/PULDB_new/	Polysaccharide Utilization Loci in Bacteroidetes species
ReMap	http://remap.cisreg.eu	Transcription factor ChIP-seq data
RMDB	http://rmdb.stanford.edu	Structure mapping of RNA
SuperDrug2	http://cheminfo.charite.de/superdrug2	Approved drugs
TRRUST v2	http://www.grnpedia.org/trrust/	Transcriptional regulatory interactions in human and mouse.
TumorFusions	http://www.tumorfusions.org	Tumour fusion genes



Tarea02: Compendio de BDs Biológicas 2018

- ► En el siguiente link está el compedio de las últimas BDs Biológicas https://academic.oup.com/nar/article/46/D1/D1/4781210
- Seleccionar 4 de las últimas bases de datos y averiguar que tipo de datos contienen y para que sirven.
- ▶ De las cuatro escojer una que sea de su interés y profundizar más:
 - ► Porqué me interesa
 - Cómo podría ayudarme en mi trabajo.
 - Otras preguntas que se te ocurran.

