#### Орг. вопросы

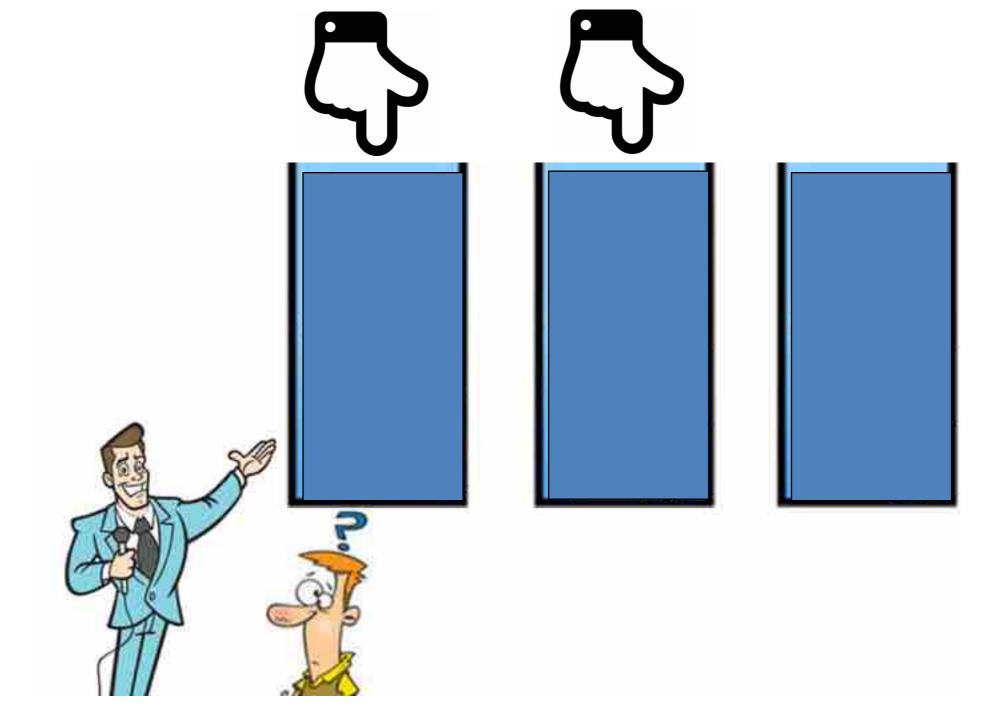
- Сайт <a href="http://intbio.org/bioinf2018-2019">http://intbio.org/bioinf2018-2019</a>
- Вводный опросник дедлайн 12 октября 23:59.
- Форма отчетности: в этом семестре зачет

## ВВЕДЕНИЕ В БИОИНФОРМАТИКУ Лекции №2-3

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

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

Сайт курса: <a href="http://intbio.org/bioinf2018-2019">http://intbio.org/bioinf2018-2019</a>



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

### Природа информации

### Информация

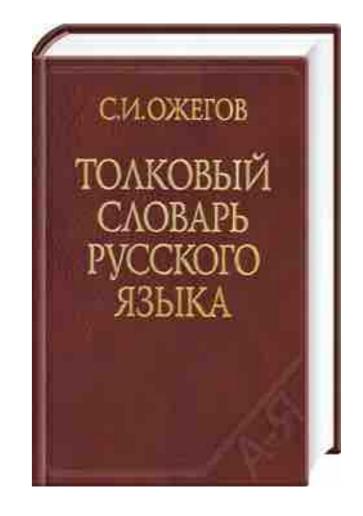
ИНФОРМАЦИЯ, 1. Сведения об окружающем мире и протекающих в нем процессах, воспринимаемые человеком или специальным устройством.

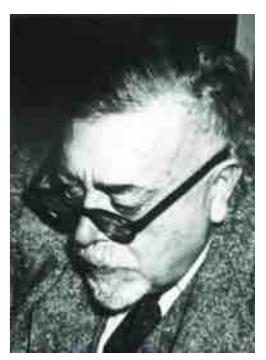


... универсального определения информации не только нет, но и быть не может из-за широты этого понятия.



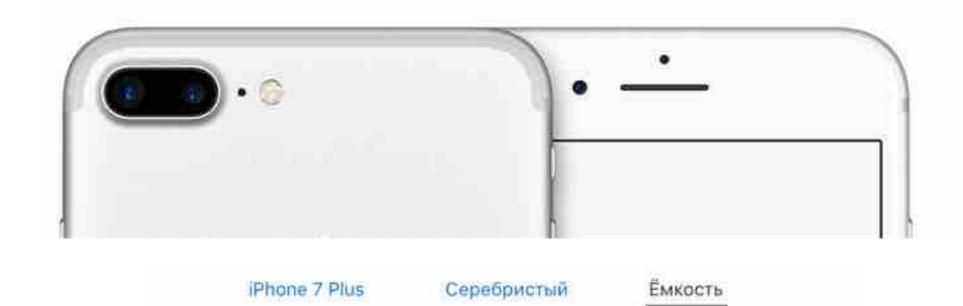
Information is information, not matter or energy.





**Norbert Wiener** 

### Информация

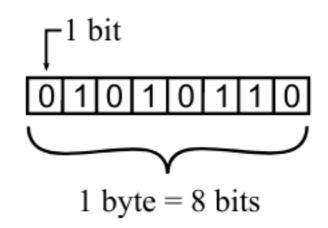


#### Теперь выберите ёмкость.

32 гб¹ 128 гб¹ 60 990.00 руб.

Доставка: на складе Доставка: на складе

### Измерение информации



		Из	мерения в	байтах
гос	T 8.417-200	2	Приста	вки СИ
Название С	бозначение	Степень	Название	Степень
байт	Б	10 <sup>0</sup>	<i>201</i>	100
килобайт	кбайт	10 <sup>3</sup>	кило-	10 <sup>3</sup>
мегабайт	Мбайт	10 <sup>6</sup>	мега-	106
гигабайт	Гбайт	10 <sup>9</sup>	гига-	109
терабайт	Тбайт	10 <sup>12</sup>	тера-	1012
петабайт	Пбайт	10 <sup>15</sup>	пета-	10 <sup>15</sup>
эксабайт	Эбайт	10 <sup>18</sup>	экса-	10 <sup>18</sup>
зеттабайт	Збайт	10 <sup>21</sup>	зетта-	10 <sup>21</sup>
иоттабайт	Ибайт	10 <sup>24</sup>	иотта-	1024

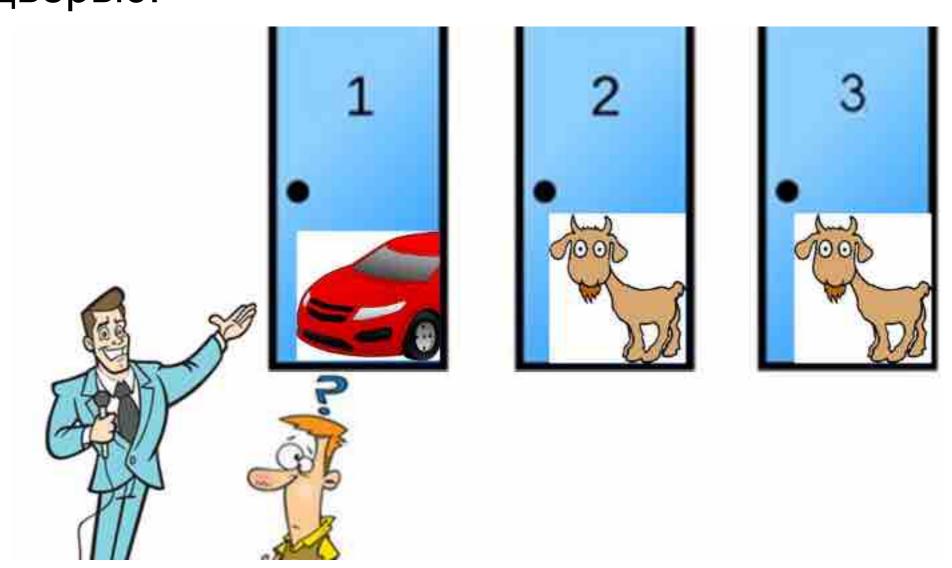
Decimal	Binary	
0	0000	
1	0001	
2	0010	
3	0011	
4	0100	
5	0101	
6	0110	
7	0111	
8	1000	
9	1001	

Вероятность того, что машина за этой дверью:

1/3

1/3

1/3

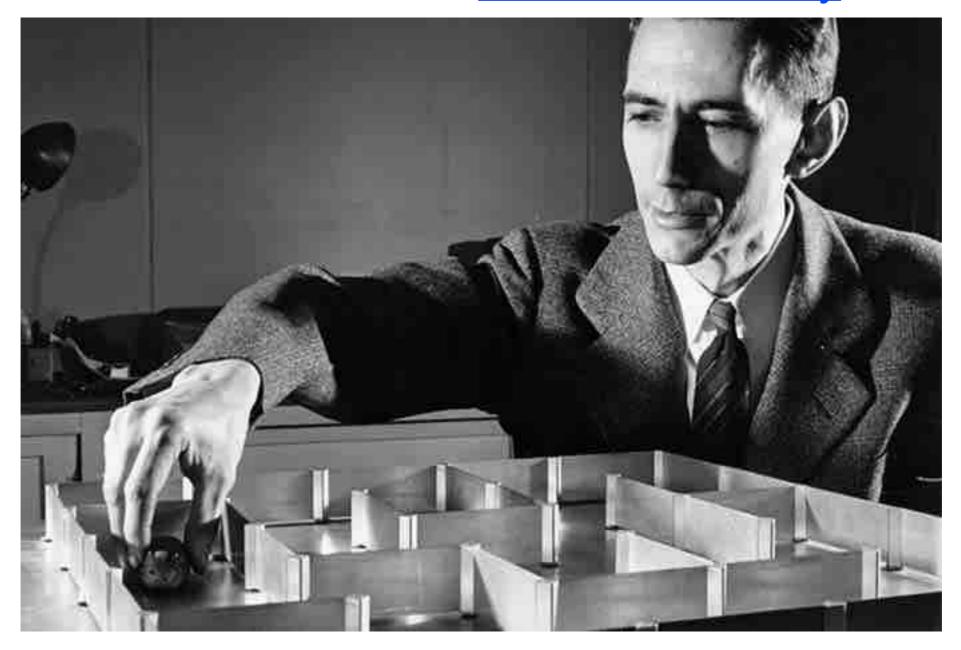


• Сколько информации нужно, чтобы закодировать положении машины?

1.5849625007211563... бит

### Теория информации

"the father of information theory"



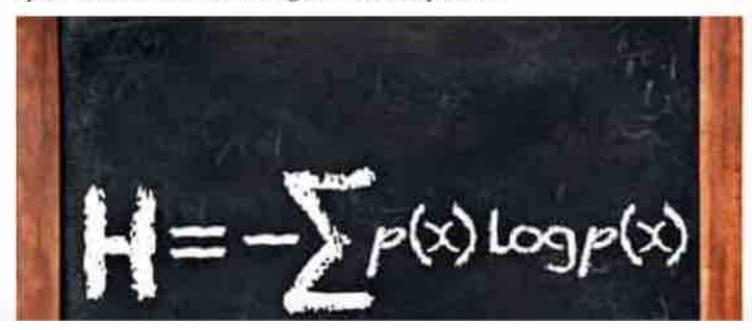
Claude Elwood Shannon (April 30, 1916 – February 24, 2001)

### Теория информации

Science A short history of equations

# Without Claude Shannon's information theory there would have been no internet

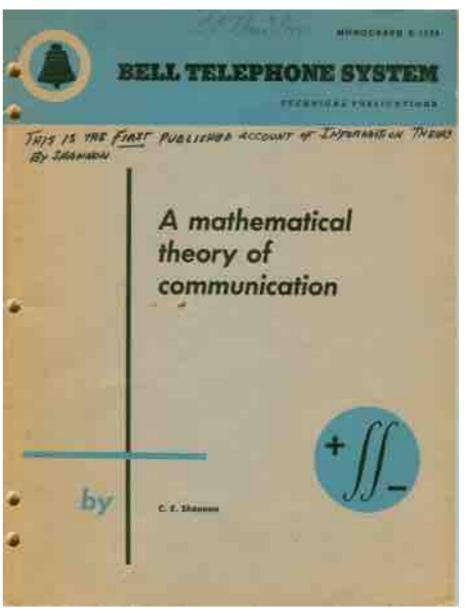
It showed how to make communications faster and take up less space on a hard disk, making the internet possible



Введена мера информации(!)

кг, метр, секунда + БИТ





1948

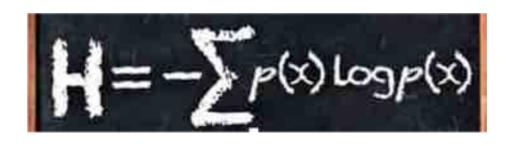
### Информационная энтропия

<u>Клод Шеннон</u> 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;

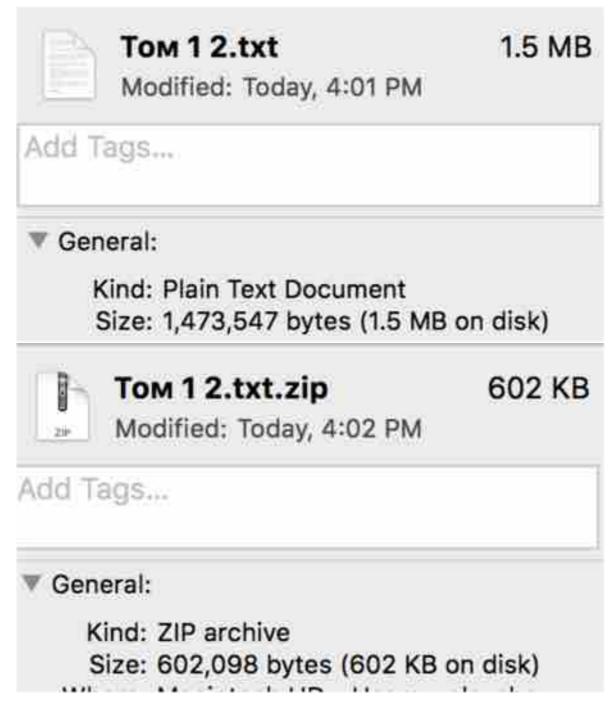
2.в случае, когда все варианты (буквы в приведённом примере) равновероятны, увеличение количества вариантов (букв) должно всегда увеличивать значение функции;

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.



### Сжатие информации





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

### Сжатие информации

#### Кодирование длин серий

Посчитаем количество повторяющихся символов:

```
    12 символов «W»;
```

2. 1 символ «В»;

12 символов «W»;

4. 3 символа «В»;

5. 24 символа «W»;

6. 1 символ «В»;

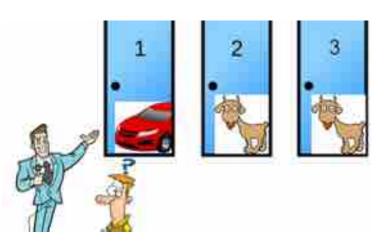
7. 14 символов «W».

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

12W1B12W3B24W1B14W

### Информационная энтропия





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

1.5849625007211563... бит

#### Энтропия

# Информационная и физическая энтропии имеют глубинную связь



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

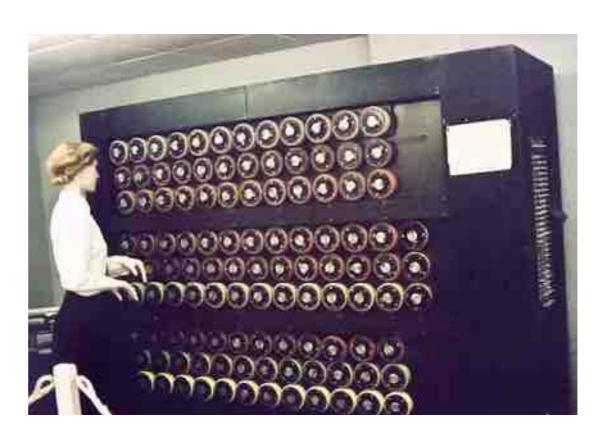
В термодинамике и кинетической теории, H - теорема, полученная <u>Больцманом</u> в <u>1872 году,</u> описывает неубывания энтропии идеального газа в необратимых процессах, исходя из уравнения Больцмана.

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

Ludwig Eduard Boltzmann

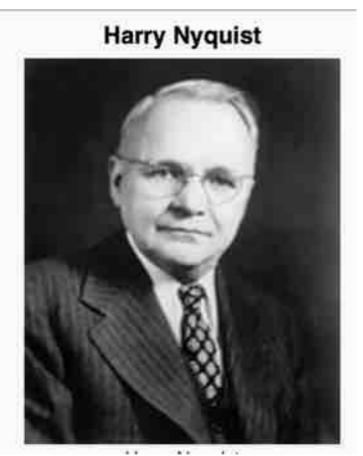
- Комплексная область: теоретические, практические, физические аспекты
- Вопросы сжатия данных
- Вопросы надежности
- Вопросы шифрования и защиты данных (особенно в медицине и биологии)

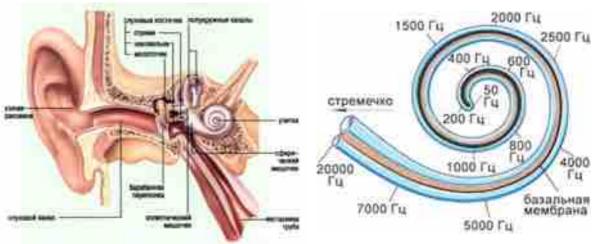




#### Связь частоты сигнала и пропускной способности







<u>1908</u> - <u>2005</u>

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

#### Связь частоты сигнала и пропускной способности

Ralph Hartley



$$1888 - 1970$$

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

где

C — пропускная способность канала, бит/с;

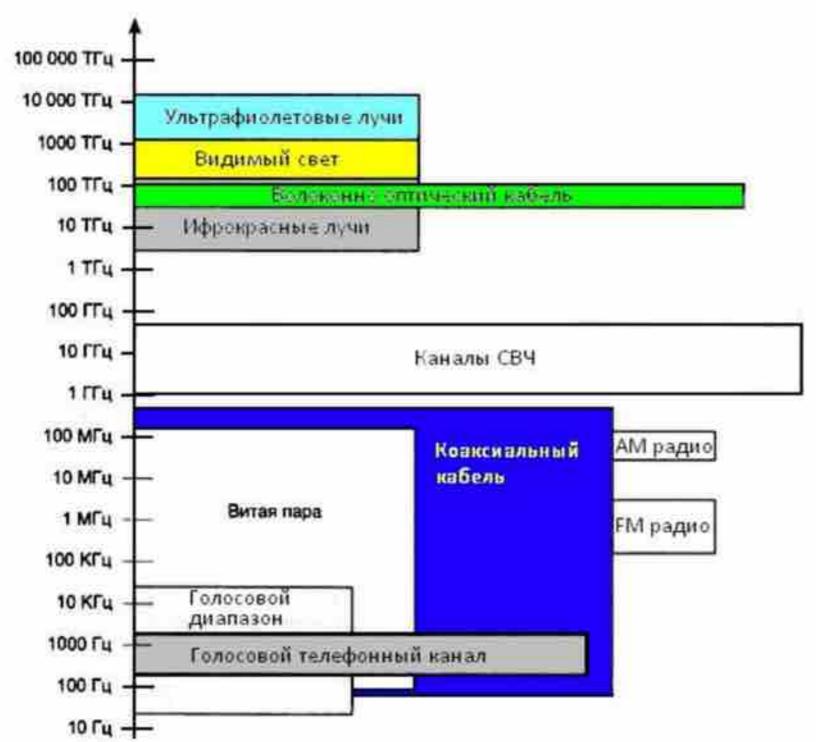
B — полоса пропускания канала, Гц;

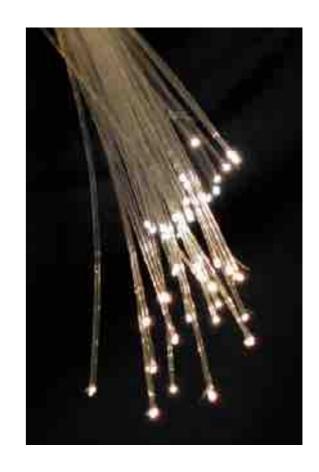
S — полная мощность сигнала над полосой пропускания, Вт или  $\mathsf{B}^2$ ;

N — полная шумовая мощность над полосой пропускания,  $B_T$  или  $B_2$ ;

S/N — отношение мощности сигнала к шуму (SNR).

Теорема Шеннона-Хартли



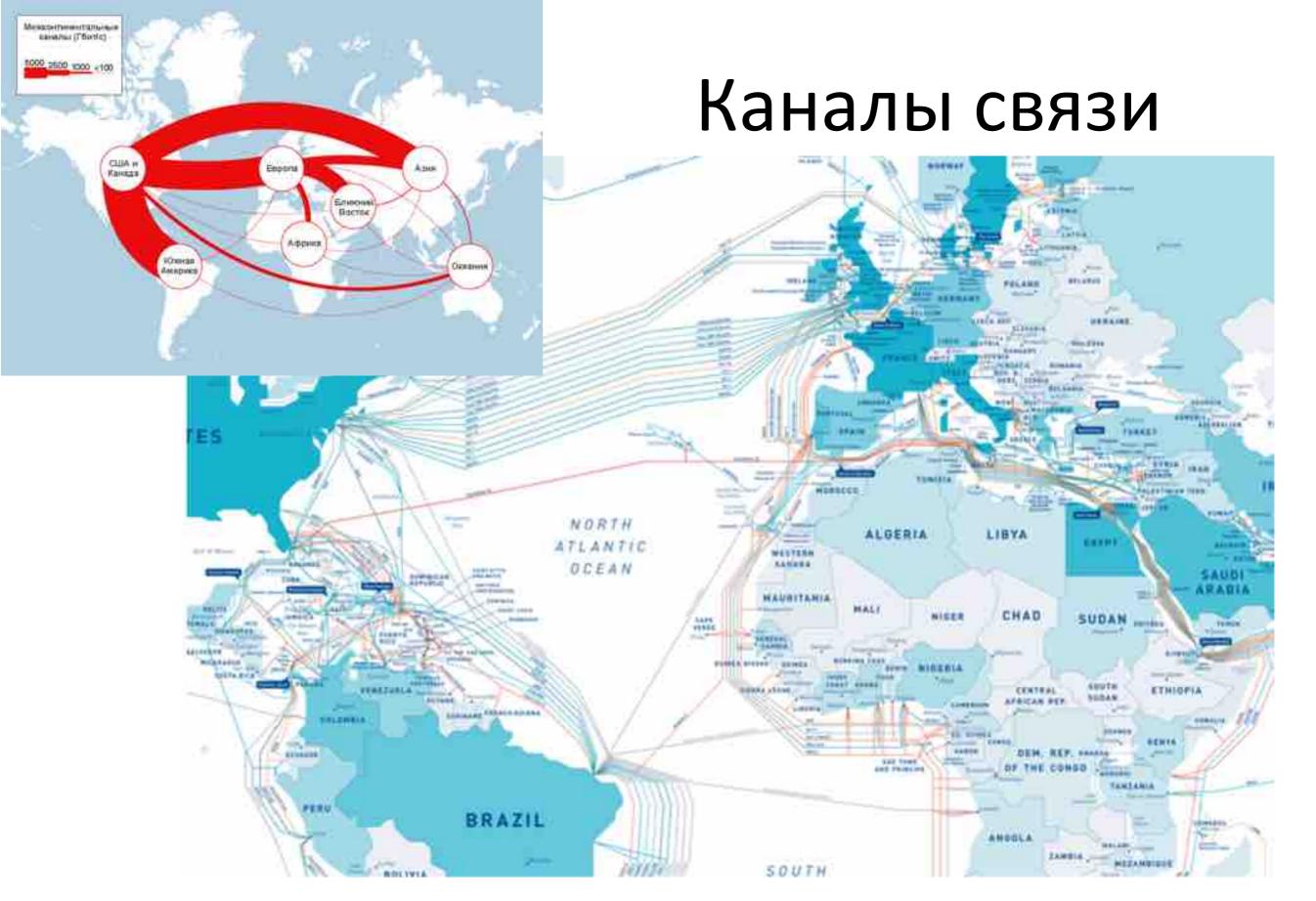


Оптоволокно



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

#### Антенны КНЧ



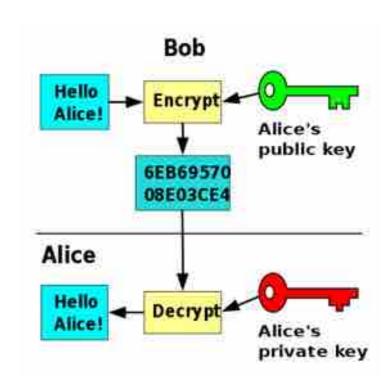
Карта подводных кабелей

### Шифрование информации



### Криптосистемы с открытым ключом





#### Необратимая Хэш функция

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

### Хранение информации

### Хранение информации



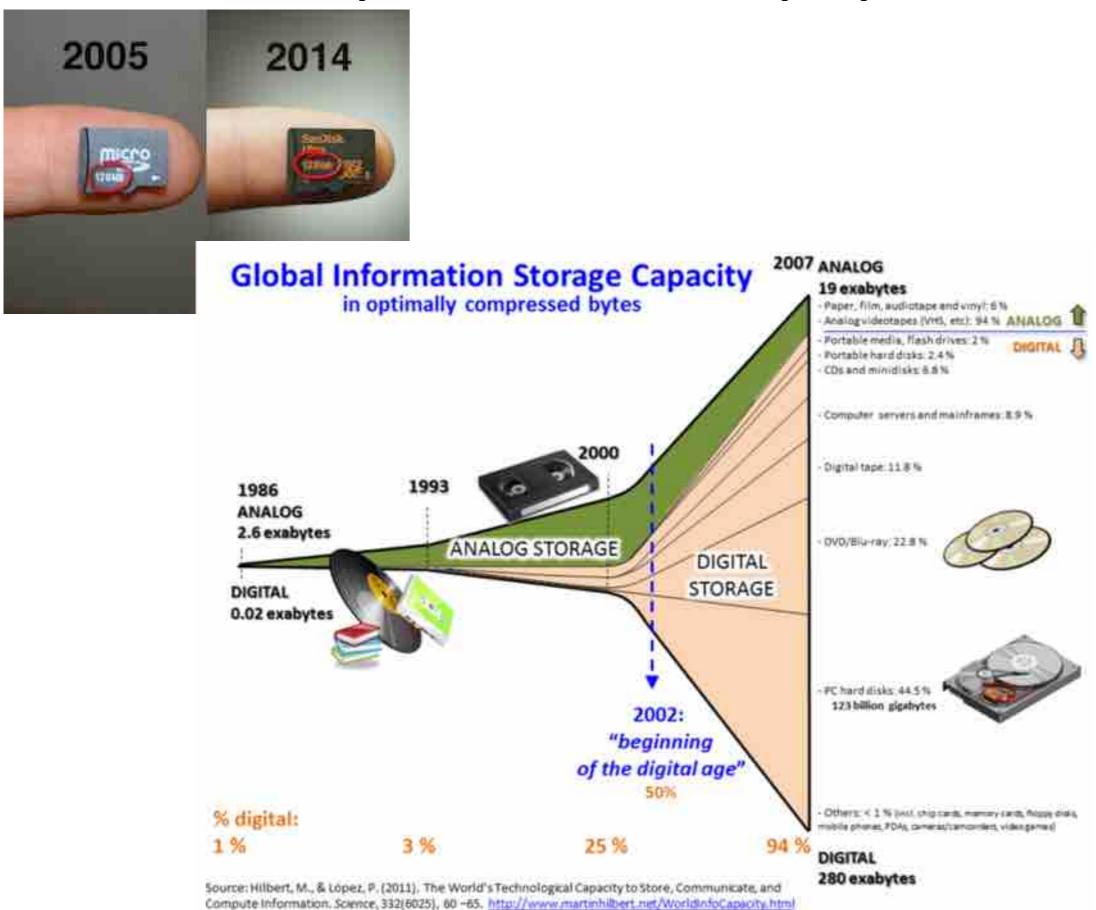






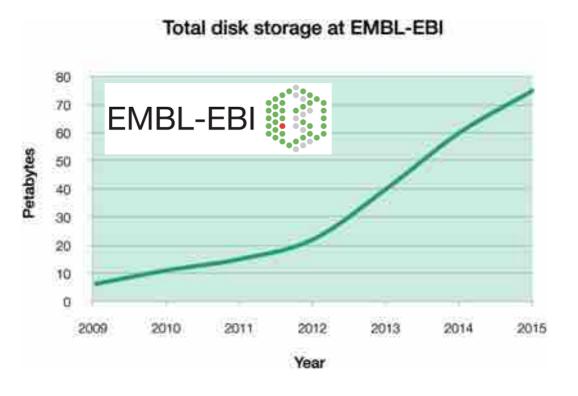


#### Хранение информации



#### Большие данные в биомедицине







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



Геном человека ~ 3.3 Gb x100 секвенирование ~300Gb





#### 25000 образцов опухолей

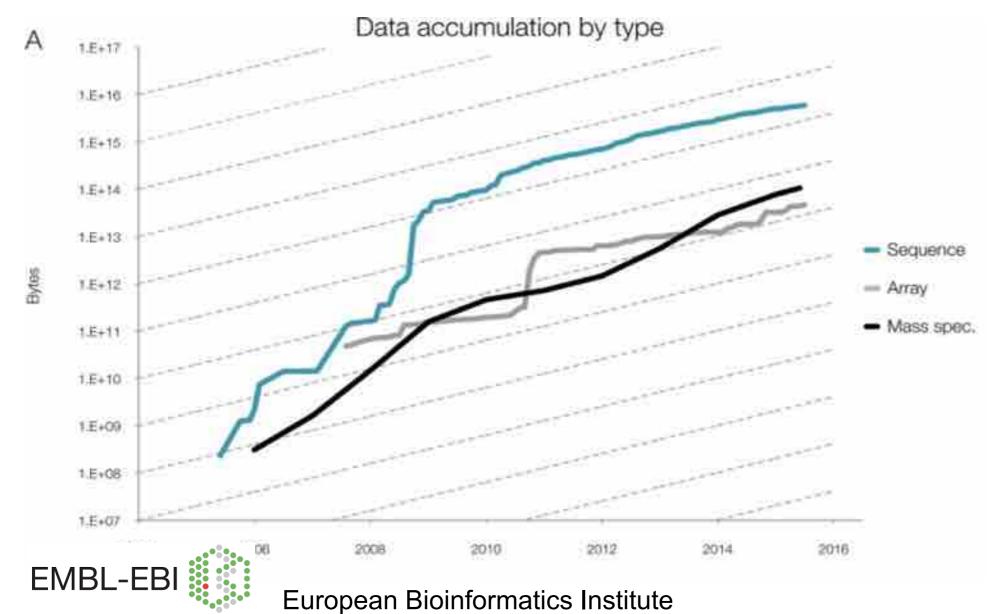
#### Международный проект, данные распределены по миру

	HeID ▼	Donor (	Repository	Project :	Study	Data Type :	Strategy :	Format	Size	Lett
	A F79995	DO217962	PCAWG - London, PCAWG - Barcelona, Collaboratory - Toronto, EGA - Hinxton	BRCA-EU		Aligned Reads	WGS	BAM	128,72.G8	MC
0	₩ F77294	00217962	PCAWG - London, PCAWG - Barcelona, Collaboratory - Toronto, EGA - Hinxton	BRCA-EU	FCANN	Aligned Reads	WG5	BAM	107.27 GB	1047
D	● F19974	DD46390	PCAWG - London, PCAWG - Barcelona, EGA - Hinxton, Collaboratory - Toronto, AWS - Virginia	DVAU	Gimb	Afigned Reads	WGS	BAM	134.05 GB	106
	<b>▲</b> FEFF13	0046390	PCAWG - London, PCAWG - Barrelona, Collaboratory - Toronto, AWS - Virginia, EGA - Hinxton	DV-AU	(CAMS)	Aligned Reads	WGS	BAM	101.45 GB	1047
0	<b>₽</b> ₹19706	DO2ZZ309	PCAWG - Chicago (TCGA), PDC - Chicago	DLBC-US	(CO)	Aligned Reads	MOR	BAM	202.00 GB	
	₽ FIS955	00222303	PCAWG - Chicago (TCGA), PDC - Chicago	OLEC-US		Aligned Reads	WGS	BAM	100.77 GB	

#### Централизованные репозитории омиксных данных









#### Genomes en masse



5 years ~ 100 000 genomes









#### Структурная биология и моделирование



European XFEL, Hamburg

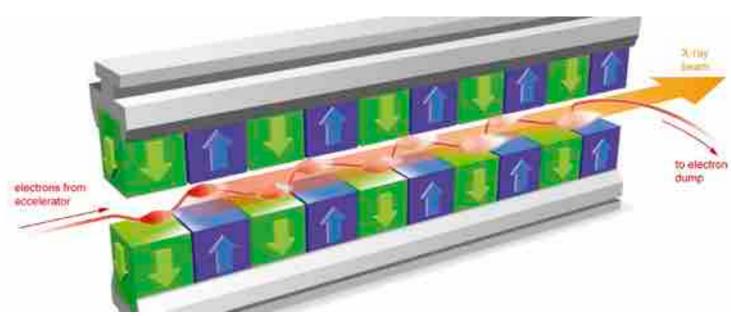


Liquid jet

Rear pnCCD
(z = 564 mm)

Interaction Front pnCCD
(z = 68 mm)

27000 импульсов в секунду



#### Передача больших данных

#### Выделенные научно-образовательные сети 100Gbit/s



Figure 1: Asia Pacific Ring (APR)



Программные решения





### Базы данных

#### Базы данных

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





#### Реляционные базы данных

Клиент	n	11	Francisco 1	
Id_кл	Фамилия	имя	Отчество	
15	Иванов	Иван	Иванович	
16	Петров	Петр	Петрович	
17	Николаев	Николай	Николаевич	

106ap				
Id_ros	Название			
1 50	Шкаф			
-2	Стул			
3	Стол			

120			
- 2	ME	75	27
-01	4.0		1.3

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 Транзакции
данных Атомарность
Изолированность

Соответствие требованиям ACID

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

Надежность

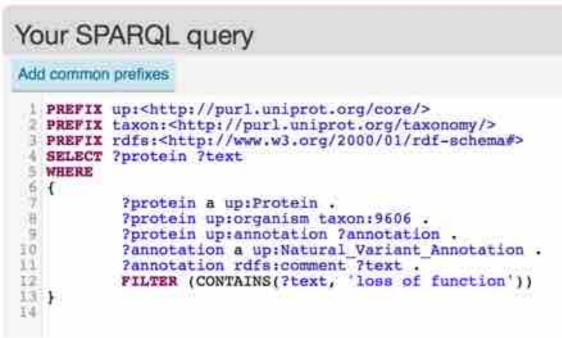
## Resource Description Framework

## Язык SPARQL

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







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

# 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")

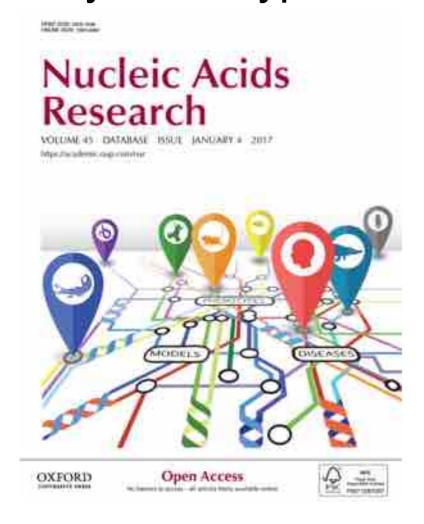
#### Data provenance [edit]

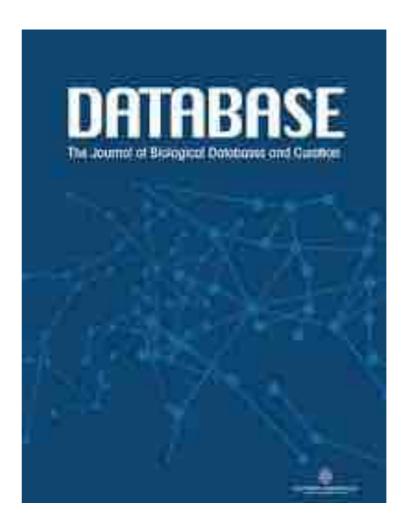
Scientific research is generally held to be of good provenance when it is documented in detail sufficient to allow reproducibility. [27][28] Scientific workflow systems assist scientists and programmers with tracking their data through all transformations, analyses, and interpretations. Data sets are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





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





 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

## 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





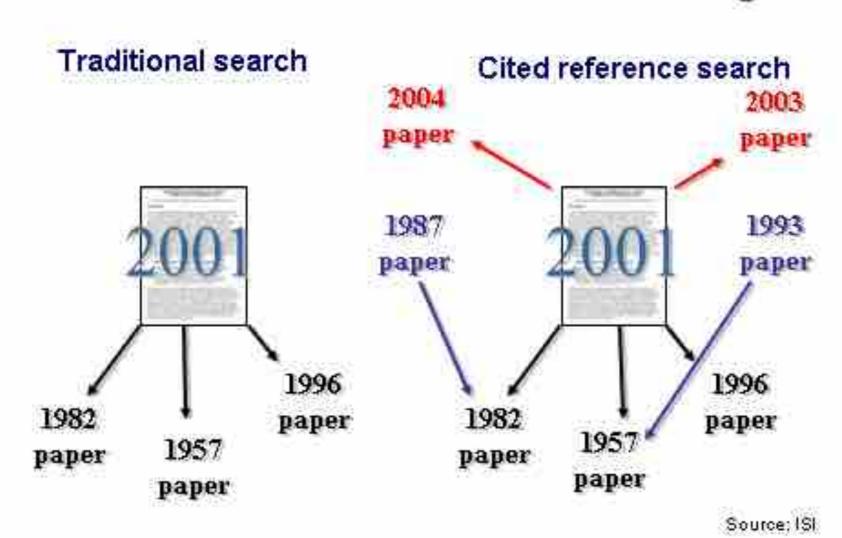
## Clinical/Biomedical

**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



## Cited Reference Searching



# 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/





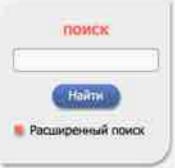
Scopus – covers >18,500 journals from 1823 to present, complete citation counts for indexed articles 1996 to present; a general science database, not a specialized database – useful for cited reference, conference information & affiliations (institutions)

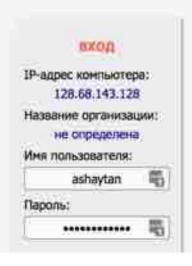
https://www.scopus.com/



## Общенаучные базы данных цитирований







#### НАУЧНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ БИБЛИОТЕКА

## **ELIBRARY.RU**

ЧИТАТЕЛЯМ | ОРГАНИЗАЦИЯМ | ИЗДАТЕЛЬСТВАМ | АВТОРАМ | БИБЛИОТЕКАМ

#### ОСНОВНЫЕ ПРОЕКТЫ НА ПЛАТФОРМЕ eLIBRARY.RU

Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - это крупнейший российский информационно-аналитический портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 26 млн научных статей и публикаций, в том числе влектронные версии более 5600 российских научнотехнических журналов, из которых более 4800 журналов в открытом доступе. Подробнее...

#### РОССИЙСКИЙ ИНДЕКС НАУЧНОГО ЦИТИРОВАНИЯ

Национальная библиографическая база данных научного цитирования, аккумулирующая более 12 миллионов публикаций российских ученых, а также информацию о ципировании этих публикаций из более 6000 российских журналов

#### SCIENCE INDEX ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИЙ

Информационно-аналитическая система Science Index для анализа публикационной активности и цитируемости ймивеинелар хиничен

#### SCIENCE INDEX ДЛЯ АВТОРОВ

Инструменты и сервисы, предлагаемые зарегистрированных авторов научных публикаций

#### **RUSSIAN SCIENCE CITATION INDEX**

Совместный проект компаний Clarivate Analytics и Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU

#### новости и объявления

- 26.01 Опубликована программа конференции SCIENCE ONLINE 2018
- 19.01 Открыта регистрация на семинар: "Использование РИНЦ и Science Index для анализа и оценки научной деятельности" 27 февраля
- 12.01 Открыт свободный доступ к архивам журналов Российской академии Hayk
- 65.10 Продолжение конкурсной поддержки программ развития научных журналов

Другие новости

#### ТЕКУЩЕЕ СОСТОЯНИЕ

число наименований журналов:	62015
- из них российских журналов:	15351
<ul> <li>из них выходящих в настоящее время;</li> </ul>	13115
Число журналов, индексируемых в РИНЦ:	5200
Число журналов с полными текстами:	10721
- из них в открытом доступе:	5537
and the second second second	



Открытый доступ к журналам Российской акалемии наук





Подписка научных организаций на информационно-аналитическую систему SCIENCE INDEX

# Реферативные базы данных Общенаучные базы данных цитирований

# Google Scholar

	Q
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

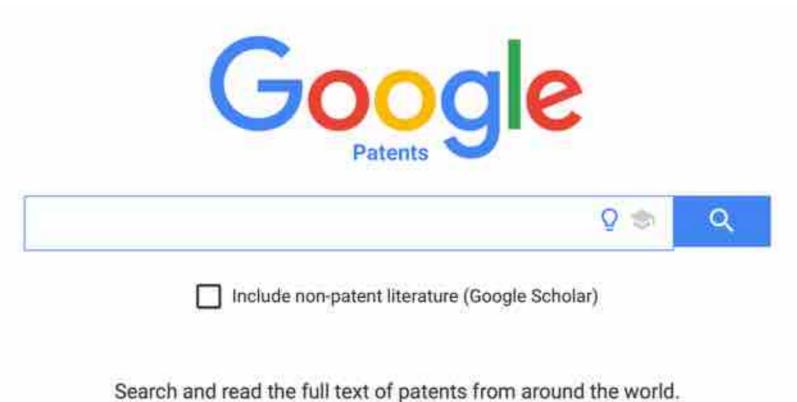
```
Open DOAR <a href="http://www.opendoar.org/index.html">http://www.opendoar.org/index.html</a>; 
OpenThesis <a href="http://www.openthesis.org/">http://www.openthesis.org/</a>; 
BASE – Bielefeld Academic Search Engine - <a href="http://www.base-search.net/">http://www.base-search.net/</a> 
> refine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

ProQuest Dissertations & Theses
Database <a href="http://www.proquest.com/products-services/pqdt.html">http://www.proquest.com/products-services/pqdt.html</a> - 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



## 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).









## База данных GenBank

Открытая БД нуклеотидных последовательностей, учреждена в 1982 г.

2017: > 300 000 организмов, ~ 203 млн. последовательностей,

~ 240 млрд. пар оснований



#### Sample GenBank Record

This page presents an annotated sample GenBank record (accession number **U49845**) in its *GenBank Flat File* format. You can see the corresponding live record for U49845, and see examples of other records that show a range of biological features.

```
LOCUS
            SCU49845
                         5028 bp
                                     DNA
                                                     PLN
                                                                21-JUN-1999
            Saccharomyces cerevisiae TCP1-beta gene, partial cds, and Ax12p
DEFINITION
            (AXL2) and Rev7p (REV7) genes, complete cds.
            U49845
ACCESSION
VERSION
            U49845.1 GI:1293613
KEYWORDS
            Saccharomyces cerevisiae (baker's yeast)
SOURCE
  ORGANISM
            Saccharomyces cerevisiae
            Eukaryota; Fungi; Ascomycota; Saccharomycotina; Saccharomycetes;
            Saccharomycetales; Saccharomycetaceae; Saccharomyces.
            1 (bases 1 to 5028)
REFERENCE
            Torpey, L.E., Gibbs, P.E., Nelson, J. and Lawrence, C.W.
  AUTHORS
            Cloning and sequence of REV7, a gene whose function is required for
  TITLE
            DNA damage-induced mutagenesis in Saccharomyces cerevisiae
            Yeast 10 (11), 1503-1509 (1994)
  JOURNAL
            7871890
  PUBMED
REFERENCE
            2 (bases 1 to 5028)
  AUTHORS
            Roemer, T., Madden, K., Chang, J. and Snyder, M.
  TITLE
            Selection of axial growth sites in yeast requires Ax12p, a novel
            plasma membrane glycoprotein
            Genes Dev. 10 (7), 777-793 (1996)
  JOURNAL
  PUBMED
            8846915
```

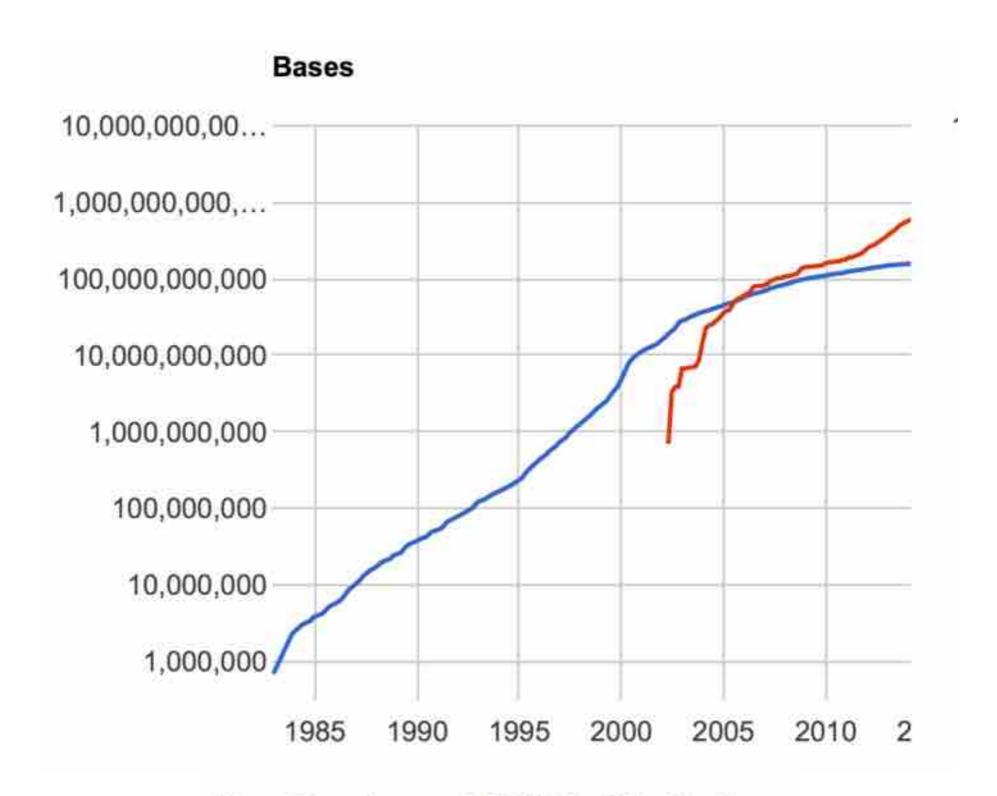
## База данных GenBank. Структура файла

```
/translation="MGQPGNGSAFLLAPNGSHAPDHDVTQQRDEVWVVGMGIVMSLIVL
FT
FΤ
            AIVFGNVLVITAIAKFERLOTVTNYFITSLACADLVMGLAVVPFGAAHILMKMWTFGNF
            WCEFWTSIDVLCVTASIETLCVIAVDRYFAITSPFKYQSLLTKNKARVIILMVWIVSGL
FT
FΤ
            TSFLPIOMHWYRATHOEAINCYANETCCDFFTNOAYAIASSIVSFYVPLVIMVFVYSRV
FT
            FOEAKROLOKIDKSEGRFHVONLSOVEODGRTGHGLRRSSKFCLKEHKALKTLGIIMGT
FT
            FTLCWLPFFIVNIVHVIQDNLIRKEVYILLNWIGYVNSGFNPLIYCRSPDFRIAFQELL
FΤ
            CLRRSSLKAYGNGYSSNGNTGEOSGYHVEOEKENKLLCEDLPGTEDFVGHOGTVPSDNI
FT
            DSQGRNCSTNDSLL«
                  46
   variation
            /gene="ADRB2«
FT
FT
            /replace="a«
FT
            /note="Arg16 to Gly polymorphism«
XX
```

## База данных GenBank. Структура файла

. . .

```
SQ Sequence 1242 BP; 275 A; 331 C; 326 G; 310 T; 0 other;
                                                                     60
atggggcaac ccgggaacgg cagcgccttc ttgctggcac ccaatggaag ccatgcgccg
                                                                    120
gaccacgacg tcacgcagca aagggacgag gtgtgggtgg tgggcatggg catcgtcatg
                                                                    180
tctctcatcg tcctggccat cgtgtttggc aatgtgctgg tcatcacagc cattgccaag
                                                                    240
ttcgagcgtc tgcagacggt caccaactac ttcatcactt cactggcctg tgctgatctg
                                                                    300
gtcatgggcc tggcagtggt gccctttggg gccgcccata ttcttatgaa aatgtggact
tttggcaact tctggtgcga gttttggact tccattgatg tgctgtgcgt cacggccagc
                                                                    360
attgagaccc tgtgcgtgat cgcagtggat cgctactttg ccattacttc acctttcaag
                                                                    420
taccagagcc tgctgaccaa gaataaggcc cgggtgatca ttctgatggt gtggattgtg
                                                                    480
                                                                    540
tcaggcctta cctccttctt gcccattcag atgcactggt accgggccac ccaccaggaa
                                                                    600
gccatcaact gctatgccaa tgagacctgc tgtgacttct tcacgaacca agcctatgcc
attgcctctt ccatcgtgtc cttctacgtt cccctggtga tcatggtctt cgtctactcc
                                                                    660
agggtctttc aggaggccaa aaggcagctc cagaagattg acaaatctga gggccgcttc
                                                                    720
                                                                    780
catgtccaga accttagcca ggtggagcag gatgggcgga cggggcatgg actccgcaga
                                                                    840
tcttccaagt tctgcttgaa ggagcacaaa gccctcaaga cgttaggcat catcatgggc
actttcaccc tctgctggct gcccttcttc atcgttaaca ttgtgcatgt gatccaggat
                                                                    900
                                                                    960
aacctcatcc gtaaggaagt ttacatcctc ctaaattgga taggctatgt caattctggt
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
//
```



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"

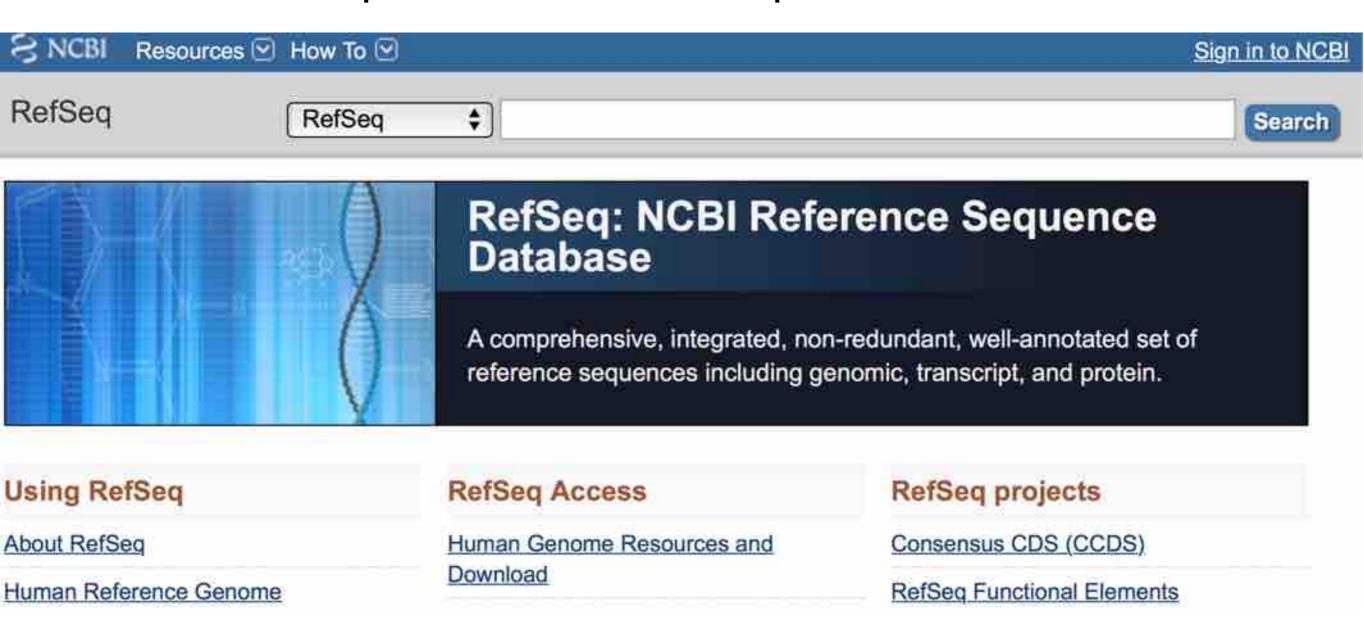
/isolate="Cuban cahibo cigar, gift from President Fidel

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

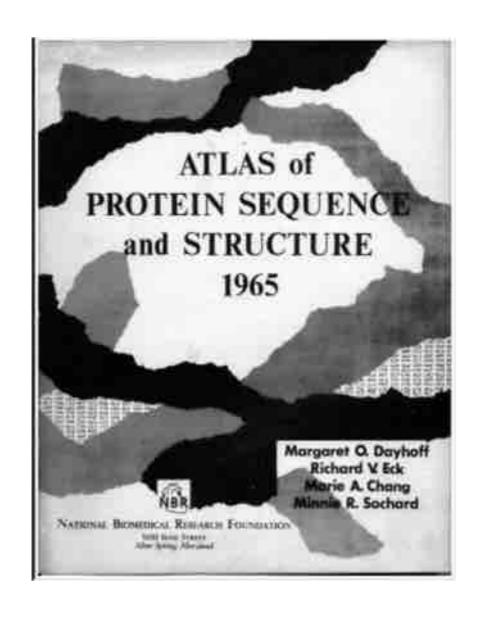
- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы 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

/translation="MGQPGNGSAFLLAPNGSHAPDHDVTQQRDEVWVVGMGIVMSLIVL FΤ FΤ AIVFGNVLVITAIAKFERLOTVTNYFITSLACADLVMGLAVVPFGAAHILMKMWTFGNF FTWCEFWTSIDVLCVTASIETLCVIAVDRYFAITSPFKYOSLLTKNKARVIILMVWIVSGL FΤ TSFLPIOMHWYRATHOEAINCYANETCCDFFTNOAYAIASSIVSFYVPLVIMVFVYSRV FQEAKRQLQKIDKSEGRFHVQNLSQVEQDGRTGHGLRRSSKFCLKEHKALKTLGIIMGT FTFTFTLCWLPFFIVNIVHVIODNLIRKEVYILLNWIGYVNSGFNPLIYCRSPDFRIAFOELL FΤ CLRRSSLKAYGNGYSSNGNTGEOSGYHVEOEKENKLLCEDLPGTEDFVGHOGTVPSDNI FΤ **DSOGRNCSTNDSLL**« variation 46 /gene="ADRB2« FT/replace="a« FΤ /note="Arg16 to Gly polymorphism« FΤ 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



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,<sup>[8]</sup> iProClass, and iProLINK.

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

## Белковые базы данных



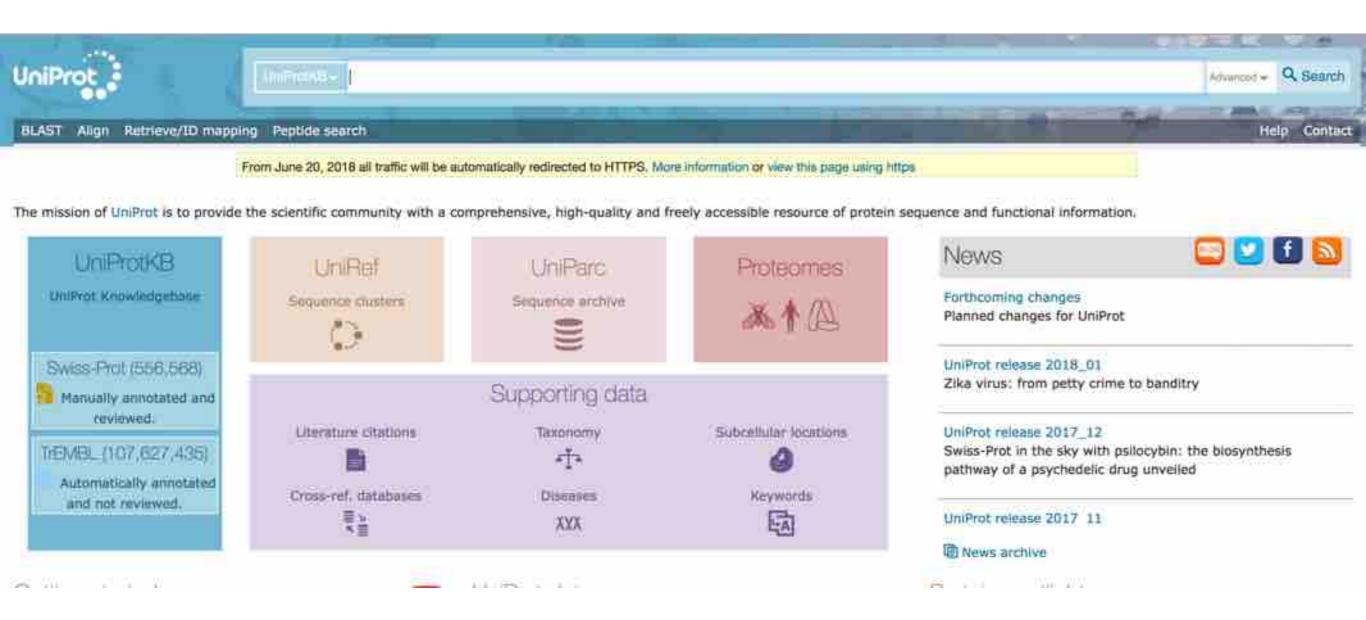






**UniProt** — наиболее всеобъемлющий каталог информации о белках, объединяющий в себе данные из UniProtKB/Swiss-Prot, UniProtKB/TrEMBL и PIR.

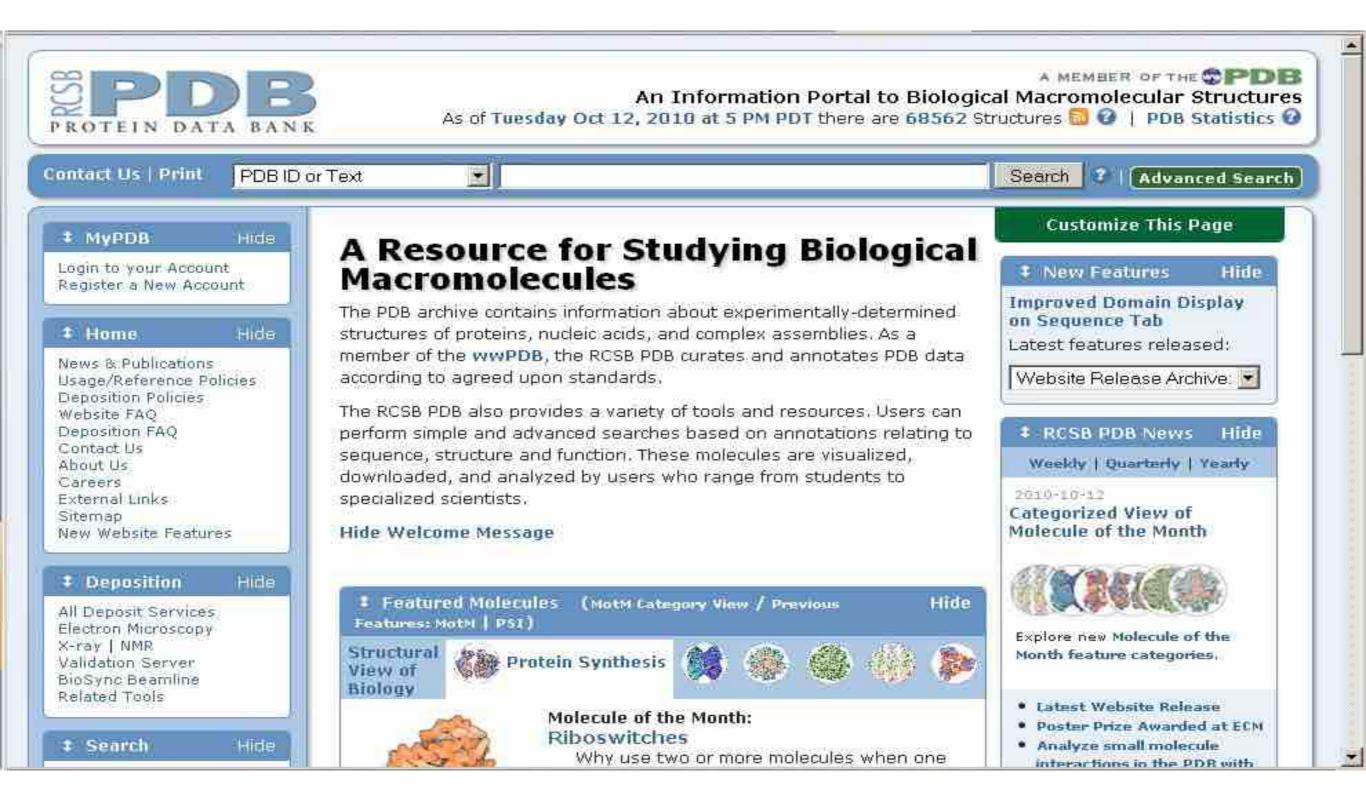
## Белковые базы данных



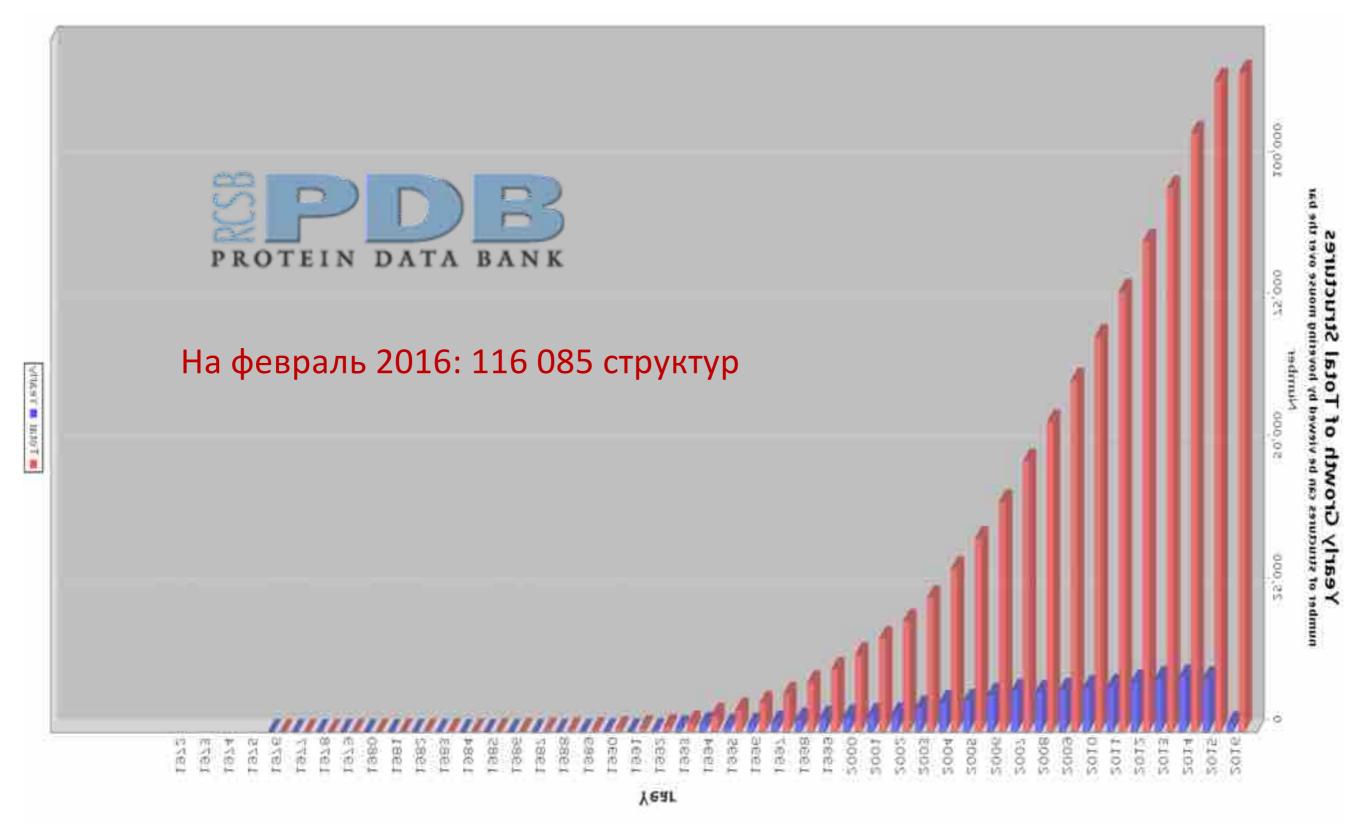
Качественно аннотированную информацию о белках нужно искать в **UniProtKB** 

## План

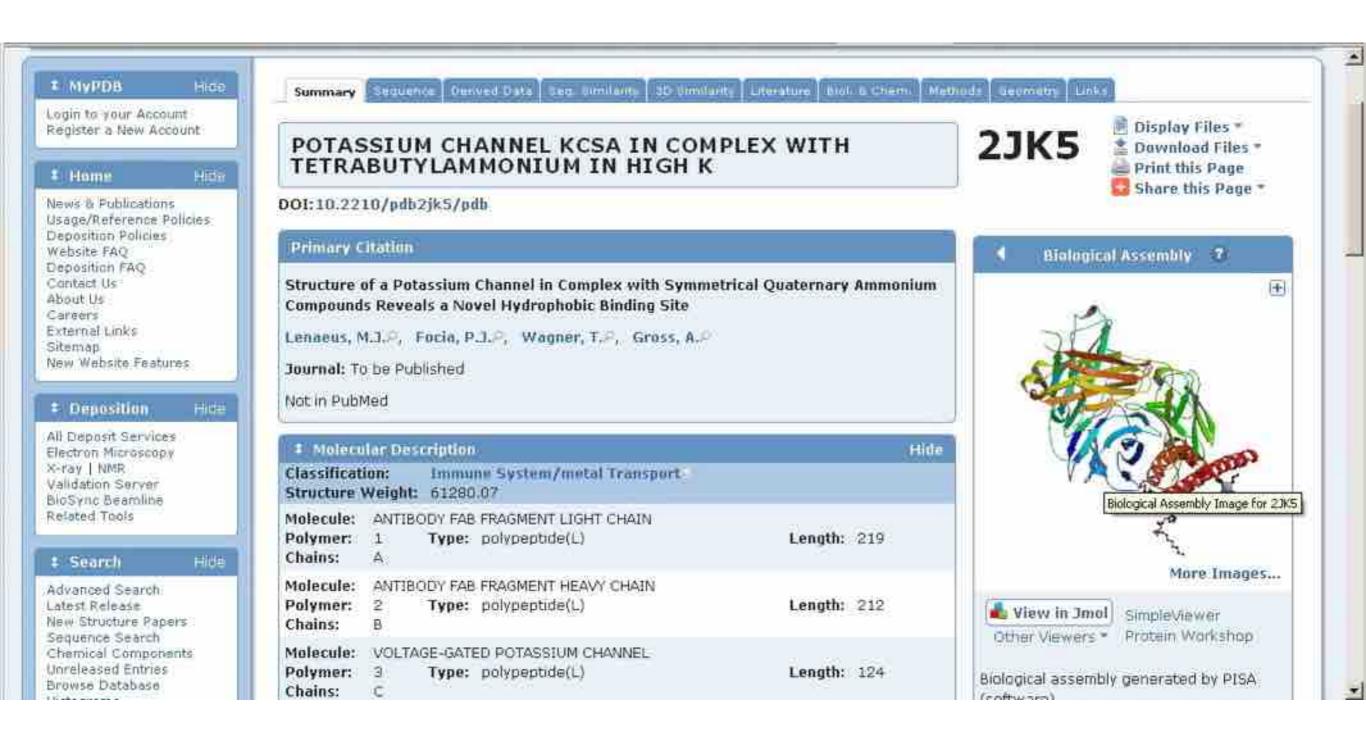
- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы 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



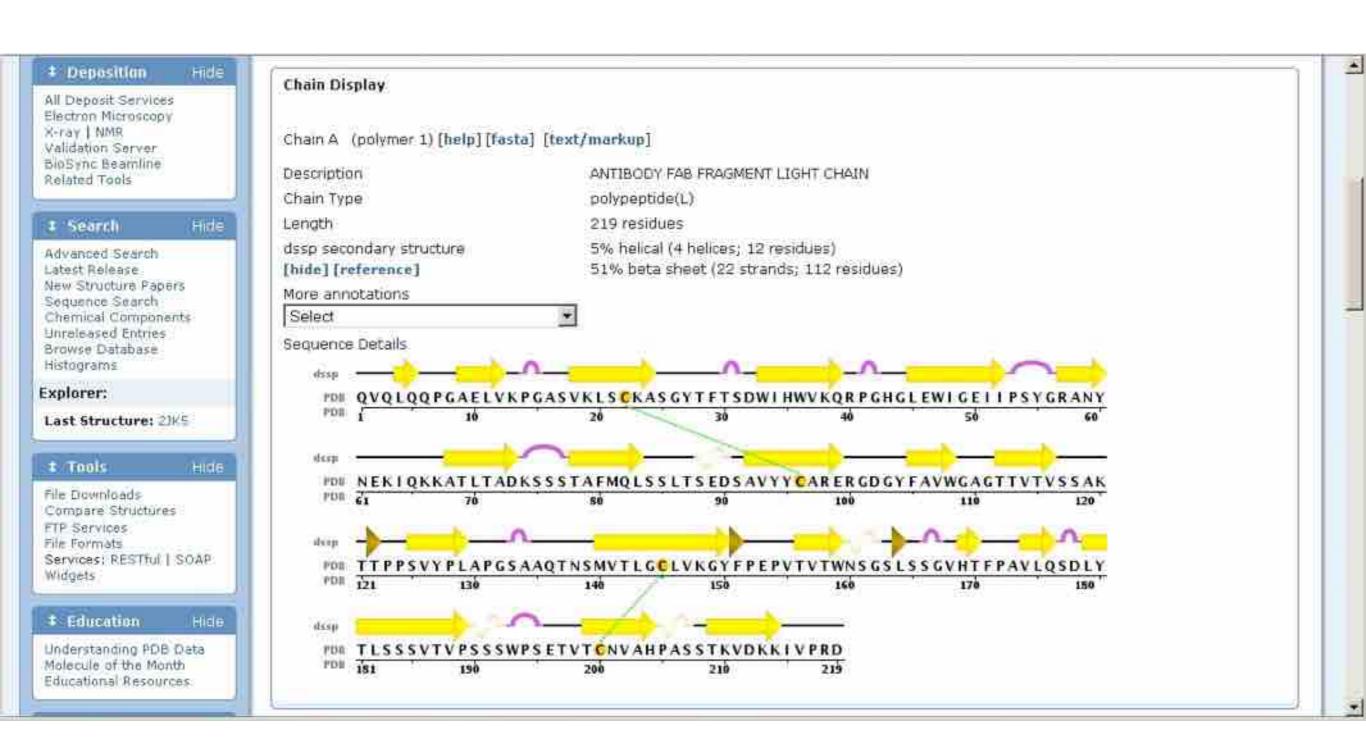
PDB – содержит информацию об экспериментально определенных структурах белков, нуклеиновых кислот и различных комплексов.



#### POTASSIUM CHANNEL KCSA IN COMPLEX WITH TETRABUTYLAMMONIUM IN HIGH K



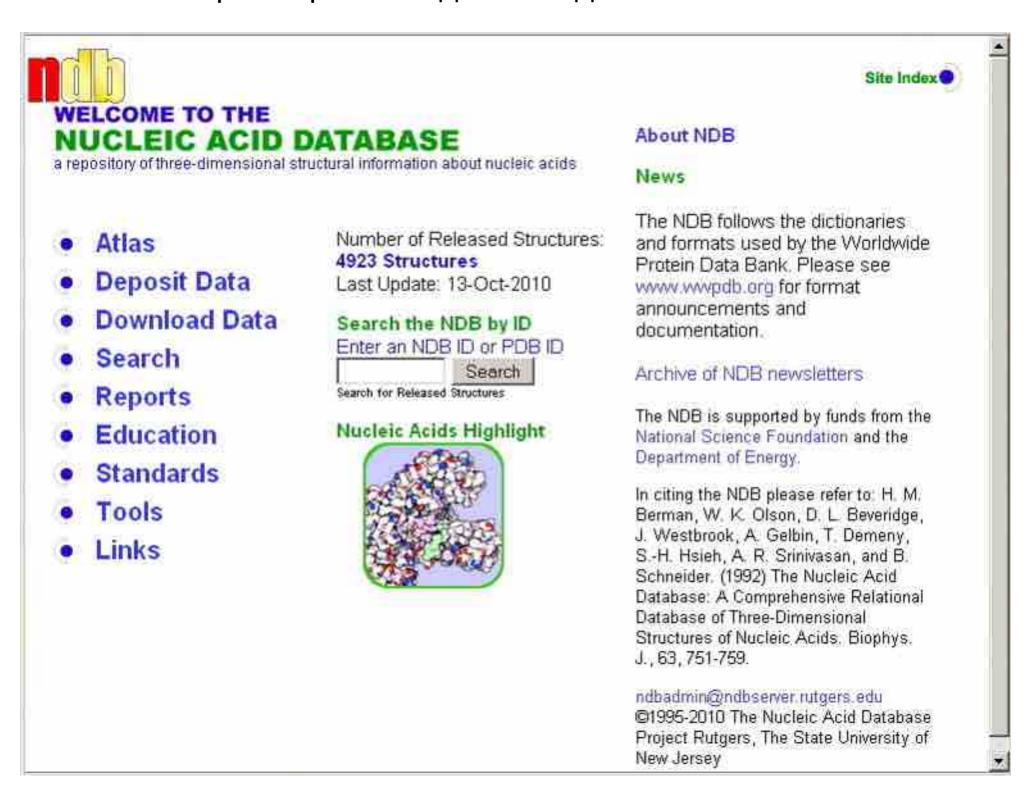
#### POTASSIUM CHANNEL KCSA IN COMPLEX WITH TETRABUTYLAMMONIUM IN HIGH K

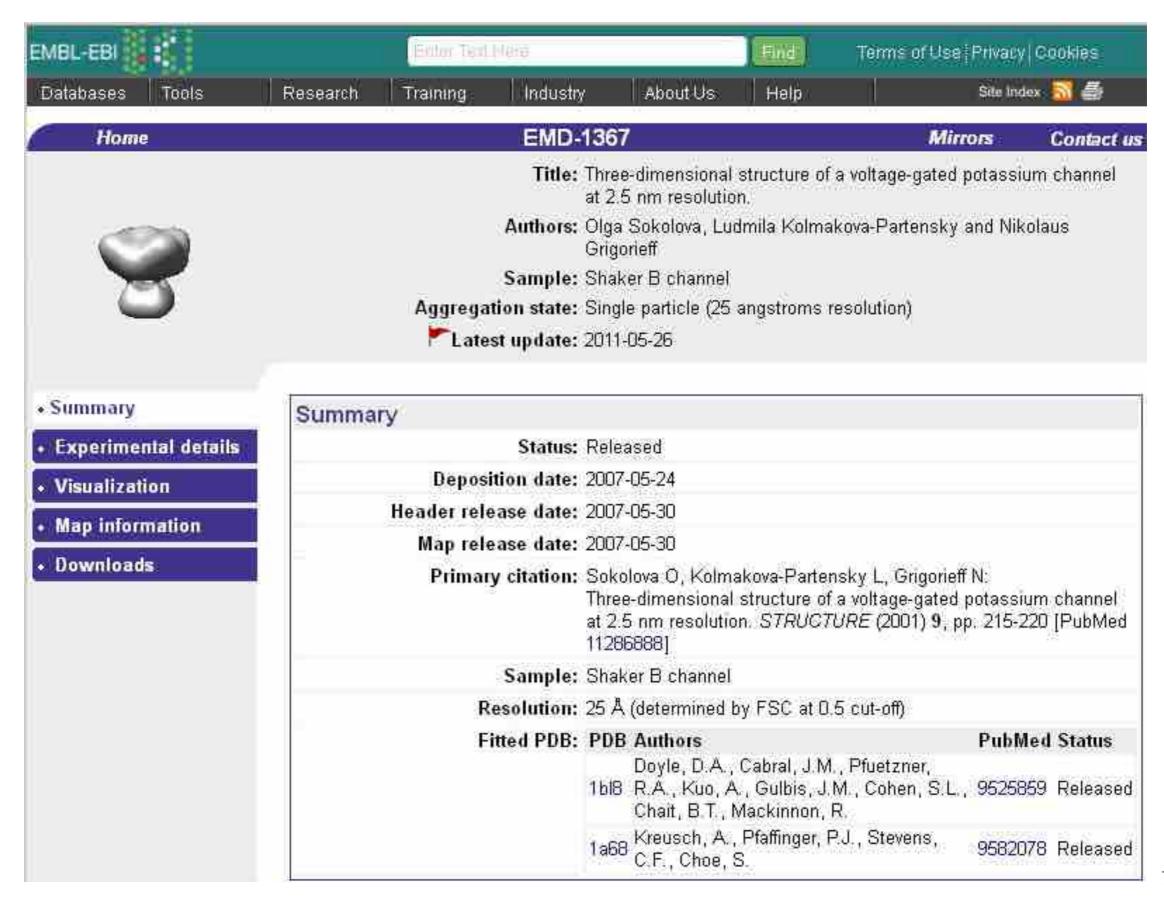


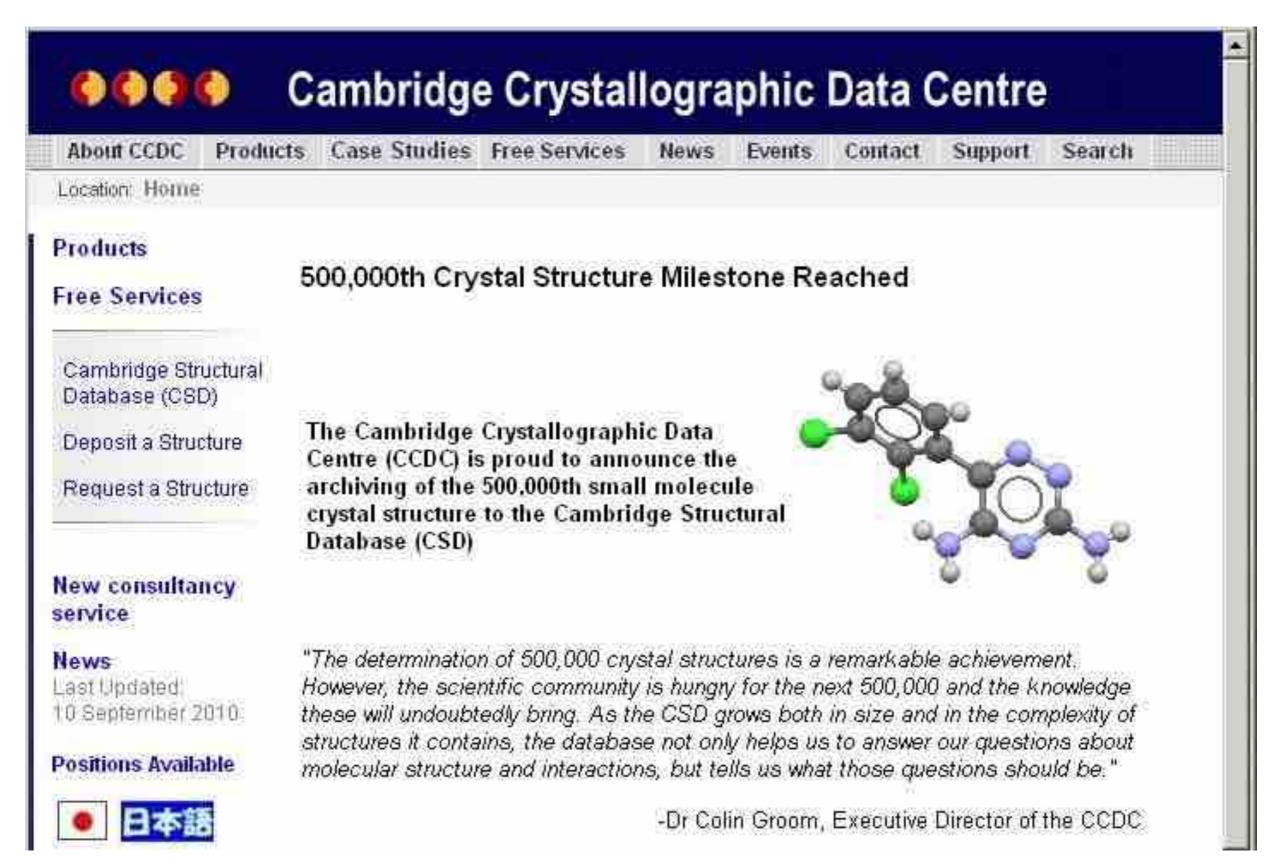
## База данных PDB. Структура файла

```
IMMUNE SYSTEM/METAL TRANSPORT 15-AUG-08
HEADER
                                                        2JK5
       POTASSIUM CHANNEL KCSA IN COMPLEX WITH TETRABUTYLAMMONIUM
TITLE
TITLE 2 IN HIGH K
COMPND MOL ID: 1;
       2 MOLECULE: ANTIBODY FAB FRAGMENT LIGHT CHAIN;
COMPND
COMPND
       3 CHAIN: A;
COMPND 4 ENGINEERED: YES;
       5 MOL ID: 2;
COMPND
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
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
       REF TO BE PUBLISHED
JRNL
       REFN
JRNL
REMARK
       2 RESOLUTION. 2.4 ANGSTROMS.
REMARK
REMARK
REMARK 3 REFINEMENT.
REMARK 3 PROGRAM : REFMAC 5.5.0051
. . .
```

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

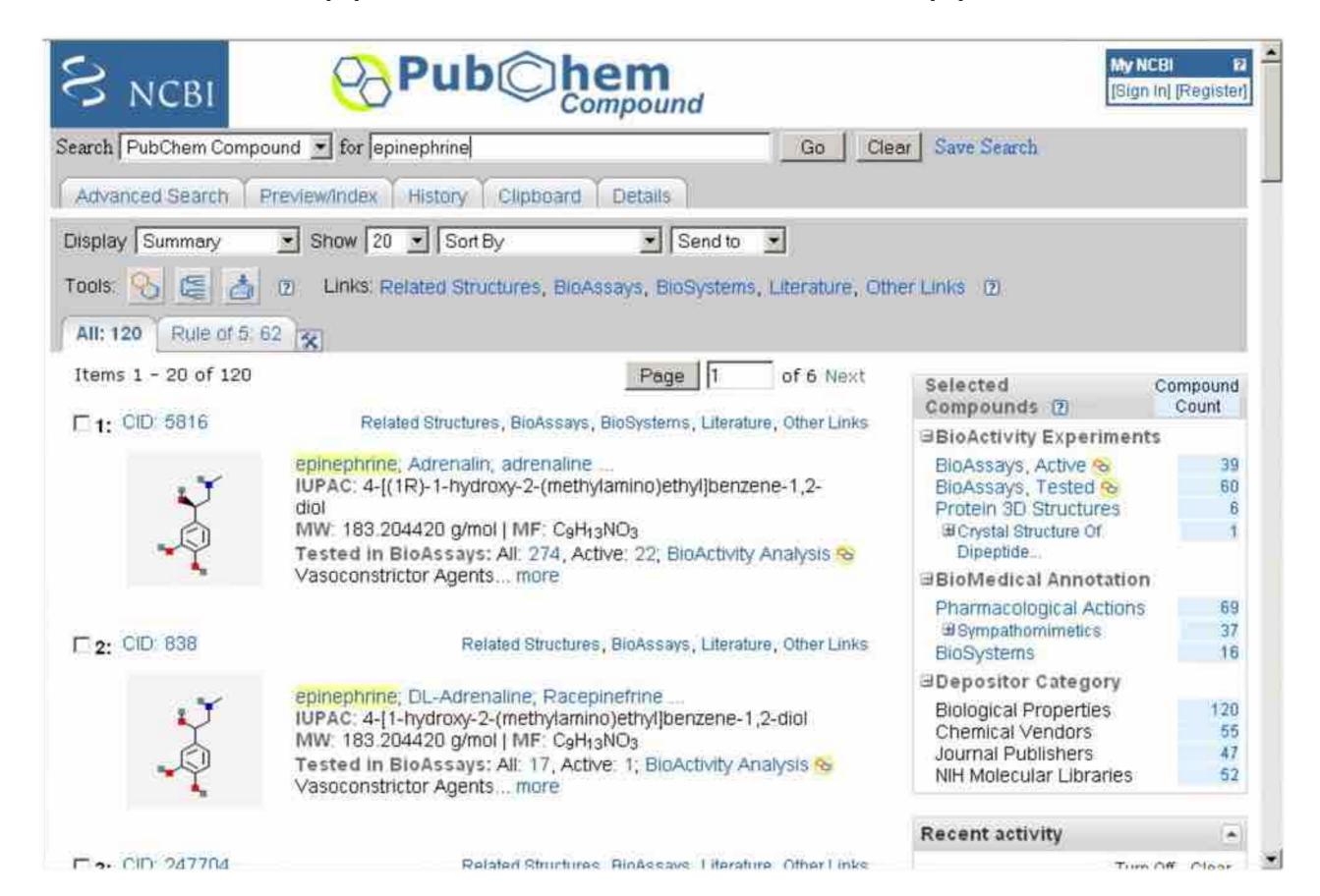




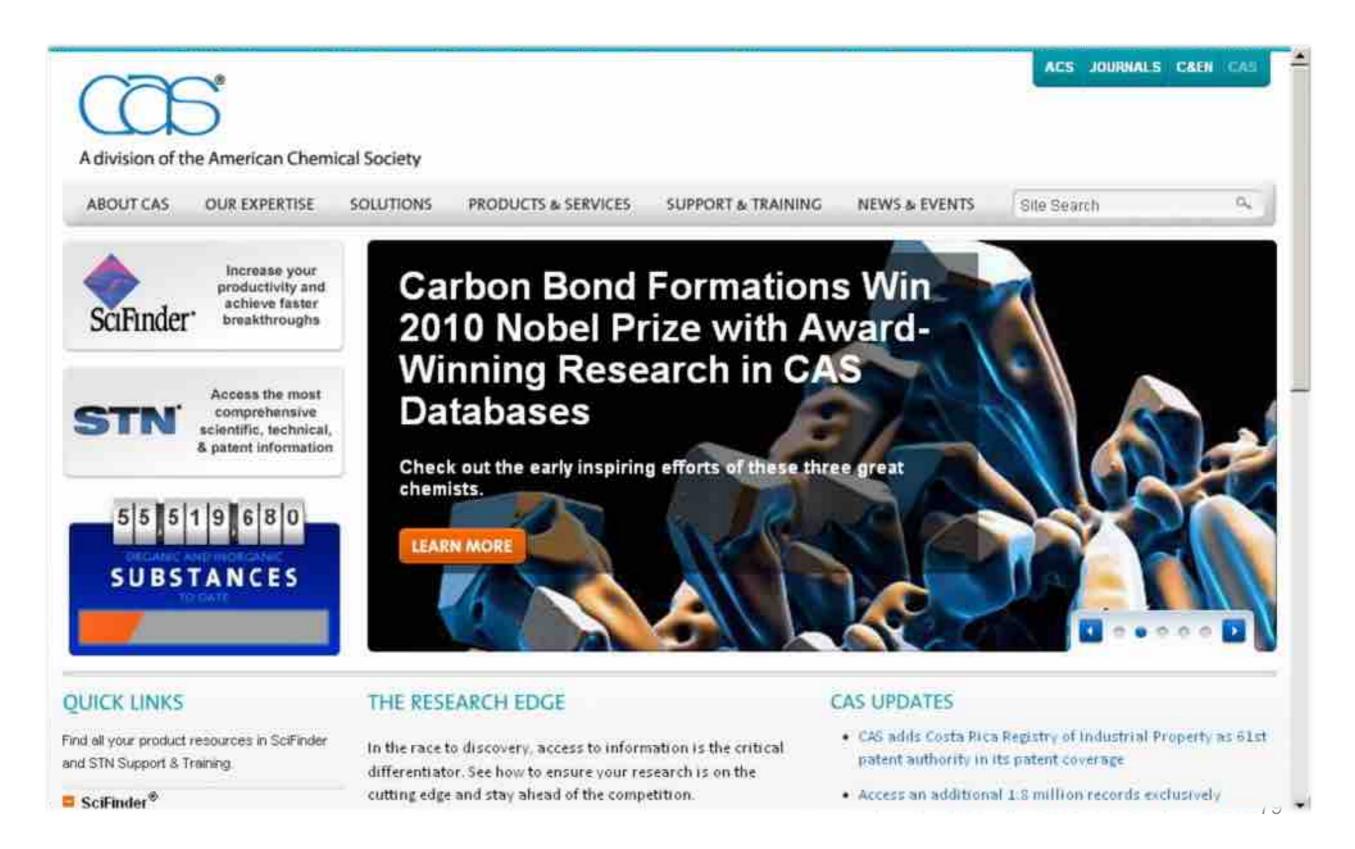


- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы 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

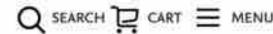




Chemical Abstract Service – в регистре содержится 130 млн соединений (2018)







#### Reaxys

Reaxys retrieves literature, compound properties and chemical reaction data faster than any other solution.

Get started

#### Already a Reaxys customer?

If you already have a Reaxys account, please click the link below to sign in.

> Reaxys sign in



### Life is chemistry: Meet the Reaxys team

Our technologists and chemists combine their expertise to create a high-quality information database.

> Watch the video

#### Teaching chemistry info literacy

Are you doing enough to prepare future chemists for their careers in research?

> Take the assessment

Why choose Reaxys

How Reaxys works

Who we serve

Customer stories

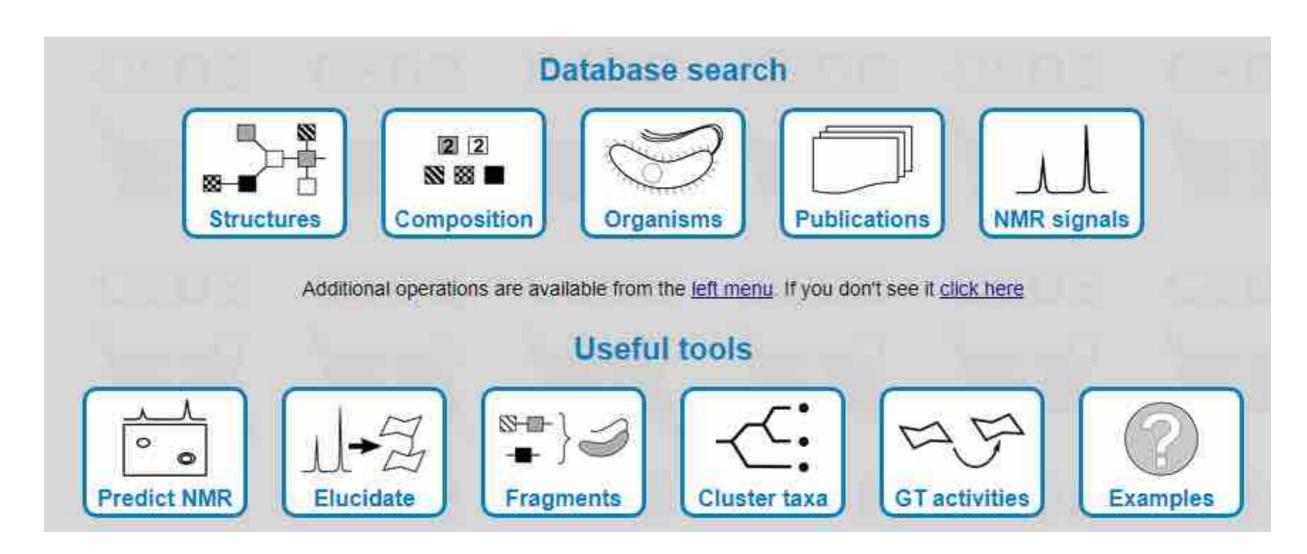
Learn & support

# Базы данных углеводов

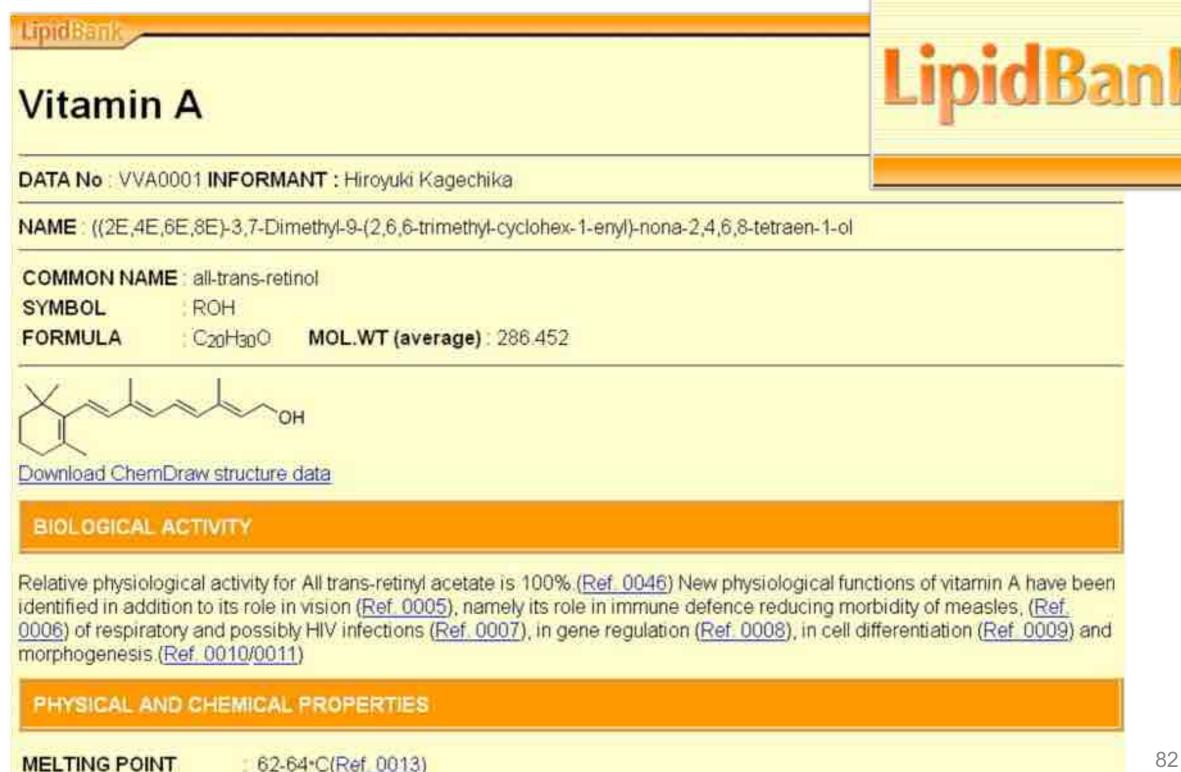


#### For 2017:

7005 publications for 18924 compounds from 8859 organisms



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



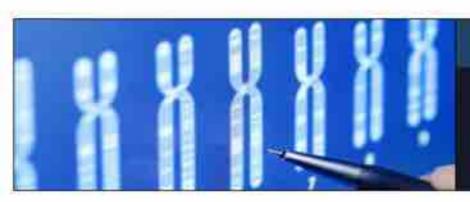
- Библиографические/реферативные базы данных литературных источников (статьи, тезисы, патенты, материалы конференций и т.д.)
- Базы данных последовательностей ДНК
- Базы данных последовательностей белков
- Базы данных 3D структур
- Базы данных хим. соединений
- Базы данных геномов и аннотаций
- Базы 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

+ Genome

Search

Limits Advanced

Help



#### Genome

This resource organizes information on genomes including sequences, maps, chromosomes, assemblies, and annotations.

#### **Using Genome**

Help

Browse by Organism UPDATED

Download / FTP

Download FAQ

Submit a genome

#### Custom resources

Human Genome

Microbes

Organelles

Viruses

#### Other Resources

Assembly

BioProject

BioSample

Map Viewer

Genome Data Viewer NEW

#### Genome Tools

BLAST the Human Genome

Microbial Nucleotide BLAST

#### Genome Annotation and Analysis

**Eukaryotic Genome Annotation** 

Prokaryotic Genome Annotation

PASC (Pairwise Sequence Comparison)

#### External Resources

GOLD - Genomes Online Database

Bacteria Genomes at Sanger

Ensembl





#### Browse a Genome

Ensembl is a genome browser for vertebrate genomes that supports research in comparative genomics, evolution, sequence variation and transcriptional regulation. Ensembl annotate genes computes multiple

#### Find a Data Display



Not sure how to find the data visualisation you need? With our

### What's New in Ensembl Release 91 (December 2017)

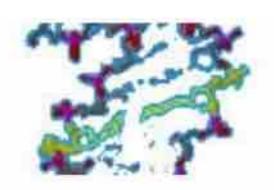
- New Primate Species
- Update of cat assembly and genebuild to Felis catus 8.0
- Mouse: update to Ensembl-Havana GENCODE gene set
- New and updated probe mapping data for primates
- Microarray Probe Mapping Update

Full details I All web updates, by

- 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



### dbSNP Short Genetic Variations





searching the SNP
FAQ Archivel

dbSNP and dbVar no longer accept submissions for non-human organism data. Please read more here.

GENERAL

RSS Feed

Contact Us

Organism Data

dbSNP Homepage

# Search by IDs on All Assemblies

Notes not and not must be profixed with I'mall on I'mall managetively (i a





### dbVar

dbVar is NCBI's database of human genomic structural variation — insertions, deletions, duplications, inversions, mobile elements, and translocations

#### **Getting Started**

Overview of Structural Variation

#### **Accessing Data**

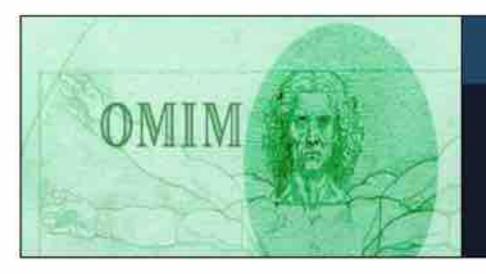
Structural Variation Data Hub

Other NCBI Resources

dbSNP

475 ATTAC





### **OMIM**

OMIM is a comprehensive, authoritative compendium of human genes and genetic phenotypes that is freely available and updated daily. OMIM is authored and edited at the McKusick-Nathans Institute of Genetic Medicine, Johns Hopkins University School of Medicine, under the direction of Dr. Ada

### Using OMIM

**Getting Started** 

FAQ

#### **OMIM** tools

**OMIM API** 

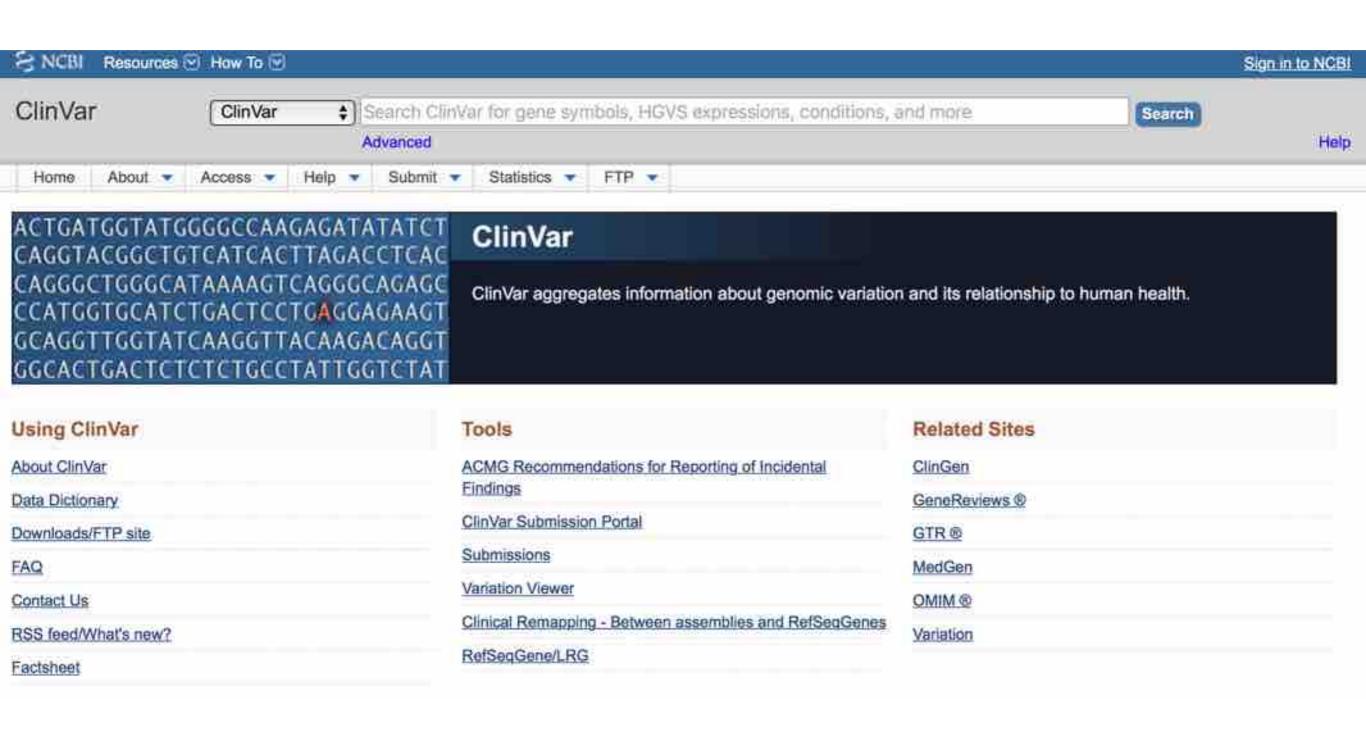
#### Related Resources

ClinVar

Gene

**GTR** 

MedGen



- 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



Browse/Search Authorized Access Help

**Authorized Access Portal** 

Log In to dbGaP

#### dbGaP Data Download

The management portal to request and download individual level data

Click here to login to the dbGaP controlled-access portal and to begin a project request. For guidance on the development of a data access request to complete project requests, please see Tips for preparing a successful Data Access Request.

Who can apply for access?

How does one apply?

Why is Access Controlled?

#### dbGaP Data Browser - View Only

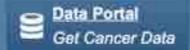
With dbGaP Data Browser approval through the simplified controlledaccess application, users may view the collection "Compilation of individual-level data from general research use (GRU)."

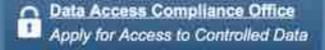
Log In

What is the purpose of the dbGaP Data Browser; why is it useful? How does one apply?

Additional help.









Enter keywords

Search

Home

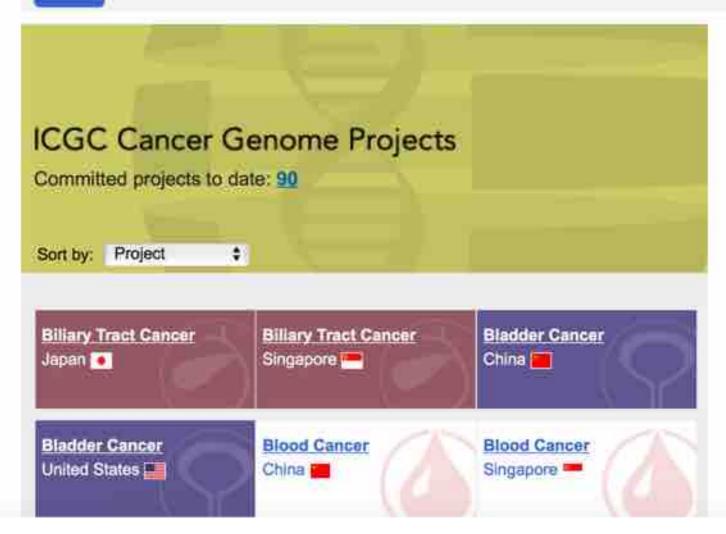
Cancer Genome Projects

Committees and Working Groups

Policies and Guidelines

Media

**Publications** 



description of genomic, transcriptomic and epigenomic changes in 50 different tumor types and/or subtypes which are of clinical and societal importance across the globe.

Read more »

Launch Data Portal »

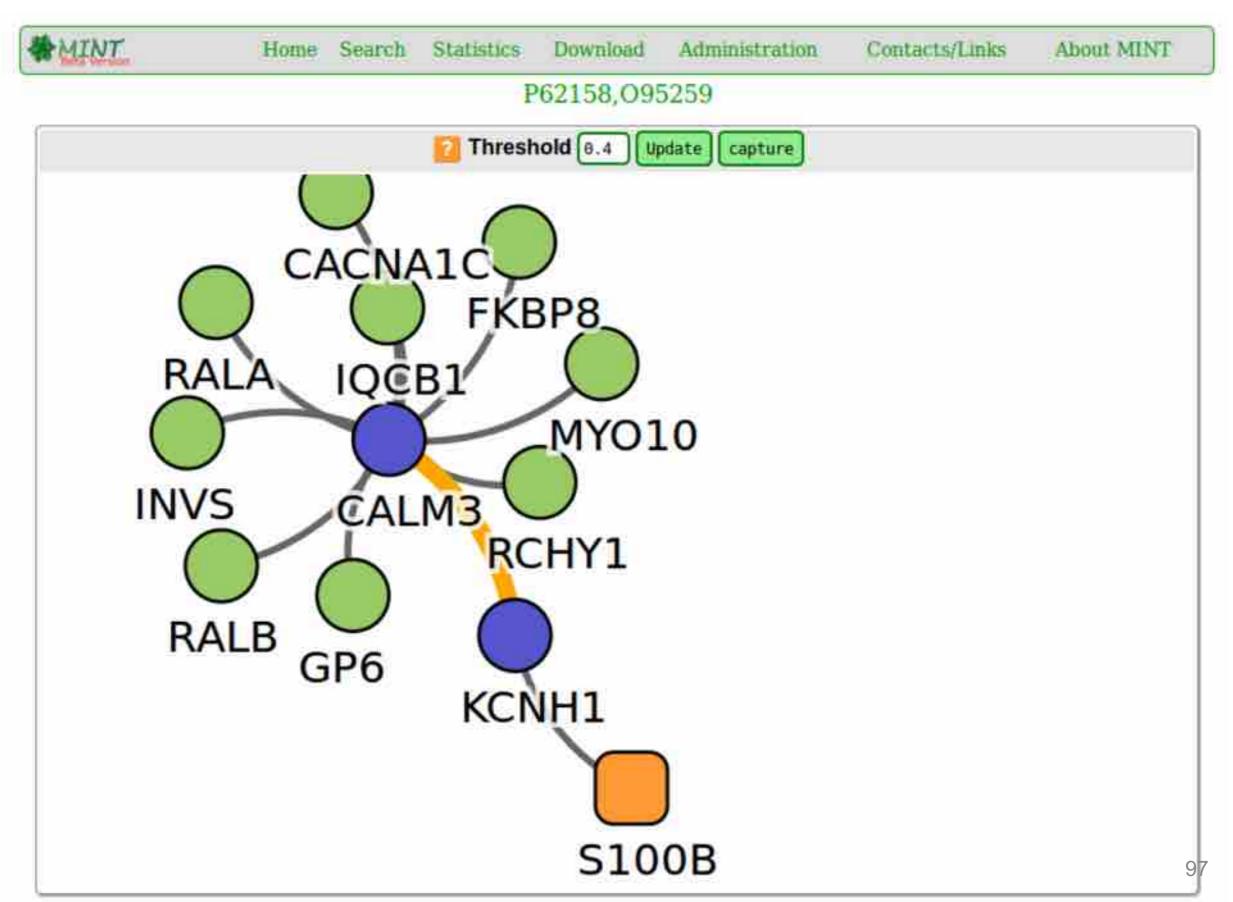
Apply for Access to Controlled Data >

- 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

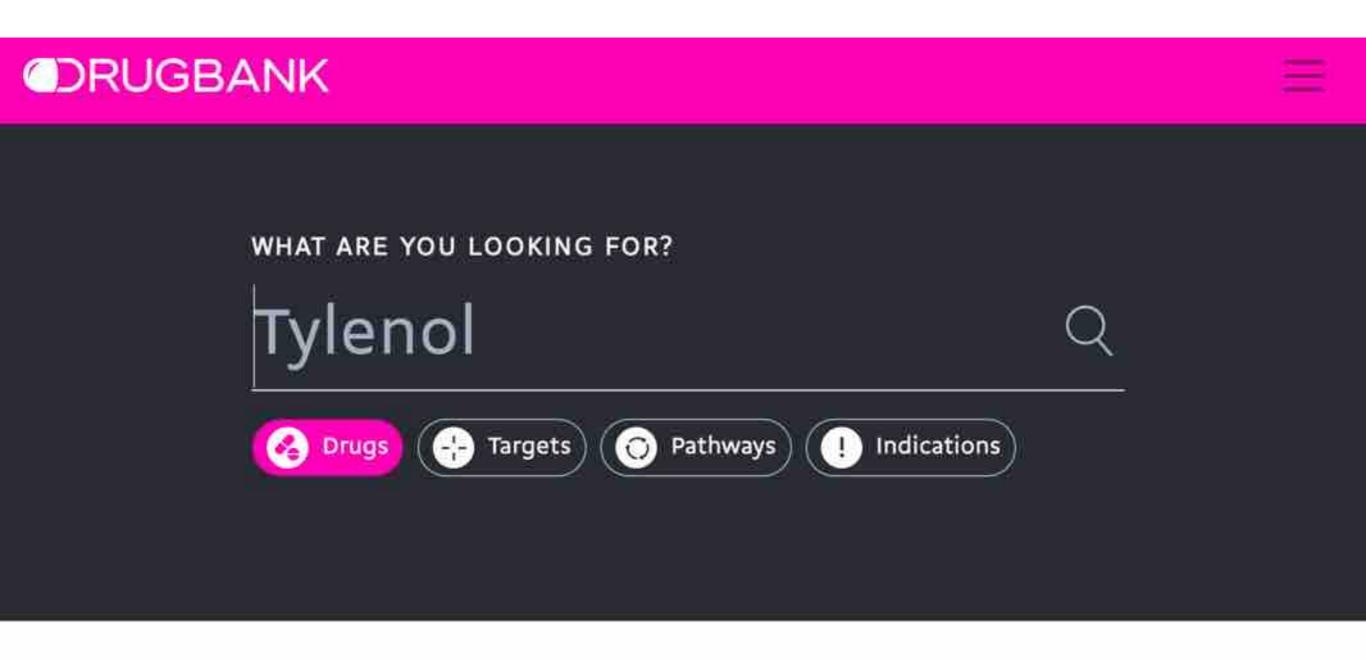


# Базы данных взаимодействий



# Базы данных взаимодействий







- 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



6. Human Diseases

7. Drug Development

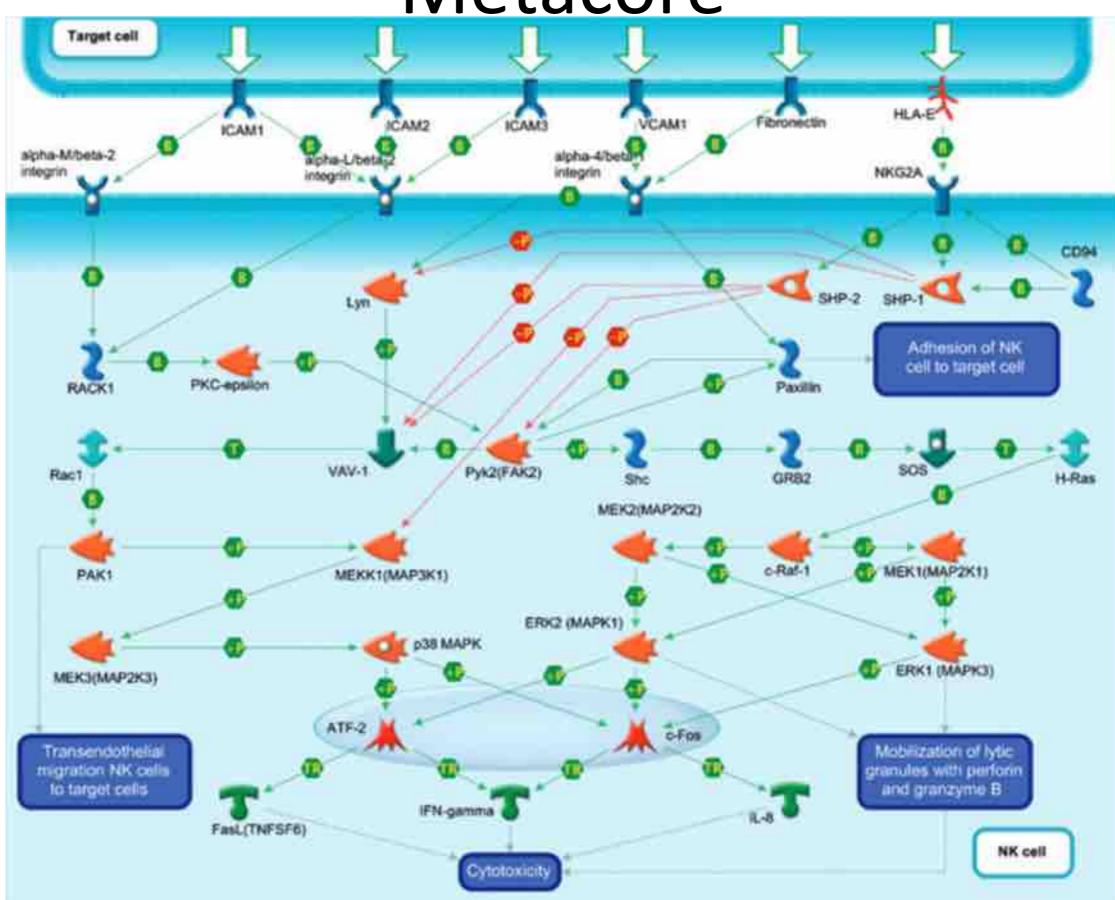
### **KEGG PATHWAY Database**

Wiring diagrams of molecular interactions, reactions and relations

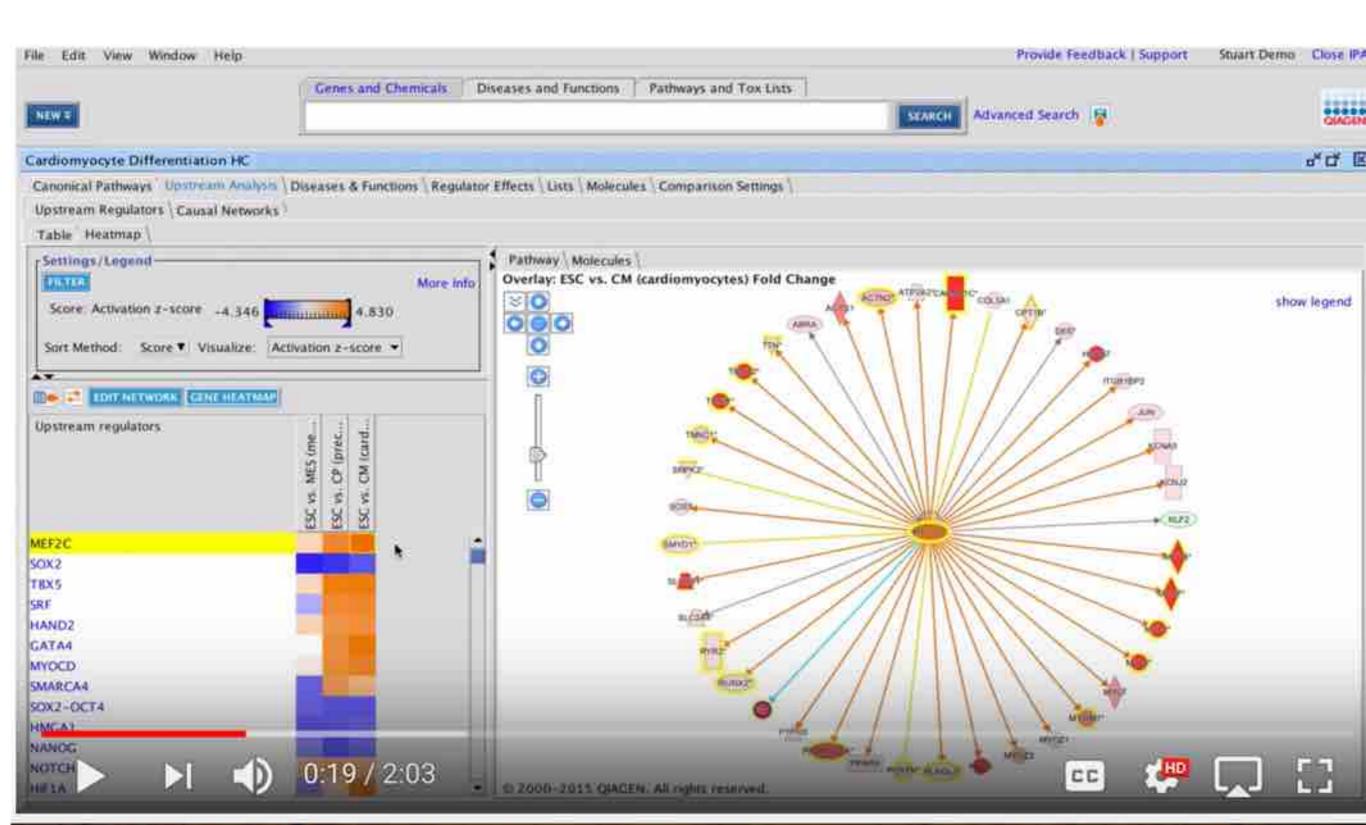
Select pre	fix	Enter keyword	s					
map	Organism	,	#PU		Go	Help		
athurau N	_				[ New pa	thway maps	Update	history
KEGG PA	4 11 4 14 4 7 1	collection of ma	nually dra	wn pathway ma	ps representin	g our knowle	dge on th	ne
KEGG PA molecular	THWAY is a d	collection of ma eaction and rela	the state of the s	wn pathway ma orks for:	ps representin	g our knowle	dge on th	ie

KEGG PATHWAY is a reference database for Pathway Mapping.

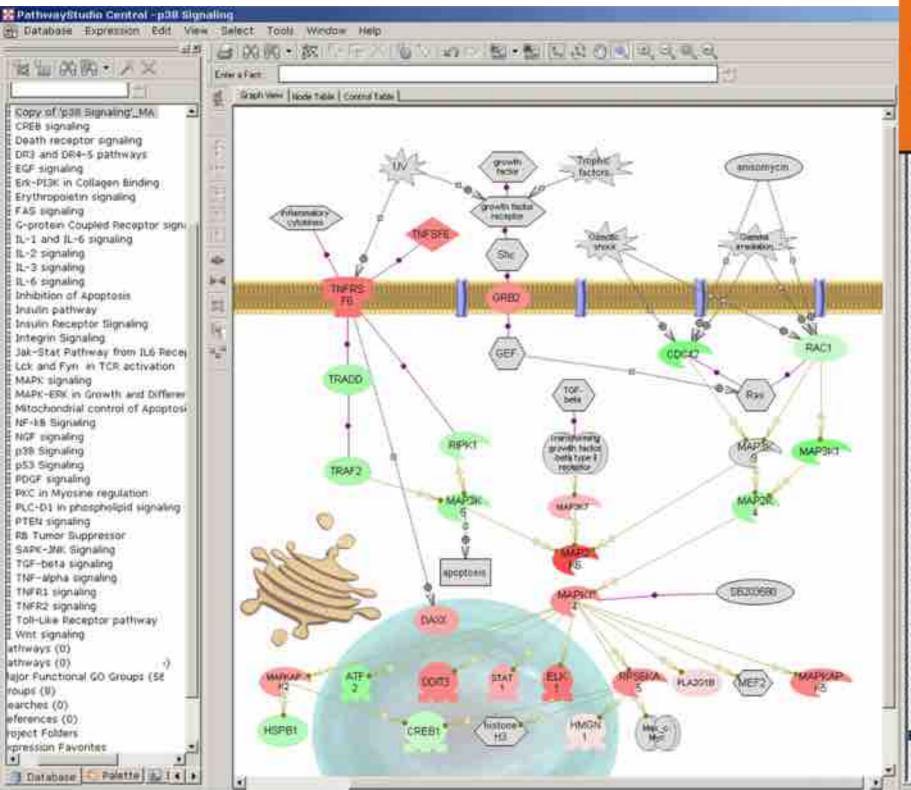
Metacore



# Ingenuity Pathway Analysis



# ELSEVIER



# Pathway Studio®



- 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





### SRA

Sequence Read Archive (SRA) makes biological sequence data available to the research community to enhance reproducibility and allow for new discoveries by comparing data sets. The SRA stores raw sequencing data and alignment information from high-throughput sequencing platforms, including Roche 454 GS System®. Illumina Genome Analyzer®. Applied Biosystems SOLiD System®.

-			01		-6		
Lac	ttin	C	-	2	rt		П.
	FF111	34			A . 6	v	•
		_					

How to Submit

Log in to SRA (for updating and troubleshooting submissions)

Log in to Submission Portal (for submitting sequence data)

#### **Tools and Software**

Download SRA Toolkit

SRA Toolkit Documentation

SRA-BLAST

SRA Run Browser

#### Related Resources

Submission Portal

Trace Archive

dbGaP Home

**BioProject** 

- 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



Find Studies ▼ About Studies ▼ Submit Studies ▼ Resources ▼ About Site ▼

ClinicalTrials.gov is a database of privately and publicly funded clinical studies conducted around the world.





Report store

Recommendations

Product login 🚨

How we help

Products & services

Resource hub

Events, awards & webinars

About

Contact

Search

# Pharmaprojects: track pharma R&D

End-to-end tracking of the global pharma R&D pipeline from bench to patient, including company development trends, global development status, and therapeutic class status.

The industry's most trusted drug development database, Citeline's Pharmaprojects has been covering pharma R&D across global markets for 35+ years. With 68,000+ drug profiles including 15,000 drugs in active development, it's the go-to resource for preclinical, clinical, and pipeline coverage, and lifecycle management tracking.

Request a free demo

Product login

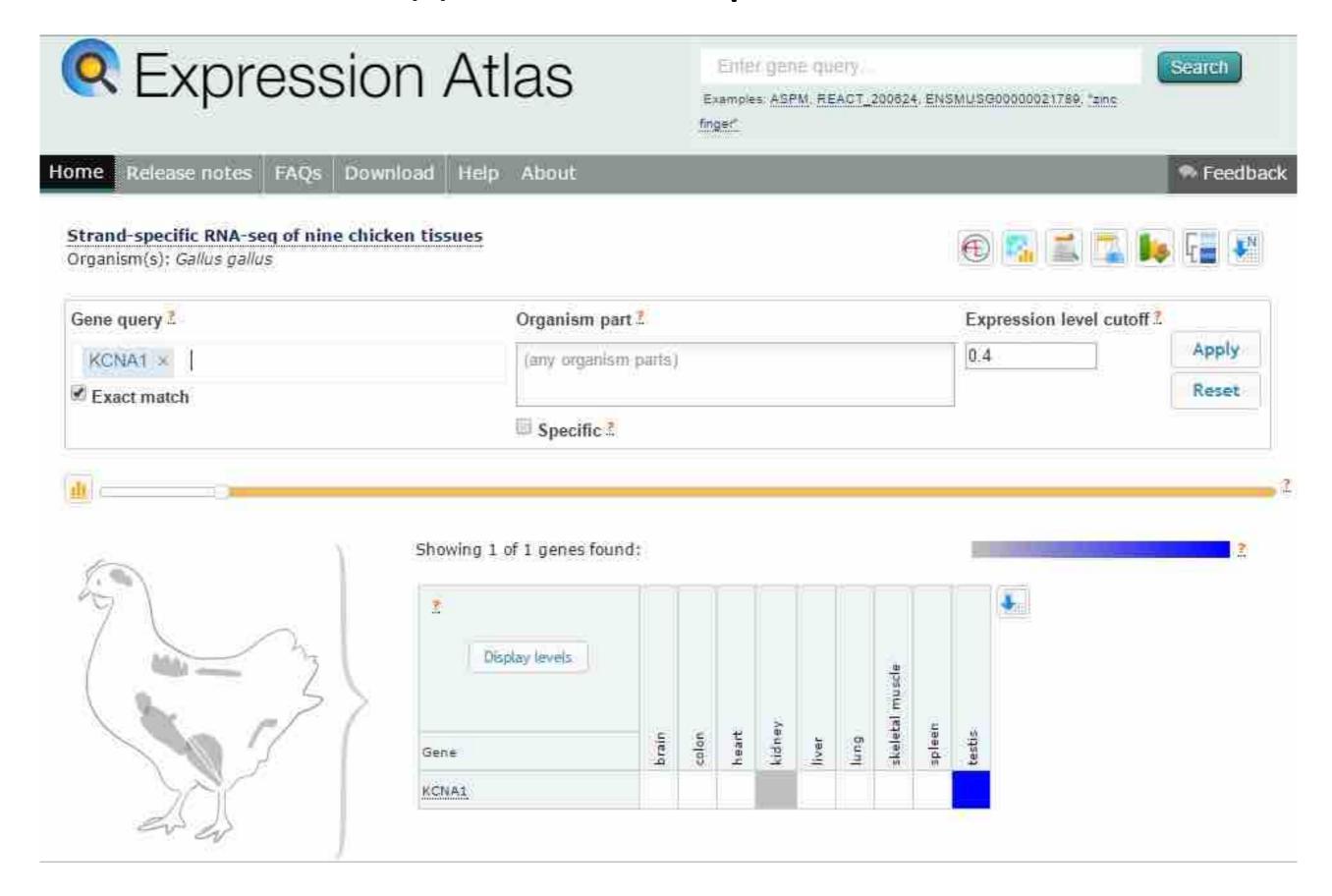
- 5

- Curated by experts
- Drug R&D landscape
- Mistorical trends



- 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



### Gene Expression Omnibus

GEO is a public functional genomics data repository supporting MIAMEcompliant data submissions. Array- and sequence-based data are accepted. Tools are provided to help users query and download experiments and curated gene expression profiles.



Keyword or GEO Accession Search

Getting Started
Overview
FAQ
About GEO DataSets
About GEO Profiles

Tools	
Search for Studies at GEO DataSets	
Search for Gene Expression at GEO Profiles	
Search GEO Documentation	

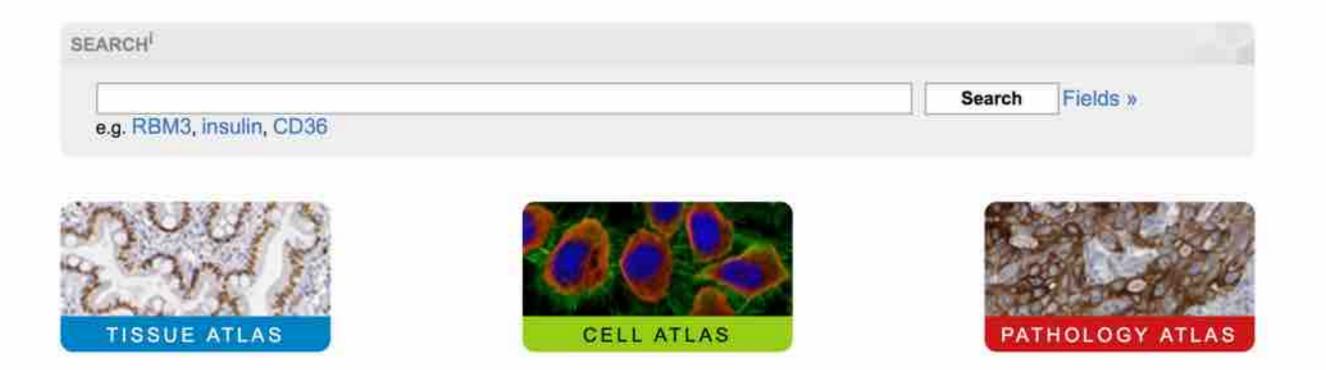
Browse Co	ntent	
Repository Bro	owser	
DataSets:	4348	
Series:	94968	
Platforms:	18150	

# THE HUMAN PROTEIN ATLAS

**EMENU** 

HELP

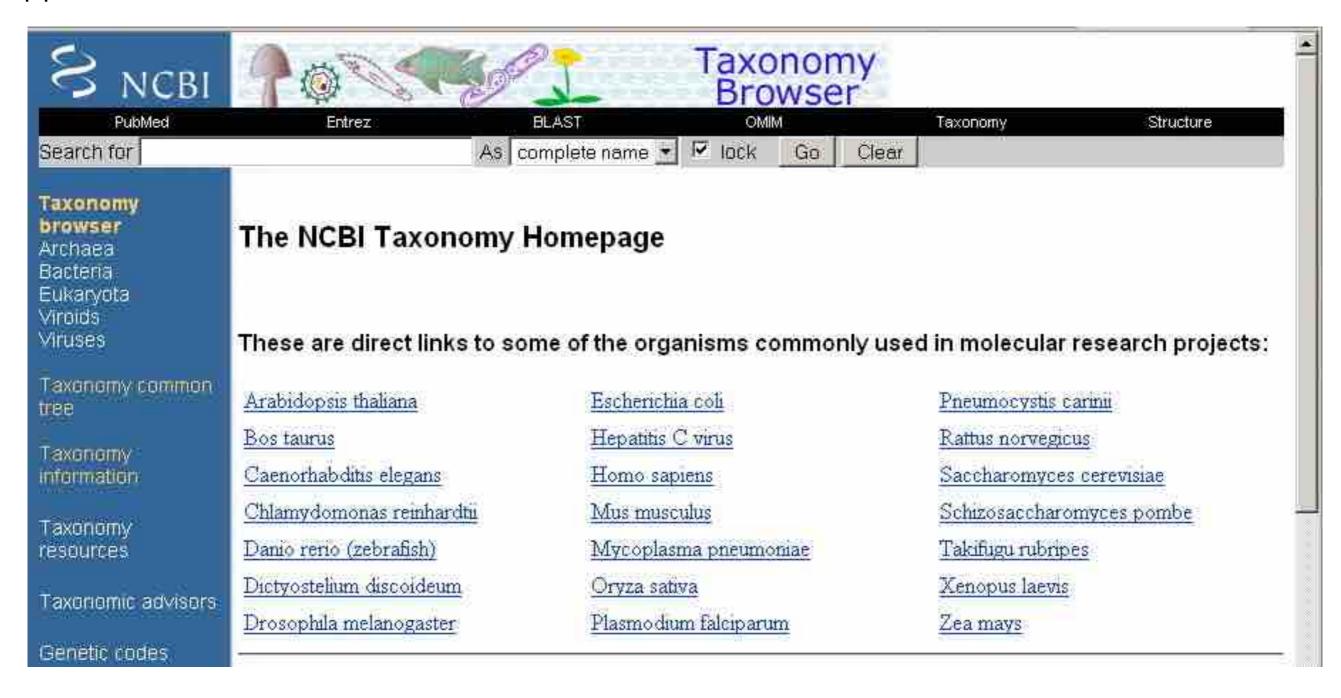
**NEWS** 



- 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



content about team notulae algarum links contact search

genus - species - literature - journals - images - common names - distribution - glossary - taxonomy browser - higher taxonomy

143,152 species and infraspecific names are in the database, 18,634 images, 54,056 bibliographic items, 314,920 distributional records.

#### Haematococcus pluvialis Flotow

#### Publication details

Haematococcus pluvialis Flotow 1844: 415, 537, pls XXIV, XXV

Published In: Flotow, J. von (1844). Beobachtungen über Haematococcus pluvialis. Verhandlungen der Kaiserlichen Leopoldinisch-Carolinischen Deutschen Akademie der Naturforscher 12(Abt. 2): 413-606, 3 pls.



#### Type species

This is the type species (lectotype) of the genus Haematococcus.

#### Status of name

This name is of an entity that is currently accepted taxonomically.



Classification:
Empire Eukaryota
Kingdom Plantae
Subkingdom Viridiplantae
Infrakingdom Chlorophyta
Infrakingdom
Phylum Chlorophyta
Subphylum Chlorophytina
Class Chlorophyceae
Order Chlamydomonadales
Family Haematococcaceae
Genus Haematococcus

Taxonomy

References

Submit Feedback

Submit Reference

Links

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

