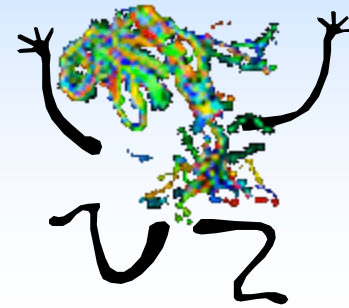
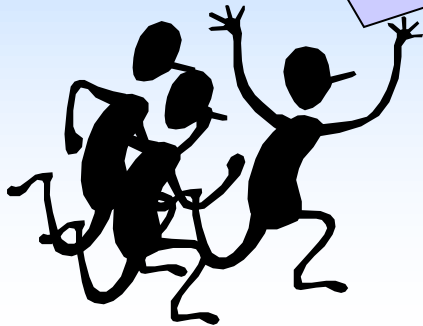


GET THAT PROTEIN!



Eller

TDDE49

Databaser och informationssäkerhet  
för bioinformatik

<http://www.ida.liu.se/~TDDE49>

# Lärare

- Examinator: Olaf Hartig
- FÖ: Olaf Hartig, Matus Nemec, Patrick Lambrix
- LA: Sijin Cheng, Matus Nemec
- projekt: Patrick Lambrix, Sijin Cheng
- databasadministration: Sijin Cheng
- studierektor: Patrick Lambrix
- Olaf/Matus/Sijin på engelska

# Kurslitteratur

- Elmasri, R. and Navathe, S. B. Fundamentals of Database Systems, Addison Wesley.
- (Padron-McCarthy, webbkurs på Svenska)
- Anderson R, Security Engineering.
  - 2<sup>nd</sup> ed. online
- Adam Shostack: Threat Modeling.
  - online via LiU (biblioteket)
- Lab + projekt: på hemsidan

# Databaser

- Ett (av flera) sätt att lagra data i elektronisk format
- Används i det vardagliga livet: bank, bokning av hotell eller resa, sökning i biblioteket, handla
- nyare tillämpningar: multimediadatabaser, geografiska informationssystem, realtiddatabaser

# Databaser

- databashanteringssystem (DBMS): en uppsättning program som tillåter en användare att skapa och underhålla en databas
- databassystem = databas + databashanteringssystem

# Bioinformatik

- Kända sekvenser samlas i en stor databas. Insamlande och studier av sekvenser och jämförelser av sekvensernas uppbyggnad i olika organismer kallas bioinformatik. Forskningen inom bioinformatik är beroende av avancerad datalogi och matematik. (forskningsrådets strategidokument 2000)

# Bioinformatik

- Bioinformatics: research, development, or application of computational tools and approaches for expanding the use of biological, medical, behavioral or health data, including those to acquire, store, organize, archive, analyze or visualize data. (National Institutes of Health)

# Bioinformatik

Ämnen på ISMB:

- protein structure and modeling
- sequence motifs, alignments and families
- networks and modeling
- gene structure, regulation and modeling
- sequence and phylogeny
- databases, information and knowledge management

# TDDE49 Databaser och informationssäkerhet för Bioinformatik

- Denna kurs: fokus på biologiska databanker

# Relation med andra kurser inom TB-programmet:

- förkunskaper: molekylärbiologi,  
programmering
- bioinformatik - översikt och tillämpningar

# Årets ändringar i kursen

## Ändringar:

- Online (covid19)
- Namnbyte
- Informationssäkerhet tillkommer (nya föreläsningar och nya labbar)
- Information retrieval, semi-strukturerad data, teoretiska delar av relationsdatabaser utgår.
- Nya labbar för databasdelen.
- Flipped classroom för databasföreläsningarna.

# Årets ändringar i kursen

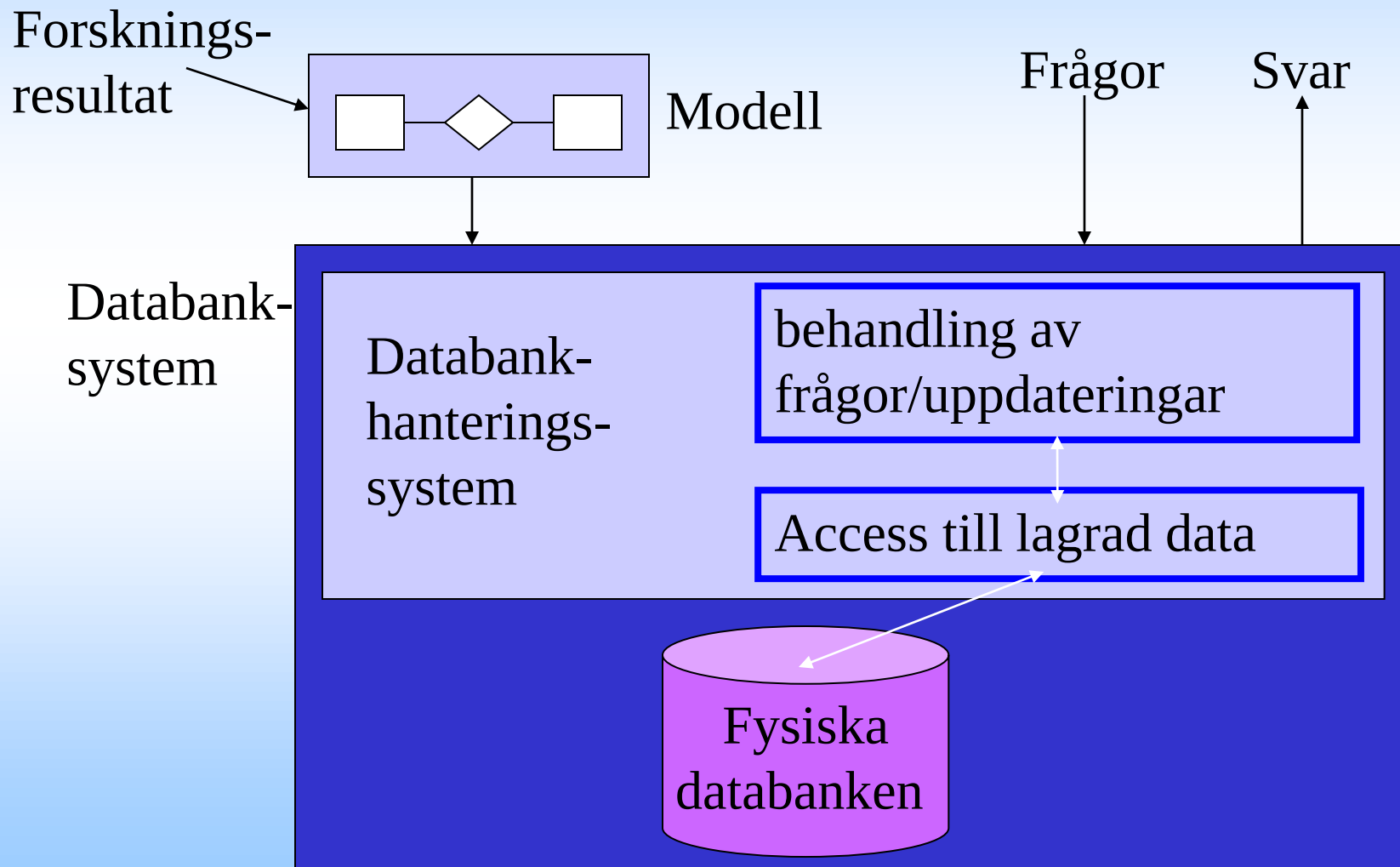
Tidigare ändringar:

- Separat inledning
- Genomgång projektbeskrivning
- Ändring inledning labbarna

# Biologiska databanker

- biologisk data i elektronisk format
- exempel: SWISS-PROT/UniProt, EMBL, DDBJ, PDB, GENBANK, KEGG, ACEDB
- används dagligen i forskningen

# Biologiska databanker



# Frågeställningar

- Vilken information lagrar man?
- Hur lagras informationen? (hög och låg nivå)
- Hur accessar man informationen?  
(användarnivå, systemnivå)
- Hur återställer man en databank efter crash?
- Hur kan flera användare accessa och uppdatera informationen samtidigt?

# Personer

- databankadministratör
  - databankdesigner
  - användare ('end user')
  - programmerare av tillämpningar
- 
- DBMS designer
  - utvecklare av verktyg
  - operator, underhåll

1 tgctacccgc gcccgggctt ctgggggtgt ccccaaccac ggcccagccc tgccacaccc  
61 cccgcccccg gcctccgcag ctccggcatgg gcgcgggggt gctcgtcctg ggcgcctccg  
121 agccccggtaa cctgtcgtcg gccgcaccgc tccccgacgg cgcggccacc gcggcgcggc  
181 tgctgggtgcc cgcgtcgccg cccgcctcgt tgctgcctcc cgccagcgaa agccccgagc  
241 cgctgtctca gcagtggaca gcgggcatgg gtctgtctgat ggcgctcatc gtgctgtca  
301 tcgtggcggg caatgtgctg gtgatcgtgg ccatcgccaa gacgccgcgg ctgcagacgc  
361 tcaccaacct cttcatcatg tcctggcca gcgccgacct ggtcatgggg ctgctgggtg  
421 tgccgttcgg gccaccatc gtggtgtggg gccgctggga gtacggctcc ttcttctcg  
481 agctgtggac ctacgtggac gtgctgtgcg tgacggccag catcgagacc ctgtgtgtca  
541 ttgcctgga ccgtacctc gccatcacct cgccttccg ctaccagagc ctgtgacgc  
601 gcgcgcgggc gcggggcctc gtgtgcaccg tgtgggcat ctcggcctg gtgtcctcc  
661 tgccatcct catgcactgg tggcgggcgg agagcgacga ggcgcgccgc tgctacaacg  
721 acccaagtg ctgcgactc gtcaccaacc gggcctacgc catcgctcg tccgtagtct  
781 cttctacgt gccctgtgc atcatggcct tcgtgtacct gcgggtgttc cgcgagggcc  
841 agaagcaggt gaagaagatc gacagctgcg agcgccgtt ctcggcggc ccagcgcggc  
901 cgcctcgc ctcgcctcg cccgtccccg cgcgcgcc gccgcccga cccccgcgc  
961 ccgcgccgc cgccgccacc gcccgcctgg ccaacggcg tgccggtaag cggcgccct  
1021 cgcgcctcgt ggccctacgc gagcagaagg cgctcaagac gctgggcatc atcatgggcg  
1081 ttctacgct ctgtggctg ccttcttc tggccaacgt ggtgaaggcc ttccaccgcg  
1141 agctggtgcc cgaccgcctc ttcgtctct tcaactggct gggctacgc aactcgccct  
1201 tcaaccccat catctactgc cgcagccccg acttcgcaa ggccttcag ggactgtct  
1261 gctgcgcgcg cagggtgcc cgccggcgcc acgcgacca cggagaccgg ccgcgcgcct  
1321 cgggtgtct ggcccgccc ggacccccgc catgcccgg ggccgcctcg gacgacgacg  
1381 acgacgatgt cgtcggggcc acgcgcccc gcgcctgct ggagccctgg gccggctgca  
1441 acggcggggc ggcggcggac agcgactcga gcctggacga gccgtgccgc cccggcttcg  
1501 cctcggaatc caaggtgtag ggcccgcg gcggcgcgga ctccgggcac ggcttccag  
1561 gggaacgagg agatctgtgt ttacttaaga ccgatagcag gtgaactcga agcccacaat  
1621 cctcgtctga atcatccgag gcaaagagaa aagccacgga ccgttcaca aaaaggaaag  
1681 ttgggaagg gatgggagag tggctgctg atgttcctg ttg

|                 |                                                                                                                            |
|-----------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| DEFINITION      | Homo sapiens adrenergic, beta-1-, receptor                                                                                 |
| ACCESSION       | NM_000684                                                                                                                  |
| SOURCE ORGANISM | human                                                                                                                      |
| REFERENCE       | 1                                                                                                                          |
| AUTHORS         | Frielle, Collins, Daniel, Caron, Lefkowitz, Kobilka                                                                        |
| TITLE           | Cloning of the cDNA for the human beta 1-adrenergic receptor                                                               |
| REFERENCE       | 2                                                                                                                          |
| AUTHORS         | Frielle, Kobilka, Lefkowitz, Caron                                                                                         |
| TITLE           | Human beta 1- and beta 2-adrenergic receptors: structurally and functionally related receptors derived from distinct genes |

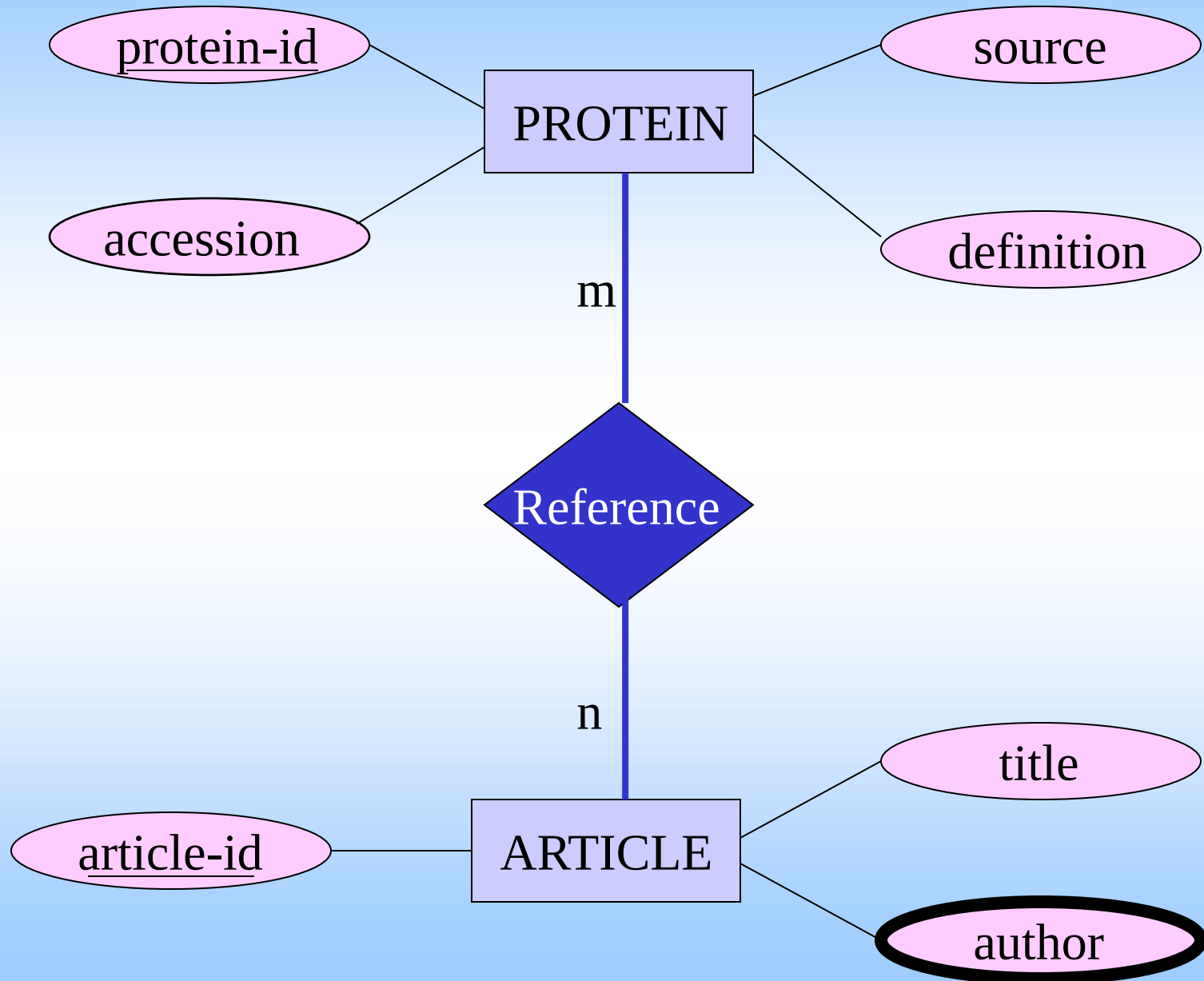
# Vilken information lagrar man?

- Modell av verkligheten
  - Entity-Relationship modell (ER)
  - Unified Modeling Language (UML)

# Entity-Relationship

- entiteter och attribut
- entitetstyper
- nyckelattribut
- relationer
- kardinalitetsvillkor

# Entity-relationship



Hur lagras informationen?  
(hög nivå)

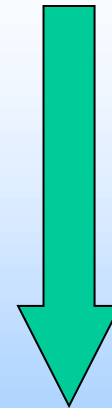
Hur accessar man informationen?  
(användarnivå)

- Text (IR)
- Semistrukturerad data
- Datamodeller (DB)
- Regler + Fakta (KB)

struktur



precision



# Text - Information Retrieval

- sökning baseras på ord
- konceptuella modeller:
  - boolesk, vektor, probabilistisk, ...
- filmodell:
  - flat fil, inverterad fil, ...

# IR - Filmodell: inverterad fil

inverterad fil

| WORD       | HITS | LINK |
|------------|------|------|
| ...        | ...  | ...  |
| adrenergic | 32   |      |
| ...        | ...  | ...  |
| cloning    | 53   |      |
| ...        | ...  | ...  |
| receptor   | 22   |      |
| ...        | ...  | ...  |

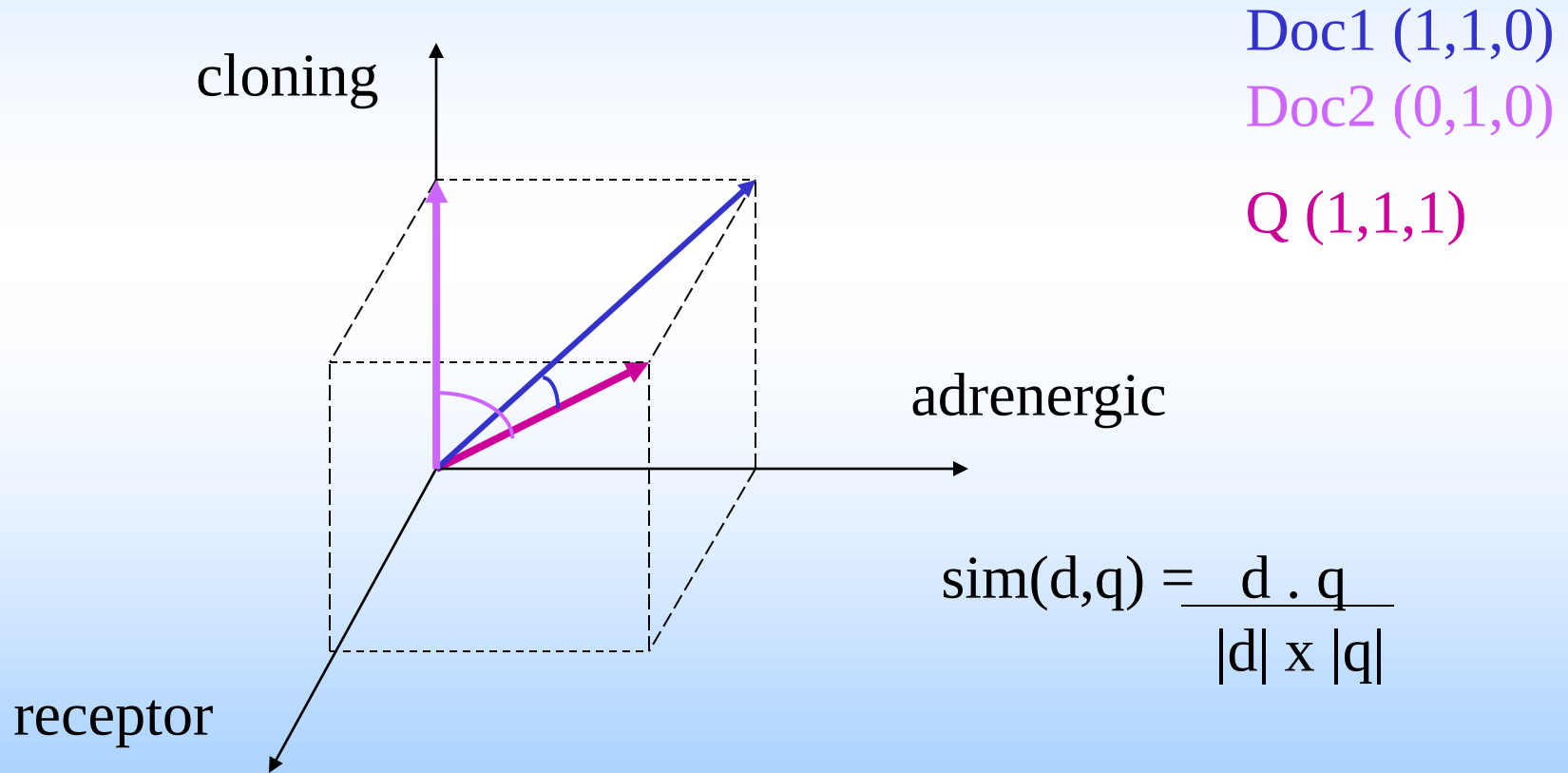
anslagningsfil

| DOC# | LINK |
|------|------|
| ...  | ...  |
| 1    |      |
| 5    |      |
| ...  | ...  |
| 1    |      |
| 2    |      |
| 5    |      |
| ...  | ...  |

dokumentfil

| DOCUMENTS |
|-----------|
| Doc1      |
| Doc2      |
| ...       |

# Vektormodellen (förenklad)



# Databaser

- Relationsdatabaser:
  - modell: tabeller + relationsalgebran
  - frågespråk (SQL)
- Objektorienterade databaser:
  - modell: fortlevande objekt, meddelande, inkapsling, ärvning
  - frågespråk (t.ex. OQL)
- System: GDB (R), ACEDB (OO)

# Relationsdatabaser

## PROTEIN

| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                       | SOURCE |
|------------|-----------|--------------------------------------------------|--------|
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  |

## REFERENCE

| PROTEIN-ID | ARTICLE-ID |
|------------|------------|
| 1          | 1          |
| 1          | 2          |

## ARTICLE

| ARTICLE-ID | AUTHOR    | TITLE                                         |
|------------|-----------|-----------------------------------------------|
| 1          | Frielle   | Cloning of the cDNA for the human ....        |
| 1          | Collins   | Cloning of the cDNA for the human ....        |
| 1          | Daniel    | Cloning of the cDNA for the human ....        |
| 1          | Caron     | Cloning of the cDNA for the human ....        |
| 1          | Lefkowitz | Cloning of the cDNA for the human ....        |
| 1          | Kobilka   | Cloning of the cDNA for the human ....        |
| 2          | Frielle   | Human beta 1- and beta 2-adrenergic receptors |
| 2          | Kobilka   | Human beta 1- and beta 2-adrenergic receptors |
| 2          | Lefkowitz | Human beta 1- and beta 2-adrenergic receptors |
| 2          | Caron     | Human beta 1- and beta 2-adrenergic receptors |

# Relationsdatabaser

## PROTEIN

| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                       | SOURCE |
|------------|-----------|--------------------------------------------------|--------|
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  |

## REFERENCE

| PROTEIN-ID | ARTICLE-ID |
|------------|------------|
| 1          | 1          |
| 1          | 2          |

## ARTICLE-AUTHOR

| ARTICLE-ID | AUTHOR    |
|------------|-----------|
| 1          | Frielle   |
| 1          | Collins   |
| 1          | Daniel    |
| 1          | Caron     |
| 1          | Lefkowitz |
| 1          | Kobilka   |
| 2          | Frielle   |
| 2          | Kobilka   |
| 2          | Lefkowitz |
| 2          | Caron     |

## ARTICLE-TITLE

| ARTICLE-ID | TITLE                                                                                                                                   |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1          | Cloning of the cDNA for the human<br>beta 1-adrenergic receptor                                                                         |
| 2          | Human beta 1- and beta 2-<br>adrenergic receptors: structurally<br>and functionally related<br>receptors derived from distinct<br>genes |

# SQL

```
select source  
from protein  
where accession = NM_000684;
```

Vilka kolumner?  
Vilka tabeller?  
Vilka rader?

PROTEIN

| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                       | SOURCE |
|------------|-----------|--------------------------------------------------|--------|
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  |

# SQL

```
select title
from protein, article-title, reference
where protein.accession = NM_000684
and protein.protein-id
      = reference.protein-id
and reference.article-id
      = article-title.article-id;
```

PROTEIN

| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                       | SOURCE |
|------------|-----------|--------------------------------------------------|--------|
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  |

REFERENCE

| PROTEIN-ID | ARTICLE-ID |
|------------|------------|
| 1          | 1          |
| 1          | 2          |

ARTICLE-TITLE

| ARTICLE-ID | TITLE              |
|------------|--------------------|
| 1          | Cloning of the ... |
| 2          | Human beta 1- ...  |

# SQL

```
select title
from protein, article-title, reference
where protein.accession = NM_000684
and protein.protein-id
      = reference.protein-id
and reference.article-id
      = article-title.article-id;
```

PROTEIN

| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                       | SOURCE |
|------------|-----------|--------------------------------------------------|--------|
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  |

REFERENCE

| PROTEIN-ID | ARTICLE-ID |
|------------|------------|
| 1          | 1          |
| 1          | 2          |

ARTICLE-TITLE

| ARTICLE-ID | TITLE              |
|------------|--------------------|
| 1          | Cloning of the ... |
| 2          | Human beta 1- ...  |

| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                       | SOURCE |
|------------|-----------|--------------------------------------------------|--------|
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  |

# SQL

```
select title
from protein, article-title, reference
where protein.accession = NM_000684
and protein.protein-id
      = reference.protein-id
and reference.article-id
      = article-title.article-id;
```

PROTEIN

| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                       | SOURCE |
|------------|-----------|--------------------------------------------------|--------|
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  |

REFERENCE

| PROTEIN-ID | ARTICLE-ID |
|------------|------------|
| 1          | 1          |
| 1          | 2          |

ARTICLE-TITLE

| ARTICLE-ID | TITLE              |
|------------|--------------------|
| 1          | Cloning of the ... |
| 2          | Human beta 1- ...  |

PROTEIN

REFERENCE

| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                       | SOURCE | PROTEIN-ID | ARTICLE-ID |
|------------|-----------|--------------------------------------------------|--------|------------|------------|
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  | 1          | 1          |
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  | 1          | 2          |

# SQL

```
select title
from protein, article-title, reference
where protein.accession = NM_000684
and protein.protein-id
      = reference.protein-id
and reference.article-id
      = article-title.article-id;
```

PROTEIN

| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                       | SOURCE |
|------------|-----------|--------------------------------------------------|--------|
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  |

REFERENCE

| PROTEIN-ID | ARTICLE-ID |
|------------|------------|
| 1          | 1          |
| 1          | 2          |

ARTICLE-TITLE

| ARTICLE-ID | TITLE              |
|------------|--------------------|
| 1          | Cloning of the ... |
| 2          | Human beta 1- ...  |

|            |           |                                            |        | REFERENCE ARTICLE-TITLE |            |            |                    |
|------------|-----------|--------------------------------------------|--------|-------------------------|------------|------------|--------------------|
| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                 | SOURCE | PROTEIN-ID              | ARTICLE-ID | ARTICLE-ID | TITLE              |
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens adrenergic, beta-1-, receptor | human  | 1                       | 1          | 1          | Cloning of the ... |
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens adrenergic, beta-1-, receptor | human  | 1                       | 2          | 2          | Human beta 1- ...  |

# SQL

```
select title
from protein, article-title, reference
where protein.accession = NM_000684
and protein.protein-id
      = reference.protein-id
and reference.article-id
      = article-title.article-id;
```

PROTEIN

| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                       | SOURCE |
|------------|-----------|--------------------------------------------------|--------|
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens<br>adrenergic,<br>beta-1-, receptor | human  |

REFERENCE

| PROTEIN-ID | ARTICLE-ID |
|------------|------------|
| 1          | 1          |
| 1          | 2          |

ARTICLE-TITLE

| ARTICLE-ID | TITLE              |
|------------|--------------------|
| 1          | Cloning of the ... |
| 2          | Human beta 1- ...  |

|            |           |                                            |        | REFERENCE ARTICLE-TITLE |            |            |                    |
|------------|-----------|--------------------------------------------|--------|-------------------------|------------|------------|--------------------|
| PROTEIN-ID | ACCESSION | DEFINITION                                 | SOURCE | PROTEIN-ID              | ARTICLE-ID | ARTICLE-ID | TITLE              |
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens adrenergic, beta-1-, receptor | human  | 1                       | 1          | 1          | Cloning of the ... |
| 1          | NM_000684 | Homo sapiens adrenergic, beta-1-, receptor | human  | 1                       | 2          | 2          | Human beta 1- ...  |

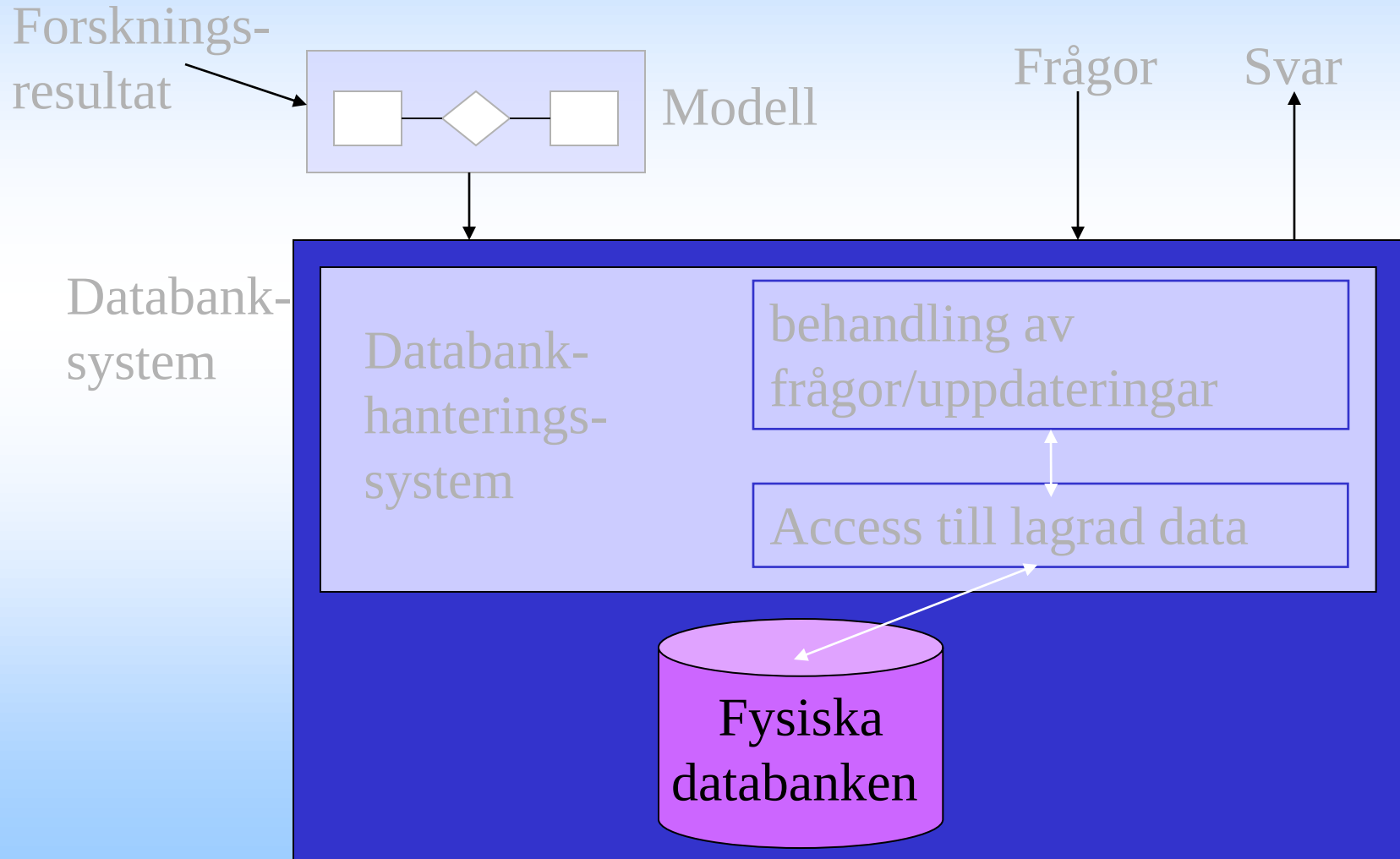
TITLE

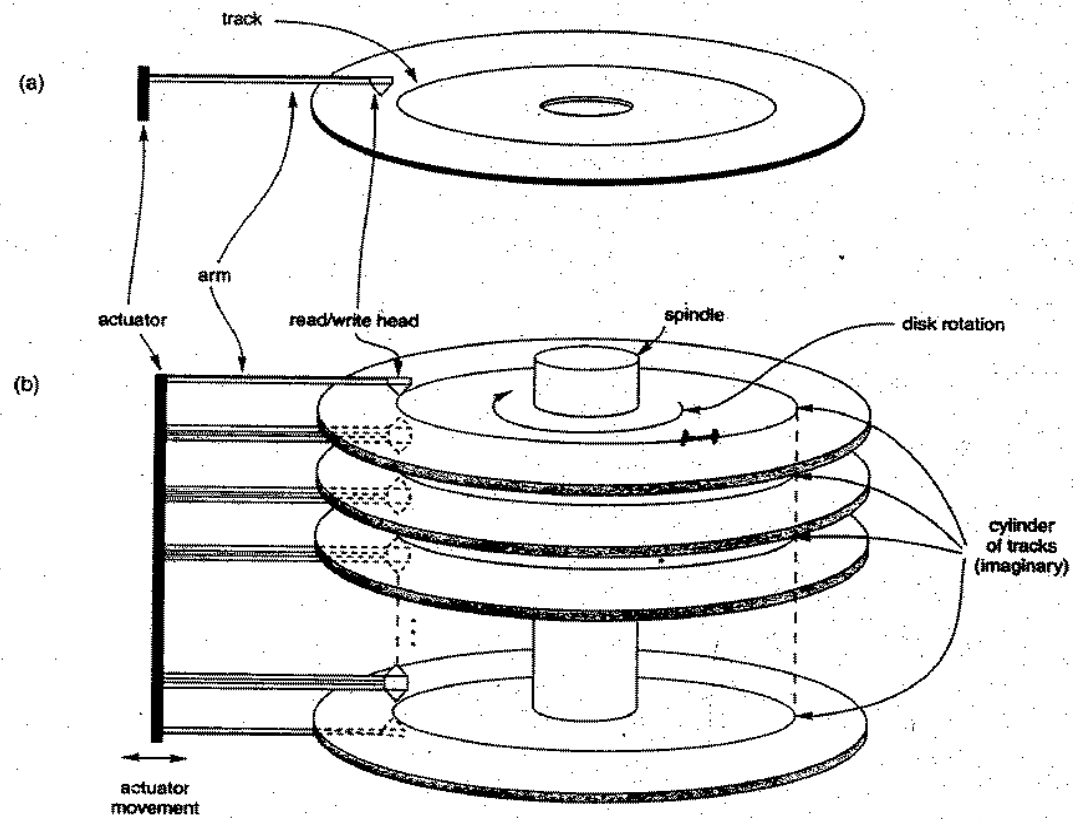
---

Cloning of the ...

Human beta 1- ...

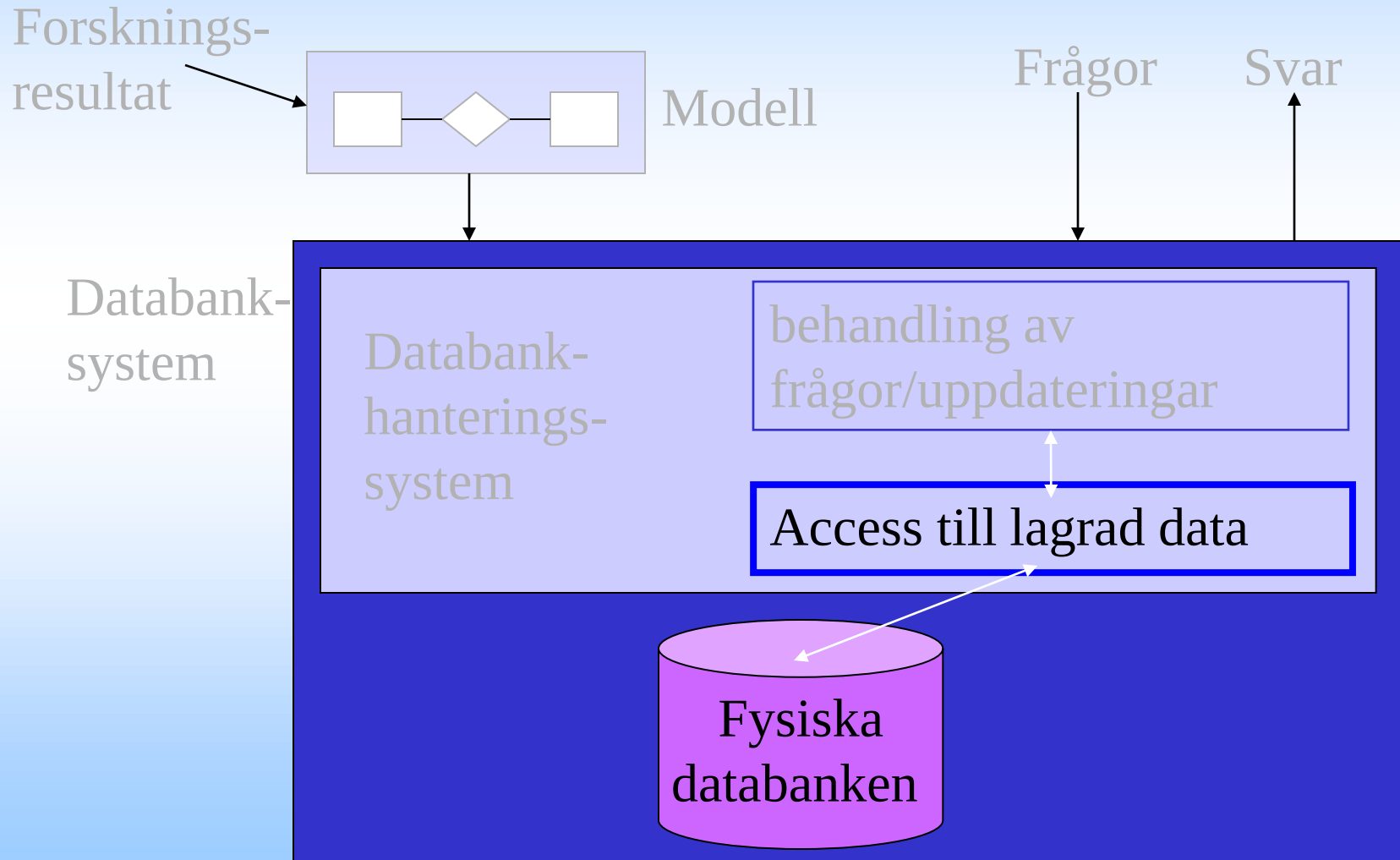
# Hur lagras informationen? (låg nivå)





**Figure 5.1** (a) A single-sided disk with read/write hardware. (b) A disk pack with read/write hardware.

# Hur accessar man informationen? (systemnivå)

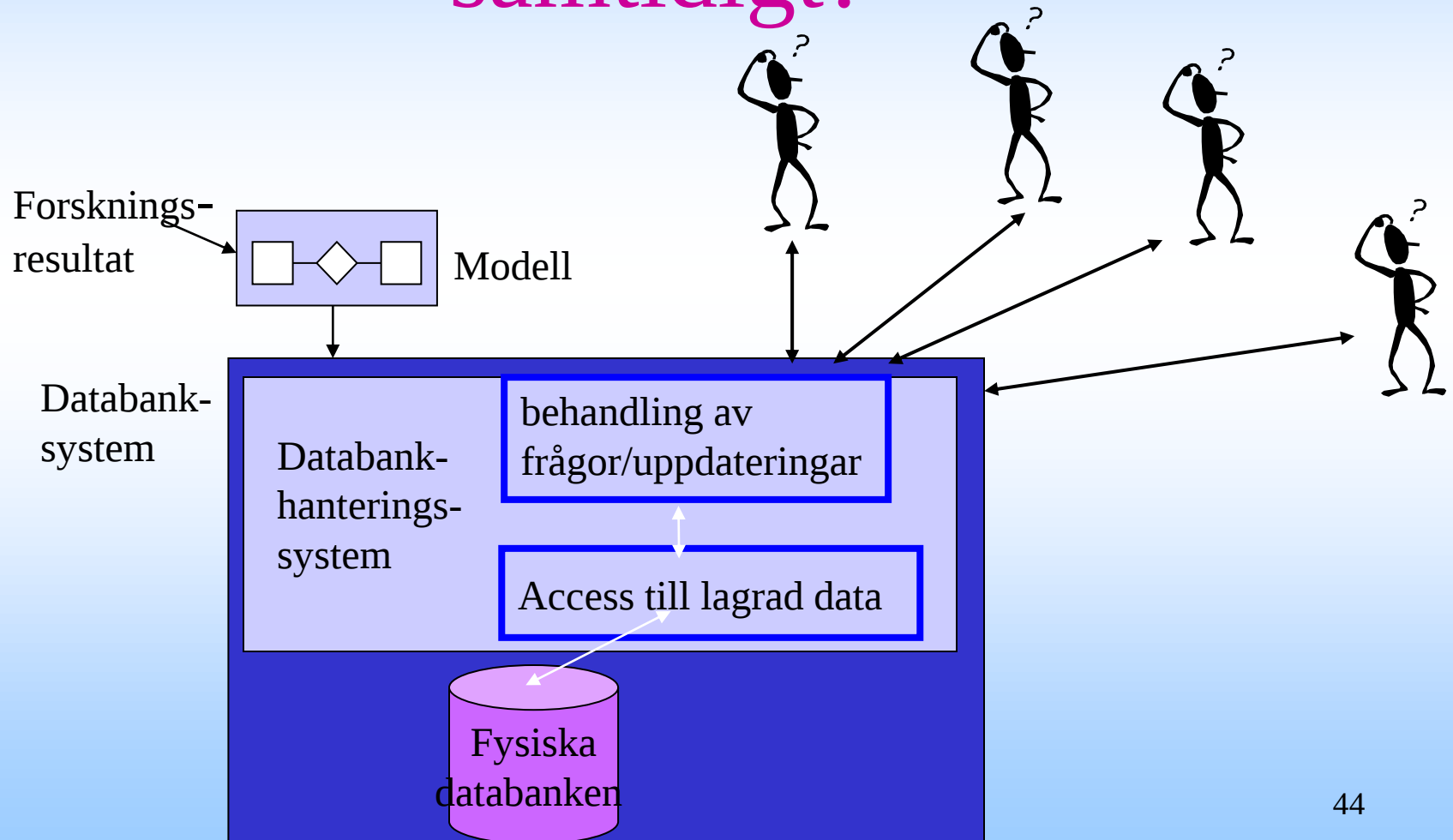


# Hur återställer man en databank efter crash?

Återställning vid

- datorstop (system crash)
- systemfel
- samtidighetsfel (flera användare)
- skivfel
- katastrofer

# Hur kan flera användare accessa och uppdatera informationen samtidigt?



# Flera användare

Administratör 1

TID

Administratör 2

Read(Antal-proteiner)

Antal-proteiner =  
Antal-proteiner + 30

Write(Antal-proteiner)

Read(Antal-proteiner)

Antal-proteiner =  
Antal-proteiner + 25

Write(Antal-proteiner)



# Flera användare

DB



Antal-proteiner: 150

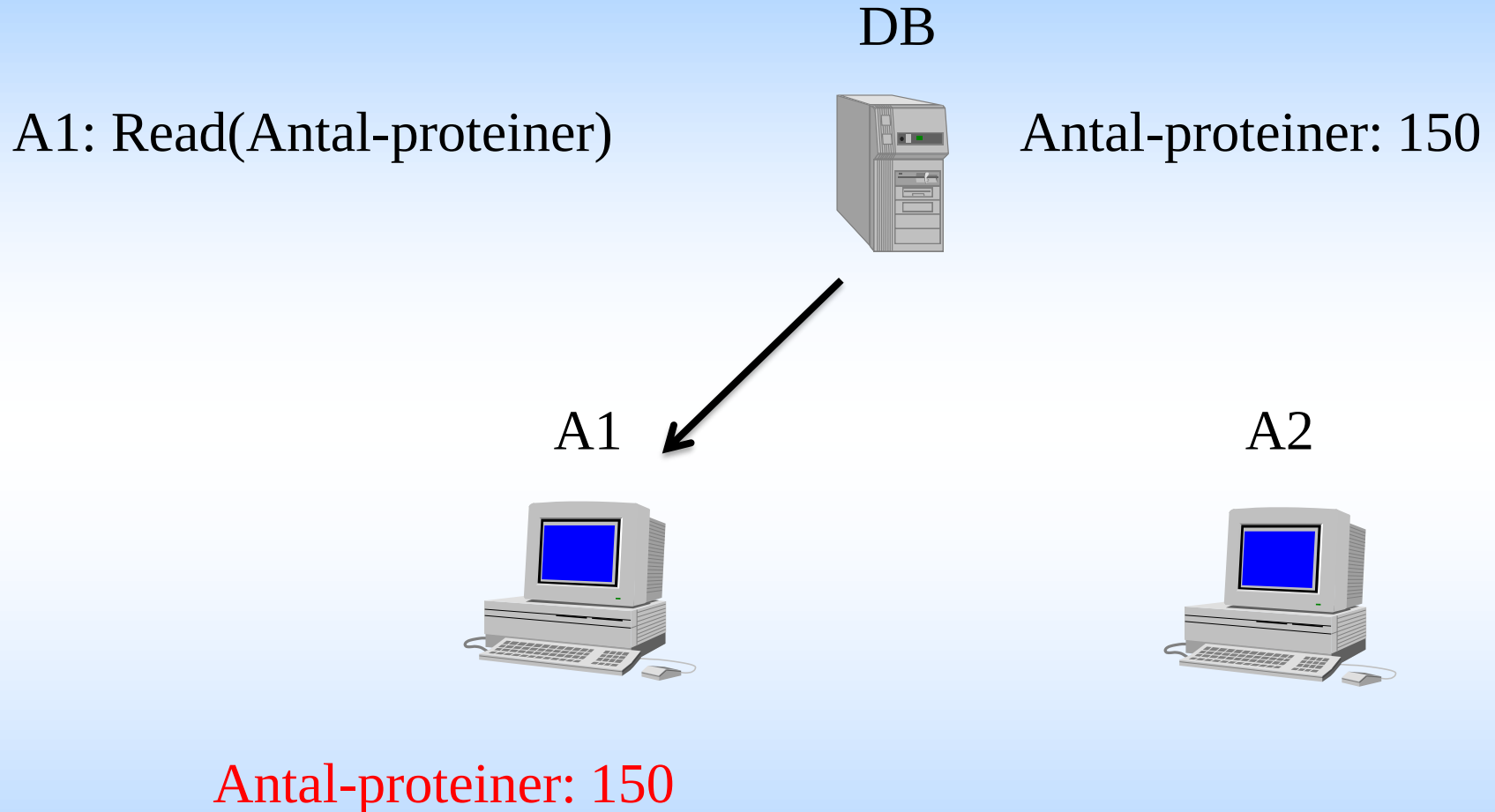
A1



A2



# Flera användare



# Flera användare

DB

A1: Antal-proteiner =  
Antal-proteiner + 30



Antal-proteiner: 150

A1



A2



Antal-proteiner: 150 + 30

# Flera användare

DB

A1: Antal-proteiner =  
Antal-proteiner + 30



Antal-proteiner: 150

A1

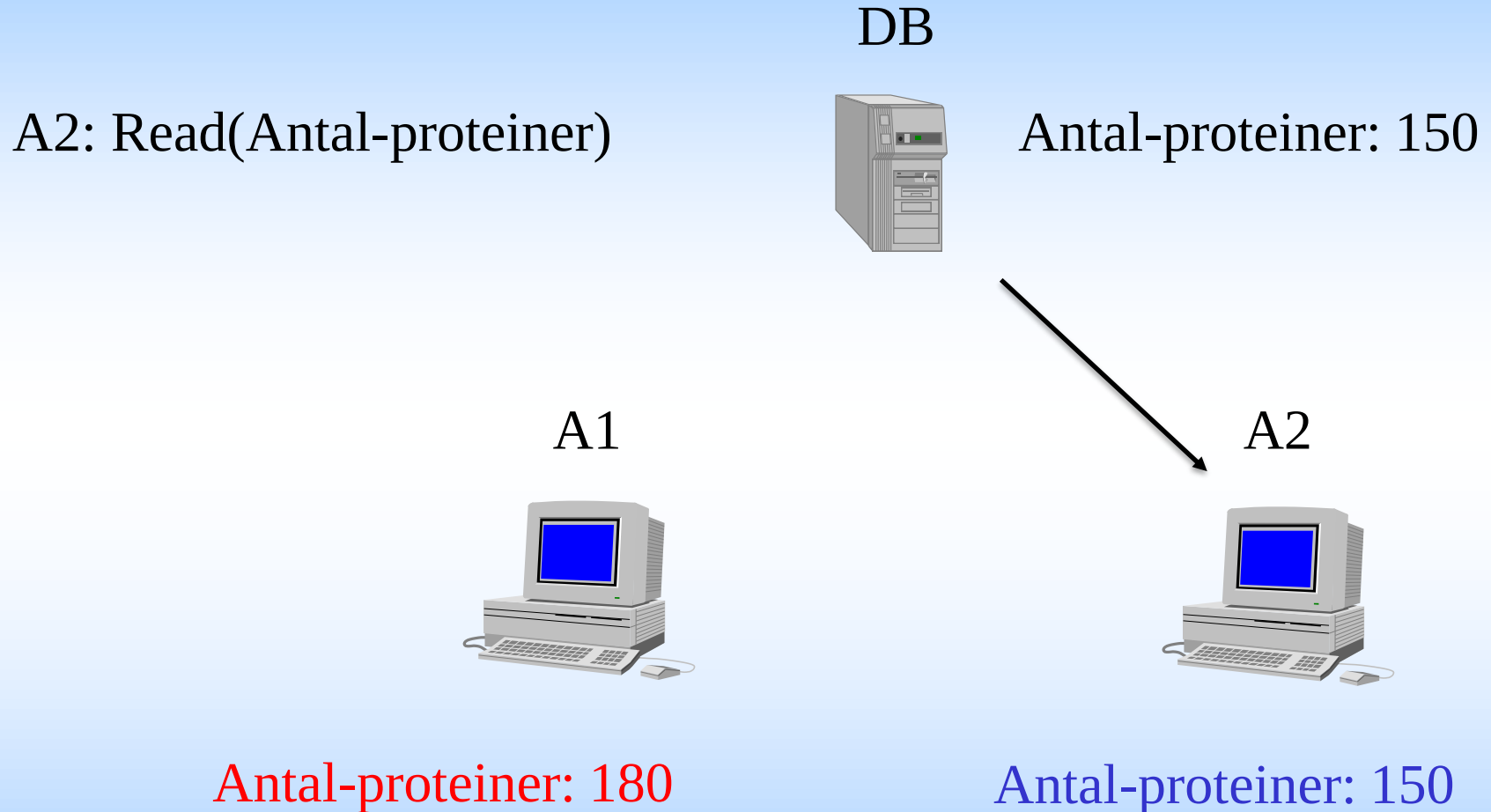


A2



Antal-proteiner: 180

# Flera användare



# Flera användare

DB



A2: Antal-proteiner =  
Antal-proteiner + 25

Antal-proteiner: 150

A1



Antal-proteiner: 180

A2



Antal-proteiner: 150 + 25

# Flera användare

DB



A2: Antal-proteiner =  
Antal-proteiner + 25

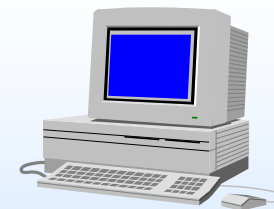
Antal-proteiner: 150

A1



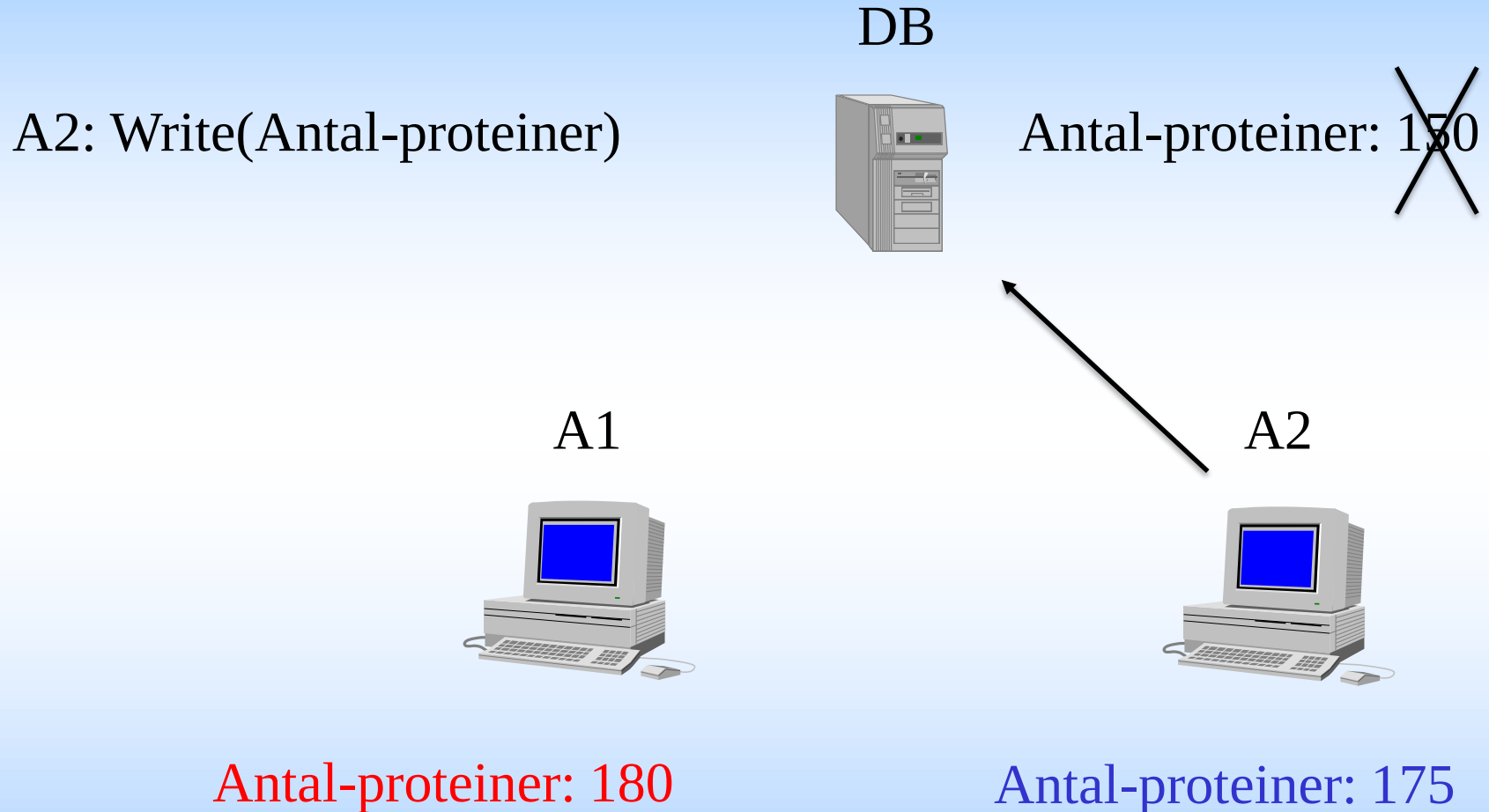
Antal-proteiner: 180

A2

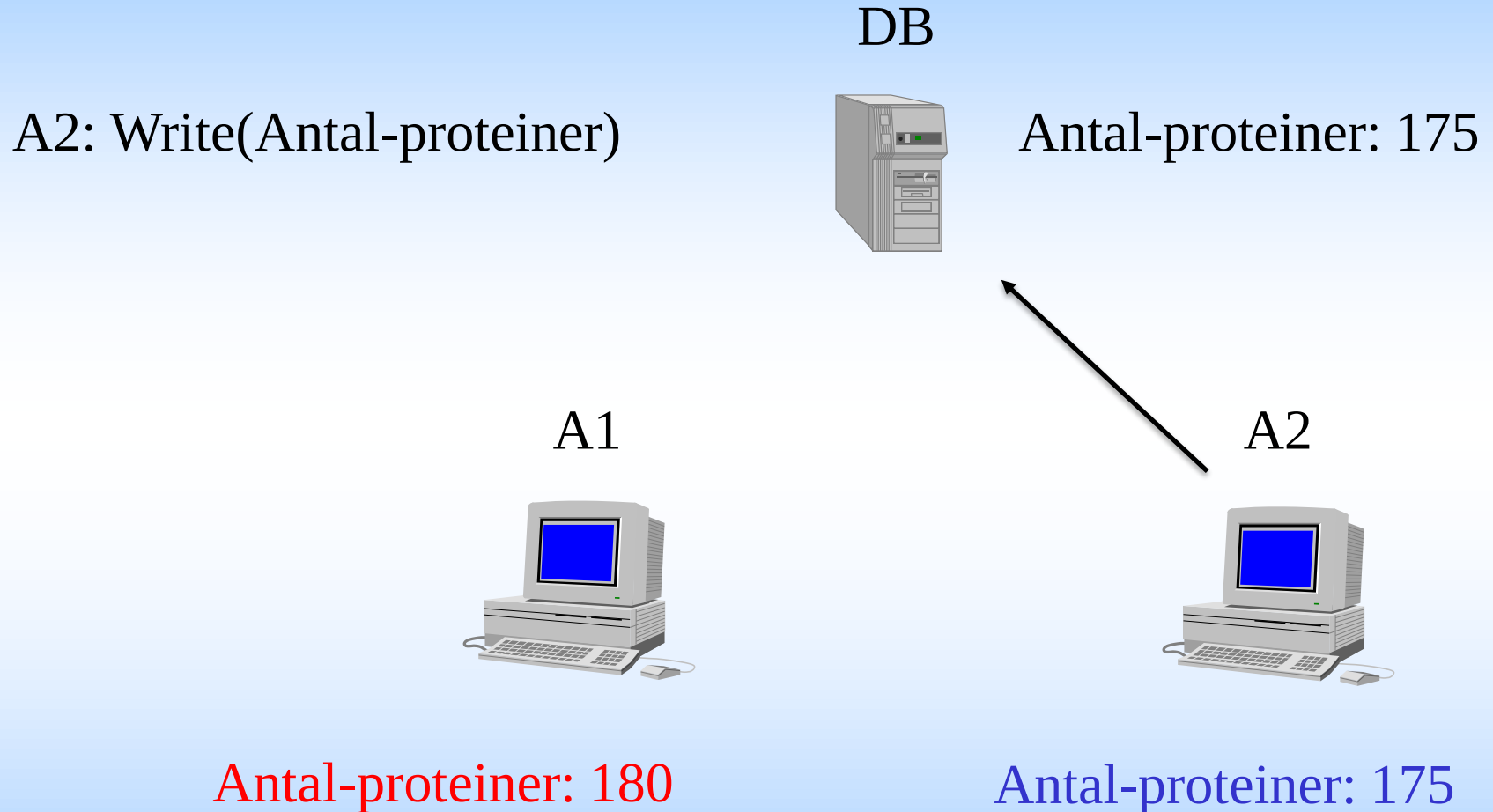


Antal-proteiner: 175

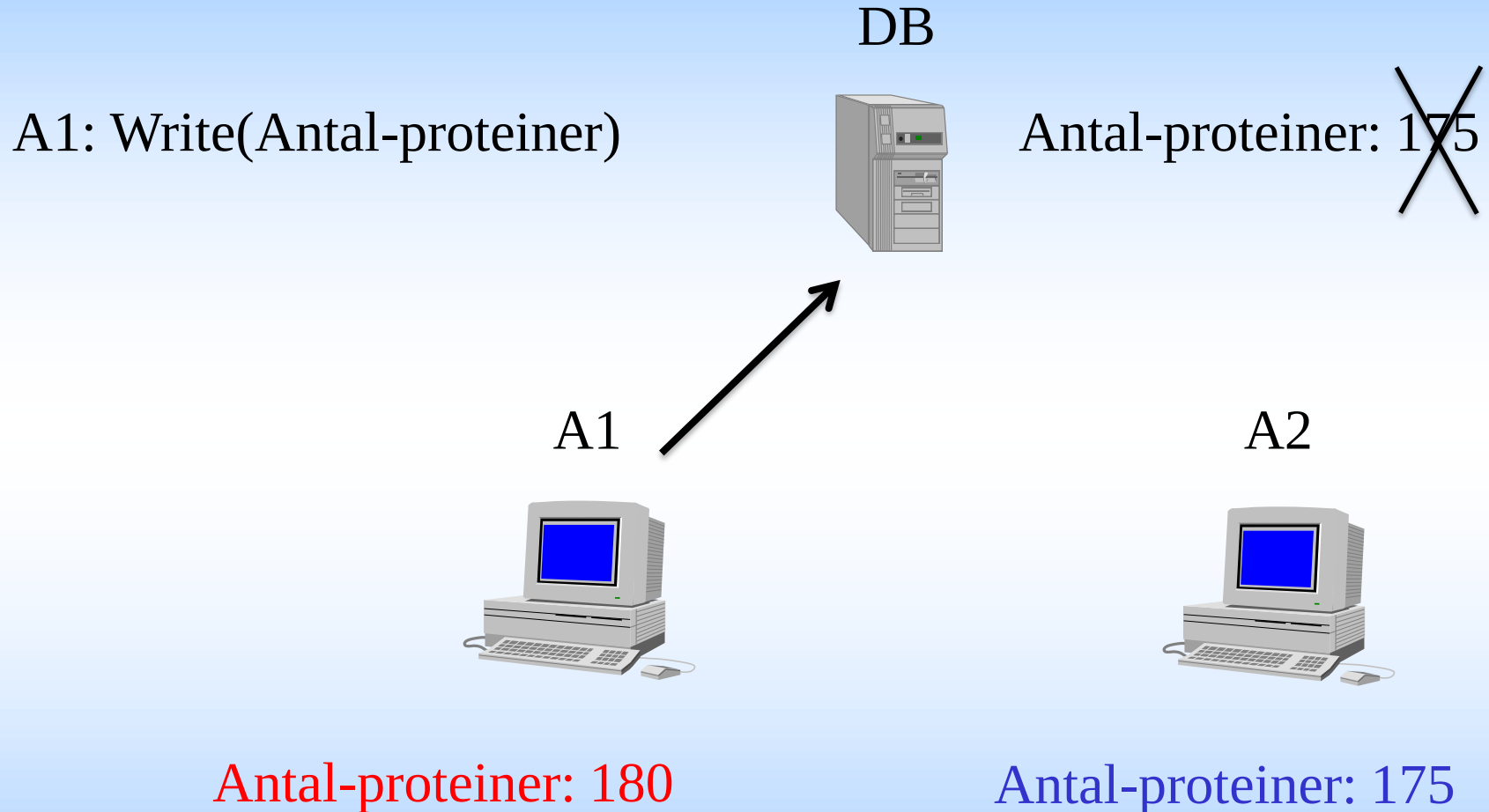
# Flera användare



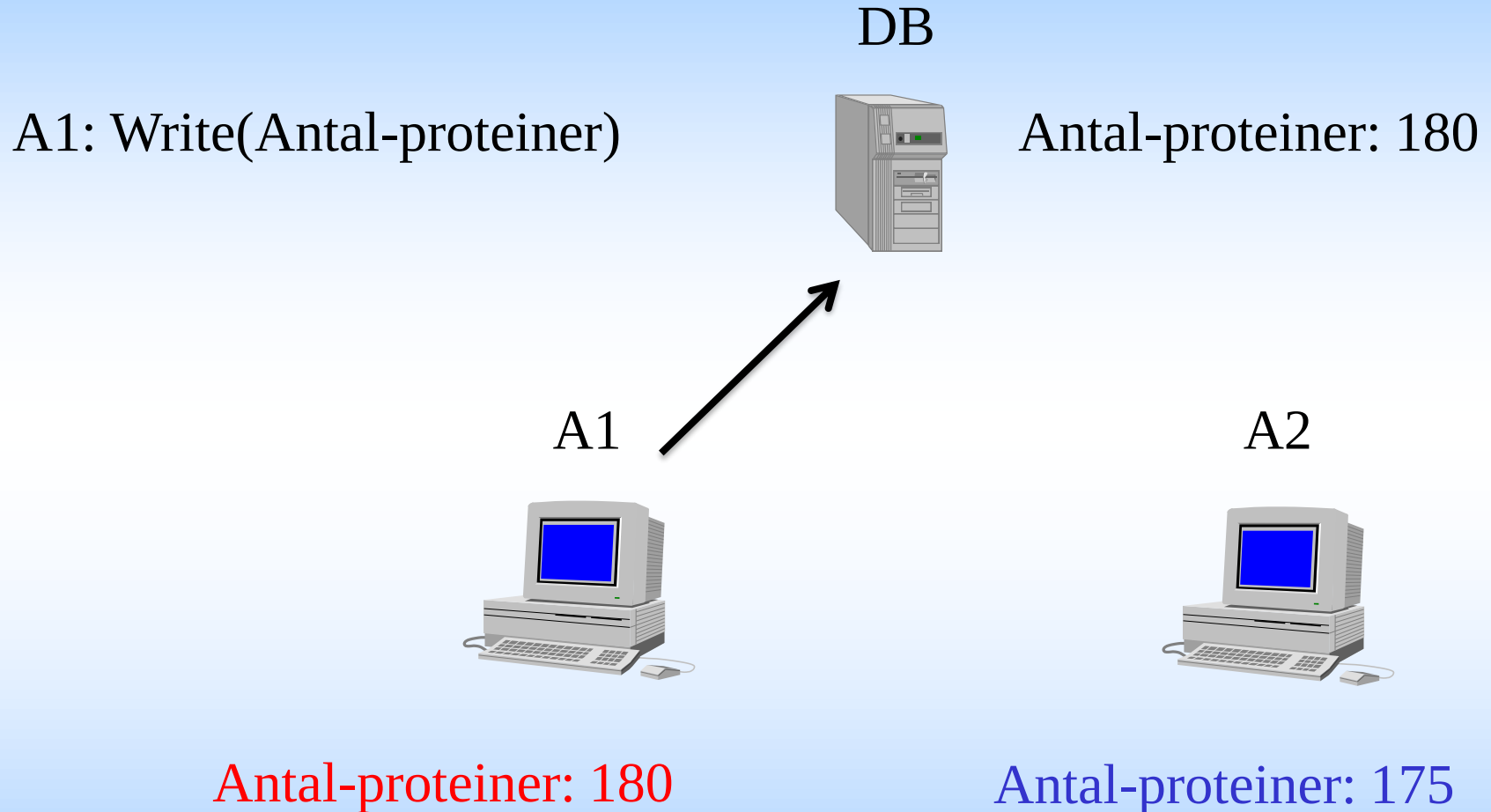
# Flera användare



# Flera användare



# Flera användare



# Flera användare

DB



Antal-proteiner: 180

Antal-proteiner:  $150 + 30 + 25 = 205$

# Informationssäkerhet

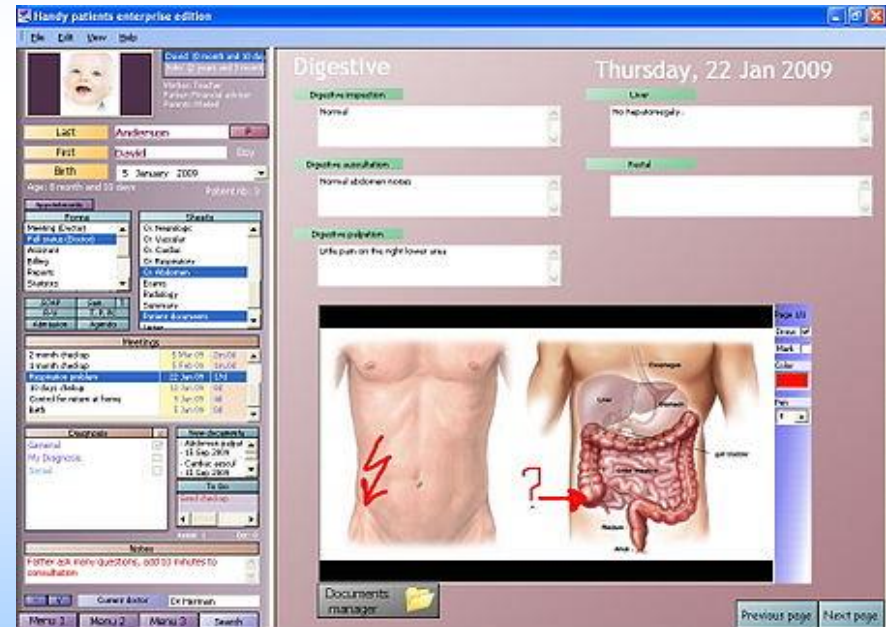
# Sekretess

## Enbart behöriga användare får ta del av informationen

# Integritet

## Korrekt och fullständig information

# Tillgänglighet



# Kursöversikt - FÖ

- Introduktion
- Relationsdatabaser och SQL
- Datamodellering, ER/EER diagram
- Att gå från EER diagram till relationsscheman

# Kursöversikt - FÖ

- Informationssäkerhet
- Databassäkerhet

# Kursöversikt - LA+projekt

- Lab1: Grundläggande SQL
- Lab2: Databasdesign och EER modellering
- Lab3: Avancerad SQL
- Lab4: Informationssäkerhet

# Kursöversikt - LA+projekt

- 'Lab5': Projekt i bioinformatik
  - genomdatabas
  - proteindatabas
  - enzymdatabas
  - databas för biologiska reglersystem

# Kursöversikt - LA+projekt

- Rapporteringsdeadline vid varje tentamenstillfälle
- behövs ett särskilt databaskonto
  - > automatisk vid registrering på kursen
  - databaskontona tas bort efter 1 år
- anmälan till laborationer via kurshemsidan senast 7 april

# Examination

- tenta
- laborationsserie
- projekt

# En kurs för TB

- Användning i senare kurser + arbete
- Unik och eftertraktad kompetens
  - Bio
  - Data
  - Förståelse av modellering + konsekvenser  
(Hur modellera? Hur ställa frågor? Varför går det långsamt? Varför får man inget svar?...)

# Samläsning

- Samläsning med TDDD12  
(DI, I, Ii, IP, M, Mat, Y)
- Innehåll föreläsningar:  
enbart databasdelen samläses  
(resten:  
TDDD12 databasteori  
TDDE49 informationssäkerhet)

# Samläsning

- labbar:
  - Flera labbar för TDDDD12
  - Mera tid för TDDE49
- Projekt:
  - Unikt projekt för TDDE49

