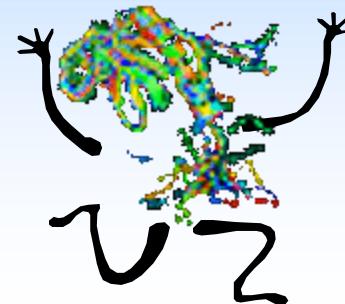


# GET THAT PROTEIN!



Eller

TDDE49

Databaser och informationssäkerhet  
för bioinformatik

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

# Lärare

- Examinator: Olaf Hartig
- FÖ: Olaf Hartig, Ulf Kargén, Patrick Lambrix
- LA: Shahrzad Khayatbashi, Ulf Kargén
- projekt: Patrick Lambrix, Shahrzad Khayatbashi
- databasadministration: Shahrzad Khayatbashi
- studierektor: Patrick Lambrix
- Olaf/Shahrzad på engelska

# Kurslitteratur

- Elmasri, R. and Navathe, S. B. Fundamentals of Database Systems, Addison Wesley.
- (Padron-McCarthy, webbkurs på Svenska)
- van Oorschot P: Computer Security and the Internet.
- Anderson R, Security Engineering.
- Adam Shostack: Threat Modeling.
- 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, realliddatabaser

# 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. (forskningsrådens 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

# Årets ändringar i kursen

Ändringar 2022:

- Campus / Online (covid19)
- Ny lärare säkerhet

Ändringar 2021:

- Namnbyte
- Informationssäkerhet tillkommer
- Information retrieval, semi-strukturerad data, teoretiska delar av relationsdatabaser utgår.
- Nya labbar för databasdelen.
- Flipped classroom för databasföreläsningarna.

# Årets ändringar i kursen

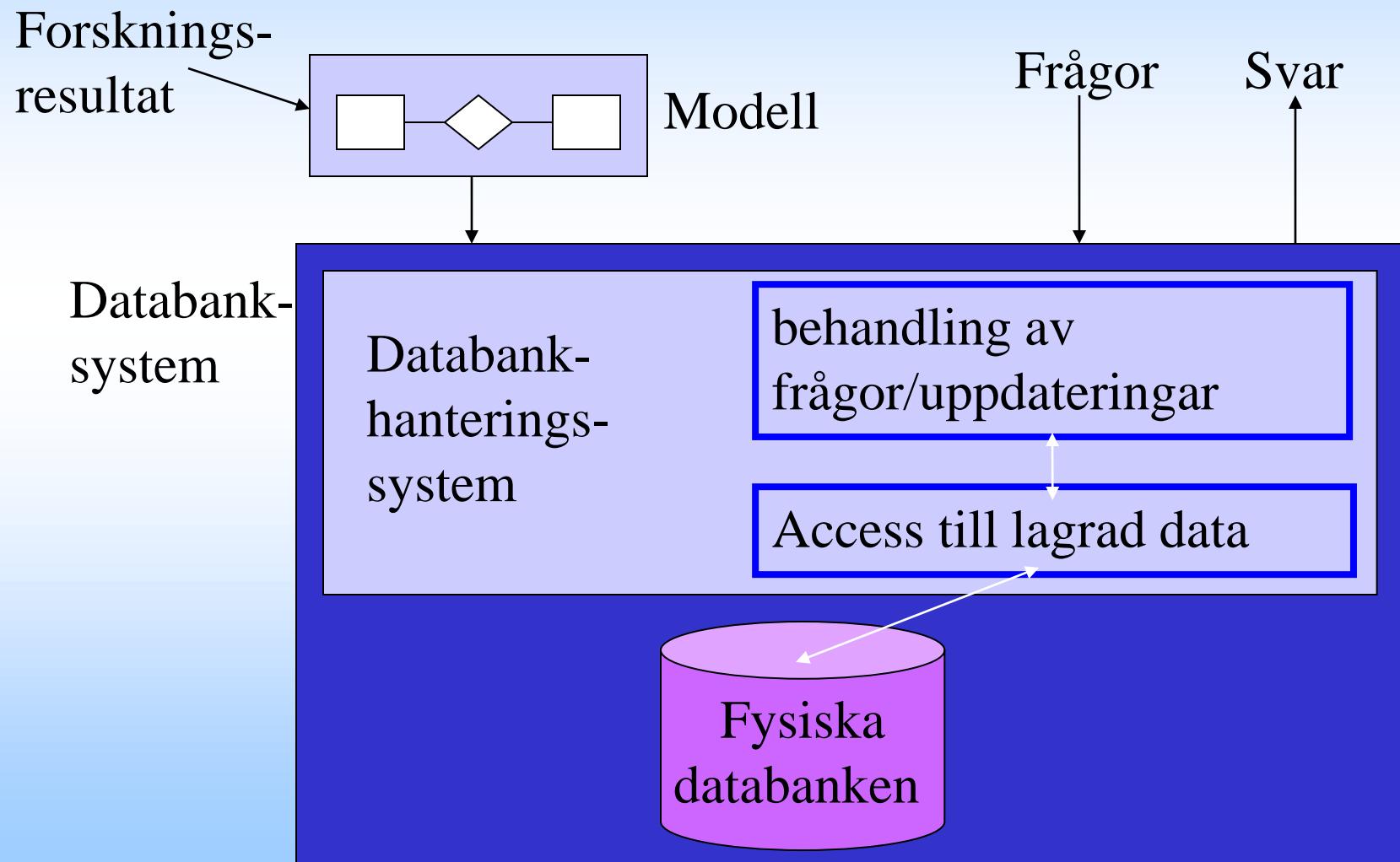
Tidigare ändringar:

- 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 ctggggtgtt ccccaaccac ggcccagccc tgccacaccc  
61 cccgcccccg gcctccgcag ctcggcatgg gcgcgggggt gctcgccctg ggcgcctccg  
121 agcccgtaa cctgtcgctg gcegcaccgc tccccgacgg cgccggccacc gcccgcggc  
181 tgctggtgcc cgctgcggc cccgcctcg tgcgtgcctcc cgccagcgaa agcccgagc  
241 cgctgtctca gcagtggaca gccccatgg gtctgtat ggcgtctatc gtgtgtca  
301 tcgtggcgcc caatgtgctg gtgatgtgg ccatacgccaa gacgcccggg ctgcagacgc  
361 tcaccaacct ttcatcatg tccctggcca gccccgaccc ggtcatgggg ctgtgttgg  
421 tgccgttcgg ggccaccatc gtgggtgtgg gccgctggga gtacggctcc ttctctgcg  
481 agctgtggac ctcaatggac gtgtgtgcg tgacggccag catcgagacc ctgtgttca  
541 ttgcccttggaa cccatcaccc gcccctccg ctaccagagc ctgtgtacgc  
601 gcccggggc gccccccctc gtgtgcaccc tggtggccat ctggccctg tggtttcc  
661 tgcccatctt catgcactgg tggcgccgg agagcgacga ggcgcggc tgctacaacg  
721 accccaagtg ctgcgacttc gtcaccaacc gggcctacgc catgcctcg tccgttagtct  
781 cttctacgt gcccgttgc atcatggct tcgtgtaccc gccccgttcc cgcgaggccc  
841 agaaggcaggtaa gaagaagatc gacagctgcg agcgcgttt ctcggcgcc ccagecgcc  
901 cggccctcgcc ctgcgcctcg cccgtccccg cggccggcc gcccggggc ccccccggcc  
961 cggccggcc cggccgcacc gccccgttgc ccaacggggc tgccggtaag cggccggccct  
1021 cggccctcggtt ggcctacgc gagcagaagg cgctcaagac gctggccatc atcatggcg  
1081 tttcacgtt ctgtggctg cccttttcc tggccaacgt ggtgaaggcc ttccaccggc  
1141 agctggtgcc cggcccttc ttgcgttttcaactggctt gggctacgc aactcgccct  
1201 tcaacccat catctactgc cgcagccccg acttccgcaa ggcctccag ggactgtct  
1261 gtcgcgcgc cagggtgcgc cggccggcc acgcgcacca cggagacccgg cggccgcgc  
1321 cggccgtctt gggccggcc ggaccccccgc catgcggccgg gggccctcg gacgacgacg  
1381 acgacgatgt ctgcggggcc acggccggcc cgcgcctgtt ggagccctgg gcccgttca  
1441 acggccggcc ggcggccgac agcgactcga gcctggacga gcccgttccgc cccggcttgc  
1501 cctcgaaatc caagggttag ggcggccggc gggccgggaa ctccggccac gggttccca  
1561 gggaaacgagg agatctgtt ttacttaaga ccgatagcag gtgaactcga agcccaaat  
1621 ctcgtctga atcatccgag gcaaaagagaa aagccacggaa ccgttgcaca aaaaggaaag  
1681 ttggaaagg gatgggagag tggcttgctg atgttcccttgg

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

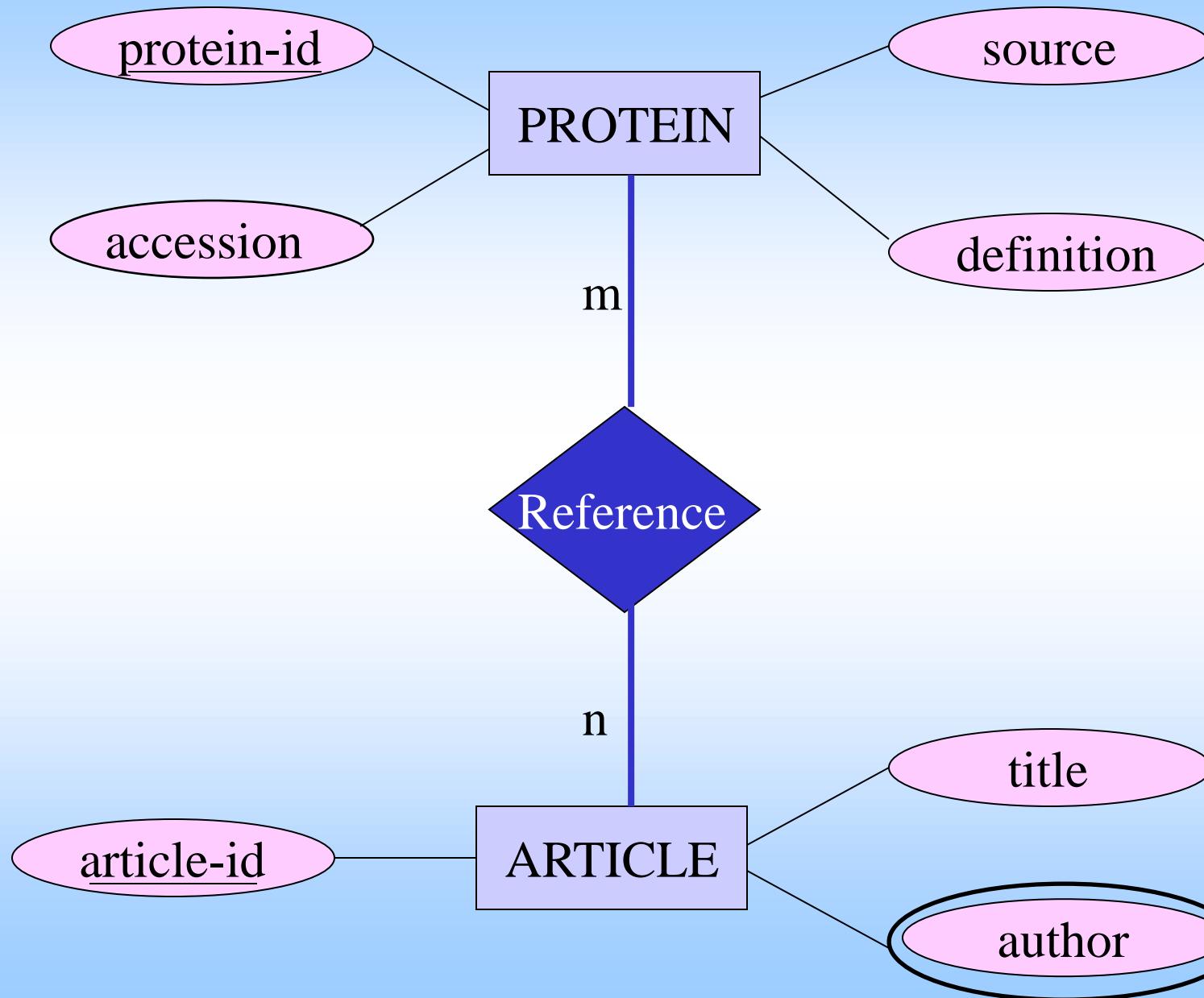
# Vilken information lagrar man?

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

# Entity-Relationship

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

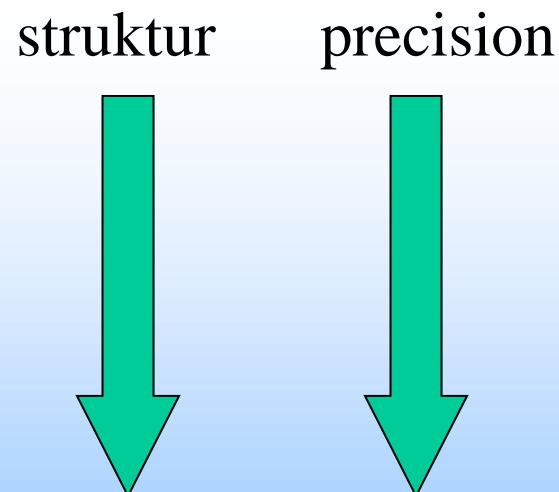
# Entity-relationship



# Hur lagras informationen? (hög nivå)

## Hur accessar man informationen? (användarnivå)

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



# Text - Information Retrieval

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

# IR - Filmmodell: inverterad fil

inverterad fil

WORD	HITS	LINK
...	...	...
adrenergic	32	—
...	...	...
cloning	53	—
...	...	...
receptor	22	—
...	...	...

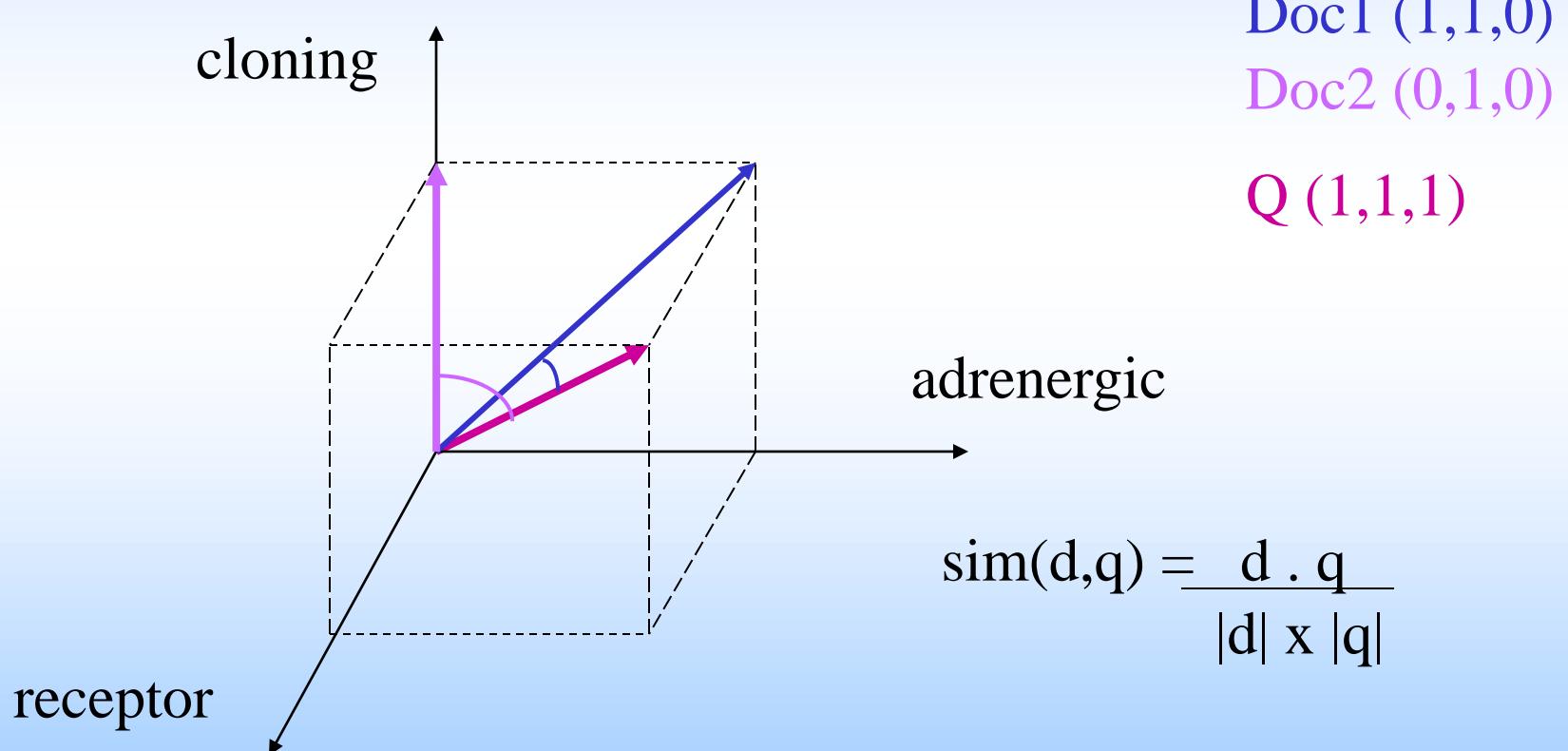
anslagningsfil

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	REFERENCE	ARTICLE-ID
1	NM_000684	Homo sapiens adrenergic, beta-1-, receptor	human	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	REFERENCE	ARTICLE-ID
1	NM_000684	Homo sapiens adrenergic, beta-1-, receptor	human	1 1	1 2

## ARTICLE-AUTHOR

ARTICLE-ID	AUTHOR	ARTICLE-ID	TITLE
1	Frielle		Cloning of the cDNA for the human beta 1-adrenergic receptor
1	Collins	1	
1	Daniel		
1	Caron	2	Human beta 1- and beta 2- adrenergic receptors: structurally and functionally related receptors derived from distinct genes
1	Lefkowitz		
1	Kobilka		
2	Frielle		
2	Kobilka		
2	Lefkowitz		
2	Caron		

# 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 adrenergic, 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 adrenergic, 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 adrenergic, 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 adrenergic, 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 adrenergic, 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

PROTEIN-ID	ACCESSION	DEFINITION	SOURCE	REFERENCE	
				PROTEIN-ID	ARTICLE-ID
1	NM_000684	Homo sapiens adrenergic, beta-1-, receptor	human	1	1
1	NM_000684	Homo sapiens adrenergic, 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 adrenergic, 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	PROTEIN-ID	REFERENCE	ARTICLE-TITLE	TITLE
					ARTICLE-ID	ARTICLE-ID	
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 adrenergic, 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	PROTEIN-ID	REFERENCE	ARTICLE-TITLE	TITLE
					ARTICLE-ID	ARTICLE-ID	
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- ...

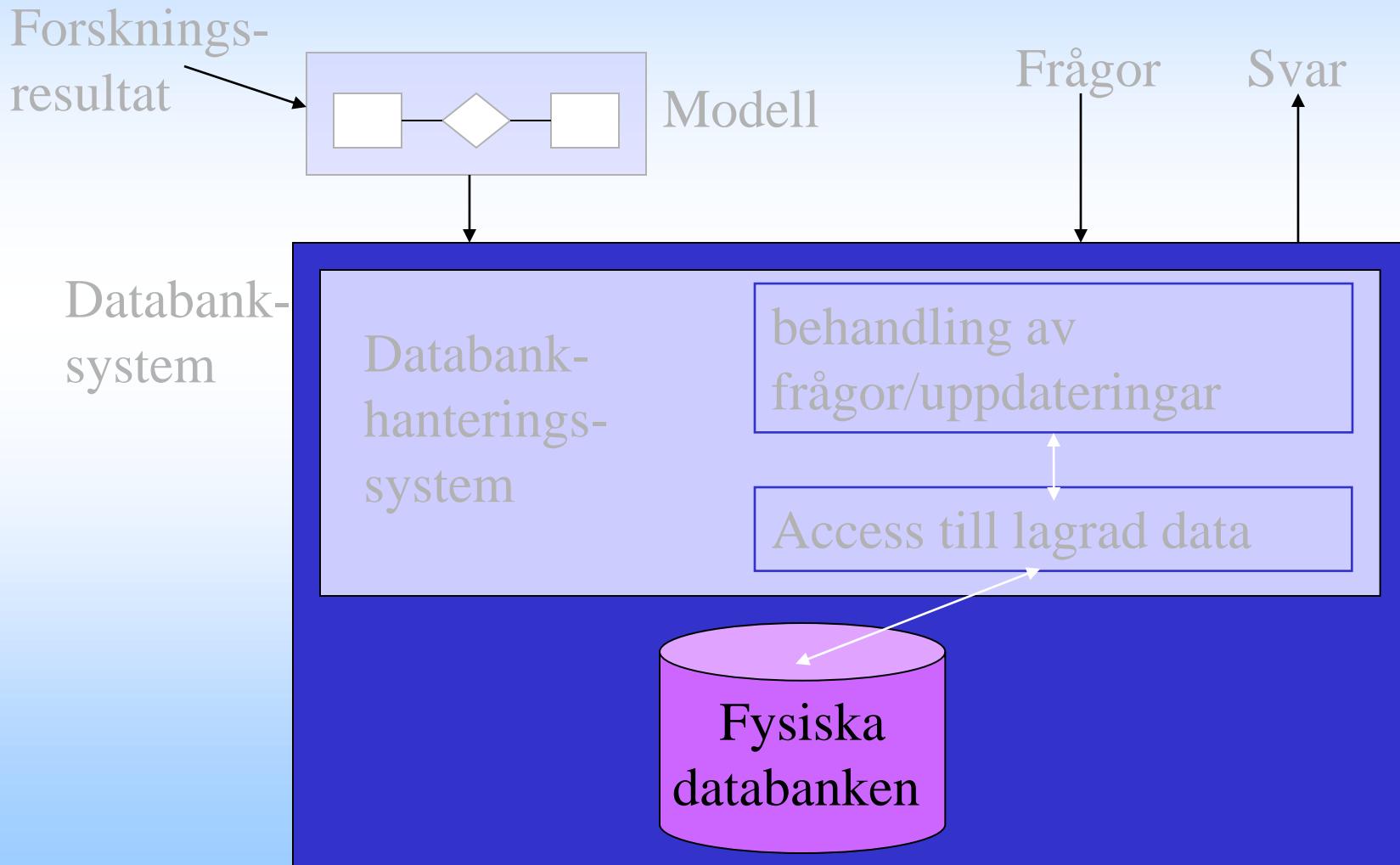
TITLE

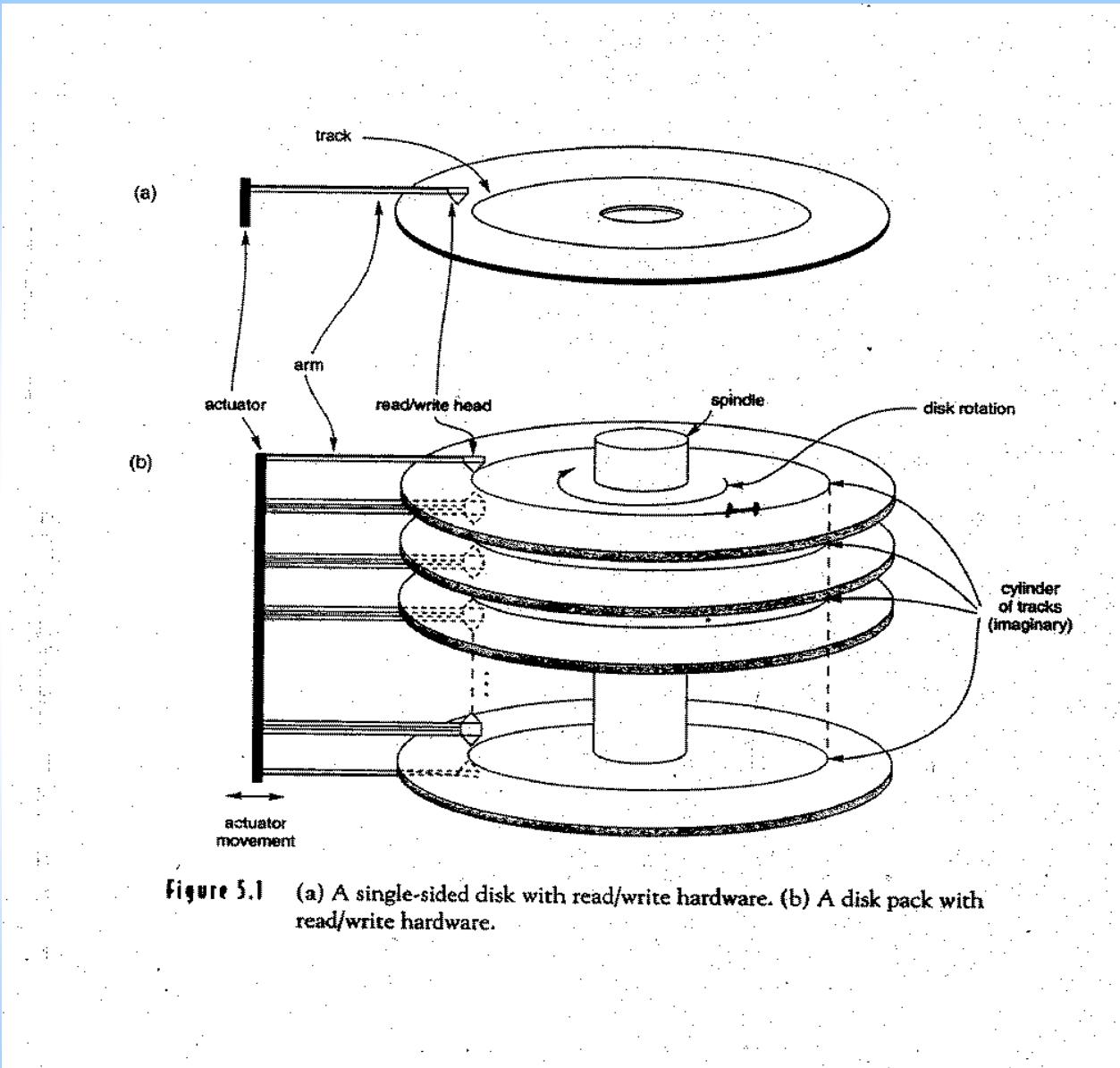
---

Cloning of the ...

Human beta 1- ...

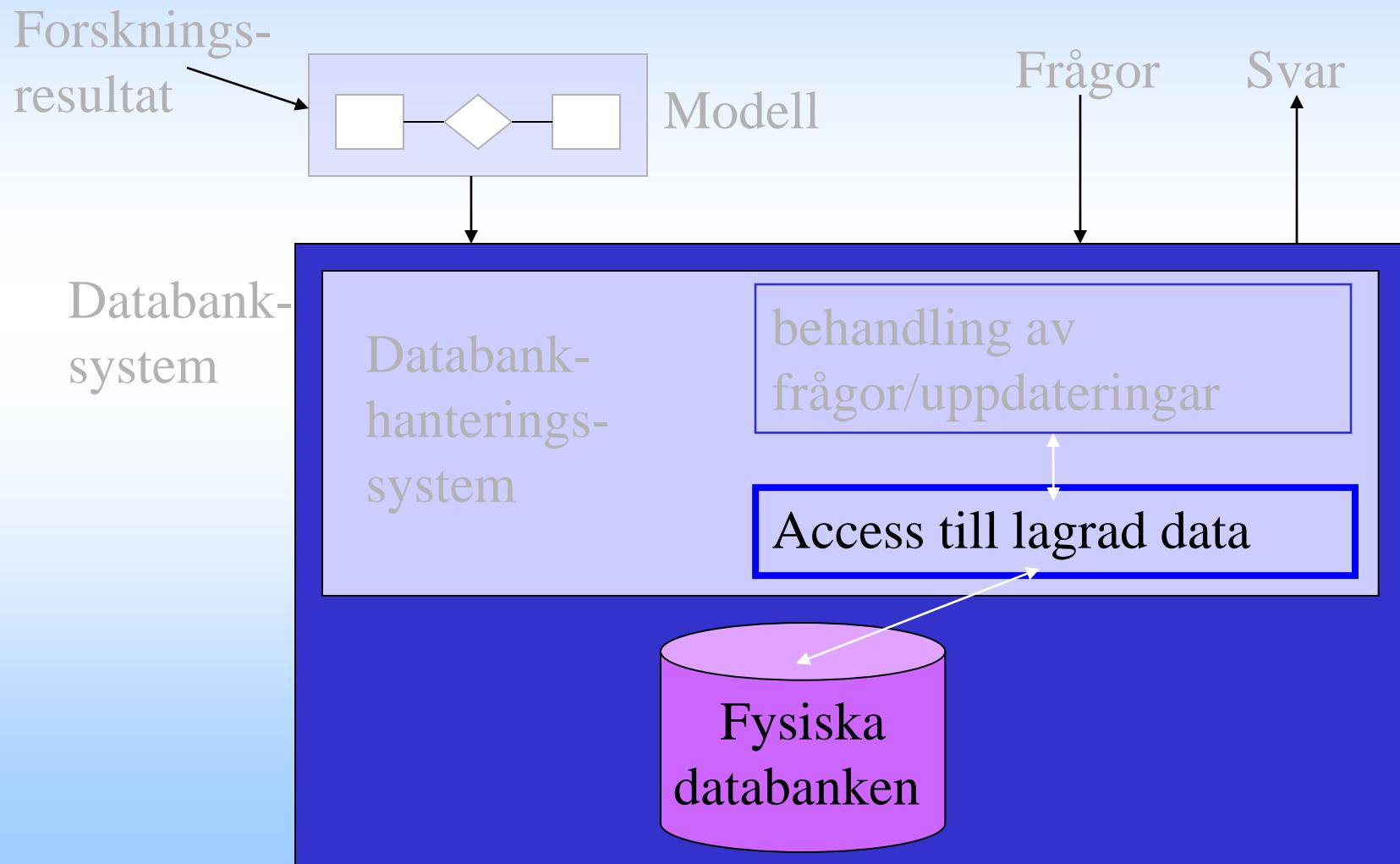
# Hur lagras informationen? (läg nivå)





**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)

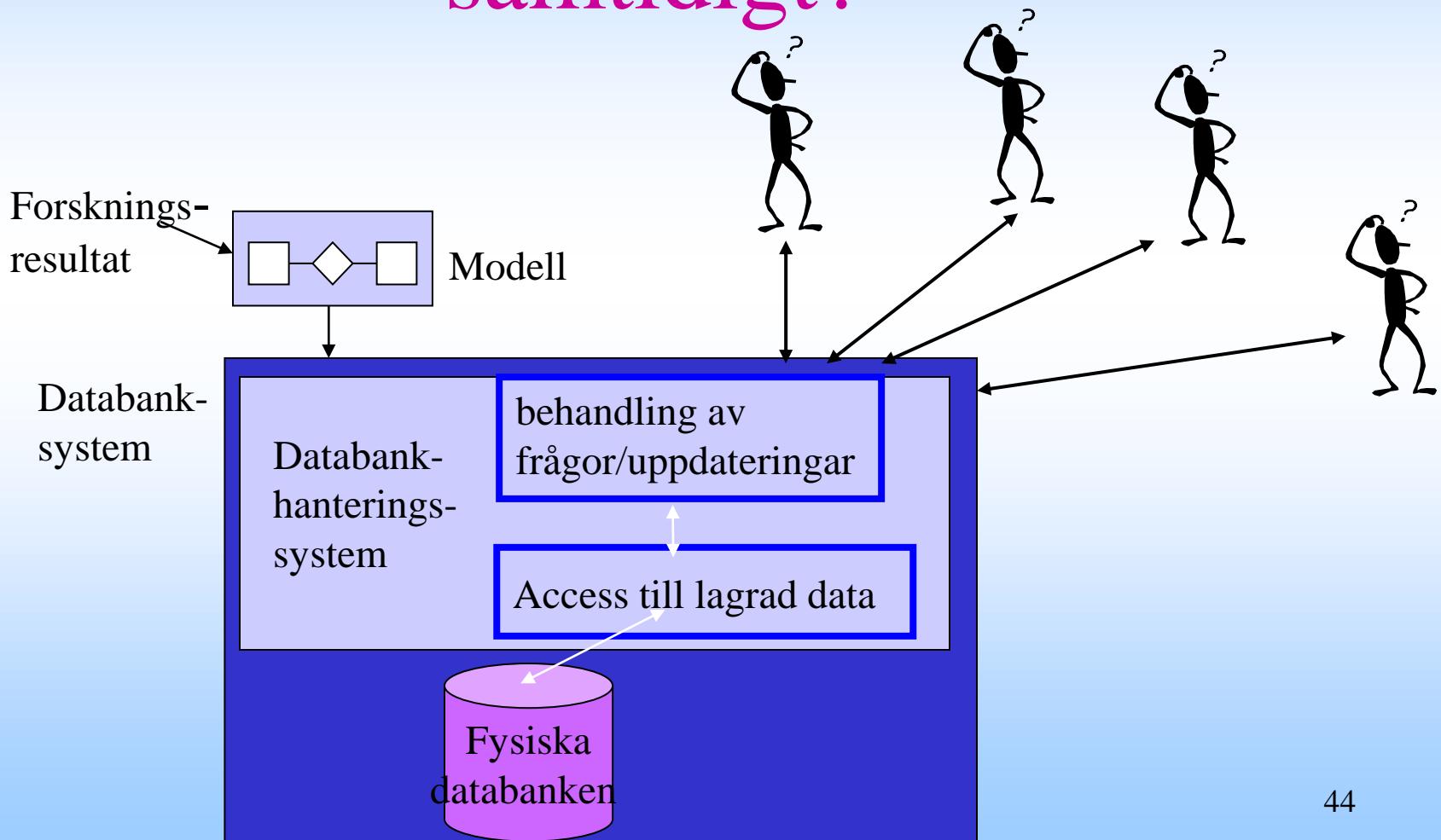


# Hur återställer man en databank efter crash?

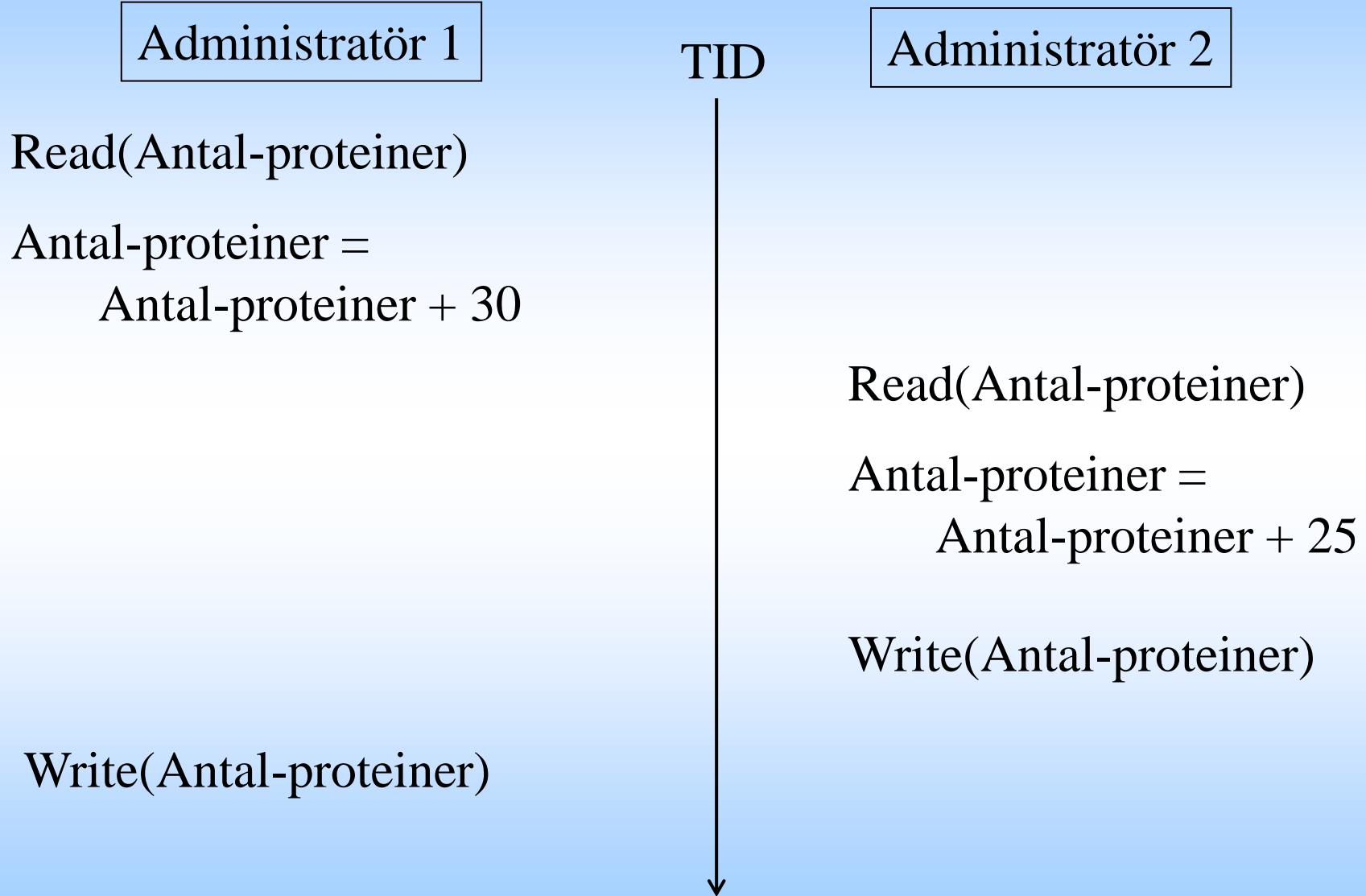
Återställning vid

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

# Hur kan flera användare accessa och uppdatera informationen samtidigt?



# Flera användare



# Flera användare

DB



Antal-proteiner: 150

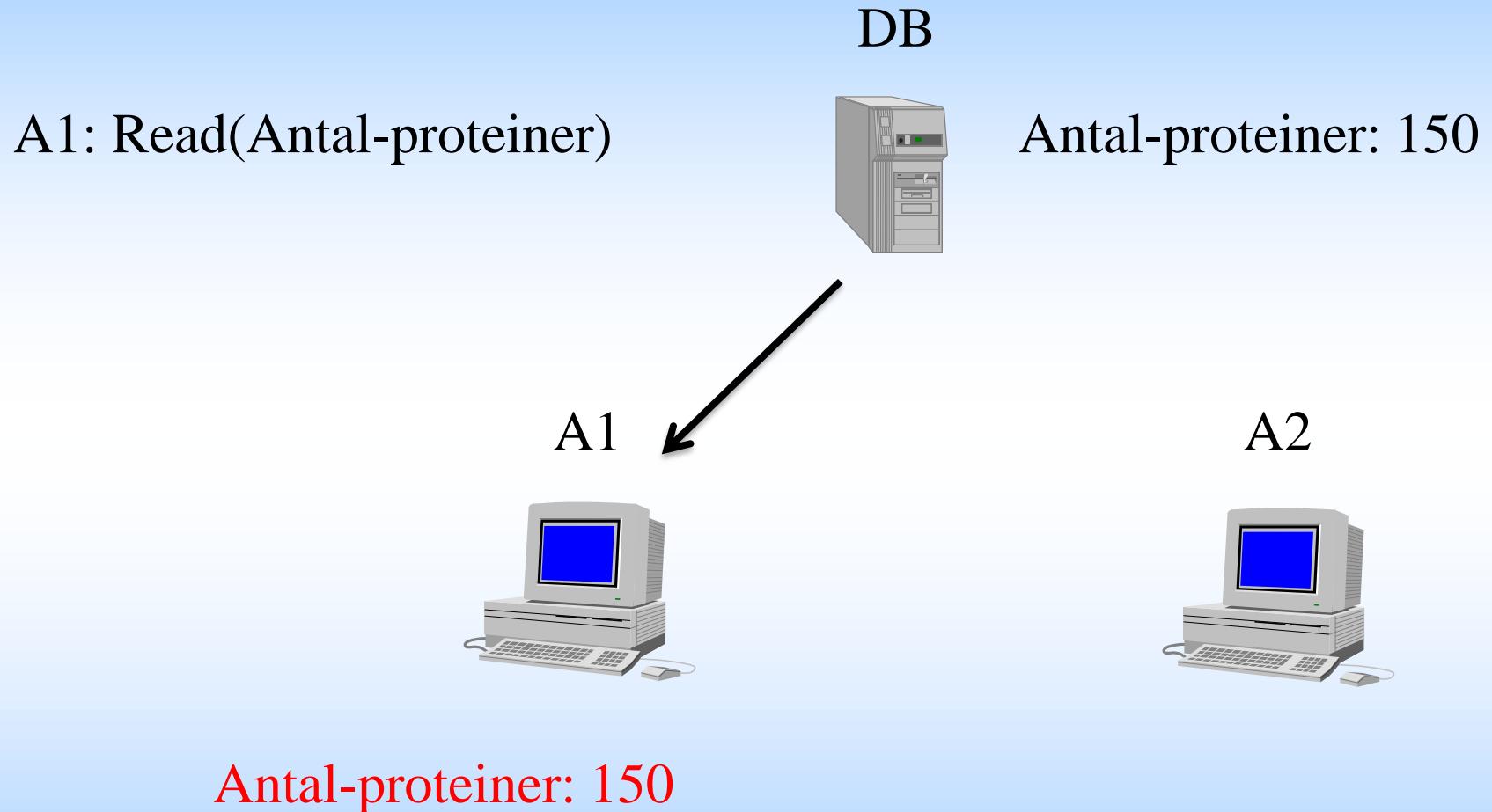
A1



A2



# Flera användare



# Flera användare

A1: Antal-proteiner =  
Antal-proteiner + 30

DB



Antal-proteiner: 150

A1



A2



Antal-proteiner: 150 + 30

# Flera användare

A1: Antal-proteiner =  
Antal-proteiner + 30

DB



Antal-proteiner: 150

A1



A2



Antal-proteiner: 180

# Flera användare

A2: Read(Antal-proteiner)

DB



Antal-proteiner: 150

A1



Antal-proteiner: 180

A2



Antal-proteiner: 150

# Flera användare

A2: Antal-proteiner =  
Antal-proteiner + 25

DB



Antal-proteiner: 150

A1



Antal-proteiner: 180

A2



Antal-proteiner: 150 +25

# Flera användare

A2: Antal-proteiner =  
Antal-proteiner + 25

DB



Antal-proteiner: 150

A1



Antal-proteiner: 180

A2



Antal-proteiner: 175

# Flera användare

A2: Write(Antal-proteiner)

DB



Antal-proteiner: 150

~~150~~

A1

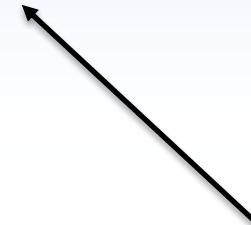


Antal-proteiner: 180

A2



Antal-proteiner: 175



# Flera användare

A2: Write(Antal-proteiner)

DB



Antal-proteiner: 175

A1



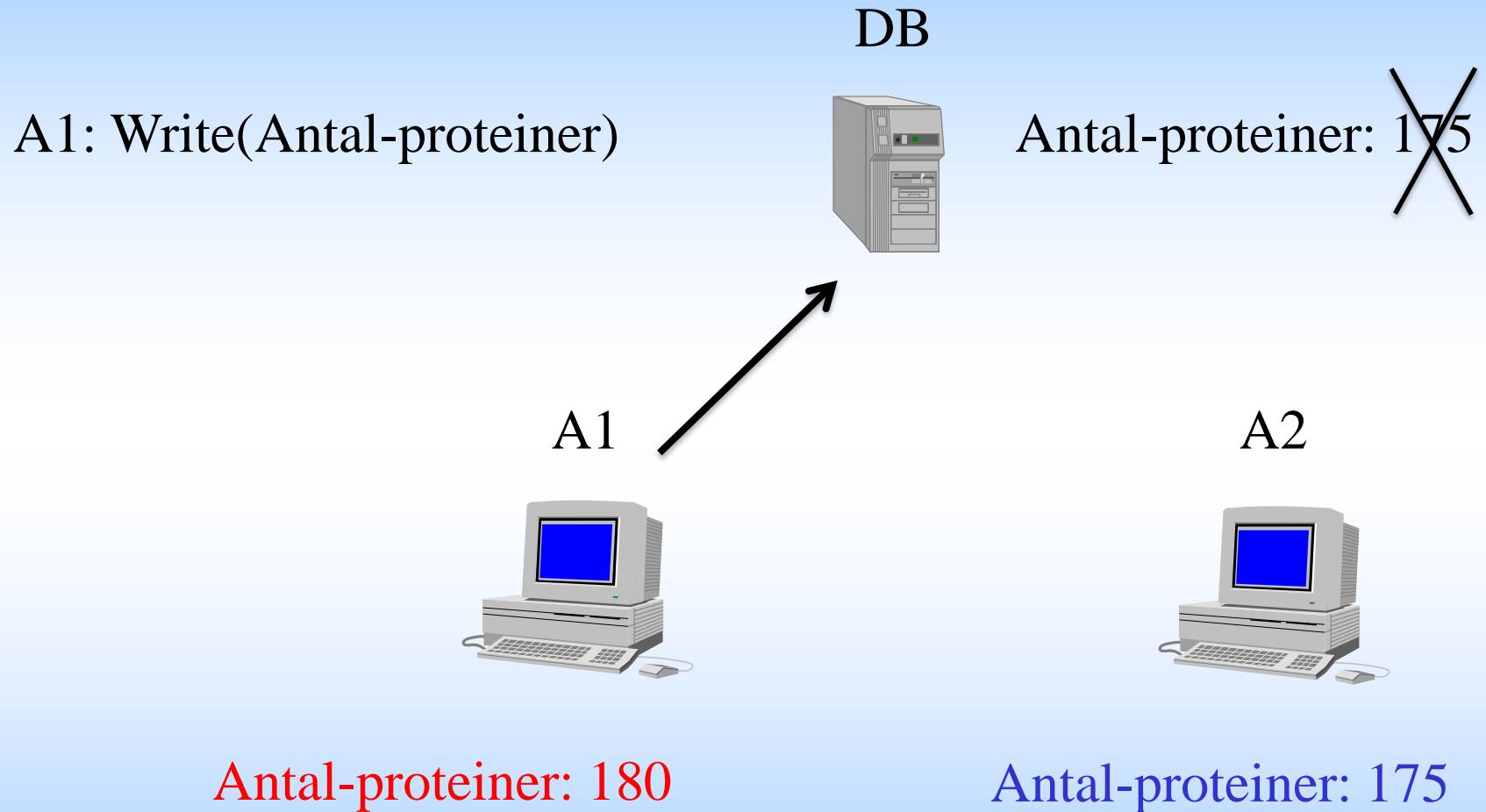
Antal-proteiner: 180

A2

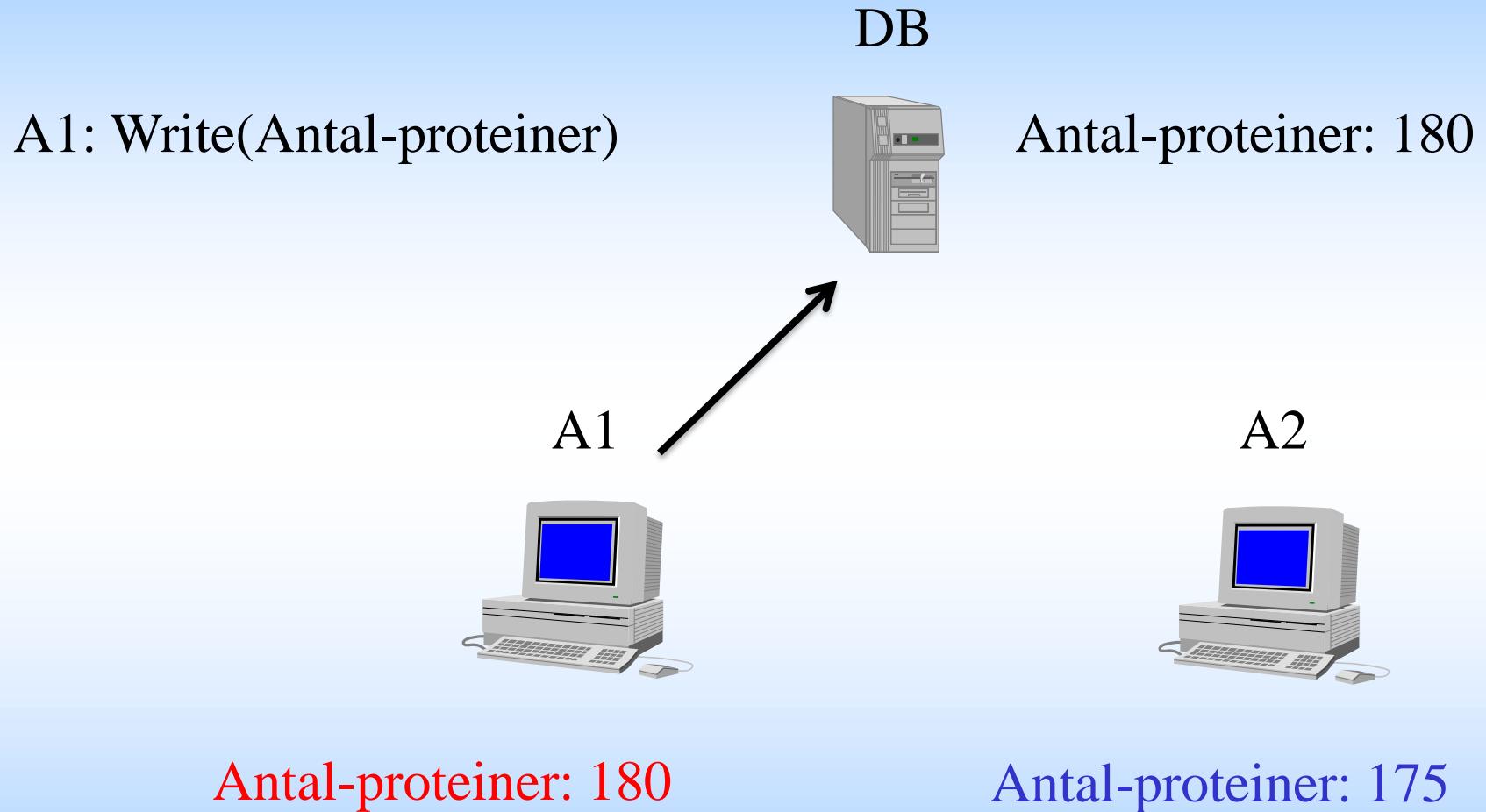


Antal-proteiner: 175

# Flera användare



# Flera användare



# Flera användare

DB



Antal-proteiner: 180

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

# Informationssäkerhet

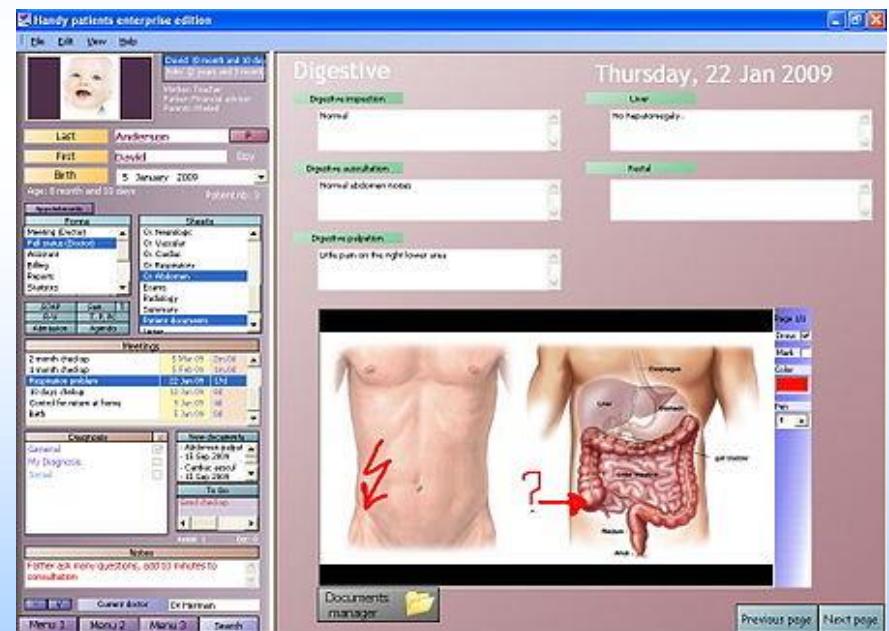
## Sekretess

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 modellerings
- Lab3: Avancerad SQL
- Lab4: Informationssäkerhet

# Kursöversikt - LA+projekt

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

# Kursöversikt - LA+projekt

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

# 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? Värför går det långsamt? Varför får man inget svar?...)

