#### Sébastien Clément

Biologiste

Équipe de génétique forestière (Jean Beaulieu) Centre de foresterie des Laurentides

Sebastien.Clement@RNCan-NRCan.gc.ca (418) 648-4886

### Projet:

•Identification de gènes liés à la formation du bois chez les conifères (avec Arborea)

#### Tâches:

- Développement de bases de données:
  - Découverte de SNPs (TreeSNPs)
  - Données phénotypiques (PhenoTree)
  - Données de génotypage
- •Développement de scripts (Unix) pour l'analyse et le formatage des données



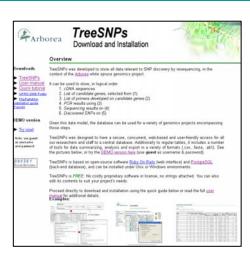
# Arborea (BD) http://dbs.arborea.ulaval.ca/



### TreeSNPs (article, page de téléchargement)

http://treesnps-pub.arborea.ulaval.ca:3000/download http://www.springerlink.com/content/a371581407281u70/fulltext.pdf





#### Conférences:

PostgreSQL conference 2009:

http://www.postgresql.jp/events/pgcon09j/e/program\_1#4a

#### PAG XVIII 2010:

http://www.intl-pag.org/18/abstracts/W31 PAGXVIII 242.html

### Références SQL intéressantes:

- •Visual Quickstart Guide, SQL, 2<sup>nd</sup> edition, 461 p., Chris Fehily, 2005, Peachpit Press, Berkeley.
- http://www.w3schools.com/sql/sql\_quickref.asp
- http://www.1keydata.com/sql/sql.html
- http://www.digitalwidgets.com/Docs/SQLQuickReference.PDF

### Cours suggéré:

UL:

IFT 2004 - Modèles et langages des bases de données

#### Plan du cours

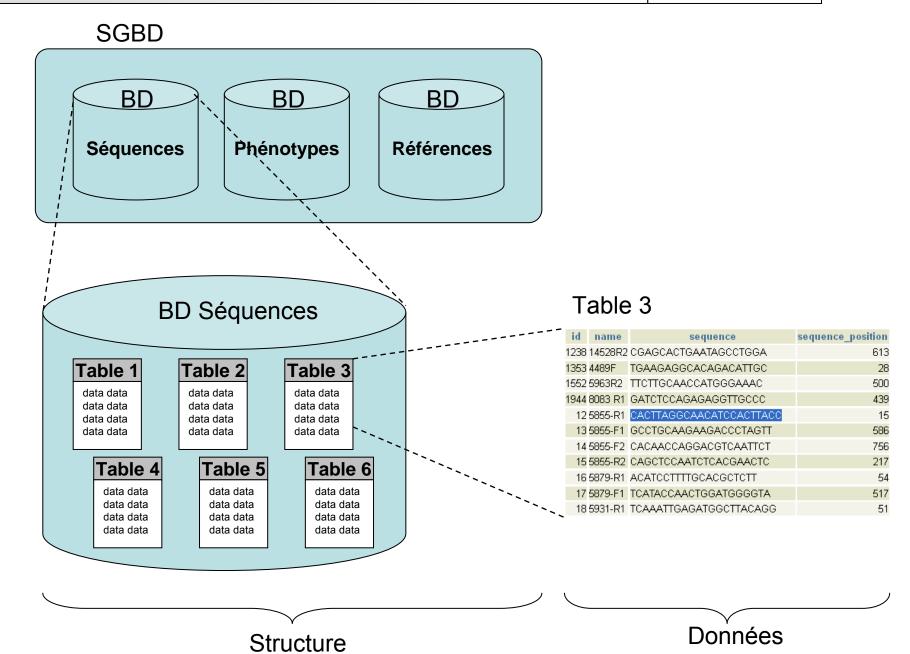
- 1. Introduction
  - SGBD
  - SQL
- 2. Pourquoi utiliser un SGBD?
- 3. Comment créer une base de données
  - besoins
  - modélisation
  - SQL
- 4. Interroger une base de données

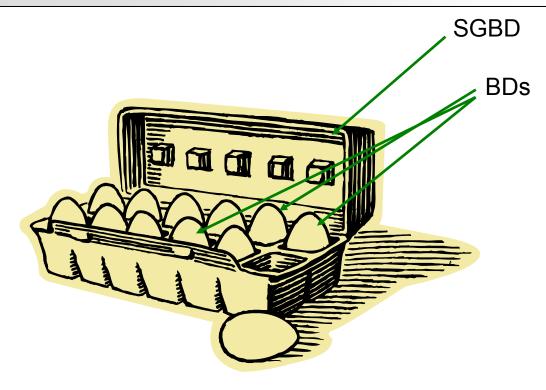
Théorie

Pratique

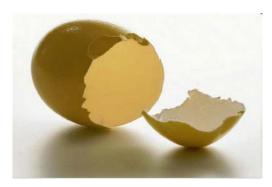
### SGBD

- •Système de gestion de bases de données (anglais: DBMS ou RDBMS)
- •Exemples:
  - Access
  - MS SQL Server
  - Oracle
  - MySQL
  - PostgreSQL
- Caractéristiques:
  - Langage commun: SQL
  - Système sécurisé
  - Opérations concurrentes
  - Intégrité
  - Catalogue
  - Sauvegarde et récupération
  - Vues

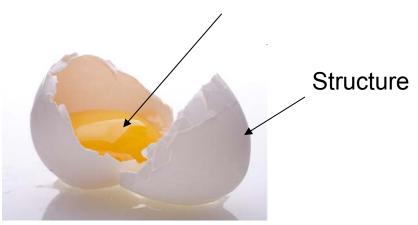


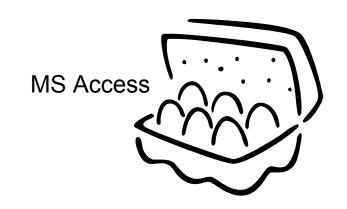


BD sans données



Données





## BD - exemples

- •Banques de données biologiques publiques
  - Genbank
  - •TAIR
  - Flybase
  - •etc.
- •De façon générale tout ce qui gère des données:
  - •Banques ex: transactions aux guichets
  - •Sites d'achat en ligne (Ebay, Amazon, Expedia, Hotwire, etc.)
  - •GIS
  - •etc.

### SQL

- Structured Query Language
- Standard ISO
- Commun aux SGBD, mais certains ont des spécificités
- •Plus que de la recherche de données:
  - •DDL Data Definition Language
  - •DML Data Manipulation Language
- •Avantages:
  - Simple
  - Rapide
  - Non-procédural
- •Exemple:

SELECT champ1, champ5 FROM ma\_table;

## Pourquoi utiliser un SGBD?

	Fichers à plat, Excel	SGBD
+	•Rapide à mettre sur pied •Facile d'utilisation (Excel)	<ul> <li>Données regroupées</li> <li>Accès concurrent</li> <li>Accès sécurisé</li> <li>Sauvegarde, restauration</li> <li>Contrôle d'intégrité (validation)</li> <li>Mise-à-jour des données</li> <li>Recherche facile (SQL) et rapide (index)</li> <li>Vues</li> </ul>
_	<ul> <li>Capacité limitée (Excel)</li> <li>Aucun accès concurrent</li> <li>Aucun contrôle d'intégrité</li> <li>Accès non-sécurisé</li> <li>Redondance et multiples-versions des données</li> <li>Jointures ???</li> </ul>	Plus long à monter  Doit être bien planifié  Performance de calcul  Taille

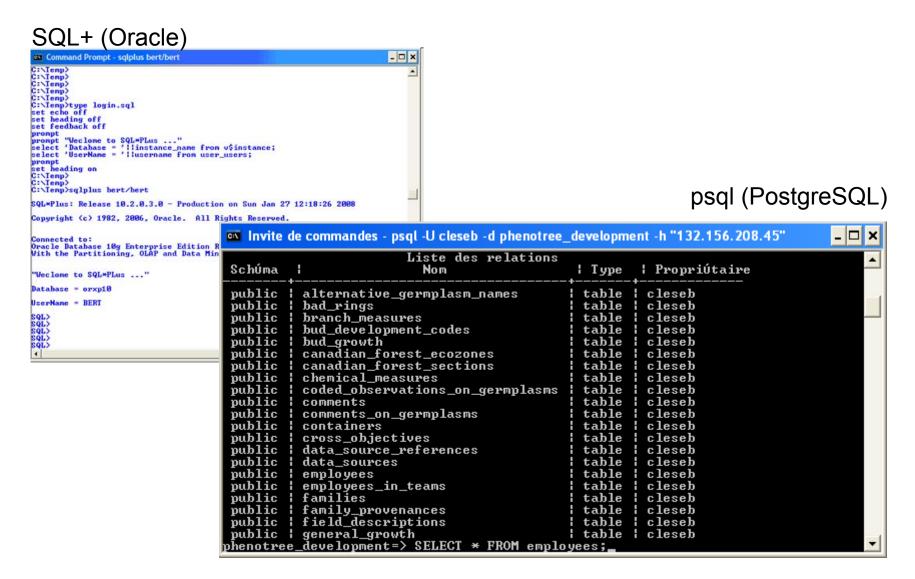
### Comment choisir un SGBD?

	Propriétaires	Libres
+	<ul><li>Meilleur support technique*</li><li>Documentation</li></ul>	•Gratuit •Souvent aussi performant
-	•Prix** •Lourdeur	•Support technique souvent déficient (forums) •Complexité ?
	•MS Access •MS SQL Server •Oracle •Sybase	•MySQL •PostgreSQL •SQLite

<sup>\*</sup>Souvent coûts en sus du coût d'achat

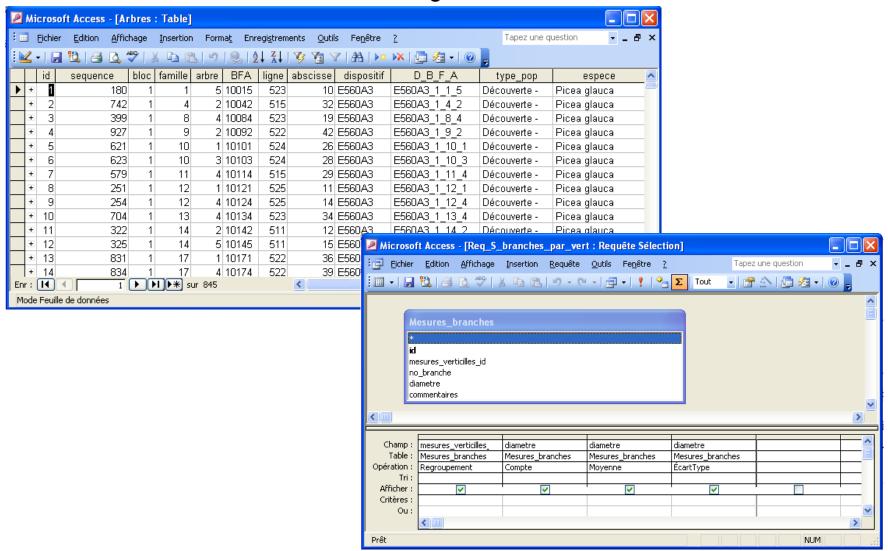
<sup>\*\*</sup>SQL Server: 9 500 à 36 700 \$ CAN (selon version), license de 2 ans

Interfaces-utilisateur: ligne de commande (SQL) ou interface graphique ?



Interfaces-utilisateur: ligne de commande (SQL) ou interface graphique?

Access – formulaire d'édition des enregistrements



Access – constructeur de requêtes

Créer une base de données: besoins, modélisation et création SQL

### Besoins de l'équipe

- •Quel est le but ?
- Quelles données ?
- Utilisation concurrente?
- Court-terme vs long-terme ?
- Rôles des utilisateurs ?
  - administrateur de la bd (DBA)
  - administrateur des données (DA)
  - •utilisateur en lecture seule



Créer une base de données: besoins, modélisation et création SQL

### La modélisation des données

Modèle de données:

« Description des données (1), des liens entre elles (2) et des contraintes sur les données (3), dans une organisation. »

### 1. Description des données

Mon équipe de recherche a:

- •ADN (cDNA, gDNA)
- amorces
- •résultats PCR



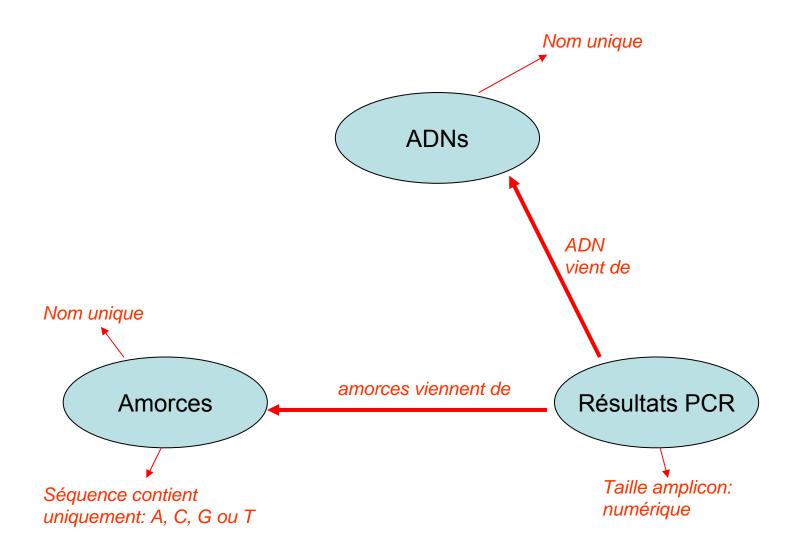
Amorces

Résultats PCR

#### 2. Liens entre les données

·Les amorces et les ADN sont mis en commun pour faire un PCR **ADNs** 1 ADN... ...dans plusieurs PCRs Résultats PCR Amorces ...dans plusieurs PCRs 1 amorce...

#### 3. Contraintes sur les données



### 1. Description des données

Mon équipe de recherche a:

- •ADN
- amorces
- •résultats PCR

#### **ADNs**

nom	espèce	type		
at_312	A. thaliana	génomique		
pt_221s	P. taeda	cDNA		
pg_S352	P. glauca	cDNA		
ADN_K33	P. aeruginosa	plasmidique		
ce_ttY14	C. elegans	cDNA		

#### **Amorces**

nom	séquence	sens
at39234F	ACACACAACACAATTCG	F
at39234R	CATACATATCATACTATCAACTA	R
pt00324F	GCCTGCAAGAAGACCCTAGTT	F
pt00324R	CACTTAGGCAACATCCACTTACC	R

#### **PCRs**

adn_nom	amorce_f	amorce_r	programme	melange	taille_amplicon
at_312	at39234F	at39234R	Prog0077	Mix321	
at_312	at39234F	at39234R	Prog0002	Mix321	1400
ADN_K33	K33_001F	K33_001R	Prog0012	Mix217	
ADN_K33	K33_001F	K33_001R	Prog0012	Mix218	450

### 2. Liens entre les données

 $\infty$ 

**PCRs** 

 $\infty$ 

Les amorces et les ADN sont mis en commun pour faire un PCR

#### **ADNs**

nom	espèce	type
at_312	A. thaliana	génomique
pt_221s	P. taeda	cDNA
pg_S352	P. glauca	cDNA
ADN_K33	P. aeruginosa	plasmidique
ce_ttY14	C. elegans	cDNA

Amorces

nom	séquence	sens
at39234F	ACACACAACACAATTCG	F
at39234R	CATACATATCATACTATCAACTA	R
pt00324F	GCCTGCAAGAAGACCCTAGTT	F
pt00324R	CACTTAGGCAACATCCACTTACC	R

adn_nom	amorce_f	amorce_r	programme	melange	taille_amplicon
at_312	at39234F	at39234R	Prog0077	Mix321	
at_312	at39234F	at39234R	Prog0002	Mix321	1400
ADN_K33	K33_001F	K33_001R	Prog0012	Mix217	
ADN K33	K33 001F	K33 001R	Prog0012	Mix218	450

#### 3. Contraintes sur les données

#### **ADNs**

Unique

	nom	espèce	type
	at_312	A. thaliana	génomique
,	pt_221s	P. taeda	cDNA
	pg_S352	P. glauca	cDNA
	ADN_K33	P. aeruginosa	plasmidique
	ce_ttY14	C. elegans	cDNA

Amorces

nom	séquence	sens
at39234F	ACACACAACACAATTCG	F
at39234R	CATACATATCATACTATCAACTA	R
pt00324F	GCCTGCAAGAAGACCCTAGTT	F
pt00324R	CACTTAGGCAACATCCACTTACC	R

Doit provenir de

**PCRs** 

A, C, G ou T

adn_nom	amorce_f	amorce_r	programme	melange	taille_amplicon
at_312	at39234F	at39234R	Prog0077	Mix321	
at_312	at39234F	at39234R	Prog0002	Mix321	1400
ADN_K33	K33_001F	K33_001R	Prog0012	Mix217	
ADN_K33	K33_001F	K33_001R	Prog0012	Mix218	450

Numérique

#### 3. Contraintes sur les données

Primaire (PK):

identifie une ligne de façon unique

Étrangère (FK):

réfère à la clé primaire d'une autre table

#### **ADNs**

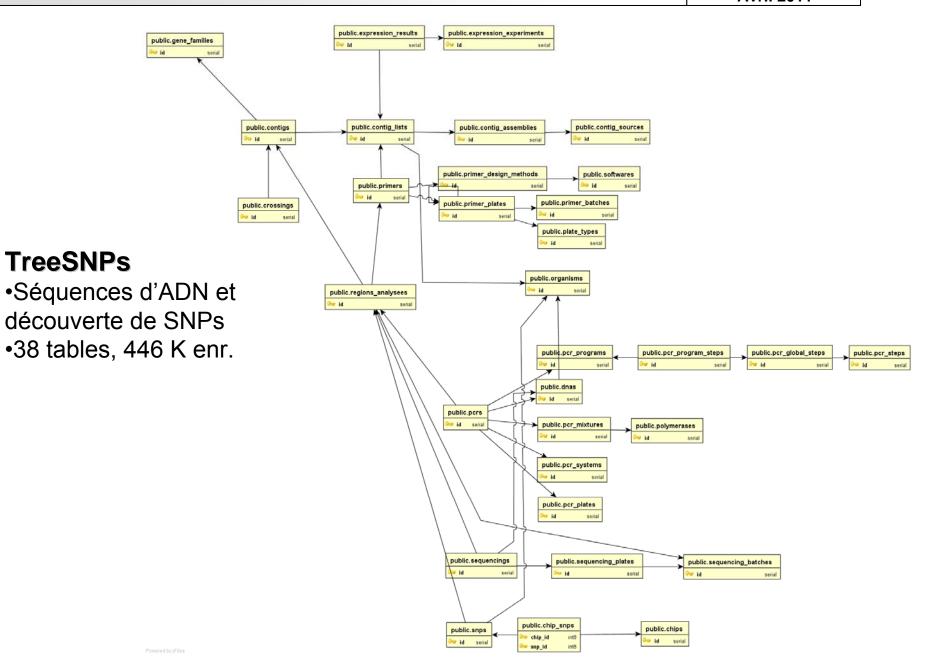
nom	espèce	type
пош	<u> </u>	type
at_312	A. thaliana	génomique
pt_221s	P. taeda	cDNA
pg_S352	P. glauca	cDNA
ADN_K33	P. aeruginosa	plasmidique
ce_ttY14	C. elegans	cDNA

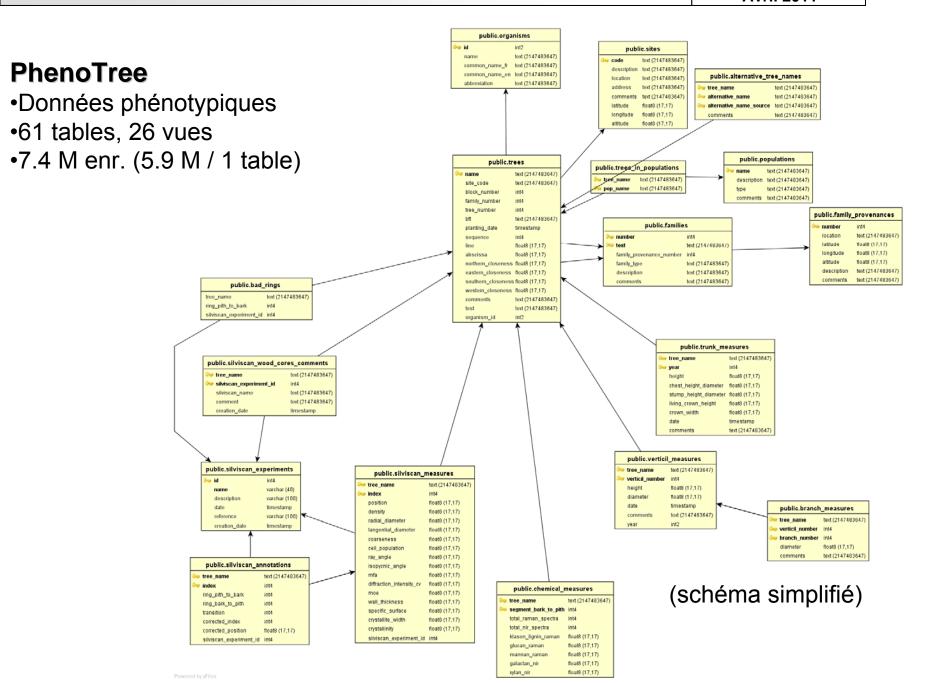
#### **Amorces**

nom	séquence	sens
at39234F	ACACACAACACAATTCG	F
at39234R	CATACATATCATACTATCAACTA	R
pt00324F	GCCTGCAAGAAGACCCTAGTT	F
pt00324R	CACTTAGGCAACATCCACTTACC	R

PCRs

	adn_nom	amorce_f	amorce_r	programme	melange	taille_amplicon
1	at_312	at39234F	at39234R	Prog0077	Mix321	
2	at_312	at39234F	at39234R	Prog0002	Mix321	1400
3	ADN_K33	K33_001F	K33_001R	Prog0012	Mix217	
4	ADN_K33	K33_001F	K33_001R	Prog0012	Mix218	450

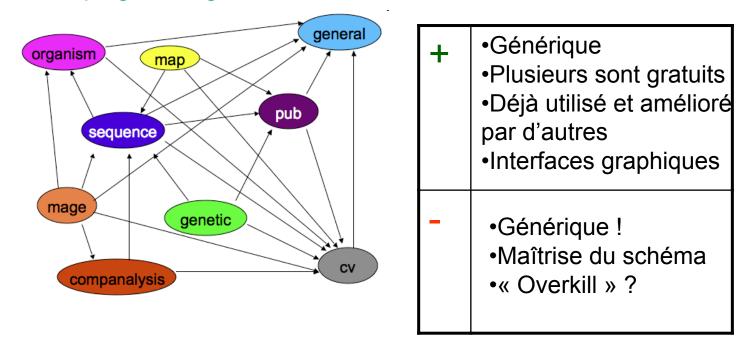




Schémas déjà existants sur le Web?

### Génomique

Chado - <a href="http://gmod.org/wiki/Chado">http://gmod.org/wiki/Chado</a>



BioSQL - <a href="http://www.biosql.org/wiki/Main">http://www.biosql.org/wiki/Main</a> Page

La création de la base de données en SQL

Serveur de bases de données

SGBD: PostgreSQL

Site: <a href="http://dbs.arborea.ulaval.ca/phppgadmin/">http://dbs.arborea.ulaval.ca/phppgadmin/</a>

Interface Web: PhpPgAdmin

Base de données: ibis\_db



Partie pratique 1

Créer une base de données

Voir le document commandes\_sql.pdf

Partie pratique 2

Interroger une base de données

Interroger une base de données – requête SQL (DML)

- À quoi servent les requêtes SQL?
  - •A) Aller chercher de l'info de façon très précise (critères)
  - •B) Joindre de l'info répartie dans plusieurs tables
  - •C) Effectuer des calculs par ligne, ou sur plusieurs lignes

### Avantages:

- Langage simple
- Dynamique (mise-à-jour)
- Soumis aux privilèges d'accès utilisateurs

Interroger une base de données – requête SQL (DML)

Exemple A: Aller chercher de l'info de façon très précise (critères)

#### Table amorces

nom	sequence	sens	adn_gabarit	pos_vs_gabarit	date_creation
at39234F	ACACACAACAACACAATTCG	F	at_312	43	2011-02-12
at39234R	CATACATATCATACTATCAACTA	R	at_312	512	2011-02-12
pt00324F	GCCTGCAAGAAGACCCTAGTT	F	pt_221s	52	2011-03-05
pt00324R	CACTTAGGCAACATCCACTTACC	R	pt_221s	744	2011-03-05
K33_001F	CCAGATCTACTACATACTTACTAT	F	ADN_K33	23	2010-09-07
K33_001R	CAACATCTATCTACTATCTAT	R	ADN_K33	455	2010-09-07
K33_002F	CACACACACAATACGACACAT	F	ADN_K33	433	2010-09-07
K33_002R	CGGCGATTATTCGATTACGATCT	R	ADN_K33	971	2010-09-07

Sélection des colonnes

Sélection des lignes

nom	date_creation
at39234F	2011-02-12
at39234R	2011-02-12
pt00324F	2011-03-05
pt00324R	2011-03-05
K33_001F	2010-09-07
K33_001R	2010-09-07
	2010-09-07
K33 002R	2010-09-07

nom	sequence	sens	adn_gabarit	pos_vs_gabarit date_creation
at39234F	ACACACAACAACACAATTCG	F	at_312	43 2011-02-12
pt00324F	GCCTGCAAGAAGACCCTAGTT	F	pt_221s	52 2011-03-05
K33_001F	CCAGATCTACTACATACTTACTAT	F	ADN_K33	23 2010-09-07
K33_002F	CACACACACAATACGACACAT	F	ADN_K33	433 2010-09-07

Interroger une base de données – requête SQL (DML)

Exemple B: Joindre de l'info répartie dans plusieurs tables

### Table ADNs

nom	espece	type
at_312	A. thaliana	Génomique
pt_221s	P. taeda	cDNA
pg_S352	P. glauda	cDNA
ADN_K33	P. aeruginosa	Plasmidique
ce_ttY14	C. elegans	cDNA

#### Table amorces

			_		
nom	sequence	sens	adn_gabarit	pos_vs_gabarit	date_creation
at39234F	ACACACAACAACACAATTCG	F	at_312	43	2011-02-12
at39234R	CATACATATCATACTATCAACTA	R	at_312	512	2011-02-12
pt00324F	GCCTGCAAGAAGACCCTAGTT	F	pt_221s	52	2011-03-05
pt00324R	CACTTAGGCAACATCCACTTACC	R	pt_221s	744	2011-03-05
K33_001F	CCAGATCTACTACATACTTACTAT	F	ADN_K33	23	2010-09-07
K33_001R	CAACATCTATCTACTATCTAT	R	ADN_K33	455	2010-09-07
K33_002F	CACACACACAATACGACACAT	F	ADN_K33	433	2010-09-07
K33 002R	CGGCGATTATTCGATTACGATCT	R	ADN K33	971	2010-09-07

## ADNs et amorces correspondantes

	nom		espece	type	nom	sequence
at	312	Α.	thaliana		at39234R	CATACATATCATACTATCAACTA
_		Α.	thaliana			ACACACAACACACAATTCG
_		P.			pt00324R	CACTTAGGCAACATCCACTTACC
pt_	221s	P.	taeda	cDNA	pt00324F	GCCTGCAAGAAGACCCTAGTT
pg	S352	P.	glauca	cDNA	NULL	NULL
ΑD	N_K33	P.	aeruginosa	Plasmidique	K33_002R	CGGCGATTATTCGATTACGATCT
ΑD	N_K33	P.	aeruginosa	Plasmidique	K33_002F	CACACACACAATACGACACAT
ΑD	N_K33	Ρ.	aeruginosa	Plasmidique	K33_001R	CAACATCTATCTACTATCTAT
ΑD	N_K33	Р.	aeruginosa	Plasmidique	K33_001F	CCAGATCTACTACATACTTACTAT
ce	ttY14	C.	elegans	cDNA	NULL	NULL

Interroger une base de données – requête SQL (DML)

### Exemple C: Effectuer des calculs par ligne, ou sur plusieurs lignes

#### Table amorces

nom	sequence	sens	adn_gabarit	pos_vs_gabarit	date_creation
at39234F	ACACACAACAACACAATTCG	F	at_312	43	2011-02-12
at39234R	CATACATATCATACTATCAACTA	R	at_312	512	2011-02-12
pt00324F	GCCTGCAAGAAGACCCTAGTT	F	pt_221s	52	2011-03-05
pt00324R	CACTTAGGCAACATCCACTTACC	R	pt_221s	744	2011-03-05
K33_001F	CCAGATCTACTACATACTTACTAT	F	ADN_K33	23	2010-09-07
K33_001R	CAACATCTATCTACTATCTAT	R	ADN_K33	455	2010-09-07
K33_002F	CACACACACAATACGACACAT	F	ADN_K33	433	2010-09-07
K33_002R	CGGCGATTATTCGATTACGATCT	R	ADN_K33	971	2010-09-07

Calcul par ligne

nom	sequence	pct_gc	length
at39234F	ACACACAACACAATTCG	40.0	20
at39234R	CATACATATCATACTATCAACTA	26.1	23
pt00324F	GCCTGCAAGAAGACCCTAGTT	52.4	21
pt00324R	CACTTAGGCAACATCCACTTACC	47.8	23
K33_001F	CCAGATCTACTACATACTTACTAT	33.3	24
K33_001R	CAACATCTATCTACTATCTAT	28.6	21
K33_002F	CACACACACAATACGACACAT	42.9	21
K33_002R	CGGCGATTATTCGATTACGATCT	43.5	23

Calcul sur plusieurs lignes

sens	nb_amorces	avg_pos	min_pos	max_pos
F	4	138	23	433
R	4	671	455	971

Champs calculés

Voir le document commandes\_sql.pdf

# Discussions avancées: Transactions Normalisation

Gestion des transactions: opérations concurrentes

Exemple sans gestion des transactions:

Temps	$T_1$	T <sub>2</sub>	solde <sub>X</sub>
t <sub>1</sub> t <sub>2</sub> t <sub>3</sub> t <sub>4</sub> t <sub>5</sub>	début_transaction $lire(solde_{x}) = 100$ $solde_{x} = solde_{x} - 10$ $écrire(solde_{x})$ validation	début_transaction lire( $solde_X$ ) 100 $solde_X = solde_X + 100 \cdot 200$ écrire( $solde_X$ )  validation	100 100 100 → 200 → 90

Normalisation: 1. non-normalisée

Autant de colonnes que d'appartenance à des projets!

**Employés** 

#	Prénom	Nom de famille	Local	Projet1	Projet2	Projet3	Projet4	Projet5	:
1	Pierre	Gascon	4432	AA0232	AA1142				
2	Sophie	Dussault	4302B	AA1142	FG3332	FG4001			
3	Herman	Smith	2212	FG3332	FG4001	FT0023	FG4329	FS7389	
4	Gilles	Dupont	2212	AA0232	FG4329				

#### **Projets**

Fiojets	
Nom	Description
AA0232	Séquençage génome
AA1142	Découverte SNPs
FG3332	Recherche gènes candidats
FG4001	Transgenèse
FG4329	Genome walking
FS7389	Gene silencing
FT0023	Développement banque de cDNA



Requête SQL?

Normalisation: 2. normalisée

### **Employés**

#	Prénom	Nom de famille	Local
1	Pierre	Gascon	4432
2	Sophie	Dussault	4302B
3	Herman	Smith	2212
4	Gilles	Dupont	2212

#### **Projets**

Fiojets	
Nom	Description
AA0232	Séquençage génome
AA1142	Découverte SNPs
FG3332	Recherche gènes candidats
FG4001	Transgenèse
FG4329	Genome walking
FS7389	Gene silencing
FT0023	Développement banque de cDNA

Employés dans projets 🗸

 $\infty$ 

# d'employé	# de projet				
1	AA0232				
1	AA1142				
2	AA1142				
2	FG3332				
2	FG4001				

Normalisation: 1. non-normalisée

#### Employés\_en\_entreprises

NoEmployé	Prénom	Nom	NoEntreprise	Nom	Adresse	Pays
1	Sven	Tor∨ald	76	DBStore	172 Clearview rd., Randall city	US
2	Pierrette	Fontaine	92	Wal Mart	65 Versant Nord, Québec	Can
3	Rolande	Messier	12	ABC Inc.	1055 Miron, Asbestos	Can
4	Éric	Thomas	92	Wal Mart	65 Versant Nord, Québec	Can
5	Roger	Moore	76	DBStore	172 Clearview rd., Randall city	US
6	Hector	Charland	12	ABC Inc.	1055 Miron, Asbestos	Can

Normalisation: 2. normalisée

### **Employés**

NoEmployé	Prénom	Nom	NoEntreprise
1	Sven	Torvald	76
2	Pierrette	Fontaine	92
3	Rolande	Messier	12
4	Éric	Thomas	92
5	Roger	Moore	76
6	Hector	Charland	12



#### **Entreprises**

NoEntreprise Nom		Adresse	Pays
12	ABC Inc.	1055 Miron, Asbestos	Can
76	DBStore	172 Clearview rd., Randall city	US
92	Wal Mart	65 Versant Nord, Québec	Can