

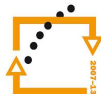
IV121 Vybrané aplikace informatiky v biologii

Týden 1

Katedra informačních technologií
Masarykova Univerzita Brno

Jaro 2013

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.



INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu bioinformatiky

Předmět zájmu systémové biologie

Okruhy se zajímavým matematickým/informatickým základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

- ▶ Dr. Matej Lexa, C506 (lexa@fi.muni.cz)
- ▶ Kurz: Út 8:00-10:50 (B116)
- ▶ Konzultace: Čt 13:00-15:00 (C506)
- ▶ <http://www.fi.muni.cz/~lexa/teaching.html>

- ▶ Dr. David Šafránek, C518 (safranek@fi.muni.cz)
- ▶ Kurz: Út 8:00-10:50 (B116)
- ▶ Konzultace: St 14:00-16:00 (C518)
- ▶ <http://www.fi.muni.cz/~xsafran1>

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

- ▶ Hodnotí se
 - ▶ Úkol z cvičení 15 bodů (max 50 bodů)
 - ▶ Účast na cvičení podmínkou udělení bodů
 - ▶ Zkouška 50 bodů
- ▶ Klasifikační stupnice
 - ▶ A 91 - 100
 - ▶ B 81 - 90
 - ▶ C 71 - 80
 - ▶ D 61 - 70
 - ▶ E 51 - 60
 - ▶ F méně než 51
- ▶ Kolokvium 30 bodů

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

- ▶ Bioinformatika
- ▶ Systémová biologie

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

- ▶ Úvod do bioinformatiky a systémové biologie
- ▶ Diskrétní dynamické modely a jejich analýza
- ▶ Spojité dynamické modely a jejich analýza
 - 26.2. kvalitativní modely
 - 5.3. cvičení NetLogo
 - 12.3. kvantitativní modely
 - 19.3. cvičení robustnost a zkoumání parametrů ve spojitých a stochastických modelech
- ▶ (Regulační, metabolické a signální sítě)
- ▶ Podobnostní metriky a vyhledávání
- ▶ Práce se sekvencemi z NGS (next-gen sequencing) - skládání a mapování
- ▶ 3D geometrie, CSG (geometrie těles na počítači)
- ▶ Závěrečná přednáška a diskuse

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu bioinformatiky

Předmět zájmu systémové biologie

Okruhy se zajímavým matematickým/informatickým základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

**Předmět zájmu
bioinformatiky**

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Bioinformatika

Studuje metody shromáždění, spřístupňování a analýzy rozsáhlých souborů biologických dat, zejména molekulárně – biologických.

Další disciplíny

- ▶ Výpočetní nebo matematická biologie
matematické přístupy k reprezentaci a zkoumání biologických procesů, často simulace
- ▶ Lékařská informatika
práce s medicínskými daty, převážně záznamy pacientů

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Předmětem zájmu nebo používanými metodami se bioinformatika prolíná s

1. molekulární biologii
2. genomikou a proteomikou
3. genetikou
4. výpočetní biologii
5. matematickou či teoretickou biologii
6. systémovou biologii
7. biomedicínskou informatikou
8. biomedicínským inženýrstvím
9. výpočetní chemií
10. informatikou
11. počítačovou lingvistikou

Převzato z <http://cz.wikipedia.org/wiki/Bioinformatics> 16.2.2008

Informace o kurzu

**Předmět zájmu
bioinformatiky**

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

- ▶ Analýza sekvencí
- ▶ Anotace genomů
- ▶ Evoluční bioinformatika
- ▶ Studium biodiverzity
- ▶ Analýza exprese genů
- ▶ Analýza genové regulace
- ▶ Analýza proteomu
- ▶ Odhad struktury proteinů
- ▶ Srovnávací genomika
- ▶ Modelování biologických systémů
- ▶ Analýza obrazu
- ▶ Studium strukturních interakcí proteinů

Informace o kurzu

**Předmět zájmu
bioinformatiky**

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Spřístupnění dat uživatelům – NCBI Genome Viewer

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

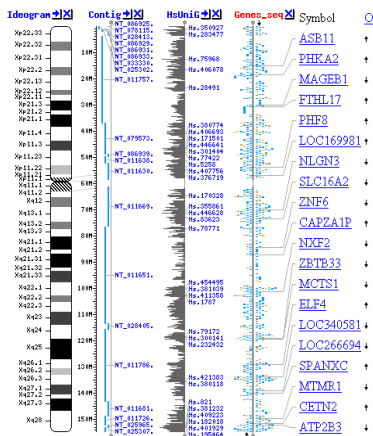
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Zobrazení informací o genech na chromozomu

- KLASICKÝ** směs biologie, chemie, fyziky atd.
- MECHANICKÝ** živé buňky jsou stroje, které chceme pochopit a ovládat
- HRA** sekvence jsou definiční soubory hráčů
- SEMIOTIKA** život je signalizace a interpretace signálů
- JAZYK** sekvence se skládají z modulů (slov) s určitou funkcí vykazujících gramatické uspořádání

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

1. Mam z toho velkou radost.
2. Mam toho kocoura dost.

```
Mamztohovelk ouradost.  
::: :::: : :::::::::::  
Mam toho kocouradost.
```

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Historie bioinformatiky do sformování disciplíny

- 1967 Fitch and Margoliash: sestrojení prvních fylogenetických stromů z biologické sekvence
- 1970 Needleman and Wunsch: zarovnání dvou sekvencí
- 1974 Chou and Fasman: predikce sekundární struktury proteinů
- 1978 Dayhoff: první sbírka sekvencí proteinů
- 1981 Kabsch and Sander: modelování struktury proteinů
- 1987 Feng and Doolittle: mnohonásobné zarovnání sekvencí
- 1990 Altschul et al.: efektivní hledání lokálních podobností
- 1998 The Journal Comp Appl Biosci se přejmenovává na Bioinformatics

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

HT-Seq: objem dat z jednoho měření a cena za 1 Mbp

- ▶ Solexa pyrosequencing (Illumina) 18 Gbp \$2
- ▶ 454 (Roche) 0.5 Gbp \$60 (ale delší sekvence)
- ▶ SOLiD (Life Technologies) 24 Gbp \$2
- ▶ IonTorrent (Life Technologies) ?
- ▶ Heliscope (Helicos) 28 Gbp \$1
- ▶ Polonator (Danaher Motion) 8 Gbp \$1
- ▶ Zero-mode waveguide sequencing (Pacific Biosciences) 10 Gbp? \$10?
- ▶ Nanoball sequencing (CompleteGenomics) 70 Gbp \$1
- ▶ FRET sequencing (Visigen) ?
- ▶ Nanopore sequencing (Oxford Nanopore)

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu bioinformatiky

Předmět zájmu systémové biologie

Okruhy se zajímavým matematickým/informatickým základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

- ▶ Systém - množina interagujících prvků, ale k pochopení funkce nestačí pouhý výčet součástí
- ▶ Vlastnosti komponentů - poloha v prostoru a čase, interakce, funkce celku, které nejsou funkcemi žádné z částí
- ▶ jinak i integrativní biologie
- ▶ Systémová biologie studuje interakce mezi komponenty biologických systémů a následně funkci systému jako celku a výsledku těchto interakcí
- ▶ Je protipólem molekulární biologie a různých "-omik"
 - ▶ mol.biologie = redukcionisticky
 - ▶ syst. biologie = integrativně

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

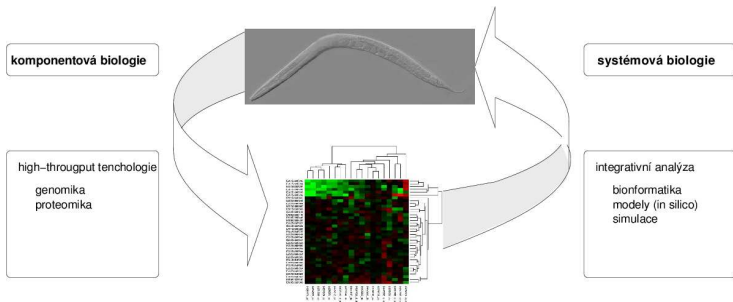
Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Od redukcionismu k integrativnímu přístupu



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

- Jazyky a gramatiky
- Algebry a dotazování
- Vyhledávací algoritmy
- Teorie informace a kódování
- Diskrétní a stochastické modely
- Numerické metody a simulace

- ▶ atom
- ▶ molekula
- ▶ makromolekula
- ▶ gen
- ▶ protein
- ▶ komplex
- ▶ organela
- ▶ buňka
- ▶ tkáň
- ▶ orgán
- ▶ organismus
- ▶ populace
- ▶ ekosystém

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

**Předmět zájmu systémové
biologie**

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

"Emergent properties" - vlastnosti, které není možné přiřknout komponentům, nýbrž systému

Informace o kurzu

Předmět zájmu bioinformatiky

Předmět zájmu systémové biologie

Okruhy se zajímavým matematickým/informatickým základem

Jazyky a gramatiky

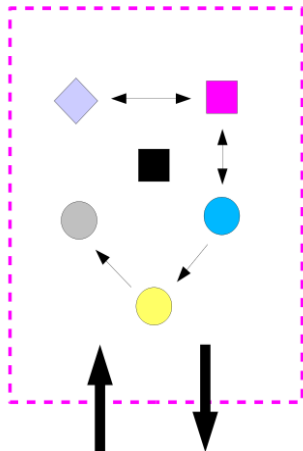
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



- ▶ Jazyky pro popis systémů
- ▶ Grafy a sítě
- ▶ Modelování a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

**Předmět zájmu systémové
biologie**

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

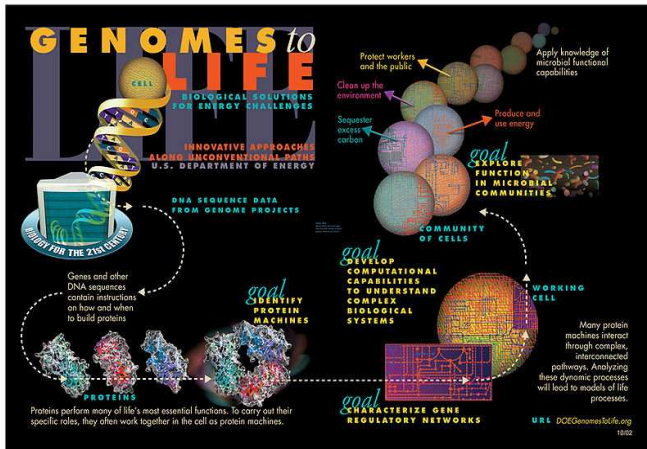
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



- ▶ Biologická realita
- ▶ Návrh modelu
- ▶ Matematický model
- ▶ Simulace
- ▶ Verifikace/validace
- ▶ Model

Rozpoznávání - Předpovědi - Vysvětlení

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

**Předmět zájmu systémové
biologie**

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

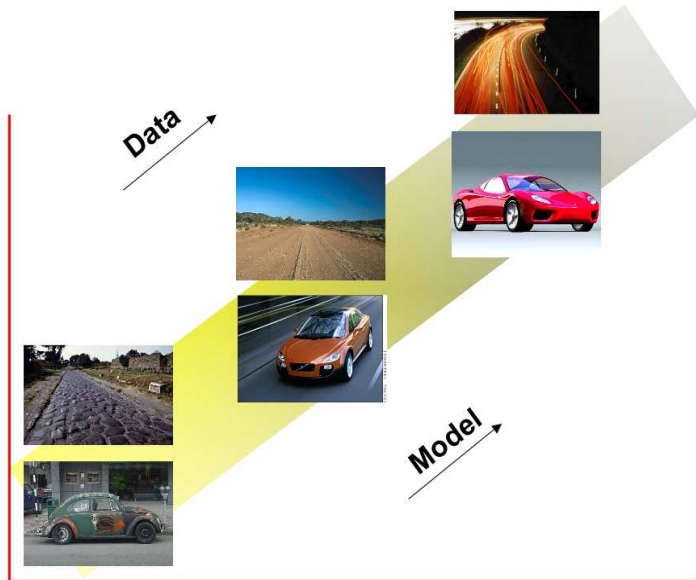
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

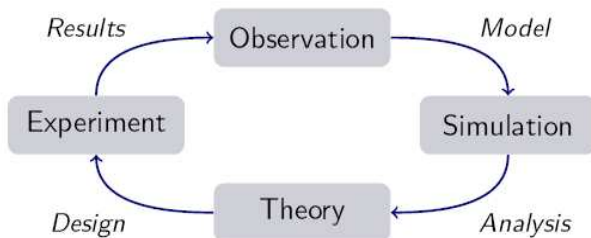
Algebry a dotazování

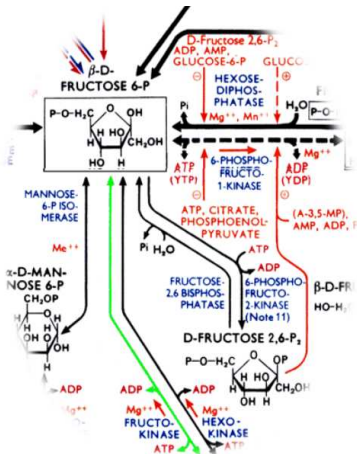
Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace





Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebra a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Metabolické dráhy

Informace o kurzu

Předmět zájmu bioinformatiky

Předmět zájmu systémové biologie

Okruhy se zajímavým matematickým/informatickým základem

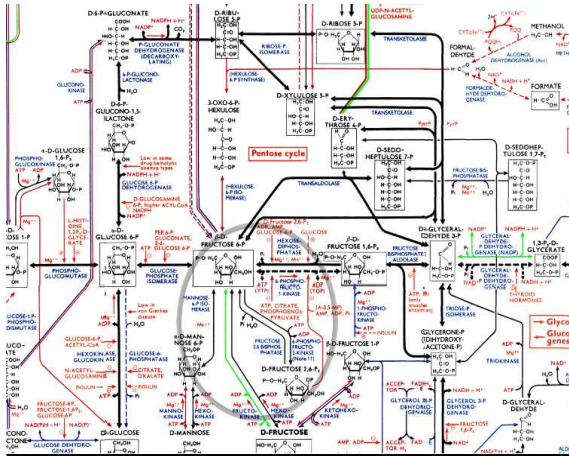
Jazyky a gramatiky
Algebra a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Metabolismus

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

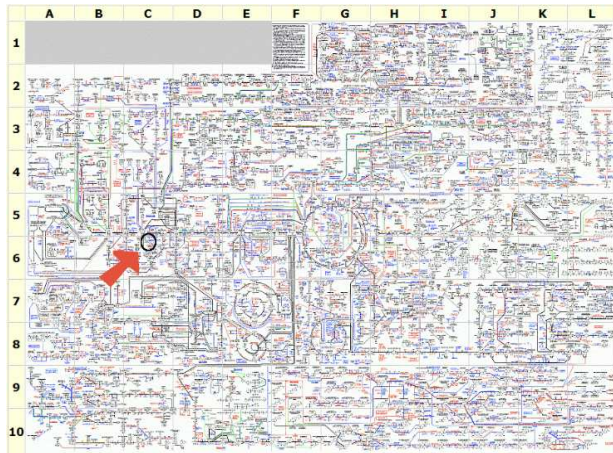
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Simulační model buňky / E-Cell

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

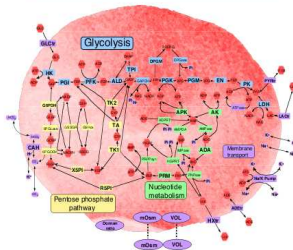
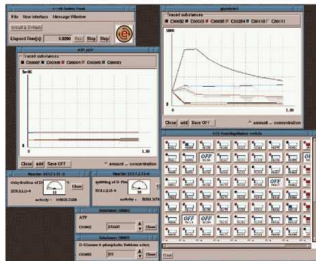
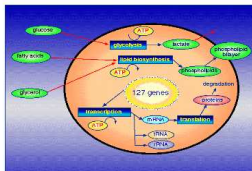
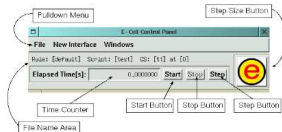
Algebra a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



CellWare: nástroj pro modelování buněčných procesů

Informace o kurzu

Předmět zájmu bioinformatiky

Předmět zájmu systémové biologie

Okruhy se zajímavým matematickým/informatickým základem

Jazyky a gramatiky

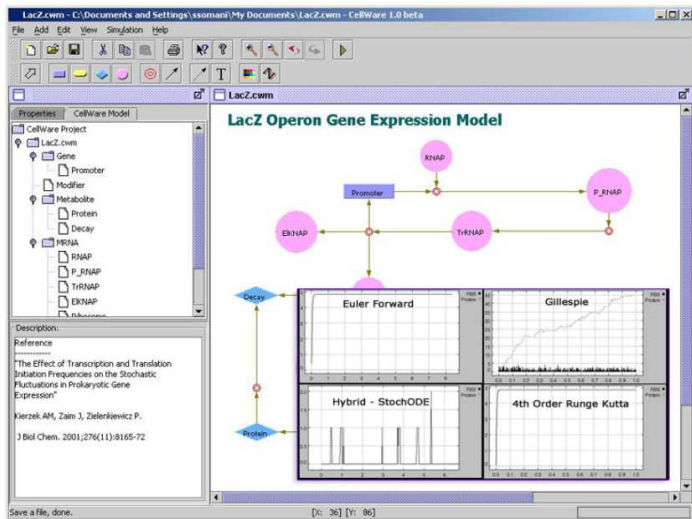
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



- ▶ Diskrétní nebo spojité v čase, bez času
- ▶ Diskrétní nebo spojité v prostoru, bez prostorové informace
- ▶ Deterministické, nedeterministické, pravděpodobnostní
- ▶ Kvalitativní, kvantitativní

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

- ▶ Stochastická simulace
 - ▶ Petriho sítě, Gillespieho algoritmus
- ▶ Diferenciální rovnice
 - ▶ Spojité, pracuje se často s koncentracemi
- ▶ Biologické algebry
 - ▶ Brane calculus (od slova membrane)

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

- ▶ SBML - Systems Biology Markup Language (vychází z XML)
- ▶ CellML - univerzálnější (používá MathML)

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

```
<component name="L_type_Ca_channel_d_gate">
  <variable name="d" public_interface="out" units="dimensionless" />

  <variable name="alpha_d" units="per_millisecond" />
  <variable name="beta_d" units="per_millisecond" />
  <variable name="d_infinity" units="dimensionless" />
  <variable name="tau_d" units="millisecond" />

  <variable name="V" public_interface="in" units="millivolt" />
  <variable name="time" public_interface="in" units="millisecond" />

<math xmlns="http://www.w3.org/1998/Math/MathML">
  <apply id="alpha_d_calculation"><eq />
    <ci> alpha_d </ci>
    <apply><divide />
      <ci> d_infinity </ci>
      <ci> tau_d </ci>
    </apply>
  </apply>
</math>
```

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

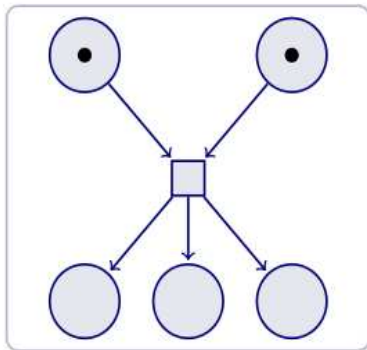
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

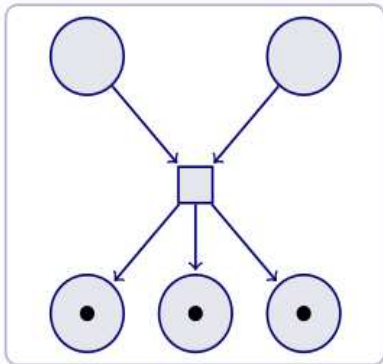
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Petriho síť - příklad modelu enzymatické reakce

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

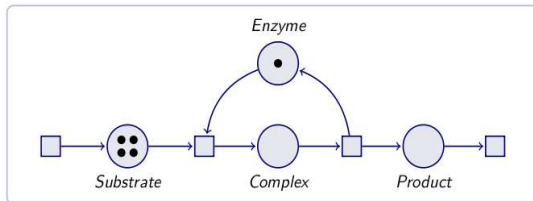
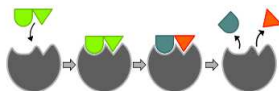
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Biologické systémy jsou živé sítě

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

**Předmět zájmu systémové
biologie**

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

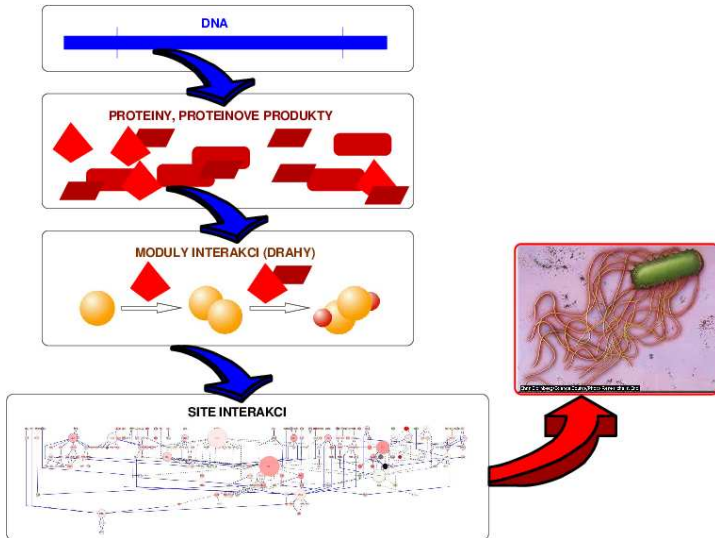
Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Genotyp → Fenotyp

Hierarchie interakcí



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

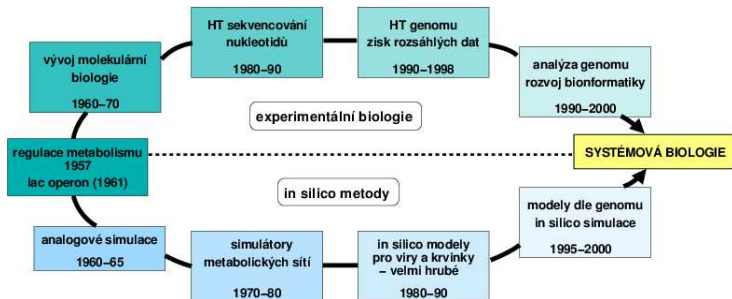
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu bioinformatiky

Předmět zájmu systémové biologie

Okruhy se zajímavým matematickým/informatickým základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

**Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem**

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

ŘETĚZEC: accgtg

GRAMATIKA:

$S \rightarrow aS$

$S \rightarrow cS$

$S \rightarrow gS$

$S \rightarrow tS$

$S \rightarrow \epsilon$

DERIVACE: $S \rightarrow aS \rightarrow acS \rightarrow accS \rightarrow accgS \rightarrow accgtS \rightarrow accgtgS \rightarrow accgtg$

"VZOREC" DNA: $(a, c, g, t)_n$

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

ŘETĚZEC: acc-gtg-ugg

GRAMATIKA:

$S \rightarrow aS$

$S \rightarrow cS$

$S \rightarrow gS$

$S \rightarrow uS$

$S \rightarrow aSu$

$S \rightarrow cSg$

$S \rightarrow gSc$

$S \rightarrow uSa$

$S \rightarrow \epsilon$

DERIVACE: $S \rightarrow aSu \rightarrow acSgu \rightarrow accSggu \rightarrow$
 $accgSggu \rightarrow accgtSggu \rightarrow accgtgSggu \rightarrow accgtgggu$

"VZOREC" RNA: $(a, c, g, t)[1](a, c, g, t)_n([1])^{-1}$

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Co mají společné tyto dvě sekvence?

SHE WATCHED A MAN WITH A TELESCOPE

CCAUGGUCCUAGG

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

SHE WATCHED A MAN WITH A TELESCOPE

C C A U G G U C C U A G G

ccaugg-u
gguacc

cca-
ggu
u
ccu-
gga

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

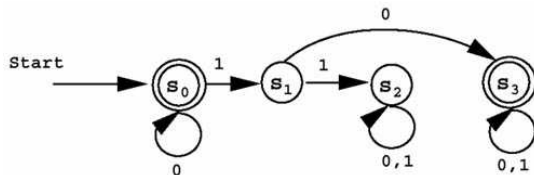
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebra a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

JAZYK	AUTOMAT	GRAMATIKA	DETEKCE
Rekurzivně vyčíslitelný	Turingův stroj (TS)	$Auv \rightarrow B$	nerozhodnutelná
Kontextový	Lineárně ohraničený TS	$uA \rightarrow Av$	exponenciální
Bezkontextový	Zásobníkový automat	$A \rightarrow uAv$	polynomiální
Regulární	Konečný automat	$A \rightarrow uA$	lineární

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

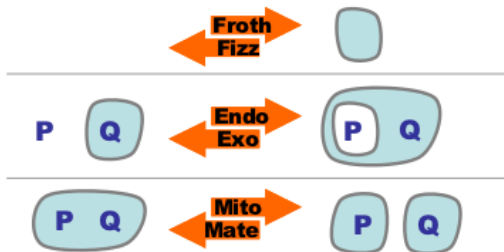


Figure 1 Examples of Bitonal Reactions

From: Cardelli L (2004). Brane Calculi.

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

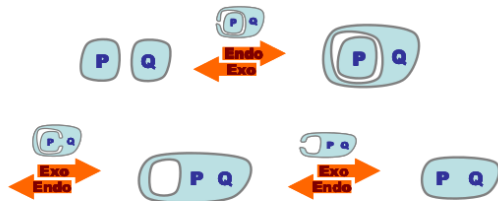


Figure 5 Mito/Mate by 3 Endo/Exo (basic technique)

From: Cardelli L (2004). Brane Calculi.

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu
 bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
 biologie

Okruhy se zajímavým
 matematickým/informatickým
 základem

Jazyky a gramatiky

Algebra a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Bud

$$\text{bud}_n.\sigma \triangleq \nu_n.\sigma$$

$$\text{bud}_n^+(\rho).\tau \triangleq \otimes(\nu_n^+(\rho).\nu_n').\nu_n^+.\tau$$

$$\text{bud}_n^+(\rho).\tau\tau_0(\text{bud}_n.\sigma\sigma_0(P) \circ Q) \longrightarrow^* \rho(\sigma\sigma_0(P)) \circ \tau\tau_0(Q)$$

$$\text{bud}_n^+(\rho).\tau\tau_0(\text{bud}_n.\sigma\sigma_0(P) \circ Q) =$$

$$\otimes(\nu_n^+(\rho).\nu_n').\nu_n^+.\tau\tau_0(\nu_n.\sigma\sigma_0(P) \circ Q) \longrightarrow^{\text{Pino}}$$

$$\nu_n^+.\tau\tau_0(\nu_n^+(\rho).\nu_n'(\diamond) \circ \nu_n.\sigma\sigma_0(P) \circ Q) \longrightarrow^{\text{Phago } n}$$

$$\nu_n^+.\tau\tau_0(\nu_n'(\rho(\sigma\sigma_0(P))) \circ Q) \longrightarrow^{\text{Exo } n'}$$

$$\rho(\sigma\sigma_0(P) \circ \tau\tau_0(Q))$$

From: Cardelli L (2004). Brane Calculi.

BWT - Burrows-Wheeler transform

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Transformation				
Input	All Rotations	Sorting All Rows in Alphabetical Order by their first letters	Taking Last Column	Output
<code>^BANANA@</code>	<code>^BANANA@</code> <code>@^BANANA</code> <code>A@^BANAN</code> <code>NA@^BANA</code> <code>ANA@^BAN</code> <code>NANA@^BA</code> <code>ANANA@^B</code> <code>BANANA@^</code>	<code>ANANA@^B</code> <code>ANA@^BAN</code> <code>A@^BANAN</code> <code>BANANA@^</code> <code>NANA@^BA</code> <code>NA@^BANA</code> <code>^BANANA@</code> <code>@^BANANA</code>	<code>ANANA@^B</code> <code>ANA@^BAN</code> <code>A@^BANAN</code> <code>BANANA@^</code> <code>NANA@^BA</code> <code>NA@^BANA</code> <code>^BANANA@</code> <code>@^BANANA</code>	<code>BNN^AA@A</code>

Inverse Transformation			
Input			
BNN^AA@A			
Add 1	Sort 1	Add 2	Sort 2
B N N ^ A A @ A	A A A B N N ^ @	BA NA NA ^B AN AN @^ A@	AN AN A@ BA NA NA ^B @^

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Add 7	Sort 7	Add 8	Sort 8
BANANA@ NANA@^B NA@^BAN ^BANANA ANANA@^ ANA@^BA @^BANAN A@^BANA	ANANA@^ ANA@^BA A@^BANA BANANA@ NANA@^B NA@^BAN ^BANANA @^BANAN	BANANA@^ NANA@^BA NA@^BANA ^BANANA@ ANANA@^B ANA@^BAN @^BANANA A@^BANAN	ANANA@^B ANA@^BAN A@^BANAN BANANA@^ NANA@^BA NA@^BANA ^BANANA@ @^BANANA
Output			
^BANANA@			

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

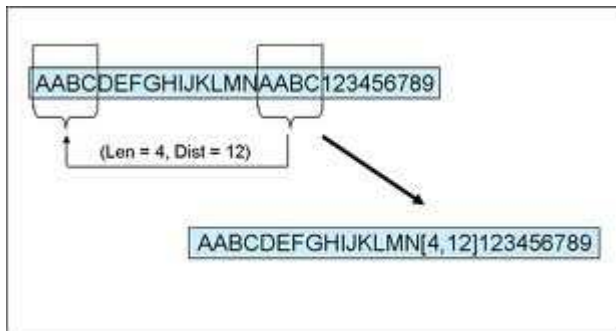
Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

wwwwwwwwwwwBwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwBbbwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwBwwwwwwwwww

9W1B12W3B19W1B9W



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

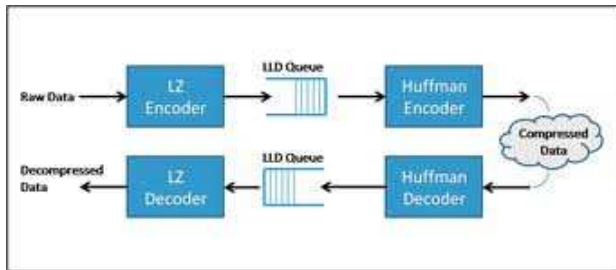
Algebry a dotazování

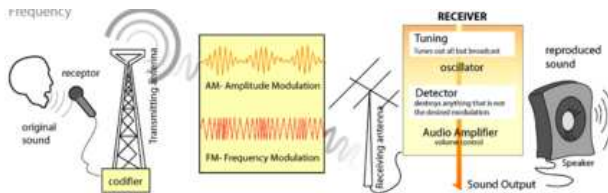
Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace





Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebra a dotazování

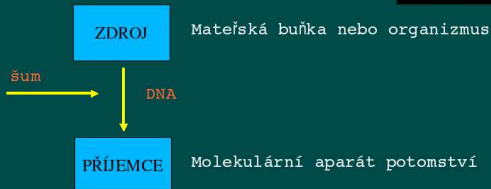
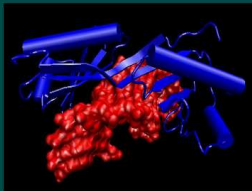
Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Biologická sekvence jako informace, život jako komunikace mezi buňkami, DNA jako komunikační kanál



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Obecné diskrétní modely v SB

Informace o kurzu

Předmět zájmu bioinformatiky

Předmět zájmu systémové biologie

Okruhy se zajímavým matematickým/informatickým základem

Jazyky a gramatiky

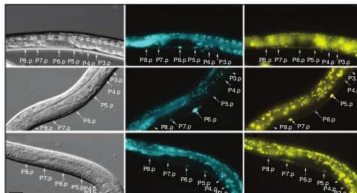
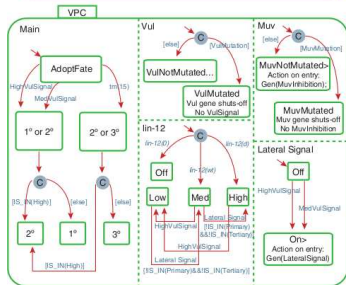
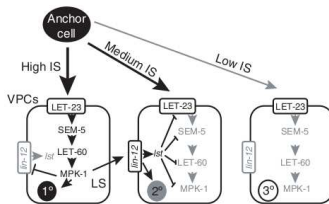
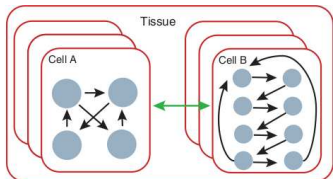
Algebra a dotazování

Vyhledávací algoritmy

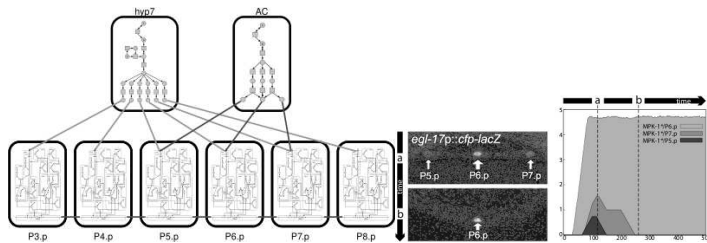
Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Fisher J., Piterman N., Hubbard J., Stern M., and Harel D. Computational insights into *C. elegans* vulval development. PNAS 102(6):1951-1956, 2005.



N. Bonzanni, E. Krepska, K.A. Feenstra, W. Fokkink, T. Kielmann, H. Bal, and J. Heringa, Executing multicellular differentiation: Quantitative predictive modelling of *C.elegans* vulval development, 25(16):2049-56, Bioinformatics Aug 2009.

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

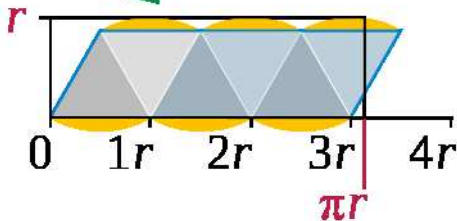
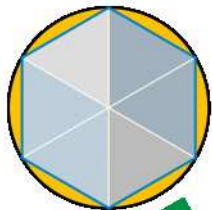
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

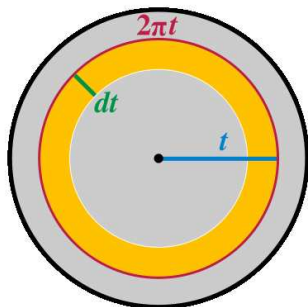
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



$$\begin{aligned}\text{Area}(r) &= \int_0^r 2\pi t \, dt \\ &= \left[(2\pi) \frac{t^2}{2} \right]_{t=0}^r \\ &= \pi r^2.\end{aligned}$$

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

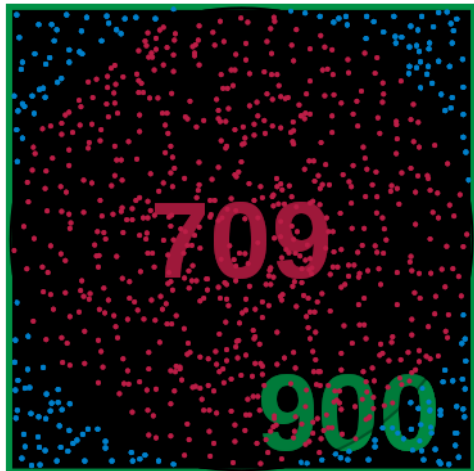
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

$$\frac{dx}{dt} = x (\alpha - \beta y)$$

$$\frac{dy}{dt} = -y (\gamma - \delta x)$$

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

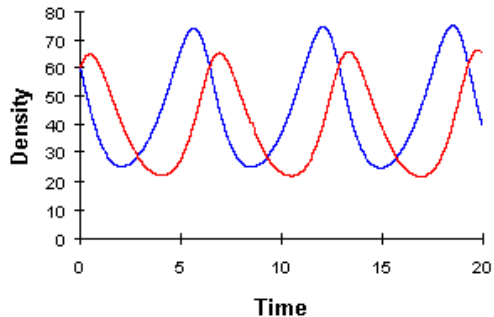
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémově
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

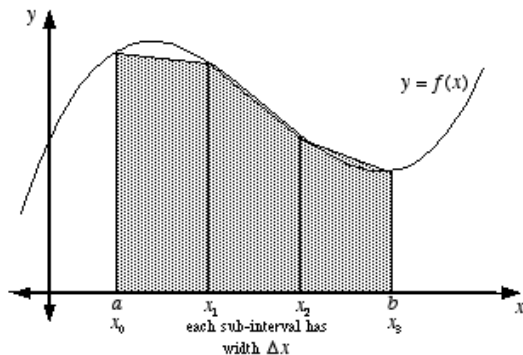
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



The area of the trapezoids (shaded) approximately equals the area bounded by $y = f(x)$.

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{\Delta x}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + f(x_3)].$$

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebra a dotazování

Vyhledávací algoritmy

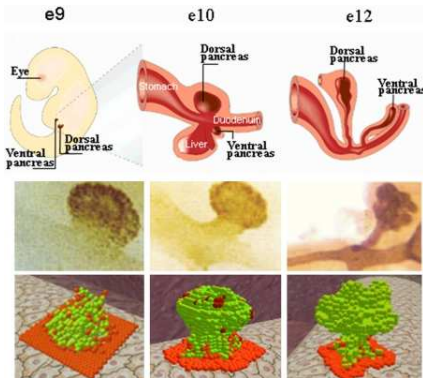
Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Počítačové modely v SB – integrace metod

Model vývoje orgánu – slinivka v myši



<http://www.wisdom.weizmann.ac.il/~yaki/wisDay/index.html>

Y. Setty, I.R. Cohen, Y. Dor, and D. Harel. Four-dimensional realistic modeling of pancreatic organogenesis, Proc Natl Acad Sci U S A. 2008 December 23; 105(51): 20374-20379.

Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

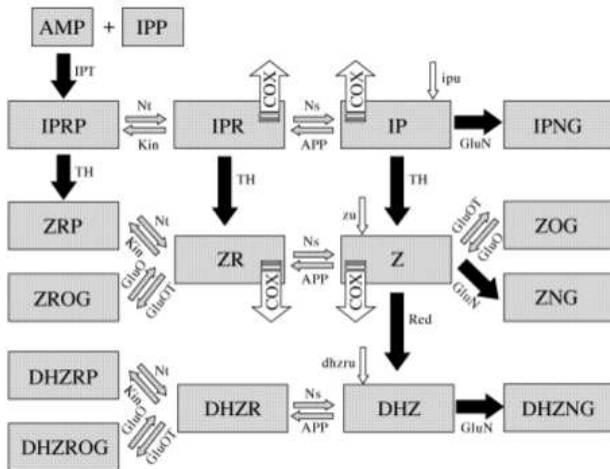
Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Lexa et al. — Model of Endogenous Cytokinin Metabolism



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Informace o kurzu

Předmět zájmu bioinformatiky

Předmět zájmu systémové biologie

Okruhu se zajímavým matematickým/informatickým základem

Jazyky a gramatiky

Algebra a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

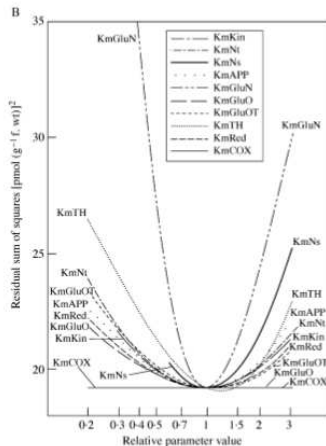
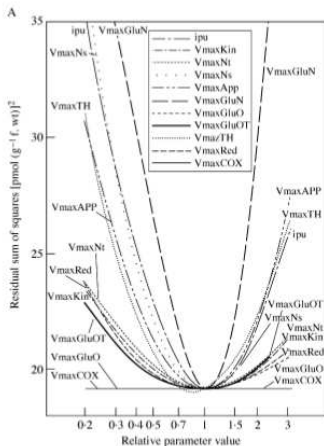
Numerické metody a simulace

TABLE 1. Endogenous CK content (pmol g f. wt⁻¹) in seedlings of SR1 tobacco grown on MS medium with or without addition of 1 μM isopentenyl adenine (MS+IP), 1 μM trans-zeatin (MS+Z) or 1 μM dihydrozeatin riboside (MS+DHZR)

CK type	Medium											
	MS			MS+IP			MS+Z			MS+DHZR		
	Days											
	2	5	12	2	5	12	2	5	12	2	5	12
Z	nd	nd	9.4	13.6	14.5	11.9	40.3	214	152	8.3	9.2	10.3
zZ	nd	5.2 (7.3; 3.1)	6.2 (6.9; 5.5)	8.9 (10.1; 7.7)	7.8 (9.1; 6.5)	(5.7; 18.1)	(435; 370)	(219; 208)	(147; 157)	(8.1; 8.5)	(7.5; 10.9)	(8.8; 11.8)
IP	0.1*	0.2*	1.3	971	446	216	2.2	2.2	1.3	0.1*	6.5 (8.3; 4.7)	7.2 (8.8; 5.5)
DHZ	0.7 (1.3; 0.1)	1.6 (0.8; 2.4)	(1.5; 1.1)	(8.83; 10.58)	(3.73; 5.19)	(1.6*	(1.2; 3.2)	(2.4; 2.0)	(1.1; 1.5)	(0.6; 1.8)	(0.9; 1.4)	(0.9; 1.4)
ZR	0.4*	0.5	0.5*	1.5	nd	0.7	6.7	0.5	1.8	0.8	nd	0.8
ZRZ		(0.4; 0.5)		(1.6; 1.4)		(1.2; 0.2)	(4.4; 9.0)	(0.8; 0.2)	(2.1; 1.5)	(1.1; 0.5)		(0.5; 1.1)
zZR	1.8 (1.2; 2.3)	1.1 (1.5; 0.7)	2.2 (1.6; 2.7)	1.6 (1.9; 1.3)	0.4 (0.2; 0.6)	0.7 (0.6; 0.8)	1.7 (1.0; 2.4)	nd	0.7 (0.8; 0.6)	1.7 (2.3; 1.1)	nd	1.5 (1.2; 1.8)
IPR	nd	0.1*	0.3*	3.0 (2.9; 3.1)	0.5*	0.4*	0.2 (0.1; 0.3)	0.2*	0.2*	0.1*	0.4*	0.4*
DHZR	1.2	2.7	1.6	0.1*	0.2*	nd	2.2	4.0	2.0	504	291	184
ZRP	(1.0; 1.4)	(2.3; 3.1)	(2.2; 1.0)				(1.2; 3.2)	(4.9; 3.1)	(2.2; 1.8)	(598; 409)	(200; 382)	(164; 204)
ZRPZ			1.6	8.6	1.3*	1.5	61.8	16.5	8.0	nd	nd	2.1*
zZRP	11.2	3.4	(1.4; 1.8)	(7.8; 9.4)	0.1*	(0.9; 2.1)	(52.4; 71.2)	(13.2; 19.8)	(6.7; 9.3)			
IPRP	(6.0; 16.4)	(2.1; 4.6)	(0.1; 1.5)	(2.8; 5.2)		3.5*	2.3*	nd	1.1	22.3	0.5	20*
IPRZ	3.4	1.9	0.5*	26.4	6.3	6.4	0.7*	0.3*	0.7	2.9	nd	0.1*
DHZRP	(2.8; 4.0)	(2.6; 1.2)		(28.0; 24.8)	(5.7; 6.9)	(6.8; 6.0)			(0.4; 1.0)	(0.8; 5.0)		
ZOG	1.8	9.1	9.9	2.2	2.2	12.9	5.9	21.0	0.9	2.1	3.6	2.1
ZROG	0.1*	nd	nd	0.6*	1.6*	(26.7; 21.7)	(10.0; 15.7)	nd	1.8*	nd	nd	nd
DHZROG	0.5	0.3*	0.5*	nd	0.6*	1.0*	0.4*	nd	0.3*	51.4	30.9	32.0
ZIG	2.0	nd	6.9	104	22.7	69.7	55.2	680	1019	11.1	nd	20.0
IPZG	(2.0; 2.0)		(4.8; 9.0)	(7.2; 1.36)	(29.0; 16.4)	(51.5; 87.9)	(510; 594)	(641; 719)	(904; 1134)	(6.8; 15.4)		(16.0; 24.0)
DHZIG-1	6.6	5.6	16.9	12.361	16.210	15.341	33.5	3.4	0.9	52.7	30*	3.1
DHZIG-2	(8.5; 4.7)	(8.8; 2.4)	(20.8; 12.9)	(16.251; 8470)	(20.114; 12.306)	(20.701; 9981)	(29.3; 37.7)	(6.3; 1.3)	(0.7; 1.4)	(47.9; 57.4)		(4.6; 1.6)
DHZIG-2	1.2	0.6*	1.0*	1.27	2.8	16.7	594	19.7	2738	4471	8822	4471
DHZIG-2	(1.0; 1.4)			(9.8; 15.6)	(5.5; 0.1)		(11.2; 22.2)	(45.2; 73.6)	(26.4; 12.9)	(1968; 3508)		(514.5; 12.499)
ZOG	(4.3; 2.9)			(19.2; 19.6)	(30.9; 30.9)	(34.3; 35.3)	(7.9; 15.5)	(14.9; 3.5)	(15.3; 5.1)	(298.5; 2432)		(328.5; 530.3)
IPZG	0.7	0.4*	0.7	1.24	1.53	19.3	0.7	0.4	0.4*	0.8	0.6*	0.2*
DHZZG	(0.4; 0.9)			(0.5; 0.9)	(14.9; 9.8)	(13.9; 16.7)	(12.8; 25.8)	(0.4; 1.0)	(0.3; 0.5)	(0.7; 0.9)		
DHZZG	0.4*	0.1*	0.7*	3.1*	0.3*	0.6 (0.3; 0.9)	0.1*	0.2*	nd	3.7 (4.6; 2.8)	9.4 (8.9; 9.9)	4.4*

Lexa et al. — Model of Endogenous Cytokinin Metabolism

591



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

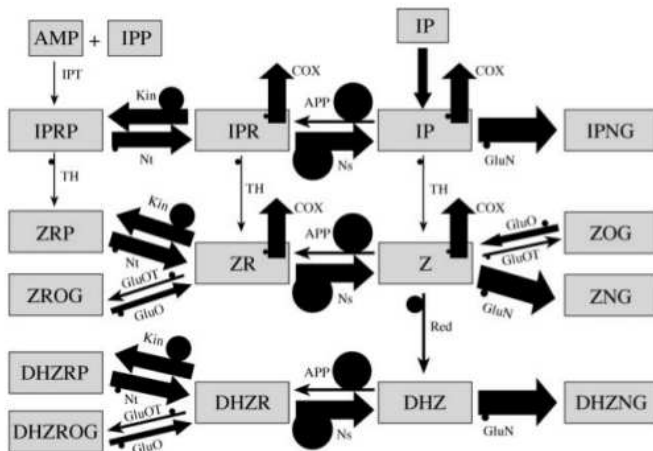
Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

Lexa et al. — Model of Endogenous Cytokinin Metabolism



Informace o kurzu

Předmět zájmu
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové
biologie

Okruhy se zajímavým
matematickým/informatickým
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace