

# IV121 Vybrané aplikace informatiky v biologii

## Týden 1

Katedra informačních technologií  
Masarykova Univerzita Brno

Jaro 2012

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



Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruby 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](mailto:lexa@fi.muni.cz))
- ▶ Kurz: Po 14:00-17:50 (A104)
- ▶ Konzultace: Čt 13:00-15:00 (C506)
- ▶ <http://www.fi.muni.cz/~lexa/teaching.html>
  
- ▶ Dr. David Šafránek, C518 ([safranek@fi.muni.cz](mailto:safranek@fi.muni.cz))
- ▶ Kurz: Po 14:00-17:50 (A104)
- ▶ 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

Theorie informace a kódování  
Diskrétní a stochastické modely  
Numerické metody a simulace

- ▶ Hodnotí se
  - ▶ Cvičení 10 bodů (max 40 bodů)
  - ▶ Účast na cvičení podmínkou udělení bodů
  - ▶ Zkouška 60 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

Theorie 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
- ▶ Regulační, metabolické a signální sítě
- ▶ Podobnostní metriky a vyhledávání
- ▶ 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

# Definice bioinformatiky

## Bioinformatika

Studuje metody shromážďování, 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

Theorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

# Předmětem zájmu nebo používanými metodami se bioinformatika prolíná s

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

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

Okruly se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky

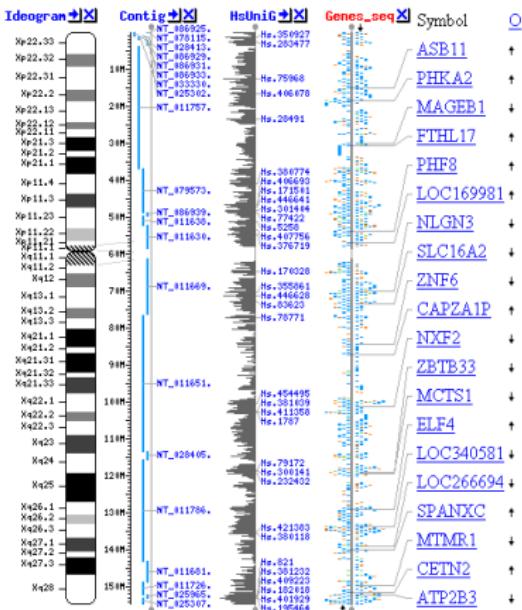
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Theorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Zobrazení informací o genech na chromozomu

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

**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

## Analoga

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

Mam z toho velkou radost.  
::: :::: : :::::::  
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 bilogické sekvence
- 1970 Needleman and Wunsh: 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

Theorie 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

Theorie 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 nestačí pouhý výčet součástí
- ▶ Vlastnosti komponentů - poloha v prostoru a čase, interakce, funkce celku, které nejsou funkciemi žádné z částí
- ▶ jinak i integrativní biologie
- ▶ Systémová biologie studuje interakce mezi komponenty biologických systémů a následně funkci systému jako celku a v sledku 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

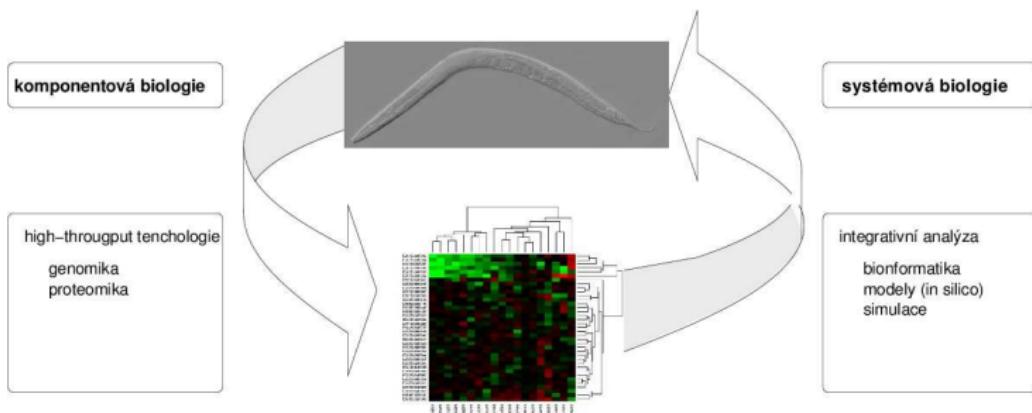
Vyhledávací algoritmy

Theorie 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
- ▶ tkáně
- ▶ orgán
- ▶ organismus
- ▶ populace
- ▶ ekosystém

Informace o kurzu

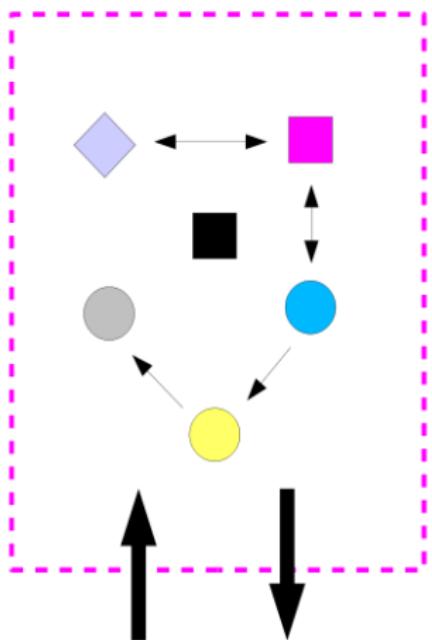
Předmět zájmu  
bioinformatiky

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



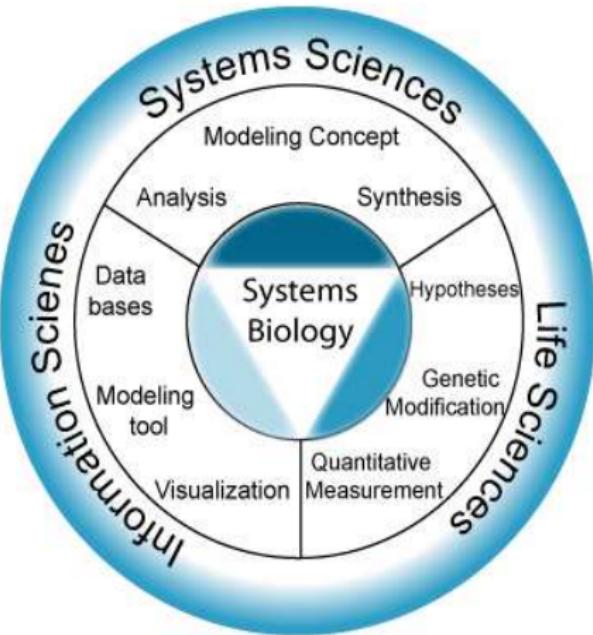
Informace o kurzu

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



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](#)

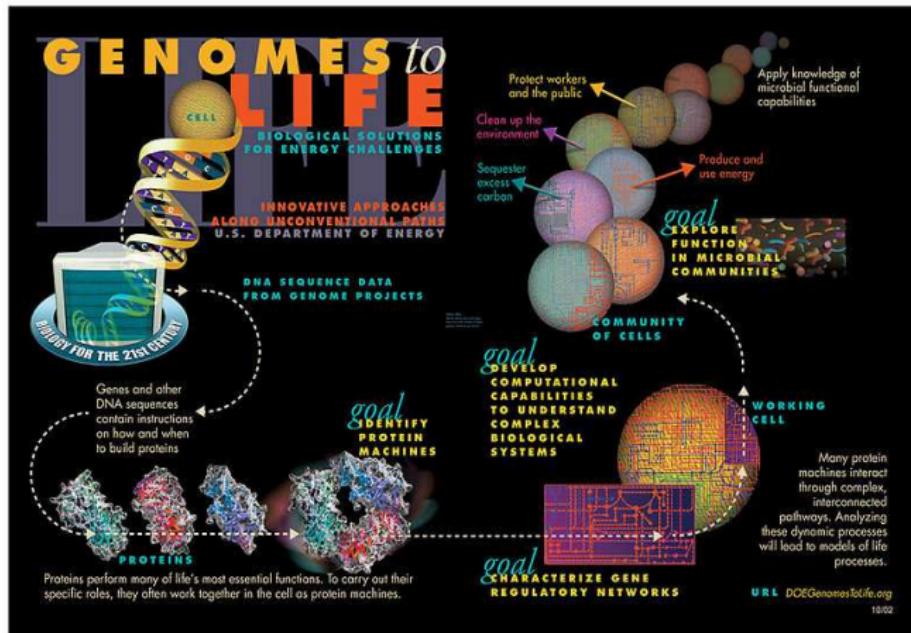
[Algebry a dotazování](#)

[Vyhledávací algoritmy](#)

[Teorie informace a kódování](#)

[Diskrétní a stochastické modely](#)

[Numerické metody a simulace](#)



### Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruly se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Theorie 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

# Modelovací cyklus



Data



Model



Informace o kurzu

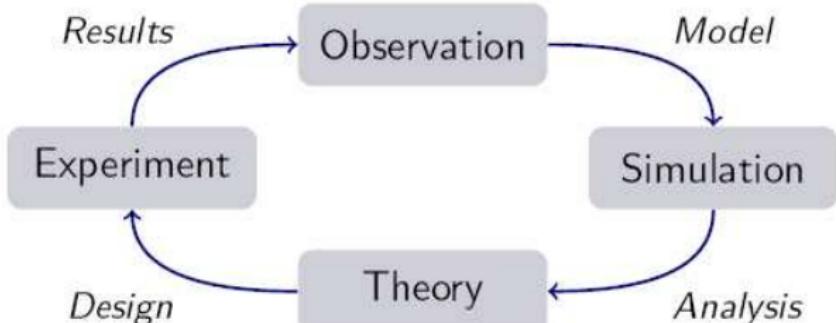
Předmět zájmu  
bioinformatiky

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

# Modelovací cyklus



Informace o kurzu

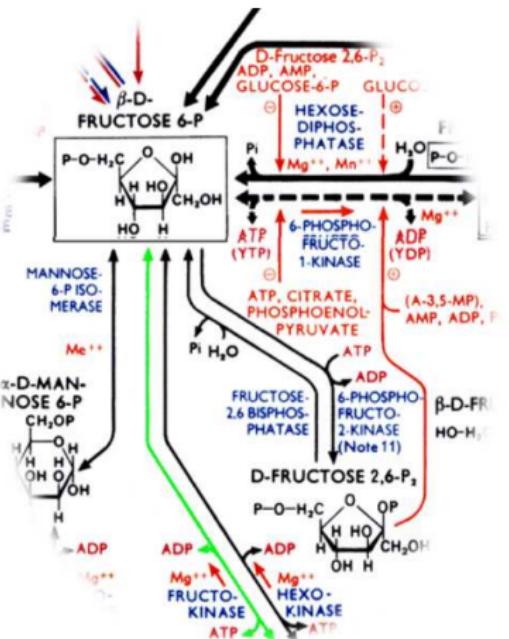
Předmět zájmu  
bioinformatiky

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

# Enzymatické reakce



Informace o kurzu

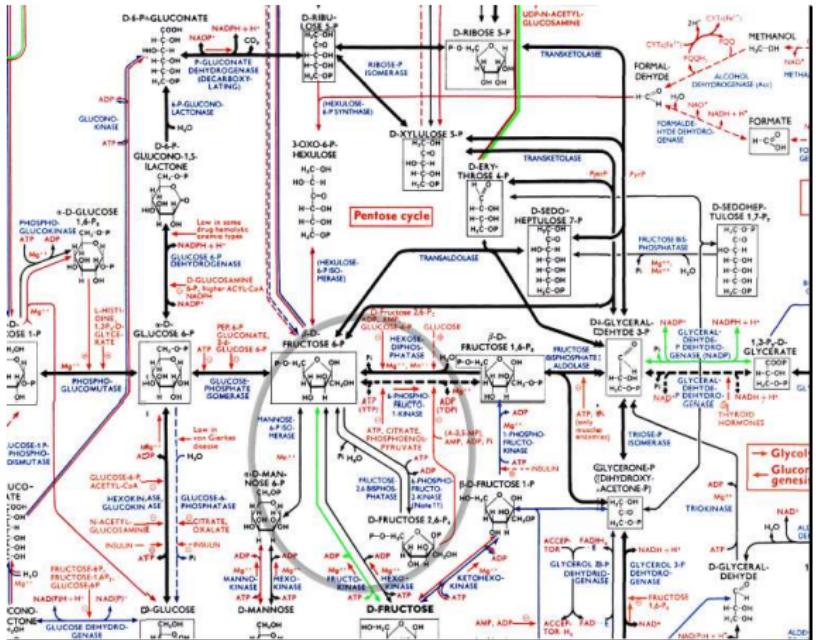
Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruly 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

# Metabolické dráhy



Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruly se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky

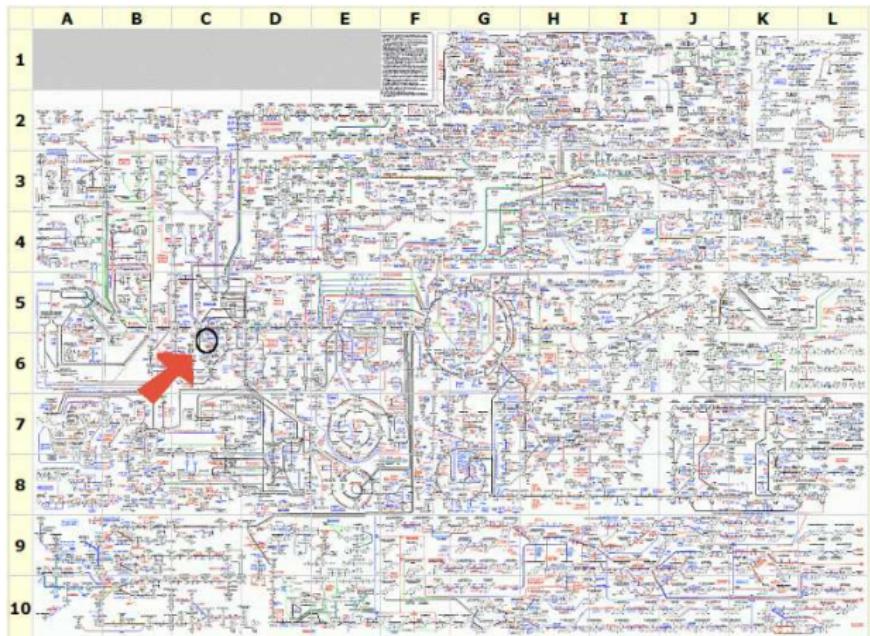
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Theorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace



Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okrupy se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

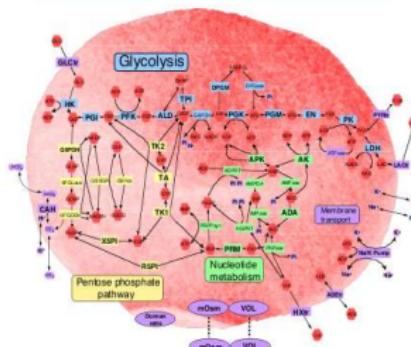
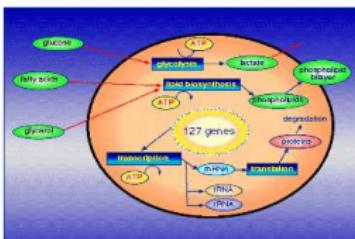
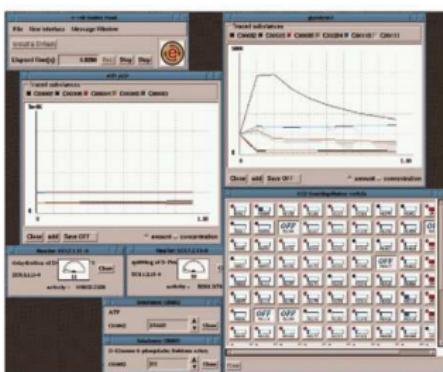
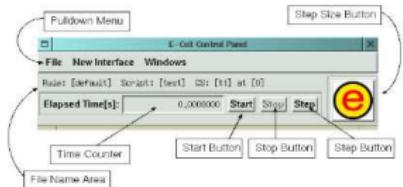
Vyhledávací algoritmy

Theorie 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

Okruly se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Theorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

# CellWare: nástroj pro modelování buněčných procesů

LacZ.cwm - C:\Documents and Settings\ssoman\My Documents\LacZ.cwm - CellWare 1.0 beta

File Add Edit View Simulation Help

LacZ.cwm

Properties CellWare Model

CellWare Project

- LacZ.cwm
  - Gene
    - Promoter
    - Modifier
  - Metabolite
    - Protein
    - Decay
  - MRNA
    - EKNAP
    - RNAP
    - P\_RNAP
    - TrRNAP
    - E\_KNAP
    - Dissociation

Description:

Reference

"The Effect of Transcription and Translation Initiation Frequencies on the Stochastic Fluctuations in Prokaryotic Gene Expression"

Kierzek AM, Zain J, Zielenkiewicz P.

J Biol Chem. 2001;276(11):8165-72

Save a file, done.

[X: 36] [Y: 86]

### LacZ Operon Gene Expression Model

The diagram illustrates the LacZ operon gene expression model. It shows the interaction between RNA polymerase (RNAP), EKNAP, TrRNAP, and Promoter. The Promoter is at the top, with RNAP and P\_RNAP associated with it. Below the Promoter, there is a feedback loop involving EKNAP, TrRNAP, and a Decay node. The EKNAP node has arrows pointing to both the Promoter and TrRNAP. The TrRNAP node also has an arrow pointing back to the Promoter. A Decay node is connected to the EKNAP node. At the bottom, a Protein node receives an arrow from the TrRNAP node and another arrow from a Protein node labeled "Protein".

Euler Forward

Gillespie

Hybrid - StochODE

4th Order Runge Kutta

Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruly se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Theorie 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="I_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

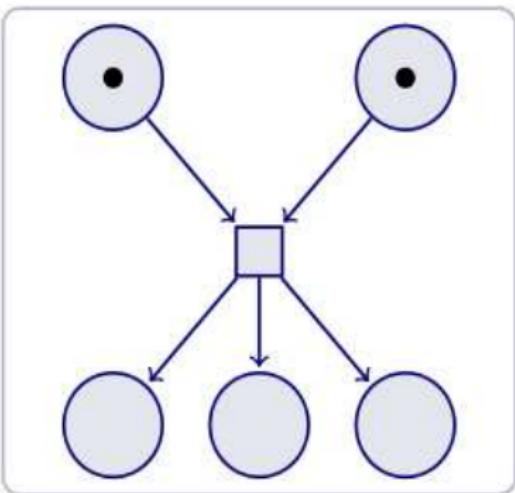
Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruly se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky  
Algebry a dotazování  
Vyhledávací algoritmy

Theorie informace a kódování  
Diskrétní a stochastické modely  
Numerické metody a simulace

# Petriho sítě - stavy a transakce



Informace o kurzu

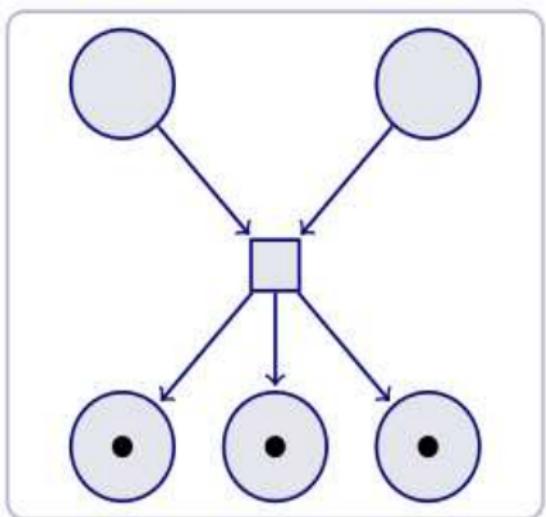
Předmět zájmu  
bioinformatiky

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 sítě - stavy a transakce



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 sítě - příklad modelu enzymatické reakce

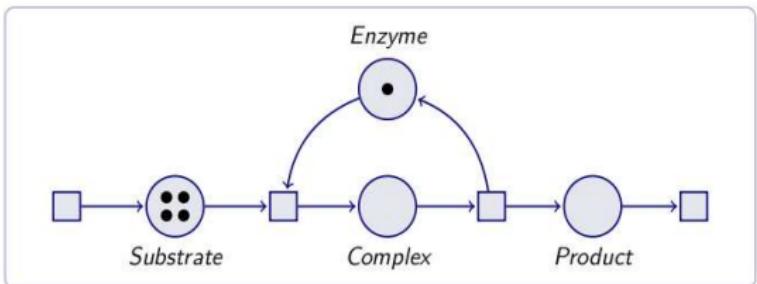
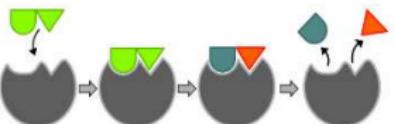
Informace o kurzu

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

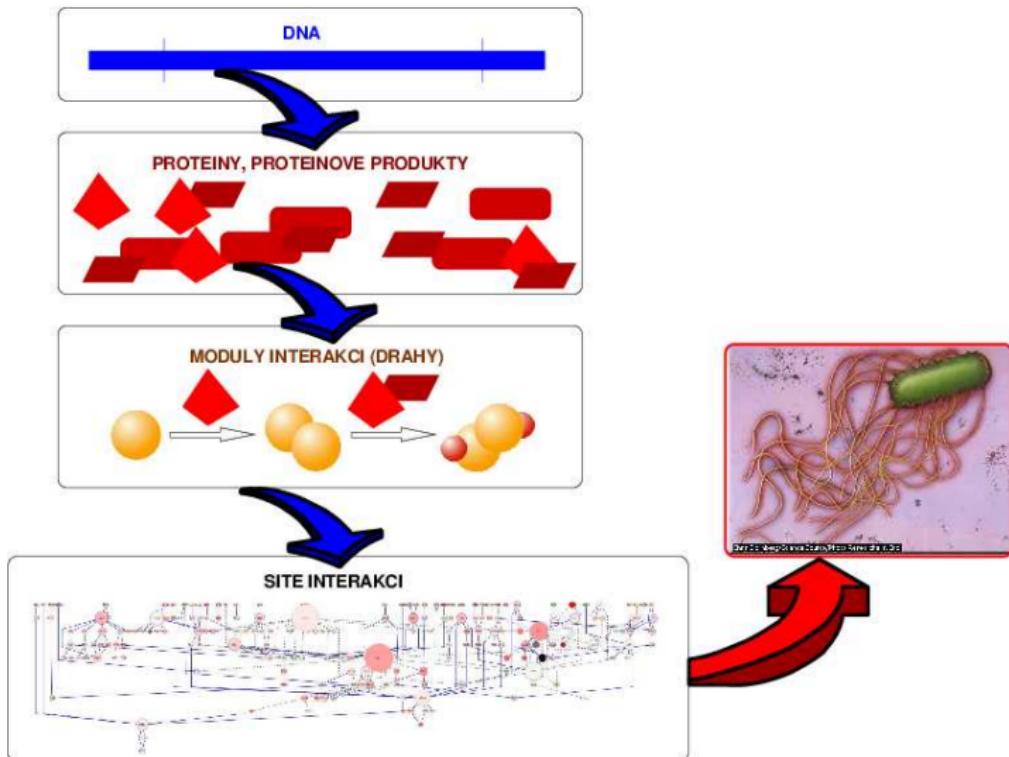
Předmět zájmu systémové  
biologie

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

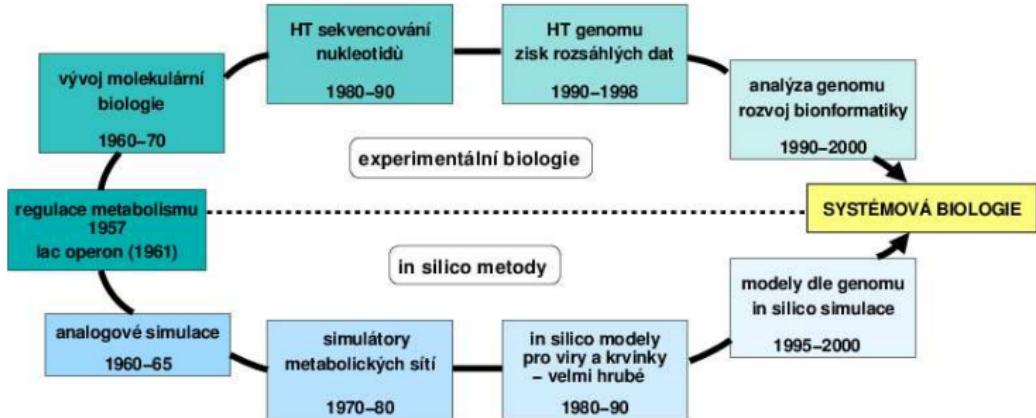
Předmět zájmu  
bioinformatiky

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

# Historický vývoj



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:  $S \rightarrow aSu \rightarrow acSgu \rightarrow accSgggu \rightarrow accgSgggu \rightarrow accgtSgggu \rightarrow accgtgSgggu \rightarrow accgtgggu$

"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

Theorie 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

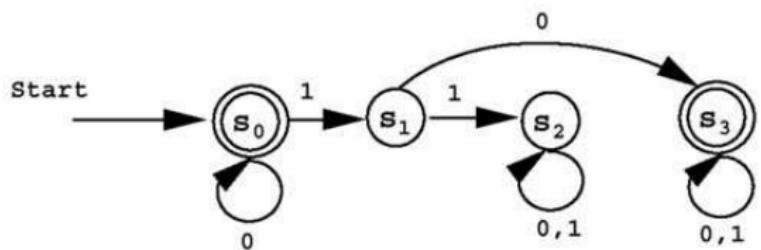
Informace o kurzu

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

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Theorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

# Chomského hierarchie jazyků

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

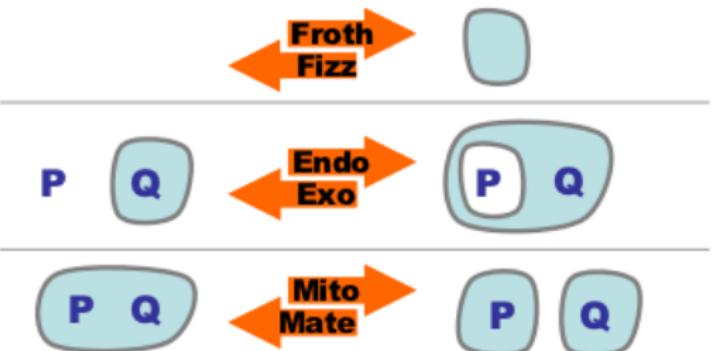
Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruby 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

# Brane Calculus



**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

# Brane Calculus

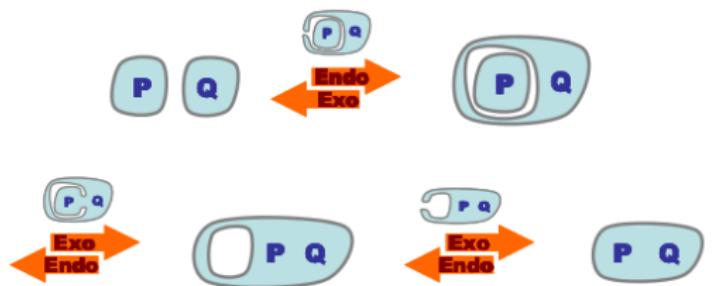


Figure 5 Mito/Mate by 3 Endo/Exo (basic technique)

From: Cardelli L (2004). Brane Calculi.

Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruby 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

## Bud

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

$$\text{bud}^\perp_n(\rho).\tau \triangleq \odot(\text{v}^\perp_n(\rho).\text{v}_n).\text{v}^\perp_n.\tau$$

$$\text{bud}^\perp_n(\rho).\tau|\tau_0 \Downarrow \text{bud}_n.\sigma|\sigma_0 \Downarrow P \circ Q \rightarrow^* \rho \Downarrow \sigma|\sigma_0 \Downarrow P \circ \tau|\tau_0 \Downarrow Q$$

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

$$\odot(\text{v}^\perp_n(\rho).\text{v}_n).\text{v}^\perp_n.\tau|\tau_0 \Downarrow \text{v}_n.\sigma|\sigma_0 \Downarrow P \circ Q \rightarrow \text{Pino}$$

$$\text{v}^\perp_n.\tau|\tau_0 \Downarrow \text{v}^\perp_n(\rho).\text{v}_n \Downarrow \circ \odot \circ \Downarrow \circ \text{v}_n.\sigma|\sigma_0 \Downarrow P \circ Q \rightarrow \text{Phago } n$$

$$\text{v}^\perp_n.\tau|\tau_0 \Downarrow \text{v}_n \Downarrow \rho \Downarrow \sigma|\sigma_0 \Downarrow P \circ Q \rightarrow \text{Exo } n$$

$$\rho \Downarrow \sigma|\sigma_0 \Downarrow P \circ \tau|\tau_0 \Downarrow Q$$

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

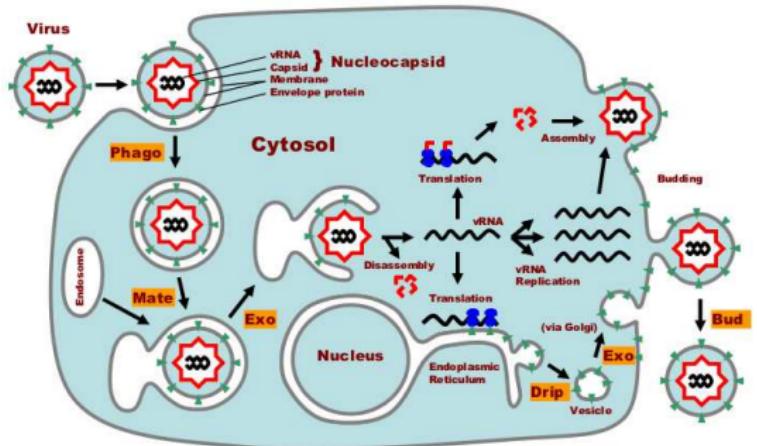
Vyhledávací algoritmy

Theorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

# Brane Calculus



From: Cardelli L (2004). Brane Calculi.

Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruby se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky  
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Theorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

# BWT - Burrows-Wheeler transform

Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruby se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky  
Algebry a dotazování  
Vyhledávací algoritmy

Theorie 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 Last Column
^BANANA@	^BANANA@ @^BANANA A@^BANAN NA@^BANA ANA@^BAN NANA@^BA ANANA@^B BANANA@^	ANANA@^B ANA@^BAN A@^BANAN BANANA@^ NANA@^BA NA@^BANA ^BANANA@ @^BANANA	ANANA@^B ANA@^BAN A@^BANAN BANANA@^ NANA@^BA NA@^BANA ^BANANA@ @^BANANA	BNN^AA@A

Inverse Transformation			
Input			
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

Theorie 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@ ANANA@^B NA@^BAN @^BANANA A@^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
<b>Output</b>			
@^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

Theorie informace a kódování  
Diskrétní a stochastické modely  
Numerické metody a simulace

<b>Input</b>	SIX.MIXED.PIXIES.SIFT.SIXTY.PIXIE.DUST.BOXES
<b>Output</b>	TEXYDST.E.IXIXIXXXSMPBS..E.S.EUSFXDIIIOIIIIT

Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruhy se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky  
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Theorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely  
Numerické metody a simulace

<b>Input</b>	SIX.MIXED.PIXIES.SIFT.SIXTY.PIXIE.DUST.BOXES
<b>Output</b>	TEXYDST.E.IXIXIXXXSMPBS..E.S.EUSFXDIIIOIIIIT

Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruhy se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

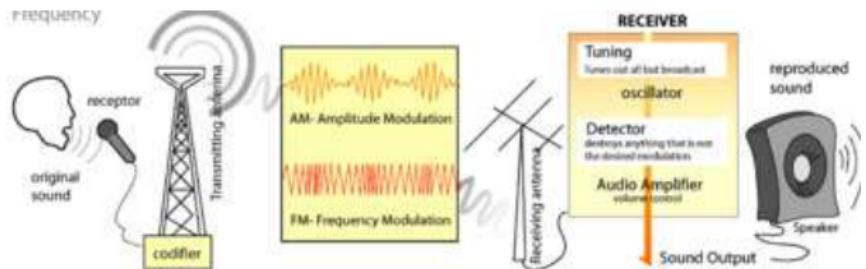
Jazyky a gramatiky  
Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Theorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely  
Numerické metody a simulace

# Shannonova teorie informace



Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

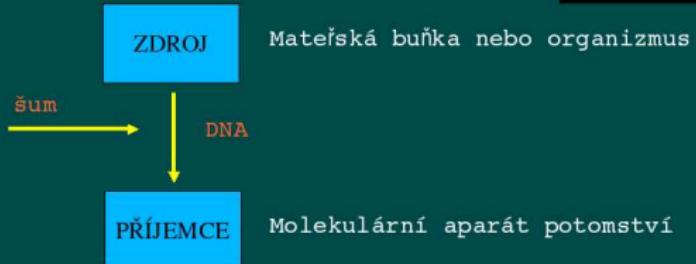
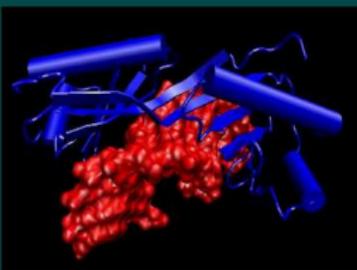
Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruhy se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky  
Algebry a dotazování  
Vyhledávací algoritmy

**Theorie 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

Okrhu se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

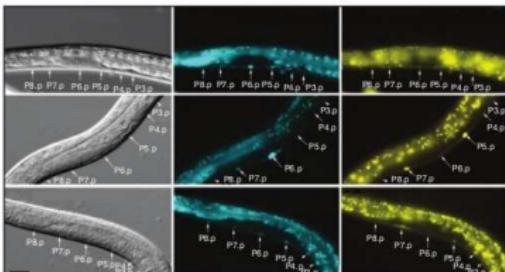
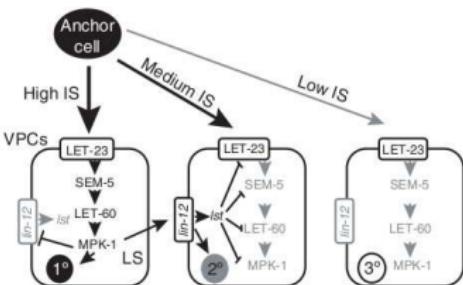
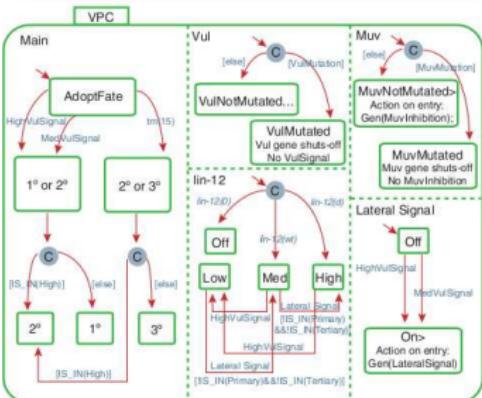
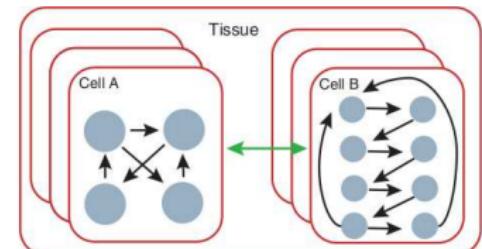
Jazyky a gramatiky  
Algebry a dotazování  
Vyhledávací algoritmy

## **Teorie informace a kódování**

### Diskrétní a stochastické modely

### Numerické metody a simulace

# Obecné diskrétní modely v SB



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

Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruly se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

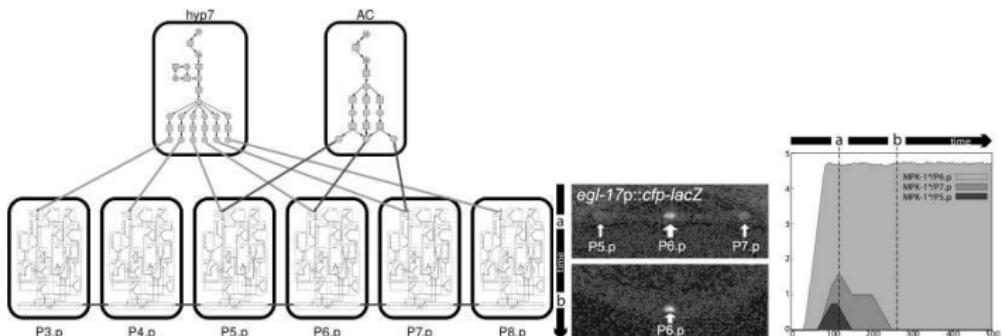
Vyhledávací algoritmy

Theorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

# Diskrétní modely v SB – Petriho sítě



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

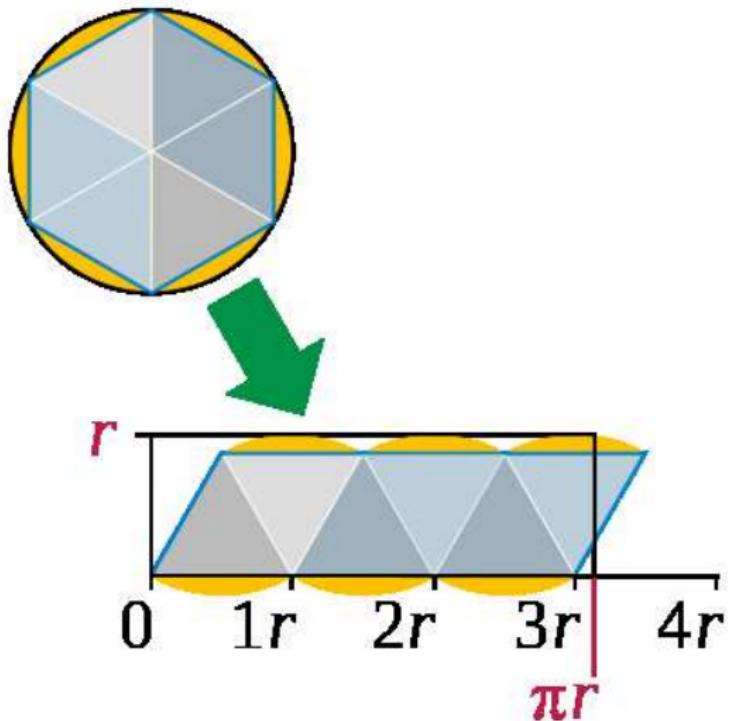
Vyhledávací algoritmy

Teorie informace a kódování

Diskrétní a stochastické modely

Numerické metody a simulace

# Obsah kruhu



Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

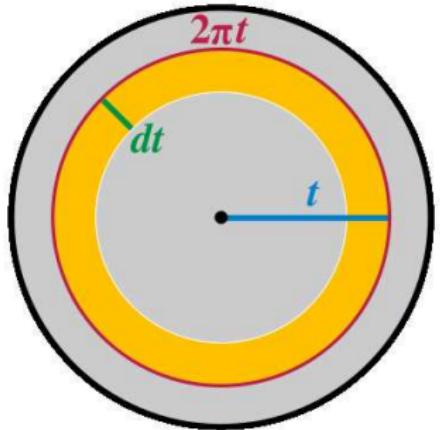
Předmět zájmu systémové  
biologie

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

# Obsah kruhu



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

Informace o kurzu

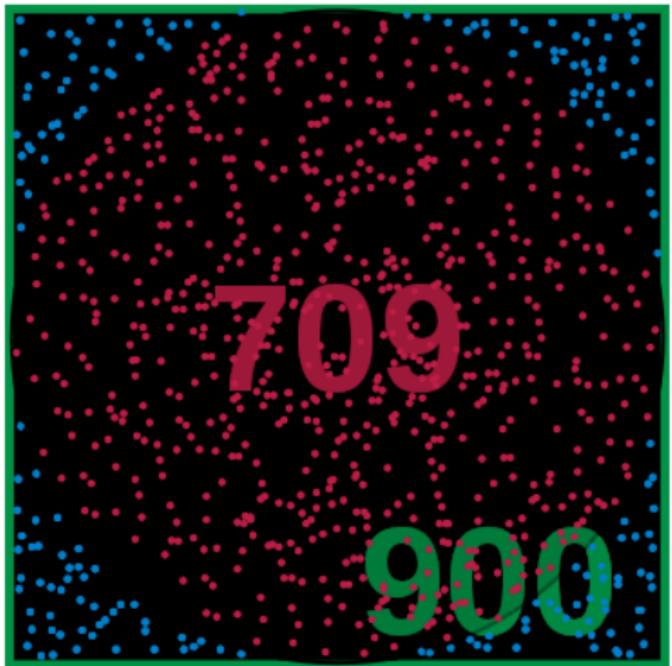
Předmět zájmu  
bioinformatiky

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

# Obsah kruhu



Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruhy se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky

Algebry a dotazování

Vyhledávací algoritmy

Theorie 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](#)

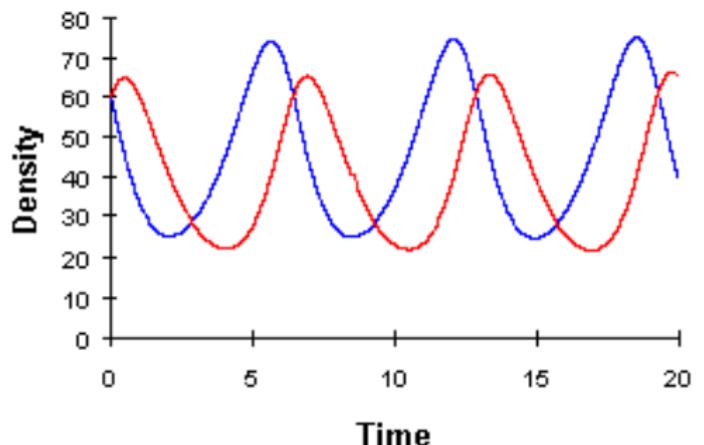
[Předmět zájmu systémové  
biologie](#)

[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](#)

# Lotka-Volterra



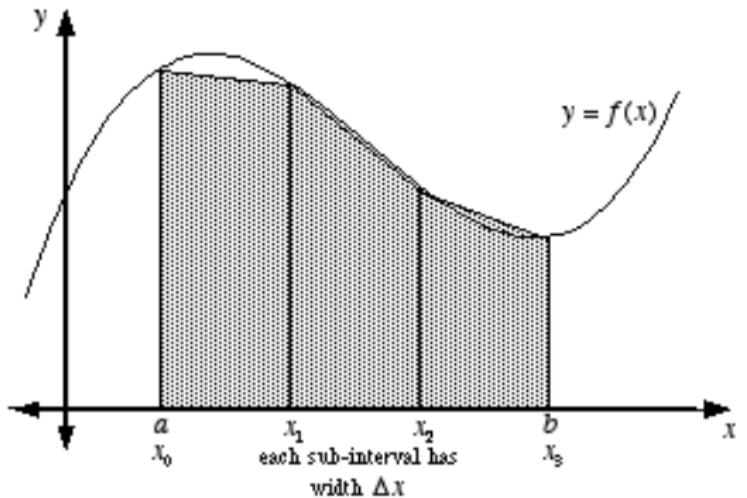
Informace o kurzu

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



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

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

Informace o kurzu

Předmět zájmu  
bioinformatiky

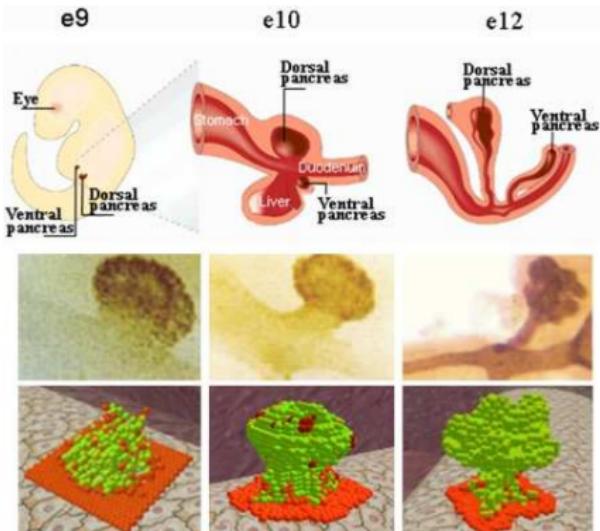
Předmět zájmu systémové  
biologie

Okruhy se zajímavým  
matematickým/informatickým  
základem

Jazyky a gramatiky  
Algebry 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

Theorie informace a kódování  
Diskrétní a stochastické modely  
Numerické metody a simulace