Bancos de dados mais usados em Bioinformática

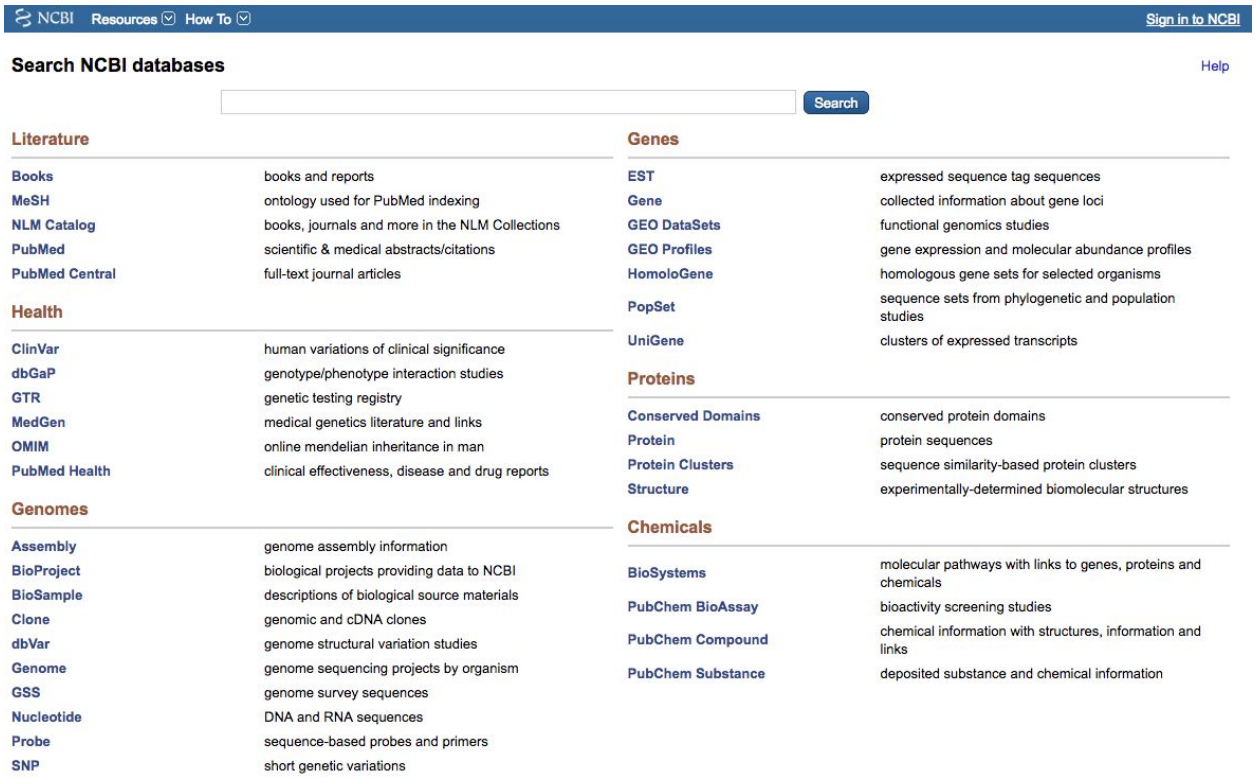
NCBI

O NCBI é dividido em vários bancos de dados específicos. Cada banco de dados armazena informações e apresenta links com outros bancos do próprio NCBI e bancos externos.

Entrez (GQuery) é o sistema de busca do NCBI que faz pesquisa em mais de 30 banco de dados. Esse sistema faz busca nas seguintes divisões do NCBI:

- **Literature**
- **Health**
- **Genome**
- **Genes**
- **Proteins**
- **Chemicals**

IMS/CAT-UFBA - Rua Rio de Contas, 58 – Quadra 17 – Lote 58 – Bairro Candeias
Vitória da Conquista – BA - CEP 45.029-094/ Fone: (77) 3429 2714. E-mail: leandromartins@ufba.br



A busca no Entrez é realizada em todos os banco de dados ligados ao NCBI. O Entrez ainda aceita pesquisa específicas para cada banco ou pesquisas mais refinadas usando operadores.

Exemplo:

(CASP1) **AND** Homo Sapiens

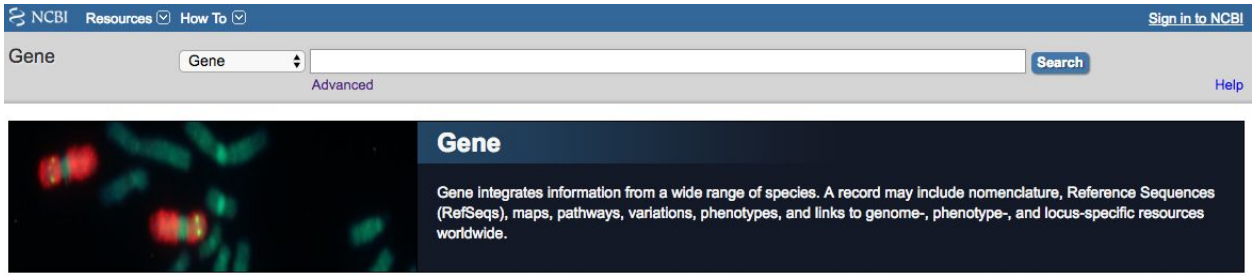
O operador **AND** diz ao Entrez para retornar somente onde encontrar o termo CASP1 e Homo sapiens como organismo

(CASP1) **AND** Homo Sapiens**[Organism]**

O operador **AND** diz ao Entrez para retornar somente onde encontrar o termo CASP1 e Homo sapiens como organismo.

Em cada banco é possível montar uma busca refinada usando ferramenta de busca avançada. Vamos usar o banco gene para fazer essa busca avançada.

Gene/NCBI



https://www.ncbi.nlm.nih.gov/gene

Figura. Página de entrada do Gene. Clicar em "Advanced"

Builder

Selecionar

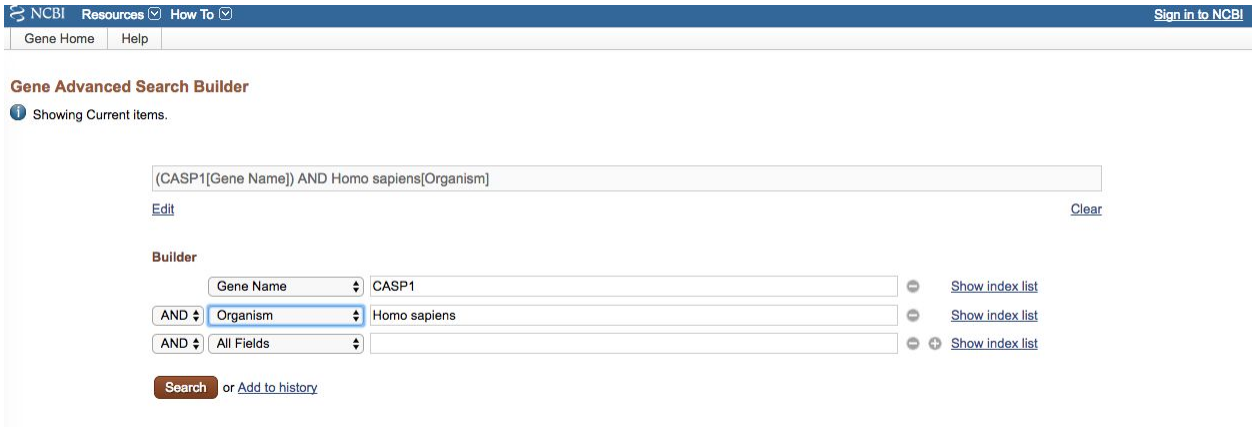
"Gene name" e digitar CASP1

Usar o Operador **AND**

"Organism" e digitar Homo sapiens

Vejam que a busca já está sendo montada acima do **"Builder"**

Ao terminar a busca clicar em "**Search".**



Agora experimentem montar diferentes buscas, usando outros operados (AND/OR/NOT), para outros genes e outras caracteristicas disponíveis para busca "Advanced".

Vamos buscar o Gene TLR9 (Toll Like Receptor 9) no banco Gene/NCBI para ver quais informações esse banco de dados retorna.

Official Symbol TLR9provided by HGNC
Official Full Name toll like receptor 9provided by HGNC
Primary source HGNC:HGNC:15633
See related Ensembl:ENSG00000239732 MIM:605474; Vega:OTTHUMG00000158106
Gene type protein coding
RefSeq status REVIEWED
Organism Homo sapiens
Lineage Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi; Mammalia; Eutheria; Euarchontoglires; Primates; Haplorrhini; Catarrhini; Hominidae; Homo
Also known as CD289
Summary The protein encoded by this gene is a member of the Toll-like receptor (TLR) family which plays a fundamental role in pathogen recognition and activation of innate immunity. TLRs are highly conserved from Drosophila to humans and share structural and functional similarities. They recognize

pathogen-associated molecular patterns (PAMPs) that are expressed on infectious agents, and mediate the production of cytokines necessary for the development of effective immunity. The various TLRs exhibit different patterns of expression. This gene is preferentially expressed in immune cell rich tissues, such as spleen, lymph node, bone marrow and peripheral blood leukocytes. Studies in mice and human indicate that this receptor mediates cellular response to unmethylated CpG dinucleotides in bacterial DNA to mount an innate immune response. [provided by RefSeq, Jul 2008]

Orthologs mouse all

Pathways from BioSystems

- **KEGG**
- **REACTOME**
- **WikiPathways**

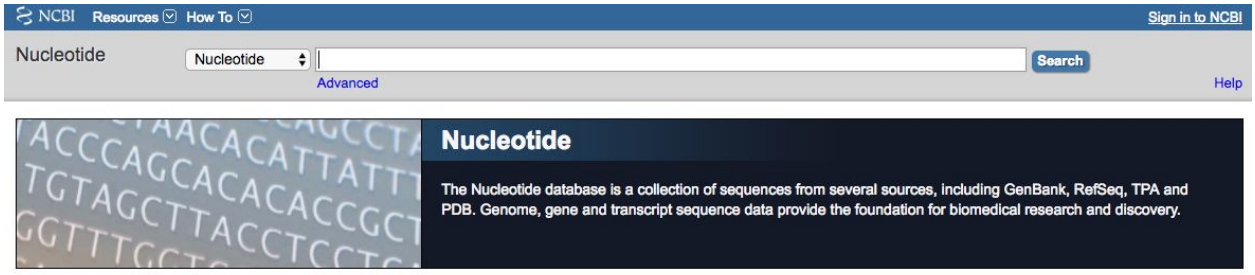
Homology

Homologs of the TLR9 gene: The TLR9 gene is conserved in chimpanzee, Rhesus monkey, dog, cow, mouse, rat, zebrafish, and frog.
Orthologs from Annotation Pipeline: 72 organisms have orthologs with human gene TLR9
Map Viewer (Mouse, Rat)
The Hierarchical Catalog of Orthologs

Gene Ontology

Function
Process
Component

Nucleotide/NCBI



https://www.ncbi.nlm.nih.gov/nuccore

O banco Nucleotide armazena sequências e informações associadas a cada uma das sequências. A pesquisa nessa banco pode retornar várias sequências depositadas por diferentes pesquisadores.

Podemos selecionar as sequências desejadas e baixar para analisar mutaçoes, diversidade, presença de regiões conservadas.

A busca pelo termo TLR9 no banco nucleotide retorna 3258 entradas (Busca realizada 26/01/17).

A descrição **"partial cds"** significa que a sequência do gene não está completa, o pesquisador que depositou não obteve a sequências completa e submeteu somente uma parte do gene. A descrição "**complete cds**" significa que foi depositado a sequência completa do gene. CDS significa a região codificante do gene.

Vamos observar a entrada 33 dessa busca.

Homo sapiens toll like receptor 9 (TLR9), mRNA

NCBI Reference Sequence: NM_017442.3

FASTA Graphics

Go to:

```
LOCUS       NM_017442               3922 bp    mRNA    linear   PRI 06-OCT-2016
DEFINITION  Homo sapiens toll like receptor 9 (TLR9), mRNA.
ACCESSION   NM_017442
VERSION     NM_017442.3
KEYWORDS    RefSeq.
SOURCE      Homo sapiens (human)
  ORGANISM  Homo sapiens
            Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi;
            Mammalia; Eutheria; Euarchontoglires; Primates; Haplorrhini;
            Catarrhini; Hominidae; Homo.
REFERENCE   1  (bases 1 to 3922)
  AUTHORS   Newman ZR, Young JM, Ingolia NT and Barton GM.
  TITLE     Differences in codon bias and GC content contribute to the balanced
            expression of TLR7 and TLR9
  JOURNAL   Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 113 (10), E1362-E1371 (2016)
   PUBMED   26903634
  REMARK    GeneRIF: Data show that differences in codon bias limit Toll-like
            receptor 7 (TLR7) expression relative to Toll-like receptor 9
            (TLR9).
```

Figura. Informações iniciais sobre a entrada número 33 após a busca usando o termo TLR9.

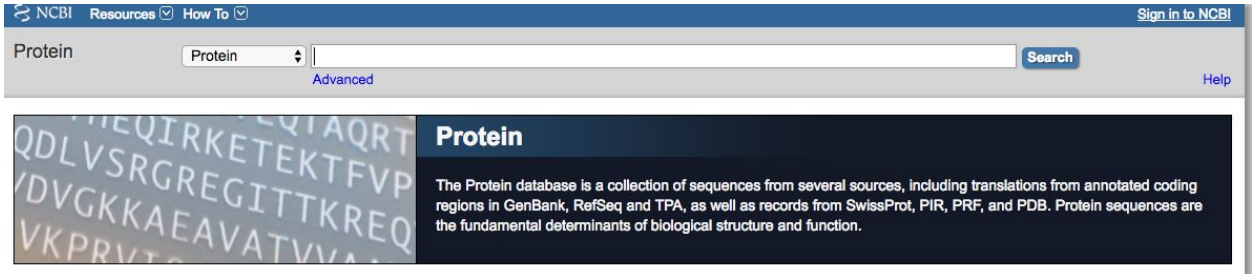
```
2697-3922           BC032713.1          2159-3384
FEATURES             Location/Qualifiers
     source          1..3922
                     /organism="Homo sapiens"
                     /mol_type="mRNA"
                     /db_xref="taxon:9606"
                     /chromosome="3"
                     /map="3p21.2"
     gene            1..3922
                     /gene="TLR9"
                     /gene_synonym="CD289"
                     /note="toll like receptor 9"
                     /db_xref="GeneID:54106"
                     /db_xref="HGNC:HGNC:15633"
                     /db_xref="HPRD:05685"
                     /db_xref="MIM:605474"
     exon            1..637
                     /gene="TLR9"
                     /gene_synonym="CD289"
                     /inference="alignment:Splign:1.39.8"
     misc_feature    563..565
                     /gene="TLR9"
                     /gene_synonym="CD289"
                     /note="upstream in-frame stop codon"
     CDS             635..3733
                     /gene="TLR9"
                     /gene_synonym="CD289"
                     /codon_start=1
                     /product="toll-like receptor 9 precursor"
                     /protein_id="NP_059138.1"
                     /db_xref="CCDS:CCDS2848.1"
                     /db_xref="GeneID:54106"
                     /db_xref="HGNC:HGNC:15633"
                     /db_xref="HPRD:05685"
                     /db_xref="MIM:605474"
                     /translation="MGFCRSALHPLSLLVQAIMLAMTLALGTLPAFLPCELQPHGLVN
                     CNWLFLKSVPHFSMAAPRGNVTSLSLSSNRIHHLHDSDFAHLPSLRHLNLKWNCPPVG
```

Figura. Informações sobre as caracteristicas já descritas para essa sequência.

Observem que mesmo dentro do banco Nucleotide nós temos acesso a sequência de proteína codificada por esse gene. Dentro da "Feature"/"CDS"/"translation".

O formato GenBank guarda toda a informação sobre as proteínas depositadas no banco Nucleotide do NCBI.

Protein/NCBI



https://www.ncbi.nlm.nih.gov/protein

O banco Protein armazena sequências de proteínas e sequências que foram traduzidas automaticamente de sequências nucleotídicas codificadoras. O banco também traz informações associadas a cada uma das sequências. A pesquisa nessa banco pode retornar várias sequências depositadas por diferentes pesquisadores.

Podemos selecionar as sequências desejadas e baixar para analisar alterações na sequência de proteína, diversidade, presença de regiões conservadas.

A busca pelo termo TLR9 retorna 8 entradas (Busca realizada 26/01/17).

O termo "partial"significa que a sequências da proteína não está completa.

Vamos observar as informação da entrada 20 da busca realizada com o termo TLR9.

GenPept

TLR9 [Homo sapiens]

GenBank: AAZ95520.1

Identical Proteins FASTA Graphics

Go to:

```
LOCUS       AAZ95520               1032 aa            linear   PRI 25-NOV-2009
DEFINITION  TLR9 [Homo sapiens].
ACCESSION   AAZ95520
VERSION     AAZ95520.1
DBSOURCE    accession DQ019999.1
KEYWORDS    .
SOURCE      Homo sapiens (human)
  ORGANISM  Homo sapiens
            Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi;
            Mammalia; Eutheria; Euarchontoglires; Primates; Haplorrhini;
            Catarrhini; Hominidae; Homo.
REFERENCE   1  (residues 1 to 1032)
  AUTHORS   Georgel,P., Macquin,C. and Bahram,S.
  TITLE     The heterogeneous allelic repertoire of human toll-like receptor
            (TLR) genes
  JOURNAL   PLoS ONE 4 (11), E7803 (2009)
   PUBMED   19924287
  REMARK    Publication Status: Online-Only
```

Figura. Informações sobre a entrada 20 da busca TLR9.

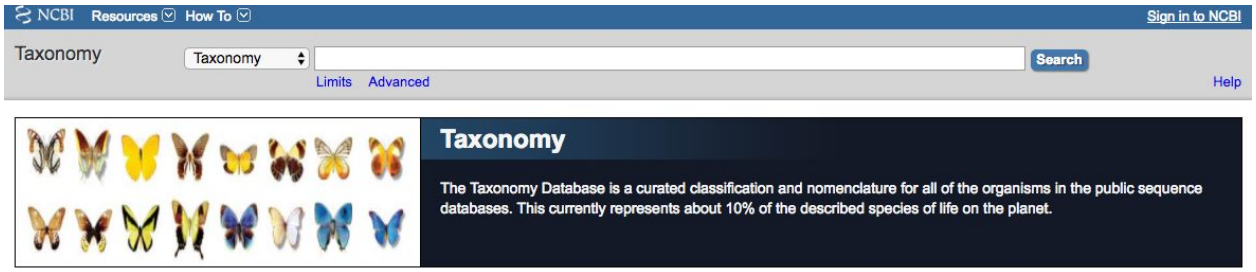
```
FEATURES             Location/Qualifiers
     source          1..1032
                     /organism="Homo sapiens"
                     /db_xref="taxon:9606"
                     /chromosome="3"
                     /map="3p21.3"
     Protein         1..1032
                     /product="TLR9"
     Region          43..64
                     /region_name="leucine-rich repeat"
                     /note="leucine-rich repeat [structural motif]"
                     /db_xref="CDD:275380"
     Region          64..135
                     /region_name="LRR_8"
                     /note="Leucine rich repeat; pfam13855"
                     /db_xref="CDD:290566"
     Region          65..88
                     /region_name="leucine-rich repeat"
                     /note="leucine-rich repeat [structural motif]"
                     /db_xref="CDD:275380"
     Region          89..124
                     /region_name="leucine-rich repeat"
                     /note="leucine-rich repeat [structural motif]"
                     /db_xref="CDD:275380"
```

Figura. Features da entrada 20 da busca por TLR9.

No final da entrada encontramos a sequência da proteína.

O formato GenPept guarda toda a informação sobre as proteínas depositadas no banco **Proteins** do NCBI.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
Instituto Multidisciplinar em Saúde
Campus Anísio Teixeira



Taxonomy/NCBI
https://www.ncbi.nlm.nih.gov/taxonomy

Banco de dados com informações sobre a classificação taxonômica das espécies. Esse banco de dados apresenta somente informações taxonômicas de espécies que têm informações moleculares depositadas no NCBI.

Informações sobre a espécie *Homo sapiens* no banco de dados Taxonomy.

Homo sapiens

Taxonomy ID: 9606
Genbank common name: **human**
Inherited blast name: **primates**
Rank: species
Genetic code: Translation table 1 (Standard)
Mitochondrial genetic code: Translation table 2 (Vertebrate Mitochondrial)
Other names:

synonym:	**humans**
common name:	**man**
authority:	**Homo sapiens Linnaeus, 1758**

Lineage(full)
cellular organisms; Eukaryota; Opisthokonta; Metazoa; Eumetazoa; Bilateria; Deuterostomia; Chordata; Craniata; Vertebrata; Gnathostomata; Teleostomi; Euteleostomi; Sarcopterygii; Dipnotetrapodomorpha; Tetrapoda; Amniota; Mammalia; Theria; Eutheria; Boreoeutheria; Euarchontoglires; Primates; Haplorrhini; Simiiformes; Catarrhini; Hominoidea; Hominidae; Homininae; Homo

A classificação apresenta quantitativo de dados em outros banco de dados com links para essas informações na tabela "Entrez records".

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
Instituto Multidisciplinar em Saúde
Campus Anísio Teixeira

Entrez records		
Database name	Subtree links	Direct links
Nucleotide	14,112,440	14,112,396
Nucleotide EST	8,705,106	8,705,106
Nucleotide GSS	1,762,817	1,761,491
Protein	1,069,030	1,068,738
Structure	33,029	33,029
Genome	1	1
Popset	23,505	23,504
SNP	165,297,523	165,297,523
Domains	24	24
GEO Datasets	1,244,816	1,244,816
UniGene	130,056	130,056
PubMed Central	553,832	553,829
Gene	219,667	219,594
HomoloGene	18,713	18,713
SRA Experiments	742,541	742,319
Probe	27,382,435	27,382,435
Assembly	90	90
Bio Project	32,438	32,427
Bio Sample	2,516,813	2,516,682
Bio Systems	3,070	3,070
Clone DB	17,567,413	17,567,413

dbVar	5,064,734	5,064,734
GEO Profiles	61,958,910	61,958,910
PubChem BioAssay	311,510	311,502
Protein Clusters	13	13
Taxonomy	3	1

Ainda podemos encontrar informações sobre projetos genomas e outros links para bancos taxonômicos nessa página.

Veja as informações que você pode encontrar para outras espécies.

Mus musculus

Taxonomy ID: 10090
Genbank common name: house mouse
Inherited blast name: rodents

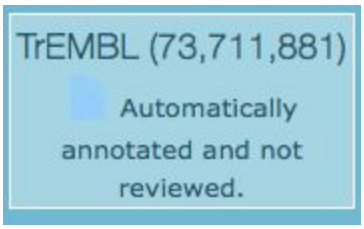
Arabidopsis thaliana

Taxonomy ID: 3702
Genbank common name: thale cress

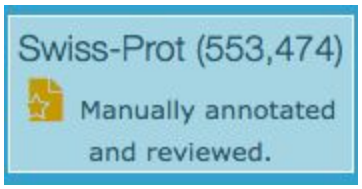
Uniprot

http://www.uniprot.org

O uniprot fornece informações e sequências sobre proteínas. As sequências e informações funcionais das proteínas podem vir de projetos genomas (sequências codificantes) ou podem ser depositadas por curadores do UniProt. Isso cria duas divisões dentro do Uniprot, o "**UniProtKB/TrEMBL**" e o "**UniProtKB/Swiss-Prot**". As entradas do Uniprot apresentam número de acesso alfanumérico, exemplo Q9NR96.



O TrEMBL são proteínas que foram adicionadas no Uniprot de forma automática e não passou por um processo de revisão dos curadores (Status **Unreviewed**). Essas informações devem ser usadas com mais cuidado.



O Swiss-Prot tem um crescimento lento porque todas as sequências que estão nessa subdivisão passaram pela anotação manual e revisão de um curador (Status **Reviewed**). Essas informações são confiáveis. As entradas trazem informações sobre resultados experimentais, características e conclusões científicas.

Informações
Protein
Gene
Organism
Status (**Reviewed** ou **Unreviewed**)
- Annotation score:
-**"Experimental evidence at protein level"** ou **"Protein predicted"**

Function
GO - Molecular function
GO - Biological process

Subcellular location

Pesquisem sobre TLR9 no uniprot e vejam as informações que vocês podem encontrar. Entrem no primeiro resultado (TLR(humano - Acesso Q9NR96).

IMS/CAT-UFBA - Rua Rio de Contas, 58 – Quadra 17 – Lote 58 – Bairro Candeias
Vitória da Conquista – BA - CEP 45.029-094/ Fone: (77) 3429 2714. E-mail: leandromartins@ufba.br

Protein Data Bank

www.rcsb.org

Banco de dados que armazena informações sobre estrutura tridimensional das proteínas. Nessa banco são armazendas estruturas das proteínas que foram avaliadas por cristalografia Raio-X, Espectroscopia por ressonância magnética nuclear (NMR).
Atualmente existem 126278 estruturas depositadas no PDB.

IMS/CAT-UFBA - Rua Rio de Contas, 58 – Quadra 17 – Lote 58 – Bairro Candeias
Vitória da Conquista – BA - CEP 45.029-094/ Fone: (77) 3429 2714. E-mail: leandromartins@ufba.br