Bioinformatika III

Trimačių struktūrų analizė ir spėjimas

Paskaita 3 – struktūrinių failų formatai (CIF)

Saulius Gražulis
2021 m.

CIF ir mmCIF formatas

- ASCII (CIF 3: UTF-8) koduotės failai
- Laisvo formato sintaksė
- Duomenys žymimi raktiniais žodžiais, bet įrašai nėra suskirstyti eilutėmis
- Reliacinis duomenų modelis
- Duomenų raktiniai žodžiai ir jų semantika aprašyti CIF žodynuose (CIF dictionaries)

http://www.iucr.org/iucr-top/cif/standard/cifstd1.html
http://www.iucr.org/iucr-top/cif/spec/version1.1/cifsyntax.html

CIF failo pavyzdys

```
data_1KNV
#
_entry.id   1KNV
#
_audit_conform.dict_name       mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version    1.044
...
_cell.entry_id           1KNV
_cell.length_a           121.230
_cell.length_b           122.280
_cell.length_c           56.870
_cell.angle_alpha        90.00
_cell.angle_beta         90.00
_cell.angle_gamma        90.00
...
loop_
_atom_site.group_PDB
_atom_site.id
_atom_site.type_symbol
...
ATOM   1    N  N   . ASN A 1 4   ? 3.407  40.303 50.109  1.00 66.19 ? ? ? ? ? 4    ASN A N   1
ATOM   2    C  CA  .
ASN A 1 4   ?  4.752
              40.029 49.523  1.00 67.25 ? ? ? ? ? 4    ASN A CA  1
```

Kalbos

Matematikoje, *kalba* L vadinama pora (A, $W \subset A^*$), kur:

A yra *baigtinis* alfabetas (t.y. baigtinis simbolių rinkinys),

A^* yra (begalinė) visų galimų *baigtinių* simbolių eilučių iš A aibė,

W yra A^* poaibis.

Gramatikos

Gramatikos pavyzdys:

$$R \to S \mid S + R \mid S - R$$
$$S \to D \mid D \times S \mid D / S$$
$$D \to V \mid (R)$$
$$V \to a \mid b \mid c$$

Teisingas sakinys:

$$(a + b) / (a - b \times b / c)$$

Neteisingas sakinys:

$$((a)(+-b) / (()a - b\,bbcdef \times b / c)$$

Bekaus-Nauro forma
(*angl.* Backus–Naur Form (BNF))

```
<reiškinys> ::= <sandauga>
              | <sandauga> + <reiškinys>
              | <sandauga> - <reiškinys>

<sandauga>  ::= <daugiklis>
              | <daugiklis> * <sandauga>
              | <daugiklis> / <sandauga>

<daugiklis> ::= <vardas> | ( <reiškinys> )

<vadas> ::= a | b | c
```

CIF failo sintaksė, STAR formatas

Gramatika Bekuso-Nauro (Backus-Naur) forma:

```
...
<data_block>   ::= <data_heading> <data>+ { <wspace>+ | <EOF> }
<data_heading> ::= <DATA_> <non_blank_char>+
<data>         ::= { <wspace>+ <data_name> <wspace>* <blank>
                     <data_value_1> }
                 | { <wspace>+ <data_name> <wspace>* <terminate>
                     <data_value_2> }
                 | <data_loop>

<data_loop>    ::= <wspace>+ <LOOP_> <data_loop_field> <data_loop_values>

<data_loop_field>   ::= { <wspace>+ <data_name> }+
<data_name>         ::= '_' <non_blank_char>+
<data_loop_values>  ::= { { <wspace>* <blank> <data_value_1> }
                        | { <wspace>* <terminate> <data_value_2> } }+
...
```

CIF 1: http://ww1.iucr.org/iucr-top/cif/spec/version1.1/cifsyntax.html#gram
CIF 2: Bernstein 2016 https://doi.org/10.1107/s160057671502187l
CIF 2 gramatika: https://journals.iucr.org/j/issues/2016/01/00/aj5269/aj5269sup1.txt
GitHub: https://github.com/COMCIFS

CIF failo sintaksės ypatumai

```
# Komentarai prasideda "groteliu" (#) simboliu
# Leistini tik ASCII simboliai, todel tenka rasyti "sveplai"

data_DataName
_tag1 value
_tag2 1.23(3)
_tag3 'eilutes su tarpais turi buti viengubose kabutese'
_tag4 "arba dvigubose kabutese"
_tag5 'zodis d'Alamber (su kabute-apostrofu) gali buti kabuciu vidury (!)'
_tag5a
'reiksme gali buti bet kur, net ir kitoje eiluteje'

loop_
_tag6 # duomenu zymiu isdestymas eilutes bet koks
_tag7 _tag8
123 456 789
111 222
333

DaTa_NextDataName # pagal gramatika, data_ neskiria didziuju ir mazuju
_tag1 123 # duom. zymes unikalios data_ bloke, bet skirtinguose
          # blokuose gali kartotis

# pabaigoje jokios zymes
```

CIF failo semantika, CIF žodynai

Ką reiškia '_atom_site_label'? Koks žymuo (tag) naudojamas koordinatėms?

```
data_atom_site_fract_
    loop_ _name                  '_atom_site_fract_x'
                                 '_atom_site_fract_y'
                                 '_atom_site_fract_z'
    _category                     atom_site
    _type                         numb
...
    _list_reference              '_atom_site_label'
    _definition
;               Atom-site coordinates as fractions of the _cell_length_ values.
;

data_atom_site_label
    _name                        '_atom_site_label'
    _category                     atom_site
    _type                         char
...
_definition
;               The _atom_site_label is a unique identifier for a particular site
                in the crystal.
...
```

cif_core_2.3.1.dic from ftp://ftp.iucr.ac.uk/pub/

CIF “žodynų žodynai”, DDL

Ką reiškia '_name'? Koks žymuo nurodo duomenų tipą?

```
data_name
    _definition
;               The data name(s) of the defined item(s). If data items are
                closely related or represent an irreducible set, their names
                may be declared as a looped sequence in the same definition.
;
    _name                       '_name'
    _category                     name
    _type                         char
    _list                         both
    loop_ _example              '_atom_site_label'
                                '_atom_attach_all   _atom_attach_ring'
```

ddl_core_1.4.1.dic from ftp://ftp.iucr.ac.uk/pub/

mmCIF, DDL2 žodynas

- Standartinis CIF žodynas neturėjo mechanizmų makromolekulių struktūroms užrašyti
- PDB sukūrė naują mmCIF (macromolecular CIF) žodyną, pritaikytą biologinėms makromolekulėms

(mm)CIF formato privalumai

- ASCII tekstas, įskaitomas tiek žmogui, tiek mašinai
- Griežtai apibrėžta sintaksė
- Semantinė informacija kaupiama to paties formato žodynuose
- Tinka visiems struktūrinės informacijos tipams
- Numatyta standartinė galimybė įvesti naujus duomenų laukus

(mm)CIF formato trūkumai

Sudėtinga gramatika

Daugelį dažnai pasitaikančių klaidų sunku griežtai lokalizuoti ar net aptikti, ypač lentelėse ('loop_' loops)

Skaitymas reikalauja sudėtingo specializuoto sintaksinio analizatoriaus

Kai kurie semantiniai aspektai iki šiol nepakankamai griežtai aprašyti

Silpnas daugianacionalinių simbolių palaikymas, nepalaikomas UTF-8

Pradinis CIF formatas netinka makromolekulėms, reikalingas dar sudėtingesnis mmCIF formato variantas (žodynas)

Dėl didelio variantų skaičiaus skaitančios programos yra sudėtingos, ir ne visi *teisingi* CIF failai bus skaitomi visų programų

PDB XML schema

mmCIF žodynus galima paversti 1:1 į XML schemą

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" ?>
<PDBx:datablock  datablockName="1KNV"
        xmlns:PDBx="http://deposit.pdb.org/pdbML/pdbx.xsd"
        xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
        xsi:schemaLocation="http://deposit.pdb.org/pdbML/pdbx.xsd pdbx.xsd">
...
  <PDBx:atom_siteCategory>
    <PDBx:atom_site id="1">
      <PDBx:group_PDB>ATOM</PDBx:group_PDB>
      <PDBx:type_symbol>N</PDBx:type_symbol>
      <PDBx:label_atom_id>N</PDBx:label_atom_id>
      <PDBx:label_alt_id xsi:nil="true" />
      <PDBx:label_comp_id>ASN</PDBx:label_comp_id>
      <PDBx:label_asym_id>A</PDBx:label_asym_id>
      <PDBx:label_entity_id>1</PDBx:label_entity_id>
      <PDBx:label_seq_id>4</PDBx:label_seq_id>
      <PDBx:Cartn_x>3.407</PDBx:Cartn_x>
      <PDBx:Cartn_y>40.303</PDBx:Cartn_y>
      <PDBx:Cartn_z>50.109</PDBx:Cartn_z>
...
```

Ontologijos ir semantiniai tinklai

- Ontologija (Graikiškai ων „būtis“, λόγος „žodis“ ar „kalba“) — filosofijos skyrius, /.../ Pagrindinis ontologijos klausimas — „Kas egzistuoja?“
- Ontologija — kompiuterijoje šiuo termino daugiskaitine forma „ontologijos“ ... vadinamas tam tikros srities sąvokų visumos specifikavimas išreikštu pavidalu.

https://en.wikipedia.org/wiki/Ontology
https://en.wikipedia.org/wiki/Ontology_(information_science)
http://lt.wikipedia.org/wiki/Ontologija
http://lt.wikipedia.org/wiki/Ontologija_(informatika)

Kaip turėtų atrodyti „idealus“ formatas?

Tekstinis, ASCII -> UTF8

Įrašas <=> eilutė

Laukai atskirti tarpais

Raktiniai žodžiai nurodo įrašą

Fiksuoti įrašų laukai ir tipai?

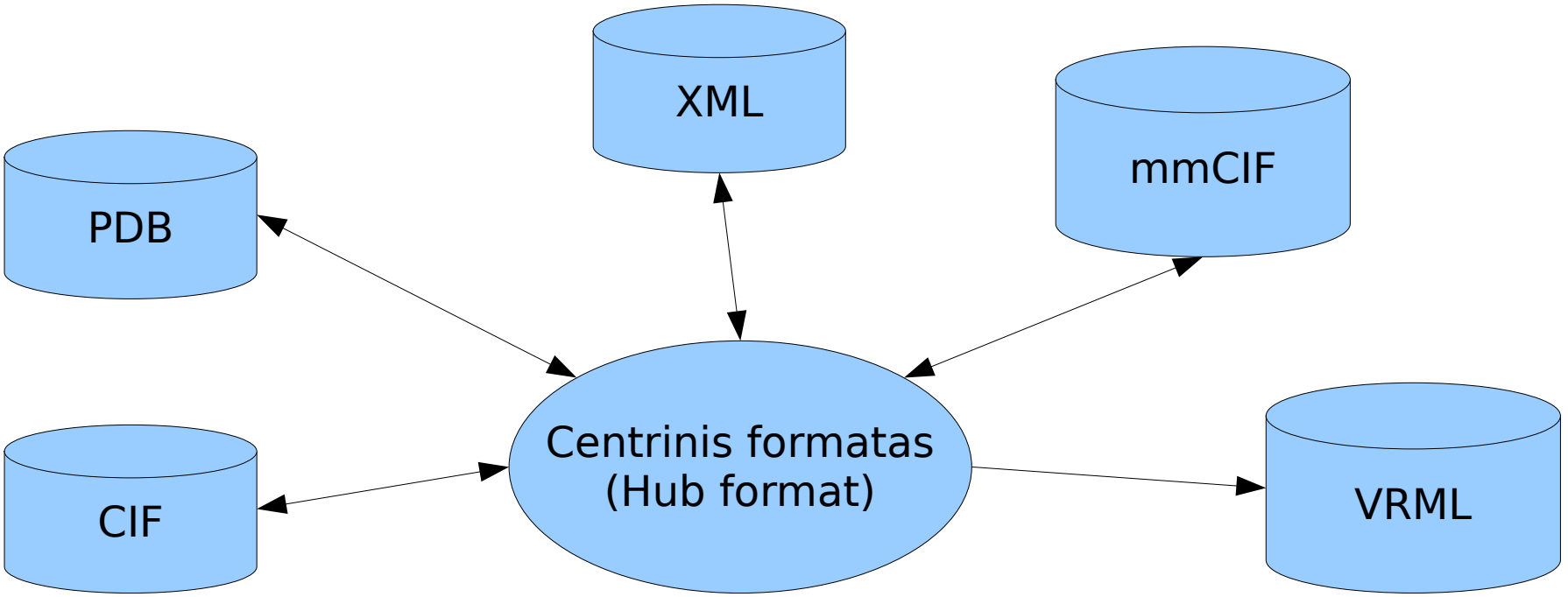
Jokių dydžio apribojimų!

„Idealaus“ formato pavyzdys...

```
FORMAT My ideal macromolecular data format ver. 0.0
#
# Komentarai gali būti skirti žmogui
#
TITLE   Restrikcijos endonukleazės struktūra
AUTHORS Saulius Gražulis; Elena Manakova (Манакова, Елена)
CELL    100.0 100.0 100.0 100.0 90 90 90
SPACEGROUP P212121
#
ATOM N  ASN A 4  3.407(1)  40.303(2)  50.109(11) 1.00 66.19  N
ATOM CA ASN A 4  4.752     40.029     49.523     1.00 67.25  C
...
```

Galimi „nuosavo“ formato panaudojimai

„Centriniai“ formatai (Hub formats)



Sėkmingo Hub-formato pavyzdys: netpbm http://netpbm.sourceforge.net/