TP2 : manipulation relationnelle (SQL)

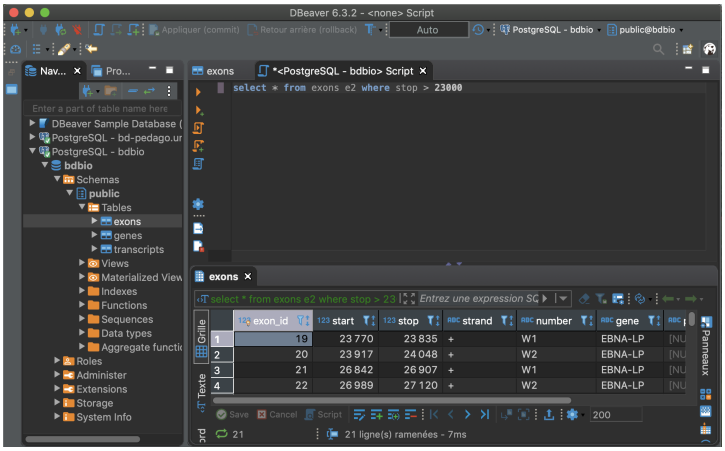
UCBL - Base de données pour la bioinformatique - 2023 / 2024

Objectif du TP : écrire des requêtes SQL sur une BD relationnelle

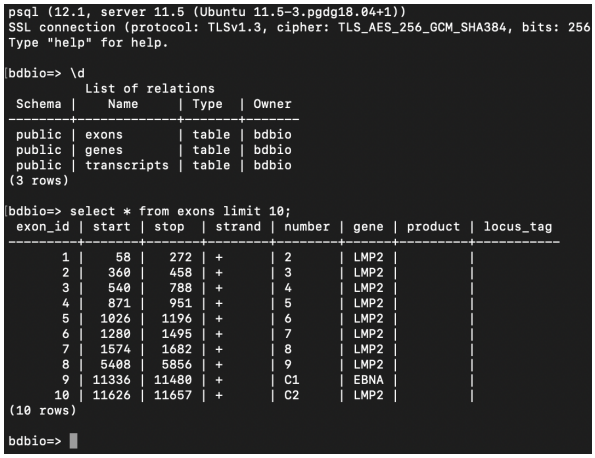
1 Préparation de l'environnement

Nous utiliserons le SGBD PostgreSQL, disponible sur le serveur *bd-pedago*[1]. Pour interagir avec ce serveur, nous conseillons l'utilisation de l'un des outils suivants (libres et multi-plateformes) :

- DBeaver est une interface graphique (Java) pour différents SGBD (dont SQLite et PostgreSQL). Disponible sur les machines du campus via le menu du système d'exploitation ;
- pgAdmin est l'interface graphique (web) de PostgreSQL. Normalement disponible sur les machines du campus ;
- psql est l'interface en ligne de commande de PostgreSQL.



Capture d'écran de DBeaver



Capture d'écran de psql

Pour les **outils graphiques**, il faut créer une nouvelle connexion avec les paramètres suivants :

- Serveur : `bd-pedago.univ-lyon1.fr`
- Base de données : `p1234567` (à remplacer par votre numéro étudiant)
- Utilisateur : `p1234567` (à remplacer par votre numéro étudiant)
- Mot de passe : voir suivi Tomuss BDBIO, case *mdp_BDBIO*

Pour l'**outil psql** en ligne de commande, il faut valider la commande suivante dans un terminal, puis saisir le mot de passe demandé (voir suivi Tomuss BDBIO, case *mdp_BDBIO*).

```
psql -h bd-pedago.univ-lyon1.fr -U p1234567
```

Il est également possible de travailler localement, en installant le SGBD PostgreSQL directement sur votre machine et en y important le jeu de données (voir section suivante).

[1] Plus de détails sur la documentation du serveur bd-pedago.

2 Création du jeu de données

Commencez par télécharger le script PostgreSQL.
Le jeu de données représente les concepts de gènes, exons et transcripts utilisés en bio-informatique. Il provient à l'origine d'un fichier au format GenBank[2], qui a été converti en SQL.

Copiez-coller le script SQL et exécutez-le dans l'éditeur SQL de votre outil, ou directement au niveau du *prompt* de psql[3]. Vous devez obtenir 152 gènes, 39 exons et 95 transcripts.

Schéma relationnel de la base de données :

GÈNES	(gene_id, *start*, *stop*, *strand*, *gene*, *GeneID*, *locus_tag*, *gene_synonym*)
EXONS	(exon_id, *start*, *stop*, *strand*, *number*, #*gene*, *product*, *locus_tag*)
TRANSCRIPTS	(CDS_id, *start*, *stop*, *strand*, *codon_start*, *protein_id*, *product*, #*gene*, *translation*, *UniProtKBSwissProt*, *InterPro*, *GOA*, *GI*, *PDB*, *GeneID*, *locus_tag*, *note*, *UniProtKBTrEMBL*, *function*)

Questions sur la modélisation :

1. Quel problème y a t-il dans cette base de données, en particulier au niveau des clés étrangères ?
2. Cette base de données est-elle en troisième forme normale ?

3 Exécution de requêtes SQL

Pour écrire des requêtes SQL, vous devez lancer l'éditeur SQL de l'outil, ou directement dans la console sur psql. Il est conseillé d'écrire les requêtes dans un fichier texte (sauvegarde) et de les copier-coller dans l'outil.
Documentations : SQL sur PostgreSQL, DBeaver, pgAdmin, SQL.sh.

Traduire les requêtes suivantes en SQL :

1. Nom des protéines de la table transcripts, que l'on obtient avec la requête `SELECT product FROM Transcripts`. Pourquoi obtient-on des doublons ? Modifiez la requête pour obtenir 84 tuples.
2. Informations sur les gènes. Les attributs *start, stop et strand* seront concaténés et séparés par des virgules au sein d'un seul attribut nommé *coords* (152 tuples résultat).
3. Informations sur les gènes qui possèdent un locus_tag. Le résultat sera ordonné par nom de gène décroissant (45 tuples résultat)
4. Identifiant des transcripts qui codent pour une protéine dont l'existence est supposée, i.e. contenant *hypothetical*. L'identifiant (le gene_id de GENES) et le nom du gène associés à ce transcript seront également donnés (65 tuples résultat)
5. Identifiant des transcripts dont le locus_tag est celui d'un gène (45 tuples résultat)
6. Nom des gènes dont le locus_tag contient un *P* ou qui sont associés à un exon codant pour une protéine (5 tuples résultat)
7. Nombre de transcripts appartenant au même gène. Les résultats seront ordonnés par nombre décroissant (85 tuples résultat)
8. Noms des gènes qui ont au moins deux *geneid* différents. On affichera aussi ce nombre de *geneid* (34 tuples résultat)
9. Longueurs minimale et maximale des translations, mais uniquement pour les transcripts dont le gène est également associé à un exon (1 tuple résultat : 378 et 944)
10. Identifiant et locus_tag des paires de transcripts qui possèdent le même complément / *strand* et dont les locus_tags sont celui d'un gène commençant par *BALF* (1 tuple résultat)

[2]Génome EBV de GenBank, http://www.ncbi.nlm.nih.gov/nuccore/NC_007605.1
[3]Sur psql, ne pas oublier le point-virgule en fin de requête. Tapez `\?` pour la liste des commandes.