# Создание веб-бота для автоматизации формирования запросов к порталу IMGT / V-quest

Участники: Золотарев Андрей Владимирович, Чеблоков Александр Александрович

Руководитель: Бакин Евгений Александрович

# Цель проекта

Существует большое множество различных веб-сайтов, предоставляющих возможность работы с интегрированными инструментами(BLAST, pfam, uniprot, phytozome).

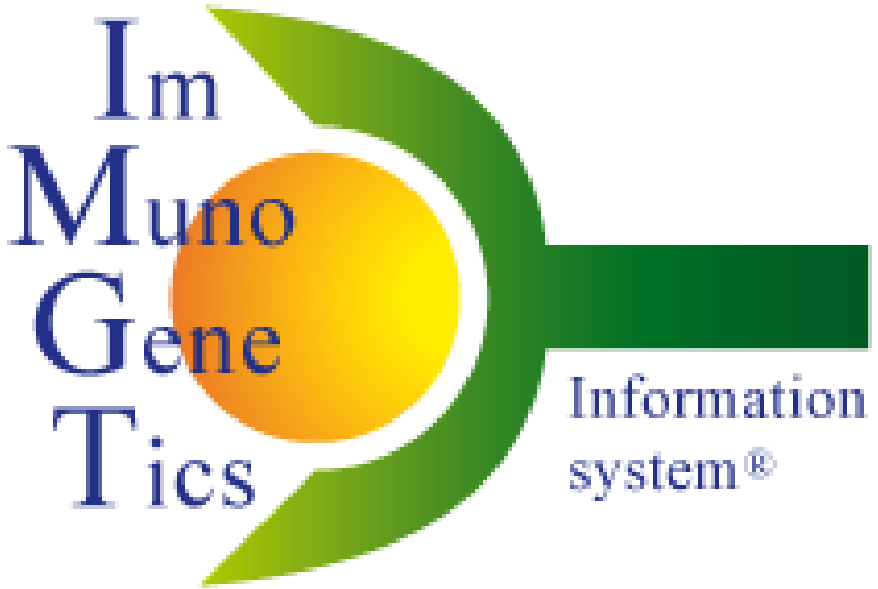
Проблемы:

- Ограничение по объему вводимых данных
- Рутинная настройка многочисленных опций

Целью проекта стала автоматизация запросов для одного из таких инструментов, а именно IMGT / V-quest.

# IMGT

IMGT®, (the international ImMunoGeneTics information system®) - это высококачественный источник знаний по иммуногенетике и иммуноинформатике



# IMGT / V-quest

IMGT / V-QUEST это интегрированный инструмент выравнивания для нуклеотидных последовательностей иммуноглобулинов и рецепторов Т-клеток.

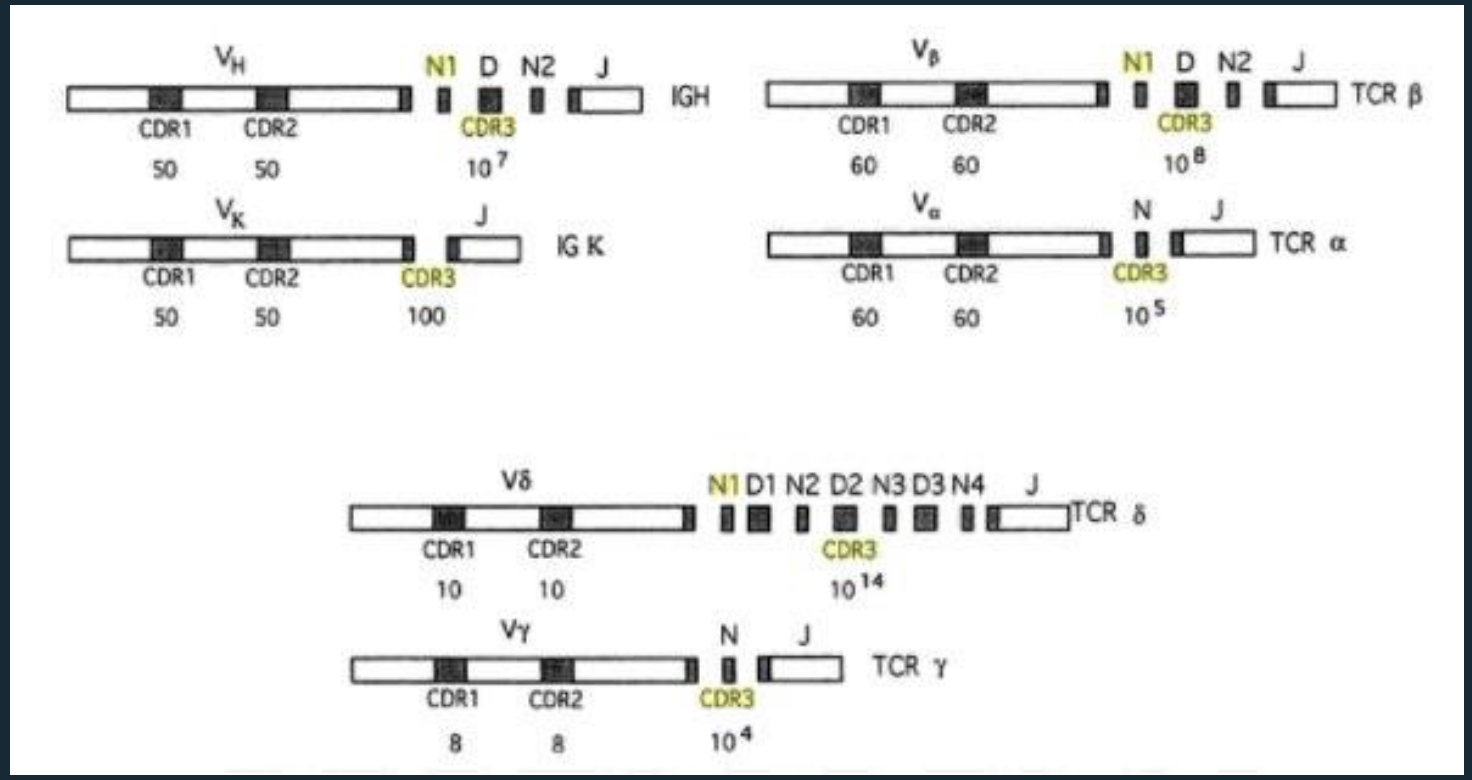



Рис. 1. Гены иммуноглобулинов с отмеченными зонами

## Для формирования запроса необходимо:

1. Выбрать вид
2. Выбрать тип рецептора или локус
3. Ввести последовательности (не более 50 штук) в формате FASTA
4. Выбрать формат отчета
5. Выбрать другие опции отчета

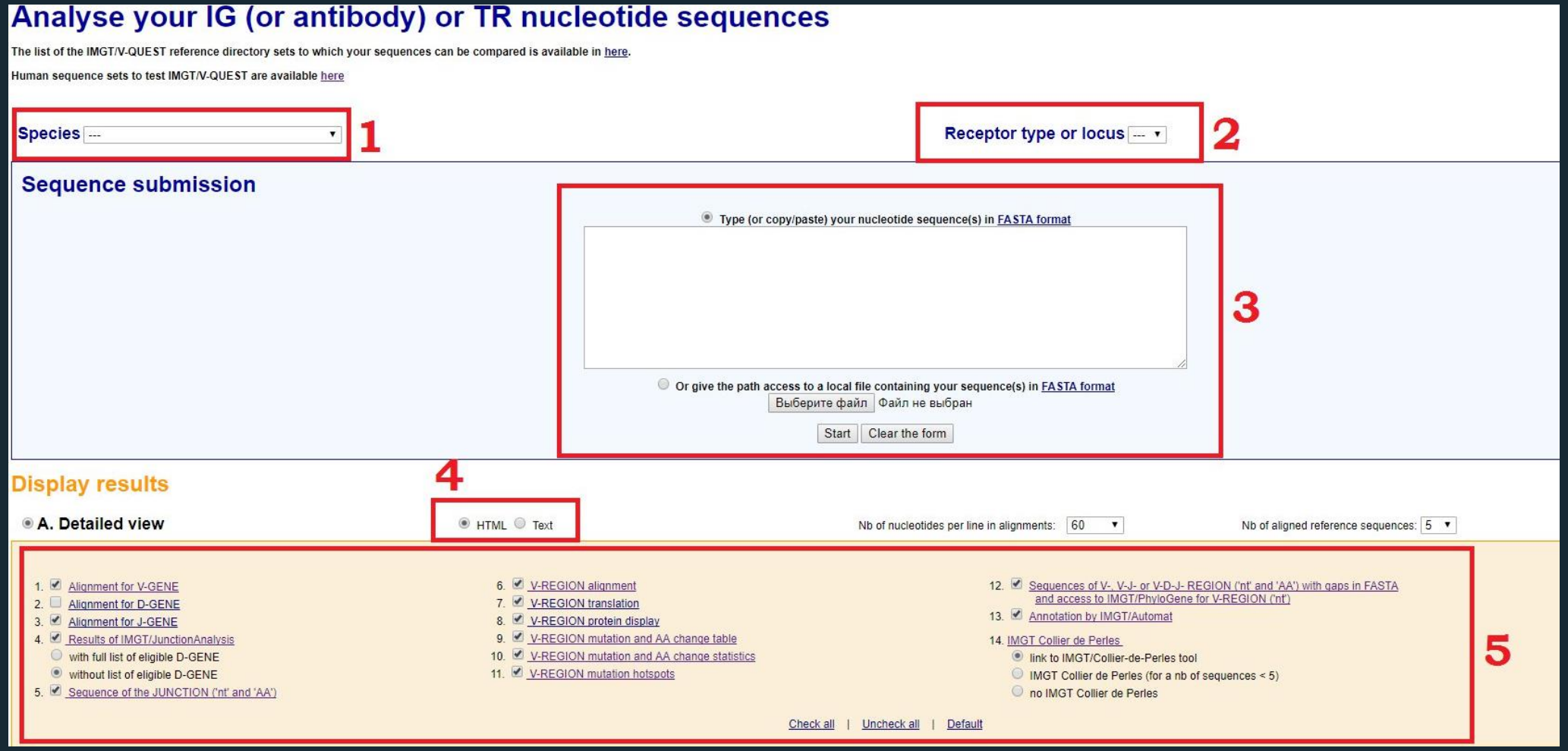



Рис. 2. Окно ввода данных для инструмента IMGT / V-QUEST

# Вывод IMGT / V-quest

```
13. Annotation by IMGT/Automat
        Label           Location/Qualifiers
V-D-J-REGION            1..355
                        /CDR_length="[8.8.11]"
                        /FR_length="[25.17.38.11]"
                        /nucleotide sequence
                        gaggtgcagctgttggagtctgggggaggcgtggtccagcctgggaggtccctgagactc
                        tcctgtatagcctctggattcaccttcagtagctatcctatgacctgggtccgccaggct
                        ccaggcaaggggctggagtgggtggcaagtatatcatatgacggaagttataaatataag
                        gtagactccatgaagggccgactcaccatctccagagacaattccaagaacacgctgtat
                        ttggaaatgaacagcctgacagctgaggacacggctgtgtattactgtgcgaggacagct
                        ttctttaacgcctatgacttctggggccagggaaccctggtcaccgtctcctcag
                        /translation
                        EVQLLESGGGVVQPGRSLRLSCIASGFTFSSYPMTWVRQAPGKGLEWVASISYDGSYKYK
                        VDSMKGRLTISRDNSKNTLYLEMNSLTAEDTAVYYCARTAFFNAYDFWGQGTLVTVSS
V-REGION                1..293
                        /allele="Homsap IGHV3-30*04 F or Homsap IGHV3-30-3*03 F"
                        /gene="Homsap IGHV3-30 or Homsap IGHV3-30-3"
                        /nucleotide sequence
                        gaggtgcagctgttggagtctgggggaggcgtggtccagcctgggaggtccctgagactc
                        tcctgtatagcctctggattcaccttcagtagctatcctatgacctgggtccgccaggct
                        ccaggcaaggggctggagtgggtggcaagtatatcatatgacggaagttataaatataag
                        gtagactccatgaagggccgactcaccatctccagagacaattccaagaacacgctgtat
                        ttggaaatgaacagcctgacagctgaggacacggctgtgtattactgtgcgag
                        /translation
                        EVQLLESGGGVVQPGRSLRLSCIASGFTFSSYPMTWVRQAPGKGLEWVASISYDGSYKYK
                        VDSMKGRLTISRDNSKNTLYLEMNSLTAEDTAVYYCA
FR1-IMGT                1..75
                        /AA_IMGT="AA 1 to 26, AA 10 is missing"
                        /nucleotide sequence
                        gaggtgcagctgttggagtctgggggaggcgtggtccagcctgggaggtccctgagactc
                        tcctgtatagcctct
                        /translation
                        EVQLLESGGGVVQPGRSLRLSCIAS
1st-CYS                 64..66
                        /nucleotide sequence
                        tgt
                        /translation
                        C
CDR1-IMGT               76..99
                        /AA_IMGT="AA 27 to 38, AA 31, 32, 33, 34 are  missing"
                        /nucleotide sequence
                        ggattcaccttcagtagctatcct
                        /translation
                        GFTFSSYP
FR2-IMGT                100..150
                        /AA_IMGT="AA 39 to 55"
                        /nucleotide sequence
                        atgacctgggtccgccaggctccaggcaaggggctggagtgggtggcaagt
                        /translation
                        MTWVRQAPGKGLEWVAS
CDR3-IMGT               289..321
                        /AA_IMGT="AA 105 to 117, AA 111, 112 are missing"
                        /nucleotide sequence
                        gcgaggacagctttctttaacgcctatgacttc
                        /translation
                        ARTAFFNAYDF
JUNCTION                286..324
                        /in_frame
                        /nucleotide sequence
                        tgtgcgaggacagctttctttaacgcctatgacttctgg
                        /translation
                        CARTAFFNAYDFW
3'V-REGION              286..293
                        /nucleotide sequence
                        tgtgcgag
                        /translation
                        CA
(N-D)-J-REGION          294..355
                        /codon_start=2
                        /nucleotide sequence
                        gacagctttctttaacgcctatgacttctggggccagggaaccctggtcaccgtctcctc
                        ag
                        /translation
                        TAFFNAYDFWGQGTLVTVSS
(N-D)-REGION            294..311
                        /codon_start=2
                        /nucleotide sequence
                        gacagctttctttaacgc
                        /translation
                        TAFFN
N1-REGION               294..294
                        /nucleotide sequence
                        g
D-J-REGION              295..355
                        /nucleotide sequence
                        acagctttctttaacgcctatgacttctggggccagggaaccctggtcaccgtctcctca
                        g
                        /translation
                        TAFFNAYDFWGQGTLVTVSS
D-REGION                295..307
                        /allele="Homsap IGHD5-18*01"
                        /gene="Homsap IGHD5-18"
                        /nucleotide sequence
                        acagctttcttta
                        /translation
                        TAFF
N2-REGION               308..311
                        /codon_start=3
                        /nucleotide sequence
                        acgc
5'J-REGION              312..324
                        /codon_start=2
```

Рис. 3. Пример вывода IMGT / V-quest

# Метод решения: Selenium WebDriver

Selenium WebDriver – это программная библиотека для управления браузерами.

Библиотеки WebDriver доступны на языках:

- Java
- .Net (C#)
- Python
- Ruby
- JavaScript

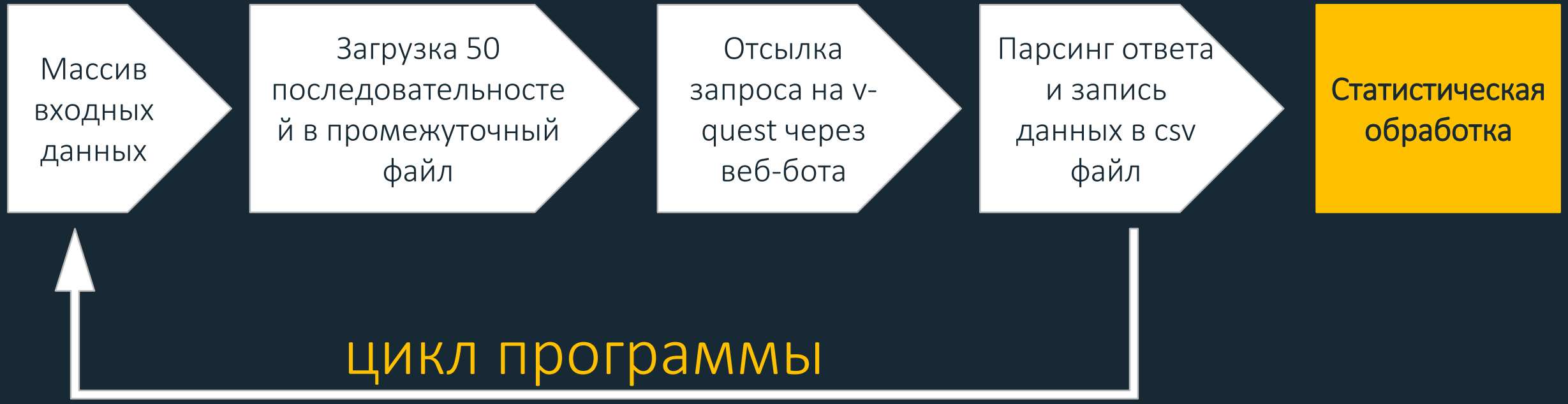
Драйверы реализованы для браузеров:

- Firefox
- InternetExplorer
- Safari
- Andriod
- iOS
- Chrome
- Opera

# Проделанная работа:

1. Изучили основные команды API библиотеки Selenium WebDriver
2. Реализовали цикл, отбирающий нужные параметры, и загружающий на обработку по 50 последовательностей
3. Осуществили выгрузку данных с сервера, провели парсинг выходного файла и получили требуемые данные (длины CDR3 и N1 регионов) и сохранение в виде csv файла
4. Построили гистограммы распределения длин CDR3 и N1 регионов

# Пайплайн программы



# Парсинг

Парсинг ответов v-quest осуществлялся при помощи данного регулярного выражения:

'>(?P<ID>[A-Z]{2}[\d]{6}\.[\d]{1}) #Поиск ID записи

[\s\S]*? #Пропуск всех символов до следующего элемента

CDR3-IMGT[\s]* #Поиск заголовка блока содержащего информацию о CDR3 регионе

(?P<CD_start>[\d]+)\.\.(?P<CD_stop>[\d]+) #Получение начала и конца CDR3

[\s\S]*? #Пропуск всех символов до следующего элемента

N1-REGION[\s]* #Поиск заголовка блока содержащего информацию о N1 регионе

(?P<N1_start>[\d]+)\.\.(?P<N1_stop>[\d]+)’ #Получение начала и конца N1

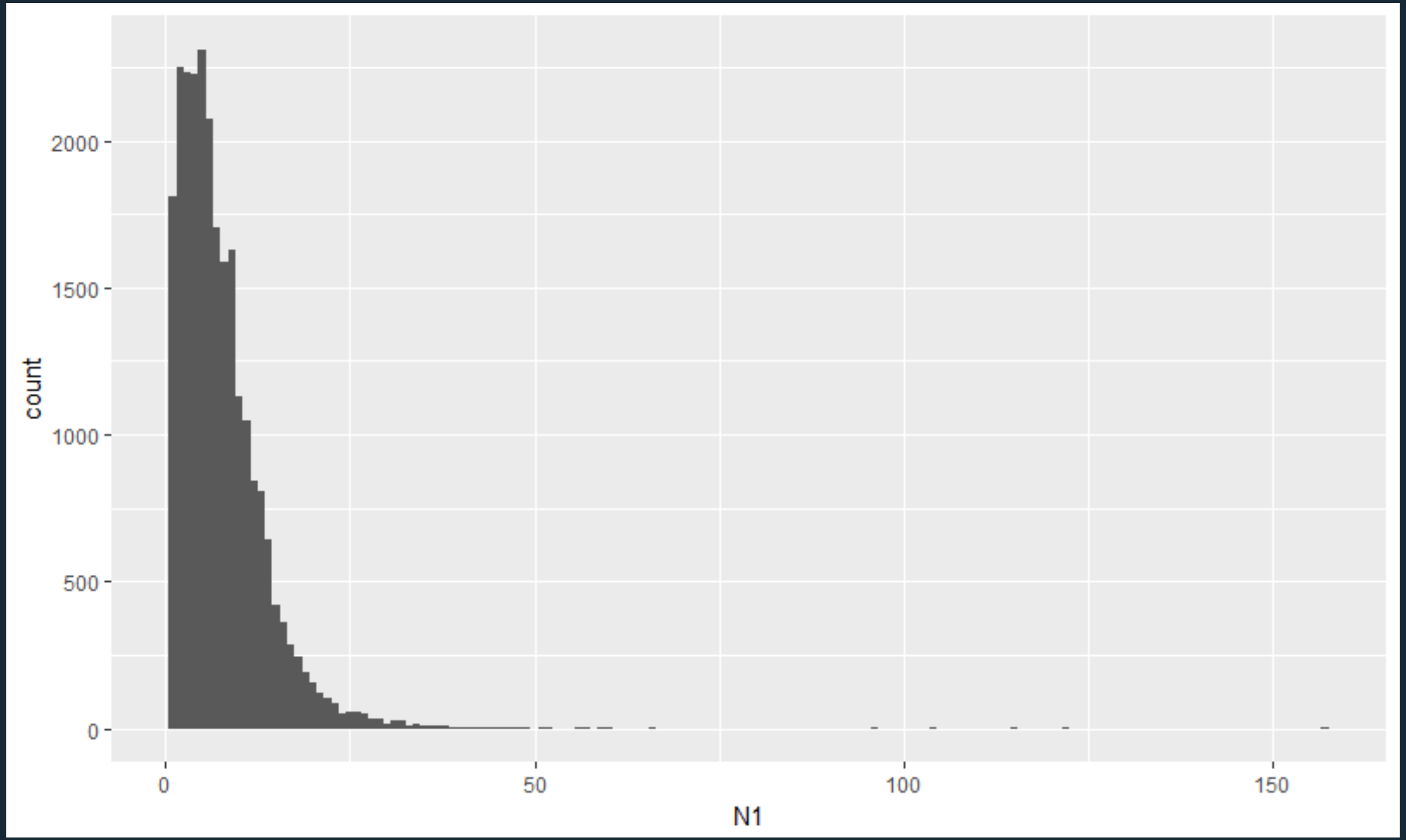



Рис. 4. Гистограмма распределения длины N1 региона

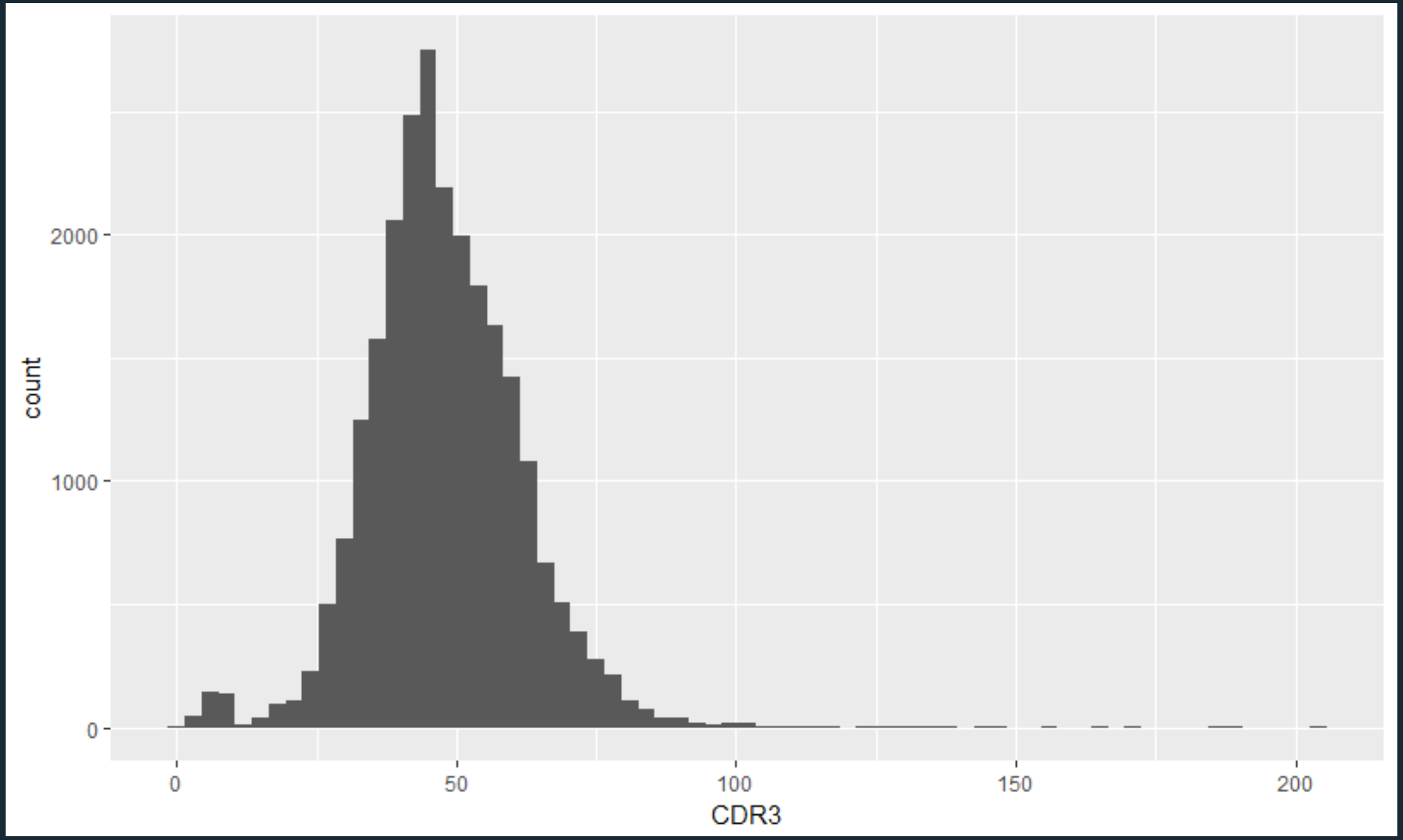



Рис. 5. Гистограмма распределения длины CDR3 региона

# Заключение

1. Сделан веб-бот для автоматизированной отправки запросов на v-quest и последующего парсинга ответов
2. Обработан массив данных и построены гистограммы распределения длин регионов N1 и CDR3

# Планы на будущее

- Реализация графического интерфейса
- Ускорение работы
- Расширение функционала в части выбора дополнительных опций для анализа и выгрузки полученных данных

Спасибо за внимание!