

Свободное программное обеспечение для открытой науки: Crystallography Open Database

Saulius Gražulis
(Саулюс Гражулис)

«Галактика», 2013

Институт биотехнологии Вильнюсского университета



(P)эволюция свободного п/о



(P)эволюция свободного п/о



(P)эволюция свободного п/о

«Мы уже победили (просто это еще не так заметно).»
«Ψ», Б.Г. & Å



(P)эволюция свободного п/о

- Набор инструментов для реализации идей
- Набор идей и принципов, как организовать работу



Применимость принципов открытого п/о для научных исследований

Наука – принципиально открытое мероприятие:

- основана на открытом обсуждении и деловой критике;
- основана на публикации результатов;
- основана на последовательном использовании результатов.

Применимость принципов открытого п/о для научных исследований

Наука – принципиально открытое мероприятие:

- основана на открытом обсуждении и деловой критике;
- основана на **публикации** результатов;
- основана на последовательном использовании результатов.

Применимость принципов открытого п/о для научных исследований

Наука – принципиально открытое мероприятие:

- основана на открытом обсуждении и деловой критике;
- основана на **публикации** результатов;
- основана на последовательном **использовании** результатов.

SDPD mailing list: Open crystallographic database - a role for whom?

> When crystallographers will be tired to buy all these fragmented
> databases, maybe they will do something. A role for IUCr ? If not, a
> role for whom ?

armellebail (Armel Le Bail) Wed Feb 12, 2003 7:24 pm

But what if crystallographers work together to establish a public domain database with all relevant crystallographic data? This would not only overcome the current situation with 'fragmented' databases, it would also prevent for becoming dependent from monopolists.

What would be needed?

1. A small team of engaged scientists with some experience in database and software design to coordinate the project.
2. The authors (i.e. the scientific community = YOU) who provides the project with database entries (note, that if you have'nt sold your experimental results exclusively, you are free to distribute the data to such a database, even if they have already been part of a publication - and a lot of good data have never been published).
3. Free software a) for maintaining the database, b) for data evaluation and calculation of derived data (e.g. calculated powder pattern from crystal structures for search-match purposes), c) for browsing and retrieval.

gemstonede (Dr. Michael BERNDT) Fri Feb 14, 2003 1:26 pm



<http://www.crystallography.net/>

- Свыше **≈217 000** записей (на 14.02.2013)
- **179** зарегистрированных пользователей
- **23** депозитора (поместившие хотя бы одну структуру)
- В 2012 г.:
 - помещено **>56 000** новых структур (на **26 000** больше, чем в прошлом году)
 - **16** активных депозиторов (поместившие хотя бы одну структуру в 2012 г.)



Crystallography Open Database

COD Home

Home
What's new?

Accessing COD Data

Browse
Search

Add your data

Deposit your data
Manage deposits
Manage/retrieve
prepublications

Documentation

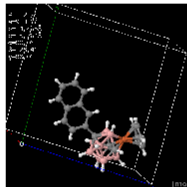
COD Web
Using COD
Citing COD
COD Metrics
Advises to donors

CIF Information Card

Information card for 4079785

[4079785](#) << [4079783](#) >> [4100200](#)

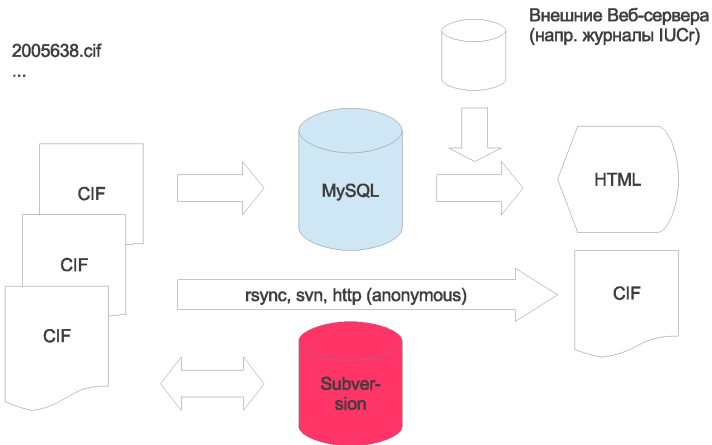
Preview



Coordinates [4079785.cif](#)

Structure parameters

Formula	C18 H 22 N6 Fe
Calculated formula	C18 H22 N6 Fe
Title of publication	Three isomers of Aryl Substituted
Authors of publication	Bakardjiev, Mario; Sibir, Bohamir
Journal of publication	Organometallics
Year of publication	2013
Journal volume	32
Journal issue	2
a	9.31 ± 0.0006 Å
b	14.4651 ± 0.0009 Å



Возможные применения

- Уточнения структур молекул белка
- Проверка данных
- Поиски «чёрного лебедя»



$H =$ «Все лебеди белые» (обычный случай)

Возможные применения

- Уточнения структур молекул белка
- Проверка данных
- Поиски «чёрного лебедя»



H = «Все лебеди белые» (обычный случай)

D = «Замечен чёрный лебедь» – ошибка или новый, неизвестный случай?

Возможные применения

- Уточнения структур молекул белка
- Проверка данных
- Поиски «чёрного лебедя»



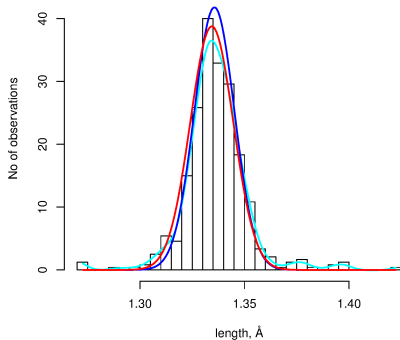
H = «Все лебеди белые» (обычный случай)

D = «Замечен чёрный лебедь» – ошибка или новый, неизвестный случай?

Пример:

Пептидные связи – модель белков

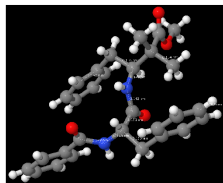
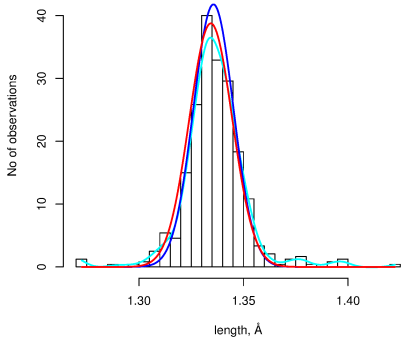
Peptide bond lengths (480 observations)



Пример:

Пептидные связи – модель белков

Peptide bond lengths (480 observations)



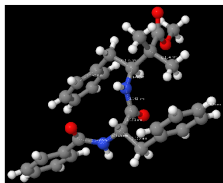
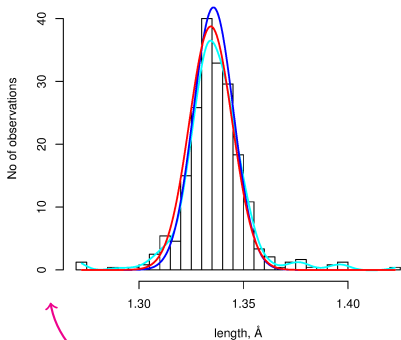
COD 4024607, $l = 1.4224 \text{ \AA}$



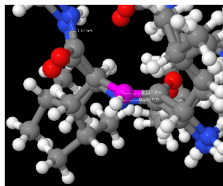
Пример:

Пептидные связи – модель белков

Peptide bond lengths (480 observations)



COD 4024607, $l = 1.4224 \text{ \AA}$



COD 7203041, $l = 1.2727 \text{ \AA}$

Другой пример:

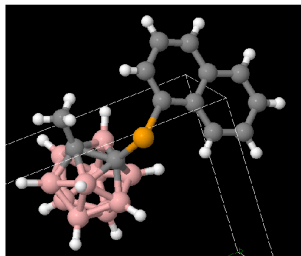
Углерод с валентностью 6 (!?)

Мы наблюдаем атомы углерода, имеющие **6** соседей на расстоянии ковалентной связи.(?)

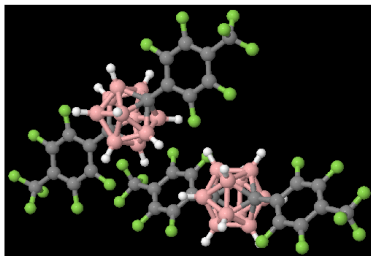
Другой пример:

Углерод с валентностью 6 (!?)

Мы наблюдаем атомы углерода, имеющие **6** соседей на расстоянии ковалентной связи.(!)



COD 7015488



COD 7015654

Зачем это нужно?

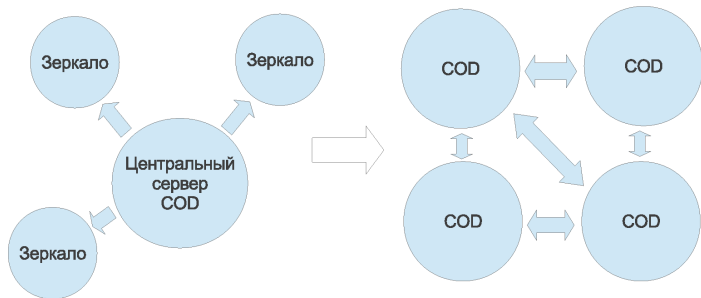


Новые материалы (нпр.
полупроводники)



Новые лекарства

Среда для научного сотрудничества во всём мире



Благодарю за внимание!

