



ipb

INSTITUTO POLITÉCNICO DE BRAGANÇA
Escola Superior Agrária

5ª Edição

Workshop em Bioinformática

Livro de Resumos

15 e 16 de Maio de 2013

Escola Superior Agrária de Bragança

Apoios:



INSTITUTO POLITÉCNICO DE BRAGANÇA Escola Superior Agrária



**Centro de
Investigação
de Montanha**



A investigação e o desenvolvimento em Bioinformática sofreram um progresso extraordinário nos últimos anos, particularmente após a rápida acumulação de informação relativa a milhares de genomas, que veio abrir novas perspectivas de conhecimento e inovação. Hoje em dia, é muito difícil, senão impossível, avançar significativamente em diversas biociências sem o suporte da Bioinformática. O presente Workshop em Bioinformática aborda de forma abrangente os temas actuais da Bioinformática.

PROGRAMA

Quarta-feira, dia 15 de Maio de 2013

Auditório Pequeno da ESA/IPB:

09h00 - Sessão de Abertura, com a presença do Exmo. Director da Escola Superior Agrária de Bragança, Professor Doutor Albino Bento

09h15 - ***Bioinformática e Ómicas, reflexões de um utilizador***
Angel Dominguez Olavarri, Departamento de Microbiologia y Genética, Universidade de Salamanca

10h00 - ***Papel da bioinformática no silenciamento de genes por iRNA***
Altino Choupina, ESA/IPB e CIMO

10h45 - Coffee Break

11h00 - ***Bioinformática e Biomedicina***
Sérgio Deusdado, ESA/IPB e CIMO

11h45 - ***VScore: Uma plataforma para desenvolvimento de novos fármacos usando Screening Virtual***
Hugo Froufe, Isabel Ferreira, João Sousa, José Amaro e Rui Abreu, ESA/IPB e CIMO

12h30 - ALMOÇO

14h30 - ***Aplicação de ferramentas de quimioinformática no desenvolvimento de novos fármacos: tienopiridinas como inibidores de VEGFR-2***
Rui Abreu, Hugo Froufe, Maria-João Queiroz, Isabel Ferreira, ESA-IPB e CIMO

16h00 - ***Análise e alinhamento de sequências biológicas***
Altino Choupina e Sérgio Deusdado, ESA-IPB e CIMO

Quinta-feira, dia 16 de Maio de 2013
Auditório Pequeno da ESA/IPB:

09h15 - ***Quantificação da expressão génica por PCR em Tempo Real –
Desenho experimental de um ensaio de RT- qPCR***

Hélio Belo, CEDOC/IPOLFG/ITQB, Instituto Português de Oncologia de Lisboa
Francisco Gentil

10h00 - ***Vaca ou Cavalo? Detecção de fraudes alimentares***

Lurdes Jorge, ESA-IPB e CIMO

10h45 - Coffee Break

11h00 - ***Descoberta de padrões e tendências de dados com o Rapid Miner***

Pedro Bastos, ESA-IPB e CIMO

11h45 - ***Utilização de métodos informáticos para a deteção e seleção no
genoma da abelha ibérica: enquadramento teórico***

Maria Alice Pinto, Júlio Chávez-Galarza e Dora Henriques, ESA-IPB e CIMO

12h30 - ALMOÇO

14h30 - ***Utilização de métodos informáticos para a deteção e seleção no
genoma da abelha ibérica: aplicação prática***

Maria Alice Pinto, Júlio Chávez-Galarza e Dora Henriques, ESA-IPB e CIMO

16h00 - ***Aplicação da bioinformática na detecção de fraudes alimentares***

Lurdes Jorge, ESA-IPB e CIMO

ANÁLISE E ALINHAMENTO DE SEQUÊNCIAS BIOLÓGICAS

Altino Choupina e Sérgio Deusdado

Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Santa Apolónia, Bragança, Portugal.
CIMO- Centro de Investigação de Montanha, Campus de Santa Apolónia, Bragança, Portugal.

O conhecimento derivado das tecnologias genómicas e computacionais aumenta em progressão geométrica. A compreensão dessa avalanche de dados está intimamente vinculada ao formidável desenvolvimento na área da bioinformática. Ao possibilitar a avaliação global dessa extraordinária quantidade de dados, a bioinformática tem acelerado consideravelmente as descobertas científicas.

No software de análise do genoma podem encontrar-se diversos pacotes de programas, os quais acompanham todo o processo desde a receção dos gráficos provenientes do sequenciador até à publicação dos dados em bases de dados on-line. Estas características, juntamente com o acesso grátis para académicos, a compatibilidade de ficheiros, e a sua data de conceção são os principais fatores de seleção nas escolhas realizadas.

Destacamos que muitos dos serviços realizados por estes programas são também realizados por alguns programas disponibilizados on-line, tendo estes a desvantagem de em cada consulta necessitarem de uma ligação à rede, não estando estes no PC ou MAC que hoje em dia se tornou indispensável no laboratório, mas tendo como vantagem o facto de estes recursos on-line serem atualizados regularmente.

Staden package (http://genome.wustl.edu/gs/new/staden/staden_home.html)

- pacote de programas bastante completo no âmbito da análise de sequências de nucleótidos, é gratuito para estudantes e investigadores, permitindo a requisição via correio ou diretamente da rede. Este pacote contém os seguintes programas:
- **Gap4** – Este programa é a ferramenta principal deste pacote, realiza a compilação, junção de sequências, retificação da compilação, lê pares de sequências e permite a adição das mesmas
- **Pregap4** – Permite uma análise de informação, receção de informação diretamente do sequenciador em vários formatos. É de certa forma, a porta de entrada para este pacote de programas.
- **Trev** – Rápido e eficaz, permite o visionamento de sequências em formatos ABI, ALF ou SRF;
- **Trace diff** – Realiza automaticamente a localização de pontos de mutação comparando a sequência com as sequências de referência. Suporta qualquer número de sequências e permite a visualização de resultados pelo Gap4;
- **Sip4** – Compara pares de sequências de diversas formas, apresentando muitas vezes os resultados graficamente. Permite a comparação, base com base, proteína com proteína e proteína com base;
- **Nip4** – Analisa sequências de nucleótidos para encontrar genes, locais de restrição, permite a tradução, etc.

Dnatools (www.dnatools.dk) – Outra proposta de pacote para PC é o *Dnatools*. Constitui um concorrente à altura da anterior referência, com uma atualização feita recentemente. Destaque-se, ainda uma atualização da biblioteca de enzimas de restrição «rebase» que data do início de 2001 e está em constante atualização. Neste pacote estão contidos os seguintes programas:

- Clustral** – Aplicação que permite alinhamento de várias sequências e a sua manipulação. Este programa foi uma edição que por si só, permite a sua utilização sem o resto do pacote;
- Blastall, Formatdb** – Permitem o acesso a bases de dados nos cinco programas blast;
- Blastel3** – Juntamente com o pacote vem também esta opção, que realiza o mesmo trabalho que o anterior mas com a vantagem de ser completamente compatível com procuras do **NCBI**;
- Convert trace** – Permite ao *dnatools* importar e exportar ficheiros convertendo os cromatogramas provenientes dos mais comuns sequenciadores;
- Chromas** – Este programa permite também a visualização de ficheiros provenientes de sequenciadores.

pDRAW 32 – Um programa para ser utilizado numa plataforma Windows, com uma interface agradável e intuitiva, estando disponível gratuitamente na Internet no site: (<http://www.crosswinds.net/~acaclone>).

Com este programa é possível realizar várias operações, tais como: anotações relativas ao ADN em estudo, clonar ADN, editar sequências, analisar sequências, seleccionar enzima, exportar gráficos e texto, calcular a temperatura ótima para PCR, calcular homologias entre dois fragmentos de ADN e ainda um ficheiro de ajuda científico.

DNASTAR™ – Outro pacote informático que tem vindo a ter grande utilização é o **DNASTAR™** (cópia de demonstração enviada por Dnastar, Ltd. Abacus House, Manor Rd. West Ealing London W130AS, Reino Unido) a qual possui programas com os quais se pode fazer a edição básica de sequências, comparação de sequências e algumas características físico-químicas bem como a construção de plasmídeos, etc.

Cn3d (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/CN3D/cn3d.shtml>) – este é um programa de ajuda à visualização tridimensional das estruturas proteicas, especificamente desenhado para permitir a visualização de ficheiros provenientes do **NCBI-Entrez**, este software, utiliza como plataformas o Windows, MAC-OS e Unix. Este programa permite a visualização em simultâneo da estrutura, sequência e alinhamento. Com uma atualização a meio do ano passado, esta permitiu o melhoramento dos gráficos, assim como do visualizador do alinhamento de sequências, coloração de sequências de conservação e possibilidade de gravar as especificações de análise num ficheiro.

SERVIDORES DE RECURSOS ON-LINE

Aplicações

Na Internet têm-se tornado disponíveis, nos últimos anos uma grande variedade de programas *on-line*, estes programas não necessitam de instalação no computador cliente e têm capacidades muitas vezes superiores às que conseguimos alcançar com os micro-computadores que utilizamos habitualmente. Na maioria dos casos, as capacidades destes servidores são postas à disposição da comunidade, sendo as verdadeiras mais valias tiradas em aplicações que requerem grandes capacidades de processamento, como a identificação de homologias ou construção gráfica de estruturas 3D. Na lista abaixo indicada ficam algumas das aplicações que consideramos mais interessantes, alertamos no entanto que os recursos referidos são, apenas, uma amostragem do vastíssimo leque de aplicações disponíveis.

Homologia de sequências (Sequence Homology):

BLAST <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/cgi-bin/BLAST/nph-newblast?jform=0>

PSI-BLAST http://www.ncbi.nlm.nih.gov/cgi-bin/BLAST/nph-psi_blast
FASTA <http://www2.ebi.ac.uk/fasta3/>
HMM <http://pfam.wustl.edu/hmmsearch.shtml>
Smith-Waterman <http://crick.genes.nig.ac.jp>
ClustalW http://pbil.ibcp.fr/NPSA/npsa_clustalw.html
RepeatMasker <http://ftp.genome.washington.edu/cgi-bin/RepeatMasker>
Translate <http://arbl.cvmb.colostate.edu/molkit/translate>
Signal <http://www.cbs.dtu.dk/services/SignalP/index.html#submission>
Transmembrane http://www.ch.embnet.org/software/TMPRED_form.html
BLOCKS search http://blocks.fhcrc.org/blocks/blocks_search.html
BLAST-Prodrom http://www.toulouse.inra.fr/prodom/doc/blast_from.html

Previsão de genes(Gene Prediction):

GENSCAN <http://gnomic.stanford.edu/>
FGENEH <http://searchlauncher.bcm.tmc.edu/>
GeneID <http://www1.imim.es/geneid.html>
Genie http://wwwfruitfly.org/seq_tools/genie.html
GRAIL <http://compbio.ornl.gov/Grail-1.3/>
SpliceView <http://125.itba.mi.cnr.it/~webgene/wwwspliceview.html>
GeneBuilder <http://125.itba.mi.cnr.it/~genebuilder.html>
CpG Island <http://125.itba.mi.cnr.it/genebin/wwwcpg.pl>
TATA Signal http://125.itba.mi.cnr.it/~webgene/wwwHC_tata.html
GenView <http://125.itba.mi.cnr.it/~webgene/www.gene.html>
HCPolyA <http://125.itba.mi.cnr.it/~webgene/www.HC.polya.html>
GeneFinder <http://scilio.cshl.org/genefinder/human.html>
AAT <http://genome.cs.mtu.edu/aat.html>
GRAIL <http://compbio.ornl.gov/Grail-1.3/>
SpliceView <http://125.itba.mi.cnr.it/~webgene/wwwspliceview.html>
GeneBuielder <http://125.itba.mi.cnr.it/~webgene/genebuilder.html>
CpG Island <http://125.itba.mi.cnr.it/genebin/wwwcpg.pl>
TATA Signal http://125.itba.mi.cnr.it/~webgene/wwwHC_tata.html
GenView <http://125.itba.mi.cnr.it/~webgene/www.gene.html>
HCPolyA <http://125.itba.mi.cnr.it/~webgene/www.HC.polya.html>
GeneFinder <http://scilio.cshl.org/genefinder/human.html>
AAT <http://genome.cs.mtu.edu/aat.html>

BASES DE DADOS

O armazenamento da informação é um fator importante para a bioinformática, são necessários padrões que permitam um armazenamento da informação e das suas anotações de forma a permitir um rápido acesso e a partilha desta entre as várias bases de dados sem problemas de compatibilidade, quer estas sejam de sequências, genomas, proteínas ou enzimas. As grandes bases de dados permitem uma partilha de dados, entre si, aumentando assim a rentabilização dos recursos e consequentemente permitindo que toda a comunidade a consulte e se mantenha atualizada.

No caso das bases de dados de nucleótidos estas são formatadas e inscritas numa das quatro grandes bases de dados as quais partilham entre si as sequências, estas estão organizadas de acordo com a sua proveniência taxonómica e tipo de sequência, identificada por uma sigla de três letras, EST (*expressed sequence tags*), STS (*sequence tagged sites*) GSS (*genomic survey sequences*).

Estas bases de dados são da responsabilidade de instituições governamentais e sem fins lucrativos, sendo portanto as referências consensuais na área:

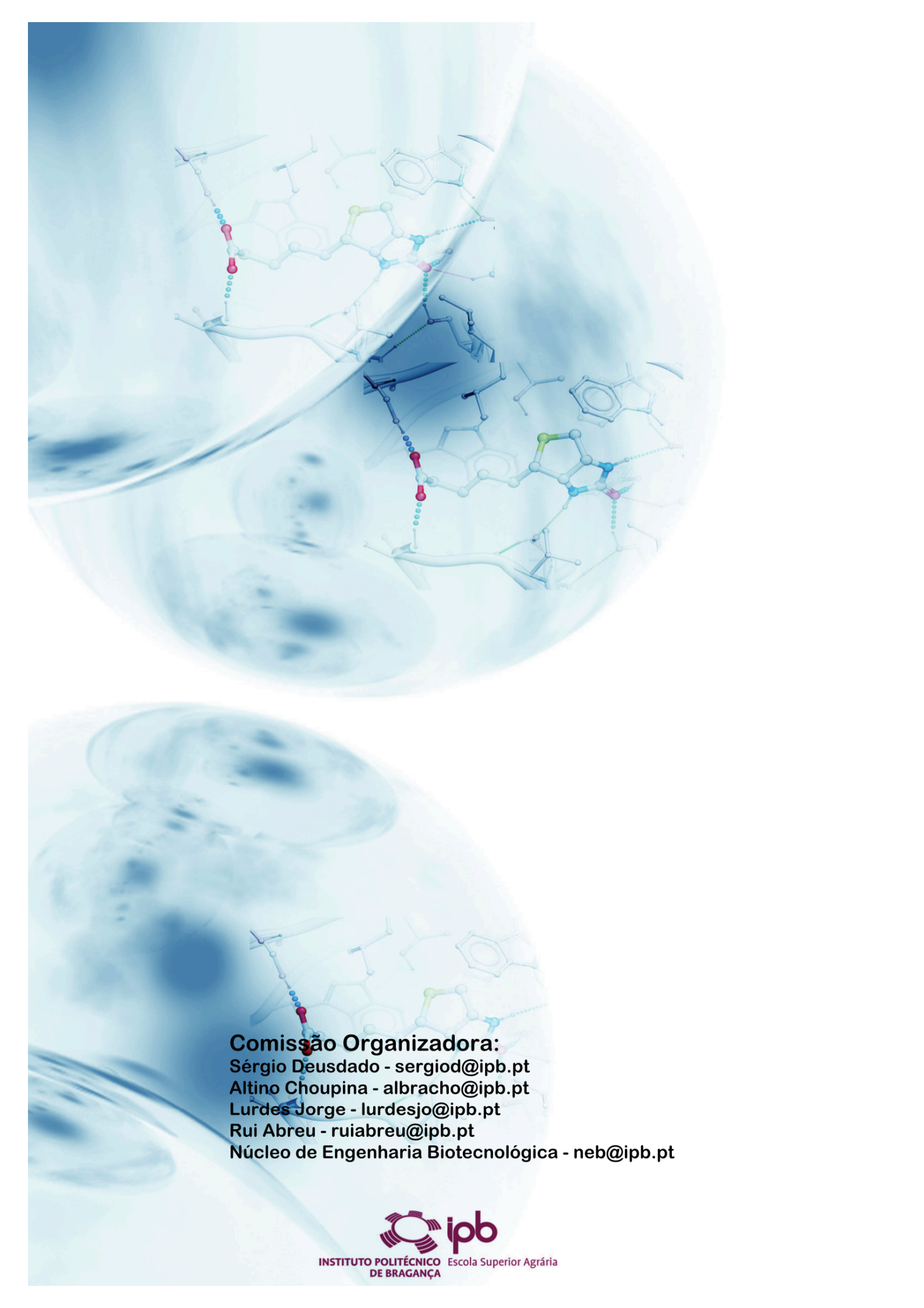
- **Genebank** <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
- **EMBL** <http://www.ebi.ac.uk/>
- **DDBJ** <http://www.ddbj.nig.ac.jp/>
- **GSDB** <http://www.ncgr.org/>

BIBLIOGRAFIA

Pearson, W e L. D. (1988). Improved tools for biological sequence analysis. Proc. Nat. Acad. Sci. USA 85: 2444-2448.

Walker, J. M. e Rapley, R. (2000). Molecular Biology and Biotechnology. Royal Society of Chemistry. University of Hertford, Hatfield, UK. 4:405-431.

Todos os sites referidos anteriormente.



Comissão Organizadora:
Sérgio Deusdado - sergiiod@ipb.pt
Altino Choupina - albracho@ipb.pt
Lurdes Jorge - lurdesjo@ipb.pt
Rui Abreu - ruiabreu@ipb.pt
Núcleo de Engenharia Biotecnológica - neb@ipb.pt



INSTITUTO POLITÉCNICO DE BRAGANÇA Escola Superior Agrária