

Inscrições Limitadas
40 vagas

Informações e Inscrições:
www.esa.ipb.pt/bioinformatica

Preços: -Alunos IPB: 10€ (sócios NEB: 8 €)
-Público em geral: 20€

Incluem: Inscrição, coffee breaks, documentação e diploma

Comissão Organizadora:

Sérgio Deusdado - sergiod@ipb.pt

Altino Choupina - albracho@ipb.pt

Lurdes Jorge - lurdesjo@ipb.pt

Rui Abreu - ruiabreu@ipb.pt

Núcleo de Engenharia Biotecnológica - neb@ipb.pt

5ª Edição

Workshop em Bioinformática

Casa aberta desde as 14h no programa de labor

Venha conhecer e compreender
as aplicações e implicações
da bioinformática

15 e 16 de Maio de 2013

Escola Superior Agrária de Bragança

Apoios:

A *Bioinformática* é uma nova ciência que tem por objectivo desenvolver soluções eficientes para o armazenamento, comunicação e análise de *bioinformação*.

A *bioinformação* corresponde aos dados biológicos em sentido lato, mas actualmente centra-se sobretudo em informação do ADN, ARN, proteínas e análise de expressão génica em microarrays.

Na era pós-genómica é fundamental o contributo da *bioinformática* para decifrar os segredos funcionais que a *bioinformação* codifica.

Programa do WB'2013

Quarta-feira, dia 15 de Maio de 2013
Auditório Pequeno da ESA/IPB:

09:00 - Sessão de Abertura, com a presença do Exmo. Diretor da Escola Superior Agrária de Bragança – Professor Doutor Albino Bento

09:15 - *Bioinformática e Ómicas, reflexões de um utilizador*
Angel Dominguez, Departamento de Microbiología y Genética, Universidad de Salamanca

10:00 *Papel da Bioinformática no silenciamento de genes por iRNA*
Altino Choupina, ESA/IPB e CIMO

10:45 - Coffee break

11:00 - *Bioinformática e Biomedicina*
Sérgio Deusdado, ESA/IPB e CIMO

11:45 - *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

12:30 - ALMOÇO

Sessões Hands On no Laboratório de Informática do CIESA:

14:30 - *Aplicação de ferramentas de quimiinformática no desenvolvimento de novos fármacos: tienopiridinas como inibidores de VEGFR-2*
Rui Abreu, Hugo Froufe, Maria-João Queiroz e Isabel Ferreira
ESA /IPB e CIMO

16:00 - *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:

09:15 - *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

10:00 - *Vaca ou cavalo? - Detecção de fraudes alimentares*
Lurdes Jorge, ESA/IPB e CIMO

10:45 - Coffee break

11:00 - *Descoberta de padrões e tendências de dados com o Rapid Miner*
Pedro Bastos, ESA/IPB e CIMO

11:45 *Utilização de métodos informáticos para detecção de seleção no genoma da abelha ibérica: enquadramento teórico*
Maria Alice Pinto, Julio Chávez-Galarza e Dora Henriques, ESA/IPB e CIMO

12:30 - ALMOÇO

Sessões Hands On no Laboratório de Informática do CIESA:

14:30 - *Utilização de métodos informáticos para detecção de seleção no genoma da abelha ibérica: aplicação prática*
Julio Chávez-Galarza, Dora Henriques e Maria Alice Pinto, ESA/IPB e CIMO

16:00 - *Aplicação da bioinformática na detecção de fraudes alimentares*
Lurdes Jorge, ESA/IPB e CIMO



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:



VScore: Uma plataforma para desenvolvimento de novos fármacos usando *Screening Virtual*

Hugo. J. C. Froufe, Isabel. C. F. R. Ferreira, João N. Sousa, José C. R. Amaro, Rui M. V. Abreu

CIMO-ESA, Instituto Politecnico de Braganca, Campus de Sta Apolonia, Apartado 1172, 5301-855 Braganca, Portugal

O *screening* virtual de grandes bibliotecas de compostos químicos, utilizando metodologias computacionais como o *molecular docking*, é cada vez mais utilizado na procura de potenciais inibidores de proteínas-alvo envolvidas em diferentes patologias. No entanto, devido ao facto destas bibliotecas poderem atingir um número de compostos químicos que podem ir das dezenas às centenas de milhar, é muitas vezes necessária a utilização de *clusters* de computadores de Alto Desempenho Computacional (HPC – *High Throughtput Computing*), bem como de ferramentas de criação, gestão e acesso de bibliotecas de compostos químicos (2).

Neste contexto, desenvolvemos o VScore (*Virtual Screening core*), uma plataforma computacional que permite a gestão de grandes projetos de *Screening Virtual*. O VScore utiliza o AutoDock4 e/ou o AutoDock Vina (1) como ferramentas de *docking* e inclui várias ferramentas avançadas de criação e gestão de bibliotecas de compostos químicos. Entre as principais características avançadas estão incluídas a automatização e paralelização de todos os ensaios de *docking*, bem com a automatização da análise e visualização de resultados e a possibilidade de gerir facilmente grandes bibliotecas de compostos e estruturas 3D de proteínas.

O VScore será disponibilizado livremente para a comunidade académica, estando a ser estudado um modelo para desenvolvimento futuro acente num regime de donativos de futuros utilizadores.

(1) Morris GM, Goodsell DS, Halliday RS, Huey R, Hart WE, Belew RK and Olson AJ. J. Computational Chemistry, 1998, 19, 1639-1662.

(2) Abreu RMV, Froufe H, Queiroz M-JRP and Ferreira ICFR. " MOLA: a bootable, self-configuring system for virtual screening using AutoDock4/Vina on computer clusters2009, *Journal of Cheminformatics* 2010, 2:10