

Inscrições Limitadas  
40 vagas

Informações e Inscrições:  
[www.esa.ipb.pt/bioinformatica](http://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](mailto:sergiod@ipb.pt)

Altino Choupina - [albracho@ipb.pt](mailto:albracho@ipb.pt)

Lurdes Jorge - [lurdesjo@ipb.pt](mailto:lurdesjo@ipb.pt)

Rui Abreu - [ruiabreu@ipb.pt](mailto:ruiabreu@ipb.pt)

Núcleo de Engenharia Biotecnológica - [neb@ipb.pt](mailto: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, Universidade 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:



# Aplicação de ferramentas de quimioinformática no desenvolvimento de novos fármacos: tienopiridinas como inibidores de VEGFR-2

Rui M. V. Abreu<sup>1</sup>, Hugo J. C. Froufe<sup>1</sup>, Maria-João R. P. Queiroz<sup>2</sup>, Isabel C. F. R. Ferreira<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CIMO-ESA, Instituto Politecnico de Braganca, Campus de Sta Apolonia, Apartado 1172, 5301-855 Braganca, Portugal

<sup>2</sup>Centro de Quimica, Universidade do Minho, Campus de Guallar 4710-057 Braga, Portugal

A quimioinformática é uma área científica que utiliza métodos computacionais para resolver problemas de Química normalmente associados à representação virtual da estrutura de compostos químicos, quer sejam sintéticos ou naturais. É provavelmente a disciplina de computação aplicada com maior historial, embora o termo quimioinformática só tenha surgido há menos de uma década. As ferramentas computacionais utilizadas na quimioinformática têm tido um enorme impacto no desenvolvimento de novos fármacos bem como na área ambiental para a estimativa de toxicidade de produtos químicos existentes no mercado (1).

As temáticas mais importantes desta área incluem a representação de estruturas de compostos químicos e o uso dessas representações na pesquisa por similaridade em bases de dados de estruturas ou de reações químicas. Também a criação, manutenção, acesso e exploração de grandes bases de dados envolvendo estruturas moleculares é um tópico muito importante na quimioinformática.

Outras aplicações incluem estudos de modelação molecular, com a utilização de técnicas computacionais avançadas de "molecular docking" e "molecular dynamics" para o estudo de compostos químicos como potenciais inibidores de proteínas associadas a diferentes patologias (2); bem como estudos QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships) e aplicação de técnicas de data mining para a extração de informação importante sobre uma determinada bioatividade de um composto químico.

Neste sessão vamos utilizar ferramentas computacionais para analisar e manipular estruturas de compostos químicos bem como fazer um estudo da interação de um composto com uma determinada proteína alvo. Vamos demonstrar como estas ferramentas podem ser utilizadas para o desenvolvimento de novos fármacos antitumorais. Como exemplos vamos utilizar compostos derivados de tienopiridinas, que estão a ser desenvolvidos no âmbito de um projeto de investigação em curso e que tem como objetivo o desenvolvimento de novos inibidores da proteína tirosina cinase VEGFR-2 (Vascular Endothelial Growth Factor Receptor).

(1) Wild, DJ. "Grand challenges for cheminformatics" *Journal of Cheminformatics* 2009, 1:1

(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 clusters" *Journal of Cheminformatics* 2010, 2:10