

www.esa.ipb.pt/bioinformatica

Comissão Organizadora:
Sérgio Deusdado - sergiod@ipb.pt
Altino Choupina - albracho@ipb.pt
Lurdes Jorge - lurdesjo@ipb.pt
Rui Abreu - ruiabreu@ipb.pt

6ª Edição

Workshop em Bioinformática

LIVRO DE RESUMOS

4 e 5 de novembro de 2015

Escola Superior Agrária de Bragança

Apoios:

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 4 de Novembro de 2015

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

09:15 - *O que é e para que serve a bioinformática?*
Sérgio Deusdado, ESA/IPB e CIMO

10:00 - *"Docking" Molecular na elucidação do mecanismo de ação de derivados de thieno[3,2-b]pyridinas como inibidores da tirosina cinase VEGFR2*
Ricardo C. Calhelha, Isabel C.F.R. Ferreira, Maria-João R.P. Queiroz, Rui M.V. Abreu, ESA/IPB e CIMO, CQ-UM

10h45 - Coffee Break

11:00 - *Desempenho de ferramentas in silico: Avaliação de variantes de mutações missense do gene UGT1A1*
Carina Rodrigues, ESSa/IPB, Alice Santos-Silva, Elísio Costa, Elsa Bronze-da-Rocha, UCIBIO/REQUIMTE, Fac. de Farmácia, Univ. do Porto

11:45 - *Simulação Computacional do Contágio da Gripe Pessoa a Pessoa*
Ana Araújo, Carlos Balsa e João Paulo Almeida, ESTIG/IPB

12h30 - ALMOÇO

Sessões Hands On no Laboratório de Informática do CIESA:

14:30 - *Utilização de métodos informáticos para desenvolvimento de novos fármacos*
Rui M. V. Abreu, ESA/IPB e CIMO

16:00 - *Análise bioinformática da estrutura e função da informação biológica*
Altino Choupina e Sérgio Deusdado, ESA/IPB e CIMO

Quinta-feira, dia 5 de novembro de 2015
Auditório Pequeno da ESA/IPB

09:15- *NGS de Genomas e Exomas Humanos*
Hugo J.C. Froufe e Conceição Egas, GENOINSEQ, BiocantPark

09:45 - *Hvar: Base de Dados de Variações Humanas*
Joana V. S. Sousa, Hugo J. C. Froufe, Conceição Egas e Paulo J. Novais,
GENOINSEQ, BiocantPark e Dep. Informática, Univ. do Minho

10:15- *seqQI: Indicador de qualidade para RNA-Seq*
Abel. E. F. Sousa, Hugo. J. C. Froufe, Conceição Egas e Rui Mendes
GENOINSEQ, BiocantPark e Dep. Informática, Univ. do Minho

10h45 - Coffee Break

11:00 - *Utilização de redes de Bayes na descoberta de tendências de dados*
Pedro Bastos, ESA/IPB e CIMO

11h45 - *Desempenho comparativo do BLAST e do mpiBLAST*
José Rufino, ESTIG/IPB

12h30 - ALMOÇO

14:30 - *Análise da expressão genética com silenciamento de genes por iRNA*
Rodrigo Costa, Univ. de Salamanca e Altino Choupina, ESA/IPB e CIMO

Sessão Hands On no Laboratório de Informática do CIESA:

15:15 - *Anotação e Análise de Variantes Humanas*
Hugo J.C. Froufe e Conceição Egas, GENOINSEQ, BiocantPark

16:45 - Encerramento

O que é e para que serve a bioinformática?

Sérgio Deusdado

Centro de Investigação de Montanha (CIMO), ESA, Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Sta. Apolónia, Apartado 1172, 5301-855 Bragança, Portugal

A bioinformática é uma área interdisciplinar entre a biologia e a informática, adjuvada por contribuições multidisciplinares tais como: bioquímica, biofísica, matemática e bioestatística. A biologia provê as fontes de (bio)informação e a informática provê as bases de dados, os algoritmos e as aplicações informáticas para armazenar, tratar e extrair conhecimento da bioinformação.

A bioinformação é exemplificada, essencialmente, por sequências de nucleótidos (ADN, ARN), proteínas, metabolomas, dados de microarrays e dados filogenéticos. Com as técnicas modernas de NGS - New generation Sequencing, a produtividade e rapidez da sequenciação genética aumentou para níveis que nos permitem pensar a bioinformática como ferramenta incontornável na medicina personalizada e na resolução de problemas com impacto global na alimentação e na saúde.

A genómica e a proteómica funcional são os objetivos maiores da bioinformática. A bioinformática integrativa procura fornecer soluções integradas na modelação, simulação e compreensão do funcionamento dos sistemas biológicos.

Atualmente, a bioinformática desenvolve-se pelo trabalho de curadores de bases de dados biológicos, técnicos/graduados altamente qualificados em biologia molecular, engenheiros de software especializados em extração de conhecimento a partir de dados biológicos/clínicos, e uma nova geração de bioinformáticos, que receberam formação avançada nos âmbitos das técnicas e tecnologias bioinformáticas na era pós-genómica.

Dentre as maiores aplicações da bioinformática destacam-se: as bases de dados online de âmbito mundial; a análise, comparação e anotação de sequências; a previsão de estrutura de proteínas; a engenharia de novos fármacos; o estudo da expressão genética, com ênfase nos microarrays; a descoberta de genes; a biomedicina, e muitas mais que se encontram em permanente expansão.

Simulação Computacional do Contágio da Gripe Pessoa a Pessoa

Ana Araújo, Carlos Balsa e João Paulo Almeida

Escola Superior de Tecnologia e Gestão, Instituto Politécnico de Bragança, Bragança, Portugal.

Neste trabalho estuda-se a propagação do vírus da gripe numa comunidade escolar com 2000 pessoas recorrendo ao modelo matemático SIR em que se considera que a população está dividida em três grupos independentes: os Suscetíveis (S), os Infeciosos (I) e os Recuperados (R). O estudo é feito do ponto de vista determinístico e estocástico. O modelo SIR descreve a dinâmica de contágio através da evolução temporal dos três compartimentos em que a população se encontra dividida: suscetíveis, infecciosos e recuperados. Considera-se que o fluxo natural é do compartimento S para o I, e depois, diretamente, para o R. Neste caso um indivíduo suscetível torna-se infeccioso a uma taxa média β , definida como sendo o número de contactos adequados por unidade de tempo. Os indivíduos infetados podem ser removidos para a subpopulação dos recuperados por aquisição de imunidade à doença a uma taxa de recuperação μ , que se define como sendo o número de pessoas que deixam de ser infecciosos por unidade de tempo. Se o período de contágio for de k dias, a taxa de recuperação será $\mu = 1/k$ e o número de contactos adequados à transmissão da doença por indivíduo será $\delta = \beta / \mu$. O modelo SIR pode ser complementado com a introdução da denominada dinâmica vital, isto é tendo em consideração os nascimentos, os óbitos e a vacinação na população.

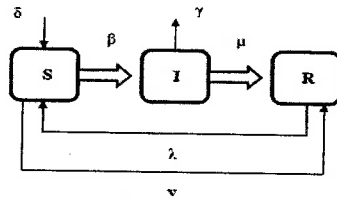


Figura 1 - Modelo compartimental SIRS com dinâmica vital e vacinação.

No modelo SIRS considera-se que os indivíduos recuperados podem perder a imunidade adquirida, tornando-se novamente suscetíveis. A Figura 1 ilustra a dinâmica compartimental do modelo SIRS tendo em consideração a dinâmica vital e a vacinação. Nesta figura, δ representa a taxa de nascimento, γ a taxa de óbitos entre os infecciosos, λ a taxa de perda de imunidade entre os recuperados e ν a taxa de vacinação entre os suscetíveis. Os restantes parâmetros têm o mesmo significado que no modelo SIR elementar. A dinâmica compartimental do modelo SIRS pode ser obtida deterministicamente através da resolução do sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = -\beta SI + \lambda R + \delta(S + I + R) - \nu S \\ \frac{dI}{dt} = \beta SI - (\gamma + \mu)I \\ \frac{dR}{dt} = \mu I - \lambda R + \nu S \end{cases}$$

com as respetivas condições iniciais $S(0) = S_0$, $I(0) = I_0$ e $R(0) = R_0$. O número total de indivíduos da população é dado por $N(t) = S(t) + I(t) + R(t)$.

No modelo SIRS estocástico a simulação é feita através do método de Monte Carlo. Repete-se um elevado número de vezes (1000 no nosso caso) a dinâmica de contacto aleatória entre todos os elementos da população, com taxas médias iguais aos do modelo determinístico mas variando de acordo com uma distribuição de Poisson. A implementação deste modelo é muito exigente do ponto de vista computacional pois exige a repetição sucessiva (1000 vezes) de um elevado número de cálculos que é diretamente proporcional à dimensão da população. A população estudada neste trabalho consiste numa escola com 2000 estudantes. Considera-se que a população é homogénea em termos de contactos. As simulações são feitas no Matlab e têm em conta o efeito de diferentes parâmetros, nomeadamente, o número inicial de infetados (I_0), o número de contactos adequados à transmissão da gripe (δ), a duração do período de contágio (k) e a taxa de vacinação (ν).

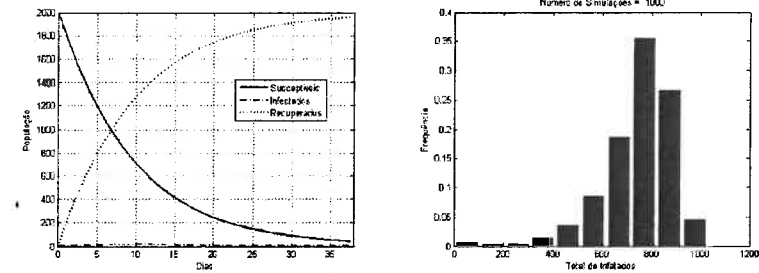


Figura 2 – Resultados obtidos com os modelos SIR determinísticos (esquerda) e estocástico (direita) com $I_0 = 2$, $\delta = 3$, $k = 4$ e $\nu = 0,1$.

A Figura 2 ilustra os resultados obtidos pelos dois modelos com os mesmos parâmetros. No modelo determinístico verifica-se que o número máximo de infecciosos em simultâneo ocorre por volta dos 10 dias. O modelo estocástico indica-nos que o surto de gripe não afetará mais de 1000 pessoas e que será mais provável que afete cerca de 800. Os restantes resultados obtidos com diferentes valores dos parâmetros dos modelos mostram que em geral os valores obtidos com o modelo determinístico correspondem aos valores mais prováveis obtidos com o modelo estocástico. O número inicial de infetados, I_0 , não tem efeito direto no número total de contagiados durante o surto de gripe e apenas altera o momento em que ocorre o número máximo de infetados em simultâneo. O número adequado de contactos δ é determinante na disseminação da gripe. Se este valor for maior do que 1, então irá ocorrer uma epidemia e se o seu valor for maior ou igual a 3 então esta afetará a totalidade da população. Este efeito pode ser contrariado pela vacinação. Como é possível observar na Figura 2, uma taxa de vacinação de 10% reduz o número máximo de infetados a metade da população (1000 pessoas), sendo as reduções superiores para maiores taxas de vacinação (ν).