



## Plano de ensino

### ESZB022-17 - INTRODUÇÃO À BIOINFORMÁTICA TNAESZB022-17SA (2021.1 - 4N12 6N12)

Carga Horária: 48 horas

**Docente responsável** : prof Antônio Sérgio Kimus Braz (CCNH -UFABC)

#### Objetivos Gerais

1. Apresentar aos alunos a área de bioinformática dar um panorama geral e apresentar suas principais possibilidades.
2. Dar ao aluno uma base teórica para que ele entenda e explore corretamente as diversas ferramentas disponíveis nas diversas possibilidade da área.
3. Estimular os alunos a usar as ferramentas em um sistema de interesse para que futuramente ele possa ser capaz de aplicar ao sistema que desejar.
4. Estimular o aluno a procurar continuar a se desenvolver numa área que está em constante mudança e com um futuro cada vez mais promissor graças ao desenvolvimento tecnológico atual.

#### Objetivos Específicos

1. Relacionar sequências DNA, RNA, Proteína e estrutura e entender as peculiaridades e detalhes do que ocorre no fluxo de informação entre essas moléculas.
2. Ensinar os alunos os fundamento e aplicações de alinhamento de sequências
3. Aprender a trabalhar e interpretar dados sequências de diversos bancos genômicos
4. Aprender a trabalhar e interpretar dados sequências de diversos bancos de

transcriptoma

5. Aprender a trabalhar e interpretar dados sequências de de bancos proteínas e domínios de proteínas
6. Aprender os fundamentos e aplicações de evolução molecular de genes e filogenia molecular
7. Aprender a trabalhar e interpretar dados de bancos de estruturas 3D de proteínas
8. Aprender os fundamentos e aplicações de modelagem molecular de proteínas
9. Aprender os fundamentos e aplicações de docking molecular
10. Ter uma visão nas futuras possibilidade da bioinformática com Inteligência artificial e Big Data

## **Ementa**

*Conceitos básicos de Biologia Molecular; Bancos de Dados Genéticos e Protéicos; Alinhamento de Seqüências; Seqüenciamento de DNA; Filogenia; Modelagem por threading e Docking molecular.*

## **Plano de aulas**

**aula 1** apresentação / introdução: apresentação da disciplina e conversa síncrona com alunos

**aula 2** Pré-Genômica/Genômica/Pós-Genômica: História de como mudou a visão da informação biológica e seu quadro atual 20 anos pós projeto genoma  
**prática** : primeira apresentação de bancos de dados biológicos

**aula 3** alinhamento / matrizes de substituição I: Base teórica de como alinhar sequências biológicas de DNA, RNA e proteína suas fundamentações e as diversas aplicações dessa análise. Primeira parte e matrizes de substituição para alinhamento.

**prática:** alinhamento de sequencias (DNA, RNA, proteína) em programas standalone e web

**aula 4** genômica I : Fundamentos de Genômica como dados são obtidos molecularmente e como são tratados e disponibilizados

**prática:** BLAST e suas variações e bancos genômicos

**aula 5** genômica II : Fundamentos de Genômica (metagenômica, SNPs, etc) como dados são obtidos molecularmente e como são tratados e disponibilizados

**prática:** bancos de genômica comparativa, bancos de variabilidade humana e SNPs

**aula 6** Transcriptômica : fundamentos de Genômica funcional, RNA seq, e outros ..como dados são obtidos molecularmente e como são tratados e disponibilizados etc.

**prática:** regiões UTRs, introns, splicing alternativos de sequências genômicas

**aula 7** proteômica : fundamentos sobre sobre proteínas estrutura , domínios de proteínas. Informações de Bancos de proteômica  
**prática:** tradução de sequências de DNA/RNA, identificação de domínios de proteínas e construção de HMMs

**aula 8** outros Omics : fundamentos e informações sobre outros omics e interatômica  
**prática:** bancos de interatômica, metabólica e integração KEGG

**aula 9** filogenia molecular I : alinhamento / matrizes de evolução  
**prática:** alinhamento para filogenia, identificação de matriz evolutiva correta

**aula 10** filogenia molecular II : métodos de construção de árvores e suporte estatístico  
**prática:** construção de uma árvore filogenética por ML com suporte estatístico

**aula 11** filogenia molecular III : análise de árvores genes. genes parálogos, ortólogos e xenólogos  
**prática:** interpretação de árvore de espécies e de genes

**aula 12** proteômica estrutural I : Fundamentos da proteômica estrutural  
**prática:** banco rcsb pdb e visualização de pdbs com pymol

**aula 13** proteômica estrutural II: Folding de proteínas e bancos de folding. Interpretação e identificação de padrões estruturais de proteínas  
**prática:** bancos CATH, alinhamentos estrutural com pymol e mustang

**aula 14** proteômica estrutural III: Modelagem por threading e avaliação de qualidade de modelos e templates  
**prática:** criação de modelos com HHpred, Phyre e modeller

**aula 15** docking molecular I : Fundamentação teórica de interação proteína e ligantes  
**prática:** uso do programa autodock contra um molécula exemplo

**aula 16** docking molecular II: fundamentação e aplicação virtual screening e ferramentas de drug desing  
**prática:** bancos de dados de moléculas e prática (e pequena escala) virtual screening e avaliação de resultados

**aula 17** Inteligência Artificial, Big Data outras perspectivas futuras

**aula 18** trabalho apresentação

**aula 19** trabalho apresentação

### ***Bibliografia sugerida***

ESK, Arthur M.. Introdução à Bioinformática. 2 ed. PortoAlegre: Artmed, 2008. 384 p.

GIBAS, C.; JAMBECK, P.; Developing Bioinformatics Computer Skills, O'Reilly & Associates, 2001. SETUBAL, J. C.; MEIDANIS, J.;

Joe Felsenstein. Inferring Phylogenies Editora : OUP USA; 2003ª edição (4 setembro 2003)  
, 580 páginas ISBN-10 : 9780878931774

Gregory Petsko (Autor), Dagmar Ringe (Autor) Protein Structure and Function OUP Oxford (29 maio 2008) 220 páginas ISBN-10 : 0199556849

Drug Design: Structure- and Ligand-Based Approaches (English Edition) Illustrated Edição, por Kenneth M. Merz, Jr (Editor), Dagmar Ringe (Editor), Charles H. Reynolds (Editor) Editora : Cambridge University Press; Illustrated edição (31 maio 2010) 286 páginas, ASIN : B00H7WPDME

Introduction to Computational Molecular Biology, Brooks/Cole, Pub Co, 1997.

VASCONCELOS, Ana T.; Bioinformática: Análise de Banco de Dados Genético, II Escola de Verão: Métodos Computacionais em Biologia, pp. 47-55, 2001.

### **Avaliação dos alunos**

- 1) 2 provas teóricas\* ( p1 25 % + p2 25 % = 50 % total )
- 2) Trabalho escrito e apresentado via vídeo = 50 % do total

- prova teórica assíncrona escrita
- trabalho com parte escrita explicando as análises feitas e uma apresentação com explicação da base teórica do alvo a análise e os resultados, o video de 15 min com resumo do que for apresentado
- trabalho pode ser individual ou em dupla