

BIOINFORMÁTICA

Profa. Raquel Minardi

PRÉ-REQUISITO: PDS1

EMENTA: Fundamentos de biologia molecular computacional e algoritmos clássicos e modernos em Bioinformática.

A – OBJETIVOS

Introduzir os conceitos associados à biologia molecular computacional e os principais problemas e desafios computacionais da área. Ajudar a desenvolver o raciocínio lógico, a capacidade de abstração e a modelagem e resolução de problemas biológicos por meio do desenvolvimento de algoritmos. Apresentar algoritmos clássicos da área relacionando os mesmos com algoritmos contemporâneos. Motivar o estudante a analisar os resultados dos algoritmos sob a perspectiva da eficiência computacional bem como da semântica biológica.

B – PROGRAMA

Conceitos básicos de biologia molecular

1. Vida
2. Proteínas
3. Ácidos nucleicos
 - a. DNA
 - b. RNA
4. Mecanismos da genética molecular
 - a. Genes e código genético
 - b. Transcrição, tradução e síntese protéica
 - c. Composição de proteínas e relação sequência x estrutura x função
5. Como os dados biológicos são gerados
 - a. Sequenciamento de genomas e proteínas
 - b. Resolução de estruturas de proteínas
6. Bases de dados biológicas

Algoritmos para comparação entre sequências biológicas

1. Distância entre sequências
 - a. Distância de Hamming
 - b. Distância de Levenstein
 - c. Matrizes de substituição
 - i. PAM
 - ii. BLOSUM
2. Tipos de alinhamento de sequências
 - a. Global

- b. Local
 - c. Par a par
 - d. Múltiplo
3. Algoritmo de Needleman-Wunsch (alinhamento global par-a-par)
 4. Algoritmo de Smith-Waterman (alinhamento local)
 5. Heurísticas para alinhamentos múltiplos
 6. Aplicações do alinhamento de sequências

Algoritmos para montagem de genomas

1. Desafios computacionais da montagem de genomas
2. Modelos
 - a. Grafos de Bruijn
3. Algoritmos
 - a. Algoritmos baseados no caminho Euleriano
 - b. Algoritmos baseados no caminho Hamiltoniano
 - c. Algoritmos modernos
4. Métricas de avaliação da qualidade das montagens

Algoritmos para construção de árvores filogenéticas

1. O problema da filogenia perfeita
2. Parsimônia e compatibilidade em filogenias
3. Algoritmos para matrizes de distância
 - a. Reconstruindo árvores aditivas
 - b. Reconstruindo árvores ultramétricas
4. Concordância entre filogenias

Algoritmos para bioinformática estrutural

1. O problema do enovelamento de proteínas
2. Visualização molecular
3. Algoritmos para predição de estruturas secundárias
4. Algoritmos para predição de estruturas terciárias
 - a. O problema da predição de estruturas ab initio
 - b. Algoritmos de satisfação de restrições espaciais para modelagem comparativa
5. Algoritmos para sobreposição estrutural
6. Paradigmas para cálculo de interações em proteínas e seus ligantes
 - a. Geométricos
 - b. Baseados em distância
7. Análise de redes moleculares
 - a. Métricas de centralidade em redes
 - b. Algoritmos para detecção de comunidades
 - c. Busca de padrões frequentes em grafos
8. Ancoragem de ligantes em proteínas
 - a. O problema da ancoragem de ligantes em proteínas

- b. Algoritmos genéticos para a ancoragem de ligantes
- c. Abordagens de avaliação da qualidade dos complexos teóricos

C - BIBLIOGRAFIA

Jones, Neil C., Pavel A. Pevzner, and Pavel Pevzner. An introduction to bioinformatics algorithms. MIT press, 2004.

Lesk, Arthur. Introduction to bioinformatics. Oxford University Press, 2019.

Setubal, Joao Carlos, Joao Meidanis e Setubal-Meidanis. Introduction to computational molecular biology, 1997.

Gu, Jenny, and Philip E. Bourne, eds. Structural bioinformatics, 2009.

Berg, Jeremy M., John L. Tymoczko, and Lubert Stryer. Bioquímica, 2017.