

Podstawy bioinformatyki dla biotechnologów

Wykład 2 Definicja bioinformatyki

plan

- Sprawy organizacyjne
- Definicje bioinformatyki
- Miejsce i dziedziny bioinformatyki
- Projekty bioinformatyczne

Od jakiego pułapu startujemy?

Zakładamy, że te pojęcia są w małym palcu:

- DNA, RNA – struktura, funkcje, rodzaje
- Genom
- Białka – struktury, funkcje, rodzaje, wiązania peptydowe
- Równanie, funkcja, algorytm

Synteza przedmiotów: chemia, fizyka, biologia, matematyka, informatyka,

matematyka

Matematyka (z łac. mathematicus, od gr. μαθηματικός mathēmatikós, od μαθηματ-, μαθημα mathēmat-, mathēma, „nauka, lekcja, poznanie”, od μανθάνειν manthánein, „uczyć się, dowiedzieć”; prawd. spokr. z goc. mundon, „baczyć, uważać”) – nauka dostarczająca narzędzi do otrzymywania ścisłych wniosków z przyjętych założeń.

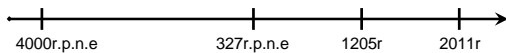
Encyklopedia PWN. [26 lutego 2011]

informatyka

Wykład inauguracyjny
Prof. dr. hab. inż. Mariana Adamskiego

Skale czasowe

- **matematyka**
- **biologia** (w tym szczególnie *biologia Molekularna i genetyka*)
- **cybernetyka / informatyka**
- **bioinformatyka**
- **nauka** (epokowe wydarzenia z każdej dziedziny nauki od początków jej historii, np. wynalezienie papieru, prochu strzelniczego, czcionka, lot balonem itp.)
- **religia** (np. Egipt i wrócenie z gwiazd, okres życia Jezusa, śmierć ostatniego apostoła, I sobór w Nicei, Luter itp.)
- **wydarzenia historyczne** (wojny, postaci historyczne, odkrycie Ameryki)



multimedia

- Human genome sequencing-Animated tutorial
- DNA - The Human Race (i pozostałe 4 odcinki)
- DNA - The Search For Adam
- THE REAL EVE

Do poczytania

- http://www.ornl.gov/sci/techresources/Human_Genome/home.shtml
- <http://www.sanger.ac.uk/about/history/hgp/>
- <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
- <http://www.ebi.ac.uk/>
- <http://www.ddbj.nig.ac.jp/>
- <http://www.insdc.org/>
- <http://www.barcodeoflife.org/>
- <http://www.staff.amu.edu.pl/~ewas/>

Bioinformatyka

- Jest to dziedzina biologiczna wywodząca się z biotechnologii
- Aby zrozumieć bioinformatykę biolog/biotechnolog musi poznać kilka względnie prostych zasad matematyki i umieć obsługiwać komputer (nie koniecznie programować)
- Aby zrozumieć bioinformatykę informatyk/matematyk musi poznać i dogłębnie zrozumieć większość zasad i praw biologii (głównie molekularnej)

Bioinformatyka wg NCBI

„Dziedzina nauki, w której biologia, informatyka i technologia informacyjna zostały scalone w jedną dyscyplinę.”

Cele:

- opracowanie nowych algorytmów i statystyki
- analiza i interpretacje różnych typów danych (m.in. nukleotydowych i aminokwasowych sekwencji, domen i struktur białkowych)
- opracowanie i wdrożenie narzędzi, które umożliwią efektywne zarządzanie dostępem i różnych rodzajów informacji.

Przełożył: Adam Szlaski

Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 10

Bioinformatyka wg EBI

„Bioinformatyka stanowi multidyscyplinarne pole naukowe będące interfejsem pomiędzy biologią a informatyką.”

Cele:

- odkrycie bogactwa biologicznej informacji ukrytej w ogromnej ilości danych
- otrzymanie jaśniejszego wglądu w w fundamenty biologiczne organizmu

Przełożył: Adam Szlaski

Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 11

Bioinformatyka wg BISTIC

Badania naukowe, rozwój lub aplikacje będące narzędziami obliczeniowymi umożliwiającymi poszerzenie możliwości wykorzystania danych biologicznych, medycznych, behawioralnych lub zdrowotnych w celu pozyskiwania, przechowywania, organizowania, archiwizacji lub wizualizacji tych danych

17 lipca 2000 – komitet powołany przez **The Biomedical Information Science and Technology Initiative Consortium** (www.bisti.nih.gov)

Przełożył: Adam Szlaski

Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 12

Bioinformatyka

"The mathematical, statistical and computing methods that aim to solve biological problems using DNA and amino acid sequences and related information."

Fredj Tekaiia (UMSC Paryż)

Bioinformatyka jest to dyscyplina nauk biologicznych zajmująca się stosowaniem narzędzi matematycznych i informatycznych do rozwiązywania problemów biologii (głównie biologii molekularnej) i zagadnień biotechnologicznych.

JP Jastrzębski

Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 13

Bioinformatyka

dyscyplina nauk biologicznych wywodząca się z biotechnologii (genetyki), zajmująca się stosowaniem narzędzi matematycznych i informatycznych do rozwiązywania problemów biologii (głównie biologii molekularnej) i zagadnień biotechnologicznych. Podstawowymi poddziedzinami bioinformatyki są: genomika, proteomika, transkryptomika i metabolomika.

- in vivo** – badania przyżyciowe; mało możliwości manipulacji
- in situ** – w tkance; ograniczone możliwości manipulacji
- in vitro** – w szkle; największe „naturalne” możliwości manipulacji
- in silico** – w komputerze; możliwość analizowania wszelkich, nawet pozornie niemożliwych układów

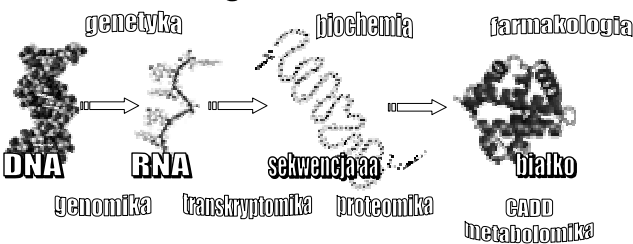
Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 14

Biotechnologia a bioinformatyka

biotechnologia



bioinformatyka

Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 15

Dygresja - Obalenie dogmatów!!!

1 sekwencja DNA

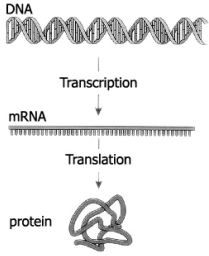
→ 1 sekwencja cDNA

→ 1 sekwencja mRNA

→ 1 sekwencja aa (str. I-rz.)

→ 1 struktura II-rzędowa

→ 1 struktura 3D



Źródło:
<http://encephalon.ca/>

Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 16

Historyczne podłoże bioinformatyki

Lata 80' – *United States Department of Energy* tworzy GenBank

1.X.1990 – Human Genom Project (plan ukończenia 2005)

(*United States Department of Energy, National Institutes of Health*) - Dr. Francis Collins

1996 – zsekwencjonowanie genomu drożdży (13 milionów par zasad i 6 275 genów)

1997 – zsekwencjonowanie genomu *Caenorhabditis elegans* (13500 genów)

IV-V.1998 – debaty publiczne w Europie; dr Craig Venter i NIH w USA

II 2001 – publikacje w Nature i Science



<http://www.genom.gov/>



Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 17

genomika

dziedzina biologii molekularnej i biologii teoretycznej (pokrewna genetyce i ściśle związana z bioinformatyką) zajmująca się analizą genomu organizmów. Głównym celem genomiki jest poznanie sekwencji oraz mapowanie genomu ale również określenie wszelkich zależności i interakcji wewnątrz genomu.

W odróżnieniu od genetyki genomika obejmuje ogół zjawisk genetycznych całościowo i przy pomocy biologii teoretycznej (głównie bioinformatyki) stara się określić i opisać wszystkie zależności tych zjawisk oraz wpisać je w ogół procesów metabolicznych żywego organizmu.

- genomika funkcjonalna (poznane funkcji wszystkich genów w genomie)
- genomika strukturalna (poznane sekwencji i jej wstępny opis)
- genomika teoretyczna (ogólne prawa rządzące genomami)
- genomika porównawcza (ewolucja genomów)
- genomika indywidualnych różnic (zmiennosć międzysobnicza genomów tego samego gatunku)

Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 18

proteomika

gałąź nauki zajmująca się badaniem białek - ich struktury, sprawowanych przez nie funkcji i zależności między nimi.

Proteomika obejmuje analizę całych **proteomów** (zestaw wszystkich białek w komórce, liniach komórkowych, tkankach lub całych organizmach).

Proteomika jest dziedziną znacznie szerszą i bardziej złożoną niż genomika, ponieważ liczba genów kodujących białka jest znacznie mniejsza niż liczba białek w komórce (genów w komórce człowieka jest około 22 tysiące, natomiast białek mniej więcej 400 tysięcy) .
(Wikipedia)

Białka są polimerami 20 typów monomerów (aminokwasy), DNA – 4 (ATCG)

- proteomika funkcjonalna (*analiza funkcji wszystkich białek w proteomie*)
- proteomika strukturalna (*poznanie struktury przestrzennej białek*)
- proteomika teoretyczna (*ogólne prawa rządzące proteomem*)
- proteomika porównawcza (*ewolucja białek i analiza miejsc zmienności genetycznej*)
- proteomika indywidualnych różnic (*zmienność międzysobnicza proteomów i poszczególnych białek tego samego gatunku*)

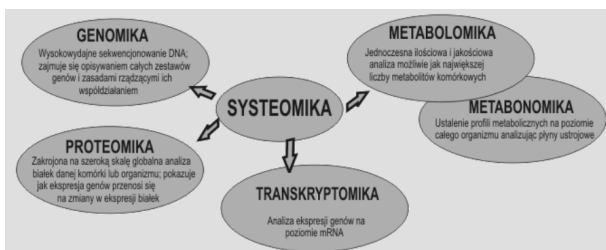
Transkryptomika i metabolomika

Transkryptomika - jest to dziedzina, za pomocą której określane jest miejsce i czas aktywności genów poprzez badanie transkryptomu, czyli ogółu cząsteczek mRNA znajdujących się w danym momencie w komórce.

Metabolomika - dziedzina nauki zajmująca się badaniem zestawu wszystkich metabolitów obecnych w organizmie, tkance czy komórce - metabolomu. Jest zaliczana obok genomiki, transkryptomiki i proteomiki do biologii systemowej.

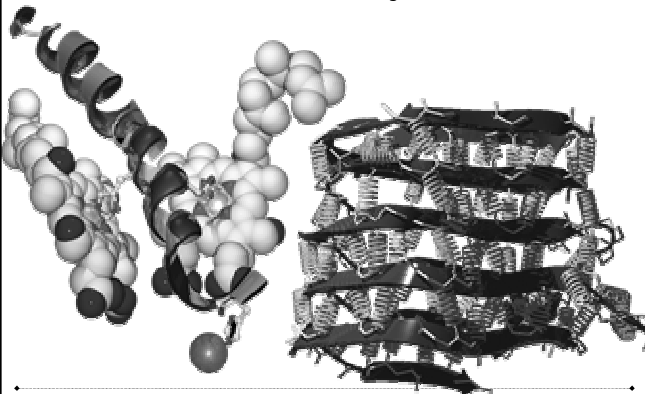
Biologia systemowa jest dziedziną nauki zajmującą się badaniem złożonych oddziaływań występujących w systemach biologicznych. Biologia systemowa łączy informacje zdobywane przez dziedziny nauki takie jak: genomika, transkryptomika, proteomika i metabolomika.

Wszystko...omika



Koło Naukowe przy Katedrze i Zakładzie Biofarmacji i Farmakodynamiki Akademii Medycznej w Gdańsku
<http://www.sbs.farmacja.amg.gda.pl/biofarmacja/>

wizualizacja

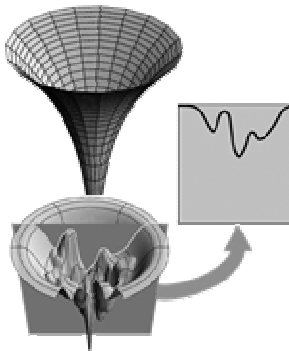


Dr Jan Paweł Jastrzębski

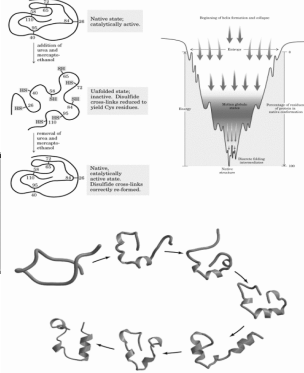
KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 31

Modelowanie *ab initio*



Protein Folding

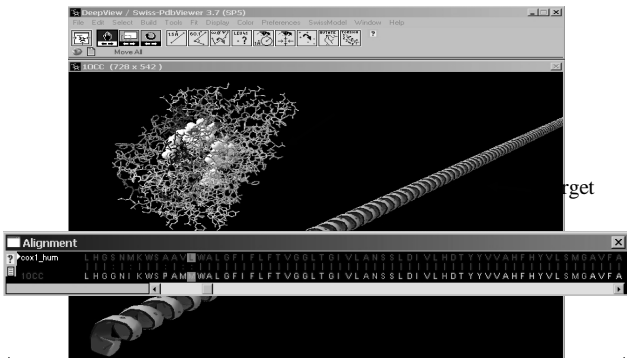


Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 32

Modelowanie homologiczne

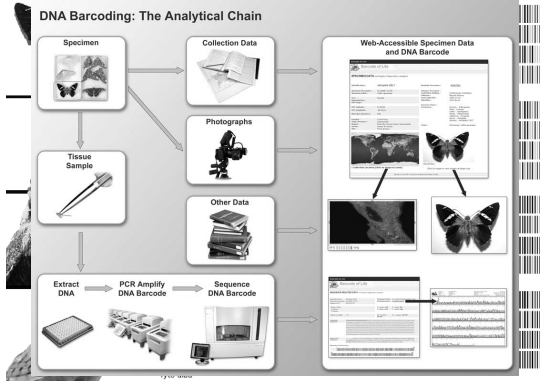


Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 33

DNA barcoding



Dr Jan Paweł Jastrzębski KFiBR, Wydział Biologii UWM Podstawy bioinformatyki Wykład 2 / 37

Przewidywanie struktury 2D

SSTMProt
The algorithm of prediction of the Secondary Structure of TransMembrane Protein

Protein name (optional)

Enter your sequence in FASTA format

hydrophobicity/hydrophilicity profile

Select scale:

- Kyte & Doolittle
- Hoop & Woods
- Lesser & Rose

Dr Jan Paweł Jastrzębski KFiBR, Wydział Biologii UWM Podstawy bioinformatyki Wykład 2 / 38

Baza metaBIOL

Metabolomiczna baza danych BIOL

Wyniki wyszukiwania:

Związki

- o 001964 : L-Sparteate 4-renalaldehyde
- o 001994 : Propane-1,2-diol 1-phosphate
- o 001995 : Hydroxyacetone phosphate
- o 002090 : sn-glycerol 3-phosphate
- o 002091 : glicykozona phosphate

Reakcje

- o 001920 : alcohol:IM2+ oxidoreductase
- o 001921 : alcohol:IM2+ oxidoreductase
- o 001922 : alcohol:IM2+ oxidoreductase
- o 001970 : L-homoserine:IM2+ oxidoreductase
- o 001971 : L-homoserine:IM2+ oxidoreductase
- o 002048 : (S,S)-butane-2,3-diol:IM2+ oxidoreductase
- o 002049 : ketonol:IM2+ oxidoreductase
- o 002050 : glicyrol:IM2+ 2-oxidoreductase
- o 002051 : Propane-1,2-diol-1-phosphate:IM2+ oxidoreductase
- o 002052 : sn-glycerol-3-phosphate:IM2+ 2-oxidoreductase
- o 002053 : Xylitol:IM2+ 4-oxidoreductase (D-Xylulose-forming)
- o 002054 : Xylitol:IM2+ 4-oxidoreductase (D-Xylulose-forming)

Enzymy

- o EC 1.1.1.1 : alcohol dehydrogenase
- o EC 1.1.1.1 : alcohol dehydrogenase (NADP-)
- o EC 1.1.1.1 : homoserine dehydrogenase
- o EC 1.1.1.1 : (S,S)-butandiol dehydrogenase
- o EC 1.1.1.1 : acetol dehydrogenase
- o EC 1.1.1.1 : glicyrol dehydrogenase
- o EC 1.1.1.1 : propandiol-phosphate dehydrogenase
- o EC 1.1.1.1 : glicyrol-3-phosphate dehydrogenase (NAD+)
- o EC 1.1.1.1 : D-Xylulose reductase
- o EC 1.1.1.1 : L-Xylulose reductase

Dr Jan Paweł Jastrzębski KFiBR, Wydział Biologii UWM Podstawy bioinformatyki Wykład 2 / 39

kasty

Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 40

Model P0

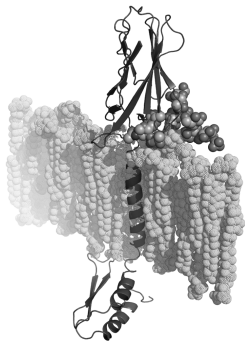
Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 41

P0 with carbohydrate anchored in membrane

P0 as a homophilic adhesion molecule



membrane

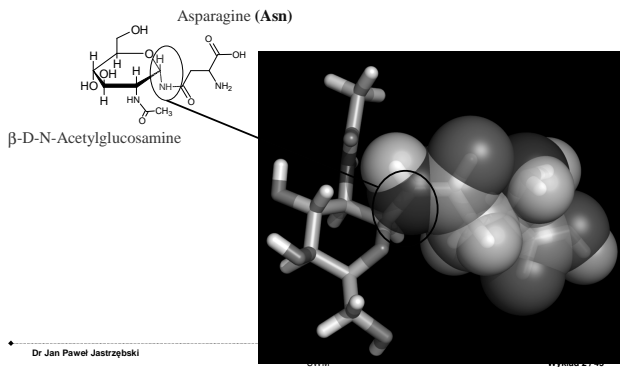
membrane

Dr Jan Paweł Jastrzębski

KFIBR, Wydział Biologii
UWM

Podstawy bioinformatyki
Wykład 2 / 42

Asn—GlcNAc N-linked glycosylation site



Model bakterii
