

FORMULÁRIO DE PLANO DE ENSINO – O DOCENTE PREENCHE SOMENTE OS CAMPOS CLAROS																		
 <p>Universidade Federal de São João del-Rei</p>	<h2>COORDENADORIA DO CURSO DE BIOTECNOLOGIA – COBIT</h2>																	
PLANO DE ENSINO																		
Curso: Biotecnologia																		
Grau Acadêmico: Bacharelado	Turno: Integral	Currículo: 2023																
Unidade Curricular: Bioinformática		Código:																
Natureza: Obrigatória	Período: 05	Ano/semestre: 2024/01																
Carga Horária Total: 60 h	Teórica: 50 h	Prática: 10 h																
Pré-requisitos: Programação de Computadores e Fundamentos de Engenharia Genética		Co-requisito: Não há																
Docente: Alex Gutterres Taranto	Unidade Acadêmica: DBTEC																	
<p>Ementa: Introdução a Bioinformática. Bancos de dados de informação biológica. Alinhamento de seqüências. Identificação de motivos e domínios regulatórios. Predição gênica. Predição de estrutura de RNA e proteína. Reconstrução filogenética. Análise genômica e genômica comparativa. Análise de expressão gênica. Redes de regulação gênica e redes metabólicas. Proteômica. Programação.</p>																		
<p>Objetivos: Familiarização com os métodos, princípios e ferramentas da bioinformática. Fundamentação nos tópicos introdutórios da bioinformática, assim como no uso das ferramentas e metodologias atuais da área. Os aspectos teóricos serão apresentados por meio de aulas expositivas e exemplos da literatura. As ferramentas computacionais serão utilizadas em laboratório de informática.</p>																		
<p>Conteúdo Programático: O conteúdo detalhado da ementa e as atividades (aulas, seminários, avaliações etc.), serão distribuídos em 60 horas (ou 30 aulas geminadas), conforme o seguinte cronograma:</p>																		
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="width: 15%;">Aula</th> <th>Conteúdo</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Unidade 1</td> <td>Desenvolvimento de Compostos Bioativos por Computador (teórico)</td> </tr> <tr> <td>Aula 1</td> <td>Apresentação do curso, exposição das avaliações e tarefas;</td> </tr> <tr> <td>Aula 2</td> <td>Aspectos gerais da ação dos fármacos; Origem e desenvolvimento de fármacos;</td> </tr> <tr> <td>Aula 3</td> <td>Relação estrutura atividade;</td> </tr> <tr> <td>Aula 4</td> <td>Estratégias de modificação molecular (bioisosterismo, hibridação, simplificação molecular);</td> </tr> <tr> <td>Aula 5</td> <td>Metabolismo e processo de latenciação de fármacos</td> </tr> <tr> <td>Aula 6</td> <td>Ensaio pré-clínicos, clínicos e Propriedade intelectual;</td> </tr> </tbody> </table>			Aula	Conteúdo	Unidade 1	Desenvolvimento de Compostos Bioativos por Computador (teórico)	Aula 1	Apresentação do curso, exposição das avaliações e tarefas;	Aula 2	Aspectos gerais da ação dos fármacos; Origem e desenvolvimento de fármacos;	Aula 3	Relação estrutura atividade;	Aula 4	Estratégias de modificação molecular (bioisosterismo, hibridação, simplificação molecular);	Aula 5	Metabolismo e processo de latenciação de fármacos	Aula 6	Ensaio pré-clínicos, clínicos e Propriedade intelectual;
Aula	Conteúdo																	
Unidade 1	Desenvolvimento de Compostos Bioativos por Computador (teórico)																	
Aula 1	Apresentação do curso, exposição das avaliações e tarefas;																	
Aula 2	Aspectos gerais da ação dos fármacos; Origem e desenvolvimento de fármacos;																	
Aula 3	Relação estrutura atividade;																	
Aula 4	Estratégias de modificação molecular (bioisosterismo, hibridação, simplificação molecular);																	
Aula 5	Metabolismo e processo de latenciação de fármacos																	
Aula 6	Ensaio pré-clínicos, clínicos e Propriedade intelectual;																	

Aula 7	Modelos Químicos: Mecânica Molecular, Métodos Quânticos, Métodos híbridos
Aula 8	Triagem Virtual com base no Ligante e na Estrutura;
Aula 9	Métodos <i>in silico</i> de determinação de estruturas proteicas;
Aula 10	Simulação de Dinâmica Molecular;
Aula 11	Uso de Inteligência Artificial em CADD;
Unidade 2	Ambiente Linux (experimental)
Aula 12	Introdução ao Linux e uso do shell;
Aula 13	Manipulação de arquivos (editor gedit) e cat;
Aula 14	Compactação e descompactação de arquivos;
Aula 15	Estrutura de diretórios;
Aula 16	Instalação de pacotes e aplicativos;
Aula 17	Shell Script/Comandos mais usuais do Linux
Aula 18	Avaliação I
Aula 19	Resolução da avaliação
Unidade 3	Bioinformática Estrutural (teórico/experimental)
Aula 20	Instalação de programas: pymol, chimera e datawarrior
Aula 21	Banco de dados de Proteínas (GenBank e PDB), banco de ligantes (Zinc, Pubchem e ChEMBL)
Aula 22	Triagem Virtual com base no Ligante. Programas: Pharmit, PLIP e Pymol;
Aula 23	Triagem Virtual Inversa. Softwares on line: swiss target predict;
Aula 24	Determinação de propriedades ADMET e Gerenciamento de ligantes (datawarrior);
Aula 25	Geração de estruturas proteicas (geração, validação e refinamento de modelos de proteínas). ab initio: raptor X, enovelamento i-tasser pyre2, modelagem comparativa SwissModel. Programa SwissModel
Aula 26	Triagem Virtual (docking): DockThor;
Aula 27	Visita Técnica ao Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC), Petrópolis. A depender da disponibilidade da instituição.
Aula 28	Avaliação II;
Aula 29	Resolução da avaliação II;
Aula 30	Avaliação substitutiva.

Metodologia e Recursos Auxiliares:

O programa será abordado por meio de aulas expositivas, podendo haver ocasionalmente atividades no portal didático, inclusive as avaliações. Os slides serão disponibilizado via portal didático aos alunos. A frequência será registrada e pontuada. **Adicionalmente, todas as aulas (teóricas e experimentais) serão realizadas no Laboratório de Computação, ao lado do salão peteca, prédio central, Campus Don Bosco (CDB).**

Avaliações:

O conteúdo será avaliado pela média de duas provas teóricas (A), com peso 2 cada, e frequência com peso 1 (F). Cada avaliação terá o valor de 10,0 pontos. A nota final será dada pela seguinte fórmula: $(2 \times \text{Avaliação 1} + 2 \times \text{Avaliação 2} + 1 \times \text{frequência})/10$. Haverá apenas uma avaliação substitutiva, com o conteúdo total da disciplina, após a realização de todas as avaliações, a qual substituirá a menor nota. Todos os alunos matriculados na disciplina podem realizar a avaliação substitutiva. As avaliações serão individuais através do portal didático, contendo questões interpretativas, dedutivas e de solução de problemas práticos, podendo haver consulta bibliográfica. Frequência: A frequência será registrada e pontuada.

Bibliografia Básica:

LEITE, F. H. A. **Práticas de química farmacêutica medicinal: uma abordagem computacional**. Curitiba: Appris, 2021. 73 p.

SÁ, E. R. A.; SILVA, F. I.; SOUZA, J. A. **Ferramentas de investigação em química computacional e bioinformática**. [S. l.]: Simplíssimo, 2021. (recurso online).

VERLI, H. (org.) **Bioinformática: da biologia à flexibilidade molecular**. São Paulo: Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular, 2014. Disponível em: <https://lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/166105/001012172.pdf?sequence=1&isAllowed=y>. Acesso em: 17 maio 2023.

Bibliografia Complementar:

ARSHAN, M. L. M. K. **Bioinformática**. [S. l.]: Nosso Conhecimento, 2021. 56p.

LOGING, W. T. (ed.). **Bioinformatics and computational biology in drug Discovery and development**. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press, 2016.

MCKINNEY, W. **Python para análise de dados: tratamento de dados com Pandas**, NumPye Ipython. São Paulo: Novatec, 2019. 615 p. ISBN 978-85-752-2647-6.

RAMALHO, L. **Python fluente**. São Paulo: Novatec, c2015. 799 p. ISBN 978-85-752-2462-5.

MONTANARI, C. A. **Química medicinal: métodos e fundamentos em planejamento de fármacos**. São Paulo: EDUSP, 2011. xviii, 712 p. (Acadêmica ; v. 79). ISBN978-85-314-1266-0.

Leitura adicional (artigos científicos, sites da internet, apostilas, capítulos de livros, etc):

1. DO VAL, Carlos Eduardo. Ubuntu, Guia do Iniciante 2.0. Vitória: e-book 191 p. 2012.

2. THE EUROPEAN BIOINFORMATICS INSTITUTE (EMBL-EBI). Train online. Disponível em: <<https://www.ebi.ac.uk/training/on-demand>>. Acesso em: 04 de dez. De 2023.

3. TeachOpenCADD. A teaching platform for computer-aided drug design. Disponível em: <<https://projects.volkamerlab.org/teachopencadd/>>. Acesso em: 04 de dez. De 2023.

Assinaturas e data:

Docente responsável pela unidade
São João del-Rei, 04 / 12 / 2023

Coordenador do Curso de Biotecnologia
São João del-Rei, / /