

Sinopse Synopsis

Unidade Curricular:
Curricular Unit:
Bioquímica Computacional

Docente Responsável:
Responsible academic staff member:
António Eduardo do Nascimento Ferreira

Conteúdos programáticos:

Introdução à Bioinformática na óptica do utilizador. A representação digital de estruturas e sequências de macromoléculas biológicas. Pesquisa de informação em bases de dados WEB disponíveis. Semelhança, homologia e conservação filogenética de sequências biológicas. Alinhamentos. Ferramentas WEB da área de Bioinformática. Software de representação e modelação de macromoléculas biológicas. Sobreposição estrutural. Representação de informação em formatos textuais: DHTML e XML. Principais esquemas de XML para bioinformática e biologia de sistemas. Introdução à programação usando a linguagem Python. Aplicações em bioinformática: extração de informação e processamento de ficheiros em formatos FASTA e PDB. Pesquisa de padrões, traduções de alfabetos e cálculos baseados em sequências biológicas. Aplicações e cálculo científico: algoritmos e métodos numéricos. Raízes de funções. Optimização. Equações lineares. Bibliotecas NumPy, Scipy e Sympy. Acesso programático a recursos online.

Syllabus:

Introduction to Bioinformatics. The computer representation of macromolecular structures and sequences. Information retrieval from Web based sources. Homology and conservation of biological sequences. Alignments. Visualization and modelling of macromolecular structures. Introduction to structural superposition. Structured text based formats: DHTML and XML. XML schemas in bioinformatics and systems biology. Introduction to computer programming using the language Python. Applications to bioinformatics: information extraction and processing from formats FASTA and PDB. Pattern search, alphabet translation and sequence derived computations. Applications in scientific computation: algorithms and numerical methods. Roots of functions, maxima and minima, matrix decomposition and linear equations. Modules numpy, scipy and sympy. Automatic online information retrieval.

Objectivos da unidade curricular e competências a adquirir:

Utilização da Web ou de programas da área da bioinformática.
Capacidade de codificação de pequenos programas para implementação de algoritmos de cálculo científico ou de tratamento de informação textual.

Objectives of the curricular unit and competencies to be acquired:

Proficiency in the use of the WWW or software in the field of Bioinformatics.
Implementation of basic algorithms of scientific computing and text manipulation in a procedural computer language.

Bibliografia principal:

- Apresentações e , to be available on a web site or campus e-learning platform
- Allen B. Downey, Jeffrey Elkner and Chris Meyers (2004). How to Think Like a Computer Scientist- Learning with Python, Gree tea press.
- C. H. Swaroop (2005) A Byte of Python.

- E. O. Voit (2000) Computational Analysis of Biochemical Systems, Cambridge University Press, Cambridge.

Main Bibliography:

- Supporting class materials, to be available on a web site or campus e-learning platform
- Allen B. Downey, Jeffrey Elkner and Chris Meyers (2004) How to Think Like a Computer Scientist- Learning with Python, Gree tea press.
- C. H. Swaroop (2005) A Byte of Python.
- E. O. Voit (2000) Computational Analysis of Biochemical Systems, Cambridge University Press, Cambridge.

Metodologias de ensino (avaliação incluída):

Aulas teóricas e exercícios realizados em computador. Avaliação: resolução de problemas para avaliação 50% + Exame final global 50% ou Exame final global 100%.

Teaching methodologies (including evaluation):

Lectures and computer based exercises. Grading: take home assignments 50% + final exam 50% or final exam 100%.