

bioinformatorek

Polskiego Towarzystwa Bioinformatycznego

Polish_Bioinformatics_Society_News

<http://ptbi.org.pl/>

#8 (2013)

red. Wiesław Nowak IF UMK



Szanowni Państwo,
Miło mi przywitać wszystkich członków i sympatyków Polskiego Towarzystwa Bioinformatycznego w imieniu Zarządu PTBI, w pierwszym numerze Bioinformatorka w roku 2013. W tym roku PTBI organizuje dwa spotkania, na które wszystkich Was zapraszamy:

Międzynarodowa konferencja Bioinformatics Society for Bioinformatics in Northern Europe (SocBiN), organizowana wspólnie z coroczną konferencją BIT w Toruniu: 26-29 czerwca 2013. Podobną konferencję organizowaliśmy już w Warszawie w r. 2008, była ona na bardzo wysokim poziomie naukowym. W roku 2013 zaprosiliśmy do uczestnictwa wielu znamienitych wykładowców z całego świata, mamy nadzieję, że konferencja ta przyczyni się do wzmożenia kontaktów członków PTBI z bioinformatykami z sąsiednich krajów, głównie ze Skandynawii i z Niemiec

Kolejny Zjazd PTBI i Sympozjum Bioinformatyczne odbędą się 27-29 września we Wrocławiu. Jak poprzednio, do wygłoszenia dłuższych wykładów zaprosiliśmy kilku gości nie-bioinformatyków z miasta, w którym odbywa się Sympozjum, pozostałą część programu wypełnią wykłady młodych naukowców wybrane z nadesłanych streszczeń. W ramach Zjazdu odbędą się wybory Zarządu PTBI na kadencję 2014-2016, w związku z czym serdecznie zapraszamy wszystkich członków Towarzystwa do aktywnego uczestnictwa.

W tym roku PTBI oficjalnie wspiera także studencką konferencję Liczby – Komputery – Życie, która odbędzie się w Krakowie w dniach 19-21 kwietnia. Serdecznie zapraszamy!

Na zakończenie chciałbym wszystkim przypomnieć o zbliżającym się terminie (15 marca!) nadsyłania zgłoszeń do konkursu na najlepsze prace magisterskie i doktorskie obronione w Polsce w roku 2012: szczegóły na stronie PTBI!



Zarząd:

Janusz M. Bujnicki (prezes)
Wiesław Nowak (wiceprezes)
Marta Szachniuk (wiceprezes)
Aleksandra Gruca (sekretarz)
Witold Rudnicki (skarbnik)

Komisja Rewizyjna:

Jacek Błazewicz (przewodniczący)
Marta Pasynkiewicz-Gierula
Anna Gambin

Polskie Towarzystwo Bioinformatyczne
ul. Ks. Trojdena 4 02-109 Warszawa

REGON 141348225

NIP 7010118646

Nr Konta 85 1240 1053 1111 0010 1724 1817

Składki członkowskie za rok 2013 wynoszą: 80 zł,
studenci i doktoranci – 40 zł

W dniu 10.02.2013 liczba członków 147 .

Janusz Bujnicki - Prezes PTBI

Informacje o zjazdach i konferencjach

Zachęcamy do liczego udziału w dużej, corocznej konferencji towarzystw bioinformatycznych Europy Północnej SocBIN13 połączonej w tym roku z warsztatami BIT13 (BioInformatics in Toruń), organizowanej przez SocBIN, PTBI oraz Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK.

Konferencja **Bioinformatics 2013/BIT13** odbędzie się w dniach 26-29 czerwca (środa-sobota) w Hotelu Bulwar, w Toruniu.



Keynote Lecture wygłosi **Søren Brunak** z TU of Denmark. Oprócz tradycyjnych wykładów wybitnych zaproszonych gości z zagranicy i wykładów wybranych ze streszczeń przewidujemy sesję plakatową i środowowe ćwiczenia praktyczne w Instytucie Fizyki UMK. Więcej informacji na stronie <http://ptbi.org.pl/SocBiN2013/>.

Członkowie PTBI i doktoranci mogą liczyć na co najmniej 100 euro zniżki (a jeśli się powiedzie nasza aplikacja do MNiSzW to nawet więcej) w opłacie rejestracyjnej. Warto już rezerwować hotele w Toruniu!



Liczby-Komputery-Życie

III Studencka Konferencja Matematyczno-Informatyczno-Biologiczna w Krakowie

Już po raz trzeci studenci i doktoranci matematyki, informatyki, biotechnologii i biofizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego łączą siły, tworząc interdyscyplinarny projekt z pogranicza tych dziedzin. 3 Studencka Konferencja Matematyczno-Informatyczno-Biologiczna „Liczby-Komputery-Życie” odbędzie się w dniach 19 - 21 kwietnia 2013 r. w budynku Wydziału Matematyki i Informatyki Uniwersytetu Jagiellońskiego. Spotkanie ma na celu przybliżenie uczestnikom założeń i problemów jednej z najbardziej dynamicznie rozwijających się dziedzin współczesnej nauki – bioinformatyki. Udział profesorów i studentów, reprezentujących różne środowiska naukowe, umożliwi spojrzenie na problemy bioinformatyczne zarówno od strony obliczeniowej jak i biologicznej, a także na wymianę doświadczeń i nawiązanie nowych kontaktów.

Do uczestnictwa zaproszeni są studenci oraz doktoranci kierunków przyrodniczych, matematyki i informatyki, jak również wszyscy zainteresowani rezultatem połączenia metod *in silico* z *in vitro*.

Szczegółowe informacje można znaleźć na stronie: www.lkz.ksi.ii.uj.edu.pl

PTBI objęło swoim patronatem trzecią edycję tej interdyscyplinarnej konferencji.

Serdecznie zapraszamy do Krakowa !

Komitet Organizacyjny

ICMMI 2013 – 3rd International Conference on Man-Machine Interactions 2013

Instytut Informatyki Politechniki Śląskiej oraz Instytut Informatyki Teoretycznej i Stosowanej PAN zapraszają na międzynarodową konferencję ICMMI 2013, która odbędzie się w 22-25 października w górach Beskidy na południu Polski.

W ramach konferencji przewidziana jest także sesja bioinformatyczna, dlatego zapraszamy do udziału wszystkich autorów, którzy chcieliby zgłosić prace z zakresu szeroko pojętej tematyki zastosowania metod komputerowych w biologii i medycynie.

Konferencja ICMMI jest interdyscyplinarną konferencją, której celem jest umożliwienie spotkania środowiska naukowego na międzynarodowym forum w celu wymiany doświadczeń i wiedzy, dyskusji oraz nawiązania nowych kontaktów. Tematyka konferencji jest bardzo szeroka i obejmuje zarówno praktyczne jak i teoretyczne aspekty związane z interakcją ludzi oraz maszyn. Organizatorzy zapraszają do przesyłania prac z zakresu (i nie tylko): metod inteligencji obliczeniowej, technik eksploracji danych i wspierania podejmowania decyzji, wykorzystania metod komputerowych w biologii i medycynie, technologii i narzędzi przeznaczonych dla osób niepełnosprawnych, metod przetwarzania, przechowywania i transferu danych oraz rozpoznawania wzorców.

Termin zgłaszania prac (do 8 stron w języku angielskim) mija **31 Marca 2013r.**

Zaakceptowane prace zostaną opublikowane w serii ***Advances in Intelligent Systems and Computing*** wydawnictwa Springer, która indeksowana jest w ISI Proceedings, DBLP, Ulrich's, EI-Compendex, SCOPUS, Zentralblatt Math, MetaPress, Springerlink.

Szczegółowe informacje można znaleźć na stronie konferencji: <http://icmmi.polsl.pl>

Serdecznie zapraszamy!
Komitet Organizacyjny

Konferencje, konferencje...

- **Symposium bioinformatyczne połączone z VI Zjazdem PTBI**, odbędzie się we Wrocławiu, w dniach 25.09 - 27.09.2013 (piątek-niedziela). Przewodniczącym Komitetu Programowego jest Małgorzata Kotulska (Politechnika Wrocławska). Zachęcamy członków PTBI oraz sympatyków bioinformatyki do udziału.
- Informujemy z przyjemnością, że kolejny **VII zjazd PTBI** odbędzie się w Warszawie, jesienią 2014 r. Organizujemy go wspólnie z PT Biochemicznym, PT Biologii Komórki i BT Biofizycznym. Oczekiwana liczba uczestników zjazdu: 800 osób. Podobnie jak podczas naszych „osobnych” zjazdów, młodzi naukowcy będą mieli okazję zaprezentować swoje prace w ramach sesji bioinformatycznej. Dodatkowo, w ramach pozostałych „tematycznych” sesji (np. genomika, proteomika) odbędą się wykłady polskich bioinformatyków-seniorów. Także wspólne sesje posterowe będą stanowiły świetną okazję do zaprezentowania naszych dokonań kolegom i koleżankom z innych obszarów badawczych.

Zaproszenie do Będlewa:

Uczestnictwo bezpłatne!

Dodatkowo możliwość
wnioskowania o stypendium na
dofinansowanie kosztów
podróży dla uczestników z
Europy Wschodniej.

Uwaga - liczba miejsc
ograniczona!

2013 Autumn school on computational aspects of gene regulation



13-19 Oct. 2013
Będlewo, Poland

Speakers:

David Arnosti, University of Michigan, East Lansing
Julien Gagneur, LMU Gene Center, Munich
Wolfgang Huber, EMBL, Heidelberg, Germany
Artur Jarmołowski, Adam Mickiewicz University, Poznań
Uwe Ohler, Duke University, Durham and Max Delbrück Center, Berlin
Shyam Prabhakar, Genome Institute of Singapore, Singapore
Zofia Szweykowska-Kulińska, Adam Mickiewicz University, Poznań
Martin Vingron, MPI for Molecular Genetics, Berlin
Bartek Wilczyński, University of Warsaw,
Limsoon Wong, National University of Singapore, Singapore

Topics:

- Epigenetic modifications in gene expression, histone mark networks
- Post-transcriptional regulation by small RNAs and RNA binding proteins
- *De novo* annotation of genomic features, systems genetics
- Regulatory genomics, modeling TF-DNA binding affinity
- Applying classical signal processing techniques to NGS Data,
- Alternative splicing and microRNA in regulation of gene expression
- Differential expression analysis and multiple hypothesis testing
- *Cis*-regulatory elements in development, fractional TF occupancy models
- Network reconstruction, chromatin domains in gene expression regulation
- Disease gene expression and proteomic profile analysis

Local organizers: Jerzy Tiurny and Bartek Wilczyński
tiurny@mimuw.edu.pl bartek@mimuw.edu.pl

Registration until **April 30th 2013**,

Webpage: <http://bioputer.mimuw.edu.pl/2013-school/>

Sprawozdania z konferencji...

- **V Zjazd PTBI i Sympozjum Bioinformatyczne** Tegoroczny V Zjazd PTBI i Sympozjum Bioinformatyczne odbył się w dniach 25-27 maja 2012 roku w Gdańsku. Organizacją Sympozjum oraz Zjazdu zajmował się Komitet Organizacyjny w składzie: Borys Wróbel (przewodniczący), Joanna Piwowarczyk, Krzysztof Giaro, Łukasz Munio oraz Witold Rudnicki.
- Zjazd zgromadził ponad 100 uczestników z kilkunastu ośrodków naukowych z Polski i zagranicy. Uczestnicy mieli okazję wysłuchać 30 wystąpień na ośmiu sesjach tematycznych oraz obejrzeć 53 plakaty. Z dużym zainteresowaniem wysłuchano 5 wykładów zaproszonych:
 1. *Why does biology need informatics, and does informatics need biology?*
(prof. Grzegorz Węgrzyn)
 2. *Bioinformatics in a wet lab; a case study of iron-sulfur Fe/S cluster biogenesis*
(prof. Jarosław Marszałek)
 3. *Computational modelling, analysis and synthesis of gene regulatory networks*
(prof. Yaochu Jin)
 4. *Measurements, models, meaning, and modesty in Systems Biology*
(dr Maria Schilstra)
 5. *Coarse grained description of biomolecular systems*
(prof. Adam Liwo)

Równolegle do sesji planarnych Sympozjum PTBI odbywały się spotkania satelitarne Polskiej Sieci Sztucznego Życia.

W trakcie Sympozjum odbyły się konkursy: na najlepszą prezentację oraz na najlepszy plakat. Wysokość każdej z nagród wyniosła 1000 zł.

Nagrodę za **najlepszą prezentację** zdobył:

Szymon Wąsik z Politechniki Poznańskiej za prezentację
"Enhancing HCV infection modelling using multi-agent approach".



Nagrodę za **najlepszy plakat** otrzymał:

Michał Woźniak z Uniwersytetu Warszawskiego za plakat „*An approach to identifying drug resistance associated mutations in bacteria*”.



Fot.NN

Wyniki konkursów PTBI

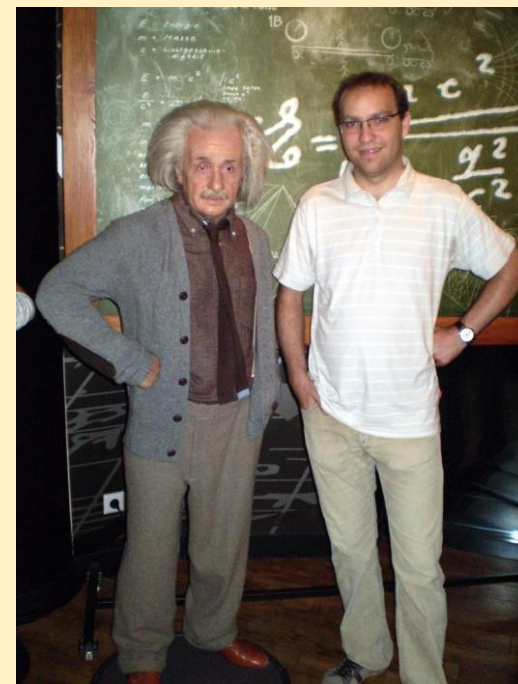
W czasie Zjazdu miało również miejsce coroczne **Walne Zebranie Polskiego Towarzystwa Bioinformatycznego**. Na zebraniu walnym ogłoszono wyniki ogólnopolskich konkursów PTBI na najlepszą pracę magisterską (IV konkurs) i doktorską (III konkurs) z bioinformatyki obronioną w roku 2011.

Najwyższą ocenę otrzymała praca magisterska napisana przez **Jerzego Stanisławskiego** z Politechniki Wrocławskiej (promotor pracy: dr hab. inż. Olgierd Unold).

Wyróżnienia w konkursie otrzymali:

Maciej Jasiński z Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu (promotorami pracy byli: prof. Wiesław Nowak oraz dr Maciej Długosz z UW)

Tomasz Żok (na zdjęciu → z prawej) z Politechniki Poznańskiej (promotor pracy: dr inż. Marta Szachniuk).



I Nagrodę (6000 zł) za najlepszą pracę doktorską zdobył **Bogusław Kluge** z Uniwersytetu Warszawskiego, promotorem pracy jest prof. Anna Gambin.

Bogusław Kluge o sobie...

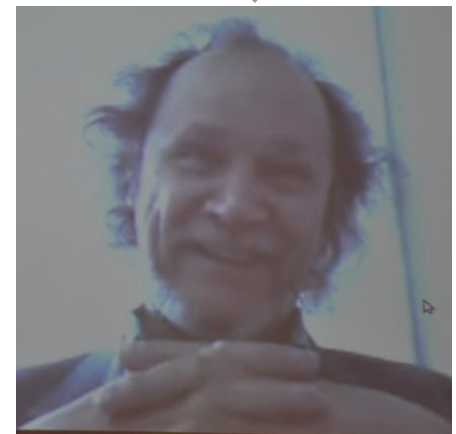


Bioinformatyką zainteresowałem się na etapie magisterskim studiów informatycznych na Wydziale Matematyki, Informatyki i Mechaniki Uniwersytetu Warszawskiego i pozostałem przy niej na studiach doktoranckich. Pod kierunkiem prof. dr hab. Anny Gambin uczestniczyłem w projektach związanych z analizą danych spektrometrii masowej. Z początku wiedziony byłem chęcią poznania nowej dziedziny, z czasem zacząłem doceniać, że problemy biologiczne mogą być inspiracją dla fascynujących rozważań matematycznych. Zdobywałem wiedzę i doświadczenie w analizach statystycznych i metodach Monte Carlo. Obecnie pracuję jako post-doc w laboratorium prof. Janusza Bujnickiego w Międzynarodowym Instytucie Biologii Molekularnej i Komórkowej w Warszawie, gdzie mam okazję poznać bliżej pracę biologów.

BIT12 – jesienią, ale też głośny

W dniach 27 - 29 września 2012 roku w Instytucie Fizyki UMK odbyły się doroczne warsztaty z serii BioInformatics in Torun BIT12. W Komitecie programowym pracowali głównie W. Nowak i J. Bujnicki, w organizacyjnym: W. Nowak, W. Rudnicki, K. Mikulska, A. Gogolińska, Ł. Peplowski, R. Jankowski, M. Dąbrowski i in. Do sukcesu finansowego przyczyniła się walcie wiceprezeska PTBI M. Szachniuk (→ dotacja MNiSzW). W tym roku pobity został kolejny rekord frekwencji – w konferencji uczestniczyło blisko 100 osób z kraju i zagranicy. Spotkanie otworzył z Singapuru (przez internet) obecny Prorektor UMK ds. Nauki **prof. Włodzisław Duch** – kognitywista, ale też poniekąd bioinformatyk.

Pierwszy dzień BIT12 zdominowały zagadnienia związane z bioinformatyką strukturalną białek i RNA. Referat otwierający pt. „**Energy design for protein docking**”, wygłosił prof. **Ron Elber** (U. of Texas). Prof. **Ina Koch** (Frankfurt) opowiedziała jak można wykorzystać sieci Petriego do modelowania reakcji biochemicznych. Swoje wyniki referowali, m.in., **B. Kondrashov** (Barcelona), **A. Bateman** (Hixon), **L. Kurgan** (Alberta), **R. Czerminski** (Boston). Referat prof. **J. Błażewicza** (PP) *Computer Science and the Origin of Life* stanowił dobre wprowadzenie do sesji piątkowej, realizowanej pod patronatem Komitetu Biologii Ewolucyjnej PAN. Referowali m.in. **W. Babik**, UJ (*Genome-wide patterns of divergence and gene flow inferred from transcriptome sequences*), **J. Radwan**, UJ (*Evolution of polymorphism of MHC genes: simulation models*), **J. Kozłowski**, UJ (*The economy of life*), **B. Wróbel**, PAN, Sopot (*Artificial life, artificial embryogenesis: evolutionary-developmental biology in silico*).



BIT12 – sesje warsztatowe



Prof. Samuel Flores (Uppsala)

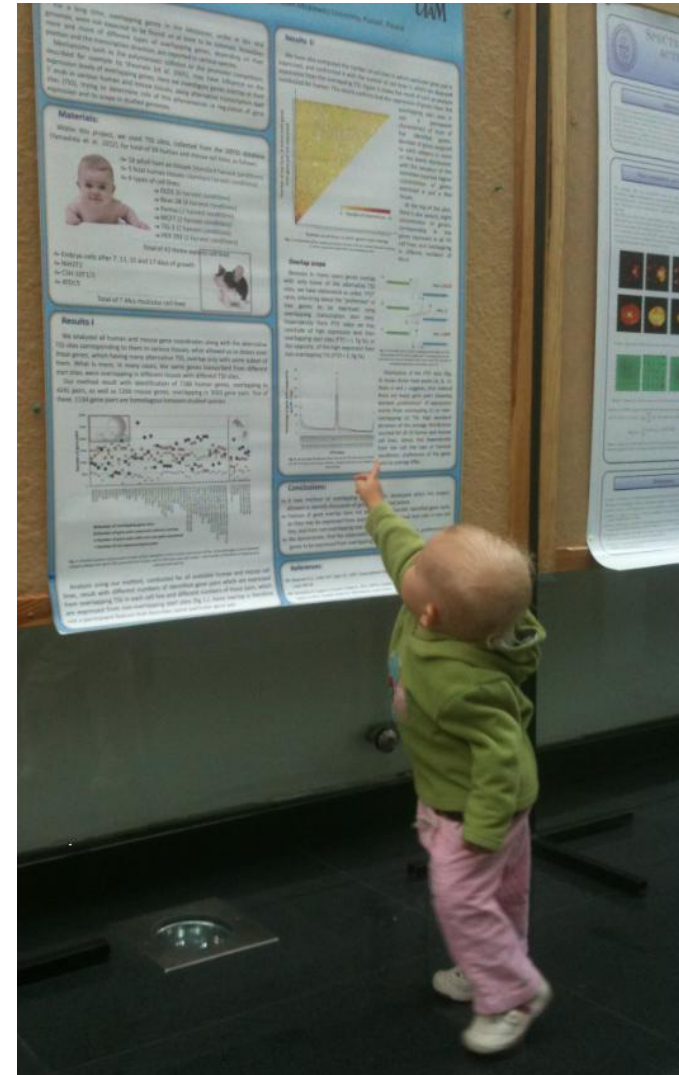
Warto podkreślić, że w sobotę na BIT12 odbyło się aż **6 sesji warsztatowych**, które poprowadzili:

1. S. Orłowski (CANON-Optopol, Toruń),
2. S. Walkowiak (ICM UW),
3. J. Sarzyńska (IChB PAN, Poznań),
4. S. Flores (Uppsala Univ.),
5. K. Murzyn (UJ),
6. B. Kluge (IIMCB, W-wa).

Przyjazd wielu gości z zagranicy był **możliwy dzięki dotacji z MNiSzW**.

BIT12 – sesja posterowa

Na sesji posterowej BIT12
zaprezentowano ponad
60 plakatów,
niektóre zainteresowały nawet
najmłodszych studentów (in spe) ...



BIT12 – mini fotoreportaż 😊



Ina Koch, Witold Rudnicki,
Alex Bateman, Mai Suan Li,
Janusz Bujnicki



Ron Elber,
Wiesiek Nowak,
Ryszard Czerminski,
Lukasz Peplowski

BIT12 się bawi

Czwartkowy wieczór – wypełniło w znacznej mierze patrzenie w sufit (pięknie odrestaurowany w restauracji w Montenegro), a potem dyskusje przy pizzy. Część towarzyską w piątek stanowił wieczór indyjski połączony z pokazami i kursem salsy prowadzonym przez instruktorów (1/2 składu tancerzy legitymuje się doktoratem z biofizyki). Prawie pełen autobus wyjechał na wycieczkę do obserwatorium astronomicznego UMK w Piwnicach. Bioinformatycy obejrzeli tam 32 m radioteleskop, który być może wykryje ślady bio- w kosmosie.

(W.Nowak)



Uczestnicy warsztatów BIT12 w Toruniu



prof. St. Chwirot - dziekan WFAiS UMK

Fot. P. Miszta

Przypominamy adresy z informacjami o konferencjach bioinformatycznych:

- <http://www.conference-service.com/conferences/bioinformatics.html>
- <http://www.conferencealerts.com/bioinform.htm>
- <http://www.iscb.org/iscb-conferences>
- <http://www.socbin.org/conferences.shtml>

Nagrody dla członków PTBI

Fot. Internet , fnp.org.pl



Profesor **Jacek Błazewicz** (z prawej, Politechnika Poznańska) wraz z profesorem **Erwinem Peschem** z Uniwersytetu w Siegen zostali laureatami czwartej edycji Polsko-Niemieckiej **Nagrody Naukowej Copernicus**. Nagroda przyznawana jest osobom, które w szczególny sposób przyczyniają się do rozwoju polsko-niemieckiej współpracy naukowej. Profesorowie Błazewicz i Pesch zostali uhonorowani za prace nad algorytmami stosowanymi, m.in. w **bioinformatyce**.

Więcej: http://www.youtube.com/watch?v=5C_uD_yaBug , lub
<http://www.naukawpolsce.pap.pl/en/news/news,391854,polish-german-professors-receive-copernicus-science-award.html>

Gratulujemy ☺ !

19 grudnia 2012 roku w Zamku Królewskim w Warszawie minister Barbara Kudrycka wręczyła nagrody najwybitniejszym polskim naukowcom. W gronie laureatów nagród ministra 2012 znalazł się **prof. dr hab. Janusz Bujnicki** (Międzynarodowy Instytut Biologii Molekularnej i Komórkowej w Warszawie i Wydział Biologii UAM w Poznaniu), **Prezes PTBI**.



Fot: iimcb

Gratulujemy ☺ !

Krzysztof Palczewski otrzymał nagrodę FNP 2012 za rozwiązanie struktury rodopsyny oraz badania mechanizmów procesu widzenia.

Sławomir Filipek, W. Chemii UW

Rodopsyna jest jednym z receptorów sprzężonych z białkami G (GPCRs - G-protein-coupled receptors). Receptory te przekazują różnorodne sygnały z zewnątrz komórki do jej wnętrza co wywołuje określony efekt w komórce. Sygnały te docierają do receptora głównie poprzez cząsteczki sygnałowe m.in. hormony czy neuroprzekaźniki, ale także peptydy i małe białka. Związki te wiążąc się z receptorem aktywują go zmieniając jego kształt, wskutek czego może się on związać z białkiem G i je aktywować. Białka G z kolei przekazują sygnał na kolejne białka efektorowe. Na każdym z tych etapów dochodzi do wzmocnienia sygnału bowiem receptor może aktywować kilkaset cząsteczek białka G, a białko G z kolei kilkaset cząsteczek białka efektorowego. Z tego powodu receptory typu GPCR są tak bardzo rozpowszechnione i liczne (istnieje ok. 800 typów tych receptorów).

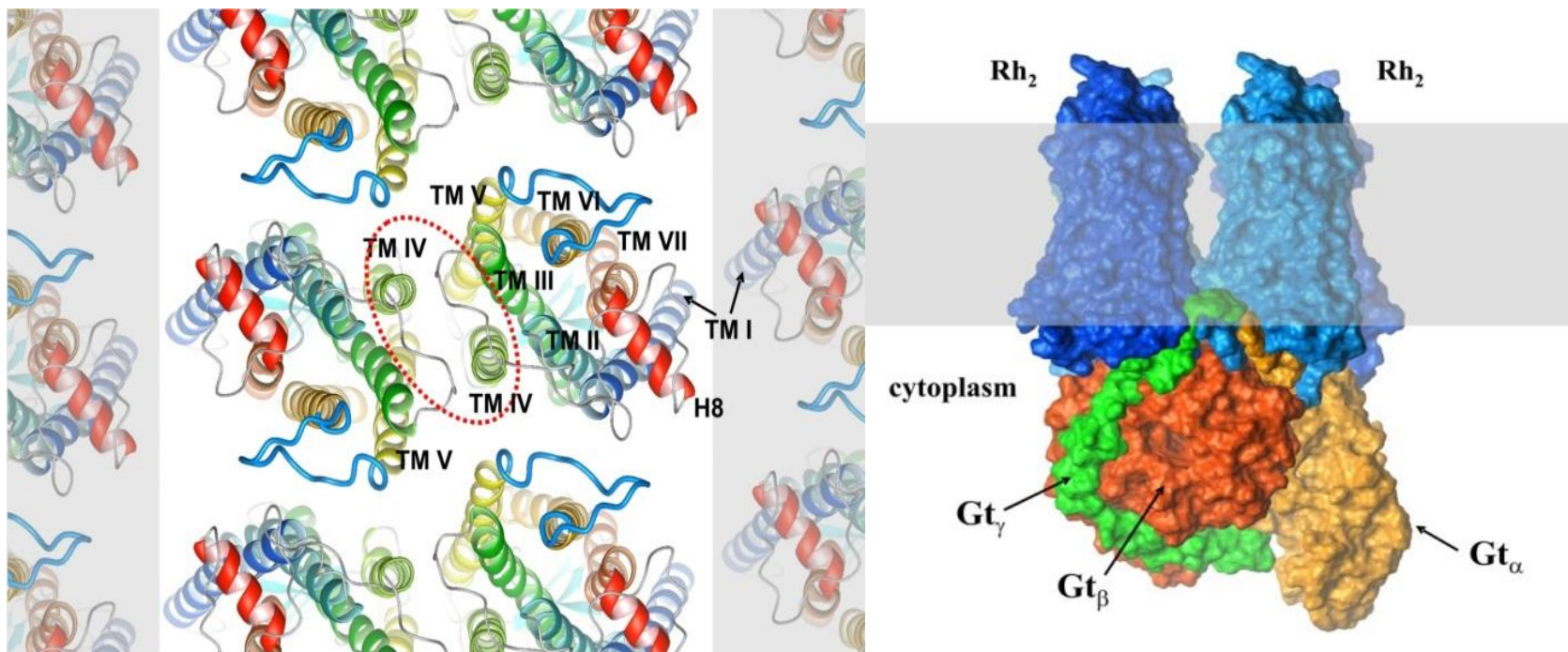


Zdjęcie „rodzinne” z małżeństwem Palczewskich (po prawej) na uroczystości otrzymania nagrody FNP. Autor artykułu drugi od lewej.

Rodopsyna także przykazuje sygnał ale sygnałem wejściowym jest zaabsorbowany kwant światła, bowiem rodopsyna znajduje się z komórkach pręcikowych siatkówki oka. Wzmocnienie tego sygnału jest tak duże, że pojedynczy kwant światła może doprowadzić do wzbudzenia całej komórki pręcikowej. Prof. Palczewski badał mechanizmy procesów widzenia począwszy od absorpcji światła przez retinal w rodopsynie poprzez udział wszystkich białek (receptorów i enzymów) związanych z aktywacją a następnie wygaszaniem sygnału i odtwarzaniem stanu pierwotnego komórki pręcikowej.

Moja współpraca z prof. Palczewskim rozpoczęła się wkrótce po opublikowaniu struktury rodopsyny w 2000 roku. Okazało się wtedy, że modele rodopsyny oparte na strukturze bakteriorodopsyny (która też zawiera retinal i siedem helis transbłonowych) są zbyt niedokładne i nie mogą służyć do badania procesów aktywacji/wygaszania rodopsyny a tym bardziej do modelowania innych receptorów GPCR.

Struktura rodopsyny posunęła naprzód badania bioinformatyczne receptorów GPCR bowiem większość tych receptorów (ok. 700) należy do rodziny receptorów podobnych do rodopsyny (rhodopsin-like). Nie oznacza to, że modelowanie przez homologię do struktury rodopsyny jest łatwe, bowiem podobieństwo między tymi receptorami jest zwykle ok. 10-30%. Skrystalizowany siedem lat później następny receptor GPCR, β 2-adrenergiczny, przez noblistę z 2012 roku Briana Kobilkę, był bardzo podobny do rodopsyny w części błonowej natomiast zupełnie niepodobny w części zewnątrzkomórkowej czyli w miejscu wiązania ligandów. Podobnie było z następnymi receptorami GPCR co wyjaśniło trudności w próbach projektowania leków wykorzystując modele homologiczne. Obecnie znanych jest 16 struktur różnych typów tych receptorów i modelowanie homologiczne może dawać dużo bardziej dokładne modele. W 2003 roku prof. Palczewski wraz z prof. Andreasem Engелеm wykazali, że rodopsyna występuje w komórkach pręcikowych w stanie oligomerycznym. Wykorzystując obrazy mikroskopu sił atomowych (AFM) wykonałem modele oligomeru rodopsyny, w których występowały dwa rodzaje powierzchni oddziaływania pomiędzy sąsiednimi cząsteczkami rodopsyny: helisy transbłonowe TM4-TM5, oraz TM1-TM1. Powierzchnie te zostały potem potwierdzone w badaniach biochemicznych (ta pierwsza) i w krystalografii (ta druga).



Rys. 1. Model oligomeru rodopsyny (z lewej) oraz model kompleksu tetrameru rodopsyny z trymerem transducyny Gt (białko G dla rodopsyny) z prawej.

Tekst i zdjęcia: **Sławomir Filipek, W. Chemii UW**

Jak widać struktury krystaliczne dimerów mogą się różnić od tych z błony komórkowej, dlatego w dalszym ciągu prowadzi się badania różnorodnymi metodami, np. FRET, aby uchwycić stadia oligomeryzacji rodopsyny i innych GPCRów. Wykonałem także modele dimeru rodopsyny z trymerem białka G oraz z arestyną, która służy do wygaszania rodopsyny. Krystaliczna struktura receptora $\beta 2AR$ z białkiem została rozwiązana przez Kobilkę w 2011 roku. Była to struktura 1:1. W tym samym roku Palczewski opublikował zaś strukturę dimeru rodopsyny z białkiem G rozwiązaną metodą niskotemperaturowej mikroskopii elektronowej. Otrzymana stechiometria tego kompleksu była 2:1 co wskazuje na dużą rolę warunków rozwiązywania struktury, które powinny być jak najbardziej zbliżone do stanu natywnego, albo, że stechiometria jest zmienna. Struktura rodopsyny bądź innego GPCRa z arestyną wciąż nie jest otrzymana. W tym temacie wciąż jest jeszcze dużo do zrobienia bowiem niedawno okazało się, że arestyna także może przekazywać sygnał z receptora i to niezależnie od białka G (wykazał to drugi noblista z 2012 roku, Robert Lefkowitz, który otrzymał tę nagrodę wspólnie z Brianem Kobilką http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2012/kobilka.html). Wobec tego nazwa receptorów sprzężonych z białkami G, GPCR, jest już nieadekwatna. Ponadto niektóre ligandy będące antagonistami tych receptorów w stosunku do białka G okazały się być agonistami w stosunku do arestyny, więc są jednocześnie agonistami i antagonistami dla tego samego receptora. Rodopsyna, jak się wydaje, nie sygnalizuje przez arestynę, ale kto wie co nas czeka tuż za rogiem.

Ciekawy artykuł (wn): [Nature](#). 2003 Jan 9;421(6919):127-8.

Atomic-force microscopy: Rhodopsin dimers in native disc membranes.

[Fotiadis D](#), [Liang Y](#), [Filipek S](#), [Saperstein DA](#), [Engel A](#), [Palczewski K](#).

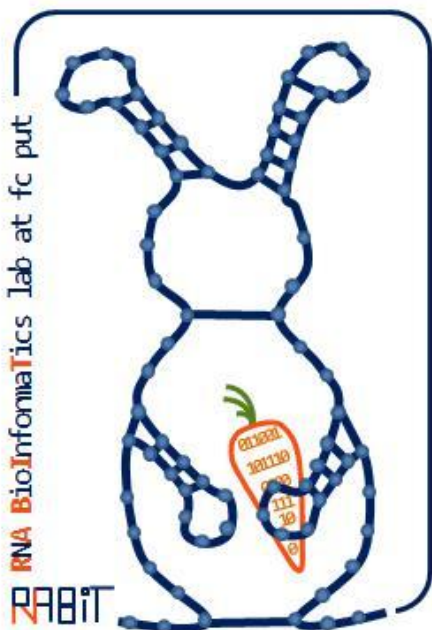
Kto w bitach piszczy???

Rozpoczynamy cykl prezentacji grup bioinformatycznych prowadzących badania w Polsce. W tym numerze zamieszczamy informacje o grupach, w których działają członkowie Zarządu PTBI:

- słów kilka o zespole bioinformatyków z Politechniki Poznańskiej, w tym o grupie RABiT (pisze Marta Szachniuk),
- o zespole działającym w Międzynarodowym Instytucie Biologii Molekularnej i Komórkowej w Warszawie i w Uniwersytecie Adama Mickiewicza w Poznaniu (opowiada Janusz Bujnicki),
- o grupie z Politechniki Śląskiej w Gliwicach (Aleksandra Gruca)
- o zespole naukowym biofizyków i bioinformatyków z UMK
(Wiesław Nowak)
- o pracach bioinformatycznych w ICM UW (Witold Rudnicki)

Zapraszamy wszystkie polskie grupy bioinformatyczne do nadsyłania materiałów do umieszczenia w kolejnych numerach Bioinformatorka!

W połowie lat 1990-tych, w wyniku współpracy naukowców z Instytutu Informatyki Politechniki Poznańskiej (<http://www.cs.put.poznan.pl>) oraz Instytutu Chemii Bioorganicznej PAN (<http://www.ibch.poznan.pl>) została powołana do życia grupa bioinformatyczna, której ojcem chrzestnym ☺ został (i jest do dnia dzisiejszego) prof. **Jacek Błażewicz**. Krótko potem w Instytucie Chemii Bioorganicznej PAN powstała Pracownia Bioinformatyki. Działa ona prężnie współpracując zarówno z innymi pracowniami IChB PAN jak i Instytutem Informatyki PP. Bioinformatycy pod wodzą Jacka to przede wszystkim specjaliści informatycy, którzy swoje umiejętności analityczne wykorzystują do rozwiązywania niebanalnych zagadnień stawianych przez dzisiejszą biologię, biochemię i biofizykę. Interesuje nas wszystko, co można zamodelować przy pomocy narzędzi matematycznych i informatycznych. Nęcą nas eksabajty danych – ktoś potrafi je przetworzyć lepiej niż my? Analizujemy, obliczamy, tworzymy algorytmy, symulujemy na życzenie ☺ i pomagamy z danych pozyskiwać wiedzę o mikro- i makroświecie.



Zespół Jacka to dzisiaj kilka wyspecjalizowanych pracowni. Grupa **Marty Kasprzak** i **Oli Świercz** prowadzi badania w zakresie sekwencjonowania, mapowania, asemblacji oraz analizy danych mikromacierzowych. Zespół **Piotra Formanowicza** specjalizuje się m.in. w zastosowaniach sieci Petriego do modelowania i analizy procesów metabolicznych. Grupa ProtAnG (Protein Analysis Group) pod wodzą **Piotra Łukasiaka** pracuje nad algorytmami do modelowania i ewaluacji struktur białkowych, od lat współpracuje również z organizatorami CASPu i wspomaga ich od strony algorytmicznej i programistycznej. **Paweł Wojciechowski**, jeden z najlepszych w kraju specjalistów od algorytmów dla dopasowania sekwencji, prowadzi wraz z grupą doktorantów badania w tej tematyce, a także rozwija algorytmy na GPU i zajmuje się analizą danych z sekwencjonowania nowej generacji. Wreszcie grupa RABIT (RnA BioInfobmaTics lab @ fc put), powołana przez **Martę Szachniuk** prowadzi badania w ramach bioinformatyki strukturalnej RNA i ściśle współpracuje z zespołem biochemików z IChB PAN (prof. R.W. Adamiak).

Słów parę o ‘królikach’ Marty ☺. RABIT, choć to stosunkowo młody twór, ma na swoim koncie badania będące przedmiotem prac doktorskich i magisterskich nagrodzonych trzykrotnie w konkursach PTBI oraz w konkursie EURO (najlepsza praca doktorska w Europie z zastosowania badań operacyjnych). Ponadto specjalizuje się w analizie danych NMR-owskich (<http://www.cs.put.poznan.pl/mszachniuk/bsmlp.zip>) oraz współpracuje przy tworzeniu baz danych strukturalnych (RNA FRABASE: <http://rnafrabase.cs.put.poznan.pl>), narzędzi do modelowania RNA (RNAComposer: <http://rnacomposer.cs.put.poznan.pl>) oraz oceny podobieństwa strukturalnego (MCQ4Structures: <http://www.cs.put.poznan.pl/tzok/mcq>). Obecnie podejmuje m.in. badania nad analizą trajektorii ruchów atomowych obserwowanych podczas dynamiki molekularnej, wyszukiwaniem motywów strukturalnych czy analizą sekwencji egzosomalnych. (M.Szachniuk)





MIBMIK+UAM

<http://genesilico.pl/index.php/people.html>

Prof. Janusz Bujnicki kieruje zespołami badawczymi w dwóch instytucjach: w Laboratorium Bioinformatyki i Inżynierii Białka w Międzynarodowym Instytucie Biologii Molekularnej i Komórkowej (MIBMIK) w Warszawie oraz w Pracowni Bioinformatyki Instytutu Biologii Molekularnej i Biotechnologii, na Wydziale Biologii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza (UAM) w Poznaniu. Oba zespoły intensywnie współpracują ze sobą. Oba prowadzą prace teoretyczne obejmujące rozwój oraz zastosowanie praktyczne algorytmów, metod i oprogramowania komputerowego do badania sekwencji, struktur, dynamiki i funkcji makrocząsteczek biologicznych, głównie białek i kwasów nukleinowych oraz ich kompleksów. Zespół warszawski prowadzi również badania doświadczalne nad systemami biologicznymi, w których główne role pełnią białka i kwasy nukleinowe. Obecnie największy nacisk w pracach obu zespołów położony jest na badanie struktury i funkcji RNA oraz białek oddziałujących z RNA.

Prof. Bujnicki i współpracownicy opracowali wiele metod bioinformatycznych, m.in. ostatnio jedną z pierwszych metod do automatycznego modelowania porównawczego RNA (ModeRNA; [http:// genesilico.pl/moderna/](http://genesilico.pl/moderna/)), MetalionRNA do przewidywania miejsc wiązania jonów metalu w RNA (<http://metalionrna.genesilico.pl/>) i potencjały statystyczne służące do przewidywania struktur kompleksów RNA i białek ([http:// genesilico.pl/RNP/](http://genesilico.pl/RNP/)). Stworzyli również pakiet programów do analiz struktur i funkcji białek, m.in., meta-server do rozpoznawania zwoju przestrzennego i wielu innych aspektów struktury pierwszo-, drugo- i trzeciorzędowej białek (<https://genesilico.pl/meta2/>), metody służące do przewidywania jakości teoretycznych modeli struktury białek i pozwalające na konstruowanie modeli hybrydowych (<http://genesilico.pl/qarecombineit/>), metody do przewidywania nieuporządkowania strukturalnego (<http://genesilico.pl/metadisorder/>) i metodę do przewidywania lokalizacji białek w komórkach bakterii Gram-ujemnych (<http://genesilico.pl/MetaLocGramN/>). Stworzyli także system baz danych opisujących metabolizm kwasów nukleinowych w komórkach, m.in. szlaki modyfikacji RNA (<http://modomics.genesilico.pl/>), dojrzewania i degradacji RNA (<http://genesilico.pl/rnapathwaysdb/>) oraz naprawy uszkodzeń w DNA (<http://repairtoire.genesilico.pl/>).

Badania doświadczalne prowadzone są przez zespół prof. Bujnickiego w ścisłym powiązaniu z badaniami teoretycznymi i koncentrują się na trzech typach analiz: 1) testowaniu hipotez funkcjonalnych i przewidywań struktury białek i RNA, 2) badaniu właściwości małych cząsteczek o przewidzianych funkcjach regulatorowych (głównie inhibitorów enzymów z organizmów patogennych, które mogą stać się punktem wyjścia do tworzenia nowych leków) oraz 3) inżynierii białek o nowych, użytecznych i niewystępujących w przyrodzie właściwościach. Przykładami sukcesów w tych obszarach są: zidentyfikowanie licznych enzymów odpowiedzialnych za modyfikacje RNA, zidentyfikowanie inhibitorów hamujących działanie bakteryjnych białek odpowiedzialnych za oporność patogenów na antybiotyki i stworzenie nukleazy, która specyficznie rozpoznaje i przecina zadaną sekwencję RNA. (J. Bujnicki)

Grupa Prof. Bujnickiego w MIBMIK (2013)



autor: Roman
Szczenanowski

Grupa Prof. Bujnickiego w UAM



kolaż zdjęć członków grupy i zagranicznych gości wizytujących

Zespół prof. Andrzeja Polańskiego (Gliwice)

Prof. Andrzej Polański jest kierownikiem grupy bioinformatycznej w Instytucie Informatyki na Wydziale Automatyki, Elektroniki i Informatyki Politechniki Śląskiej w Gliwicach. Zespół naukowy prowadzi prace teoretyczne związane z rozwojem algorytmów oraz narzędzi do analizy danych genomicznych i proteomicznych. W pracach badawczych członkowie zespołu wykorzystują zaawansowane metody obliczeniowe oraz techniki eksploracji danych, w szczególności metody maszynowego uczenia i sztucznej inteligencji. Opracowane algorytmy z powodzeniem stosowane są w praktyce do analizy danych z dziedziny biologii oraz medycyny. Zadania badawcze realizowane są między innymi we współpracy z Instytutem Onkologii w Gliwicach oraz z Instytutem Biologii Molekularnej i Biotechnologii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu.

Główne kierunki prac badawczych prowadzonych przez członków zespołu w ostatnich latach w zakresie genomiki to zagadnienia kompresji oraz analizy danych z sekwencjowania DNA, w szczególności: wyszukiwanie charakterystycznych motywów i powtórzeń tandemowych, zastosowanie transformaty Buffowsa-Wheelera do budowania algorytmów jednoczesnej kompresji oraz przeszukiwania sekwencji, a także algorytmy wspomagania wyszukiwania wybranych charakterystycznych sekwencji DNA, retrogenów oraz miRNA. W zakresie proteomiki prace zespołu koncentrują się wokół metod służących do modelowania oraz analizy widm masowych, w szczególności zastosowania modeli mieszanin do ekstrakcji cech widm masowych białek oraz do konstrukcji klasyfikatorów molekularnych dla widm masowych białek. Inne zadania badawcze realizowane przez zespół prof. Polańskiego to rozwój metod oraz narzędzi wykorzystujących wiedzę zawartą w bioinformatycznych bazach danych adnotacji do wieloatrybutowego opisu oraz automatycznej interpretacji funkcjonalnej zbiorów genów.

Opracowane w ramach prof. Polańskiego publicznie dostępne narzędzia bioinformatyczne to:

- BWtrs (<http://bioinfo.polsl.pl/BWtrs>) – internetowy serwis wyszukiwania powtórzeń tandemowych w sekwencjach DNA
- RuleGO (<http://rulego.polsl.pl>) – internetowy serwis adnotacji funkcjonalnych zbiorów genów
- miRNEST (<http://mirnest.amu.edu.pl>) – baza danych mikroRNA dla organizmów zwierzęcych, roślinnych oraz wirusów opracowana we współpracy z Instytutem Biologii Molekularnej oraz Biotechnologii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza.
- Oficjalna strona grupy: <http://bioinfo.polsl.pl/> (A.Gruca)



Zespół prof. Polańskiego

Zespół Teoretycznej Biofizyki Molekularnej

prof. Wiesława Nowaka (UMK, Toruń)

Zespół TBM działa w **Instytucie Fizyki UMK** od 2000 r. Prowadzone badania dotyczą głównie modelowania klasycznego i kwantowego dynamiki i struktur białek ważnych w medycynie i biotechnologii (np. neuroglobina, hydratasa nitrylowa). Stosujemy i rozwijamy niestandardowe metody dynamiki molekularnej takie jak: Locally Enhanced Sampling czy Sterowana Dynamika Molekularna. Ostatnio interesuje nas problem teoretycznego i doświadczalnego badania nanomechaniki białek ważnych w aktywności neuronów i adhezji komórek. Ściśle współpracujemy z grupami doświadczalnymi AFM w Toruniu i Lozannie. Zajmujemy się też analizą genów związanych ze spektrum autyzmu, wykorzystaniem algorytmów sieciowych w bioinformatyce, nowymi reprezentacjami graficznymi DNA, analizą aktywności kanałów jonowych owadów i ich oddziaływań z neurotoksynami, nanomechaniką i transportem ładunku w DNA oraz wpływem pola elektrycznego na oddziaływanie ligandów z receptorami. Współpracujemy, m.in., z zespołami z USA, Francji, Szwajcarii, Szkocji i Japonii. Od 2000 roku organizujemy coraz popularniejsze warsztaty naukowe/konferencje BioInformatics in Torun (BIT). Planujemy rozwijanie bionanotechnologii w ramach **ICNT UMK** (współpraca z firmami). [W.Nowak]



Dr Witold Rudnicki wraz ze współpracownikami z **Interdyscyplinarnego Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego na Uniwersytecie Warszawskim** prowadzi badania w dwóch dziedzinach na pograniczu bioinformatyki, informatyki i obliczeń naukowych.

Pierwszy obszar to rozwój algorytmów obliczeniowych na architekturach hybrydowych, w których obliczenia wykonywane są z wykorzystaniem akceleratorów sprzętowych (GPU). Architektura współczesnych procesorów (CPU) jest optymalizowana dla uzyskania jak największej szybkości wykonywania obliczeń sekwencyjnych. Większość tranzystorów w CPU jest wbudowana w jednostki mające na celu przewidzenie efektów instrukcji warunkowych, spekulatywne wykonanie rozgałęzionych fragmentów kodu oraz w pamięci podręcznej. Z kolei w GPU większość tranzystorów jest przeznaczona do prowadzenia obliczeń. GPU są optymalizowane na wykonywanie w jak najszybszy sposób stosunkowo prostych, masywnie równoległych obliczeń o dobrze przewidywalnej strukturze kodu i instrukcji warunkowych. Takie obliczenia są wykonywane zarówno na potrzeby renderowania trójwymiarowych scen w grach komputerowych, jak i w bardzo wielu problemach naukowych. W wielu przypadkach dzięki wykorzystaniu GPU można uzyskać przyspieszenie obliczeń rzędu nawet 10 razy, choć bardziej typowe wyniki to przyspieszenie 2-3 krotne kodu w stosunku do dobrze zoptymalizowanego kodu wykonywanego na najwydajniejszych procesorach.



Drugi obszar badań prowadzonych przez dra Rudnickiego należy do domeny uczenia maszynowego i jego zastosowaniach w bioinformatyce. Interesuje go problem identyfikacji wszystkich zmiennych powiązanych ze zmienną decyzyjną. Uczenie maszynowe jest wykorzystywane w bioinformatyce do budowy modeli predykcyjnych tam, gdzie nie są znane mechanizmy i modele analityczne badanego procesu/zjawiska. Często nie są nawet znane zmienne istotne dla procesu – np. w przypadku wykorzystania danych o poziomie ekspresji genów do badania różnic między fenotypami. Do analizy takich danych można zastosować algorytmy uczenia maszynowego. Istotnym krokiem w budowie modelu jest wybór podzbioru istotnych genów. Standardowa strategia to wybór jak najmniejszego zbioru genów, dla którego da się zbudować jak najlepszy algorytm klasyfikacyjny. Takie podejście jest bardzo dobre dla znalezienia genów znacznikowych i opracowania testów diagnostycznych, ale znacznie trudniej wykorzystać jego wyniki do dogłębnego zrozumienia badanego zjawiska. Procedura selekcji może doprowadzić bowiem do ograniczenia się do wyboru genów na końcu ścieżki regulacyjnej a pominąć geny na początku tej ścieżki.

W podejściu alternatywnym poszukujemy wszystkich genów, dla których można wykazać w istotny sposób powiązanie między aktywnością a fenotypem. Opracowany przez dra Rudnickiego i współpracowników algorytm Boruta oparty o algorytmy uczenia maszynowego ma na celu znalezienie wszystkich zmiennych powiązanych ze zmienną decyzyjną. Algorytm jest dostępny w środowisku modelowania statystycznego R. (W. Rudnicki)

Uwaga doktorzy wypromowani w roku 2012 !!

- Konkurs PTBI z wysoką nagrodą 6000 zł za najlepszą pracę doktorską z bioinformatyki w roku 2012 → szczegóły na stronie:
[http://ptbi.org.pl/index.php?option=com_content
&view=article&id=46&Itemid=117](http://ptbi.org.pl/index.php?option=com_content&view=article&id=46&Itemid=117)
- Powiadom znajomych, nie muszą być członkami PTBI by startować!
- Termin nadsyłania prac mija **15 marca** 2013
(zgłoszenie = wysłanie pracy w pdf emailom)

Gdzie publikować – wybrane publikacje z PL 2012

może w „*Bioinformatics*”, IF=5.468

Anna Philips, Kaja Milanowska, Grzegorz Lach, Michal Boniecki, Kristian Rother, and Janusz M. Bujnicki

MetalionRNA: computational predictor of metal-binding sites in RNA structures

Bioinformatics (2012) 28(2): 198-205 doi:10.1093/bioinformatics/btr636

Grzegorz Chojnowski, Janusz M. Bujnicki, and Matthias Bochtler

RIBER/DIBER: a software suite for crystal content analysis in the studies of protein–nucleic acid complexes

Bioinformatics (2012) 28(6): 880-881 doi:10.1093/bioinformatics/bts003

Tomasz Kalwarczyk, Marcin Tabaka, and Robert Holyst

Biologistics—Diffusion coefficients for complete proteome of *Escherichia coli*

Bioinformatics (2012) 28(22): 2971-2978 doi:10.1093/bioinformatics/bts537

albo w „*BMC Bioinformatics*”, IF=2.75

- [Machine learning methods can replace 3D profile method in classification of amyloidogenic hexapeptides](#)
J. Stanislawski, M. Kotulska, O. Unold *BMC Bioinformatics* 2013, **14**:21 (17 January 2013)
- [RNAmap2D – calculation, visualization and analysis of contact and distance maps for RNA and protein-RNA complex structures](#)
M.J. Pietal, N. Szostak, K.M. Rother, J.M. Bujnicki *BMC Bioinformatics* 2012, **13**:333 (21 December 2012)
- [The utility of comparative models and the local model quality for protein crystal structure determination by Molecular Replacement](#)
M. Pawlowski, J.M. Bujnicki *BMC Bioinformatics* 2012, **13**:289 (5 November 2012)

Gdzie publikować – cd.

i jeszcze w „*BMC Bioinformatics*”, IF=2.75

- [Quality assessment of protein model-structures based on structural and functional similarities](#) B.M. Konopka, J.-C. Nebel, M. Kotulska *BMC Bioinformatics* 2012, **13**:242 (21 September 2012)
- [Sampling issues in quantitative analysis of dendritic spines morphology](#) B. Ruszczycki, Z. Szepesi, G.M. Wilczynski, Monika Bijata, Katarzyna Kalita, Leszek Kaczmarek, Jakub Włodarczyk *BMC Bioinformatics* 2012, **13**:213 (25 August 2012)
- [Molecular evolution of dihydrouridine synthases](#) J.M. Kasprzak, A. Czerwoniec, J.M. Bujnicki *BMC Bioinformatics* 2012, **13**:153 (28 June 2012)
- [Algorithms: simultaneous error-correction and rooting for gene tree reconciliation and the gene duplication problem](#) P. Górecki, O. Eulenstein *BMC Bioinformatics* 2012, **13**(Suppl 10):S14 (25 June 2012)
- [MetaDisorder: a meta-server for the prediction of intrinsic disorder in proteins](#) L.P. Kozłowski, J.M. Bujnicki *BMC Bioinformatics* 2012, **13**:111 (24 May 2012)
- [GeVaDSs – decision support system for novel Genetic Vaccine development process](#) J. Blazewicz, M. Borowski, W. Chaara, P. Kedziora, D. Klatzmann, P. Lukasiak, A. Six, P. Wojciechowski *BMC Bioinformatics* 2012, **13**:91 (10 May 2012)
- [Inferring serum proteolytic activity from LC-MS/MS data](#) P. Dittwald, J. Ostrowski, J. Karczmarski, A. Gambin *BMC Bioinformatics* 2012, **13**(Suppl 5):S7 (12 April 2012)

(WLW) = Wtórne Lanie Wody czyli (RE SOURCES)

- Czy da się opatentować programy związane z bioinformatyką ? Zob.:
<http://www.wired.com/opinion/2012/11/software-patents-bioinformatics/>
- Coś dla programistów w Pythonie:
<http://www.python.org/doc/humor/>
- Pewnie każdy zna tę stronę:
<http://www.ebi.ac.uk/2can/resources/index.html>
- Nie każdy wie, że bioinformatyka doczekała się FESTYNU (2012):
<http://bioinf.mimuw.edu.pl/festyn/>
- Bioinformatyka a „bioemanacyjne sprzężenie z mózgiem” ☹(uwaga!)
<http://index.forum.gazeta.pl/szukaj/forum/bioinformatyka>

PS. Zapraszamy do współpracy przy redagowaniu Bioinformatorka, kontakt: SRN Wiesław Nowak , wiesiek [*at*] fizyka.umk.pl

Zapraszamy wszystkie polskie grupy bioinformatyczne do nadsyłania materiałów do umieszczenia w kolejnych numerach Bioinformatorka!