



Βιοπληροφορική

Ενότητα 6^η: Φυλογενετική ανάλυση 3

Ηλίας Καππάς
Τμήμα Βιολογίας



Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Περιεχόμενα ενότητας

- Αξιολόγηση
- Εφαρμογές
- Προκλήσεις



Αξιολόγηση (1/5)

- Κριτήρια αξιολόγησης της ακρίβειας ενός φυλογενετικού δέντρου

- επαναληψιμότητα ... *consistency*
- αποτελεσματικότητα ... *efficiency*
- ισχύς ... *robustness*



- Bootstrapping ... μέτρο της ισχύος της τοπολογίας

Ξεκινώντας από μία συγκεκριμένη τοπολογία, πόσο επαναλήψιμος είναι ένας αλγόριθμος ως προς την εύρεση αυτής της τοπολογίας χρησιμοποιώντας τυχαία δείγματα του αρχικού data set ???



Αξιολόγηση (2/5)

Δοκιμασία μη-παραμετρικών επαναλήψεων bootstrap

αρχικό data set

T1	A	T	G	G	C	T	A	T	T	C	T	T	A	T	A	G	T	A	C	G
T2	A	T	C	G	C	T	A	G	T	C	T	T	A	T	A	T	T	A	C	A
T3	T	T	C	A	C	T	A	G	A	C	C	T	G	T	G	G	T	C	C	A
T4	T	T	G	A	C	C	A	G	A	C	C	T	G	T	G	G	T	C	C	G
T5	T	T	G	A	C	C	A	G	T	T	C	T	C	T	A	G	T	T	C	G

μετά από bootstrap (x 100 – 1000) → δειγματοληψία με αναπλήρωση

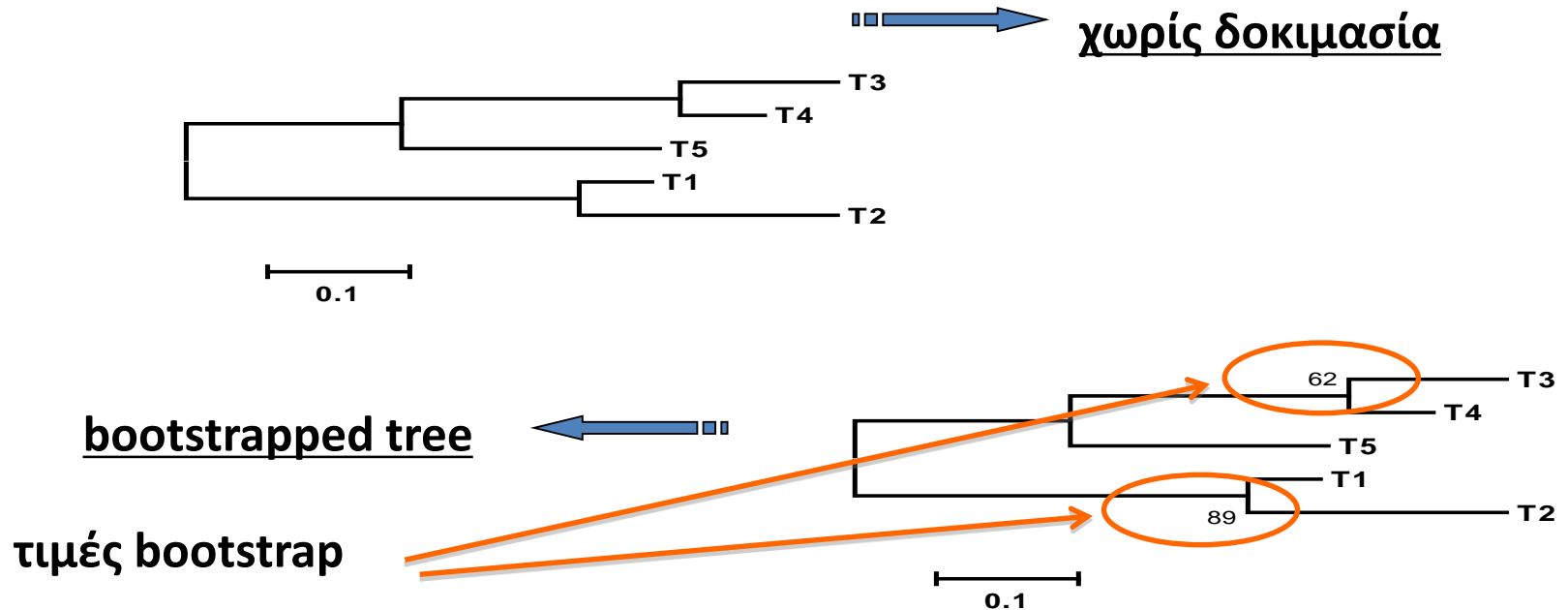
T1	T	T	G	G	G	C	T	T	T	A	A	A	A	A	T	T	A	C	G
T2	T	T	C	C	G	C	T	T	T	A	A	A	A	A	T	T	A	C	A
T3	T	T	C	C	A	C	C	T	T	G	G	G	G	G	T	T	C	C	A
T4	T	T	G	G	A	C	C	T	T	G	G	G	G	G	T	T	C	C	G
T5	T	T	G	G	A	C	C	T	T	C	C	C	A	A	T	T	T	C	G

pseudo-replicate



Αξιολόγηση (3/5)

Εφαρμόσιμη σε όλους τους αλγόριθμους κατασκευής δέντρων



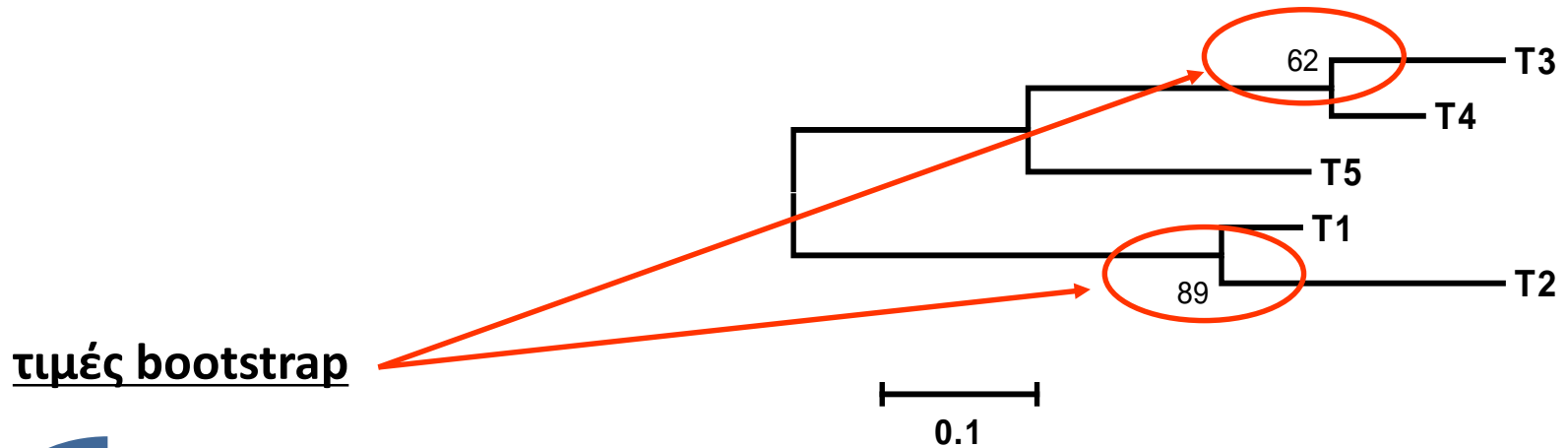
επαναληψιμότητα ή ακρίβεια ???

> 70% → ~ 95% πιθανότητα



Αξιολόγηση (4/5)

Bootstrap ... σημασία



Η πιθανότητα ότι μέλη ενός συγκεκριμένου κλάδου είναι πάντοτε μέλη αυτού του κλάδου



Αξιολόγηση (5/5)

Αύξηση της ακρίβειας ενός φυλογενετικού δέντρου ...

- αύξηση του αριθμού των ακολουθιών
- αύξηση του μήκους των ακολουθιών

↪ στη φυλογένεση ...

οι υπολογισμοί είναι τόσο καλοί όσο είναι
το data set και ο χρησιμοποιούμενος
αλγόριθμος !!!



Εφαρμογές (1/7)

Εφαρμογές φυλογενετικής ανάλυσης:

- Conservation Biology
 - Faith and Baker 2007
 - Baker and Palumbi 1994
- Επιδημιολογία
 - Bush et al. 1999
- Εγκληματολογία
 - Ou et al. 1992
- Πρόβλεψη λειτουργίας γονιδίων
 - Chang and Donoghue 2000, Bader et al. 2001
- Σχεδιασμός φαρμάκων
 - Halbur et al. 1994



Εφαρμογές (2/7)

Διατήρηση/διαχείριση βιοποικιλότητας ... *Conservation Biology*

- Phylogenetic diversity (PD) and biodiversity conservation: some bioinformatics challenges

Faith and Baker 2007

- Which whales are hunted? A molecular genetic approach to monitoring whaling

Baker and Palumbi 1994

DNA barcoding ...

Μοριακός ραβδοκώδικας



Εφαρμογές (3/7)

Επιδημιολογία ... *Epidemiology*

- Predicting the evolution of human influenza A
- Bush et al. 1999, Science



Εφαρμογές (4/7)

Διαγνωστική ... *Forensics*

- Molecular epidemiology of HIV transmission in a dental practice

Ou et al. 1992, Science



Εφαρμογές (5/7)

The Human Microbiome

bacterial cells

10^{14}

vs

human cells

10^{13}

Ένας χάρτης του ανθρώπινου μικροβιώματος παρουσιάζεται στον παρακάτω σύνδεσμο:

<http://mucholderthen.tumblr.com/post/48203676035/a-map-of-diversity-in-the-human-microbiome-over>



Εφαρμογές (6/7)

Σχεδιασμός φαρμάκων ... *Drug design*

Fast-acting antidepressant appears within reach

<http://www.sciencedaily.com/releases/2014/04/140430161301.htm>

method: “virtual screening”

«εικονική σάρωση» → υπολογιστικά μοντέλα → προσομοίωση των
φαρμακευτικών ιδιοτήτων μιας ουσίας

δοκιμή πολύ μεγαλύτερου αριθμού υποψήφιων φαρμάκων σε σύγκριση με
τη μέθοδο του εργαστηρίου

σχεδόν **απίθανο να είχε ανακαλυφθεί το MI-4** χωρίς την ισχύ των
υπολογιστών

δοκιμάστηκε σε ποντίκια επιβεβαιώνοντας τις «εικονικές» ιδιότητες



Εφαρμογές (7/7)

Το Δέντρο της Ζωής ... *The Tree of Life*

- The Tree of Life: Benefits to society through phylogenetic research
- Using phylogenetic knowledge to discover snakebite antivenins
- Improving global agriculture through use of the Tree of Life
- The Tree of Life and human health
- Predicting disease outbreaks: Hantavirus

<https://www.nsf.gov/bio/pubs/reports/atol.pdf>



Προκλήσεις (1/5)

... η συνέχεια ...

- κατανόηση πρωτεϊνικής λειτουργίας/τροποποιήσεων
- μοριακές αλληλεπιδράσεις (interactome)
- συστημική βιολογία (systems biology)
- ανάλυση γενετικής ποικιλομορφίας σε επίπεδο γονιδιωμάτων



...the -omics era...



Προκλήσεις (2/5)

- ελαχιστοποίηση χρόνου απόκτησης/ανάλυσης βιολογικής πληροφορίας (data assembly + annotation)
- αποθήκευση πληροφορίας

Every human genome that is sequenced utilizes about 200 gigabytes of raw data



Προκλήσεις (3/5)

➤ οπτικοποίηση πληροφορίας

visualization of human interactome →

Cytoscape: <http://www.cytoscape.org/images/irefindex.png>



Προκλήσεις (4/5)

- διεπιστημονική προσέγγιση

Βιολογία + Πληροφορική

Νέα γενιά επιστημόνων



Προκλήσεις (5/5)

➤ Εκπαίδευση

- Editorial: International, interdisciplinary, multi-level bioinformatics training and education, Schneider and Jungck, 2013
- Explain Bioinformatics to your grandmother!, Bernard and Michaut, 2013



Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης,
Ηλίας Καππάς, «Βιοπληροφορική, Φυλογενετική
ανάλυση 3». Έκδοση: 1.0. Θεσσαλονίκη 2014.
Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:
http://opencourses.auth.gr/eclass_courses.



Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά - Παρόμοια Διανομή [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.

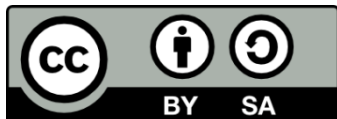
[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>





Σας ευχαριστώ!

Ηλίας Καππάς, Λέκτορας Τμήματος
Βιολογίας Α.Π.Θ.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



Τέλος ενότητας

Επεξεργασία: Στυλιανή Μηνούδη
Θεσσαλονίκη, Εαρινό εξάμηνο 2014



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.

