

# IDENTIFICACIÓN DE PROTEÍNAS Y RUTAS METABÓLICAS ASOCIADAS A LA RESPUESTA NEUROPROTECTORA MEDIADA POR LA TIBOLONA EN ASTROCITOS BAJO UN MODELO INFLAMATORIO INDUCIDO.

---

Daniel Camilo Osorio

Agosto 14, 2015

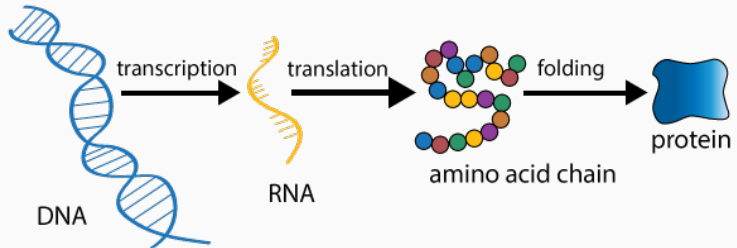
**Maestría en Bioinformática**

Universidad Nacional de Colombia

**Laboratorio de Bioquímica Computacional y Bioinformática**

Pontificia Universidad Javeriana

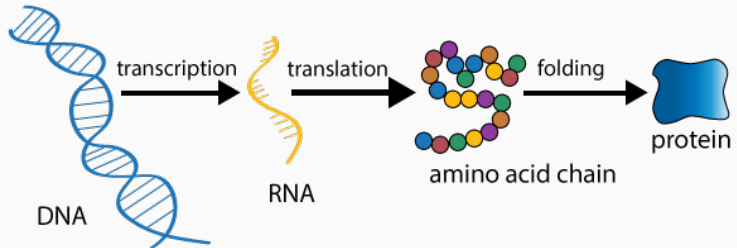
# PROTEINAS



© Bio-Social Methods Collaborative 2013 The Regents of the University of Michigan

- Están determinadas mayoritariamente por la genética de los organismos.

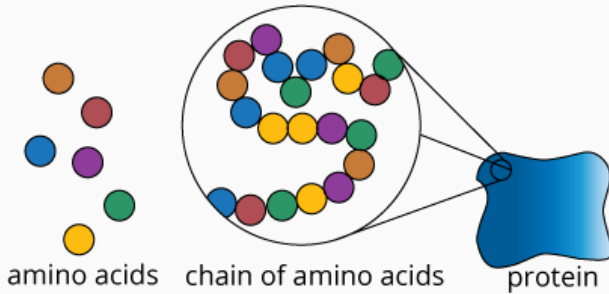
# PROTEINAS



© Bio-Social Methods Collaborative 2013 The Regents of the University of Michigan

- Están determinadas mayoritariamente por la genética de los organismos.
- Son los componentes principales de las rutas metabólicas de las células.

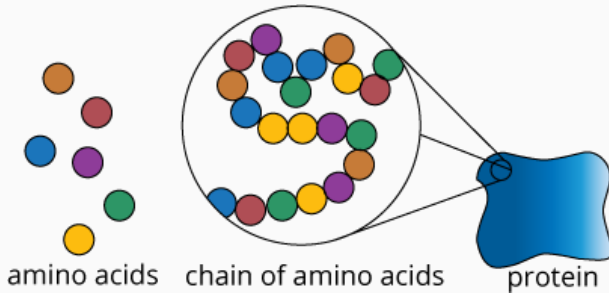
# PROTEÍNAS



© Bio-Social Methods Collaborative 2013 The Regents of the University of Michigan

- Son moléculas formadas por cadenas lineales de aminoácidos.

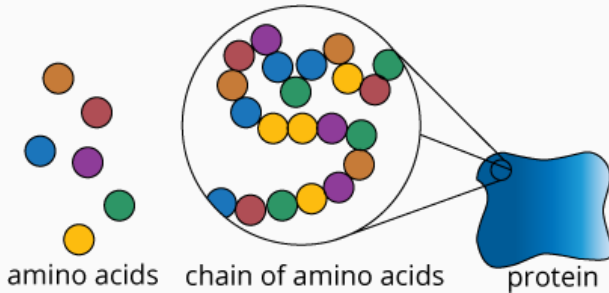
# PROTEÍNAS



© Bio-Social Methods Collaborative 2013 The Regents of the University of Michigan

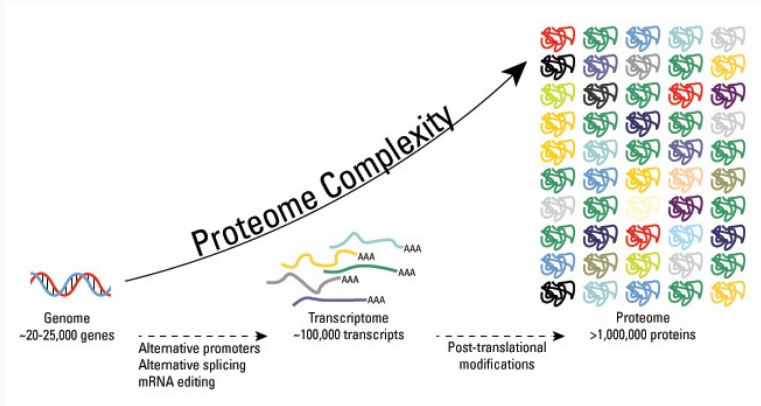
- Son moléculas formadas por cadenas lineales de aminoácidos.
- Realizan funciones enzimáticas, estructurales y de transducción de señales entre otras.

# PROTEÍNAS

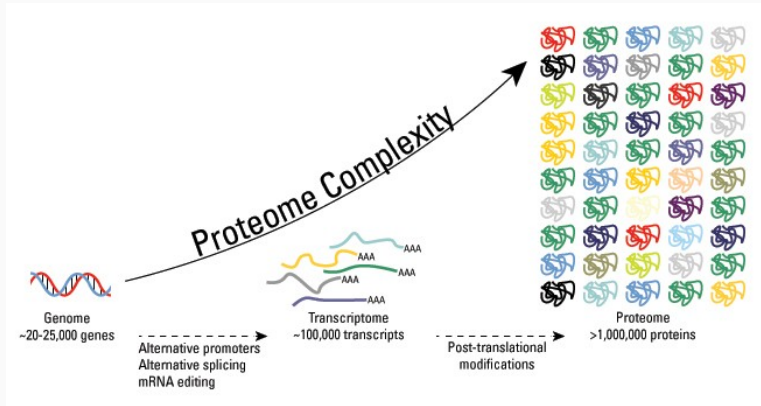


© Bio-Social Methods Collaborative 2013 The Regents of the University of Michigan

- Son moléculas formadas por cadenas lineales de aminoácidos.
- Realizan funciones enzimáticas, estructurales y de transducción de señales entre otras.
- El conjunto de las proteínas expresadas en una circunstancia determinada es denominado *proteoma*.



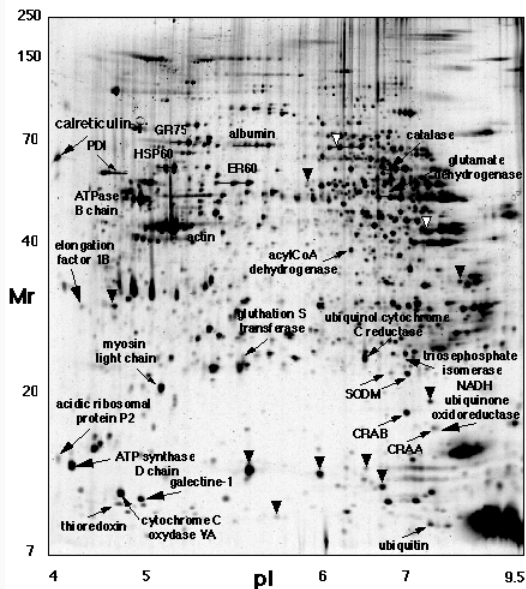
- Es el equivalente proteínico del *genoma*.



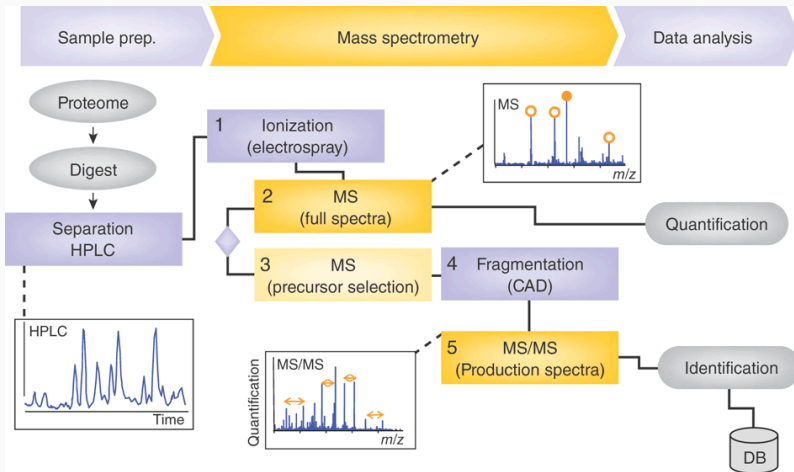
- Es el equivalente proteínico del *genoma*.
- Es la totalidad de proteínas expresadas en una célula bajo ciertas condiciones ó etapa de desarrollo específicas.



# MÉTODOS PARA CARACTERIZACIÓN DE PROTEOMAS

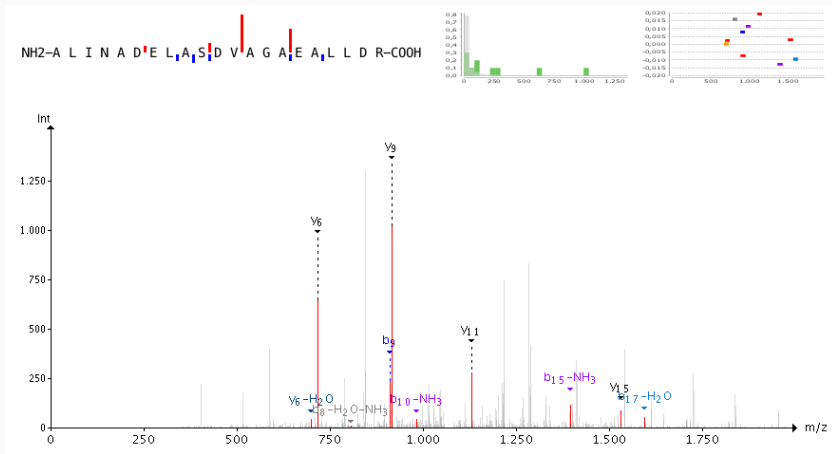


# MÉTODOS PARA CARACTERIZACIÓN DE PROTEOMAS



Secuenciación de alto rendimiento de proteomas

# ESPECTROS DE MASAS



Representa la abundancia de los diferentes tipos de iones en función de la relación masa/carga de cada uno de ellos.

TITLE=01-02.734.734.3 File:"01-02.RAW",  
NativeID:"controllerType=0 controllerNumber=1  
scan=734"

BEGIN IONS

RTINSECONDS=810.6452

PEPMASS=423.252593994141 12337.3798828125

CHARGE=3+

129.1288300 52.872806549

149.1461182 3.9003605843

157.1478424 2.5976366997

163.1104431 7.5093927383

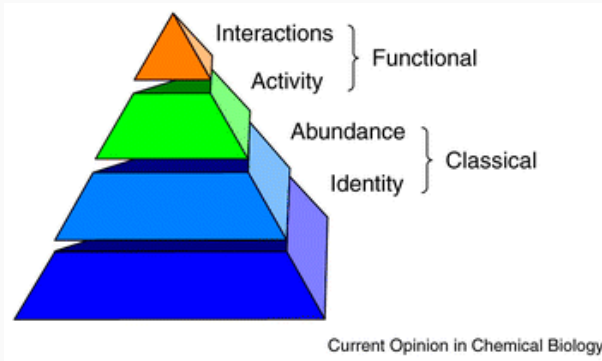
174.8226013 9.9194545746

193.2301788 2.1630632877

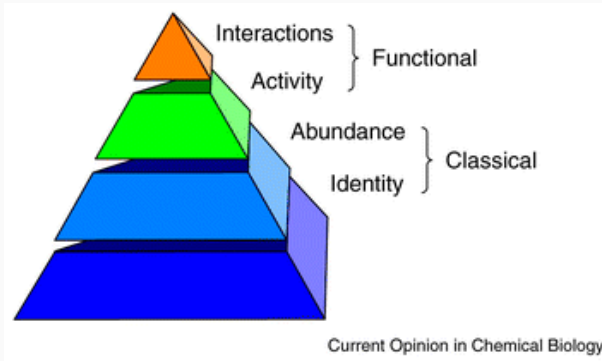
.

.

.



- La *proteómica* es el estudio a gran escala de la identidad, abundancia, actividad e interacciones de las proteínas.



- La *proteómica* es el estudio a gran escala de la identidad, abundancia, actividad e interacciones de las proteínas.
- La comparación de proteomas en diferentes situaciones metabólicas permite identificar proteínas correlacionadas con determinados estadios fisiológicos.

## OBJETIVO:

*Caracterizar computacionalmente el conjunto de proteínas expresadas diferencialmente* por el aumento en la concentración de ácidos grasos libres y la presencia del esteroide Tibolona en astrocitos humanos.

## PROTEOMICS.sh

### IDENTIDAD

**X!TANDEM**  
**MS-GF+**  
**MIRYMATCH**  
**COMET**  
**TIDE**  
**OMSSA**

### ABUNDANCIA

**PEPTIDE  
SHAKER**

(ABUNDANCIA y PROBABILIDAD)

### ACTIVIDAD

**UNIPROT**

ID PROTEINAS



**EC.**



**HMR**

REACCIONES



**METABOLISMO**

### INTERACCIÓN

**ENSEMBL**

ID GENES



**STRINGDB**

PPI



**SEÑALIZACIÓN**



3548

DOI 10.1002/pmic.201300201

Proteomics 2013, 13, 3548–3553

## DATASET BRIEF

# The human oligodendrocyte proteome

*Keiko Iwata<sup>1,2,3</sup>, Cecilia C. Café-Mendes<sup>4,5</sup>, Andrea Schmitt<sup>1,6</sup>, Johann Steiner<sup>7</sup>, Takayuki Manabe<sup>8</sup>, Hideo Matsuzaki<sup>2,3</sup>, Peter Falkai<sup>1</sup>, Christoph W. Turck<sup>4</sup> and Daniel Martins-de-Souza<sup>1,4,6</sup>*

<sup>1</sup> Department of Psychiatry and Psychotherapy, Ludwig Maximilians University of Munich (LMU), Munich, Germany

<sup>2</sup> Research Center for Child Mental Development, University of Fukui, Japan

<sup>3</sup> Department of Development of Functional Brain Activities, United Graduate School of Child Development, Osaka University, Kanazawa University, Hamamatsu University School of Medicine, Chiba University and University of Fukui, Fukui, Japan

<sup>4</sup> Max Planck Institute for Psychiatry, Proteomics and Biomarkers, Munich, Germany

<sup>5</sup> Lab. de Neurobiologia Celular, Inst. Ciências Biomédicas, Universidade de São Paulo (USP), São Paulo, SP, Brazil

<sup>6</sup> Lab. de Neurociências (LIM-27), Inst. de Psiquiatria, Faculdade de Medicina da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brazil

<sup>7</sup> Department of Psychiatry, University of Magdeburg, Magdeburg, Germany

<sup>8</sup> Division of Gene Expression Mechanism, Institute for Comprehensive Medical Science, Fujita Health University, Aichi, Japan



6 PARALELIZABLES, AUTOMATIZABLES Y DISEÑADOS PARA LINUX



6 PARALELIZABLES, AUTOMATIZABLES Y DISEÑADOS PARA LINUX

**MS-GF+**  
**X!TANDEM**

**MYRIMATCH**  
**COMET**

**OMSSA**  
**TIDE**



6 PARALELIZABLES, AUTOMATIZABLES Y DISEÑADOS PARA LINUX

**MS-GF+**  
**X!TANDEM**

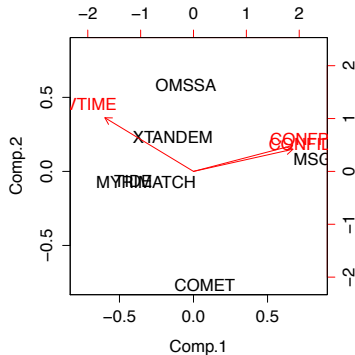
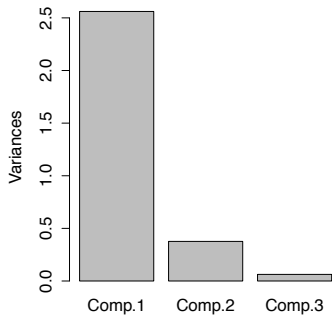
**MYRIMATCH**  
**COMET**

**OMSSA**  
**TIDE**

TIEMPO	PROTEINAS	PEPTIDES	P. CONFIABLES	P. DUDOSAS
--------	-----------	----------	---------------	------------

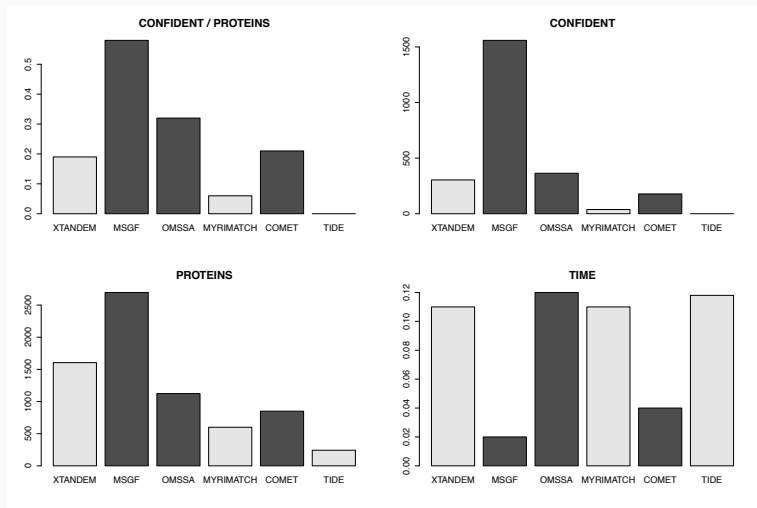
# SELECCIÓN DE MOTORES DE BÚSQUEDA: PCA

MODELO: *CONFPROT* + *CONFIDENT* + *INVTIME*



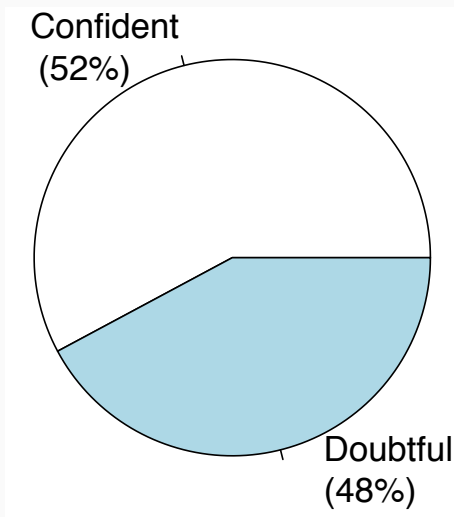
# SELECCIÓN DE MOTORES DE BÚSQUEDA

SELECCIONADOS: MSGF + COMET + OMSSA



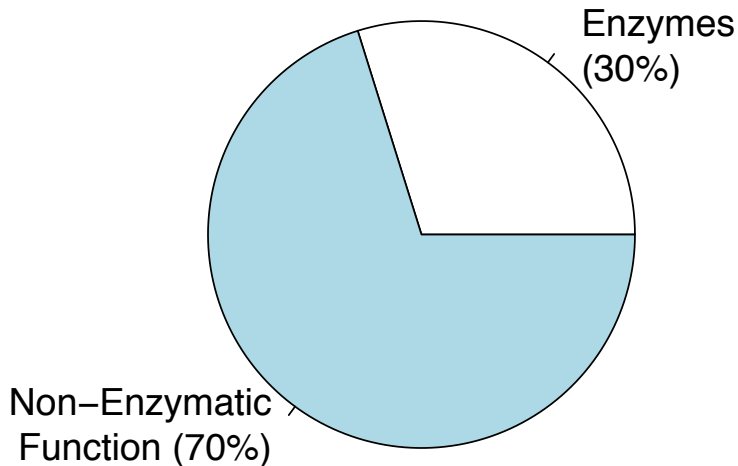
TOTAL PROTEÍNAS IDENTIFICADAS: 2696

## PROTEÍNAS IDENTIFICADAS



CONFIABLE: PSM/Proteína, Base de datos objetivo, FDR < 1 %.

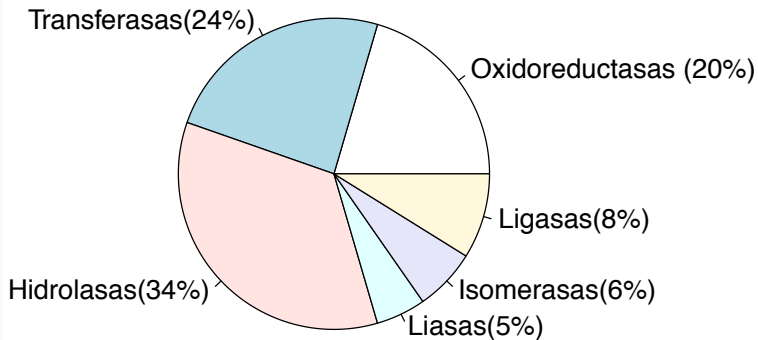
## PROTEÍNAS IDENTIFICADAS



ENZIMA: Número EC. asociado al ID de la Proteína en UNIPROT



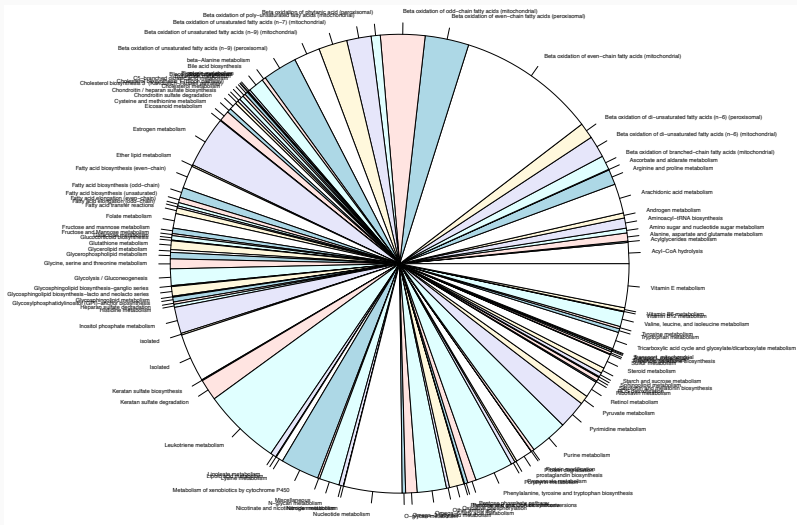
## PROTEÍNAS IDENTIFICADAS



Funciones Enzimáticas

REDES		
REGULACIÓN	SEÑALIZACIÓN	METABOLISMO
PROT-DNA	PROT-PROT	ENZIMAS

## REDES METABÓLICAS



465:ENZIMAS 541:FUNCIONES ENZIMÁTICAS 4190:REACCIONES  
109:RUTAS

¿PREGUNTAS?