

Bioinformàtica

2014/2015

Codi: 101909

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501230 Ciències Biomèdiques	OB	3	2

Professor de contacte

Nom: Leonardo Pardo Carrasco

Correu electrònic: Leonardo.Pardo@uab.cat

Utilització de llengües

Llengua vehicular majoritària: espanyol (spa)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: No

Grup íntegre en espanyol: No

Equip docent

Mercedes Campillo Grau

Angel González Wong

Prerequisits

No hi ha prerequisits.

Objectius

Aquest curs introdueix els estudiants el camp de la Bioinformàtica, una especialitat que utilitza bases de dades informàtiques per emmagatzemar, recuperar i ajudar en la comprensió de la informació biològica. Els projectes de seqüenciació de genomes a gran escala així com el progrés en la determinació d'estructures tridimensionals de proteïnes han conduït a una explosió de seqüències genètiques i dades estructurals disponibles per a l'anàlisi automatitzada. A l'estudiant se li mostra com l'anàlisi de seqüències genòmiques i d'estructures de proteïnes poden conduir a una comprensió molt més completa dels processos biològics. Els estudiants seran introduïts als conceptes bàsics i eines de Bioinformàtica i de la Biologia Computacional. Les sessions pràctiques complementaran aquests coneixements, permetent els estudiants a familiaritzar-se amb els detalls i l'ús de les eines més utilitzades i recursos en línia de l'especialitat.

Objectius:

- Presentació general del camp de la Bioinformàtica.
- Iniciació als tipus de dades que són objecte d'anàlisi a Bioinformàtica i les seves bases de dades.
- Introduir a l'ús de les eines i algorismes comunament usats en l'especialitat.
- Desenvolupar habilitats en la recerca, obtenció i anàlisi de seqüències i estructures de proteïnes.
- Conèixer els aspectes més rellevants de la quimioinformàtica, amb especial èmfasi en el descobriment de fàrmacs.
- Conèixer els conceptes d'informàtica mèdica i la integració de bases de dades genètiques i clíniques

Competències

- Desenvolupar estratègies d'aprenentatge autònom.

- Desenvolupar un pensament i un raonament crítics i saber comunicar-los de manera efectiva, tant en les llengües pròpies com en una tercera llengua.
- Generar propostes innovadores i competitives en la recerca i en l'activitat professional.

Resultats d'aprenentatge

1. Desenvolupar estratègies d'aprenentatge autònom.
2. Desenvolupar un pensament i un raonament crítics i saber comunicar-los de manera efectiva, tant en les llengües pròpies com en una tercera llengua.
3. Generar propostes innovadores i competitives en la recerca i en l'activitat professional.

Continguts

1. Introducció al curs. Bases de dades en Bioinformàtica

- Bases de Dades Bioinformàtiques
 - NCBI - Entrez
 - Bases de dades bibliogràfiques
 - Seqüències de proteïnes. UniProt
 - Seqüències de nucleòtids. Genbank

2. Genòmica

- Anotacions de genomes
- Recerca de gens
- Projecte Genoma
- Navegadors genòmics
- Projecte Encode
- Projecte HapMap
- Catalogue de gens humans i desordres genètics: OMIM
- Bases de dades de SNPs
- Estudis d'associació del genoma comple (GWAS)

3. Alineament de seqüències

- Mètodes de comparació de seqüències
- Matrius de substitució
- Programació Dinàmica
- Alineament local i global
- Recerca per similaritat (BLAST)
- Alineament multiple de seqüències.
- Representació de LOGOS de Seqüències
- Alineaments progressius. Ús de CLUSTALW

4. Anàlisis filogenètiques

5. Bioinformàtica estructural

- Estructura secundària de proteïnes
- Predicció de l'estructura secundària i de segments de transmembrana
- Classificació estructural de proteïnes: homòlegs, motius, dominis i famílies proteiques
- Models de Markov
- Bases de dades: PFAM, SMART, CDD, InterPro
- Estructura terciària de proteïnes. Interaccions moleculars
- Mètodes experimentals per a la determinació d'estructures d'àcids nucleícs i proteïnes. Difracció de Rayos-X i RMN. El format PDB
- Estructura quaternària de proteïnes
- Alineament estructural de proteïnes

- Plegament de proteïnes i motius estructurals. CATH i SCOP
- Cavitats moleculars. Potencial electrostàtic molecular. Camp de força (force field)

6. Quimioinformàtica

- Formats de representació d'entitats químiques. SMILES i coeficient de Tanimoto
- Bases de dades: BindingDB, ZINC, DRUGBANK
- Relació Estructura-Activitat. Models de farmacòfor
- Acoblament molecular Proteïna-Lligand (Docking)
- Recerca Virtual de composts (Virtual Screening)

7. Modes de acció de fàrmacs

- Receptors acoblats a proteïnes G
- Cinases
- Factors de creixement

8. Marc ètic i social de les noves tecnologies

Metodologia

L'orientació de l'assignatura és eminentment pràctica amb la utilització de programari de bioinformàtica.

Classes de teoria:

Les classes teòriques s'impartiran amb la metodologia de tipus presencial -classes magistrals- encara que es possibilitarà i estimularà al màxim la interacció i participació de l'alumnat. Les classes tindran suport de medis audiovisuals.

El material utilitzat a classe pel professor estarà disponible al Campus Virtual de l'assignatura; es recomana als alumnes que l'imprimeixin i el portin a classe, per utilitzar-lo com a suport a l'hora de prendre apunts.

S'animarà l'alumne a aprofundir en els coneixements adquirits en classe mitjançant la utilització de la bibliografia i programari de simulació recomanats.

Classes pràctiques:

Donat el caràcter i l'orientació de l'assignatura aquestes classes jugaran un paper clau en el seu desenvolupament i en l'aprenentatge de la matèria i són un punt fonamental per al correcte compliment dels objectius de l'assignatura.

A més de l'ampli ventall de recursos web de Bioinformàtica a l'abast de tothom, que estaran instal·lats a l'aula d'informàtica.

En elles l'alumne haurà de resoldre casos pràctics, prèviament seleccionats. L'aprenentatge contempla tant la introducció i manipulació de dades, com l'ús de les principals facilitats que ofereixen els programaris seleccionats.

Les pràctiques duran a terme individualment o per parelles.

Projecte de recerca:

Es pretén que l'estudiant desenvolupi habilitats en la resolució d'una hipòtesi biològica utilitzant les eines i recursos bioinformàtics impartits.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes Pràctiques	24	0,96	2, 3
Classes Teòriques	24	0,96	2
Presentació Projecte Recerca	5,5	0,22	2
Tipus: Supervisades			
Pràctiques de consolidació i tutoritzacions	10	0,4	2
Tipus: Autònomes			
Estudi	71	2,84	1
Projecte de recerca	10	0,4	2

Avaluació

Les competències de l'assignatura s'avaluaran segons els següents criteris:

Part teòrica-pràctica:

- 2 exàmens parcials de coneixements teòrics-pràctics i preguntes conceptuals [proves T1 (35%) i T2 (35%)]

Part Pràctica:

- Assistència a pràctiques i presentació dels informes corresponents [AI (10%)]
- Elaboració i presentació d'un projecte [PJ (20%)]

Exàmens teòric-pràctic	T	70%
	T1	35%
	T2	35%
Assistència a pràctiques i presentació dels informes corresponents	AI	10%
Elaboració i presentació projecte	PJ	20%

- La qualificació mínima global necessària per superar l'assignatura serà de 5 punts.
- La part pràctica es indispensable per poder ser avaluat, si bé no hi hauran mínims.
- Es considerarà que un estudiant obtindrà la qualificació de "No Presentat" si: la valoració de totes les activitats d'avaluació realitzades no li permeti assolir la qualificació global de 5 en el supòsit que hagués obtingut la màxima nota en totes elles.
- Hi haurà un examen final: bé de recuperació per aquells alumnes que no superin l'assignatura, bé per els que desitgin pujar nota (amb afectació negativa). Aquest examen representarà el 70% de la nota final donatque la part pràctica contarà el 30% restant.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Assistència i presentació d'informes de pràctiques	10%	1	0,04	1

Exàmens teòric-pràctic	70%	4	0,16	1, 3
Presentació Projecte Recerca	20%	0,5	0,02	2, 3

Bibliografia

Bibliografia específica

Attwood, T.K., Parry-Smith, D.J., Introducció a la Bioinformàtica, Pearson Education, 2002.

Bibliografia de consulta

Baldi, P., Brunak, S., Bioinformatics, MITPress, 1998.

Baxebanis, A.D., Oullette, F., Bioinformatics, John Wiley & Sons, 1998.

Lesk, A. Introduction to Bioinformatics. Oxford University Press, 2005.

Waterman, M.S., Introduction to computational biology maps, sequences and genomes, Chapman & Hall/CRC, 2000.

Recursos d'Internet

<http://www.nih.gov/>

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>

<http://www.pdb.org/>

<http://www.ebi.ac.uk>

<http://www.uniprot.org/>

<http://www.rcsb.org/>

<http://www.genomesonline.org/index>

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/projects/mapview/>

<http://genome.ucsc.edu/ENCODE/>

<http://www.genome.gov/Encode/>

<http://www.nature.com/encode/#/threads>

<http://hapmap.ncbi.nlm.nih.gov>

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/snp>

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/SNP/>

<http://omim.org>

<http://www.1000genomes.org/home>

<http://www.genome.gov/>

<http://www.genome.gov/GWASStudies/>

<http://www.embl.de/>

<http://genes.mit.edu/GENSCAN.html>

<http://expasy.org/prosite/>

<http://prodom.prabi.fr/>

<http://pfam.sanger.ac.uk/>

<http://www.cbs.dtu.dk/services/TMHMM/>

<http://scop.mrc-lmb.cam.ac.uk/scop/>

<http://www.cathdb.info/>

http://ekhidna.biocenter.helsinki.fi/dali_server/

<http://www.vcclab.org/lab/edragon/>

<http://matisse.ucsd.edu/itp-bioinfo/links.html>

<http://sites.univ-provence.fr/~wabim/english/logligne.html>