

## Bioinformàtica

2015/2016

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)

### 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 algoritmes 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 electrostatic molecular. Camp de força (force field)

### 6. Modes de acció de fàrmacs

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

## 7. 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)

## 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 duren 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 |
|-------------------------|-------|------|--------------------------|
| <b>Tipus: Dirigides</b> |       |      |                          |
| Classes Pràctiques      | 24    | 0,96 | 2, 3                     |

|                                             |     |      |   |
|---------------------------------------------|-----|------|---|
| Classes Teòriques                           | 24  | 0,96 | 2 |
| Presentació Projecte Recerca                | 5,5 | 0,22 | 2 |
| <b>Tipus: Supervisades</b>                  |     |      |   |
| Pràctiques de consolidació i tutoritzacions | 10  | 0,4  | 2 |
| <b>Tipus: Autònomes</b>                     |     |      |   |
| 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 (32.5%) i T2 (32.5%)]

### Part Pràctica:

- Assistència a pràctiques i presentació dels informes corresponents [AI (15%)]
- Elaboració i presentació d'un projecte [PJ (20%)]

|                                                                    |    |       |
|--------------------------------------------------------------------|----|-------|
| Exàmens teòric-pràctic                                             | T  | 65%   |
|                                                                    | T1 | 32.5% |
|                                                                    | T2 | 32.5% |
| Assistència a pràctiques i presentació dels informes corresponents | AI | 15%   |
| 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 evaluable" 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 65%de la nota final donatque la prart pràctica contarà el 35% restant.

## Activitats d'avaluació

| Títol                                              | Pes | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge |
|----------------------------------------------------|-----|-------|------|--------------------------|
| Assistència i presentació d'informes de pràctiques | 15% | 1     | 0,04 | 1                        |
| Exàmens teòric-pràctic                             | 65% | 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., *Introducción a la Bioinformática*, 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/GWASudies/>

<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://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>