

Bioinformàtica

Codi: 100948

Crèdits: 3

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500253 Biotecnologia	OB	3	1

Professor/a de contacte

Nom: Susana Navarro Cantero

Correu electrònic: susanna.navarro.cantero@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: No

Grup íntegre en espanyol: Sí

Equip docent

Nathalia Varejao Nogueira

Prerequisits

No existeixen prerequisits per aquesta assignatura, però és imprescindible haver repassat els conceptes adquirits a les assignatures de "Bioquímica", "Genètica i Biologia Molecular" i "Tecnologia del DNA recombinat" impartides durant el primer i segon curs.

Són molt recomanables coneixements d'anglès.

Objectius

La matèria impartida durant aquest curs constitueix una visió introductòria a la bioinformàtica. Aquesta assignatura esta dirigida a estudiants de Biotecnologia de tercer curs (5e semestre) i correspon a un assignatura teorica de 3 crèdits. S'han definit els objectius i continguts d'aquesta assignatura tenint en compte que dins de la mateixa materia (Biologia Molecular de Sistemes) es troba la assignatura de "Genomica, Proteomica e Interactomica".

Els objectius principals són:

- Proporcionar als estudiants els coneixements bioinformàtics bàsics que els permeti tant l'ús d'eines per realitzar cerques d'informació a les bases de dades moleculars com abordar l'anàlisi computacional de seqüències i estructures d'àcids nucleics i proteïnes.
- Donar una perspectiva àmplia del potencial d'aquesta disciplina tant en l'àmbit de la recerca com en el professional.

Competències

- Adquirir nous coneixements i tècniques de forma autònoma.
- Aplicar els recursos informàtics per a la comunicació, la recerca d'informació, el tractament de dades i el càlcul.
- Buscar i gestionar informació procedent de diverses fonts.

- Buscar, obtenir i interpretar la informació de les principals bases de dades biològiques, bibliogràfiques i de patents i usar les eines bioinformàtiques bàsiques.
- Fer una presentació oral, escrita i visual d'un treball a una audiència professional i no professional, tant en anglès com en les llengües pròpies.
- Interpretar resultats experimentals i identificar elements consistents i inconsistents.
- Obtenir informació de bases de dades i utilitzar el programari necessari per a establir correlacions entre estructura, funció i evolució de macromolècules.
- Raonar de forma crítica.
- Treballar de forma individual i en equip.

Resultats d'aprenentatge

1. Adquirir nous coneixements i tècniques de forma autònoma.
2. Aplicar els recursos informàtics per a la comunicació, la recerca d'informació, el tractament de dades i el càlcul.
3. Buscar i gestionar informació procedent de diverses fonts.
4. Establir relacions estructurals, funcionals i evolutives a partir de la informació existent en les bases de dades biològiques.
5. Fer una presentació oral, escrita i visual d'un treball a una audiència professional i no professional, tant en anglès com en les llengües pròpies.
6. Interpretar resultats experimentals i identificar elements consistents i inconsistents.
7. Obtenir, interpretar i utilitzar la informació existent en les bases de dades biològiques, bibliogràfiques, de patents, de mercats, etc.
8. Raonar de forma crítica.
9. Treballar de forma individual i en equip.

Continguts

Tema 1- Introducció. Bancs de dades en Biologia Molecular. Motors de cerca: Entrez i SRS. Bancs de dades primaris i secundaris. Cerca en bases de dades especialitzades. Identificació de proteïnes mitjançant cerques en bases de dades.

Tema 2- Anàlisi de la informació seqüencial del DNA. Mapes de restricció (clonatge). Disseny de sondes i d'oligonucleòtids per PCR per a la detecció i quantificació d'una seqüència, clonatge o mutagènesis dirigida. Estructura secundària de l'RNA.

Tema 3- Projectes Genoma i Navegadors genòmics. Seqüenciació, ensemblatge i anotacions de genomes. Identificació de les seqüències codificants i promotores.

Tema 4- Alineaments de seqüències. Conceptes d'homologia i similitud. Algorismes d'alineament per parells de seqüències. Dot-Plot. Alineament global i local. Matrius de puntuació. Gaps. Cerques per similitud en bases de dades: BLAST i FASTA.

Tema 5- Multialiniaments: Creació y anàlisi de alineaments múltiples de seqüències: Alineament múltiple de seqüències. Programes d'edició i visualització. Avaluació de regions conservades de proteïnes. Disseny de sondes i d'oligonucleòtids per PCR a partir de un alineament múltiple de seqüències de proteïnes. Arbres filogenètics.

Tema 6- Proteïnes: anàlisi de la funció: identificació d'homòlegs, motius, dominis i famílies proteiques. Identificació d'homòlegs llunyans mitjançant PSI-Blast. Models estadístics que relaxen la freqüència d'un aminoàcid en una posició concreta (matrius PSSM, perfils, i model de Markov ocult HMM). Predicció de motius i dominis. Bases de dades de motius, dominis i famílies proteiques. Representació de LOGOS de motius o emprentes.

Tema 7- Proteïnes: anàlisi de l'estructura: Mètodes de predicció d'estructura de proteïnes globulars, *ab-initio based*, basats en homologia i xarxes neuronals. Avaluació de la fiabilitat de del mètodes de predicció.

Predicció de l'estructura de proteïnes de membrana amb hèlix transmembrana i de barril beta. Predicció de "coiled-coil". Mètodes de predicció de l'estructura terciària. El banc d'estructures PDB. Visualització i comparació d'estructures. Classificació estructural de proteïnes.

Tema 8- Proteïnes: anàlisi i predicció del plegament i agregació. Prediccions basades en seqüència, identificació de dianes terapèutiques. Prediccions basades en estructura. Redisseny de la solubilitat proteica.

Metodologia

La metodologia docent inclou dos tipus d'activitats diferenciades: classes de teoria i classes pràctiques d'aula d'informàtica. L'aprenentatge també comptarà amb estudi i resolució de problemes autònoms.

Classes Teòriques

Classes per transmetre els conceptes bàsics i la informació necessària per desenvolupar un aprenentatge autònom. Les classes de teoria seran no presencials i s'impartiran mitjançant suport audiovisual.

Classes de Pràctiques de laboratori d'informàtica o Problemes

Aquesta activitat es durà a terme en les aules d'informàtica de la Facultat i es realitzarà en grups de 20 alumnes aproximadament. Aquestes pràctiques s'organitzaran a partir de problemes plantejats pels professors i que l'alumne haurà de resoldre usant les diferents eines i anàlisis bioinformàtiques. Al final de cada una de les sessions els alumnes hauran de lliurar els problemes que hagin aconseguit resoldre. Aquest lliurament es farà a través del campus virtual.

Per agilitzar les classes, els estudiants tenen a la seva disposició tutorials i material de suport al campus virtual.

L'assistència i entrega a les sessions de pràctiques és de caràcter obligatori.

Tutories

Sessions individuals o en parelles per a la resolució de dubtes relacionats amb l'assignatura. Aquest tipus d'activitat es realitzarà per petició dels alumnes.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes teòriques	6	0,24	1, 2, 3, 4, 7
Pràctiques de laboratori a l'aula d'informàtica	20	0,8	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9
Tipus: Supervisades			
Tutories	5	0,2	2, 3, 6, 7, 8
Tipus: Autònomes			
Estudi i Resolució de problemes	40	1,6	1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9

Avaluació

Les competències d'aquesta matèria seran avaluades mitjançant avaluació continuada, que es basarà en els següents ítems:

- proves escrites
- entrega dels problemes realitzats en les sessions de l'aula d'informàtica.
- entrega del treball integrador

a) Proves escrites,

Consistirà en dues proves escrites (temes 1-4, part 1; temes 5-8, part 2) que constaran de preguntes curtes i/o preguntes tipus test per relacionar conceptes i resolució de problemes. Es realitzaran preferiblement a les aules d'informàtica de la Facultat, de manera que l'alumne tindrà al seu abast totes les eines bioinformàtiques necessàries per respondre a les preguntes i problemes plantejats.

El pes de cada prova serà del 35% de la nota final.

b) Resolució de problemes en les sessions de l'aula d'informàtica,

És una avaluació individual que consistirà en el lliurament de tots els problemes realitzats al laboratori. El lliurament de les pràctiques únicament es pot realitzar a través del Campus Virtual en el període proposat per el professor. La no entrega de les pràctiques a través del Campus Virtual serà penalitzat. Així mateix, s'avaluarà el treball integrador de l'assignatura.

El pes d'aquesta avaluació serà del 30% de la nota final.

La nota obtinguda en aquesta activitat d'avaluació tan sols podrà fer mitja amb la nota de les proves escrites si el promig dels dos exàmens parcials és superior o igual a 5.

Prova de recuperació i millora de nota

Per participar a la recuperació, l'alumnat ha d'haver estat prèviament avaluat en un conjunt d'activitats el pes de les quals equivalgui a un mínim de dues terceres parts de la qualificació total de l'assignatura o mòdul. Per tant, l'alumnat obtindrà la qualificació de "No Avaluable" quan les activitats d'avaluació realitzades tinguin una ponderació inferior al 67% en la qualificació final.

L'exàmen de recuperació, tindrà el mateix format que les proves escrites, es a dir: preguntes tipus test i resolució de problemes. També es farà en les aules d'informàtica de la Facultat en la data programada.

Millora de la qualificació final

Els alumnes que vulguin millorar nota podran presentar-se a un exàmen de millora de nota al final del semestre, en la data i lloc programada per l'examen de recuperació. El grau de dificultat d'aquesta prova es correspondrà amb l'objectiu de la mateixa i, per tant, podrà ser superior a les altres proves escrites. L'alumne que es presenti a millorar la nota renuncia a la nota obtinguda prèviament.

La qualificació obtinguda de les pràctiques de laboratori no es podrà modificar.

Fórmula de ponderació de la nota final

Nota final= (Avaluació 1 *0.35) + (Avaluació 2 * 0.35) + (Problemes 1 * 0.15) + (Problemes 2 * 0.15)

Consideracions generals sobre l'avaluació

Per superar l'assignatura és necessari obtenir una qualificació final igual o superior a 5. La nota final s'obté fent la mitja ponderada de les tres activitats d'avaluació. No es farà promig si no s'obté una nota igual o superior a 5 en les proves escrites o de recuperació. Si la nota de les proves escrites i/o de la recuperació es inferior a 5 no es podrà superar l'assignatura.

La revisió de les proves escrites es realitzarà en dia i lloc concertat, entre 1 i 7 dies hàbils de la publicació de les notes.

Els alumnes que no puguin assistir a una prova escrita per causa justificada i aportin la documentació oficial corresponent al Coordinador de Grau, tindran dret a realitzar en un altre data una prova que podria combinar la resolució de problemes i la resposta oral a preguntes plantejades pel professor/a.

Coordinador de Grau vetllarà per la concreció d'aquesta amb el professor de l'assignatura afectada.

Qualsevol aspecte que no estigui contemplat en aquesta guia seguirà la normativa d'avaluació de la Facultat de Biociències.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Avaluació Parcial 1	35%	2	0,08	1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9
Avaluació Parcial 2	35%	2	0,08	1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9
Lliurament de problemes realitzats en les sessions de l'aula d'informàtica.	30%	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9

Bibliografia

Attwood T.K. i Parry-Smith, J. 1999. Introduction to Bioinformatics Longman. UK.

Xiong, J. 2006. Essential bioinformatics. Cambridge Univ. Press.

Sheehan, D., Physical biochemistry : principles and applications 2nd ed. Chichester: John Wilwy & Sons, 2008.

Dear, P.H., 2007. Bioinformatics, Methods Express.

Prevsner, j, 2015. Bioinformatic and functional genomics, 3rd edition. Wiley-Blackwel. ISBN 978-1-118-58178-0.

Lesk, A. 2014. Introduction to bioinformatics, 4th edition. Oxford University. ISBN: 9780199651566.

Programari

Programa JalView (www.jalview.org). representació de multialiniaments

Links a bases de dades i aplicacions:

NCBI/nucleotide

<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/nucleotide/>

NCBI/Gene

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

Uniprot

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

BRENDA

<http://www.brenda-enzymes.org/>

Swiss-2DPAGE

<http://us.expasy.org/ch2d/>

Proteome SD-PAGE database

<http://web.mpiib-berlin.mpg.de/cgi-bin/pdbs/2d-page/extern/index.cgi>

String

<http://string-db.org/>

OMIM

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

Phosphosite

<http://www.phosphosite.org/homeAction.do;jsessionid=117096AF4D54A36677C243A7D586DF45>

Nebcutter

<http://tools.neb.com/NEBcutter2/>

Netprimer

<http://www.premierbiosoft.com/netprimer/>

Primer3plus

<http://www.bioinformatics.nl/cgi-bin/primer3plus/primer3plus.cgi>

PrimerBlast

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/tools/primer-blast/>

ClustalW 2

<http://www.ebi.ac.uk/Tools/msa/clustalw2/>

Jalview

<http://www.jalview.org/download>

Uniprot

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

Paquete T-COFFE

<http://tcoffee.vital-it.ch/apps/tcoffee/index.html>

Predictor NPSA:

http://npsa-pbil.ibcp.fr/cgi-bin/npsa_automat.pl?page=/NPSA/npsa_server.html

Jalview

<http://www.jalview.org/download>

Prosite:

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

InterProScan 4

<http://www.ebi.ac.uk/Tools/pfa/iprscan/>

PRATT

<http://web.expasy.org/pratt/>

WebLogo

<http://weblogo.berkeley.edu/logo.cgi>

JPred3

<http://www.compbio.dundee.ac.uk/www-jpred/>

Predict Protein

<https://predictprotein.org/>

COILS

http://embnet.vital-it.ch/software/COILS_form.html

Phobius

<http://phobius.sbc.su.se/>

Signal Peptide

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

PRED TMBB

<http://bioinformatics.biol.uoa.gr/PRED-TMBB/input.jsp>

RCSB PDB

<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

PDBsum

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

VAST

<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/VAST/vast.shtml>

Dali

http://ekhidna.biocenter.helsinki.fi/dali_lite/start

EXPASY:

www.expasy.org

Aggrescan:

<http://bioinf.uab.es/aggrescan/>

Aggrescan 3D

<http://biocomp.chem.uw.edu.pl/A3D2/>