

**ASIGNATURA: BIOINFORMÁTICA**

Coordinador/es	Gabriel Pons y Josep Lluís Gelpí
Profesorado	Gabriel Pons y Josep Lluís Gelpí

JUSTIFICACIÓN DE LA ASIGNATURA

La utilización de la informática en la biología y en la biomedicina resulta tan básico que la justificación de una asignatura de bioinformática en un Master en Biomedicina parecería innecesario. Ahora bien, definir lo que es y lo que pretende la bioinformática puede resultar demasiado amplio. Se puede entender como Bioinformática todo aquello que implica la utilización de herramientas informáticas para investigar y resolver problemas biológicos y biomédicos. Esto comportaría aspectos como los abordajes sobre vías metabólicas, análisis estructural de biomoléculas, predicción de estructuras tridimensionales o análisis y manipulación de secuencias de ADN o proteínas. Esta asignatura se centrará esencialmente en estos últimos aspectos. La justificación de la asignatura y su troncalidad viene dada por el hecho que todo investigador en biomedicina ha de conocer a un nivel básico las principales herramientas de que disponemos para poder investigar las funciones bioquímicas y las consecuencias patológicas provocadas por alteraciones en las proteínas y los genes que las codifican. Esto implica conocer las principales bases de datos biológicas, las herramientas para obtener información de ellas y su interpretación.

OBJETIVOS**Objetivos de conocimientos**

El alumno deberá conocer:

1. Las bases de datos principales primarias y secundarias de secuencia (proteínas y ácidos nucleicos) y estructuras tridimensionales. Contenido, estructura, herramientas de recuperación de datos. Criterios de calidad.
2. Las bases de datos genómicas y recursos genómicos especializados. Predicción génica.
3. Los principios de alineamiento de secuencias y las herramientas representativas.
4. Concepto de familia de proteínas. Búsqueda de homólogos. Herramientas representativas.
5. Principios básicos de la genética evolutiva.
6. Predicción funcional. Uso de la homología y motivos de secuencia.
7. Los métodos de predicción estructural. “Threading” y modelado comparativo.

Objetivos de habilidades

El alumno deberá ser capaz de:

1. Buscar y recuperar información sobre proteínas o genes accediendo a bases de datos de secuencia o estructura 3D
2. Efectuar manipulaciones simples de secuencia utilizando herramientas locales
3. Alinear secuencias localmente o contra bases de datos. Buscar homólogos e identificar familias de proteínas utilizando herramientas como BLAST o bases de datos como PFAM u otras.
4. Analizar estructuras génicas a partir de bases de datos y efectuar predicciones génicas con herramientas de tipo automático (GeneID)
5. Localizar patrones de secuencia y valorar su utilidad (PROSITE)
6. Utilizar a nivel sencillo herramientas de visualización molecular (Deep View, Protein Explorer).
7. Inferir relaciones estructura-función simple a partir del análisis visual de estructuras
8. Efectuar predicciones de estructura 3D utilizando herramientas de tipo automático y valorar sus resultados (3DPSSM, Swiss-Model)

CONTENIDOS Y TEMARIO

Temario (11T, 9P)

1. Introducción a la Bioinformática.
2. Bases de datos de interés biológico. Repositorios de secuencia. Repositorios de estructura 3D.
3. Bases de datos derivados: Genómicas, Familias proteicas, clasificación de estructuras.
4. Concepto de homología. Alineamiento de secuencias. Matrices de comparación, algoritmos principales. Alineamiento global vs. Alineamiento local. Herramientas de alineamiento local (BLAST).
5. Alineamiento múltiple. Ventajas. Herramientas representativas.
6. Concepto de motivo. Utilidad, herramientas representativas y criterios de valoración.
7. Estructuras Tridimensionales, PDB, visualización molecular.
8. Predicción estructural. Threading y modelado comparativo. Herramientas representativas.
9. Seminarios especializados.

Profesores participantes: J.Ll. Gelpí y Gabriel Pons

Possibles conferenciants convidats: R. Guigó, (UPF), A. Valencia (CNB), J. Rozas (Genética, UB)

METODOLOGÍA Y ORGANIZACIÓN DE LA ASIGNATURA

Enseñanza presencial

La asignatura se desarrollará en su mayor parte en aulas de informática con conexión a Internet. Dada la naturaleza de las materias a impartir, las sesiones contendrán lecciones magistrales con actividades prácticas guiadas.

Además de las lecciones magistrales derivadas del programa, se realizarán los siguientes seminarios:

- Predicción génica
- Genética evolutiva
- Text-Mining

Trabajo no presencial

El trabajo no presencial a desarrollar consistirá en un proyecto integrado de búsqueda, predicción y análisis, el tema concreto del cual se seleccionará de manera que resulte de interés para el alumno (en relación a su currículum, otros cursos, eventuales actividades de investigación, etc.). El trabajo deberá incorporar un cierto número de las técnicas estudiadas y deberá de significar la formulación de hipótesis de predicción funcional y/o estructural. Se valorará la programación de eventuales experimentos que puedan corroborar las predicciones realizadas.

EVALUACIÓN

Se propondrán un conjunto de actividades no presenciales en forma de proyectos de investigación y predicción que integren el conjunto amplio de las herramientas estudiadas en las sesiones presenciales. Se procurará que el tema seleccionado sea de utilidad para el proyecto de investigación personal del alumno.

La evaluación del curso se realizará analizando del trabajo realizado según los criterios siguientes:

- Adecuación de las herramientas seleccionadas a los objetivos del proyecto a realizar
- Buen uso de las herramientas seleccionadas
- Originalidad en el planteamiento de la hipótesis
- Criterios utilizados en la valoración crítica de los resultados obtenidos
- Eventualmente, capacidad de plantear experimentos derivados de la formación obtenida

En cualquier caso la valoración de los resultados se ajustará a la dificultad del problema seleccionado.

BIBLIOGRAFÍA

- Baxevanis, A.D. y Oullette, B.F Francis. *Bioinformatics*. A practical guide to the analysis of genes and proteins. 3ª edición. Wiley. 2005

- Tutoriales en:

<http://www.expasy.org>

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

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

<http://www.pdb.org>

- Revistas: Artículos seleccionados de Bioinformatics, Proteins, J. Mol. Biol.