



<b>Assignatura</b>	BIOINFORMÀTICA
<b>Codi</b>	
<b>Crèdits ECTS</b>	2
<b>Departament/s</b>	
<b>Coordinador/s</b>	Gabriel Pons i Josep Lluís Gelpí
<b>Professorat</b>	Gabriel Pons i Josep Lluís Gelpí

## □ JUSTIFICACIÓ DE L'ASSIGNATURA

L'ús de la informàtica en la biologia i en la biomedicina resulta tan bàsic que la justificació d'una assignatura de bioinformàtica en un màster de Biomedicina semblaria innecessària. Ara bé, definir el que es i pretén la bioinformàtica pot resultar massa ampli. Es pot entendre com a Bioinformàtica tot allò que implica la utilització de eines informàtiques per investigar i resoldre problemes biològics i biomèdics. Això comportaria aspectes com els abordatges sobre vies metabòliques, anàlisi estructural de biomolècules, predicció d'estructures tridimensionals o l'anàlisi i manipulació de seqüències de DNA o proteïnes. Aquesta assignatura es centrarà essencialment en aquests últims aspectes. La justificació de l'assignatura i la seva troncalitat ve donada pel fet de que tot investigador en biomedicina ha de conèixer a un nivell bàsic les principals eines bioinformàtiques de que disposem per tal de poder investigar les funcions bioquímiques i les conseqüències patològiques provocades per alteracions en les proteïnes i els gens que les codifiquen. Això implica conèixer les principals bases de dades biològiques, les eines per obtenir informació de elles i la seva interpretació.

## □ OBJECTIUS

### Objectius de coneixements

L'alumne haurà de conèixer:

1. Les bases de dades principals primàries i secundàries de seqüència (proteïnes i àcids Nucleics) i estructures tridimensionals. Contingut, estructura, eines de recuperació de dades. Criteris de qualitat.
2. Les bases de dades genòmiques i recursos genòmics especialitzats. Predicció gènica
3. Els principis d'alineament de seqüències i les eines representatives.
4. Concepte de família de proteïnes. Cerca d'homòlegs. Eines representatives.
5. Principis bàsics de la genètica evolutiva.
6. Predicció funcional. Ús d'homologia, Motius de seqüència
7. Els mètodes de predicció estructural. "Threading" i modelat comparatiu.

### Objectius d'habilitats

L'alumne haurà de ser capaç de:

8. Cercar i recuperar informació sobre proteïnes o gens accedint a bases de dades de seqüència o estructura 3D
9. Efectuar manipulacions simples de seqüència emprant eines locals
10. Alinear seqüències localment o contra bases de dades. Cercar homòlegs i identificar famílies de proteïnes emprant eines com BLAST o bases de dades com PFAM o altres.
11. Analitzar estructures gèniques a partir de bases de dades i efectuar prediccions gèniques amb eines de tipus automàtic (GeneID)
12. Localitzar patrons de seqüència i valorar-ne la utilitat (PROSITE)
13. Emprar a nivell senzill eines de visualització molecular (Deep View, Jmol, Protein Explorer).
14. Inferir relacions estructura-funció simple a partir d'anàlisi visual d'estructures
15. Efectuar prediccions d'estructura 3D emprant eines de tipus automàtic i valorar-ne els resultats (3DPSSM, Swiss-Model)

16. Efectuar prediccions d'estructura 3D emprant eines de tipus automàtic i valorar-ne els resultats (3DPSSM, Swiss-Model)

## □ CONTINGUTS I TEMARI

### Temari (11T, 9P)

1. Introducció a la Bioinformàtica
2. Bases de dades d'interès biològic. Repositoris de seqüència. Repositoris d'estructura 3D.
3. Bases de dades derivades: Genòmiques, Famílies proteiques, classificació d'estructures.
4. Concepte d'homologia. Alineament de seqüències. Matrius de comparació, algorismes principals. Alineament global vs. Alineament local. Eines d'alineament local (BLAST).
5. Alineament múltiple. Avantatges. Eines representatives.
6. Concepte de motiu. Utilitat, eines representatives, criteris de valoració
7. Estructures Tridimensionals, PDB, visualització molecular
8. Predicció estructural. Threading i Modelat comparatiu. Eines representatives.
9. Seminaris especialitzats

**Professors participants:** J.Ll. Gelpí i Gabriel Pons

**Possibles conferencians convidats:** R. Guigó, (UPF), A. Valencia (CNB), J. Rozas (Genetica, UB)

## □ METODOLOGIA I ORGANITZACIÓ DE L'ASSIGNATURA

### Ensenyament presencial

L'assignatura es desenvoluparà en la seva major part en aules d'informàtica amb connexió a Internet. Donada la naturalesa de les matèries a impartir, les sessions contindran lliçons magistrals combinades amb activitats pràctiques guiades.

A més de les lliçons magistrals derivades del programa es realitzaran els següents seminaris:

- Predicció gènica
- Genètica evolutiva
- Text-Mining

### Treball no presencial

El treball no presencial a desenvolupar consistirà en un projecte integrat de cerca, predicció i anàlisi, el tema concret del qual es seleccionarà de manera que resulti d'interès per a l'alumne (en relació al seu currículum, altre cursos, eventuales activitats de recerca, etc.): El treball haurà d'incorporar un cert nombre de les tècniques estudiades i haurà de significar la formulació d'hipòtesis de predicció funcional i/o estructural. Es valorarà la programació d'eventuals experiments que puguin corroborar les prediccions realitzades.

### Tutories

Es faran a conveniència i a petició dels alumnes

## □ AVALUACIÓ

Es proposaran un conjunt d'activitats no presencials en forma de projectes de cerca i predicció que integrin el conjunt ampli de les eines estudiades en les sessions presencials. Es procurarà que el tema seleccionat sigui d'utilitat per al projecte de recerca personal de l'alumne.

L'avaluació del curs s'efectuarà analitzant el treball realitzat segons els criteris següents:

- Adequació de les eines seleccionades als objectius del projecte a realitzar
- Bon ús de les eines seleccionades.
- Originalitat en el plantejament d'hipòtesi
- Criteris emprats en la valoració crítica del resultat obtingut
- Eventualment, capacitat de plantejament de experiments derivats de la informació obtinguda

En qualsevol cas la valoració dels resultats s'ajustarà a la dificultat del problema seleccionat.

## □ BIBLIOGRAFIA

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

- Tutorials a:

<http://www.expasy.org>

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

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

<http://www.pdb.org>

- Revistes: Articles seleccionats de Bioinformatics, Proteins, J. Mol. Biol.