



PROGRAMA DE ACTIVIDAD CURRICULAR

SEMINARIO: Bioinformática

CARGA HORARIA: 30 horas

PROFESOR: Dr. Ezequiel Juritz

Fundamentación

La Bioinformática es una ciencia interdisciplinaria que se ha convertido en un componente esencial en una gran diversidad de campos; desde análisis evolutivos hasta la búsqueda de nuevos fármacos. Las implementaciones bioinformáticas se han extendido en los últimos años a todas las ramas de la ciencia, al punto que actualmente en todo desarrollo biotecnológico se encuentra implicado un proceso bioinformático.

Su eje central es el análisis computacional aplicado a distintos niveles de sistemas biológicos. La bioinformática articula áreas del conocimiento como la biología, estadística, bioquímica, matemática, informática y genética. Gracias a esta interdisciplinariedad ofrece un amplio espectro de herramientas que posibilitan el abordaje de complejos estudios como el diseño racional de proteínas, predicción de funciones biológicas, identificación de ligandos específicos y el análisis funcional de secuencias de ácidos nucleicos.

El estudio de alta resolución y en gran escala de sistemas biológicos a nivel molecular, celular, de organismo y superiores abre las puertas a un nuevo universo de datos, fuente de retos para la interpretación, manejo y análisis de datos biológicos complejos de manera precisa y eficiente. Con el fin de aprovechar el potencial de estos acontecimientos, es preciso el desarrollo y la aplicación de modelos teóricos y procesamiento de datos orientados al estudio de sistemas biológicos. Estos desafíos sólo son abordables mediante la implementación y el desarrollo de herramientas bioinformáticas.

A fin de conseguir un aprovechamiento óptimo de los conceptos abordados por la asignatura, el alumno debe contar con conocimientos de biología molecular, genética, estructura proteica y manejo básico de conceptos informáticos.

Objetivos

- Estudiar las herramientas y bases de datos bioinformáticas.
- Conocer los parámetros y las aplicaciones de las herramientas bioinformáticas más difundidas.
- Abordar problemas biológicos desde una perspectiva bioinformática, seleccionando las herramientas adecuadas, optimizando sus parámetros y analizando los resultados obtenidos para extraer conclusiones biológicamente relevantes.
- Incorporar una formación especializada con una sólida base teórico-conceptual de biología computacional.



Contenidos

UNIDAD 1 – INTRODUCCIÓN.

Consideraciones generales de la Bioinformática: Alcance, campos de aplicación y metodologías.

UNIDAD 2 – ANÁLISIS SECUENCIALES.

Bases de datos secuenciales. divergencia secuencial, evolución molecular. Formatos para archivos de secuencias moleculares. Alineamientos secuenciales. Redes neuronales. Concepto de redes de similitud. Modelos ocultos de Markov. Significancia estadística. Algoritmos de alineamientos. Profiles. Logos. Análisis de residuos conservados. Patrones y motivos secuenciales. Predicciones a partir de métodos secuenciales.

UNIDAD 3 – ANÁLISIS ESTRUCTURALES.

Estructura proteica. Plegado proteico. Paradoja de Levinthal. Cristalización proteica. Difracción de Rayos X. Formato PDB y PDBQT. Herramientas de visualización de estructuras moleculares. Relación secuencia, estructura y función en el marco evolutivo. Métodos de medición de similitud estructural. Root Mean SquareDeviation. Bases de datos estructurales. Búsquedas basadas en criterios estructurales.

UNIDAD 4 – BIOINFORMÁTICA APLICADA.

Termodinámica proteica. Efecto termodinámico de mutaciones. Modelado por homología. Modelado molecular ab initio. Validaciones de modelos por métodos estructurales y energéticos. Técnicas de Docking. Predicción de interacciones moleculares. Diseño racional de proteínas. Método consenso. Diversos predictores bioinformáticos: agregación proteica, ASA, cavidades.

Modalidad

Durante el curso se dispondrán las siguientes modalidades de enseñanza:

Clases teóricas

Exposición de los fundamentos teóricos del tema abordado en modo conceptual, utilizando para tal fin presentaciones y ejemplos de aplicaciones prácticas guiadas por el profesor. Las clases teóricas apuntan a una exposición clara de los conceptos tratados.

Se busca que el alumno genere de forma dinámica sus propias ideas y apuntes personales en base a la información suministrada por el docente. Asimismo, se brindará el espacio necesario para evacuar dudas e inquietudes relacionadas.

Trabajos prácticos

Los trabajos prácticos se corresponden a temas conceptuales ya tratados en clases teóricas y plantean problemas que los alumnos deberán resolver en grupos y mediante el uso de computadoras utilizando software local y servidores disponibles en línea. Se proveerá al alumno con los programas y archivos necesarios para la resolución de los trabajos. Se discutirán las distintas propuestas empleadas por distintos grupos.



Los trabajos prácticos promueven el trabajo en grupo como así también la capacidad de discusión de problemas planteados en tiempo real.

Ejercitación fuera de clase

El curso incluye trabajos prácticos para desarrollar fuera del horario de clase, para luego ser presentados en tiempo y forma al docente.

La ejercitación fuera de clase posee como objetivo promover la autonomía del alumno mediante la resolución de problemas bioinformáticos fuera de la supervisión del docente. El docente estará disponible para evacuar dudas por medio de correo electrónico o video-conferencia en horarios preestablecidos.

Modalidad de Evaluación

Entrega de un trabajo e informe a desarrollar por grupo de dos alumnos con fecha de entrega posterior a la finalización del curso. Dicho trabajo consistirá en un estudio de una proteína o sistema proteico de interés elegido por los alumnos y comprenderá la integración de las herramientas estudiadas en clase.

Se evaluarán la destreza y creatividad aplicada en la resolución del problema propuesto, la solvencia en la argumentación y la coherencia en el desarrollo del contenido.

Cronograma de cursada:

- Miércoles 13 de septiembre de 14:00 a 22:00 horas
- Jueves 14 de septiembre de 14:00 a 22:00 horas
- Viernes 15 de septiembre de 14:00 a 22:00 horas
- Sábado 16 de septiembre de 9:00 a 13:00 y de 14:00 a 18:00 horas

Bibliografía obligatoria

- Introduction to Bioinformatics. Lesk A. ISBN: 978-0199651566. 2014.
- Biomolecular Interfaces: Interactions, Functions and Drug Design. Stigliano, A.F. ISBN: 978-3319168494. 2015.
- Bioinformatics for Beginners: Genes, Genomes, Molecular Evolution, Databases and Analytical Tools. Choudhuri, S. ISBN: 978-0124104716. 2014.
- Practical Bioinformatics, 1st Edition. Agostino, M. ISBN: 9780815344568. 2013.
- Introduction to Modeling for Biosciences. Barnes, D.J. and Chu, D. ISBN: 978-1447159070. 2014.
- Bioinformatics: Principles and Applications. Ghosh, Z. and Mallick, B. ISBN: 978-0195692303. 2015.