



Grado en Biotecnología 27123 - Bioinformática

Guía docente para el curso 2013 - 2014

Curso: 3, Semestre: 2, Créditos: 6.0

Información básica

Profesores

- **María Francisca Fillat Castejón** fillat@unizar.es
- **María Milagros Medina Trullenque** mmedina@unizar.es
- **Emma Sevilla Miguel** esevilla@unizar.es
- **Patricia Ferreira Neila** ferreira@unizar.es
- **Javier Sancho Sanz** jsancho@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Para cursar con aprovechamiento esta asignatura se recomienda haber cursado Bioquímica, Biología Molecular y Estructura de Macromoléculas, así como haber cursado o estar cursando Ingeniería Genética.

Actividades y fechas clave de la asignatura

La asignatura es cuatrimestral del segundo cuatrimestre. Los horarios y las fechas de los exámenes se pueden consultar en la página web de la Facultad de Ciencias: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

- 1:** Conocer, utilizar y extraer información de las principales bases de datos de biomoléculas.
- 2:** Construcción e interpretación de árboles filogenéticos.
- 3:** Realización de análisis básicos de estructuras de proteínas y ácidos nucleicos.

- 4: Utilización de herramientas informáticas en el apoyo de diversas metodologías de Ingeniería Genética.
- 5: Realización de simulaciones sencillas de interacción entre biomoléculas y organizaciones cuaternarias.
- 6: Identificación de metodologías computacionales de simulación en el análisis de dinámica molecular y las reacciones enzimáticas en biomoléculas.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

Esta asignatura tiene como objetivo introducir al estudiante en las principales técnicas informáticas de uso más habitual en Biotecnología. Esto le permitirá conocer, utilizar y extraer información de las principales bases de datos de contenido biológico disponibles en red, construir e interpretar árboles filogenéticos, realizar análisis básicos de estructuras de proteínas y ácidos nucleicos, predecir estructuras tridimensionales y realizar simulaciones sencillas de dinámica molecular, interacción molecular e incluso, reacciones bioquímicas.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

Esta asignatura introduce a sus estudiantes tanto en aspectos generales como concretos de las principales técnicas informáticas de uso habitual en Bioquímica, Biotecnología y Bioinformática. Los contenidos de esta asignatura corresponden a la enseñanza de una serie de metodologías computacionales que van desde aquellas de uso general entre los trabajadores en los campos de Bioquímica y Biotecnología, al conocimiento de otras que requieren de especialización.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Con las clases magistrales y las prácticas en el aula de informática los alumnos adquirirán los conocimientos y destrezas básicas de esta materia. Al mismo tiempo desarrollarán habilidades técnicas específicas de un perfil de Biólogo Estructural. Con la elaboración de un trabajo personal, se pretende que los alumnos pongan en práctica los conocimientos adquiridos y adquieran competencias adicionales relacionadas con la búsqueda de información y su análisis crítico, redacción y comunicación de contenidos científicos, etc...

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

- 1: Identificar las principales bases de datos de moléculas biológicas disponibles en la red.
- 2: Obtener información de dichas bases de datos e interpretarla en terminos bioquímicos y biotecnológicos.
- 3: Utilizar el software mas habitual para el análisis de secuencias de macromoléculas.
- 4: Elegir y utilizar las herramientas adecuadas para obtener datos estructura-función de un molécula biológica a partir de su secuencia.
- 5: Analizar y las estructuras de macromoléculas depositadas en las bases de datos.

- 6: Resolver problemas sencillos de dinámica molecular, predicción de interacción entre proteínas y predicción de mecanismos de catálisis
- 7: Analizar de forma crítica la información obtenida
- 8: Realizar presentaciones y exposiciones
- 9: Transmitir conceptos básicos acerca de los métodos estudiados y su aplicación
- 10: Comunicar conclusiones a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

La información estructural y funcional que se deriva del empleo de distintos métodos bioinformáticos resulta cada vez más relevante para el manejo y análisis de datos en las áreas de conocimiento que implican a los organismos vivos, como son la Biotecnología, la Bioquímica, y las Biologías Estructural, Molecular y Celular. Así, la información que derivan estos métodos presenta aplicaciones relevantes para la utilización y mejora de sistemas biológicos de cara a su uso en Biotecnología y Biomedicina.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

- 1: **Examen de Teoría.** Exámen al final del cuatrimestre. Las competencias específicas se evaluarán mediante pruebas escritas que incluirán problemas y/o ejercicios.
 - 2: **Casos Prácticos.** Evaluación continua durante la realización de los mismos. Asistencia obligatoria.
 - 3: **Preparación de un proyecto individual.** Se evaluará el rigor, los resultados obtenidos, la claridad del proceso y la discusión de los resultados en el informe presentado al profesor. Realización obligatoria.
 - 4: **General.** Hay que aprobar Teoría y Prácticas (casos prácticos + proyecto individual) independientemente. A la nota final de la asignatura contribuirán: Examen de Teoría, 50%, Casos Prácticos, 15% y Proyecto Individual, 35%.
 - 5: Además de la modalidad de evaluación señalada, el alumno tendrá la posibilidad de ser evaluado en una prueba global, que juzgará la consecución de los resultados del aprendizaje señalados anteriormente. Esta prueba se realizará en el aula de informática.
 - 6: El temario que los estudiantes deben utilizar para preparar las diferentes pruebas se encuentra en el apartado "Actividades y recursos" de esta misma guía docente
-

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

Partiendo de una intensificación de conocimientos teóricos se adquiere una orientación eminentemente práctica y aplicada en el aula de informática para el manejo de las herramientas de búsqueda, análisis y modelización de moléculas biológicas, así como de los resultados derivados del estudio de genomas completos. Se pretende que los alumnos sean capaces de elegir el método que aplicar a sus necesidades partiendo de los conocimientos teórico-prácticos que han adquirido en la asignatura.

Esta estrategia se adapta a la resolución de problemas prácticos que supone en definitiva, la parte más aplicada de la asignatura, y un modo de aproximar a los estudiantes a las situaciones que confrontarían en un trabajo diario en el ámbito de trabajo. Así, la asignatura tiene una orientación fundamentalmente aplicada, las actividades que se proponen se centran en la aplicación de una serie de principios fundamentales a casos reales concretos, bien sea mediante el análisis del caso proporcionado por el profesor e interpretación desde el punto de vista biológico, o la preparación individual por parte del alumno de casos concretos que han requerido de la aplicación de una o varias de las metodologías tratadas en la asignatura y el debate con sus compañeros.

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

1: **Clases magistrales.** Presencial. 20 hr. En ellas se presentan a los alumnos los conocimientos teóricos básicos de la asignatura, que versarán sobre los siguientes contenidos:

1. Introducción.
2. Bases de datos de secuencias de genes y proteínas. Introducción y recuperación de datos.
3. Alineamiento de secuencias.
4. Análisis y comparación de genomas. Metagenomas. Bases de datos de Transcriptómica.
5. Bases de datos de rutas metabólicas
6. Árboles filogenéticos. Caso Práctico 1: Construcción de matrices de distancia y cladogramas.
7. Bases de datos de estructura de proteínas y ácidos nucleicos. Introducción de datos y aplicaciones de visualización.
8. Quimioinformática: bases de datos de moléculas orgánicas.
9. Herramientas para el diseño de fármacos. QSAR, ADMET.
10. Servidores web: ¿cómo se hacen y cómo funcionan?
11. Bases de datos y servidores temáticos (de enfermedades, etc.).
12. Miscelánea de aplicaciones bioinformáticas de interés biotecnológico.
13. Interrogación de bases de datos biológicas mediante scripts.
14. Métodos de simulación molecular.
15. Dinámica Molecular y Montecarlo. Caso Práctico 2: Simulaciones de plegamiento y estabilidad.
16. Métodos de predicción de estructuras de proteínas y ácidos nucleicos.
17. Acoplamiento molecular (*docking*).
18. Métodos híbridos Mecánica Cuántica/Mecánica Molecular (QM/MM). Caso Práctico 3: Simulaciones de reacciones enzimáticas. (1H).
19. Bases de datos para proteómica y para interactómica. (1H).

Se utilizarán proyecciones de pantalla de ordenador (PowerPoint), incluyendo pequeñas animaciones y videos y navegación on-line, así como metodologías semi-presenciales.

Bibliografía

Bioinformatics : sequence and genome analysis. David W. Mount. Cold Spring Harbor Laboratory Press. 2ª ed. 0-87969-712-1.

Bioinformatics : sequence and genome analysis. David W. Mount Cold Spring Harbor Laboratory Press 0-87969-6078-7.

Discovering genomics, proteomics, and bioinformatics. A. Malcolm Campbell, Laurie J. Heyer Benjamin Cummings. 0-8053-4722-4.

Structural bioinformatics. Edited by Philip E. Bourne, Helge. Weissig Wiley-Liss 0-471-20200-2.

Introduction to bioinformatics. Arthur M. Lesk. Oxford University Press. 199251967.

Introduction to bioinformatics. Teresa K. Attwood and David J. Parry-Smith. Prentice Hall, 1999 582327881.

The ten most wanted solutions in protein bioinformatics. Anna Tramontano. Chapman & Hall/CRC, 2005. 1-58488-491-6

Bioinformatics : genes, proteins, and computers. Edited by Christine Orengo, David Jones, Janet Thornton Taylor & Francis Group 978-1-85996-054-7.

Bioinformatic.s D. R. Westhead, J.H. Parsih and R.M. Twyman Bios: Instant Ntes 1859962726 bioinformatica

Bioinformatics : a practical guide to the analysis of genes and proteins [edited by] Andreas D. Baxevanis, B.F. Francis Ouellette. Wiley-Interscience, 2001 0-471-38391-0 bioinformatica

2: **Clases de casos prácticos.** Presencial. 20 horas. Aula de Informática.

Caso 1: Recuperación de secuencias, alineamiento de secuencias y construcción de un árbol filogenético.

Caso 3: Amplificación y clonaje de genes *in silico*.

Caso 3: Análisis estructural: .relación estructura-función de una enzima.

Caso 4: Acoplamiento molecular para el diseño de un fármaco.

Caso 5. Confección de un script de análisis

El profesor repartirá los casos prácticos a través de las plataformas de enseñanza semi-presencial. Se instruirá al alumno en cómo debe diseñar sus búsquedas y simulaciones e interpretar los resultados.

Estas actividades permitirán al alumno adquirir la capacidad y destrezas necesarias para más adelante analizar y resolver problemas utilizando las metodologías con las que se trabaja en la asignatura. El alumno será capaz de diseñar búsquedas y simulaciones de forma independiente y evaluar críticamente los resultados obtenidos.

3: **Proyecto:** 20 h. 5 sesiones de 4 horas en aula informática para preparación de un proyecto. Cada alumno presentará, para su evaluación, un informe de su proyecto de una extensión máxima de 10 folios (una cara, espacio simple, tamaño 12 puntos).

En esta actividad los alumnos desarrollarán un caso concreto de forma individual y después generarán un informe. El análisis de la información deberá conducir a la elaboración de una presentación estructurada en Introducción, Métodos, Resultados, Discusión, Conclusiones, y Bibliografía. El profesor supervisará el trabajo individual de los alumnos en cinco sesiones de 4 horas en el aula de informática.

Esta actividad estimulará a los alumnos a utilizar las distintas aplicaciones informáticas en red que se han explicado en las clases teóricas y utilizado en las sesiones de casos prácticos, para resolver un problema particular. Estimulará la utilización por parte de los estudiantes de material científico en red y su

interpretación para la presentación de un informe donde los estudiantes deberán comunicar conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

El horario reservado esta asignatura, así como las fechas previstas para los exámenes, se puede consultar en la página web de la Facultad de Ciencias: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Attwood, T.K.. Introduction to Bioinformatics. - 1999 Prentice Hall
- Baxevanis, A. D. (Ed). Bioinformatics: a practical guide to the analysis of genes and proteins . 2001 Wiley-Interscience
- Bourne, P.E. (Ed.). Structural Bioinformatics. Weissig Wiley-Liss
- Campbell, A. Malcolm. Discovering genomics, proteomics, and bioinformatics / A. Malcolm Campbell, Laurie J. Heyer . - 2nd ed. San Francisco [etc.] : Pearson Benjamin Cummings, cop. 2007
- Lesk, Arthur M.. Introduction to bioinformatics / Arthur M. Lesk . 4th. ed. Oxford : Oxford University Press, cop.2014
- Mount, D. W.. Bioinformatics: sequence and Genome Analysis. - 2ª Cold Spring Harbor Laboratory Press
- Orengo, C (Ed.). Bioinformatics: Genes, Proteins and Computers. Taylor & Francis Group
- Tramontano, Anna. The ten most wanted solutions in protein bioinformatics / Anna Tramontano Boca Raton : Chapman & Hall/CRC, 2005
- Westhead, D.R.. Bioinformatics Twyman Bios: Instant Ntes