

27123 - Bioinformática

Información del Plan Docente

Año académico	2016/17
Centro académico	100 - Facultad de Ciencias
Titulación	446 - Graduado en Biotecnología
Créditos	6.0
Curso	3
Periodo de impartición	Segundo Semestre
Clase de asignatura	Obligatoria
Módulo	---

1. Información Básica

1.1. 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 simultáneamente Ingeniería Genética.

* Realizar un trabajo regular y continuado a lo largo del curso, participando activamente en las clases y tutorías, y realizando los casos propuestos en el aula de informática.

* Consultar libros específicos relacionados con la asignatura, además del material específico suministrado por el profesor.

1.2. Actividades y fechas clave de la asignatura

La asignatura pertenece al Módulo Fundamental y es cuatrimestral del segundo cuatrimestre de tercer curso del Grado.

Para aquellos alumnos matriculados los horarios y fechas de clases teóricas (único grupo, febrero-marzo) y sesiones en aula de informática (4 grupos, dos bloques de 5 sesiones de 4 hr por grupo entre febrero-mayo) se harán públicos a través del TABLON DE ANUNCIOS DEL GRADO en moodle y en el moodle de la asignatura. Dichas vías serán también utilizadas para comunicar a los alumnos matriculados su distribución por grupos de prácticas confeccionada desde la Coordinación del Grado.

Unas fechas provisionales se podrán consultar en la página web de la Facultad de Ciencias en la sección correspondiente del Grado en Biotecnología: <https://ciencias.unizar.es/grado-en-biotecnologia> . En dicha web se podrán consultar también las fechas de exámenes en el apartado Grado en Biotecnología.

2. Inicio

2.1. Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

- Conocer, utilizar y extraer información de las principales bases de datos de biomoléculas.
- Construcción e interpretación de alineamientos múltiples de secuencias.
- Construcción e interpretación de árboles filogenéticos.
- Realización de análisis básicos de estructuras de proteínas y ácidos nucleicos.
- Utilización de herramientas informáticas en el apoyo de diversas metodologías de Ingeniería Genética y Biología Estructural.
- Realización de simulaciones sencillas de interacción entre biomoléculas, predicción de organizaciones cuaternarias y modelado por homología.
- Identificación de metodologías computacionales de simulación en el análisis de dinámica molecular y las reacciones enzimáticas en biomoléculas.

2.2. Introducción

Esta asignatura tiene como objetivo introducir al estudiante en el uso de las herramientas informáticas más habituales en el estudio de biomoléculas y/o con aplicaciones en diversos campos de la Biotecnología.

La superación de la asignatura permitirá al estudiante conocer y utilizar las principales bases de datos de contenido biológico disponibles en red, producir alineamientos múltiples de secuencias, construir e interpretar árboles filogenéticos, realizar análisis básicos de estructuras de proteínas y ácidos nucleicos, predecir estructuras tridimensionales y conocer las herramientas para realizar simulaciones sencillas de dinámica molecular, interacción molecular e, incluso, reacciones bioquímicas.

3. Contexto y competencias

3.1. Objetivos

El objetivo de esta asignatura es introducir a los estudiantes tanto en aspectos generales como concretos de las principales herramientas bioinformáticas de uso habitual en Bioquímica, Biotecnología y Bioinformática y familiarizarles con el potencial de una serie de metodologías computacionales que incluyen desde aquellas de uso general en los campos de Bioquímica y Biotecnología hasta métodos especializados en Biotecnología Computacional.

3.2. Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Esta asignatura se imparte en el segundo cuatrimestre del tercer curso del Grado en Biotecnología y pertenece al Módulo Fundamental. En este momento los alumnos ya disponen de un gran número de conocimientos metodológicos y teóricos y son conscientes de la ingente cantidad de información que es necesario procesar al trabajar con sistemas biológicos.

Esta asignatura les permite conocer las bases de datos principales de biomoléculas así como servidores en red para su almacenamiento, búsqueda de información o análisis. En las clases magistrales y las prácticas en el aula de informática los alumnos adquirirán los conocimientos y destrezas básicas de esta materia. Con la elaboración de un trabajo personal individual los alumnos pondrán en práctica los conocimientos adquiridos en un caso real de actualidad, que les permitirá además trabajar competencias transversales relacionadas con la búsqueda de información y su análisis crítico, así como en la redacción y comunicación de contenidos científicos.

3.3. Competencias

Al superar la asignatura, el estudiante será capaz de:

- Identificar las principales bases de datos de moléculas biológicas disponibles en la red.

27123 - Bioinformática

- Obtener información de dichas bases de datos e interpretarla en terminos bioquímicos y biotecnológicos.
- Utilizar el software más habitual para el análisis de secuencias de macromoléculas.
- Elegir y utilizar las herramientas adecuadas para obtener datos estructura-función de un molécula biológica a partir de su secuencia.
- Utilizar el software más habitual para analizar estructuras de macromoléculas depositadas en las bases de datos.
- Resolver problemas sencillos de modelado molecular, dinámica molecular, predicción de interacción entre proteínas y predicción de mecanismos de catálisis.
- Analizar e interpretar de forma crítica la información obtenida.
- Transmitir por escrito conceptos básicos acerca de los métodos estudiados y su aplicación, así como de los resultados de un estudio concreto.
- Comunicar conclusiones a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

3.4.Importancia de los resultados de aprendizaje

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

4.Evaluación

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

- **Examen de Teoría.** Exámen al final del cuatrimestre. Las competencias específicas se evaluarán mediante pruebas escritas que incluirán una prueba de tipo test y otra que corresponderá a la resolución de cuestiones teóricas cortas y/o ejercicios. Habitualmente: 50 preguntas test y 10 preguntas cortas (contribución a la nota 60/40% respectivamente). Será imprescindible puntuar 4.5 sobre 10 en cada uno de los apartados del examen para que estos promedien. Esta prueba se realizará en las fechas que la Facultad determine para tal fin durante los periodos oficiales de exámenes.
- **Casos Prácticos.** Evaluación continua durante la realización de los mismos. **Asistencia obligatoria** . El alumno elaborará un pequeño informe de cada sesión práctica que será presentado el mismo día de su realización a través de la plataforma moodle.
- **Preparación de un proyecto individual.** Se evaluará el rigor en la obtención de resultados, así como la claridad y coherencia en su presentación y discusión en el informe que se presentará al profesor. El alumno dispondrá de una semana tras la finalización de las sesiones presenciales para su presentación a través de la plataforma moodle. La asistencia y realización es obligatoria.
- **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%.
- Para superar la asignatura será imprescindible tener un 5 sobre 10 en cada uno de los apartados computables, y 5 sobre 10 en la nota global

Además de la modalidad de evaluación señalada, aquellos alumnos que no acudieran a las sesiones practicas obligatorias deberán realizar una prueba global, que juzgará la consecución de los resultados del aprendizaje señalados anteriormente. Esta prueba consistirá en la realización del Examen de Teoría en la misma fecha y horario que el resto de sus compañeros más la de una **prueba adicional en el aula de informática** en las fechas que la Facultad determine para tal fin.

El temario que los estudiantes deben utilizar para preparar las diferentes pruebas se encuentra en el apartado "Programa" de esta misma guía docente.

5.Actividades y recursos

5.1. Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje se ha diseñado para que partiendo de una intensificación de conocimientos teóricos, el alumno adquiera una orientación eminentemente práctica y aplicada en el aula de informática para el manejo de las herramientas bioinformáticas.

Se pretende que en la medida de lo posible los alumnos sean capaces de elegir la herramienta bioinformática que aplicar a sus necesidades partiendo de los conocimientos teórico-prácticos que han adquirido en la asignatura. Esta estrategia se adapta incluyendo primero la realización de unas prácticas generales que permitirán al alumno familiarizarse con algunos métodos bioinformáticos, para posteriormente pasar a la resolución tutorizada de un problema bioquímico real que supone, en definitiva, la parte más aplicada de la asignatura y un modo de aproximar a los estudiantes a las situaciones que confrontarían el día a día en el ámbito de trabajo.

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 un caso concreto que requiera de la aplicación de una o varias de las herramientas tratadas en la asignatura.

5.2. Actividades de aprendizaje

CLASES MAGISTRALES

Presencial. 2 ECTS (20 hr). Presentan los conocimientos teóricos básicos de la asignatura. Se utilizarán proyecciones de pantalla de ordenador, incluyendo prequeñas animaciones, vídeos y navegaciones on-line. El material básico se proporcionará a los alumnos a través de la plataforma semipresencial MOODLE de UNIZAR.

CLASES DE CASOS PRÁCTICOS

Presencial y obligatorio. 2 ECTS (20 horas). 5 sesiones de 4 horas en el aula de Informática. El profesor repartirá los casos prácticos a través de la plataforma 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 particulares. El alumno será capaz de diseñar búsquedas, análisis de datos y simulaciones de forma independiente y evaluar críticamente los resultados obtenidos.

PROYECTO INDIVIDUAL

Presencial y obligatorio. 2 ECTS (20 h). 5 sesiones de 4 horas en aula informática para preparación de un proyecto supervisadas por un profesor. Cada alumno presentará, para su evaluación, un informe de su proyecto según la extensión y normativa que se indique en el guion proporcionado por el profesor para su realización. En esta actividad los alumnos desarrollarán un caso concreto tutorizado de forma individual y después generarán un informe. El análisis de la información deberá conducir a la elaboración de una presentación estructurada que incluya Resultados, Discusión, Conclusiones, y Bibliografía. 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 deberán comunicar conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan.

5.3. Programa

CLASES MAGISTRALES

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. CP1. 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. Bases de datos para proteómica y para interactómica.
9. Quimioinformática: bases de datos de moléculas orgánicas.
10. Herramientas para el diseño de fármacos. QSAR, ADMET.
11. Servidores web: ¿cómo se hacen y cómo funcionan?.
12. Bases de datos y servidores temáticos (de enfermedades, etc.).
13. Métodos de simulación molecular.
14. Dinámica Molecular y Montecarlo. CP2. Simulaciones de plegamiento y estabilidad.
15. Métodos de predicción de estructuras de proteínas y ácidos nucleicos.
16. Acoplamiento molecular (*docking*).
17. Métodos híbridos Mecánica Cuántica/Mecánica Molecular (QM/MM). CP3: Simulaciones de reacciones enzimáticas.

CLASES DE CASOS PRÁCTICOS

- Caso 1: Recuperación de secuencias, alineamiento de secuencias y construcción de un árbol filogenético.
- Caso 2: 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.

PROYECTO INDIVIDUAL

Desarrollo de un proyecto individual tutorizado sobre un caso de estudio real y presentación de los resultados del estudio en un informe.

5.4. Planificación y calendario

El periodo de clases teóricas y de problemas coincidirá con el establecido oficialmente. Consultar en: <https://ciencias.unizar.es/grado-en-biotecnologia> .

El calendario y los grupos de prácticas se establecerán de manera coordinada con el resto de materias a principio de curso. El coordinador confeccionará los grupos de prácticas a principio de curso con el objeto de no producir solapamientos con otras asignaturas.

La asignatura se iniciará con las 20 horas de sesiones de clases magistrales (Febrero-Marzo).

A continuación se realizarán la semana de Sesiones de Casos Prácticos con 5 casos en el aula de informática en 5 sesiones de 4 horas cada uno (Febrero-Abril).

Finalmente los alumnos dispondrán de otra semana de 5 sesiones de 4 horas en el aula de informática para la preparación del proyecto asistidos por el profesor, y de una semana más para su finalización de forma individual (Abril-Mayo).

5.5. Bibliografía y recursos recomendados

- BB** Fuxreiter, M.. Computational Approaches to Protein Dynamics. From Quantum to Coarse-Grained Methods. CRC Press, 2015
- BB** Lesk, Arthur M.. Introduction to bioinformatics / Arthur M. Lesk . 4th. ed. Oxford : Oxford University Press, cop.2014
- BB** Marketa Zvelebil, J.. Understanding Bioinformatics. Garland Science. 2008
- BB** Structural bioinformatics / edited by Jenny Gu, Philip E. Bourne . 2nd ed. Hoboken, New Jersey : Wiley-Blackwell, cop. 2009
- BC** Attwood, T.K.. Introduction to Bioinformatics. - 1999 Prentice Hall
- BC** Baxevanis, A. D. (Ed). Bioinformatics: a practical guide to the analysis of genes and proteins . 2001 Wiley-Interscience
- BC** Campbell, A. Malcolm. Discovering genomics, proteomics, and bioinformatics / A. Malcolm Campbell, Laurie J. Heyer . - 2nd ed. San Francisco [etc.] : Pearson Benjamin Cummings, cop. 2007
- BC** Des Higgins and Willie Taylor eds. Bioinformatics: sequence, structure and databanks. Oxford University Press, 2000
- BC** Mount, D. W.. Bioinformatics: sequence and Genome Analysis. - 2ª Cold Spring Harbor Laboratory Press
- BC** Orengo, C (Ed.). Bioinformatics: Genes, Proteins and Computers. Taylor & Francis Group
- BC** Schlick, Tamar. Molecular modeling and simulation : an interdisciplinary guide / Tamar Schlick New York [etc.] : Springer, cop. 2002
- BC** The phylogenetic handbook : a practical approach to DNA and protein phylogeny / edited by Marco Salemi and Anne- Mieke Vandamme. Cambridge [etc.] : Cambridge University Press, 2003.
- BC** Tramontano, Anna. The ten most wanted solutions in protein bioinformatics / Anna Tramontano Boca Raton : Chapman & Hall/CRC, 2005
- BC** Westhead, D.R.. Bioinformatics Twyman Bios: Instant Ntes
- BC** Zhou, R.. Molecular Modeling at the Atomic Scale. Methods and Applications in Quantitative Biology. CRC Press, 2015