Ficha de Asignatura

Bioinformática y Biología Computacional (3343) - 2024

Aula Virtual

Dirección: https://classroom.google.com/c/NjgyNDI5MzA1ODA4

Automatriculación: SI

Presidente

Dr. PUIATTI MARCELO - QCA. ORGCA. - (mpuiatti@unc.edu.ar)

Tribunal

Titulares

Dr. HEREDIA, ADRIÁN ALBERTO - QCA. ORGCA. - (aheredia@fcq.unc.edu.ar)

Dr. PUIATTI MARCELO - QCA. ORGCA. - (mpuiatti@unc.edu.ar)

Dr. VILLARREAL, MARCOS - QCA.TRCA. COMP. - (mvillarreal@unc.edu.ar)

Suplentes

Dr QUIROGA, RODRIGO - QCA.TRCA. COMP. - (rquiroga@unc.edu.ar, rquiroga@fcq.unc.edu.ar)

Clases

Comisiones

Comisión: 01	Observ.:
Comisión: 02	Observ.:
Comisión: 03	Observ.:
Comisión: 04	Observ.:
Comisión: 05	Observ.:

1º Semana (Del 05/08/2024 al 09/08/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Jueves - 08/08 (13:30 - 16:00)

Teórico 01. Introducción a la Bioinformática / Bases de Datos Biológicos

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

2º Semana (Del 12/08/2024 al 16/08/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Jueves - 15/08 (13:30 - 16:00)

Teórico 02. Análisis de Secuencias Biológicas

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

3º Semana (Del 19/08/2024 al 23/08/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Martes - 20/08 (09:00 - 13:00)

* TP1 Bases de Datos

Comisiones: 01,

Martes - 20/08 (14:00 - 18:00)

* TP1 Bases de Datos

Comisiones: 02,

Martes - 20/08 (18:00 - 22:00)

* TP1 Bases de Datos

Comisiones: 03,

Jueves - 22/08 (13:30 - 16:00)

Teórico 03. Filogenética

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

Jueves - 22/08 (16:30 - 20:30)

* TP1 Bases de Datos

Comisiones: 04,

Viernes - 23/08 (09:00 - 13:00)

* TP1 Bases de Datos

Comisiones: 05,

4º Semana (Del 26/08/2024 al 30/08/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Martes - 27/08 (09:00 - 13:00)

* TP2 Análisis d Secuencias

Comisiones: 01,

Martes - 27/08 (14:00 - 18:00)

* TP2 Análisis d Secuencias

Comisiones: 02,

Martes - 27/08 (18:00 - 22:00)

* TP2 Análisis d Secuencias

Comisiones: 03,

Jueves - 29/08 (13:30 - 16:00)

Teórico 04. Aprendizaje Automático

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

Jueves - 29/08 (16:30 - 20:30)

* TP2 Análisis d Secuencias

Comisiones: 04,

Viernes - 30/08 (09:00 - 13:00)

* TP2 Análisis d Secuencias

Comisiones: 05,

5º Semana (Del 02/09/2024 al 06/09/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Martes - 03/09 (09:00 - 13:00)

* TP3 Filogenética

Comisiones: 01,

Martes - 03/09 (14:00 - 18:00)

* TP3 Filogenética

Comisiones: 02,

Martes - 03/09 (18:00 - 22:00)

* TP3 Filogenética

Comisiones: 03,

Jueves - 05/09 (13:30 - 16:00)

Teórico 05. Bioinformática Estructural

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

Jueves - 05/09 (16:30 - 20:30)

* TP3 Filogenética

Comisiones: 04,

Viernes - 06/09 (09:00 - 13:00)

* TP3 Filogenética

Comisiones: 05,

6º Semana (Del 09/09/2024 al 13/09/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Martes - 10/09 (09:00 - 13:00)

* TP4 Bioinformática Estructural

Comisiones: 01,

Martes - 10/09 (14:00 - 18:00)

* TP4 Bioinformática Estructural

Comisiones: 02,

Martes - 10/09 (18:00 - 22:00)

* TP4 Bioinformática Estructural

Comisiones: 03,

Jueves - 12/09 (13:30 - 16:00)

Teórico 06. Superficie de Energía Potencial

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

Jueves - 12/09 (16:30 - 20:30)

* TP4 Bioinformática Estructural

Comisiones: 04,

Viernes - 13/09 (09:00 - 13:00)

* TP4 Bioinformática Estructural

Comisiones: 05,

7º Semana (Del 16/09/2024 al 20/09/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Jueves - 19/09 (13:30 - 16:00)

Teórico 07. Espacio Conformacional

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

Viernes - 20/09 (17:00 - 19:00)

Calse de Consulta 1º Parcial

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

8º Semana (Del 07/10/2024 al 11/10/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Jueves - 10/10 (13:30 - 16:00)

Teórico 08. Mecánica Molecular

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

9º Semana (Del 14/10/2024 al 18/10/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Martes - 15/10 (09:00 - 13:00)

* TP5 Mecánica Molecular

Comisiones: 01,

Martes - 15/10 (14:00 - 18:00)

* TP5 Mecánica Molecular

Comisiones: 02,

Martes - 15/10 (18:00 - 22:00)

* TP5 Mecánica Molecular

Comisiones: 03,

Jueves - 17/10 (13:30 - 16:00)

Teórico 09. Docking Molecular

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

Jueves - 17/10 (16:30 - 20:30)

* TP5 Mecánica Molecular

Comisiones: 04,

Viernes - 18/10 (09:00 - 13:00)

* TP5 Mecánica Molecular

Comisiones: 05,

10º Semana (Del 21/10/2024 al 25/10/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Martes - 22/10 (09:00 - 13:00)

* TP6 Docking Molecular

Comisiones: 01,

Martes - 22/10 (14:00 - 18:00)

* TP6 Docking Molecular

Comisiones: 02,

Martes - 22/10 (18:00 - 22:00)

* TP6 Docking Molecular

Comisiones: 03,

Jueves - 24/10 (13:30 - 16:00)

Teórico 10. Dinámica Molecular 1

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

Jueves - 24/10 (16:30 - 20:30)

* TP6 Docking Molecular

Comisiones: 04,

Viernes - 25/10 (09:00 - 13:00)

* TP6 Docking Molecular

Comisiones: 05,

11º Semana (Del 28/10/2024 al 01/11/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Martes - 29/10 (09:00 - 13:00)

* TP7 Dinámica Molecular 1

Comisiones: 01,

Martes - 29/10 (14:00 - 18:00)

* TP7 Dinámica Molecular 1

Comisiones: 02,

Martes - 29/10 (18:00 - 22:00)

* TP7 Dinámica Molecular 1

Comisiones: 03,

Jueves - 31/10 (13:30 - 16:00)

Teórico 11. Dinámica Molecular 2

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

Jueves - 31/10 (16:30 - 20:30)

* TP7 Dinámica Molecular 1

Comisiones: 04,

Viernes - 01/11 (09:00 - 13:00)

* TP7 Dinámica Molecular 1

Comisiones: 05,

12º Semana (Del 04/11/2024 al 08/11/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Martes - 05/11 (09:00 - 13:00)

* TP8 Dinámica Molecular 2

Comisiones: 01,

Martes - 05/11 (14:00 - 18:00)

* TP8 Dinámica Molecular 2

Comisiones: 02,

Martes - 05/11 (18:00 - 22:00)

* TP8 Dinámica Molecular 2

Comisiones: 03,

Jueves - 07/11 (13:30 - 16:00)

Teórico 12. Ejemplos y Aplicaciones

Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

Jueves - 07/11 (16:30 - 20:30)

* TP8 Dinámica Molecular 2

Comisiones: 04,

Viernes - 08/11 (09:00 - 13:00)

* TP8 Dinámica Molecular 2

Comisiones: 05,

13º Semana (Del 11/11/2024 al 15/11/2024) (*=Actividad Obligatoria)

Martes - 12/11 (09:00 - 13:00)

* TP9 Actividad Integradora

Comisiones: 01,

Martes - 12/11 (14:00 - 18:00)

* TP9 Actividad Integradora

Comisiones: 02,

Martes - 12/11 (18:00 - 22:00)
* TP9 Actividad Integradora
Comisiones: 03,

Jueves - 14/11 (16:30 - 20:30)
* TP9 Actividad Integradora
Comisiones: 04,

Viernes - 15/11 (09:00 - 13:00)
* TP9 Actividad Integradora
Comisiones: 05,

Viernes - 15/11 (17:00 - 19:00)
Clase de Consulta 2º Parcial
Comisiones: 01, 02, 03, 04, 05,

Recuperación:

Los alumnos se distribuirán en las distintas comisiones atento a la capacidad del aula.

Contenidos

Objetivos

? Introducir los conceptos de: información en el contexto de la biología, de algoritmos, y de aprendizaje automático.

? Creación y utilización de las bases de datos tanto de secuencias como de estructuras.

? Manejo de técnicas que permitan predecir la estructura y función de proteínas basados solo en la secuencia.

? Mecánica molecular y técnicas de simulación computacionales (Monte Carlo, Dinámica Molecular Clásica). Conceptos, usos recomendados e interpretación de la información obtenida.

? Aspectos básicos del diseño de fármacos

Programa

Tema 1 - Introducción a la bioinformática:

Herramientas bioinformáticas como usuario y como desarrollador. Pasado, presente y futuro de la bioinformática. Algoritmos.

Tema 2 - Secuencias biológicas:

Genética y evolución. Transcripción, traducción y función proteica. Secuencias nucleotídicas y proteicas.

Secuenciamiento y genómica. Estructura secundaria y terciaria de ácidos nucleicos y proteínas. Formatos de secuencias.

Bases de datos de secuencias biológicas.

Tema 3 - Análisis de secuencias:

Alineamientos de a pares y alineamientos múltiples. Conceptos de homología, parálogos y ortólogos.

Comparación de secuencias mediante algoritmos de búsqueda. Dominios conservados, secuencias regulatorias,

predicción de actividad enzimática y de modificaciones post-traduccionales.

Tema 4 - Filogenética y evolución molecular:

Historia de la filogenética pre-informática. Selección positiva y negativa. Teoría neutralista de la evolución

molecular. Árboles filogenéticos. Reconstrucción filogenética, modelos de evolución molecular. Métodos de

construcción de árboles filogenéticos (máxima parsimonia, máxima verosimilitud o likelihood, inferencia

bayesiana).

Tema 5 - Análisis de datos a gran escala.

Inteligencia Artificial. Aprendizaje automático. Redes Neuronales.

Tema 6 - Bioinformática Estructural:
Relación entre conservación evolutiva y función enzimática. Predicción de función proteica. Predicción de estructura terciaria.

Tema 7 - Superficies Potenciales:
Geometrías y estructuras moleculares. Superficies Potenciales. Aproximación de la coordenada de reacción. Caracterización de estados estacionarios.

Tema 8 - Espacio conformacional:
Métodos para el cálculo de geometrías moleculares: técnicas de primera y segunda derivadas. Espacio conformacional. Métodos automatizados para explorar el espacio conformacional. Métodos basados en MonteCarlo.

Tema 9 - Mecánica Molecular:
Principios de Mecánica Molecular. Campos de fuerza: funciones potenciales y parametrización. Estudios conformacionales, geométricos y de interacciones moleculares.

Tema 10 - Acoplamiento molecular (docking):
Ajuste inducido de ligandos a proteínas. Diseño racional de fármacos. Diseño holístico de drogas: fundamentos de QSAR y QSPR.

Tema 11 - Dinámica molecular:
Dinámica Molecular. Espacio de las fases, trayectorias, integración de las ecuaciones de movimiento. Propiedades periódicas de contorno, cutoff. Etapas de una dinámica y condiciones de simulación. Ensambles, propiedades de ensambles y mecánica estadística. Comparación con simulaciones de Monte-Carlo.

Bibliografía

Bibliografía

- Bioinformatics and Functional Genomics (Third Edition) . Jonathan Pevsner. 2015
- Bioinformática con Ñ. Volumen I: Principios de Bioinformática. Álvaro Sebastián y Alberto Pascual-Garc??a. 2014
- Essential Bioinformatics. JIN XIONG. 2006
- Bioinformatics: Sequence and Genome Analysis (Second Edition). David Mount. 2004
- Biomolecular Simulations. Methods and protocols.. Luca Monticelli Emppu Salonen Ed.Humana Press. 2013.
- Molecular Modelling. Principles and Applications. A. R. Leach. Pearson : Pentice Hall 2001.
-Introduction to Computational Chemistry. F. Jensen, 2oa. ed. Wiley, 2007.
-Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. C. J. Cramer. John Wiley &Sons, 2004.
-Molecular modelling for beginners. Alan Hinchliffe. Wiley, 2003

Resumen de Modalidad de Dictado

Tipo Actividad	Modalidad	Tiempo (H:m)
Teórico	Presencial en Aula	30:00
	Total Teórico	30:00
Clase de Consulta	Virtual Sincrónico	04:00
	Total Clase de Consulta	04:00
Trabajo Práctico	Presencial en Aula	36:00
	Total Trabajo Práctico	36:00
	Total Asignatura:	70:00

Regularidad y aprobación

Regularidad

Estar presente y aprobar en el 80% de las actividades prácticas obligatorias

Promoción

Tipo de Parcial:

Porcentaje de la nota final correspondiente al 1º Parcial: 50%

Porcentaje de la nota final correspondiente al 2º Parcial: 50%

Porcentaje de la nota final correspondiente a las Actividades Prácticas: 0%

Exámenes Finales para libres:

Los alumnos libres realizarán el mismo examen que los regulares, más un número extra de preguntas relacionadas con las actividades prácticas de la asignatura.

Información IMPORTANTE

La guía de trabajos prácticos se comparte como un documento de google.

Las actividades prácticas se realizan en el aula de computación, así que no existe mayor necesidad de imprimir la guía.