

# BIOINFORMÁTICA:

## HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES PARA LA GESTIÓN Y ANÁLISIS DE DATOS BIOLÓGICOS – VERSIÓN 2022.

---

### INTRODUCCIÓN

La Bioinformática es un campo multidisciplinario que involucra biología molecular y genética, ciencia de la computación, matemática y estadística. Los problemas más comunes que resuelve son el modelado de procesos biológicos a nivel molecular y la realización de inferencias a partir de los datos recopilados. Generalmente, una solución bioinformática implica los siguientes pasos: recopilar datos biológicos para análisis estadísticos, construir un modelo computacional, resolver un problema de modelado computacional, probar y evaluar un algoritmo computacional.

Por tanto, los objetivos de la bioinformática son tres:

1. Organizar los datos de una manera que permite a los investigadores acceder a la información existente
2. Desarrollar herramientas y recursos que ayuden en el análisis de datos
3. Utilizar estas herramientas para analizar los datos e interpretar los resultados de una manera biológicamente significativa

Este curso complementa la formación integral de cualquier profesional en el área de Bioquímica, Biología y Ciencias en general.

### OBJETIVO

Este curso tiene como eje de aprendizaje reunir los conocimientos de la química, bioquímica y en general de las ciencias biomoleculares para entender y solucionar problemas cualitativos y cuantitativos de sistemas biológicos mediante el uso de herramientas computacionales, así como también estadística a la gestión y análisis de datos.

### OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Al finalizar el curso, el estudiante será capaz de:

- Comparar los algoritmos básicos de alineamientos de secuencias empleadas como herramientas bioinformáticas para búsqueda de secuencias homólogas y dominios.
- Comparar los algoritmos de modelamiento molecular de sistemas biológicos empleadas como herramientas bioinformáticas para analizar sus interacciones moleculares.

- Utilizar herramientas computacionales en talleres teóricos-prácticos para el análisis de problemas cualitativos y cuantitativos de sistemas biológicos.
- Predecir estructuras moleculares de sistemas biológicos a partir de los algoritmos enseñados en clases para favorecer la comprensión de la relación entre sus estructuras y funciones biológicas.
- Desarrollar trabajo científico desde la perspectiva del método científico que involucre la utilización de técnicas de bioquímica, química, genética, biología molecular, etc. así como también herramientas bioinformáticas en la resolución de problemas.

## ACADÉMICO

El curso será dictado por Waldo Acevedo, Doctor en Ciencias de la Ingeniería, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Profesor Asociado del Instituto de Química PUCV, quien ha impartido clases de Introducción a la Bioinformática y Bioinformática a la carrera de Bioquímica, además ha realizado una serie de publicaciones científicas aplicada a la Bioinformática.

## METODOLOGÍA

La metodología de enseñanza aprendizaje para el curso se ha diseñado con orientación hacia el aprendizaje basado en competencias, sostenida en casos (modelos) reales a nivel nacional. Se utilizarán técnicas metodológicas activas donde el estudiante será el centro del proceso de enseñanza aprendizaje y el profesor un facilitador. Las actividades y trabajos desarrollados por los participantes serán objeto de seguimiento académico y tutoría con el objetivo de retroalimentar y atender sus requerimientos en forma oportuna.

La metodología empleada será en base a clases expositivas con ejemplos prácticos y videos, además de una alta interacción alumno profesor y talleres prácticos.

Los talleres serán llevados a cabo sincrónicamente de forma remota, usando un computador personal, mediante el uso de softwares gratuitos y servidores web.

La evaluación será una prueba de selección múltiple y un trabajo final aplicando el conocimiento en función de casos reales.

Duración total: 4 semanas, 22 horas cronológicas.

Duración por semana: 5,5 horas por semana, articulada como sigue: 1,5 hora de clase teórica y 4 horas de taller teórico-práctico.

## CONTENIDOS

### MÓDULO 1: BASE DATOS

Objetivos	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Conoce el fundamento de una base de datos</li> <li>• Aprender a utilizar la información de un registro para acceder a él desde una casilla de búsqueda.</li> <li>• Conocer más acerca de la información almacenada tanto en base datos primarias como secundarias.</li> <li>• Diferenciar los datos primarios de los curados</li> <li>• Utilizar herramientas computacionales en talleres teóricos-prácticos para el análisis de problemas cualitativos y cuantitativos de sistemas biológicos.</li> </ul>
Clase - Taller	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Base de Datos Primarias y Secundarias <ul style="list-style-type: none"> <li>• Herramientas: NCBI, Swiss-Prot/UniprotKB, PDB</li> </ul> </li> <li>• Base de Datos Secundarias <ul style="list-style-type: none"> <li>• Herramientas: InterproScan, PFam, PROSITE</li> </ul> </li> </ul>

### MÓDULO 2: ANÁLISIS DE SECUENCIAS DE NUCLEÓTIDOS Y PROTEÍNAS

Objetivos	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Conocer los diferentes métodos utilizados para el alineamiento simple de secuencias de aminoácidos y nucleótidos.</li> <li>• Comprender la diferencia entre un alineamiento global y local.</li> <li>• Uso de la herramienta BLAST para búsqueda de secuencias homólogas.</li> <li>• Analizar el alineamiento múltiple de secuencias</li> </ul>
Clase - Taller	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Alineamiento simple de secuencias <ul style="list-style-type: none"> <li>• Herramientas: BLAST (blastn, blastp, blastx, tblastn, psi-blast)</li> </ul> </li> <li>• Alineamiento múltiple de secuencias de proteínas y árboles filogenéticos <ul style="list-style-type: none"> <li>• Herramientas: ClustalOmega / JalView</li> </ul> </li> </ul>

### MÓDULO 3: MODELAMIENTO Y FUNCIÓN DE PROTEÍNAS

Objetivos	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Visualizar sistemas biomoleculares usando el programa VMD</li> <li>• Predecir la estructura tridimensional de una proteína mediante modelamiento por homología usando uno o más templados</li> </ul>
Clase - Taller	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Estructura tridimensional de proteínas <ul style="list-style-type: none"> <li>• Herramientas: VMD (Visual Molecular Dynamics)</li> </ul> </li> <li>• Predicción y validación de estructura de proteínas <ul style="list-style-type: none"> <li>• Herramientas: BLAST, Modeller, ProsaWeb, QMEAN</li> </ul> </li> </ul>

## MÓDULO 4: SIMULACIÓN MOLECULAR DE MACROMOLÉCULAS

Objetivos	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Predice del mejor sitio de interacción y energías libres ligando-receptor</li> <li>• Interpreta y analiza los resultados obtenidos del docking</li> <li>• Minimiza y equilibra estructura de proteína solvatada usando NAMD</li> <li>• Aprende analizar los resultados de la simulación</li> </ul>
Clase - Taller	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Docking proteína-ligando             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Herramientas: AutodockTools, Autodock, Vina</li> </ul> </li> <li>• Dinámica Molecular             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Herramienta: NAMD, VMD</li> </ul> </li> </ul>

## PROGRAMACIÓN DE CLASES

Módulo	Clase	Hora de inicio	Hora de término	Fecha
Módulo 1	Clase 1	18.00	19.30	Lunes 22-08-22
	Taller 1	18.00	20.00	Martes 23-08-22
	Taller 2	18.00	20.00	Jueves 25-08-22
Módulo 2	Clase 2	18.00	19.30	Lunes 29-08-22
	Taller 3	18.00	20.00	Martes 30-08-22
	Taller 4	18.00	20.00	Jueves 01-09-22
Módulo 3	Clase 3	18.00	19.30	Lunes 05-09-22
	Taller 5	18.00	20.00	Martes 06-09-22
	Taller 6	18.00	20.00	Jueves 08-09-22
Módulo 4	Clase 4	18.00	19.30	Lunes 12-09-22
	Taller 7	18.00	20.00	Martes 13-09-22
	Taller 8	18.00	20.00	Jueves 15-09-22

## INFORMACIÓN GENERAL

El curso tiene un valor de \$220.000. Las clases serán desarrolladas de manera virtual los martes de 18:00 horas a las 19:30 horas, y los miércoles y viernes de 18:00 horas a las 20:00 horas. El curso cuenta con certificación por parte de la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso tras ser aprobado.

Las clases comienzan el martes 22 de agosto y terminan el 15 de septiembre.

Para realizar su inscripción debe escribir a Jennifer Araya, Asistente de Dirección del Instituto de Química a [jennifer.araya@pucv.cl](mailto:jennifer.araya@pucv.cl)

## MODALIDADES DE PAGO

La matrícula se considera una vez efectuado el pago, luego de ser aceptado en el Programa, el cual puede ser al contado en efectivo, transferencia electrónica a la cuenta de la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.

El pago a través de transferencia electrónica se realiza con la siguiente información:

- Banco Scotiabank
- Cuenta a nombre de Pontificia Universidad Católica de Valparaíso
- Cuenta corriente N° 610995606
- Rut: 81.669.200-8
- Asunto: Pago curso de Bioinformática

Una vez realizado el pago enviar comprobante a Secretaria de la Dirección de Asistencia Técnica y Capacitación del Instituto de Química, enviando un correo a [datyc.quimica@pucv.cl](mailto:datyc.quimica@pucv.cl)

Para pagar al contado en efectivo, tarjeta de crédito y cheque, se debe coordinar previamente escribiendo a [datyc.quimica@pucv.cl](mailto:datyc.quimica@pucv.cl) dado que requiere presencialidad, asistiendo a la Dirección de Asistencia Técnica y Capacitación del Instituto de Química, primer piso Facultad de Ciencias en Campus Curauma.

Para empresas que requieran factura, se genera cotización para posterior emisión de orden de compra. Escribir a [datyc.quimica@pucv.cl](mailto:datyc.quimica@pucv.cl)

## DESCUENTOS

Se ofrecen los siguientes descuentos, no acumulables entre sí al matricularse:

- 10% de descuento por pago al contado.
- 10% de descuento para grupos de tres o más alumnos pertenecientes a una misma empresa por persona.
- 15% de descuento Alumni PUCV.
- 15% de descuento para Funcionarios PUCV.
- 30% de descuento para Alumni del Instituto de Química PUCV (Bioquímica, Pedagogía en Química, Química Industrial, Licenciatura en Química/Química, Doctorado en ciencias mención Química).

Inscripciones hasta el 12 de agosto 2022.