

Abordaje Computacional de la Biología Estructural de Proteínas - VISIT2024

Dr. Carlos Alberto Brizuela Rodríguez (Profesor Invitado) con la colaboración del Dr. Ricardo Rodríguez (Profesor Asociado, DC, FCEN, UBA)

Programa:

Familiarizar al participante con distintos problemas computacionales que tienen su origen en biología estructural de proteínas, así como proporcionarle las herramientas fundamentales para el análisis y diseño de algoritmos para resolverlos.

Desarrollar habilidades para la re-ingeniería de algoritmos de acceso libre para manejar y procesar datos provenientes de experimentos relacionados a la estructura de proteínas.

Temario:

1. Introducción (3 hrs)
 - Genotipo y fenotipo, ADN, ARN y proteínas
 - Algoritmos para la búsqueda de secuencias en bases de datos
 - Eventos relevantes en biología estructural
2. Análisis de proteínas y proteómica (3 hrs)
 - Base de datos de proteínas
 - Estructura de los aminoácidos y las proteínas
 - Patrones en proteínas
 - Propiedades físicas de las proteínas
 - Técnicas experimentales para identificar proteínas
3. Predicción de estructura de proteínas (9 hrs)
 - Plegamiento y predicción de estructura en proteínas
 - Empaquetamiento de la cadena lateral
 - Modelado por homología
 - Modelado por enhebrado
 - Modelado de primeros principios
 - Modelado basado en aprendizaje de máquina
 - AlphaFold2, ESMfold, Rosetta Fold, HelixFold
4. Diseño Computacional de Proteínas (9 hrs)
 - Definiciones del problema
 - Diseño con columna vertebral fija
 - Diseño basado en aprendizaje automático
 - Algoritmos y métodos para la identificación y diseño de péptidos bioactivos

Bibliografía:

1. Donald, B. R. (2023). Algorithms in structural molecular biology. MIT Press.
2. Pevsner, J. Bioinformatics and Functional Genomics, Willey-Blackwell. ISBN: 978-1-118-58178-0, 3rd edition, 2015.
3. Neil C. Jones and Pavel A. Pevzner. An Introduction to Bioinformatics Algorithms. The MIT Press; 1 edition (August 1, 2004).
4. R. Deonier, S. Tavaré and M. Waterman. Computational Genome Analysis: An Introduction. Springer, 2005.
5. D. Mount. Bioinformatics: Sequence and Genome Analysis. Cold Spring Harbor Laboratory Press; 2nd edition, 2004.

6. I. Eidhammer, I. Jonassen, and W. R. Taylor. Protein Bioinformatics: An algorithmic approach to sequence and structure analysis. John Wiley & Sons, 2004.
7. Revistas como PLOS Computational Biology, Briefings Bioinformatics, Bioinformatics, Journal of Chemical Information and Modeling, Nucleic Acids Research, entre otras.
8. Cursos en línea como los del MITOPENCOURSEWARE: HST.506J Foundations of Computational and Systems Biology, Spring 2014