



UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS
DE GRAN CANARIA

GUÍA DOCENTE

CURSO: 2008/09

12722 - BIOINFORMÁTICA

ASIGNATURA: 12722 - BIOINFORMÁTICA

Vinculado a : (Titulación - Asignatura - Especialidad)

1801-Ingeniería en Informática - 12722-BIOINFORMÁTICA - 00

CENTRO: Escuela de Ingeniería Informática

TITULACIÓN: Ingeniero en Informática

DEPARTAMENTO: INFORMÁTICA Y SISTEMAS

ÁREA: Ciencia De La Comp. E Intel. Artificial

PLAN: 10 - Año 199**ESPECIALIDAD:**

CURSO: Cr. comunes cic**IMPARTIDA:** Segundo semestre **TIPO:** Optativa

CRÉDITOS: 6

TEÓRICOS: 3

PRÁCTICOS: 3

Descriptores B.O.E.

Fundamentos y Métodos Biológicos y Computacionales. Mecanismos Funcionales Biológicos. Automatización de Procesos Complejos. Sistemas Bioinformáticos.

Temario

Módulo I: Soluciones Informáticas Bioinspiradas. Computación Natural (15 h.)

Tema I.1: La Computación Natural (1 h)

- 1.1 Elementos de los Sistemas Biológicos.
- 1.2 Teorías Computacionales.
- 1.3 Elementos de Computación Natural.
- 1.4 Aprendizaje y Conducta.

Tema I.2: Sistemas Complejos (2 h)

- 2.1 Modelado.
- 2.2 Análisis de Complejidad.
- 2.3 Teorías
- 2.4 Sistemas Caóticos. Estudio de Casos.
- 2.5 Conceptos:
 - 2.5.1 Emergencia
 - 2.5.2 Adaptación, Replicación, Reproducción
- 2.6 Estudio de Casos: Ecosistemas
- 2.7 Geometría Fractal.

Tema I.3: Vida Artificial (3 h.)

- 3.1 Concepto. Aplicación.
- 3.2 Autómatas Celulares
- 3.3 Autorreplicación.

- 3.3.1 Modelo de Von Neumann y Langton
- 3.3.2 Autorreproducción trivial
- 3.3.3 Autoreproducción según von Neumann, Codd, Langton y Bly
- 3.4 Redes de Autómatas Celulares.
- 3.5 Aplicaciones y Estudios de Casos.

Tema I.4: Inteligencia Computacional (2 h.)

- 4.1 Soft Computing
 - 4.1.1 Sistemas Borrosos y Redes Neuronales. Aplicaciones
 - 4.1.2 Metaheurísticas
- 4.2 Analogías Físicas: Recocido Simulado. Ejemplo
- 4.3 Analogías Biológicas: Colonia de Hormigas. Ejemplo
- 4.4 Analogías Biológicas: Modelos Evolutivos.
 - 4.4.1 Fundamentos de la Evolución Biológica
 - 4.4.2 Aplicación de la Analogía de la Evolución a Problemas Computacionales

Tema I.5: Computación Evolutiva I. Algoritmos Genéticos (2 h.)

- 5.1 Fundamentos
- 5.2 Codificación
- 5.3 Muestreo de Poblaciones
- 5.4 Procedimiento Básico AG
- 5.5 Selección de Criadores
- 5.6 Reproducción
- 5.7 Mutación
- 5.8 Reemplazo. Selección de Población
- 5.9 Estudio de Casos: Optimización Funcional

Tema I.6: Computación Evolutiva II: Programación Genética (2 h.)

- 6.1 Representación
- 6.2 Operadores
- 6.3 Algoritmo
- 6.4 Estudio de Casos. Análisis de las Soluciones
- 6.5 Análisis
- 6.6 Mejoras

Tema I.7: Computación Evolutiva III: Programación Evolutiva y Estrategias Evolutivas (1 h.)

- 7.1 Programación Evolutiva
 - 7.1.1 Teoría y Soporte Conceptual
 - 7.1.2 Selección
 - 7.1.3 Mutación
 - 7.1.4 Procedimiento Básico
 - 7.1.5 Estudio de Casos
- 7.2 Estrategias Evolutivas
 - 7.2.1 Estrategia Evolutiva Simple (1+1)
 - 7.2.1.1 Evolución de Cromosomas y Tratamiento de Individuos
 - 7.2.1.2 Procedimiento (1+1)-ES
 - 7.2.1.3 Análisis y Discusión. Convergencia
 - 7.2.2 Estrategia Evolutiva ($\lambda + \mu$)-ES
 - 7.2.2.1 Operadores: Cruce y Mutación

- 7.2.2.2 Criterios: Selección y Reemplazo
- 7.2.2.3 Procedimiento ($\lambda + \mu$)-ES
- 7.2.3 Estudio de Casos

Tema I.8: Computación Evolutiva IV. Sistemas Clasificadores y Programación Memética (1 h.)

8.1 Sistemas Clasificadores

8.1.1 Concepto

8.1.2 Estructura Genética en un Sistema Clasificador para el Aprendizaje de Conceptos

8.1.2.1 Formulación de Michigan

8.1.2.2 Algoritmo de Relevos

8.1.2.3 Estudio de Caso

8.2 Programación Memética

8.2.1 Concepto

8.2.2 Representación

8.2.3 Operadores, Selección y Evaluación

8.2.4 Búsqueda Local

Tema I.9: Sistemas Inmunes Artificiales (1 h.)

9.1 Concepto.

9.2 Descripción del Sistema Inmune

9.3 Ingeniería Inmune

9.4 Principio de Selección Clonal

9.5 Discriminación Inmunológica

9.6 Teoría de la Red Inmune

9.7 Herramientas y Aplicaciones de Ingeniería Inmune

9.8 Estudio de Casos: Aplicaciones de Seguridad, Detección y Clasificación.

Módulo II: Genómica y Proteómica (15 h.)

Tema 1. Definición y concepto de genómica computacional (1 horas)

1.1 Objetivos

1.2 Auto-organización, evolución y tecnología.

1.3 Paradigma de similitudes.

1.4 Fuentes de información.

Tema 2. Introducción al sistema celular. (1 horas)

2.1 Organización y clasificación biológica.

2.2 El material genético. Cromosomas y genes.

2.3 Mapas genéticos.

2.4 Herencia e intercambio genético.

Tema 3. Organización básica de los materiales genómicos. (1 horas)

3.1 Organización del DNA y RNA

3.2 Enzimas. Localización de patrones.

3.3 Organización de las proteínas.

Tema 4. Operaciones centrales de la genómica. (2 horas)

4.1 Replicación del DNA

4.2 Transcripción a mRNA

4.3 Codificación. El código genético.

4.4 Mutaciones.

4.5 Procesos de post-producción.

Tema 5. Bases de datos primarias. (2 horas)

5.1 Bases de datos genómicas. EMBL y Genbank.

5.2 Bases de datos proteómicas. SWISSPROT, TrEMBL y PDB.

5.3 Bases de datos integradas. SRS

Tema 6. Análisis de alineamientos. Procedimientos y herramientas. (5 horas)

6.1 Concepto de alineamiento.

6.2 Alineamiento simple. Dotplot.

6.3 Distancia de Levenshtein.

6.4 Matrices de sustitución PAM y BLOSUM.

6.5 Alineamientos globales. Método de Needleman-Wunsch

6.6 Alineamientos locales. Método de Smith-Waterman.

6.7 Alineamientos heurísticos. FASTA y BLAST.

6.8 Alineamientos múltiples.

Tema 7. Bases de datos secundarias. (1 hora)

7.1 Base de datos de patrones. PROSITE.

7.2 Bases de datos de alineamientos. PRINTS BLOCKS

Tema 8. Niveles de organización de las proteínas. (2 horas)

8.1 Nivel primario, secundario y superiores.

8.2 Tipos de plegamiento. Métodos de predicción.

Requisitos Previos

Formación en Álgebra, Cálculo, Análisis Matemático, Programación, Inteligencia Artificial y Teoría de Sistemas

Objetivos

Formación en aspectos, conceptos y técnicas de la informática provenientes de diversas áreas y disciplinas relacionadas con la computación natural y en su aplicación para la resolución de problemas, así como el desarrollo de sistemas con soluciones de inspiración biológica. Se hace especial énfasis tanto en soluciones informáticas bioinspiradas como en genómica y proteómica

Metodología

La didáctica diferencia la actividad teórica de la práctica. Las clases de teoría se plantean como clases participativas de exposición de contenidos en las que se pretende que los alumnos se integren como parte activa en la actividad docente. Para ello, cada alumno deberán realizar un trabajo documental acerca de un tópico seleccionado específicamente por el profesorado, que incluirá una breve presentación oral con defensa ante la clase. En lo que respecta a los trabajos prácticos, estarán orientados a la aplicación de los conceptos y herramientas expuestos en las clases teóricas a la resolución de problemas reales de naturaleza diversa. Los trabajos se orientarán como pequeños proyectos y se plantearán para que los alumnos adquieran una visión de la utilidad práctica en diferentes campos de aplicación de los métodos y técnicas estudiados. El desarrollo de cada trabajo práctico incluirá las siguientes actividades: planteamiento del problema propuesto, análisis y diseño de la solución, codificación, prueba y validación del proyecto resultante. Al final

se deberá entregar una memoria explicativa del trabajo realizado y realizar una defensa del mismo ante el profesorado.

Criterios de Evaluación

Para la evaluación se tendrá en cuenta la actividad práctica y la participativa. La valoración de la parte práctica se realizará mediante la calificación obtenida en las actividades de los trabajos prácticos, que tendrán carácter obligatorio. La calificación final, con cada apartado valorado en rango de 10 puntos, se obtendrá de la forma siguiente:

(Calificación Final) = $0,8 * (\text{Evaluación Trabajos}) + 0,2 * (\text{Asistencia, participación y presentaciones en clase})$

Opcionalmente se pueden realizar trabajos prácticos adicionales, que pueden aportar una calificación extra de hasta 10 % de la nota total, que sustituiría al correspondiente 10 % de aquella de las dos partes anteriores con menos puntuación obtenida por el alumno.

Para considerar la asignatura aprobada, la media ponderada obtenida según la fórmula anterior, que será la correspondiente a la Calificación Final no debe ser inferior a cinco puntos. En todo caso, los trabajos prácticos aprobados durante el curso puntúan y son liberatorios según lo establecido por la normativa universitaria vigente.

Descripción de las Prácticas

Practica 1. Uso de Metaheurísticas

Descripción: Estudio y análisis y resolución de un problema típico de complejidad exponencial y planteamiento de su resolución utilizando metaheurísticas. Para ello se incluyen las técnicas de colonias de hormigas, enjambres de partículas y simulated annealing

Objetivos: adquisición de destrezas teórico-práctica en el uso de metaheurísticas

Material de Laboratorio Recomendado (Software): Windows XX, Suite Office, Matlab 5.3 o superior y Toolboxes

Material de Laboratorio Recomendado (Hardware): Pentium III con 128 MB de memoria mín.

Horas estimadas de laboratorio: 3

Trabajo Práctico 2: Estudio y Análisis de un Sistema Complejo

Descripción: Estudio, Análisis, Modelado y Simulación del comportamiento de un sistema complejo, ideal o real, como puede ser un sistema ecológico como el Depredador-Presa, un sistema autorregulado como el Mundo de las Margaritas, etc ... Se propone su estudio y evaluación para diferentes situaciones y configuraciones así como la influencia de parámetros y elementos del modelo en el comportamiento.

Objetivos: Adquirir la formación práctica y destrezas necesaria para el análisis del comportamiento de sistemas complejos.

Material de Laboratorio Recomendado (Software): Windows XX, Suite Office, Matlab 5.3 o superior y Toolboxes

Material de Laboratorio Recomendado (Hardware): Pentium III con 128 MB de memoria mín.

Nº de Horas Estimadas de Laboratorio: 4

Trabajo Práctico 3: Autómatas Celulares

Descripción: Utilización de Autómatas Celulares y Redes de Autómatas Celulares para la resolución de problemas o aplicación de principios como la autorreplicación.

Objetivos: Adquirir la formación práctica y destrezas necesaria para la utilización de esta técnica en la resolución de un problema real.

Material de Laboratorio Recomendado (Software): idem práctica 1

Material de Laboratorio Recomendado (Hardware): idem práctica 1

Nº de Horas Estimadas de Laboratorio: 4

Trabajo Práctico 4: Computación Evolutiva

Descripción: Aplicación de las técnicas de Algoritmos Genéticos o Programación Evolutiva para la resolución de problemas como Optimización o ajuste de controladores.

Objetivos: Adquirir la formación práctica y destrezas necesaria para la aplicación de estas técnicas en la resolución de un problema real.

Material de Laboratorio Recomendado (Software): idem práctica 1

Material de Laboratorio Recomendado (Hardware): idem práctica 1

Nº de Horas Estimadas de Laboratorio: 4

Trabajo Práctico 5: Introducción práctica a Perl

Descripción: Introducción a la programación con el lenguaje Perl

Objetivos: Adquisición de soltura y habilidad en la programación con Perl.

Material de Laboratorio Recomendado (Software): S.O. Linux y Navegador

Material de Laboratorio Recomendado (Hardware): Pentium III con 128 MB de memoria mín.

Nº de Horas Estimadas de Laboratorio: 5

Trabajo Práctico 6: Introducción a la bases de datos genómicas

Descripción: Acceso on-line a las bases de datos genómicas más utilizadas

Objetivos: Aprendizaje de la estructura, acceso para consulta y confección de ficheros FASTA

Material de Laboratorio Recomendado (Software): Idem Práctica 4

Material de Laboratorio Recomendado (Hardware): Idem. Práctica 4

Nº de Horas Estimadas de Laboratorio: 2

Trabajo Práctico 7: Lectura de formato FASTA

Descripción: Programar en Perl programas lectores de formato FASTA.

Objetivos: Adquisición de destrezas en el uso de Perl para la lectura de secuencias codificadas

Material de Laboratorio Recomendado (Software): Idem Práctica 4

Material de Laboratorio Recomendado (Hardware): Idem. Práctica 4

Nº de Horas Estimadas de Laboratorio: 2

Trabajo Práctico 8: Lectura de entrada SwissProt

Descripción: Programar en Perl programas lectores de entradas SwissProt

Objetivos: Adquisición de destrezas en el uso de Perl para la lectura de entradas de esta base de datos

Material de Laboratorio Recomendado (Software): Idem Práctica 4

Material de Laboratorio Recomendado (Hardware): Idem. Práctica 4

Nº de Horas Estimadas de Laboratorio: 4

Trabajo Práctico 9: Acceso remoto a SwissProt.

Descripción: Programar en Perl un acceso a través de Internet un acceso directo a esta base de datos.

Objetivos: Adquisición de destrezas en el uso de Perl para accesos remotos en internet

Material de Laboratorio Recomendado (Software): Idem Práctica 4

Material de Laboratorio Recomendado (Hardware): Idem. Práctica 4

Nº de Horas Estimadas de Laboratorio: 2

[1 Básico] Introduction to protein structure /

Carl Branden, John Tooze.
Garland,, New York : (1998) - (2nd ed.)
0-8153-2305-0

[2 Básico] Swarm intelligence: from natural to artificial systems /

Eric Bonabeau, Marco Dorigo, Guy Theraulaz ; Santa Fe Institute Studies in the Sciences of Complexity.
Oxford University Press : Santa fe Institute Editorial Board,, New York : Oxford : (1999)
0195131592

[3 Básico] An introduction to genetic algorithms.

Mitchell, Melanie
MIT,, Cambridge (Massachusetts) : (1996)
0262133164

[4 Básico] Introducción a la Bioinformática /

Teresa K. Attwood.
Prentice Hall,, Madrid : (2002)
84-205-3551-6

[5 Recomendado] Developing Bioinformatics Computer Skills /

Cynthia Gibas and Per Jambeck.
O'Reilly,, Sebastopol (California) : (2001)
1-56592-664-1

[6 Recomendado] Evolutionary computation: toward a new philosophy of machine intelligence /

David B. Fogel.
IEEE press,, New York : (1995)
0780310381

[7 Recomendado] Genetic Programming: Proceedings of the First Annual Conference 1996 /

edited by John R. Koza... [et al.].
The MIT Press,, Cambridge, MA : (1996)
0262611279

[8 Recomendado] Exploring complexity: an introduction /

Grégoire Nicolis, Ilya Prigogine.
W. H. Freeman,, New York : (1989)
0-7167-1859-6

[9 Recomendado] Heurísticas en optimización /

J. Marcos Moreno Vega ; José A. Moreno Pérez.
Consejería de Educación, Cultura y Deportes,, Santa Cruz de Tenerife : (1999)
8483090880

[10 Recomendado] Swarm intelligence: collective, adaptive /

James Kennedy, Russell C. Eberhart with Yuhui Shi.
Morgan Kaufmann,, San Francisco : (2001)
1558605959

[11 Recomendado] Genetic programming: on the programming of computers by means of natural selection.

Koza, John R.
MIT Press,, Cambridge, Mass : (1992)
0262111705

[12 Recomendado] Bioinformatics: the machine learning approach /

Pierre Baldi, Soren Brunak.

MIT Press,, Cambridge, Massachusetts [etc.] : (2001) - (2nd ed.)

0-262-02506-X

[13 Recomendado] Biological sequence analysis :probabalistic models of proteins and nucleic acids /

Richard Durbin ... [et al.].

Cambridge University Press,, Cambridge, UK : ; (1998)

0521629713 (pbk.)

Equipo Docente

FRANCISCO MARIO HERNÁNDEZ TEJERA

(COORDINADOR)

Categoría: CATEDRATICO DE UNIVERSIDAD

Departamento: INFORMÁTICA Y SISTEMAS

Teléfono: 928458744 **Correo Electrónico:** mario.hernandez@ulpgc.es

JUAN ÁNGEL MÉNDEZ RODRÍGUEZ

(RESPONSABLE DE PRACTICAS)

Categoría: CATEDRATICO DE UNIVERSIDAD

Departamento: INFORMÁTICA Y SISTEMAS

Teléfono: 928458746 **Correo Electrónico:** juan.mendez@ulpgc.es

EDUARDO MIGUEL RODRÍGUEZ BARRERA

Categoría: PROFESOR AYUDANTE DOCTOR

Departamento: INFORMÁTICA Y SISTEMAS

Teléfono: 928459862 **Correo Electrónico:** eduardo.rodriguez@ulpgc.es