

WORKSHOP: BIOLOGÍA COMPUTACIONAL

PRESENTACIÓN

El Instituto de Investigaciones de la Amazonía Peruana (IIAP) en colaboración con el grupo de Umbrella Bioinformatics Inc., tienen el agrado de presentarles el Workshop de Biología Computacional. El presente Workshop tiene como objetivo brindar a los investigadores de las diferentes áreas de la ciencias biológicas, las herramientas y habilidades necesarias en programación en Python, simulación de sistemas biológicos y diseño racional de fármacos, de la mano con el avance de las tecnologías de vanguardia; como el uso de la supercomputadora MANATI del IIAP, que gracias a sus grandes capacidades computacionales puede realizar cálculos complejos de sistemas biológicos, que brindan una aproximación más real a las simulaciones por computadora. Por otro lado, la reciente pandemia por COVID-19 pone de manifiesto la necesidad de desarrollar habilidades en bioinformática y biología computacional que en el contexto actual son determinantes para la investigación y solución de problemas en salud pública; como el desarrollo vacunas y sistemas de diagnóstico molecular.

PROGRAMACIÓN DEL CURSO

Módulo I: Introducción al uso de la supercomputadora “MANATÍ”	31 de mayo
Módulo II: Phyton para no programadores	01 de junio
Módulo III: Diseño de fármacos	02 de junio
Módulo IV: Modelado de proteínas	03 de junio
Módulo V: Dinámica molecular	04 de junio
Módulo VI: Análisis y gráficos biomoleculares	05 de junio

¿A QUIÉNES ESTÁ DIRIGIDO?

Dirigido a estudiantes de pregrado, posgrado, investigadores en áreas de Biología, Química, Física, Farmacia, Bioquímica y afines.

OBJETIVO

Permitir el alcance de conocimientos de programación, simulación de diversas biomoléculas y diseño de fármacos en diferentes sistemas dentro de la biofísica computacional para usos necesarios en diversas áreas de la investigación.

METODOLOGÍA

Las clases serán vía online, a través de sesiones en vivo en plataforma Zoom

ORGANIZADORES

Instituto de investigaciones de la Amazonía Peruana y Umbrella Bioinformatics Inc.

INSTRUCTORES

Prof. Ihosvany Camps, PhD

Head Lab, Umbrella Bioinformatics Inc., Lima, Perú

Jefe del Laboratorio de Modelado por Computadora, Universidad Federal de Alfenas, Brasil

Blgo. Ropón-Palacios G, MSc, PhD(c)
CEO, Umbrella Bioinformatics Inc., Lima, Perú.
Investigador del Laboratorio de Modelado por Computadora, Universidad Federal de Alfenas, Brasil

Gustavo Olivos Ramirez, MSc (c)
Investigador, Umbrella Bioinformatics Inc., Lima, Perú.
Facultad de Salud Pública, Universidad Peruana Cayetano Heredia, Perú

Yaritzza Ramirez Díaz, BSc (c)
Investigadora, Umbrella Bioinformatics Inc., Lima, Perú.
Investigadora del Laboratorio de Modelado por Computadora, Universidad Federal de Alfenas, Brasil

Sheyla E. Carmen Sifuentes, BSc (c)
Investigadora, Umbrella Bioinformatics Inc., Lima, Perú.
Investigadora del Laboratorio de Modelado por Computadora, Universidad Federal de Alfenas, Brasil

Ing. Rodolfo Cárdenas Vigo
Centro de Alto Rendimiento Computacional, Instituto de Investigaciones de la Amazonía Peruana- Iquitos, Perú

I. CRONOGRAMA

Módulo I: Introducción al uso de la supercomputadora “MANATÍ”

Día: Lunes 31 de mayo del 2021

Horario	Descripción	Ponentes
20:00 - 21:30 hrs	Teoría	Ing. Rodolfo Cárdenas Vigo
21:30 - 22:00 hrs	Preguntas y Respuestas	Moderador

Módulo II: Python para no programadores

Día: Martes 01 de junio del 2021

Horario	Descripción	Ponentes
20:00 - 21:00 hrs	Teoría	Ing. Rodolfo Cárdenas Vigo
21:00 - 22:00 hrs	Práctica	Ing. Rodolfo Cárdenas Vigo

Módulo III: Diseño de fármacos



Día: Martes 02 de junio del 2021

Horario	Descripción	Ponentes
20:00 - 21:30 hrs	Teoría y demostración práctica	Prof. Ihosvany Camps, PhD
21:30 - 22:00 hrs	Preguntas y Respuestas	Moderador

Módulo IV: Modelado de proteínas

Día: Miércoles 03 de junio del 2021

Horario	Descripción	Ponentes
20:00 - 21:00 hrs	Videoclase teoría	Blgo. Ropón-Palacios G, MSc, PhD(c)
21:00 - 22:00 hrs	Videoclase práctica	Yaritza Ramirez Díaz, BSc(c)

Módulo V: Dinámica Molecular

Día: Jueves 03 de junio del 2021

Horario	Descripción	Ponentes
20:00 - 21:00 hrs	Videoclase teoría	Blgo. Ropón-Palacios G, MSc, PhD(c)
21:00 - 22:00 hrs	Videoclase práctica	Blgo. Ropón-Palacios G, MSc, PhD(c)

Módulo VI: Análisis y gráficos biomoleculares

Día: Jueves 03 de junio del 2021

Horario	Descripción	Ponentes
20:00 - 21:00 hrs	Videoclase teoría	Sheyla E. Carmen Sifuentes, BSc(c)
21:00 - 22:00 hrs	Videoclase práctica	Sheyla E. Carmen Sifuentes, BSc(c)

II. DESCRIPCIÓN DE MÓDULOS

1. Módulo I: Introducción a la supercomputadora “MANATÍ”

Descripción:

El HPC “MANATI” es un clúster de supercomputación adquirido por el IIAP con el financiamiento del Programa CIENCIA ACTIVA del CONCYTEC. Está orientado a potenciar las capacidades de investigación de las instituciones y proyectos de investigación dirigidos al estudio de la Amazonía peruana.

Ponente:

Ing. Rodolfo Cárdenas Vigo
Centro de Alto Rendimiento Computacional, IIAP- Iquitos, Perú

Temario:

- Perspectiva general de las supercomputadoras
- Estructura del “MANATI”
- Accediendo a “MANATI”
- Ejecutando procesos en “MANATI”

2. Módulo II: Phytion para No Programadores

Descripción:

Python es un lenguaje de programación potente, versátil y de uso general. Es un excelente primer lenguaje de programación para principiantes porque es conciso y fácil de leer. Los alcances de Python son muy amplios. Desde el desarrollo web, el machine learning, ciencia de datos y análisis bioinformáticos.

Ponente:

Ing. Rodolfo Cárdenas Vigo
Centro de Alto Rendimiento Computacional, IIAP- Iquitos, Perú

Temario:



- Introducción a Python
- Instalación de Anaconda
- Entornos virtuales
- Instalación de librerías
- Comenzando a programar
- Tipos de datos, variables y expresiones
- Bucles e iteración
- Funciones
- Lectura y escritura en archivos

3. Módulo III: Diseño de Fármacos **

Descripción:

El diseño de fármacos, es el proceso inventivo de encontrar nuevos medicamentos basados en el estudio de un target biológico. El fármaco es comúnmente una pequeña molécula orgánica que activa o inhibe la función de una biomolécula, lo que a su vez resulta en un beneficio terapéutico para el paciente. En la actualidad el enfoque del diseño de fármacos asistido por computadora (DIFAC) está cobrando relevancia para optimizar que un fármaco llegue a ser usado en la práctica clínica. La sesión será principalmente teórica con demostración práctica por parte del ponente.

Ponente:

Prof. Ihosvany Camps, PhD
Head Lab, Umbrella Bioinformatics Inc., Lima, Perú
Jefe del Laboratorio de Modelado por Computadora, Universidad Federal de Alfenas, Brasil

Temario:

- Formas de acción de fármacos
- Selección de proteínas
- Mecánica Molecular
- Diseño de moléculas
- Caracterización de moléculas

***Usar un correo institucional para una práctica guiada**

***Licencia de programa de prueba para diseño de fármacos para los 15 primeros inscritos**

4. Módulo I: Modelamiento de proteínas

Descripción:

El objetivo de este módulo es brindar conocimientos avanzados en el modelamiento de proteínas, con baja cobertura de identidad y longitud de secuencia, realizar un curado manual de los alineamientos, así como personalizar scripts, usando diferentes métodos de refinamiento de estructuras usando técnicas de dinámica molecular Langeviniana. Todo esto a

través de una interfaz amigable en Jupyter notebook. Lenguajes de programación: Bash, AWK, Python.

Ponentes:

Blgo. Ropón-Palacios G, MSc, PhD(c)
CEO, Umbrella Bioinformatics Inc., Lima, Perú.
Investigador del Laboratorio de Modelado por Computadora, Universidad Federal de Alfenas Gerais, Brasil

BSc (c). Yaritza Ramirez Díaz
Investigadora, Umbrella Bioinformatics Inc., Investigadora del Laboratorio de Modelado por Computadora, Universidad Federal de Alfenas Gerais, Brasil

Programas:

- ❑ VMD 1.9.3 (<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/vmd-1.9.3/>)
- ❑ Clustal Omega (<http://www.clustal.org/omega/>)
- ❑ Jalview 2.11.1.0 (<http://www.jalview.org/getdown/release/>)
- ❑ Modeller 9.24(https://salilab.org/modeller/download_installation.html)
- ❑ Python 3.7 (<https://www.python.org/downloads/>)
- ❑ PyMoL 2.4 (<https://pymol.org/edu/?q=educational/>)

Temario:

- ❑ Introducción a la investigación y modelado de proteínas
- ❑ Conceptos generales del modelado por homología
- ❑ Modelo threading
- ❑ Softwares para predicción de proteínas

5. Módulo V: Dinámica Molecular

Descripción:

Este este módulo se podrá explorar la interacción entre fármaco-receptor, para entender el mecanismo de reconocimiento molecular y cómo interpretar los resultados, a través de análisis específicos. La preparación, ensamblado, y simulación, serán enseñados con detalles, para performar a un setup correcto y extraer información termodinámica relevante para nuestra pregunta de investigación.

Ponentes

Blgo. Ropón-Palacios G, MSc, PhD(c)
CEO, Umbrella Bioinformatics Inc., Lima, Perú.
Investigador del Laboratorio de Modelado por Computadora, Universidad Federal de Alfenas, Brasil

Gustavo Olivos Ramirez, MSc (c)
Investigador, Umbrella Bioinformatics Inc., Lima, Perú.
Facultad de Salud Pública, Universidad Peruana Cayetano Heredia, Perú

Programas

- ❑ NAMD (<https://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/D/>)
- ❑ VMD 1.9.3
(<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/vmd-1.9.3/>)
- ❑ PyMoL 2.4 (<https://pymol.org/edu/?q=educational/>)
- ❑ Avogadro 1.2
(<https://sourceforge.net/projects/avogadro/files/latest/download>)
- ❑ PDB Fixer 1.6 (Se instala con conda)
- ❑ Python 3.7 (<https://www.python.org/downloads/>)

Temario:

- ❑ Conceptos generales de dinámica molecular
- ❑ Topología molecular y campos de fuerza
- ❑ Componentes de una simulación molecular
- ❑ Potenciales usos de la dinámica molecular
- ❑ Softwares para desarrollo de dinámica molecular

6. Módulo VI: Análisis y Gráficos Biomoleculares

Descripción:

El análisis crítico de resultados y la calidad en la generación de manuscritos son recursos importantes para la generación de conocimiento que pueda ayudar a resolver problemas sociales. En el presente módulo se desarrollará la interpretación de análisis de simulación molecular y docking, así como la generación de gráficos biomoleculares para la presentación de resultados para manuscritos de investigación en biología computacional.

Ponente

BSc (c). Sheyla E. Carmen Sifuentes
Investigadora, Umbrella Bioinformatics Inc., Investigadora del Laboratorio de Modelado por Computadora, Universidad Federal de Alfenas Gerais, Brasil

Programas

- ❑ VMD 1.9.3
(<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/vmd-1.9.3/>)
- ❑ PyMoL 2.4 (<https://pymol.org/edu/?q=educational/>)

Temario:

- Análisis de docking molecular
- Análisis de simulación por dinámica molecular: RMSD, SASA y RMSF
- Uso de VMD y comandos de TLC
- Análisis gráfico de interacción ligando-receptor
- Generación de imágenes moleculares de alta calidad

PROCESO DE INSCRIPCIÓN

1. Informes

correo: biologiacomputacional@iiap.gob.pe

2. Pagos

S/. 300.00* Antes S/. 750.00

*Workshop Completo (todos los módulos)

** Programa con licencia de prueba para diseño de fármacos para los primeros 15 inscritos

OPCIÓN 1: A las siguientes cuentas realizar un solo depósito por el total del Workshop

2.1 Depósitos a la cuenta bancaria BBVA (soles)

- 0011-0057-0248244071 - Rodolfo Cardenas Vigo
- CCI: 011-057-000248244071-72

2.2 Depósitos a la cuenta bancaria Interbank (soles)

- 747-3113226188 - Rodolfo Cardenas Vigo
- CCI: 00374701311322618837

2.3 Depósitos a la cuenta bancaria BCP (soles)

- 39093942956045 - Rodolfo Cardenas Vigo
- CCI: 00239019394295604539

OPCIÓN 2 :Al siguiente enlace debe realizar un solo pago por el total del Workshop

2.4 Pago con tarjeta: <https://mpago.la/2sB7CYw>

3. Registro



Llenar el siguiente enlace y adjuntar una foto del pago correspondiente
link: <https://forms.gle/nm6arH6gC1RcX5Yu8>

4. Confirmación

Una vez registrado, el participante recibirá un correo de confirmación.