



## **CICLO ESPECIAL DE CURSOS 2010 MAESTRÍA EN BIOINFORMÁTICA PEDECIBA**

La Maestría en Bioinformática del PEDECIBA tiene el agrado de difundir el siguiente curso en el marco del Ciclo Especial de Cursos que está llevando adelante desde el mes de Agosto de 2010 hasta el mes de Febrero de 2011 (aproximadamente) con la participación especial de invitados del exterior.

Estos cursos podrán ser tomados como Optativas por parte de los estudiantes de la Maestría en Bioinformática, teniendo éstos preferencia al momento de la inscripción.

Las inscripciones deberán realizarse una semana antes de comenzar cada curso al mail de la Maestría ([bioinformatica@pedeciba.edu.uy](mailto:bioinformatica@pedeciba.edu.uy)).

Se adjunta en la siguiente página la información de dicho curso.

Saluda atte.,

**Ing. Jorge Corral**  
**Encargado Docente**



**Maestría  
Bioinformática**



## **Curso:** "Estrategias bioinformático-estructurales aplicadas a la medida de energías libres de interacción (FEPs)"

**Prof. Invitado:** Dr. Christophe Chipot (Link a CV: [www.pedeciba.edu.uy/bioinformatica/temarios/CVEnglish-abridged.pdf](http://www.pedeciba.edu.uy/bioinformatica/temarios/CVEnglish-abridged.pdf))

**Fecha:** del Lunes 29/11 al Viernes 3/12 de 2010.

**Horarios:** todo el día (de 9 a 13 y de 14 a 18hs).

**Cupo:** 14 estudiantes.

**Metodología:** El curso será propuesto en la forma de clases magistrales impartidas en la mañana, seguidas en la tarde por clases de taller-laboratorio computacional. Los participantes tendrán acceso a computadoras con los programas VMD y NAMD a ser usados en el curso.

**Lugar:** Sala de Informática de la Facultad de Química.

**Idioma:** El curso será dictado en español.

**Conocimientos previos recomendados:** al menos uno de estos cursos: (aprobados o en curso):

- Bioinformática II de la Maestría en Bioinformática (cursado o en curso).
- Bioinformática Estructural, Estrategias en el diseño de compuestos bioactivos o de Diseño de Drogas de la Facultad de Química.

**Evaluación:** Evaluación al finalizar el curso (viernes de tarde). Modalidad: oral. Se solicitará a los estudiantes que entreguen uno de los ocho ejercicios de los dos tutoriales de FEPs. Se insistirá sobre aspectos de la redacción. Adicionalmente, se podrá realizar una evaluación oral discutiendo sobre un tema relacionado a las simulaciones.

### **Programa:**

- Lunes 29/11:
  - 9 ~ 13hs: Introducción a los Campos de Fuerza de modelado molecular.
  - 14 ~ 18hs: Introducción a VMD y NAMD. Tutorial de membranas proteicas.



- Martes 30/11:
  - 9 ~ 13hs: Introducción a la Dinámica Molecular para el desarrollo de métodos perturbacionales de energía libre (FEP).
  - 14 ~ 18hs: Free-energy perturbation (FEP) Tutorial I .
- Miércoles 1/12:
  - 9 ~ 13hs: Métodos perturbacionales de Energía libre.
  - 14 ~ 18hs: Free-energy perturbation (FEP) Tutorial II
- Jueves 2/12:
  - 9 ~ 13hs: Integración termodinámica
  - 14 ~ 18hs: Tutorial I de Energía libre a lo largo de la coordenada de reacción.
- Viernes 3/12:
  - 9 ~ 13hs: FreeTutorial II de Energía libre a lo largo de la coordenada de reacción.

#### Referencia del curso y materiales:

1. Frenkel, D. & Smit, B. Understanding molecular simulations: From algorithms to applications. *Academic Press*, **1996**.
2. Chipot, C. Métodos numéricos en dinámica molecular, **2003**.
3. Chipot, C. & Pohorille, A. Free energy calculations. Theory and applications in chemistry and biology. *Springer Verlag*, **2007**.
4. Hénin, J.; Gumbart, J.; Harrison, C.; Chipot, C. In silicoalchemy: A tutorial for al chemical free-energy perturbation calculations with NAMD. **2010**. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>
5. Hénin, J.; Gumbart, J.; Harrison, C.; Chipot, C. Free energy calculations along a reaction coordinate: A tutorial for adaptive biasing force simulations. **2010**. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

**Software a utilizar:** VMD & NAMD.