

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	42588
Nombre	Bioinformática estructural
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	3.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2116 - M.U. en Bioinformática 12-V.1	Escuela Técnica Superior de Ingeniería	1	Segundo cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2116 - M.U. en Bioinformática 12-V.1	6 - Bioinformática estructural	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
ARNAU LLOMBART, VICENTE	240 - Informática

RESUMEN

En esta asignatura se presentarán los conocimientos teóricos y prácticos necesarios para la determinación estructural de las principales biomoléculas: proteínas y ácidos nucleicos. Se promoverá la búsqueda de datos, la caracterización, el análisis y la visualización de estructuras; así como la predicción y modelado de interacciones moleculares. Además se estudiarán y debatirán casos reales de aplicación directa de la Bioinformática Estructural.

CONOCIMIENTOS PREVIOS**Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.



Otros tipos de requisitos

No hay.

Se recomienda tener conocimientos básicos en Python y bash.

COMPETENCIAS

2116 - M.U. en Bioinformática 12-V.1

- Que los/las estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Que los/las estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- Ser capaces de acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo.
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.
- Ser capaces de valorar la necesidad de completar su formación científica, histórica, en lenguas, en informática, en literatura, en ética, social y humana en general, asistiendo a conferencias o cursos y/o realizando actividades complementarias, autoevaluando la aportación que la realización de estas actividades supone para su formación integral.
- Desarrollar la iniciativa personal y ser capaces de realizar una toma rápida y eficaz de decisiones en su labor profesional y/o investigadora.
- Trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional y/o investigadora y con personas de diferente procedencia.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE



- Dominar los conceptos básicos de biología estructural y biofísica, así como de las herramientas bioinformáticas esenciales aplicadas al manejo de estructuras de ácidos nucleicos y proteínas.
- Conocer el uso y el desarrollo de los métodos principales aplicados a la predicción, validación y análisis de estructuras tridimensionales de ácidos nucleicos y proteínas.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Estructura y biofísica de ácidos nucleicos y proteínas

- Estudio de los diferentes niveles estructurales definidos en proteínas y ácidos nucleicos (específicamente en ADN) y su importancia a nivel funcional. Dinamismo molecular.
- Análisis y estudio de las principales técnicas experimentales aplicadas a la determinación de estructuras proteínas(cristalografía de rayos X, resonancia magnética nuclear,etc) y de ácidos nucleicos (técnicas de microscopia de alta resolución y biología molecular).
- Estudio de aplicaciones reales de modelados 3D y toma de contacto con las principales metodologías computacionales aplicadas a la predicción y modelado estructural.

2. Bases de datos de estructura de proteínas, ácidos nucleicos y pequeñas moléculas

- Acceso y análisis de los principales repositorios existentes de estructura de proteínas, ácidos nucleicos y pequeñas moléculas.
- Estudio de los principales formatos de almacenamiento de información estructural y funcional de biomoléculas (PDB, mmCIF, XML, BED)

3. Alineamiento y clasificación de estructura

- Estudio, validación y optimización de los diferentes tipos de alineamientos estructurales existentes, basados en la estructura y/o en la secuencia. Evaluación de los alineamientos estructurales.
- Conceptos básicos del modelado de zonas intrínsecamente desordenadas y con cierto grado de libertad: modelado de bucles.

4. Genómica estructural

Necesitamos conocer estructuras no determinadas experimentalmente de secuencias conocidas de genes y proteínas. La genómica estructural se ocupa de generar y analizar estas formas tridimensionales.

**5. Predicción de estructura tridimensional de ácidos nucleicos y proteínas.**

Nos centraremos en la predicción de estructura tridimensional de ácidos nucleicos y proteínas

6. Docking de pequeñas molecular en la superficie de estructuras de proteínas.

Estudiaremos el acoplamiento molecular o Docking de pequeñas molecular en la superficie de estructuras de proteínas.

7. Aplicaciones para el desarrollo de nuevos fármacos

Uno de los principales objetivos de la Bioinformática estructural es su aplicación al desarrollo de nuevos fármacos. Analizaremos esta posibilidad con las técnicas vista en esta materia.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	10,50	100
Prácticas en laboratorio	4,50	100
Elaboración de trabajos en grupo	5,00	0
Elaboración de trabajos individuales	10,00	0
Estudio y trabajo autónomo	15,00	0
Lecturas de material complementario	10,00	0
Preparación de actividades de evaluación	10,00	0
Preparación de clases de teoría	5,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	5,00	0
TOTAL	75,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

MD1 - Tareas formativas del proceso de enseñanza-aprendizaje entorno a la interacción en el aula mediante sesiones expositivas. Incluyen las tareas previas de preparación (búsqueda de información, lectura de textos facilitados por el profesorado), las propias sesiones lectivas y el trabajo posterior de profundización.

MD2 – Aprendizaje mediante resolución de problemas y casos de estudio, a través de los cuales se va adquiriendo competencias sobre los diferentes aspectos de las materias y asignaturas.

MD3 - Actividades prácticas de laboratorio. Incluyen preparación, realización de las prácticas con el seguimiento y apoyo del profesor, trabajo autónomo on-line y elaboración de informes de las prácticas.



MD4 - Competencias transversales. Incluyen asistencia a cursos, conferencias o mesas redondas organizadas por la CCA del Máster y/o realización de un trabajo bibliográfico sobre temas que contribuyan a la formación integral. Se elabora una memoria de las actividades

EVALUACIÓN

En las dos convocatorias:

SE1 Evaluación continua: mínimo 5 y máximo 15.

SE2 Actividades: mínimo 10 y máximo 50.

SE3 Laboratorio: mínimo 25 y máximo 75.

SE4 Exámenes: mínimo 0 y máximo 40

REFERENCIAS

Básicas

- Referencia b1: Structural Bioinformatics. Jenny Gu, Philip E. Bourne. Ed. John Wiley & Sons, 2009.
- Belton JM, McCord RP, Gibcus JH, Naumova N, Zhan Y, Dekker J. 2012. Hi-C: a comprehensive technique to capture the conformation of genomes. Methods 58: 268-276.
- Cavalli G, Misteli T. 2013. Functional implications of genome topology. Nature structural & molecular biology 20: 290-299.
- Dekker J, Marti-Renom MA, Mirny LA. 2013. Exploring the three-dimensional organization of genomes: interpreting chromatin interaction data. Nature reviews Genetics 14: 390-403.

Complementarias

- Referencia c1: Structural Bioinformatics: An Algorithmic Approach (Chapman & Hall/CRC Mathematical & Computational Biology). Forbes J. Burkowski. 2008 | ISBN-10: 1584886838.
- Referencia c2: Structural Bioinformatics. Ed. Aaron Philippe Toll. 2012. ISBN-10: 6200704244 | ISBN-13: 978-6200704245