FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	44986
Nombre	Multiescala, machine learning y métodos QSAR aplicados a biomoléculas
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.	Facultad de Química	2	Anual

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.	4 - Optativas de segundo	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUMEN

El objetivo de este curso es proporcionar a los estudiantes los conocimientos básicos de técnicas de aprendizaje automático y métodos QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) aplicados a sistemas moleculares de pequeño y gran tamaño, tales como reactivos simples o biomoléculas.

El Machine Learning (ML) permite a los equipos solucionar problemas aprendiendo de los datos. En los últimos años el ML se ha aplicado, cada vez más, a una amplia variedad de desafíos químicos, desde la mejora de la química computacional hasta el diseño de medicamentos y materiales e incluso la planificación de síntesis. Esta curso nace con el propósito de introducir esta realidad de rápido crecimiento.

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

COMPETENCIAS (RD 1393/2007) // RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (RD 822/2021)

2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.

- 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 posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- Los estudiantes manejan las técnicas más usuales de programación en física y en química y está familiarizado con las herramientas de cálculo esenciales en estas áreas.
- El estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.
- Los estudiantes desarrollan un pensamiento y razonamiento crítico y saben comunicarlos de manera igualitaria y no sexista tanto en forma oral como escrita, en su lengua propia y en una lengua extranjera.
- El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.
- El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1.

1. Introducción al Cloud Computing.

2. Virtualización y arquitecturas contenedoras.

3. Servicios de gestión del Big Data y despliegues automáticos.

4. Clasificación binaria de proteínas mediante enfoque del Machine learning.

5. Modelado multiescala de procesos bioquímicos.

6. Dinámica Molecular de alto rendimiento: teoría y aplicaciones.

7. Introducción al Deep learning y al Tensorflow.

8. Dinámica molecular multiescala de biomoléculas.

9. Posibilidades del Machine learning.

10. Métodos QSAR aplicados a biomoléculas.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en aula informática	20,00	100
Clases de teoría	20,00	100
Tutorías regladas	5,00	100
TOTAL	**45,00**	

METODOLOGÍA DOCENTE

EVALUACIÓN

Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

REFERENCIAS

Básicas

- Combined Quantum Mechanics/Molecular Mechanics (QM/MM) Methods in Computational Enzymology M.W. van der Kamp and A. J. Mulholland Biochemistry 2013.

  QM/MM Methods for Biomolecular Systems H. M. Senn and W. Thiel (2009), QM/MM Methods for Biomolecular Systems. Angewandte Chemie Int. Ed. 2009.

  A Hybrid Potential Reaction Path and Free Energy Study of the Chorismate Mutase Reaction S. Martí, J. A., V. Moliner, E. Silla, I. Tuñón, J. Bertrán, and M. J. Field Journal of the American Chemical Society 2001.