

1. DATOS BÁSICOS

Asignatura	BIOINFORMÁTICA APLICADA III.
Titulación	MÁSTER UNIVERSITARIO EN BIOINFORMÁTICA
Escuela/ Facultad	BIOMEDICINA Y SALUD
Curso	1º
ECTS	6 ECTS
Carácter	OBLIGATORIA
Idioma/s	ESPAÑOL
Modalidad	ONLINE
Semestre	SEGUNDO
Curso académico	2022-2023
Docente coordinador	JON DEL ARCO ARRIETA

2. PRESENTACIÓN

El objetivo fundamental de este módulo es entender el papel clave que juega la estructura molecular en el diseño de fármacos asistido por ordenador, y cómo a partir de su estudio podemos crear nuevas moléculas que, necesariamente, deberán de ser validadas experimentalmente. Usaremos un modelo incremental partiendo de átomos y llegando a macromoléculas. Analizaremos sus estructuras y las interacciones entre ellas, realizando cálculos de mecánica para entender cómo funcionan los sistemas biológicos a su nivel más íntimo, el atómico.

3. COMPETENCIAS Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Competencias básicas:

CB2-Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB5-Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

Competencias transversales:

CT3-Competencia digital

CT5-Trabajo en equipo

CT6-Análisis crítico

Competencias específicas:

CE6-Analizar e interpretar las principales aplicaciones informáticas aplicadas disponibles para el diseño de fármacos asistido por ordenador y en el análisis de librerías de moléculas en los protocolos de *Drug Discovery*.

CE8-Utilizar y valorar las principales aplicaciones y los paquetes de software de la biología estructural, dinámica molecular y *docking* enfocados a la validación de terapias.

Resultados de Aprendizaje:

R1-Analizar las técnicas que nos permiten estudiar los movimientos macromoleculares

R2-Investigar y cuantificar las interacciones presentes entre moléculas biológicas en el contexto celular

R3-Estudiar los principios y métodos del acoplamiento ligando-receptor.

R4-Diseñar estrategias de *docking* para estudios ligando receptor.

R5-Analizar los métodos y plataformas automatizadas existentes para el cribado virtual de fármacos.

R6-Crear estrategias de interacción ligando-receptor basadas en inteligencia artificial.

En la tabla inferior se muestra la relación entre las competencias que se desarrollan en la asignatura y los resultados de aprendizaje que se persiguen:

Competencias	Resultados de aprendizaje
CB2, CT3, CE6	R1
CB5, CT5, CE7	R2
CB5, CT6, CE7	R3
CB2, CT3, CE7	R4
CB2, CT5, CE6	R5
CB5, CT6, CE7	R6

4. CONTENIDOS

UD 1. Fundamentos de estructura. Estructura molecular, visualización de estructuras con PyMOL, cálculo y análisis de estructuras, clasificación estructural de proteínas y modelado por homología.

UD 2. Movimientos macromoleculares. Mecánica molecular, modos normales y dinámica molecular.

UD 3. Interacciones entre moléculas. Tipos y cuantificación de interacciones entre moléculas.

UD 4. Acoplamiento ligando-receptor I: *docking* o anclaje molecular. Principios, métodos, comparativa de métodos.

UD 5. Acoplamiento ligando-receptor II: cribado virtual. Principios, métodos, plataformas automatizadas para cribado virtual, comparativa.

UD 6. Acoplamiento ligando-receptor III: otras metodologías. Diseño de fármacos basados solo en la estructura de los ligandos (similitud molecular) e inteligencia artificial aplicada en el diseño computacional de fármacos.

5. METODOLOGÍAS DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE

A continuación, se indican los tipos de metodologías de enseñanza-aprendizaje que se aplicarán:

- Clase magistral
- Aprendizaje cooperativo
- Aprendizaje basado en proyectos
- Aprendizaje basado en enseñanzas de taller
- Aprendizaje experiencial
- Entornos de simulación

6. ACTIVIDADES FORMATIVAS

A continuación, se identifican los tipos de actividades formativas que se realizarán y la dedicación en horas del estudiante a cada una de ellas:

Modalidad online:

Actividad formativa	Número de horas
Clases virtuales (Clase magistral/seminario virtual)	30 h
Elaboración de informes y escritos	12 h
Investigaciones y proyectos	12h
Actividades en laboratorios virtuales	20h
Estudios de contenidos y documentación complementaria	50h
Tutoría virtual	18h
Foro virtual	8 h
Pruebas presenciales de conocimiento	2 h
TOTAL	150 h

7. EVALUACIÓN

A continuación, se relacionan los sistemas de evaluación, así como su peso sobre la calificación total de la asignatura:

Modalidad online:

Sistema de evaluación	Peso
Pruebas semipresenciales de conocimiento	60%
Informes y escritos	15%
Investigaciones y proyectos	15%
Cuaderno de prácticas de laboratorio	10%

En el Campus Virtual, cuando accedas a la asignatura, podrás consultar en detalle las actividades de evaluación que debes realizar, así como las fechas de entrega y los procedimientos de evaluación de cada una de ellas.

7.1. Convocatoria ordinaria

Para superar la asignatura en convocatoria ordinaria deberás obtener una calificación mayor o igual que 5,0 sobre 10,0 en la calificación final (media ponderada) de la asignatura.

En todo caso, será necesario que obtengas una calificación mayor o igual que 4,0 en la prueba final, para que la misma pueda hacer media con el resto de actividades.

Actividades obligatorias:

o En esta asignatura existen actividades obligatorias. La no realización de alguna de ellas implica no superar la asignatura en convocatoria ordinaria, y tener que presentarse a la convocatoria extraordinaria. La nota máxima que aparecerá en las actas de convocatoria ordinaria será un 4,0 sobre 10,0.

o Las actividades obligatorias son:

- Reconocimiento del ligando en el sitio de unión: interacciones no enlazadas.
- Obtención, cálculo y análisis de estructuras 3D de moléculas pequeñas.
- Actividad. Análisis e identificación de interacciones en el centro activo.
- Ejercicio práctico de docking.
- Ejemplo práctico de cribado virtual con VINA.

INFORMACIÓN IMPORTANTE relacionada con la normativa de la Universidad Europea sobre el plagio:

Se denomina PLAGIO, según el Diccionario de la Real Academia de la Lengua (DRAE): “Copiar en lo sustancial obras ajenas, dándolas como propias”. Lo correcto es hacer lo que se denomina una paráfrasis, es decir, expresar con vuestras palabras la idea de uno o varios autores, indicando al final la fuente o fuentes. Según el Reglamento Disciplinario de los estudiantes de la Universidad Europea de

Madrid, Cap. II sobre infracciones disciplinarias (art. 5.f), el plagio de todo o parte de obras intelectuales de cualquier tipo, se recoge como falta muy grave. La consecuencia que tiene esta falta es, en primer lugar, la pérdida de la convocatoria en la que se realiza o presenta la prueba de evaluación (art. 8.3 del mismo reglamento).

7.2. Convocatoria extraordinaria

Para superar la asignatura en convocatoria ordinaria deberás obtener una calificación mayor o igual que 5,0 sobre 10,0 en la calificación final (media ponderada) de la asignatura.

En todo caso, será necesario que obtengas una calificación mayor o igual que 4,0 en la prueba final, para que la misma pueda hacer media con el resto de actividades.

Se deben entregar las actividades no superadas en convocatoria ordinaria, tras haber recibido las correcciones correspondientes a las mismas por parte del docente, o bien aquellas que no fueron entregadas.

8. CRONOGRAMA

En este apartado se indica el cronograma con fechas de entrega de actividades evaluables de la asignatura:

Actividades evaluables	Fecha
Reconocimiento del ligando en el sitio de unión: interacciones no enlazadas.	Semana 1 (mes de mayo)
Obtención, cálculo y análisis de estructuras 3D de moléculas pequeñas.	Semana 1 (mes de mayo)
Actividad. Análisis e identificación de interacciones en el centro activo.	Semana 2 (mes de mayo)
Ejercicio práctico de docking.	Semana 3 (mes de mayo)
Ejemplo práctico de cribado virtual con VINA.	Semana 4 (mes de mayo)
Test de repaso de contenidos	Al final del módulo (junio 2023)

Este cronograma podrá sufrir modificaciones por razones logísticas de las actividades. Cualquier modificación será notificada al estudiante en tiempo y forma.

9. BIBLIOGRAFÍA

La obra de referencia para el seguimiento de la asignatura es:

- Leach, A. (2001). *Molecular modelling. Principles and applications*. Inglaterra: Pearson Educational Limited.

A continuación, se indica bibliografía recomendada:

- Monticelli, L. (2013). *Biomolecular Simulations: Methods and Protocols, Methods in Molecular Biology*, (924). Springer Science+Business Media New York.
- Petsko, G. A. y Ringe, D. (2004). *Protein structure and function*. London: New Science Press.
- Cavasotto, C. N. (2016). *In Silico Drug Discovery and Design. Theory, Methods, Challenges, and Applications*. EE. UU.: CRC Press.
- Habib, E. (2020). *Structure-Based Virtual Screening: From Classical to Artificial Intelligence*. *Frontiers in Chemistry*, 8, 343. Disponible en: <<https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fchem.2020.00343/full>>

10. UNIDAD DE ATENCIÓN A LA DIVERSIDAD

Estudiantes con necesidades específicas de apoyo educativo:

Las adaptaciones o ajustes curriculares para estudiantes con necesidades específicas de apoyo educativo, a fin de garantizar la equidad de oportunidades, serán pautadas por la Unidad de Atención a la Diversidad (UAD).

Será requisito imprescindible la emisión de un informe de adaptaciones/ajustes curriculares por parte de dicha Unidad, por lo que los estudiantes con necesidades específicas de apoyo educativo deberán contactar a través de: unidad.diversidad@universidadeuropea.es al comienzo de cada semestre.

11. ENCUESTAS DE SATISFACCIÓN

¡Tú opinión importa!

La Universidad Europea te anima a participar en las encuestas de satisfacción para detectar puntos fuertes y áreas de mejora sobre el profesorado, la titulación y el proceso de enseñanza-aprendizaje.

Las encuestas estarán disponibles en el espacio de encuestas de tu campus virtual o a través de tu correo electrónico.

Tu valoración es necesaria para mejorar la calidad de la titulación.

Muchas gracias por tu participación.