



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

33082 - BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL

Información de la asignatura

Código - Nombre: 33082 - BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL

Titulación: 702 - Máster en Bioinformática y Biología Computacional
805 - Máster en Bioinformática y Biología Computacional (2024)

Centro: 106 - Facultad de Medicina

Curso Académico: 2024/25

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Análisis de secuencias

1.2. Carácter

Obligatoria

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

Segundo semestre

1.6. Número de créditos ECTS

3.0

1.7. Idioma

Español/English

1.8. Requisitos previos

-

1.9. Recomendaciones

Para garantizar la asimilación de los contenidos y la adquisición de habilidades se recomienda:

- Lectura crítica de los textos de la bibliografía.
- Uso del material electrónico disponible on-line en la plataforma Moodle de Posgrado de la UAM (<http://posgrado.uam.es>).
- Revisión de material complementario en la red.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	28/01/2025	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

Es recomendable disponer de un dominio de inglés para leer la bibliografía de consulta.

Asimismo, se requiere:

- Trabajo individual antes de las sesiones teóricas y prácticas: Lectura del material a cubrir con el objetivo de familiarizarse con los conceptos que se van a manejar y los problemas a resolver.
- Trabajo individual posterior a las sesiones:
 - Revisión de las notas tomadas en clase.
 - Consulta de la bibliografía.
 - Realización de ejercicios.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

Tal y como marca la normativa de la UAM es obligatoria la asistencia a un mínimo del 33% de horas lectivas. Además, la realización de las prácticas es obligatoria y se recomienda la realización de las mismas en el aula bajo la supervisión de los profesores.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Modesto Redrejo Rodriguez

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias / Resultados del proceso de formación y aprendizaje

COMPETENCIAS

CM1 - Aplicar conocimientos para resolver problemas en nuevos contextos de bioinformática y continuar aprendiendo de forma autónoma nuevos conocimientos y desarrollos tecnológicos en bioinformática.

CM2 - Capacidad de elaborar proyectos de investigación o aplicaciones en bioinformática, incorporando soluciones innovadoras, anticipando dificultades y valorando estrategias alternativas de contingencia, así como consideraciones en cuanto a responsabilidad social y éticos y legales.

CM3 - Capacidad para buscar, procesar y extraer conclusiones de la información de bases de datos biológicas sobre secuencias, estructuras, transcriptomas, genomas, proteomas, etc.

CM4 - Trabajar eficientemente en equipos multidisciplinares, con responsabilidad compartida en el diseño y comunicación de herramientas de trabajo y de acuerdo con las buenas prácticas científicas.

CM5 - Desarrollar tareas en investigación, desarrollo, innovación y gestión en empresas y centros tecnológicos en bioinformática.

CM6 - Buscar, analizar y gestionar información, interpretando y evaluando con razonamiento crítico en el ámbito de la bioinformática.

Competencias específicas de la asignatura:

Capacidad de obtener y comprender diferentes resultados de modelado de estructuras de proteínas para resolver problemas biológicos

1.12.2. Resultados de aprendizaje

CONOCIMIENTOS

CON1 - Conocer las principales bases de datos de secuencias y estructuras biológicas, así como acceder, extraer y procesar información de ellas.

CON2 - Conocer las bases teóricas y algorítmicas en bioinformática.

HABILIDADES

HA2 - Aplicar herramientas y métodos bioinformáticos y computacionales a la resolución de problemas y automatización de procesos en el ámbito de la investigación, tanto en biología y como biomedicina básica y traslacional.

HA3- Proyectar, calcular y diseñar métodos y productos bioinformáticos para el procesamiento de datos, incorporando conocimientos de biología, genética, matemáticas, computación, física y estadística.

HA4 - Utilización de métodos computacionales para el procesado, almacenamiento y manejo de datos masivos, en particular aquellos generados mediante tecnologías ómicas de alto rendimiento en biología y biomedicina.

HA6 - Identificar fuentes de información científica solventes para fundamentar el estado de la cuestión de un problema bioinformático y poder abordar su resolución.

HA8 - Analizar y modelar secuencias biológicas a nivel tanto estructural como funcional.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	28/01/2025	2/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

Habilidades específicas de la asignatura:

1. Identificar las principales bases de datos de estructuras biológicas, así como acceder y extraer información de ellas.
2. Comprender las bases teóricas, tanto conceptuales como algorítmicas, de la predicción y análisis de estructura de macromoléculas, e interpretar los resultados de estos programas.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

1. Aplicaciones y métodos de bioinformática estructural en biología y biomedicina.
2. Aplicaciones para visualización de estructuras 3D de moléculas biológicas.
3. Métodos alternativos para la predicción de estructuras secundarias y terciarias de proteínas.
4. Acoplamiento (docking) computacional de proteínas y fármacos

1.14. Referencias de consulta

1. Libros

- Structural Bioinformatics 2 by Jenny Gu (Redactor), Philip E. Bourne (Redactor) Wiley- Blackwell 2nd edition 2011
- A basic introduction to protein structure and function: Protein Structure and Function Gregory A. Petsko (Autor), Dagmar Ringe (Autor) OUP Oxford 2nd edition (2008)
- Exploring Protein Structure: Principles and Practice (2018) Skern, T. (Ed) SpringerBooks.
<https://doi.org/10.1007/978-3-319-76858-8>
- Protein Structure Prediction. (Methods in Molecular Biology, Vol. 1137, (2014) Kihara, Daisuke (Ed.)
<https://doi.org/10.1007/978-1-4939-0366-5>
- Minovski, Nicola. MOLECULAR DOCKING CALCULATIONS UTILIZING DISCOVERY STUDIO & PIPELINE PILOT (2021). Link: <https://indico.ijs.si/event/1349/attachments/1155/1506/Sklop%205-3%20Minovski%202.pdf>

-

2. Artículos

- Baker D, Sali A. Protein structure prediction and structural genomics. Science, 2001
<https://science.sciencemag.org/content/294/5540/93.long>
- Structural Biologists and Computer Scientists. Structure, 2019 [https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0969-2126\(19\)30307-7](https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0969-2126(19)30307-7)
- Goddard, TD. UCSF ChimeraX: Meeting modern challenges in visualization and analysis. Protein Science, 2018.
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/pro.3235>
- Ken A. Dill & Justin L. MacCallum. The Protein-Folding Problem, 50 Years On. Science 338,1042-1046(2012). DOI: [10.1126/science.1219021](https://doi.org/10.1126/science.1219021)
- Kempen, Michel van, Stephanie S. Kim, Charlotte Tumescheit, Milot Mirdita, Cameron L. M. Gilchrist, Johannes Söding, and Martin Steinegger. n.d. "Foldseek: Fast and Accurate Protein Structure Search." <https://doi.org/10.1101/2022.02.07.479398>
- Mirdita, Milot, Konstantin Schütze, Yoshitaka Moriwaki, Lim Heo, Sergey Ovchinnikov, and Martin Steinegger. 2022. "ColabFold: making protein folding accessible to all." Nature Methods 19 (6): 679–82. <https://doi.org/10.1038/s41592-022-01488-1>
- Callaway, Ewen. 2022. "AlphaFold's New Rival? Meta AI Predicts Shape of 600 Million Proteins." Nature 611 (7935): 211–12. <https://doi.org/10.1038/d41586-022-03539-1>.
- Elofsson, Arne. 2023. "Progress at protein structure prediction, as seen in CASP15." Current Opinion in Structural Biology 80 (June): 102594. <https://doi.org/10.1016/j.sbi.2023.102594>.
- Evans, Richard, Michael O'Neill, Alexander Pritzel, Natasha Antropova, Andrew Senior, Tim Green, Augustin Idek, et

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	28/01/2025	3/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

- al. 2022. "Protein Complex Prediction with AlphaFold-Multimer." <https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2021.10.04.463034v2>.
- Holm, Liisa. 2022. "Dali Server: Structural Unification of Protein Families." *Nucleic Acids Research* 50 (W1): W210–15. <https://doi.org/10.1093/nar/gkac387>.
 - Butt et al. 2020. "Molecular Docking Using Chimera and Autodock Vina Software for Nonbioinformaticians" *JMIR Bioinformatics and Biotechnology* <https://doi.org/10.2196/14232>
 - Baroroh et al. 2023. "Molecular interaction analysis and visualization of protein-ligand docking using Biovia Discovery Studio Visualizer". *IJCB* 2023:22-30, <https://doi.org/10.24198/ijcb.v2i1.46322>
 - Richardson R.J. "Method for installing Biovia Discovery Studio Viewer 2021 in Linux Mint 20.01 or Ubuntu 20.04." *ResearchGate*: https://www.researchgate.net/publication/353035302_Method_for_installing_Biovia_Discovery_Studio_Viewer_2021_in_Linux_Mi

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

Tal y como marca la normativa es obligatoria la asistencia a un mínimo del 33% de horas lectivas.

2.2. Relación de actividades formativas

AF1 – Clases teórico-prácticas (aproximadamente 10 h presenciales)

AF2 – Realización de proyectos o ejercicios prácticos por ordenador (aproximadamente 18 h, 50% presenciales).

AF3 – Estudio y trabajo autónomo de los estudiantes, individual o en grupo (aproximadamente 45 h, 5 h presenciales).

AF4 – Tutorías individuales o grupos reducidos (aproximadamente 2 h presenciales).

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

La calificación final de la asignatura en la convocatoria ordinaria se obtiene a partir de las notas del examen final (Teoría) y calificación obtenida en los ejercicios y/o prácticas y asistencia y participación en clase (Prácticas) mediante la ecuación:

- $\text{Calificación} = \text{Mín}(4.9, 0.6 \cdot \text{Prácticas} + 0.4 \cdot \text{Teoría})$

Para aprobar la asignatura es obligatorio obtener una nota mayor o igual a 5 puntos tanto en la parte de teoría como en las prácticas.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

-

3.2. Convocatoria extraordinaria

- Los estudiantes deben revisar las entregas realizadas, completándolas y corrigiendo sus errores sobre la versión entregada durante el curso, sobre un problema de modelado alternativo.
- En el caso de que no se realizara una o más entregas en la convocatoria ordinaria se podrá acordar con los profesores el enunciado de las prácticas para la convocatoria extraordinaria.
- Realizarán un examen escrito o/y oral.
- Calificación: $\text{Mín}(4.9, 0.6 \cdot \text{Prácticas} + 0.4 \cdot \text{Teoría})$

3.2.1. Relación actividades de evaluación

-

4. Cronograma orientativo

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	28/01/2025	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	