



Universidad
Internacional
de Valencia

Guía didáctica

Bioinformática Farmacológica

Título: *Máster Universitario en Bioinformática*

Materia: *Bioinformática farmacológica*

Créditos: 6 ECTS

Código: 08MBIF

Índice

1. Organización general.....	3
1.1. Datos de la asignatura.....	3
1.2. Equipo docente	3
1.3. Introducción a la asignatura.....	3
1.4. Competencias.....	3
2. Contenidos/temario	4
3. Metodología	6
4. Actividades formativas	6
5. Evaluación.....	7
5.1. Sistema de evaluación.....	7
5.2. Sistema de calificación	8
6. Bibliografía.....	9

1. Organización general

1.1. Datos de la asignatura

MATERIA	Bioinformática Farmacológica
ASIGNATURA	<i>Bioinformática farmacológica</i> 6 ECTS
Carácter	Obligatorio
Cuatrimestre	Segundo
Idioma en que se imparte	Castellano
Requisitos previos	No existen
Dedicación al estudio por ECTS	25 horas

1.2. Equipo docente

Profesor/a	Dr. Juan José Galano Frutos <i>juanjose.galano@campusviu.es</i>
-------------------	---

1.3. Introducción a la asignatura

La asignatura se propone aportar a los estudiantes parte del conocimiento (know-how) así como algunas de las herramientas actuales más expandidas y versátiles utilizadas en el diseño, desarrollo y/o evaluación de nuevos compuestos con actividades terapéuticas potenciales y también en el estudio del efecto de variaciones genéticas en el fenotipo. La aplicación e importancia de las metodologías empleadas en el diseño de nuevos fármacos y en la predicción del efecto de mutaciones asociadas a enfermedades genéticas serán abordadas durante el transcurso de la asignatura, a través de sesiones teóricas (4), prácticas (5) y teórico-práctica (1) en las que se abordarán ejemplos interesantes y casos de estudio. La realización de las actividades previstas, en particular las de tipo práctica y teórico-práctica permitirá a los estudiantes afianzar los elementos teóricos estudiados y a la vez desarrollar habilidades en el manejo de una selección de herramientas bioinformáticas útiles.

1.4. Competencias

COMPETENCIAS BÁSICAS

CB6: 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.

CB7: 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

CB8: Que los 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.

CB9: Que los 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.

CB10: 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 ESPECÍFICAS DE LA ASIGNATURA

C.E.11.- Saber analizar los principales formatos de secuencias en la aplicación de datos ómicos.

C.E.12.- Ser capaz de extraer la información necesaria de las principales bases de datos de depósito de información biológica, mediante herramientas de automatización o scripting, en la resolución de problemas bioinformáticos.

C.E.22.- Saber aplicar herramientas avanzadas de química computacional, dinámica molecular y sus aplicaciones en bioinformática farmacológica.

2. Contenidos/temario

Tema 1. Química medicinal farmacológica

1.1. Fármacos

1.1.1. Índice terapéutico

1.1.2. Clasificación y nomenclatura de los fármacos

1.1.3. Regla de cinco de Lipinski. Otras reglas o pautas

1.1.4. Profármacos

1.2. Dianas terapéuticas (o farmacológicas)

1.2.1. Dianas terapéuticas a nivel molecular

1.3. Función de las proteínas

1.3.1. Enzimas, receptores, y otros blancos proteicos

1.3.2. Ensayos para medir el potencial terapéutico de compuestos

1.4. Identificación, diseño y optimización de fármacos

1.4.1. Descubrimiento de compuestos cabezas de serie

1.4.2. Métodos de cribado masivo o HTS

1.4.3. Aislamiento, purificación y resolución estructural

1.4.4. Diseño y optimización de candidatos a fármacos

1.5. Química combinatoria, síntesis paralela y análisis retrosintético

- 1.5.1 Química combinatoria
- 1.5.2 Síntesis paralela
- 1.5.3 Análisis retrosintético
- 1.6 Identificación, diseño y optimización de fármacos asistidos por ordenador
 - 1.6.1 Estructura molecular: representación, dibujo, estructura 3D, minimización
 - 1.6.2 Análisis conformacional
 - 1.6.3 Propiedades (descriptores) moleculares: cálculo in silico, programas y métodos
 - 1.6.4 Relación cuantitativa estructura-actividad. QSAR: tipos de QSAR, conceptos generales y metodología
 - 1.6.5 Comparación estructural: medidas de similitud en ligandos
 - 1.6.6 Identificación y diseño de farmacóforos 3D. Programas de modelado: LigandScout
 - 1.6.7 Bases de datos de ligandos. Cribado de bases de datos de ligandos
 - 1.6.8 Acoplamiento (o docking) de ligandos. Conceptos básicos, objetivos, tipos de docking, metodología y programas
 - 1.6.9 Diseño de novo de fármacos: principios básicos. Métodos basados en fragmentos de ligandos

Tema 2. Análisis conformacional: métodos de simulación molecular

- 2.1 Métodos de mecánica molecular
- 2.2 Simulación de dinámica molecular
 - 2.2.1 Objetivo y principios básicos
 - 2.2.2 Campos de fuerzas y modelos de solvente
 - 2.2.3 Metodología de la simulación de DM. Cajas de simulación y condiciones periódicas de contorno (PBC)
 - 2.2.4 Análisis de trayectorias de simulación
 - 2.2.5 Utilidad de AlphaFold en la aplicación de métodos de DM
 - 2.2.6 Dinámicas moleculares de relajación: análisis de estabilidad e interacción
 - 2.2.7 Aplicación al diseño y/u optimización de fármacos y al análisis del efecto de mutaciones a nivel molecular
- 2.3 Otros métodos de modelado conformacional
 - 2.3.1 El método de Monte Carlo
 - 2.3.2 Los métodos aleatorios y sistemáticos
 - 2.3.3 Los algoritmos genéticos

Tema 3. Predicción del fenotipo de variantes genéticas. Medicina personalizada

- 3.1 Variaciones genéticas: efecto a nivel molecular y funcional, criterios de clasificación y relación con enfermedades genéticas

3.2 Métodos de predicción del efecto de mutaciones y herramientas predictivas más

populares

3.3 PirePred: clasificación de mutaciones en un contexto estructural

3. Metodología

La metodología de la Universidad Internacional de Valencia (VIU) se caracteriza por una apuesta decidida en un modelo de carácter e-presencial. Así, siguiendo lo estipulado en el calendario de actividades docentes del Título, se impartirán en directo un conjunto de sesiones, que, además, quedarán grabadas para su posterior visionado por parte de aquellos estudiantes que lo necesitasen. En todo caso, se recomienda acudir, en la medida de lo posible, a dichas sesiones, facilitando así el intercambio de experiencias y dudas con el docente.

En lo que se refiere a las metodologías específicas de enseñanza-aprendizaje, serán aplicadas por el docente en función de los contenidos de la asignatura y de las necesidades pedagógicas de los estudiantes. De manera general, se impartirán contenidos teóricos y, en el ámbito de las clases prácticas se podrá realizar la resolución de problemas, el estudio de casos y/o la simulación.

Por otro lado, la Universidad y sus docentes ofrecen un acompañamiento continuo al estudiante, poniendo a su disposición foros de dudas y tutorías para resolver las consultas de carácter académico que el estudiante pueda tener. Es importante señalar que resulta fundamental el trabajo autónomo del estudiante para lograr una adecuada consecución de los objetivos formativos previstos para la asignatura.

4. Actividades formativas

Durante el desarrollo de cada una de las asignaturas se programan una serie de actividades de aprendizaje que ayudan a los estudiantes a consolidar los conocimientos trabajados.

A continuación, se relacionan las actividades que forman parte de la asignatura:

1. Actividades de carácter teórico

Se trata de un conjunto de actividades guiadas por el profesor de la asignatura destinadas a la adquisición por parte de los estudiantes de los contenidos teóricos de la misma. Estas actividades, diseñadas de manera integral, se complementan entre sí y están directamente relacionadas con los materiales teóricos que se ponen a disposición del estudiante (manual y material complementario).

2. Actividades de carácter práctico

Se trata de un conjunto de actividades guiadas y supervisadas por el profesor de la asignatura vinculadas con la adquisición por parte de los estudiantes de las competencias asociadas. Estas actividades, diseñadas con visión de conjunto, están relacionadas entre sí para ofrecer al estudiante una formación completa e integral.

3. Tutorías

Se trata de sesiones, tanto de carácter síncrono como asíncrono (e-mail), individuales o colectivas, en las que el profesor comparte información sobre el progreso académico del estudiante y en las que se resuelven dudas y se dan orientaciones específicas ante dificultades concretas en el desarrollo de la asignatura.

4. Trabajo autónomo

Se trata de un conjunto de actividades que el estudiante desarrolla autónomamente y que están enfocadas a lograr un aprendizaje significativo y a superar la evaluación de la asignatura. La realización de estas actividades es indispensable para adquirir las competencias y se encuentran entroncadas en el aprendizaje autónomo que consagra la actual ordenación de enseñanzas universitarias. Esta actividad, por su definición, tiene carácter asíncrono.

5. Prueba objetiva final

Como parte de la evaluación de cada una de las asignaturas (a excepción del Trabajo fin de Máster), se realiza una prueba objetiva (examen). Esta prueba se realiza en tiempo real (con los medios de control antifraude especificados) y tiene como objetivo evidenciar el nivel de adquisición de conocimientos y desarrollo de competencias por parte de los estudiantes. Esta actividad, por su definición, tiene carácter síncrono.

5. Evaluación

5.1. Sistema de evaluación

El Modelo de Evaluación de estudiantes en la Universidad se sustenta en los principios del Espacio Europeo de Educación Superior (EEES), y está adaptado a la estructura de formación virtual propia de esta Universidad. De este modo, se dirige a la evaluación de competencias.

Sistema de Evaluación	Ponderación
Portafolio*	70 %
<i>Se desarrolla a lo largo de todo el curso. Los elementos que componen esta evaluación son los trabajos que realizan los estudiantes en el marco de las clases prácticas (estudio de casos, resolución de problemas, revisión bibliográfica, simulación, trabajo cooperativo, diseño de proyectos, etc.).</i>	
Sistema de Evaluación	Ponderación
Prueba final*	30 %
<i>Valoración del nivel de adquisición por parte del estudiante de las competencias asociadas a la asignatura, empleando diversas tipologías de pregunta (preguntas de tipo test, preguntas de desarrollo, preguntas de respuesta breve o cualquier combinación de estas).</i>	

***Es requisito indispensable para superar la asignatura aprobar cada apartado (portafolio y prueba final) con un mínimo de 5.0 para ponderar las calificaciones.**

Los enunciados y especificaciones propias de las distintas actividades serán aportados por el docente, a través del Campus Virtual, a lo largo de la impartición de la asignatura.

Atendiendo a la Normativa de Evaluación de la Universidad, se tendrá en cuenta que la utilización de **contenido de autoría ajena** al propio estudiante debe ser citada adecuadamente en los trabajos entregados. Los casos de plagio serán sancionados con suspenso (0) de la actividad en la que se detecte. Asimismo, el uso de **medios fraudulentos durante las pruebas de evaluación** implicará un suspenso (0) y podrá implicar la apertura de un expediente disciplinario.

5.2. Sistema de calificación

La calificación de la asignatura se establecerá en los siguientes cálculos y términos:

Nivel de aprendizaje	Calificación numérica	Calificación cualitativa
Muy competente	9,0 - 10	Sobresaliente
Competente	7,0 - 8,9	Notable
Aceptable	5,0 -6,9	Aprobado
Aún no competente	0,0 -4,9	Suspenso

Sin detrimento de lo anterior, el estudiante dispondrá de una **rúbrica simplificada** en el aula que mostrará los aspectos que valorará el docente, como así también los **niveles de desempeño que tendrá en cuenta para calificar las actividades vinculadas a cada resultado de aprendizaje.**

La mención de «**Matrícula de Honor**» podrá ser otorgada a estudiantes que hayan obtenido una calificación igual o superior a 9.0. Su número no podrá exceder del cinco por ciento de los estudiantes matriculados en una materia en el correspondiente curso académico, salvo que el número de estudiantes matriculados sea inferior a 20, en cuyo caso se podrá conceder una sola «Matrícula de Honor».

6. Bibliografía

Gavernet, L. y Colectivo de autores (2021). Introducción a la Química Medicinal.

<https://libros.unlp.edu.ar/index.php/unlp/catalog/download/1627/1606/5240-1>

Yu, W., & MacKerell, A. D., Jr (2017). Computer-Aided Drug Design Methods. Methods in

Molecular Biology (Clifton, N.J.), 1520, 85–106. https://doi.org/10.1007/978-1-4939-6634-9_5

Lill, M. A. (Ed.). (2013). In silico drug discovery and design. Future Science Ltd.

Young, D. C., & Nelson, C. M. M. S. L. (2009). Computational drug design: A guide for computational and medicinal chemists. John Wiley & Sons, Incorporated.

Leach, A. R. (2001). Molecular Modelling: Principles and Applications, 2nd Ed. Pearson

Education Ltd, England. <https://chz276.ust.hk/public/Cloud::siqin/References/From-MD-toMSM/Molecular%20Modelling%20Principles%20and%20Applications.pdf>

Jain, K. K. (2015). Textbook of Personalized Medicine (eBook), 2nd Ed. Humana Press,

Switzerland. <https://pdfroom.com/books/textbook-of-personalized-medicine/eKRd66rAdZp>