



Guía de Asignatura

ASIGNATURA: *Proteómica y Bioinformática Estructural*

Título: *Máster Universitario en Bioinformática*

Materia: *Bioinformática estructural*

Créditos: *6 ECTS*

Código: *07MBIF*

Índice

1.	Organización general.....	3
1.1.	Datos de la asignatura	3
1.2.	Introducción a la asignatura	3
1.3.	Competencias y resultados de aprendizaje	3
2.	Contenidos/temario	4
3.	Metodología	7
4.	Actividades formativas	7
5.	Evaluación	10
5.1.	Sistema de evaluación	10
5.2.	Sistema de calificación.....	11
6.	Bibliografía	11

1. Organización general

1.1. Datos de la asignatura

TITULACIÓN	<i>Máster Universitario en Bioinformática</i>
ASIGNATURA	<i>Proteómica y Bioinformática Estructural</i>
CÓDIGO - NOMBRE ASIGNATURA	<i>07MBIF_ Proteómica y Bioinformática Estructural</i>
Carácter	Obligatorio
Cuatrimestre	Segundo
Idioma en que se imparte	Castellano
Requisitos previos	No existen
Dedicación al estudio por ECTS	25 horas

1.2. Introducción a la asignatura

Esta asignatura conforma la materia de Bioinformática Estructural del Máster en Bioinformática. La asignatura introduce los conceptos y metodologías básicas en proteómica y bioinformática estructural, tales como: caracterización, identificación y cuantificación de la expresión diferencial de proteínas, proteómica estructural, modelización comparativa de proteínas, interactómica y modelización de interacciones entre proteínas.

1.3. Competencias y resultados de aprendizaje

COMPETENCIAS (C)

C10 Saber aplicar herramientas bioinformáticas avanzadas en el análisis de expresión génica, de poblaciones y de expresión diferencial de proteínas en datos ómicos.

C11 Saber aplicar herramientas computacionales avanzadas de identificación, caracterización y modelado comparativo de proteínas.

HABILIDADES O DESTREZAS (H)

H03 Ser capaz de seleccionar las técnicas bioestadísticas adecuadas para el análisis en bioinformática.

H04 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.

CONOCIMIENTOS O CONTENIDOS (CC)

CC02 Saber analizar los principales formatos de secuencias en la aplicación de datos ómicos.

2. Contenidos/temario

Tema 1. Introducción a la proteómica

- 1.1. Química de proteínas: aspectos básicos
 - 1.1.1. Aminoácidos
 - 1.1.2. Cadena polipeptídica
 - 1.1.3. Expresión y síntesis de proteínas
 - 1.1.4. Modificaciones postraduccionales
 - 1.1.5. Función de las proteínas
- 1.2. De la química de proteínas a la proteómica
- 1.3. Información proteómica: aplicaciones
- 1.4. Metodologías usadas en proteómica
 - 1.4.1. Caracterización cualitativa y cuantitativa de la expresión de proteínas
 - 1.4.2. Caracterización estructural del proteoma (proteómica estructural)
 - 1.4.3. Modificaciones postraduccionales
 - 1.4.4. Proteómica funcional: *microarrays*
 - 1.4.5. Proteómica funcional: interactómica
- 1.5. Bioinformática y proteómica

Tema 2. Métodos en proteómica: caracterización de la expresión de proteínas

- 2.1. Separación o fraccionamiento de proteínas
 - 2.1.1. Métodos de fraccionamiento mediante electroforesis
 - 2.1.2. Métodos de fraccionamiento por cromatografía
- 2.2. Caracterización e identificación de proteínas
 - 2.2.1. Espectrometría de masas
 - 2.2.2. Aplicación en combinación con métodos de fraccionamiento
- 2.3. Cuantificación y expresión diferencial de proteínas
- 2.4. Análisis computacional de datos en proteómica
 - 2.4.1. Bases de datos de proteínas
 - 2.4.2. Interpretación de datos de electroforesis
 - 2.4.3. Interpretación de experimentos de MS

Tema 3. Proteómica estructural

- 3.1. Aspectos estructurales de las proteínas: niveles de organización
 - 3.1.1. Estructura primaria
 - 3.1.2. Estructura secundaria
 - 3.1.3. Estructura terciaria
 - 3.1.4. Estructura cuaternaria

- 3.2. Métodos de caracterización estructural en proteómica
 - 3.2.1. Determinación de la estructura 3D de proteínas
 - 3.2.2. Métodos de determinación estructural a escala proteómica
 - 3.2.3. Caracterización estructural de péptidos mediante MS
- 3.3. Servidores y bases de datos en proteómica estructural
- 3.4. Bioinformática estructural

Tema 4. Modelización estructural de proteínas

- 4.1. Modelización por homología
 - 4.1.1. Homología de proteínas: conceptos básicos
 - 4.1.2. Identificación de proteínas plantilla (*templates*)
 - 4.1.3. Construcción del modelo: cadena principal
 - 4.1.4. Construcción del modelo: cadenas laterales
 - 4.1.5. Evaluación del modelo
 - 4.1.6. Validación de los métodos de modelización
 - 4.1.7. Aplicación a proteómica
- 4.2. Modelización por reconocimiento del plegamiento
 - 4.2.1. Reconocimiento del plegamiento: conceptos básicos
 - 4.2.2. Potenciales estadísticos
 - 4.2.3. Reconocimiento de homología remota
 - 4.2.4. Predicción de estructura secundaria
- 4.3. Modelización ab initio
 - 4.3.1. Métodos de modelización ab initio basados en principios físicos
 - 4.3.2. Métodos empíricos de modelización ab initio
 - 4.3.3. Métodos basados en inteligencia artificial

Tema 5. Interactómica

- 5.1. Redes de interacciones entre proteínas
 - 5.1.1. Identificación de interacciones entre proteínas
 - 5.1.2. Bases de datos de interacciones entre proteínas
 - 5.1.3. Predicción computacional de interacciones
 - 5.1.4. Análisis de redes de interacciones
- 5.2. Caracterización biofísica y estructural del interactoma
 - 5.2.1. Tipos de complejos
 - 5.2.2. Aspectos termodinámicos y cinéticos: mecanismo de unión
 - 5.2.3. Interactoma estructural
- 5.3. Métodos de modelización estructural de interacciones
 - 5.3.1. Modelización comparativa
 - 5.3.2. Modelización ab initio

Tema 6. Modelización de interacciones por docking

- 6.1. Búsqueda de orientaciones entre proteínas
 - 6.1.1. Búsqueda sistemática: métodos basados en FFT
 - 6.1.2. Búsqueda sistemática: *geometric hashing*
 - 6.1.3. Búsqueda estocástica: optimización energética
- 6.2. Puntuación de modelos de docking
 - 6.2.1. Funciones de puntuación específicas para cada método de docking
 - 6.2.2. Funciones de puntuación de docking de aplicación general
 - 6.2.3. Optimización de funciones de puntuación de docking
 - 6.2.4. Integración de información externa en la puntuación de docking
- 6.3. Flexibilidad conformacional en docking
 - 6.3.1. Refinado de modelos de docking
 - 6.3.2. Docking flexible
 - 6.3.3. Ensamblados conformaciones precalculados
- 6.4. Evaluación de las predicciones de docking
 - 6.4.1. Evaluación de la calidad de los modelos
 - 6.4.2. Evaluación de métodos de docking en conjuntos de pruebas
 - 6.4.3. CAPRI: evaluación objetiva de métodos de docking

Tema 7. Modelización de interacciones: otros aspectos

- 7.1. Predicción de regiones de interacción
 - 7.1.1. Características de las superficies de interacción en proteínas
 - 7.1.2. Predicción de regiones de interacción: análisis de la superficie
 - 7.1.3. Predicción de regiones de interacción mediante docking
- 7.2. Identificación de residuos energéticamente relevantes (*hot-spots*)
 - 7.2.1. Caracterización de hot-spots en superficies de interacción
 - 7.2.2. Métodos de predicción de hot-spots
 - 7.2.3. Identificación de hot-spots mediante docking
- 7.3. Interpretación molecular del impacto de mutaciones
 - 7.3.1. Mutaciones en interacciones entre proteínas
 - 7.3.2. Predicción del impacto energético de mutaciones
- 7.4. Plegamiento inverso
- 7.5. Aplicaciones en biomedicina
 - 7.5.1. Interacciones entre proteínas como dianas terapéuticas
 - 7.5.2. Mutaciones patológicas en interacciones entre proteínas

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 necesiten. 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

La metodología VIU, basada en la modalidad virtual, se concreta en una serie de actividades formativas y metodologías docentes que articulan el trabajo del estudiante y la docencia impartida por los profesores.

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 en cada una de las asignaturas.

A continuación, listamos las actividades genéricas que podrán formar parte de cada asignatura:

1. Actividades de carácter teórico

Se trata de un conjunto de actividades supervisadas 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, SCORM y material complementario). Estas actividades se desglosan en las siguientes categorías:

- a. **Clases expositivas:** sesiones de carácter síncrono en las que el profesor, a través de metodologías como la lección magistral o la lección magistral participativa, expone a los estudiantes los fundamentos teóricos de la asignatura. Estas asignaturas se programan en el calendario académico y en cada una de ellas se abordan contenidos específicos del temario.
- b. **Sesiones con expertos en el aula:** sesiones de carácter síncrono en las que un experto externo a la Universidad acude a presentar algún contenido teórico-

práctico directamente vinculado con el temario de la asignatura. Estas sesiones permiten acercar al estudiante a la realidad de la disciplina en términos no sólo profesionales, sino también académicos. Todas estas sesiones se sustentan en contenidos previamente explicados en las clases expositivas.

- c. **Observación y evaluación de recursos didácticos audiovisuales:** se trata de sesiones expositivas grabadas, impartidas por docentes de la Universidad o por expertos externos, directamente vinculadas con el contenido teórico-práctico de la asignatura. Su visualización es necesaria para adquirir los conocimientos asociados a la asignatura. Tras la visualización de cada recurso, el estudiante debe realizar una breve prueba de comprensión. Esta actividad, por su definición, tiene carácter asíncrono.
- d. **Estudio y seguimiento de material interactivo:** esta actividad refleja el número de horas destinadas por el estudiante al estudio y seguimiento de material interactivo (SCORM o recursos similares). Este contenido es complementario a las clases expositivas y permite afianzar la adquisición de conocimientos. Su seguimiento puede ser controlado a través de las funcionalidades del Campus Virtual, identificando el número de horas dedicadas por el estudiante. Esta actividad, por su definición, tiene carácter asíncrono.

2. Actividades de carácter práctico

Se trata de un conjunto de actividades supervisadas por el profesor de la asignatura vinculadas con la adquisición por parte de los estudiantes de los resultados de aprendizaje y competencias de carácter más práctico. Estas actividades, diseñadas con visión de conjunto, están relacionadas entre sí para ofrecer al estudiante una formación completa e integral. Esta categoría se desglosa en el siguiente conjunto de actividades:

- a. **Clases prácticas:** sesiones de trabajo síncronas en las que el profesor desarrolla junto con los alumnos actividades prácticas que se basan en los fundamentos teóricos vistos en las clases expositivas. En términos generales, su desarrollo consta de las siguientes fases, pudiéndose adaptar en función de las necesidades docentes:
 - i. La primera fase se desarrolla en la sala principal de la videoconferencia, donde el profesor plantea la actividad.
 - ii. A continuación, divide a los alumnos en grupos de trabajo a través de las salas colaborativas y se comienza con la actividad. En esta fase el profesor va entrando en cada sala colaborativa rotando los grupos para resolver dudas, dirigir el trabajo o dar el feedback oportuno. Los alumnos también tienen posibilidad de consultar al profesor en el momento que consideren necesario.
 - iii. La tercera fase también se desarrolla en la sala principal y tiene como objetivo mostrar el ejercicio o explicar con ejemplos los resultados obtenidos. Por último, se ponen en común las conclusiones de la actividad realizada.

Se contemplan, de manera general, cuatro tipos de clases prácticas, cuyo contenido se ajusta posteriormente a las particularidades de cada uno de los programas formativos (la selección de actividades para cada materia figura en la ficha de cada una de ellas):

- i. **Estudio de casos:** El estudio de casos facilita el aprendizaje por descubrimiento, el estudiante asume el papel de protagonista activo de su propio aprendizaje, potenciando la adquisición de las competencias asignadas a la asignatura mediante el estímulo de hacer preguntas y formular sus propias respuestas así como a deducir principios de ejemplos prácticos o experiencias.
 - ii. **Resolución de problemas:** El estudiante resuelve cuestiones planteadas por el profesor que tienen como base una situación concreta. Mediante esta actividad formativa se desarrollan habilidades y capacidades de aprendizaje autónomo ideando estrategias que permitan obtener una solución.
 - iii. **Laboratorio informático virtual:** En esta actividad, el estudiante resuelve cuestiones y simula situaciones y casos prácticos con la ayuda de herramientas informáticas virtuales.
- b. **Prácticas observacionales:** se trata de sesiones de prácticas grabadas, impartidas por un docente de la Universidad o por un experto (según su finalidad), que permiten ilustrar con ejemplos aún más concretos los contenidos abordados en las sesiones de clases prácticas. Estas sesiones, desarrolladas en formato tutorial, ofrecen al alumno un nutrido conjunto de ejemplos para trabajar a la vez que sigue la exposición del docente. Su visualización es obligatoria para poder abordar adecuadamente las actividades del portafolio. En este sentido, la plataforma virtual de la Universidad permite comprobar qué alumnos no hacen seguimiento de esta actividad formativa. Esta actividad, por su definición, tiene carácter asíncrono.
- c. **Actividades de seguimiento de la asignatura:** se trata de un conjunto de actividades de evaluación continua que permiten al profesor testar el avance del estudiante en la adquisición de los resultados de aprendizaje previstos, especialmente de aquellos de carácter práctico. Estas actividades, entre otras, pueden ser de la siguiente naturaleza: exposiciones de trabajos, actividades vinculadas a las clases prácticas (resúmenes, mapas conceptuales, one minute paper, etc.), pruebas de seguimiento intermedias (test de autoevaluación, etc.), desarrollo de un cuaderno reflexivo de la asignatura, etc. Estas actividades serán seleccionadas por el profesor en función de las necesidades docentes. Esta actividad, por su definición, tiene carácter asíncrono.

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 alumno y en las que se resuelven dudas y se dan orientaciones específicas ante dificultades concretas en el desarrollo de la asignatura. Tal y como se ha indicado, se realizan a través de videoconferencia y e-mail. El plazo máximo de respuesta del profesor está establecido en 48h.

Se computan una serie de horas estimadas, pues, aunque existen sesiones comunes para todos los estudiantes, éstos posteriormente pueden solicitar al docente tantas tutorías como estimen necesarias.

Dado el carácter mixto de esta actividad formativa, se computa un porcentaje de presencialidad estimado del 30%.

4. Trabajo autónomo

Se trata de un conjunto de actividades que el alumno 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. Esta categoría se desglosa en el siguiente conjunto de actividades:

- a. **Lectura, análisis y estudio del manual de la asignatura:** actividad en la que el estudiante estudia el manual de la asignatura proporcionado por la Universidad a fin de adquirir los contenidos que luego deberá demostrar en la prueba (examen final).
- b. **Lectura, análisis y estudio de material complementario:** actividad en la que el estudiante lee, analiza y estudia el material complementario facilitado por el docente de la asignatura (bibliografía adicional, lecturas, etc.).
- c. **Desarrollo de actividades del portafolio:** actividad compuesta por un conjunto de horas que el alumno dedica a desarrollar las actividades que componen el portafolio.
- d. **Trabajo cooperativo:** en esta actividad, el estudiante, junto con otros compañeros, trabajan conjuntamente para la realización de actividades grupales del portafolio, estudio conjunto, compartición de experiencias, etc. Esta actividad puede articularse mediante videoconferencias, foros o cualquier otro medio que favorezca la interacción de los estudiantes.

5. Prueba objetiva final

Como parte de la evaluación de cada una de las asignaturas (a excepción de las prácticas y el Trabajo fin de título), se realiza una prueba (examen final). 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*	60 %
Sistema de Evaluación	Ponderación
Prueba final*	40 %

***Es requisito indispensable para superar la asignatura aprobar cada apartado (portafolio y prueba final) con un mínimo de 5 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. 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

Gómez-Moreno Calera, C. (2004). Estructura de proteínas. Barcelona, Spain: Editorial Ariel.

- Mishra, N. C. (2010). Introduction to proteomics : Principles and applications. John Wiley & Sons, Incorporated.
- Orengo, C. A., & Bateman, A. (Eds.). (2014). Protein families: Relating protein sequence, structure, and function. John Wiley & Sons, Incorporated.
- Perez-Riverol, Y., Csordas, A., Bai, J., Bernal-Llinares, M., Hewapathirana, S., Kundu, D. J., Inuganti, A., Griss, J., Mayer, G., Eisenacher, M., Pérez, E., Uszkoreit, J., Pfeuffer, J., Sachsenberg, T., Yilmaz, S., Tiwary, S., Cox, J., Audain, E., Walzer, M., [...] Vizcaíno, J. A. (2019). The PRIDE database and related tools and resources in 2019: improving support for quantification data. *Nucleic Acids Research*, 47, D442-D450.
- Rangwala, H., & Karypis, G. (Eds.). (2010). Introduction to protein structure prediction: Methods and algorithms. John Wiley & Sons, Incorporated.
- The UniProt Consortium. (2019) UniProt: a worldwide hub of protein knowledge. *Nucleic Acids Research*, 47, D506-D515.
- Mistry, J., Chuguransky, S., Williams, L., Qureshi, M., Salazar, G.A., Sonnhammer, E.L.L., Tosatto, S.C.E., Paladin, L., Raj, S., Richardson, L.J., Finn, R.D., y Bateman, A. (2020) Pfam: The protein families database in 2021. *Nucleic Acids Research*, 49, D412-D419.
- Porta-Pardo, E., Ruiz-Serra, V., Valentini, S., y Valencia, A. (2022). The structural coverage of the human proteome before and after AlphaFold. *PLoS Computational Biology*, 18, e1009818.