



# Guía de Asignatura

## **ASIGNATURA: *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.	Introducción a la asignatura .....	3
1.3.	Competencias y resultados de aprendizaje .....	3
2.	Contenidos/temario .....	4
3.	Metodología .....	5
4.	Actividades formativas .....	6
5.	Evaluación .....	9
5.1.	Sistema de evaluación .....	9
5.2.	Sistema de calificación.....	10
6.	Bibliografía .....	10

# 1. Organización general

## 1.1. Datos de la asignatura

<b>TITULACIÓN</b>	<i>Máster Universitario en Bioinformática</i>
<b>ASIGNATURA</b>	<i>Bioinformática Farmacológica</i>
<b>CÓDIGO - NOMBRE ASIGNATURA</b>	<i>08MBIF_ Bioinformática Farmacológica</i>
<b>Carácter</b>	Obligatorio
<b>Cuatrimestre</b>	Segundo
<b>Idioma en que se imparte</b>	Castellano
<b>Requisitos previos</b>	No existen
<b>Dedicación al estudio por ECTS</b>	<b>25 horas</b>

## 1.2. 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.

## 1.3. Competencias y resultados de aprendizaje

### COMPETENCIAS (C)

C12: Saber aplicar herramientas avanzadas de química computacional, dinámica molecular y sus aplicaciones en bioinformática farmacológica.

### HABILIDADES O DESTREZAS (H)

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. 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

## **Tema 4. Seguridad *in silico*. Predicciones computacionales toxicológicas en el ámbito farmacológico**

- 4.1 Necesidad de aproximaciones *in silico* en seguridad farmacológica
- 4.2 Modelos *in silico* en el ámbito de la seguridad farmacológica
- 4.3 Herramienta OECD QSAR Toolbox

# **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

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

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](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>