

Guía Docente

DATOS DE IDENTIFICACIÓN

Titulación:	Experto en Innovación Farmacéutica (Título Propio asociado a Farmacia)		
Facultad/Escuela:	Ciencias Experimentales		
Asignatura:	Bioinformática y Modelización en el Diseño de Fármacos		
Tipo:	Propia Obligatoria	Créditos ECTS:	3
Curso:	3	Código:	25214
Periodo docente:	Quinto semestre		
Tipo de enseñanza:	Presencial		
Idioma:	Castellano		
Total de horas de dedicación del alumno:	75		

Equipo Docente	Correo Electrónico
Carlo Bressa	carlo.bressa@ufv.es

DESCRIPCIÓN DE LA ASIGNATURA

Los continuos avances en tecnologías de la información han propiciado en las últimas décadas la incorporación progresiva de métodos de cálculo complejos a las diferentes áreas de la farmacología que están implicadas directamente en el descubrimiento, desarrollo y el reposicionamiento de fármacos. En esta asignatura confluye un repertorio de técnicas desarrolladas fundamentalmente en los ámbitos de la bioinformática estructural y la química computacional. Si bien éstas toman a su vez elementos teóricos, datos experimentales y metodologías procedentes de otros ámbitos de la investigación (biología estructural, física, estadística, etc), su aplicación al campo del modelado de fármacos es genuina e inseparable.

Uno de los aspectos esenciales de la formación ofrecida en la asignatura consiste en aprender a generar modelos de interacción molecular entre proteínas y ligandos (substratos e inhibidores fisiológicos, fármacos, posibles cabezas de serie, etc). De forma simultánea, también se estudian los fundamentos teóricos subyacentes a las técnicas de modelado, simulación, clasificación y predicción utilizadas. Como en cualquier ámbito de la investigación, resulta esencial trasladar el pensamiento racional crítico a los modelos generados con el fin de comprender sus limitaciones y el alcance predictivo.

De manera complementaria, a lo largo de la asignatura se promoverá la importancia de incorporar los modelos estructurales teóricos a los proyectos de diseño de fármacos y de selección de nuevas dianas, así como a los procesos traslacionales de proyectos relacionados con el ámbito de la asignatura.

OBJETIVO

El objetivo final de la asignatura es adquirir conocimientos y habilidades para la comprensión y el manejo de las técnicas computacionales básicas para el modelado de biomoléculas con aplicación en el diseño de fármacos.

Los fines específicos de la asignatura son:

- Comprender los principios y metodologías generales utilizadas en la investigación computacional en bioinformática y modelado molecular.
- Proporcionar al alumno los fundamentos de la construcción de modelos de estructuras moleculares de nuevas dianas terapéuticas.
- Modelar y analizar correctamente interacciones proteína-ligando.

CONOCIMIENTOS PREVIOS

Es aconsejable que el alumno tenga una sólida base de conocimientos fundamentales de química orgánica, bioquímica, física, matemáticas y estadística. En paralelo, es aconsejable un nivel de competencia alto (i) en lengua inglesa y (ii) en ofimática y hojas de cálculo al nivel de usuario.

CONTENIDOS

- Tema 1. Introducción a la bioinformática y el modelado molecular.
- Tema 2. Fundamentos de sistemas y bases de datos en bioinformática.
- Tema 3. Métodos de análisis de secuencias de proteínas y ácidos nucleicos.
- Tema 4. Análisis estructural de macromoléculas.
- Tema 5. Interacciones proteína-ligando y acoplamiento molecular (docking)
- Tema 6. Microbiota: descripción taxonómica

ACTIVIDADES FORMATIVAS

La metodología de enseñanza+aprendizaje en la asignatura se llevará a cabo mediante las siguientes actividades formativas (AF) de carácter obligatorio:

- AF1. Sesiones de clase magistral expositiva y participativa.
- AF2. Sesiones de clase práctica participativa.
- AF3. Realización de trabajos prácticos.
- AF4. Preparación y presentación de seminarios.
- AF5. Tutorías.

TUTORÍAS

- Al inicio del curso, el profesor informará del horario de tutorías y quedará accesible en el aula virtual. También podrá consultarse en la coordinación del grado.

OTROS

“Las actividades formativas, así como la distribución de los tiempos de trabajo, pueden verse modificadas y

adaptadas en función de los distintos escenarios establecidos siguiendo las indicaciones de las autoridades sanitarias”

DISTRIBUCIÓN DE LOS TIEMPOS DE TRABAJO

ACTIVIDAD PRESENCIAL	TRABAJO AUTÓNOMO/ACTIVIDAD NO PRESENCIAL
30 horas	45 horas

COMPETENCIAS

Conocer y manejar los fundamentos de computación y bases de datos científicas necesarios para llevar a cabo proyectos de modelado molecular.

Comprender y manejar los métodos bioinformáticos básicos utilizados en proyectos de modelización de estructuras, aplicados al diseño de fármacos.

Integra correctamente los métodos e información necesarios para el análisis y predicción de estructura de proteínas

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Maneja las bases de datos necesarias para los procesos de modelado molecular.

Analiza e interpreta correctamente estructuras moleculares complejas.

Maneja herramientas habituales utilizadas en el diseño asistido por ordenador

Interpreta correctamente modelos de interacción proteína-ligando.

Analiza e interpreta correctamente artículos científicos originales relacionados con los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura.

SISTEMA DE EVALUACIÓN DEL APRENDIZAJE

La evaluación general se basa en comprobar si el alumno ha asimilado y comprendido los conceptos fundamentales de la asignatura, así como su capacidad de razonamiento con el manejo de herramientas y datos experimentales para elaborar análisis bioinformáticos y modelos computacionales relacionados con el modelado de fármacos. La asignatura se aprobará obteniendo en todas y cada una de las calificaciones (CAL, desglosadas en este apartado de la Guía Docente) una puntuación mínima de 5, en cualquier convocatoria.

CONVOCATORIA ORDINARIA

La nota final se compondrá de las siguientes calificaciones, según los porcentajes indicados:

- CAL1 (50%): examen único (escrito u oral) sobre los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura. Basado en preguntas de tipo test y/o de respuesta corta y/o de desarrollo.
- CAL2 (35%): trabajos prácticos individuales o en grupo (criterio nota: media aritmética). El grado de aprendizaje del alumno sobre los trabajos entregados podrá ser evaluado mediante examen escrito u oral independiente de CAL1.
- CAL3 (15%): evaluación del contenido de los trabajos prácticos, seminarios, participación (criterio nota: media aritmética). El grado de aprendizaje del alumno sobre los trabajos entregados podrá ser evaluado mediante examen escrito u oral independiente de CAL1.

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

Si el alumno no superase alguna de las calificaciones estipuladas en la convocatoria ordinaria, deberá acudir a la

extraordinaria con esa(s) parte(s).

- En el supuesto de no superar CAL1, el alumno deberá realizar un único examen sobre los mismos contenidos que en la convocatoria ordinaria.
- En el supuesto de no superar CAL2, el alumno deberá entregar para ser calificados todos los trabajos solicitados durante el curso y realizar un examen práctico sobre los contenidos formales de dicho(s) trabajo(s).
- En el supuesto de no superar CAL3, el alumno deberá entregar para ser calificados todos los trabajos solicitados durante el curso y realizar un examen sobre el contenido específico de los mismos.

EXÁMENES Y PRUEBAS PARCIALES

- "Los exámenes serán presenciales siempre y cuando la situación sanitaria lo permita."
- Existe la posibilidad de plantear pruebas parciales. La inclusión de las calificaciones de dichas pruebas parciales en CAL1/CAL2 queda a criterio del profesor. El carácter liberatorio o eximente de las pruebas queda también a criterio del profesor. Los criterios se comunicarán con antelación suficiente a todos los alumnos.

SISTEMA DE EVALUACIÓN ALTERNATIVO

Se podrá aplicar un sistema de evaluación alternativo a alumnos repetidores que no se acojan al sistema ordinario de evaluación por no poder asistir a las clases de forma regular. Los alumnos en 2ª o sucesivas matrículas deben contactar con el profesor a lo largo de los 5 primeros días del curso para solicitar acogerse a este sistema e informarse de los criterios de evaluación específicos de su caso. La nota final se compondrá de las siguientes calificaciones, según los porcentajes indicados:

- CAL1 (50%): examen único (escrito u oral) sobre los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura. Basado en preguntas de tipo test y/o de respuesta corta y/o de desarrollo.
- CAL2 (35%): trabajos prácticos individuales o en grupo (criterio nota: media aritmética). El grado de aprendizaje del alumno sobre los trabajos entregados podrá ser evaluado mediante examen escrito u oral independiente de CAL1.
- CAL3 (15%): evaluación del contenido de los trabajos prácticos, seminarios, participación (criterio nota: media aritmética). El grado de aprendizaje del alumno sobre los trabajos entregados podrá ser evaluado mediante examen escrito u oral independiente de CAL1.

SISTEMA DE EVALUACIÓN ALTERNATIVO COVID

En el supuesto caso de que, debido a una emergencia sanitaria, sea necesario modificar la actividad docente siguiendo las indicaciones de las autoridades competentes, los porcentajes de evaluación descritos para la asignatura se mantendrán. Los exámenes serán presenciales siempre y cuando la situación sanitaria lo permita. Las conductas de plagio, así como el uso de medios ilegítimos en las pruebas de evaluación, serán sancionados conforme a lo establecido en la Normativa de Evaluación y la Normativa de Convivencia de la universidad.

PLAZOS DE PRESENTACIÓN DE TRABAJOS

El tiempo destinado para la realización y entrega de trabajos será anunciado en el aula virtual con antelación suficiente. Los trabajos (1) no entregados o (2) entregados fuera de plazo no serán evaluados y se calificarán con cero.

OTROS

En el caso de impartirse la docencia exclusivamente en remoto (sólo por razones de seguridad sanitaria), se mantendrá el sistema de evaluación.

CRITERIOS GENERALES DE VALORACIÓN DE ACTIVIDADES

En la calificación de exámenes y trabajos se valorará la corrección técnica y científica de la producción original del alumno, así como su capacidad expresiva y corrección idiomática. Para ello se tendrá en cuenta (1) la propiedad del vocabulario y la sintaxis, (2) la corrección formal de esquemas, tablas y referencias, (3) la adecuada presentación general. En el caso particular de trabajos escritos, la sola presentación de resultados copiados de programas de cálculo o de recursos/servicios bioinformáticos de uso público en internet no implica obtener un aprobado. Para aprobar dichos trabajos será indispensable que el alumno contribuya de forma original a la producción sujeta a evaluación.

EXCEPCIÓN: el incorrecto uso y/o grafía de acrónimos propios de la materia tratada en la asignatura podrá suponer la calificación de suspenso en la(s) parte(s) afectada(s). Igualmente, el uso incorrecto de términos científicos y técnicos podrá suponer la calificación de suspenso en la(s) parte(s) afectada(s).

BIBLIOGRAFÍA Y OTROS RECURSOS

Básica

"Advanced Concepts in Structural Bioinformatics: Structural Bioinformatics", Philip E. Bourne (Ed.) & Helgeweissig (Ed.). ISBN: 978-0-471-20199-1

"Introduction to Bioinformatics", Arthur Lesk, 4th Edition, 2014, ISBN: 978-0199651566

"Computational Drug Design: A Guide for Computational and Medicinal Chemists", David Young, Wiley, 2009, ISBN: 978-0-470-12685-1

Artículos de investigación anunciados a lo largo del curso.

Complementaria

"Practical Computing for Biologists", Steven Haddock & Casey Dunn, ISBN: 9780878933914

Lista de revistas recomendadas:

- Nature Reviews Drug Discovery
- Journal of the American Chemical Society
- Journal of Biological Chemistry
- Journal of Medicinal Chemistry
- Journal of Molecular Modeling
- Journal of Molecular Graphics and Modelling
- Journal of Chemical Information and Modeling
- Chemical Biology & Drug Design