

DATOS DE IDENTIFICACIÓN

Titulación:	Master Universitario en Bioinformática y Análisis de Datos Biomédicos		
Ámbito	Biología y genética		
Facultad/Escuela:	Escuela de Postgrado y Formación Permanente		
Asignatura:	Docking		
Tipo:	Obligatoria	Créditos ECTS:	3
Curso:	1	Código:	8992
Periodo docente:	Primer semestre		
Materia:	Bioinformática II		
Módulo:			
Tipo de enseñanza:	Presencial		
Idioma:	Castellano		
Total de horas de dedicación del alumno:	75		
Equipo Docente	Correo Electrónico		
Jesús Mendieta Gómez	j.mendieta.prof@ufv.es		

DESCRIPCIÓN DE LA ASIGNATURA

El docking se centra en predecir y analizar las interacciones entre una molécula pequeña (ligando) y una macromolécula, como una proteína (receptor). Se utiliza ampliamente en el descubrimiento de fármacos y la investigación de interacciones molécula-receptor, donde se busca identificar moléculas candidatas que puedan unirse selectivamente a una proteína objetivo.

OBJETIVO

El objetivo de esta asignatura es que el alumno sepa encontrar la orientación y la conformación más favorable del ligando en el sitio activo del receptor, lo que podría implicar la formación de un complejo estable.

CONOCIMIENTOS PREVIOS

Es recomendable tener una base sólida en biología molecular, química y bioinformática. Además de estos conocimientos fundamentales, es beneficioso tener una comprensión general de los principios de diseño de fármacos y la relación estructura-actividad. Esto implica conocer los conceptos de moléculas pequeñas, ligandos, interacciones fármaco-receptor y propiedades farmacológicas.

CONTENIDOS

Estudio del acoplamiento molecular.
Estudio de interacciones entre moléculas.
Búsqueda en bases de datos específicas.
Procesamiento de datos y diseño de moléculas bioactivas.

ACTIVIDADES FORMATIVAS

AF1 - Clases presenciales (clases magistrales, seminarios y mesas redondas, exposición de trabajos, etc....)
AF2 - Tutorías individuales y/o en grupo
AF3 - Clases prácticas en aula con portátiles y/o aula informática
AF4 - Aula Virtual (foros; entrega de tareas, trabajos individuales y/o grupales; material de estudio)

DISTRIBUCIÓN DE LOS TIEMPOS DE TRABAJO

ACTIVIDADES FORMATIVAS DIRIGIDAS POR EL PROFESOR	TRABAJO AUTÓNOMO
25 Horas	50 Horas

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Utilizar las principales aplicaciones informáticas disponibles para el diseño de fármacos y los protocolos de Drug Discovery.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPECÍFICOS

Comprender los principios y conceptos fundamentales detrás del docking.

Comprender y manejar las herramientas de docking.

Analizar e interpretar los resultados del docking.

SISTEMA DE EVALUACIÓN DEL APRENDIZAJE

Todos los exámenes en convocatoria ordinaria y extraordinaria se realizarán de forma presencial, siempre y cuando la situación sanitaria lo permita. En caso de que las recomendaciones sanitarias nos obliguen a volver a un escenario de docencia en remoto los pesos del sistema de evaluación no se verán afectados. El examen presencial se sustituirá por un examen en remoto con herramientas que garanticen la autenticidad de la prueba. En cualquier convocatoria, sistema de evaluación o situación sanitaria, la asignatura se supera obteniendo una puntuación mínima de 5 en las calificaciones CAL1 y CAL2 descrita en los siguientes apartados:

CONVOCATORIA ORDINARIA:

CAL1 - Pruebas y exámenes de contenido teórico y/o práctico: 50%

CAL2 - Trabajos, proyectos y resolución de casos prácticos: 40%

CAL3 - Participación en clases teóricas y prácticas, aula virtual, tutorías: 10%

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA:

Como norma general se conservarán las calificaciones de las distintas partes aprobadas en la convocatoria ordinaria. En el supuesto de no haber superado una o más partes de la asignatura en convocatoria ordinaria:

CAL1 - Se realizará un nuevo examen de contenido teórico y/o práctico: 50%

CAL2 - Se volverán a presentar los trabajos, proyectos y resolución de casos prácticos suspensos realizados durante el semestre: 40%

CAL3 – Se mantendrá la evaluación obtenida en la Convocatoria Ordinaria.

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 entregados fuera de plazo serán calificados con cero.

CRITERIOS GENERALES DE VALORACIÓN DE ACTIVIDADES

“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.”

USO ÉTICO Y RESPONSABLE DE LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL

1.- El régimen de uso de cualquier sistema o servicios de Inteligencia Artificial (IA) vendrá determinado por el criterio del profesor, pudiendo ser utilizada solo en la forma y supuestos en que así lo indique y, en todo caso, con sujeción a los siguientes principios:

a) El uso de sistemas o servicios de IA deberá acompañarse de una reflexión crítica por parte del alumno sobre su impacto y/o limitaciones en el desarrollo de la tarea o trabajo encomendado.

b) Se justificará la elección de los sistemas o servicios de IA utilizados, explicando sus ventajas respecto a otras herramientas o métodos de obtención de la información. Se describirá con el mayor detalle posible el modelo elegido y la versión de IA utilizada.

c) El uso de sistemas o servicios de IA debe ser citado adecuadamente por el alumno, especificando en qué partes del trabajo se ha utilizado, así como el proceso creativo desarrollado. Puedes consultar el formato de citas y ejemplos de uso en la web de la Biblioteca (https://www.ufv.es/gestion-de-la-informacion_biblioteca/).

d) Se contrastarán siempre los resultados obtenidos a través de sistemas o servicios de IA. Como autor, el alumno es responsable de su trabajo y de la legitimidad de las fuentes utilizadas en el mismo.

2.- En todo caso, el uso de sistemas o servicios de IA deberá respetar siempre y en todo momento los principios de uso responsable y ético que rigen en la universidad y que pueden consultarse en la [Guía de Buen Uso de la Inteligencia Artificial en los Estudios de la UFV](#). Además, el profesor podrá recabar del alumno otro tipo de compromisos individuales cuando así lo estime necesario.

3.- Sin perjuicio de lo anterior, en caso de duda sobre el uso ético y responsable de cualquier sistema o servicio de IA, el profesor podrá optar por la presentación oral de cualquier trabajo o entrega parcial solicitado al alumno, siendo esta la evaluación prevalente sobre cualquier otra prevista en la Guía Docente. En dicha defensa oral, el alumno deberá demostrar su conocimiento de la materia, justificando sus decisiones y el desarrollo de su trabajo.

BIBLIOGRAFÍA Y OTROS RECURSOS

Básica

AUTORES VARIOS Tutoriales y/o manuales específicos