



Universidad  
Internacional  
de Valencia

# Guía didáctica

## ***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. Equipo docente .....	3
1.3. Introducción a la asignatura.....	3
1.4. Competencias.....	3
2. Contenidos/temario .....	4
3. Metodología .....	7
4. Actividades formativas .....	7
5. Evaluación.....	8
5.1. Sistema de evaluación.....	8
5.2. Sistema de calificación .....	9
6. Bibliografía.....	10
6.1. Bibliografía de referencia .....	10
6.2. Bibliografía complementaria.....	10

# 1. Organización general

## 1.1. Datos de la asignatura

<b>MATERIA</b>	<b>Bioinformática estructural</b>
<b>ASIGNATURA</b>	Proteómica y Bioinformática Estructural <b>6 ECTS</b>
<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. Equipo docente

<b>Profesor/a</b>	<b>Dr. Juan Fernández Recio</b> <i>juan.fernandez.r@campusviu.es</i>
-------------------	---

## 1.3. 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.*

## 1.4. 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.10.- Ser capaz de seleccionar las técnicas bioestadísticas adecuadas para el análisis en bioinformática.

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

C.E.21.- Saber aplicar herramientas computacionales avanzadas de identificación, caracterización y modelado comparativo de proteínas.

## 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
- 2.5. Aplicaciones prácticas en proteómica: proyectos y protocolos

### **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

## **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. Aplicaciones en biomedicina
  - 7.4.1. Interacciones entre proteínas como dianas terapéuticas
  - 7.4.2. 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

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

### 6.1. Bibliografía de referencia

- 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.

### 6.2. Bibliografía complementaria

- 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.