



PRESENTACIÓN

Análisis de secuencias y bioinformática estructural

- **Breve descripción de la asignatura:** La función de una proteína está determinada por su estructura tridimensional y ésta, a su vez, viene definida por su secuencia de aminoácidos. Esta interrelación explica la necesidad de conocer mejor los determinantes que contribuyen a la información estructural codificada en las proteínas lo que nos ayudará a entender mejor el funcionamiento de las mismas. Este curso proporcionará una visión general de técnicas bioinformáticas dirigidas a predecir, simular, validar y analizar estructuras de proteínas y complejos proteína/ligando de interés biológico y/o farmacológico. De forma complementaria, aportará una visión práctica sobre cómo y cuándo deben emplearse estas técnicas.
- **Carácter:** Optativa
- **ECTS:** 3
- **Curso y semestre:** Curso 1º y semestre 2º
- **Idioma:** Español
- **Título:** Máster en Métodos Computacionales en Ciencias
- **Módulo y materia de la asignatura:** Módulo 4 Optativo y Materia 4.1 Optatividad
- **Profesor responsable de la asignatura:** Antonio Ángel Pineda Lucena
- **Profesores:** Antonio Ángel Pineda Lucena
- **Horario:** [Calendario del Máster](#)
- **Aula:** 1 edificio Los Castaños

COMPETENCIAS

	Análisis de secuencias y bioinformática estructural
	COMPETENCIAS BÁSICAS
CB6	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo 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 de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.



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 GENERALES
CG3	Conocer los principales problemas que se presentan en la adquisición y tratamiento de datos experimentales y cómo darles respuesta.
CG4	Comunicar tanto de manera oral como escrita un tema o datos de investigación en el área de las ciencias experimentales.
	COMPETENCIAS ESPECÍFICAS
CE5	Aplicar los métodos computacionales de procesamiento de datos a un problema científico particular de la disciplina de interés para el estudiante.
CE6	Diseñar un experimento científico para que sea rico en información, recogiendo gran cantidad de datos de manera estructurada que faciliten su procesamiento posterior.
CE8	Adquirir datos (bien en el laboratorio, o bien mediante minería on-line), organizarlos, filtrarlos, procesarlos, representarlos y refinarlos.
CE9	Extraer información de los datos con técnicas computacionales siguiendo un método científico.
CE10	Presentar los datos experimentales y la información científica de manera que se comuniquen de manera eficiente y fidedigna.
	COMPETENCIAS ESPECÍFICAS DE OPTATIVIDAD



CEOP7	Conocer los principales métodos de análisis de secuencias y motivos de ADN, ARN y proteínas para su aplicación al estudio de la regulación génica, la metagenómica o la estructura de proteínas.
CEOP15	Aplicar las herramientas informáticas para analizar relaciones estructura-actividad en compuestos de interés

PROGRAMA

PROGRAMA:

- 1.- Introducción a la bioinformática estructural: Motivaciones, objetivos y retos
- 2.- Representación de secuencias de proteínas en el ordenador
- 3.- Comparación de secuencias binarias y múltiples
- 4.- Bases de datos de utilidad en bioinformática estructural
- 5.- Manipulación, visualización y comparación de estructuras
- 6.- Predicción de características estructurales 1D
- 7.- Predicción de estructuras tridimensionales
- 8.- Evaluación de la calidad de las estructuras
- 9.- Características biofísicas, bioquímicas y funcionales derivadas de la estructura
- 10.- Modelado de interacciones entre proteínas y ligandos
- 11.- Redes de interacciones de proteínas
- 12.- Redes metabólicas

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Asignatura de 3 ECTS que equivalen a 75 horas.

1.- ACTIVIDADES PRESENCIALES (25 horas)

- Clases presenciales teóricas (25 horas)

2.- ACTIVIDADES NO PRESENCIALES (50 horas)

- Trabajos dirigidos (15 horas)



Universidad
de Navarra

- Estudio personal (35 horas)

EVALUACIÓN

Presencialidad activa: 10%

Resolución de casos prácticos: 15%

Trabajos individuales: 30%

Examen, prueba escrita: 45%

HORARIOS DE ATENCIÓN

MARTES 18:00-19:00

MIÉRCOLES 18:00-19:00

apinedal@unav.es

BIBLIOGRAFÍA

Pazos et al., "Practical Protein Bioinformatics", Springer, 2015 [Localízalo en la Biblioteca](#)
[recurso electrónico]

Koca et al., "Structural Bioinformatics Tools for Drug Design: Extraction of Biologically relevant information from structural databases", Springer, 2016 [Localízalo en la Biblioteca](#)
[recurso electrónico]

Shanker, "Bioinformatics: Sequences, Structures, Phylogeny", Springer, 2018 [Localízalo en la Biblioteca](#) [recurso electrónico]

Mohan, "Structural Bioinformatics: Applications in preclinical drug discovery process", Springer, 2019 [Localízalo en la Biblioteca](#) [recurso electrónico]