

# Máster Universitario en Bioinformática

## Proteómica y Bioinformática Estructural

Curso académico 2024-2025



**Universidad**  
Internacional  
de Valencia

**Dra. Magdalena Nikolaeva Koleva**

[magdalena.nikolaeva@professor.universidadviu.com](mailto:magdalena.nikolaeva@professor.universidadviu.com)

17/09/2024

De:



Planeta Formación y Universidades

# Sesión 1 – Parte I

## Tutoría Colectiva Inicial

# Introducción a la asignatura

## 1. Organización general

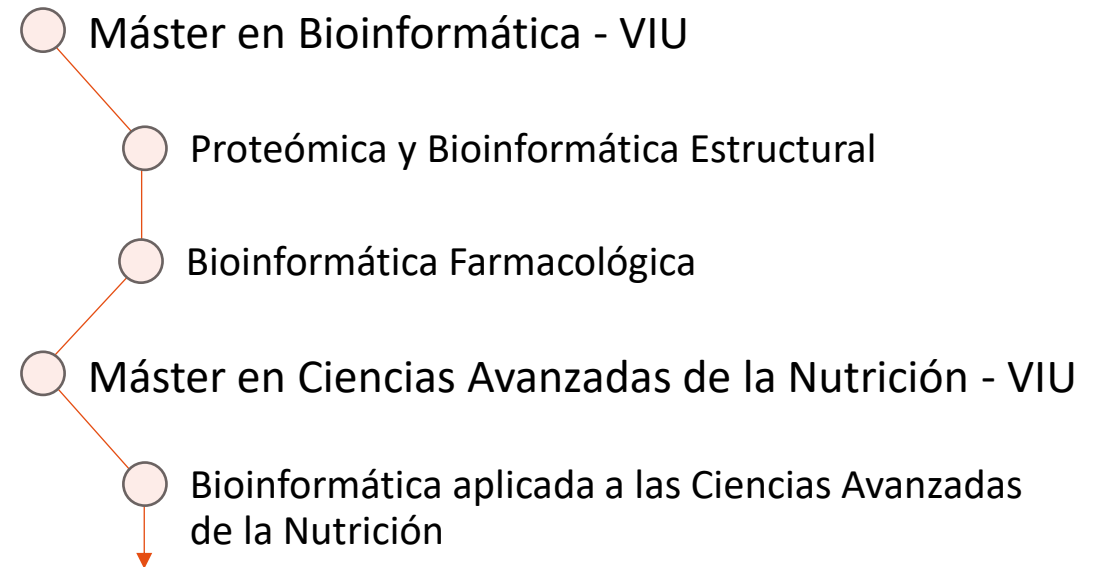
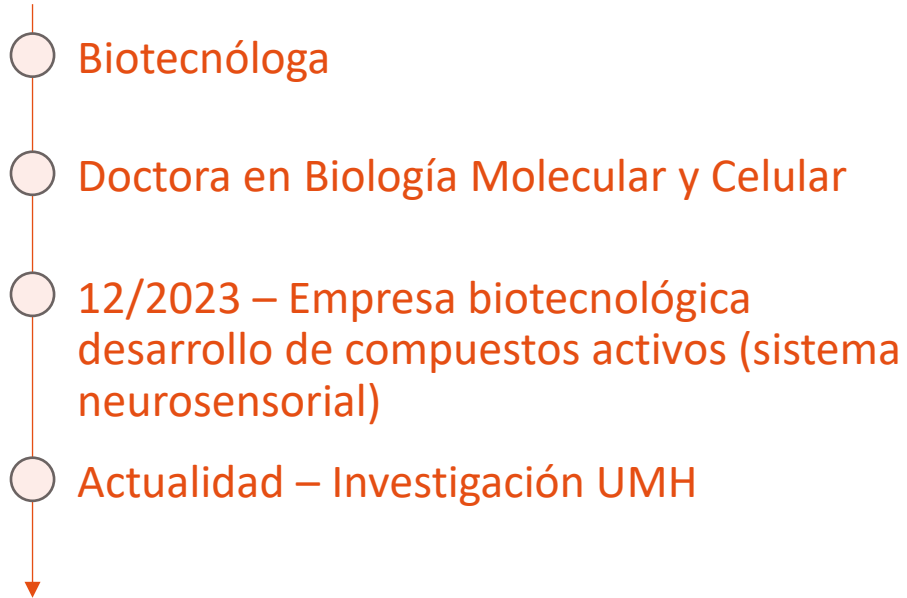
### 1.1. Datos de la asignatura

<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>

# Introducción a la asignatura

## 1.2. Equipo docente

Profesor/a	Dra. Magdalena Nikolaeva Koleva <a href="mailto:magdalena.nikolaeva@professor.universidadviu.com">magdalena.nikolaeva@professor.universidadviu.com</a>
------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------



# Temario - Contenidos

## **Tema 1. Introducción a la proteómica**

- 1.1. Química de proteínas: aspectos básicos
- 1.2. De la química de proteínas a la proteómica
- 1.3. Información proteómica: aplicaciones
- 1.4. Metodologías usadas en proteómica
- 1.5. Bioinformática y proteómica

## **Tema 2. Métodos en proteómica: caracterización de la expresión de proteínas**

- 2.1. Separación o fraccionamiento de proteínas
- 2.2. Caracterización e identificación de proteínas
- 2.3. Cuantificación y expresión diferencial de proteínas
- 2.4. Análisis computacional de datos en proteómica

## **Tema 3. Proteómica estructural**

- 3.1. Aspectos estructurales de las proteínas: niveles de organización
- 3.2. Métodos de caracterización estructural en proteómica
- 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
- 4.2. Modelización por reconocimiento del plegamiento
- 4.3. Modelización *ab initio*

## **Tema 5. Interactómica**

- 5.1. Redes de interacciones entre proteínas
- 5.2. Caracterización biofísica y estructural del interactoma
- 5.3. Métodos de modelización estructural de interacciones

## **Tema 6. Modelización de interacciones por docking**

- 6.1. Búsqueda de orientaciones entre proteínas
- 6.2. Puntuación de modelos de docking
- 6.3. Flexibilidad conformacional en *docking*
- 6.4. Evaluación de las predicciones de *docking*

## **Tema 7. Modelización de interacciones: otros aspectos**

- 7.1. Predicción de interacción
- 7.2. Identificación de residuos energéticamente relevantes (*hot-spots*)
- 7.3. Interpretación molecular del impacto de mutaciones
- 7.4. Plegamiento inverso
- 7.5. Aplicaciones en biomedicina

# Calendario - Sesiones

**Octubre 2024**

LUN	MAR	MIÉ	JUE	VIE	SÁB	DOM
	1	2	3	4	5	6
7	8	9	10	11**	12	13
14	15	16	17	18*	19	20
21	22	23	24	25*	26	27
28	29	30	31			

**Enero 2025**

LUN	MAR	MIÉ	JUE	VIE	SÁB	DOM
		1	2	3	4	5
6	7	8	9	10	11	12
13**	14	15	16	17	18	19
20**	21	22	23	24	25	26
27	28	29	30	31		

**Noviembre 2024**


LUN	MAR	MIÉ	JUE	VIE	SÁB	DOM
				1	2	3
4	5	6	7	8	9	10
11	12	13	14	15	16	17
18	19	20	21	22	23	24
25	26*	27	28*	29	30	

**Septiembre 2024**

LUN	MAR	MIÉ	JUE	VIE	SÁB	DOM
						1
2	3	4	5	6	7	8
9	10	11	12	13**	14	15
16	17	18	19	20**	21	22
23	24	25	26	27	28	29
30						

**Diciembre 2024**

LUN	MAR	MIÉ	JUE	VIE	SÁB	DOM
						1
2*	3	4	5	6	7	8
9**	10	11	12	13	14	15
16**	17	18	19	20	21	22
23	24	25	26	27	28	29
30	31					

 **Proteómica y**  
**Bioinformática Estructural**

Examen 1ª convocatoria

Examen 2ª convocatoria

## Calendario - Sesiones

Tutorías colectivas (TC): 2 – TC1 (inicial) y TC2 (final)

Sesiones teóricas: 2

Sesiones teórico-prácticas: 5

Sesiones guiadas: 4

# Calendario - Sesiones

Sesión	Fecha (Hora inicio)	Actividad/Tema/Contenido
1	17/09/2024 20-22h	Tutoría colectiva 1 (TC1), Tema 1. Introducción a la proteómica
2	19/09/2024 20-22h	Tema 2. Métodos en proteómica: caracterización de la expresión de proteínas
3	24/09/2024 20-22h	Tema 3. Proteómica estructural, AP1 – Sesión 1: Bases de datos
4	26/09/2024 20-22h	Tema 4. Modelización estructural: comparativa, AP1 – Sesión 2: Chimera (I)
5	01/10/2024 20-22h	Tema 4. Modelización estructural: predicción, AP1 – Sesión 3: Chimera (II)
6	03/10/2024 20-22h	AP1 – Sesión 4: Modelado estructural
7	08/10/2024 20-22h	Tema 5. Interactómica, AP2 – Sesión 1: Docking de proteínas (PatchDock y GRAMM-X)
8	10/10/2024 20-22h	Tema 6. Docking de proteínas (I), AP2 – Sesión 2: Docking de proteínas (pyDock)
9	15/10/2024 20-22h	Tema 6. Docking de proteínas (II), AP2 – Sesión 3: Docking de proteínas (pyDock restricciones)
10	17/10/2024 20-22h	Tema 7. Docking de proteínas (III), AP2 – Sesión 4: Docking de proteínas (PatchDock restricciones)
11	22/10/2024 20-22h	Tema 7. Modelización de interacciones (I), AP2 – Sesión 5: Regiones de interacción
12	24/10/2024 20-22h	Tema 7. Modelización de interacciones (II), AP2 – Sesión 6
13	29/10/2024 20-22h	Tutoría colectiva 2 (TC2), Repaso actividades portafolio, Dudas



# Calendario - Evaluaciones

## Fechas de realización del Examen Final

1ª Convocatoria	<b>Martes 26 de noviembre</b> de 2024: Franja A: 11:00 a 13:00 Franja B: 19:00 a 22:00 (hora peninsular española)
2ª Convocatoria	<b>Lunes 20 de enero</b> de 2025: Franja A: 11:00 a 13:00 Franja B: 19:00 a 22:00 (hora peninsular española)

## Fechas máximas de entrega del portafolio

1ª Convocatoria	Martes 26 de noviembre de 2024 hasta las 23:59 (hora peninsular española)
2ª Convocatoria	Lunes 20 de enero de 2025 hasta las 23:59 (hora peninsular española)

# Sistema de evaluación

## Actividades prácticas evaluativas (2; 50% del portafolio cada una)

Se llevarán a cabo en sesiones guiadas por el profesor, con la diferencia de que se deberá entregar una **plantilla de respuestas** y **documentación suplementaria** (ficheros importantes) que se indicarán oportunamente en la guía de cada actividad. (Nota máxima 10 puntos)

### Examen:

- 2 preguntas de respuesta breve (1 punto)
  - 20 preguntas tipo test (0.4 puntos cada)
    - ¡Cada 3 respuestas mal restan 1 bien!
- (Nota máxima 10 puntos)

**Temario incluido:  
Manual, anexo al manual y  
explicaciones en clase**

**Es requisito indispensable para superar la asignatura aprobar cada apartado (portafolio y prueba final)** con un mínimo de 5.0 para ponderar las calificaciones.



# Sistema de evaluación

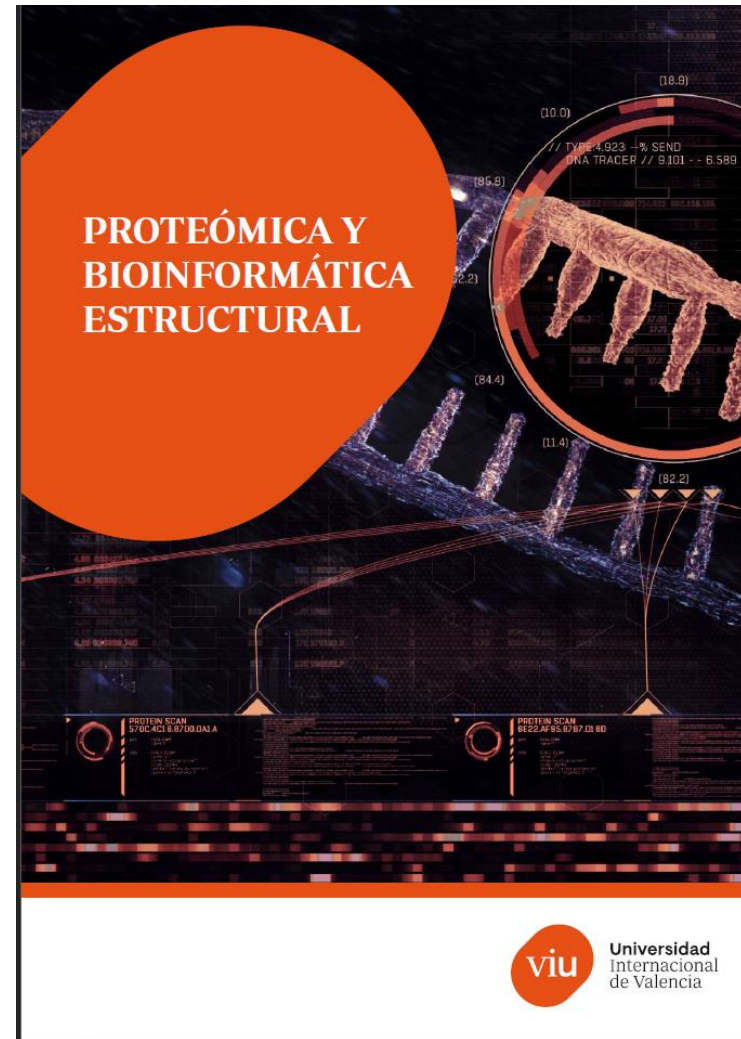
**Es requisito indispensable para superar la asignatura aprobar cada apartado (portafolio y prueba final) con un mínimo de 5.0 para ponderar las calificaciones.**



## Posibilidades:

- Examen aprobado + portafolio suspenso / no presentado = **Suspenso**
- Examen no presentado + cualquier opción del portafolio (no presentado, aprobado, suspenso) = **Suspenso**
- Examen suspenso + cualquier opción del portafolio (no presentado, aprobado, suspenso) = **Suspenso**

# Manual de la asignatura y Anexo al manual



# Contenidos del aula

## Recursos y materiales



### **01. Materiales docentes** ▼

Habilitado: Seguimiento de estadísticas

Carpeta con el material docente de la asignatura: manual y documento multimedia.



### **03. Materiales del profesor** ▼

Habilitado: Seguimiento de estadísticas

Carpeta con material adicional del profesor.

# Contenidos del aula

Recursos y materiales

02. Materiales del profesor



## Software

Disponibilidad: Este elemento está oculto para los estudiantes  
Aquí se encuentran algunos de los programas proporcionados por el profesor para su uso durante las sesiones prácticas.



### PatchDock

Archivos adjuntos: [patch\\_dock\\_download.zip](#) (8,362 MB)



### pyDock

Archivos adjuntos: [pyDock3.tgz](#) (7,998 MB)



### ZDock

Archivos adjuntos: [zdock2.1\\_linux\\_64bit.tar.gz](#) (841,918 KB)



### SCWRL

Archivos adjuntos: [scwrl3\\_lin.tar.gz](#) (4,702 MB)



### Chimera

Archivos adjuntos: [chimera-1.18-linux\\_x86\\_64.bin](#) (148,313 MB)



### ICM - visualizador

Archivos adjuntos: [icm-browser-3.9-3a-linux.rar](#) (516,394 MB)

**Instalar el software antes del inicio de las sesiones prácticas.**



**No esperar hasta el final para realizar las APs. ¡Pueden surgir contratiempos!**

# Contenidos del aula

Recursos y materiales

02. Materiales del profesor




## Software

Disponibilidad: Este elemento está oculto para los estudiantes  
Aquí se encuentran algunos de los programas proporcionados por el profesor para su uso durante las sesiones prácticas.



## Guía de instalación de software

Disponibilidad: Este elemento está oculto para los estudiantes  
Archivos adjuntos:  07MBIF\_Guia\_Instalacion\_Programas.pdf (272,092 KB)



Máster en Bioinformática

07MBIF- Proteómica y Bioinformática Estructural

2024/25

GUÍA DE INSTALACIÓN DE SOFTWARE

### CHIMERA (visualizador molecular)

Descargar Chimera (v.1.18 para Linux) del apartado de Recursos y Materiales>Materiales del profesor>Software>Chimera>chimera-1.18-linux\_x86\_64.bin

Instalación en AWS:

Abrir una terminal, entrar al directorio de "Descargas" donde se ha situado el programa. Modificar el archivo para transformarlo en ejecutable mediante el siguiente comando que deberá ejecutarse en la consola:

```
>chmod +x chimera-1.18-linux_x86_64.bin
```

Para instalar el programa, simplemente ejecutar el fichero:

```
>./chimera-1.18-linux_x86_64.bin
```

# Presentación

- Ámbito de procedencia (empresa/academia)
- Perfil (bio/no bio)
- Conocimientos previos de bioinformática (estructural)
- Expectativas de la asignatura





# ¡Gracias!



viu

**Universidad**  
Internacional  
de Valencia