

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

Sesión 1 – Parte I

Tutoría Colectiva Inicial

Introducción a la asignatura

1. Organización general

1.1. Datos de la asignatura

MATERIA	Bioinformática Estructural
ASIGNATURA	Proteómica y Bioinformática Estructural 6 ECTS
Carácter	Obligatorio
Cuatrimestre	Segundo
Idioma en que se imparte	Castellano
Requisitos previos	No existen
Dedicación al estudio por ECTS	25 horas

Introducción a la asignatura

1.2. Equipo docente

Profesor/a	Dra. Magdalena Nikolaeva Koleva magdalena.nikolaeva@professor.universidadviu.com
------------	---

-  Biotecnóloga
 -  Doctora en Biología Molecular y Celular
 -  12/2023 – Empresa biotecnológica
desarrollo de compuestos activos (sistema
neurosensorial)
 -  Actualidad – Investigación UMH
- 

-  Máster en Bioinformática - VIU
 -  Proteómica y Bioinformática Estructural
 -  Bioinformática Farmacológica
-  Máster en Ciencias Avanzadas de la Nutrición - VIU
 -  Bioinformática aplicada a las Ciencias Avanzadas
de la Nutrición

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

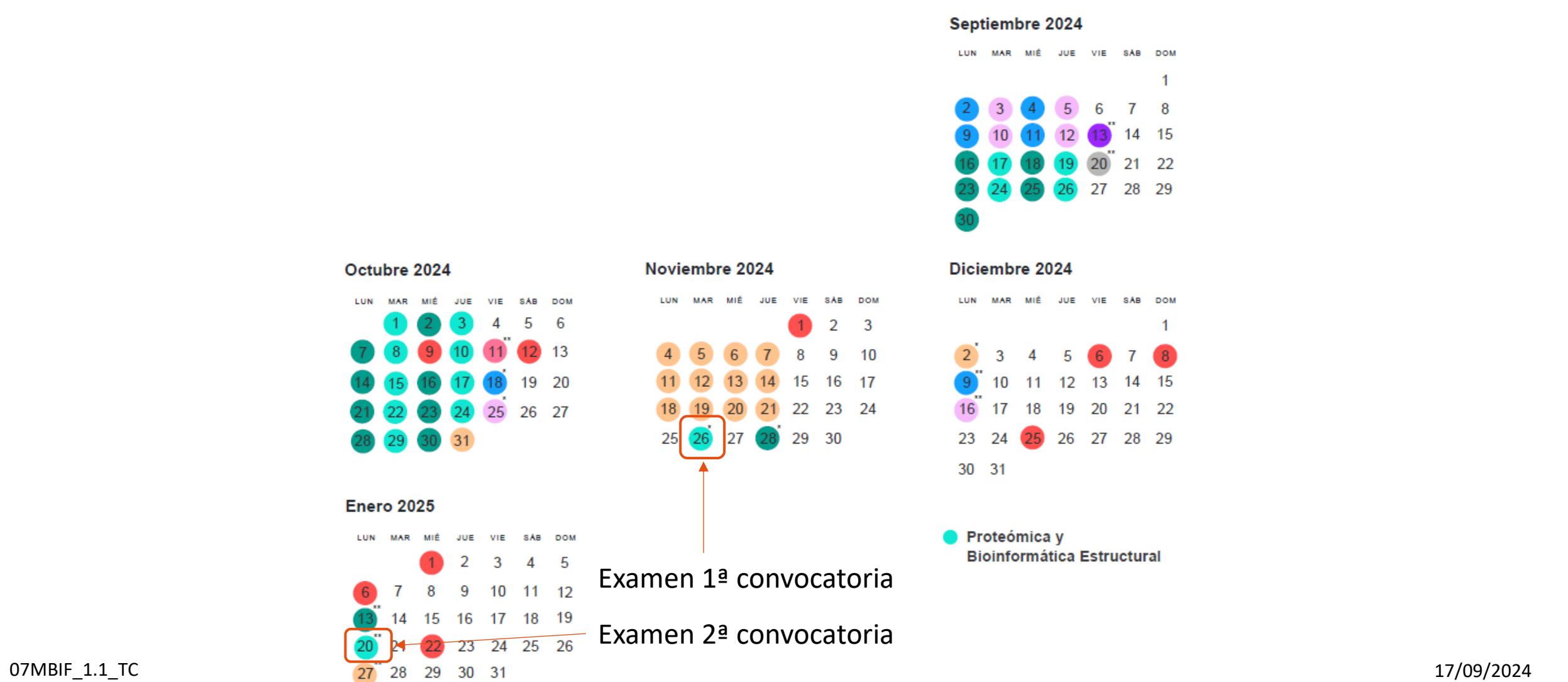
Tema 6. Modelización de interacciones por docking

- 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



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

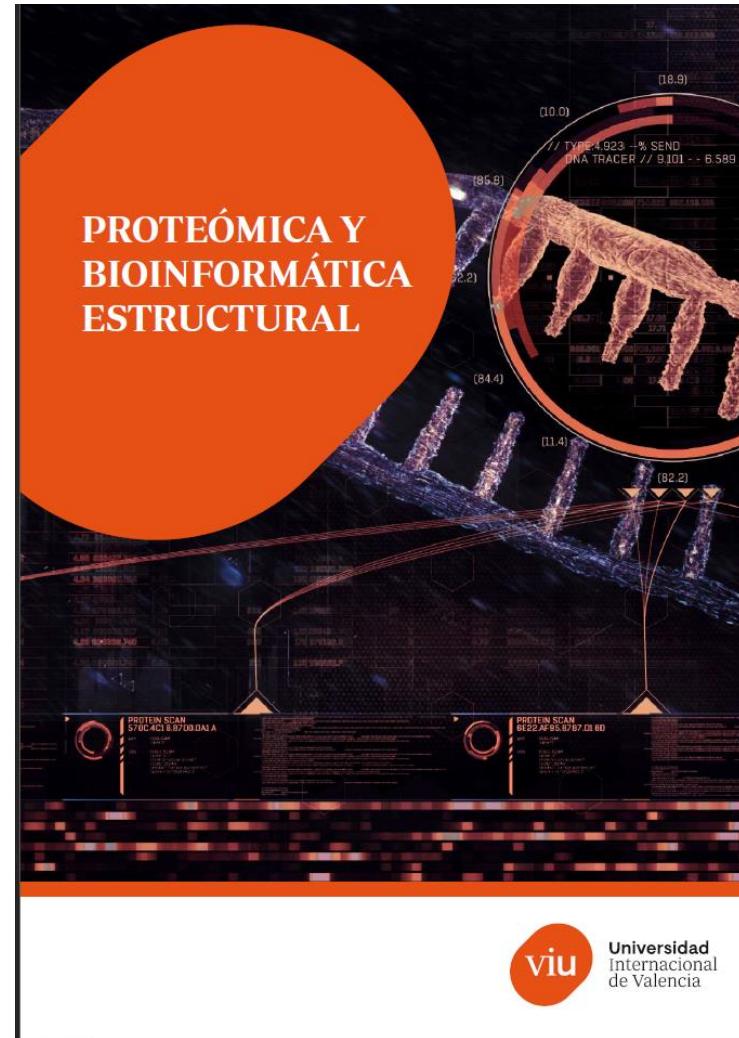
Es requisito indispensable para superar la asignatura aprobar cada apartado (portafolio y prueba final) con un mínimo de 5.0 para ponderar las calificaciones.



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.

 **Guía de instalación de software** 

Disponibilidad: Este elemento está oculto para los estudiantes
Archivos adjuntos: [07MBIF_Guia_Instalacion_Programas.pdf](#)  (272,092 KB)

Instalar el software antes del inicio de las sesiones prácticas.



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

 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)

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 ISNTALACIÓN 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!

The logo consists of the lowercase letters "viu" in white, centered within a solid orange rounded rectangular shape.

viu

Universidad
Internacional
de Valencia

universidadviu.com

De:
 Planeta Formación y Universidades