

Guia docent

2703126 - SB - Bioinformàtica Estructural

Última modificació: 30/01/2026

Unitat responsable: Facultat d'Informàtica de Barcelona
Unitat que imparteix: 1004 - UB - Universitat de Barcelona.

Titulació: GRAU EN BIOINFORMÀTICA (Pla 2024). (Assignatura obligatòria).

Curs: 2025 **Crèdits ECTS:** 6.0 **Idiomes:** Anglès

PROFESSORAT

Professorat responsable: JOSEP LLUIS GELPI BUCHACA

Altres: Segon quadrimestre:
JOSEP LLUIS GELPI BUCHACA - 11, 12

CAPACITATS PRÈVIES

Coneixement bàsic d'estructura de macromolècules (Química Física i orgànica, Bioquímica, Biologia Molecular)
Coneixement de Termodinàmica i cinètica i avaluació d'energies en macromolècules (Química Física i orgànica, Biofísica)
Coneixement amb eines de visualització molecular
Coneixements de programació (python)

RESULTATS D'APRENTATGE

Coneixements:

K1. Reconèixer els principis bàsics de la biologia, des de l'escala cel·lular fins a la d'organisme, i la manera com es relacionen amb els coneixements actuals en els camps de la bioinformàtica, de l'anàlisi de dades i de l'aprenentatge automàtic, i així assolir una visió interdisciplinària amb èmfasi especial en aplicacions biomèdiques.
K2. Identificar els mètodes estadístics i computacionals i els models matemàtics que permeten resoldre problemes en els camps de la biologia molecular, la genòmica, la recerca mèdica i la genètica de poblacions.
K5. Identificar la naturalesa de les variables biològiques que cal analitzar, així com els models matemàtics, els algorismes i les proves estadístiques adequades per desenvolupar i avaluar anàlisis estadístiques i eines computacionals.
K7. Analitzar les fonts d'informacions científiques, vàlides i fiables, per fonamentar l'estat de la qüestió d'un problema bioinformàtic i poder-ne abordar la resolució.

Habilitats:

S10. Utilitzar els coneixements adquirits i la capacitat de resolució de problemes bioinformàtics en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la bioinformàtica i la biologia computacional.
S7. Implementar mètodes de programació i anàlisi de dades orientats a partir de l'elaboració d'hipòtesis de treball dins l'àrea d'estudi.

METODOLOGIES DOCENTS

- Les classes teòriques seran expositives amb l'ajuda de materials gràfics (diapositives, vídeos, demostracions per ordinador).
- La sessió de resolució de problemes detallarà la metodologia per resoldre els problemes seleccionats. Inclourà sessions expositives i pràctiques.
- Les sessions d'anàlisi estructural guiat es faran en grups de treball en estil "Hackathon" per resoldre la utilització d'eines de bioinformàtica estructural per a la resolució de casos pràctics.

OBJECTIUS D'APRENENTATGE DE L'ASSIGNATURA

- 1.1. Reconeixement dels patrons estructurals de les biomolècules i la seva relació amb la seva funció biològica. L'estudiant ha de demostrar comprensió dels descriptors fisicoquímics de l'estructura: termes d'energia potencial, solubilitat, acidesa, hidrofobicitat.
 - 2.2. Correlacionar l'estructura tridimensional de les biomolècules amb la seva funció biològica
- Demostrar comprensió de:
- Relació entre seqüència, estructura i funció: flexibilitat global i local i similitud de la seqüència, preservació tridimensional dels centres actius, conservació de les interaccions amb lligands i altres proteïnes.
 - Bases i aplicacions del concepte d'homologia. Identificar els residus conservats en l'estructura i descriure la seva possible funció estructural.
- 3.3. Manejar el programari que permet processar dades que representen estructures i seqüències de biomolècules.

HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup gran	30,0	20.00
Hores grup petit	30,0	20.00
Hores aprenentatge autònom	90,0	60.00

Dedicació total: 150 h

CONTINGUTS

Part 0. INTRODUCCIÓ

Descripció:

Introducció al curs. Objectius, posició de la bioinformàtica estructural dins de la bioinformàtica, objectius principals. Exemples d'aplicació.

Part 1. ESTRUCTURA I MODELITZACIÓ

Descripció:

Fonaments de les estructures macromoleculares. Espai conformacional. Determinació de l'estructura experimental. Fonts i formats de dades. Bases de dades i visualització molecular.

Qualitat de les dades estructurals, problemes comuns i solucions. Comparació d'estructures, alineació de seqüències/estructura, famílies estructurals, el concepte d'homologia. Predicció d'estructures (1D, Threading, Comparativa, Ab initio, AlphaFold).

Predicció complexa (Docking)

Part 2. ESPAI CONFORMACIONAL I SIMULACIÓ

Descripció:

Avaluació energètica. Camps de força molecular. Configuració del sistema per a la simulació. Optimització del procés de simulació i HPC. Estratègies per millorar el mostreig de conformació. Anàlisi de simulació. Control de qualitat. Anàlisi de flexibilitat.

Estratègies per a l'avaluació d'entropia i energia lliure. Anàlisi avançada. Anàlisi de xarxes i mètodes basats en IA.

Part 3. ESTRUCTURES EN BIOLOGIA DE SISTEMES

Descripció:

Dominis proteics. Interaccions entre cadenes i entre dominis. Predicció d'interaccions físiques basades en dominis. Complexos transitius i permanents. Altres prediccions de relacions entre gens i proteïnes. Sistemes de comunicació i xarxes de senyalització (fosforilació). Estudi de xarxes d'interacció: Interactoma. Grans complexos macromoleculares.

ACTIVITATS

Examen Parcial

Descripció:

Control de resolució de problemes

Objectius específics:

1, 2, 3

Dedicació: 2h

Activitats dirigides: 2h

Examen Final

Descripció:

Examen Final

Objectius específics:

1, 2, 3

Dedicació: 3h

Activitats dirigides: 3h

Presentacions de teoria

Descripció:

Sessions de presentació dels continguts. Presentacions sobre diapositives amd demostraciones guiades.

Objectius específics:

1, 2

Dedicació: 47h

Grup gran/Teoria: 27h

Aprenentatge autònom: 20h

Resolució guiada de problemes

Objectius específics:

1, 2, 3

Dedicació: 30h

Grup petit/Laboratori: 10h

Aprenentatge autònom: 20h

Analisi estructural guiat

Descripció:

Resolució de casos practiques sobre eines d'anàlisi bioinformàtica, usualment disponibles via web, o instal·lables de manera senzilla

Objectius específics:

1, 2, 3

Dedicació: 44h

Grup petit/Laboratori: 14h

Aprenentatge autònom: 30h

Sessió presentacio projectes

Descripció:

Presentacions curtes per grups dels resultats del projecte d'anàlisi

Objectius específics:

1, 2, 3

Dedicació: 2h

Activitats dirigides: 2h

Projecte d'anàlisi integrat

Descripció:

Projecte de tema lliure que impliqui la utilització d'eines d'anàlisi o predicció estructural treballades durant en curs, aplicades a la comprensió de la relació estructura-funció d'un sistema proteic.

Dedicació: 22h

Grup petit/Laboratori: 2h

Aprenentatge autònom: 20h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

Per a l'avaluació de l'assignatura, es tindrà en compte la nota de l'examen parcial (MTE) i final (FE) i la nota de les sessions pràctiques i del projecte d'anàlisi (Proj) segons la fórmula següent:

$$\text{Nota} = \text{MTE} * 0.2 + \text{FE} * 0.6 + \text{Proj} * 0.2$$

Cal una nota igual o superior a 5 per aprovar.

La qualificació de Sessions Practiques i Projecte (Proj) està condicionada a una assistència presencial mínima d'un 60% a les sessions de pràctiques/problemes

Els estudiants que hagin suspès amb una nota igual o superior a 3 poden fer l'examen de reavaluació (RT). En aquest cas, la nota de l'assignatura serà de $0,2 * \text{Proj} + \text{RT} * 0,8$.



BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Gu, Jenny; Bourne, Philip E.. Structural Bioinformatics. 2. Wiley Blackwell, 2009. ISBN 978-0-470-18105-8.
- Branden, Carl; Tooze, John. Introduction to protein structure. 2a ed. Garland, cop. 1999. ISBN 978-0-8153-2305-1.
- Leach, Andrew R. Molecular modelling : principles and applications. 2nd ed. Prentice Hall, 2001. ISBN 9780582382107.
- Creighton, Thomas E. The Biophysical chemistry of nucleic acids & proteins. Helvetian Press, 2010. ISBN 9780956478115.