

Guía docente

2703126 - SB - Bioinformática Estructural

Última modificación: 30/01/2026

Unidad responsable: Facultad de Informática de Barcelona
Unidad que imparte: 1004 - UB - Universitat de Barcelona.

Titulación: GRADO EN BIOINFORMÁTICA (Plan 2024). (Asignatura obligatoria).

Curso: 2025 **Créditos ECTS:** 6.0 **Idiomas:** Inglés

PROFESORADO

Profesorado responsable: JOSEP LLUIS GELPI BUCHACA

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

CAPACIDADES PREVIAS

Conocimiento básico de estructura de macromoléculas (Química Física y orgánica, Bioquímica, Biología Molecular)
Conocimiento de Termodinámica y cinética y evaluación de energías en macromoléculas (Química Física y orgánica, Biofísica)
Conocimiento con herramientas de visualización molecular
Conocimientos de programación (python)

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Conocimientos:

K1. Reconocer los principios básicos de la biología, desde la escala celular a la de organismo, y cómo estos se relacionan con los conocimientos actuales en los campos de la bioinformática, del análisis de datos y del aprendizaje automático; alcanzando así una visión interdisciplinar con especial énfasis en aplicaciones biomédicas.
K2. Identificar los métodos estadísticos y computacionales y los modelos matemáticos que permiten resolver problemas en los campos de la biología molecular, la genómica, la investigación médica y la genética de poblaciones.
K5. Identificar la naturaleza de las variables biológicas que es preciso analizar, así como los modelos matemáticos, los algoritmos y las pruebas estadísticas adecuadas para desarrollar y evaluar análisis estadísticos y herramientas computacionales.
K7. Analizar las fuentes de informaciones científicas, válidas y fiables, para fundamentar el estado de la cuestión de un problema bioinformático y poder abordar su resolución.

Habilidades:

S10. Utilizar los conocimientos adquiridos y la capacidad de resolución de problemas bioinformáticos en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con la Bioinformática y la Biología Computacional.
S7. Implementar métodos de programación y análisis de datos orientados a partir de la elaboración de hipótesis de trabajo, dentro del área de estudio.

METODOLOGÍAS DOCENTES

Las clases teóricas serán expositivas con la ayuda de materiales gráficos (diapositivas, videos, demostraciones en computadora).

La sesión de resolución de problemas detallará la metodología para resolver los problemas seleccionados. Incluirá sesiones expositivas y prácticas.

Las sesiones guiadas de análisis estructural se realizarán en grupos de trabajo tipo "Hackathon" para resolver casos prácticos con herramientas de bioinformática estructural.

OBJETIVOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

1.1. Reconocimiento de los patrones estructurales de las biomoléculas y su relación con su función biológica. El estudiante debe demostrar comprensión de los descriptores fisicoquímicos de la estructura: términos de energía potencial, solubilidad, acidez e hidrofobicidad.

2.2. Correlacionar la estructura tridimensional de las biomoléculas con su función biológica.

Demostrar comprensión de:

- Relación entre secuencia, estructura y función: flexibilidad y similitud global y local de la secuencia, preservación tridimensional de los centros activos, conservación de las interacciones con ligandos y otras proteínas.

- Fundamentos y aplicaciones del concepto de homología. Identificar los residuos conservados en la estructura y describir su posible función estructural.

3.3. Manejar el software que permite procesar datos representativos de estructuras y secuencias de biomoléculas.

HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTE

Tipo	Horas	Porcentaje
Horas aprendizaje autónomo	90,0	60.00
Horas grupo grande	30,0	20.00
Horas grupo pequeño	30,0	20.00

Dedicación total: 150 h

CONTENIDOS

Parte 0. INTRODUCCION

Descripción:

Introducción al curso. Objetivos, posición de la bioinformática estructural dentro de la bioinformática, objetivos principales. Ejemplos de aplicación.

Parte 1. ESTRUCTURA Y MODELADO

Descripción:

Fundamentos de las estructuras macromoleculares. Espacio conformacional. Determinación experimental de la estructura. Fuentes y formatos de datos. Bases de datos y visualización molecular. Calidad de los datos estructurales, problemas comunes y soluciones. Comparación de estructuras, alineamiento secuencial/estructural, familias estructurales, el concepto de homología. Predicción de estructuras (1D, enhebrado, comparativa, ab initio, Alphafold). Predicción compleja (acoplamiento).

Parte 2. ESPACIO CONFORMACIONAL Y SIMULACIÓN

Descripción:

Evaluación energética. Campos de fuerza molecular. Configuración del sistema para simulación. Optimización del proceso de simulación y HPC. Estrategias para mejorar el muestreo de conformación. Análisis de simulación. Control de calidad. Análisis de flexibilidad. Estrategias para la evaluación de entropía y energía libre. Análisis avanzado. Análisis de redes y métodos basados en IA.

Parte 3. ESTRUCTURAS EN BIOLOGÍA DE SISTEMAS

Descripción:

Dominios proteicos. Interacciones entre cadenas y entre dominios. Predicción de interacciones físicas basadas en dominios. Complejos transitorios y permanentes. Otras predicciones de relaciones entre genes y proteínas. Sistemas de comunicación y redes de señalización (fosforilación). Estudio de redes de interacción: Interactoma. Grandes complejos macromoleculares.

ACTIVIDADES

Examen Parcial

Descripción:

Control de resolución de problemas

Objetivos específicos:

1, 2, 3

Dedicación: 2h

Actividades dirigidas: 2h

Examen Final

Descripción:

Examen Final

Objetivos específicos:

1, 2, 3

Dedicación: 3h

Actividades dirigidas: 3h

Presentaciones de teoría

Descripción:

Sesiones de presentación de los contenidos. Presentaciones sobre diapositivas con demostraciones guiadas.

Objetivos específicos:

1, 2

Dedicación: 47h

Grupo grande/Teoría: 27h

Aprendizaje autónomo: 20h

Resolución guiada de problemas

Objetivos específicos:

1, 2, 3

Dedicación: 30h

Grupo pequeño/Laboratorio: 10h

Aprendizaje autónomo: 20h

Análisis estructurales guiados

Descripción:

Resolución de casos prácticos sobre herramientas de análisis bioinformático, usualmente disponibles vía web, o instalables de forma sencilla. Resolución de casos prácticos sobre herramientas de análisis bioinformático, usualmente disponibles vía web, o instalables de forma sencilla.

Objetivos específicos:

1, 2, 3

Dedicación: 44h

Grupo pequeño/Laboratorio: 14h

Aprendizaje autónomo: 30h

Sesión de presentación de proyectos.

Descripción:

Presentación corta por grupos de los resultados del proyecto de análisis

Objetivos específicos:

1, 2, 3

Dedicación: 2h

Actividades dirigidas: 2h

Proyecto de análisis integrado

Descripción:

Proyecto de tema libre que implique la utilización de herramientas de análisis o predicción estructural trabajadas durante el curso, aplicadas a la comprensión de la relación estructura-función de un sistema proteico.

Dedicación: 22h

Grupo pequeño/Laboratorio: 2h

Aprendizaje autónomo: 20h

SISTEMA DE CALIFICACIÓN

Para la evaluación de la asignatura, se tendrá en cuenta la calificación del examen parcial (EMP) y del examen final (EF), así como la calificación de las sesiones prácticas y del proyecto de análisis (Proyecto), según la siguiente fórmula:

$$\text{Calificación} = \text{EMP} * 0,2 + \text{EF} * 0,6 + \text{Proy} * 0,2$$

Se requiere una calificación igual o superior a 5 para aprobar.

La calificación de Sesiones Prácticas y Proyecto (Proj) está condicionada a una asistencia presencial mínima de un 60% en las sesiones de prácticas/problemas

Los alumnos que hayan suspendido con una calificación igual o superior a 3 podrán presentarse al examen de reevaluación (RT). En este caso, la calificación de la asignatura será $0,2 * \text{Proj} + \text{RT} * 0,8$.



BIBLIOGRAFÍA

Básica:

- 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.