



Modelado
molecular y
ensayos *in silico*
Máster Universitario en
Bioinformática
Curso 2024/2025



UNIVERSIDAD
NEBRIJA

GUÍA DOCENTE

Asignatura: Modelado molecular y ensayos *in silico* **Titulación:** Máster Universitario en Bioinformática **Carácter:** Obligatoria

Idioma: Castellano

Modalidad: Presencial

Créditos: 4

Curso: 1º

Semestre: 2º

Profesores/Equipo Docente: Dr. D. Fernando Martínez de Benito

1. COMPETENCIAS Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1.1. Conocimientos o contenidos (Knowledge)

K2. Comprender los conceptos clave de las estructuras de datos masivos necesarios en biología y los algoritmos necesarios para trabajar con ellas

K5. Conocer las principales infraestructuras de computación relacionadas con el trabajo con datos médicos.

K7. Conocer cómo se comportan las entidades biológicas, entendiéndolas como sistemas simplificados y modelables

1.2. Habilidades o destrezas (Skills)

H2. Resolver problemas de bioinformática, aplicando métodos estadísticos y computacionales, relacionados con la investigación médica.

H3. Realizar diseños conceptuales para aplicaciones de bioinformática, trabajando en un equipo interdisciplinar.

H4. Generar modelos computacionales que permitan predecir el comportamiento de entidades biológicas (células, proteínas, aminoácidos, etc.) a ordenador, para optimizar los recursos necesarios en investigación.

H5. Analizar y plantear soluciones a problemas dados a través del análisis y representación de datos en el ámbito de la medicina.

1.3. Competencias (Competences)

C1. Aplicar los conocimientos obtenidos de biología, informática, matemáticas, física y estadística para comprender las principales problemáticas que se presentan en la bioinformática.

C2. Analizar y resolver problemas biológicos y biomédicos con el soporte de herramientas computacionales, en el ámbito de la investigación biomédica básica y traslacional.

C3. Explotar tecnologías avanzadas de aprendizaje automático y minería de textos para obtener información y analizar datos mediante inteligencia artificial.

C4. Emplear técnicas computacionales para procesado, almacenamiento y manejo de datos masivos, principalmente generados por las tecnologías "ómicas" de alto rendimiento en biología y biomedicina.

C5. Diseñar, implementar y evaluar modelos computacionales de estructuras biológicas (aminoácidos, nucleótidos, etc.) para predecir sus comportamientos (*estructuras, funciones, y dinámica*) *in silico*. C2,

2. CONTENIDOS

2.1. Requisitos previos

Ninguno.

2.2. Descripción de los contenidos

- Generación y obtención de modelos moleculares
- Estructura de macromoléculas.
- Estudio de interacción molecular in silico, con predicción de la estructura y función de proteínas.
- Plataformas de modelado molecular.

2.3. Actividades formativas

Modalidad presencial:

ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PORCENTAJE DE PRESENCIALIDAD
AF1 Lección magistral, con estudio y resolución de casos y problemas	28	100% = 28
AF4 Estudio individual y trabajo autónomo	58	0%
AF6 Resolución de casos prácticos	12	100% = 12
AF7 Evaluación	2	100% = 2
NÚMERO TOTAL DE HORAS	100	

3. METODOLOGÍA DOCENTES

El profesorado podrá elegir entre una o varias de las siguientes metodologías detalladas en la memoria verificada del título.

Código	METODOLOGÍAS DOCENTES	Descripción
MD1	Metodología clásica	Lecciones magistrales participativas en las que se trabajará el contenido de la asignatura a través de la exposición docente apoyada en presentaciones, vídeos, etc. y actividades de análisis, reflexión, debates, etc.
MD2	Aprendizaje basado en Proyectos/Problemas	El alumnado trabajará en la resolución de problemas planteados por el docente en relación con la asignatura a través de la investigación y planificación, planteando soluciones basadas en sus conocimientos y destrezas adquiridas.
MD3	Aprendizaje cooperativo	El alumnado, organizado en equipos de tamaño reducido, desarrollará tareas o proyectos con una meta común, cuidando la interdependencia y responsabilidad individual, estableciendo roles para la organización del trabajo y normas para la resolución de los conflictos que puedan surgir.

4. SISTEMA DE EVALUACIÓN

4.1. Sistema de calificaciones

El sistema de calificaciones finales se expresará numéricamente del siguiente modo:

- 0 - 4,9 Suspenso (SS)
- 5,0 - 6,9 Aprobado (AP)
- 7,0 - 8,9 Notable (NT)
- 9,0 - 10 Sobresaliente (SB)

La mención de "matrícula de honor" podrá ser otorgada a alumnos que hayan obtenido una calificación igual o superior a 9,0. Su número no podrá exceder del cinco por ciento de los alumnos matriculados en la materia en el correspondiente curso académico, salvo que el número de alumnos matriculados sea inferior a 20, en cuyo caso se podrá conceder una sola "Matrícula de Honor".

4.2. Criterios de evaluación

Convocatoria ordinaria

Sistema de evaluación	Ponderación
Participación	5%-10%
Trabajos y proyectos	20%-25%
Examen parcial	10%-20%
Examen final	50%-60%

Convocatoria extraordinaria

Sistema de evaluación	Ponderación
Trabajos y proyectos	10%-20%
Examen final	80%-90%

5. BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía básica

- Bioinformatics and Computational Biology Solutions Using R and Bioconductor Robert Gentleman 2005
- "Of mice and models; improved animal models for biomedical research" Bockamp, E., Maringer, M., Spangenberg, C., Fees, S., Frase, S., Eshkind, L., Oesch, F., Zabel B., 2002, Physiol. Genomics 11:115-132
- "Principles and philosophy of modeling in biomedical research" Massoud, T.F., Hademenos, G.J., Young, W.L., Gao, E., Pile-Spellman, J., Viñuela, F., 1998, The FASEB Journal, 12:275-285

Bibliografía recomendada

- Jensen, Jan H., 1969-. "Molecular modeling basics"(abre en nueva ventana). Boca Raton Taylor & Francis c2010.
- Hinchliffe, Alan. "Molecular modelling for beginners"(abre en nueva ventana). Hoboken (NJ) John Wiley & Sons 2008.
- Hèoltje, Hans-Dieter. "Molecular modeling basic principles and applications"(abre en nueva ventana). Weinheim Wiley-VCH c2008.
- Schneider, Gisbert 1965-. Baringhaus, Karl-Heinz. "Molecular design concepts and applications"(abre en nueva ventana). Weinheim Wiley-VCH 2008.
- Schlick, Tamar. "Molecular modeling and simulation [electronic resource] : an interdisciplinary guide /"(abre en nueva ventana). New York : Springer Science+Business Media, LLC, 2010.
- Tramontano, Anna. "Protein structure prediction concepts and applications"(abre en nueva ventana). Weinheim Wiley-VCH cop.2006.
- Leach, Andrew R. "Molecular modelling principles and applications"(abre en nueva ventana). Harlow [etc.] Prentice Hall 2001.
- Ouyang, Defang, editor./Smith, Sean C., editor. "Computational pharmaceutics : application of molecular modeling in drug delivery /"(abre en nueva ventana).
- Maginn, Edward J.,. "Foundations of molecular modeling and simulation : select papers from FOMMS 2018 /"(abre en nueva ventana).
- "Molecular Modeling in Drug Design"(abre en nueva ventana). MDPI - Multidisciplinary Digital Publishing Institute.

6. DATOS DEL PROFESOR

Puede consultar el correo electrónico de los profesores y el perfil académico y profesional del equipo docente, en <https://www.nebrija.com/programas-postgrado/master/bioinformatica/>