



PERSONA CIENCIA EMPRESA  
Universitat Ramon Llull

## ASIGNATURA: MODELLING

**MATERIA:** Modelización de Biomoléculas

**MÓDULO:** Específico

**ESTUDIOS:** Máster en Bioingeniería

Página 1 de 5

### CARACTERÍSTICAS GENERALES \*

**Tipo:**  Formación básica,  Obligatoria,  Optativa

Trabajo de fin de grado,  Prácticas externas

**Duración:** Cuatrimestral

**Semestre / s:** 2

**Número de créditos ECTS:** 3

**Idioma / s:** Inglés

### DESCRIPCIÓN

#### BREVE DESCRIPCIÓN Y JUSTIFICACIÓN

En esta asignatura se introducirá al alumno en los conceptos y técnicas básicas de la modelización molecular (principalmente dinámica molecular y docking), haciendo especial hincapié en su utilidad de cara a una mejor comprensión de los procesos biológicos y en cómo pueden complementarse con técnicas estructurales y bioquímicas.

#### COMPETENCIAS

##### BÁSICAS:

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

##### TRANSVERSALES:

T5 - Capacidad para valorar el impacto del uso de las biotecnologías en el desarrollo sostenible de la sociedad.

##### ESPECÍFICAS:

E1 - Capacidad para comprender y aplicar los conocimientos de las disciplinas en biociencias a las aplicaciones biotecnológicas y a la resolución de problemas en contextos multidisciplinares.

E2 - Capacidad para comprender y aplicar las metodologías y herramientas biotecnológicas para la investigación, desarrollo y producción de productos y servicios.

E3 - Capacidad para diseñar, realizar e interpretar experimentos en el ámbito de la bioingeniería.

## ASIGNATURA: MODELLING

**MATERIA:** Modelización de Biomoléculas

**MÓDULO:** Específico

**ESTUDIOS:** Máster en Bioingeniería

Página 2 de 5

E5 - Capacidad para aplicar e integrar los conocimientos y herramientas de la bioingeniería a los distintos sectores industriales que utilizan, desarrollan o producen productos o procesos biotecnológicos.

### REQUISITOS PREVIOS

Bioinformática. Bioquímica.

### CONTENIDOS

#### 1. INTRODUCCIÓN

Modelización molecular, ¿para qué?. Estado actual del campo. Aplicaciones en bioingeniería.

#### 2. CONCEPTOS BÁSICOS

Energía potencial. Campo de fuerzas. Minimización (técnicas).

#### 3. DINÁMICA MOLECULAR (MD)

Definición. Dinámica clásica. Cálculo de gradientes. Integración numérica. Trayectoria de MD. Aspectos prácticos. Protocolo. Propiedades que pueden calcularse a partir de una MD. Limitaciones. Ejemplos.

#### 4. RECONOCIMIENTO MOLECULAR

Propiedades electrostáticas de las biomoléculas. Docking: Cómo saber dónde se enlazaría un ligando (algoritmos de búsqueda, funciones de scoring, resultados de clustering, limitaciones, ejemplos). Cálculo de constantes de enlace.

### PRÁCTICAS DE LABORATORIO:

#### 1. PROPIEDADES ELECTROSTÁTICAS DE BIOMOLÉCULAS

Utilización y análisis de resultados del programa APBS

#### 2. DINÁMICA MOLECULAR (MD)

Utilización y análisis de resultados del programa GROMACS

#### 3. RECONOCIMIENTO MOLECULAR

Utilización y análisis de resultados del programa AUTODOCK

## METODOLOGÍA

### ACTIVIDADES FORMATIVAS

Actividades formativas	Créditos ECTS	Competencias
Sesiones de exposición de conceptos	0,5	E1, E2, CB6, CB7
Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos	0,7	E2, CB6, CB7
Seminarios	-	

## ASIGNATURA: MODELLING

**MATERIA:** Modelización de Biomoléculas

**MÓDULO:** Específico

**ESTUDIOS:** Máster en Bioingeniería

Página 3 de 5

Trabajo práctico / laboratorio	-	
Presentaciones	-	
Actividades de estudio personal por parte de los estudiantes	1,7	E1, E2, E3, E5 CB6, CB7, CB8, T5
Actividades de evaluación (exámenes, controles de seguimiento ...)	0,1	E1, E2, E3 CB6, CB7
<b>TOTAL</b>	<b>3,0</b>	<b>E1, E2, E3, E5 CB6, CB7, CB8, T5</b>

### EXPLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA DIDÁCTICA

Se basa en las siguientes actividades:

- Exposición de contenidos mediante presentación o explicación (posiblemente incluyendo demostraciones) por parte de un profesor.
- Resolución de ejercicios, planteamiento/resolución de problemas y exposición/discusión de casos por parte de un profesor con la participación activa de los estudiantes.
- Trabajo personal del estudiante necesario para adquirir las competencias de cada Materia y asimilar los conocimientos expuestos en las sesiones de exposición de conceptos y sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos, utilizando, cuando sea necesario, el material recomendado de consulta. Incluyen también la preparación de tareas relacionadas con las otras actividades, y la preparación de exámenes.
- Pruebas orales y / o escritas realizadas durante el periodo lectivo de una asignatura o una vez finalizada la misma (examen final, actividades de seguimiento)

### EVALUACIÓN

#### MÉTODOS DE EVALUACIÓN

Métodos de evaluación	Peso	Competencias
Examen final (EX)	40%	E1, E2
Actividades de seguimiento (AS)	10%	T5, CB6
Trabajos y presentaciones (TP)	15%	E5, CB8
Trabajo experimental o de campo (TE)	30%	E3, CB7
Participación (TP)	5%	E5, CB8



## ASIGNATURA: MODELLING

**MATERIA:** Modelización de Biomoléculas

**MÓDULO:** Específico

**ESTUDIOS:** Máster en Bioingeniería

Página 4 de 5

### RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- El estudiante debe ser capaz de acceder a la información de las principales bases de datos de estructuras de biomoléculas. (→ CB6, CB7) [Actividades de seguimiento, Trabajos y presentaciones]
- El estudiante debe demostrar que conoce los conceptos básicos y los principales ingredientes para realizar una simulación de dinámica molecular o un cálculo de docking. (→ E1, E2) [Actividades de seguimiento, Examen final]
- El estudiante debe demostrar haber desarrollado el criterio necesario saber en qué casos será útil realizar una simulación de dinámica molecular y/o un cálculo de docking. (→ E3, E5, T5) [Trabajos y presentaciones, Participación]
- El estudiante debe demostrar capacidad para seleccionar, calcular y analizar propiedades moleculares y fisicoquímicas de biomoléculas según los objetivos propuestos. (→ CB8, E2, E3) [Trabajo experimental]

### CALIFICACIÓN

- Las actividades de seguimiento consistirán en un mínimo de 2 ejercicios. Del promedio directo del resultado de las pruebas se obtendrá la calificación **AS** valorada sobre 10 puntos.
- Se realizará un trabajo, individual o en grupo, de la temática propuesta por el profesor y el resultado podrá ser expuesto y discutido con el resto de los alumnos y/o el profesor. El trabajo, así como la participación en las presentaciones, conformarán la calificación **TP** valorada sobre 10 puntos.
- El desarrollo individual del alumno durante las sesiones de trabajo experimental será evaluado junto con la memoria del trabajo realizado, conformando así la calificación **TE** valorada sobre 10 puntos.
- El examen final constará de una única parte en la que se evaluarán tanto fundamentos teóricos como resolución de pequeños problemas. La calificación final del examen **EX** será valorada sobre 10 puntos.
- La calificación final de la asignatura será  $0,4*EX + 0,3*TE + 0,1*AS + 0,2*TP$  siempre y cuando cada una de las calificaciones suponga un mínimo del 50% de su valor. En caso contrario, la calificación final de la asignatura corresponderá a la calificación más baja de ellas valorada sobre 10 puntos.

### EVALUACIÓN DE LAS COMPETENCIAS

Para la evaluación de las competencias CB8 y E5, se usarán como indicadores las notas de los trabajos y presentaciones y de la participación (**TP**). Para la evaluación de las competencias T5 y CB6 se usará como indicador la nota de las actividades de seguimiento (**AS**). Para la evaluación de las competencias CB7 y E3 se usará como indicador la nota del



PERSONA CIENCIA EMPRESA  
Universitat Ramon Llull

## ASIGNATURA: MODELLING

**MATERIA:** Modelización de Biomoléculas

**MÓDULO:** Específico

**ESTUDIOS:** Máster en Bioingeniería

Página 5 de 5

trabajo experimental (**TE**). Para la evaluación de las competencias E1 y E2 se usará como indicador la nota del examen final (**EX**).

### BIBLIOGRAFÍA

- Andrew R. Leach. *Molecular modeling. Principles and applications*. Prentice Hall, 2001.
- Tamar Schlick. "*Molecular modelling and simulation*". Springer, 2006.
- D. Frenkel and B. Smit. "*Understanding molecular simulation*". Academic Press, 2002.

### HISTÓRICO DEL DOCUMENTO

#### MODIFICACIONES ANTERIORES

2011, Dr. Xevi Biarnés, Dr. Carme Rovira

2016, Dr. Xevi Biarnés, Dr. Carme Rovira

#### ÚLTIMA REVISIÓN

27 de marzo de 2017, Dr. Xevi Biarnés, Dr. Carme Rovira