



UNIVERSIDAD  
POLITÉCNICA  
DE MADRID

PROCESO DE  
COORDINACIÓN DE LAS  
ENSEÑANZAS PR/CL/001



Etsi Agronómica, Aliment. y  
Biosistemas

# ANX-PR/CL/001-01

## GUÍA DE APRENDIZAJE

### ASIGNATURA

203000030 - Biología Estructural Computacional Para El Descubrimiento De Dianas

### PLAN DE ESTUDIOS

20BC - Master Universitario En Biología Computacional

### CURSO ACADÉMICO Y SEMESTRE

2025/26 - Primer semestre

## Índice

---

### Guía de Aprendizaje

1. Datos descriptivos.....	1
2. Profesorado.....	1
3. Conocimientos previos recomendados.....	2
4. Competencias y resultados de aprendizaje.....	2
5. Descripción de la asignatura y temario.....	3
6. Cronograma.....	5
7. Actividades y criterios de evaluación.....	7
8. Recursos didácticos.....	9
9. Otra información.....	10

## 1. Datos descriptivos

---

### 1.1. Datos de la asignatura

<b>Nombre de la asignatura</b>	203000030 - Biología Estructural Computacional para el Descubrimiento de Dianas
<b>No de créditos</b>	3 ECTS
<b>Carácter</b>	Optativa
<b>Curso</b>	Primer curso
<b>Semestre</b>	Primer semestre
<b>Período de impartición</b>	Septiembre-Enero
<b>Idioma de impartición</b>	Inglés/Castellano
<b>Titulación</b>	20BC - Master Universitario en Biología Computacional
<b>Centro responsable de la titulación</b>	20 - Etsi Agronómica, Aliment. Y Biosistemas
<b>Curso académico</b>	2025-26

## 2. Profesorado

---

### 2.1. Profesorado implicado en la docencia

<b>Nombre</b>	<b>Despacho</b>	<b>Correo electrónico</b>	<b>Horario de tutorías</b> *
Maria Garrido Arandia (Coordinador/a)	06 (microb)	maria.garrido@upm.es	L - 08:00 - 13:00 Request an appointment with the teacher via e- mail.

\* Las horas de tutoría son orientativas y pueden sufrir modificaciones. Se deberá confirmar los horarios de tutorías con el profesorado.

## 2.3. Profesorado externo

Nombre	Correo electrónico	Centro de procedencia
Bruno Cuevas Zuviria	bruno.czuviria@upm.es	Centro de Biotecnología y Genómica de Plantas

## 3. Conocimientos previos recomendados

---

### 3.1. Asignaturas previas que se recomienda haber cursado

El plan de estudios Master Universitario en Biología Computacional no tiene definidas asignaturas previas recomendadas para esta asignatura.

### 3.2. Otros conocimientos previos recomendados para cursar la asignatura

- Knowledge about protein structure

## 4. Competencias y resultados de aprendizaje

---

### 4.1. Competencias

CE02 - Utilizar sistemas operativos, programas y herramientas de uso común en biología computacional, así como, manejar plataformas de cómputo de altas prestaciones, lenguajes de programación y análisis bioinformáticos

CE03 - Analizar e interpretar bioinformáticamente los datos que se derivan de las tecnologías ómicas, y proponer soluciones bioinformáticas en relación a dichos datos.

CE05 - Utilizar herramientas de biología computacional para el análisis genómico, incluida la genómica comparativa y biología evolutiva.

CE10 - Conocimiento de las técnicas de representación del conocimiento reutilizables y modelos de razonamiento en entornos centralizados y distribuidos a utilizar en la resolución de problemas que impliquen conducta inteligente.

CG01 - Poseer los conocimientos que constituyen la base científica y tecnológica de la Biología computacional, lo que permitirá el desarrollo de ideas originales en este campo, en un contexto de investigación o desarrollo.

CG03 - 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 el área de la Biología Computacional.

CT02 - Capacidad para aplicar el método científico para la resolución de problemas de forma efectiva y creativa.

## 4.2. Resultados del aprendizaje

RA32 - Conocer los fundamentos y el manejo de los métodos de docking y de determinación in silico de sitios de unión y centros activos en proteínas

RA33 - Conocer los fundamentos y el manejo de los métodos computacionales para obtener in silico estructuras de biomoléculas, tanto proteínas como fármacos

RA31 - Adquirir destreza en el manejo de software para el estudio de estructuras e interacciones en sistemas biomoleculares fármaco-diana

## 5. Descripción de la asignatura y temario

---

### 5.1. Descripción de la asignatura

The course provides an updated view of the computational methodologies for the study of structures and interactions of complexes between receptor biomolecules (mainly proteins) and small molecules or drugs. The course is designed in an interactive way, so students will put into practice in the classroom the computational techniques necessary for the study of these complexes. The course begins with a brief historical review of the field, then the fundamental physicochemical concepts and the sources of information (databases) to be used are introduced. After that, the course will focus on the study of the different techniques used in the drug discovery process. Firstly, the methods used in ligand-based virtual screening are presented, describing the essential concepts of similarity and molecular descriptors at the three levels of analysis (1D, 2D and 3D) together with the methods to calculate the parameters of statistical significance (scoring). Then the course focus on the essential pharmacophore concept and on the techniques of structure-based virtual screening following two complementary approaches: protein-ligand docking and *de novo* design. At the end of the course, the students will have acquired the computational skills to perform a process to discover a lead compound (i.e., drug design)

## 5.2. Temario de la asignatura

### 1. Introduction to Computational Methods for Lead Discovery

#### 1.1. Basic concepts

##### 1.1.1. Overview of drug discovery

##### 1.1.2. Pharmacodynamics

##### 1.1.3. Pharmacokinetics

#### 1.2. Molecular Representation

#### 1.3. Databases

### 2. Ligand-based virtual screening

#### 2.1. Similarity Principle

#### 2.2. Molecular descriptors

#### 2.3. Molecular Fingerprint

#### 2.4. Shape-based analysis

#### 2.5. QSAR methods

#### 2.6. Pharmacophore

### 3. Structure-based virtual screening

#### 3.1. Protein Structure

#### 3.2. De novo design

#### 3.3. Protein-ligand Docking

## 6. Cronograma

### 6.1. Cronograma de la asignatura \*

Sem	Actividad tipo 1	Actividad tipo 2	Tele-enseñanza	Actividades de evaluación
1	<b>Tema 1</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
2	<b>Tema 1</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Aplicaciones tema 1 (ordenador)</b> Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
3	<b>Aplicaciones tema 1 (ordenador)</b> Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación			
4	<b>Tema 2</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Aplicaciones tema 2 (ordenador)</b> Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		<b>Databases</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 00:00
5	<b>Tema 2</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Aplicaciones tema 2 (ordenador)</b> Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
6	<b>Tema 2</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Aplicaciones tema 2 (ordenador)</b> Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
7	<b>Tema 2</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Aplicaciones tema 2 (ordenador)</b> Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
8	<b>Tema 2</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
9		<b>Aplicaciones tema 2 (ordenador)</b> Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
10	<b>Tema 2</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			<b>Ligand-based virtual screening</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 00:00
11		<b>Aplicaciones tema 2 (ordenador)</b> Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		

12	<b>Tema 3</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Aplicaciones tema 3 (ordenador)</b> Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
13	<b>Lesson 3</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
14		<b>Lesson 3 Applications (computer)</b> Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
15				<b>Identification of new drugs</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva No presencial Duración: 02:00
16				
17				<b>Identification of new drugs</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Global No presencial Duración: 03:00

Para el cálculo de los valores totales, se estima que por cada crédito ECTS el alumno dedicará dependiendo del plan de estudios, entre 26 y 27 horas de trabajo presencial y no presencial.

## 7. Actividades y criterios de evaluación

### 7.1. Actividades de evaluación de la asignatura

#### 7.1.1. Evaluación (progresiva)

Sem.	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
4	Databases	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	00:00	15%	5 / 10	CG03 CE03 CG01
10	Ligand-based virtual screening	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	00:00	15%	5 / 10	CG01 CG03 CE10
15	Identification of new drugs	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	02:00	70%	5 / 10	CG01 CE05 CG03 CE10 CE03 CE02 CT02

#### 7.1.2. Prueba evaluación global

Sem	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
17	Identification of new drugs	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	03:00	100%	5 / 10	CG01 CE05 CG03 CE10 CE03 CE02 CT02

#### 7.1.3. Evaluación convocatoria extraordinaria

Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
Drug Discovery	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	03:00	100%	5 / 10	CG03 CE10 CG01 CE05 CE03 CE02 CT02

## 7.2. Criterios de evaluación

### Progressive Assessment System

In the progressive assessment system, the evaluation for this course will consist of two components: **30% for individuals short exercises and 70% for the final assignments.**

The progressive assessment system for this course is designed to enable students to acquire the necessary competencies to successfully complete the course. By incorporating a combination of individual exercises and group assignments, students will have the opportunity to develop and demonstrate their understanding of the subject matter.

Through the completion of individual short exercises, students will engage in independent learning and apply their knowledge to solve specific problems. These exercises will not only test their comprehension of the material but also enhance their critical thinking and problem-solving skills. The inclusion of group assignments provides students with the opportunity to collaborate, communicate, and work effectively as part of a team. The group assignments will not only assess their ability to work collaboratively but also foster a deeper understanding of the subject matter through peer interaction and diverse perspectives.

### Global Assessment

Students who have not successfully passed the course through the progressive assessment will be required to undertake a single global assessment test in the form of an **individual assignment** that covers the entire curriculum. The grade obtained in this global assessment will represent **100% of the final grade** for the course.

## 8. Recursos didácticos

### 8.1. Recursos didácticos de la asignatura

Nombre	Tipo	Observaciones
Speck-Planche, A. (Ed.), Multi-scale Approaches in Drug Discovery, Elsevier, 2017	Bibliografía	
Varnek, A. (Ed.) Tutorials in Chemoinformatics, Wiley, 2017	Bibliografía	
Cavasotto, C.N. (Ed), In Silico Drug Discovery and Design, CRC Press, 2016	Bibliografía	
Stromgaard K, Krogsgaard-Larsen P. and Madsen U. (Eds), Drug Design and Discovery, 5th edition, CRC Press, 2017	Bibliografía	
ZINC Database	Recursos web	<a href="http://zinc15.docking.org/">http://zinc15.docking.org/</a>
ChEMBL Database	Recursos web	<a href="https://www.ebi.ac.uk/chembl/">https://www.ebi.ac.uk/chembl/</a>
Click2Drug	Recursos web	<a href="http://www.click2drug.org/">http://www.click2drug.org/</a>
SwissADME	Recursos web	<a href="http://www.swissadme.ch/index.php">http://www.swissadme.ch/index.php</a>
Swiss Similarity	Recursos web	<a href="http://www.swissimilarity.ch/">http://www.swissimilarity.ch/</a>
Swiss Target Prediction	Recursos web	<a href="http://www.swisstargetprediction.ch/">http://www.swisstargetprediction.ch/</a>
Pocket Query	Recursos web	<a href="http://pocketquery.csb.pitt.edu/pocket.html?JMOL=1">http://pocketquery.csb.pitt.edu/pocket.html?JMOL=1</a>

SmoothDock	Recursos web	<a href="http://smoothdock.ccbb.pitt.edu/pharmer/">http://smoothdock.ccbb.pitt.edu/pharmer/</a>
Chimera program	Otros	Free software available at <a href="http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/index.html">http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/index.html</a>
AutoDock VINA program	Otros	Protein-ligand docking. Free software available at: <a href="http://vina.scripps.edu/">http://vina.scripps.edu/</a>
Jupyter Notebooks	Otros	

## 9. Otra información

### 9.1. Otra información sobre la asignatura

Due to the methodological approach of the course as explained in the "Course Description", the teaching activities are an indistinguishable mixture of "theory and practice". It is thus necessary that each student uses his/her laptop in classroom classes. The software needed to follow the course (Chimera, essentially, in addition to multiple web resources) will be presented on the first day of class and consists of programs freely available on the web for academic users, as indicated in the Teaching Resources section. In parallel, students will have to use their own computer tools for file editing, scientific graphics, programming environment (Python) and mathematical analysis.

UPM addresses Sustainable Development Goals (SDG) from an integrated perspective that includes, not only research and innovation initiatives, but also teaching and governance activities within the institution.

UPM's Biotechnology Degree in general, and the subject "Computational Structural Biology For Lead Discovery" in particular, aims to respond to those challenges that the ODS address through the potential applications of the knowledge acquired by the students along their academic formation.

The own scientific nature of the subject "Computational Structural Biology For Lead Discovery" is fully aligned with the following challenge included within UN's SDG initiative : SDG 3 - Health and Welfare: the acquisition of knowledge related to those computational tools useful for the design of new drugs allows the students to gain the ability to address the first development stages of new drugs in order to improve the quality of life of patients undergoing numerous pathological conditions.

