



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

20504424 - Biología Estructural Computacional

PLAN DE ESTUDIOS

20BT - Grado En Biotecnología

CURSO ACADÉMICO Y SEMESTRE

2025/26 - Segundo 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.....	6
7. Actividades y criterios de evaluación.....	8
8. Recursos didácticos.....	10
9. Otra información.....	12

1. Datos descriptivos

1.1. Datos de la asignatura

Nombre de la asignatura	20504424 - Biología Estructural Computacional
No de créditos	5 ECTS
Carácter	Optativa
Curso	Cuarto curso
Semestre	Octavo semestre
Período de impartición	Febrero-Junio
Idioma de impartición	Inglés/Castellano
Titulación	20BT - Grado en Biotecnología
Centro responsable de la titulación	20 - Etsi Agronómica, Aliment. Y Biosistemas
Curso académico	2025-26

2. Profesorado

2.1. Profesorado implicado en la docencia

Nombre	Despacho	Correo electrónico	Horario de tutorías *
Maria Garrido Arandia (Coordinador/a)		maria.garrido@upm.es	- -
Krzysztof Teodor Wabnik		k.wabnik@upm.es	- -

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

3. Conocimientos previos recomendados

3.1. Asignaturas previas que se recomienda haber cursado

- Estructura E Ingeniería De Proteínas

3.2. Otros conocimientos previos recomendados para cursar la asignatura

- Linux
- Programación

4. Competencias y resultados de aprendizaje

4.1. Competencias

CB02 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio

CB05 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía

CE11 - Habilidad para buscar, obtener e interpretar la información de las principales bases de datos bibliográficos y biológicos (genómicos, transcriptómicos, proteómicos y metabolómicos) y elaborar información a partir de datos experimentales.

CE17 - Conocimientos adecuados de la estructura de las distintas macromoléculas biológicas y distinguir su función y los procedimientos para su separación.

CE20 - Habilidad para utilizar aplicaciones informáticas que permitan analizar y visualizar estructuras de ácidos nucleicos, proteínas y macromoléculas.

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

CT04 - Capacidad para comunicar en lengua castellana e inglesa de forma oral y escrita.

CT06 - Capacidad para organizar y planificar proyectos, experimentos y, en general, trabajos de índole profesional.

CT08 - Ser capaz de manejar las tecnologías de la información y comunicación en un contexto profesional.

CT09 - Tener capacidad de análisis y síntesis para interpretar datos relevantes y abordar los problemas desde diferentes perspectivas

4.2. Resultados del aprendizaje

RA235 - Conocer y manejar software adecuado para el análisis de la estructura y función de biomoléculas

RA239 - Conocer los principales métodos para modelar computacionalmente estructuras de proteínas

RA86 - Conocer la estructura y función de los principales tipos de biomoléculas y su relevancia en la biotecnología

RA236 - Conocer las bases estructurales de las interacciones moleculares en sistemas proteína-ligando y proteína-proteína

5. Descripción de la asignatura y temario

5.1. Descripción de la asignatura

Se trata de una asignatura de Itinerario en el último semestre del Grado para los estudiantes que cursen el itinerario de Biotecnología Computacional. Presenta unos contenidos avanzados sobre la base de otras materias del itinerario computacional y de la asignatura de Estructura e Ingeniería de Proteínas, Obligatoria de Grado impartida en el semestre anterior en el mismo 4º Curso.

La asignatura presenta de forma actualizada la teoría y los métodos fundamentales junto con el software correspondiente para el estudio de estructuras, propiedades e interacciones en sistemas biomoleculares y, muy en particular, métodos de docking y dinámica molecular. En diferentes puntos del temario, el estudiante tendrá que elaborar además sus propios programas o scripts para tareas específicas que irán surgiendo. Dado el bajo número de alumnos que habitualmente cursan el itinerario de Biotecnología Computacional, la asignatura está planteada de forma totalmente interactiva. A cada estudiante se le

asignará un sistema molecular al que aplicará los diferentes métodos y recursos computacionales que irá aprendiendo. De esta forma, cada estudiante desarrolla de forma individualizada y personalizada la actividad de estudio e investigación sobre los contenidos del temario.

This course is part of the Itinerary in the final semester of the Degree for students following the Computational Biotechnology pathway. It presents advanced content based on other courses in the computational itinerary and the Structure and Protein Engineering course, a mandatory Degree course taught in the previous semester of the same 4th year.

The course provides an updated presentation of the theory and fundamental methods along with the corresponding software for studying structures, properties, and interactions in biomolecular systems, with a particular focus on docking methods and molecular dynamics. At various points in the syllabus, students will also have to develop their own programs or scripts for specific tasks that will arise. Given the low number of students typically enrolled in the Computational Biotechnology pathway, the course is designed to be fully interactive. Each student will be assigned a molecular system to which they will apply the different computational methods and resources they learn. This way, each student individually and personally develops the study and research activities related to the course content.

5.2. Temario de la asignatura

1. Proteínas

- 1.1. Grandes estructuras
- 1.2. Aplicación al análisis de datos estructurales
- 1.3. Análisis de modos normales
- 1.4. Interfaces proteína-proteína
- 1.5. Modelos de solvatación

2. Modelado de moléculas pequeñas

- 2.1. Construcción de moléculas pequeñas en el ordenador
- 2.2. Mecánica Molecular (MM)

- 2.3. Potencial electrostático PB para moléculas pequeñas
- 2.4. Bases de datos de moléculas pequeñas
- 2.5. Parámetros y topologías MM: Aplicación práctica CHARMM
- 2.6. Optimización en agua: VMD/NAMD-autoIMD
- 2.7. Construcción de estructuras de péptidos en el ordenador
- 2.8. Modelado de estructuras de ácidos nucleicos
- 3. Docking
 - 3.1. Introducción al docking
 - 3.2. Docking proteína-ligando
 - 3.3. Docking proteína-proteína
- 4. Dinámica Molecular (DM)
 - 4.1. Introducción a la DM
 - 4.2. Notas de Mecánica Estadística
 - 4.3. Ecuaciones del movimiento
 - 4.4. Condiciones iniciales, equilibrado
 - 4.5. Solvatación
 - 4.6. Interacciones de no enlace
 - 4.7. Control de T y P constantes. Dinámica de Langevin
 - 4.8. DM coarse-grained
 - 4.9. Simulaciones QM/MM
 - 4.10. Breve historia de los cálculos DM. Supercomputación
 - 4.11. Cálculos DM: ciclo minimización-equilibrado-simulación
 - 4.12. Propiedades calculadas en simulaciones DM
 - 4.13. Práctica de los cálculos DM
 - 4.14. Análisis de trayectorias
 - 4.15. Visualización y animación

6. Cronograma

6.1. Cronograma de la asignatura *

Sem	Actividad tipo 1	Actividad tipo 2	Tele-enseñanza	Actividades de evaluación
1	Tema 1 Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 1 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
2	Tema 1 Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 1 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
3	Tema 1 Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 1 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
4	Tema 1 Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 1 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
5	Tema 2 Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 2 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
6	Tema 2 Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 2 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
7	Tema 2 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 2 Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
8	Tema 3 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 2 Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
9	Aplicaciones Tema 3 Duración: 03:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación	Prácticas de computación Tema 3 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
10	Tema 3 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral Aplicaciones Tema 3 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación	Prácticas de computación Tema 3 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		

11	Tema 3 Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 3 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
12	Tema 4 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral Aplicaciones Tema 3 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación	Prácticas de computación Tema 4 Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
13	Tema 4 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 4 Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
14	Tema 4 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas de computación Tema 4 Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
15	Aplicaciones Tema 4 Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación	Prácticas de computación Tema 4 Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
16				
17				Trabajo de investigación individual (prueba de evaluación progresiva) TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva No presencial Duración: 00:00 Prueba de evaluación global para quienes no hayan superado la asignatura mediante las pruebas de evaluación progresiva EX: Técnica del tipo Examen Escrito Evaluación Global Presencial Duración: 02:00

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
17	Trabajo de investigación individual (prueba de evaluación progresiva)	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	00:00	100%	5 / 10	CB02 CB05 CT02 CT04 CT06 CT08 CT09 CE20 CE11 CE17

7.1.2. Prueba evaluación global

Sem	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
17	Prueba de evaluación global para quienes no hayan superado la asignatura mediante las pruebas de evaluación progresiva	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	02:00	100%	5 / 10	CB02 CB05 CT02 CT04 CT06 CT08 CT09 CE20 CE11 CE17

7.1.3. Evaluación convocatoria extraordinaria

Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
Prueba de evaluación global para quienes no hayan superado las pruebas de evaluación progresiva en la convocatoria ordinaria	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	02:00	100%	5 / 10	CB02 CB05 CT02 CT04 CT06 CT08 CT09 CE20 CE11 CE17

7.2. Criterios de evaluación

Progressive evaluation system of the subject

The progressive evaluation tests consist of the delivery of the results and analysis that each student will present in the form of an **individual research work** at the end of the course. This personalized work will consist of the application of the contents of the subject to different problems of a biomolecular system that the student will build throughout the course from a different protein that the teacher will have assigned to each student.

Altogether, the tasks assigned to each student involve the use and application of the computational methods and tools that constitute the syllabus and that are managed in class by the students on their personal computers. Due to the advanced nature of the subject, these classes are developed uniformly without distinction between theoretical or practical activities. Some of these tasks also imply that the student must develop their own computational solutions for specific properties of their molecular system (in particular, related to data formats and types of structural information).

Carrying out individual research work is **mandatory** to pass the subject through progressive evaluation tests. **The correction of this work, whose grade represents 100% of the final grade.**

Evaluation through a global test

Those who have not passed the subject through the progressive evaluation tests will have to take a **single global evaluation test** in the form of a final written exam that will cover the complete syllabus (topics 1-4) and whose grade will represent 100% of the final grade.

8. Recursos didácticos

8.1. Recursos didácticos de la asignatura

Nombre	Tipo	Observaciones
Burkowski FJ, 2015, Computational and Visualization Techiques for Structural Bioinformatics Using Chimera, CRC Press, Taylor&Francis	Bibliografía	
Gu J, Bourne PE (Eds), 2009, Structural Bioinformatics, 2nd Edition, Wiley-Blackwell	Bibliografía	
Jensen F, 2007, Introduction to Computational Chemistry, 2nd Edition, Wiley	Bibliografía	
Martín-Santamaría, S (Ed), 2018, Computational Tools for Chemical Biology, Royal Society of Chemistry, London, UK	Bibliografía	
Schlick T, 2010, Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide, 2nd Edition, Springer	Bibliografía	
Schwede T, Peitsch M, 2008, Computational Structural Biology. Methods and Applications, World Scientific Publishing Co.	Bibliografía	

APBS (http://sourceforge.net/projects/apbs/)	Otros	Free software
AutoDock Vina (http://vina.scripps.edu/)	Otros	Free software
Chimera (http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/index.html)	Otros	Free software
NAMD (http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/)	Otros	Free software
PyMOL (http://sourceforge.net/projects/pymol/)	Otros	Free software
VMD (http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/)	Otros	Free software
Moodle - UPM	Otros	Presentaciones con contenidos de clase, material informático para las prácticas, guías de usuario y documentos diversos (protocolos de cálculo y artículos científicos)
Free Maestro (https://www.schrodinger.com/academic-licensing)	Otros	Free software
ChemSketch (https://www.acdlabs.com/resources/free-chemistry-software-apps/chemsketch-	Otros	Free software

9. Otra información

9.1. Otra información sobre la asignatura

La Comisión de Calidad del Centro en su reunión del día 29 de mayo de 2023 acordó aprobar la propuesta de reasignación de competencias transversales en las materias de las Licenciaturas en Biotecnología, Ingeniería de Alimentos, Ingeniería Agrícola, Ingeniería Agroambiental, Ciencias Agrarias y Bioeconomía, y en la Maestría en Ingeniería Agronómica. En virtud de dicho acuerdo, este sujeto ha sido designado como "Sujeto Punto NO de Control". Esto significa que si bien se puede seguir trabajando una o varias competencias transversales que se abordan en diferentes puntos y aspectos de la materia, dicha formación y evaluación no será objeto de recogida de evidencia por parte de los sistemas de acreditación de calidad del Centro.

Como se indica en la "Descripción de la asignatura", las actividades docentes son una mezcla indistinguible de "teoría y práctica". Los estudiantes utilizarán sus computadoras portátiles para poner en práctica toda la metodología computacional. Al inicio del curso, el profesor indicará el conjunto de programas (todos "de código abierto", gratuitos para los usuarios académicos) que deben instalarse. Paralelamente, los alumnos deberán utilizar diferentes herramientas informáticas de edición, gráfica científica, entorno de programación (Python, fundamentalmente) y análisis matemático.

Tal y como se indica en la "Descripción de la asignatura", su planteamiento central es que cada alumno desarrollará a lo largo del curso un trabajo personalizado de análisis e investigación sobre un sistema biomolecular que desarrollará y someterá a estudio computacional con las diversas metodologías y modelos. que se presentará. Al finalizar el curso, cada alumno entregará este trabajo de investigación individual con los resultados y análisis de su sistema biomolecular.

Los contenidos de la asignatura están relacionados con el ODS9. Las posibles aplicaciones de lo abordado en la asignatura están relacionadas con el ODS14 y el ODS15.