



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

33424 - MULTIESCALA, MACHINE LEARNING Y MÉTODOS QSAR APLICADOS A BIOMOLÉCULAS

Información de la asignatura

Código - Nombre: 33424 - MULTIESCALA, MACHINE LEARNING Y MÉTODOS QSAR APLICADOS A BIOMOLÉCULAS

Titulación: 748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2024/25

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

MULTIESCALA, MACHINE LEARNING Y MÉTODOS QSAR APLICADOS A BIOMOLÉCULAS.

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

2

1.5. Semestre

762-Primer semestre o Segundo semestre

748-Primer semestre o Segundo semestre

621-Segundo semestre

1.6. Número de créditos ECTS

6.0

1.7. Idioma

Inglés

1.8. Requisitos previos

No hay.

1.9. Recomendaciones

No aplica.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	1/3
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/3	

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Noelia Faginas Lago (Universidad de Perugia).

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias / Resultados del proceso de formación y aprendizaje

BÁSICAS Y GENERALES

CG01 - Los estudiantes son capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

CG04 - Los estudiantes desarrollan un pensamiento y razonamiento crítico y saben comunicarlos de manera igualitaria y no sexista tanto en forma oral como escrita, en su lengua propia y en una lengua extranjera.

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

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida auto dirigido o autónomo.

TRANSVERSALES

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia.

CT10 - Predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador y profesional

CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético

ESPECÍFICAS

CE13 - Los estudiantes manejan las técnicas más usuales de programación en física y en química y está familiarizado con las herramientas de cálculo esenciales en estas áreas.

CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

CE19 - El/la estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

No aplica.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

El objetivo de este curso es proporcionar a los estudiantes los conocimientos básicos de técnicas de aprendizaje automático y métodos QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) aplicados a sistemas moleculares de pequeño y gran tamaño, tales como reactivos simples o biomoléculas.

El Machine Learning (ML) permite a los equipos solucionar problemas aprendiendo de los datos. En los últimos años el ML se ha aplicado, cada vez más, a una amplia variedad de desafíos químicos, desde la mejora de la química computacional hasta el diseño de medicamentos y materiales e incluso la planificación de síntesis. Esta curso nace con el propósito de introducir esta realidad de rápido crecimiento.

1.13. Contenidos del programa

1. Introducción al Cloud Computing.
2. Virtualización y arquitecturas contenedoras.
3. Servicios de gestión del Big Data y despliegues automáticos.
4. Clasificación binaria de proteínas mediante enfoque del Machine learning.
5. Modelado multiescala de procesos bioquímicos.
6. Dinámica Molecular de alto rendimiento: teoría y aplicaciones.
7. Introducción al Deep learning y al Tensorflow.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	2/3
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/3	

8. Dinámica molecular multiescala de biomoléculas.
9. Posibilidades del Machine learning.
10. Métodos QSAR aplicados a biomoléculas.

1.14. Referencias de consulta

Combined Quantum Mechanics/Molecular Mechanics (QM/MM) Methods in Computational Enzymology M.W. van der Kamp and A. J. Mulholland Biochemistry 2013.

QM/MM Methods for Biomolecular Systems H. M. Senn and W. Thiel (2009), QM/MM Methods for Biomolecular Systems. Angewandte Chemie Int. Ed. 2009.

A Hybrid Potential Reaction Path and Free Energy Study of the Chorismate Mutase Reaction S. Martí, J. A., V. Moliner, E. Silla, I. Tuñón, J. Bertrán, and M. J. Field Journal of the American Chemical Society 2001.

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#Horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total).	43
Porcentaje de actividades no presenciales.	82

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Prácticas con medios informáticos	20
Actividades de evaluación	3

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final	20
Ejercicios propuestos	80

3.2. Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

4. Cronograma orientativo

El curso lo organizará la Universidad de Perugia.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	3/3
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/3	