

Dinámica Molecular

Grupo de Bioinformática y Biocomputación

Facultad de Ingeniería

Universidad del Valle

Código:	750063	Créditos:	3
Tipo de asignatura:	Electiva Profesional	Horas / Semana:	3
Prerrequisito:	Ninguno	Validable:	Si
Tipo de programa:	Postgrado	Habilitable:	No

JUSTIFICACIÓN

Una de las herramientas para estudiar las macromoléculas de interés biológico (secuencias de ADN o ARN, proteínas) es la dinámica molecular. La dinámica molecular calcula el comportamiento de un sistema molecular en dependencia del tiempo. Este método se emplea hoy día en forma rutinaria para investigar la estructura y entender la dinámica en los procesos de formación, operación e interacción de estas macromoléculas. En el campo de la proteómica, se usa la dinámica molecular para analizar la estabilidad de una proteína, su plegamiento y sus cambios conformacionales, la interacción con otras proteínas u otras biomoléculas, y permite describir y modelar los procesos complejos que aplican las proteínas para poder cumplir con su función, como por ejemplo la unión de ligandos, el transporte de iones y la inserción en membranas.

El objetivo del presente curso es dar una visión general de los fundamentos teóricos de la dinámica molecular clásica, discutir algunos aspectos prácticos, y mostrar algunas aplicaciones específicas de la minimización de energía y la simulación dinámica de proteínas o secuencia de nucleótidos. Estos temas de aplicación acompañaran e ilustrarán la exposición de los conceptos teóricos a lo largo del curso. Se espera poder profundizar el entendimiento del estudiante en los principios de la estructura macromolecular y su relación con su función, generar experiencia práctica en el proceso de construcción y evaluación de modelos moleculares y familiarizar al estudiante con el uso de los algoritmos estándares de la dinámica molecular.

OBJETIVOS

Introducir a los estudiantes en los conceptos, modelos y algoritmos de la dinámica molecular restringida.

Al final del curso, el estudiante está en capacidad de:

- Conocer el contexto biológico en que se aplica la dinámica molecular restringida.
- Entender los ensamblajes y las restricciones que están aplicando
- Entender el concepto potencial y las diferentes simplificaciones típicas
- Conocer y saber aplicar con éxito los algoritmos subyacentes de la dinámica molecular en aplicaciones a biomoléculas.

CONTENIDO

Introducción

Diseño de las restricciones

- Ensamble microcanónico
- Ensamble Canónico
- Ensamble Isotérmica—Isobárica
- Ensamblados Generalizados

Potenciales en simulaciones de la dinámica molecular

- Potenciales empíricos

- Potenciales de dos y muchos cuerpos
- Métodos ab—initio
- Representaciones reducidas

Algoritmos de la Dinámica Molecular

- Integradores
- Algoritmos de interacción a distancia corta
- Algoritmos de interacción a distancia larga
- Estrategias de paralelización.

METODOLOGÍA

El curso consiste de 3 horas semanales de clases teórico-prácticas. Los textos Guía del curso son el libro “Estructura de proteínas” y el libro “Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods”. En el proyecto final, el estudiante aplica un modelo de dinámica molecular a un problema de biología molecular, el trabajo debe comprender selección del problema, selección de datos, selección de modelos, aplicación algorítmica (software existente) e interpretación de los resultados.

EVALUACIÓN

- 30 % Pruebas Individuales
- 40 % Proyecto de curso
- 30 % Controles de lecturas (Ensayos, pruebas cortas)

BIBLIOGRAFÍA

- Frenkel, Daan; Smit, Berend (2001). Understanding Molecular Simulation: from algorithms to applications. San Diego, California: Academic Press. ISBN 0-12-267351-4.
- J. M. Haile (2001) Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods. ISBN 0-471-18439-X
- Andrew Leach (2001) Molecular Modelling: Principles and Applications. (2nd Edition) Prentice Hall. ISBN 978-0582382107.
- J. A. McCammon, S. C. Harvey (1987) Dynamics of Proteins and Nucleic Acids. Cambridge University Press. ISBN 0521307503.

- D. C. Rapaport (1996) *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. ISBN 0-521-44561-2.
- R. J. Sadus, *Molecular Simulation of Fluids: Theory, Algorithms and Object-Oriented*, 2002, ISBN 0-444-51082-6
- Tamar Schlick (2002) *Molecular Modeling and Simulation*. Springer. ISBN 0-387-95404-X.