



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias



Propuesta TFG_BIOTEC
Curso: 2017-18
DEPARTAMENTO:
Bioquímica y Biología Molecular I

CÓDIGO DEL TFG BQ01-04

1. DATOS DEL TFG OFERTADO:

Título

Contribución al diseño y desarrollo preliminar de un motor de visualización y simulación dinámica de macromoléculas biológicas en entornos de realidad virtual.

Introducción

La incipiente incorporación de tecnologías de Realidad Virtual (RV) al ámbito de la investigación científica y desarrollo tecnológico abre un nuevo campo, inexplorado aún, de nuevas posibilidades para la representación virtual de macromoléculas biológicas. Las iniciativas existentes para la incorporación de estas tecnologías al ámbito del estudio estructural y funcional de proteínas y ácidos nucleicos son aún, como cabía esperar, llamativamente escasas y su alcance es limitado. Por su complejidad, sin embargo, la representación infográfica de este tipo de estructuras en campos específicos como la Ingeniería de Proteínas, la Bionanotecnología, la Bioquímica estructural o la Dinámica Molecular de proteínas y ácidos nucleicos trasciende, con mucho, la mera intencionalidad artística y responde, como sucede en las ingenierías “clásicas” a una necesidad inherente e ineludible al propio proceso de investigación o desarrollo.

Las herramientas de *software* tradicionales son inadecuadas para abordar este nuevo tipo de estrategias de visualización inmersiva, por lo que resulta imprescindible a corto plazo impulsar iniciativas y proyectos creativos que generen conocimiento de estos nuevos entornos y contribuyan al desarrollo de aplicaciones informáticas capaces de satisfacer las necesidades actuales y las posibles expectativas futuras en el ámbito de la biología molecular y las biotecnologías asociadas.

Objetivos

El alumno o alumna participará en una línea de investigación que tiene por objeto explorar el potencial de las tecnologías de realidad virtual en escenarios concretos de visualización envolvente e interactiva de macromoléculas biológicas. Partiendo de una serie de herramientas y recursos ya generados de antemano, el candidato/a se centrará en el desarrollo de un prototipo de visor de RV capaz de representar contornos de Van der Waals y otros tipos de superficies moleculares y dotado de la capacidad de representar, asimismo, simulaciones de dinámica molecular de proteínas y otras estructuras descritas en formato PDB. El proyecto será implementado en un entorno multiplataforma (tipo Unity o Unreal Engine) mediante el empleo de scripting en C#, javascript o C++ (dependiendo del entorno asignado). Para ello, el candidato/a deberá adquirir (o disponer) de conocimientos ambos entornos de programación y en aquellos aspectos de química y geometría estructural de proteínas necesarios para la consecución del proyecto.

Plan de trabajo

- 1.- Desarrollo de una API básica apta para la representación de superficies y simulación dinámica de estructuras PDB en entorno Unity o Unreal Engine.
- 2.- Desarrollo de un prototipo de visor RV basado en la librería SteamVR o equivalente y que incorpore recursos ad hoc desarrollados anteriormente.
- 3.- Evaluación del potencial de la herramienta desarrollada mediante experimentos preliminares

con estructuras modelo.

Tabla de actividades y dedicación estimada:

Planteamiento, orientación y supervisión	20
Exposición del trabajo	0.25
Desarrollo del trabajo	94.75
Preparación de la memoria	35
TOTAL (6 ECTS)	150 horas

OFERTADO POR:

Profesor del Departamento

Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución

Propuesto por alumno (*)

(*) En el caso de TFG propuesto por alumno, por favor completar la siguiente información sobre el mismo:

Apellidos:

Nombre:

e-mail institucional:

2. **MODALIDAD:** 5

1. Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado
2. Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional
3. Elaboración de un plan de empresas
4. Simulación de encargos profesionales
5. Trabajos experimentales, de toma de datos.
6. Trabajos bibliográficos sobre el estado actual de una temática relacionada con el Grado.
7. Trabajos derivados de la experiencia desarrollada en prácticas externas.

3. **COMPETENCIAS Y RESULTADOS DEL APRENDIZAJE:**

CG2 - Capacidad para la modelización, simulación y optimización de procesos y productos biotecnológicos.

CG5 - Conocer los principios básicos de la estructura y funcionalidad de los sistemas biológicos.

CG8 - Diseñar nuevos productos a partir de la modificación de organismos y modelización de fenómenos biológicos.

CB2 - 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

CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética

CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado

CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía

4. BIBLIOGRAFIA BÁSICA:

- 1.- Interactive 3D Protein Structure Visualization Using Virtual Reality. E. Moritz, J. Meyer. Proceedings of the Fourth IEEE Symposium on Bioinformatics and Bioengineering BIBE04 (2004), 0-7695-2173-8/04.
- 2.- iview: an interactive WebGL visualizer for protein-ligand complex. L. Hongjian, L. Kwong-Sak, N. Takanori and W. Man-Hon. BMC Bioinformatics (2014), 15:56.
- 3.- Virtual reality based approach to protein heavy-atom structure reconstruction. X. Peng, A. Chenani, S. Hu, Y. Zhou, and A. J. Niemi³. arXiv:1412.7975v1 [q-bio.BM]
- 4.- Prototyping bio-nanorobots using molecular dynamics simulation and virtual reality. M. Hamdi, A. Ferreira, G. Sharma and C. Mavroidis. Microelectronics Journal (2008), 39: 190.
- 5.- Visualizing Protein Structures in Virtual Interactive Interface. K. Ahsan and M. Shahzad. Journal of Medical and Bioengineering (2015), 4:5.

5. ACLARACIONES PARA EL ESTUDIANTE:

- 1.- Para la realización de este proyecto es altamente recomendable que el alumno o alumna curse o haya cursado la asignatura de Ingeniería de Proteínas. En ella se completan los conocimientos básicos y las destrezas necesarias para desarrollar herramientas elementales de bio-informática estructural de proteínas.
- 2.- Aun cuando disponer de conocimientos previos de Unity/Unreal Engine o C#/C++ no es un prerrequisito indispensable, el alumno deberá estar dispuesto y abierto a completar sus conocimientos de programación en estos entornos. Aún cuando en la programación de este TFG se ha incluido una previsión de horas de formación complementaria en este sentido, deberá tenerse en cuenta que dicha previsión tiene, necesariamente, carácter meramente estimativo y podría desviarse de forma significativa en cada caso particular.

DATOS DEL TUTOR/A UGR:

Apellidos: Ramírez Rodrigo
Teléfono: 657854910

Nombre: Hilario
e-mail: hilario@ugr.es

**En el caso de trabajos desarrollados en Empresas u otras Instituciones ajenas a la Universidad de Granada, por favor completar la siguiente información:

TUTOR/A DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN:

Apellidos:
Empresa/Institución:
Teléfono:

Nombre:
e-mail: