



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Desarrollo de una aplicación bioinformática para filogenética y generación de dendrogramas mediante el análisis de homología estructural

Descripción general (resumen y metodología):

La ingente masa de datos genómicos y proteómicos acumulados durante las últimas décadas nos ha permitido constatar de forma contundente algo que ya se había planteado anteriormente: durante el proceso evolutivo, las secuencias génicas de un marco abierto de lectura divergen más rápidamente que las secuencias peptídicas que codifican (debido a las mutaciones silenciosas derivadas de la degeneración del código genético) y, a su vez, las secuencias peptídicas divergen más rápidamente que las estructuras nativas de las proteínas que codifican (debido a la presión selectiva funcional). Por todo ello, para analizar un árbol evolutivo es crucial precisar la escala temporal y elegir el criterio adecuado. Si se estudia el parentesco entre especies que divergieron muy recientemente, se emplearán las secuencias génicas, ya que es poco probable encontrar diferencias significativas en las secuencias peptídicas. Por el contrario, para obtener filogenias de organismos muy distantes, deben tenerse en cuenta las homologías estructurales de sus proteínas. Además, la filogenética estructural permite identificar relaciones evolutivas que no se detectan fácilmente a nivel de secuencia, facilitando la predicción de funciones proteicas en organismos poco caracterizados o en proteínas de función desconocida. Asimismo, el uso de dendrogramas basados en estructura aporta información complementaria a los métodos convencionales, mejorando la robustez del análisis evolutivo.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

El objetivo del TFG propuesto será la implementación de un prototipo de aplicación bioinformática que facilite la investigación de filogenias basadas en homología estructural a gran escala. Para ello, se plantea que la aplicación a desarrollar (se empleará para ello un compilador de C++ o Free Pascal/Lazarus) disponga de un front-end visual e interactivo que permita:

1. Gestionar las bases de datos estructurales.
2. Realizar el análisis cuantitativo de la homología estructural entre proteínas, subunidades o dominios funcionales.
3. Obtener y visualizar los dendrogramas y árboles filogenéticos correspondientes.

Plan de trabajo

1. Revisión y extracción de datos estructurales: carga de ficheros PDB y preparación de conjuntos de proteínas. Definición de clases y arquitectura modular.
2. Implementación del módulo de cálculo de similitud estructural (lectura de coordenadas y cálculo de RMSD). Alineamiento y cálculo de puntuaciones de homología.
3. Generación de la matriz de distancias y creación de dendrogramas mediante clustering jerárquico.
4. Desarrollo de la interfaz visual para cargar datos, ajustar parámetros y visualizar árboles filogenéticos.

Bibliografía básica:

1. Asthana M, Easton A, Mollenhauer J, Renwick S, Golpalrathnam A. Visualizing Bacteriophage Evolution Through Sequence and Structural Phylogeny of Lysin A and

- Terminase Proteins: An Analysis of Protein Structure Across Phage Clusters. The Journal of Purdue Undergraduate Research. 2021;11(1):Article 2. doi:10.7771/2158-4052.1492
2. Agarwal G, Rajavel M, Gopal B, Srinivasan N. Structure-Based Phylogeny as a Diagnostic for Functional Characterization of Proteins with a Cupin Fold. PLoS One. 2009;4(5):e5736. doi:10.1371/journal.pone.0005736
 3. Chakraborty S, Rao BJ, Baker N, Asgeirsson B. Structural Phylogeny by Profile Extraction and Multiple Superimposition Using Electrostatic Congruence as a Discriminator. Intrinsically Disordered Proteins. 2013;1(1):e25463. doi:10.4161/idp.25463
 4. Fu X, Yu LJ, Mao-Teng L, Wei L, Wu C, Ma Y-F. Evolution of Structure in γ -Class Carbonic Anhydrase and Structurally Related Proteins. Molecular Phylogenetics and Evolution. 2008;47(1):211-220. doi:10.1016/j.ympev.2008.01.005
 5. Kim TD, Pretorius D, Murray JW, Cardona T. Exploring the Structural Diversity and Evolution of the D1 Subunit of Photosystem II Using AlphaFold and Foldtree. Physiologia Plantarum. 2025;177(3):e70284. doi:10.1111/ppl.70284
 6. Malik AJ, Poole AM, Allison JR. Structural Phylogenetics with Confidence. Molecular Biology and Evolution. 2020;37(9):2619-2630. doi:10.1093/molbev/msaa100

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Para la realización de este proyecto es altamente recomendable que el alumno o alumna curse o haya cursado la asignatura de Ingeniería de Proteínas y/o disponer de conocimientos básicos en programación.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: FERNANDO JESÚS REYES ZURITA

Ámbito de conocimiento/Departamento: BIOQUÍMICA Y BIOLOGÍA MOLECULAR I

Correo electrónico: ferjes@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos: Hilario Ramírez Rodrigo

Ámbito de conocimiento/Departamento: BIOQUÍMICA Y BIOLOGÍA MOLECULAR I

Correo electrónico: hilario@ugr.es

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: