



## 1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

**Título:** Prototipo escalable y flexible para la simulación virtual de rutas metabólicas no lineales, orientado al laboratorio y al aula

### **Descripción general** (resumen y metodología):

Durante la práctica totalidad del siglo XX, la investigación metabólica se centró en la confección detallada del mapa metabólico desde una perspectiva descriptiva y estática basada, casi exclusivamente, en datos experimentales. La incorporación de métodos que permiten obtener una imagen dinámica y cuantitativa precisa, basadas no solo en datos experimentales sino también en aproximaciones numéricas y simulaciones virtuales, es ahora de la máxima prioridad en el campo del análisis metabólico.

Este TFG colaborativo entre los departamentos de Bioquímica y Biología Molecular I y el departamento de Matemática Aplicada incide precisamente en este problema y se apoya en el denominado proyecto ASIMOV desarrollado por ambos departamentos durante los tres años precedentes, dentro de un proyecto interdisciplinar docente.

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

### **Objetivos planteados:**

El objetivo fundamental del TFG será completar el desarrollo de un prototipo funcional de herramienta bioinformática de simulación, flexible y escalable, que partiendo de la descripción de una ruta metabólica dada (o un fragmento de ésta) en términos de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias y no lineales, permita hacer predicciones sobre su dinámica apoyándose en un conjunto de algoritmos cualificados basados en el análisis numérico (como los "ODE solvers" integrados en las librerías de Python, R o C++).

El prototipo permitirá tanto la interacción sencilla a través de una interfaz visual amigable y orientada a demostraciones docentes, en las que el motor numérico es transparente para el usuario, como a través de un sistema de scripting que permitirá escalar su flexibilidad y potencia, en caso de usuarios avanzados.

### **Plan de trabajo**

1. **Sistema de scripting e integración de entornos C++ y Python.** Desarrollo del "front-end" en C++. Implementación del "back-end" para el análisis numérico en Python. Conexión bidireccional entre ambas capas
2. **Desarrollo de una interfaz gráfica.** Diseño de la interfaz para la presentación visual de rutas metabólicas y los resultados obtenidos. Implementación de controles para seleccionar parámetros, lanzar simulaciones y mostrar resultados
3. **Validación preliminar del prototipo.** Utilizando casos de prueba, como fragmentos de la ruta de la glucólisis. Comparación de resultados simulados con datos experimentales existentes

### **Bibliografía básica:**

1. Hynne F, Danø S, Sørensen PG. Full-scale model of glycolysis in *Saccharomyces cerevisiae*. *Biophysical Chemistry*. 2001.

2. Ahmed N, SS T, Imran M, et al. Numerical analysis of auto-catalytic glycolysis model. AIP Advances. 2019.
3. Lambeth MJ, Kushmerick MJ. A computational model for glycogenolysis in skeletal muscle. Annals of Biomedical Engineering. 2002.
4. Termonia Y, Ross J. Oscillations and control features in glycolysis: numerical analysis of a comprehensive model. Proceedings of the National Academy of Sciences. 1981.
5. Kourdis PD, Steuer R, Goussis DA. Physical understanding of complex multiscale biochemical models via algorithmic simplification: Glycolysis in *Saccharomyces cerevisiae*. Physica D: Nonlinear Phenomena. 2010.
6. Kloska SM, Pałczyński K, Marciniak T, et al. Integrating glycolysis, citric acid cycle, pentose phosphate pathway, and fatty acid beta-oxidation into a single computational model. Scientific Reports. 2023.

### **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 Biología Molecular de Sistemas 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:** LIDIA FERNÁNDEZ RODRÍGUEZ

**Ámbito de conocimiento/Departamento:** MATEMÁTICA APLICADA

**Correo electrónico:** lidiafr@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:**