

**Modelización y simulación de biosistemas**

Código: 100919  
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2500253 Biotecnología	OT	4	0

**Contacto**

Nombre: Joan Albiol Sala

Correo electrónico: Joan.Albiol@uab.cat

**Uso de idiomas**

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: Sí

Algún grupo íntegramente en español: No

**Otras observaciones sobre los idiomas**

Se utiliza bibliografía en inglés

**Prerequisitos**

Poseer conocimientos fundamentales de álgebra, cálculo diferencial e integral, química y bioquímica.

Ser capaz de leer literatura científica en inglés.

Ser capaz de utilizar herramientas informáticas básicas (Word, Excel,...)

Poseer conocimientos previos de programación de ordenadores puede ser de utilidad.

Poseer conocimientos básicos de Catalán a nivel oral y escrito

**Objetivos y contextualización**

La simulación por ordenador del comportamiento de sistemas es una rama de la ciencia bien desarrollada especialmente en ámbitos como la ingeniería, la física o la química. En el ámbito de la biotecnología y en general las ciencias de la vida, su papel fue inicialmente limitado. En éste contexto la simulación clásica reproduce el comportamiento de microorganismos y enzimas en biorreactor. Pero el verdadero impulso a la simulación en biotecnología es consecuencia, por un lado de la acumulación de conocimientos de los componentes de los seres vivos y su funcionamiento aislado y por otra parte de la comprobación a nivel experimental de que los componentes de un sistema biológico, tal como una célula, operan conjuntamente de manera coordinada y autónoma como un sistema integrado. El sistema se puede considerar como un entramado de redes (metabólicas, genéticas, de transmisión de señal,...) operando de manera coordinada. De esta forma la comprensión del funcionamiento de uno de estos sistemas, incluso de los más sencillos, no puede comprenderse si no es desde el punto de vista de su operación como un sistema integrado. La operación del sistema da lugar a la aparición de propiedades emergentes, que no existen en cada una de las partes aisladas pero que son fundamentales para la operación del sistema. Esta nueva visión ha dado lugar a la aparición de la disciplina conocida como Biología de Sistemas. La simulación por ordenador del comportamiento de los sistemas biológicos ha sido clave fundamental para el desarrollo de la Biología de Sistemas juntamente con la acumulación de información sobre la operación de sistemas biológicos en grandes bases de datos y la proliferación y abaratamiento de los ordenadores. Por medio de la simulación por

ordenador se hace evidente las diferencias de comportamiento en función tanto de las propiedades individuales como de la interconexión de sus componentes así como también de las condiciones de operación.

En este contexto la asignatura pretende introducir al alumno en las aproximaciones fundamentales y la metodología para conseguir simular el comportamiento de un sistema biológico en un ordenador. Desde el biorreactor como sistema experimental hasta la simulación de ejemplos de redes de diferentes tipos (metabólicas, genéticas, de transmisión de señal,...) en diferentes estados (estacionario, dinámico,...). Como objetivo global se pretende que el alumno pueda experimentar de primera mano las diferencias y la relevancia del comportamiento de un sistema como un 'todo' integrado en contraposición a las características de sus componentes aislados, así como también de la información que se deriva de los diferentes modos de operación y por tanto de los requerimientos para estudiarlos.

Dado que se pretende que el alumno tenga una experiencia de simulación de primera mano, el curso se plantea con un contenido práctico elevado. Así el alumno utilizará tanto un entorno de programación numérico, tipo Matlab, para alcanzar el conocimiento de las operaciones fundamentales con ejemplos sencillos, así como de programas más específicos enfocados a la simulación de sistemas biológicos (SBW, COPASI, ...) para la simulación de sistemas biológicos concretos de mayor complejidad.

El temario presenta la materia de forma gradual, avanzando desde los conceptos y conocimientos básicos hacia la descripción de sistemas de complejidad creciente de manera que el alumno pueda comprender la necesidad del estudio de los sistemas como un todo integrado, en el marco de la nueva biotecnología del siglo XXI.

## Contenido

1. Introducción. Modelos y sistemas
  1. Definición de modelo. Ventajas y necesidad
  2. Aproximaciones a la modelización de sistemas
  3. Características de sistemas
  4. Fases del proceso de modelización
  5. Componentes y tipos de modelos.
2. Revisión de conceptos fundamentales y modelización
  1. Ecuaciones de balance y estructura.
  2. Cinética y termodinámica
3. Sistemas sencillos en estado dinámico
  1. Sistemas biorreactor biocatalizador
  2. Sistemas metabólicos sencillos
  3. Dinámica básica de sistemas
4. Sistemas en estado estacionario
  1. Sistemas biorreactor biocatalizador
  2. Redes metabólicas. Módulos elementales.
  3. Optimización de sistemas en estado estacionario.
  4. Análisis de sensibilidad de sistemas. Teoría de control metabólico
5. Ejemplos de simulación de sistemas
  1. Redes metabólicas
  2. Redes genéticas.
  3. Redes de transmisión de señal