



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014/2015

Título de la línea de trabajo: Estudio de la perturbación de la membrana celular debida a la acción de fármacos con actividad anestésica local.

Descripción de la línea de trabajo:

En el presente trabajo, se explorará el efecto de la perturbación mecánica de diferentes modelos de membrana celular, debido a la presencia de fármacos con actividad anestésica, en especial la benzocaína y la lidocaína, que permita explicar el mecanismo de actuación de dichos compuestos a escala molecular.

La membrana celular será modelada mediante bicapas lipídicas de diferente composición, siendo la dinámica molecular la herramienta computacional empleada para su estudio. Entre otras propiedades a estudiar podemos destacar su módulo de compresibilidad, su constante de flexión, el módulo de Gauss de curvatura, así como la termodinámica asociada al proceso de inserción de dichos fármacos en el interior de la bicapa.

Así del presente trabajo esperamos poder explicar la relación existente entre la estructura de los anestésicos propuestos y su potencia anestésica, a escala molecular, y como el mecanismo molecular de actuación puede estar fuertemente determinado por la naturaleza del anestésico empleado.

Máximo de estudiantes en esta línea: 2

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
José Javier López Cascales	27444844W	javier.lopez@upct.es	UPCT



**Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática**

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014-2015
Título de la línea de trabajo: Modelado de la actuación del factor de transcripción RcsB sobre los regulones relacionados con motilidad y resistencia a estrés en <i>Escherichia coli</i>
Descripción de la línea de trabajo: El alumno establecerá el modelo que describe el efecto del factor de transcripción RcsB sobre los distintos regulones y comparará el resultado de las simulaciones con datos experimentales.
Máximo de estudiantes en esta línea:1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
Manuel Cánovas Díaz	22434275Y	mcanovas@um.es	UM
Sara Castaño Cerezo	50753273R	saracastano@um.es	Externo: INSA-CNRS, TOULOUSE, Francia



**Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática**

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014-2015
Título de la línea de trabajo: Aplicaciones bioinformáticas en Hematología y Oncología Clínico-Experimental
Descripción de la línea de trabajo: Análisis de resultados NGS; simulación in silico de interacciones RNA-proteína; algoritmos predictivos desarrollados en el contexto de proyectos experimentales del grupo de Hematología y Oncología Clínico-Experimental

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM
Javier Corral de la Calle	06560211J	jcc@um.es	Si



**Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática**

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 14/15
Título de la línea de trabajo: Dinámica de péptidos en disolución acuosa
Descripción de la línea de trabajo: Simulación de la dinámica conformacional de péptidos en disolución acuosa
Máximo de estudiantes en esta línea: 1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
Adolfo Bastida Pascual	27441591S	bastida@um.es	UM
Beatriz Miguel Hernández	02210496N	beatriz.miguel@upc.t.es	UPCT



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014/15
Título de la línea de trabajo:
Evolutionary algorithms for de novo drug design
Descripción de la línea de trabajo:
The process of drug design and discovery demands several man years and huge investment. De novo drug design, a Computer-aided drug technique to identify drug-like novel chemical structures from a huge chemical search space, helps to find new drugs by the optimization of multiple pharmaceutically relevant parameters required for a successful drug. As the search space is very large in the case of de novo drug design, Evolutionary algorithm (EA), a soft computing technique can be used to find an optimal solution, which in this case is a novel drug. In this TFM, various EA techniques used in de novo drug design tools will be surveyed and analyzed in detail, with particular emphasis on the computational aspects.
Máximo de estudiantes en esta línea: 1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
José M. García Carrasco	19844302V	jmgarcia@um.es	UM



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014/15
Título de la línea de trabajo:
High performance in silico virtual drug screening on many-core processors
Descripción de la línea de trabajo: Drug screening is an important part of the drug development pipeline for the pharmaceutical industry. Traditional, lab based methods are increasingly being augmented with computational methods, ranging from simple molecular similarity searches through more complex pharmacophore matching to more computationally intensive approaches, such as molecular docking. The latter simulates the binding of drug molecules to their targets, typically protein molecules. This TFM will explore the performance of BINDSURF and MURCIA (two tools we have already carried out) across a broad spectrum of different computer architectures from different vendors, including GPUs from Nvidia and AMD, Intel's Xeon Phi and multicore CPUs with SIMD instruction sets.
Máximo de estudiantes en esta línea: 1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
José M. García Carrasco	19844302V	jmgarcia@um.es	UM



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014/15
Título de la línea de trabajo:
Portable Parallel Programs with Python and OpenCL
Descripción de la línea de trabajo: Open Common Language (OpenCL) runs on multicore GPUs, as well as other architectures including ordinary CPUs and mobile devices. Combining OpenCL with numerical Python (numPy) and a new module—ocl, a Python-to-C converter that lets developers use Python to write OpenCL kernels—creates a powerful framework for developing efficient parallel programs for modern heterogeneous architectures. This TFM will develop some scientific codes using this new approach.
Máximo de estudiantes en esta línea: 1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
José M. García Carrasco	19844302V	jmgarcia@um.es	UM



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014/15
Título de la línea de trabajo: GraphEFM: Calculating Elementary Flux Modes using Graph theory and meta-heuristics
Descripción de la línea de trabajo: Elementary Flux Modes (EFMs) analysis constitutes a fundamental tool in systems biology. However, the efficient calculation of EFMs in genome-scale metabolic networks (GSMNs) is still a challenge. This TFM will develop a novel algorithm based on graph theory and meta-heuristics to enumerate a subset of EFMs in GSMNs. Our approach will try to demonstrate a significant improvement in computation time compared to traditional approaches based on linear programming (as the EFMEvolver). To validate the usefulness of our new approach, the acetate overflow metabolism in the Escherichia Coli bacteria will be study, by means of computing one million EFMs for each energetic amino acid, and then analyzing the relevance of each energetic amino acid based on gene/protein expression data and the obtained EFMs.
Máximo de estudiantes en esta línea: 1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
José M. García Carrasco	19844302V	jmgarcia@um.es	UM



**Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática**

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014-2015
Título de la línea de trabajo:
BÚSQUEDA Y ANÁLISIS DE SECUENCIAS EN PECES
Descripción de la línea de trabajo: Se pretende que los alumnos desarrollen herramientas para la búsqueda y anotación de secuencias génicas en las bases de datos de peces.
Máximo de estudiantes en esta línea: 1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
ALBERTO CUESTA PEÑAFIEL	52759749A	alcuesta@um.es	PROFESOR UM
MARÍA DE LOS ÁNGELES ESTEBAN ABAD	74186458G	aesteban@um.es	PROFESOR UM



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico:2014-15

Título de la línea de trabajo:

Improving usability of trimAI: a multiple-sequence alignment trimming software

Descripción de la línea de trabajo:

Multiple sequence alignments (MSA) are central to many bioinformatics experiments. During the last 20 years, many efforts have been placed to improve existing approximations and to propose new ones. Despite all improvements achieved, the non-polynomial nature of the problem makes MSA reconstruction an active field of research. Identifying and removing non-reliable regions in MSA has became a popular practice for improving alignments prior to downstream analyses. In this context, trimAI (Capella-Gutierrez et al., 2009, <http://trimal.cgenomics.org>) has gained broad recognition (>250 citations) since its first implementation was published. During this time we have continued developing trimAI to incorporate new algorithms as well as suggestions and requests made by the users.

To facilitate the trimAI use and attract users who are not familiar with the command-line, we have planned to build a web-server. On this web-server users will be able to upload their own alignments and process them using all trimAI available methods. We also plan to make available a Galaxy package to allow users to deploy trimAI in public and/or private web-servers. With the same idea of extending trimAI use, we have also planned to integrate trimAI into popular alignment package editors such as JalView, SeaView or the brand new AliView. Depending on time-constraints, we would like also to explore the difficulties of providing trimAI with a graphical user interface (GUI).

Máximo de estudiantes en esta línea:1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
Jesualdo Tomás Fernández Breis	34834720R	jfernand@um.es	UM
Juan Antonio Gabaldón Estevan	22569511W	toni.gabaldon@crg.eu	externo



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico:2014-15
Título de la línea de trabajo:
Estandarización de la representación de ortólogos en recursos bioinformáticos
Descripción de la línea de trabajo:
En los últimos años se han creado varias bases de datos que contienen información sobre ortólogos. Sin embargo cada una de ellas ha seguido criterios distintos de representación y organización de la información, con los consiguientes problemas para la compartición de información. Existen iniciativas internacionales para intentar combatir este problema que pasa por definir una representación estandarizada para este tipo de información. El objetivo de este trabajo es la generación de un repositorio de datos integrado a partir de la información disponible en las bases de datos de ortólogos existentes.
Máximo de estudiantes en esta línea:1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
Jesualdo Tomás Fernández Breis	34834720R	jfernand@um.es	UM
Juan Antonio Gabaldón Estevan	22569511W	toni.gabaldon@crg.eu	externo



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico:2014-15

Título de la línea de trabajo:

Enriquecimiento de repositorios de datos biomédicos con Linked Open Data

Descripción de la línea de trabajo:

Actualmente tenemos disponible la herramienta SWIT (sele.inf.um.es/swit), que a partir de bases de datos relacionales y esquemas XML que representan datos biomédicos podemos generar repositorios de datos RDF. El paradigma de Linked Open Data persigue que los conjuntos de datos publicados en Internet en RDF estén conectados entre sí. Para ello, hace falta identificar qué recursos disponibles en la Linked Open Data Cloud pueden estar relacionados con nuestros datos.

El objetivo será definir mecanismos de selección de los conjuntos de Linked Data más adecuados dado un repositorio RDF y permitir la generación de enlaces entre nuestro repositorio y los repositorios externos. Más información sobre Linked Data: <http://linkeddata.org/>

Máximo de estudiantes en esta línea:1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
Jesualdo Tomás Fernández Breis	34834720R	jfernand@um.es	UM



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico:2014-15

Título de la línea de trabajo:

Análisis basado en técnicas de RNA-Seq de genes implicados en procesos relacionados con implantación embrionaria

Descripción de la línea de trabajo:

Recientemente se han analizado por primera vez de manera sistemática lncRNA expresados maternalmente en embriones humanos tempranos, encontrando aproximadamente 1500 genes diferencialmente expresados entre los transcriptomas humanos EPI y el primario hESC. En este trabajo se analizarán los genes que codifican para proteínas secretadas, por su posible efecto paracrino, el cual podría tener un efecto sobre la implantación embrionaria.

Máximo de estudiantes en esta línea:1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
Jesualdo Tomás Fernández Breis	34834720R	jfernand@um.es	UM
Manuel Avilés Sánchez	77506829A	maviles@um.es	UM



**Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática**

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2015-2016

Título de la línea de trabajo: Imagen Docker para pipelines de Metagenómica

Descripción de la línea de trabajo:

Una parte importante de los estudios metagenómicos consiste en evaluar la diversidad de una comunidad bacteriana mediante marcadores como 16S o CPN60. Los "reads" obtenidos mediante secuenciación de estos marcadores se analizan mediante pipelines como QIIME. Sin embargo, la instalación, configuración y ejecución de estos pipelines es difícil debido a dependencias, configuración, falta de usabilidad, y otros factores. Docker, un entorno de "virtualización", permite definir imágenes que capturan el entorno computacional (Sistema Operativo, software, bibliotecas, datos), mejorando así la capacidad de reproducción de ejecuciones de pipelines, ya que el usuario solo necesita ejecutar la imagen. El alumno creará una imagen Docker que contenga:

- Pipelines de Metagenómica ya configurados y comprobados (QIIME, MOTHUR, mPuma, ...).
- Un dataset de reads, obtenido de un repositorio público, y el resultado de pasar esos reads por los pipelines.
- Una página Web con documentación extensa sobre cómo usar los pipelines a través de la imagen.

De modo que cualquier usuario que esté interesado en este tipo de análisis tenga un punto de partida fácil de usar.

Máximo de estudiantes en esta línea: 2



UNIVERSIDAD DE
MURCIA

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
Ricardo Fernández Pascual	48396776	ricardof@um.es	UM
Mikel Egaña Aranguren	16068955M	mikel.egana.aranguren@gmail.com	Externo



**Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática**

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014-2015
Título de la línea de trabajo:
Tratamiento y análisis de información en investigación genómica
Descripción de la línea de trabajo: En esta línea, el trabajo consistirá en la aplicación de los conocimientos y habilidades adquiridas en distintas materias del máster, reflejando el carácter interdisciplinar de la Bioinformática. En concreto, se pretende que el alumno desarrolle un trabajo sobre el tratamiento y análisis de datos biológicos, como los producidos en los procesos de investigación genómica u otros relacionados, a través de la combinación y aplicación de técnicas informáticas y estadísticas.
Máximo de estudiantes en esta línea: 1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
Manuel Franco Nicolás	27471828F	mfranco@um.es	Profesor UM
Jesualdo Tomás Fernández Breis	34834720R	jfernand@um.es	Profesor UM



**Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática**

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014-2015
Título de la línea de trabajo:
Curvas ROC en el estudio y análisis de datos en Bioinformática
Descripción de la línea de trabajo: Las curvas ROC (Receiver Operating Characteristic) son utilizadas para cuantificar la exactitud de los sistemas o tests diagnósticos para discriminar entre dos grupos (por ejemplo, un grupo de enfermos frente a uno sano, o genes en un cierto grupo funcional o no). En general, el análisis de curvas ROC constituye un mecanismo para evaluar procedimientos de discriminación o clasificación. El trabajo que se desarrolle en esta línea se centrará en el estudio de problemas de evaluación de sistemas diagnósticos o clasificadores a partir de datos no balanceados en estudios bioinformáticos.
Máximo de estudiantes en esta línea: 1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
Juana María Vivo Molina	34791534D	jmvivomo@um.es	Profesor UM
Jesualdo Tomás Fernández Breis		jfernand@um.es	Profesor UM



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014-2015
Título de la línea de trabajo:
Software estadístico en Bioinformática
Descripción de la línea de trabajo: En la actualidad, el software estadístico es el soporte imprescindible para la aplicación práctica de los métodos estadísticos. En una amplia variedad de situaciones usuales en el ámbito de la Bioinformática, ya sea por necesidades científicas o profesionales, la extracción de información a partir de datos específicos de este campo requiere de modificaciones computacionales en su tratamiento, para que los resultados sean fiables o para mejorar su precisión. En este marco, los TFM que se realicen en esta línea tratarán de desarrollar herramientas necesarias para la computación estadística o implementar las variaciones específicas para su resolución en situaciones concretas.
Máximo de estudiantes en esta línea: 1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
Manuel Franco Nicolás	27471828F	mfranco@um.es	Profesor UM
Juana María Vivo Molina	34791534D	jmvivomo@um.es	Profesor UM



Anexo I. Oferta de Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Bioinformática

El siguiente documento describe una línea de trabajo y los tutores que la ofertan.

Curso académico: 2014-15
Título de la línea de trabajo:
Eplotación de bases de datos de expresión génica en cáncer de próstata
Descripción de la línea de trabajo: El proyecto consistiría en generar una aplicación que sea capaz de explotar estadísticamente los datos de expresión génica que son hechos públicos en plataformas accesibles: Ej. GEO, integrándolos con los datos clínicos que proporcionan los mismos autores y también son disponibles en la misma plataforma. La aplicación se centraría exclusivamente en cáncer de próstata. Debe ser capaz de realizar un análisis estadístico representativo para poder sacar alguna conclusión sencilla (ej. Comparar tumores localizados y extendidos, o por características clínicas). Como dato de la utilidad de esta aplicación, se debería realizar un caso práctico, que consistiría en analizar los niveles de expresión de 4 genes (BNC2, PTEN, BRCA1 y BRCA2) en relación con la expresión de un mi-RNA (miR-106b) y su relación con el tipo de tumor al debut: Benigno, Primario no metastásico o metastásico o muestra de metástasis; así como su relación con el desarrollo de recidiva, resistencia a la castración y muerte. Otras extensiones que sería interesante incluir para los clínicos-investigadores en general serían: 1.- La posibilidad de incorporar de forma pseudoautomática datos propios, que no estuvieran en GEO, pero que los pudiera cargar cada investigador, para comparar sus resultados con los disponibles públicamente, y la posibilidad de incorporar datos de proteínas (expresión IHQ) que tampoco están disponibles en GEO. 2.- La posibilidad de analizar el significado de co-expresiones, es decir la ocurrencia de 2 eventos (elevación del gen A y disminución del gen B) en relación con las características clínicas descritas anteriormente.
Máximo de estudiantes en esta línea: 1

Tutores (el segundo será el cotutor)

Nombre y apellidos	DNI	email	Profesor UM/UPCT/externo
José Tomás Palma Méndez	31248453D	jtpalma@gmail.com	UM
Enrique Gonzalez Billalabeitia	44676222X	engonbil@um.es	externo