



Propuesta de Trabajo Fin de Máster

Año académico 2024-2025

MÁSTER EN MÉTODOS COMPUTACIONALES EN CIENCIAS

Proyecto Nº 9

Título: Reposicionamiento de fármacos masivo utilizando Graph Neural Networks

Departamento/ Laboratorio: Biología computacional (CIMA)

Director: Mikel Hernaez

Correo electrónico: mhernaez@unav.es

Codirector:

Correo electrónico:

Resumen:

El proyecto tiene como objetivo ser pionero en el uso de aprendizaje profundo en gráficos, impulsado por la amplia base de conocimientos biomédico público, para descubrir combinaciones de fármacos sinérgicas diseñadas para revertir la transcripción desregulada asociada con la resistencia al tratamiento en cánceres mortales. Específicamente, se desarrollará un modelo de reutilización de medicamentos basado en Graph Neural Networks para identificar fármacos que puedan revertir módulos transcripcionales desregulados. Las nuevas combinaciones de medicamentos descubiertas serán validadas experimentalmente en líneas celulares y organoides clínicamente relevantes de cánceres una mortalidad y mal pronóstico.

Además, estos modelos se usarán para ampliar nuestra comprensión de la dinámica transcripcional en la heterogeneidad tumoral y plasticidad adaptativa que conduce a la resistencia al tratamiento en dichos cánceres.

OPTATIVAS RECOMENDADAS

1. ML I
2. ML II
3. Análisis de datos de alto rendimiento
4. Bioinformática Estructural o Análisis de Imágenes