



Propuesta de Trabajo Fin de Máster

Año académico 2024-2025

MÁSTER EN MÉTODOS COMPUTACIONALES EN CIENCIAS

Proyecto Nº 02
Título: Inteligencia Artificial aplicada a estructuras funcionales de RNA
Departamento/ Laboratorio: 406 CIMA
Director: Puri Fortes Correo electrónico: pfortes@unav.es Codirector: Fernando Pastor Correo electrónico: fpastor@unav.es
Resumen: Comprender el código del RNA es la próxima frontera que ha de franquearse para que las terapias de RNA tengan por fin un impacto profundo en la clínica. Este objetivo está mucho más avanzado en el campo de las proteínas, donde tras años de averiguar estructuras secundarias por cristalografía y de entender los dominios fundamentales, ha sido posible aplicar estrategias de inteligencia artificial que permitiesen predecir la estructura de secuencias de amino ácidos concretas. Los excelentes resultados obtenidos con AlphaFold han de continuar ahora para relacionar estructura y función con el fin último de ser capaces de imaginar una estructura con cierta funcionalidad y obtener de ella la secuencia de amino ácidos que la podría formar de forma más fiel. El objetivo del TFM es el de dar los primeros pasos en este camino en el mundo del RNA. Disponemos en el laboratorio de una batería de secuencias conocidas funcionales o no, que queremos usar como train y test para protocolos de inteligencia artificial. El fin es el de encontrar aquellos parámetros que nos permitan identificar las estructuras de RNA más funcionales. Se utilizarán además programas de predicción de estructuras secundarias para determinar la influencia que tienen los parámetros estructurales en la funcionalidad. Se darán pasos en el futuro para que estos protocolos se puedan integrar con la estructura real de las moléculas de RNA y mejorar así los programas de predicción de estructura de RNA y de su funcionalidad. El fin último es el de ser capaces de diseñar <i>in silico</i> estructuras de RNA con funciones terapéuticas concretas y recorrer con ellas el camino hacia la clínica.

OPTATIVAS RECOMENDADAS

1. Análisis e interpretación de datos de alto rendimiento.
2. Machine learning I
3. Análisis de secuencias y bioinformática estructural
4. Machine learning II