



**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.

**Presupuesto solicitado (máximo 1500€) y breve justificación**

Se solicitan 1500Eur para la validación de los resultados obtenidos mediante secuenciación a nivel de célula única (el resto del coste de la secuenciación se obtendrá de proyectos del laboratorio).

**OPTATIVAS RECOMENDADAS**

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