

Guía docente

230481 - COMBIO - Biofísica Computacional

Última modificación: 09/11/2022

Unidad responsable: Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Telecomunicación de Barcelona
Unidad que imparte: 748 - FIS - Departamento de Física.

Titulación: **Curso:** 2022 **Créditos ECTS:** 6.0
Idiomas: Inglés

PROFESORADO

Profesorado responsable:

Otros:

CAPACIDADES PREVIAS

- Conocimiento de matlab o algún otro lenguaje de programación. (visto MNC1)
- Conocimiento de los principales algoritmos de propagación temporal para la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias. Métodos de Runge-Kutta (visto MNC2)
- Conocimiento de los conceptos básicos y del tratamiento general de ecuaciones diferenciales ordinarias y de las ecuaciones en derivadas parciales (visto MM2)
- Familiaridad con los conceptos básicos relacionados con la bacteria, la célula eucariota y el dogma central de la biología (visto BIOF2)
- Familiaridad con conceptos básicos de mecánica analítica: espacio de fases y atractores (visto MECF)

REQUISITOS

Numerical and Computational Methods 2
Mecànica
Mètodes matemàtics 2
Biophysics 2

COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN A LAS QUE CONTRIBUYE LA ASIGNATURA

Específicas:

INF1. Comprensión y dominio de la programación de ordenadores, uso de sistemas operativos y de herramientas informáticas (software científico). Aptitudes para implementar algoritmos numéricos en lenguajes de bajo (C, F90) y alto (Matlab) nivel.
BIOC1. Capacidad de describir de forma general la estructura de los seres vivos, desde el nivel celular hasta el sistémico. Capacidad de analizar las limitaciones impuestas por las leyes físicas al desarrollo de los sistemas biológicos, y las soluciones biológicas a los problemas de ingeniería.
BIOC2. Aptitud para analizar los sistemas biológicos como sistemas complejos.
INF2. Aptitud para resolver problemas de física e ingeniería utilizando metodologías numéricas fundamentales: tratamiento de datos experimentales, interpolación, raíces de ecuaciones no-lineales, álgebra lineal numérica y optimización, cuadraturas e integración de ecuaciones diferenciales, ponderando adecuadamente sus diferentes aspectos (precisión, estabilidad y rendimiento o coste).

Genéricas:

3. CAPACIDAD PARA IDENTIFICAR, FORMULAR Y RESOLVER PROBLEMAS DE INGENIERÍA FÍSICA. Capacidad para plantear y resolver problemas de ingeniería física con iniciativa, tomada de decisiones y creatividad. Desarrollar métodos de análisis y solución de problemas de forma sistemática y creativa.

Transversales:

1. TERCERA LENGUA: Conocer una tercera lengua, que será preferentemente inglés, con un nivel adecuado de forma oral y por escrito y en consonancia con las necesidades que tendrán las tituladas y los titulados en cada enseñanza.
 2. APRENDIZAJE AUTÓNOMO - Nivel 3: Aplicar los conocimientos alcanzados en la realización de una tarea en función de la pertinencia y la importancia, decidiendo la manera de llevarla a cabo y el tiempo que es necesario dedicarle y seleccionando las fuentes de información más adecuadas.
- 05 TEQ N1. TRABAJO EN EQUIPO - Nivel 1: Participar en el trabajo en equipo y colaborar, una vez identificados los objetivos y las responsabilidades colectivas e individuales, y decidir conjuntamente la estrategia que se debe seguir.

METODOLOGÍAS DOCENTES

La metodología de este curso se centrará en clases teóricas y de problemas / programación con ejemplos prácticos. Aparte de clases normales también habrá una serie de seminarios sobre la aplicación de los métodos explicados en clase a diferentes campos de la investigación

Durante el curso habrá básicamente dos tipos de clase:

-Clases teóricas donde se definirán conceptos y estructuras en el campos computacionales, matemático y biofísico. La estructura de la clase será exponer los conceptos numéricos, matemáticos o biológicos a partir de la pizarra, vídeos y explicaciones interactivas.

-Clases de problemas y programación donde se trabajarán ejemplos y se plantearán problemas y códigos a trabajar en casa.

Una clase podrá tener contenido de ambos tipos siempre que sea necesario.

OBJETIVOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

- Entender la sintaxis de Python y poder hacer programas básicos de simulación de sistemas dinámicos en el espacio y el tiempo
- Conocer y entender herramientas numéricas utilizando el lenguaje de programación Python para poder resolver y representar soluciones de problemas de física.
- Saber utilizar paquetes de Python no incluidos en la librería standard
- Describir las formas principales de enfocar la simulación de sistemas dinámicos con componente espacial o posicional utilizados en física: Métodos compartimentales, modelos extensos con fronteras y modelos de red. El estudiante debe ser capaz de identificar cuál es el mejor método para simular un problema concreto.
- Describir los principales atractores e identificar las principales bifurcaciones de co.dimensió 1. Ser capaz de implementar una decisión computacional a partir de la teoría de bifurcaciones
- Entender el concepto de ciclo límite y atractor caótico. Definir las interacciones fundamentales en un proceso metabólico y sus reacciones cinéticas. Ser capaz de implementar una red oscilatoria genética y un proceso típico de señalización celular. Analizar un problema biofísico en términos de sus posibles elementos.
- Entender el concepto de sistema excitable y su importancia en la transmisión de información.
- Entender los modelos más fundamentales de dinámica de poblaciones y su relación con la ecología, aprendiendo los diferentes factores que afectan el crecimiento y desarrollo de las poblaciones: efectos espacio-temporales, generacionales. Entender cómo la dinámica de una población puede afectar a su variabilidad genética.
- Definir los aspectos fundamentales de la epidemiología y los modelos más relevantes que presentan las principales características de la propagación de una enfermedad realista. Estudiar los parámetros relevantes de un proceso epidémico y los observables. Entender los efectos del patrón de contactos físicos en la propagación de enfermedades biológicas.
- Definir el concepto de sincronización en sistemas dinámicos. Entender su relevancia en biología. Estudiar modelos simples de sincronización y entender sus propiedades.
- Entender la importancia de los aspectos estocásticos en los sistemas biofísicos. Entender y saber implementar teóricamente y numérica algunos métodos estocásticos relevantes por los temas tratados en este curso.
- Hacer un análisis de estabilidad lineal en un sistema donde se forman patrones. Ser capaz de solucionar un problema lineal y no-lineal de frontera con condiciones iniciales utilizando diferentes implementaciones numéricas comprobando su estabilidad y precisión.
- Comprender el comportamiento dinámico de los sistemas de reacción-difusión-advección y dar ejemplos de la formación de estructuras en biología.
- Entender las limitaciones de la estabilidad lineal y conocer algunos aspectos no lineales de la formación de estructuras espaciales y temporales como las Ecuaciones de amplitud o la interacción de modas.

En cuanto a los seminarios, los estudiantes deberán poder resumir los seminarios en un párrafo y escribir el esquema fundamental de los programas de investigación en dos áreas de biofísica punteras actualmente. También deberán ser capaces de describir brevemente qué herramientas de simulación y informáticas utilizan en estos campos.

HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTADO

Tipo	Horas	Porcentaje
Horas grupo grande	65,0	43.33
Horas aprendizaje autónomo	85,0	56.67

Dedicación total: 150 h

CONTENIDOS

Introducción a python

Descripción:

- Estructura de programación y sintaxis de Python.
- Funciones fundamentales de librerías

Actividades vinculadas:

Entregable periódico

Dedicación: 20h

Grupo grande/Teoría: 5h

Aprendizaje autónomo: 15h

Fundamentos biología matemática. Genes y toma de decisiones

Descripción:

- Conceptos básicos del sistema dinámico: Atractores, bifurcaciones y nuliclinas. Introducción a las EDO. Puntos fijos y nulas. Estabilidad y bifurcaciones. Análisis de estabilidad lineal. Bifurcación transcítica. Ecuaciones diferenciales de alto orden y EDO. Puntos fijos en sistemas unidimensionales. Generalización. Oscilación y periodicidad en sistema bidimensional. Nullclines en sistemas bidimensionales.

-Introducción a la teoría de redes. Redes reguladoras de genes.

Aristas y vértices. Redes dirigidas y no dirigidas. Vínculos inhibidores y excitadores. Términos excitadores/inhibidores tipo MM. Decisiones en redes genéticas celulares.

-Vías inhibitorias y excitadoras.

Tipos de regulacion. Regulación y expresión génica simple. Sistemas de excitabilidad. Emisión de señales. Relevancia de la codificación.

Actividades vinculadas:

Entregables periódicos

Dedicación: 38h

Grupo grande/Teoría: 18h

Aprendizaje autónomo: 20h

Procesos dinámicos en biología. Dinámica de poblaciones, epidemiología y ecología

Descripción:

- Introducción a la dinámica de poblaciones: modelos de tiempo discreto versus tiempo continuo. Modelos de una especie y dos especies. Efectos de la estructura de la población y la edad. Introducción a la genética de poblaciones.

- Dinámica de las enfermedades infecciosas: modelos compartimentales de propagación de enfermedades, de lo simple a lo realista. El umbral epidémico. Efectos de la estructura poblacional. Predicción epidemiológica. Inmunidad colectiva y vacunación. Modelos más complejos de propagación de enfermedades.

- Fenómenos de sincronización en biología: Definición de sincronización. Observaciones empíricas de sincronización en biología, desde luciérnagas hasta movimiento colectivo. Modelos de sincronización.

Actividades vinculadas:

Entregables periódicos

Dedicación: 45h

Grupo grande/Teoría: 20h

Aprendizaje autónomo: 25h

Sistemas especialmente extendidos. Formación de patrones en biología.

Descripción:

- Procesos estocásticos. Descripción neuronal. Escalas espaciales y temporales en modelos biológicos. El ejemplo del cerebro: neuronas y redes. Procesos de Markov. Ecuaciones de Langevin y Fokker-Planck y su implementación numérica.
- Estabilidad y dinámica no lineal en sistemas extendidos. Análisis de estabilidad lineal de sistemas no lineales. El mecanismo de Turing y otros ejemplos de sistemas biológicos de formación de patrones de reacción-difusión-advección. Implementación numérica de este tipo de ecuaciones. Estabilidad numérica y precisión de estas implementaciones. Limitaciones del análisis de estabilidad lineal y extensiones no lineales de modelos lineales.
- Patrones y ondas en el cerebro. Descripción mesoscópica del tejido cerebral. Formación de patrones y ondas en neurociencia.

Dedicación: 45h

Grupo grande/Teoría: 20h

Aprendizaje autónomo: 25h

Seminariis

Descripción:

Ejemplos de modelización fuera de la estructura de temario del curso.

Dedicación: 2h

Grupo mediano/Prácticas: 2h

ACTIVIDADES

Entregable periodico

Descripción:

Los profesores plantearán problemas que pondrán en contexto con el temario. Estos problemas pueden ser sencillos a solucionar en clase o más complicados donde se solucionan parte en clase y parte en casa. En estos problemas se utilizaron tan herramientas matemáticas como computacionales claramente guiadas con el objetivo de entender puntos y problemas concretos de importancia.

Dedicación: 45h

Aprendizaje autónomo: 30h

Grupo mediano/Prácticas: 15h

Proyecto final

Material:

Enunciado de examen

Dedicación: 33h

Aprendizaje autónomo: 30h

Grupo grande/Teoría: 3h



SISTEMA DE CALIFICACIÓN

La evaluación consistirá en entregables periódicos que necesitarán en parte o en su totalidad de computación para resolver problemas típicos utilizando análisis matemáticos o computacionales (HI). También habrá un proyecto final donde se desarrollará un código en python por parejas y se preparará un informe de forma individual (PF).

La nota se obtendrá a partir de la siguiente fórmula

$$0.5*PF+0.5*HE$$

NORMAS PARA LA REALIZACIÓN DE LAS PRUEBAS.

Todas las actividades propuestas son obligatorias. Un entregable o proyecto no presentado se evaluará con cero.

BIBLIOGRAFÍA

Básica:

- Gries, P.; Campbell, J.; Montoyo, J. Practical programming : an introduction to computer science using Python 3. 2nd ed. The Pragmatic Bookshelf, 2013. ISBN 9781937785451.
- DiStefano, J. Dynamic system biology modeling and simulation. Elsevier, 2013. ISBN 9780124104112.
- Ingalls, B.P. Mathematical Modeling in Systems Biology [en línea]. Cambridge, MA: MIT, 2013 [Consulta: 15/04/2020]. Disponible a: <https://ebookcentral.proquest.com/lib/upcatalunya-ebooks/detail.action?docID=3339638>. ISBN 9780262018883.
- Barrat, A.; Barthélemy, M.; Vespignani, A. Dynamical processes on complex networks. Cambridge: Cambridge University Press, 2008. ISBN 9780521879507.

Complementaria:

- Murray, J.D. Mathematical biology, vol. 1 [en línea]. 3rd. ed. Springer, 2002 [Consulta: 09/07/2014]. Disponible a: <http://link.springer.com/book/10.1007/b98868>. ISBN 9780387952239.
- Kriete, A.; Elis, R. Computational Systems biology: from molecular mechanism to diseases [en línea]. 2nd. ed. Amsterdam: Elsevier, 2014 [Consulta: 15/04/2020]. Disponible a: <https://ebookcentral.proquest.com/lib/upcatalunya-ebooks/detail.action?docID=1574921>. ISBN 9780124059269.
- Brauer, F.; Castillo-Chavez, C. Mathematical models in population biology and epidemiology [en línea]. 2nd. ed. New York: Springer, 2012 [Consulta: 15/04/2020]. Disponible a: <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-1686-9>. ISBN 9781461416869.
- Murray, J.D. Mathematical biology, vol. 2 [en línea]. 3rd. ed. Springer, 2003 [Consulta: 15/04/2020]. Disponible a: <http://link.springer.com/book/10.1007/b98869>. ISBN 9780387952284.

RECURSOS

Material informático:

- Curs a atenea.. Recurso en atenea

Enlace web:

- The virtual heart. <http://thevirtualheart.org/>- Human Brain Project. <https://www.humanbrainproject.eu/es/discover/the-project/overview>