



## Guia docent

# 390338 - MSSB - Modelització i Simulació de Sistemes Biològics

Última modificació: 03/06/2024

**Unitat responsable:** Escola d'Enginyeria Agroalimentària i de Biosistemes de Barcelona

**Unitat que imparteix:** 748 - FIS - Departament de Física.

**Titulació:** GRAU EN ENGINYERIA DE SISTEMES BIOLÒGICS (Pla 2009). (Assignatura obligatòria).

**Curs:** 2024

**Crèdits ECTS:** 6.0

**Idiomes:** Català

### PROFESSORAT

**Professorat responsable:** CLARA PRATS SOLER

**Altres:** Alvarez Lacalle, Enrique  
Lopez Codina, Daniel

### COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

#### Específiques:

1. Models biològics i determinació de les seves principals característiques.

### METODOLOGIES DOCENTS

Les activitats formatives inclouran classes teòriques, classes pràctiques i activitats dirigides. Les sessions teòriques constaran de classes magistrals i de tipus cooperatiu, incloent exercicis pràctics per ser resolts amb un full de càlcul proposats pel professor sobre un tema ja treballat, en les que es promourà un alt nivell de participació de l'estudiant. Les pràctiques es faran amb ordinadors. En aquestes sessions es treballarà individualment o en grups reduïts, i al final de les sessions s'haurà de presentar un informe individual de la pràctica realitzada.

### OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

Comprendre els fonaments bàsics de la modelització en l'àmbit de l'enginyeria de sistemes biològics, entendre models existents i identificar-ne les utilitats, limitacions i dominis d'aplicació. Utilitzar programes de simulació existents, ajustant els seus paràmetres a dades experimentals, i interpretar el significat i validesa dels resultats que se n'obtenen. Dissenyar, implementar i utilitzar nous models i simulacions seguint les diverses etapes del procés de modelització i simulació.

### HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup gran	40,0	26.67
Hores grup petit	20,0	13.33
Hores aprenentatge autònom	90,0	60.00

**Dedicació total:** 150 h

## CONTINGUTS

### INTRODUCCIÓ A LA MODELITZACIÓ I SIMULACIÓ

**Descripció:**

## 1.1 Conceptes bàsics

Ciència, tecnologia, matemàtiques i biologia. Postulats i Principis de la ciència front models. Necessitat de la modelització en ciència i tecnologia.

## 1.2 Tipus de models

Estratègia top-down i estratègia bottom-up. Models continus en equacions diferencials. Models en compartiments. Models amb espai explícit. Autòmat cel·lular. Models basats en agents. Xarxes.

## 1.3 Mètodes numèrics

Interpolació. Filtres numèrics. Derivada numèrica. Integració numèrica. Anàlisi de sensibilitat. Parametrització de funcions.

## 1.4 Models continus de creixement i decreixement

Models de creixement: exponencial, logístic, Gompertz i altres. Models de decreixement: exponencial i altres. Caos determinista.

## 1.5 Introducció a la programació

Paràmetres i variables. Estructura d'un codi de programació.

**Activitats vinculades:**

Activitat 1: Classes d'explicació teòrica.

Activitat 2: Proves individuals d'avaluació.

Activitat 3: Sessions pràctiques amb ordinadors a l'aula.

**Dedicació:** 23h

Grup gran/Teoria: 9h

Grup petit/Laboratori: 4h

Aprenentatge autònom: 10h

### MODELS CONTINUS EN BIOQUÍMICA I EN MICROBIOLOGIA

**Descripció:**

## 2.1 Cinètica enzimàtica

Cinètica de Michaelis-Menten

## 2.2 Models primaris

Velocitat específica de creixement d'un cultiu. Mesura experimental de la corba de creixement. Fases de creixement d'un cultiu tancat. Models primaris. Model de Baranyi i Roberts.

## 2.3 Models secundaris

Model de Monod (concentració de substrat). Model de Ratkowsky (temperatura).

## 2.4 Cultius continus

Modelització d'un bioreactor simple.

## 2.5 Models d'inhibició

Inhibició no competitiva. Inhibició exponencial decreixent. Inhibició competitiva. Inhibició per substrat. Inhibició acompetitiva.

Cinètica de Monod generalitzada

## 2.6 Models terciaris

La plataforma ComBase.

**Activitats vinculades:**

Activitat 1: Classes d'explicació teòrica.

Activitat 2: Proves individuals d'avaluació.

Activitat 3: Sessions pràctiques amb ordinadors a l'aula.

**Dedicació:** 23h

Grup gran/Teoria: 9h

Grup petit/Laboratori: 4h

Aprenentatge autònom: 10h



## MODELS ESTRUCTURATS EN COMPARTIMENTS

### Descripció:

3.1 Estructura, formalisme i representació

3.3 Exemples en microbiologia i en farmacocinètica

Model amb un sol compartiment: utilització de traçadors. Model amb dos compartiments: farmacocinètica. Models amb més compartiments: bioreactors amb processos simultanis. Notació matricial.

### Activitats vinculades:

Activitat 1: Classes d'explicació teòrica.

Activitat 2: Proves individuals d'avaluació.

Activitat 3: Sessions pràctiques amb ordinadors a l'aula.

### Dedicació: 23h

Grup gran/Teoria: 5h

Grup petit/Laboratori: 2h

Aprenentatge autònom: 16h

## MODELS AMB ESPAI EXPLÍCIT

### Descripció:

Models primaris, secundaris i terciaris. Efecte de la temperatura, pH, aW i molt altes pressions.

Models empírics. Bases de dades i ajustos.

Models continus de població.

4.1 Models amb espai continu

Modelització de la difusió. Transport de calor per conducció.

4.2 Autòmat cel·lular

El joc de la vida. Aplicacions en medi ambient i en fisiologia.

### Activitats vinculades:

Activitat 1: Classes d'explicació teòrica.

Activitat 2: Proves individuals d'avaluació.

Activitat 3: Sessions pràctiques amb ordinadors a l'aula.

### Dedicació: 33h

Grup gran/Teoria: 5h

Grup petit/Laboratori: 4h

Aprenentatge autònom: 24h

## MODELS BASATS EN AGENTS I XARXES COMPLEXES

### Descripció:

5.1 Models basats en agents i models basats en l'individu

Formalisme. Models basats en agents vs models continus. Exemples en epidemiologia i microbiologia

5.2 Xarxes complexes en biologia de sistemes

Introducció i formalisme. Xarxes complexes en biologia de sistemes

### Activitats vinculades:

Activitat 1: Classes d'explicació teòrica.

Activitat 2: Proves individuals d'avaluació.

Activitat 3: Sessions pràctiques amb ordinadors a l'aula.

### Dedicació: 25h

Grup gran/Teoria: 3h

Grup petit/Laboratori: 4h

Aprenentatge autònom: 18h



## EPIDEMIOLOGIA MATEMÀTICA

### Descripció:

#### 6.1 Introducció

Epidemiologia descriptiva. Relacions conceptuals amb ecologia. Estratègia de la  $r$  i estratègia de la  $K$ . Models matemàtics en epidemiologia. Incidència, prevalença, control, eliminació, eradicació i extinció.

#### 6.2 Models estructurats en compartiments

Model SI, model SIS, model SIR, model SIRS, model SEIR, altres models. Velocitat reproductiva bàsica i efectiva. Severitat d'una malaltia.

#### 6.3 Malalties de transmissió vectorial

Models SIR amb transmissió vectorial.

#### 6.4 Models IbM i xarxes complexes en epidemiologia

Models basats en l'individu. Xarxes complexes en epidemiologia.

### Activitats vinculades:

Activitat 1: Classes d'explicació teòrica.

Activitat 2: Proves individuals d'avaluació.

Activitat 3: Sessions pràctiques amb ordinadors a l'aula.

### Dedicació: 20h

Grup gran/Teoria: 6h

Grup petit/Laboratori: 2h

Aprenentatge autònom: 12h

## DESENVOLUPAMENT DE MODELS

### Descripció:

#### 7.1 Implicacions de la física en el desenvolupament de models de sistemes biològics

Conceptes i vocabulari de termodinàmica. Principis de conservació. Segon principi de la termodinàmica.

#### 7.2 Metodologia de desenvolupament de models

Mètode. Àmbit d'aplicació dels diversos tipus de models.

### Dedicació: 5h

Grup gran/Teoria: 3h

Aprenentatge autònom: 2h

## ACTIVITATS

### CLASSES D'EXPLICACIÓ TEÒRICA

#### Dedicació: 88h

Aprenentatge autònom: 50h

Grup gran/Teoria: 38h

### PROVES INDIVIDUALS D'AVALUACIÓ

#### Dedicació: 2h

Grup gran/Teoria: 2h



## SESSIONS PRÀCTIQUES AMB ORDINADORS A L'AULA

### Descripció:

Pràctica 0: Introducció a la programació amb Matlab  
Pràctica 1: Introducció a la programació amb Matlab (II)  
Pràctica 2: Models històrics de creixement  
Pràctica 3: Simulació d'un bioreactor  
Pràctica 4: Models en farmacocinètica  
Pràctica 5: Propagació del vector de la malaltia de Chagas en una comunitat  
Pràctica 6: Modelització basada en l'individu d'un cultiu bacterià  
Pràctica 7: Propagació del potencial d'acció en el teixit cardíac  
Pràctica 8: La cèl·lula pren una decisió  
Pràctica 9: Epidèmia de grip a un internat anglès

### Material:

Ordinadors portàtils dels estudiants

### Lliurament:

Informe de les pràctiques P1 a P9 mitjançant Atenea

### Dedicació: 60h

Aprenentatge autònom: 40h

Grup petit/Laboratori: 20h

## SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

N1: Els informes de pràctiques lliurats al professor seran corregits i avaluats.

N2: Es faran dos exàmens (parcial i final) que constaran de dues proves cadascun (teòrico-pràctica i pràctica), i que conformaran el 75% de la nota final.

$$N_{\text{final}} = 0,25N1 + 0,75N2$$

## NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

### PRÀCTIQUES:

- 1) Les pràctiques estan concebudes com a presencials, ja que requereixen de la supervisió i suport del professor. Per tant, només s'avaluaran els ítems de pràctiques si l'estudiant assisteix a les sessions corresponents. En casos degudament justificats es podrà fer la pràctica sense haver assistit a la sessió corresponent i prèvia comunicació al professor. En aquests casos no es tindrà en compte la nota de les qüestions inicials d'aquella sessió en el còmput de la nota final.
- 2) Les pràctiques han de fer-se individualment, tot i que es pugui comptar amb el suport puntual dels companys, per tal de garantir el correcte progrés en el procés d'aprenentatge de tots estudiants. En cas de detectar-se una còpia entre estudiants del mateix curs o bé respecte cursos anteriors, es posarà un 0 de la qualificació global de pràctiques (N1).
- 3) Cal lliurar els informes en els terminis indicats a Atenea. No s'acceptarà cap lliurement més enllà del 30 de desembre.

### EXÀMENS:

- 1) Els exàmens han de fer-se individualment i sense cap tipus de suport per part del professor o d'altres estudiants. Per tant, en cas de detectar-se una còpia es posarà un 0 de l'assignatura als estudiants implicats. Pel bloc de teoria no es podran dur apunts ni formulari. Pel bloc pràctic podrà portar-se un full escrit per les dues cares amb els esquemes o llistes de comandes que els estudiants considerin necessaris.



## BIBLIOGRAFIA

---

### Bàsica:

- Haefner, James W. Modeling biological systems : principles and applications [en línia]. 2nd ed. New York: Springer, cop. 2005 [Consulta: 31/10/2023]. Disponible a : <https://ebookcentral-proquest-com.recursos.biblioteca.upc.edu/lib/upcatalunya-ebooks/detail.action?pq-origsite=primo&docID=6311640>. ISBN 0387250115.