

## Propuesta de Prácticas Curriculares

### Título de las prácticas:

Predicción de propiedades de moléculas con redes neuronales de aprendizaje profundo como herramienta de soporte a la anotación de metabolitos.

**Requisitos:** *(indicar titulación y curso); otros requisitos adicionales (idiomas, informática, otros conocimientos, etc).*

Grado en Biotecnología o Grado en informática. Se valorará positivamente conocimientos de Python y de técnicas de aprendizaje automático.

### Proyecto formativo

El objetivo fundamental de la Práctica Externa es guiar al alumno para que aplique en el mundo real sus conocimientos, destrezas y habilidades, en un entorno de trabajo en grupo, que reproduzca las condiciones que se pueden encontrar en su futuro lugar de trabajo. Las funciones y tareas a desarrollar en la Práctica permitirán ayudar al alumno a desarrollar sus competencias profesionales desde tres dimensiones: competencias técnicas (conocimientos técnicos propios de la titulación); competencias personales (comportamientos, comunicación, sentido de responsabilidad, compromiso y motivación, creatividad e iniciativa, implicación, trabajo en equipo) y competencias contextuales (capacidad de adaptación al contexto profesional)

Módulo TRABAJO FIN DE GRADO. El objetivo fundamental del TFG es la realización de un trabajo académico que demuestre que el alumno es capaz de aplicar los conocimientos y competencias que ha adquirido a lo largo de la carrera para tratar de resolver un problema, aprovechar una oportunidad o satisfacer una necesidad, de similar naturaleza y complejidad a los que pueda desarrollar en el ejercicio de su actividad profesional, eligiendo una solución que sea viable, tanto desde un punto de vista técnico como económico.

### Actividades a desarrollar en la práctica académica:

**Contexto:** La cromatografía líquida acoplada a la espectrometría de masas es una técnica ampliamente utilizada para identificar los metabolitos presentes en una muestra biológica. Uno de los aspectos fundamentales de este proceso es la obtención de dos parámetros clave: la relación masa-carga ( $m/z$ ) y el tiempo de retención (RT). Estos parámetros se utilizan para comparar los valores experimentales con bases de datos metabolómicas y realizar la anotación de metabolitos. Sin embargo, medir experimentalmente el RT es un proceso largo, tedioso y costoso, lo que limita la disponibilidad de este parámetro en las bases de datos.

**Objetivo del Proyecto:** El objetivo de esta práctica académica es desarrollar una solución computacional basada en modelos de redes neuronales de grafos que permita predecir el tiempo

de retención (RT) a partir de la fórmula química de las moléculas. Esta solución proporcionará una alternativa más rápida y económica para obtener el valor de RT.

**Actividades a desarrollar durante la práctica académica:**

1. Investigación y comprensión del contexto: El estudiante realizará una revisión exhaustiva de la literatura científica relacionada con la cromatografía líquida acoplada a la espectrometría de masas, el tiempo de retención y las bases de datos metabolómicas. Esto permitirá establecer una base sólida de conocimientos para abordar el proyecto.
2. Recopilación y preparación de datos: El estudiante recopilará conjuntos de datos de moléculas con sus respectivas fórmulas químicas y tiempos de retención asociados. Estos datos se utilizarán para el entrenamiento y validación del modelo de predicción.
3. Diseño y entrenamiento de modelos de redes neuronales de grafos: El estudiante explorará diferentes arquitecturas de redes neuronales de grafos para desarrollar un modelo de predicción del tiempo de retención. Se realizarán experimentos con diferentes configuraciones de hiperparámetros y técnicas de regularización para obtener el mejor rendimiento del modelo.

Evaluación del modelo y análisis de resultados: El estudiante evaluará el rendimiento del modelo utilizando métricas adecuadas.

<b>Nº de plazas:</b>	<b>2</b>
<b>Fecha de inicio:</b>	<b>Octubre 2023</b>
<b>Fecha de fin:</b>	<b>Mayo 2024</b>
<b>Horas semanales:</b>	<b>20</b>
<b>Horario jornada laboral:</b>	<b>A convenir con el estudiante</b>
<b>Importe Ayuda/Bolsa de estudio:</b>	<b>0 €/mes</b>
<b>Tutor académico:</b>  Email:	



POLITÉCNICA



E.T.S. DE INGENIERÍA AGRONÓMICA,  
ALIMENTARIA Y DE BIOSISTEMAS

Departamento tutor académico:	
Tutor empresa:	Abraham Otero Quintana
Email tutor empresa:	<a href="mailto:aotero@ceu.es">aotero@ceu.es</a>
Departamento tutor empresa:	Ingeniería en sistemas de la información
ENTIDAD COLABORADORA:	Universidad CEU San Pablo
<i>A cumplimentar por Oficina Prácticas:</i> Créditos a reconocer (Nº ECTS):	

Enviar por email a: [paebiotec.etsiaab@upm.es](mailto:paebiotec.etsiaab@upm.es)