

Contenido

Capítulo 1. Introducción	1
1.1 Introducción	1
1.2 Biología de Sistemas	1
1.3 Modelos Metabólicos	3
1.4 Red de Petri	3
1.5 Métodos de análisis en Biología de Sistemas	5
1.6 Las restricciones en las funciones celulares	6
1.7 Métodos de análisis basados en restricciones	9
1.8 Métodos de optimización	10
1.9 Herramientas informáticas	11
Capítulo 2. Automatización en la reconstrucción de modelos metabólicos	14
2.1 Introducción	14
2.2 La reconstrucción de modelos metabólicos	14
2.3 Herramientas informáticas orientadas a la reconstrucción de los modelos metabólicos	15
2.4 ¿Por qué se construye COPABI?	18
2.4.1 Metodología que utiliza COPABI	20
2.5 Análisis e implementación de COPABI	21
2.5.1 Mejoras en COPABI	22
Chapter 3. PyNetMet: Python tools for efficient work with networks and metabolic models...23	
3.1 Introduction.....	23
3.2 Software Description	24
3.2.1 Enzyme	25
3.2.2 Network	25
3.2.3 Metabolism	27
3.2.4 FBA	28
3.3 Applications	28
Capítulo 4. BioMOE, Herramienta de análisis multiobjetivo.	32
4.1 Introducción	32
4.2 Optimización Multiobjetivo.....	32
4.3 Algoritmos evolutivos de optimización multiobjetivo	34
4.4 Descripción del algoritmo	35
4.5 Descripción de la aplicación	38
4.5.1 Clase “Read”	39
4.5.2 Clase “Species”	39
4.5.3 Clase “Reactions”	39
4.5.4 Clase “Stoichiometry”	40
4.5.5 Clase “FBA”	41
4.5.6 Clase “AE”	43
Capítulo 5. CompNet, Herramienta para la comparación de dos modelos metabólicos. ...	45
5.1 Introducción	45
5.2 Igualdad entre dos modelos metabólicos	46
5.3 Métricas para distancia entre dos modelos	47
5.4.1 Métrica propuesta por Baláž	48
5.4.2 Métrica propuesta por Bunke	49
5.4.3 Distancia de Edición	50
5.5 Descripción del Software	51
5.5.1 Clase TKEGGReactionsProvider	53
5.5.2 Clase TMetabolite	53
5.5.3 Clase TReaction	53

5.5.4 Class TReactionsGraph	54
5.5.5 Class ModifyNameMetabolites	54

5.5.6 Clase DistanceGraphCalculator	55
5.5.7 Clase ModificationsofGraph	55
Capítulo 6. Conclusiones	58
Bibliografía	60
Apéndices	72