

PRE-PROPUESTA DE PROYECTO CDTI – ACCIÓ (abstract)

Si ha indicado en el formulario de inscripción su interés en mantener una reunión con el punto nacional de contacto de CDTI y ACCIÓ, es necesario rellenar este cuestionario **adjuntarlo a en el formulario de inscripción antes del próximo 25 de junio a las 12:00h.** Una vez aceptado la reunión por parte de la organización, recibirá un email de confirmación de la misma. **Es imprescindible adjuntar este abstract en la inscripción para que la reunión sea aceptada.**

Toda la información será utilizada confidencialmente por ACCIÓ/CDTI y con el único propósito de asesorarle en la preparación de su propuesta.

La extensión máxima del formulario es de **tres páginas.**

1. Información del participante.

Nombre	Irene Espelta Figuerola
Entidad	Mind the Byte
Teléfono	0034934020938
E-mail	irene@mindthebyte.com

Descripción de la entidad

Mind the Byte es una compañía bioinformática especializada en proveer servicios computacionales de desarrollo de fármacos, y también otros servicios y productos basados en SaaS (Software como un servicio, por sus siglas en inglés).
Combinando la química computacional y la filosofía SaaS, somos capaces de dar soporte al proceso de desarrollo de fármacos, reduciendo el tiempo necesario para su salida al mercado, la inversión requerida y el capital humano y técnico.

2. Propuesta

Acrónimo	BioSaaS
Título	Desarrollo de una plataforma computacional de diseño de fármacos biológicos de fácil manejo para el usuario final
Coste total estimado	130.000
Ámbito Sectorial	IT+Salud

Lista de participantes (indicar primero el nombre del coordinador)

Nombre de la entidad Mind the Byte

Lista de entidades subcontratadas

Nombre de la entidad No hay entidades subcontratadas



Resumen de la propuesta (máximo 2 páginas)

Objetivos i descripción del proyecto

En este proyecto se pretende crear una plataforma computacional de diseño de fármacos biológicos de fácil manejo para el usuario final.

El objetivo, a nivel técnico, es desarrollar una plataforma web donde integrar diversas herramientas de software orientadas al descubrimiento y desarrollo de fármacos biológicos que se crearán para su explotación como tecnología *cloud*, según el modelo SaaS (*Software as a Service*).

Desde Mind the Byte, hemos detectado que en el mercado hay un interés creciente en los fármacos biológicos, para los cuales se estima que el uso de herramientas computacionales puede suponer un gran ahorro de tiempo y dinero. En este sentido, Mind The Byte quiere iniciar una nueva línea estratégica de negocio enfocada al desarrollo de herramientas computacionales para ayudar a la generación de biofármacos.

Esta plataforma, a nivel comercial, nos permitiría disponer de una herramienta muy versátil y de gran utilidad que atraerá la atención de PYMES y grandes farmacéuticas que elaboren biofármacos. Nuestro objetivo es consolidarnos como un referente en el diseño computacional de fármacos, especialmente dentro de los fármacos biológicos.

Impacto esperado (necesidad a la que responde el proyecto)

En el mercado hay un interés creciente en los fármacos biológicos, que a diferencia de los tradicionales poseen estructuras moleculares más complejas y mayor tamaño. Además, presentan estructuras que frecuentemente no están bien caracterizadas y cuya síntesis requiere un mayor número de pasos. En este sentido, las técnicas computacionales que ayudan al desarrollo de fármacos adquieren una relevancia todavía mayor. Se estima que estas técnicas permiten ahorrar entre 1 y 3 años en el proceso de desarrollo de un medicamento tradicional. En referencia a fármacos biológicos no hay datos concretos debido a la novedad del sector, pero se cree que el ahorro, debido a la complejidad de estas moléculas, puede ser mucho mayor. Las herramientas computacionales orientadas al descubrimiento y desarrollo de estos fármacos son, por lo tanto, de gran interés y si están englobadas en una plataforma sencilla de usar desde la que se pueden combinar varias de ellas, se constituirá una herramienta definitiva cuyo potencial de aplicación y mercado será enorme.

Estructura (paquetes de trabajo, duración)

Fase1:

Creación de una herramienta de software para la realización de cribado virtual basado en receptor (docking masivos entre ligando y receptor de bases de datos) en la nube.

Fase 2:

Creación de algoritmos en Python para realizar dinámicas moleculares y estudiar el efecto de mutaciones

puntuales en estructuras proteicas. Finalmente estos algoritmos se integrarán dentro de la herramienta de software.

- Algoritmo en Python: configuración de macromoléculas y moléculas pequeñas (Gromacs o NAMD). En Gromacs permitirá escoger entre las últimas versiones de los campos de fuerza GROMOS, AMBER, CHARMM, OPLS y MARTINI. En NAMD se podrá escoger entre CHARMM y AMBER.
- Algoritmo en Python: preparar el sistema inicial, incluyendo la solvatación del mismo, por medio de minimizaciones de energía, equilibrio del sistema y relajación estructural por medio de procesos de "Simulated annealing"
- Algoritmo en Python: dinámicas moleculares. Implementaremos varios tipos de dinámicas, que serán dependientes del uso de GROMACS o NAMD. Estas serán inicialmente: dinámica molecular clásica (MD), dinámica molecular por intercambio de réplicas (REMD), dinámica molecular a pH constante, dinámica molecular a presión constante (SMD), dinámica molecular de campo eléctrico constante, dinámica molecular acelerada (AMD), dinámica molecular restringida, y dinámica molecular "coarse-grained"(CG).
- Algoritmo en Python: analizar las trayectorias generadas. Cuando se realicen mutaciones, permitirá la exploración de la estabilidad y las implicaciones estructurales y funcionales de las mismas.

Fase 3:

Creación de una herramienta de software para el análisis de datos de secuenciación masiva en la nube. Diseño de algoritmos en Python específicos que después se integrarán dentro de la herramienta de software:

- comparación de polimorfismos (SNP) y de variantes estructurales (CNV)
- genes HLA
- mutaciones exómicas
- genoma completo
- ensamblaje de novo
- expresión génica (gen completo y región génica), splicing alternativo y variantes
- expresión de mRNA, miRNA y RNA no codificante
- comparación de perfiles de expresión génica

Fase 4:

Desarrollo de otra herramienta de software en la nube que permitirá realizar análisis de ontología de genes.

- Creación de un algoritmo en Python que permita analizar la de ontología de genes de proteínas concretas introducidas por el usuario o provenientes de otras herramientas de software propias.
- Integración del algoritmo dentro de la infraestructura creada en la nube.
- Integración en la herramienta en la nube de las herramientas de software Cabrakan y Hurakan, pertenecientes al portfolio de Mind the Byte.