



DOCTORATS  
INDUSTRIALS

EL PLA DE  
DOCTORATS  
INDUSTRIALS

# PROJECTE DE DOCTORAT INDUSTRIAL EXPEDIENT 2016 DI 080

## DADES DE L'EMPRESA I DE L'ENTORN ACADÈMIC

### **Títol del projecte**

Desenvolupament i millora d'algoritmes i tècniques de desenvolupament de fàrmacs fent servir tècniques de Deep Learning.

### **Empresa**

Mind the Byte, S.L.

### **Responsable de l'empresa**

Dr. Alfons Nonell Canals

### **Universitat**

Universitat Politècnica de Catalunya

### **Director/a de tesi**

Alexandre Perera Lluna

### **Treballador/a de l'empresa i doctorand/a**

Ángela López Del Río

## BREU DESCRIPCIÓ DEL PROJECTE DE RECERCA

Aquest projecte pretén aplicar diferents tècniques d'intel·ligència artificial (Machine Learning) amb especial èmfasi en tècniques de Deep Learning (DL) per al desenvolupament i millora de tècniques i programari de disseny computacional de fàrmacs. L'objectiu, dins del context de la tesi doctoral industrial, és la inclusió de versions validades d'aquestes tècniques basades en DL en eines cloud –Software as a Service (SaaS) – com a productes de suport al disseny de fàrmacs.

El Deep Learning pretén la construcció de models d'alt nivell d'abstracció emprant xarxes neuronals amb múltiples capes que realitzen transformacions de caire lineal i no lineals. La disciplina es fonamenta en tècniques d'aprenentatge automàtic de característiques, en el que es permet que la màquina aprengui a efectuar una tasca de reconeixement de patrons, alhora que aprèn quines característiques són les pròpies de la tasca.

L'ús del DL en les prediccions d'activitats biològiques basades tant en lligand com en diana és especialment adequat donada la gran quantitat de dades disponible i les característiques complexes i multi-escala en seqüència d'aminoàcids. Les aplicacions cobriran predicció *in silico* de propietats biològiques (incloent indicacions i efectes secundaris) i prediccions d'ADME/TOX. També s'investigarà en l'ús autoencoders en l'aprenentatge de característiques en estructura primària en proteïnes i la seva aplicació en tasques de predicció. S'usaran tècniques d'enriquiment avançat en òmiques a fi d'analitzar rutes metabòliques i cascades de senyalització producte d'una acció a un target en particular.



Generalitat de Catalunya  
Departament d'Empresa i Coneixement  
**Secretaria d'Universitats i Recerca**



Agència  
de Gestió  
d'Ajuts  
Universitaris  
i de Recerca



## EL PLA DE DOCTORATS INDUSTRIALS

El doctorand o doctoranda haurà de desenvolupar un conjunt de tasques, incloent:

- Aprenentatge de tècniques de Deep Learning
- Construcció d'un banc de dades i esquemes de validació
- Desenvolupament de les tècniques proposades
- Validació i estimació de rendiment computacional
- Implementació en sistemes de càlcul cloud i productificació SaaS
- Estudi d'escalabilitat.

