DOCTORATS INDUSTRIALS
Aliança de talent!

Generalitat de Catalunya
Departament de Recerca i Universitats

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca
AGAUR

FORMULARI DE PROJECTES DE DOCTORAT INDUSTRIAL

A EMPLENAR PELS ENTORNS EMPRESARIAL I ACADÈMIC

1. SOL·LICITUD DE PARTICIPACIÓ EN UN PROJECTE DE DOCTORAT INDUSTRIAL

→ PROJECTE Target-Specific Machine Learning Models for Improved Protein-Ligand Binding Affinity Predictions

→ DATA PREVISTA D'INICI DEL PROJECTE 01/10/2023

→ ERC PANEL 1 LS1 Molecular and Structural Biology and Biochemistry

→ ERC PANEL 2 (OPCIONAL) LS2 Genetics, Genomics, Bioinformatics and Systems Biology

→ SECTOR 1 Farmacèutica i biotecnologia

→ SECTOR 2 (OPCIONAL) Salut

2. MODALITAT DEL PROJECTE DE RECERCA

Vegeu l'apartat de característiques i escolliu la modalitat en funció de les característiques del projecte.

Modalitat de **cofinançament** ✔ Modalitat d'**ajuts específics** ☐

3. DADES DE L'ENTORN EMPRESARIAL

→ NOM DE L'ENTITAT Chemotargets SL → CIF

→ REPRESENTANT LEGAL DE L'ENTITAT Scott Boyer

→ RESPONSABLE DEL PROJECTE A L'ENTITAT (TUTOR/A) Xavier Jalencas

→ ADREÇA ELECTRÒNICA → TELÈFON

→ ADREÇA DEL CENTRE DE TREBALL ON ES DESENVOLUPARÀ PARCIALMENT EL PROJECTE

Carrer Baldiri Reixac 4, Torre R, Planta 3 (Parc Científic de Barcelona)

→ CODI POSTAL 08028 → POBLACIÓ Barcelona → PÀGINA WEB https://chemotargets.com/

→ BREU PRESENTACIÓ DE L'ENTITAT

Chemotargets es va fundar el 2006 com a spin-off del Grup de Recerca en Farmacologia de Sistemes del Dr. Jordi Mestres en el marc de l'Institut Hospital del Mar d'Investigacions Mèdiques (IMIM), centre acadèmic d'excel.lència líder amb seu a Barcelona. Des de les seves oficines al Parc Científic de Barcelona, la companyia ofereix metodologies de computació d'última generació amb capacitat predictiva de primer nivell al mercat, desenvolupant un conjunt d'eines basades en intel.ligència artificial per identificar, optimitzar i assegurar el perfil de seguretat òptim per a nous candidats a fàrmacs. L'aplicació d'aquestes eines possibilita una ràpida identificació de propietats moleculars que poden abordar importants necessitats mèdiques no cobertes.

DipòsitLegal B-9413-2014

4. DADES DE L'ENTORN ACADÈMIC DEL PROJECTE

→ UNIVERSITAT Universitat Pompeu Fabra

→ PROGRAMA DE DOCTORAT Biomedicina

☐ INVESTIGADOR/A ICREA ☐ BENEFICIARI D'UN AJUT ERC ☑ GRUP DE RECERCA SGR

→ CODI SGR 2021 SGR 00046 → NOM DEL GRUP DE RECERCA Biomedicina Computacional (BIOCOMP)

→ DIRECTOR/A DE TESI Jordi Mestres

→ CENTRE DE RECERCA (SI ESCAU) Programa de Recerca en Informàtica Biomedica (GRIB)

→ ADREÇA ELECTRÒNICA → TELÈFON

→ ADREÇA DEL DEPARTAMENT/CENTRE ON DESENVOLUPARÀ PARCIALMENT EL PROJECTE

Carrer Doctor Aiguader 88 (Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona)

→ CODI POSTAL 08003 → POBLACIÓ Barcelona → PÀGINA WEB http://grib.imim.es/

5. DESCRIPCIÓ DEL PROJECTE DE RECERCA

Breu resum del projecte de recerca, que indiqui si hi ha altres entitats o centres participants, amb l'extensió màxima del requadre, mitjançant el qual el candidat pugui identificar si es tracta d'un projecte del seu interès.

·Target-Specific Machine Learning Models for Improved Protein-Ligand Binding Affinity Predictions.

Proteins play a crucial role in the correct functioning of the organism and often their dysfunctionality results in diseases. Accordingly, most drug discovery processes consist on the identification of small molecules capable of interacting with the target protein by either activating, modulating or inhibiting its activity. Structure-based Virtual Screening is a computational approach used to reduce the time and costs associated with hit identification campaigns and it is thus extensively used in the early phases of a drug discovery project. These methods regard the interaction between a protein and a ligand as a lock that requires the right key to open a door. In this respect, one of the techniques commonly used is molecular docking that combines an algorithm that explores the position and orientation of the ligand in the protein binding cavity (ligand pose) with a scoring function (SF) that assigns a numerical value to the strength of the protein-ligand interaction for that ligand pose.

Many SFs rely on the physical and biological characteristics of the protein and the ligand to obtain a total estimation of the system and they have been key in the successful identification of small molecule hits in numerous structure-based virtual screening campaigns. However, the performance of the SFs has been shown to depend largely on the protein system and the lack of a correlation between SF values and experimental binding affinities of ligands, particularly within the same chemical series, preclude their use for hit and lead optimisation.
To alleviate these intrinsic problems, attempts to develop target-specific SFs have been made in recent years and, in general, they outperform the more traditional and general SFs when applied to the same protein system. In this respect, target-specific machine learning (ML) models have been shown to compete with physics-based SFs. Lately, this type of ML-based SFs has gained popularity due to significant increase in the availability of protein-ligand binding affinity data but also to the good performance that they show compared with other SFs .

The novelty and relevance of this investigation is justified by the following points:

A. Despite the enormous possibilities that this line of research currently offers, only very few target-specific machine learning models have been developed and published recently, leaving room for significant improvements.
B. Most models have been trained on binding affinity available in the public domain. Since the intention is that this work will be performed within the remit of an Industrial Doctorate, we will have access to several times more binding affinity data that we expect will result in improved binding affinity models.
C. This project will build on our recent work on Extended Connectivity Interaction Features (ECIF) and the models derived from them which were recently shown to produce state-of-the-art performances.
D. The outcome of the project should result in more active and more selective small molecule hits identified and less false positives encountered.

Objectives:

1. Creation and evaluation of target-specific machine learning models for those proteins with a substantial amount of binding affinity data
2. Creation and evaluation of target-specific machine learning models for those protein families for which perhaps there is not enough binding affinity data for a particular protein, but the availability of the data is enough when all proteins members of the family are considered
3. Creation and evaluation of an improved general machine learning model to be applied on those proteins for which neither a protein model nor a protein-family model can be applied
4. Confirm computational predictions with experimental in vitro binding affinity data of both commercially available as well as de novo designed small molecules

6. PERFIL DEL CANDIDAT/A

Descripció dels requisits mínims i valorables, quant a titulació, idiomes i experiència, que seran més valorats en els candidats.
En tots els apartats cal fer referència a si és un requisit mínim o valorable.

→ **TITULACIÓ*** (GRAU, O EQUIVALENT (LLICENCIATURA, ENGINYERIA SUPERIOR I ARQUITECTURA), I MÀSTER UNIVERSITARI)

Grau en Farmàcia i Màster en Bioinformatica i Bioestadística.

***Requisits per a l'admissió al doctorat:** vegeu l'apartat corresponent a les preguntes més freqüents dels estudiants de doctorat (FAQ) del web del Pla de Doctorats Industrials.

→ IDIOMES

Domini de Català i Castellà.
Alt nivell d'anglès.

→ EXPERIÈNCIA PROFESSIONAL D'INTERÈS

Es valorarà haver fet pràctiques en l'àmbit farmacèutic.

→ ALTRES

Es requereix:
- Experiència en llenguatges de programació: Python, R, C
- Experiència amb Tècniques Òmiques: Genòmica, Transcriptòmica, Proteòmica, Farmacogenòmica.
- Experiència amb Tècniques de SBDD (Structure Based Drug Discovery): Docking, Dinàmiques Moleculars, Machine Learning

CARACTERÍSTIQUES DELS PROJECTES DE DOCTORAT INDUSTRIAL

L' **element essencial** del Pla de Doctorats Industrials és un **projecte de doctorat industrial**, és a dir, un projecte de recerca estratègic d'una empresa, on el doctorand/a desenvoluparà la seva formació investigadora, en col·laboració amb un organisme de recerca, i que serà objecte d'una tesi doctoral.
La **Generalitat de Catalunya** dona suport econòmic a aquests projectes mitjançant **2 modalitats**, ateses algunes característiques en l'execució del projecte:

a. Projectes de doctorat industrial **cofinançats** per la Generalitat de Catalunya.
b. Projectes de doctorat industrial amb **ajut específic**.

CARACTERÍSTIQUES COMUNES D'AMBDUES MODALITATS

- La tesi doctoral es desenvoluparà en el marc d'un **conveni de col·laboració** entre l'entitat o entitats de l'entorn empresarial i l'entitat o entitats de l'entorn acadèmic (sempre ha d'haver-hi una universitat catalana), que ha de ser vigent durant els **3 anys de durada del període d'execució del projecte**.
- El doctorand/a disposarà d'un **director/a de tesi** vinculat l'organisme de recerca sol·licitant i d'una **persona responsable designada per l'empresa** sol·licitant (tutor/a).
- La **selecció** de la persona candidata es realitzarà conjuntament entre les parts signants del conveni de col·laboració. En tot cas, la persona candidata ha de ser **acceptada i admesa en el programa de doctorat** de la universitat corresponent.
- La persona candidata ha de tenir una nota mitjana de l'**expedient acadèmic igual o superior a 6,5** (escala 0 a 10), calculada sobre el total de crèdits dels estudis superiors que donen accés als estudis oficials de doctorat.
- El director/a de tesi ha de formar part d'un **grup de recerca reconegut (SGR)** vigent de la Generalitat de Catalunya o bé ser investigador/a del **programa ICREA** o haver obtingut finançament del **Consell Europeu de Recerca (ERC)**.
- La **dedicació** del doctorand/a al projecte de recerca **es distribuirà entre els dos entorns**.
- El doctorand/a participarà en **programes formatius en competències específiques** relacionades amb el lideratge, la coordinació i la gestió de projectes d'R+D+I; la transferència de resultats de recerca; el desenvolupament de noves empreses, i la propietat intel·lectual i industrial, entre altres matèries rellevants.
- El doctorand/a disposarà d'una **assignació anual (borsa del doctorand/a)** finançada per la Generalitat de Catalunya i acumulable per un període de **3 anys**. La finalitat és cobrir les **despeses** de matrícula, mobilitat, formació i publicació d'articles del doctorand/a.
- Totes les tesis llegides en el marc del Pla de doctorats industrials rebran la **menció de doctorat industrial**. Els tutors i tutores a l'entorn empresarial, així com els directors i directores de tesi participants rebran un **reconeixement** per la seva participació al Pla.

DipòsitLegal B-9413-2014

DOCTORATS INDUSTRIALS
Aliança de talent!

Generalitat de Catalunya
Departament de Recerca i Universitats

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca
AGAUR

A EMPLENAR PEL CANDIDAT/A

DADES DE LA PERSONA SOL·LICITANT

→ NOM I COGNOMS DE L'ESTUDIANT

→ NIF

→ ADREÇA DE LA RESIDÈNCIA HABITUAL

→ CODI POSTAL

→ POBLACIÓ

→ TELÈFON

→ ADREÇA ELECTRÒNICA

PERFIL DEL CANDIDAT/A

→ TITULACIÓ: GRAU O EQUIVALENT (LLICENCIATURA, ENGINYERIA SUPERIOR I ARQUITECTURA), I MÀSTER UNIVERSITARI.

→ NOMBRE DE CRÈDITS (ECTS) del GRAU O EQUIVALENT

→ NOTA MITJANA DE L'EXPEDIENT (ESCALA 1 a 10)

→ NOMBRE DE CRÈDITS (ECTS) del MÀSTER UNIVERSITARI

→ NOTA MITJANA DE L'EXPEDIENT (ESCALA 1 a 10)

→ IDIOMES. EN EL CAS DE DISPOSAR D'UN CERTIFICAT ACREDITATIU, CAL ESPECIFICAR-HO AMB LA DATA D'OBTENCIÓ.

→ EXPERIÈNCIA PROFESSIONAL

→ ALTRES DADES D'INTERÈS RELLEVANTS PER AL PROJECTE

DipòsitLegal B-9413-2014

DOCTORATS INDUSTRIALS
Aliança de talent!

Generalitat de Catalunya
Departament de Recerca i Universitats

Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca
AGAUR

A EMPLENAR PEL CANDIDAT/A

MOTIVACIÓ I INTERÈS EN EL PROJECTE

Espai per incloure les **motivacions** i l'**interès personal** en el projecte, amb l'extensió màxima del requadre.

PROTECCIÓ DE DADES DE CARÀCTER PERSONAL

En complimentar el present formulari, autoritza i dona el seu consentiment per al tractament de les dades personals facilitades en els termes següents:

Responsable. AGAUR – CIF Q0801117C – Passeig Lluís Companys 23, 08010, Barcelona – T. 93 310 63 94 – lopd.agaur@gencat.cat.

Delegat de Protecció de Dades. agaur@dpo.microlabhard.es

Finalitat. La finalitat de la recollida de les dades és fer arribar la seva candidatura a l'empresa i Universitat/organisme de recerca impulsors del projecte de recerca al qual s'hagi inscrit per si, s'escau, gestionar la sol·licitud d'ajut en el marc del Pla de Doctorats Industrials (en endavant, Pla DI), de conformitat amb el Reglament (UE) 2016/679 del Parlament Europeu relatiu a la protecció de dades de caràcter personal i la Llei Orgànica 3/2018, de 5 de desembre, de protecció de dades personals i garantia dels drets digitals.

Base Legal. El compliment d'una missió realitzada en interès públic, l'exercici de poders públics conferit al Responsable o el compliment d'una obligació legal o; el consentiment de l'interessat en el cas de sol·licitar-lo, consentiment que podrà ser retirat en qualsevol moment.

Conservació de les dades. Les seves dades es conservaran mentre siguin necessàries per gestionar la convocatòria corresponent, i un cop tancada, es conservaran d'acord amb els terminis establerts a la normativa d'arxius aplicable. El Responsable, certifica haver implementat les mesures tècniques i organitzatives recollides al Reglament (UE) 2016/679, per tal de garantir la seguretat i integritat de les dades de caràcter personal incloses als fitxers i evitar la seva alteració, pèrdua i tractament o accés no autoritzats.

Drets. En qualsevol moment, vostè pot exercir els drets d'accés, rectificació, supressió, oposició, limitació del tractament de les seves dades, o exercir el dret a la portabilitat de les mateixes. Tot això, mitjançant escrit, acompanyat de còpia de document oficial que l'identifiqui, adreçat a l'AGAUR o al Delegat de Protecció de Dades. En cas de disconformitat amb el tractament, també té el dret de presentar una reclamació davant l'Autoritat Catalana de Protecció de Dades.

Destinataris. Empresa i universitat/organisme de recerca impulsors del Projecte de Recerca per a la valoració de la candidatura, Departament de Recerca i Universitats (REU) i Consorci de Serveis Universitaris de Catalunya (CSUC) amb la finalitat de participar i assessorar en la selecció de les entitats i candidats, coordinar i promocionar conjuntament el programa amb l'AGAUR. Igualment, les dades podran ser comunicades a l'empresa on desenvolupi les seves funcions i a la universitat amb la finalitat de seleccionar el candidat.

Data i signatura de l'interessat/da.

_____, _____ de _____ de _____

BLOQUEJAR

Per a més informació:
doctorats.industrials.recerca@gencat.cat · doctoratsindustrials.gencat.cat

Procediment de sol·licitud de participació:
Enviament electrònic d'una còpia signada a la bústia de correu del Pla de Doctorats Industrials: doctorats.industrials.recerca@gencat.cat

DipòsitLegal B-9413-2014