

Anexo I

(Información a cumplimentar por cada tutor)

MEMORIA DE ACTIVIDADES DEL PUESTO SOLICITADO

Modalidad A: Solicitud de investigador posdoctoral

Datos de la propuesta	
Área de conocimiento: indique el área de conocimiento por la que desea su propuesta sea evaluada	Ciencias exactas y experimentales
Nombre del tutor	HORACIO EMILIO PÉREZ SÁNCHEZ
DNI del tutor	29075543R
Teléfono del tutor	968278819
Correo electrónico del tutor	HPEREZ@UCAM.EDU
Relación administrativa o contractual	INVESTIGADOR A TIEMPO COMPLETO, CONTRATO INDEFINIDO
Departamento y organismo	DEPARTAMENTO DEL GRADO EN INGENIERÍA INFORMÁTICA, UCAM
Grupo de investigación	BIOINFORMATICS AND HIGH PERFORMANCE COMPUTING (BIO-HPC)
I.P. Grupo de investigación	HORACIO EMILIO PÉREZ SÁNCHEZ
Título del proyecto de investigación en el que participa el grupo de acogida¹	DESCUBRIMIENTO Y OPTIMIZACIÓN DE COMPUESTOS BIOACTIVOS MEDIANTE TÉCNICAS AVANZADAS DE QUÍMICA COMPUTACIONAL (20988/PI/18)
Entidad financiadora del proyecto de investigación	FUNDACIÓN SÉNECA
Fecha inicio del proyecto de investigación	01/04/2019
Fecha fin del proyecto de investigación	31/03/2022
Especialidad del doctor solicitado	CIENCIAS EXACTAS Y EXPERIMENTALES (QUÍMICA, FÍSICA, BIOLOGÍA) O INGENIERÍAS (QUÍMICA, INFORMÁTICA)

Propuesta, descripción y objetivo de actividades de I+D a realizar por el contratado doctor

(Indique el conjunto de actividades a realizar, organizadas como tareas o hitos con especial referencia a los métodos y procedimientos que se van a seguir para alcanzar los mismos, y el cronograma del programa formativo. La descripción de las actividades y tareas a desarrollar por el investigador debe contemplar el periodo máximo de la ayuda. Se incluirán tantas filas como hitos tenga el proyecto). El inicio del proyecto será el **01/01/2020 hasta el 31/12/2021**).

Introducción

Uno de los retos más importantes actualmente en el campo de la salud y seguridad social es el relativo al descubrimiento de nuevos compuestos bioactivos para problemas de relevancia farmacológica o donde los compuestos conocidos previamente no son lo suficientemente efectivos. Tradicionalmente ha sido la industria farmacéutica quien se ha ocupado del estudio de dichos problemas, debido al gran coste económico que implica y a sus dificultades técnicas. Sin embargo, desde hace unas dos décadas existen metodologías basadas en la química computacional que permiten acelerar dichos descubrimientos, y que pueden ser desarrolladas de manera eficiente en un entorno académico a un coste menor. El solicitante de este proyecto ya ha demostrado la factibilidad de estas técnicas, al aplicar un proceso de investigación multidisciplinar (química, biología, informática) con la explotación de arquitecturas computacionales paralelas de alto rendimiento (GPUs) y supercomputadores. Las mejoras metodológicas obtenidas por el solicitante se están aplicando actualmente (bajo el proyecto de la Fundación Séneca 20988/PI/18) a diversos contextos de relevancia farmacológica y agroalimentaria donde el solicitante ya ha descubierto y en algunos casos patentado, compuestos candidatos a fármacos, y donde se espera que dichas metodologías contribuyan al descubrimiento de nuevos compuestos bioactivos.

El plan de trabajo a desarrollar por el contratado doctor se centra en la aplicación de dichas metodologías de química computacional en diversos contextos de relevancia farmacológica y agroalimentaria para descubrir nuevos compuestos bioactivos. Todo ello tras una etapa de formación en el seno del grupo BIO-HPC, liderado por el Dr. Pérez-Sánchez, tras la cual el contratado podrá aplicar directamente las técnicas computacionales con alta destreza e independencia. Para alcanzar estos objetivos se plantean las siguientes actividades e hitos que se describen y temporalizan a continuación:

Nº de Tarea o Hito	Descripción Científico-Técnica	Mes (m) estimado de inicio del hito (mes entre 1 y 24)	Duración (d) estimada del hito (en meses)
Tarea 1 (T1)	<u>Descubrimiento de fármacos en el contexto de cáncer colorrectal</u> : el/la contratado doctor (CD) contribuirá en esta primera tarea (ya iniciada en el proyecto Séneca 20988/PI/18, PS18, y en pleno desarrollo) a la formación en técnicas de química computacional (QC) para el desarrollo de nuevos fármacos en el contexto de cáncer colorrectal a partir de resultados previamente obtenidos, correspondientes a una patente internacional depositada por el solicitante, EP18382696.5 (2018).	m=1	d=18
T2	<u>Descubrimiento de fármacos en el contexto de la diabetes</u> : el CD contribuirá en esta tarea (ya iniciada en PS18, y en pleno desarrollo) a la aplicación de técnicas de QC para el desarrollo de nuevos fármacos en el contexto de la diabetes, mediante el uso de herramientas web desarrolladas por el grupo BIO-HPC (http://bio-hpc.ucam.edu/dia-db/).	m=7	d=12
T3	<u>Descubrimiento de fármacos en el contexto de la enfermedad de Fabry</u> : el CD contribuirá en esta tarea (en pleno desarrollo en PS18) a la aplicación de técnicas de QC para el desarrollo de nuevos fármacos en el contexto de la enfermedad de Fabry, a partir de resultados obtenidos previamente por el grupo BIO-HPC (DOI: 10.1371/journal.pone.0165463).	m=7	d=12

T4	<i>Descubrimiento de fármacos en el contexto del Inflammasoma: el CD contribuirá en esta tarea (no existente en PS18) a la aplicación de técnicas de QC para el desarrollo de nuevos fármacos en el contexto del inflammasoma, a partir de resultados obtenidos previamente por el grupo BIO-HPC y publicados en la prestigiosa Nature Chemical Biology (DOI:10.1038/s41589-019-0278-6).</i>	$m=13$	$d=12$
T5	<i>Descubrimiento de fármacos en el contexto del virus del Zika: el CD contribuirá en esta tarea (en pleno desarrollo en PS18) a la aplicación de técnicas de QC para el desarrollo de nuevos fármacos en el contexto del virus del Zika, a partir de resultados obtenidos previamente por el grupo BIO-HPC algunos de los cuales ya están publicados y cuya patente (PCT/CN2017/088420, US 62491007 (2017)) se ha licenciado a una empresa internacional para la realización de los ensayos clínicos correspondientes.</i>	$m=13$	$d=12$
T6	<i>Descubrimiento de compuestos bioactivos en el contexto del rejuvenecimiento: el CD contribuirá en esta tarea (en pleno desarrollo en PS18) a la aplicación de técnicas de QC para el desarrollo de nuevos compuestos bioactivos en el contexto del rejuvenecimiento, a partir de resultados obtenidos previamente por el grupo BIO-HPC cuya patente internacional se encuentra ahora mismo en proceso de preparación y se estima se deposite en Octubre de 2019.</i>	$m=13$	$d=12$

Medios disponibles e interés del puesto de trabajo propuesto

Se detallará el contenido, medios y recursos de que dispone el departamento o grupo de investigación (máximo 300 palabras)

El grupo BIO-HPC (IP Horacio Pérez Sánchez) lidera actualmente 3 proyectos nacionales (MINECO-Retos y Fundación Séneca), con dos naturalezas bien diferenciadas: Investigación Básica y aplicada (IBA), y Transferencia Tecnológica (TT). Los proyectos IBA se basan en el desarrollo de herramientas avanzadas de química computacional para el descubrimiento de fármacos y su aplicación a contextos de relevancia farmacológica, alimentaria y agroquímica. Los proyectos de TT aplican el conocimiento desarrollado en IBA a problemas de interés para empresas farmacéuticas, biotecnológicas, y de sectores alimentación y agroquímicos. El contratado doctor podrá llevar al tejido productivo las investigaciones desarrolladas gracias a los contratos y convenios con empresas que dispone el grupo.

A) **Medios disponibles:** El grupo de BIO-HPC dispone de acceso a cinco centros de supercomputación (CS) con recursos de alta capacidad:

- CS Málaga: <http://www.scbi.uma.es/site>
- CETA-CIEMAT: <http://www.ceta-ciemat.es>
- CS Chile: <http://www.nlhpc.cl>
- CS Universidad Tromso(Noruega): <https://www.sigma2.no/>
- CS Poznan(Polonia): <http://www.man.poznan.pl/online/en>

En dichos centros de supercomputación se llevaran a cabo todos los cálculos intensivos de cribado virtual requeridos para el proyecto. Por otra parte, además del software propio desarrollado por el grupo BIO-HPC (<http://bio-hpc.eu/software/>); METADOCK (DOI:10.1177/1094342017697471), Vina_vision, DIA-DB, Blind Docking Server (<https://bio-hpc.ucam.edu/achilles>), BRUSELAS (<http://bio-hpc.ucam.edu/Bruselas/>), etc, éste también cuenta con diverso software tanto abierto como comercial (con sus correspondientes licencias de software) de:

- Docking: Autodock Vina, FlexScreen, Fred, Lead Finder
- Química cuántica: Gaussian, ORCA
- Molecular Dynamics: Gromacs
- QSAR: Dragon
- Modelado farmacofórico: Ligand Scout

Señalar que el departamento dispone de los recursos necesarios para que el contratado doctor pueda desarrollar su investigación; espacio de trabajo, ordenador personal, acceso a internet y todos los recursos materiales necesarios.

B) Interés del puesto de trabajo propuesto: dadas las características comentadas, el puesto que se ofrece se encuentra totalmente alineado con la Estrategia Ris3Mur.

Se justificará la necesidad del puesto y el impacto de la contratación en la entidad solicitante. Asimismo, deberá indicarse la existencia o no de puestos equivalentes en el departamento o grupo de investigación (máximo 300 palabras)

El grupo BIO-HPC está compuesto en este momento por dos investigadores senior, dos profesores doctores, un técnico ingeniero en informática y cinco doctorandos. Actualmente el grupo no dispone de un investigador doctor que gracias a su experiencia pueda potenciar y acelerar las líneas de investigación más potentes del grupo, relativas a la aplicación de técnicas de química computacional para el descubrimiento de fármacos y otros compuestos bioactivos en diferentes contextos. Por tanto se precisa de un contratado doctor de las áreas de ciencias exactas y experimentales (química, física, biología) que pueda contribuir a los aspectos más aplicados del proyecto explotando las herramientas computacionales ya desarrolladas, o un ingeniero informático que pueda mejorar las herramientas ya desarrolladas y aplicarlas de manera más eficiente. Las habilidades demandadas son un pilar fundamental para las diferentes tareas especificadas previamente en el plan de trabajo.

Actividades de formación, capacitación y evaluación

Se describirá el contenido, medios y recursos del plan de actividades así como las capacidades y competencias que se prevé que adquiera el contratado doctor (máximo 300 palabras)

En este proyecto el contratado doctor se integrará en un grupo multidisciplinar puntero (BIO-HPC) cuyas líneas de investigación principales están avaladas por diversas publicaciones de alto impacto, proyectos competitivos, contratos con empresas y patentes internacionales, relacionadas con:

- Química computacional
- Bioinformática estructural
- Computación de alto rendimiento
- Inteligencia artificial
- Descubrimiento y optimización de compuestos bioactivos de contextos farmacológicos y agroalimentarios

Por otra parte, cabe mencionar que el grupo BIO-HPC tiene una muy fuerte vertiente internacional dado el elevado número de grupos de investigación de otros países con los que éste colabora y de los cuales recibe y/o envía investigadores para intercambios de conocimiento experto y aplicación conjunta a convocatorias internacionales de financiación competitivas para proyectos. Este aspecto puede incidir de manera muy positiva en la formación del contratado. Por último y en una línea similar, el grupo BIO-HPC trabaja en diversos proyectos con empresas tanto nacionales como internacionales donde el contratado se verá involucrado y obtendrá una formación y visión adicional inexistente en otros grupos de investigación exclusivamente centrados en la Academia.

Es de esperar por tanto que el contratado doctor adquiera una formación multidisciplinar tanto a nivel técnico como a nivel empresarial que, sin lugar a dudas, le permitirá complementar las competencias adquiridas en su doctorado. Entre las capacidades y competencias que se espera adquiera el contratado doctor, se encuentran, entre otras:

Capacidades técnicas

- Aprendizaje de conceptos clave en las técnicas de Docking, Dinámica Molecular, Química Cuántica, QSAR, Machine Learning y Modelado Farmacofórico
- Manejo eficiente de software de química computacional para descubrimiento de compuestos bioactivos (listado completo citado anteriormente en la sección de recursos)
- Explotación de software de química computacional en supercomputadores

Competencias transversales

- Trabajo en grupo.
- Exposición pública de trabajos realizados a nivel nacional e internacional
- Colaboración en la redacción de proyectos nacionales e internacionales
- Técnicas de exploración de mercado (Lean Startup)

Se describirán los mecanismos de evaluación y monitorización del progreso del personal. Se incluirá la repercusión que tendrá la actividad en la empleabilidad futura del contratado (máximo 300 palabras)

El contratado doctor se integrará en el grupo de investigación BIO-HPC para reforzar las actividades del proyecto previamente concedido por la Fundación Séneca 20988/PI/18. El Dr. Horacio Pérez Sánchez, será el principal responsable tanto de su proceso formativo como de su proceso investigador. El proyecto 20988/PI/18 es multidisciplinar e implica interacción con diversos grupos de investigación nacionales, internacionales y Entes Promotores Observadores (E.P.O.) con los que se organizan diversas reuniones, tanto presenciales como online y se reportan resultados de manera periódica. En dichas reuniones el contratado doctor presentará sus avances dando visibilidad a su trabajo y adquiriendo las competencias propias de un marco de trabajo de transferencia tecnológica y multidisciplinar. Sin lugar a dudas, esto beneficiará la empleabilidad del doctor de manera directa, ya que diferentes empleadores podrán evaluar la evolución de las actividades del doctor dentro del proyecto.

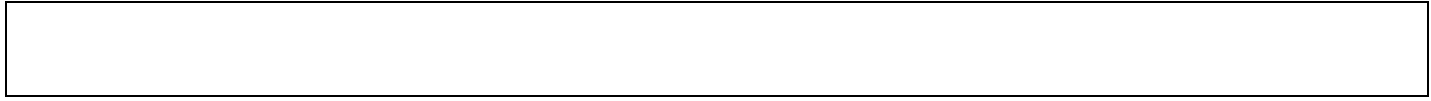
En cuanto a la ejecución de la investigación se realizarán reuniones mensuales en un ciclo iterativo entre todos los miembros del proyecto, donde se usará principalmente dos fuentes de información: los comentarios recibidos con motivo de las diversas publicaciones realizadas en revistas internacionales de alto impacto, y en las reuniones de coordinación previamente mencionadas.

Prolongación del contrato

En caso de que se proponga extender la contratación del investigador posdoctoral durante un período adicional al que sería objeto de subvención, deberá expresar la duración de dicho período adicional, los medios disponibles para hacer frente al mismo, así como las características del plan de actividades y formación previstos para dicho período adicional (máximo 300 palabras)

Los hitos o tareas propuestos para el contratado doctor pueden acelerar de manera decisiva el proyecto de la Fundación Séneca 20988/PI/18 y ampliar consecuentemente su alcance. La mayor cantidad y/o calidad de resultados conseguidos podría facilitar la aplicación exitosa a diversas convocatorias competitivas de financiación tanto nacional como internacional o a proyectos de transferencia tecnológica con diversas empresas con lo que la labor del contratado doctor podría extenderse durante al menos un año.

Por otra parte, en el ámbito de la planificación anual de la plantilla de personal docente e investigador de la UCAM existiría la posibilidad de la prolongación de estos contratados adscritos a la Universidad, como Investigadores, siempre que sean necesarios en el grupo de investigación en el que estén integrados y previo informe favorable del Vicerrectorado de Investigación.



ⁱ El grupo de investigación en el que se desarrollará la acción formativa del contratado posdoctoral, deberá encontrarse participando en un proyecto de investigación financiado con cargo a programas financiadores competitivos de organismos o entidades distintos de aquél al que se encuentre adscrito. El proyecto deberá encontrarse en vigor al tiempo de cierre de la convocatoria y extenderse al menos hasta el fin del periodo del contrato del investigador.