



PROYECTO INTERNO PII-DICC-02-2017

"Desarrollo y Evaluación de un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos"

En la ciudad de Quito D.M., a los dos días del mes de mayo del año dos mil diecinueve, comparecen a la celebración de la presente Acta de Finalización del Proyecto Interno **PII-DICC-02-2017 "Desarrollo y Evaluación de un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos"**, por una parte la **Ph.D. Alexandra Patricia Alvarado Cevallos** en calidad de **Vicerrectora de Investigación y Proyección Social** de la Escuela Politécnica Nacional, y por otra el **M.Sc. Iván Marcelo Carrera Izurieta** en calidad de **Director del Proyecto Interno**, al tenor de lo siguiente:

1. ANTECEDENTES:

- a) Mediante Memorando Nro. EPN-DICC-2017-0318-M del 25 de mayo de 2017, la Jefa del Departamento de Informática y Ciencias de la Computación (DICC) solicita al Vicerrectorado de Investigación y Proyección Social (VIPS), que se asigne código y se registre el proyecto "Desarrollo y Evaluación de un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos" propuesto por el M.Sc. Iván Marcelo Carrera Izurieta.
- b) Mediante Memorando Nro. EPN-VIPS-2017-1154-M, del 2 de junio de 2017, el Vicerrectorado de Investigación y Proyección Social (VIPS) notifica a la Jefa del Departamento de Informática y Ciencias de la Computación (DICC) que el proyecto de Investigación Interno del M.Sc. Iván Marcelo Carrera Izurieta ha sido registrado con el código PII-DICC-02-2017.

2. DATOS GENERALES DEL PROYECTO:

Código de Proyecto	PII-DICC-02-2017
Nombre del Proyecto	Desarrollo y Evaluación de un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos
Director del Proyecto	M.Sc. Iván Marcelo Carrera Izurieta
Departamento	Informática y Ciencias de la Computación (DICC)
Líneas de Investigación	Evaluación de prestaciones de hardware y software, computación de alto rendimiento y alta disponibilidad
Objetivo	Desarrollar un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos, integrando múltiples bases de datos, mediante análisis teórico y experimental del desempeño computacional de algoritmos y frameworks de programación
Duración del Proyecto	<ul style="list-style-type: none"> • Inicio: 29 de mayo del 2017. • Fin: 28 de mayo del 2018. • Prórroga: 4 meses, hasta el 28 de septiembre de 2018. • Duración total: 16 meses.
Entrega del Informe Final	15 de marzo de 2018
Presupuesto Asignado:	\$ 0,00

Recibido:
Juan Carrera
14/05/2019



3. INFORME FINAL:

Mediante Memorando Nro. EPN-DICC-2019-0180-M, del 15 de marzo de 2019, el M.Sc. Iván Marcelo Carrera Izurieta presenta el Informe Final del proyecto, que es revisado por la Dirección de Investigación y Proyección Social (DIPS). La DIPS realizó las observaciones del Informe Final y las comunicó al Director del Proyecto mediante Memorando Nro. EPN-VIPS-2019-0513-M.

Mediante Memorando Nro. EPN-DICC-2019-0254-M, enviado el 11 de abril de 2019, el Director del Proyecto presenta el Informe Final con los cambios sugeridos, mismo que se anexa y forma parte integrante del Acta de Finalización; y, cuyas conclusiones, y productos generados son:

CONCLUSIONES:

- a) Las bases de datos se estudiaron para establecer las relaciones entre los datos contenidos. Se pueden realizar simplificaciones a las bases de datos como en (Molina, 2018), u optimizaciones para mejorar las búsquedas como en el trabajo de titulación "Análisis Comparativo Del Desempeño Computacional Entre Dos Gestores De Bases De Datos En Consultas Sobre La Base De Datos UNIPROT/SWISS-PROT". Estos trabajos estudian los efectos sobre el tiempo de ejecución de las consultas sobre las bases de datos de la simplificación de las bases de datos o de las optimizaciones que se pueden realizar a los gestores de bases de datos.
- b) Las relaciones que se establecen entre los datos de las bases de datos están descritas brevemente en el presente documento, y más detalladamente en (Cárdenas, 2019). Estas relaciones permiten integrar las bases de datos de fármacos, proteínas, rutas metabólicas y ontologías de genes, y realizar las búsquedas de blancos terapéuticos.
- c) Se definió un método computacional, basado en la relación estructura – actividad SAR, para interrelacionar las interacciones entre fármacos y blancos terapéuticos. El método específico que relaciona fármacos y rutas metabólicas está descrito en (Cárdenas, 2019). Dentro de los blancos terapéuticos se definen proteínas y líneas celulares. El servicio web programado para Cell Fishing permite predecir los blancos terapéuticos de los fármacos en el dominio de las líneas celulares.
- d) Se definió un modelo matemático general para las búsquedas de blancos terapéuticos en las bases de datos que permite identificar las regiones paralelizables del modelo computacional. Esto, a su vez, permitirá posibles optimizaciones del desempeño computacional en términos del tiempo de ejecución para las búsquedas.

PRODUCTOS:

1. Artículo: "Defining architectures for recommended systems for medical treatment. A Systematic Literature Review"; Carrera I., Jiménez C.; Latin American Journal of Computing; ISSN: 1390-9266; noviembre 2018.
2. Artículo enviado para revisión: "Cell fishing: A similarity based approach for multiple cell lines-compound sensitivity prediction"; Carrera I., Tejera E.,



Jimenes K., Armijos V., Sánchez-Rodríguez A., Cruz-Monteagudo M., Pérez-Castillo Y.; PLOS Computational Biology (Q1); ISBN: 1553734X, 15537358.

3. Proyecto de Titulación de Ingeniería en Sistemas Informáticos y de Computación: "Analítica de Datos Aplicada al Enriquecimiento de Rutas Metabólicas a Través de Target Fishing"; Cárdenas Ayala Verónica Yakelin, Yáñez Escarabay Karla Victoria; <http://bibdigital.epn.edu.ec/handle/15000/20045>; febrero 2019.
4. Proyecto de Titulación de Ingeniería en Sistemas Informáticos y de Computación: "Evaluación Comparativa del Desempeño Computacional de la Ejecución de Consultas Usando la Base de Datos ChEMBL"; Molina Sierra Samantha Penélope; <http://bibdigital.epn.edu.ec/handle/15000/19271>; marzo 2018.
5. Conferencia: "Defining architectures for recommended systems for medical treatment. A Systematic Literature Review"; Carrera Iván; Jornadas de Ingeniería de Sistemas Informáticos y de Computación JISIC 2018, EPN; octubre 2018.

4. LIQUIDACIÓN ECONÓMICA:

El Proyecto Interno PII-DICC-02-2017 no contó con asignación presupuestaria del Vicerrectorado de Investigación y Proyección Social (VIPS).

5. FINALIZACIÓN:

Con la presente Acta se declara finalizado y cerrado el Proyecto Interno *PII-DICC-02-2017 "Desarrollo y Evaluación del desempeño de un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos"*.

Para constancia de lo ejecutado y por estar de acuerdo con el contenido de la presente Acta, las partes libre y voluntariamente suscriben la misma, en tres ejemplares de igual contenido, tenor y valor legal.

Dado en la ciudad de Quito, D.M. a los dos días del mes de mayo del año dos mil diecinueve.

Ph.D. Alexandra P. Alvarado C.
Vicerrectora de Investigación y
Proyección Social

fc/sp



ESCUELA POLITECNICA NACIONAL
VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN
Y PROYECCION SOCIAL

M.Sc. Iván M. Carrera I.
Director del Proyecto
PII-DICC-02-2017



PROYECTO INTERNO PII-DICC-02-2017

"Desarrollo y Evaluación de un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos"

En la ciudad de Quito D.M., a los dos días del mes de mayo del año dos mil diecinueve, comparecen a la celebración de la presente Acta de Finalización del Proyecto Interno **PII-DICC-02-2017 "Desarrollo y Evaluación de un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos"**, por una parte la **Ph.D. Alexandra Patricia Alvarado Cevallos** en calidad de **Vicerrectora de Investigación y Proyección Social** de la Escuela Politécnica Nacional, y por otra el **M.Sc. Iván Marcelo Carrera Izurieta** en calidad de **Director del Proyecto Interno**, al tenor de lo siguiente:

1. ANTECEDENTES:

- a) Mediante Memorando Nro. EPN-DICC-2017-0318-M del 25 de mayo de 2017, la Jefa del Departamento de Informática y Ciencias de la Computación (DICC) solicita al Vicerrectorado de Investigación y Proyección Social (VIPS), que se asigne código y se registre el proyecto "Desarrollo y Evaluación de un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos" propuesto por el M.Sc. Iván Marcelo Carrera Izurieta.
- b) Mediante Memorando Nro. EPN-VIPS-2017-1154-M, del 2 de junio de 2017, el Vicerrectorado de Investigación y Proyección Social (VIPS) notifica a la Jefa del Departamento de Informática y Ciencias de la Computación (DICC) que el proyecto de Investigación Interno del M.Sc. Iván Marcelo Carrera Izurieta ha sido registrado con el código PII-DICC-02-2017.

2. DATOS GENERALES DEL PROYECTO:

Código de Proyecto	PII-DICC-02-2017
Nombre del Proyecto	Desarrollo y Evaluación de un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos
Director del Proyecto	M.Sc. Iván Marcelo Carrera Izurieta
Departamento	Informática y Ciencias de la Computación (DICC)
Líneas de Investigación	Evaluación de prestaciones de hardware y software, computación de alto rendimiento y alta disponibilidad
Objetivo	Desarrollar un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos, integrando múltiples bases de datos, mediante análisis teórico y experimental del desempeño computacional de algoritmos y frameworks de programación
Duración del Proyecto	<ul style="list-style-type: none">• Inicio: 29 de mayo del 2017.• Fin: 28 de mayo del 2018.• Prórroga: 4 meses, hasta el 28 de septiembre de 2018.• Duración total: 16 meses.
Entrega del Informe Final	15 de marzo de 2018
Presupuesto Asignado:	\$ 0,00



3. INFORME FINAL:

Mediante Memorando Nro. EPN-DICC-2019-0180-M, del 15 de marzo de 2019, el M.Sc. Iván Marcelo Carrera Izurieta presenta el Informe Final del proyecto, que es revisado por la Dirección de Investigación y Proyección Social (DIPS). La DIPS realizó las observaciones del Informe Final y las comunicó al Director del Proyecto mediante Memorando Nro. EPN-VIPS-2019-0513-M.

Mediante Memorando Nro. EPN-DICC-2019-0254-M, enviado el 11 de abril de 2019, el Director del Proyecto presenta el Informe Final con los cambios sugeridos, mismo que se anexa y forma parte integrante del Acta de Finalización; y, cuyas conclusiones, y productos generados son:

CONCLUSIONES:

- a) Las bases de datos se estudiaron para establecer las relaciones entre los datos contenidos. Se pueden realizar simplificaciones a las bases de datos como en (Molina, 2018), u optimizaciones para mejorar las búsquedas como en el trabajo de titulación "Análisis Comparativo Del Desempeño Computacional Entre Dos Gestores De Bases De Datos En Consultas Sobre La Base De Datos UNIPROT/SWISS-PROT". Estos trabajos estudian los efectos sobre el tiempo de ejecución de las consultas sobre las bases de datos de la simplificación de las bases de datos o de las optimizaciones que se pueden realizar a los gestores de bases de datos.
- b) Las relaciones que se establecen entre los datos de las bases de datos están descritas brevemente en el presente documento, y más detalladamente en (Cárdenas, 2019). Estas relaciones permiten integrar las bases de datos de fármacos, proteínas, rutas metabólicas y ontologías de genes, y realizar las búsquedas de blancos terapéuticos.
- c) Se definió un método computacional, basado en la relación estructura – actividad SAR, para interrelacionar las interacciones entre fármacos y blancos terapéuticos. El método específico que relaciona fármacos y rutas metabólicas está descrito en (Cárdenas, 2019). Dentro de los blancos terapéuticos se definen proteínas y líneas celulares. El servicio web programado para Cell Fishing permite predecir los blancos terapéuticos de los fármacos en el dominio de las líneas celulares.
- d) Se definió un modelo matemático general para las búsquedas de blancos terapéuticos en las bases de datos que permite identificar las regiones paralelizables del modelo computacional. Esto, a su vez, permitirá posibles optimizaciones del desempeño computacional en términos del tiempo de ejecución para las búsquedas.

PRODUCTOS:

1. Artículo: "Defining architectures for recommended systems for medical treatment. A Systematic Literature Review"; Carrera I., Jiménez C.; Latin American Journal of Computing; ISSN: 1390-9266; noviembre 2018.
2. Artículo enviado para revisión: "Cell fishing: A similarity based approach for multiple cell lines-compound sensitivity prediction"; Carrera I., Tejera E.,



Jimenes K., Armijos V., Sánchez-Rodríguez A., Cruz-Monteagudo M., Pérez-Castillo Y.; PLOS Computational Biology (Q1); ISBN: 1553734X, 15537358.

3. Proyecto de Titulación de Ingeniería en Sistemas Informáticos y de Computación: "Analítica de Datos Aplicada al Enriquecimiento de Rutas Metabólicas a Través de Target Fishing"; Cárdenas Ayala Verónica Yakelin, Yáñez Escarabay Karla Victoria; <http://bibdigital.epn.edu.ec/handle/15000/20045>; febrero 2019.
4. Proyecto de Titulación de Ingeniería en Sistemas Informáticos y de Computación: "Evaluación Comparativa del Desempeño Computacional de la Ejecución de Consultas Usando la Base de Datos ChEMBL"; Molina Sierra Samantha Penélope; <http://bibdigital.epn.edu.ec/handle/15000/19271>; marzo 2018.
5. Conferencia: "Defining architectures for recommended systems for medical treatment. A Systematic Literature Review"; Carrera Iván; Jornadas de Ingeniería de Sistemas Informáticos y de Computación JISIC 2018, EPN; octubre 2018.

4. LIQUIDACIÓN ECONÓMICA:

El Proyecto Interno PII-DICC-02-2017 no contó con asignación presupuestaria del Vicerrectorado de Investigación y Proyección Social (VIPS).

5. FINALIZACIÓN:

Con la presente Acta se declara finalizado y cerrado el Proyecto Interno *PII-DICC-02-2017 "Desarrollo y Evaluación del desempeño de un método computacional para procesos de búsqueda de blancos terapéuticos para fármacos"*.

Para constancia de lo ejecutado y por estar de acuerdo con el contenido de la presente Acta, las partes libre y voluntariamente suscriben la misma, en tres ejemplares de igual contenido, tenor y valor legal.

Dado en la ciudad de Quito, D.M. a los dos días del mes de mayo del año dos mil diecinueve.


Ph.D. Alexandra P. Alvarado C.
**Vicerrectora de Investigación y
Proyección Social**

fc/sp

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE INVESTIGACIÓN
Y PROYECCIÓN SOCIAL


M.Sc. Iván M. Carrera I.
**Director del Proyecto
PII-DICC-02-2017**