

FULL DE RESUM DEL TREBALL DE FI DE GRAU DEL BDBI (ESCI-UPF)

TÍTOL DEL PROJECTE: A method to identify common features among similar protein binding sites	
AUTOR/A: Jordi Busoms	NIA:102762
CURS ACADÈMIC: 2018/2019	
DATA: 20 June 2019	
TUTOR/S: Dr. Xavier Jalencas, Dr. Jordi Mestres	
PARAULES CLAU (mínim 3)	
<ul style="list-style-type: none"> • Català: llocs d'unió, agrupament, desenvolupament d'algoritmes • Castellà: lugares de unión, agrupamiento, desarrollo de algoritmos • Anglès: Binding sites, clustering, algorithm development 	
RESUM DEL PROJECTE (extensió màxima: 100 paraules per llengua)	
<ul style="list-style-type: none"> • Català: Una de les principals causes de les reaccions adverses provocades per fàrmacs són les interaccions inesperades d'aquests amb proteïnes més enllà del seu objectiu. Els mètodes computacionals per a predir aquestes reaccions per milers de proteïnes es basen principalment en el lligand. Els mètodes basats en l'estructura segueixen sent computacionalment costosos. L'objectiu d'aquest projecte és investigar mètodes basats en l'estructura més eficients per tal de poder anticipar la probabilitat d'unió entre cada petita molècula i milers de proteïnes. Hem obtingut un algoritme funcional capaç d'aconseguir grups de llocs d'unió similars des d'estructures de proteïnes en tres dimensions i de generar entitats representatives del grup sencer. • Castellà: Una de las principales causas de las reacciones adversas provocadas por fármacos son las interacciones inesperadas de estos con proteínas más allá de su objetivo. Los métodos computacionales para predecir estas reacciones por miles de proteínas se basan principalmente en el ligando. Los métodos basados en la estructura siguen siendo computacionalmente costosos. El objetivo de este proyecto es investigar métodos basados en la estructura más eficientes para poder anticipar la probabilidad de unión entre cada pequeña molécula y miles de proteínas. Hemos obtenido un algoritmo funcional capaz de conseguir grupos de lugares de unión similares desde estructuras de proteínas en tres dimensiones y de generar entidades representativas del grupo entero. • Anglès: Unexpected binding of drugs to proteins beyond the intended protein target is one of the main causes of adverse drug reactions. 	

Computational approaches to profiling compounds over thousands of proteins rely mostly on fast ligand-based methodologies. Structure-based methods are still computationally demanding. The main objective of this project is to investigate more efficient structure-based approaches to anticipating the likely binding of small molecules to thousand of proteins without the need to process them all individually. We have obtained a fully working algorithm that is able to get groups of similar binding sites from three-dimensional protein structures and generate representative signatures of the entire group of proteins.