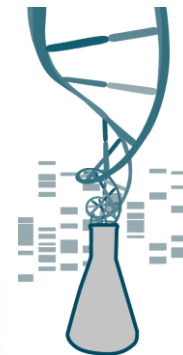




ASTURIAS
CAMPUS DE EXCELENCIA
INTERNACIONAL
|AD FUTURUM|

| AD FUTURUM |

DEL XVII AL XXI: PROYECTANDO
NUESTRA TRADICIÓN HACIA EL FUTURO



30/03/2011

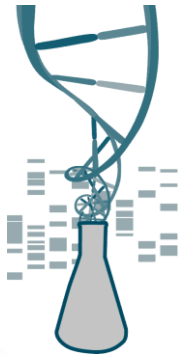
1ª JORNADA SECTORIAL

L1: GENOMICA Y PROTEOMICA
RELACIONADA CON CANCER Y
ENVEJECIMIENTO

CLÚSTER DE BIOMEDICINA Y SALUD

| AD FUTURUM |

DEL XVII AL XXI: PROYECTANDO NUESTRA TRADICIÓN HACIA EL FUTURO



UN POCO DE FILOSOFÍA PARA EMPEZAR...

The Eli and Edythe L. Broad Institute of Harvard and MIT is founded on two core beliefs:

1. This generation has a historic opportunity and responsibility **to transform medicine by using systematic approaches in the biological sciences to dramatically accelerate the understanding and treatment of disease.**
2. To fulfill this mission, **we need new kinds of research institutions, with a deeply collaborative spirit across disciplines and organizations, and having the capacity to tackle ambitious challenges.**

The Broad Institute is essentially an **“experiment” in a new way of doing science**, empowering this generation of researchers to:

- **Act nimbly.** Encouraging creativity often means moving quickly, and taking risks on new approaches and structures that often **defy conventional wisdom.**
- **Work boldly.** Meeting the **biomedical challenges** of this generation requires the capacity **to mount projects at any scale — from a single individual to teams of hundreds of scientists.**
- **Share openly.** Seizing scientific opportunities requires **creating methods, tools and massive data sets** — and making them available to the entire scientific community to rapidly accelerate biomedical advancement.
- **Reach globally.** Biomedicine should address the **medical challenges of the entire world**, not just advanced economies, and **include scientists in developing countries as equal partners whose knowledge and experience are critical to driving progress.**



INVESTIGADOR RESPONSABLE: JUAN LUIS FERNÁNDEZ MARTÍNEZ

Nº MIEMBROS: ≥ 4 (trabajo en red)

TEL: 985103199

@: jlfm@uniovi.es

WEB:

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN PRINCIPALES

- **Problemas inversos (o de identificación de parámetros) y estimación de la incertidumbre.** Aplicación: Segmentación probabilista de imágenes biomédicas.
- **Problemas de optimización y algoritmos bio-inspirados.** Aplicación: optimización de modelos biomédicos y predicción de la estructura secundaria de las proteínas.
- **Problemas de clasificación y aprendizaje automático.** Aplicación: Aprendizaje de microarrays (large scale).
- **Algoritmos de interpolación y simulación estocástica.** Aplicación: Simulación de procesos (escenarios) biomédicos.
- **Técnicas de procesamiento de señales digitales-ondículas.** Aplicación: filtrado de señales biomédicas y análisis de singularidades.



INVESTIGADOR RESPONSABLE: JUAN LUIS FERNÁNDEZ MARTINEZ

Nº MIEMBROS: ≥ 4 (trabajo en red)

TEL: 985103199

@: jlfm@uniovi.es

WEB:

EXPERIENCIA PREVIA

- Experiencia en modelización geofísica (petróleo) y medioambiental (**HARD PROBLEMS**)
- Alrededor de 100 publicaciones en revistas con índice de impacto y actas de congresos internacionales de prestigio.
- Colaboraciones con grandes universidades y centros de investigación en Estados Unidos (UC Berkeley, Stanford, UT Texas, Colorado School of Mines, IOWA State, Lawrence Berkeley Lab, Schlumberger EMI Center), Europa (Francia, UK, etc) y Asia (India, China y Singapur).
- Creciente interés en problemas de ingeniería biomédica. Ejemplo: predicción de la estructura secundaria de las proteínas mediante algoritmos de aprendizaje.

PATENTES

- DATA ANALYSIS IN HIGH DIMENSIONAL SPACES (MODEL REDUCTION AND UNCERTAINTY ANALYSIS). USA PATENT PENDING.

Otras patentes en preparación:

- KNOWLEDGE DISCOVERING IN LARGE SCALE MICROARRAYS USING LEARNING APPROACHES AND BIOINSPIRED GLOBAL OPTIMIZATION ALGORITHMS.
- DESIGN OF A WHOLE FAMILY OF BIO-INSPIRED (GLOBAL AND ROBUST) OPTIMIZERS.

PROYECTO SPRING-Singapur Marzo 2011:
DESARROLLO DE PROTOTIPOS INDUSTRIALES.



INVESTIGADOR RESPONSABLE: JUAN LUIS FERNÁNDEZ MARTÍNEZ

Nº MIEMBROS: >=4 (trabajo en red)

TEL: 985103199

@: jlfm@uniovi.es

WEB:

COMPETENCIAS Y CAPACIDADES TECNOLÓGICAS MÁS RELEVANTES

- F*ï*D*Î * Convulsión
- DESARROLLO DE TÉCNICAS ORIGINALES DE MODELIZACIÓN AVANZADA
- GUSTO POR LOS PROYECTOS APLICADOS Y MULTIDISCIPLINARES
- SENCILLEZ, CREATIVIDAD Y SERIEDAD
- EL TORTUOSO CAMINO DE LA IDEA AL TEOREMA Y DE ESTE FINALMENTE A LA PATENTE



INVESTIGADOR RESPONSABLE: JUAN LUIS FERNÁNDEZ MARTÍNEZ

Nº MIEMBROS: ≥ 4 (trabajo en red)

TEL: 985103199

@: jlfm@uniovi.es

WEB:

NUESTRA VISIÓN: OMICS-BASED RESEARCH

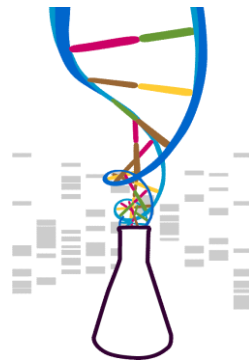
1. According to **National Institute of Allergy and Infectious Diseases (NIAID) Task Force report**, an individual's susceptibility to diseases is influenced by the person's gene expressions.
2. The application of **data mining and knowledge discovery techniques to genetic microarrays can provide huge advances in computer-aided diagnosis** through establishing important biomarkers, and developing new drugs and therapies. For example, the Microarray Gene Expression Data (MAGE) can be used to enable molecular classification of cancers through selection of genes that can serve as markers for different types of cancers.
3. NSF Releases Open Government Plan
"Roadmap" for future efforts reflects public input. April 7, 2010

In response to President Obama's Open Government Directive, the National Science Foundation (NSF) is finding ways to make its work more accessible to the general public. Through an Open Government Directive Plan being released today, not only will NSF continue to inform the public about innovative research it is funding at institutions around the country and make research results more available, it will also improve transparency and better integrate public participation and collaboration into the agency's core mission, enhancing innovation and efficiency.

4. **Bottle necks** are NOW in knowledge discovery and data mining techniques for large scale microarrays.

**MINING THIS OREBODY IS FREE!
INVESTMENTS=0.
IMPACT=INFINITE!**

DESIGN OF FAST AN EFFICIENT LEARNING METHODS FOR PROTEIN SECONDARY STRUCTURE PREDICTION



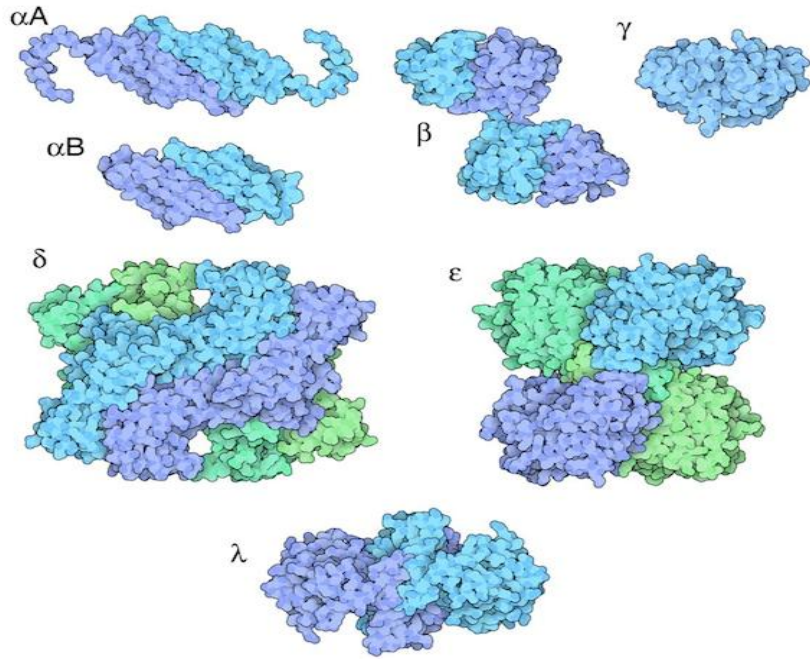
Research done in collaboration with

Saras Saraswathi (PhD)
Prof. Robert L. Jernigan
Prof. Andrzej Kloczkowski.

Iowa State University, USA

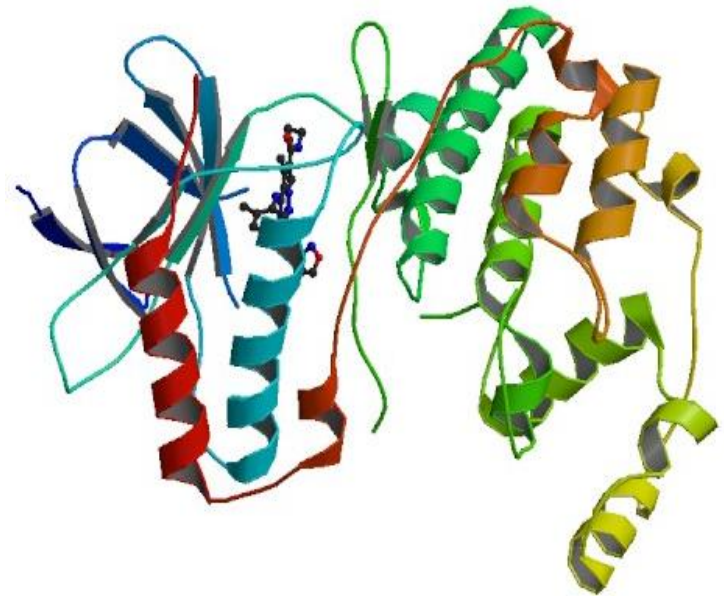
Prof. Andrzej Kolinski
Warsaw University, Poland

DISEASES, PROTEIN MALFUNCTION and drug design



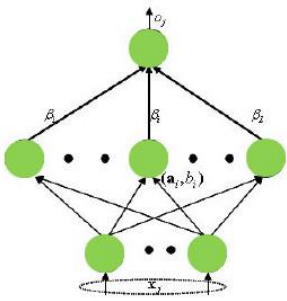
Crystallins : lenses in your eyes - long cells - filled themselves with Crystallins - smooth, transparent solution of protein – **misfoldings leads to cataract**

PDB entries 3l1e and 2wj7, July 2010 Molecule of the Month by David Goodsell :doi: 0.2210/rcsb_pdb/mom_2010_7

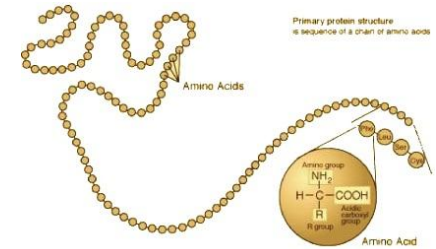


P38 Alpha MAP kinase inhibitor complexed with pyrrolotriazine inhibitor 7V that is currently in phase II clinical trials for the treatment of **rheumatoid arthritis**.

PDB – 3MVM DOI: 10.1021/jm100540x



DATA AND METHODS



- Unraveling proteins structure allows important advances in drug design
- Problem:
 - Experimental methods are too expensive and time consuming
 - There are millions of protein sequences
- Solution:
 - Computational methods are cheaper and faster
 - Machine Learning methods - Neural Networks
 - Particle Swarm Optimization
- AIM: designing learning methods with optimum accuracy and efficiency

Literature Results

Width	Testing set Q_3 (%)
1	57.28
3	69.11
5	74.44
7	76.28
9	77.44
11	76.98

• **Accuracy** - Q_3 – is between 82% and 90 % for our testing set compared to 77% for literature

• Our **standard deviation** is below 2.38 % . Industry averages are between 3 and 10% (not shown here).

RESULTS

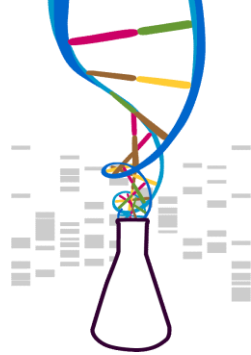
Our Results Using ELM - PSO

Metrics	Dataset	Average	Std-dev
Q3-testing	1	89.70	0.48
	2	85.03	1.38
	3	81.67	1.38
Sensitivity	1	79.52	0.50
	2	72.54	1.41
	3	68.67	2.38
Specificity	1	94.06	0.23
	2	91.41	0.74
	3	90.12	0.81
Corr-coeff	1	76.20	0.61
	2	66.71	1.61
	3	61.19	1.91

Pendientes de publicación

We are on it!

1. Saras Saraswathi, Pawel Gniewek, Juan Luis Fernández-Martínez,, Robert L. Jernigan, Andrzej Koliniski, Andrzej Kloczkowski, 2011. FLOPRED for secondary structure prediction using knowledge based potentials. Submitted to BMC Bioinformatics.
2. Saras Saraswathi, Juan Luis Fernández-Martínez, Robert L. Jernigan, Andrzej Kloczkowski, 2011. An aminoacid perspective of secondary structure prediction. Joint research report. Universities of Iowa and Oviedo. Submitted to BMC Bioinformatics.
3. Saras Saraswathi, Juan Luis Fernández-Martínez, Robert L. Jernigan, Andrzej Kloczkowski, 2011. FLOPRED for secondary structure prediction using physicochemical features of aminoacids. Joint research report. Universities of Iowa and Oviedo. Submitted to BMC Bioinformatics.
4. Saras Saraswathi, Juan Luis Fernández-Martínez, Robert L. Jernigan, Andrzej Kloczkowski, 2011. Improving secondary prediction using position specific residue preferences of Amino Acids. Joint research report. Universities of Iowa and Oviedo. It will be submitted to BMC Bioinformatics.
5. Saras Saraswathi, Juan Luis Fernández-Martínez, Robert L. Jernigan, Andrzej Kloczkowski, 2011. FLOPRED methodology for prediction of Phosphorylation sites in proteins. Joint research report. Universities of Iowa and Oviedo. It will submitted to BMC Bioinformatics.



Una pregunta ...

1. ¿NECESITA EL CLÚSTER DE BIOMEDICINA DE LA UNIVERSIDAD DE OVIEDO LA CREACIÓN DE UN CENTRO **MULTIDISCIPLINAR** DE MODELIZACIÓN MATEMÁTICA EN PROBLEMAS BIOMÉDICOS?

o por el contrario

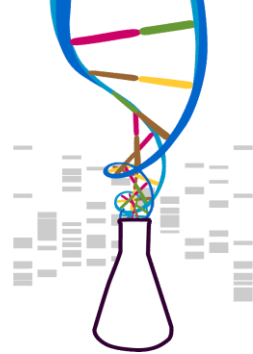
2. ¿LA INVESTIGACIÓN BIOMÉDICA VA A SER PURAMENTE EXPERIMENTAL, BASADA EN EL PROCEDIMIENTO ENSAYO-ERROR Y REALIZADA EN COMPARTIMENTOS ESTANCOS?

En NUESTRO GRUPO estamos interesados en el primer enfoque, y dispuestos a empezar a trabajar en la creación de este “centro” multidisciplinar.

No estamos interesados en la subcontratación de problemas matemáticos que la mayoría de las veces están incorrectamente planteados.

Un deseo para terminar...

No sólo ofrecemos nuestra “expertise” matemática,
sino un proyecto mucho más ambicioso:



**La creación de un
CENTRO DE MODELIZACIÓN DE PROBLEMAS BIOMÉDICOS
que estaría al servicio del clúster e integraría diferentes proyectos
relacionados con sus temáticas de trabajo.**

Para ello no demandamos en nuestro caso ni grandes equipos, ni grandes infraestructuras, ni grandes inversiones plasmadas en edificios inteligentes con baños de mármol, sino todo lo contrario,

ES NECESARIO FINANCIAR TIEMPO Y TALENTO

**¡EL FUTURO ESTÁ EN LAS PERSONAS,
NO SÓLO EN LOS MEDIOS!**

GRACIAS POR SU ATENCIÓN