

Αντικείμενο της παρούσας εγκεκριμένης πρότασης αποτελεί η ανάπτυξη μιας «one stop shop» υπολογιστικής πλατφόρμας νέας γενιάς (**CloudScreen**) για την επανατοποθέτηση και επαναστόχευση φαρμάκων στην ιατρική ακριβείας.

Το **CloudScreen** αποτελεί στρατηγική σύμπραξη ανάμεσα στο Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών/ Ινστιτούτο Χημικής Βιολογίας (ΕΙΕ/ΙΧΒ) και στη **Cloudpharm**, μια ελληνική start-up εταιρεία βιοτεχνολογίας.

The objective of this approved proposal is the development of a new generation «one stop shop» computational platform (**CloudScreen**) toward drug repositioning and repurposing in precision medicine.

CloudScreen is a strategic partnership between the National Research Foundation/ Institute of Chemical Biology (NHRF) and **Cloudpharm**, a Greek biotechnology start-up company.



ΔΡΑΣΗ ΕΘΝΙΚΗΣ ΕΜΒΕΛΕΙΑΣ: «ΕΡΕΥΝΩ-ΔΗΜΙΟΥΡΓΩ-ΚΑΙΝΟΤΟΜΩ Β΄ ΚΥΚΛΟΣ»

«ΑΝΤΑΓΩΝΙΣΤΙΚΟΤΗΤΑ, ΕΠΙΧΕΙΡΗΜΑΤΙΚΟΤΗΤΑ & ΚΑΙΝΟΤΟΜΙΑ» (ΕΠΑνεΚ)

Ειδική Υπηρεσία Διαχείρισης Επιχειρησιακού Προγράμματος Ανταγωνιστικότητα Επιχειρηματικότητα και Καινοτομία (ΕΥΔ ΕΠΑνεΚ)

Ειδική Υπηρεσία Διαχείρισης και Εφαρμογής Δράσεων στους τομείς Έρευνας, Τεχνολογικής Ανάπτυξης και Καινοτομίας (ΕΥΔΕ ΕΤΑΚ)

ΤΙΤΛΟΣ: Cloudscreen, ΑΚΡΩΝΥΜΙΟ: Cloudscreen

ΚΩΔΙΚΟΣ ΕΡΓΟΥ: T2ΕΔΚ-03153

Διάρκεια: 30 μήνες

Horizon 2020: 31048417

Συντονιστής: Μίνως Τιμόθεος Ματσούκας (Cloudpharm)

Επιστημονική Υπεύθυνη: Δρ. Θεοδώρα Κασίλα (Εντεταλμένη Ερευνήτρια, ΙΧΒ/ΕΙΕ)

Ιστοσελίδα: <https://cloudscreen.gr/?lang=en>

RESEARCH-CREATE-INNOVATE

Ministry of Economy & Development, Special Secretary For ERDF & CF Managing Authority Of EPAnEK,

EPAnEK2014-2020 Operational Programme Competitiveness –Entrepreneurship –Innovation (ΕΥΔΕ-ΕΤΑΚ)

Title: CloudScreen

Acronym: CloudScreen

Project CODE: T2ΕΔΚ-03153

Duration: 30 months

Horizon 2020: 31048417

Coordinator: Minos Timotheos Matsoukas (Cloudpharm)

Scientist in charge: Dr. Theodora Katsila (Research Assistant Professor, ICB/NHRF)

Webpage: <https://cloudscreen.gr/?lang=en>

Η βασική ιδέα:

- Η φαρμακευτική επανατοποθέτηση και επαναστόχευση συνιστούν πλέον στρατηγική τεχνολογία αιχμής, αναδεικνύοντας τη δυνατότητα εύρεσης νέων μοριακών στόχων, άρα και νέων φαρμάκων.
- Πλήθος υπολογιστικών εργαλείων επεξεργασίας δεδομένων μεγάλου όγκου (1D) έχει αναπτυχθεί σήμερα ως απόρροια των τεχνολογικών επιτευγμάτων στις -ομικές τεχνολογίες (γονιδίωμα-μεταγράψωμα-πρωτέωμα-μεταβόλωμα).
- Τα τελευταία 20 έτη εφαρμόζεται με επιτυχία η καινοτόμος 3D μεθοδολογία για το σχεδιασμό βιοδραστικών μορίων με φαρμακευτικές ιδιότητες, βρίσκοντας εφαρμογή και στο πεδίο της επανατοποθέτησης και επαναστόχευσης φαρμάκων.
- Τα 3D δεδομένα, που αφορούν τα μοριακά συστήματα, συμβάλουν, τόσο στη νοσοκεντρική, όσο και στη φαρμακοκεντρική προσέγγιση για την επανατοποθέτηση και επαναστόχευση φαρμάκων.

Overview:

- Nowadays, drug repositioning and repurposing are a cutting-edge technology, highlighting the possibility of new molecular target discovery, meaning also new drug discovery.
- Numerous computational tools for processing 1D data have been developed today as a result of technological advances in -omic technologies (genome-transcriptome- proteome-metabolome)
- For the last 20 years, the innovative 3D methodology has been successfully applied for the design of bioactive molecules with medicinal properties, finding application in the field of drug repositioning and repurposing.
- 3D data for molecular systems can contribute to drug repositioning and repurposing according to the disease or the drug of interest.

Η βασική ιδέα:

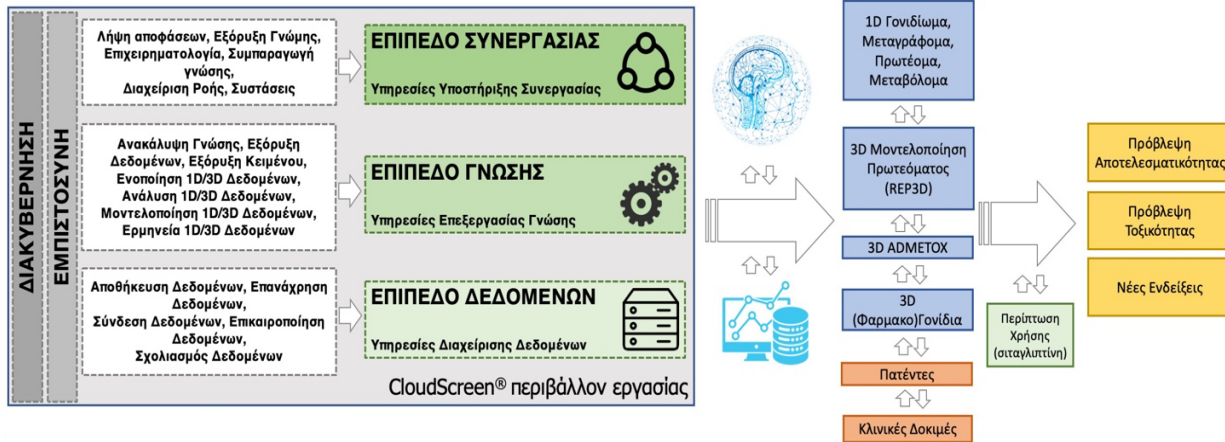
- Πρόκληση στην επανατοποθέτηση και επαναστόχευση φαρμάκων αποτελεί η εύρεση υπολογιστικών λύσεων για την συνένωση ετερογενών δεδομένων, την ανάλυση και την ερμηνεία τους.
- Παρόλο που τα επαναστοχευμένα φάρμακα θεωρούνται εξ' ορισμού πιο ασφαλή ή/και αποτελεσματικά, αυτό δε φαίνεται να ισχύει πάντα. Το επαναστοχευμένο φάρμακο μπορεί να οδηγεί και σε τοξικότητα.
- Την εποχή της ιατρικής ακριβείας, η βέλτιστη διαστρωμάτωση των ασθενών εξακολουθεί να αποτελεί διαρκή πρόκληση (το κατάλληλο επαναστοχευμένο φάρμακο στον κατάλληλο ασθενή).

Overview:

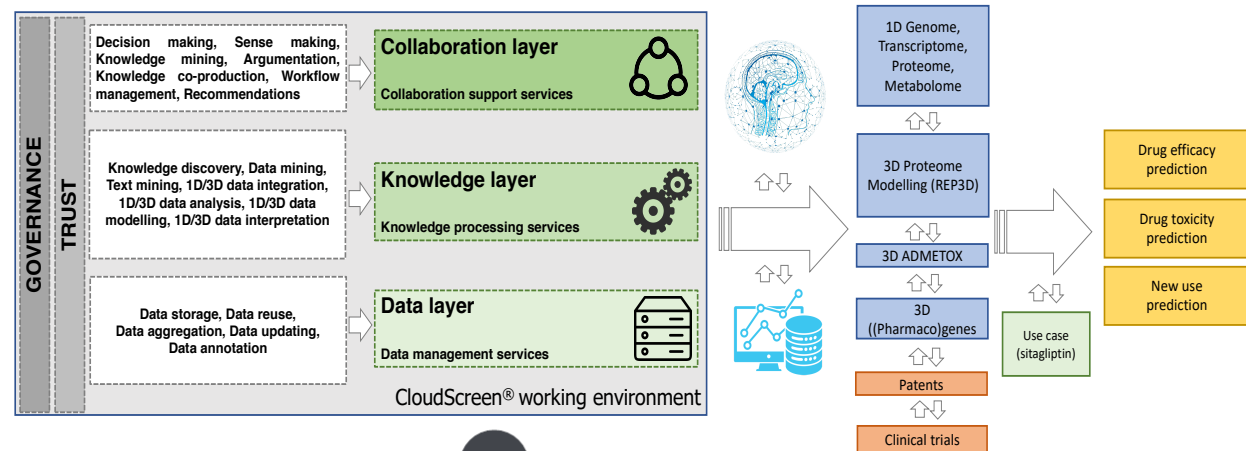
- It is challenging in drug-repositioning and repurposing to find computational solutions for the integration of heterogeneous data, their analysis and their interpretation.
- Although repurposing drugs are considered safer and/or more effective, this does not always seem to be the case. Drug repurposing can also lead to toxicity.
- In the precision medicine era, optimal patient stratification remains an ongoing challenge (appropriate repurposing drug to the right patient).



Διάγραμμα Έργου



Project Outline



CloudScreen - συγκριτικά πλεονεκτήματα:

- 1) δεν περιορίζεται σε 1D δεδομένα (γονιδίωμα-μεταγράψωμα-πρωτέωμα-μεταβόλωμα), αλλά ενοποιεί-αναλύει-ερμηνεύει τόσο 1D όσο και 3D δεδομένα (μοριακής δομής)
- 2) ελαχιστοποιεί τα σφάλματα στην εξόρυξη-ενοποίηση-ανάλυση δεδομένων και προάγει την αμερόληπτη λήψη αποφάσεων, συνδυάζοντας τις ικανότητες συλλογισμού τεχνητής και ανθρώπινης νοημοσύνης
- 3) παρέχει δυνατότητες δυναμικής επικαιροποίησης και επεκτείνει τις υπηρεσίες κειμένου (πατέντες, ηθικά και νομικά ζητήματα)
- 4) εξυπηρετεί ως «one stop shop» εργαλείο πρόβλεψης και αποτίμησης της αποτελεσματικότητας και τοξικότητας των επαναστοχευμένων μορίων σε νέες ενδείξεις



CloudScreen – comparative advantage:

- 1) is not limited in 1D data (genome-transcriptome-proteome-metabolome) but combines-analyses-interpretes 1D and 3D data (molecular structure)
- 2) minimizes errors during data precipitation-combination-analysis and promotes unbiased decision-making considering both artificial and human intelligence
- 3) provides capabilities of dynamic updating and expands text services (patents, ethics and legal issues)
- 4) serves as "one stop shop" tool for predicting and evaluating the effectiveness and toxicity of retargeted molecules in new indications

