

## [vMutate: vMutate: a complete solution for virtual enzyme engineering](#)

### Description

vMutate desarrollará la próxima plataforma computacional para el desarrollo eficiente de la ingeniería de enzimas de interés industrial. Para ello, integraremos técnicas y datos ómicos (de diferentes servidores y bases de datos), con metodologías vanguardistas de modelado molecular y atómico y, además, el conocimiento (intuición) humano. Perseguimos una integración interactiva (y más intuitiva) del conocimiento y experiencia humana con los mecanismos automáticos de simulación por ordenador uniendo, para ello, dispositivos gráficos innovadores con herramientas novedosas de análisis y modelación.

Para cumplir con este objetivo, la plataforma proporcionará librerías de mutantes "inteligentes" para ser integradas en los procesos de diseño enzimático experimental: mutación racional o, por ejemplo, evolución dirigida. La plataforma será validada con una prueba de concepto en peroxidasas inespecíficas (UPOS).

Esta propuesta se asienta en cuatro pilares tecnológicos:

- 1) **Avances en el modelado molecular.** La innovación en las técnicas de modelado permite hoy la predicción rápida y robusta de eventos bioquímicos y biofísicos.
- 2) **Avances en la computación de alto rendimiento (HPC).** HPC se está convirtiendo en una corriente principal, satisfaciendo las necesidades de rendimiento computacional, con una optimización del diseño, costes operativos y impacto ecológico.
- 3) **Avances en la visualización.** El desarrollo reciente de herramientas gráficas con dispositivos de interacción humana incluyendo pantallas táctiles, control de voz y movimiento, realidad virtual (VR), etc. En un futuro 5G, una comunicación rápida permitirá la visualización 3D interactiva en tiempo real, abriendo la posibilidad de trabajo en equipo remoto (virtual).
- 4) **Los avances en la IA.** Inteligencia Artificial se está convirtiendo en una realidad que, sin duda, afectará a todas las tecnologías futuras.

En los últimos años hemos trabajado en estos cuatro pilares, y vamos a demostrar que estamos preparados para integrarlos en la futura plataforma computacional de diseño de enzima. Esta novedosa herramienta bioinformática, destinada a poner técnicas avanzadas de modelado a disposición de investigadores académicos e industriales, acelerará la aplicación de la biotecnología en la industria química y farmacológica, con repercusión directa en el medio ambiente y en los sectores económicos biotecnológicos.

Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación

---

**Source URL (retrieved on 23 febr 2024 - 04:45):** <https://www.bsc.es/ca/research-and-development/projects/vmutate-vmutate-complete-solution-virtual-enzyme-engineering>