IRB BARCELONA
INSTITUTE FOR RESEARCH IN BIOMEDICINE

PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNIQUES PER A LA CONTRACTACIÓ DE LLICÈNCIES DE PROGRAMARIS PER A CRIBRATGES D'ALT RENDIMENT PER A LA DRUG SCREENING PLATFORM DE L'IRB BARCELONA

I.- INTRODUCCIÓ

La Fundació Institut de Recerca Biomèdica (IRB Barcelona), és una fundació creada per la Generalitat de Catalunya, la Universitat de Barcelona (UB) i el Parc Científic de Barcelona (PCB), que té per objectiu contribuir a la millora de la qualitat de vida per mitjà de l'aplicació dels avenços en l'àmbit de la ciència biomèdica bàsica i aplicada, i promoure la recerca multidisciplinària d'excel·lència en la interfície entre la biologia i la química, així com fomentar la col·laboració entre les entitats locals i els instituts de recerca institucionals, impulsant i coordinant la recerca interdisciplinària en biomedicina. L'IRB Barcelona té condició de centre CERCA, reconegut per la Generalitat de Catalunya.

L'IRB Barcelona, d'acord amb els seus objectius, necessita llicències de programari per registrar la quimioteca de l'IRB Barcelona, analitzar i visualitzar els resultats biològics provinents de campanyes de cribratge, així com associar-los a les diferents entitats químiques, per tal de gestionar els cribratges d'alt rendiment realitzats a la plataforma de cribratge de l'IRB Barcelona (Drug Screening Platform), motiu pel qual durà a terme la present contractació.

The Biomedical Research Institute Foundation (IRB Barcelona) is a foundation created by the Generalitat de Catalunya, the University of Barcelona (UB) and the Barcelona Science Park (PCB), which aims to contribute to the improvement of the quality of life through the application of advances in the field of basic and applied biomedical science, and to promote multidisciplinary research of excellence at the interface between biology and chemistry, as well as to foster collaboration between local entities and institutional research institutes, promoting and coordinating interdisciplinary research in biomedicine. IRB Barcelona has status as a CERCA center, recognized by the Generalitat de Catalunya.

IRB Barcelona, in accordance with its objectives, needs software licenses to register the chemical library of IRB Barcelona, analyse and visualize the biological results coming from screening campaigns, as well as associate them with the different chemical entities, in order to manage the High Throughput Screenings carried out at the Drug Screening Platform of the IRB Barcelona, reason for carrying out this contract.

II.- OBJECTE DE LA CONTRACTACIÓ

L'objecte d'aquest procediment és el subministrament de llicències de programari per gestionar els cribratges d'alt rendiment realitzats a la plataforma de cribratge de l'IRB Barcelona (Drug Screening Platform).

Amb aquesta finalitat, es necessiten les llicències següents:

- 1 llicència d'emmagatzematge de dades al núvol

- 2 llicències per registrar els compostos de la quimioteca (> 200K compostos) - 3 Llicències per importar els resultats dels lectors i analitzar-los
- 3 llicències de programari de visualització de resultats
- 3 llicències de navegador per cercar resultats a la base dades

Específicament estaran inclosos tots els serveis, provisions i subministraments que siguin necessaris per a l'execució total i completa del contracte en els termes detallats, mentre no s'especifiqui el contrari en aquest plec de prescripcions tècniques.

The purpose of this procedure is the supply of software licenses to manage the high-throughput screenings carried out at the Drug Screening Platform of IRB Barcelona.

For this purpose, the following licenses are needed:

- 1 cloud data storage license
- 2 licenses to register the compounds of the chemical library (> 200K compounds)
- 3 Licenses to import the results of the readers and analyze them
- 3 results visualization software licenses
- 3 browser licenses to search results in the data base

Specifically, all services, provisions and supplies that are necessary for the full and complete execution of the contract will be included in the detailed terms, unless otherwise specified in this technical specifications.

III.- REQUISITS TÈCNICS DE LA CONTRACTACIÓ

L´IRB Barcelona necessita adquirir llicències de programari per gestionar els cribratges d'alt rendiment realitzats a la plataforma de cribratge de l'IRB Barcelona (Drug Screening Platform).

Amb aquesta finalitat, es necessiten les llicències següents:

- 1 llicència d'emmagatzematge de dades al núvol
- 2 llicències per registrar els compostos de la quimioteca (> 200K compostos)
- 3 Llicències per importar els resultats dels lectors i analitzar-los
- 3 llicències de programari de visualització de resultats
- 3 llicències de navegador per cercar resultats a la base dades

The IRB Barcelona needs to acquire software licenses to manage the high-throughput screenings carried out on the IRB Barcelona screening platform (Drug Screening Platform).

For this purpose, the following licenses are needed:

- 1 cloud data storage license
- 2 licenses to register the compounds of the chemical library (> 200K compounds)
- 3 Licenses to import the results of the readers and analyze them
- 3 results visualization software licenses
- 3 browser licenses to search results in the data base

1. Requeriments mínims del servei / subministrament:

L'oferta ha d'incloure i garantir, amb caràcter de mínims, les prestacions que es detallen a continuació, els quals són obligatoris:

Registre compost:

Realitzeu un registre d'un sol compost o lot mitjançant una interfície d'usuari interna o una plataforma de tercers.

Importació de resultats de lectors i anàlisi

- S'adapta a una gran varietat de tipus d'assaig de Cribratges d'alt rendiment (HTS) i dosi-resposta.
- Els resultats es poden importar carregant resultats de plaques de diferents lectors (Envision, Ensight...) o diferents lectures (HTRF, Alpha, Luminescència, etc.)
- Definir regles per a una classificació altament automatitzada de resultats, que permeti un processament eficient de conjunts de resultats massius.
- Les visualitzacions riques en informació ajuden a l'anàlisi i la revisió eficients d'experiments d'assaig (Z prime, robust Z prime, mitjanes de control, % CV de control, senyal versus fons, diagrames de bigotis, vistes de plaques amb mapes d'activitat associats, etc.)
- Manera fàcil de validar/rebutjar els resultats de l'experiment/plaques/pous.
- Trieu entre protocols d'assaig predefinits, calculadores d'ajustament de corbes, lectors de plaques i dissenys de plaques, o creeu i reutilitzeu definicions personalitzades.
- Captura totes les dades d'R+D, estructurades i no estructurades, relacionades amb un experiment, alhora que dóna suport als fluxos de treball de validació interns, externalitzats i entre empreses.
- Els científics de cribratge poden definir manualment experiments i validar els resultats, o una capa d'automatització pot impulsar la creació i el processament d'experiments.
- Envieu dades directament a tota la plataforma per a anàlisis, cerca, informes, registre i seguiment de mostres i materials.

- Una interfície basada en web i els desplegaments allotjats al núvol admeten un accés ràpid i col·laboracions externes.

Navegador

- Gestioneu i compartiu dades de recerca de tots els sistemes, repositoris corporatius i fonts de dades de tercers, en un sol lloc perquè pugueu simplificar la gestió del flux de treball de big data i trobar les dades necessàries per respondre ràpidament les preguntes sobre el progrés i les prioritats.

- Les funcions de gestió de dades de recerca permeten als científics revisar i gestionar formularis de cerca personals i a nivell de projecte, vistes, consultes i llistes.

- Milloreu els coneixements mitjançant la cerca i el descobriment científics integrats, com ara la cerca d'estructura química i la similitud, amb el millor programari de visualització de dades que inclou formularis, taules i gràfics.

- Integra bases de dades químiques, biològiques, d'assaig i altres bases de dades d'investigació per proporcionar una única capacitat de cerca i navegació.

- Realitzeu una gestió simplificada del cicle de vida de les dades de recerca amb consultes basades en formularis mitjançant formularis d'arrossegar i deixar anar a nivell de projecte i d'usuari, així com la navegació basada en taules i gràfics.

- Creeu noves cerques i navegueu per formularis i vistes o cloneu formularis existents per reutilitzar-los amb petites modificacions.

- Realitzeu consultes d'estructura química utilitzant dibuixants químics populars i calculeu automàticament les propietats físiques de les molècules.

- Exporta les dades a fitxers SD, CSV o Microsoft Office

Visualització

- Realitzar la manipulació de dades, l'anàlisi estadístic i les capacitats de traçat sofisticades necessàries per explorar i comprendre qualsevol complexitat i mida de les dades.

- Aprofiteu els tipus de dades nadius per a anàlisis químiques avançades.

- Deseu plantilles estandarditzades i compartiu espais de treball per a l'anàlisi en equip i la presa de decisions.

- Realitzar anàlisis químics, incloent grups R, enumeració, SAR i parells moleculars coincidents.

- Comprendre, refinar i seleccionar entre conjunts de dades grans i complexos de milions de compostos mitjançant milers de descriptors.

- Col·laborar en l'anàlisi científic mitjançant espais de treball compartibles i plantilles reutilitzables.

- Visualitzar dades numèriques, textuals, d'imatge, d'estructura química.

- Genera visualitzacions d'alt rendiment, inclosos gràfics i taules interactives.

- Carregueu dades de molts tipus de fitxers directament des de bases de dades.

The offer must include and guarantee, as a minimum, the capabilities detailed below, which are mandatory:

Compound registration:

Perform single compound or batch registration using a internal user interface, or a third-party platform.

Result importing from readers and analysis

- Accommodates a wide variety of assay types for High Throughput Screening (HTS) and dose-response.

- Results can be imported by loading plate results from different readers (Envision, Ensight...) or different readouts (HTRF, Alpha, Luminescence etc)

- Define business rules for highly automated classification of results, allowing for efficient processing of massive results sets.

- Information-rich visualizations aid in the efficient analysis and review of assay experiments (Z prime, robust Z prime, control averages, control %CV, signal to background, whisker plots, plate views with associated hit maps, etc etc)

- Easy way to validate/reject results from the experiment/plates/wells.

- Choose from out-of-the-box assay protocols, curve fit calculators, plate readers and plate layouts, or create and reuse custom definitions.

- Captures all R&D data, structured and unstructured, related to an experiment, while supporting in-house, outsourced and cross-company validation workflows.

- Screening scientists can manually define experiments and validate results, or an automation layer can drive experiment creation and processing.

- Directly deliver data throughout the platform for analysis, search, reporting, registration and sample and materials tracking.

- A web-based interface and cloud-hosted deployments support quick access and external collaborations.

IRB BARCELONA
INSTITUTE FOR RESEARCH IN BIOMEDICINE

Browser

- Manage and share research data from all systems, including Dotmatics, corporate repositories, and third-party data sources, in one place so you can simplify big data workflow management and find the data needed to quickly answer questions about progress and priorities.

- Research data management functions that allow scientists to review and manage project-level and personal search forms, views, queries and lists.

- Enhance insights through built-in scientific search and discovery, such as chemical structure search and similarity, with the best data visualization software that includes forms, tables, and charts.

- Integrates chemical, biological, assay and other research databases to provide a single federated search and browse capability.

- Realize simplified research data lifecycle management with form-based queries using project- and user-level drag and drop forms, as well as table- and chart-based browsing.

- Create new search and browse forms and views or clone existing forms to reuse with minor modifications.

- Perform chemical structure queries using popular chemical sketchers and automatically calculate physical properties of molecules.

- Export data into SD files, CSV or Microsoft Office

Visualization

- Perform data manipulation, statistical analysis and sophisticated plotting capabilities required to explore and understand any complexity and size of data.

- Leverage native data types for advanced chemistry analyses.

- Save standardized templates and share workspaces for team analysis and decision-making.

- Conduct cheminformatics analyses, including R-group, enumeration, SAR and matched molecular pairs.

- Understand, refine and select from large and complex data sets of millions of compounds by thousands of descriptors.

- Collaborate on scientific analysis through shareable workspaces and reusable templates.

- Visualize numeric, textual, image, chemical structure data.
- Generate high performance visualizations, including interactive charts and tables.
- Load data from many types of files directly from databases.

2. Instal·lació, execució i manteniment

La instal·lació es farà amb el suport de l'empresa proveïdora dels diferents programaris. Suport i manteniment inclosos

The installation will be carried out with the support of the company that provides the different software
Support and maintenance included

3. Calendari de lliurament i execució del servei

La data límit de lliurament del subministrament de les llicències serà serà de dues setmanesa partir de la formalització del contracte.

The deadline for delivery of the supply of licenses will be two weeks from the formalization of the contract.

5. Documentació tècnica

El contractista haurà de presentar amb l'oferta tècnica un document amb la descripció tècnica detallada de les característiques de les llicències ofertades.

The contractor must present, with the technical offer, a document with the detailed technical description of the characteristics of the licenses offered.

Barcelona, 01 de Febrer de 2023

Israel Ramos Villullas
Drug Screening Platform Coordinator
Fundació Institut de Recerca Biomèdica (IRB Barcelona)