

Επιθυμητή Θεματική Περιοχή Διδακτορικής Διατριβής:

Χημειοπληροφορική, Βιοπληροφορική, Αλγόριθμοι πρόβλεψης, Μηχανική Μάθηση, Τεχνητή νοημοσύνη, Ανακάλυψη φαρμάκων

Προτεινόμενος τίτλος Διδακτορικής Διατριβής και γλώσσα εκπόνησης:

Νέες υπολογιστικές προσεγγίσεις στην ταυτοποίηση βιοδραστικών ενώσεων με μεθοδολογίες τεχνητής νοημοσύνης και μηχανικής μάθησης

Τεκμηριωμένη επιστημονική πρόταση και προσχέδιο Διδακτορικής Διατριβής

(Προσθέστε σελίδες ανάλογα με τις ανάγκες της πρότασης ή επισυνάψτε αυτόνομο κείμενο).

Η διδακτορική διατριβή διερευνά νέες μεθοδολογίες ανακάλυψης βιοδραστικών ενώσεων και εκτίμησης της βιοσυμβατότητας εξελιγμένων υλικών συνδυάζοντας την Τεχνητή Νοημοσύνη (TN), τη Μηχανική Μάθηση (MM) και τη Μοριακή Δυναμική (ΜΔ). Η έρευνα επιδιώκει να συνδυάσει την ισχύ προσεγγίσεων ανάλυσης πολυπαραμετρικών δεδομένων προκειμένου να προσδιορίσει, προβλέψει και βελτιστοποιήσει προφίλ βιοδραστικών ενώσεων και εξελιγμένων υλικών, αποκαλύπτοντας δυνητικά επαναστατικές εφαρμογές στη μηχανική βιοϊατρική.

Ερευνητικοί στόχοι:

MM στην εικονική σάρωση: Εφαρμογή αλγορίθμων MM για την εξέταση βιοδραστικών ενώσεων που παράγονται με τεχνητή νοημοσύνη, με έμφαση στη βιολογική τους δραστικότητα, τη βιοσυμβατότητά τους και το δυναμικό τους ως υποψήφια φάρμακα.



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΔΥΤΙΚΗΣ ΑΤΤΙΚΗΣ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Γενετική TN για νέα μόρια: Χρήση τεχνικών generative AI¹ για τη δημιουργία νέων μοριακών δομών για πιθανές βιοδραστικές ενώσεις και εξελιγμένα υλικά.

Αξιολογήσεις βιοσυμβατότητας: Ενσωμάτωση αξιολογήσεων και εκτιμήσεων βιοσυμβατότητας, διασφαλίζοντας ότι ενώσεις και υλικά είναι ασφαλή για τα βιολογικά συστήματα.²

Ενσωμάτωση TN, MM, και ΜΔ: Συνδυασμός αυτών των μεθοδολογιών για την παραγωγή βελτιωμένων εργαλείων ανακάλυψης βιοδραστικών ενώσεων/ εξελιγμένων υλικών.³

Βελτιωμένες προσομοιώσεις ΜΔ: Αξιοποίηση της MM για την καθοδήγηση προσομοιώσεων MD στη διερεύνηση βιομοριακών αλληλεπιδράσεων, με έμφαση στην κατανόηση της βιοσυμβατότητας.⁴

Ανάλυση δεδομένων για ΜΔ και γνώσεις βιοσυμβατότητας: Χρησιμοποιώντας προηγμένες τεχνικές ΜΔ για την ανάλυση προσομοιώσεων και δεδομένων βιοσυμβατότητας, εντοπίζοντας μοτίβα για ασφαλή σχεδιασμό.

Μεθοδολογία:

Ανάπτυξη μοντέλων TN: Δημιουργία μοντέλων TN για τη δημιουργία νέων μοριακών δομών, με έμφαση στη βιοσυμβατότητα.

Εικονική Σάρωση βάσει MM: Εφαρμογή αλγορίθμων για την αξιολόγηση της βιολογικής δραστηριότητας και της βιοσυμβατότητας

Ολοκληρωμένη επαναληπτική ανάπτυξη: Ανάπτυξη βρόχων ανατροφοδότησης που ενσωματώνουν TN, ML και δοκιμές βιοσυμβατότητας για συνεχή βελτιστοποίηση.

Ενισχυμένες προσομοιώσεις ΜΔ για βιοσυμβατότητα: Εστίαση των προσομοιώσεων ΜΔ σε τομείς για την κατανόηση της βιοσυμβατότητας

Ανάλυση δεδομένων με MM: Ανάλυση δεδομένων ΜΔ και βιοσυμβατότητας με χρήση ML για την εξαγωγή σχετικών πληροφοριών.

Συμπερασματικά, αυτό το διδακτορικό έργο φιλοδοξεί να προωθήσει σημαντικά τον σχεδιασμό βιοδραστικών ενώσεων και εξελιγμένων υλικών με την ενσωμάτωση πρωτοποριακών τεχνικών τεχνητής νοημοσύνης, μηχανικής μάθησης και μοριακής δυναμικής, με στόχο την ανάπτυξη συνδυαστικών μεθοδολογιών στη μηχανική βιοιατρική.

¹ Corso, G., Stärk, H., Jing, B., Barzilay, R., & Jaakkola, T. (2022). Diffdock: Diffusion steps, twists, and turns for molecular docking. *arXiv preprint arXiv:2210.01776*.

² Tepla, T. L., Izonin, I. V., Duriagina, Z. A., Tkachenko, R. O., Trostianchyn, A. M., Lemishka, I. A., ... & Kovbasyuk, T. M. (2018). Alloys selection based on the supervised learning technique for design of biocompatible medical materials. *Archives of Materials Science and Engineering*, 93(1), 32-40.

³ Patel, V., & Shah, M. (2022). Artificial intelligence and machine learning in drug discovery and development. *Intelligent Medicine*, 2(3), 134-140.

⁴ Wang, Y., Ribeiro, J. M. L., & Tiwary, P. (2020). Machine learning approaches for analyzing and enhancing molecular dynamics simulations. *Current opinion in structural biology*, 61, 139-145.