

Głównym celem projektu jest zrozumienie, w jaki sposób można skuteczniej identyfikować nowe związki chemiczne, które mogą wykazywać aktywność wobec makrocząsteczek biologicznych, takich jak enzymy czy receptory. Ludzkość od dawna szuka sposobu na przewidywanie wpływu związków chemicznych na ważne biologicznie i medycznie cele. Pomogłoby to w szybszym projektowaniu nowych i bezpieczniejszych leków (np. związków hamujących zmutowane białko powodujące chorobę). Związek chemiczny (np. lek) oddziałuje z celem molekularnym w sposób dynamiczny, oba są "elastyczne" i dopasowują do siebie. Niestety obecnie wykorzystywanych metodach obliczeniowych niezwykle trudno ująć ten efekt.

Projekt ma na celu systematyczne zajęcie się tym problemem, proponuje nowy sposób uwzględnienia dynamicznej natury interakcji ligand-receptor. Aby osiągnąć ten cel, koncentruje się na zastosowaniu specjalnie zaprojektowanej procedury obejmującej dokowanie molekularne i krótkie symulacje dynamiki molekularnej w celu wygenerowania zróżnicowanego zestawu dynamicznych kompleksów białko-ligand. W połączeniu z ekstrakcją deskryptorów ten rodzaj dynamicznych interakcji cel-ligand dostarcza nowy rodzaj danych, które można wykorzystać do trenowania metod uczenia maszynowego i predyktorów opartych na uczeniu głębokim (ang. deep learning). Modele predykcyjne opracowane w ramach tego projektu zostaną przetestowane w szczególności na biologicznie istotnych celach, dla których obecne metody obliczeniowe są niewystarczające.

Wyniki tego projektu pomogą poszerzyć naszą wiedzę na temat różnych mechanizmów wiązania wykorzystywanych przez naturę do regulacji procesów komórkowych. Metodologia i narzędzia, które zostaną opracowane, mogą stać się w niezwykle przydatne przy opracowywaniu nowych związków lub pochodnych związków już znanych. Wszystkie zestawy danych oraz modele będą publicznie dostępne, gotowe do testowania i ponownego wykorzystania dla społeczności naukowej oraz zainteresowanego społeczeństwa.