

Interakcje kwas nukleinowy (NA)-białko w komórce odgrywają istotną rolę w różnych procesach biologicznych, takich jak synteza białek, ekspresja genów, przetwarzanie RNA, replikacja wirusa, obrona komórkowa i regulacja rozwoju. Eksploracja tej interakcji w badaniach terapeutycznych jest przede wszystkim ograniczona ze względu na niedostępność funkcji punktacji, która może zrozumieć różne składniki kompleksu makrocząsteczkowego, takie jak białko, DNA, RNA i ligandy w jednolitej reprezentacji. Celem tego projektu jest zastosowanie modelowania gruboziarnistego do kompleksów NA-białko-ligand, pierwsza tego rodzaju próba i zbadanie interakcji preferencyjnych na poziomie makroskopowym. Innowacyjnym elementem tego projektu jest trenowanie tego potencjału interakcji w ramach głębokiego uczenia o nazwie SimNPL, który stanowi potencjał do oceny ligandów oddziałujących z białkiem NA i nadaje priorytet cząsteczkom o lepszej punktacji w konfiguracji eksperymentalnej. Program SimNPL będzie testowany na wybranych kompleksach: HIV-1 odwrotna transkryptaza-kompleks DNA (silny lek HIV-1), SARS-CoV-2 z nsp13 (silny lek SARS-CoV-1), helikazy DNA (silny lek przeciwnowotworowy) . Projekt przewiduje natychmiastowy i długotrwały wpływ na szybkie promowanie krajobrazu terapeutycznego małych cząsteczek nakierowanych na NA, z cennymi implikacjami w programach odkrywania leków.