

Tytuł pracy doktorskiej: Nawigacja po krajobrazach konformacyjnych białek: podejście AI i dynamiki molekularnej


Streszczenie

Pomimo znaczących postępów w technikach biologii strukturalnej, uchwycenie różnorodnych stanów energetycznych i ścieżek przejściowych makrocząsteczek pozostaje niespełnionym wyzwaniem. Modelowanie obliczeniowe, a zwłaszcza symulacje dynamiki molekularnej (MD), odgrywa kluczową rolę w badaniu złożonych biologicznych makrocząsteczek. Jednak tradycyjne symulacje MD borykają się z problemami takimi jak wolne lub nieadekwatne próbkowanie ich przejść konformacyjnych.

Praca wprowadza nowe podejście wykorzystujące uczenie maszynowe, sztuczną inteligencję i zaawansowane techniki próbkowania dynamiki molekularnej (MD). Opracowana metoda znacznie przyspiesza symulacje MD i oferuje bardziej efektywne i skuteczne próbkowanie krajobrazów konformacyjnych, jak wykazano na przykładzie kilku modeli i systemów molekularnych. Została również zastosowana do badania aktywacji Domeny Czujnika Napięcia kanału potasowego Kv 1.2. Algorytm, w połączeniu z najnowocześniejszymi technikami stosowanymi w modelowaniu stanów Markowa, ujawnił istotne spostrzeżenia dotyczące kinetyki zaangażowanej.

Całość pracy toruje drogę do rozwoju zautomatyzowanego systemu, który oferuje wyczerpujące i holistyczne narzędzie do próbkowania krajobrazów konformacyjnych i ujawniania kinetyki, z ostateczną cechą drastycznego zmniejszenia ludzkiego uprzedzenia.

Wrocław 17.05.24
(miejsowość, data)


(podpis autora)

