

Tytuł: Oparta na danych metodologia dla przewidywania, wyjaśniania i rozumienia wiązania RNA i małych cząsteczek (NCN/OPUS)

Promotor: Dr hab. Filip Stefaniak

Instytut: Międzynarodowy Instytut Biologii Molekularnej i Komórkowej w Warszawie

Jednostka organizacyjna: Laboratorium Bioinformatyki i Inżynierii Białka

www: bujnicki_lab oraz <https://genesilico.pl/>

Opis projektu:

Cząsteczki RNA odgrywają kluczową rolę w niemal wszystkich procesach komórkowych — od przechowywania i przekazywania informacji genetycznej, przez katalizowanie reakcji biochemicznych, po regulację ekspresji genów. Wiele cząsteczek RNA, w tym bakteryjne rybosomy i ryboprzełączniki, stanowi ugruntowane lub potencjalne cele dla leków małowcząsteczkowych. Jednocześnie metody obliczeniowe służące do przewidywania oddziaływań małych cząsteczek z RNA znacząco ustępują analogicznym narzędziom opracowanym dla białek, co stanowi istotne ograniczenie w odkrywaniu leków ukierunkowanych na RNA.

Cel:

Celem projektu jest opracowanie metodologii obliczeniowej DeepLeaRNA do przewidywania i projektowania małowcząsteczkowych ligandów wiążących się do RNA, a także do wyjaśniania natury tworzenia tych kompleksów. Podejście to integruje uczenie maszynowe, głębokie uczenie oraz wyjaśnialną sztuczną inteligencję (XAI) ze starannie wyselekcjonowanymi danymi strukturalnymi i biologicznymi. Projekt bezpośrednio bazuje na wcześniejszych pracach zespołu: funkcji oceniającej AnnapuRNA do przewidywania struktury kompleksów RNA–ligand oraz narzędziu fingerRNA służącym do wykrywania i klasyfikacji oddziaływań niekowalencyjnych w kompleksach RNA–ligand.

Wymagania:

- Tytuł magistra w dziedzinie bioinformatyki, biologii obliczeniowej, biochemii, chemii, informatyki lub pokrewnej dyscypliny
- Praktyczne doświadczenie w co najmniej jednej z następujących dziedzin: programowanie w Pythonie, uczenie maszynowe, chemoinformatyka lub bioinformatyka strukturalna
- Znajomość biologii RNA, biologii strukturalnej, biologii molekularnej, chemii organicznej, chemii medycznej lub projektowania leków będzie dodatkowym atutem
- Znajomość bibliotek do głębokiego uczenia (np. PyTorch, TensorFlow) będzie dodatkowym atutem
- Biegła znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie
- Gotowość do nauki i podejmowania nowych wyzwań, umiejętność samodzielnej pracy, analityczne myślenie
- Dobra komunikatywność i umiejętność pracy w zespole

Liczba dostępnych miejsc: 1

Kontakt: fstefaniak@iimcb.gov.pl