

Μεταπτυχιακός Φοιτητής: Διονύσης Μαρκόπουλος

Τίτλος Διπλωματικής Εργασίας:

Ανάπτυξη εφαρμογής για τη διαχείριση δεδομένων κρυστάλλωσης πρωτεϊνών

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Οι νέες αυτοματοποιημένες μέθοδοι και οι τεχνικές υψηλής ρυθμαπόδοσης στον τομέα της κρυστάλλωσης μακρομορίων έχουν ως αποτέλεσμα την παραγωγή μεγάλου όγκου δεδομένων. Η διαρκώς αυξανόμενη ανάγκη για σωστή διαχείριση και αξιοποίηση των δεδομένων αυτών με σκοπό την παραγωγή νέας γνώσης έχει οδηγήσει την επιστημονική κοινότητα σε αναζήτηση νέων αποτελεσματικών λύσεων.

Το όλο εγχείρημα συνοψίζεται σε δύο μέρη. Το πρώτο είναι η συστηματική καταγραφή τόσο των δοκιμών κρυστάλλωσης όσο και όλων των υπόλοιπων δεδομένων που πλαισιώνουν τα πειράματα ενός ερευνητικού εργαστηρίου. Θεωρείται πολύ χρήσιμο για τον ερευνητή να διατηρεί τα στοιχεία της προόδου που έχει κάνει με οργανωμένο τρόπο και ενιαίο φορμαλισμό. Επίσης να είναι σε θέση να ανακτήσει κάποια τμήματα ή το σύνολο των δεδομένων που επιθυμεί μέσα από διαμορφωμένα εργαλεία αναζήτησης. Το δεύτερο μέρος είναι η ικανότητα εκμετάλλευσης της καταγεγραμμένης πληροφορίας με τρόπο που να προσφέρει στοιχεία τα οποία ο ερευνητής θα χρησιμοποιήσει για την επιτυχημένη εκτέλεση νέων πειραμάτων κρυστάλλωσης.

Αντικείμενο της παρούσας εργασίας είναι η διαμόρφωση και υλοποίηση ενός συστήματος για την καταγραφή - διαχείριση των δοκιμών κρυστάλλωσης καθώς και για την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων. Για τον σκοπό αυτό δημιουργήθηκε μία σχεσιακή βάση δεδομένων και το απαραίτητο σύστημα διαχείρισης αυτής. Το λειτουργικό περιβάλλον είναι διαμορφωμένο σε html κώδικα ώστε να γίνεται χρήση μέσω ενός οποιουδήποτε internet browser. Εκτός από τα πειράματα κρυστάλλωσης, καταγράφονται επίσης οι κατηγορίες εμπορικών σκευασμάτων που χρησιμοποιούνται στις δοκιμές κρυστάλλωσης μακρομοριακών στόχων, όπως επίσης οι επί μέρους συνθήκες που συντίθενται στο εργαστήριο.

Άλλες ομάδες δεδομένων που δέχεται η βάση, είναι πληροφορίες για την κάθε πρωτεΐνη που μελετάται καθώς και τα πειράματα αλλαγής κλίμακας. Ο χρήστης έχει τη δυνατότητα αξιολόγησης του αποτελέσματος των πειραμάτων με την εισαγωγή σχολίων, εικόνων και την ανάθεση βαθμολογιών. Η βάση είναι διαμορφωμένη κατά τέτοιο τρόπο ώστε να δέχεται δεδομένα τόσο από επιτυχημένες όσο και από μη επιτυχημένες δοκιμές κρυστάλλωσης συνοδευόμενες από την κατάλληλη αξιολόγηση. Έτσι δημιουργείται η υποδομή για περαιτέρω αναβάθμιση της βάσης με στόχο την εκπαίδευση μοντέλων μηχανικής μάθησης για τη λειτουργία της πρόβλεψης βέλτιστων συνθηκών κρυστάλλωσης κάνοντας χρήση των δεδομένων που καταχωρούνται. Τα φίλτρα αναζήτησης στοιχείων της βάσης έχουν διαμορφωθεί κατάλληλα ώστε να επιτρέπουν στον ερευνητή να θέτει τα κριτήρια της επιλογής του και να μπορεί να ανακτήσει πειράματα ή σκευάσματα που πληρούν καθορισμένες συνθήκες.

Η εφαρμογή μπορεί να εγκατασταθεί εύκολα και να χρησιμοποιηθεί από κάθε ερευνητικό εργαστήριο κρυστάλλωσης πρωτεϊνών, ενώ οι ήδη καταχωρημένες εγγραφές μπορούν να εισαχθούν μαζικά σε νέα συστήματα μέσω απλών αρχείων κειμένου. Ο τρόπος υλοποίησης της εφαρμογής επιτρέπει αλλαγές που μπορούν να γίνουν στην βάση δεδομένων και στο σύστημα διαχείρισής αυτής για την αναβάθμιση της στο μέλλον.

ΘΕΜΑΤΙΚΗ ΠΕΡΙΟΧΗ: Βιοπληροφορική, Κρυστάλλωση Πρωτεϊνών

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: δοκιμές κρυστάλλωσης, συνθήκες κρυστάλλωσης, πρωτεϊνική κρυσταλλογραφία ακτίνων Χ, εργαστηριακή εφαρμογή διαχείρισης πληροφοριών, καταγραφή και οργάνωση πειραμάτων, φίλτρα αναζήτησης

Εξεταστική Επιτροπή:

Δρ. Ηλίας Μανωλάκος, Αν. Καθηγητής - ΕΚΠΑ (επιβλέπων)

Δρ. Γεώργιος Θ. Τσάγκαρης, Ειδικός Λειτουργικός Επιστήμονας Α' - ΙΙΒΕΑΑ

Δρ. Ευαγγελία Χρυσίνα, Επιστημονικό προσωπικό – ΕΙΕ