

Μεταπτυχιακή φοιτήτρια: Μανουσίδου Θεοδώρα

Τίτλος διπλωματικής εργασίας:

Αξιολόγηση και σύγκριση εργαλείων Βιοπληροφορικής που μελετούν την τρισδιάστατη δομή των πρωτεϊνών στον χώρο

Περίληψη:

Στην εργασία ερευνάται η γεωμετρική αναπαράσταση της τρισδιάστατης δομής μακρομορίων από σύγχρονα υπολογιστικά εργαλεία. Αντικείμενο αποτελεί η συγκριτική μελέτη των εργαλείων αυτών αναφορικά με την ικανότητα πρόβλεψης και χαρτογράφησης των κέντρων σύνδεσης των μακρομοριακών στόχων. Το ενζυμο της φωσφορυλάσης του γλυκογόνου, το οποίο αποτελεί μοριακό στόχο για την αντιμετώπιση της ασθένειας του σακχαρώδη διαβήτη τύπου 2, χρησιμοποιήθηκε για την αξιολόγηση των εργαλείων. Ειδικότερα, εξετάζονται το ανοιχτού κώδικα λογισμικό Frocket και ο αλγόριθμος Cast, τα οποία αναζητούν περιοχές των εξεταζόμενων πρωτεϊνών ικανών να προσελκύσουν τροποποιητές, καταστολείς ή ενεργοποιητές. Εξετάζεται η εφαρμογή Caver όπου πραγματοποιείται ο καθορισμός μοριακών μονοπατιών με κατεύθυνση από το εσωτερικό προς το εξωτερικό των πρωτεϊνών.

Η αναγνώριση εκείνων των χαρακτηριστικών που είναι ικανά να διακρίνουν τις παραπάνω περιοχές από αυτές που δεν σχετίζονται με κάποιο σύνολο λειτουργιών, αποτέλεσε επίσης αντικείμενο της εργασίας. Έγινε χρήση αλγορίθμων μηχανικής μάθησης και μεθόδων επιλογής υποσυνόλου χαρακτηριστικών, ικανών να περιγράψουν ικανοποιητικά τον αρχικό χώρο των προτύπων, που ορίζουν το σύνολο δεδομένων που εξετάζεται. Η εφαρμογή των επιλεγμένων αλγορίθμων πραγματοποιήθηκε σε ένα πλήρως χαρακτηρισμένο σύνολο 260 πρωτεϊνικών δομών, ενώ επιλέχθηκε ένα δεύτερο σύνολο ελέγχου κατά την διαδικασία αξιολόγησης των αποτελεσμάτων.

Εξεταστική Επιτροπή

Δρ. Ιωάννης Εμίρης, Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών - Επιβλέπων

Δρ. Ευαγγελία Χρυσίνα, Επιστημονικό Προσωπικό του ΙΟΦΧ, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών – Συν-επιβλέπουσα

Δρ. Ηλίας Μανωλάκος, Αν. Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών