

МОЛБА ЗА ОДОБРАВАЊЕ ТЕМЕ МАСТЕР РАДА

Молим да ми се одобри израда мастер рада под насловом:

Развој софтвера за откривање молекулских структура са потенцијално лековитим дејством

Значај теме и области:

Развој нових лекова представља изузетно сложен, дуготрајан и финансијски захтеван процес. Традиционални приступи у фармакологији, засновани на лабораторијским експериментима, често подразумевају испитивање великог броја молекула уз значајна улагања времена и ресурса. Са развојем рачунарске интелигенције и повећањем доступности рачунарске снаге, отвара се могућност примене софтверских алата који могу значајно убрзати и оптимизовати процес откривања нових лекова. Употребом метода као што су генетски алгоритми и развојем одговарајућих модела, може се на ефикасан начин претраживати огроман простор молекулских структура и идентификовати кандидати са пожељним фармаколошким својствима. Значај теме огледа се у потенцијалу да се убрза процес развоја лекова, смање трошкови истраживања и повећа вероватноћа проналаска ефикасних терапијских решења.

Специфични циљ рада:

Циљ овог рада је развој софтверског система који омогућава генерисање, евалуацију и оптимизацију молекулских структура са потенцијално лековитим дејством. Систем ће користити методе рачунарске интелигенције, са посебним акцентом на генетске алгоритме, ради претраживања простора могућих молекула.

У оквиру рада биће реализовани различити модели који омогућавају дефинисање функције погодности (fitness функције), као и механизми селекције, мутације и рекомбинације. Додатно, биће развијен кориснички интерфејс који омогућава подешавање параметара алгоритма и визуализацију процеса претраге, као и анализу добијених резултата.

Циљ је да се покаже да овако развијен софтвер може ефикасно идентификовати молекулске структуре које задовољавају задате критеријуме и представљају потенцијалне кандидате за даља фармаколошка испитивања.

Остале битне информације:

За тестирање и евалуацију система користиће се молекулски подаци из јавно доступне базе података биоактивних молекула ChEMBL. Имплементација софтверског решења биће реализована у програмском језику Python. За развој графичког корисничког интерфејса користиће се библиотека PyQt, док ће за рад са молекулским структурама бити коришћене функционалности библиотеке RDKit. Систем ће користити методе рачунарске интелигенције и генетске алгоритме за генерисање и оптимизацију молекулских структура.

(својеручни потпис студента)

(својеручни потпис ментора)

(датум подношења молбе)

Чланови комисије

1. др Мирјана Маљковић Ружичић

2. др Стефан Капунац

Катедра _____ је сагласна са предложеном темом.

(шеф катедре)

(датум одобравања молбе)