Celem projektu jest stworzenie platformy PATmed – innowacyjnego narzędzia opartego na algorytmach uczenia maszynowego, służącego do analizy toksyczności związków małocząsteczkowych. Platforma wspierałaby proces odkrywania nowych związków chemicznych, których potencjalna toksyczność nie została jeszcze przebadana eksperymentalnie. Platforma, umożliwiając oceną toksyczności na etapie wczesnych bada, idealnie wpisywałaby się w potrzeby współczesnej nauki – ograniczałaby koszty oraz czas potrzebny na syntezę związków i dalsze testy, tym samym promując zrównoważone podejście do projektowania leków. Pozwoliłoby to na uwzględnienie aspektów związanych z ochroną środowiska zgodne z ideą zielonej chemii, czyli minimalizację wykorzystania surowców chemicznych i ograniczenie ilości odpadów laboratoryjnych. Ponadto, odrzucenie toksycznych związków na tak wczesnym etapie prowadziłoby do zminimalizowania liczby zwierząt niezbędnych do badań.

Działania projektowe obejmują:

1. Wybór klasycznych antytargetów białek związanych z występowaniem powszechnych efektów ubocznych działania leków.

2. Przygotowanie baz związków oddziałujących na wybrane targety w oparciu o bazę ChEMBL i/lub PubChem.

3. Wstępne opracowanie algorytmu platformy i modeli uczenia maszynowego.

4. Eksperymentalna walidacja wstępnych wyników platformy.

5. Optymalizacja algorytmów platformy.

6. Próba przygotowania interfejsu dla użytkownika wewnętrznego i zewnętrznego.

Rezultatem projektu PATmed będzie stworzenie funkcjonalnej i łatwej w obsłudze platformy do przewidywania potencjalnej toksyczności związków. Pozwoli to na odrzucenie odrzucenie we wczesnym etapie badań cząsteczek, które wykazują ryzyko wywołania efektów ubocznych, co zmniejszy koszty i wpłynie na ograniczenie czasu potrzebnego na syntezę nowych związków, a także na kosztowne badania komórkowe i na zwierzętach. Tym samym realizowana będzie koncepcja zielonej chemii poprzez ograniczenie zużycia odczynników i ich późniejszej utylizacji. Realizacja projektu przez członków Koła Naukowego przyczyni się do poszerzenia ich wiedzy z zakresu programowania, algorytmów uczenia maszynowego, praktycznego zastosowania modelowania molekularnego, testowania modeli, mechanizmów toksyczności, ale także do rozwinięcia kompetencji miękkich związanych z pracą w zespole oraz rozwojem umiejętności prezentowania i raportowania wyników badań. Istnieje zapotrzebowanie na takie oprogramowanie na Wydziale Chemii, zwłaszcza w zespołach zajmujących się projektowaniem związków bioaktywnych. Gotowy produkt o znacznym wskaźniku sukcesu predykcji może pozostawać w kręgu zainteresowań otoczenia gospodarczego o profilu farmaceutycznym, ograniczając koszty produkcji i badań nad odkrywaniem nowych substancji bioaktywnych. Zakupiony w ramach projektu sprzęt komputerowy zostanie zdeponowany w pokoju Naukowego Koła Chemii Medycznej i Środowiskowej UJ i będzie przeznaczony do użytku przez członków Koła.