

A StreamNovation Szoftverfejlesztő Korlátolt Felelősségű Társaság 2024. június 30.-án zárta az Innovációs és Technológiai Minisztérium által, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH), mint kezelő szerv útján meghirdetett GYORSÍTÓSÁV (2020-1.1.5-GYORSÍTÓSÁV) című program 2020-1.1.5-GYORSÍTÓSÁV-2021-00023 számú "Gyógyszerkutatást és molekula tervezést támogató, mesterséges intelligenciára épülő kvantumkémiai szimulációs szoftver" című pályázatának megvalósítását.

Projekt időtartama: 2021. július 01. - 2024. június 30.; Támogatás összege: 89.536.200,- Ft; Támogatás mértéke: 80,86%; Teljes pályázati projektösszeg: 110.736.600,- Ft.

Projektünk során egy biomolekula szerkezetének nagypontosságú meghatározására alkalmas szoftver készült el, mely felhasználja a gépi tanulás (deep learning) adta lehetőségeket ezen a területen. A szoftver kezdetleges molekula szerkezetből közelíti NMR spektroszkópiai kísérleti adatok segítségével a fizikailag, kémiailag és biológiailag (gyógyszerkutatási szempontból) releváns molekulaszervezetet, folyamatos emberi beavatkozás szükségessége nélkül. Szoftverünket szolgáltatásként is elérhetővé tettük egy egyszerűsített interfészen keresztül, ahol az AWS felhőszolgáltatás biztosítja a háttér.

A megvalósítás során különösen nagy gondot fordítottunk arra, hogy megfelelő adatokat teremtsünk elő és azokat augmentáljunk a molekula szerkezet finomítását célzó gépi tanuláshoz. Az összegyűjtött és tisztított adatokból további tanuló példákat generáltunk oly módon, hogy a validált geometriához kis eltéréseket adva NMR spektrumot számoltunk különböző módszerekkel. Így nem csupán helyes adatokat kaptunk, hanem pontosan tudtuk, hogy milyen módosítás állítja vissza a helyes szerkezetet.

Projekt során tehát egy kutatásban használható szoftvert készítettünk, ami a felhasználói számára a kutatásokban nagyban megkönnyíti a szerkezet meghatározást. A kifejlesztésre került szoftver piaci potenciálja jelentős, mivel a gyógyszerkutatásban érdekelt cégek számára a költséghatékonyság növelése nagy jelentőséggel bír.

