

DEFINIZIONE STRUTTURALE DI SISTEMI BIOLOGICI MOLECOLARI COMPLESSI MEDIANTE NMR

La complessità della struttura della gran parte di sistemi eterogenei di origine biologica è tale da ostacolare l'inclusione nei modelli matematici con potenziale predittivo delle loro proprietà e della loro trasformazione chimica in stati più stabili, ancorché non più funzionali. Un notevole impulso all'impiego di informazioni legate all'anisotropia dei sistemi biologici, viene determinato dall'utilizzo dell'intelligenza artificiale per elaborare modelli a partire dai dati che derivano dalla loro caratterizzazione analitica strumentale. La definizione analitica, tuttavia, trascura attualmente la descrizione strutturale, riducendosi a una rappresentazione basata sulla composizione molecolare (elenco e concentrazione di sostanze costitutive) perdendo una caratteristica fondamentale per distinguere matrici complesse da miscele omogenee. Scopo della ricerca proposta è quello di selezionare, acquisire e analizzare dati spettroscopici e rilassometrici di risonanza magnetica nucleare per definire la struttura dei sistemi biologici complessi, ed esplorare il loro potenziale utilizzo per definire numericamente la qualità macroscopica e la stabilità dei sistemi. Partendo da queste informazioni numeriche, si dovrà esplorare una possibile metodologia per costruire modelli matematici per simulare e prevedere proprietà strutturali e di stabilità. L'obiettivo finale dell'approccio da sviluppare è quello di arrivare a utilizzare gemelli digitali, progettati in silico, in alternativa ai più costosi sistemi biologici naturali. Il candidato deve possedere conoscenze di risonanza magnetica nucleare, esperienza nell'acquisizione ed elaborazione di spettri NMR, nonché una discreta padronanza di utilizzo di sistemi di intelligenza artificiale, in particolare di machine learning.

Gli obiettivi di ricerca che si vogliono raggiungere nell'ambito del progetto proposto, può essere pertanto riassunto nel seguente punto:

1. Valutare, mediante tecniche di machine learning applicate a dati spettroscopici, gli aspetti strutturali degli alimenti rilevanti per la bioaccessibilità e la biodisponibilità dei differenti nutrienti in essi contenuti. La ricerca sarà soprattutto diretta a definire, negli alimenti, le relazioni tra struttura e proprietà importanti per il consumo umano, e identificare e validare protocolli di indagine per tali aspetti.

Questi obiettivi potranno essere raggiunti presso i laboratori di ricerca del Dipartimento di Scienze e Tecnologie Agro-Alimentari dell'Università di Bologna. Inoltre, presso i gruppi di ricerca del Dipartimento DISTAL - UOS Cesena, sono in esecuzione progetti di ricerca Europei focalizzati alla caratterizzazione degli alimenti, per cui il presente piano è funzionale al raggiungimento degli obiettivi.

Piano di attività.

Il piano di attività prevede la definizione del disegno sperimentale con l'acquisizione di una campionatura sufficientemente numerosa in modo da garantire la significatività statistica dei risultati. Durante il periodo di svolgimento del piano di attività sarà inoltre cura del titolare dell'assegno la preparazione dei campioni rappresentativi dei sistemi oggetto di studio, mediante tecniche conservative idonee alla metodica analitica, la registrazione degli spettri di risonanza magnetica e di curve rilassometriche e di immagini microscopiche, nonché l'analisi dei dati e l'elaborazione di specifici algoritmi per l'identificazione e la convalida degli elementi strutturali. Le attività dovranno portare allo sviluppo di descrittori utili per identificare gli effetti generali sulla bioaccessibilità e biodisponibilità dei nutrienti. Infine, è prevista la preparazione di almeno un articolo scientifico da sottoporre alla pubblicazione su rivista internazionale.

STRUCTURAL DEFINITION OF COMPLEX BIOLOGICAL MOLECULAR SYSTEMS BY NMR

The complexity of the structure of most heterogeneous systems of biological origin is such as to prevent their inclusion in predictive mathematical models of their properties and their chemical transformation in more stable, even if no longer functional states. A significant boost to the use of information related to the anisotropy of biological systems is determined by the use of artificial intelligence to elaborate models starting from the data deriving from their analytical characterization. The analytical definition, however, currently neglects the structural description, reducing itself to a representation based on molecular composition (list and concentration of constituent substances). The aim of the proposed research is to select, acquire and analyze spectroscopic and relaxometric data of nuclear magnetic resonance to define the structure of complex biological systems, and to explore their potential use to numerically define the macroscopic quality and stability of the systems. Starting from this numerical information, a possible methodology for building mathematical models to simulate and predict structural properties and stability will have to be explored. The final goal of the developed approach is to use digital twins, designed in silico, as an alternative to more expensive natural biological systems. The candidate must have knowledge of nuclear magnetic resonance, experience in the acquisition and processing of NMR spectra, as well as a good command of the use of artificial intelligence systems, in particular machine learning.

The research objectives to be achieved within the proposed project can therefore be summarized in the following point:

1. Evaluate, through machine learning techniques applied to spectroscopic data, the structural aspects of foods relevant for the bioaccessibility and bioavailability of the different nutrients they contain. The research will mainly be aimed at defining, in foods, the relationships between structure and properties important for human consumption and identifying and validating investigation protocols for these aspects.

These objectives can be achieved in the research laboratories of the Department of Agricultural and Food Sciences of the University of Bologna. Furthermore, by the research groups of the DISTAL Department - UOS Cesena, European research projects are being carried out focused on the characterization of foods, for which this plan is functional to the achievement of the objectives.

Activity plan.

The activity plan provides for the definition of the experimental design with the acquisition of a sufficiently large sampling in order to guarantee the statistical significance of the results. During the period of development of the activity plan, the grant holder will also be responsible for preparing the samples using conservative techniques suitable for the analytical method, acquiring the magnetic resonance spectra and relaxation curves and microscopic images, as well as for analysing the emerging data. At this end, the candidate will contribute to the development of specific algorithms for the identification and validation of the structural elements, as well as for identifying the general effects on the bioaccessibility and bioavailability of nutrients. Finally, the preparation of at least one scientific article to be submitted for publication in an international journal is foreseen.