



Universiteit
Leiden

The Netherlands

Interactive evolutionary algorithms and data mining for drug design

Lameijer, E.M.W.

Citation

Lameijer, E. M. W. (2010, January 28). *Interactive evolutionary algorithms and data mining for drug design*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/14620>

Version: Corrected Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/14620>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Stellingen

behorende bij het proefschrift

Interactive Evolutionary Algorithms and Data Mining for Drug Design - Of Molecules, Machines and Men

1. De beste resultaten in geneesmiddelontwerp zullen niet bereikt worden door een onderzoeker òf een computerprogramma, maar door een effectieve samenwerking tussen deze twee. (*dit proefschrift, hoofdstuk 1*)
2. De diversiteit van de huidige molecuulbibliotheken is veel kleiner dan chemisch haalbaar en farmaceutisch wenselijk is. (*dit proefschrift, hoofdstuk 3*)
3. De uitdaging van het creëren van een interactief evolutionair algoritme voor geneesmiddelontwerp is niet zozeer het ontwerp van het evolutionaire algoritme, maar het programma zo maken dat chemici het kunnen en willen gebruiken. (*dit proefschrift, hoofdstuk 4*)
4. De combinatie van de willekeurigheid van computergeproduceerde moleculen en de expertise van chemici kan tot moleculen leiden die zowel chemisch vernieuwend zijn, als synthetiseerbaar en biologisch actief. (*dit proefstuk, hoofdstuk 7*)
5. De verbetering van evolutionaire algoritmes in geneesmiddelontwerp wordt niet beperkt door gebrek aan ideeën of onderzoekers, maar door gebrek aan openbaarheid/beschikbaarheid van de gebruikte algoritmes.
6. Een programma voor 'multiple objective optimization' is niet af zolang het geen deugdelijke methode heeft om de honderden of duizenden "even goede" oplossingen te sorteren op kwaliteit.
7. In plaats van moleculen te screenen op 'drug-likeness' zou er zoveel mogelijk gescreend moeten worden op 'lead-likeness'. (*Hann, M. and Oprea, T. Current Opinion in Chemical Biology 2004, 8: 255-263*)
8. Het ontwikkelen van een QSAR-model zonder te analyseren hoe en waarom het werkt verbergt zijn tekortkomingen en helpt de wetenschap niet vooruit.

9. Zolang chemici mensen zijn zouden toegepaste psychologie en sociologie onderdeel moeten uitmaken van de studie scheikunde.
10. Vaak doen we dingen niet omdat ze belangrijk zijn, maar omdat we ze gisteren ook deden.
11. De gedachte dat milieubehoud een luxe is en economische groei een noodzaak houdt er geen rekening mee dat economische groei zinloos is als zij de bevolking uitroeit die ervan moet profiteren.
12. Uit het feit dat Marx het communisme bedacht, kunnen we afleiden dat hij nooit in een studentenhuus heeft gewoond.

Eric-Wubbo Lameijer

Leiden, januari 2010