

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОЛДИНГА БЕЛКА КАК СПОСОБ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМ, ВЫЗВАННЫХ ДЕФЕКТНЫМИ БЕЛКАМИ

Ворона Е. А., Полуэктова В. В.

Научный руководитель: к.б.н. Абдукаева Нелли Сулеймановна, к.б.н. Косенкова Наталия Сергеевна
Кафедра медицинской биологии
Санкт-Петербургский государственный педиатрический медицинский университет

Контактная информация: Ворона Елизавета Антоновна — студентка 1 курса педиатрического факультета.
E-mail: elizaveta.vorona@yandex.ru

Ключевые слова: белок, компьютерное моделирование, дефектные гены.

Актуальность исследования: в конце прошлого года впервые появилось сообщение о том, что искусственный интеллект может прогнозировать фолдинг белка с очень высокой точностью (до 92%). Это позволяет молекулярным биологам приблизиться к их заветной мечте — способности предсказывать структуру и функцию белка по нуклеотидной последовательности ДНК для минимизации многих генетических заболеваний [1].

Цель исследования: информировать студенческую аудиторию о перспективах использования компьютерного моделирования в прогнозировании фолдинга как нормальных, так и дефектных белков.

Материалы и методы: отечественная и зарубежная литература по механизмам фолдинга белка, рассмотрение компьютерного моделирования в онлайн-головоломке «Fold.it», сбор данных о методах компьютерного моделирования по сравнению с рутинными способами изучения конформационных изменений белков, изучение литературных данных о зависимости генетических заболеваний от дефектов фолдинга.

Результаты: при фолдинге белка значительную роль играют шапероны (белки теплового шока, БТШ), способные связываться с протеинами в неустойчивом состоянии для стабилизации их конформации [1]. Белки семейства Hsp70 способствуют правильному сворачиванию вновь синтезированной полипептидной цепи и участвуют в транспорте белка к определенным органеллам. Hsp60 защищают клеточные белки от денатурирующих воздействий [3]. До недавнего времени основными методами прогнозирования пространственной структуры были сопоставительное моделирование и макетирование белка на основании первичной структуры. Перспективный альтернативный способ определения конформации белка — онлайн-головоломка «Fold.it». Игра позволяет на основе создаваемых моделей прогнозировать свойства и функции белка. Мы решили провести викторину среди студентов разных вузов (Санкт-Петербург, Москва, Воронеж, Белгород, Новый Уренгой) для ознакомления с принципами онлайн-головоломки и ее перспективами. В настоящее время нами обрабатываются результаты около 100 анкет.

Выводы: в настоящее время уже известен целый ряд заболеваний, которые являются следствием нарушения конформационной структуры белковой молекулы (б.Альцгеймера, б.Паркинсона, муковисцидоз, прионные болезни) [3]. Новый способ моделирования возможно в ближайшем будущем позволит устранить последствия дефектных фолдингов и приблизиться к возможности диагностики и лечения таких заболеваний. Инновационный метод с привлечением искусственного интеллекта создает платформу для совместной работы ученых, врачей и IT-специалистов над решением проблем фолдинга. Анализируя данные проведенного нами анкетирования, мы смогли убедиться в том, что даже человек без специального образования способен внести свой вклад в решение конкретной проблемы.

Литература

1. Научная статья «Проблема фолдинга белка»
2. Видео с выступлением микробиолога Константина Северинова <https://postnauka.ru/video/32627>
3. https://knowledge.allbest.ru/medicine/2c0b65635a2bc79a5c53b88421216d37_0.html