

Razvoj metaprediktora neuređenosti proteina

Master rad iz oblasti
Bioinformatika
Matematički fakultet

Una Stanković
una_stankovic@yahoo.com

18. jul 2018.

Sažetak

U ovom radu biće predstavljen proces kreiranja metaprediktora za analizu neuređenosti proteina. Najpre će biti objašnjeni svi pojmovi vezani za biološke osnove ovog problema, a potom i sam razvojni proces iz informatičkog ugla. Sav softver primenjen pri izradi rada je korišćen isključivo u akademske svrhe.

Sadržaj

1	Uvod	2
2	Proteini - Funkcije i struktura	2
3	Prediktori	2
3.1	SPOT-Disorder prediktor	2
4	Zaključak	3
	Literatura	3
A	Literatura	3

1 Uvod

Neuređenost proteina

2 Biološke osnove

U ovoj sekciji biće ukratko predstavljene biološke osnove neophodne za razumevanje rada i motivacije koja stoji iza određenih njegovih elemenata.

Najpre, biće opisano šta su proteini koje su njihove osnovne funkcije i kakva im je struktura. Potom, biće opisana svaka od struktura ponao-sob, uz priložen grafički prikaz istih. Na kraju, posebno će biti opisani neuređeni proteini, njihova uloga i uzroci koji mogu dovesti do njihove pojave.

2.1 Proteini - Funkcije i struktura

Proteini (grč. protos - "zausimam prvo mesto") i peptidi su linearni polimeri izgrađeni od 22 L-aminokiseline ¹ koje se javljaju u prirodi i povezani su peptidnim vezama. [1]

Proteini su biološki najaktivniji molekuli sa velikim brojem esencijalnih uloga koje se dele na:

- dinamičke, od kojih su najvažnije:
 1. transportna - prenos molekula (kiseonika, gvožđa, lipida) i hormona od mesta sinteze do mesta delovanja,
 2. biološka - regulacija metaboličkih procesa u ćeliji, kontrola i regulacija transkripcije gena i translacija,
 3. katalizatorska - biološka katalizacija ²,
 4. zaštitna - keratin, koagulacija krvi,
 5. održavanje zapremine tečnosti u organizmu,
- strukturne
 1. obezbeđivanje čvrstine i elastičnosti organa,
 2. davanje oblika organizmu,
 3. izgradnja strukturnih elemenata ćelije i
 4. bitna uloga u kontraktilnim i pokretnim elementima organizma.

[2]

3 Prediktori

- SPINE-D/SPOT-Disorder
- PONDR
- s2D
- IUPred
- ESpritz
- SEG
- Disopred2

¹L-aminokiseline su one sa levom prostornom konfiguracijom, analogno, postoje i D-aminokiseline, sa desnom

²Katalizacija predstavlja proces povećavanja brzina reakcija

3.1 SPOT-Disorder prediktor

Abstract MOTIVATION: Capturing long-range interactions between structural but not sequence neighbors of proteins is a long-standing challenging problem in bioinformatics. Recently, long short-term memory (LSTM) networks have significantly improved the accuracy of speech and image classification problems by remembering useful past information in long sequential events. Here, we have implemented deep bidirectional LSTM recurrent neural networks in the problem of protein intrinsic disorder prediction. RESULTS: The new method, named SPOT-Disorder, has steadily improved over a similar method using a traditional, window-based neural network (SPINE-D) in all datasets tested without separate training on short and long disordered regions. Independent tests on four other datasets including the datasets from critical assessment of structure prediction (CASP) techniques and >10 000 annotated proteins from MobiDB, confirmed SPOT-Disorder as one of the best methods in disorder prediction. Moreover, initial studies indicate that the method is more accurate in predicting functional sites in disordered regions. These results highlight the usefulness combining LSTM with deep bidirectional recurrent neural networks in capturing non-local, long-range interactions for bioinformatics applications. AVAILABILITY AND IMPLEMENTATION: SPOT-disorder is available as a web server and as a standalone program at: <http://sparks-lab.org/server/SPOT-disorder/index.php> .

4 Zaključak

Literatura

- [1] Gerhard Michal Dietmar Schomburg. *Biochemical Pathways: An Atlas of Biochemistry and Molecular Biology*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2012.
- [2] Vesna Spasojević-Kalimanovska Slavica Spasić, Zorana Jelić-Ivanović. *Opšta biohemija*. 2002.

A Literatura