Strukturális bioinformatika

Az elmúlt évtizedekben a bioinformatika területe jelentős fejlődést mutatott, és számos új módszer és technika jelent meg a biológiai adatok elemzésére. Az egyik ilyen terület a strukturális bioinformatika, amely a biológiai makromolekulák, például fehérjék és nukleinsavak háromdimenziós szerkezetének elemzésével foglalkozik.

A strukturális bioinformatika célja a biológiai makromolekulák szerkezetének megértése és az ezek közötti kapcsolatok feltárása. Ez az információ segíthet megérteni a molekulák működését, valamint a betegségek kialakulását és terápiáját. A strukturális bioinformatika módszerei közé tartozik a molekuláris modellezés, a szerkezet-alapú következtetés és az evolúciós analízis.

A molekuláris modellezés a biológiai makromolekulák háromdimenziós szerkezetének előrejelzését jelenti. Ez a módszer segít megérteni a molekulák működését és kölcsönhatásait más molekulákkal. A szerkezet-alapú következtetés lehetővé teszi a molekulák közötti hasonlóságok és különbségek azonosítását, ami segíthet a funkciók és kölcsönhatások feltárásában. Az evolúciós analízis pedig a molekulák evolúciós történetének feltárására szolgál, és segít megérteni a molekulák fejlődését és diverzitását.

A strukturális bioinformatika számos alkalmazási területtel rendelkezik. Például segíthet a gyógyszerfejlesztésben, ahol a molekulák szerkezetének megértése lehetővé teszi a hatékonyabb gyógyszerek tervezését. Emellett segíthet a biológiai folyamatok megértésében is, például a sejtosztódás vagy az immunválasz mechanizmusának vizsgálatában.

A strukturális bioinformatika tehát fontos eszköz a biológiai adatok elemzésében és az élettudományok fejlődésében. A további kutatások és fejlesztések segítségével még több információ nyerhető ki a biológiai makromolekulák szerkezetéből, ami hozzájárulhat az egészségügyi és környezeti problémák megoldásához.

A bioinformatika olyan interdiszciplináris tudomány, amiben biológiai problémák megoldását keressük erőteljes számítógépes, informatikai segítséggel. A cél, a feladat tehát pl. biológiai folyamatok megértése, leírása, modellezése, vagy akár befolyásolása is lehet; az eszköz pedig az informatika, ennek eszközeit és módszereit alkalmazzuk. Hasonlóan a DNS számításokhoz a bioinformatika is a biológia és az informatika határterületén fekszik. A bioinformatika a molekuláris biológiához és a biotechnológiához is szorosan kapcsolódik.

Tehát éppen fordított a cél-eszköz viszony, mint a DNS számítások esetén. Bár a biológiai adatok kinyeréséhez ugyanazokat a műveleteket végezzük a DNS molekulákkal, mint a DNS számítások estén, az egyik fontos különbség, hogy itt nem magunk által adott kísérlethez megtervezett és legyártott DNS molekulákkal dolgozunk, hanem a természetben találhatóakkal. Azokat szekvenáljuk, térképezzük fel... A szekvenálás, vagyis a DNS molekula bázissorrendjének meghatározása az első lépés, és már itt szüksége van a biológusoknak az informatikusok és számítástudósok segítségére. A természet nemcsak a DNS molekulák (illetve a sejtek és élőlények) nagy számával „dolgozik", de a természetben található DNS-ek hossza is meghatározó jelentőséggel bír, és általában nagyságrendekkel nagyobb, mint amikkel a DNS számítások során a laborban találkozhatunk.

Ennek megfelelően, sokszor nem(csak) a vizsgált molekulák száma, hanem azok mérete okozhat gondot a biológusoknak. Ma már automata szekvenáló berendezések állnak rendelkezésre, viszont csak az élő sejtekben előforduló DNS szálak töredékének megfelelő hosszú molekulákra működnek. A rövid molekulák nagyon gyorsan, pontosan és nagyon olcsón szekvenálhatók ezekkel a gépekkel. Tehát ha gyorsan akarunk eredményt elérni, akkor a hosszú (akár 1010 nagyságrend körüli) DNS láncot felvágjuk rövid (értsd pár száz nukleotidpár hosszúságú) részekre. Sokszor nem egy, hanem több molekulát, és nem ugyanott elvágva. Ezek az átfedő részek segítenek a megfejtett darabok sorrendjének megállapításában. Itt persze egy algoritmuselméleti probléma is fellép: hogyan lehet ezt gyorsan, hatékonyan megoldani (illetve milyen feltételek kellenek a szétvágásnál, hogy aztán minél gyorsabban és minél biztosabban kaphassuk meg a végeredményt).

A természetben előforduló DNS láncok megfejtése tehát elsődleges fontosságú a (molekuláris) biológia számára. 2000-ben sikerült az ember genetikai kódját „megfejteni", vagyis szekvenálni először egy emberi DNS-t a Human Genom Programjának részeként. Az emberi DNS kb. 3 milliárd bázispárból áll (3 ⋅ 109). Egy ilyen hosszú láncban, egy molekulában, elvben kb. 5.6 Gigabájtnyi adat fér el. A DNS molekulák a természetben előforduló leghosszabb molekulák közé tartoznak. Az emberi DNS lánc megfejtése volt az első mérföldkő, az első nagy horderejű lépés, egy hosszúnak tűnő úton az ember vizsgálatával kapcsolatban. Ez olyan, mintha egy programnyelv szintaktikáját ismernénk, láthatjuk, milyen kódot „írt" a természet. Viszont a szemantika, hogy hol, mi, mit jelent, sokkal nehezebbnek tűnő feladat, amit nem biztos, hogy olyan gépies eszközökkel sikerül megfejteni, mint a szintaktikát... A DNS lánc megértése tehát a nagy kihívás, amiben vannak biztató kisebb, illetve nagyobb részeredmények.

A természetben előforduló DNS molekulák vizsgálata viszont a DNS számítások szempontjából is fontos. A DNS számítások során előállítható mesterséges DNS láncok általában csak pár ezer bázis(pár) hosszig használhatóak. A természetben viszont több nagyságrenddel hosszabb DNS szálak is előfordulnak, sőt túlnyomó többségben ilyenek fordulnak elő. A természet titka a DNS molekulák térbeli struktúrájában van. Egy nagyságrendileg 109-1010 bázispárt tartalmazó molekulát nem egy hosszú spirálrugóként kell elképzelnünk, hiszen a hossza már méter nagyságrendű. Az élő sejtben, aminek mérete azért elég tág határok közt mozog, de legtöbb esetben 1-2 nagyságrenddel a milliméter mérete alatt van, el sem férne egy ilyen hosszú molekula, ha nem lenne megfelelően összehajtva. Ez az összehajtogatás, vagy csomagolás általában több lépcsőben hierarchikusan zajlik. A DNS molekula három dimenziós alakja pedig nagyon fontos az élő sejt szempontjából.

források

<https://mernokkapu.hu/strukturalis-bioinformatika/>

<https://gyires.inf.unideb.hu/GyBITT/09/ch11.html>