

Kvantumalgoritmusok bioinformatikai alkalmazása

Protein folding & Molecular docking

Nemkin Viktória

Témavezető: dr. Friedl Katalin



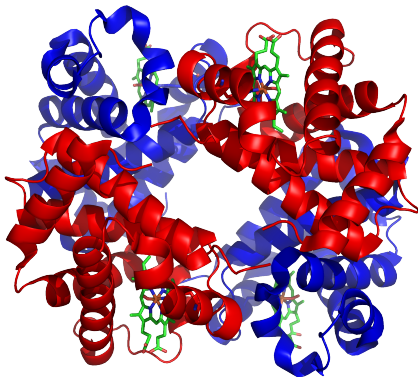
Számítástudományi és Információelméleti Tanszék



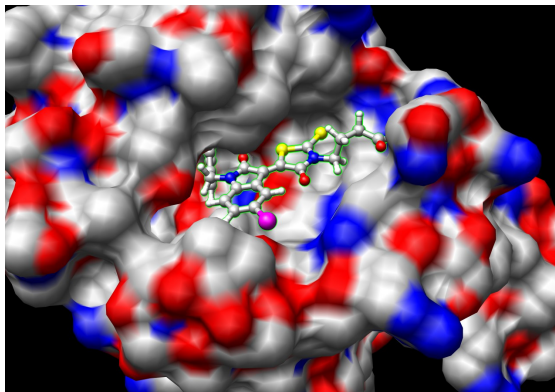
Miért foglalkozunk bioinformatikával?

- Területek: egészségügy, gyógyszergyártás, környezetvédelem, agráripár.
 - ▶ Küzdelem betegségek, globális felmelegedés, éhínség ellen.
- Sok problémára nincs hatékony, egzakt algoritmus.
- Kvantuminformatika: új számítási modell = kvantum Turing-gép.

Gyógyszergyártás = A rossz lyukak betömése.



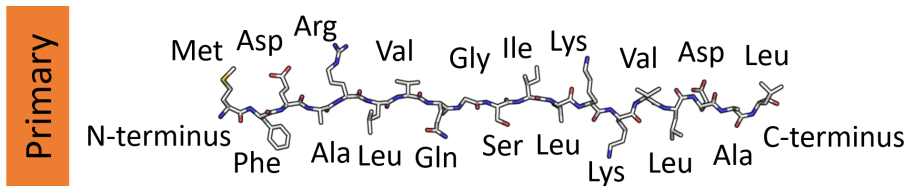
(a) Protein folding (Hemoglobin)



(b) Molecular docking

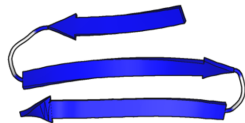
Protein folding

- Proteinek = Emberi szervezet építőkövei.
- Feladataik: jelzés (inzulin), szállítás (hemoglobin), metabolizmus (enzimek), stb.
- Felépítésük: 20 lehetséges aminosavból, hosszú lánc (elsődleges struktúra).



Proteinek 4 szintű szerkezete

Secondary

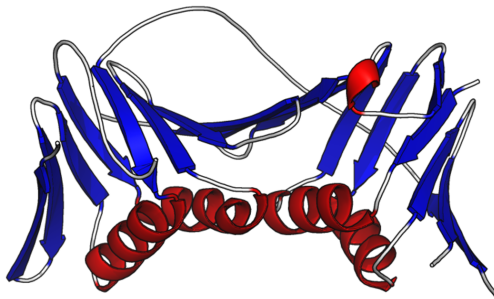


β -Sheet (3 strands)



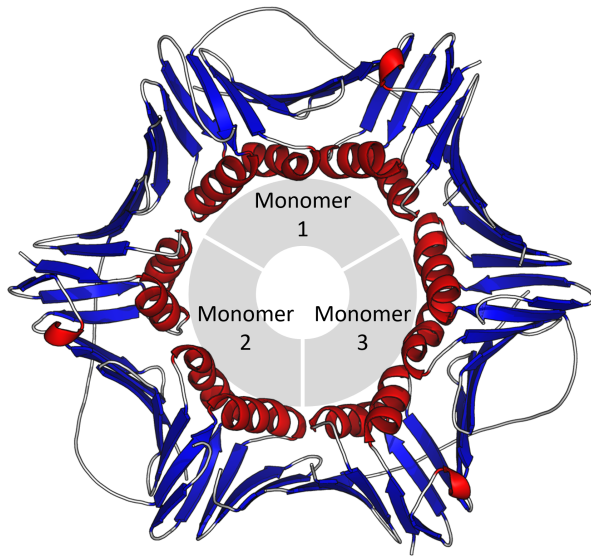
α -helix

Tertiary



Proteinek 4 szintű szerkezete

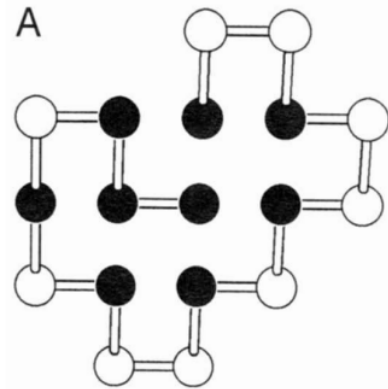
Quaternary



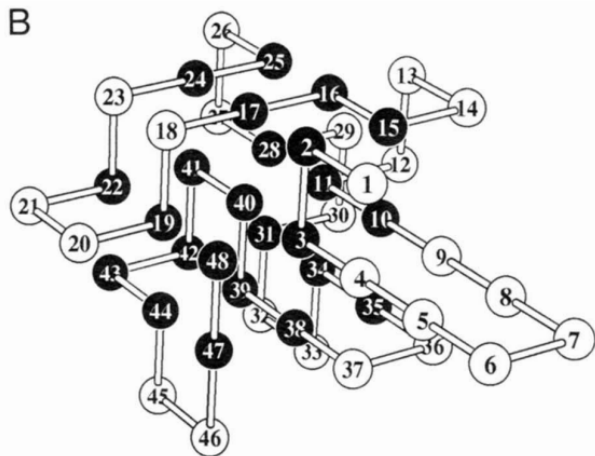
Dill-féle HP modell

- Egyszerűsített modell, gyakorlatban jól használható.
- Aminosavak csoportosítása:
 - ▶ H = Hidrofób = Apoláris = Nem szereti a vizet.
 - ▶ P = Poláris = Hidrofil = Szereti a vizet.
 - ▶ Sejtben víz veszi körül → kívül P, belül H.
- Térbeli elhelyezkedés:
 - ▶ 2D vagy 3D rács pontjaiba.
 - ▶ Beágyazás jósága = egymás melletti H-H párok darabszáma.
- Feladat: maximalizálás → bizonyítottan NP-nehéz (Hamilton-kör).

HP lánca beágyazása rácsba



(a) Beágyazás 2D rácsba



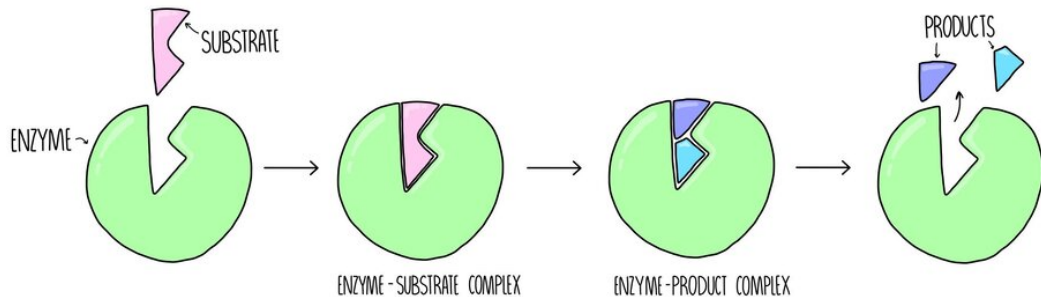
(b) Beágyazás 3D rácsba

H feketével, P fehérrel jelölve

Molecular docking

- Emberi test működése = kémiai reakciók → enzimek katalizátorok.
- Betegség = rossz kémiai reakciók → gyógyszer = enzim lyuk (kötési hely) betömése.

LOCK AND KEY MODEL



Molecular docking

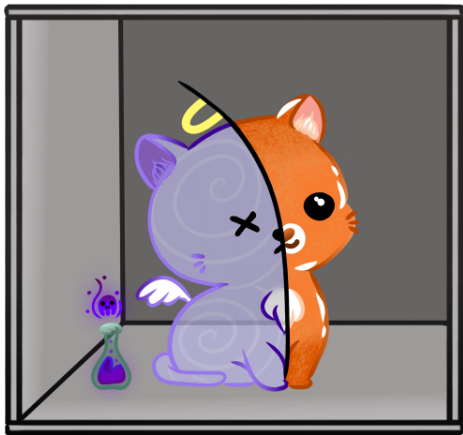
- Keressük a lyukba passzoló kulcsot.
- Mindkét 3D felület modellezése gráffal:
 - ▶ Csúcsok = Atomok
 - ▶ Élek = Kötések
 - ▶ Élsúlyok = Távolságok
- Feladat:
 - ▶ Részgráfizomorfia \rightarrow csúcsok megfeleltetése.
 - ▶ NP-nehéz.
 - ▶ Minimalizálandó: megfeleltetett élek súlyeltérésének szórása.

Kvantumos gyógyszergyártás

- Gyógyszergyártási feladat =
Betegség → Enzim → Lyuk → Protein struktúra adatbázis → Passzoló protein
- Kell: minimum / maximum keresése rendezetlen adatbázisban.
- Kvantumosan $O(\sqrt{N})$ -ben!

Maximumkeresés kvantumosan (Dill folding)

- Input: $w \in \{H, P\}^*$, $|w| = n$.
- Kódolás: beágyazás $\rightarrow c \cdot n$ db qubit.
 - ▶ Pl. Kezdőpont = Origó, Lépés = 4 irány = 2 qubit.
 - ▶ Probléma: önmagát metsző beágyazásnak is van kódja.
- Feltétel = Orákulum (1.): Kódolás \rightarrow Helyes-e?
- Adatbázis = Kvantumregiszterben az összes beágyazás szuperpozíciója.
 - ▶ Grover: ebben talál a feltételt kielégítő elemet.
- Maximalizálás = Orákulum (2.): Kódolás \rightarrow Aktuálisnál jobb-e?
 - ▶ Grover: talál egy jobbat, többször futtatva maximumig jut, összesen $O(\sqrt{N})$ -ben.



<https://cs.bme.hu/quantum/>