

Γενικές πληροφορίες από το κεφάλαιο 1 της βιολογίας προσανατολισμού 3ης λυκείου. Εξετάζουμε έννοιες που είτε χρειάζονται άμεσα στην κατανόηση του κειμένου είτε μπορούν να παρομοιαστούν με άλλες έννοιες πχ προσανατολισμός , αλληλουχίες βάσεων. Το DNA και το RNA, είναι μακρομόρια, αποτελούμενα από νουκλεοτίδια. Κάθε νουκλεοτίδιο του DNA αποτελείται από μια πεντόζη, τη δεοξυριβόζη, ενωμένη με μια φωσφορική ομάδα και μια αζωτούχα βάση. Στα νουκλεοτίδια DNA η αζωτούχος βάση μπορεί να είναι :

- a. αδενίνη (A)
- b. γουανίνη (G)
- c. κυτοσίνη (C)
- d. θυμίνη (T)

Σε κάθε νουκλεοτίδιο η αζωτούχος βάση συνδέεται με τον 1ο άνθρακα δεοξυριβοζης και η φωσφορική ομάδα με τον 5ο. Μια πολυνουκλεοτιδική αλυσίδα σχηματίζεται από την ένωση πολλών νουκλεοτιδίων με ομοιοπολικό δεσμό. Ο δεσμός αυτός δημιουργείται μέσω του υδροξυλίου του 3ου άνθρακα της πεντόζης και του επόμενου νουκλεοτιδίου και της φωσφορικής ομάδας που είναι συνδεδεμένη με στον 5ο άνθρακα της πεντόζης του επόμενου νουκλεοτιδίου. Ο δεσμός αυτός ονομάζεται φωσφοδιεστερικός. Με τον τρόπο αυτό η πολυνουκλεοτιδική αλυσίδα που δημιουργείται έχει έναν σκελετό, που αποτελείται από επανάληψη των μορίων φωσφορική ομάδα-πεντόζη-φωσφορική ομάδα-πεντόζη.

Ανεξάρτητα από τον αριθμό των νουκλεοτιδίων από τα οποία αποτελείται η πολυνουκλεοτιδική αλυσίδα, το πρώτο της νουκλεοτίδιο έχει πάντα μια ελεύθερη φωσφορική ομάδα συνδεδεμένη στον 5ο άνθρακα της πεντόζης του και το τελευταίο νουκλεοτίδιο της, έχει ελεύθερο το υδροξύλιο του 3ου άνθρακα της πεντόζης του. Έτσι καθορίζεται ο προσανατολισμός της πολυνουκλεοτιδικής αλυσίδας 5->3.

- Το DNA αποτελείται από 2 πολυνουκλεοτιδικές αλυσίδες που σχηματίζουν στο χώρο μια δεξιόστροφη διπλή έλικα.

- Η διπλή έλικα έχει έναν σταθερό σκελετό, από επαναλαμβανόμενα μόρια φωσφορικής ομάδας-δεοξυριβόζης ενωμένων με φωσφοδιεστερικό δεσμό. Ο σκελετός αυτός είναι υδρόφιλος και βρίσκεται στο εξωτερικό του μορίου. Προς το εσωτερικό του σκελετού βρίσκονται οι αζωτούχες βάσεις που είναι υδρόφοβες.

- Οι αζωτούχες βάσεις της μιας αλυσίδας συνδέονται με δεσμούς υδρογόνου με τις αζωτούχες βάσεις της απέναντι αλυσίδας με βάση τον κανόνα της συμπληρωματικότητας. Η αδενίνη συνδέεται μόνο με θυμίνη και αντίστροφα, ενώ η κυτοσίνη μόνο με γουανίνη και αντίστροφα. Οι δεσμοί υδρογόνου που αναπτύσσονται μεταξύ των βάσεων σταθεροποιούν την δευτεροταγή δομή του μορίου.

- Ανάμεσα στην αδενίνη και τη θυμίνη σχηματίζονται 2 δεσμοί υδρογόνου, ενώ ανάμεσα στη γουανίνη και την κυτοσίνη σχηματίζονται 3 δεσμοί υδρογόνου.

- Οι 2 αλυσίδες ενός μορίου DNA είναι συμπληρωματικές, και αυτό υποδηλώνει ότι η αλληλουχία της μια καθορίζει την αλληλουχία της άλλης. Η συμπληρωματικότητα έχει τεράστια σημασία για τον αυτοδιπλασιασμό του DNA, μια ιδιότητα που το καθιστά το καταλληλότερο μόριο για τη διατήρηση και μεταβίβαση της γενετικής πληροφορίας. Κάθε αλυσίδα DNA μπορεί να χρησιμεύσει ως καλούπι για τη σύνθεση μιας συμπληρωματικής αλυσίδας, ώστε τελικά να σχηματίζονται 2 δίκλωνα μόρια DNA πανομοιότυπα με το αρχικό μόριο.

Μια λειτουργία του DNA είναι η έκφραση των γενετικών πληροφοριών, που επιτυγχάνεται με τον έλεγχο της σύνθεσης των πρωτεϊνών. Για την περιγραφή του μήκους ή της αλληλουχίας ενός νουκλεϊκού οξέος χρησιμοποιείται ο όρος αλληλουχία βάσεων. Στην

πραγματικότητα εννοούμε την ακολουθία των νουκλεοτιδίων του νουκλεϊκού οξέος. Το 1953 υπήρξε η πρώτη υπόθεση ότι το DNA αυτοδιπλασιάζεται.

Τα κύτταρα, διαθέτουν εξειδικευμένα ένζυμα και άλλες πρωτεΐνες που δρουν ταυτόχρονα και καταλύουν τις χημικές αντιδράσεις της αντιγραφής DNA με ταχύτητα και ακρίβεια.

Η αντιγραφή ξεκινά από τις θέσεις έναρξης αντιγραφής. Στα ευκαριωτικά κύτταρα το DNA κάθε χρωμοσώματος είναι ένα μακρύ γραμμικό μόριο, με πολυάριθμες θέσεις έναρξης αντιγραφής. Έτσι η αντιγραφή γίνεται ταυτόχρονα σε εκατοντάδες σημεία σε όλο το μήκος και τα τμήματα που δημιουργούνται ενώνονται.

Για να αρχίσει η αντιγραφή, είναι απαραίτητο να ξετυλιχθούν στις θέσεις εκκίνησης οι δύο αλυσίδες. Αυτό επιτυγχάνεται με τη βοήθεια ειδικών ενζύμων που σπάζουν τους δεσμούς υδρογόνου μεταξύ των αλυσίδων. Τα ένζυμα αυτά ονομάζονται DNA ελικάσες.

Τα κύρια ένζυμα που συμμετέχουν στην αντιγραφή ονομάζονται DNA πολυμεράσες.

Επειδή αυτά δεν μπορούν μόνοι τους να αρχίσουν την αντιγραφή, το κύτταρο έχει ένα ειδικό σύμπλοκο, αποτελούμενο από πολλά ένζυμα, το πριμόσωμα, το οποίο συνθέτει στις θέσεις έναρξης αντιγραφής μικρά τμήματα RNA, συμπληρωματικά προς τις μητρικές αλυσίδες. Οι πολυμεράσες επιμηκύνουν τα αρχικά τμήματα, τοποθετώντας συμπληρωματικά δεοξυριβονουκλεοτίδια απέναντι από τις μητρικές αλυσίδες. Επίσης οι πολυμεράσες επιδιορθώνουν λάθη κατά το στάδιο αντιγραφής.

Τέλος να προσθέσουμε ότι τα ένζυμα είναι πρωτεΐνες και οι πρωτεΐνες είναι μόρια αποτελούμενα από αλληλουχίες αμινοξέων. Οι αλληλουχίες νουκλεϊκών οξέων καθορίζουν τη σειρά των αμινοξέων στις πρωτεΐνες μέσω της μεταγραφής και της μετάφρασης. Οι πρωτεΐνες είναι υπεύθυνες για ποικίλες λειτουργίες στον οργανισμό, όπως η δομή και η λειτουργία των

κυττάρων, η ανοσολογική αντίδραση, η μεταφορά οξυγόνου και η κατασκευή των ιστών. Η δευτεροταγής δομή των πρωτεϊνών αναφέρεται στην τρισδιάστατη μορφή των τοπικών τμημάτων της πρωτεΐνης. Η δευτεροταγής δομή ορίζεται επίσης από το σχήμα των δεσμών υδρογόνου μεταξύ των ατόμων υδρογόνου της αμίνης και του καρβοξυλικού οξυγόνου στο πεπτιδίο σκελετού. Άλλοι τύποι βιοπολυμερών, όπως τα νουκλεϊκά οξέα, διαθέτουν επίσης χαρακτηριστικές δευτεροταγείς δομές. Συνολικά, η δευτεροταγής δομή παρέχει σημαντικές πληροφορίες για την τρισδιάστατη διάταξη των πρωτεϊνών και την εκτέλεση των βιολογικών τους λειτουργιών.

Τα πεπτιδία είναι δομικά στοιχεία πρωτεϊνών, ενζύμων, κυττάρων και ιστών του σώματος. Συνολικά, τα πεπτιδία αποτελούνται από δύο ή περισσότερα αμινοξέα που συνδέονται με πεπτιδικό δεσμό. Ο αριθμός των αμινοξέων σε ένα πεπτιδίο υποδηλώνεται με αριθμητικό πρόθεμα, όπως διπεπτιδίο (2 αμινοξέα), οκταπεπτιδίο (με 8 αμινοξέα) ή ακόμα ολιγοπεπτιδίο ή πολυπεπτιδίο (περισσότερα από 50). Η διάκριση μεταξύ πολυπεπτιδίου και πρωτεΐνης είναι μάλλον ασαφής, χωρίς καμία πρακτική σημασία.

Σύμφωνα με το paper “Advanced Protein Alignments Based on Sequence, Structure and Hydropathy Profiles; The Paradigm of the Viral Polymerase Enzyme” Το κείμενο μας, αναφέρει ένα από τα μειονεκτήματα που έχουν οι αλγόριθμοι ομοιότητας αλληλουχιών αμινοξέων αναζήτησης ομοιοτήτων ανάμεσα σε διαφορετικές πρωτεΐνες με βάση την ακολουθία των αμινοξέων σε αυτές, όταν είναι ότι δεν βασίζονται στη δομή και τοπογραφία των μορίων. Δεν λαμβάνουν υπ' όψη χαρακτηριστικά της πραγματικής φυσικής και χημικής δομής τους. Αυτό διότι οι λειτουργίες των πρωτεϊνών βασίζονται πιο πολύ στη δομή. Για το λόγο αυτό έγινε

ανάπτυξη ενός νέου εργαλείου, του PSSP(Protein Signature Structure Profile) tool. Σκοπός του είναι η ταχύτερη αναζήτηση ομοιοτήτων ανάμεσα σε πρωτεΐνες με βάση πρωτογενή και δευτερογενή δομικά χαρακτηριστικά τους.

~~Συγκεκριμένα~~ Πολλές ομόλογες πρωτεΐνες, παρόλο ~~που την κοινή τους λειτουργία~~ δομικά είναι ομόλογες, ~~το~~ παρουσιάζουν χαμηλό ποσοστό ομοιότητας μεταξύ των αλληλουχιών ~~τους~~ των αμινοξέων από τα οποία αποτελούνται (μικρότερο από 10%). Ομόλογες(homologous) είναι δύο πρωτεΐνες που ανήκουν στην ίδια "οικογένεια", έχουν την ίδια λειτουργικότητα και δομικά είναι όμοιες κατά περισσότερο από 30%. Τέτοια παραδείγματα είναι τα ένζυμα των οικογενειών helicases (ελικάσες), proteases (πρωτεάσες) και polymerases (πολυμεράσες).

~~Ένα Το~~ λογισμικό που προτείνεται ~~το οποίο είναι ανοικτού κώδικα. Πιο συγκεκριμένα θα~~ εξετάσουμε ένα εργαλείο του λογισμικού αυτού. ~~Αξιοποιεί την βάση δεδομένων RCSB Protein Data Base για να ανακτά με blast αναζήτηση αποθηκευμένες δευτεροταγείς πληροφορίες για τη δομή των πρωτεϊνών όταν υπάρχουν αποθηκευμένες στη βάση PDB. Η πρόβλεψη της τρισδιάστατης δομής πρωτεϊνών που έχουν άγνωστη δομή γίνεται με χρήση της δομής άλλων ομόλογων με αυτές πρωτεϊνών ως πρότυπα(templates) και ευθυγράμμιση των ακολουθιών τους (sequence alignment). Θα κάνει τις~~ Όταν δεν υπάρχουν πληροφορίες στην PDB για κάποιο συγκεκριμένο μοντέλο πρωτεϊνών, το λογισμικό τις προβλέπει με ~~γρήγορους υπολογισμούς~~ μερική στοίχιση (partial geometry alignment) και αντιγραφή της γεωμετρίας της δομής των προτύπων και μετά τις επαληθεύει χρησιμοποιώντας και άλλα εργαλεία. Οι συγκρίσεις γίνονται έτσι με μεγαλύτερη ακρίβεια, ενώ γίνεται καλύτερη πρόβλεψη της δομής άγνωστων μορίων πρωτεϊνών, επειδή ~~εξετάζει~~ εξετάζονται μέσω της σειράς τόσο η σειρά της αλληλουχίας αμινοξέων όσο και ~~η~~ η τρισδιάστατη δομή των πρωτεϊνών που έχουν ήδη καταγραφεί ~~του~~ μορίου. Έτσι προβλέπει καλύτερα τη λειτουργία των μορίων.

Οι πληροφορίες που χρησιμοποιούνται για την μοντελοποίηση της δομής των πρωτεϊνών θα είναι δευτεροταγείς, αλλά θα εξαιρούνται οι πλευρικές αλυσίδες. Ένα μητρώο ομοιότητας (similarity matrix) που κατασκευάζεται με βάση τα σκορ ομοιότητας(similarity scores) και περιέχει τις δευτεροταγείς πληροφορίες ~~πολλών των~~ μορίων και θα χρησιμοποιηθεί χρησιμοποιείται ώστε να μεταφράσει μια σειρά αμινοξέων σε σχηματική μορφή σύμφωνα με τις πρωτεΐνες-πρότυπα όταν είναι απαραίτητο. Αυτό το μητρώο ~~βασίζεται στις μετρήσεις του χρησιμοποιώντας~~ κατασκευάζεται με βάση τις ιδιότητες υδροπάθειας (hydropathicity) των μορίων, καθώς αυτό ~~συνδέεται~~ που αφορά το folding πρωτεϊνών και ~~συνδέεται~~ συνδέεται άμεσα με τις φυσικοχημικές ιδιότητές τους και τη δομή τους. Η σύγκριση βασισμένη στο hydropathicity επιτρέπει να εντοπίζεται η ομοιότητα και σε περιπτώσεις μακρινής συγγένειας μεταξύ πρωτεϊνών όταν δεν παρατηρείται απλά με σύγκριση των αλληλουχιών των αμινοξέων τους.

~~Το PSSP είναι το εργαλείο πάνω σε αυτό το λογισμικό. Εξετάζουμε τρισδιάστατες δομές ή τεταρτοταγείς. Το εργαλείο σε κάθε αναζήτηση ψάχνει στη βάση RCSB PDB για παρόμοιες δομές πρωτεϊνών.~~

Μια εικόνα για τη δευτεροταγή δομή των πρωτεϊνών μπορεί να δοθεί όταν αυτές βρίσκονται σε επαφή με το νερό. Η υδροπάθεια μελετάει τις ιδιότητες του μορίου που συμβαίνουν λόγω της υδροφοβίας ή υδροφιλίας των αμινοξέων του. Βασίζεται στις χημικές ιδιότητες των πλευρικών αλυσίδων του (αφού αυτές έχουν την ελευθερία κίνησης) και βοηθάει να καθορίσουμε τον

προσανατολισμό των πλευρικών αλυσίδων στις 3 διαστάσεις. Αν οι πλευρικές αλυσίδες είναι υδρόφοβες, μέσα στο νερό διπλώνουν προς τον πυρήνα του μορίου. Υδροφοβία(hydrophoby) είναι η τάση μη-πολικών(non-polar) ουσιών να απωθούνται όταν έρχονται σε επαφή με νερό. Τα 20 γνωστά αμινοξέα έχουν κατηγοριοποιηθεί με βάση έναν δείκτη υδροφοβίας(amino acid hydrophathy index) σε τρεις κλάσεις: τα υδρόφοβα(I, V, F, C, M, A, W), τα ουδέτερα(G, T, S, Y, P, H) και τα υδρόφιλα(D, N, E, Q, K, R). Ο προσδιορισμός των κλίσεων των υδρόφοβων ή υδρόφυλων πλευρικών αλυσίδων γίνεται με πολλούς τρόπους. Ένας είναι να μετρηθούν μέσα στο νερό και μετά σε ένα μη αντιδραστικό περιβάλλον ως ισοτροπικές, αφαιρώντας την διαφορά ενέργειας σε κάθε κατάσταση. Ένας άλλος τρόπος βασίζεται στον υπολογισμό του μέσου όρου της θέσης των ατομικών συντεταγμένων 12 πρωτεϊνών. Ένας τρίτος τρόπος είναι ο συνδυασμός των παραπάνω.

Τα αμινοξέα με μεγάλες μη πολικές πλευρικές αλυσίδες τείνουν να είναι υδροφοβικά, ενώ τα πολύ πολικά τείνουν να είναι υδροφιλικά. Πολλά αμινοξέα έχουν και υδροφιλικά και υδροφοβικά τμήματα. Για τη μέτρησή τους χωρίζουμε τις περιόδους μέτρησης. Οι δομές των πρωτεϊνών σχετίζονται με πολλά πράγματα όπως τη δυναμική ενέργεια των μορίων, την εντροπία και τις ηλεκτροστατικές δυνάμεις. Όμως η υδροπάθεια ~~θεωρείται η πιο σημαντική δυνατή~~ είναι υπεύθυνη για το folding πρωτεϊνών και αποτελεί τον βασικότερο παράγοντα που καθορίζει ποιά θα είναι η τρισδιάστατη δομή μιας πρωτεΐνης.

~~στην επιφάνεια του νερού κατά την μέτρηση. Έχει αποδειχθεί ότι Η~~ περιοδικότητα πολικών και μη πολικών αμινοξέων, είναι καθοριστικός παράγοντας για τη δευτερογενή δομή των αυτο-συναρμολογούμενων ολιγομετρικών πεπτιδίων. Παρόλο που τα αμινοξέα μοιάζουν να διαφέρουν κάποιες φορές ενώ έχουν κοινές δομές ~~στη δομή τους~~, μέσα στο νερό, ο σχηματισμός υδρόφυλων δομών δείχνει πατέντες που μπορεί να είναι κοινές και αυτό έχει τεράστια σημασία σύμφωνα με έρευνες. Αυτές οι πατέντες είναι κοινές ανάμεσα σε οικογένειες, μπορούν εύκολα να διακριθούν όταν βάλουμε ένα μόριο μέσα στο νερό και θα ήταν πολύ δύσκολο να παρατηρηθούν διαφορετικά. Αυτό ~~μας έδωσε πολλές νέες δυνατότητες και~~ έκανε δυνατή ~~μέχρι και~~ την ταυτοποίηση ~~μέχρι και~~ πιο μακρινών συγγενικών πρωτεϊνών. Ομόλογες πρωτεΐνες μιας οικογένειας με παρόμοιες δομές, έχει βρεθεί να εμφανίζουν πολλές ομοιότητες όσον αφορά την υδροπάθειά τους, παρόλο που είχαν μηδαμινές ομοιότητες στην αλληλουχία αμινοξέων.

~~Ομόλογα μοντέλα μορίων έχουν 30% και πάνω ομοιότητες.~~

~~Για έναν συνηθισμένο~~ Συνοπτικά, ο αλγόριθμος που χρησιμοποιεί το προτεινόμενο λογισμικό-εργαλείο για να ψάχνει ομόλογα μόρια πρωτεϊνών ~~έχουμε~~ ακολουθεί τα εξής βήματα:

1. ~~Ψάξε~~ Αφού δεχθεί ως είσοδο από το χρήστη είτε μια ακολουθία αμινοξέων ή μια πρωτεϊνική ακολουθία που έχει προηγουμένως υποστεί DSSP-formatting, ψάχνει στη βιολογική βάση δεδομένων για παρόμοια μοντέλα μορίων σχετικά με την είσοδό σου.

1.1. ~~Χρησιμοποίησε~~ Χρησιμοποιεί γρήγορες μεθόδους εξαντλητικής αναζήτησης και υπολόγισε υπολογίζει ένα σκόρ μεταξύ αναζήτησης και μοντέλα της βάσης ομοιότητας.

1.2. ~~Φτιάξε~~ Κατασκευάζει το μητρώο ομοιότητας και ~~διέταξε~~ διατάσσει τα πιθανά μοντέλα.

1.3. ~~Χρησιμοποίησε~~ Χρησιμοποιεί μια μέθοδο για μια ακόμη καλύτερη ταξινόμηση.

1.4. ~~Παρήγαγε~~ Παράγει μια πολλαπλή αντιστοίχιση με τα καλύτερα μοντέλα.

2. Ο αλγόριθμος θα ψάξει στη βάση, μέσω μιας ευρετικής συνάρτησης, τμήματα ιδίων δομών πρωτεϊνών, με την είσοδο(άγνωστη δομή). Αν η ομοιότητα είναι μεγάλη, η άγνωστη δομή θα αντιγράψει στοιχεία από το σκελετό και τις πλευρικές αλυσίδες. Αν η ομοιότητα είναι μικρή, θα αντιγράψει μόνο το σκελετό. Σε μηδέν ομοιότητα δεν αντιγράφει τίποτα.

Τέλος για να ~~τεστάρουμε~~ ελεγχθεί την η ποιότητα της αντιγραφής, ελέγχουμε ελέγχεται αν τα τελικά στοιχεία έχουν ίδιες ιδιότητες υδροπάθειας.

Λίγα πράγματα για τη λειτουργία της διεπαφής λογισμικού:

Αρχικά, το λογισμικό μας δίνει επιλογές εισαγωγής τύπου-ερωτήματος. Επιλέγουμε σειρά αμινοξέων ή DSSP-δευτεροταγών στοιχείων σειρών πρωτεϊνών.

Η αναζήτηση για όμοια μοντέλα γίνεται είτε με τις κλασσικές σειρές αμινοξέων είτε με δευτερογενή στοιχεία με το STRAP μοντέλο. Το μοντέλο STRAP ~~θα προβλέψει~~ προβλέπει μια

πρώτη εικόνα για την δομή. Έπειτα θα κάνει αναζήτηση για δευτερογενή ταιριάσματα με άλλα μόρια. Μετά ~~θα γίνει~~ γίνεται αναζήτηση στη βάση δεδομένων πρωτεϊνών.

Η αναζήτηση ομοιότητας ακολουθεί δύο βήματα: Πρώτα γίνεται αναζήτηση blast, με την οποία παράγεται ένα προσωρινό αρχείο με όλες τις ακολουθίες που έχουν πάνω από 30% ομοιότητα με τη δοσμένη πρωτεϊνική ακολουθία. Στη συνέχεια με τη βοήθεια ενός μητρώου (hydropathicity matrix) οι είσοδοι κατατάσσονται με βάση το προφίλ υδροπάθειάς τους. Υπολογίζονται οι στοιχίσεις μεταξύ τους και τα ποσοστά ομοιότητας, τα οποία στη συνέχεια αναπαριστώνται γραφικά και προβάλλονται στο χρήστη σύμφωνα με το IMGT coloring scheme for hydropathy. Στα αποτελέσματα χρησιμοποιούνται χρώματα για να περιγράψουν κατά πόσο το μοντέλο είναι ακριβές. Τα πανομοιότυπα στοιχεία χρωματίζονται πράσινα, τα υδρόφοβα μπλε, τα ουδέτερα κόκκινα και τα υδρόφιλα κίτρινα.

1. αναζήτηση για αλληλουχίες με ομοιότητα > 30%

2. μέσω του μητρώου ομοιότητας διαλέγονται από τις παραπάνω μόνο όσες αλληλουχίες ικανοποιούν το προφίλ υδροπάθειας.

Στα αποτελέσματα χρησιμοποιούνται χρώματα για να περιγράψουν κατά πόσο το μοντέλο είναι ακριβές.

Οι δευτεροταγείς πληροφορίες κωδικοποιούνται με αλφάβητο 8 συμβόλων για τα αμινοξέα αντί για 20. Αυτό επιτυγχάνει μεγαλύτερη ταχύτητα.

Για τον έλεγχο της αποτελεσματικότητας του εργαλείου επιλέχθηκε να γίνει μοντελοποίηση του ιού της πολυμεράσης. Το λογισμικό χρησιμοποιεί με το πακέτο MOE για αναπαράσταση πρωτεϊνών 3-

διαστάσεων. Οι υπολογισμοί μοριακών δυναμικών έγιναν με το GROMACS, λαμβάνοντας υπόψη

τοπολογία και σύστημα. Το εργαλείο αυτό περιέχει και βάση με τις τοπολογίες νουκλεοτιδίων και αμινοξέων. Κάποιες δυσκολίες εντοπίζονται όμως λόγω της πολυπλοκότητάς του. Ένας έλεγχος που έγινε με συναρτήσεις του MOE έδειξε ότι τα λάθη στην μοντελοποίηση ήταν ασήμαντα και ότι το μοντέλο λειτουργεί κανονικά που παράχθηκε ήταν ικανοποιητικά ακριβές. Η μοντελοποίηση της HCV πολυμεράσης δεν θα ήταν δυνατή με χρήση προγενέστερων τεχνικών μοντελοποίησης. Το παράδειγμα αυτό δείχνει τη χρησιμότητα του εργαλείου-πλατφόρμας PSSP.

Δυστυχώς όταν μπαίνουμε στη σελίδα του λογισμικού να πειραματιστούμε με αυτό οδηγούμαστε σε μια αρχική οθόνη που λέει enter. Αφού πατάμε enter οδηγούμαστε εδώ: <http://www25.bioinfoteam.com/?subid1=20240406-2046-3316-8900-afcc8ae4214a> όπου είναι απλά μια κενή σελίδα. Σε αυτό το paper προτείνεται ένα μοντέλο λογισμικού και όχι μια θεωρητική ιδέα ή μέθοδος. Άρα είναι λίγο δύσκολο να προσθέσουμε καινούργιες ιδέες χωρίς προσομοίωση. Έτσι

Κατά την μελέτη του συγκεκριμένου paper σταθήκαμε περισσότερο στην περιγραφή και ανάλυση όρων. Μια ιδέα συνέχισης της εργασίας και σε συνδυασμό με το προηγούμενο paper είναι η περαιτέρω ανάπτυξη του εργαλείου ώστε εκτός από τις συγκρίσεις υδροπαθειών να συγκρίνεται ταυτόχρονα και η ηλεκτροστατική δυναμική για κάθε ομοιότητα. Για να πραγματοποιηθεί αυτό πρέπει να γίνει ανάλυση όλων των γνωστών αμινοξέων με βάση το προηγούμενο paper και να ενταχθούν σε μια βάση δεδομένων.