

Streszczenie

Cząsteczki RNA są oprócz DNA i białek podstawowymi elementami każdej żywej komórki. Uczestniczą przede wszystkim w procesach odczytu kodu genetycznego. Współczesne badania pokazały jednak, że RNA pełni jeszcze wiele innych ról w komórce. Potrafi regulować jej metabolizm, przekazywać informacje, a nawet zmieniać swoją postać. Te interesujące procesy są możliwe dzięki wpływowi otoczenia na najbardziej kluczową cechę RNA, jaką jest jej kształt. W projekcie tym rozwijane będą informatyczne metody, by tę właściwość analizować i tym samym lepiej zrozumieć funkcję danej cząsteczki RNA.

Dla informatyków kształt cząsteczki RNA to pewna informacja, którą możemy zapisać cyfrowo i następnie przetwarzać. Najpopularniejszą metodą jej zapisu jest podanie wartości współrzędnych X, Y i Z dla każdego z atomów, które składają się na analizowane RNA. Można to jednak zrobić inaczej. Otóż okazuje się, że kształt cząsteczki równie dobrze opisuje informacja zawarta we względnych obrotach wokół wiązań atomowych. Dysponując informacją o wszystkich kolejnych wartościach kątów, również możemy podjąć się analizy kształtu cząsteczki.

W tym projekcie weźmiemy pod uwagę poznane już wcześniej struktury RNA. Istnieją bazy danych, które udostępniają te informacje dla społeczności naukowej. Na ich podstawie zwerifikujemy wiedzę o tym, jaką postać rzeczywiście przyjmują cząsteczki RNA w komórkach. Na tej podstawie możliwe będzie zbudowanie modelu, który posłuży do oceny poprawności przewidywanych kształtów RNA.

Ponieważ kształt cząsteczek RNA to pewna informacja, możliwa jest jej komputerowa modyfikacja w celu opisania innego kształtu. Jest to w dużym uproszczeniu opis tego, jak działają algorytmy przewidywania struktur RNA. Bazując na pewnych założeniach, próbują one opisać, jak w komórce wyglądałaby dana cząsteczka. Jest to zatem próba odtworzenia procesów naturalnych w cyfrowej postaci i takie próby oczywiście obarczone są pewnym błędem.

Nasz model zbudowany na podstawie wiedzy z rzeczywistych struktur będzie służył temu, aby te próby oceniać albo wręcz wspomagać. Dysponując informacją o tym, które wartości kątów są prawdopodobne, a które nie występują naturalnie, będziemy w stanie stwierdzić, w jakim stopniu dany opis kształtu cząsteczki RNA jest wiarygodny. Planujemy też samemu tworzyć takie wiarygodne opisy dla pewnych parametrów wejściowych.