

УДК 57.087

ДЕТАЛЬНЫЙ ПОДХОД В МОЛЕКУЛЯРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ: СОЧЕТАНИЕ МЕТОДОВ БИОИНФОРМАТИКИ И 3D-ТЕХНОЛОГИЙ

Е. И. Шакирзянова, студент гр. ИСТ-312, III курс
Научный руководитель: О. В. Батенькина, к.т.н., доцент
Омский государственный технический университет
г. Омск

Биоинформатика – раздел науки, направленный на решение задач биологии (в настоящее время это задачи, касающиеся молекулярной биологии) с использованием компьютерных технологий и исключая наблюдение за живыми существами, проведение опытов и экспериментов. Биоинформатика – главный инструмент учёных-исследователей в областях молекулярной и медицинской генетики [1, с.51]. Целью биоинформатики является накопление биологических знаний в форме, обеспечивающей наиболее эффективное их использование, а также первичная обработка, анализ и хранение результатов массовых данных или целых проектов.

Компьютерное моделирование, в частности 3D-моделирование, – один из способов представления биологической информации. С его развитием появилась возможность наглядного представления молекулярного строения вирусов и других различных частиц, не доступных для восприятия человеческому глазу. Визуализация молекулярных частиц и способность построения их в 3D-пространстве – это одновременно и возможность и новая задача для CG-инженеров.

Создание молекулярной 3D-модели – трудоемкий процесс, требующий детального подхода и представляющий собой командную поэтапную работу, как, к примеру, работа по созданию спецэффектов для кинематографа известной американской студии ILM. Как и в любом процессе проектирования, неотъемлемым этапом является поиск необходимой информации. В свою очередь сбор всей доступной информации представляется технически невозможным, где и появляется потребность командного подхода, который подразумевает под собой систематизацию, обработку и перевод в 3D-модель полученных данных. При этом стоит учитывать область, в которой проводится исследовательская и проектная работа. В данном случае действие происходит в постоянном контакте с биологическим миром, для визуализации частиц которого необходима, в первую очередь, хорошая теоретическая основа, прочный фундамент, составленный из багажа определенных знаний в специализированных

областях биологии [3]. Хорошая теоретическая база – залог успешной практической работы, поэтому при формировании команды, работающей над созданием молекулярных 3D-моделей, необходимо учесть то, что даже самый лучший из CG-инженеров не сможет корректно построить модели молекул, не обладая при этом биологическим образованием. Поэтому вовлечение в работу ученых, биологов, исследователей, специалистов в узких областях биологии является одной из первых необходимостей. Ведь лишь тесное взаимодействие двух подразделений – 3D-визуализаторов и биологов – принесет информативно точный и полезный результат.

Следующий этап проектирования – обработка данных [2, с.189]. На этой стадии работы основную роль играют ученые, задача которых заключается в представлении информации в удобном для дальнейшей работы виде. На этапе обработки исследователи зачастую делятся собственными гипотезами, которые ранее не были опубликованы, что вносит ценный вклад в формирование молекулярных моделей.

Результирующей описанных выше этапов проектирования является вербальная картина будущей модели, представленная таблицами количества молекул, подробным описанием взаимодействующих частиц между собой.

Следующие этапы работы включают в себя получение трехмерных моделей всех нужных компонентов [3]. Здесь применяется ряд методов и вспомогательных процедур, выполняющих определенные функции. Первый из них – это электронная микроскопия, описывающая строение крупных молекулярных комплексов, а также позволяющая оценить размеры и очертания полноценных молекулярных частиц, состоящих из нуклеиновых кислот и капсида. Рентгеноструктурный анализ – метод, отвечающий за описание белков и их фрагментов. Объединенные молекулярно-биологические и биохимические методы информируют о молекулярном и количественном составе. Далее вновь следует систематизация полученных структур (данных, представленных в виде цифр и изображений) [2, с.201]. После получения достаточного количества изображений с различных углов обзора, инженеры при помощи специализированных программ, предназначенных для первичного анализа, формируют трехмерную картину. Основной проблемой, возникающей при данном процессе, является то, что существенная доля молекулярных частиц не до конца или же вовсе не описана учеными. Для получения полноценной модели используется моделирование на основе известных структур, которое заключается в предугадывании недостающих молекулярных структур. Для наибольшей точности такого моделирования применяются компьютерные методы, в основе которых лежат алгоритмы, позволяющие с определенной достоверностью рассчитывать взаимодействие между отдельными атомами молекулы.

Для поиска схожих, или же известных, молекулярных структур используется база данных BLAST – один из сервисов, содержащих программы, используемые в биоинформатике [3].

После завершения построения моделей компонентов следует этап первичной оптимизации, именуемый докинг. Докинг – это метод молекулярного моделирования, при котором перебираются варианты взаимного положения составляющих молекулярной модели для поиска наиболее устойчивого комплекса. На данном этапе к работе подключается структурная биоинформатика. Наиболее известны и распространены следующие программы молекулярного докинга: Dock, GOLD, Glide, Flexx, Autodock [1, с.205].

Результат процесса докинга – создание прочной и удобной для дальнейшего использования молекулярной 3D-структуры, состоящей из объединенных воедино компонентов. Далее молекулярная модель подлежит импортированию в программы, предназначенные для работы с 3D-графикой, для осуществления профессионального рендеринга, позволяющего получить довольно привлекательные образы.

В созданную молекулярную 3D-модель могут вноситься корректировки, она также подлежит редактированию и посатрапсационным химическим модификациям [3].

Детальный подход к молекулярно-биологическому моделированию включает поэтапное формирование 3D-модели, открывая немалые перспективы использования биоинформатики и 3D-технологий в образовании и научных коммуникациях.

Список литературы:

1. Игнасимуту С. Основы биоинформатики. – М. – Ижевск: НИЦ "Регуляторная и хаотическая динамика", Институт компьютерных исследований, 2007. – 320 с.
2. Леск. А. Введение в биоинформатику. – М.: Бином, 2013. – 278 с.
3. "Хабрахабр": ресурс для IT-специалистов компании "TM". – 2006 [Электронный ресурс]. Дата обновления: 06.02.2015. – URL: <http://habrahabr.ru/company/visual-science/blog/235297/> (дата обращения: 21.01.2015).