

РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація: 106 с., 21 рис., 5 табл., 3 додатки, 78 джерел.

Актуальність. Проблема прогнозування третинної структури молекули протеїну актуальна в сферах молекулярної біології, біохімії, генетики, фармакології. Можливість передбачувати структуру протеїнів є ключем до розуміння їх впливу на організм, схем виникнення багатьох захворювань, і часто знаходження шляхів їх лікування.

Для багатьох білків правильна тривимірна структура необхідна для функціонування. Неправильна структура приводить до утворення неактивних білків, які часто блокують роботу своїх потенційних партнерів, порушуючи роботу всієї клітини. В окремих випадках неправильна структура може навіть передаватися іншим білкам, як це трапляється з пріонами. Кілька нейродегенеративних хвороб, як вважається, виникають через накопичення неправильно згорнутих білків. Накопичення неправильно згорнутих білків у цитозолі призводить до запуску механізму відповіді на тепловий шок. Він призводить до збільшення експресії білків-шаперонів, які допомагають незгорнутим поліпептидам згортатися до нативної конформації. У випадку стресу ендоплазматичного ретикулуму, тобто коли спостерігається висока концентрація неправильно згорнутих білків у цій органелі, в клітині запускається так звана відповідь на незгорнуті білки (англ. *unfolded protein response*). Її завданням є збільшення кількості шаперонів ендоплазматичного ретикулуму, білків, що беруть участь у ретротранслокації поліпептидів у цитозоль, де вони підлягають деградації, та інших білків, що сприяють збільшенню здатності ендоплазматичного ретикулуму здійснювати фолдинг.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Магістерська дисертація виконана у відповідності до плану відділу оптимізації керованих процесів Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України в рамках науково дослідної теми «Розробка математичного апарату, орієнтованого на створення інтелектуальних інформаційних технологій розв'язування проблем комбінаторної оптимізації та інформаційної

безпеки»(номер державної реєстрації 0117U000323)

Мета Підвищення точності передбачення третинної структури білка.

Для досягнення мети необхідно виконати наступні **завдання**:

- виконати огляд існуючих моделей та алгоритмів передбачення третинної структури протеїну;
- виконати порівняльний аналіз математичних моделей, що використовуються при передбаченні третинної структури протеїну;
- виконати формалізацію задачі передбачення процесу згортки протеїнових молекул
- розробити модель представлення третинної структури протеїнових молекул,
- розробити метод передбачення третинної структури протеїну;
- розробити програмну реалізацію алгоритмів та моделей у вигляді, що може використовуватися для передбачення процесу згортки протеїнових молекул;
- виконати аналіз отриманих результатів.

Об'єкт дослідження – Математичне моделювання процесу формування третинної структури протеїнів.

Предмет дослідження – Підходи, математичні моделі та алгоритми розв'язування задач комбінаторної оптимізації, що виникають при такому моделюванні.

Методи дослідження – імітаційне моделювання, порівняльний аналіз.

Наукова новизна отриманих результатів полягає у використанні видозміненого алгоритму оптимізації мурашиною колонією та порівняння його ефективності з раніше створеними.

Публікації. «Інформатика та обчислювальна техніка» ІОТ-2017» - Применение различных реализаций алгоритма оптимизации муравьиной колонией в задаче прогнозирования третичной структуры протеинов

ЗГОРТКА ПРОТЕЇНУ, ТРЕТИННА СТРУКТУРА МОЛЕКУЛИ БІЛКА,

ДИСКРЕТНІ ГРАТКИ, КОМБІНАТОРНА ОПТИМІЗАЦІЯ, ПЕРЕДБАЧЕННЯ
ТРЕТИННОЇ СТРУКТУРИ ПРОТЕЇНУ, МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ
МУРАШИНИМИ КОЛОНІЯМИ, ЕВРИСТИКИ, NP-СКЛАДНІСТЬ