

All'Ufficio Accordi e Relazioni Internazionali del CNR
Piazzale Aldo Moro 7
00185 ROMA

Oggetto: Relazione sulla attivita' svolta

Durante la permanenza presso l'University College of Dublin (UCD) sono state studiate alcune tecniche di previsione della struttura delle proteine basate sulle reti neurali.

Tali tecniche sono orientate al perfezionamento delle strutture predette dagli algoritmi neurali messi a punto al laboratorio AmMBIO@UCD dell'UCD.

Una prima tecnica e' orientata alla correzione della ricostruzione delle mappe di contatto ottenute attraverso la cosiddetta predizione "ab initio". Le tecniche usate per la predizione "ab initio" ricavano delle contact map inquinate da artefatti contrari alla fisica realizzabilita' della proteina, filtrare tali artefatti significa ottenere mappe di contatto utili per la ricostruzione della struttura tridimensionale della proteina.

Una rete neurale opportunamente addestrata puo' memorizzare parti di mappa di contatto, trattate come se fossero immagini, e cercare di ricostruire una parte della mappa quando viene dato in ingresso un dettaglio o una parte della mappa stessa. Reti di questo tipo sono dette auto associatori e necessitano di una delicata messa a punto. Durante la permanenza all'UCD e' stato usato un programma sviluppato in loco, con cui e' stato preparato un prototipo della rete neurale addestrato su un database di esempi. I risultati sono stati incoraggianti, ma il procedimento necessita di una maggiore messa a punto e di un database selezionato in maniera opportuna. Il lavoro e' attualmente in corso.

La seconda tecnica e' orientata alla correzione delle contact map ottenute per le proteine cosiddette "hard template modeling" cioe' proteine per cui sono noti dei modelli ma sono molto difficili da trovare. La tecnica indagata e' una tecnica di ricerca per i modelli di tali proteine, ed e' basata sulla indicizzazione di parti di struttura della proteina. La predizione della struttura e' iniziata usando la sequenza, poi parte della struttura prevista e' usata per la ricerca in un database di strutture note codificate in maniera compatibile con i criteri di ricerca. La ricerca e' poi raffinata usando i classici metodi di allineamento delle proteine. I risultati di questa tecnica sono ancora allo stadio preliminare ma i risultati sono incoraggianti sebbene molti passi debbano essere supervisionati per potere ottenere risultati soddisfacenti.

Palermo 12/07/2010

In Fede
Ing. Riccardo Rizzo