

Studien har tagits fram med stöd från Jordbruksverket/Djurskyddsmyndigheten.

## **Fortsatt utveckling av proteokemometri och informatik för proteokemometri**

**Jarl Wikberg, Uppsala universitet**

Proteokemometri är en av oss ursprungligen utvecklad teknologi. Vi upptäckte den 1999 och har sedan dess kontinuerligt utvecklat den. Proteokemometri utgör en kombination av nya bioinformatiska och bioteknologiska metoder med vars hjälp man kan modellera, prediktera och kartlägga molekylära interaktioner hos biomolekyler. Med hjälp av proteokemometri erhåller man detaljerad och kvantitativ information om de molekylära igenkänningsprocesserna för biomakromolekyler. Vi har visat att man kan prediktera funktioner också i de fall när man helt saknar funktionella data för en viss makromolekyl. Applicerat systematiskt kan proteokemometri bygga modeller över hela genom och proteom. Endast en fraktion av genomen och proteomen behöver kartläggas experimentellt. De resterande delarna kan predikteras.

Proteokemometri har en mängd användningsområden vilka bl.a. inkluderar design av läkemedel samt utredningar av biologiska funktioner. Design och prediktion kan utföras samtidigt över flera proteiner inklusive muterade proteinvarianter, målproteiner med nya okända funktioner mm.

Proteokemometri är generellt användbart och kan användas vid läkemedelsutveckling och biotekniska tillämpningar, inom kemisk industri som sysslar med biologiska applikationer, samt inom den biologiska och biomedicinska forskningen.

Användarvänliga proteokemometriska informatikverktyg är den viktigaste nyckeln till en systematisk spridning av proteokemometri. Vi har därför utvecklat ett system, Bioclipse (<http://www.bioclipse.net>), som erhållit två internationella pris (se [http://info.uu.se/press.nsf/pm/dubbla\\_utmarkelser.id6E0.html](http://info.uu.se/press.nsf/pm/dubbla_utmarkelser.id6E0.html)). Vårt fritt tillgängliga datasystem har rönt mycket stor uppmärksamhet med över 5000 nerladdningar. Information om proteokemometri sprids även via <http://www.proteochemometrics.org>.

En systematisk användning av proteokemometri av ett stort antal forskare över hela världen leder till att ökande mängder data samlas i de proteokemometriska databaserna.

Detta leder i sin tur till att de proteokemometriska prediktionsmodellerna kontinuerligt kommer att kunna förbättras. Så småningom kan de proteokemometriska modellerna komma att bli heltäckande för många viktiga biologiska funktioner.

Projektet har direkt bäring på de tre ”Rn” då proteokemometri flyttar pertinenta delar av biologin in i ett datorbaserat prediktionssystem vilket helt och hållet baseras på matematik och kemi. Behovet av djurförsök minskar därvid radikalt inom alla biologiskt relaterade forsknings- och utvecklingsområden.