



# 어떻게 접히는지 알기

인간 게놈의 염기서열 결정이 대단히 중요한 성과였지만, 이제 어려운 부분이 남아있습니다. 단백질의 구조와 기능을 이해하는 것입니다. 우리 몸속 100,000개의 단백질은 (접힘이라 부르는) 구조 및 다른 단백질과의 교신을 통해 인체의 모든 생물학적 기능들을 개시하고 제어하며 수행합니다. 잘못 접히거나 표적을 잘못 택한 단백질은 암, 광우병, 낭포성 섬유증과 같은 질병을 일으킵니다. 계산 생물학자들은 기하학, 확률론, 매듭이론을 이용해 단백질의 복잡한 접힘을 설명하기 시작하였습니다. 기능 이상 단백질이 정확히 어떻게 어긋났는지 알 수 있다면 그에 맞는 약을 설계하여 피해 세포들을 복구할 수 있을 것입니다.

단백질은 극미의 공간과 많은 경우 극소의 시간 안에서 조립 및 재조립되지만, 단백질의 기능을 시뮬레이션하면 수십억의 아주 작은 시간격마다 수백만 번의 계산을 포함하는 방대한 것입니다. 적분, 편미분 방정식, 선형 대수학, 수치해석학을 포함하는 수학 분야 대부분이 단백질의 행동을 시뮬레이션하는 데 사용되는데, 가장 단순한 형태의 단백질에서조차 해를 구하려면 병렬 계산이 필요합니다.

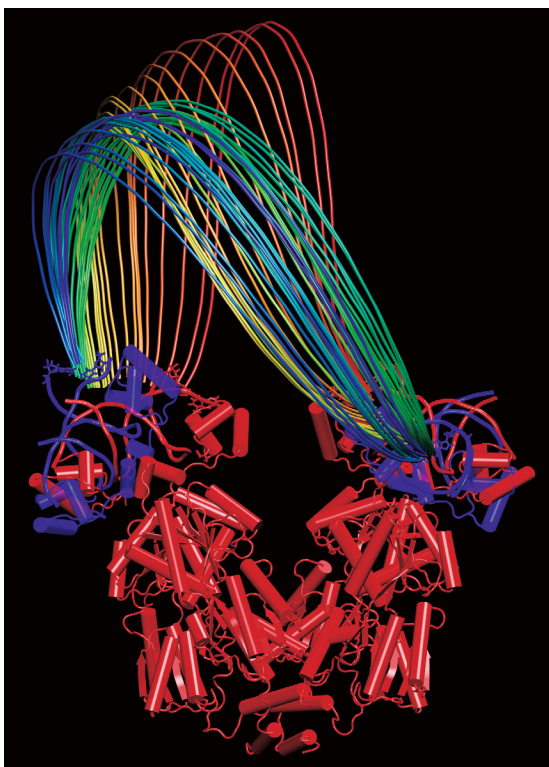


Image courtesy of Theoretical & Computational Biophysics Group, University of Illinois.

이런 작은 규모에 그런 거대한 노력을 집중하는 것이 이상해 보일 수도 있지만 결실이 많습니다. 어떤 HIV 균주는 치료에 대한 저항성이 컸는데 HIV 단백질인 인테그라제에 대한 모형을 통해 나노단위의 틈새를 발견하여, 그 틈새를 화합물로 채움으로써 저항성을 극복할 수 있었습니다.

더 알아보기: *From Protein Structure to Function with Bioinformatics*, Daniel John Rigden, Editor.

Translation courtesy of volunteer members of the Korean Mathematical Society.