

BIOINFORMATYKA STRUKTURALNA II

- ZAGADNIENIA NA EGZAMIN -

1. Pojęcia: predykcja de novo, modelowanie ab initio, modelowanie komparatywne.
2. Wady i zalety modelowania de novo i modelowania komparatywnego.
3. Przebieg modelowania de novo i komparatywnego na przykładzie znanej metody do przewidywania struktur 3D.
4. Potencjały: harmoniczny, kulombowski, Lennarda-Jonesa.
5. Do czego służy dynamika molekularna?
6. Reprezentacje drugorzędowej struktury RNA.
7. Pseudowęzły i możliwość ich przedstawienia w różnych reprezentacjach struktury drugorzędowej.
8. Formaty plików z zapisem informacji o strukturze II- i III-rzędowej RNA.
9. Algorytmy przewidywania struktury drugorzędowej RNA - zasada działania (Zuker, Nussinov).
10. Struktura trzeciorzędowa cząsteczek i jej reprezentacje: algebraiczna, geometryczna, trygonometryczna, probabilistyczna.
11. Proces anotowania struktury drugorzędowej na podstawie danych z plików PDB.
12. Miara podobieństwa a miara odległości.
13. Lokalne i globalne podobieństwo struktur.
14. Obliczanie RMSD. Algorytm Kabscha.
15. Wady i zalety RMSD.
16. Obliczenie: dRMSD, MCQ, URMS, LCS, GDT, LGA, INF, MAX CMO.
17. Obliczanie odległości między strukturami: odległość Levenshteina, współczynnik korelacji Matthews, odległość między diagramami.
18. Wyszukiwanie motywów sekwencyjnych i strukturalnych. Algorytm naiwny. Algorytm Karpa-Rabina. Drzewa suffiksowe.
19. Symulacja deterministyczna a symulacja stochastyczna.
20. Jak działa symulacja Monte Carlo? Co to jest eksperyment Monte Carlo?
21. Wady i zalety algorytmów Monte Carlo.
22. Algorytm Metropolis - schemat działania.
23. Eksperymentalne metody badania struktur trzeciorzędowych – podstawowe cechy.
24. Język skryptowy Pymola.