

Streszczenie

Przedmiotem badań niniejszej rozprawy doktorskiej są metody analizy mechanizmów funkcjonowania układów (bio)molekularnych.

Pierwsza część badań dotyczy sieci strukturalnych białek (ang. *protein structure network*) zdefiniowanych w oparciu o zbiór węzłów (aminokwasów) połączonych krawędziami (kontaktami), którym przypisywany jest atrybut, długość kontaktu. Dążąc do określenia sieci zapewniających optymalną reprezentację struktur białek skupiono się na znalezieniu właściwej odległości odcięcia kontaktu, tj. długości powyżej której jest on uznawany za zerwany. Stosując podejście oparte na teorii informacji, w ramach którego poszukiwano reprezentacji charakteryzującej się możliwie dużą zawartością informacji przypadającej na kontakt, wykazano, że odległość odcięcia zapewniająca spełnienie tego kryterium dla szerokiej klasy białek jest taka sama, niezależnie od rodzaju drugorzędowej struktury i wielkości białka. Na potrzeby analiz wprowadzono i zastosowano miarę średniej korelacji, która w zastosowaniu do sygnałów gaussowskich równoważna jest mierze informacji wzajemnej, określającej ilość redundantnej informacji w sygnale.

W drugiej części badań wykorzystano model sieci kontaktów uzyskany dla trajektorii dynamiki molekularnej białka chignoliny oraz formalizm analizy przyczynowości Grangera, do określania powiązań czasowych w procesie odwracalnego przechodzenia białka ze struktury rozwiniętej do natywnej struktury β -spinki do włosów. Na potrzeby opisu wprowadzono szereg deskryptorów pozwalających na uzyskanie prostej interpretacji macierzy współczynników Grangera. Przeprowadzona analiza pozwoliła w sposób obiektywny wskazać, który spośród dwóch głównych, szeroko rozważanych w literaturze mechanizmów zwijania się chignoliny w strukturę β -spinki, jest realizowany w ramach badanej symulacji.

W ostatniej części, zaproponowano wydajny numerycznie formalizm oparty o algebrę kwaternionów, pozwalający na zastosowanie analizy przyczynowości Grangera do badania powiązań czasowych pomiędzy wektorami trójwymiarowymi. Formalizm taki pozwala na wygodne stosowanie analizy powiązań czasowych w odniesieniu do wektorowych wielkości fizycznych, m.in. powszechnie występujących w symulacjach układów (bio)molekularnych. Jego poprawne działanie zostało zweryfikowane w oparciu o symulacje modelowego układu fizycznego.