

Implementacja algorytmu Nussinov do obliczania struktury drugorzędowej DNA i RNA

Jerzy Balcerzak, Oleg Druzhynets

March 23, 2014

Jednym z podstawowych problemów nad którego rozwiązaniem pracuje wiele naukowców badających kwasy rybonukleinowe (RNA) to określenie trójwymiarowej struktury molekuł. Jednak w przypadku kwasów RNA, ostateczna budowa molekuly jest w dużej mierze zdeteminowana poprzez drugorzędową strukturę RNA. Na przełomie lat 70' i 80' ubiegłego wieku, zespół badawczy dr Ruth Nussinov zaproponował metodykę przewidywania możliwych drugorzędowych struktur jednoniociowych kwasów RNA [1][2] wykorzystując w niej programowanie dynamiczne – to właśnie implementacji tego algorytmu będzie dotyczył poniżej przedstawiony projekt.

1 CEL PROJEKTU

Celem projektu jest implementacja programu obliczającego strukturę drugorzędową cząsteczki DNA lub RNA wykorzystując algorytm Nussinov.

2 SKŁAD ZESPOŁU

Jerzy Balcerzak
Oleg Druzhynets

3 FUNKCJONALNOŚĆ APLIKACJI

Tworzony w ramach projektu program będzie miał naturę aplikacji konsolowej - po jego uruchomieniu, użytkownik będzie mógł wprowadzić ciągi znaków wczytując wskazany plik,

bądź też wpisując dane z klawiatury. Program zwróci czytelną reprezentację struktury drugorzędowej na konsolę oraz również do pliku.

4 PRZEWIDZIANE PRACE

Jako źródło przykładowych danych testowych, wraz z wynikami referencyjnymi zostanie wykorzystana baza danych RNA STRAND v2.0 [3]. Zatem aplikacja zostanie dostarczona wraz ze zbiorem przykładowych zestawów danych które użytkownik będzie mógł uruchomić i zapoznać się z działaniem aplikacji oraz zwracanym formatem danych.

Ponadto zostaną przeprowadzone testy wydajnościowe...?

Literatura i źródła

- [1] Nussinov, Ruth; Pieczenik, George; Griggs, Jerrold R.; Kleitman, Daniel J. (1 July 1978). "Algorithms for Loop Matchings". *SIAM Journal on Applied Mathematics* 35 (1): 68–82. doi:10.1137/0135006.
- [2] Nussinov, R; Jacobson, AB (Nov 1980). "Fast algorithm for predicting the secondary structure of single-stranded RNA.". *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 77 (11): 6309–6313. doi:10.1073/pnas.77.11.6309. PMC 350273. PMID 6161375.
- [3] RNA STRAND v2.0 - The RNA secondary STRucture and statistical ANalysis Database, <http://www.rnasoft.ca/strand/>