1 Cel naukowy projektu

Zbadanie i wykorzystanie modeli fizycznych bazujących na formalizmie macierzy losowych do opisu topologicznej klasyfikacji RNA [1] i białek.

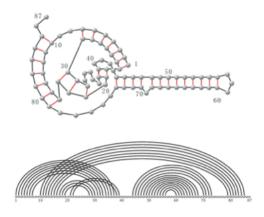
- 1. Analiza ścisłych rozwiązań oparta o teorię macierzy losowych oraz formalizm topologicznych rekurencji modelu macierzowego opisującego tzw. diagramy łukowe (chordowe)
- 2. Kategoryjne ujęcie diagramów łukowych i określenie ich własności

2 Znaczenie projektu

Proponowany projekt w istotny sposób rozszerza nowatorskie podejście zaproponowane w ostatnim czasie przez kierownika projektu wraz z dr hab. Piotrem Sułkowskim [2].

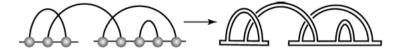
3 Istniejący stan wiedzy w zakresie tematu badań

RNA pełnią rozmaite funkcje biologiczne uzależnione od sekwencji nukleotydów. Sekwencje te łączą się ze sobą tworząc tzw. połączenia Watson'a-Crick'a. Aby wydobyć informację o charakterystykach topologicznych struktur RNA wygodnie jest zaprezentować taką strukturę w postaci diagramów łukowych [2]. Każdy taki diagram składa się z pewnej liczby podstaw b (backbones), Połączenia struktury RNA (czyli pary Watson'a-Crick'a), reprezentowane są natomiast przez półokręgi zaczepione w podstawach. Ich ilość oznaczona jest przez parametr n. W ten sposób każdej molekule RNA możemy przypisać konkretny diagram łukowy.



Rysunek 1: Reprezentacja struktury RNA. Rysunek z prac: [2, 3].

Każdy taki diagram, poprzez jego pogrubienie, wyznacza powierzchnię, która posiada $r \ge 1$ brzegów.



Rysunek 2: Związek diagramu łukowego z powierzchnią Riemanna. Diagram po lewej stronie posiada 2 podstawy oraz 4 łuki $(b=2 \quad n=4)$. Pogrubiona powierzchnia po prawej posiada 4 brzegi (r=4). Genus tej powierzchniq=0. Rysunek z prac: [2, 3].

Zgodnie z relacją b-n=2-2g-r, każdemu diagramowi można przyporządkować liczbę g określającą jego genus. Podsumowując, każda struktura RNA może być scharakteryzowana przez jej ilość podstaw (b), liczbę wiązań (n) oraz genus (g).

W chwili obecnej przeanalizowane zostały struktury RNA dzięki którym będzie można wykorzystać opracowane metody dla struktur bardziej skomplikowanych jakimi są białka.

4 Metodyka

Ścisła analiza modeli oparta o teorię macierzy losowych oraz topologiczne rekurencje; m.in. modele macierzowe będą analizowane przy użyciu metod wykorzystywanych w kwantowej teorii pola, opartych o rozwinięcia perturbacyjne, diagramy Feynmana, oraz tożsamości Warda. Ponadto zaprezentowane zostanie nowe, kategoryjne ujęcie diagramów łukowych. Przeanalizowane zostaną również ich formalne własności.

5 Efekt

Po realizacji projektu przewidujemy jego następujące efekty: Napisanie oprogramowania rozszerzającego możliwości obecnego programu służącego do wyznaczania topologicznej charakterystyki genusu dla białek. Przedstawienie otrzymanych wyników na międzynarodowych konferencjach wraz z ich opublikowaniem w czasopismach z listy filadelfijskiej. Otrzymanie kategorii opisującej diagramy chordowe wraz z ich matematycznymi własnościami.

Literatura

- [1] Michael Bon, Graziano Vernizzi, Henri Orland, and A. Zee. Topological classification of rna structures. *Journal of Molecular Biology*, 379, 07 2008. arXiv:q-bio/0607032.
- [2] Jørgen E. Andersen, Leonid O. Chekhov, R. C. Penner, Christian M. Reidys, and Piotr Sułkowski. Enumeration of rna complexes via random matrix theory. *Biochem. Soc. Trans.*, 41:652, 2013. URL: http://arxiv.org/abs/1303.1326, arXiv:1303.1326.
- [3] C. M. Reidys, Fenix W. D. Huang, J. E. Andersen, R. C. Penner, P. F. Stadler, and M. E. Nebel. Topology and prediction of rna pseudoknots. *Bioinformatics*, (27):1076–1085, 2011.