

# **Pythonowy-adapter-do-FR3D**

FR3D jest biblioteką matlaba (dostępne kody źródłowe). Celem projektu jest konstrukcja klas umożliwiających wykorzystanie biblioteki bezpośrednio z poziomu pythona.

## Projekt oparty jest o bibliotekę matlaba FR3D . Służy ona do

FR3D oznacza "Znajdź RNA 3D". Został on opracowany, aby znaleźć małe motywy RNA (od dwóch do 20 nukleotydów) w plikach PDB. Jest ono dostępne pod kodem Matlab / Octave, który został przetestowany na PC, Macintosh i UNIX. Najbardziej aktualna wersja jest dostępna na stronie "dev" oddział na Github pod tym linkiem, natomiast najbardziej stabilna wersja jest dostępna na stronie "Master" oddział na Github pod tym linkiem. Najbardziej aktualna dokumentacja jest pod koniec kursu materiałów struktury RNA 3D pod tym linkiem. WebFR3D, w wersji online FR3D, jest również dostępna. Nie można wyszukać aktualne nieredundantnych list, a wyniki będą dostępne w stabilnych adresów URL.

FR3D adnotacje wszystkich plików PDB zawierające RNA są dostępne od od BGSU pod tym linkiem lub NDB pod tym linkiem przez patrząc na strukturę zainteresowania. Możesz być także zainteresowany w katalogu RNA par zasad hostowane na NDB i FR3D Base-Phosphate Catalog.

Projekt został ograniczony do zaimplementowania funkcji 'zClasyfyPai'r oraz tych, które są niezbędne do jej poprawnego działania (cała biblioteka posiada ich 91). Także ostatecznie projekt wymagał napisania 16 funkcji.

# Funkcje z biblioteki FR3D zaimplementowane w pythonie w ramach proiektu:

- *xDiscrepancyFast*

oblicza różnicę pomiędzy Model i Cand, która jest tablicą NT jest.

Trzeba wziąć pierwiastek kwadratowy i podzielić przez liczbę nukleotydów po.

Gdy tylko różnica przekracza Model.RelCutoff obliczenie oporu.

Aktualna suma jest zwracana jako negatywna rozbieżność, przesunięty nagrywać, gdy obliczenie zatrzymany.

- *zAnalyzePair*

obliczeniowe odległości, kątów i kody klasyfikacyjne.

- *zAngle*

Oblicza kąt w B wykonane przez wektory AB i BC

- *zAngleOfRotation*

oblicza kąt obrotu macierzy rotacji R

Dobrym online odniesienia jest:

[http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/toolbox/physmod/mech/mech\\_review7.html](http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/toolbox/physmod/mech/mech_review7.html)

- *zAxisAngle*

oblicza się oś i kąt obrotu w położeniu ortogonalnym Macierz R, to sprawia, że ten punkt i kąt osi wynosić między -90 i 270 stopni

- *zAxisAngleRadians*

oblicza oś i kąt obrotu w macierzą ortogonalną, R

- *zBestRotation*

znajdzie obrót najmniejszych kwadratów punktów na punkty X Y

X i Y oznaczają n o 3 matryc zawierających rozmieszczenie punktów odpowiadających

Czym jest zwracany jest najlepiej dopasowana do  $Y = X * R'$

R jest macierz obrotu 3x3

- *zCheckCutoffs*

wyszukuje kategorie, których cutoffs obejmują daną przemieszczenia D, Normal, kąt Ang i Gap, zgodnie z z cutoffs w macierzy B

- *zCheckHydrogen*

Program ten jest generowany przez zGenerateCheckHydrogen.m w oparciu o plik Excela H\_bonding\_Atoms\_from\_Isostericity\_Table.xls stworzony przez Jesse Stombaugh.

zCheckHydrogen (NT1, NT2, klasa) oblicza kąty i odległości w wiązania wodorowe między dwoma nukleotydami zakładając ich oddziaływanie jest klasa

Program nazywa podstawy, które powinny być na N1 pochodzenia, drugi N2

- *zClassLimits*

przechowuje spodenki do klasyfikacji komputerowej parami w zależności od przemieszczenia, wektor normalny, i kąt obrotu. Takie jak, jest skarbnicą wiedzy eksperckiej klasyfikacji par.

- *zClassifyPair*

oblicza macierz obrotu, Axis, kąt i przesunięcie od podstaw w aktach, które są wystarczająco blisko, aby być ewentualnie interakcji, a następnie klasyfikuje interakcji

- *zClassifyPairs*

oblicza macierz obrotu, Axis, kąt i przesunięcie od podstaw w aktach, które są wystarczająco blisko, aby być ewentualnie interakcji, a następnie klasyfikuje interakcji

- *zDistance*

znajdzie euklidesowej odległości między rzędami A i B

- *zDistanceToExemplars*

oblicza odległość do każdego egzemplarzu dla danej pary nukleotydów

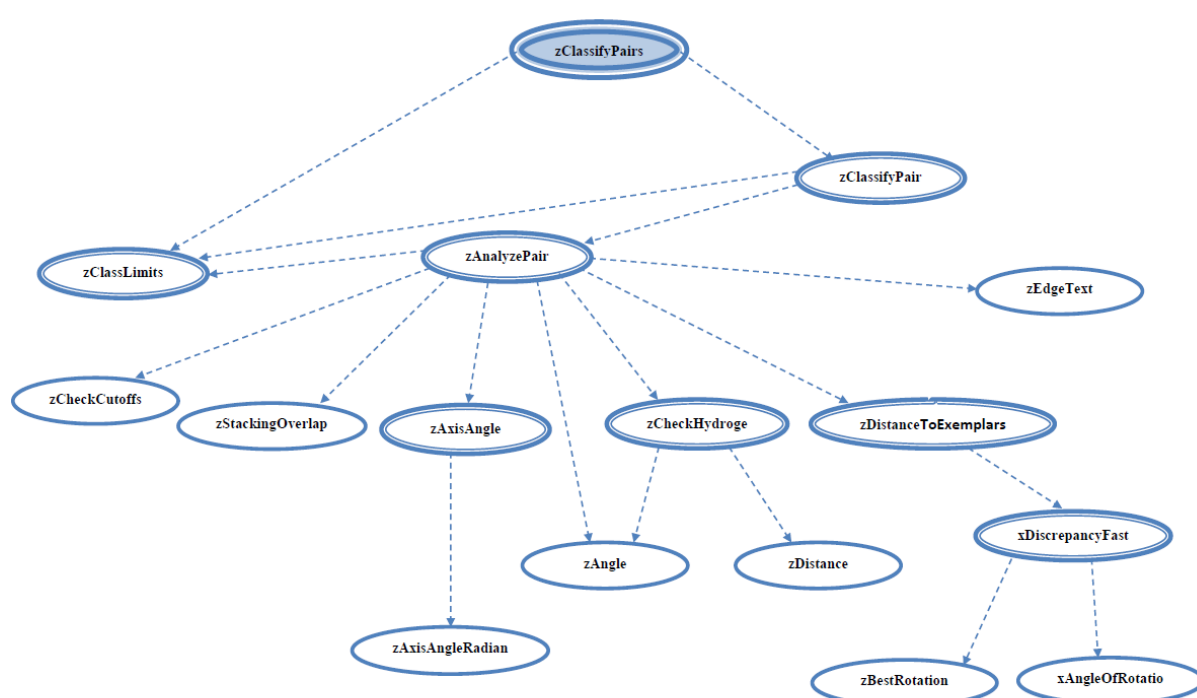
- *zEdgeText*

konwertuje kody wewnętrznych interakcji para na tekst

- *zStackingOverlap*

oblicza miarę zachodzenia na siebie nukleotydów N1 i N2, N2 przez rzutowanie na płaszczyznę N1.

# Graf relacji funkcji



Dodatkowe w projekcie została wykorzystana biblioteka NumPy posiadająca wiele odpowiedników funkcji matlaba.

NumPy jest podstawowym pakietem do obliczeń naukowych z pythona. W projekcie główne jego zastosowanie jest w obiektach Array, które można traktować jako macierze oraz operacje na nich jak np transponować je, mnożyć, itp.

funkcje wykorzystane w projekcie:

linki:

<https://docs.scipy.org/doc/numpy-dev/user/numpy-for-matlab-users.html>

<http://mathesaurus.sourceforge.net/matlab-numpy.html>

[http://scipy.github.io/old-wiki/pages/NumPy\\_for\\_Matlab\\_Users.html](http://scipy.github.io/old-wiki/pages/NumPy_for_Matlab_Users.html)