

## Specifikace projektu:

Cílem projektu je pokusit se identifikovat v relevantních datech z PDB proteiny se změněnou konektivitou. Práce bude zahrnovat otestování a příslušnou modifikaci vhodných nástrojů (především dříve připravený program ConnectId), dále výběr vhodných dat k analýze, provedení analýzy a řešení problému filtrace a interpretace výsledků.

---

### 1. Otestování programu nad modelovými daty

- Ověření správnosti programu.
- Ověření reálné rychlosti běhu.
- Modifikace kódu dle zjištěných problémů.

### 2. Výběr relevantních dat z PDB pro další zpracování

- Určení kritérií *vhodnosti* dat pro hledání změněné konektivity.
- Technika vyhledávání vhodných dat (nástroje, PISCES, CULLED...).

### 3. Spuštění nad vybranými daty

- Otestování vhodného nastavení parametrů.
- Odhad doby výpočtu nad konkrétními vybranými daty.
- Technické řešení spuštění výpočtu (na jakých strojích a jakým způsobem).

### 4. Filtrace výsledků

- V závislosti na výstupu upravovat nastavení výchozích parametrů.
- Zjistit, co jsou *dobré* výsledky a ty se pokusit vyfiltrovat.

### 5. Interpretace výsledků

- Zajímavé výsledky pro názornost vizualizovat (PyMol), vytáhnout příslušné sekvence apod.
- Tyto výsledky dále interpretovat – zda se nejedná jen o triviální případy (sekundární struktury apod.).