

МОЛБА

Школска 2024/25. година

ПОДАЦИ О ПОДНОСИОЦУ МОЛБЕ

Презиме:	Стевановић	Име:	Емилија
Е-пошта:	emilija.stevanovicc2810@gmail.com		
Број индекса:	1034/2024	Статус:	Буџет
Ниво студија:	Мастер академске студије		

Тип: пријава теме мастер рада

Број молбе: м1034/2024-1

Катедра: Катедра за рачунарство и информатику

Развој апликације за анализу растојања аминокиселина у протеинима"

САДРЖАЈ МОЛБЕ:

Значај теме и области:

Протеини су основни биолошки полимери састављени од аминокиселина, чији редослед и просторна структура одређују њихову функцију. Анализа растојања између аминокиселина у 3Д структури протеина пружа увид у просторне односе, стабилност и интеракције унутар протеина. Ова анализа је значајна за боље разумевање структуре и функције протеина, што може имати примену у биоинформатици, молекуларној биологији и развоју лекова.

Специфични циљ рада:

Циљ мастер рада је развој апликације за интуитивни приказ и анализу растојања између аминокиселина унутар протеинских структура на основу података о протеинима и растојањима коришћеним у [1]. Ово ће бити постигнуто кроз израду графовске базе података коришћењем система за управљање графовским базама података Neo4j и развој веб апликације засноване на оквиру Django. У графовској бази података, свака аминокиселина се представља као чвор са атрибутима: назив протеина, ланац, секундарна структура одређена програмом DSSP, структурна класа протеина (SCOP) и координате Са атома, док су везе између чворова дефинисане као растојања са пратећим атрибутима: тип, атоми и вредност растојања. Три типа растојања између аминокиселина у протеину ће бити коришћена: растојање између Са атома, минимално растојање не узимајући у обзир атом водоника и максимално растојање не узимајући у обзир атом водоника. Веб апликација ће омогућити: 1) визуелни приказ 3Д графа протеина заснованог на Са координатама, 2) филтрирање приказаних веза у изабраном протеину по различитим критеријумима као што су тип растојања, праг растојања, називи аминокиселина, секундарна структура аминокиселина, минимално растојање позиција аминокиселина у ланцу и ланац, 3) интерактивни приказ повезаних аминокиселина након одабира аминокиселине (чвора), 4) аутоматско израчунавање и приказ дескриптивних статистика за издвојена растојања као и 5) приказ различитих статистика за све протеине у бази података. Додатно, уколико нису задати називи аминокиселина, апликација ће пружати могућност приказа броја парова за све комбинације аминокиселина које задовољавају критеријуме у различитим облицима.

Остале битне информације:

Литература:[1] Maljković M. DistAA: Database of amino acid distances in proteins and web application for statistical review of distances. Computational Biology and Chemistry. 2019.

Комисија:

1. Ментор: Мирјана Маљковић Ружић
2. Председник: Ненад Митић

3. Члан: Саша Малков

ПРИЛОЗИ МОЛБИ:

Београд, 9. јун 2025.

(потпис)

(Попуњава надлежна особа)

☒ ОДОБРАВА СЕ

☐ НЕ ОДОБРАВА СЕ

13. јун 2025., Мирослав Марић

(датум, име, презиме и потпис)

ОБРАЗЛОЖЕЊЕ: