

GR–L04: PRACOVNÍ LIST

Jméno: _____

Úloha 1: Čtení vážené matice

Níže vidíš matici vzdáleností (v km) mezi čtyřmi městy (K, L, M, N). Znak „x“ znamená, že mezi městy nevede přímá cesta.

$$\begin{bmatrix} 0 & 4 & 1 & x \\ 4 & 0 & 2 & 5 \\ 1 & 2 & 0 & 3 \\ x & 5 & 3 & 0 \end{bmatrix}$$

1. Překresli tuto matici do podoby váženého grafu (uzly spoj čarou a napiš k ní vzdálenost).
2. Najdi „od oka“ minimální kostru (MST) – spoj všechna 4 města tak, aby součet kilometrů byl co nejmenší. Kolik kilometrů měří tvoje kostra?
3. Aplikuj Kruskalův „hladový“ algoritmus. Shoduje se tvoje řešení „od oka“ s algoritmickým řešením?

Prostor pro náskres grafu:

Úloha 2: Angiogeneze (růst cév)

Tkáň potřebuje vyživit 6 buněk (A, D, O, R, S, T). Tělo má omezené množství stavebních látek, proto chce buňky propojit cévní sítí tak, aby byla její **celková délka minimální** (tvoří *Minimální kostru*).

K dispozici jsou tyto možné cévní spojky (s délkou v mikrometrech, hrany jsou záměrně zpřeházené):

- D-S (6 μm)
- R-A (1 μm)
- O-T (7 μm)
- A-D (2 μm)
- R-D (4 μm)
- O-S (3 μm)
- S-T (4 μm)
- A-O (5 μm)
- D-O (2 μm)
- R-T (8 μm)

Prostor pro náskres sítě:

Zadání (aplikuj Kruskalův algoritmus):

1. Seřaď si všechny hrany podle velikosti od nejmenší:
2. Postupně vybírej hrany od té nejmenší a kresli si je do grafu.
Které hrany budeš muset BĚHEM postupu **zahodit**, protože by vytvořily cyklus (zkrat)?
.....
3. Nakresli výslednou cévní síť a spočítej její celkovou délku:
4. Pokud se podíváš na výsledný strom cév od jednoho konce ke druhému, jaké slovo tvoří propojené buňky?

Úloha 3: Fragment-Based Drug Design (design nového léku)

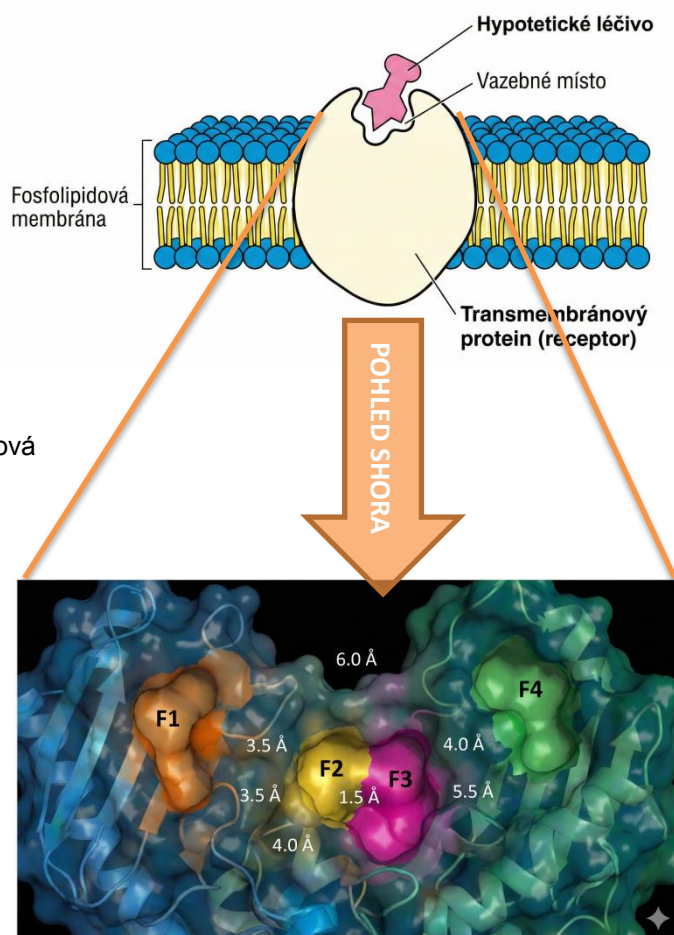
Farmakologové objevili v aktivním místě nepostradatelného receptoru patogenní bakterie 4 „kapsy“ (**farmakofory** F1, F2, F3, F4), do kterých se musí navázat molekula inhibitoru. Cílem je navrhnout co nejlehčí/nejkratší uhlíkovou kostru (tzv. linker), která tyto 4 záchytné body propojí do jedné superstruktury. Tak bude receptor zablokován a pro bakterii to bude mít fatální následky. Vzdálenosti mezi kapsami v Angströmech (Å) známe z rentgenové krystalografie:

- F1 > F2 = 3,5 Å
- F1 > F3 = 6,0 Å
- F1 > F4 = 2,0 Å
- F2 > F3 = 1,5 Å
- F2 > F4 = 4,0 Å
- F3 > F4 = 5,5 Å

Zadání:

1. Nakresli si **graf farmakoforů** F1, F2, F3, F4.
2. Navrhni efektivní **chemický linker** (použij Kruskalův algoritmus).
3. Které „vazby“ mezi kapsami vytvoříš, které naopak zahodíš a jaká bude celková délka tvé navržené molekuly v Å?

Prostor pro náčrt struktury léku:



Úloha 4: Odolnost vs. cena sítě

Diskutujte následující body ve dvojicích na základě výsledků z úlohy č. 3 a sepište své postřehy:

1. **Co se stane** s molekulou léku (Úloha 3), pokud se vlivem metabolismu **rozštěpí** (praskne) **jedna jediná vazba** ve tvém stromu (např. F1-F2)?
2. Jak bys **upravil molekulu** (za cenu přidání další vazby = více atomů uhlíku), aby **zůstala vcelku**, i když se jedna konkrétní vazba přeruší?
3. Jak by se toto pravidlo „**redundance**“ dalo aplikovat v **informatice** (HW, počítačové sítě) nebo v **medicině** (např. cévní zásobení mozku, srdce, prstů)?