

Część 1 – metody obliczeniowe

1. Omów zastosowanie rozkładów trójkątnych macierzy do rozwiązywania układów równań liniowych.
2. Omów wykorzystanie podobieństw do rozwiązywania zagadnienia własnego macierzy.
3. Omów zastosowanie pseudoodwrotności do znajdowania rozwiązania minimalnego układu równań liniowych.
4. Podaj i zwięźle omów przykład metody jednokrokowej i metody wielokrokowej stosowanych do rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych.
5. Porównaj metody gradientowe i bezgradientowe stosowane do znajdowania ekstremów funkcji; podaj przykłady metod naśladujących procesy zachodzące w przyrodzie lub technice.

Część 2

Krystalografia 1

1. Problem fazowy w krystalografii, zasada metody Pattersona i metod bezpośrednich
2. Metody przestrzeni rzeczywistej w rozwiązywaniu struktur krystalicznych. Idea metod 'symulowanego wyżarzania'
3. Metody przestrzeni rzeczywistej w rozwiązywaniu struktur krystalicznych. Metoda systematycznego przeszukiwania (grid search), wady, zalety.
4. Metoda 'charge flipping' w badaniach strukturalnych
5. Metody dyfraktometrii proszkowej w badaniach materiałowych; wady, zalety, możliwości.
6. Analiza strukturalna z użyciem pełnego profilu dyfrakcyjnego – metoda Rietvelda. Różnice pomiędzy dyfrakcją proszkową a dyfrakcją na monokryształach.

Część 3:

Krystalografia 2

1. Bazy PDB i CSD – struktury jakiego typu cząsteczek poszukujemy w tych bazach oraz jakie informacje strukturalne możemy uzyskać analizując dane z tych baz?
2. Wyjaśnij znaczenie i wpływ rozdzielczości, parametrów R oraz interpretacji map gęstości elektronowej na wiarygodność danych strukturalnych makromolekuł biologicznych oraz ich możliwe wykorzystanie do procedur dokowania molekularnego.
3. Wyjaśnij na czym polegają poszczególne typy procedur dokowania:
 - a. sztywnego
 - b. półelastycznego
 - c. elastycznego
4. Co to jest funkcja oceny i w jaki sposób na jej podstawie interpretujemy uzyskany wynik dokowania (na przykładzie funkcji PLP programu Gold).
5. Jakie typy niekwalencyjnych oddziaływań międzycząsteczkowych mogą stabilizować kompleks ligand-białko?