

Abstrakt: Cílem práce je navrhnout a popsat vhodný zhrubený model proteinu, na jehož základě bude studován protein-folding. Model bude implementován jako počítačový program, jeho vývoj v čase bude zajišťovat Hamiltonian Monte Carlo. Pomocí simulace na počítači bude zkoumán jak protein-folding samotný, tak veličiny, které jej charakterizují a podobnost nativní konfigurace skutečného a námi simulovaného proteinu.

Klíčová slova: skládání proteinů, počítačová simulace, Hamiltonian Monte Carlo, zhrubené modely