

UNIVERSITA' DI ROMA "LA SAPIENZA"

DIPARTIMENTO DI SCIENZE BIOCHIMICHE  
"A. ROSSI FANELLI"

TESI DI  
**DOTTORATO DI RICERCA**  
IN  
**BIOCHIMICA**

- VIII CICLO -

**Codifica e classificazione  
delle strutture proteiche.**

COORDINATORE:  
PROF. MAURIZIO BRUNORI

CANDIDATO:  
DR. PAOLO SIRABELLA

RELATORE:  
PROF. ALFREDO COLOSIMO

A.A. 1995/96

## Indice

### **Capitolo 1**

#### Introduzione e presentazione del lavoro

1.1	Introduzione	1.1
1.2	Presentazione del lavoro	1.2

### **Capitolo 2**

#### Tecniche di predizione delle strutture proteiche

2.1	Metodi statistici	2.2
2.2	Metodi connessionistici	2.3
2.3	Calcoli <i>ab initio</i>	2.8

### **Capitolo 3**

#### Materiali e metodi

3.1	Tecniche standard	
	3.1.1 Mappe autoorganizzanti di Kohonen	3.1
	3.1.2 Analisi delle componenti principali	3.13
	3.1.2 L'analisi dei clusters	3.15
3.2	Tecniche appositamente sviluppate	
	3.2.1 Codifica numerica delle strutture primarie e l'algoritmo del "Letto di Procuste"	3.17
	3.2.2 Algoritmo della "Buccia di cipolla"	3.23

### **Capitolo 4**

#### Risultati

4.1	Esperimento 1 : Ottimizzazione dei criteri di codifica per gli aminoacidi	4.1
4.2	Esperimento 2 : Test di performance del metodo	4.8
4.3	Esperimento 3 : Validazione oggettiva del metodo	4.13

### **Capitolo 5**

#### Discussione

#### **Referenze**

## Ringraziamenti:

Prof. A. Colosimo  
Università di Roma “La Sapienza”

Prof. M.C. Silvestrini  
Università di Roma “La Sapienza”

Dr. A. Giuliani  
Ist. Ric. Sen. - “Sigma Tau”

Dr. S. Pascarella  
Università di Roma “La Sapienza”

Dr. H. G. Holzütter  
Humboldt Universität - Berlin (FDR)