

1. Последовательность

MSTLTSVSGFPRIGQNRELKKIIEGYWKGANDLA AVKATAAELRAKHWRLQQAAGIDLIASNDFSYYDQMLDT
AILLNVIPQRYQRLAFDDQEDTLFAMA

название программ-предсказателей: AlphaFold2, OmegaFold

название программы выравнивателя: ProFit

2. Полученные ноутбуки с предсказанной структурой (формат *.ipynb)

Ноутбук AlphaFold2 лежит в AlphaFold2.ipynb

Ноутбук OmegaFold лежит в OmegaFold.ipynb

3. Полученные предсказания структур в формате PDB

Предсказание AlphaFold2 лежит в AlphaFold2.pdb

Предсказание OmegaFold лежит в OmegaFold.pdb

4. Полную выдачу программы выравнивания в виде PDB или иного формата, а также все логи и сопутствующие файлы

Вывод веб-версии:

ProFit Results

RMSD

FIT RMSD : 6.854
USER RMSD: 6.854

STATUS

HETATM records are: Included
Align gap penalty: 10
Align gap extend penalty: 2
Fitting will be: Normal (unweighted)
Reference structure Chains: A
Mobile structure Chains: A
Current numbering mode: Residue
Iterative zone updating: Off
Atoms being fitted: All
Atoms will be included regardless of B-value
Atom pairs will be included regardless of interatomic distance
Zones being fitted: All
Atoms for RMS calculation: All
Zones for RMS calculation: All

Coordinates written centred on: REFERENCE SET

Reference sequence:
MSTLTSVSGFPRIGQNRELKKIIEGYWKGANDLA AVKATAAELRAKHWRLQQAAGIDLIA
SNDFSYYDQMLDTAILLNVIPQRYQRLAFDDQEDTLFAMA
Mobile sequence:
MSTLTSVSGFPRIGQNRELKKIIEGYWKGANDLA AVKATAAELRAKHWRLQQAAGIDLIA
SNDFSYYDQMLDTAILLNVIPQRYQRLAFDDQEDTLFAMA

FITTED COORDINATES

[Reference Coordinates](#)

[Mobile Coordinates](#)

Однако было интересно попробовать и десктопную версию, результаты совпали:

```
PS C:\Users\MarkB\Downloads\profit\ProFitV3.1> .\profit.exe

      PPPPP      FFFFFFFF ii   tt
      PP  PP      FF           tt
      PP  PP rrrrrr   oooo  FF    ii  ttttt
      PPPPP  rr  rr oo  oo FFFF   ii  tt
      PP     rr     oo  oo FF     ii  tt
      PP     rr     oo  oo FF     ii  tt
      PP     rr      oooo  FF     ii  ttt

      Protein Least Squares Fitting

      Version 3.1

      Copyright (c) Dr. Andrew C.R. Martin, SciTech Software 1992-2009
      Copyright (c) Dr. Craig T. Porter, UCL 2008-2009

ProFit> REFERENCE AlphaFold2.pdb
      Reading reference structure...
ProFit> MOBILE OmegaFold.pdb
      Reading mobile structure...
ProFit> FIT
      Fitting structures...
      RMS: 6.854
ProFit> WRITE res.pdb
      Writing coordinates...
ProFit> |
```

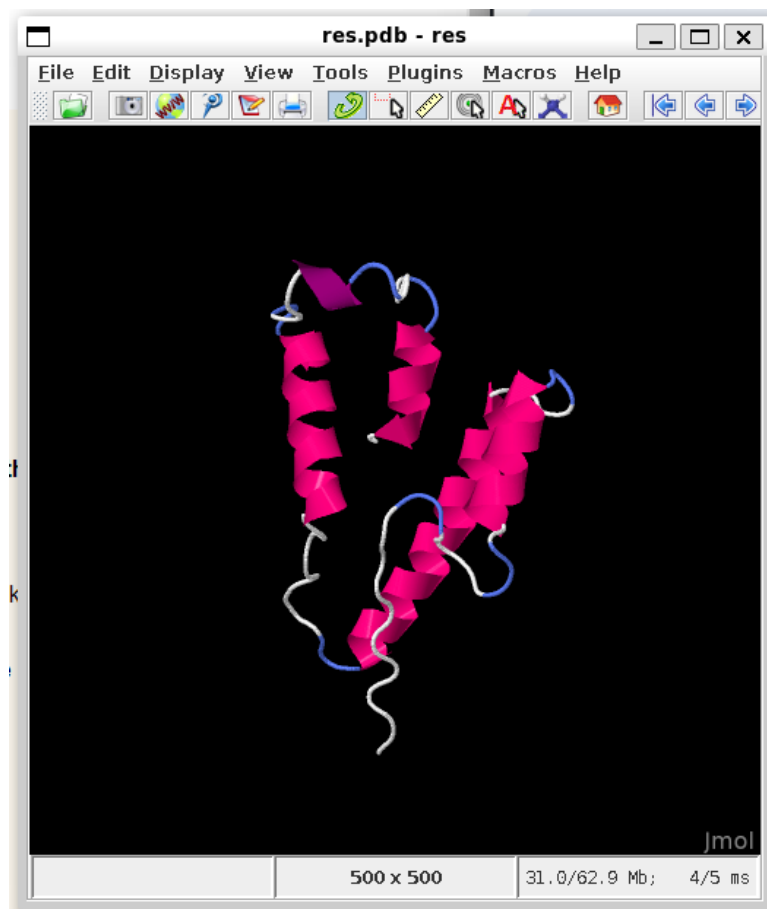
Результат выравнивания находится в **res.pdb**

5. Проект/сессию/иное из программы визуализации (например, в PyMOL - сессия *.pse)

Для визуализации я использую программу Jmol, которую изучал в 4 задания.

“Сессия” из программы Jmol находится в файле **state.jmol**, этот файл можно открыть из Jmol используя File -> Open.

6. Снимки экрана / запись видео с полученным раскрашенным выравниванием



7. Краткие выводы о совпадении полученных предсказаний в свободной форме

Совпадение полученных предсказаний может свидетельствовать о том, что либо модели обучались на одинаковых данных, либо имеют общий подход к обучению в целом. Важную роль играет длина первичной последовательности белка. В общем случае совпадение подтверждает корректность обоих предсказаний.