

Последовательность:

MSTLTSVSGFPRIGQNRELKKIIEGYWKGANDLAAVKATAAELRAKHW
RLQQAAGIDLIASNDFSYYDQMLDTAILLNVIPQRYQRLAFDDQEDTLFA
MA

Программы-предсказатели: RoseTTAFold2, AlphaFold2

Программа-выравниватель: TMAAlign

Полученные ноутбуки: RoseTTAFold2.ipynb, AlphaFold2.ipynb

Полученные предсказания структур:

alphafold2.pdb - AlphaFold2,

rosettafold2.pdb - RoseTTAFold2

Полную выдачу программы выравнивания: Папка TM-align

tm-align-results.txt - Текст, который вывела программа

tm-align.png - скриншот визуализации

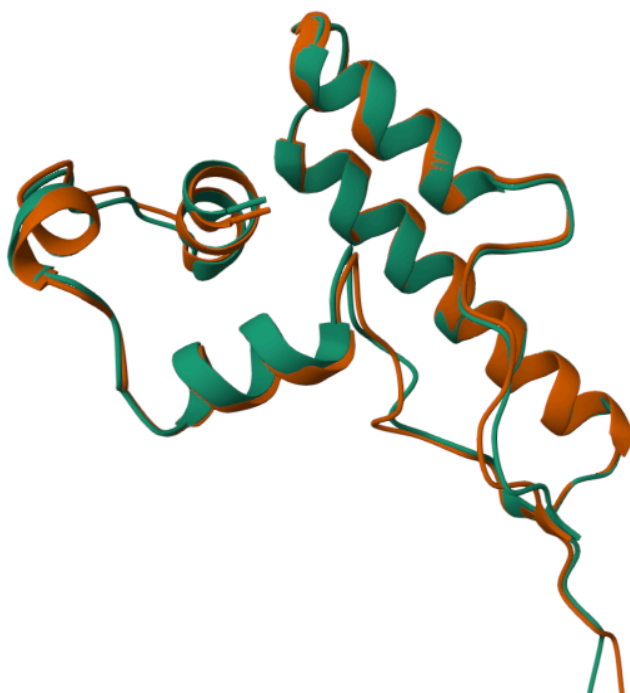
Папка pdbs - файлы, которые выдала программа

Сессия из программы визуализации:

Использовал <https://www.rcsb.org/3d-view/>

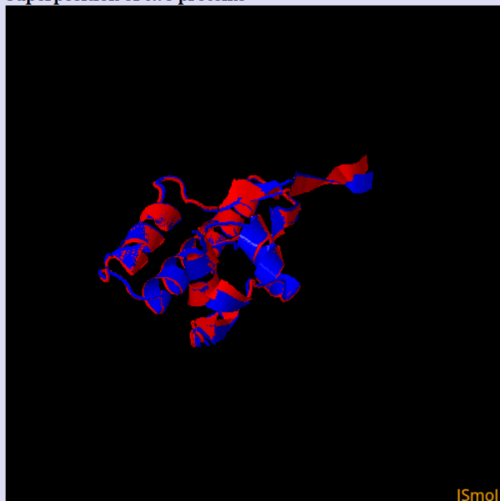
Файл сессии - session.molx

Полученное выравнивание:

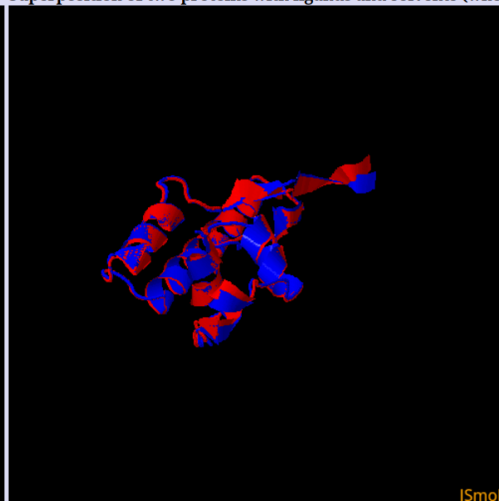


Visualization (Protein-1 in blue and Protein-2 in red)

Superposition of two proteins



Superposition of two proteins with ligands and solvents (when available)



Выводы о совпадении:

Предсказания структур практически идентичны. Об этом свидетельствует высокий TM-score, низкий RMSD и совпадение структур на визуализации