Факультет биоинженерии и биоинформатики

Межфакультетский курс

Лабораторная работа $N^{\circ}3$. OPM

Студент: Шутова Ю.М. Вариант: 3f3a

1. Работа с базой данных о положении белков в мембране ОРМ

Название: Leucine transporter LeuT (Лейциновый транспортер LeuT)

Организм: Aquifex aeolicus (бактерия, на русском без перевода)

Мембрана: Bacterial Gram-negative inner membrane (Бактериальная

грамотрицательная внутренняя мембрана)

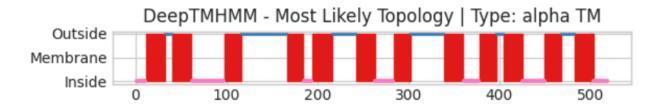
Количество трансмембранных элементов: 12 для α-спиралей

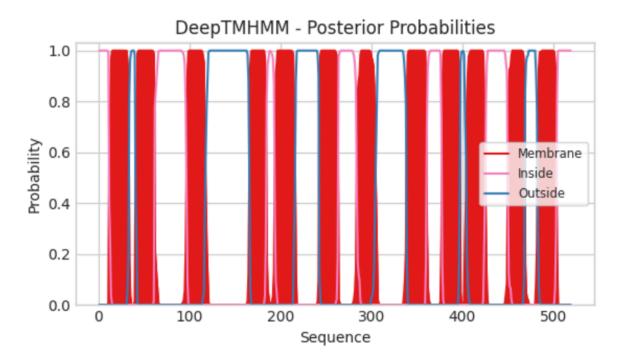
Transmembrane	12-29	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 🖮 Add
Transmembrane	41-61	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 奋 Add
Transmembrane	92-111	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 奋 Add
Transmembrane	166-185	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 奋 Add
Transmembrane	197-215	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 奋 Add
Transmembrane	243-268	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 奋 Add
Transmembrane	289-314	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 🖮 Add
Transmembrane	342-367	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 🛍 Add
Transmembrane	379-399	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 奋 Add
Transmembrane	405-427	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 奋 Add
Transmembrane	447-469	Helical Automatic Annotation	♣ Tools ▼ 奋 Add
Transmembrane	481-504	Helical Automatic Annotation	Add Tools ▼ Add

2. Работа с инструментом предсказания ОРМ

UnitProt: O67854 \cdot O67854_AQUAE

https://dtu.biolib.com/results/0dc98216-1a9d-4c6c-8abd-ac94d3631863/?token=gNiY7L4XMfo7vRgX





>3F3A 1|Chain | TM

MEVKREHWATRLGLILAMAGNAVGLGNFLRFPVQAAENGGGAFMIPYIIAFLLVGIPLMWIEWAMGRYGGAQGHGTTPAIFYL LWRNRFAKILGVFGLWIPLVVAIYYVYIESWTLGFAIKFLVGLVPEPPPNATDPDSILRPFKEFLYSYIGVPKGDEPILKPSL FAYIVFLITMFINVSILIRGISKGIERFAKIAMPTLFILAVFLVIRVFLLETPNGTAADGLNFLWTPDFEKLKDPGVWIAAVG QIFFTLSLGFGAIITYASYVRKDQDIVLSGLTAATLNEKAEVILGGSISIPAAVAFFGVANAVAIAKAGAFNLGFITLPAIFS QTAGGTFLGFLWFFLLFFAGLTSSIAIMQPMIAFLEDELKLSRKHAVLWTAAIVFFSAHLVMFLNKSLDEMDFWAGTIGVVFF GLTELIIFFWIFGADKAWEEINRGGIIKVPRIYYYVMRYITPAFLAVLLVVWAREYIPKIMEETHWTVWITRFYIIGLFLFLT FLVFLAERRRNHESAGTLVPR

Предсказания DTU трансмембранных спиралей: Chain TMhelix - координаты структур

```
3F3A_1|Chainoutside 34 40
3F3A 1|ChainTMhelix 41
                           61
3F3A 1|Chaininside
                     62
                        97
3F3A 1|ChainTMhelix 98 116
3F3A 1|Chainoutside 117 166
3F3A 1|ChainTMhelix 167
                         184
3F3A 1|Chaininside
                     185
                         193
3F3A 1|ChainTMhelix
                     194
                         216
                     217 242
3F3A 1|Chainoutside
3F3A 1|ChainTMhelix
                     243
                         263
3F3A 1|Chaininside
                     264
                         283
3F3A 1|ChainTMhelix
                     284
                         303
                     304
                         338
3F3A 1|Chainoutside
                     339
                         360
3F3A 1|ChainTMhelix
3F3A 1|Chaininside
                     361
                         377
3F3A 1|ChainTMhelix
                         397
                     378
3F3A 1|Chainoutside
                     398
                         404
                  405
                         425
3F3A 1|ChainTMhelix
3F3A 1|Chaininside
                  426
                         449
3F3A 1|ChainTMhelix
                     450
                         468
                         482
3F3A 1|Chainoutside
                     469
3F3A 1|ChainTMhelix
                     483
                          503
3F3A 1|Chaininside
                     504
                         519
```

```
TMhelix 2: 41 - 61

TMhelix 3: 98 - 116

TMhelix 4: 167 - 184

TMhelix 5: 194 - 216

TMhelix 6: 243 - 263

TMhelix 7: 284 - 303

TMhelix 8: 339 - 360

TMhelix 9: 378 - 397

TMhelix 10: 405 - 425

TMhelix 11: 450 - 468

TMhelix 12: 483 - 503
```

Первый конец - N-конец (inside 1-11) находится внутри (на цитоплазматической стороне мембраны). С-конец находится также (inside 1-11) внутри относительно мембраны.

ВЫВОД

Проведенный сравнительный анализ данных экспериментальной структуры белка LeuT (3F3A) и результатов его предсказания с помощью алгоритма DeepTMHMM демонстрирует высокую степень совпадения. Качественная картина строения белка предсказана абсолютно верно: алгоритм корректно идентифицировал наличие ровно двенадцати трансмембранных α-спиралей, что полностью соответствует установленной экспериментально архитектуре белка-транспортера из семейства NSS. Не было выявлено ни ложноположительных (лишних), ни ложноотрицательных (пропущенных) трансмембранных сегментов, а предсказания для всех двенадцати спиралей имеют зоны перекрытия с экспериментальными данными.

На количественном уровне наблюдаются незначительные расхождения в точном определении границ спиралей, которые составляют в среднем 2-5 аминокислотных остатков. Эти отклонения не являются случайными ошибками, а закономерно вытекают из фундаментального различия методов. Экспериментальная структура отражает точное пространственное положение атомов, в то время как DeepTMHMM, будучи статистической моделью, прогнозирует укладку белка исключительно на основе первичной последовательности, опираясь на такие параметры, как гидрофобность. Кроме того, на расхождения могут влиять частичная подвижность концевых участков спиралей и особенности кристаллической упаковки.

Таким образом, можно заключить, что современные методы предсказания, такие как DeepTMHMM, обладают исключительно высокой надежностью для определения общей топологии мембранных белков. Результаты предсказания с высокой точностью позволяют судить о количестве трансмембранных доменов и их относительном расположении в последовательности, что делает эти инструменты незаменимыми для первичного анализа в отсутствие экспериментальных структурных данных.