

Домашнее задание 5

Входные данные:

Обрабатываемая последовательность:

MDKGDVTALPMKKWFTTNYHYLVPEVEPSAEIKLNSTKPFDEFNEAKSLGVETK
PVFIGPYTFLKLARTPEAAELEIDKGLVNAVAAVYAEVLARFNDLG

1. Генерация структур

С использованием среды Google Colab были получены предсказания третичных структур:

- **OpenFold:** результат сохранен как openfold_prediction.pdb.
- **RoseTTAFold2:** результат сохранен как rosettafold2_prediction.pdb.

2. Парное выравнивание и визуализация

Сравнение полученных моделей выполнено инструментом jCE-CP (RCSB PDB).

- **Выравнивание:** результат сохранен как sequence_alignment.fasta
- Графическое отображение наложения структур с цветовой дифференциацией цепей (Chain A/B) приложено в файле molstar-image.png.

3. Сравнительный анализ

Геометрия полученных моделей демонстрирует высокую степень сходства, пространственная укладка практически идентична. Основное структурное различие заключается в длине последовательности: модель RoseTTAFold2 содержит два дополнительных остатка на N-конце, в то время как структура OpenFold фактически является её укороченной версией.