

Struktūrų analizė ir vaizdavimas

Nikita Pavliukovec

VU MIF, Bioinformatika, III kursas, 2024 m.

Įvadas

Pagrindinis užduoties tikslas buvo susipažinti su SCOP ir CATH baltymų klasėmis. Taip pat išmokti atvaizduoti pagrindines baltymų antrines struktūras su „Jmol“ programa. Bė to, tam kad įrodyti temos suvokimą reikėjo parašyti skriptą, kuris galėtų generuoti baltymų antrinės struktūros paveikslėlius, bei automatizuoti paveikselių kūrimą su „Make“.

Metodologija

Galutinis tikslas – paveikslėlių automatizuotas generavimas. Logiškai galiu išskirti darbą į 3 etapus:

Duomenų atsiuntimas:

Kiekvienam studentui buvo priskirti po 5 skirtingų PDB id. Iš bendros lentelės („assigned-PDB-ids.tsv“), pagal savo vardą paėmiau priskirtą man id ir užrašiau į atskirą failą („my_ids.txt“). Po to, atsiunčiau duomenis, naudojant savo skriptą („downloadPDB“). Duomenys patalpinau „inputs“ direktorijoje, bė to, kiekvienam failui atskirai užrašiau siuntimo logus į „logs“ direktorią.

Paveikslėlių generavimo skriptas:

Skriptas parašytas „bash“ programavimo kalba. Skriptas priima 3 parametrus:

„Jmol“ „select“ komandos argumentas, PDBx failo vardas, išvedimo failo vardas png arba pnm formatu. Taip pat, skriptui galima nurodyti 2 argumentus: „-r“ ir „-o“. Su „-r“ argumentu galima nurodyti failo vardą, kur bus užrašyti „Jmol“ posukio komandos. „-o“ argumentas nebuvo nurodytas laboratorinio darbo reikalavimose, t.r. kad šio argumento realizacija tai yra mano iniciatyva. „-o“ argumentas priima failo vardą su papildomais „Jmol“ komandomis, kurie gali būti naudingos geresniam antrinių struktūrų atvaizdavimui. Priimami komandos:

color (on|off| only), wireframe (only|on|off), calculate hbonds, zoom [0-9]+, hbonds [0-9]+, color (chain|cpk|structure), trace (on|off).

Automatizacija su „Make“:

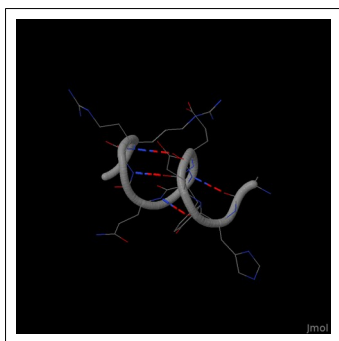
Paveikslėlių kūrimas su „Make“ yra realizuotas per scenarijų sistemą. Kievieno paveikslėlio scenarijus yra užrašytas atskirame faile „cases“ direktorijoje. Kievienas scenarijus, kaip privalomus parametrus priima paveikslėlių kūrimo skripto pavadinimą, kartu su keliu ir kelia iki „inputs“, „outputs“, „subOptionsFiles“ ir „rotationFiles“ direktorijas. Taip pat, makefile'as atutomatiškai testuoja programą per „tests“ scenarijų sistemą ir atsiunčia duomenis, pagal id sąrašą iš „my_ids.txt“ failo.

Rezultatai ir aptarimas

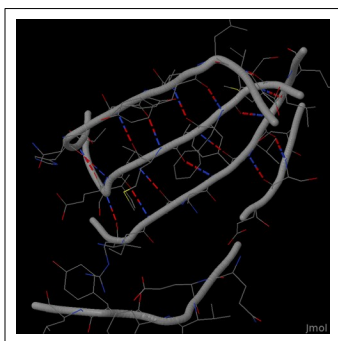
Prieš pereinant prie rezultatų aptarimo, manu verta pažymėti kaip baltymui yra priskiriama tam tikrą klasę. Galiu pažymėti 4 pagrindines SCOP klases: α (All alpha proteins), β (All beta proteins), α/β ir $\alpha+\beta$ (Alpha and beta proteins). Tam kad lengviau būtų suprasti kokiai klasei atitinka baltymas, manu verta susipažinti kaip atrodo antrinės struktūros sudedamosios dalys.

1 lentelė:

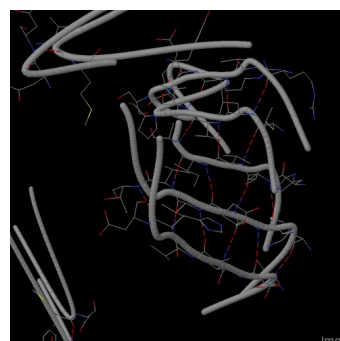
Baltymų antrinės struktūros elementai



Alfa-spiralė



Antilygiagretus beta-lakštas



Lygiagretus beta-lakštas

Dažniausiai baltymuose galime atrasti tik vieną spiralių tipą – 4_{13} spiralės (alfa), priešingai beta-lakštai buna 2 tipu. Juos galim lengvai atskirti pagal vandenilinių ryšių kryptį. Antilygiagrečių beta-lakštų vandeniliniai ryšiai yra išsidėstę stačiai, priešingai lygiagrečių beta-lakštų vandeniliniai ryšiai yra trapecijos formos. Taigi, dabar galime pereiti prie baltymų analizės ir priskirti kiekvienam atitinkamą SCOP klasę.

2 lentelė:

SCOP klasių vaizdavimas



id	7REZ	1XBD	3TBO	3T49	2NU7
SCOP klasė	α/β	$\alpha+\beta$	β	α	α/β
Grandinė	A	A	A	A	A

Kaip matome iš lentelės, turime 2 baltymus su a/b klasėmis, 1 su a+b kalse, 1 su a kalse ir 1 su b kalse. Su α ir β klasėmis yra viskas suprantama: Baltymas sudarytas vien tik iš alfa-spiralių arba iš beta-kloščių, tačiau su α/β ir $\alpha+\beta$ klasėmis gali kilti tam tikrų klausimų. Žinome, kad klasiai atitinka baltymai, kurie sudaryti ir iš alfa-spiralių ir iš beta-kloščių, tačiau esminis skirtumas yra tam kaip antinės struktūros elementai yra išsidėstę grandinyje. Jeigu elementai yra „kaitaliojami“ – tai α/β , jeigu elementai yra grupuojami, tarsi, atskirai – $\alpha+\beta$ klasė.

Šaltiniai:

World Wide Protein Data Bank. (2023). MYCOBACTERIUM ABSCESSUS TRNA METHYLTRANSFERASE IN COMPLEX WITH S-ADENOSYL-L-HOMOCYSTEINE. <https://doi.org/10.2210/pdb7rez/pdb>

World Wide Protein Data Bank. (1999). INTERNAL XYLAN BINDING DOMAIN FROM CELLULOMONAS FIMI XYLANASE D, NMR, 5 STRUCTURES. <https://doi.org/10.2210/pdb1xbd/pdb>

World Wide Protein Data Bank. (2021). Crystal structure of a type 3 CDGSH iron-sulfur protein.. <https://doi.org/10.2210/pdb3tbo/pdb>

World Wide Protein Data Bank. (2011). Crystal structure of truncated form of Staphylococcal Complement Inhibitor B (SCIN-B) at 1.5 Angstrom. <https://doi.org/10.2210/pdb3t49/pdb>

World Wide Protein Data Bank. (2007). C123aS Mutant of E. coli Succinyl-CoA Synthetase. <https://doi.org/10.2210/pdb2nu7/pdb>