

Tarea algoritmos3D-4

1) Elige una secuencia S de la superfamilia que elegiste para la tarea 3.

<http://scop.berkeley.edu/sunid=95078>

→

d1ps9a3

2) Usando HHpred (<http://toolkit.tuebingen.mpg.de/hhpred>) selecciona al menos una estructura molde o template que puedas usar para modelar S, asegurándote que tiene menos del 90% de identidad si fuera posible.

En HHpred tomamos 1ps9_A con una identidad de 81% y 3dme con identidad del 41% como template para modelar d1ps9a3

3) De acuerdo con el ejemplo de http://eead-csic-compbio.github.io/bioinformatica_estructural/node34.html y la documentación de MODELLER construye dos modelos M1 y M2 de S y comprueba su estima de calidad con DOPE.

Construimos los modelos M1(con 1ps9_A) y M2(con 3dme)

M1 DOPE score : -18396.277344

M2 DOPE score : -2298.385498

4) Evalúa la calidad de los modelos M obtenidos comparándolos con la estructura conocida, que descargaste de SCOP en la tarea 3. Para ello puedes usar MAMMOTH. En tu informe por favor indica el alineamiento obtenido, el RMSD y al menos una imagen de su superposición para brevemente comentar las diferencias que observas entre cada modelo y la estructura experimental.

Alineamiento **M1**

```
>P1;query1 sequence:query1:1 : :180 : :query1:Seq-Seq (1000):-1.00:-1.00
INTCIGCNQACLDQIFVGKVTSLVNPRACHETKMPILPAVQKKNLAVVGAGPAGLAFAINAAARGHQVTLF
DAH SEIGGQFNIAKQIPGKEEFYETLRYRMIIEVTGVTLKLNHTVTADQLQAFDETILASGI-----
-----
-GPNR ALAQPLIDSGKTVHLIGGCDVAMELDARRAIAQGTRLALEI* >P1;1ps9A structureX:1ps9:331
:A:671 :A:1ps9A:Seq-Seq (1000):-1.00:-1.00
INTCIGCNQACLDQIFVGKVTSLVNPRACHETKMPILPAVQKKNLAVVGAGPAGLAFAINAAARGHQVTLF
DAH
SEIGGQFNIAKQIPGKEEFYETLRYRMIIEVTGVTLKLNHTVTADQLQAFDETILASGIVPRTTPPIDGIDHPK
V
LSYLDVLRDKAPVGNKVIAIGCGGIGFDTAMYLSQPGESTSQNIAGFCNEWGIDSSLQAGGLSPQGMQIP
RSPR
QIVMLQRKASKPGQGLGKTTGWIHRTTLLSRGVKMIPGVSYQKIDDDGLHVVINGETQVLAVDNVVICAGQ
EPNR ALAQPLIDSGKTVHLIGGCDVAMELDARRAIAQGTRLALEI*
```

Alineamiento M2

```
>P1;query1 sequence:query1:46 : :80 : :query1:Seq-Prf (0001):-1.00:-1.00
LAVVGAGPAGLAFAINAAARGHQVTLFDAHSEIGG* >P1;3dmeA structureX:3dme:7 :A:41 :A:3dmeA:Seq-
Prf (0001):-1.00:-1.00 CIVIGAGVVGLAIARALAAGGHEVLVAEAAEGIGT*
```

MAMMOTH M1

E-value= 0.30552834E-07

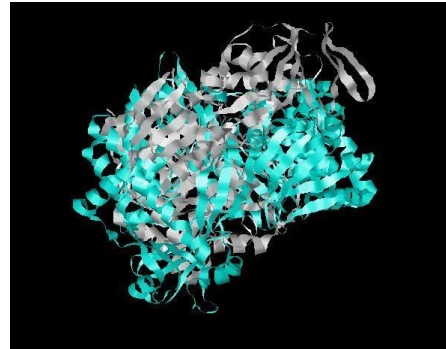
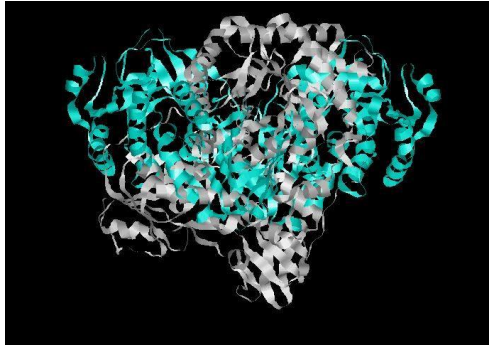
-ln(E)= 17.303808

Elisa Márquez Zavala
Eric Dilan Soriano Rosales
MAMMOTH M2

E-value= 0.30286607E-01

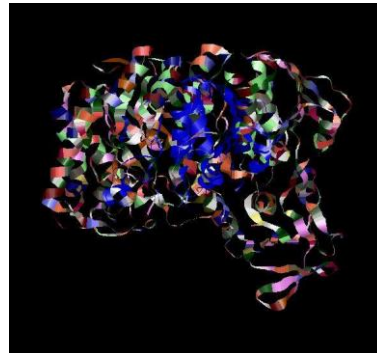
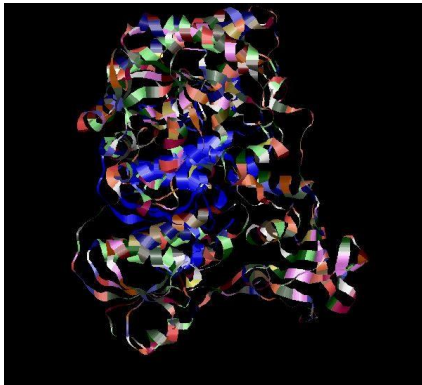
$\ln(E)$ = 3.4970497

El E-value de M1 es mucho mejor que el E-value de M2 ya que en esencia éste describe el ruido aleatorio del background.



1ps9_A(azul claro) vs d1ps9a3(blanco) RMSD= 3.41

En este modelo se ve que las estructuras son más parecidas y, como parecían predecir los datos, es el que más se acercó a la estructura real.



3dme(colores) vs d1ps9a3(azul oscuro) RMSD= 14.30

En este modelo se ve que las estructuras encajan mucho menos y, como parecían predecir los datos, no se acerca lo suficiente a la estructura real.