

1. W narzędziu XRNA porównujemy struktury używając 4 konfiguracji wprowadzonych danych: run with ETRNA pdb, run with ETRNA pdb and all basepairs, run with W. Scott Hammerhead Ribozyne oraz normal run.

2. Porównywane struktury wyrzucają identyczne dane – przykład z symulacji dla 2nbx:

a) run with ETRNA pdb - 1 chains , 22 bondpairs , (5 = helices\*2):

- label file:

AETN	1	C
AETN	2	G
AETN	3	C
AETN	4	G
AETN	5	G
AETN	6	G
AETN	7	G
AETN	8	U
AETN	9	G
AETN	10	G
AETN	11	A
AETN	12	G
AETN	13	C
AETN	14	A
AETN	15	G
AETN	16	C
AETN	17	C
AETN	17A	U
AETN	18	G
AETN	19	G
AETN	20	U
AETN	21	A
AETN	22	G
AETN	23	C
AETN	24	U
AETN	25	C
AETN	26	G
AETN	27	U
AETN	28	C
AETN	29	G
AETN	30	G
AETN	31	G
AETN	32	C
AETN	33	U
AETN	34	C
AETN	35	A
AETN	36	U
AETN	37	A

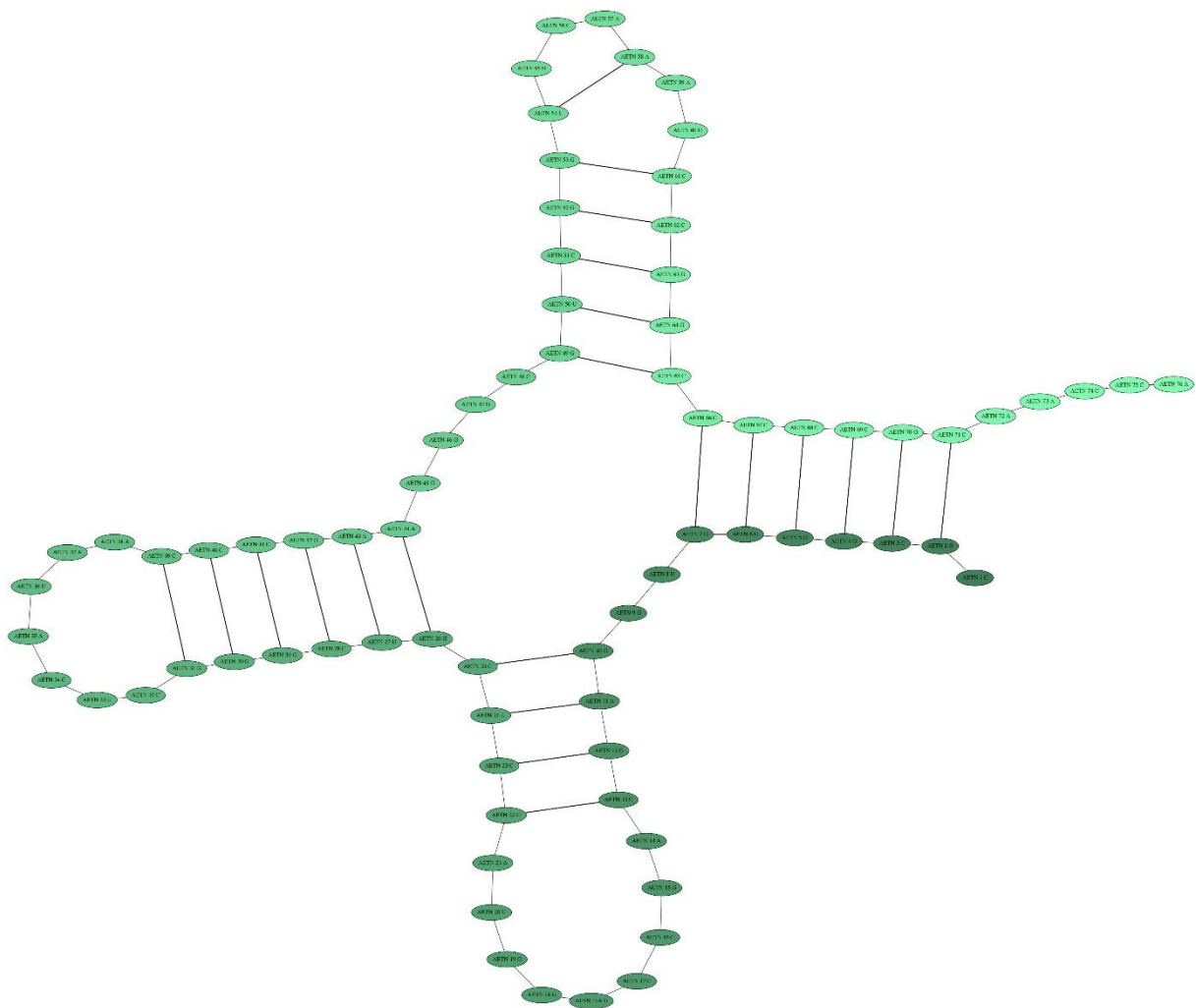
AETN	38	A
AETN	39	C
AETN	40	C
AETN	41	C
AETN	42	G
AETN	43	A
AETN	44	A
AETN	45	G
AETN	46	G
AETN	47	U
AETN	48	C
AETN	49	G
AETN	50	U
AETN	51	C
AETN	52	G
AETN	53	G
AETN	54	U
AETN	55	U
AETN	56	C
AETN	57	A
AETN	58	A
AETN	59	A
AETN	60	U
AETN	61	C
AETN	62	C
AETN	63	G
AETN	64	G
AETN	65	C
AETN	66	C
AETN	67	C
AETN	68	C
AETN	69	C
AETN	70	G
AETN	71	C
AETN	72	A
AETN	73	A
AETN	74	C
AETN	75	C
AETN	76	A

- base pair file:

1	AETN	2	GUA	AETN	71	CYT	XIX
2	AETN	3	CYT	AETN	70	GUA	XIX
3	AETN	4	GUA	AETN	69	CYT	XIX
4	AETN	5	GUA	AETN	68	CYT	XIX
5	AETN	6	GUA	AETN	67	CYT	XIX
6	AETN	7	GUA	AETN	66	CYT	XIX

8	AETN	10	GUA	AETN	25	CYT	XIX
9	AETN	11	ADE	AETN	24	URI	XX
10	AETN	12	GUA	AETN	23	CYT	XIX
11	AETN	13	CYT	AETN	22	GUA	XIX
14	AETN	26	GUA	AETN	44	ADE	VIII
15	AETN	27	URI	AETN	43	ADE	XX
16	AETN	28	CYT	AETN	42	GUA	XIX
17	AETN	29	GUA	AETN	41	CYT	XIX
18	AETN	30	GUA	AETN	40	CYT	XIX
19	AETN	31	GUA	AETN	39	CYT	XIX
21	AETN	49	GUA	AETN	65	CYT	XIX
22	AETN	50	URI	AETN	64	GUA	XXVIII
23	AETN	51	CYT	AETN	63	GUA	XIX
24	AETN	52	GUA	AETN	62	CYT	XIX
25	AETN	53	GUA	AETN	61	CYT	XIX
26	AETN	54	URI	AETN	58	ADE	XXIV

- grafika:



b) run with ETRNA pdb and all basepairs - 1 chains , 26 bondpairs , (9 = helices\*2):

-label file:

AETN	1	C
AETN	2	G
AETN	3	C
AETN	4	G
AETN	5	G
AETN	6	G
AETN	7	G
AETN	8	U
AETN	9	G
AETN	10	G
AETN	11	A
AETN	12	G
AETN	13	C
AETN	14	A
AETN	15	G
AETN	16	C
AETN	17	C
AETN	17A	U
AETN	18	G
AETN	19	G
AETN	20	U
AETN	21	A
AETN	22	G
AETN	23	C
AETN	24	U
AETN	25	C
AETN	26	G
AETN	27	U
AETN	28	C
AETN	29	G
AETN	30	G
AETN	31	G
AETN	32	C
AETN	33	U
AETN	34	C
AETN	35	A
AETN	36	U
AETN	37	A
AETN	38	A
AETN	39	C
AETN	40	C
AETN	41	C
AETN	42	G
AETN	43	A

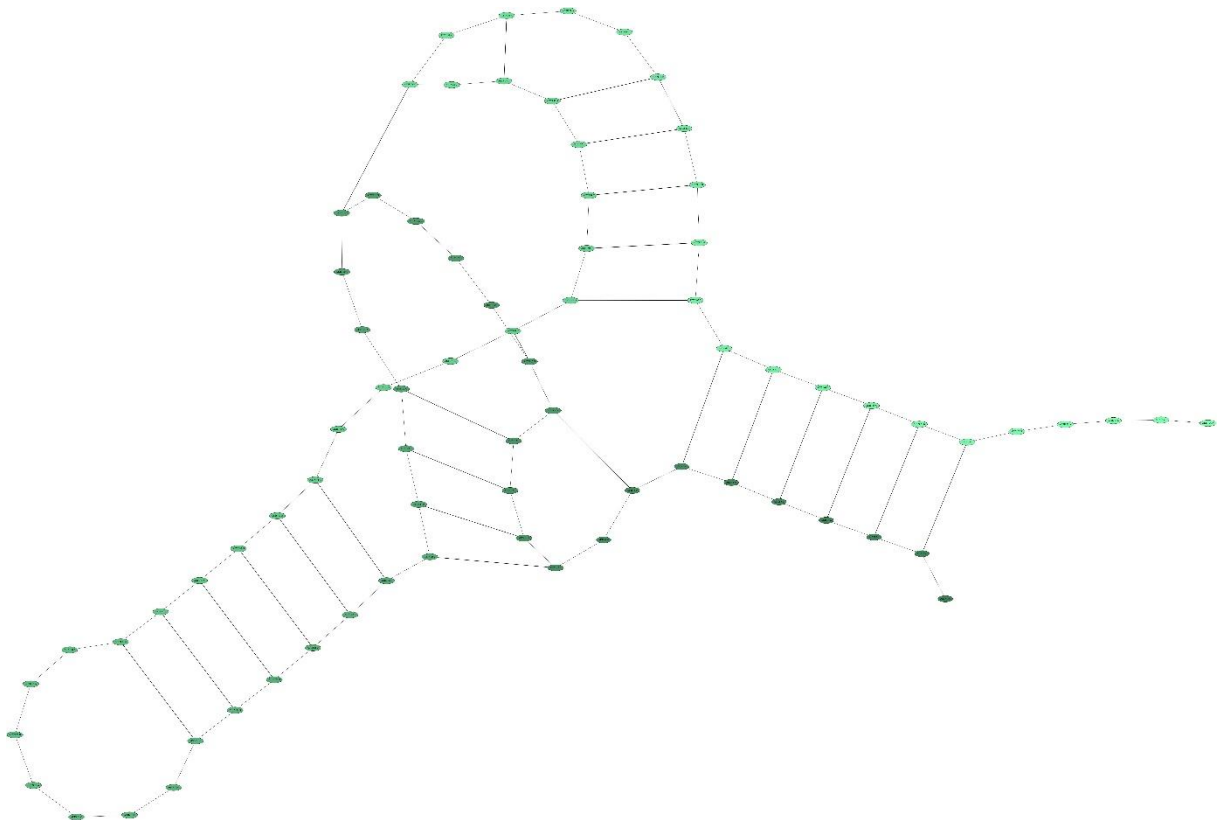
AETN	44	A
AETN	45	G
AETN	46	G
AETN	47	U
AETN	48	C
AETN	49	G
AETN	50	U
AETN	51	C
AETN	52	G
AETN	53	G
AETN	54	U
AETN	55	U
AETN	56	C
AETN	57	A
AETN	58	A
AETN	59	A
AETN	60	U
AETN	61	C
AETN	62	C
AETN	63	G
AETN	64	G
AETN	65	C
AETN	66	C
AETN	67	C
AETN	68	C
AETN	69	C
AETN	70	G
AETN	71	C
AETN	72	A
AETN	73	A
AETN	74	C
AETN	75	C
AETN	76	A

- base pair file:

1	AETN	2	GUA	AETN	71	CYT	XIX
2	AETN	3	CYT	AETN	70	GUA	XIX
3	AETN	4	GUA	AETN	69	CYT	XIX
4	AETN	5	GUA	AETN	68	CYT	XIX
5	AETN	6	GUA	AETN	67	CYT	XIX
6	AETN	7	GUA	AETN	66	CYT	XIX
7	AETN	8	URI	AETN	14	ADE	XXIV
8	AETN	10	GUA	AETN	25	CYT	XIX
9	AETN	11	ADE	AETN	24	URI	XX
10	AETN	12	GUA	AETN	23	CYT	XIX
11	AETN	13	CYT	AETN	22	GUA	XIX
12	AETN	15	GUA	AETN	48	CYT	XXII

13	AETN	19	GUA	AETN	56	CYT	XIX
14	AETN	22	GUA	AETN	46	GUA	VII_HW
15	AETN	26	GUA	AETN	44	ADE	VIII
16	AETN	27	URI	AETN	43	ADE	XX
17	AETN	28	CYT	AETN	42	GUA	XIX
18	AETN	29	GUA	AETN	41	CYT	XIX
19	AETN	30	GUA	AETN	40	CYT	XIX
20	AETN	31	GUA	AETN	39	CYT	XIX
21	AETN	49	GUA	AETN	65	CYT	XIX
22	AETN	50	URI	AETN	64	GUA	XXVIII
23	AETN	51	CYT	AETN	63	GUA	XIX
24	AETN	52	GUA	AETN	62	CYT	XIX
25	AETN	53	GUA	AETN	61	CYT	XIX
26	AETN	54	URI	AETN	58	ADE	XXIV

- grafika:



c) run with W. Scott Hammerhead Ribozyme - 2 chains , 23 bondpairs , (11 = helices\*2):

- label file:

A	2	G
A	3	A
A	4	U
A	5	G

A	6	U
A	7	A
A	8	C
A	9	U
A	10	A
A	11	C
A	12	C
A	13	A
A	14	G
A	15	C
A	16	U
A	17	G
A	18	A
A	19	U
A	20	G
A	21	A
A	22	G
A	23	U
A	24	C
A	25	C
A	26	C
A	27	A
A	28	A
A	29	A
A	30	U
A	31	A
A	32	G
A	33	G
A	34	A
A	35	C
A	36	G
A	37	A
A	38	A
A	39	A
A	40	C
A	41	G
A	42	C
A	43	C
B	1	G
B	2	G
B	3	C
B	4	G
B	5	U
B	7	C
B	8	U
B	9	G
B	10	G

B	12	A
B	13	U
B	14	C
B	15	C
B	16	A
B	17	A
B	18	U
B	19	C
B	20	DC

- base pair file:

1	A	2	G	B	19	C	XIX
2	A	3	A	B	18	U	XX
3	A	5	G	B	14	C	XIX
4	A	6	U	A	28	A	XXIV
5	A	8	C	A	26	C	XV
6	A	9	U	B	12	A	XX
7	A	11	C	B	10	G	XIX
8	A	12	C	B	9	G	XIX
9	A	13	A	B	8	U	XX
10	A	14	G	B	7	C	XIX
11	A	15	C	A	20	G	XIX
12	A	21	A	A	36	G	XI
13	A	22	G	A	35	C	XIX
14	A	23	U	A	34	A	XX
15	A	24	C	A	33	G	XIX
16	A	25	C	A	32	G	XIX
17	A	31	A	B	13	U	XXIV
18	A	39	A	B	5	U	XX
19	A	40	C	B	4	G	XIX
20	A	41	G	B	3	C	XIX
21	A	42	C	B	2	G	XIX
22	A	43	C	B	1	G	XIX
23	B	15	C	A	4	U	XVIII

- grafika:

Grafika się nie załadowała przy wielokrotnych próbach.

d) normal run:

Występuje błąd przy wielokrotnych próbach oraz różnorodnych plikach wejściowych – „problem with bp file, errcode23”.

3. Narzędzie uznajemy więc za niepoprawnie działające dla próbowanych struktur drugorzędowych, co skutkuje również brakiem funkcjonalności. Dodatkową wadą jest fakt, że bardzo często się zawiesza, co prowadzi do uporczywego uzyskiwania danych.