

Домашнее задание 5

Предсказание и парное выравнивание структур белков

Юрий Викторович Вяткин

E-mail: vyatkin@gmail.com

Факультет информационных технологий
Новосибирский государственный университет
Осенний семестр 2023

Домашнее задание 5

- Решение необходимо оформить в репозитории на github.com и выслать преподавателю на почту vyatkin@gmail.com с обязательным указанием ФИО слушателя, [ссылку на репозиторий](#)
- Срок выполнения задания – [3 недели](#) (01.12.23)
- Наличие выполненного задания и срок сдачи влияет на допуск к экзамену и оценку

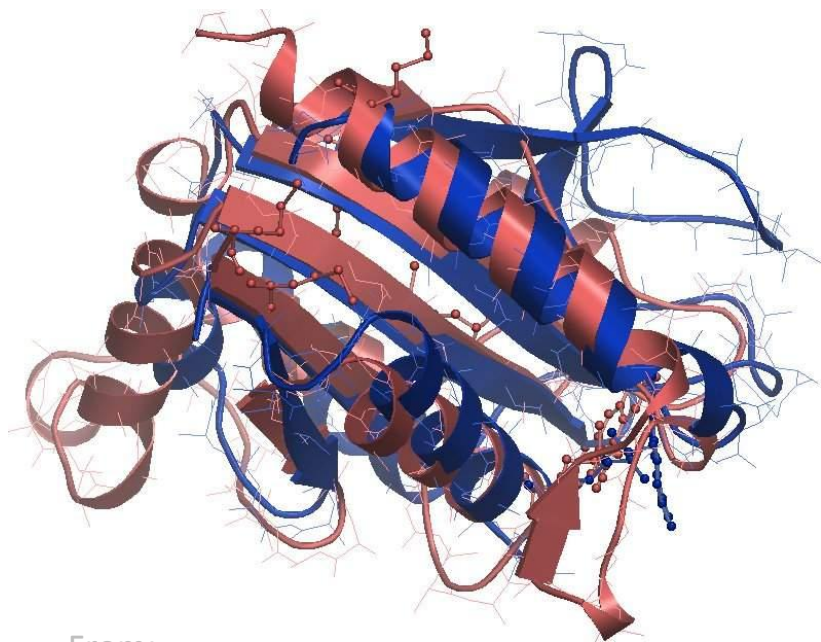
Домашнее задание 5

1. Для указанных в задании последовательностей получить **два** предсказания третичных структур в формате PDB с помощью указанных ноутбуков Google Colab. При необходимости завести аккаунт в Google Colab и сделать личную копию ноутбука
2. В указанном ПО **в веб-версии** построить парное (pairwise) выравнивание полученных структур (указывать везде Assembly 1, Chain A, **если ПО не работает - связаться с преподавателем**)
3. Зафиксировать все полученные программой выравнивания результаты (выдачу программы, полученные программой файлы, логи, ...)
4. Визуализировать полученное выравнивание структур в любой программе визуализации (из задания 5, PyMOL, <https://www.rcsb.org/3d-view/>, ...)
5. Выполнить раскраску выравнивания **двумя различными цветами** по цепям (Chain A,B,C,...) исходных структур
6. Сделать выводы о совпадении полученных предсказаний

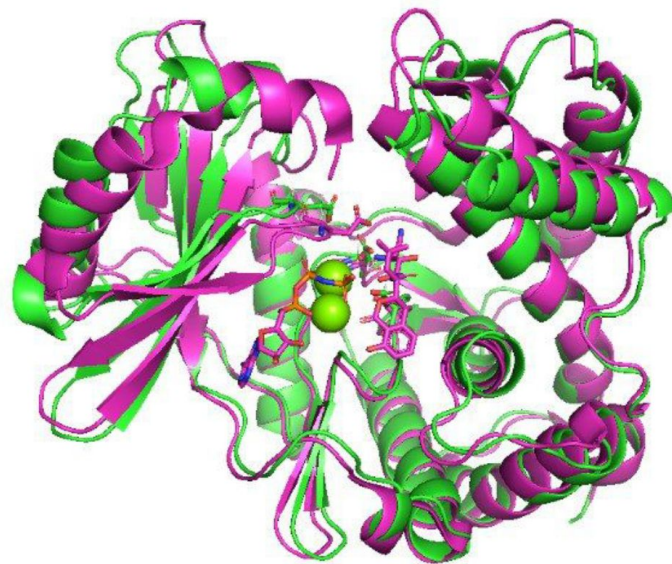
Домашнее задание 5

Необходимо получить и **выложить в репозиторий** результаты:

1. Последовательность, название программ-предсказателей и программы-выравнивателя
2. Полученные ноутбуки с предсказанной структурой (формат *.ipynb)
3. Полученные предсказания структур в формате PDB
4. Полную выдачу программы выравнивания в виде PDB или иного формата, а также все логи и сопутствующие файлы
5. Проект/сессию/иное из программы визуализации (например, в PyMOL - сессия *.pse)
6. Снимки экрана / запись видео с полученным раскрашенным выравниванием
7. Краткие выводы о совпадении полученных предсказаний в свободной форме



From:
Christoph Gille
Institut für
Biochemie, Charité
Berlin



From:
Юлия Беляева