

Домашнее задание №5

“Предсказание и парное выравнивание структур белков”

- 1) Возьмем первичную структуру белка:

MKGMLTGPVTILNWSWPREDITHEEQTKQLALAIRDEVLDLEAAGIKIIQIDEAAL
REKLPLRKSDWNAKYLDWAIPAFRLVHSAVKPTTQIHTHMCYSE

- 2) Получим два предсказания третичных структур в формате PDB с помощью инструментов:

- AlphaFold2
(<https://colab.research.google.com/github/sokrypton/ColabFold/blob/main/AlphaFold2.ipynb>);
- OmegaFold
(<https://colab.research.google.com/github/sokrypton/ColabFold/blob/main/beta/omegafold.ipynb>).

Полученные результаты и сами ноутбуки с кодом прилагаются.

- 3) Построим парное выравнивание полученных структур с помощью инструмента ProFit
(<http://www.bioinf.org.uk/software/profit/>). Полученное выравнивание прилагается (файл res.pdb).

Дополнительная информация, которую показывает ProFit:

HETATM records are: Ignored

Align gap penalty: 10

Align gap extend penalty: 2

Fitting will be: Normal (unweighted)

Reference structure Chains: A

Mobile structure Chains: A

Current numbering mode: Residue

Iterative zone updating: Off

Atoms being fitted: All

Atoms will be included regardless of B-value

Atom pairs will be included regardless of interatomic distance

Zones being fitted: All

Atoms for RMS calculation: All

Zones for RMS calculation: All

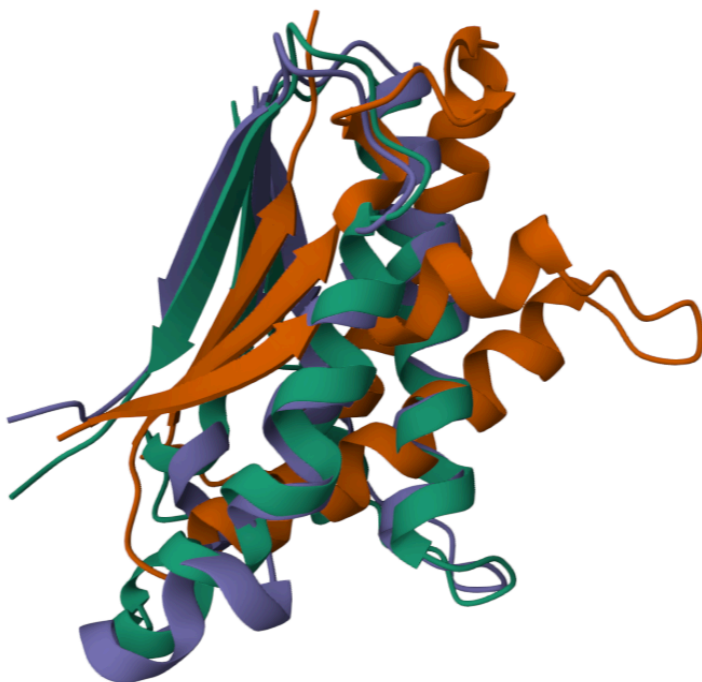
RMS: 4.178

- 4) Визуализируем полученное выравнивание при помощи инструмента Mol* 3D Viewer (<https://www.rcsb.org/3d-view/>):

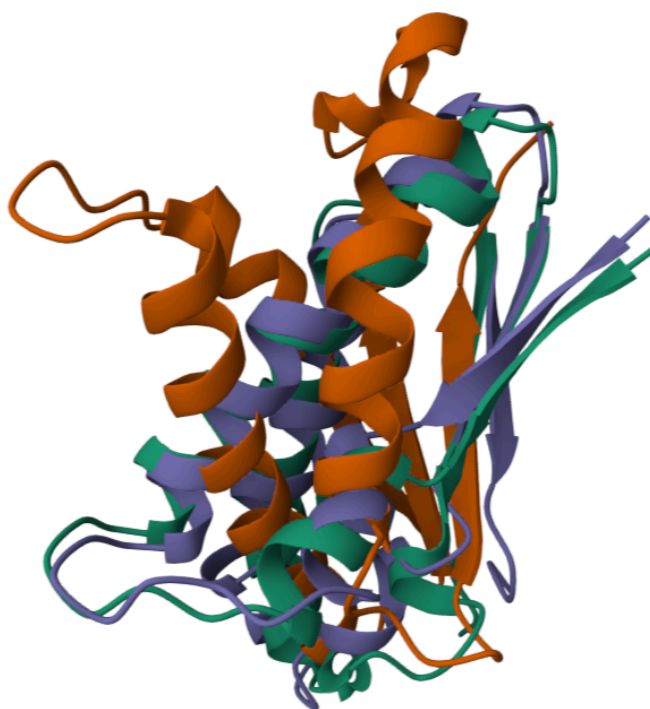


К сожалению, выполнить раскраску двумя различными цветами не получилось, т.к. инструмент видит только одну цепь А.

Выполним визуализацию предсказаний от AlphaFold2, OmegaFold и парного выравнивания:



С другого ракурса:

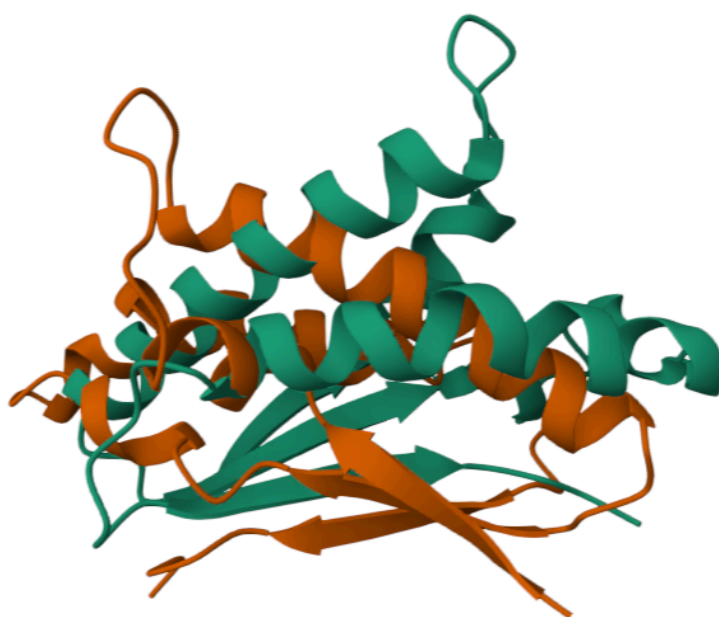


Здесь красным цветом изображен итог работы OmegaFold, синим цветом - AlphaFold2, зеленым цветом - парное выравнивание.

- 5) Дополнительно, для себя, визуализируем только итоги работ OmegaFold (зеленый цвет) и AlphaFold2 (красный цвет):



С другого ракурса:



- 6) Благодаря визуализации хорошо видно, что два полученных предсказания очень похожи, визуально их отличает лишь небольшие детали.