

GPCR BOUND AND UNBOUND STATE COMPARISON

PDB - 1FBP.PDB with F6P and AMP (yellow sphere) in the allosteric site of F16BPase tetramer – bound state

nodes = 335

average degree = 8.18507462687

avg clustering coeff = 0.553484276917

edges = 1371

average shortest path = 6.24077218697

BETWEENNESS CENTRALITY =

[0, 0, 317, 0, 513, 139, 241, 319, 916, 466, 218, 211, 577, 259, 172, 173, 768, 0, 0, 0, 188, 0, 241, 133, 430, 88, 483, 220, 387, 51, 499, 394, 234, 81, 83, 611, 339, 83, 87, 643, 1310, 303, 163, 0, 0, 229, 273, 0, 20, 3, 431, 628, 20, 50, 146, 1320, 24, 61, 977, 233, 74, 165, 727, 108, 151, 181, 716, 294, 0, 214, 30, 1081, 824, 414, 829, 578, 298, 634, 0, 129, 144, 0, 4, 597, 45, 201, 441, 21, 0, 0, 68, 422, 106, 217, 688, 636, 564, 594, 583, 725, 802, 646, 0, 731, 419, 0, 348, 125, 0, 0, 317, 18, 777, 451, 573, 276, 700, 615, 408, 535, 283, 326, 460, 266, 31, 30, 52, 8, 612, 207, 134, 0, 226, 269, 617, 318, 279, 557, 0, 159, 387, 248, 75, 828, 601, 317, 354, 740, 831, 0, 0, 0, 479, 393, 211, 524, 265, 556, 317, 0, 0, 262, 734, 282, 492, 848, 587, 770, 573, 0, 0, 0, 0, 153, 107, 406, 371, 25, 153, 9, 84, 406, 243, 819, 178, 113, 185, 68, 339, 397, 229, 307, 539, 488, 164, 0, 306, 0, 0, 436, 693, 181, 130, 331, 155, 112, 62, 732, 43, 92, 313, 657, 0, 99, 416, 0, 0, 0, 0, 415, 463, 968, 162, 46, 464, 532, 323, 21, 678, 22, 709, 417, 744, 180, 110, 153, 670, 180, 0, 0, 566, 257, 362, 655, 402, 186, 196, 367, 876, 0, 300, 0, 0, 77, 847, 412, 264, 999, 63, 584, 810, 384, 550, 568, 483, 233, 405, 201, 536, 949, 0, 196, 430, 27, 293, 324, 357, 573, 82, 425, 0, 0, 148, 704, 314, 112, 106, 51, 72, 40, 90, 385, 170, 74, 153, 271, 120, 1196, 242, 149, 661, 651, 157, 81, 362, 672, 191, 201, 391, 480, 90, 245, 479, 269, 0, 48, 315, 632, 318, 4, 4, 8, 8, 9, 2597, 332, 333, 330, 335, 332, 333, 0, 335, 0, 0, 0]

CLOSENESS CENTRALITY =

[0, 0.00038299502106472615, 0.00043535045711797995, 0.0004351610095735422, 0.0004950495049504951, 0.0004725897920604915, 0.0005356186395286556,

0.0005521811154058532, 0.0005868544600938967,
0.0005458515283842794, 0.0005216484089723526,
0.0005221932114882506, 0.0005396654074473826,
0.0004918839153959665, 0.0004666355576294914,
0.0004666355576294914, 0.0004901960784313725,
0.0004286326618088298, 0.0004280821917808219,
0.0004278990158322636, 0.00044072278536800354,
0.0004434589800443459, 0.00045558086560364467,
0.0004791566842357451, 0.0005277044854881266,
0.0005291005291005291, 0.0005257623554153522,
0.000536480686695279, 0.0005602240896358543,
0.000510986203372509, 0.0005347593582887701,
0.0005434782608695652, 0.0005608524957936063,
0.0005422993492407809, 0.0005428881650380022,
0.000576036866359447, 0.0005730659025787965,
0.0005617977528089888, 0.0005621135469364812,
0.0005885815185403178, 0.0006199628022318661,
0.0005420054200542005, 0.0005431830526887561,
0.0005385029617662897, 0.0005254860746190226,
0.0004692632566870014, 0.0004723665564478035,
0.0004510599909788002, 0.00041254125412541255,
0.0004901960784313725, 0.0005040322580645161,
0.0005672149744753262, 0.0005319148936170213,
0.0005376344086021505, 0.0005506607929515419,
0.0006269592476489029, 0.0005509641873278236,
0.0005567928730512249, 0.0006510416666666666,
0.0006203473945409429, 0.0005685048322910744,
0.0005763688760806917, 0.000641025641025641,
0.0005685048322910744, 0.0005656108597285068,
0.0005813953488372093, 0.0005995203836930455,
0.0005574136008918618, 0.0005141388174807198,
0.0005461496450027307, 0.0005344735435595938,
0.0005834305717619603, 0.0006086427267194157,
0.0005827505827505828, 0.0006056935190793458,
0.0006218905472636816, 0.0006369426751592356,
0.0006422607578676942, 0.0006325110689437065,
0.0005379236148466917, 0.0005549389567147614,
0.0004935834155972359, 0.0004972650422675286,
0.0005621135469364812, 0.0005592841163310962,

0.0005530973451327434, 0.0005405405405405405,
0.0005027652086475615, 0.00047505938242280285,
0.00046533271288971617, 0.0005065856129685917,
0.0005330490405117271, 0.0005640157924421884,
0.0005896226415094339, 0.000641025641025641,
0.0006583278472679394, 0.0006863417982155113,
0.0007117437722419929, 0.0007336757153338225,
0.0007451564828614009, 0.0007183908045977011,
0.0007062146892655367, 0.0006978367062107466,
0.0006635700066357001, 0.0006369426751592356,
0.0005621135469364812, 0.0005595970900951316,
0.0005385029617662897, 0.0005012531328320802,
0.000502008032128514, 0.0005770340450086555,
0.0005858230814294083, 0.0006858710562414266,
0.0007057163020465773, 0.0007446016381236039,
0.0007369196757553427, 0.0007830853563038371,
0.0007552870090634441, 0.0007352941176470588,
0.0007042253521126761, 0.0006540222367560497,
0.0006131207847946045, 0.0005767012687427913,
0.0005356186395286556, 0.0004904364884747426,
0.0004616805170821791, 0.0004616805170821791,
0.00046146746654360867, 0.0005344735435595938,
0.0005330490405117271, 0.0005399568034557236,
0.0005219206680584551, 0.0005431830526887561,
0.0005733944954128441, 0.0005711022272986865,
0.0005733944954128441, 0.0005952380952380953,
0.0006341154090044388, 0.0006138735420503376,
0.0006060606060606061, 0.0006653359946773121,
0.0006514657980456026, 0.0006675567423230974,
0.0007462686567164179, 0.0007656967840735069,
0.0007518796992481203, 0.0007320644216691069,
0.000744047619047619, 0.0006839945280437756,
0.0006325110689437065, 0.0005730659025787965,
0.0005913660555884093, 0.0006872852233676976,
0.0006934812760055479, 0.0007132667617689016,
0.0007092198581560284, 0.0007097232079489,
0.0007057163020465773, 0.0006666666666666666,
0.0006257822277847309, 0.0005871990604815032,
0.0006609385327164573, 0.0006949270326615705,

0.0006706908115358819, 0.0006706908115358819,
0.0006635700066357001, 0.0006373486297004461,
0.0006119951040391676, 0.0005452562704471102,
0.0005219206680584551, 0.0004662004662004662,
0.0004743833017077799, 0.0005252100840336134,
0.0005382131324004305, 0.000578368999421631,
0.0005803830528148578, 0.0006146281499692685,
0.0005988023952095808, 0.0006222775357809583,
0.0006277463904582549, 0.0006119951040391676,
0.0006485084306095979, 0.0006138735420503376,
0.0006544502617801048, 0.0005777007510109763,
0.0005780346820809249, 0.0005506607929515419,
0.0005470459518599562, 0.000555247084952804,
0.0005720823798627002, 0.0005793742757821553,
0.0005977286312014345, 0.0005934718100890207,
0.0005411255411255411, 0.000508646998982706,
0.00047058823529411766, 0.00048638132295719845,
0.0004623208506703652, 0.00045187528242205153,
0.0004928536224741252, 0.0004987531172069825,
0.0004948045522018803, 0.0004488330341113106,
0.0004697040864255519, 0.00046490004649000463,
0.00046533271288971617, 0.00043497172683775554,
0.0004757373929590866, 0.00044169611307420494,
0.00044169611307420494, 0.00043159257660768235,
0.0004623208506703652, 0.0004580852038479157,
0.00042826552462526765, 0.00042265426880811494,
0.00039277297721916735, 0.00037355248412401944,
0.00039872408293460925, 0.0004144218814753419,
0.0004488330341113106, 0.000474158368895211,
0.0005184033177812338, 0.0005385029617662897,
0.0005509641873278236, 0.000591715976331361,
0.0005991611743559018, 0.0006325110689437065,
0.0005834305717619603, 0.0006591957811470006,
0.0006261740763932373, 0.0007127583749109052,
0.0006963788300835655, 0.0006734006734006734,
0.0006724949562878278, 0.0006493506493506494,
0.0006353240152477764, 0.0006426735218508997,
0.0006207324643078833, 0.0006195786864931846,
0.000580046403712297, 0.0006273525721455458,

0.0006176652254478073, 0.0006365372374283895,
0.0006635700066357001, 0.0006418485237483953,
0.0006309148264984228, 0.0006075334143377885,
0.0005621135469364812, 0.0005580357142857143,
0.00049800796812749, 0.0005482456140350877,
0.0005353319057815846, 0.000544069640914037,
0.0005571030640668524, 0.0006157635467980296,
0.0006009615384615385, 0.0006605019815059445,
0.0006734006734006734, 0.0006784260515603799,
0.0006993006993006993, 0.0007627765064836003,
0.0007558578987150416, 0.0007358351729212656,
0.0007147962830593281, 0.0007751937984496124,
0.0007407407407407407, 0.0007262164124909223,
0.0007220216606498195, 0.0007451564828614009,
0.0007107320540156361, 0.0006770480704129993,
0.0006793478260869565, 0.000691085003455425,
0.0006357279084551812, 0.0006493506493506494,
0.0006430868167202572, 0.0006788866259334691,
0.0006253908692933083, 0.0006169031462060457,
0.0005662514156285391, 0.0005330490405117271,
0.0005913660555884093, 0.0006045949214026602,
0.0006770480704129993, 0.000651890482398957,
0.0006016847172081829, 0.0005995203836930455,
0.0005443658138268917, 0.0005509641873278236,
0.0005356186395286556, 0.0005361930294906167,
0.0005973715651135006, 0.0005817335660267597,
0.0006064281382656155, 0.0006108735491753207,
0.0006402048655569782, 0.0006045949214026602,
0.000689655172413793, 0.0006464124111182935,
0.0006493506493506494, 0.0006720430107526882,
0.0006153846153846154, 0.0005927682276229994,
0.0005376344086021505, 0.0005665722379603399,
0.0006090133982947625, 0.0005288207297726071,
0.0005263157894736842, 0.0005324813631522897,
0.0005356186395286556, 0.00047281323877068556,
0.000474158368895211, 0.000510986203372509,
0.00046382189239332097, 0.0004452359750667854,
0.00045024763619990995, 0.00041186161449752884,
0.0003562522265764161, 0.00032030749519538755,

0.0002909514111143439, 0.0002910360884749709,
0.00029129041654529564, 0.0002914602156805596,
0.00029163021289005544, 0.000321853878339234,
0.00029197080291970805, 0.0002920560747663551,
0.0002920560747663551, 0.00029214139643587495,
0.0002671653753673524, 0.0002670940170940171,
0.00026695141484249865, 0.0002668801708033093,
0.0002457606291472106, 0.0002455795677799607,
0.0002452182442373713]

PDB USED – 2FBP.PDB – UNBOUND STATE

nodes = 335
average degree = 7.94029850746
avg clustering coeff = 0.560507320209
edges = 1330
average shortest path = 6.23439091965

BETWEENNESS CENTRALITY =

[0, 0, 315, 0, 321, 365, 452, 435, 823, 719, 218, 211, 322, 249, 196, 197,
653, 0, 0, 0, 0, 228, 120, 242, 693, 18, 648, 100, 735, 51, 198, 166, 897,
81, 74, 220, 1097, 105, 98, 525, 1002, 320, 313, 0, 0, 632, 0, 0, 33, 26, 0,
0, 760, 152, 85, 1225, 20, 60, 1100, 231, 136, 204, 393, 100, 89, 194, 662,
264, 0, 171, 61, 953, 723, 395, 993, 594, 491, 763, 0, 84, 4, 0, 255, 23, 26,
214, 533, 25, 0, 0, 70, 377, 0, 176, 710, 364, 573, 618, 597, 462, 519, 673,
0, 782, 385, 0, 338, 48, 0, 0, 239, 112, 480, 915, 730, 177, 708, 780, 398,
626, 335, 289, 513, 239, 167, 8, 10, 158, 0, 71, 1042, 152, 115, 274, 304,
433, 164, 406, 242, 274, 258, 217, 83, 663, 763, 388, 740, 473, 728, 47, 0,
0, 453, 289, 296, 544, 260, 346, 468, 0, 0, 316, 669, 477, 517, 847, 579,
813, 567, 0, 0, 0, 0, 164, 85, 153, 366, 28, 0, 74, 104, 330, 247, 922, 171,
126, 190, 0, 277, 459, 234, 242, 549, 583, 166, 0, 206, 734, 0, 0, 289, 474,
44, 458, 40, 43, 43, 939, 31, 61, 293, 870, 0, 87, 666, 0, 0, 0, 6, 0, 816,
798, 111, 60, 395, 646, 301, 27, 493, 26, 804, 447, 489, 471, 127, 118,
695, 157, 0, 0, 488, 315, 662, 489, 337, 234, 207, 533, 123, 0, 13, 0, 89,
755, 572, 233, 408, 979, 56, 586, 842, 237, 515, 423, 493, 185, 826, 209,
534, 771, 0, 231, 413, 42, 300, 266, 306, 473, 120, 393, 0, 116, 255, 498,
335, 65, 255, 61, 147, 0, 52, 602, 170, 71, 390, 85, 122, 1006, 260, 500,
439, 484, 119, 85, 331, 791, 229, 249, 399, 414, 0, 317, 830, 0, 0, 0, 315,
632, 318, 6, 2, 8, 8, 20, 2583, 332, 333, 334, 331, 332, 333, 334, 0, 0, 0, 0]

CLOSENESS CENTRALITY =

[0, 0.0003590664272890485, 0.0004045307443365696,
0.0004045307443365696, 0.0004476275738585497,
0.00046253469010175765, 0.0005189413596263622,
0.0005385029617662897, 0.000585480093676815,
0.0005485463521667581, 0.0005213764337851929,
0.0005219206680584551, 0.0005379236148466917,
0.0004897159647404506, 0.00046511627906976747,
0.00046511627906976747, 0.0004803073967339097,
0.0004269854824935952, 0.0004201680672268908,
0.0004201680672268908, 0.0004182350480970305,
0.0004426737494466578, 0.0004608294930875576,
0.00048123195380173246, 0.0005350454788657035,
0.0004995004995004995, 0.0005254860746190226,
0.000505050505050505, 0.0005688282138794084,
0.0005390835579514825, 0.000555247084952804,
0.0005485463521667581, 0.0006079027355623101,
0.0005844535359438924, 0.0005847953216374269,
0.0005865102639296188, 0.0006561679790026247,
0.0005824111822947001, 0.0005820721769499418,
0.0005868544600938967, 0.0006134969325153375,
0.0005367686527106817, 0.0005359056806002144,
0.0005299417064122947, 0.0005173305742369374,
0.00046125461254612545, 0.0004601932811780948,
0.0004032258064516129, 0.0004032258064516129,
0.00046274872744099955, 0.0004572473708276177,
0.0004572473708276177, 0.0005257623554153522,
0.0005307855626326964, 0.0005446623093681918,
0.0006230529595015577, 0.0005482456140350877,
0.0005521811154058532, 0.0006472491909385113,
0.0006169031462060457, 0.0005668934240362812,
0.0005753739930955121, 0.0005955926146515784,
0.0005608524957936063, 0.0005302226935312832,
0.000554016620498615, 0.0005861664712778429,
0.0005555555555555556, 0.0005073566717402334,
0.0005411255411255411, 0.0005302226935312832,
0.0005820721769499418, 0.0006013229104028864,
0.0005878894767783657, 0.0006112469437652812,
0.0006257822277847309, 0.0006305170239596469,

0.000630119722747322, 0.0006038647342995169,
0.0005274261603375527, 0.0005319148936170213,
0.00046511627906976747, 0.0005347593582887701,
0.0005546311702717693, 0.0005543237250554324,
0.0005586592178770949, 0.0005461496450027307,
0.0004965243296921549, 0.0004761904761904762,
0.0004601932811780948, 0.0004923682914820286,
0.0005232862375719519, 0.0005605381165919282,
0.000578368999421631, 0.0006381620931716656,
0.0006489292667099286, 0.000689655172413793,
0.000700770847932726, 0.0007220216606498195,
0.0007112375533428165, 0.000691085003455425,
0.0006934812760055479, 0.0006724949562878278,
0.0006480881399870382, 0.0006285355122564425,
0.0005467468562055768, 0.0005473453749315818,
0.0005344735435595938, 0.0004938271604938272,
0.0005002501250625312, 0.0005672149744753262,
0.0005841121495327102, 0.0006775067750677507,
0.0006983240223463687, 0.0007451564828614009,
0.0007283321194464676, 0.0007710100231303007,
0.0007621951219512195, 0.0007423904974016332,
0.000697350069735007, 0.0006626905235255136,
0.0006056935190793458, 0.0005837711617046118,
0.0005154639175257732, 0.0004957858205255329,
0.000449034575662326, 0.0004438526409232135,
0.00046253469010175765, 0.00046189376443418013,
0.0004916420845624386, 0.0005379236148466917,
0.000550357732526142, 0.0005254860746190226,
0.000547645125958379, 0.0005546311702717693,
0.0005411255411255411, 0.0005599104143337066,
0.0006002400960384153, 0.0006165228113440197,
0.0006079027355623101, 0.0006587615283267457,
0.0006242197253433209, 0.000671591672263264,
0.0007380073800738007, 0.0007575757575757576,
0.0007462686567164179, 0.0007369196757553427,
0.0007304601899196494, 0.0006752194463200541,
0.0006289308176100629, 0.0005694760820045558,
0.0005878894767783657, 0.0006747638326585695,
0.000689655172413793, 0.0007072135785007072,

0.0007117437722419929, 0.0007027406886858749,
0.0007027406886858749, 0.000657030223390276,
0.0006045949214026602, 0.0005777007510109763,
0.000649772579597141, 0.0006949270326615705,
0.0006697923643670462, 0.0006662225183211193,
0.0006578947368421052, 0.0006273525721455458,
0.0006031363088057901, 0.0005379236148466917,
0.000508646998982706, 0.0004608294930875576,
0.0004710315591144607, 0.0005197505197505198,
0.0005341880341880342, 0.0005753739930955121,
0.0005763688760806917, 0.0005913660555884093,
0.0005927682276229994, 0.0005847953216374269,
0.0006002400960384153, 0.0006082725060827251,
0.000641025641025641, 0.0006086427267194157,
0.0006480881399870382, 0.0005717552887364208,
0.0005720823798627002, 0.0005443658138268917,
0.0005359056806002144, 0.0005494505494505495,
0.0005675368898978433, 0.0005861664712778429,
0.0005927682276229994, 0.000591715976331361,
0.0005446623093681918, 0.0005099439061703213,
0.0004784688995215311, 0.00048007681228996637,
0.0005115089514066496, 0.00045998160073597056,
0.00045024763619990995, 0.00048661800486618007,
0.00046382189239332097, 0.0004450378282153983,
0.0004623208506703652, 0.0004434589800443459,
0.0004438526409232135, 0.00042625745950554135,
0.00047505938242280285, 0.00043535045711797995,
0.00043535045711797995, 0.0004317789291882556,
0.00046533271288971617, 0.0004601932811780948,
0.00042122999157540015, 0.00041893590280687055,
0.00038955979742890534, 0.0003707823507601038,
0.0003707823507601038, 0.00041186161449752884,
0.0004108463434675431, 0.0004710315591144607,
0.0005235602094240838, 0.0005197505197505198,
0.0005488474204171241, 0.0005636978579481398,
0.0006002400960384153, 0.0005934718100890207,
0.0005787037037037037, 0.0006418485237483953,
0.0006253908692933083, 0.0007087172218284905,
0.0006574621959237344, 0.0006605019815059445,

0.0006738544474393531, 0.0006459948320413437,
0.0006064281382656155, 0.0006321112515802782,
0.0006127450980392157, 0.0006093845216331506,
0.0005701254275940707, 0.0006013229104028864,
0.0006053268765133172, 0.0006406149903907751,
0.00066711140760507, 0.0006353240152477764,
0.0006027727546714888, 0.0005945303210463733,
0.0005443658138268917, 0.0005208333333333333,
0.0004880429477794046, 0.0005167958656330749,
0.0004837929366231253, 0.0005446623093681918,
0.0005614823133071309, 0.0006067961165048543,
0.0005931198102016608, 0.000655307994757536,
0.0006666666666666666, 0.0006711409395973154,
0.0006934812760055479, 0.0007558578987150416,
0.0007374631268436578, 0.000727802037845706,
0.0007194244604316547, 0.0007530120481927711,
0.000723589001447178, 0.0007199424046076314,
0.0006988120195667365, 0.0007390983000739098,
0.0006925207756232687, 0.0006724949562878278,
0.0006738544474393531, 0.0006830601092896175,
0.0006321112515802782, 0.0006435006435006435,
0.0006353240152477764, 0.0006506180871828237,
0.0006199628022318661, 0.0006138735420503376,
0.000574052812858783, 0.000543773790103317,
0.0006031363088057901, 0.0005995203836930455,
0.000663129973474801, 0.000655307994757536,
0.0005878894767783657, 0.0005977286312014345,
0.0005382131324004305, 0.0005627462014631402,
0.0005333333333333333, 0.0005336179295624333,
0.0005984440454817474, 0.000585480093676815,
0.0006009615384615385, 0.0006134969325153375,
0.0006293266205160479, 0.0006142506142506142,
0.0006747638326585695, 0.0006357279084551812,
0.0006798096532970768, 0.0006596306068601583,
0.0006071645415907711, 0.0005861664712778429,
0.0005417118093174431, 0.0005704506560182544,
0.0006101281269066504, 0.0005361930294906167,
0.0005285412262156448, 0.0005336179295624333,
0.0005402485143165856, 0.00048007681228996637,

0.00047596382674916705, 0.00051440329218107,
0.0004666355576294914, 0.0004440497335701599,
0.0004520795660036166, 0.00045310376076121433,
0.0003866976024748647, 0.0003447087211306446,
0.00031104199066874026, 0.00031104199066874026,
0.00031133250311332503, 0.00031152647975077883,
0.00031191515907673113, 0.0003465003465003465,
0.00031210986267166043, 0.00031220730565095225,
0.0003123048094940662, 0.0003123048094940662,
0.00028392958546280523, 0.0002838489923360772,
0.00028376844494892167, 0.0002836074872376631,
0.0002598752598752599, 0.00025967281225655674,
0.0002594706798131811]