

Практикум 8. Домены

Задание 1. ДОМАК

В этом практикуме анализировалась структура гликоген синтазы (PDB ID: 3FRO, цепь A). Для разбиения структуры на домены для начала использовался алгоритм ДОМАК. Также был построен график, показывающий значение `split_value` ($\text{SplitValue} = (\text{intA}/\text{extAB}) \cdot (\text{intB}/\text{extAB})$) в зависимости от номера остатка (Рис. 1).

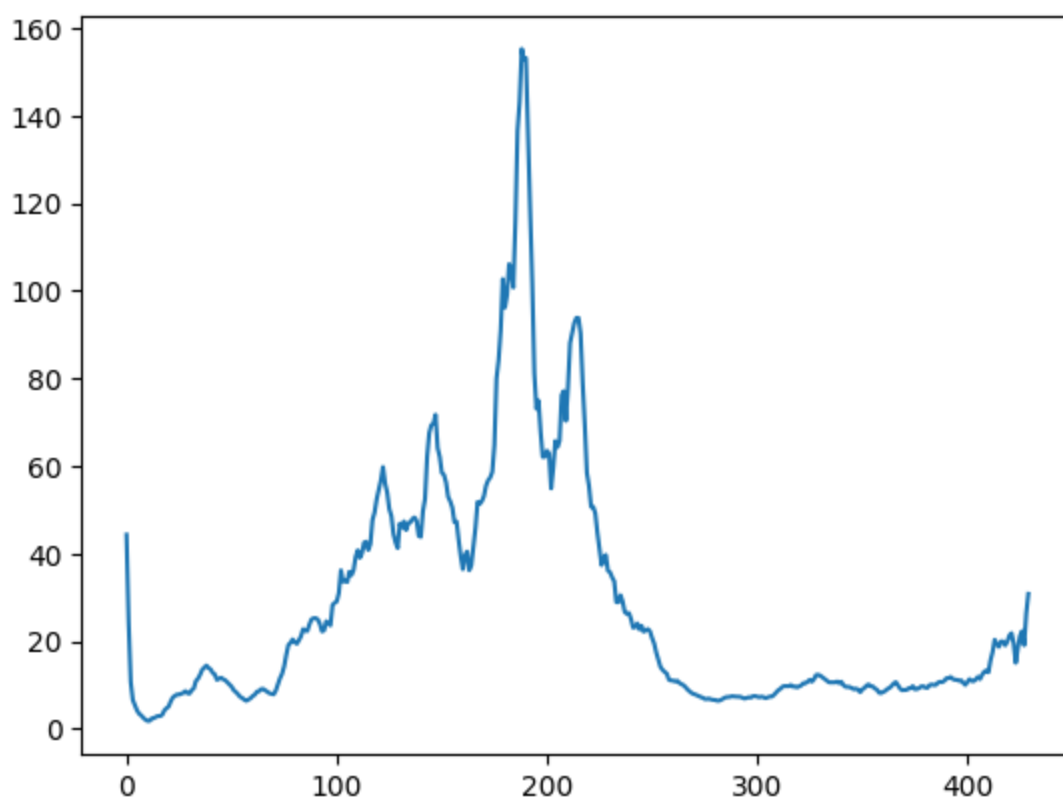


Рис. 1 Зависимость значения `split_value` от номера остатка

Номер остатка с наибольшим значением `split_value` - 188. Структура с разделением на домены по этому остатку показана на Рис. 2.

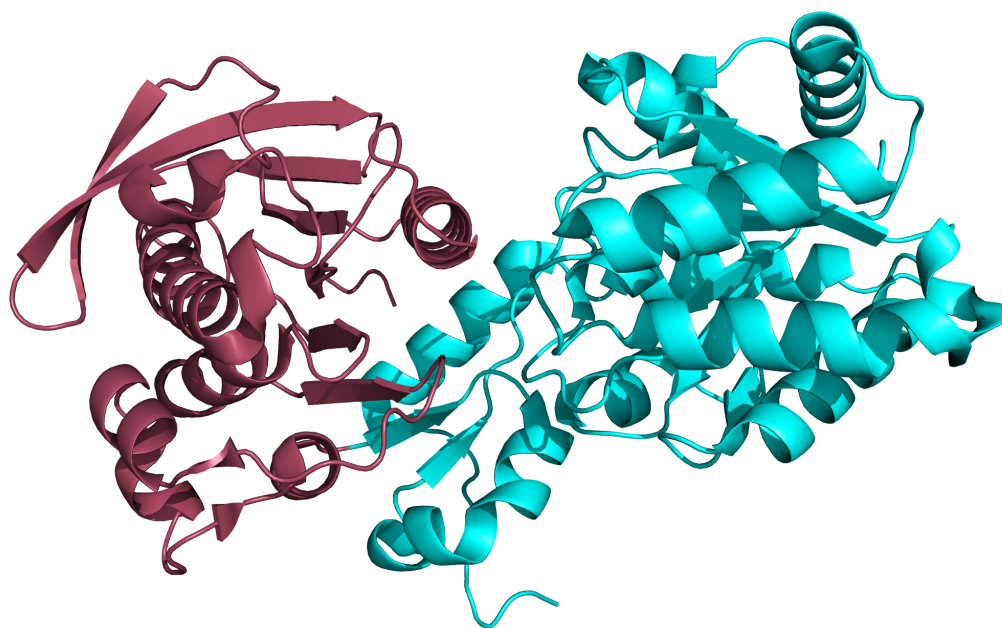


Рис. 2 Разбиение структуры на домены с помощью алгоритма DOMAK

Разделение выглядит разумным, визуально домены действительно отделимы. Граница проходит по петле.

Задание 2. SCOP и CATH

Также были рассмотрены определенные для изучаемого белка структурные домены из баз SCOP и CATH. Согласно базе SCOP граница проходит по 220му остатку, а CATH по 221му. Разделение изображено на Рис. 3. На рисунке видно, что к левому домену добавились бета-лист и альфа-спираль (изображены фиолетовым). Теперь граница проходит по самой длинной петле, так что разделение выглядит более правдоподобным. Если считать границей первого домена самое начало петли, то получится, что алгоритм DOMAK ошибся не столь критично, чуть больше чем на 10 остатков.

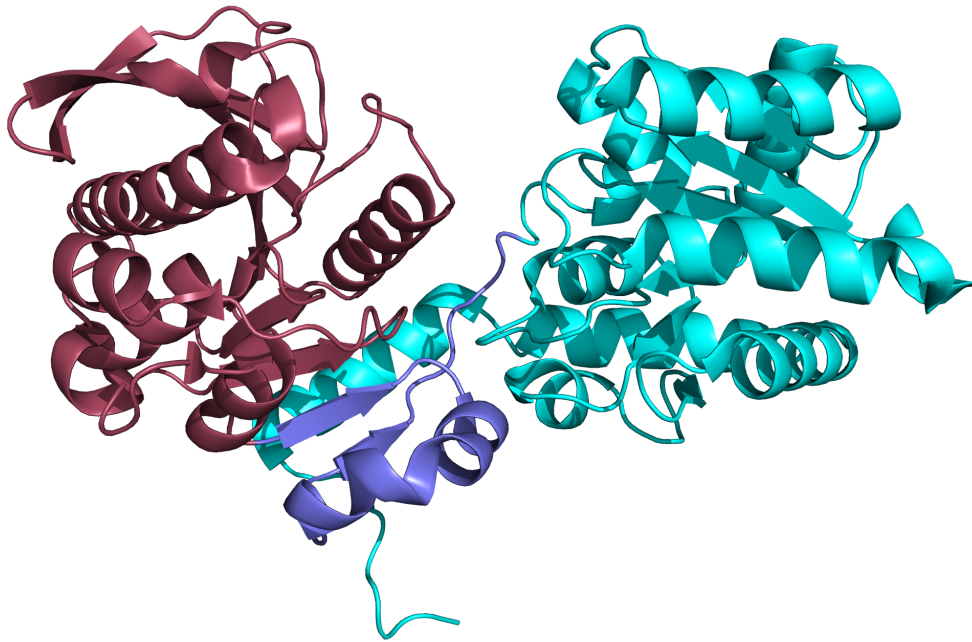


Рис. 2 Разбиение структуры на домены с помощью баз SCOP и CATH. Фиолетовым изображен сдвиг границ

Задание 3. InterPro

Наконец результат был сравнен с разметкой на домены согласно базе эволюционных доменов InterPro. Программа показала, что граница доменов проходит по 200му остатку, поэтому по сравнению с предсказанием алгоритма ДОМАК к левому домену присоединилась часть бета-слоя и часть альфа-спирали (изображены лиловым, Рис. 3). Таким образом InterPro показал что-то между результатом ДОМАК и SCOP/CATH, при этом все-таки разделение по альфа-спирали, а не петле выглядит менее логичным.

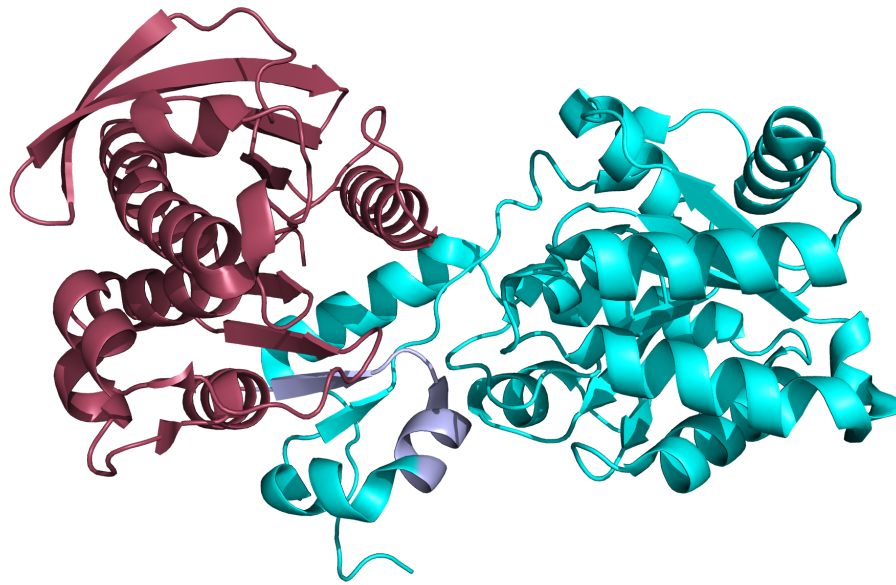


Рис. 3 Разбиение структуры на домены с помощью базы InterPro. Лиловым изображен сдвиг границ

Согласно базе InterPro левый домен ассоциирован с синтезом крахмала (гликотрансфераза), что согласуется с данными из Uniprot.