СРАВНЕНИЕ ПОДХОДОВ К ПРЕДСКАЗАНИЮ ФУНКЦИЙ БЕЛКОВ: ПО СТРУКТУРЕ И ПО ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ

**Основные определения**

Методы предсказания функций белков делятся на две основные группы: основанные на анализе структуры и последовательности. К структурным методам относятся:

1. «Нешаблонные» (template-free) -
* основаны исключительно на свойствах структуры белка интереса;
* анализируют физико-химические свойства поверхности для поиска важных сайтов;
* как правило, ищут области для связывания лигандов.

2) Остальные:

* «слепой» докинг;
* исследование физико-химических свойств аминокислотных остатков (рКа, гидрофобность и т.д.) для поиска сайтов связывания.

Эти методы хороши только для структур с высоким разрешением. Кроме того, подход осложняется проблемой неоднозначного соотношения укладки и функции: это приводит к появлению большого числа ложных положительных результатов - FP.

Общность укладки. Говорят, что белки обладают сходной укладкой (fold), если у них совпадает расположение основных элементов вторичной структуры, сходные элементы топологии. Такие белки могут иметь различия во вторичных структурах на периферии. Иногда различия могут наблюдаться даже в половине элементов структуры. Белки с общей укладкой не обязательно родственны в эволюционном плане: сходства структуры могут объясняться и физико-химическими свойствами.

Авторы этой статьи рассматривают некоторые аспекты функциональной аннотации по структуре: определение «карманов связывания», оценка молекулярной функции и сканирование связываний лигандов. Авторы также демонстрируют решение проблемы предсказания по последовательности. С использованием таких методов функцию предсказывают, основываясь на свойствах гомолога. Но возникает проблема: наличие «сумеречных» (twilight) зон, c низким уровнем сходства. Авторы статьи предлагают решить этот вопрос с помощью трединга (threading).

**Threading**

Это метод для моделирования структур белков, имеющих укладку, как у некоторых других (известных) структур, но для чьих гомологов структура не определена.

Принцип: остаток за остатком выравниваем целевую последовательность и образец. Ищем образец с наилучшим выравниванием. Строим модель структуры по последовательности наилучшего образца. Таким образом, трединг сочетает элементы анализа как последовательностей, так и структур.

Допущения:

1. Способов укладки в природе немного – около 1300
2. У 90% новых структур есть соответствующие им ранее определенные, с такой же укладкой.

Алгоритм

1. Из структурных баз данных (PBD, SCOP, CATH) выбрать белки, которые будут служить образцами.
2. Определить функцию счета, которая позволит сравнивать целевой белок и образцы, основываясь на знании о соотношении последовательностей и функций этих белков. Хорошая функция счета должна учитывать окружение, парное выравнивание, сходства и различие структур, штрафы за гэпы.
3. Провести выравнивание целевой последовательности с каждым из образцов и, таким образом, найти лучшее значение функции счета.
4. Выбрать лучшее выравнивание. Создать модель целевой структуры, сопоставляя атомы остова целевого белка соответствующим (по выравниванию) атомам выбранного образца.

Трединг и моделирование по гомологии

И тот, и другой метод основаны на использовании образцов-шаблонов. В плане технологии предсказания между ними нет четкой границы. Но структуры целевых белков разные. При моделировании по гомологии известна структура гомолога; задача трединга сложнее: смоделировать белок, для которого известны не гомологи, а структуры со сходной укладкой.

**Findsite**

Известно, что внутри белкового семейства глобальная укладка более консервативна, чем последовательность. Таким образом, при низком сходстве сравниваемых последовательностей преимущество получают методы предсказания функции по структуре. Рассмотрев данные SCOP по известным белкам, можно прийти к выводу: белки со сходной укладкой связывают субстрат на сходных участках, т.е. даже у очень далеких по гомологии белков могут быть сходные сайты связывания. На этом наблюдении основан FINDSITE - алгоритм предсказания молекулярной функции и сайтов связывания лигандов на основе структуры и эволюции.

Пример

На рис.1 показана 3D структура белка человека **FIDGETIN-LIKE PROTEIN 1,** участвующего в обмене АТФ, дифференцировке остеобластов и их пролиферации, отрицательной регуляции апоптоза и других процессах**.** Пространственные структуры его гомологов не определены, зато известны структуры белков с аналогичной укладкой. В статье приведены данные о моделировании этого белка в рамках CASP8.

****

**Рис.1**

Для образцов-шаблонов и этого белка были построены выравнивания, на этой схеме, в зависимости от качества отмеченные зеленым, желтым, красным или белым.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |
| --- |
| **#** |

 |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |
| --- | --- |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/up.gif |  |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/down.gif |  |

 | **Name** |

 |   |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |
| --- | --- |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/up.gif |  |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/down.gif |  |

 | **AL0\_P** |

 |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |
| --- | --- |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/up.gif |  |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/down.gif |  |

 | **AL4\_P** |

 |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |
| --- | --- |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/up.gif |  |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/down.gif |  |

 | **ALI\_P** |

 |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |
| --- | --- |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/up.gif |  |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/down.gif |  |

 | **RMSD** |

 |
| 1   | [T0422TS296\_1\_2](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS296_1_2.png | 79.36 | 93.24 | 93.24 | 1.92 |
| 2   | [T0422TS182\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS182_1.png | 78.29 | 92.17 | 92.17 | 1.97 |
| 3   | [T0422TS057\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS057_1.png | 78.29 | 88.61 | 88.61 | 1.69 |
| 4   | [T0422TS138\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  |  | 77.94 | 92.17 | 92.17 | 1.94 |
| 5   | [T0422TS149\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  |  | 77.58 | 88.97 | 88.97 | 1.80 |
| 6   | [T0422TS124\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  |  | 77.22 | 88.61 | 88.97 | 1.66 |
| 7   | [T0422TS438\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  |  | 77.22 | 87.54 | 87.54 | 1.91 |
| 8   | [T0422TS256\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  |  | 77.22 | 91.46 | 93.24 | 1.95 |
| 9   | [T0422TS020\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  |  | 76.51 | 86.83 | 86.83 | 1.69 |
| 10   | [T0422TS425\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  |  | 76.51 | 93.59 | 93.59 | 2.02 |
| 11   | [T0422TS408\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  |  | 76.51 | 90.04 | 90.75 | 2.04 |
| 12   | [T0422TS385\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS385_1.png | 76.16 | 91.46 | 91.81 | 2.01 |
| 13   | [T0422TS379\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS379_1.png | 76.16 | 91.81 | 91.81 | 1.98 |
| 14   | [T0422TS279\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS279_1.png | 76.16 | 91.81 | 91.81 | 2.06 |
| 15   | [T0422TS131\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  |  | 76.16 | 88.26 | 88.26 | 1.66 |
| 16   | [T0422TS409\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS409_1.png | 75.80 | 89.68 | 90.04 | 1.83 |
| 17   | [T0422TS419\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS419_1.png | 75.80 | 91.10 | 91.46 | 2.04 |
| 18   | [T0422TS196\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS196_1.png | 75.44 | 90.75 | 91.10 | 2.00 |
| 19   | [T0422TS282\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS282_1.png | 75.44 | 92.17 | 92.17 | 2.07 |
| 20   | [T0422TS013\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS013_1.png | 75.44 | 87.54 | 87.54 | 1.72 |
| 21   | [T0422TS140\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS140_1.png | 75.44 | 91.46 | 91.46 | 2.03 |
| 22   | [T0422TS299\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS299_1.png | 75.44 | 90.75 | 91.10 | 2.00 |
| 23   | [T0422TS429\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS429_1.png | 75.44 | 86.83 | 86.83 | 1.93 |
| 24   | [T0422TS034\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS034_1.png | 75.44 | 87.90 | 87.90 | 1.70 |
| 25   | [T0422TS415\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS415_1.png | 75.44 | 92.53 | 92.53 | 2.03 |
| 26   | [T0422TS174\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS174_1.png | 75.09 | 91.81 | 92.17 | 2.16 |
| 27   | [T0422TS443\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS443_1.png | 75.09 | 88.26 | 88.26 | 1.72 |
| 28   | [T0422TS147\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS147_1.png | 75.09 | 90.75 | 90.75 | 2.03 |
| 29   | [T0422TS266\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS266_1.png | 75.09 | 91.46 | 91.81 | 2.11 |
| 30   | [T0422TS449\_1\_2](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS449_1_2.png | 74.73 | 88.61 | 88.61 | 2.07 |
| 31   | [T0422TS396\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS396_1.png | 74.73 | 90.75 | 90.75 | 2.04 |
| 32   | [T0422TS426\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS426_1.png | 74.73 | 91.10 | 91.46 | 2.09 |
| 33   | [T0422TS142\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS142_1.png | 74.73 | 90.04 | 90.04 | 2.02 |
| 34   | [T0422TS069\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS069_1.png | 74.73 | 87.90 | 87.90 | 1.76 |
| 35   | [T0422TS434\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS434_1.png | 74.38 | 90.75 | 91.10 | 2.05 |
| 36   | [T0422TS316\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS316_1.png | 74.38 | 86.12 | 90.39 | 2.13 |
| 37   | [T0422TS234\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS234_1.png | 74.38 | 90.39 | 90.75 | 2.07 |
| 38   | [T0422TS349\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS349_1.png | 74.02 | 87.90 | 87.90 | 2.01 |
| 39   | [T0422TS122\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS122_1.png | 74.02 | 89.68 | 89.68 | 2.04 |
| 40   | [T0422TS322\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS322_1.png | 73.67 | 86.12 | 86.83 | 2.09 |
| 41   | [T0422TS243\_1\_2](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS243_1_2.png | 73.67 | 88.97 | 88.97 | 2.01 |
| 42   | [T0422TS318\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS318_1.png | 73.67 | 88.97 | 89.68 | 2.06 |
| 43   | [T0422TS351\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS351_1.png | 73.67 | 88.97 | 90.04 | 2.07 |
| 44   | [T0422TS220\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS220_1.png | 73.67 | 88.97 | 90.04 | 2.07 |
| 45   | [T0422TS247\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS247_1.png | 73.31 | 89.68 | 89.68 | 2.09 |
| 46   | [T0422TS436\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS436_1.png | 73.31 | 80.07 | 80.07 | 1.77 |
| 47   | [T0422TS007\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS007_1.png | 73.31 | 89.68 | 89.68 | 2.09 |
| 48   | [T0422TS387\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS387_1.png | 72.95 | 88.97 | 89.68 | 2.09 |
| 49   | [T0422TS193\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS193_1.png | 72.60 | 87.54 | 87.90 | 2.02 |
| 50   | [T0422TS002\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS002_1.png | 72.60 | 80.07 | 80.07 | 1.80 |
| 51   | [T0422TS293\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS293_1.png | 72.24 | 91.46 | 91.46 | 2.12 |
| 52   | [T0422TS116\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS116_1.png | 72.24 | 85.77 | 85.77 | 2.03 |
| 53   | [T0422TS297\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS297_1.png | 71.89 | 89.32 | 89.68 | 2.07 |
| 54   | [T0422TS048\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS048_1.png | 71.89 | 86.83 | 87.54 | 2.18 |
| 55   | [T0422TS153\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS153_1.png | 71.53 | 88.97 | 89.68 | 2.09 |
| 56   | [T0422TS453\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS453_1.png | 71.17 | 92.17 | 92.17 | 2.17 |
| 57   | [T0422AL421\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422AL421_1.png | 70.82 | 80.07 | 80.07 | 1.83 |
| 58   | [T0422TS402\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS402_1.png | 70.82 | 83.27 | 86.12 | 2.10 |
| 59   | [T0422TS157\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS157_1.png | 70.46 | 83.27 | 83.99 | 1.80 |
| 60   | [T0422TS143\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS143_1.png | 70.11 | 79.72 | 79.72 | 1.80 |
| 61   | [T0422TS394\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS394_1.png | 70.11 | 88.61 | 88.61 | 2.18 |
| 62   | [T0422TS135\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS135_1.png | 70.11 | 85.05 | 86.12 | 2.15 |
| 63   | [T0422TS407\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS407_1.png | 69.75 | 88.97 | 88.97 | 2.21 |
| 64   | [T0422TS427\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS427_1.png | 68.33 | 86.48 | 86.83 | 2.16 |
| 65   | [T0422TS477\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS477_1.png | 67.26 | 86.12 | 88.61 | 2.40 |
| 66   | [T0422TS100\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS100_1.png | 66.55 | 84.70 | 85.77 | 2.30 |
| 67   | [T0422TS340\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS340_1.png | 66.19 | 75.09 | 82.56 | 1.84 |
| 68   | [T0422TS073\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS073_1.png | 66.19 | 82.21 | 82.21 | 2.11 |
| 69   | [T0422TS154\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS154_1.png | 65.12 | 83.99 | 85.05 | 2.34 |
| 70   | [T0422TS235\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS235_1.png | 65.12 | 83.27 | 84.34 | 2.29 |
| 71   | [T0422TS454\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS454_1.png | 63.70 | 76.16 | 78.65 | 2.17 |
| 72   | [T0422TS186\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS186_1.png | 63.35 | 80.43 | 81.49 | 2.33 |
| 73   | [T0422TS270\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS270_1.png | 62.28 | 79.00 | 80.07 | 2.29 |
| 74   | [T0422TS475\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS475_1.png | 61.92 | 77.94 | 81.85 | 2.23 |
| 75   | [T0422TS095\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS095_1.png | 60.14 | 69.40 | 70.82 | 1.86 |
| 76   | [T0422TS463\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS463_1.png | 56.58 | 79.00 | 80.78 | 2.28 |
| 77   | [T0422TS166\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS166_1.png | 56.23 | 70.46 | 74.73 | 2.28 |
| 78   | [T0422TS014\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS014_1.png | 50.89 | 66.90 | 74.38 | 2.31 |
| 79   | [T0422TS462\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS462_1.png | 41.99 | 82.56 | 83.27 | 1.96 |
| 80   | [T0422TS012\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS012_1.png | 26.33 | 67.62 | 72.24 | 2.31 |
| 81   | [T0422TS495\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS495_1.png | 25.98 | 51.60 | 68.68 | 2.99 |
| 82   | [T0422TS164\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS164_1.png | 19.57 | 28.11 | 59.43 | 2.49 |
| 83   | [T0422AL019\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422AL019_1.png | 18.15 | 73.67 | 80.07 | 2.81 |
| 84   | [T0422TS213\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS213_1.png | 16.37 | 70.11 | 76.51 | 2.81 |
| 85   | [T0422TS450\_1\_2](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS450_1_2.png | 9.25 | 17.44 | 53.38 | 3.13 |
| 86   | [T0422TS272\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS272_1.png | 4.63 | 28.11 | 59.07 | 3.36 |
| 87   | [T0422TS262\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS262_1.png | 1.78 | 5.69 | 28.83 | 3.43 |
| 88   | [T0422TS420\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS420_1.png | 0.36 | 0.71 | 52.31 | 3.36 |
| 89   | [T0422TS479\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS479_1.png | 0.36 | 2.49 | 42.70 | 3.33 |
| 90   | [T0422TS243\_1\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS243_1_1.png | 0.00 | 0.00 | 1.42 | 3.43 |
| 91   | [T0422TS404\_1](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS404_1.png | 0.00 | 0.36 | 30.96 | 3.35 |
| 92   | [T0422TS450\_1\_3](http://predictioncenter.org/casp8/alplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/AL/T0422/T0422TS450_1_3.png | 0.00 | 0.00 | 12.10 | 3.17 |

 |

 |
| А это выравнивание – позиционно-специфическое. Белым отмечены остатки, которые выровнять не удалось. |
|

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |
| --- |
| **#** |

 |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |
| --- | --- |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/up.gif |  |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/down.gif |  |

 | **Name** |

 |   |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |
| --- | --- |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/up.gif |  |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/down.gif |  |

 | **EQV0P** |

 |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |
| --- | --- |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/up.gif |  |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/down.gif |  |

 | **EQV4P** |

 |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |
| --- | --- |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/up.gif |  |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/down.gif |  |

 | **EQVIP** |

 |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|

|  |  |
| --- | --- |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/up.gif |  |
| http://predictioncenter.org/casp8/images/down.gif |  |

 | **RMSD** |

 |
| 1   | [T0422TS379\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS379_1.png | 86.48 | 93.24 | 93.24 | 1.98 |
| 2   | [T0422TS296\_1\_2](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS296_1_2.png | 86.48 | 94.66 | 94.66 | 1.92 |
| 3   | [T0422TS438\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS438_1.png | 86.48 | 88.61 | 88.61 | 1.91 |
| 4   | [T0422TS140\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS140_1.png | 86.48 | 93.59 | 93.59 | 2.03 |
| 5   | [T0422TS299\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS299_1.png | 86.48 | 93.24 | 93.24 | 2.00 |
| 6   | [T0422TS316\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS316_1.png | 86.48 | 89.68 | 95.37 | 2.13 |
| 7   | [T0422TS182\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS182_1.png | 86.48 | 93.59 | 93.59 | 1.97 |
| 8   | [T0422TS196\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS196_1.png | 86.48 | 93.24 | 93.24 | 2.00 |
| 9   | [T0422TS415\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS415_1.png | 85.41 | 93.95 | 93.95 | 2.03 |
| 10   | [T0422TS147\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS147_1.png | 85.41 | 92.53 | 92.53 | 2.03 |
| 11   | [T0422TS247\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS247_1.png | 85.05 | 92.17 | 92.17 | 2.09 |
| 12   | [T0422TS007\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS007_1.png | 85.05 | 92.17 | 92.17 | 2.09 |
| 13   | [T0422TS279\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS279_1.png | 84.70 | 93.59 | 93.95 | 2.06 |
| 14   | [T0422TS266\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS266_1.png | 84.70 | 91.81 | 91.81 | 2.11 |
| 15   | [T0422TS419\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS419_1.png | 84.70 | 93.59 | 93.59 | 2.04 |
| 16   | [T0422TS293\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS293_1.png | 84.34 | 93.24 | 93.24 | 2.12 |
| 17   | [T0422TS243\_1\_2](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS243_1_2.png | 83.99 | 90.39 | 90.39 | 2.01 |
| 18   | [T0422TS409\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS409_1.png | 83.99 | 90.75 | 90.75 | 1.83 |
| 19   | [T0422TS385\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS385_1.png | 83.99 | 92.53 | 92.53 | 2.01 |
| 20   | [T0422TS322\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS322_1.png | 83.99 | 88.61 | 88.61 | 2.09 |
| 21   | [T0422TS425\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS425_1.png | 83.63 | 93.24 | 93.24 | 2.02 |
| 22   | [T0422TS408\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS408_1.png | 83.63 | 91.46 | 91.46 | 2.04 |
| 23   | [T0422TS387\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS387_1.png | 83.27 | 90.75 | 91.10 | 2.09 |
| 24   | [T0422TS153\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS153_1.png | 83.27 | 90.39 | 90.39 | 2.09 |
| 25   | [T0422TS434\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS434_1.png | 83.27 | 92.53 | 92.53 | 2.05 |
| 26   | [T0422TS138\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS138_1.png | 82.92 | 93.59 | 93.59 | 1.94 |
| 27   | [T0422TS131\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS131_1.png | 82.92 | 88.97 | 88.97 | 1.66 |
| 28   | [T0422TS256\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS256_1.png | 82.92 | 91.81 | 92.53 | 1.95 |
| 29   | [T0422TS282\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS282_1.png | 82.92 | 93.59 | 93.95 | 2.07 |
| 30   | [T0422TS048\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS048_1.png | 82.92 | 89.68 | 90.75 | 2.18 |
| 31   | [T0422TS449\_1\_2](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS449_1_2.png | 82.56 | 90.04 | 90.04 | 2.07 |
| 32   | [T0422TS116\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS116_1.png | 82.56 | 87.54 | 87.54 | 2.03 |
| 33   | [T0422TS426\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS426_1.png | 82.56 | 92.53 | 92.53 | 2.09 |
| 34   | [T0422TS122\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS122_1.png | 82.56 | 90.39 | 90.39 | 2.04 |
| 35   | [T0422TS174\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS174_1.png | 82.56 | 93.24 | 93.59 | 2.16 |
| 36   | [T0422TS402\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS402_1.png | 82.21 | 84.70 | 85.05 | 2.10 |
| 37   | [T0422TS318\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS318_1.png | 82.21 | 91.10 | 91.46 | 2.06 |
| 38   | [T0422TS453\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS453_1.png | 82.21 | 93.24 | 93.24 | 2.17 |
| 39   | [T0422TS396\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS396_1.png | 82.21 | 91.46 | 91.46 | 2.04 |
| 40   | [T0422TS193\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS193_1.png | 81.85 | 88.97 | 91.46 | 2.02 |
| 41   | [T0422TS477\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS477_1.png | 81.85 | 86.83 | 89.68 | 2.40 |
| 42   | [T0422TS135\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS135_1.png | 81.85 | 87.19 | 88.26 | 2.15 |
| 43   | [T0422TS057\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS057_1.png | 81.85 | 88.97 | 88.97 | 1.69 |
| 44   | [T0422TS124\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS124_1.png | 81.85 | 88.61 | 88.61 | 1.66 |
| 45   | [T0422TS020\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS020_1.png | 81.49 | 88.61 | 88.61 | 1.69 |
| 46   | [T0422TS429\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS429_1.png | 81.49 | 87.90 | 87.90 | 1.93 |
| 47   | [T0422TS443\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS443_1.png | 81.14 | 88.61 | 88.61 | 1.72 |
| 48   | [T0422TS069\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS069_1.png | 81.14 | 88.97 | 88.97 | 1.76 |
| 49   | [T0422TS142\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS142_1.png | 81.14 | 91.10 | 91.10 | 2.02 |
| 50   | [T0422TS149\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS149_1.png | 81.14 | 90.39 | 90.39 | 1.80 |
| 51   | [T0422TS407\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS407_1.png | 80.43 | 91.46 | 91.46 | 2.21 |
| 52   | [T0422TS013\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS013_1.png | 80.43 | 88.61 | 88.97 | 1.72 |
| 53   | [T0422TS394\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS394_1.png | 80.43 | 90.39 | 90.39 | 2.18 |
| 54   | [T0422TS234\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS234_1.png | 80.07 | 90.75 | 91.46 | 2.07 |
| 55   | [T0422TS034\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS034_1.png | 79.72 | 88.26 | 88.26 | 1.70 |
| 56   | [T0422TS100\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS100_1.png | 79.00 | 85.41 | 85.41 | 2.30 |
| 57   | [T0422TS220\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS220_1.png | 78.65 | 89.68 | 90.04 | 2.07 |
| 58   | [T0422TS235\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS235_1.png | 78.65 | 85.05 | 85.05 | 2.29 |
| 59   | [T0422TS351\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS351_1.png | 78.65 | 89.68 | 90.04 | 2.07 |
| 60   | [T0422TS297\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS297_1.png | 78.29 | 89.68 | 89.68 | 2.07 |
| 61   | [T0422TS002\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS002_1.png | 77.94 | 80.43 | 80.43 | 1.80 |
| 62   | [T0422TS436\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS436_1.png | 77.94 | 80.78 | 80.78 | 1.77 |
| 63   | [T0422TS454\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS454_1.png | 77.94 | 80.43 | 80.43 | 2.17 |
| 64   | [T0422TS349\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS349_1.png | 77.22 | 87.90 | 89.68 | 2.01 |
| 65   | [T0422TS427\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS427_1.png | 76.87 | 88.26 | 88.26 | 2.16 |
| 66   | [T0422TS154\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS154_1.png | 76.51 | 85.05 | 85.41 | 2.34 |
| 67   | [T0422AL421\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422AL421_1.png | 76.16 | 81.14 | 81.14 | 1.83 |
| 68   | [T0422TS143\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS143_1.png | 76.16 | 80.07 | 80.07 | 1.80 |
| 69   | [T0422TS270\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS270_1.png | 76.16 | 80.78 | 80.78 | 2.29 |
| 70   | [T0422TS186\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS186_1.png | 75.44 | 82.56 | 82.92 | 2.33 |
| 71   | [T0422TS157\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS157_1.png | 75.09 | 83.27 | 83.27 | 1.80 |
| 72   | [T0422TS073\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS073_1.png | 72.24 | 81.85 | 81.85 | 2.11 |
| 73   | [T0422TS463\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS463_1.png | 70.82 | 80.78 | 80.78 | 2.28 |
| 74   | [T0422TS340\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS340_1.png | 68.33 | 75.44 | 82.21 | 1.84 |
| 75   | [T0422TS475\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS475_1.png | 68.33 | 79.72 | 80.07 | 2.23 |
| 76   | [T0422TS095\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS095_1.png | 63.35 | 70.46 | 70.46 | 1.86 |
| 77   | [T0422TS166\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS166_1.png | 61.92 | 72.24 | 74.02 | 2.28 |
| 78   | [T0422TS014\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS014_1.png | 57.30 | 65.12 | 65.12 | 2.31 |
| 79   | [T0422TS462\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS462_1.png | 42.35 | 83.63 | 83.63 | 1.96 |
| 80   | [T0422TS495\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS495_1.png | 33.81 | 54.09 | 57.65 | 2.99 |
| 81   | [T0422TS012\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS012_1.png | 23.84 | 68.68 | 73.31 | 2.31 |
| 82   | [T0422TS164\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS164_1.png | 21.00 | 26.69 | 48.75 | 2.49 |
| 83   | [T0422AL019\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422AL019_1.png | 20.28 | 71.89 | 75.80 | 2.81 |
| 84   | [T0422TS213\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS213_1.png | 17.08 | 72.60 | 74.38 | 2.81 |
| 85   | [T0422TS450\_1\_2](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS450_1_2.png | 7.12 | 8.90 | 17.79 | 3.13 |
| 86   | [T0422TS272\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS272_1.png | 3.56 | 23.49 | 30.60 | 3.36 |
| 87   | [T0422TS262\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS262_1.png | 0.71 | 6.41 | 14.59 | 3.43 |
| 88   | [T0422TS404\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS404_1.png | 0.00 | 0.00 | 22.78 | 3.35 |
| 89   | [T0422TS450\_1\_3](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS450_1_3.png | 0.00 | 0.00 | 13.17 | 3.17 |
| 90   | [T0422TS420\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS420_1.png | 0.00 | 0.00 | 27.76 | 3.36 |
| 91   | [T0422TS243\_1\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS243_1_1.png | 0.00 | 0.00 | 10.32 | 3.43 |
| 92   | [T0422TS479\_1](http://predictioncenter.org/casp8/eqvplot.cgi?target=T0422)  | http://predictioncenter.org/casp8/PLOTS/EQV/T0422/T0422TS479_1.png | 0.00 | 0.00 | 23.84 | 3.33 |

 |

 |  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

Одним из образцов с наилучшим выравниванием оказался белок **АТФ-ЗАВИСИМАЯ МЕТАЛЛОПРОТЕАЗА FTsH** из Thermus thermophilius, необходимая для расщепления неправильно собранных белков и поддержания целостности мембраны**.** Как и упомянутый выше белок, эта протеаза проявляет нуклеозидтрифосфатазную, металлсвязывающую и гидролазную активности.

****

**Рис.2**

Классификация методов предсказания по укладке

Вообще, методы предсказания по укладке можно разделить на два типа:

1. Служат для разработки одномерного профиля для каждой структуры из библиотеки образцов.
2. Используют трехмерную структурную образцов.

Пример эксперимента: рассматриваем каждый аминокислотный остаток структуры и определяем, где он расположен – на поверхности белка или в ядре. Более совершенное исследование может затронуть и вопросы вторичной структуры (например, входит ли остаток в состав альфа-спирали?) или даже вопросы эволюции (насколько остаток консервативен?).

При трехмерном исследовании структура может быть представлена как набор расстояний между атомами. Это более гибкий подход, более широкий, информативный. Но выравнивание построить сложнее.

Эти методы широко используются. Они эффективны. Так как типов укладки ограниченное число, велика вероятность (70-80%) того, что для данного белка найдется белок со сходной укладкой, структура которого, причем, будет содержаться в PDB.

Многие из этих подходов используют динамическое программирование тем или иным образом. Для трехмерного исследование поиск наилучшего выравнивания является очень сложной NP-задачей. Разработаны комбинаторные методы оптимизации, например, так называемый метод условных случайных полей (conditional random fields), искусственный отжиг, линейное программирование. В настоящее время ищутся эвристические решения этой задачи.

**Задача, поставленная авторами:**

Сравнить наборы образцов:

1. Полученные исходя из максимального сходства структур
2. Полученные тредингом, с учетом сайтов связывания лигандов и химических свойств этих лигандов.

 Набор данных: 901 не гомологичный комплекс белок-лиганд.

Цель: 842 белка, для каждого из которых может быть определен тредингом хотя бы один низкогомологичный белок

Для исследования функций авторы искали сайты связывания лигандов. Достоверность такого предсказания оценивали как достоверное (easy), средней достоверности (medium) или малодостоверное (hard).

Для поиска наилучшего структурного выравнивания – алгоритм ТМ.

Для соотнесения целевых белков и сходных структур – трединг.

Выбор образцов на основе трединга – программа PROSPECTOR\_3.

Профильное сравнение последовательностей – Hhpred.

Геометрические нешаблонные алгоритмы: LigsiteCS 34 и Fpocket26.

FINDSITE использовали, чтобы оценить вклад трединга в предсказание функции. Образцы отбирались структурными методами - по выравниванию структур (образца и целевого белка), либо с помощью трединга. Для целевого белка и для образцов выше установленного порога по структурному сходству авторы подбирали и подсчитывали находки GO. Из образцов, близких по структуре к целевому белку, отбирались те, сайты связывания в которых располагались на расстоянии до 4 Ǻ от аналогичного сайта в целевом белке. Если на таком расстоянии ничего не удавалось найти, его постепенно увеличивали на 1 Ǻ, пока не находили хотя бы один образец.

**Анализ результатов**

1. Исследовали консервативность лиганд-связывающих сайтов и ранжировали сайты связывания по количеству связавшихся с ними лигандов. Отбирали образцы, у которых центр кармана связывания на расстоянии 4-8 ангстрем от аналогичного центра в целевом белке.
2. Исследовали консервативность функции с помощью GO
3. Оценка функционального сходства образца и целевого белка – коэффициент **корреляции Мэтью**. Подсчитывалось количество общих терминов GO для образца и целевого белка.



TP – число находок GO, общих для целевого белка и образца

TN – не нашлось ни для целевого белка, ни для образца

FP – находки, специфичные только для образца

FN - находки, специфичные только для целевого белка

4) Для каждого целевого белка определяли набор образцов со схожими сайтами связывания и вычисляли чувствительность и специфичность предсказания. Требовалось сходное положение сайтов связывания (расстояние между соответствующими сайтами в целевом белке и образце не должно было превышать 4 ангстрем); а также химические свойства связанных лигандов. Если учитывать последний фактор, заметно возрастает чувствительность предсказания. Однако все эти результаты недостаточно точны, имеется много ложных положительных находок, следовательно, белки, хоть и сходные по структуре с целевым, связывают лиганды в разных участках или же связывают непохожие по химическим свойствам молекулы в одних и тех же участках.

5) Оценивали предсказание с помощью трединга и на основании структуры в «сумеречной области».

6) Исследовали связывание лигандов образца с целевым белком.

Сайты связывания определялись сопоставлением лигандов образцов и целевого белка. Чтобы предсказать сайт связывания более точно, требовалось получить достаточно большое количество образцов с одинаковыми сайтами связывания. В зависимости от того, сколько таких образцов удавалось найти, целевые белки классифицировали на easy, medium и hard.



**Рис.3.** Распределение белков на категории easy, medium и hard. Примечательно, что тредингом предсказано гораздо больше «легких» белков, чем чисто структурными методами.

А так выглядит зависимость доли соответствующих белков от расстояния между сайтом связывания и центром масс лиганда в кристаллической структуре для пяти наилучших образцов (рис. 4А). Структурными методами предсказано больше сайтов, и они включают в себя сайты, определенные тредингом. С этим связано довольно небольшое (5%) расхождение предсказаний при пороге 8 ангстрем.

Что касается точности ранжирования сайтов связывания, при использовании чисто структурных методов лучший сайт получил первое место в 56,3% случаев, а при трединге – в 78,5%.

Рисунок В показывает точность ранжирования для ста лучших образцов. При использовании чисто структурных методов лучший сайт получил первое место в 50,2% случаев, а при трединге – в 75,9%.



**Рис.4**

7) С помощью GO оценивали точность и чувствительность предсказания функции. На графике приведены данные для наилучших образцов (рис. 5А) и для пяти «лучших из лучших» (В).



**Рис.5**

При предсказании чисто структурными методами появляется много ложных положительных находок. Это можно объяснить противоречием между качеством образца и сайта связывания: иногда хорошие сайты связывания лигандов ранжируются низко.

Для пяти «лучших из лучших» предсказание чисто структурными методами сопоставимо с тредингом, но проигрывает в чувствительности и точности. Таким образом, общность структуры и сайтов связывания – еще не гарантия общей молекулярной функции. Следовательно, трединг помогает не только избавиться от ложных положительных находок, но и отсеять те белки, которые несмотря на общие сайты связывания выполняют совершенно разные функции и связывают непохожие лиганды.

**Выводы**

* Использование образцов, найденных тредингом и имеющих сходные сайты связывания, уменьшает FP.
* Жесткие ограничения для структурного сходства хороши только для чисто структурных методов. Недостаток подхода в том, что эти ограничения могут отсеять функционально близкие образцы.
* Трединг с использованием профиля последовательностей – важный эволюционный фильтр в функциональной аннотации белков, так как значительно повышает эффективность и надежность анализа.