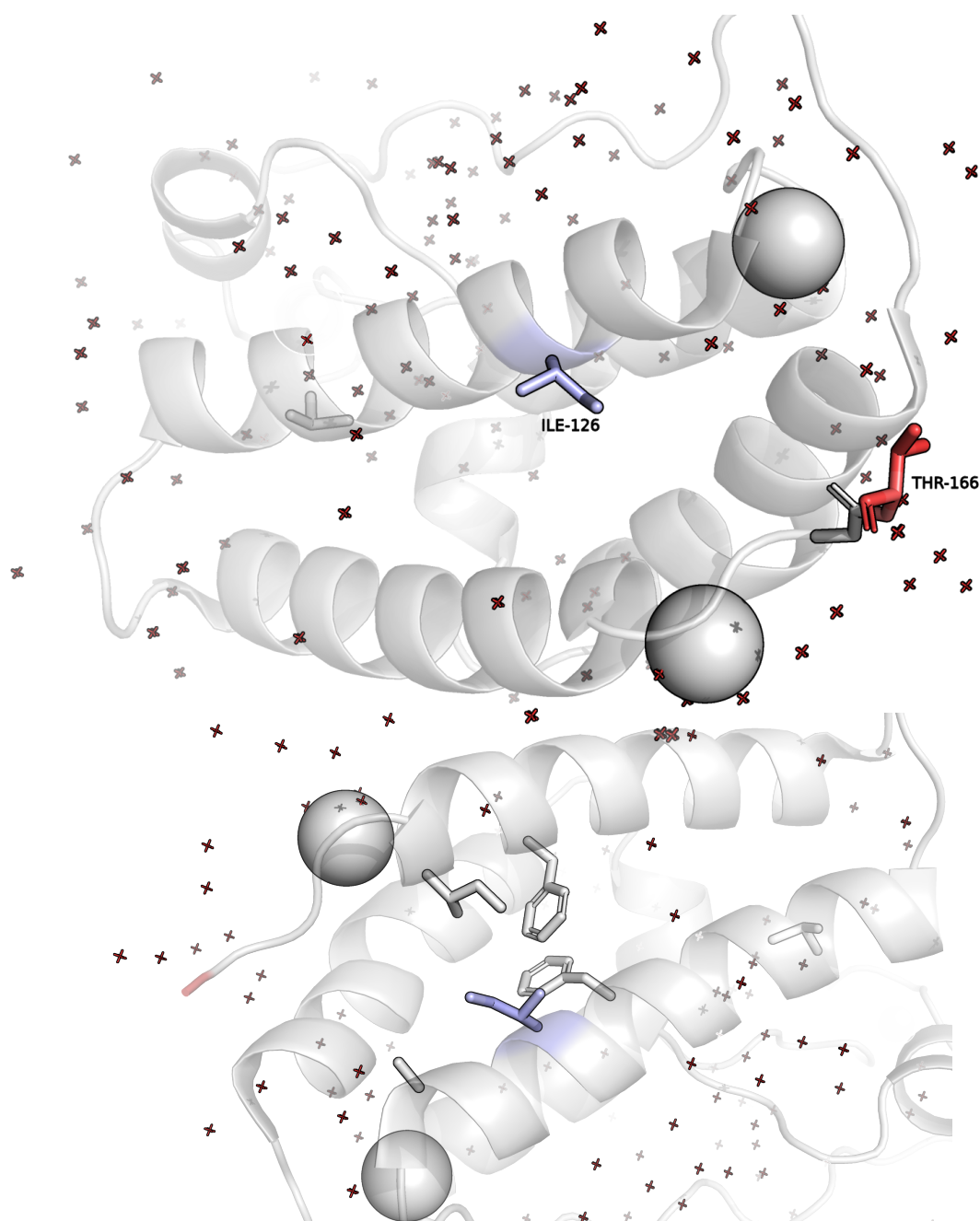


# Практикум 3

## Задание 1

С помощью Prody я нашел остатки с наименьшим и наибольшим средним B-фактором атомов. Наибольший B-фактор — у треонина 166 (42.0), а наименьший — у изолейцина 126 (17.8). На картинке ниже видно, что треонин находится на С конце белка и окружен водой со всех сторон (вода в кристалле более подвижна чем ак, а значит хуже стабилизирует его). К тому же у атомов треонина довольно большой разброс значений B-факторов от азота к следующим атомам (от 36.4 до 44.0 в то время как у изолейцина разброс 16.9 - 19.21). Вероятно это объясняется увеличением степени свободы атомов при отдалении от азота, который связан с предыдущей аминокислотой и менее подвижен чем все остальные атомы.

Изолейцин 126 находится в альфа-спирали и при этом вокруг него нет воды. Если посмотреть на его окружение можно заметить много гидрофобных аминокислот, которыми он стабилизируется (вторая картинка).

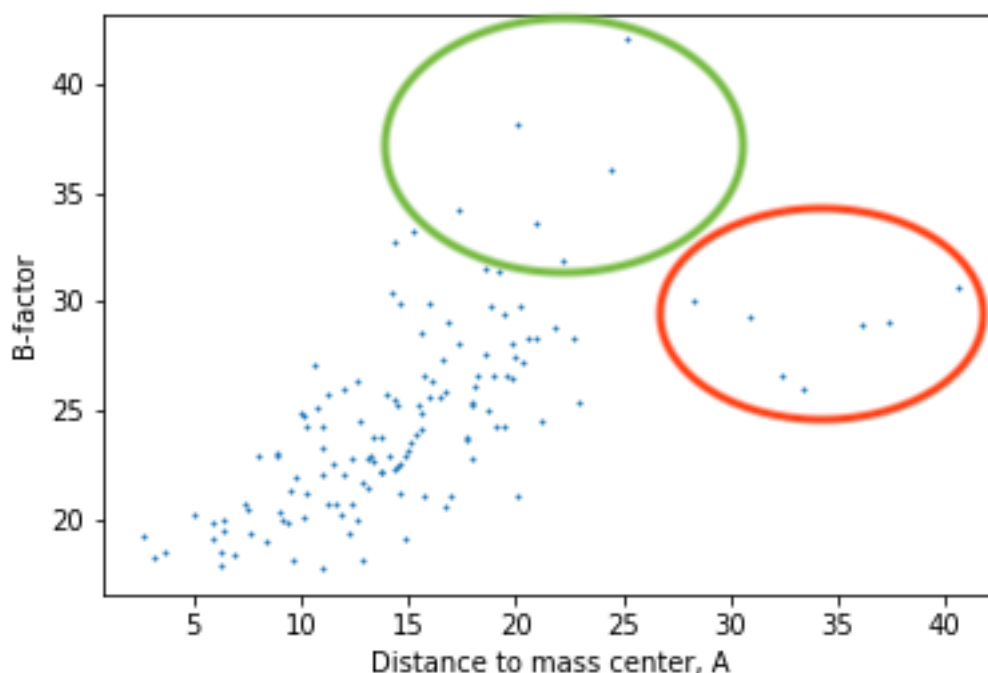


## Задание 2

В этом задании надо было построить график зависимости B-фактора аминокислот белка от расстояния их центра масс до центра масс белка. На графике явно видно увеличение B-фактора с отдалением от центра масс, что логично т.к чем ближе ак к центру масс белка тем больше у нее соседей которые могут ее потенциально стабилизировать. Однако разброс значений все же довольно большой, к тому же имеется группа ак похожая на выбросы (красный и зеленый овалы).

Возможно красный выброс наблюдается из-за того, что белок находится в кристаллическом окружении и эти ак стабилизируются соседними белками (поэтому при довольно большом расстоянии от центра у них не самый большой B-фактор). У группы ак в зеленом овале наоборот — довольно большой B-фактор при среднем расстоянии от центра, я думаю это происходит из-за того, что боковые цепи этих ак смотрят в полости кристалла заполненные водой, или же эти ак находятся на концах белковой цепи (при условии что конец белковой цепи не контактирует с другим белком).

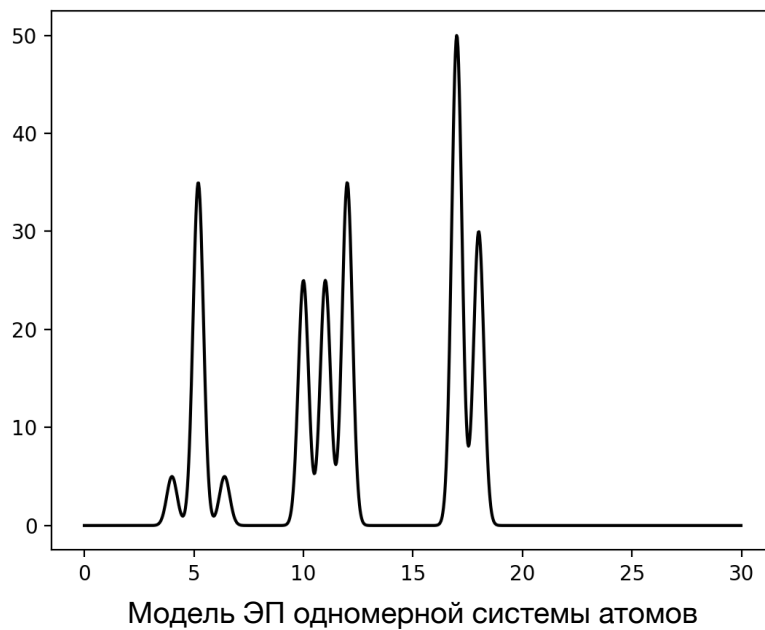
Большой разброс же может объясняться тем, что некоторые ак находятся в альфа-спиралях и бета-листах, тем самым стабилизируясь, в то время как другие ак не входят в эти структуры



### Задание 3

В этом задании надо было воспроизвести восстановление электронной плотности по экспериментальным данным и посмотреть как на итоговую модель влияют различные факторы.

Я создал модель ЭП системы из 8 атомов разной величины (легкие — 5, средние — 25-35, тяжелый — 50)



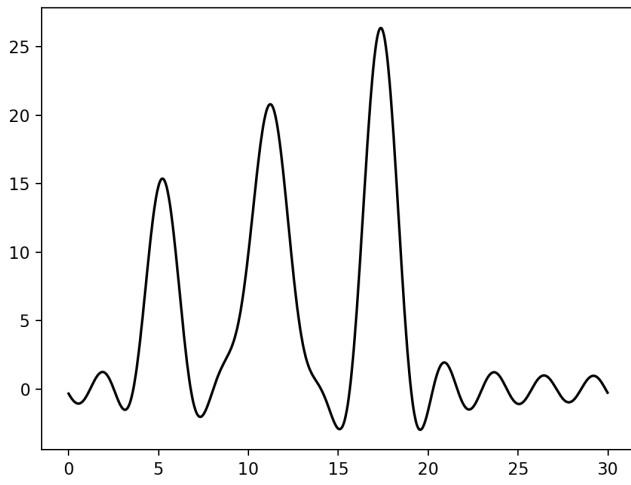
В таблице ниже — восстановление этого графика по коэффициентам ряда Фурье в зависимости от разных параметров. Еще ниже — графики восстановленных из ряда Фурье ЭП. Каждый подписан в соответствии с номером в таблице.

**Таблица 1. Восстановление функции по коэффициентам ряда Фурье.**

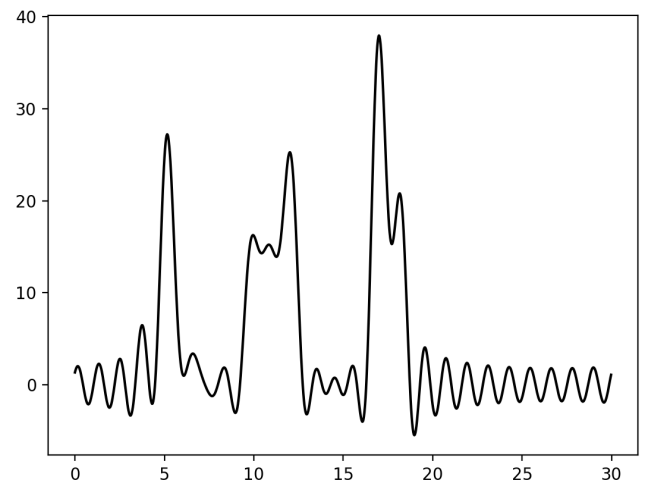
| №                                | Набор гармоник | Разрешение (Å) | Полнота данных (%) | Шум амплитуды (% от F) | Шум фазы (% от phi) | Качество восстановления | Комментарии  |
|----------------------------------|----------------|----------------|--------------------|------------------------|---------------------|-------------------------|--|
| Полный набор гармоник без помех  |                |                |                    |                        |                     |                         |  |
| 1                                | 0–10           | 3 Å            | 100%               | 0                      | 0                   | Плохое                  |  |
| 2                                | 0-25           | 1.2Å           | 100 %              | 0                      | 0                   | Среднее                 |  |
| 3                                | 0-30           | 1Å             | 100 %              | 0                      | 0                   | Хорошее                 | Все же не совсем различимы малые атомы   |
| 4                                | 0-35           | 0,86Å          | 100 %              | 0                      | 0                   | Отличное                |  |
| 5                                | 0-50           | 0,6Å           | 100 %              | 0                      | 0                   | Отличное                | Почти полностью совпадает с моделью  |
| Полный набор гармоник с помехами |                |                |                    |                        |                     |                         |  |
| 6                                | 0-35           | 0.86Å          | 100 %              | 0                      | 10 %                | Отличное                |  |
| 7                                | 0-35           | 0.86Å          | 100 %              | 0                      | 20 %                | Хорошее                 | Для средних и тяжелых атомов можно легко определить расположение, но легкие уже неотличимы от шума. Пики которые в исходной модели были одинаковой высоты теперь немного различаются по высоте |
| 8                                | 0-35           | 0.86Å          | 100 %              | 20 %                   | 0                   | Хорошее*                | Легкие атомы неотличимы от шума + разница между высотой пиков атомов средней величины становится меньше  |
| 9                                | 0-35           | 0.86Å          | 100 %              | 20 %                   | 20 %                | Среднее                 |  |
| 10                               | 0-35           | 0.86Å          | 100 %              | 40 %                   | 40 %                | Среднее                 | Нельзя отличить друг от друга средние по величине атомы  |
| 11                               | 0-35           | 0.86Å          | 100 %              | 50 %                   | 50 %                | Плохое                  | Средние атомы неотличимы от шума   |
| Неполный набор гармоник          |                |                |                    |                        |                     |                         |  |
| 12                               | 2–35           | 0.86Å          | 94%                | 0                      | 0                   | Отличное                | График стал вогнутым к середине и похожим на синусоиду, однако пики даже самых легких атомов можно отличить от шума  |
| 13                               | 0–11, 13–35    | 1Å             | 91 %               | 0                      | 0                   | Хорошее                 | Рядом с пиками появились небольшие «псевдо-пики»   |
| 14                               | 0-35,45        | 0.86Å          | 80 %               | 0                      | 0                   | Отличное                | Нет изменений по сравнению с полным набором гармоник   |

# Полный набор гармоник без помех

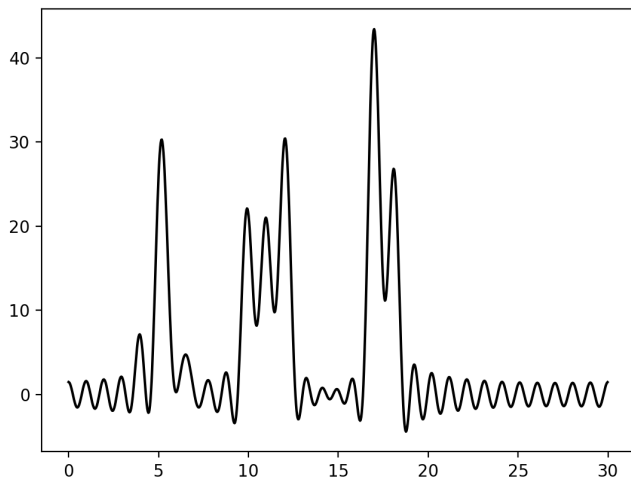
№1



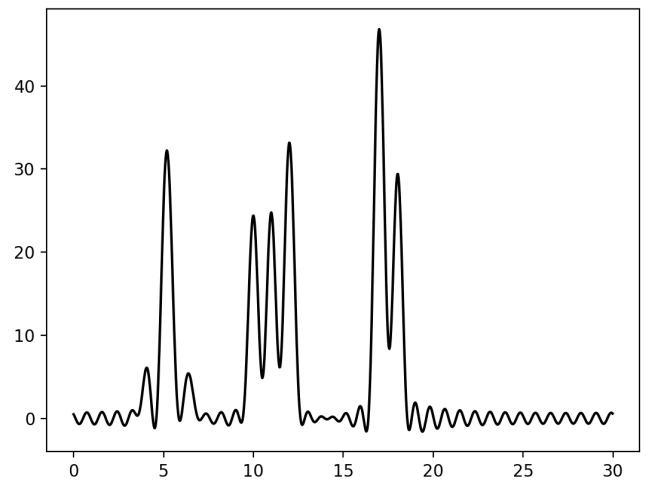
№2



№3

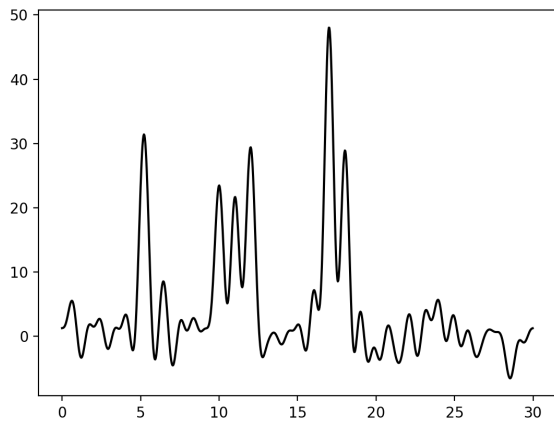


№4

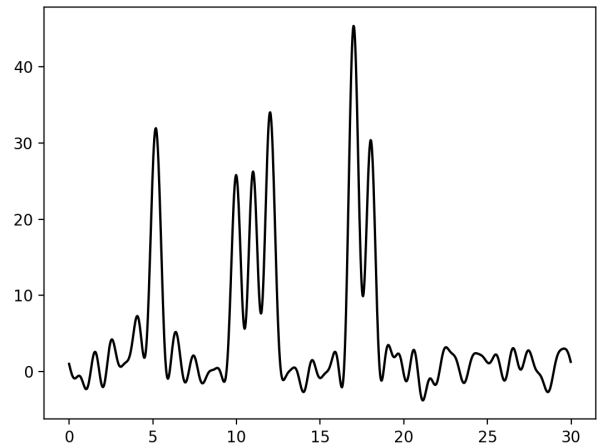


## Полный набор гармоник с помехами

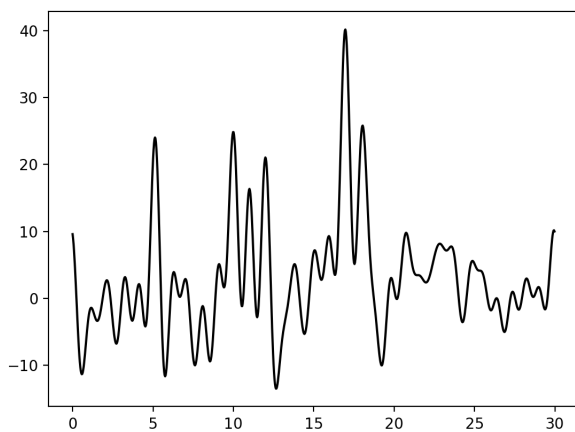
№7



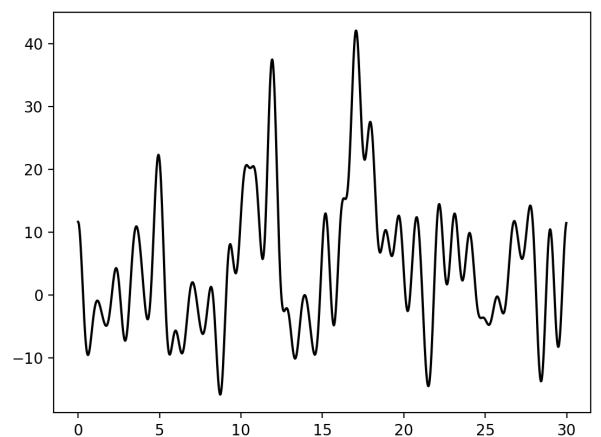
№8



№10



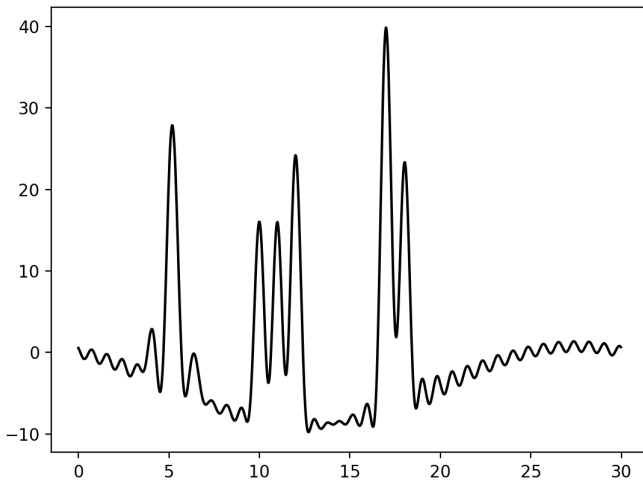
№11



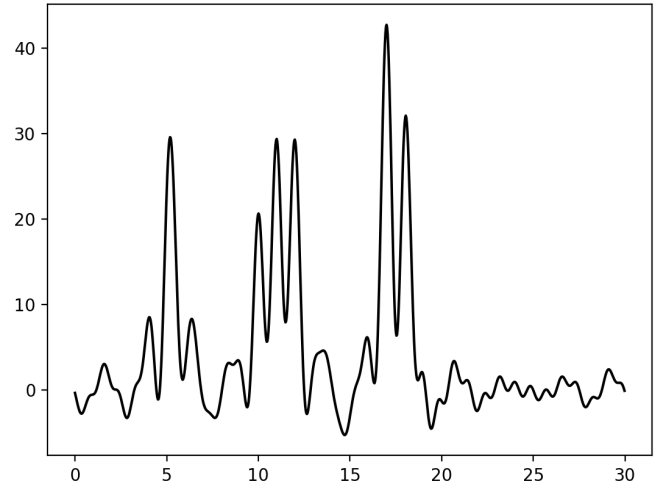
Из графиков видно, что при одинаковом уровне шума, фазовый шум(7) значительно сильнее мешает восприятию чем амплитудный (8), например из-за фазового шума меняется относительная величина ЭП атомов, а значит легче их перепутать. Это говорит о том, что очень важно найти правильное решение фазовой проблемы при восстановлении ЭП.

## Неполный набор гармоник

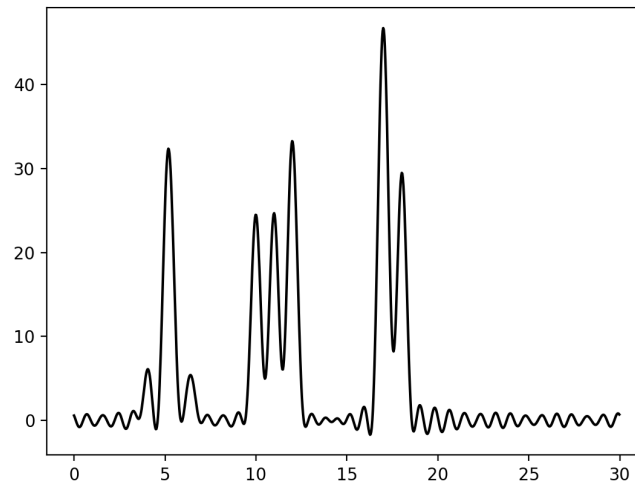
№11



№12



№13



№1 Удаление нескольких начальных гармоник не сильно влияет на разрешение. Просто теперь пики находятся не на прямой, а на синусоиде. Период (на рисунке удобнее воспринимается как длина волны) этих гармоник примерно 30-15 А поэтому их пропажа не сильно влияет на расположение и высоту пиков относительно друг-друга, а значит и не мешает их распознать.

№2 Удаление 8% гармоник из середины более заметно. Период этих гармоник около 2-3 А поэтому на картинке появляются небольшие пики, которые мешают распознать

легкие атомы.

№3 Наличие одной гармоники большего номера не влияет на общую картину. Так как между предпоследней и этой последней гармоникой нет гармоник — уточнение функции ЭП которое она дает практически незаметно.

Таким образом, надо подобрать количество гармоник так, чтобы они обладали достаточной полнотой (не брать какую-то гармонику с большим  $n$  если между ней и остальными гармониками большой промежуток), обеспечивали приемлемое разрешение (период последней гармоники меньше чем минимальное расстояние между атомами) и чтобы присутствовали гармоники период которых сопоставим с размерами атомов)

Наконец, я думаю что подбирать разрешение надо основываясь на графиках, восстановленных из полного набора гармоник, а именно сравнивать полученный экспериментально график с графиками различных разрешений. Разрешение при котором картина на графике из полного набора гармоник будет наиболее похожа на экспериментальную и будет разрешением этого графика.