

Задание 1. Prody и B-факторы часть 1

Для выполнения этого задания я взяла PDB3 из практикума 2 - 7bk2. С помощью пакета Prody был найден остаток, средний B-фактор атомов которого максимален и остаток, B-фактор атомов которого минимален. (Рис. 1)

```
In [24]: sorted(mean_betas, key = lambda x:x[1])[0]
         executed in 8ms, finished 20:16:47 2021-11-06
Out[24]: [<Residue: GLY 195 from Chain A from 7bk2 (4 atoms)>, 15.147499999999999]

In [25]: sorted(mean_betas, key = lambda x:x[1], reverse = True)[0]
         executed in 8ms, finished 20:17:14 2021-11-06
Out[25]: [<Residue: ALA 19 from Chain A from 7bk2 (5 atoms)>, 111.33600000000001]
```

Рис. 1 Сверху: остаток с минимальным B-фактором - Gly 195: 15, 147; Снизу: остаток с максимальным B-фактором - Ala 19: 111,336

Далее я оценила разброс значений B-фактора (Рис. 2).

```
In [39]: selection_max.getBetas()
         executed in 7ms, finished 20:25:38 2021-11-06
Out[39]: array([109.63, 112.6 , 111.83, 119.43, 103.19])

In [41]: selection_min.getBetas()
         executed in 9ms, finished 20:26:05 2021-11-06
Out[41]: array([14.85, 15.78, 15.25, 14.71])
```

Рис. 2 Сверху: разброс значений B-фактором для Ala 19; Снизу: разброс значений B-фактором для Gly 195

Как видим разброс небольшой. То есть наличие или отсутствие размытости электронной плотности характерно для всего остатка.

На рисунке 3 изображены эти остатки:

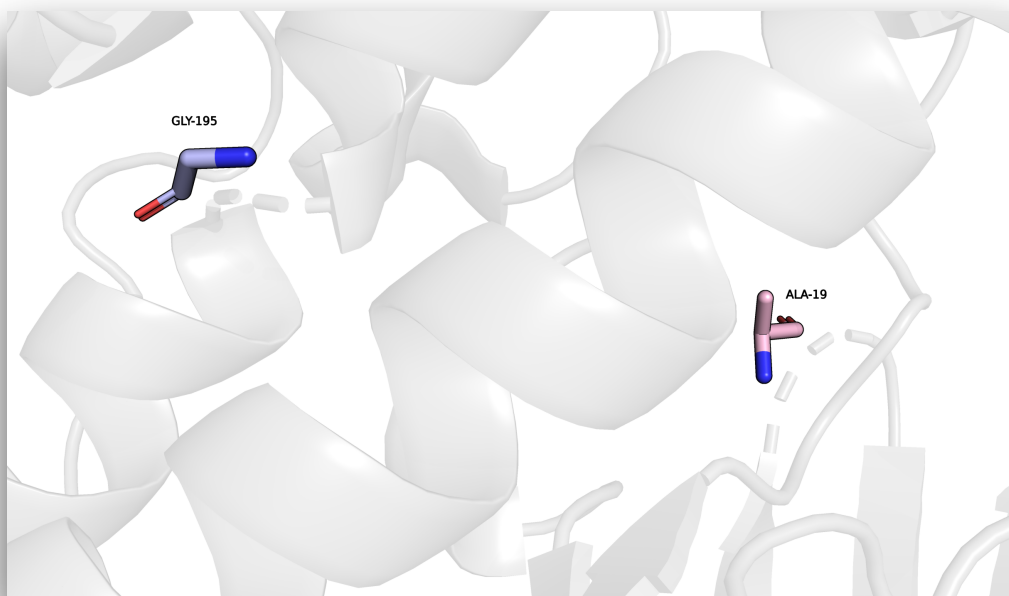


Рис. 3 Остатки глицина и аланина в контексте своей структуры.

Значение В - фактора напрямую связано с их положением. Глицин входит в состав альфа - спирали, он находится внутри белковой глобула, в то время как аланин расположен на поверхности белка между бета-слоями.

Задание 2. Prody и В-факторы часть 2

Для каждого остатка белка я вычислила средний В-фактор по его атомам и его центр масс. Затем вычислила центр масс всего белка. А также нашла для каждого остатка расстояние от его центра масс до центра масс белка.

Далее был построен график зависимости В-фактора от расстояния до центра белка:

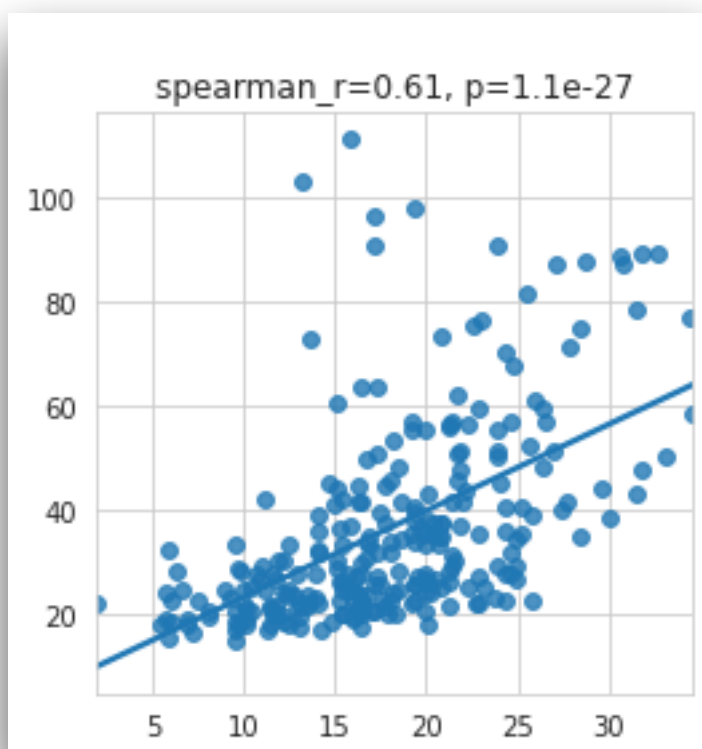


Рис. 4 График зависимости В-фактора остатка от его расстояния до центра белка.

На рисунке 4 наблюдается определенная закономерность - с увеличением расстояния от центра масс остатка до центра масс белка растет значение В-фактора. Математически это наблюдение подтверждается вычисленным коэффициентом ранговой корреляции Спирмена. Он равен 0,61.

Задание 3. Как работает восстановление функции электронной плотности по экспериментальным данным

В ходе выполнения задания, я заполняла следующую таблицу:

Таблица 1. Восстановление функции по коэффициентам ряда Фурье.

Набор гармоник	Разрешение (Å)	Полнота данных (%)	Шум амплитуды (% от величины F)	Шум фазы (% от величины phi)	Качество восстановления (отличное, хорошее, среднее, плохое)
Полный набор гармоник					
0–2	30 Å	100 %	0	0	Плохое
0–10	3 Å	100 %	0	0	Плохое
0–15	2 Å	100 %	0	0	Среднее
0-20	1,5 Å	100 %	0	0	1-среднее 2-хорошее
0-30	1 Å	100 %	0	0	1 - отличное 2-хорошее
0-40	0,75 Å	100 %	0	0	1 - отличное 2-хорошее
0-50	0,6 Å	100 %	0	0	1 - отличное 2-хорошее
0-60	0,5 Å	100 %	0	0	Отличное
0-60	0,5 Å	100 %	25 %	0	1- отличное 2 - хорошее
0-60	0,5 Å	100 %	50 %	0	1-отличное 2-плохое
0-60	0,5 Å	100 %	75 %	0	Плохое
0-60	0,5 Å	100 %	0	25 %	1- отличное 2 - хорошее
0-60	0,5 Å	100 %	0	50 %	1-хорошее 2-плохое
0-60	0,5 Å	100 %	0	75 %	Плохое
0-60	0,5 Å	100 %	10 %	30 %	1 - отличное 2 - плохое
0-60	0,5 Å	100 %	30 %	10 %	1 - среднее 2 - среднее
Неполный набор гармоник					
2-60	0,5 Å	96,667 %	0	0	Отличное
10-60	0,5 Å	83,333 %			Хорошее, близкое к среднему
20-60	0,5 Å	33,333 %	0	0	Среднее