

# Python для структур и не только

## Задание 1. Prody и B-факторы часть 1

PDB ID: 6AAO

Для работы был дан уже ранее использованный в прошлом практикуме PDB ID.

Целью было найти два остатка с максимальным и минимальным средним значением B-фактора, используя Prody.

Остаток с минимальным средним B-фактором (15.038) - GLU 261.

Остаток с максимальным средним B-фактором (82.505) - ASP 279.

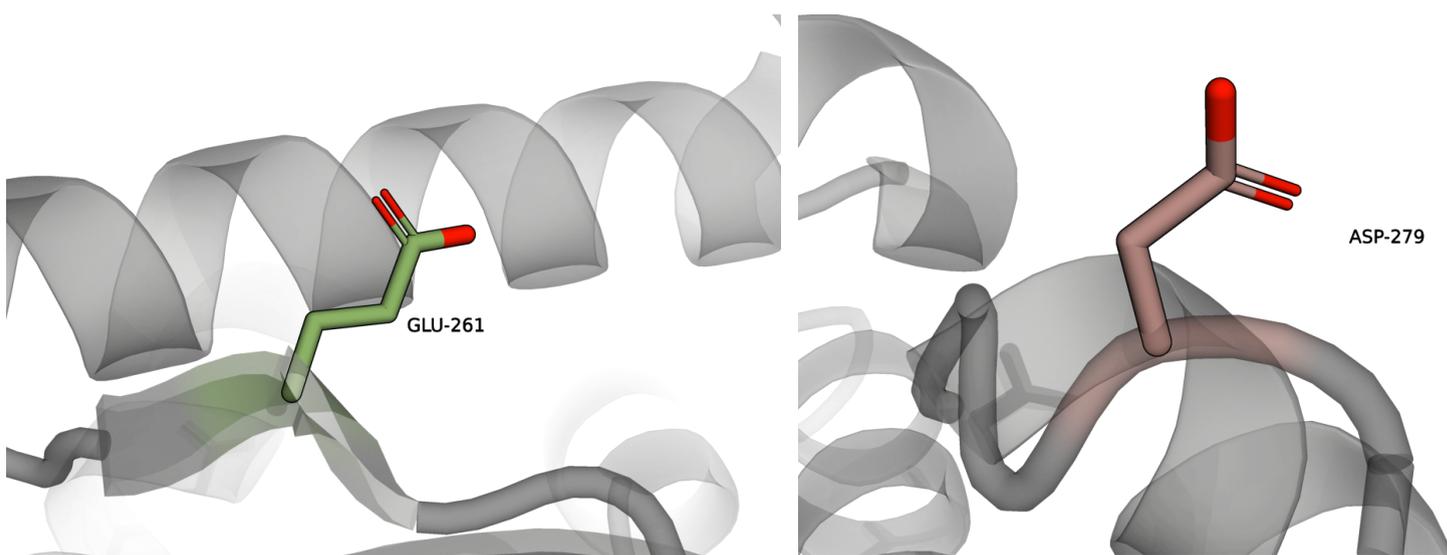


Рис. 1. GLU 261 - остаток с минимальным средним B-фактором

Рис. 2. ASP 279 - остаток с максимальным средним B-фактором

Ниже представлено распределение значений B-фактора по атомам в найденных остатках.

GLU 261	ASP 279
Atom N (index 611) 14.14	Atom N (index 758) 75.18
Atom CA (index 612) 13.75	Atom CA (index 759) 79.36
Atom C (index 613) 13.98	Atom C (index 760) 79.61
Atom O (index 614) 15.73	Atom O (index 761) 80.22
Atom CB (index 615) 14.48	Atom CB (index 762) 82.96
Atom CG (index 616) 15.15	Atom CG (index 763) 86.56
Atom CD (index 617) 15.0	Atom OD1 (index 764) 87.86
Atom OE1 (index 618) 17.11	Atom OD2 (index 765) 88.29
Atom OE2 (index 619) 16.0	

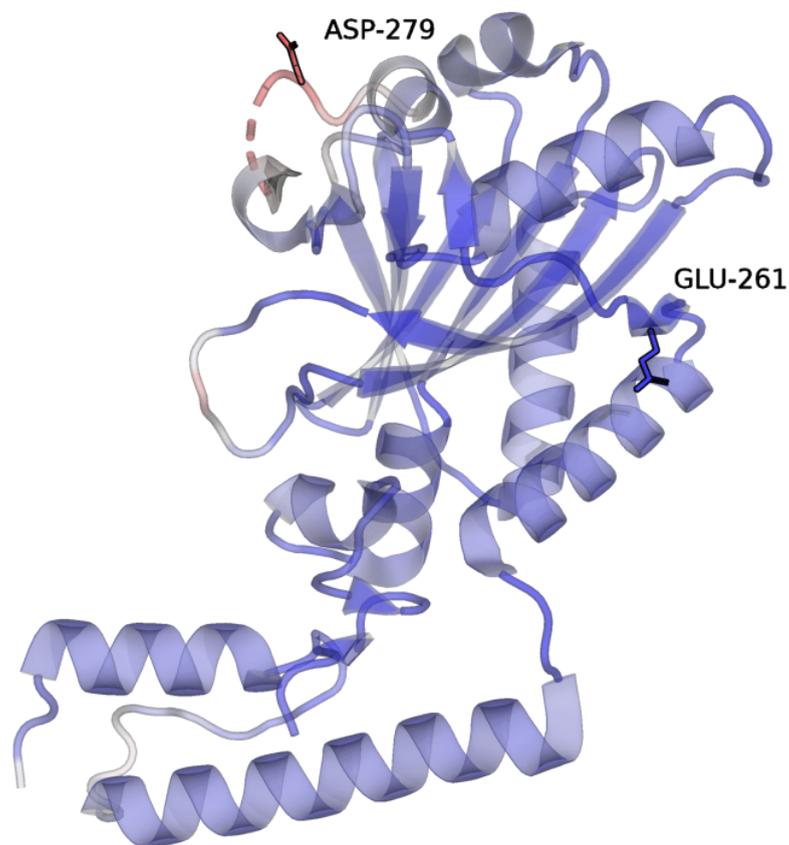


Рис. 3. Остатки с максимальным (ASP 279) и минимальным (GLU 261) средним значением В-фактора.

Для того, чтобы проанализировать найденные остатки и понять, почему их В-факторы так различаются была рассмотрена структура заданного белка.

Раскраска производилась по В-фактору: атомы с высокими значениями В-фактора окрашены в красный, с низким - в синий.

Остаток с максимальным средним В-фактором заметно выступает за пределы молекулы и находится как бы с краю, из-за чего довольно подвижен. Остаток же с минимальным средним В-фактором вероятно стабилизируется окружением, что и приводит к его малоподвижности.

## Задание 2. Prody и В-факторы часть 2

Целью этого задания было вычисление среднего В-фактора для каждого АК остатка заданного белка по его атомам и расстоянию от его центра масс до центра масс всего белка.

Был построен scatter plot зависимости В-фактора от расстояния до центра белка.

На графике видно, что есть зависимость между В-фактором остатка и расстоянием до центра белка. В целом можно сказать, что чем больше расстояние между остатком и центром белка, тем больше В-фактор, хотя после 15 ангстрем значения перестают сильно меняться.

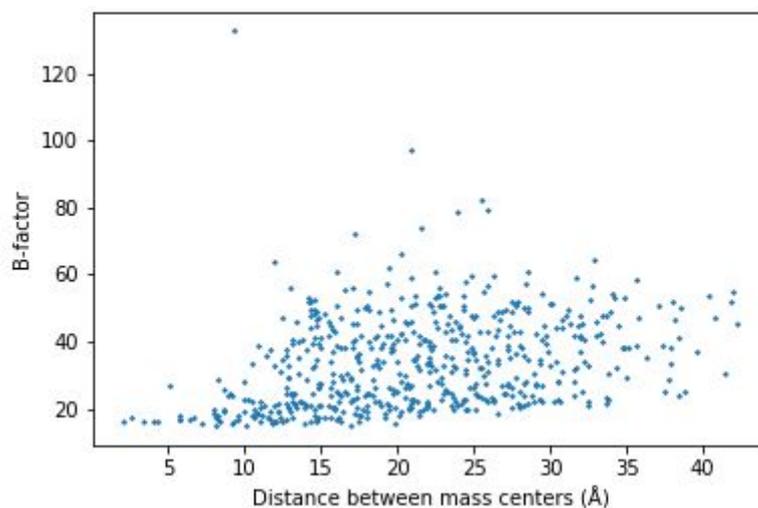


Рисунок 4. Scatter plot зависимости B-фактора от расстояния до центра белка.

### Задание 3. Восстановление функции ЭП по экспериментальным данным.

В этом задании нужно было воспроизвести ход кристаллографического эксперимента в упрощённой форме.

Была сгенерирована и разложена в ряд Фурье функция электронной плотности. Затем были предприняты попытки к восстановлению изначальной функции.

- Параметры функции:  
 $30,3,5+40,6,6,5,2+2,5,6,6+22,3,7,8,8+30,2,18+2,5,19+25,2,20$
- Атомы представлены на отрезке в 30 ангстрем.
- Электронная плотность описывается гауссовой кривой

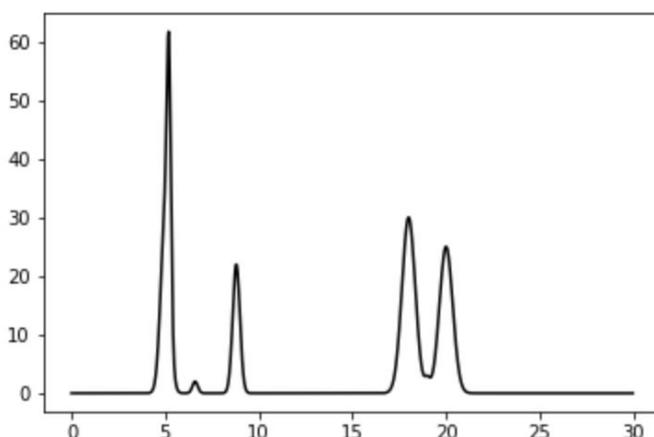


Рисунок 4. Сгенерированная функция электронной плотности.

Далее было проведено восстановление функции электронной плотности по полному набору гармоник без различных шумов.

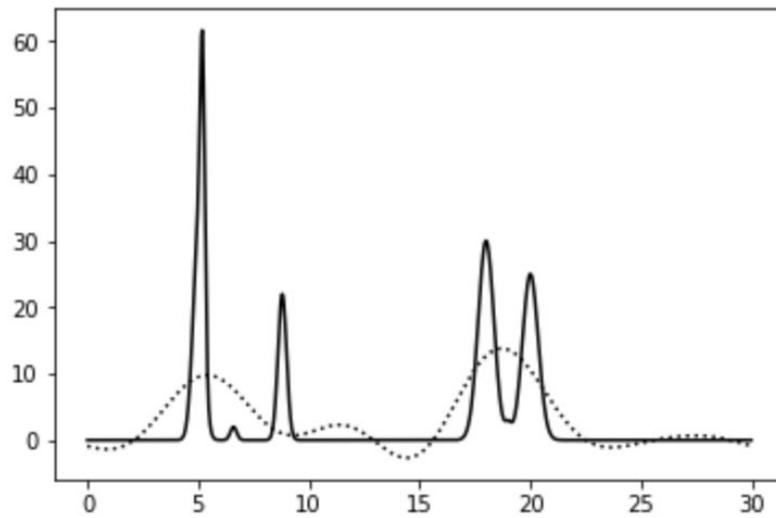


График 1. Набор гармоник 0-5

Набор гармоник	Разрешение	Качество восстановления
0-5	6	Плохое

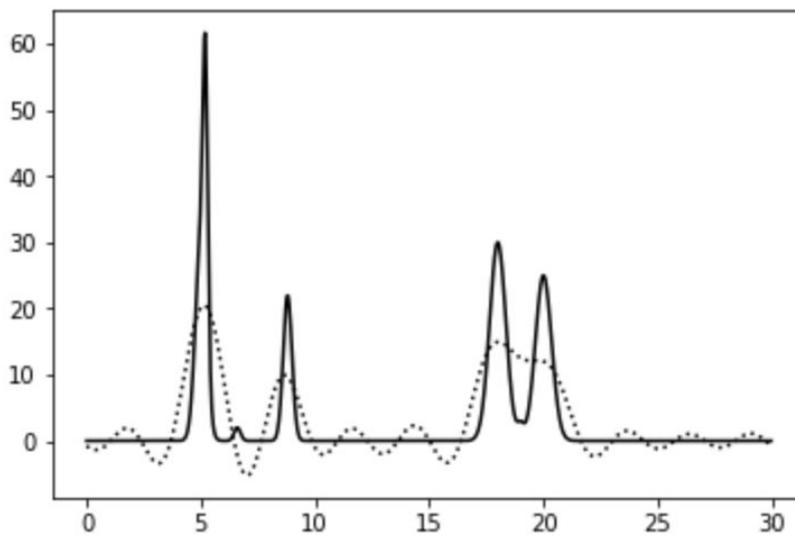


График 2. Набор гармоник 0-10

Набор гармоник	Разрешение	Качество восстановления

0-10	3	Среднее, невозможно определить положения водородов
------	---	--

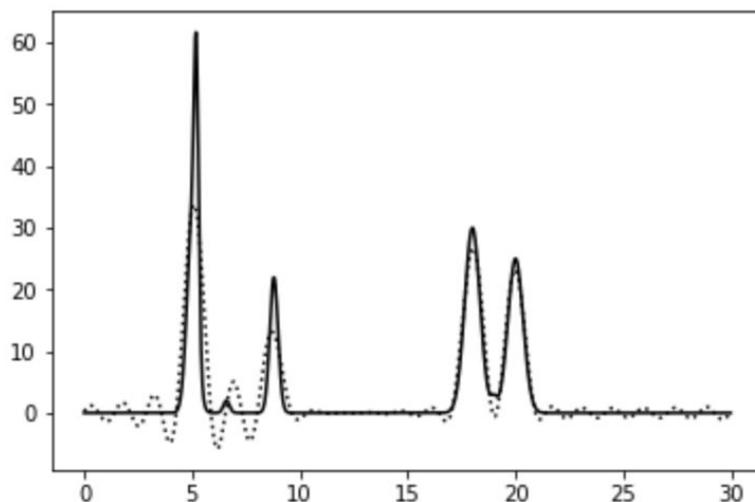


График 3. Набор гармоник 0-20

Набор гармоник	Разрешение	Качество восстановления
0-20	1.5	Среднее - довольно хорошо видны атомы, но водороды все еще есть трудности

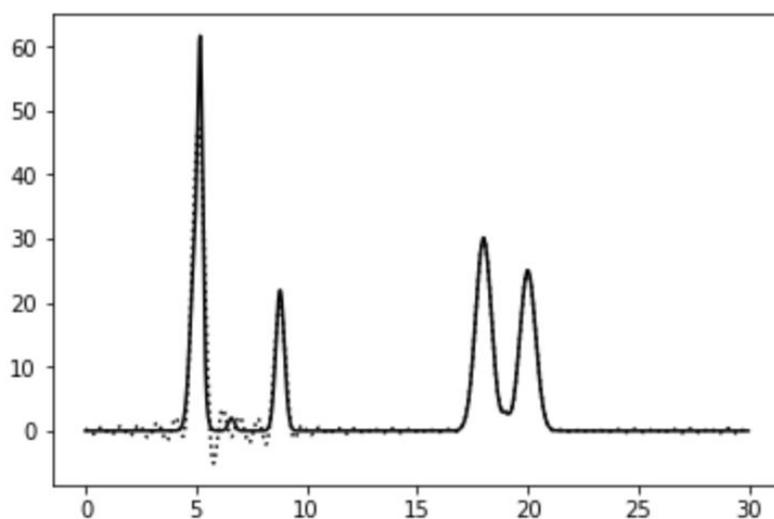


График 4. Набор гармоник 0-30

Набор гармоник	Разрешение	Качество восстановления

0-30	0.86	Хорошее - все атомы видны хорошо, однако шум все еще присутствует
------	------	---

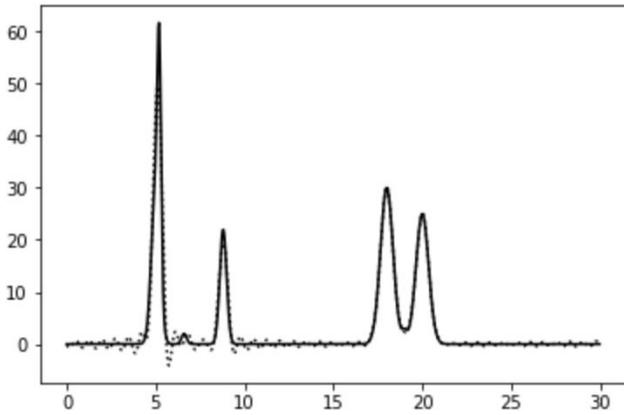


График 5. Набор гармоник 0-40.  
Разрешение 0.75

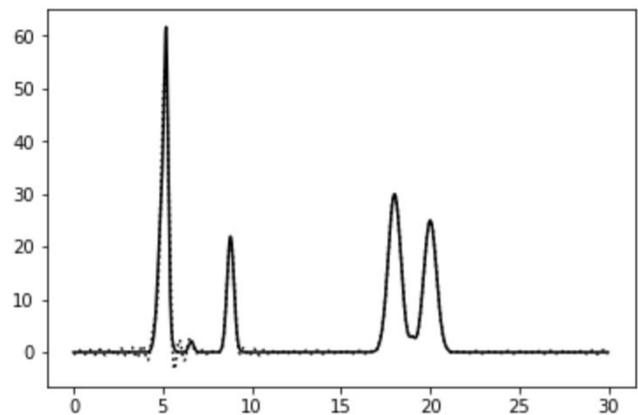


График 6. Набор гармоник 0-50.  
Разрешение 0.6

Отличное качество восстановления. Шум присутствует в незначительной степени.

Восстановление функции электронной плотности по полному набору гармоник (0-40) с зашумлением.

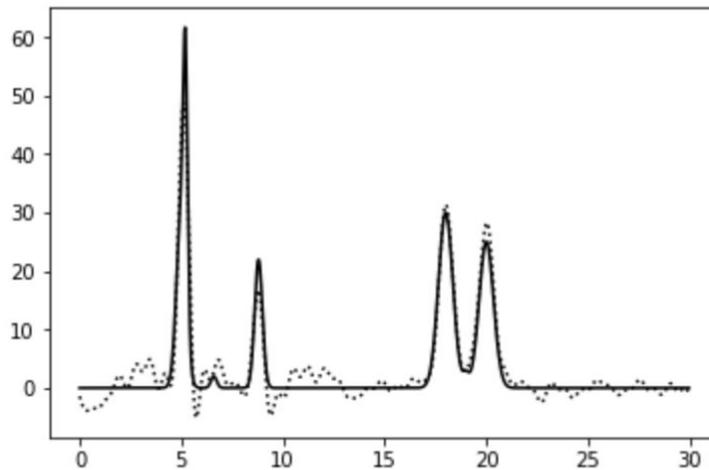


График 7. Набор гармоник 0-40. Зашумление 20%

Шум амплитуды	Шум фазы	Качество восстановления
---------------	----------	-------------------------

20%	0%	В общем зашумление 20% по амплитуде не сильно испортило восстановление
-----	----	--

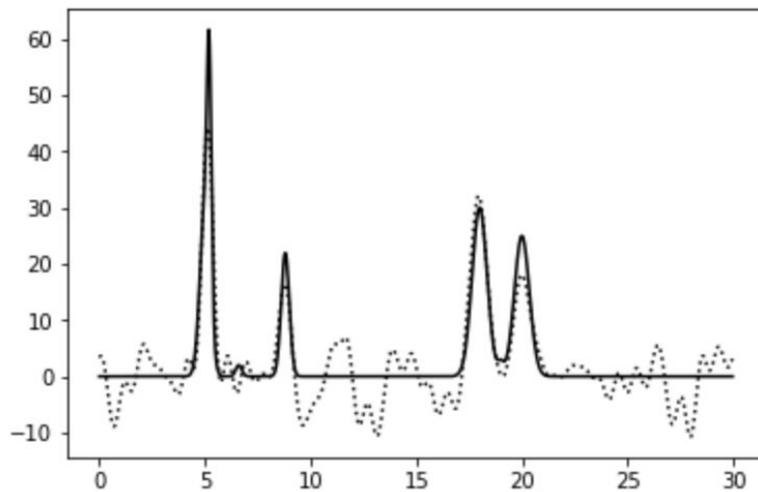


График 8. Набор гармоник 0-40. Зашумление 70%

Шум амплитуды	Шум фазы	Качество восстановления
70%	0%	Качество упало и водороды уже отличить очень сложно, тем не менее другие атомы найти ещё реально

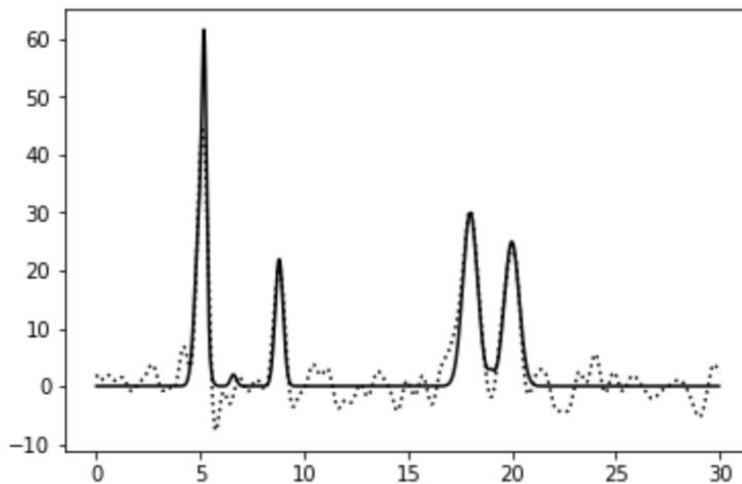


График 9. Набор гармоник 0-40. Зашумление по фазе 20%

Шум амплитуды	Шум фазы	Качество восстановления

0%	20%	Качество упало и водороды найти почти невозможно, тем не менее другие атомы прослеживаются
----	-----	--

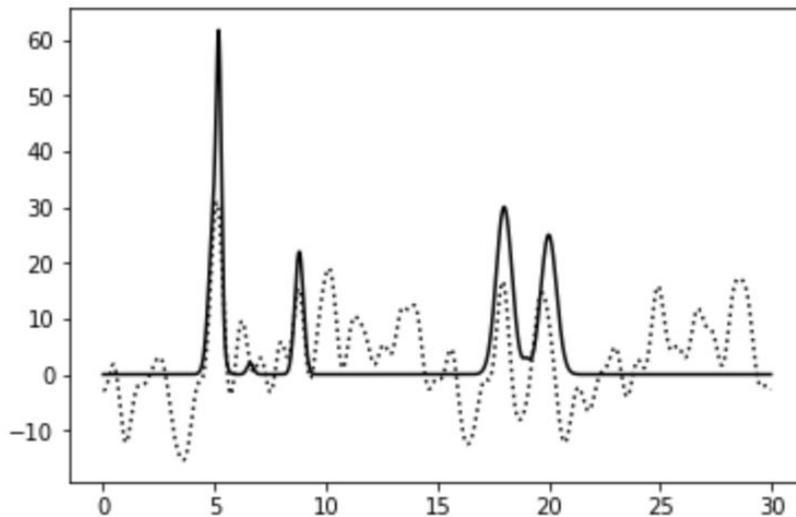


График 10. Набор гармоник 0-40. Зашумление по фазе 70%

Шум амплитуды	Шум фазы	Качество восстановления
0%	70%	Почти невозможно что-то разобрать

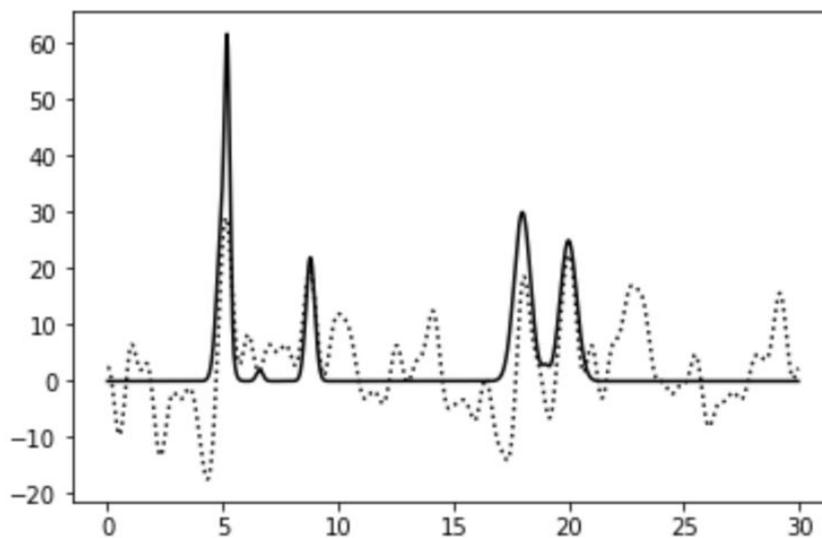


График 11. Набор гармоник 0-40.

Шум амплитуды	Шум фазы	Качество восстановления
20%	70%	Наблюдаемый результат не отличается от шума и что-то сказать будет крайне сложно

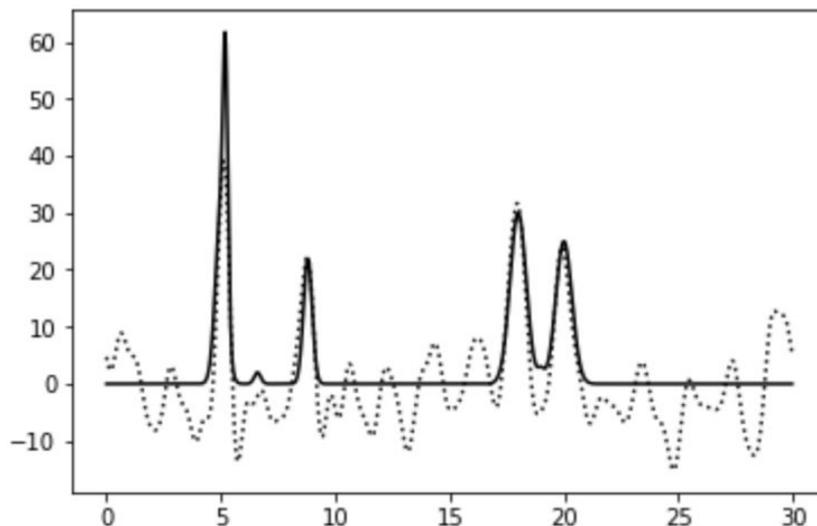


График 12. Набор гармоник 0-40.

Шум амплитуды	Шум фазы	Качество восстановления
70%	20%	Теоретически можно определить положение атомов (не водородов), но это очень сложно

Восстановление функции электронной плотности по неполному набору гармоник.

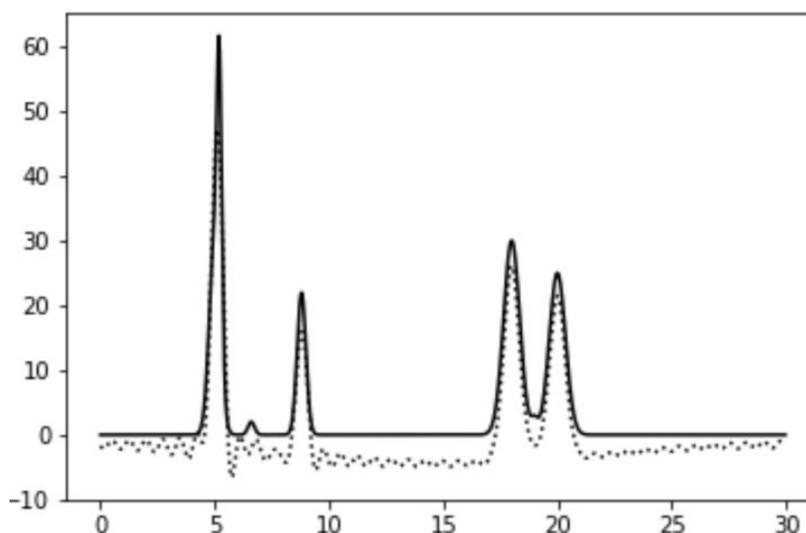


График 13. Набор гармоник 2-40.

Набор гармоник	Полнота данных %	Качество восстановления

2-40	95	Отличное - график немного съехал вниз, но атомы все еще различимы
------	----	---

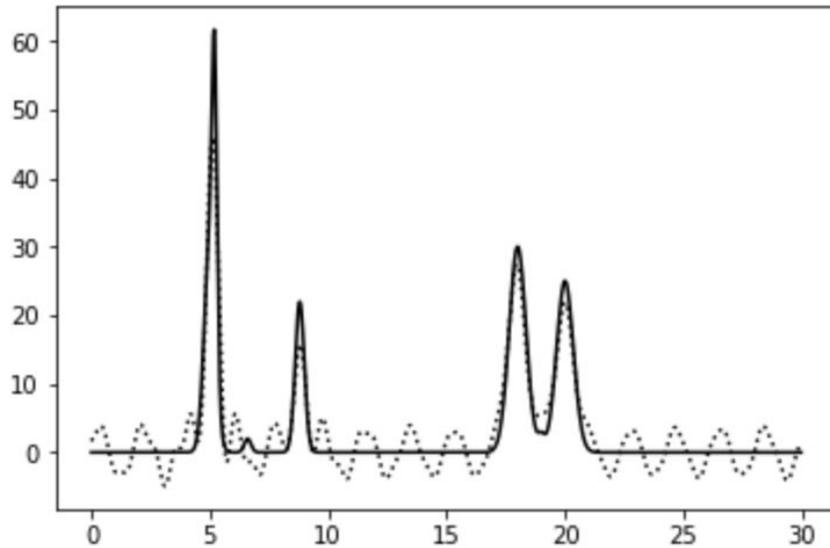


График 14. Набор гармоник 0-14, 17-40.

Набор гармоник	Полнота данных %	Качество восстановления
0-14, 17-40	92.5%	Хорошее - все атомы, кроме водородов, реально отличить

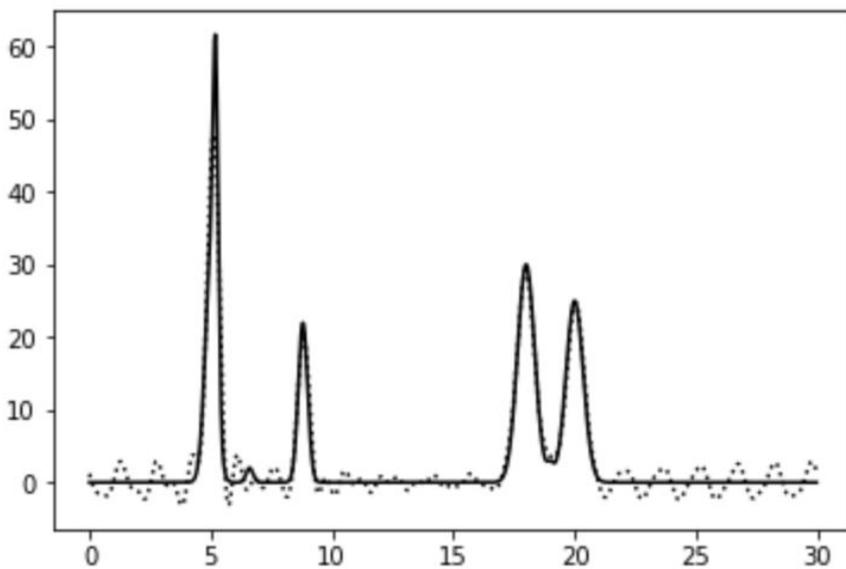


График 15. Набор гармоник 0-18, 21-40.

Набор гармоник	Полнота данных %	Качество восстановления
0-18, 21-40	92.5%	Хорошее - все атомы, кроме водородов, реально отличить

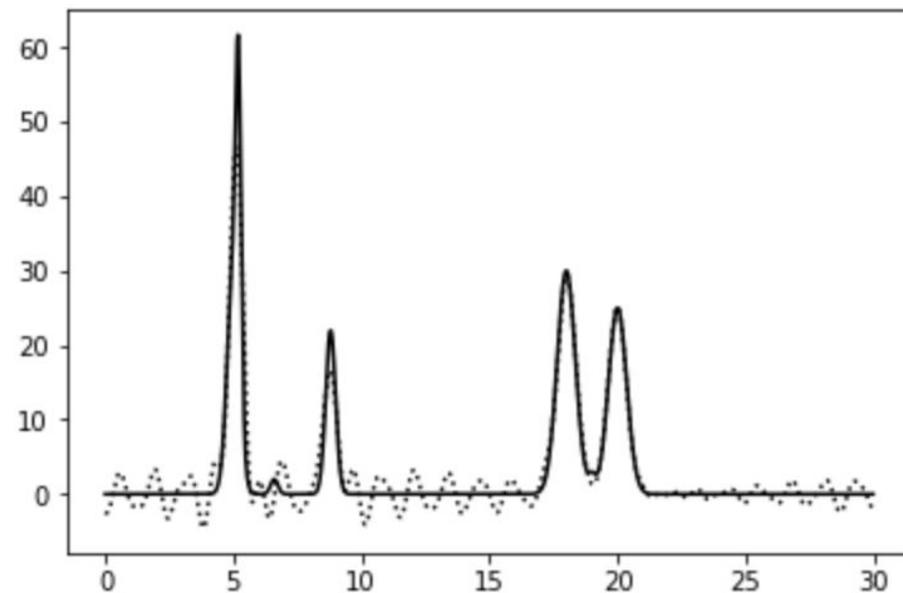


График 16. Набор гармоник 0-22, 25-40.

Набор гармоник	Полнота данных %	Качество восстановления
0-22, 25-40	92.5%	Хорошее - все атомы, кроме водородов, реально отличить

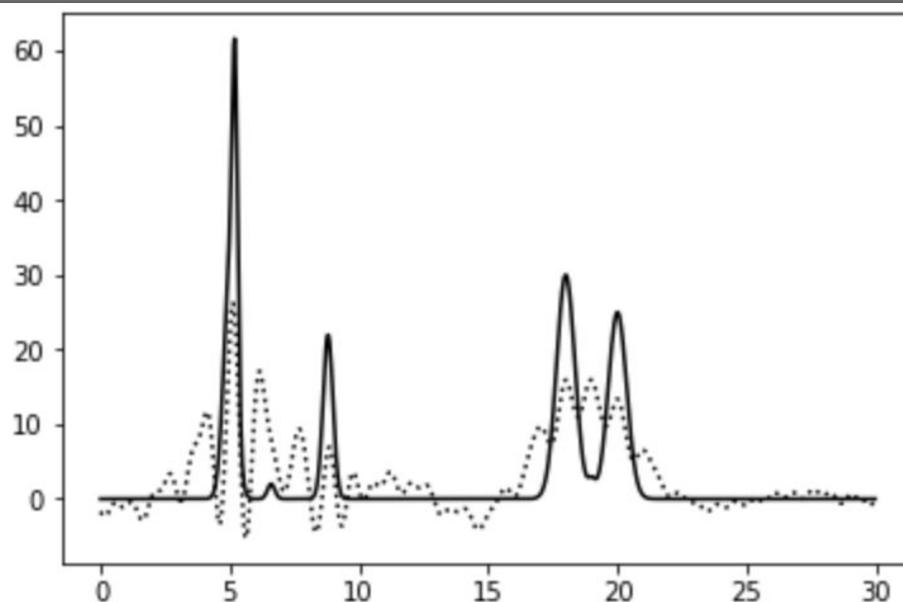


График 17. Набор гармоник 0-5, 20-40.

Набор гармоник	Полнота данных %	Качество восстановления
0-5, 20-40	62.5%	Плохое – атомы крайне сложно отличить от шума

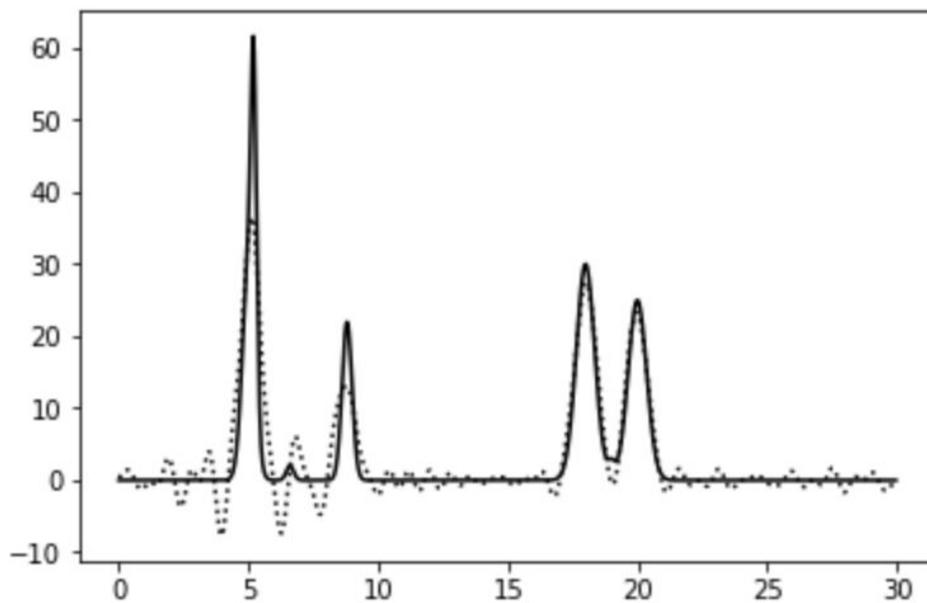


График 18. Набор гармоник 0-20, 35-40.

Набор гармоник	Полнота данных %	Качество восстановления
0-20, 35-40	62.5%	Хорошее – все атомы, кроме водородов легко отличить

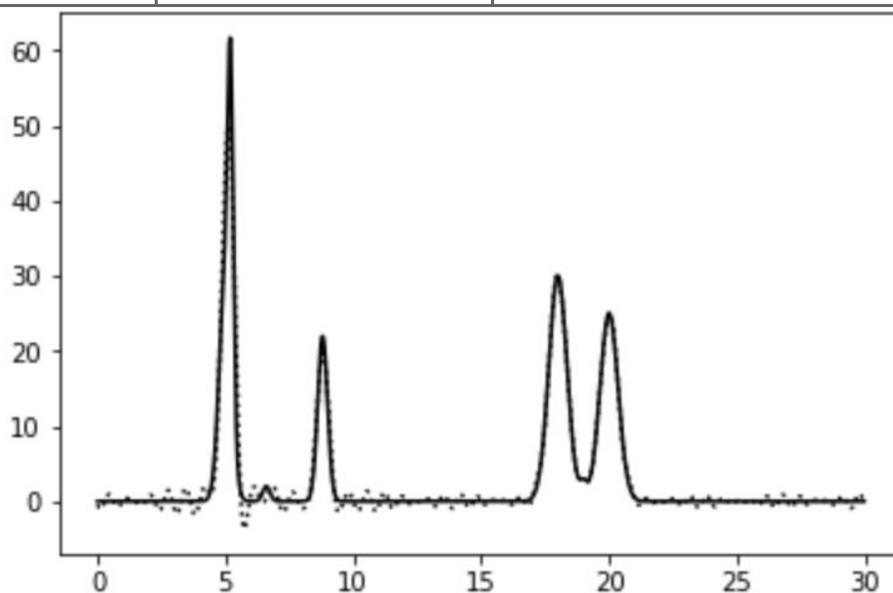


График 18. Набор гармоник 0-40, 50.

Набор гармоник	Полнота данных %	Качество восстановления
0-40, 50	80%	Сильно ничего не портится

#### Выводы:

- Удаление гармоник из конца набора помогает улучшить читаемость графика, в то время как потеря даже нескольких гармоник из начала набора приводит к тому, что становится невозможно отличить водороды (хотя восстановление все еще хорошее)
- Удаление большого количества гармоник сильнее ухудшает читаемость
- Добавление десятой после максимума набора гармоники не вносит существенных изменений