

C2150

Zpracování informací a vizualizace v chemii a biochemii

7. lekce (3D vizualizace III)

Petr Kulhánek

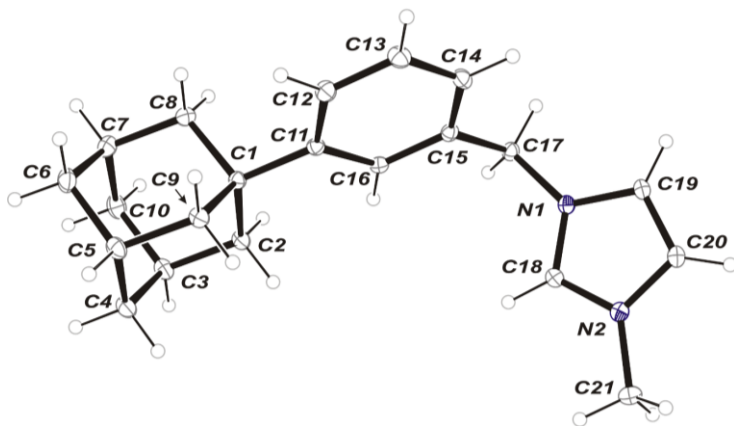
kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kamenice 5, CZ-62500 Brno

In silico modelování struktur

Modelování

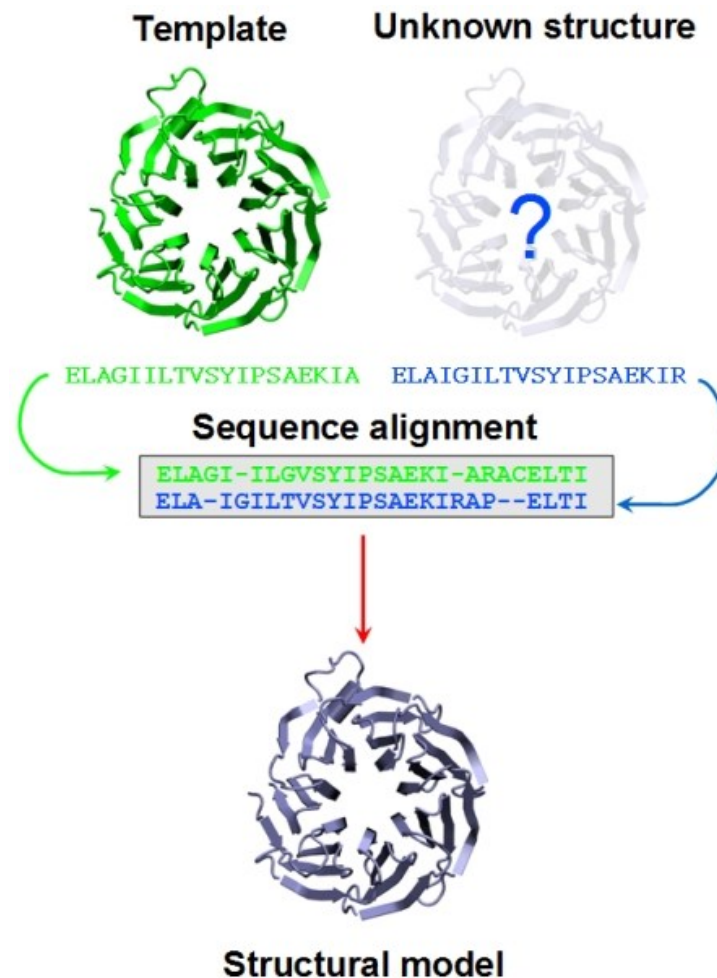
Modifikace existujících experimentálních struktur



Dostupné exp. struktury je možné měnit

- zaváděním nových substituentů
- vytvářením komplexů s jinými látkami
- ...

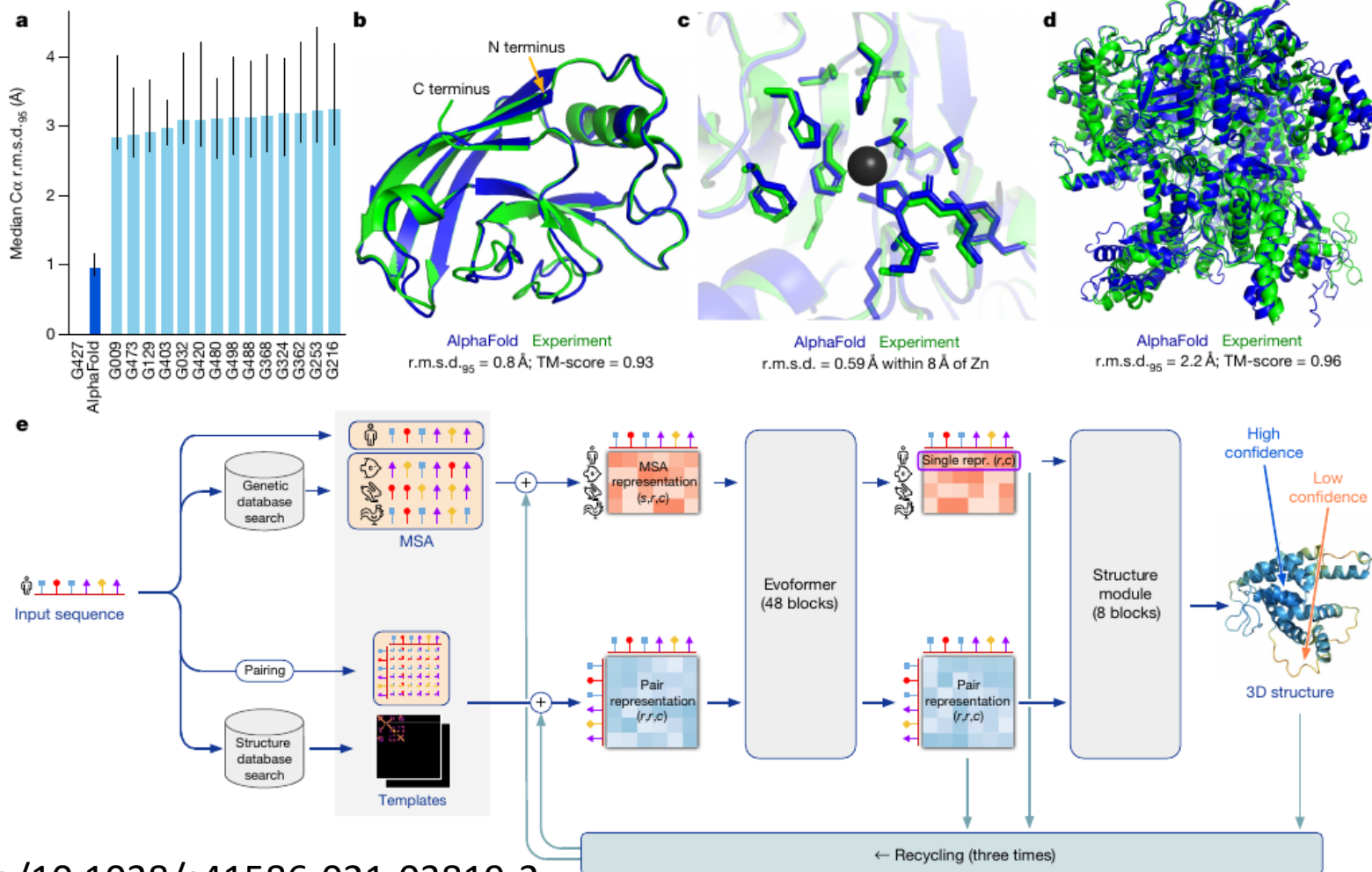
Homologní modelování



<http://www.unil.ch/pmf/en/home/menuinst/technologies/homology-modeling.html>

AlphaFold

AlphaFold využívá strojové učení k predikce 3D struktur proteinů a jejich komplexů ze sekvence aminokyselin.



<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2>

AlphaFold DB

<https://alphafold.ebi.ac.uk/>

AlphaFold DB provides open access to 992,316 protein structure predictions (2022) for the human proteome and other key proteins of interest, to accelerate scientific research.

AlphaFold is an AI system developed by DeepMind that predicts a protein's 3D structure from its amino acid sequence. It regularly achieves accuracy competitive with experiment.

DeepMind and EMBL's European Bioinformatics Institute (EMBL-EBI) have partnered to create AlphaFold DB to make these predictions freely available to the scientific community. The database covers the complete human proteome (including fragments for long proteins) and the proteomes of 47 other key organisms (e.g., mouse), as well as the majority of manually curated UniProt entries (Swiss-Prot).

In 2022 we plan to expand the database to cover a large proportion of all catalogued proteins (**the over 100 million** in UniRef90).

Cvičení 1

1. Najděte v PDB databázi strukturu malého proteiny s počtem AA < 200 a datem publikování > 2021-04.
2. Je tento protein obsažen v databázi AlphaFold DB?
3. Provedte predikci proteinu nástrojem alphafold. K řešení použijte návod uvedený v modulu alphafold. **Na klastru WOLF musí být vstupní data úlohy umístěny na scratchi!**

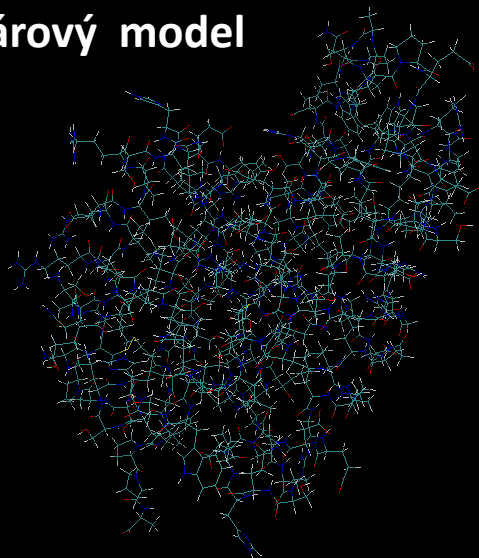
```
$ module help alphafold
```

4. Srovnejte predikovanou strukturu se strukturou experimentální (provedete v následující hodině).

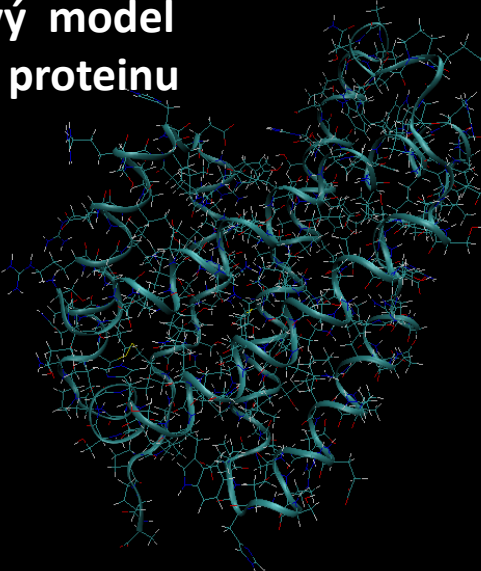
Vizualizace biomolekul

Vizualizace – biomolekuly

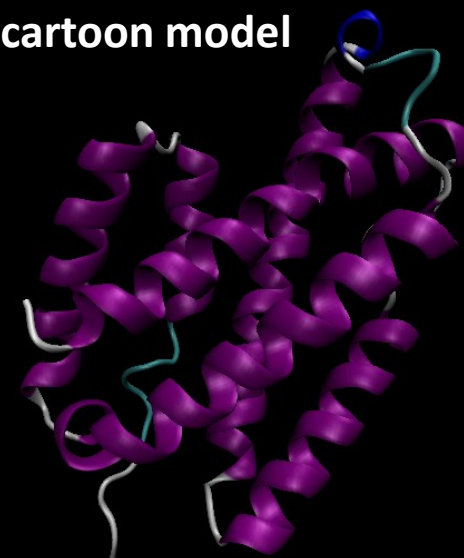
čárový model



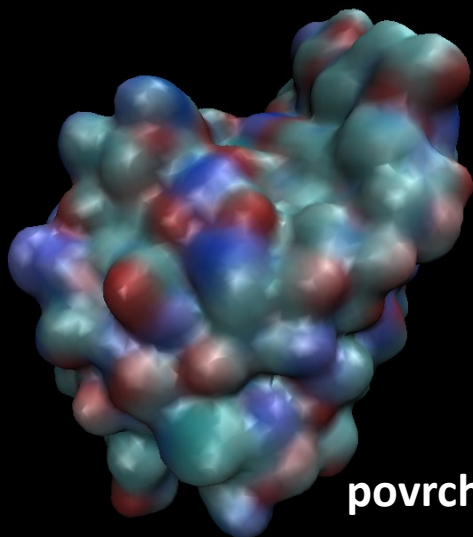
čárový model
páteř proteinu



cartoon model



stejná struktura
jiná vizualizace

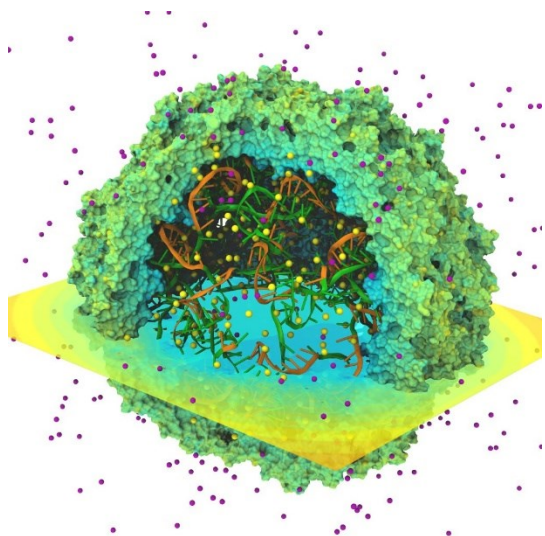


povrch biomolekuly

Různé modely slouží k zvýraznění určité strukturní informace nebo vnitřní vlastnosti molekuly či uskupení molekul, které pak usnadňuje snadnější pochopení studovaného problému.

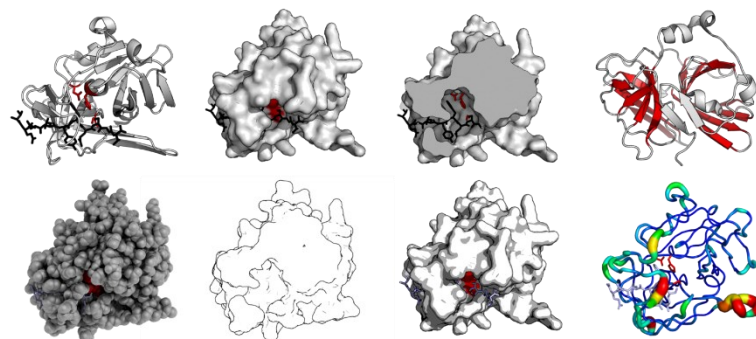
Software

Visual Molecular Dynamics (VMD)



<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd>

PyMOL



<https://en.wikipedia.org/wiki/PyMOL>

- scriptable (TCL, Python)
- advanced rendering
- available for MS Windows, Linux, macOS

Dále např. **Chimera** (<https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>)

Overview of software:

https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_molecular_graphics_systems

Spuštění programů - PyMOL

- PyMOL

```
$ module add pymol
```

```
$ pymol
```

Cvičení 2

1. Řešte úkoly v samostatném dokumentu popisujícím používání programu PyMOL.