

Предсказание функции родопсинов

А. Е. Ушаков¹, П. А. Попов¹, А. М. Казённов¹, С. В. Грудинин²³⁴¹Московский физико-технический институт (государственный университет)²CNRS, LJK, F-38000 Grenoble, France³Inria⁴Univ. Grenoble Alpes, LJK, F-38000 Grenoble, France

Организмы всех доменов используют фоторецепторные белки, чтобы реагировать на свет. Одними из таких белков являются микробные родопсины, состоящие из опсина и ковалентно связанным с ним ретинали, который поглощает фотоны с целью превращения их в энергию, нужную для осуществления функциональной активности белка, что помогает организмам выживать и адаптироваться к окружающей среде. В качестве примера функций микробных родопсинов можно привести бактериородопсин, прокачивающий протон через мембрану, и галородопсин, который прокачивает ион хлора. Таким образом, несмотря на то, что мембранные части родопсинов в достаточной степени гомологичны, функции их могут сильно отличаться. Говоря о структуре данных родопсинов стоит отметить, что они содержат семь трансмембранных столбов, обычно обозначаемых латинскими буквами от А до G. Данные белки обращены С-концом наружу и N-концом внутрь клетки (рис 1.). Ретиналь ковалентно связан с лизином на столбце G. [1]

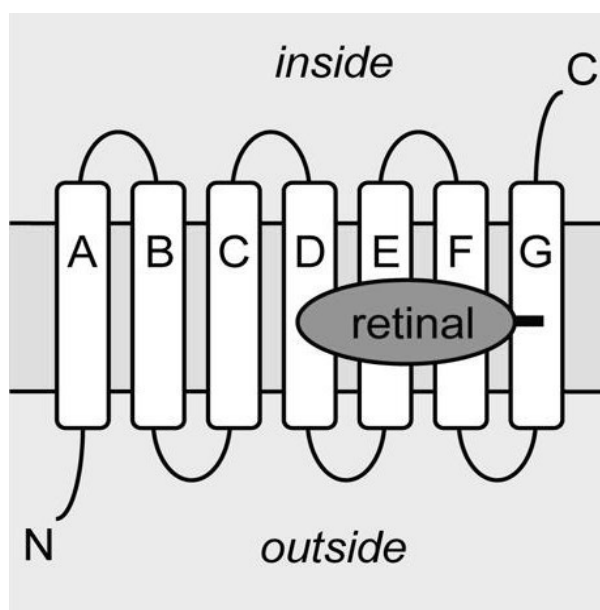


Рис. 1. Структура родопсинов. [1]

К сожалению, задача предсказания функции родопсина на данный момент не

решена, из-за того, что используются лишь признаки, основанные на первичной структуре белка. Мы же направили наши усилия на то, чтобы написать программу, которая предсказывает функцию микробного родопсина по аминокислотной последовательности и по признакам, полученным из 3D структуры белка. Эта структура создаётся при помощи программы моделлер, осуществляющей поиск аналогов по известным структурам родопсинов, которые, обладая схожей структурой, позволяют предсказать структуру белка с достаточной степенью точности. [2] Далее по белкам с известной функцией происходит обучение multiclass SVM классификатора, который должен предсказывать функцию родопсинов. [3]

Литература

- [1] *Oliver P. Ernst, David T. Lodowski* - Microbial and Animal Rhodopsins: Structures, Functions, and Molecular Mechanisms, *Chem. Rev.*, 2014, 114 (1), pp 126–163.
- [2] *N. Eswar, M. A. Marti-Renom, B. Webb, M. S. Madhusudhan, D. Eramian, M. Shen, U. Pieper, A. Sali*. - Comparative Protein Structure Modeling With MODELLER. *Current Protocols in Bioinformatics*, John Wiley & Sons, Inc., Supplement 15, 5.6.1-5.6.30, 2006.
- [3] *C.-C. Chang and C.-J. Lin*. LIBSVM : a library for support vector machines. *ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology*, 2:27:1--27:27, 2011.