

QASDOM: МЕТА-СЕРВЕР ДЛЯ АНАЛИЗА, ОЦЕНКИ И РАНЖИРОВАНИЯ МОДЕЛЕЙ БЕЛОК-БЕЛКОВОГО ДОКИНГА

Анашкина А.А., Кравацкий Ю.В., ¹Кузнецов Е.Н., Аджубей А.А.

Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН,
Россия, 119991, Москва, Вавилова 32, nastya@eimb.ru

¹Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН,
Россия, 117997, Москва, ул. Профсоюзная, д. 65

Сервер QASDOM (Quality ASsessment of Docking Models) это простой и эффективный инструмент для одновременного анализа, оценки и ранжирования наборов моделей взаимодействия рецептор-лиганд (комплексов), построенных методами глобального докинга, в режиме реального времени. Моделирование при помощи нескольких серверов, использующих разные алгоритмы докинга, позволяет более достоверно предсказать сайты взаимодействия. Однако оценка и сравнение всех моделей экспертом трудоемка и практически неприменима для большого объема такого моделирования. Данный инструмент разработан для пользователей, которым необходимо проанализировать набор моделей докинга большого объема, полученный разными способами и инструментами предсказания, оценить вероятность вовлечения тех или других остатков в процесс узнавания, ранжировать модели по критериям качества и выбрать наилучшую модель. Сервер позволяет визуализировать участки последовательности рецептора и лиганда, вовлеченные во взаимодействия, и отобразить в трехмерном пространстве структуры моделей комплекса рецептор-лиганд.

Каждой модели присваивается две независимых оценки, характеризующие качество модели в данном наборе моделей докинга. В качестве входных данных сервер QASDOM принимает модели докинга в формате PDB, построенные серверами Hex, SwarmDock, ClusPro, Gramm-X, Zdock, а также любые другие модели комплексов в формате PDB, заархивированные в форматах zip, tar, tar.gz или без архивации. В качестве рецептора и лиганда в комплексах могут рассматриваться молекулы любой природы, включая белок-нуклеиновые комплексы, и допускаются любые химические модификации в составе рецептора или лиганда. Сервер применялся для изучения моделей комплексов в работах [1] и [2].

Работа выполнена при поддержке грантов РФФ 14-24-00100 и РФФИ 15-04-99605.

Литература

1. Adzhubei, A. A. et al. Left-handed polyproline-II helix revisited: proteins causing proteopathies // *J. Biomol. Struct. Dyn.* 2016. 1–13.
2. Petrushanko, I. Y. et al. Direct interaction of beta-amyloid with Na,K-ATPase as a putative regulator of the enzyme function // *Sci. Rep.* 6, 2016.