

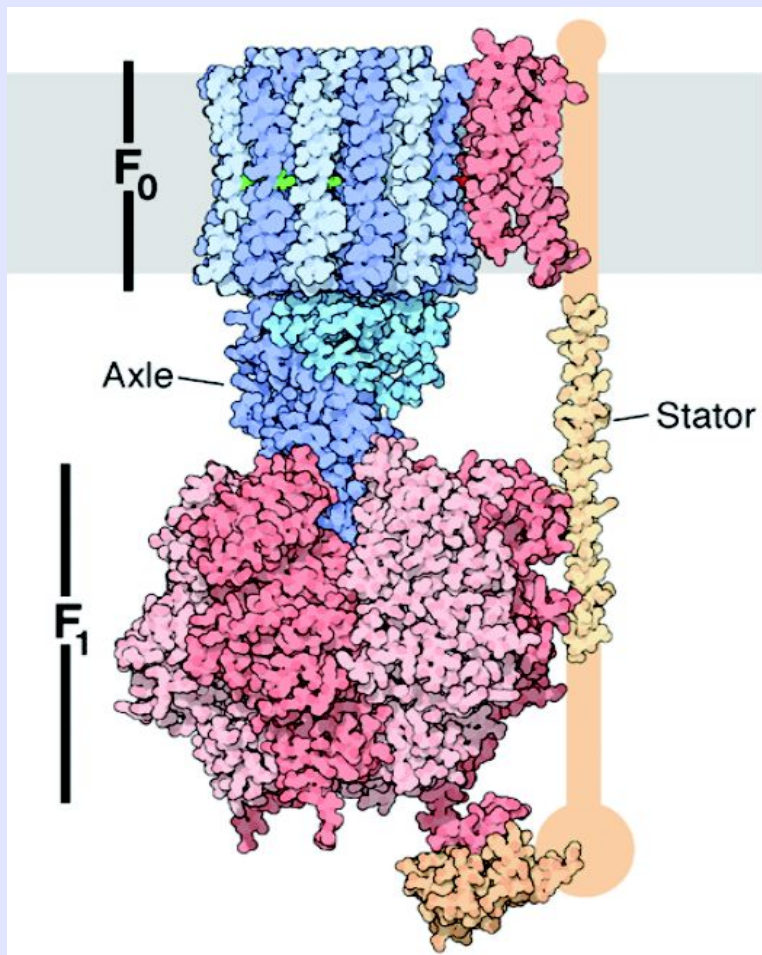
# Функции

Мембранные белки.  
Транспортные белки.

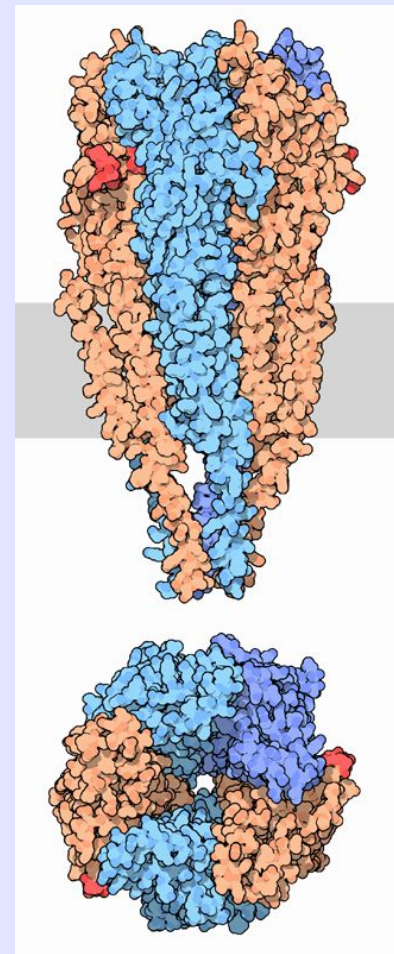
А.Б. Рахманинова  
(13 апреля 2010 г.)

*Факультет Биоинженерии и Биоинформатики,  
2 курс, весенний семестр*

## АТФ-синтетаза

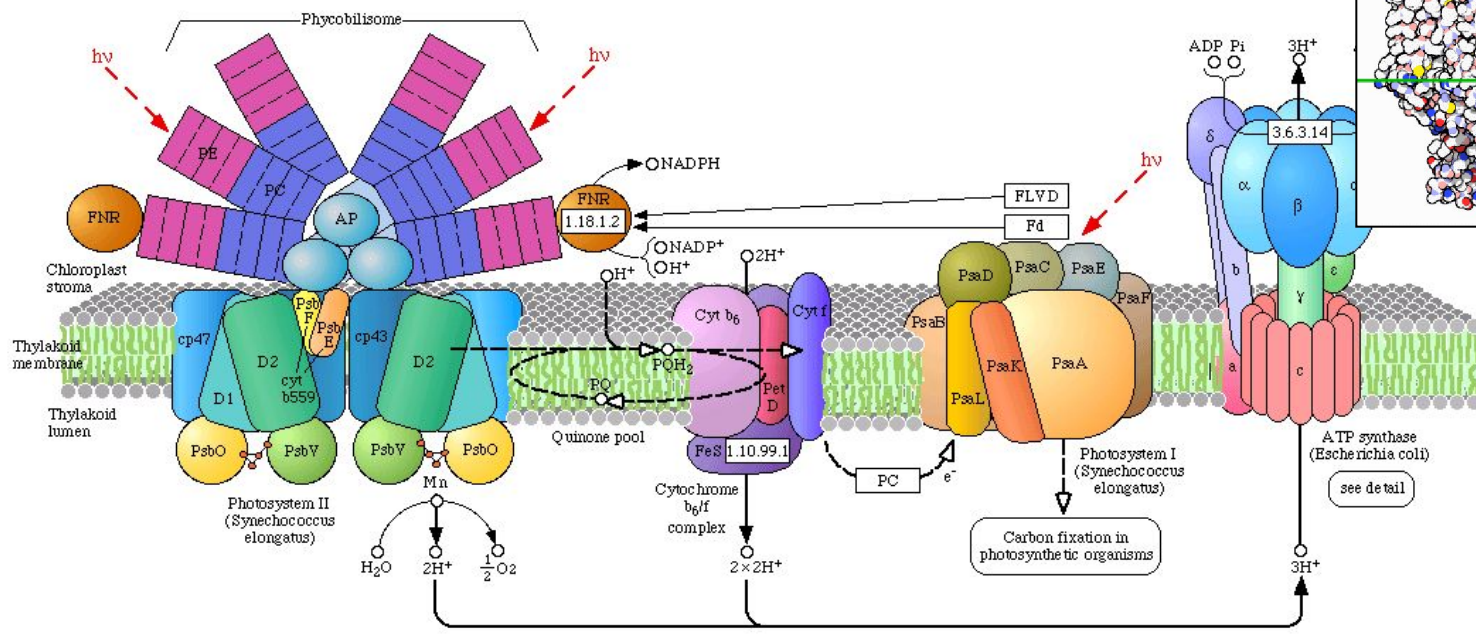
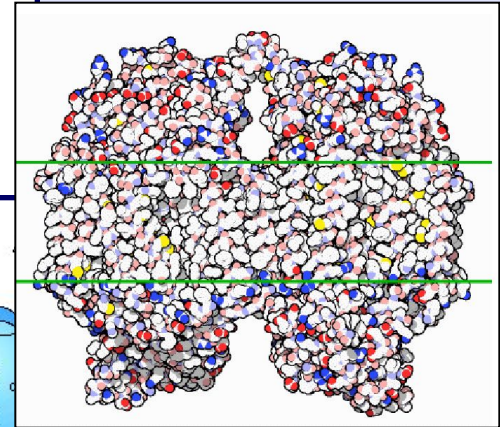
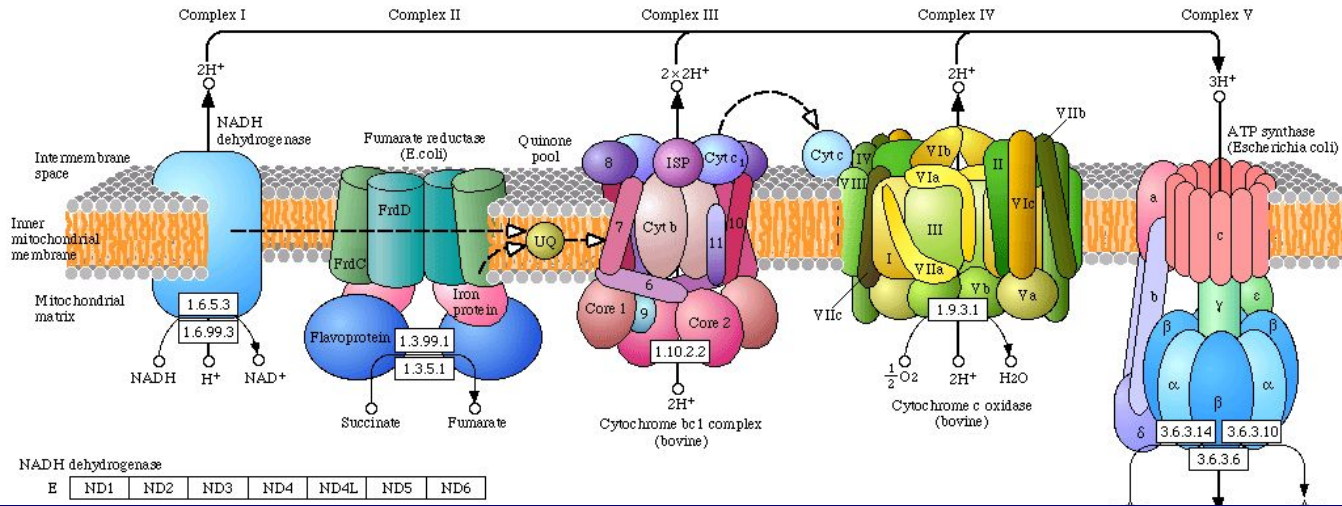


## Ацетилхолиновый рецептор



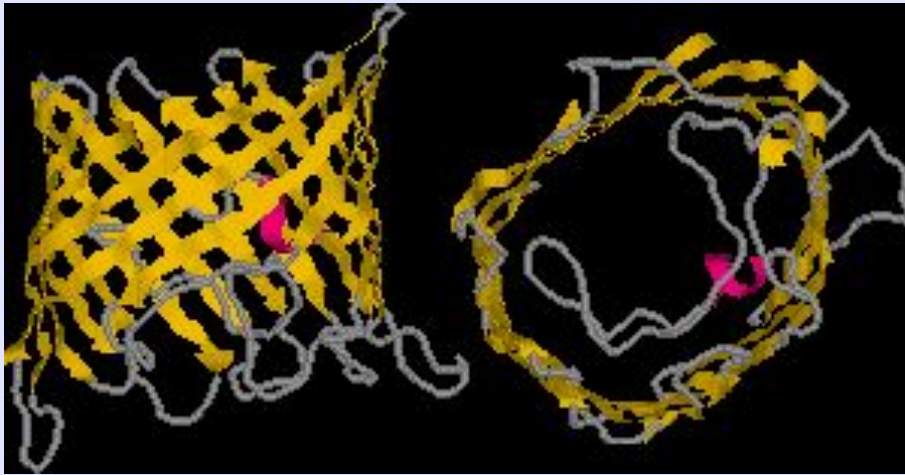
# Объекты

## OXIDATIVE PHOSPHORYLATION

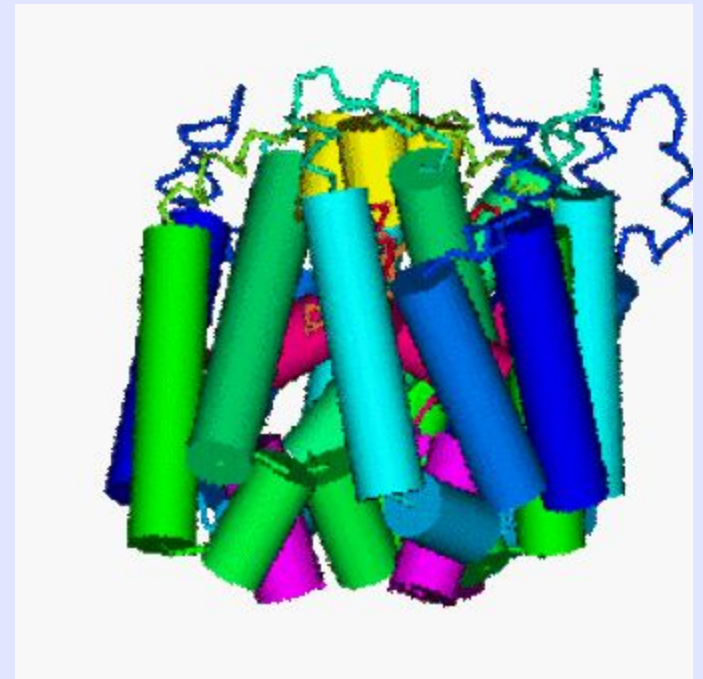


# Объекты

$\beta$ -баррель



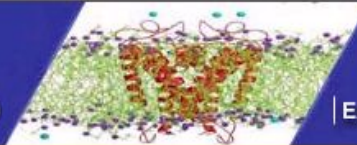
$\alpha$ -спирали





# http://www.tcdb.org/index.php

## TCDB



## Transport Classification Database

| EXPLORE | SEARCH | ANALYZE | CONTRIBUTE | ABOUT-US |

Search:  Search TC#:  Lookup

### About TCDB

TCDB is operated by the [Saier Lab Bioinformatics Group](#). The database details a comprehensive [IUBMB](#) approved classification system for membrane transport proteins known as the Transporter Classification (TC) system. The TC system is analogous to the Enzyme Commission (EC) system for classification of enzymes, but incorporates phylogenetic information additionally.



### Quick Access

[TC System](#)

Browse the TCDB data.

[BLAST](#)

Search for homologs in TCDB.

[TC Superfamilies](#)

Browse transporter superfamilies.

[Human MTPs](#)

Transporters from Humans.

[MTP Structures](#)

Transporter structural data.

[MTP Diseases](#)

Transporters & Diseases

### Help and Documentation

Documentation and tutorials are coming soon.  
For help in the interim please [contact us](#).

### Facts

- TCDB is a curated database of factual information from over 10,000 published references.
- The database contains about 3,000 protein sequences.
- These proteins are classified into over 550 transporter families based on the TC system.

V.W.X.  
Y.Z

## 1. Channels/Pores

[View Subclasses](#) [Read Description](#)

## 2. Electrochemical Potential-driven transporters

[View Subclasses](#) [Read Description](#)

## 3. Primary Active Transporters

[View Subclasses](#) [Read Description](#)

## 4. Group Translocators

[View Subclasses](#) [Read Description](#)

## 5. Transport Electron Carriers

[View Subclasses](#) [Read Description](#)

## 8. Accessory Factors Involved in Transport

[View Subclasses](#) [Read Description](#)

## 9. Incompletely Characterized Transport Systems

### 1.A. $\alpha$ -Type channels

[View Families](#) [Read Description](#)

### 1.B. $\beta$ -Barrel porins

[View Families](#) [Read Description](#)

### 1.C. Pore-forming toxins (proteins and peptides)

[View Families](#) [Read Description](#)

### 1.D. Non-ribosomally synthesized channels

[View Families](#) [Read Description](#)

### 1.E. Holins

#### 1.A.1. The Voltage-gated Ion Channel (VIC) Superfamily

[View Proteins](#) [Read Description](#)

#### 1.A.2. Inward Rectifier K<sup>+</sup> Channel (IRK-C) Family

[View Proteins](#) [Read Description](#)

#### 1.A.3. The Ryanodine-Inositol 1,4,5-triphosphate Receptor Ca<sup>2+</sup> Channel (RIR-CaC) Family

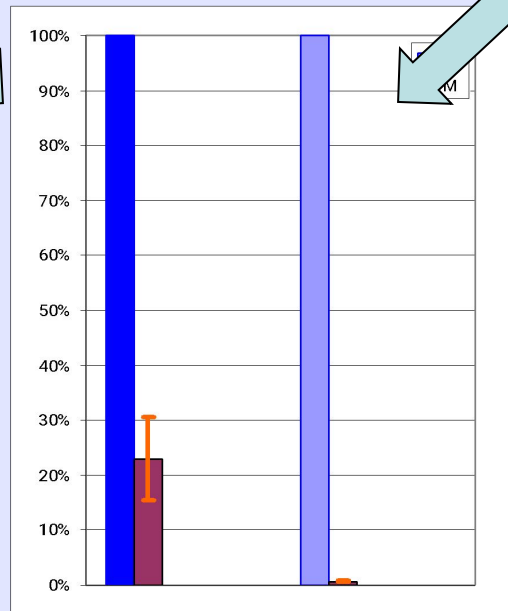
1.A.2.1.1

ATP-activated inward rectifier K<sup>+</sup> channel, IRK1 (also called ROMK or KIR1.1) (regulated by Sur1, allowing ATP sensitivity; also activated by phosphatidylinositol 4,5-bisphosphate (PIP) with affinity to PIP controlled by protein kinase A phosphorylation (which increases affinity for PIP)) and protein kinase C phosphorylation (which decreases affinity for PIP (Zeng et al., 2003))


# В чем проблема?

От **15%** до **30%**  
от общего числа белков  
— белки  
с хотя бы одной  
трансмембранной  
спиралью

Всего  $\approx 59\,705$   
белковых структур.  
Мембранных - 217 (**0.36%**),  
2009



# В чем проблема?

 **NCBI** *protein-protein* **BLAST**

Nucleotide Protein Translations Retrieve results for an RID

[Search](#)

[Set subsequence](#) From:  To:

[Choose database](#)

[Do CD-Search](#)

Now: **BLAST!** or

---

**Options** for advanced blasting

[Limit by entrez query](#)  or select from

[Compositional adjustment](#)

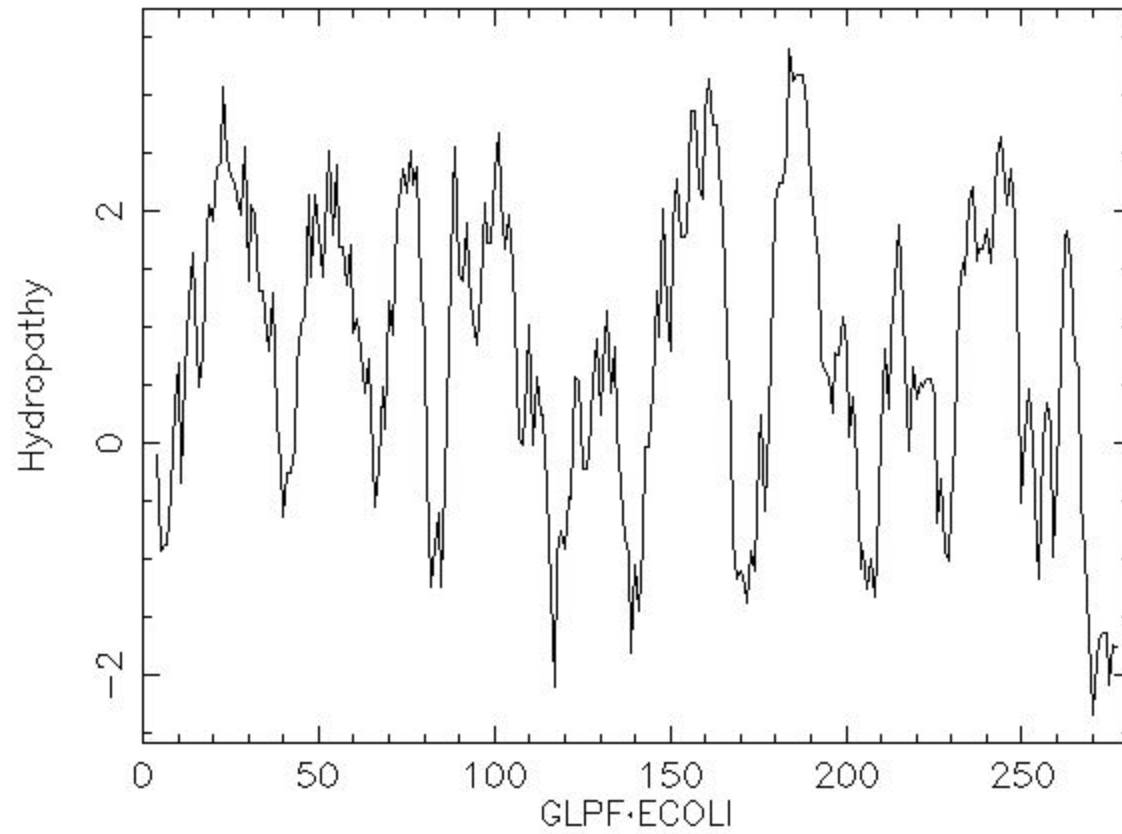
[Choose filter](#)  Low complexity  Mask for lookup table only  Mask lower case

[Expect](#)

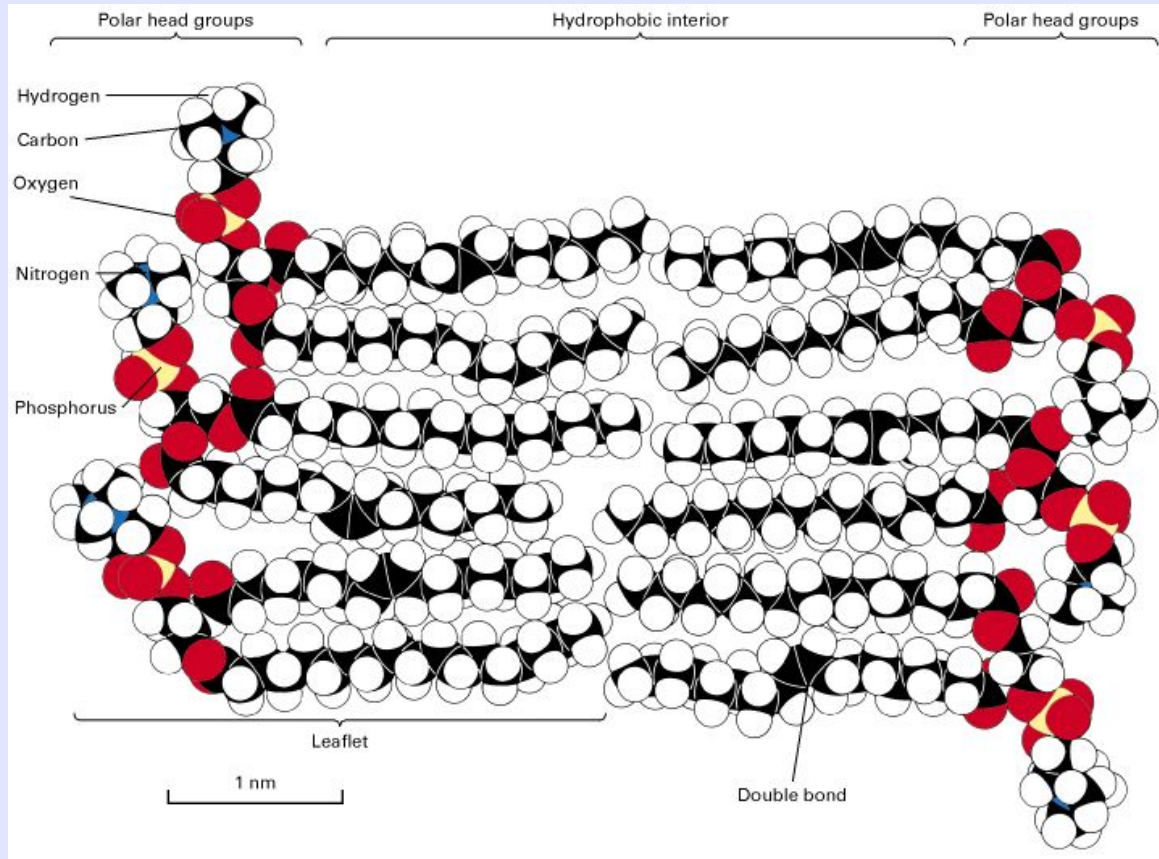
[Word Size](#)



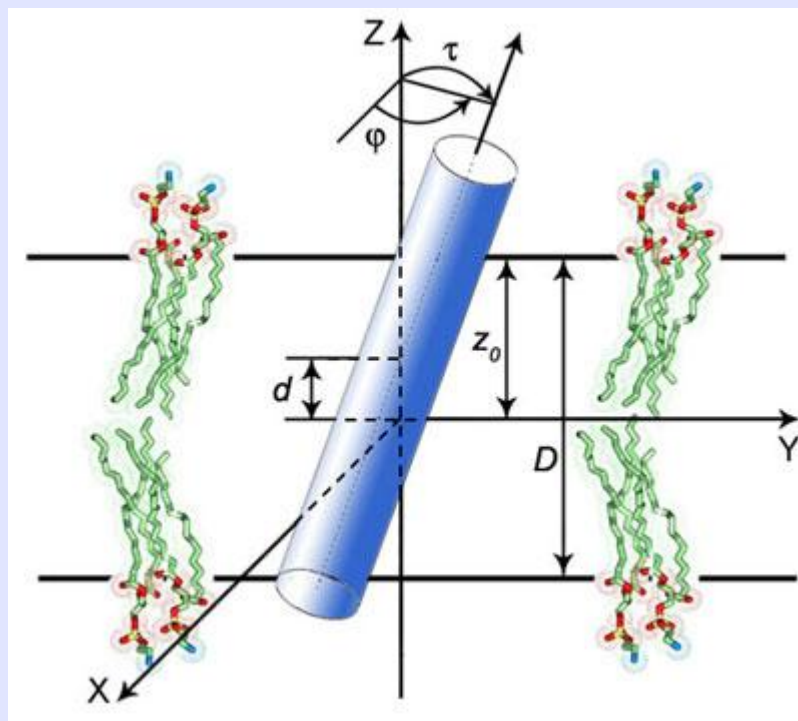
Kyte-Doolittle Plot



# von Heijne “the positive-inside rule”



<http://opm.phar.umich.edu/>



$$\Delta G_{transfer}(\varphi, \tau, z_0, d) = \sum_i ASA_i \sigma_i^{W \rightarrow M} f(z_i)$$

# Как оценить качество паттерна или профиля? Или как оценить качество предсказания?

	То, что нужно	То, что не нужно
Найдено или предсказано (+)	Правильное предсказание ( True positives, TP)	Нашли не то, что нужно (False positives, FP)
Не найдено или не предсказано (-)	Не нашли, а хотели ( False negatives, FN)	Правильно, что не нашли (True negatives, TN)

Чувствительность (sensitivity) =  $TP / (TP+FN)$  (доля правильных предсказанных от общего числа «истинных»)

Специфичность (specificity) =  $TN / (TN+FP)$  (доля правильно непредсказанных от общего числа ненужных)

Точность (precision) =  $TP / (TP+FP)$  (доля правильных предсказанных от общего числа предсказанных)

Сверхпредсказание =  $FP / (FP+TP)$  (доля лишних среди предсказанных)

Недопредсказание =  $FN / (TN+FN)$  (доля «истинных» среди непредсказанных)



# Ошибки.....

- **Ошибки первого рода (FP):** отвергается нулевая гипотеза, а она соответствует действительности.
- **Ошибки второго рода (FN):** принимается нулевая гипотеза, а она не верна.
- *Ошибки третьего рода: справедливо отвергнута нулевая гипотеза на основе неверных соображений.*

# Сравнение нескольких предсказаний

ROC-кривые (Receiver operating characteristic)  
или кривые ошибок

