

## Приложение В. Восстановление протеина

Если протеин содержит пропущенные атомы или аминокислотные остатки вблизи активного центра, то необходимо их восстановить. Для этого в базе данных PDB проводим поиск альтернативных структур исследуемого протеина, содержащих пропущенные аминокислотные остатки и атомы. Найденную структуру, в которой присутствуют пропущенные аминокислоты или атомы, назовем эталонной.

Далее переведем эталонную структуру протеина в систему координат исследуемого протеина путем вращения и трансляции эталонного протеина как жесткого тела. Это преобразование производится с помощью программы `superimpose-protein`. Первый аргумент программы – это эталонная структура (которую будем вращать). Второй аргумент – это исследуемая структура, содержащая пропуски (на которую будет наложена эталонная структура).

Строка запуска программы:

```
superimpose-protein.exe etalon.pdb to_reduce.pdb
```

В ходе работы программа сравнивает расположение атомов аминокислотных остатков друг относительно друга и выводит на экран совпадающие атомы. Далее, программа предлагает убрать из сравнения часть атомов и заново проводит сравнение. Если убирать атомы из сравнения больше не нужно, то осуществляется вращение эталонной структуры, которая сохраняется в файл с именем `etalon_rotated.pdb`. Дополнительно программа предлагает перевести в новую систему координат структуру нативного лиганда, соответствующую эталонной структуре белка. Данная опция необходима для проведения кросс-докинга.

Полученная структура `etalon_rotated.pdb` соответствует эталонному протеину, в котором координаты атомов записаны в системе координат исследуемого протеина. Далее открываем полученный файл в текстовом редакторе и вырезаем из него строки с пропущенными в исследуемом протеине аминокислотными остатками и/или атомами. После чего вставляем вырезанные строки в соответствующий файл исследуемого протеина `to_reduce.pdb`.