

博士论坛

利用蛋白质的二面角序列对蛋白质结构比对

高建召, 胡刚, 王奎, 崔家峰

南开大学 数学科学学院与LPMC, 天津 300071

收稿日期 2009-8-5 修回日期 2009-9-15 网络版发布日期 2009-11-26 接受日期

摘要 蛋白质结构比对对理解蛋白质功能和进化关系非常重要。提出一种基于蛋白质残基的二面角的结构比对算法。通过动态时间规整算法比对二面角序列, 来比较蛋白质的结构, 拟合两蛋白结构距离的分布后, 利用p-value来评价比对的好坏。主要结果有: 利用动态时间规整算法计算得出的结构距离是一个很好的蛋白质结构相似性度量; 结构距离服从参数为 $\mu=94.7697$, $\sigma=41.5837$, $\xi=0.1925$ 的广义的极值分布; 和其他结构比对算法相比, 该算法比CTSS的搜索结果要好。

关键词 [蛋白质结构比对](#) [广义极值分布](#) [二面角序列](#) [动态时间规整](#) [p-value](#)

分类号 [O236](#)

Using dihedral angle series of protein for protein structure comparison

GAO Jian-zhao, HU Gang, WANG Kui, CUI Jia-feng

School of Mathematical Sciences and LPMC, Nankai University, Tianjin 300071, China

Abstract

Protein structure comparison is very important to protein function and evolution. This paper proposes a novel algorithm based on dihedral angle. It uses dynamic time warping to align angle series. After fitting the distribution of aligned score, it uses p-value to evaluate the result of alignment. The results reported here show that (1) The aligned score is a good similarity measure in analysis of the protein. (2) Aligned score is following the generalized extreme value distribution with parameters $\mu=94.7697$, $\sigma=41.5837$, $\xi=0.1925$. (3) Compared with other algorithm of structure alignment, the algorithm performs better than CTSS.

Key words [protein structure comparison](#) [generalized extreme value distribution](#) [dihedral angle series](#) [dynamic time warping](#) [p-value](#)

DOI: 10.3778/j.issn.1002-8331.2009.32.002

通讯作者 高建召 gaojazz@gmail.com

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(935KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“蛋白质结构比对”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [高建召](#)
- [胡刚](#)
- [王奎](#)
- [崔家峰](#)