

### Metodo di Chou-Fasman

Date le 15 strutture 3D allora disponibili, e' stata calcolata la probabilita' di trovare ciascuno dei 20 amminoacidi nelle  $\alpha$ -eliche, nei  $\beta$ -foglietti e nei turn

Esempio-Ala in  $\alpha$ -elica:

Numero tot di aa = 2000

Numero di Ala = 100

Numero di aa in  $\alpha$ -elica = 500

Numero di Ala in  $\alpha$ -elica = 50

$$\begin{aligned} P(\text{Ala-H}) &= 50/100 = 0.1 \\ P(\text{Ala}) &= 100/2000 = 0.05 \end{aligned}$$

↓

$$\begin{aligned} \text{Propensione all'elica dell'Ala} &= PA(\text{Ala}) \\ PA(\text{Ala}) &= P(\text{Ala-H})/P(\text{Ala}) = 0.1/0.05 = \mathbf{2.0} \end{aligned}$$

### Chou-Fasman prediction values

Nome	PA	PB	PT
Glutamic Acid	1.39	0.37	0.74
Methionine	1.45	1.05	0.60
Alanine	1.42	0.83	0.66
Leucine	1.41	1.30	0.59
Lysine	1.14	0.74	1.01
Phenylalanine	1.13	1.38	0.60
Glutamine	1.11	1.10	0.98
Tryptophan	1.08	1.37	0.96
Isoleucine	1.08	1.60	0.47
Valine	1.06	1.70	0.50
Aspartic Acid	1.01	0.54	1.46
Histidine	1.00	0.87	0.95
Arginine	0.98	0.93	0.95
Threonine	0.83	1.19	0.96
Serine	0.77	0.75	1.43
Cysteine	0.70	1.19	1.19
Tyrosine	0.69	1.47	1.14
Asparagine	0.67	0.89	1.56
Glycine	0.57	0.75	1.56
Proline	0.57	0.55	1.52

PA = propensione elica  
PB = propensione foglietto  
PT = propensione turn

PX < 1.0 = prop sfavorevole  
PX = 1.0 = indifferente  
PX > 1.0 = prop favorevole

↓  
HA/B = forte formatore A/B  
hA/B = formatore A/B  
IA/B = debole formatore A/B  
iA/B = indifferente A/B  
bA/B = interruttore A/B  
BA/B = forte interruttore A/B

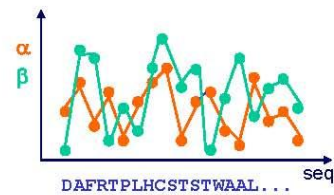
### Chou-Fasman prediction values

Nome	PA	PB	PT	f(i)	f(i+1)	f(i+2)	f(i+3)
Glutamic Acid	1.39(HA)	0.37(BB)	0.74	0.056	0.060	0.077	0.064
Methionine	1.45(HA)	1.05(HB)	0.60	0.068	0.082	0.034	0.055
Alanine	1.42(HA)	0.83(BB)	0.66	0.06	0.076	0.035	0.058
Leucine	1.41(HA)	1.30(HB)	0.59	0.061	0.025	0.036	0.070
Lysine	1.14(hA)	0.74(bB)	1.01	0.055	0.115	0.072	0.095
Phenylalanine	1.13(hA)	1.38(HB)	0.60	0.059	0.041	0.065	0.065
Glutamine	1.11(hA)	1.10(hB)	0.98	0.074	0.098	0.037	0.098
Tryptophan	1.08(hA)	1.37(HB)	0.96	0.077	0.013	0.064	0.167
Isoleucine	1.08(hA)	1.60(HB)	0.47	0.043	0.034	0.013	0.056
Valine	1.06(hA)	1.70(HB)	0.50	0.062	0.048	0.028	0.053
Aspartic Acid	1.01(IA)	0.54(bB)	1.46	0.147	0.110	0.179	0.081
Histidine	1.00(IA)	0.87(iB)	0.95	0.140	0.047	0.093	0.054
Arginine	0.98(iA)	0.93(iB)	0.95	0.070	0.106	0.099	0.085
Threonine	0.83(iA)	1.19(hB)	0.96	0.086	0.108	0.065	0.079
Serine	0.77(iA)	0.75(bB)	1.43	0.120	0.139	0.125	0.106
Cysteine	0.70(iA)	1.19(HB)	1.19	0.149	0.050	0.117	0.128
Tyrosine	0.69(bA)	1.47(HB)	1.14	0.082	0.065	0.114	0.125
Asparagine	0.67(bA)	0.89(iB)	1.56	0.161	0.083	0.191	0.091
Glycine	0.57(bA)	0.75(bB)	1.56	0.102	0.085	0.190	0.152
Proline	0.57(bA)	0.55(bB)	1.52	0.102	0.301	0.034	0.068

Quindi, ogni sequenza ha uno specifico andamento delle PA e PB, che da' un'indicazione sulla struttura secondaria piu' probabilmente assunta.

...DAFRTPLHCSTSTWAALPRT...

	$\alpha$	$\beta$
ALA	0.14	0.24
CYS	0.15	0.22
...		



### Metodo di Chou e Fasman

- Gli amminoacidi hanno preferenze per certi tipi di struttura secondaria. I valori dei parametri sono derivati empiricamente.
- Regole arbitrarie per decidere la struttura secondaria.

Per esempio:

- 4 residui su 6 preferenzialmente in elica la nucleano (3 residui su 5 per  $\beta$ -strand)
- l'elica continua finche' non si incontra un tetrapeptide con preferenza media minore di 1.0

### Finestra di 5 residui

...D A F R T P L H C S T S T W A A ...  
..12 .34 .21 .30 .22 .34 .61 .12 .06 ...

$$\begin{aligned} & \left( (.12 + .34 + .21 + .30 + .22) / 5 \right) \\ & \left( (.34 + .21 + .30 + .22 + .34) / 5 \right) \end{aligned}$$

