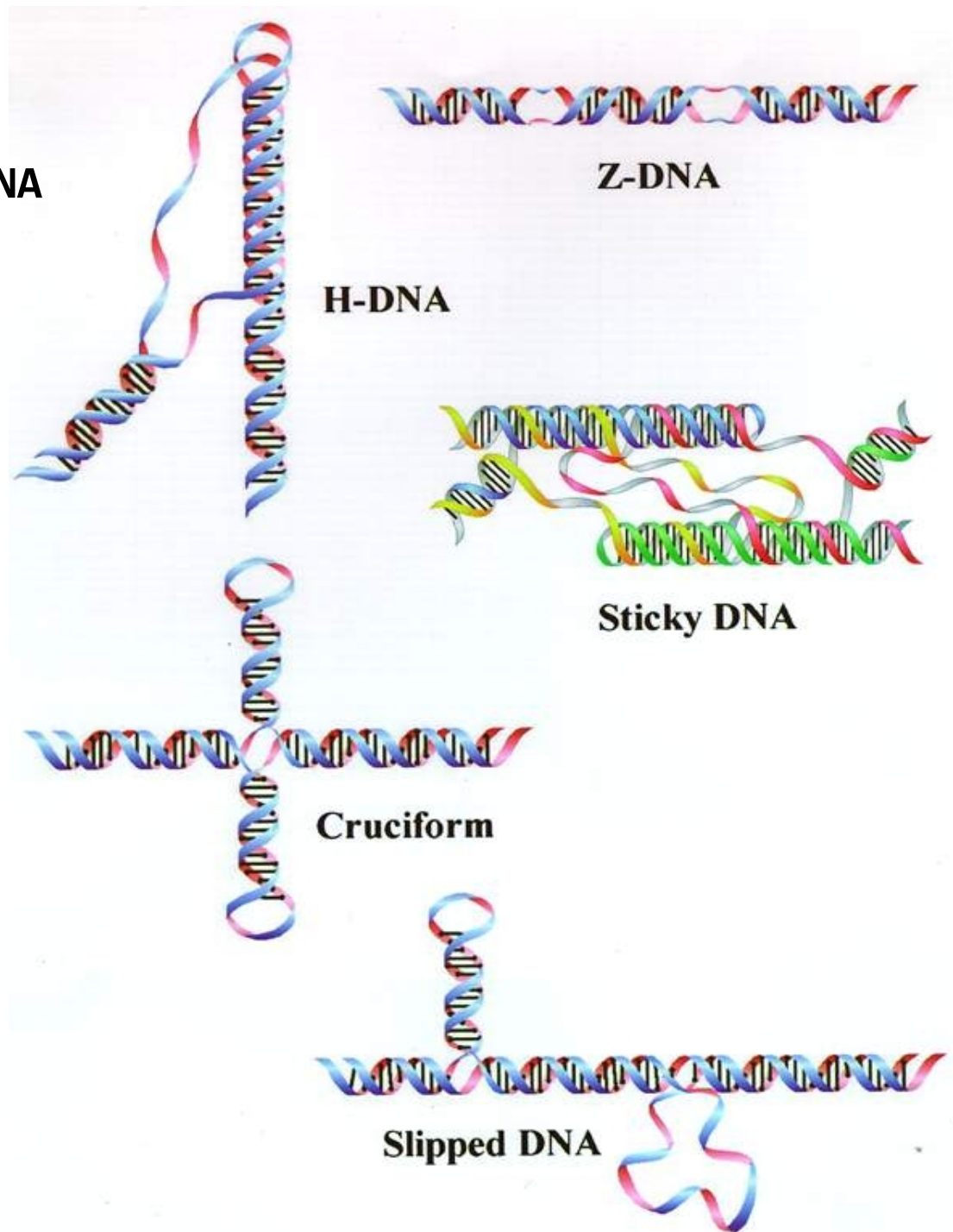


# Stochastický model sekundárných štruktúr v DNA

Matej Lexa (Fakulta Informatiky, MU Brno)  
Marie Brázdová (Biofyzikálny ústav AV ČR, Brno)

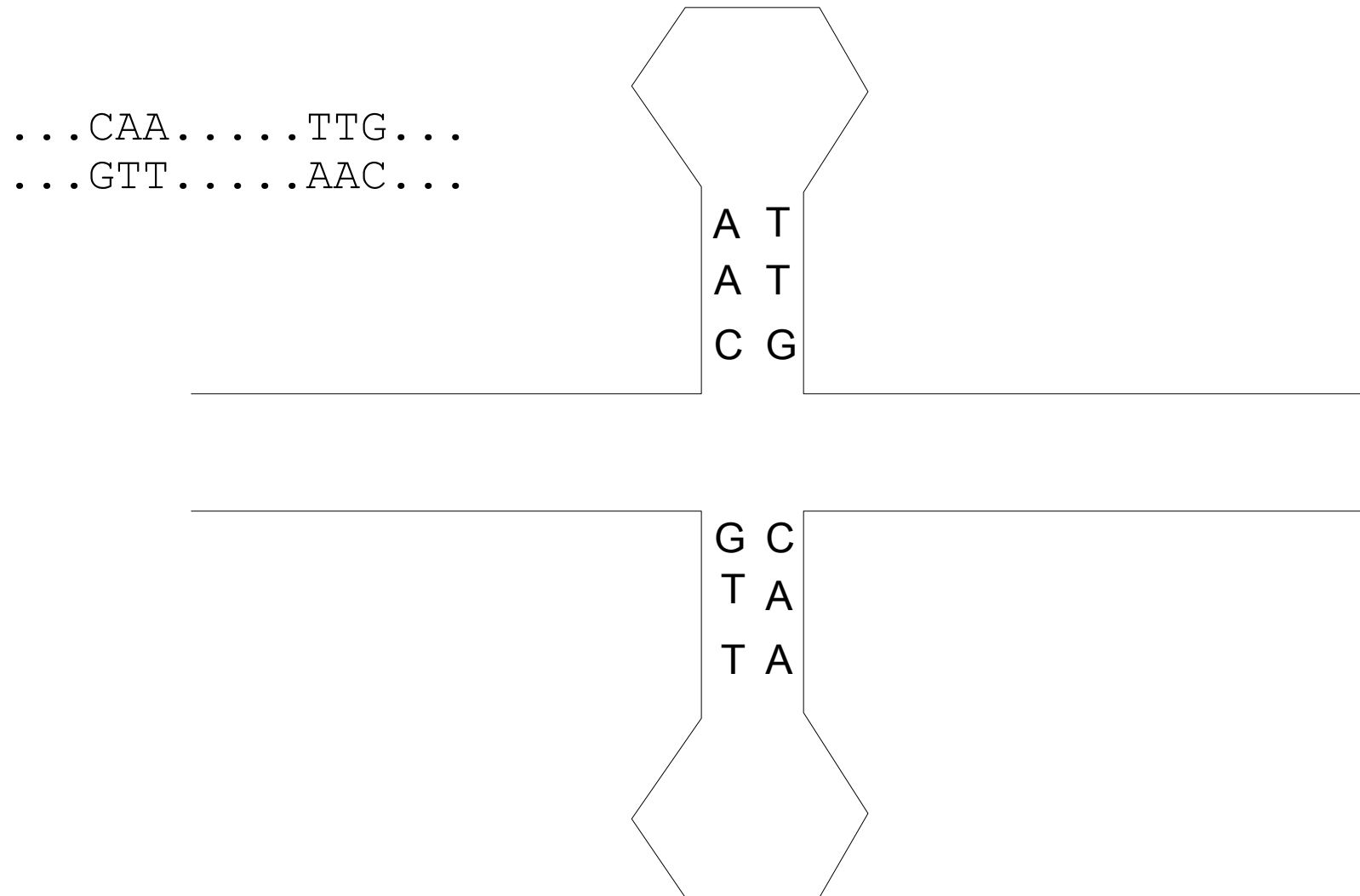
FOBIA 2009 – Zlín, 6.11.

**Nekanonické štruktúry v DNA  
(non B-DNA)**



## Kruciforma – krížová DNA

môže vznikáť v miestach obsahujúcich palindrómy



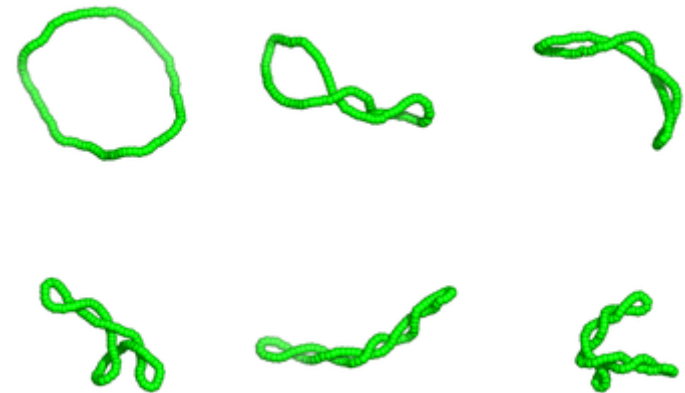
## Křížová DNA

vzniká v oblastech s negativnou superhelikálnou hustotou

$$L_0 = N/10.5$$

$$L = T + W$$

$$\text{Sigma} = 10.5W/N = (L-L_0)/L_0$$

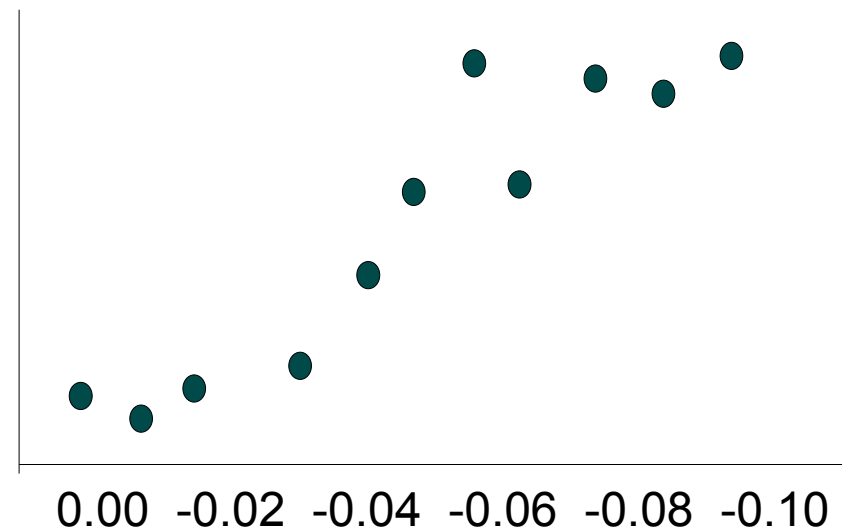


**Každých 10.5 nukleotidov  
kruciformy odoberie jednu  
Obrátku zo zvyšnej DNA**

$$\begin{aligned} \text{Sigma}_{\text{new}} &= \\ &= (\text{Sigma}_{\text{old}} * N + 1) / (N - 1) \end{aligned}$$

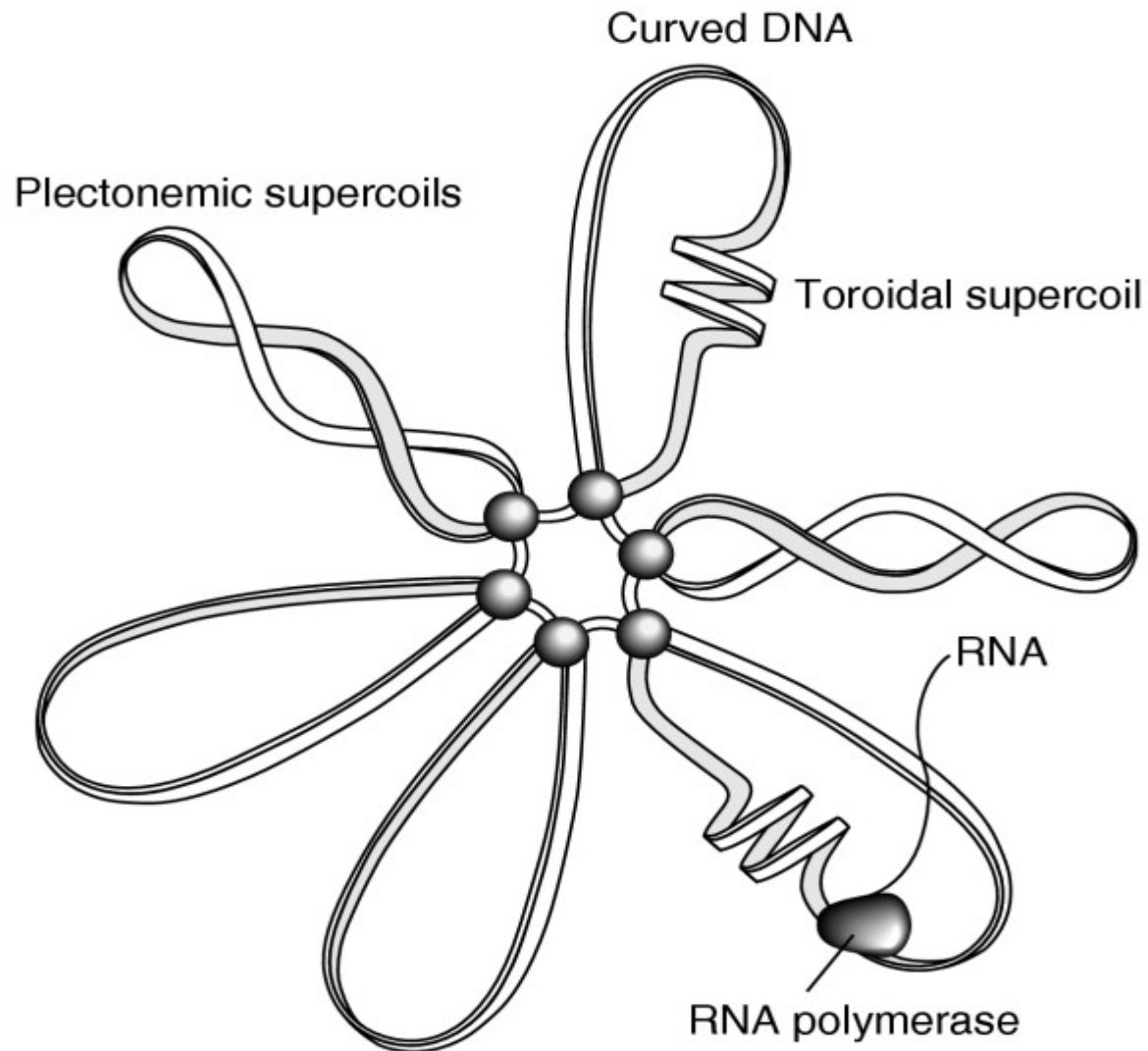
$$(-0.065 * 1000 + 20) / (1000 - 20) =$$

$$= -0.046$$

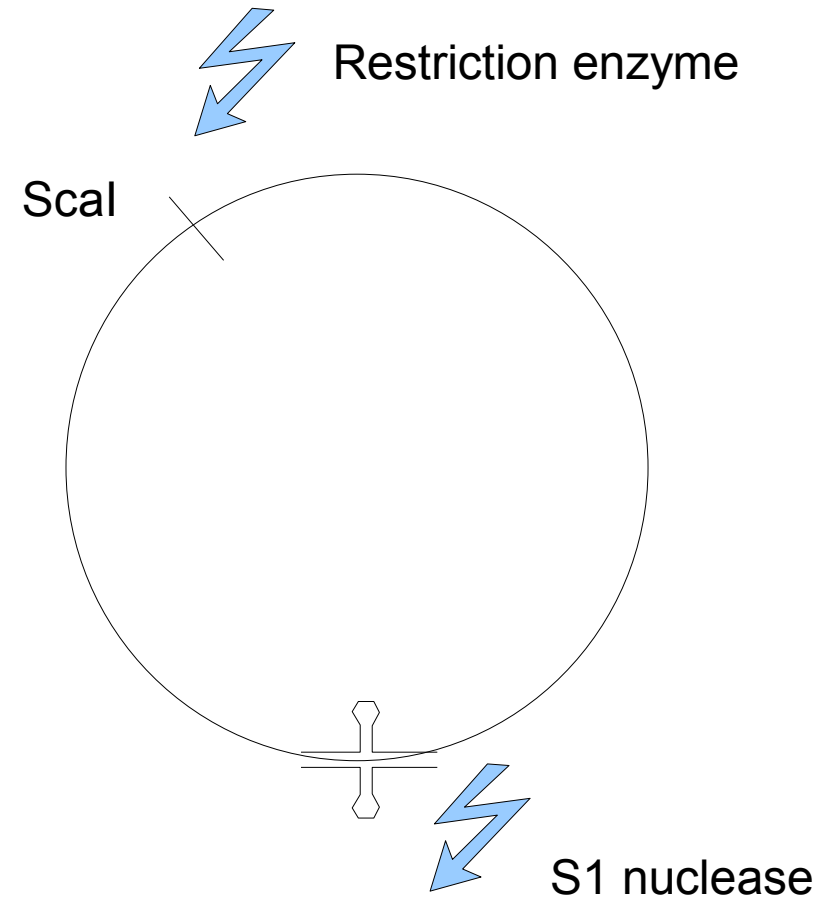
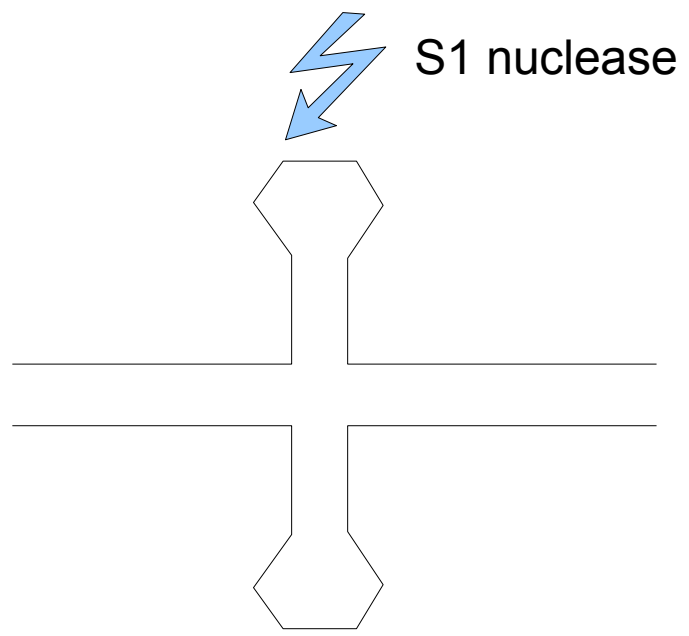


# Křížová DNA

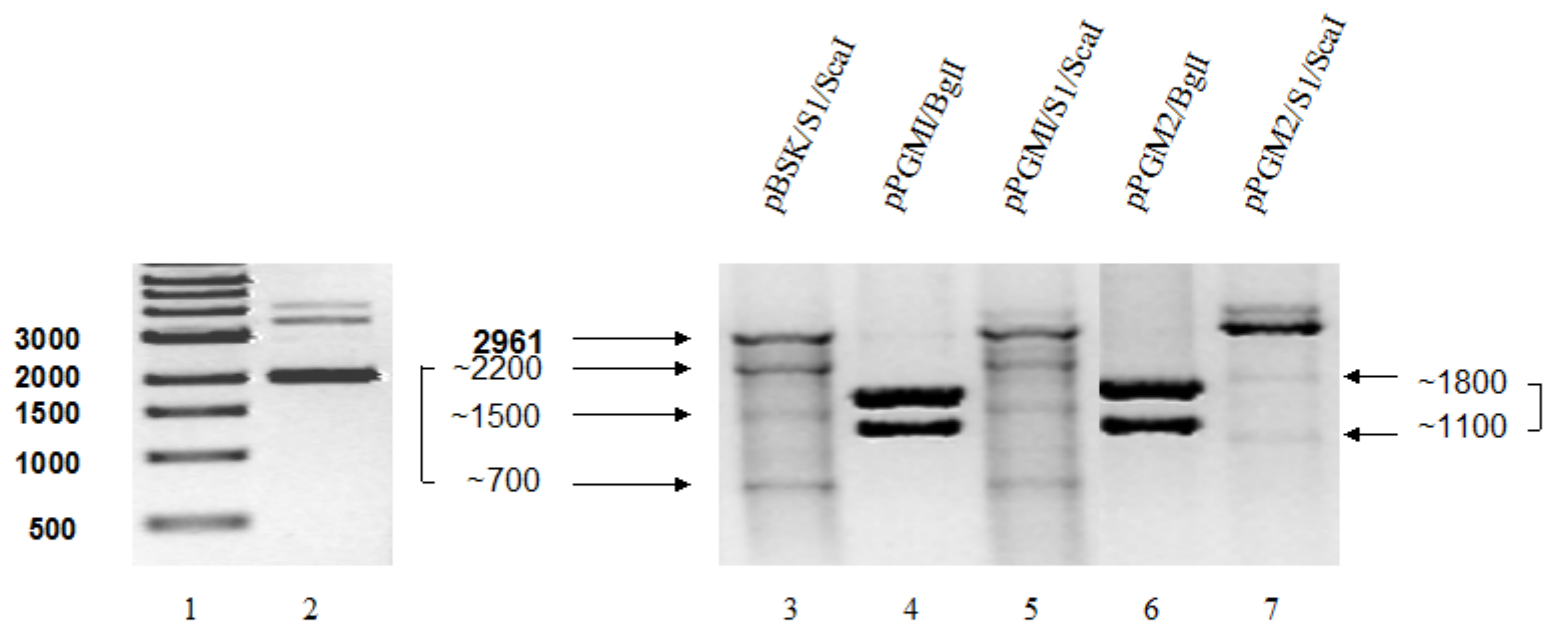
vzniká v oblastech s negativnou superhelikálnou hustotou



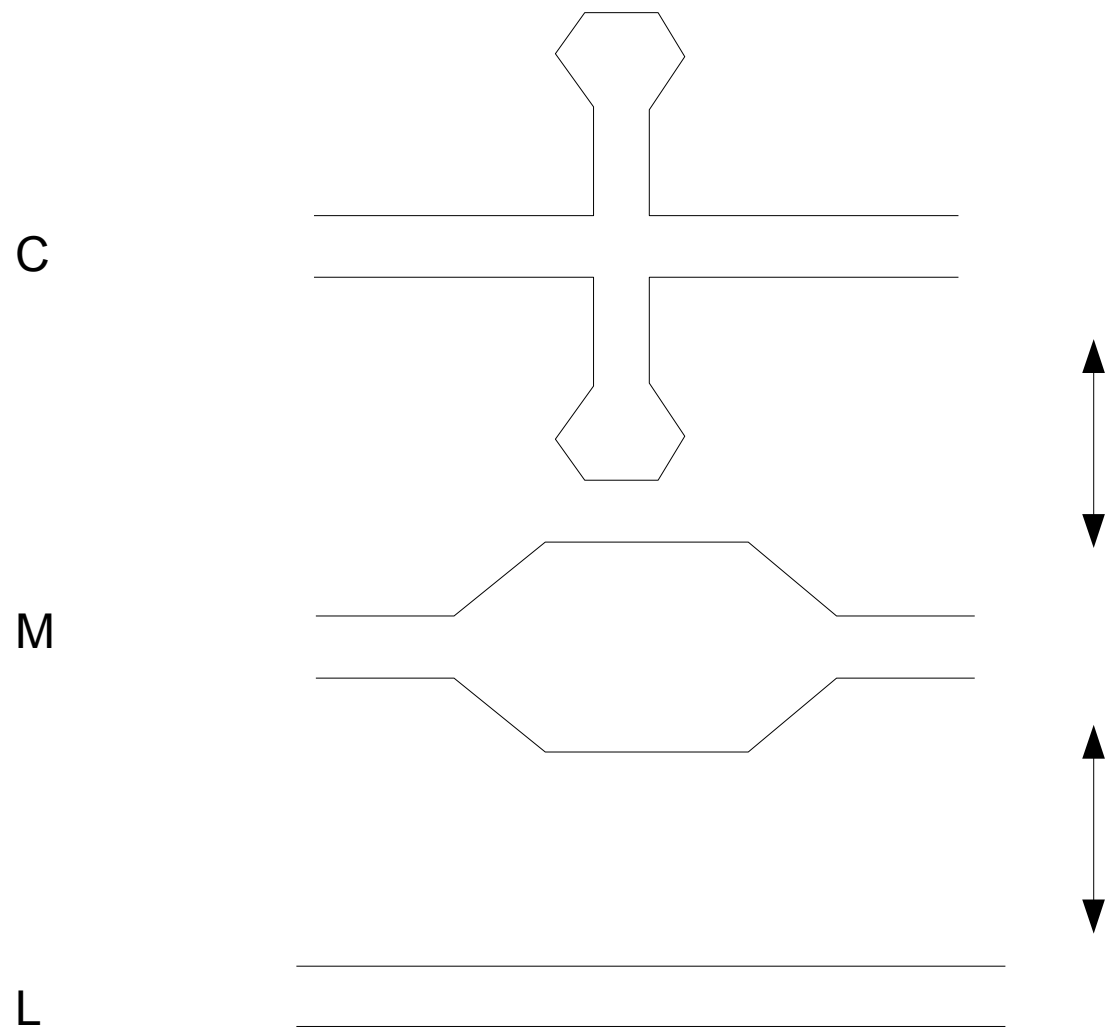
# Experimentálna detekcia krížovej DNA pomocou S1 nukleázy



# Experimentálna detekcia krížovej DNA pomocou nukleázy

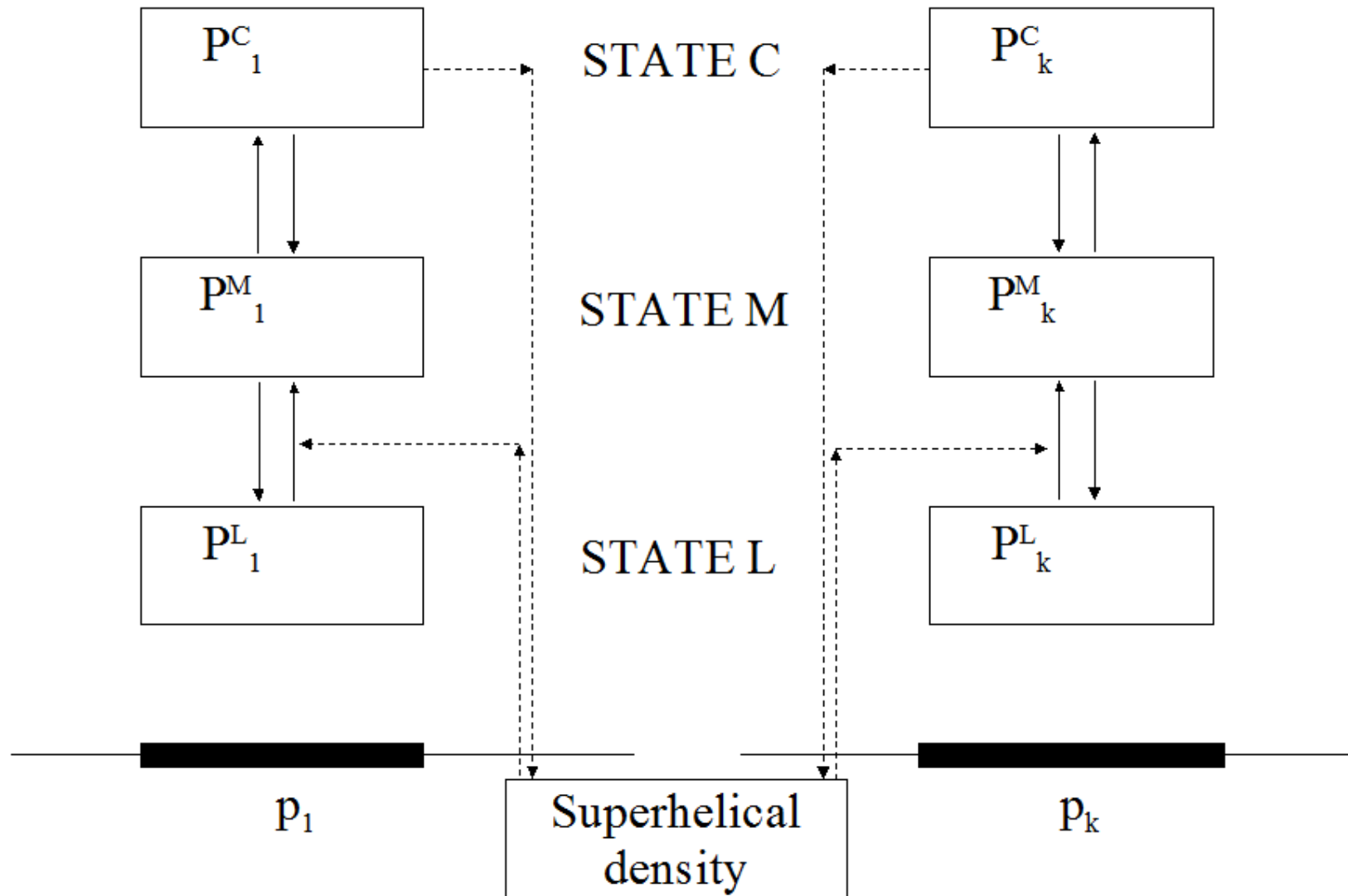


# Modelový pohľad na vznik krížovej DNA





Stochastický model pracuje s pravdepodobnosťami prechodu medzi stavmi a vzniku nekanonických štruktúr



Oblasti plazmidu pBSK-, ktoré by mohli tvoriť krížovú DNA identifikované programom UnaFold alebo palex (náš vyhľadávač približných palindrómov)

ID	POS	SEQUENCE	dG	Tm
P1	53	GGCGGGTGTGGTGGTT <u>ACGCGCAGCGT</u> GACCGCTACACTTGCC	-16.5	38.0
P2	167	CTAAATC <u>GGGGGCTCCCTTTAGGGTTCC</u> GATTTAGT	-9.9	78.0
P3	236	AGGGTGATGGTT <u>CACGTAGTG</u> GGCCATCGCCCT	-13.2	28.0
P4	1025	GCGGGGAGAGGC <u>GGTTTGCGTATTGGGCGCTCTTCC</u> GCTTCCTCGC	-11.8	84.0
P5	1070	CTCGCT <u>GCGCTCGGTCGTT</u> CGGCTGCGGCGAG	-8.6	70.0
P6	1189	GCCAGCAAAGG <u>CCAGGAACCGTAAAAAGG</u> CCGCGTTGCTGGC	-11.5	54.0
P7	1746	GCAAACAAACCACC <u>GCTGGTAGC</u> GGTGGTTTTTTTTGTTTGC	-17.8	30.0
P8	705	AAGCTTAAGGCA <u>TGTCTAGGCA</u> TGTCTAAGCTT	-11.6	30.0
P9	705	AAGCTTAAGACA <u>TGCTCAGGCA</u> TGTCTGGGCTT	-11.8	32.0

## Výsledky simulácie na plazmidovej DNA s oblasťami obsahujúcimi palindrómy

	sigma	formation	only	p1	p2	p3	p4	p5	p6	p7	p8/p9
pBSK- (EXP)				0	0	20	0	5	0	20	-
pBSK- (SIM1)	-0.065	no		7	0	6	0	0	0	84	-
pBSK- (SIM2)	-0.060	no		0	2	75	0	1	0	0	-
pBSK- (SIM3)	-0.063	yes		0	4	23	0	2	0	71	-
pBSK- (SIM4)	-0.063	hybrid		0	0	54	0	14	0	32	-
pPGMI (EXP)				5	0	20	0	5	0	20	0
pPGMI (SIM1)	-0.065	no		4	0	7	0	0	0	83	6
pPGMI (SIM2)	-0.060	no		0	1	57	0	1	0	0	27
pPGMI (SIM3)	-0.063	yes		0	2	32	0	3	0	45	18
pPGMI (SIM4)	-0.063	hybrid		0	0	32	0	4	0	25	39
pPGM2 (EXP)				0	0	0	0	0	0	0	10
pPGM2 (SIM1)	-0.065	no		8	0	6	0	0	0	82	2
pPGM2 (SIM2)	-0.060	no		0	1	62	0	0	0	0	18
pPGM2 (SIM3)	-0.063	yes		0	3	17	0	3	0	64	13
pPGM2 (SIM4)	-0.063	hybrid		0	0	47	0	7	0	24	22

# Porovnanie modelu s experimentom

