

Identification of potential PTP-LAR inhibitors through 3D QSAR, virtual screening
and molecular dynamics study

Shan Du^{a,1}, Bing Yang^{b,1}, Wei-Ya Li^a, Yang-Chun Ma^a, Liang Zhou^a, Xinhua Lu^c,
Zhihui Zheng^c, Ying, Ma^{a,*}, Run-Ling Wang^{a,*}

^aTianjin Key Laboratory on Technologies Enabling Development of Clinical
Therapeutics and Diagnostics (Theranostics), School of Pharmacy, Tianjin Medical
University, Tianjin 300070, China.

^bDepartment of Cell Biology, School of Basic Medical Science, Tianjin Medical
University, Tianjin 300070, China.

^cNew Drug Research & Development Center of North China Pharmaceutical Group
Corporation, National Microbial Medicine Engineering & Research Center, Hebei
Industry Microbial Metabolic Engineering & Technology Research Center, Key
Laboratory for New Drug Screening Technology of Shijiazhuang City, Shijiazhuang
050015, Hebei, China.

¹These authors contributed equally to this work.

*Correspondence to: Ying Ma, Run-Ling Wang

Email: maying@tmu.edu.cn; wangrunling@tmu.edu.cn;

Supplementary Material

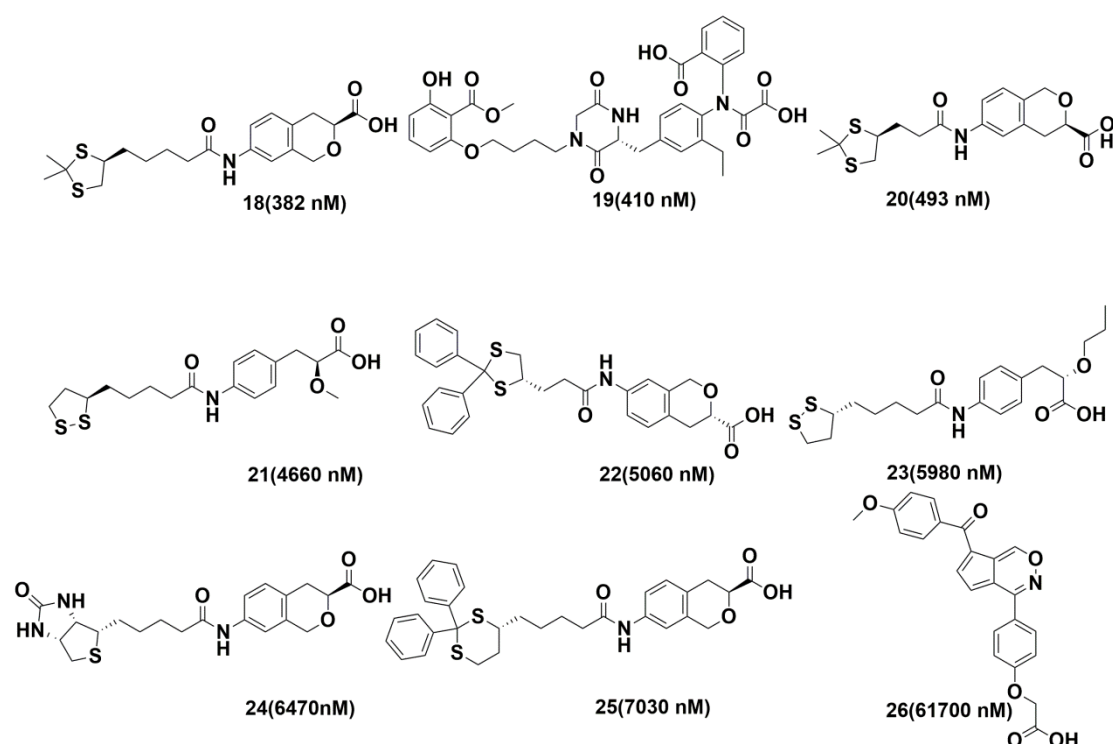


Figure S1 Chemical structures of 9 test set molecules for PTP-LAR

Table S1

Compound no.	Fit	LogIC ₅₀ ^a		error ^b	Activity scale ^c	
		Actual	Estimated		Actual	Estimated
1	6.73	2.5798	2.4099	-0.1699	+++	+++
2	5.33	2.6609	3.8043	+1.1435	+++	++

3	6.16	2.7959	2.9713	+0.1754	+++	+++
4	5.85	2.8837	3.2840	+0.4003	+++	++
5	5.77	3.2878	3.3662	+0.0784	++	++
6	5.58	3.4548	3.5535	+0.0987	++	++
7	5.78	3.5172	3.3560	-0.1612	++	++
8	5.71	3.6096	3.4234	-0.1862	++	++
9	5.37	3.6405	3.7695	+0.1290	++	++
10	5.94	3.6972	3.5664	-0.1308	++	++
11	4.49	3.8470	3.1909	-0.6561	++	++
12	4.36	4.0719	4.3230	+0.2511	+	+
13	4.53	4.1004	4.2044	+0.1040	+	+
14	4.93	4.5551	4.6059	+0.0508	+	+
15	4.85	5.0792	4.2868	-0.7924	+	+
16	4.35	5.0792	4.7894	-0.2898	+	+
17	3.69	5.5052	5.4492	-0.0560	+	+
18	6.89	2.5821	2.2405	-0.3415	+++	+++
19	6.26	2.6128	2.8774	+0.2646	+++	+++
20	6.87	2.6928	2.2625	-0.4304	+++	+++
21	5.86	3.6684	3.2744	-0.3940	++	++
22	6.10	3.7042	3.0386	-0.6655	++	++
23	6.02	3.7767	3.1123	-0.6644	++	++
24	5.58	3.8109	3.5582	-0.2527	++	++
25	5.90	3.8470	3.2327	-0.6142	++	++
26	4.58	4.7903	4.5497	-0.2406	+	+

a Data for activities of LAR inhibitors, represented by the LogIC₅₀.

b Difference between the predicted and experimental values. ‘+’ indicates that the predicted IC₅₀ is higher than the experimental IC₅₀; ‘-’ indicates that the predicted IC₅₀ is lower than the experimental IC₅₀; a value of 1 indicates that the predicted IC₅₀ is equal to the experimental IC₅₀.

c Activity scale: +++ (LogIC₅₀<3, highly active), ++ (3≤LogIC₅₀<4, moderately active), + (LogIC₅₀>4, inactive).

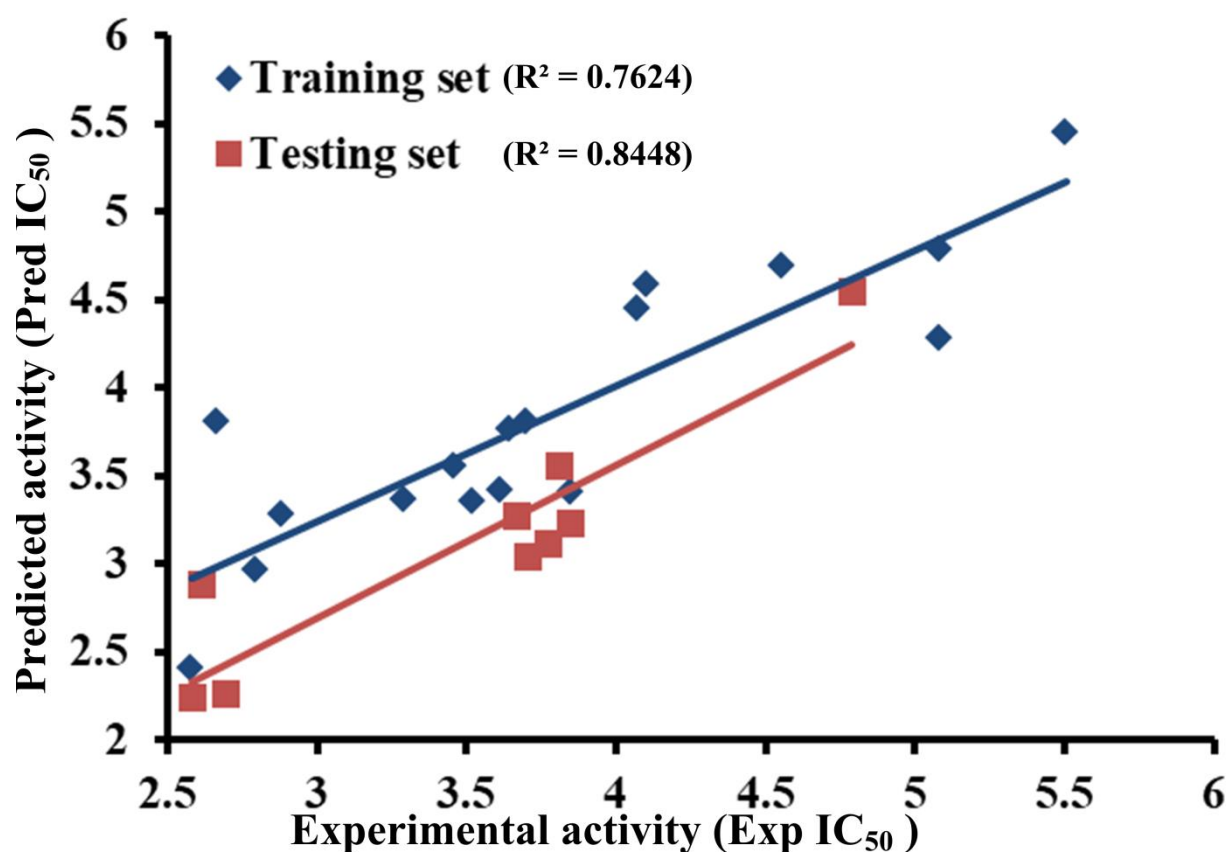


Figure S2 Correlations between the experimental activities and the predicted activities using the Hypo-1-LAR with the training set and test set compounds.

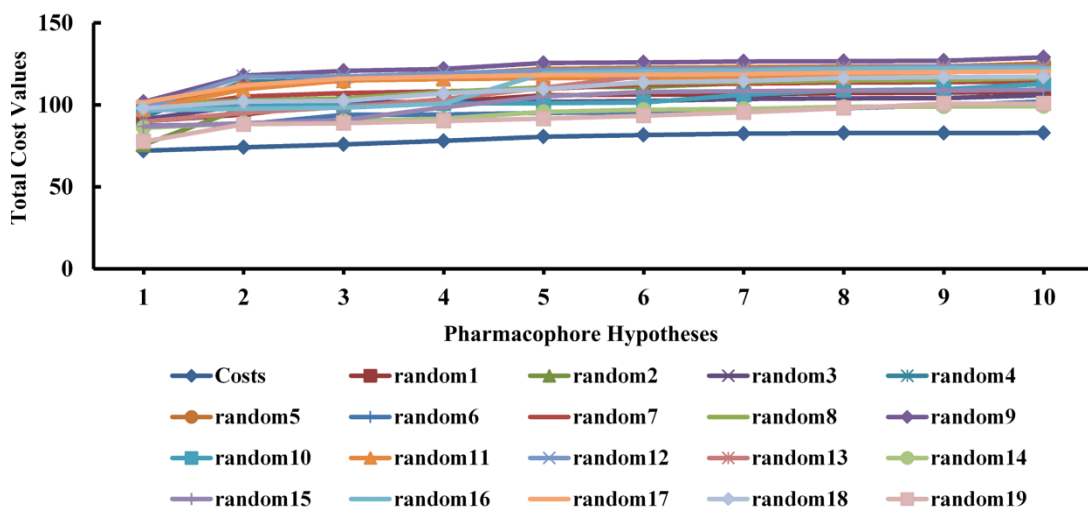


Figure S3 The difference in total cost values of hypotheses between HYPOGEN runs and the scrambled runs for the pharmacophore hypotheses of LAR.

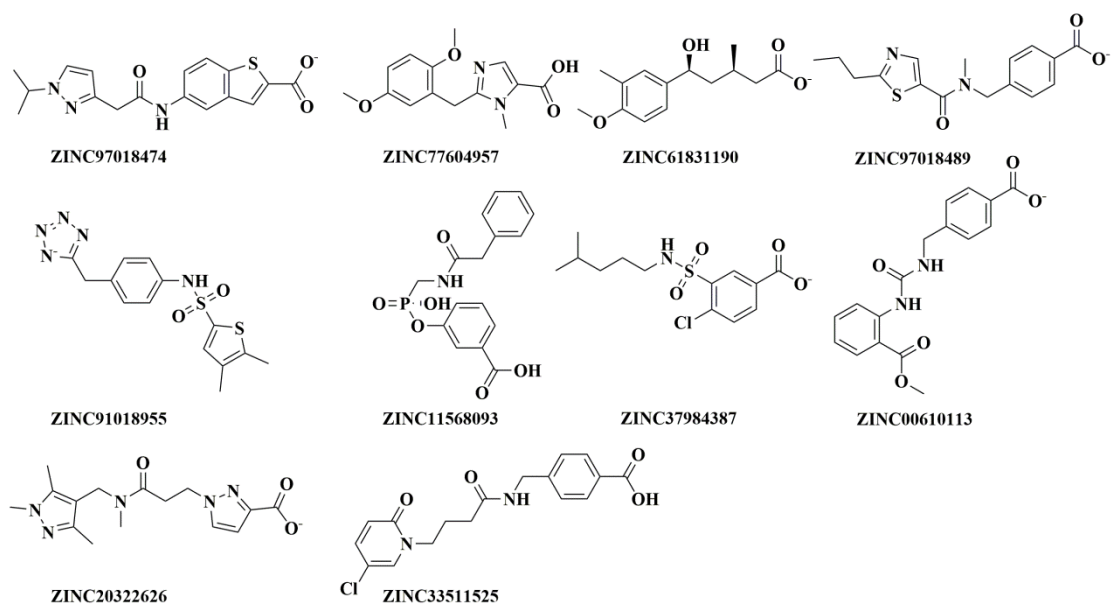


Figure S4 10 potential inhibitors for PTP-LAR

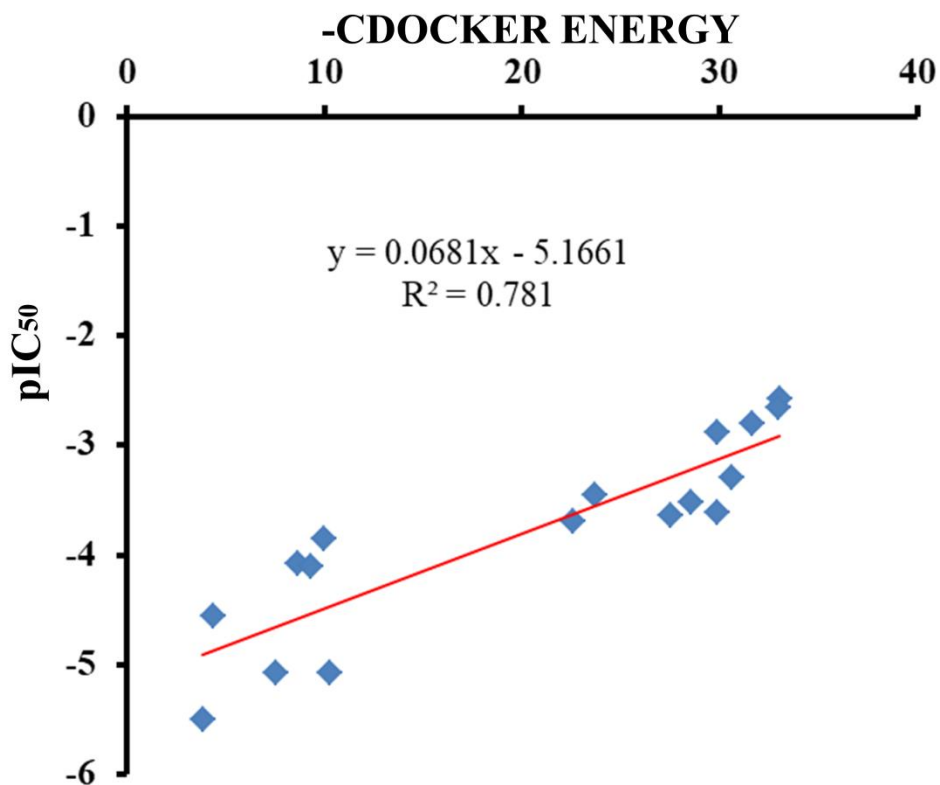


Figure S5 Correlation between the experimental pIC_{50} and the docking score of 17 LAR inhibitors ($R^2=0.781$).

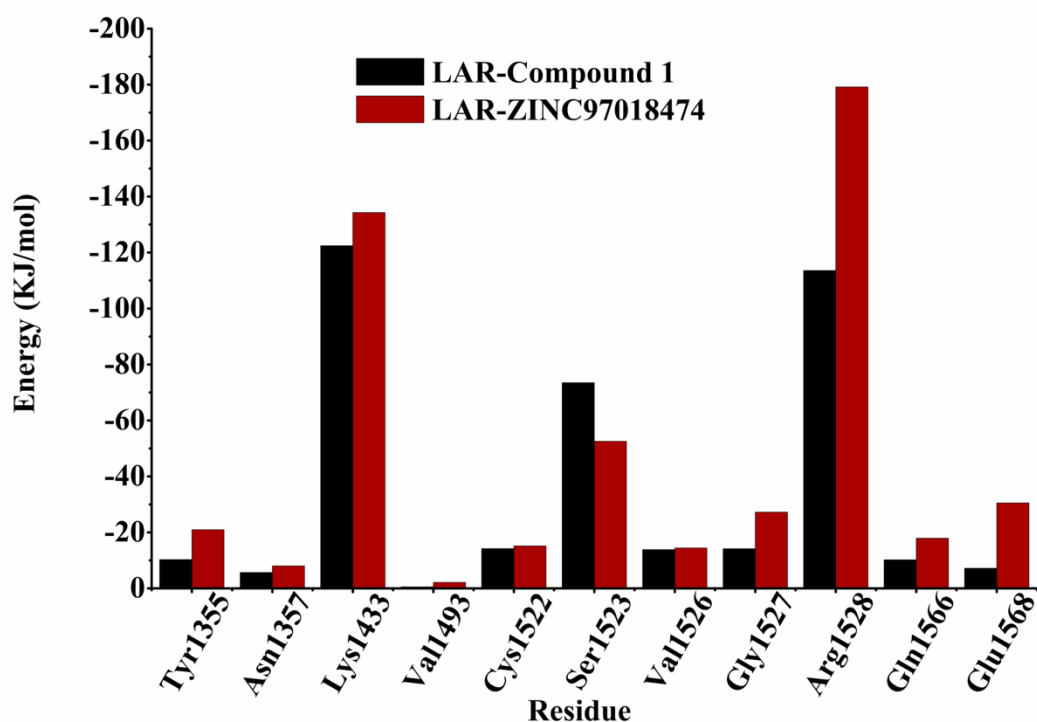


Figure S6 The interaction energies of the top 10 residues in the LAR-Compound 1 system and LAR-ZINC97018474 system.

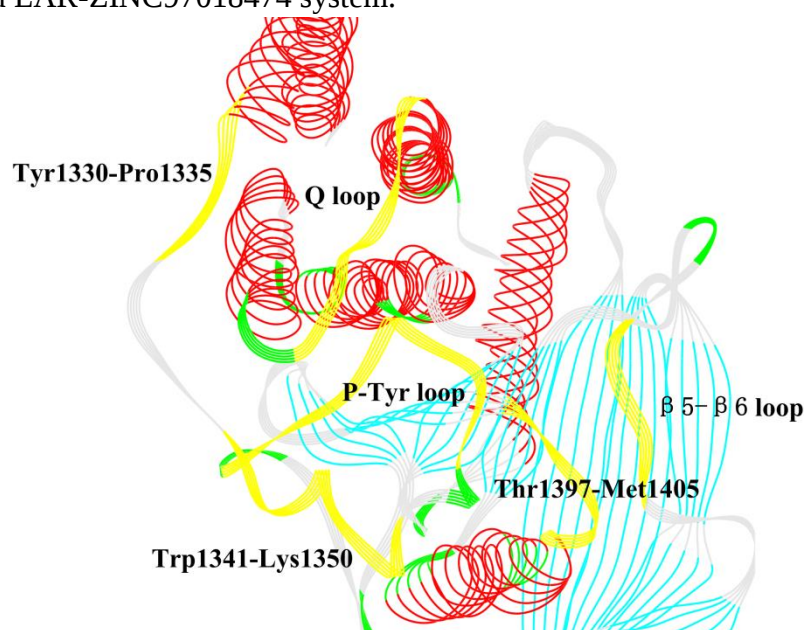


Figure S7 The active loop areas and the surrounding areas of LAR.

Table S2

Residue	Shortest Path Betweenness			ClosenessCentrality		
	LAR-WT	LAR-Compound1	LAR-ZINC97018474	LAR-WT	LAR-Compound1	LAR-ZINC97018474
A:1308_:ILE	0.0154	0.0078	0.0126	0.1547	0.1194	0.1490
A:1309_:THR	0.0146	0.0171	0.0091	0.1374	0.1349	0.1311
A:1310_:ASP	0.0085	0.0078	0.0080	0.1249	0.1113	0.1167
A:1311_:LEU	0.0369	0.0369	0.0263	0.1595	0.1419	0.1436

A:1312:._:ALA	0.0240	0.0296	0.0196	0.1517	0.1355	0.1501
A:1313:._:ASP	0.0094	0.0099	0.0162	0.1223	0.1198	0.1281
A:1314:._:ASN	0.0238	0.0223	0.0157	0.1410	0.1251	0.1263
A:1315:._:ILE	0.0300	0.0299	0.0462	0.1620	0.1421	0.1631
A:1316:._:GLU	0.0096	0.0151	0.0229	0.1323	0.1199	0.1458
A:1317:._:ARG	0.0085	0.0091	0.0080	0.1249	0.1135	0.1167
A:1318:._:LEU	0.0174	0.0080	0.0126	0.1473	0.1250	0.1409
A:1319:._:LYS	0.0077	0.0098	0.0379	0.1395	0.1249	0.1686
A:1320:._:ALA	0.0083	0.0079	0.0079	0.1274	0.1076	0.1225
A:1323:._:GLY	0.0150	0.0090	0.0105	0.1447	0.1391	0.1460
A:1324:._:LEU	0.0088	0.0093	0.0122	0.1270	0.1202	0.1327
A:1325:._:LYS	0.0126	0.0205	0.0139	0.1412	0.1337	0.1359
A:1326:._:PHE	0.0439	0.0290	0.0313	0.1684	0.1605	0.1697
A:1327:._:SER	0.0213	0.0223	0.0293	0.1435	0.1358	0.1515
A:1328:._:GLN	0.0102	0.0103	0.0092	0.1290	0.1185	0.1270
A:1329:._:GLU	0.0260	0.0356	0.0259	0.1600	0.1523	0.1562
A:1330:._:TYR	0.0410	0.0455	0.0555	0.1662	0.1690	0.1768
A:1331:._:GLU	0.0079	0.0083	0.0090	0.1267	0.1201	0.1325
A:1332:._:SER	0.0144	0.0118	0.0134	0.1445	0.1327	0.1423
A:1333:._:ILE	0.0337	0.0394	0.0210	0.1676	0.1618	0.1668
A:1339:._:PHE	0.0154	0.0088	0.0158	0.1488	0.1505	0.1504
A:1340:._:THR	0.0077	0.0078	0.0089	0.1184	0.1280	0.1515
A:1341:._:TRP	0.0322	0.0377	0.0282	0.1508	0.1583	0.1724
A:1342:._:GLU	0.0080	0.0081	0.0082	0.1208	0.1286	0.1364
A:1343:._:ASN	0.0185	0.0218	0.0154	0.1366	0.1460	0.1531
A:1344:._:SER	0.0109	0.0103	0.0097	0.1403	0.1546	0.1526
A:1345:._:ASN	0.0141	0.0216	0.0226	0.1361	0.1375	0.1556
A:1346:._:LEU	0.0088	0.0111	0.0101	0.1233	0.1282	0.1452
A:1348:._:VAL	0.0001	0.0000	0.0236	0.6667	1.0000	0.1359
A:1349:._:ASN	0.0155	0.0081	0.0271	0.1234	0.1282	0.1669
A:1350:._:LYS	0.0205	0.0157	0.0139	0.1326	0.1217	0.1656
A:1351:._:PRO	0.0001	0.0000	0.0158	1.0000	1.0000	0.1198
A:1352:._:LYS	0.0077	0.0078	0.0343	0.1099	0.1273	0.1567
A:1353:._:ASN	0.0366	0.0243	0.0870	0.1504	0.1799	0.1950
A:1355:._:TYR	0.0337	0.0233	0.0000	0.1627	0.1594	1.0000
A:1359:._:ILE	0.0081	0.0130	0.0330	0.1336	0.1356	0.1765
A:1360:._:ALA	0.0190	0.0417	0.0105	0.1556	0.1461	0.1564
A:1361:._:TYR	0.0982	0.0562	0.0471	0.1745	0.1812	0.1766
A:1362:._:ASP	0.0199	0.0224	0.0122	0.1342	0.1757	0.1493
A:1363:._:HIS	0.0077	0.0119	0.0079	0.1296	0.1467	0.1308
A:1364:._:SER	0.0782	0.0199	0.0163	0.1838	0.1515	0.1671
A:1365:._:ARG	0.0412	0.0613	0.0142	0.1531	0.1747	0.1565
A:1366:._:VAL	0.0342	0.0078	0.0180	0.1872	0.1685	0.1713
A:1368:._:LEU	0.0186	0.0161	0.0208	0.1499	0.1757	0.1755

A:1369:._:THR	0.0077	0.0078	0.0079	0.1310	0.1302	0.1494
A:1370:._:SER	0.0077	0.0078	0.0000	0.1309	0.1390	1.0000
A:1371:._:ILE	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.1299	1.0000
A:1374:._:VAL	0.0000	0.0000	0.0000	0.1203	1.0000	1.0000
A:1377:._:SER	0.0077	0.0078	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
A:1378:._:ASP	0.0077	0.0078	0.0079	0.1417	0.1403	0.1494
A:1379:._:TYR	0.0240	0.0196	0.0140	0.1305	0.1153	0.1668
A:1380:._:ILE	0.0228	0.0114	0.0079	0.1396	0.1452	0.1494
A:1381:._:ASN	0.0400	0.0403	0.0576	0.1685	0.1406	0.2014
A:1382:._:ALA	0.0116	0.0139	0.0079	0.1661	0.1869	0.1667
A:1383:._:ASN	0.0524	0.0970	0.0201	0.1804	0.1865	0.1770
A:1384:._:TYR	0.0815	0.0098	0.0147	0.1805	0.1963	0.1626
A:1385:._:ILE	0.0358	0.0379	0.0394	0.1974	0.1535	0.1995
A:1386:._:ASP	0.0222	0.0087	0.0079	0.1895	0.1918	0.1545
A:1387:._:GLY	0.0154	0.0078	0.0079	0.1257	0.1551	0.1464
A:1388:._:TYR	0.0077	0.0085	0.0134	0.1545	0.1366	0.1705
A:1390:._:LYS	0.0077	0.0233	0.0181	0.1255	0.1658	0.1714
A:1392:._:ASN	0.0077	0.0133	0.0079	0.1530	0.1581	0.1664
A:1393:._:ALA	0.0307	0.0408	0.0093	0.1435	0.1629	0.1576
A:1394:._:TYR	0.0651	0.0464	0.0561	0.2145	0.1871	0.2059
A:1395:._:ILE	0.0881	0.1013	0.0488	0.1985	0.2095	0.1965
A:1396:._:ALA	0.0124	0.0083	0.0086	0.1773	0.2063	0.1719
A:1397:._:THR	0.0252	0.0639	0.0403	0.2041	0.1751	0.2138
A:1398:._:GLN	0.0457	0.0341	0.1054	0.1581	0.2072	0.2175
A:1399:._:GLY	0.0129	0.0078	0.0133	0.1790	0.1844	0.1911
A:1400:._:PRO	0.0077	0.0153	0.0162	0.1133	0.1255	0.1674
A:1401:._:LEU	0.0000	0.0239	0.0616	0.1000	0.1720	0.1813
A:1404:._:THR	0.0000	0.0151	0.0079	1.0000	0.1763	0.1547
A:1405:._:MET	0.0156	0.0268	0.0786	0.1716	0.1816	0.1909
A:1406:._:GLY	0.0077	0.0134	0.0101	0.1309	0.1709	0.1584
A:1407:._:ASP	0.0388	0.0445	0.0208	0.1649	0.1515	0.1755
A:1408:._:PHE	0.0285	0.0352	0.0854	0.1885	0.1631	0.2122
A:1409:._:TRP	0.1070	0.1040	0.1211	0.1808	0.1897	0.1839
A:1410:._:ARG	0.0445	0.0479	0.0237	0.1505	0.1714	0.1591
A:1411:._:MET	0.0629	0.0702	0.0907	0.1903	0.1493	0.2052
A:1412:._:VAL	0.0586	0.0167	0.0318	0.1792	0.1835	0.1877
A:1413:._:TRP	0.0916	0.0658	0.0614	0.1578	0.1594	0.1614
A:1414:._:GLU	0.0077	0.0303	0.0208	0.1310	0.1530	0.1755
A:1415:._:GLN	0.0655	0.0408	0.0114	0.1888	0.1614	0.1743
A:1416:._:ARG	0.0157	0.0092	0.0079	0.1558	0.1878	0.1353
A:1417:._:THR	0.0185	0.0195	0.0358	0.1579	0.1647	0.1820
A:1418:._:ALA	0.0124	0.0193	0.0208	0.1837	0.1700	0.1436
A:1419:._:THR	0.0259	0.0078	0.0133	0.1848	0.1848	0.1815
A:1420:._:VAL	0.0284	0.0447	0.0763	0.1838	0.1589	0.1773

A:1421:_:VAL	0.0565	0.0730	0.0684	0.2207	0.1919	0.2226
A:1422:_:MET	0.1209	0.1024	0.0463	0.2041	0.2246	0.1897
A:1423:_:MET	0.0568	0.0720	0.0359	0.2242	0.2068	0.2218
A:1424:_:THR	0.0401	0.0290	0.0452	0.1790	0.2314	0.2111
A:1425:_:ARG	0.0077	0.0109	0.0095	0.1212	0.1831	0.1787
A:1426:_:LEU	0.0444	0.0078	0.0105	0.1750	0.1674	0.1686
A:1428:_:GLU	0.0488	0.0670	0.0323	0.1904	0.1429	0.2024
A:1431:_:ARG	0.0077	0.0078	0.0079	0.1601	0.1898	0.1685
A:1432:_:VAL	0.0077	0.0078	0.0079	0.1490	0.1597	0.1541
A:1433:_:LYS	0.0349	0.0577	0.0170	0.1652	0.1376	0.1810
A:1434:_:CYS	0.0553	0.0151	0.0433	0.1988	0.1667	0.1902
A:1435:_:ASP	0.0326	0.0490	0.0844	0.1259	0.1576	0.1635
A:1436:_:GLN	0.0077	0.0078	0.0079	0.1465	0.1636	0.1604
A:1437:_:TYR	0.1027	0.1006	0.0580	0.1949	0.1501	0.1998
A:1438:_:TRP	0.0143	0.0371	0.0536	0.1759	0.1935	0.1876
A:1439:_:PRO	0.0123	0.0392	0.0351	0.1405	0.1804	0.1628
A:1442:_:GLY	0.0077	0.0078	0.0079	0.1242	0.1415	0.1232
A:1443:_:THR	0.0077	0.0078	0.0079	0.1079	0.1172	0.0877
A:1444:_:GLU	0.0077	0.0078	0.0079	0.1385	0.1106	0.1402
A:1446:_:CYS	0.0094	0.0078	0.0079	0.1534	0.1306	0.1558
A:1448:_:LEU	0.0000	0.0078	0.0079	1.0000	0.1465	0.0987
A:1449:_:ILE	0.0078	0.0080	0.0079	0.1413	0.0955	0.1556
A:1450:_:GLN	0.0154	0.0233	0.0236	0.1208	0.1482	0.1228
A:1451:_:VAL	0.0252	0.0186	0.0126	0.1585	0.1178	0.1625
A:1452:_:THR	0.0231	0.0233	0.0158	0.1209	0.1480	0.0961
A:1453:_:LEU	0.0183	0.0163	0.0236	0.1418	0.1243	0.1404
A:1454:_:LEU	0.0154	0.0078	0.0313	0.1249	0.1327	0.1185
A:1455:_:ASP	0.0077	0.0078	0.0079	0.1247	0.1253	0.1181
A:1456:_:THR	0.0077	0.0183	0.0079	0.1386	0.1253	0.1368
A:1457:_:VAL	0.0077	0.0078	0.0079	0.1465	0.1447	0.1421
A:1458:_:GLU	0.0077	0.0082	0.0079	0.1321	0.1419	0.1310
A:1459:_:LEU	0.0077	0.0078	0.0079	0.1560	0.1419	0.1609
A:1461:_:THR	0.0383	0.0225	0.0236	0.1593	0.1553	0.1584
A:1462:_:TYR	0.0180	0.0272	0.0274	0.1847	0.1779	0.1916
A:1463:_:THR	0.0154	0.0119	0.0158	0.1521	0.1837	0.1506
A:1464:_:VAL	0.0154	0.0156	0.0158	0.1716	0.1622	0.1655
A:1465:_:ARG	0.0299	0.0253	0.0158	0.1600	0.1652	0.1584
A:1466:_:THR	0.0307	0.0233	0.0467	0.1424	0.1670	0.1339
A:1467:_:PHE	0.0388	0.0459	0.0509	0.1733	0.1431	0.1765
A:1468:_:ALA	0.0077	0.0078	0.0236	0.1079	0.1628	0.1062
A:1469:_:LEU	0.0286	0.0145	0.0236	0.1643	0.1106	0.1645
A:1470:_:HIS	0.0458	0.0309	0.0313	0.1371	0.1505	0.1396
A:1471:_:LYS	0.0231	0.0078	0.0079	0.1366	0.1332	0.1391
A:1472:_:SER	0.0000	0.0156	0.0158	1.0000	0.1329	0.1095

A:1478:_:ARG	0.0078	0.0078	0.0079	0.1430	0.1056	0.1437
A:1480:_:LEU	0.0116	0.0140	0.0308	0.1525	0.1342	0.1685
A:1481:_:ARG	0.0425	0.0315	0.0617	0.1653	0.1677	0.1534
A:1482:_:GLN	0.0272	0.0201	0.0224	0.1800	0.1664	0.1773
A:1483:_:PHE	0.0710	0.0497	0.0933	0.2066	0.1772	0.1978
A:1484:_:GLN	0.0475	0.0474	0.0260	0.1790	0.1974	0.1769
A:1485:_:PHE	0.0716	0.0867	0.0512	0.2078	0.1926	0.2056
A:1486:_:MET	0.0231	0.0195	0.0079	0.1378	0.2223	0.1368
A:1487:_:ALA	0.0077	0.0078	0.0079	0.1375	0.1563	0.1368
A:1488:_:TRP	0.0454	0.0708	0.0532	0.2039	0.1511	0.2138
A:1492:_:GLY	0.0077	0.0078	0.0079	0.1695	0.2201	0.1763
A:1493:_:VAL	0.0104	0.0078	0.0142	0.1798	0.1805	0.1873
A:1494:_:PRO	0.0077	0.0157	0.0079	0.1773	0.1683	0.1824
A:1496:_:TYR	0.0077	0.0104	0.0079	0.1585	0.1984	0.1580
A:1497:_:PRO	0.0194	0.0373	0.0161	0.1883	0.1861	0.1822
A:1498:_:THR	0.0179	0.0086	0.0131	0.1670	0.2008	0.1677
A:1499:_:PRO	0.0532	0.0168	0.0437	0.1882	0.1629	0.1875
A:1500:_:ILE	0.0537	0.1012	0.0593	0.2032	0.1887	0.2105
A:1501:_:LEU	0.0133	0.0176	0.0385	0.1631	0.2160	0.1886
A:1502:_:ALA	0.0216	0.0120	0.0164	0.1733	0.1844	0.1726
A:1503:_:PHE	0.1094	0.1155	0.1201	0.2197	0.1726	0.2208
A:1504:_:LEU	0.0203	0.0246	0.0643	0.1985	0.2147	0.2163
A:1505:_:ARG	0.0154	0.0373	0.0151	0.1724	0.2133	0.1705
A:1506:_:ARG	0.0339	0.0212	0.0163	0.1934	0.1862	0.1841
A:1507:_:VAL	0.0315	0.0305	0.0398	0.1988	0.1871	0.2088
A:1508:_:LYS	0.0251	0.0230	0.0232	0.1876	0.2010	0.1885
A:1509:_:ALA	0.0094	0.0165	0.0084	0.1677	0.1936	0.1645
A:1510:_:CYS	0.0311	0.0204	0.0095	0.1809	0.1747	0.1799
A:1511:_:ASN	0.0280	0.0290	0.0101	0.1823	0.1766	0.1807
A:1512:_:PRO	0.0077	0.0078	0.0079	0.1364	0.1977	0.1256
A:1516:_:GLY	0.0077	0.0083	0.0278	0.1543	0.1366	0.1564
A:1517:_:PRO	0.0258	0.0349	0.0079	0.1782	0.1608	0.1643
A:1518:_:MET	0.0382	0.0520	0.0229	0.1667	0.1955	0.1864
A:1519:_:VAL	0.0411	0.0245	0.0440	0.1988	0.2128	0.2021
A:1520:_:VAL	0.0733	0.0736	0.0382	0.2153	0.1888	0.2151
A:1521:_:HIS	0.0665	0.1198	0.0710	0.2069	0.2236	0.2179
A:1522:_:CYS	0.0482	0.0406	0.1560	0.2095	0.2166	0.2348
A:1523:_:SER	0.0287	0.0156	0.0082	0.1734	0.2091	0.1643
A:1524:_:ALA	0.0077	0.0078	0.0000	0.1366	0.1434	1.0000
A:1525:_:GLY	0.0077	0.0337	0.0079	0.1883	0.1117	0.2027
A:1526:_:VAL	0.0142	0.0221	0.1024	0.1666	0.2013	0.2173
A:1527:_:GLY	0.0102	0.0088	0.0296	0.1798	0.1739	0.2138
A:1528:_:ARG	0.0897	0.0622	0.1013	0.2199	0.1828	0.2377
A:1529:_:THR	0.0545	0.0500	0.0594	0.2165	0.2162	0.2258

A:1530:._:GLY	0.0279	0.0236	0.0174	0.1872	0.2195	0.2034
A:1531:._:CYS	0.0619	0.0242	0.0830	0.2113	0.1947	0.2210
A:1532:._:PHE	0.1748	0.1357	0.1317	0.2357	0.2049	0.2341
A:1533:._:ILE	0.0675	0.0408	0.0656	0.2066	0.2380	0.2126
A:1534:._:VAL	0.0565	0.0418	0.0402	0.2010	0.2070	0.2040
A:1535:._:ILE	0.0961	0.1041	0.0603	0.2143	0.1949	0.2147
A:1536:._:ASP	0.0597	0.0641	0.0572	0.2117	0.2258	0.2096
A:1537:._:ALA	0.0199	0.0199	0.0234	0.1846	0.2185	0.1850
A:1538:._:MET	0.0501	0.0723	0.0374	0.2007	0.1881	0.1807
A:1539:._:LEU	0.0448	0.0704	0.0209	0.1910	0.2100	0.1835
A:1540:._:GLU	0.0182	0.0230	0.0348	0.1826	0.2035	0.1838
A:1541:._:ARG	0.0164	0.0194	0.0196	0.1714	0.1871	0.1667
A:1542:._:MET	0.0446	0.1053	0.0170	0.1778	0.1792	0.1735
A:1543:._:LYS	0.0077	0.0092	0.0087	0.1605	0.1898	0.1638
A:1545:._:GLU	0.0077	0.0562	0.0079	0.1464	0.1604	0.1500
A:1546:._:LYS	0.0077	0.0091	0.0079	0.1340	0.1630	0.1256
A:1548:._:VAL	0.0077	0.0348	0.0099	0.1377	0.1619	0.1555
A:1549:._:ASP	0.0120	0.0091	0.0079	0.1711	0.1619	0.1531
A:1550:._:ILE	0.0295	0.0183	0.0285	0.1837	0.1618	0.1753
A:1551:._:TYR	0.0195	0.0117	0.0179	0.1609	0.1751	0.1586
A:1552:._:GLY	0.0092	0.0078	0.0079	0.1593	0.1539	0.1459
A:1553:._:HIS	0.0223	0.0202	0.0362	0.1809	0.1310	0.1950
A:1554:._:VAL	0.0406	0.0521	0.0395	0.1867	0.1941	0.1820
A:1555:._:THR	0.0183	0.0133	0.0131	0.1561	0.1767	0.1612
A:1556:._:CYS	0.0230	0.0166	0.0231	0.1743	0.1584	0.1708
A:1557:._:MET	0.0723	0.0953	0.0680	0.2031	0.1507	0.2061
A:1558:._:ARG	0.0539	0.0399	0.0246	0.1819	0.1987	0.1858
A:1559:._:SER	0.0101	0.0098	0.0089	0.1530	0.1819	0.1528
A:1560:._:GLN	0.0901	0.0498	0.0486	0.1956	0.1413	0.1825
A:1561:._:ARG	0.0838	0.1266	0.0675	0.1875	0.1760	0.2067
A:1562:._:ASN	0.0107	0.0107	0.0344	0.1490	0.2042	0.1863
A:1563:._:TYR	0.0109	0.0144	0.0079	0.1581	0.1568	0.1787
A:1564:._:MET	0.0274	0.0199	0.0238	0.1880	0.1524	0.1992
A:1565:._:VAL	0.0077	0.0262	0.0112	0.1597	0.1942	0.1936
A:1566:._:GLN	0.0109	0.0172	0.0514	0.1551	0.1893	0.1955
A:1567:._:THR	0.0212	0.0134	0.0109	0.1723	0.1765	0.1852
A:1568:._:GLU	0.0078	0.0288	0.0107	0.1536	0.1743	0.1640
A:1569:._:ASP	0.0151	0.0217	0.0135	0.1727	0.1556	0.1764
A:1570:._:GLN	0.0311	0.0595	0.0354	0.1915	0.1834	0.2029
A:1571:._:TYR	0.0328	0.0469	0.0401	0.1734	0.2022	0.1761
A:1572:._:VAL	0.0253	0.0431	0.0208	0.1693	0.1695	0.1663
A:1573:._:PHE	0.0608	0.1256	0.0669	0.1974	0.1689	0.1985
A:1574:._:ILE	0.0503	0.0393	0.0573	0.1969	0.2177	0.1960
A:1575:._:HIS	0.0393	0.0251	0.0187	0.1815	0.1866	0.1647

A:1576:_:GLU	0.0337	0.0676	0.0536	0.1768	0.1664	0.1789
A:1577:_:ALA	0.0285	0.0284	0.0291	0.1877	0.1906	0.1876
A:1578:_:LEU	0.0780	0.0394	0.0668	0.2000	0.1990	0.1795
A:1579:_:LEU	0.0172	0.0469	0.0207	0.1688	0.1879	0.1652
A:1580:_:GLU	0.0284	0.0192	0.0424	0.1669	0.1695	0.1757
A:1581:_:ALA	0.0249	0.0092	0.0162	0.1772	0.1753	0.1590
A:1582:_:ALA	0.0385	0.0089	0.0220	0.1721	0.1785	0.1611
A:1583:_:THR	0.0150	0.0499	0.0267	0.1453	0.1617	0.1583
A:1584:_:CYS	0.0083	0.0078	0.0177	0.1540	0.1545	0.1642
