

Pattern of Amino Acid Substitutions in Transmembrane Domains of β -Barrel Membrane Proteins for Detecting Remote Homologs in Bacteria and Mitochondria

David Jimenez-Morales¹, Jie Liang^{1,*}

¹ Department of Bioengineering, University of Illinois at Chicago, Chicago, Illinois, United States of America.

* E-mail: Corresponding author jliang@uic.edu

Figure S2. The estimated instantaneous substitution rates.

A. Estimating Q_{all} . Instantaneous substitution rate values estimated for residues embedded within the outer membrane region (Q_{all}). The entries q_{ij} of the rate matrix Q are substitution rates of amino acid residues for the 20 amino acids at an infinitesimally small time interval. The values are in the unit of $\times 10^{-4}$ expected residue changes per 100 site between sequences.

Q_{all} : Substitution rate values for the fragments embedded within the outer membrane region.
Scaling factor: $q_{ij} \times 10^{-4}$

	S	T	N	Q	D	E	R	K	H	C	P	G	W	Y	F	V	I	L	A	M
S	-91.699	37.585	14.958	2.972	2.530	0.728	1.435	0.998	0.521	0.133	0.197	9.318	0.049	0.240	0.379	0.618	0.162	0.510	17.641	0.723
T	37.585	-94.888	5.927	2.069	0.438	0.741	0.973	1.355	0.246	0.102	0.161	2.930	0.148	0.566	0.385	7.994	1.537	1.461	24.893	5.379
N	14.958	5.927	-37.543	2.511	6.672	0.487	0.695	1.253	0.817	0.037	0.050	1.394	0.102	0.523	0.146	0.162	0.079	0.212	0.958	0.559
Q	2.972	2.069	2.511	-27.419	1.466	5.979	2.735	2.551	3.045	0.133	0.113	0.307	0.113	0.345	0.104	0.576	0.429	0.444	0.741	0.786
D	2.530	0.438	6.672	1.466	-17.105	3.365	0.174	0.350	0.130	0.030	0.042	0.556	0.060	0.123	0.090	0.151	0.071	0.400	0.360	0.096
E	0.728	0.741	0.487	5.979	3.365	-13.688	0.234	0.234	0.052	0.019	0.127	0.443	0.069	0.132	0.049	0.218	0.040	0.142	0.515	0.114
R	1.435	0.973	0.695	2.735	0.174	0.234	-14.180	4.802	1.003	0.061	0.053	0.300	0.071	0.335	0.251	0.223	0.123	0.361	0.262	0.089
K	0.998	1.355	1.253	2.551	0.350	0.234	4.802	-13.533	0.086	0.029	0.042	0.208	0.120	0.123	0.134	0.100	0.142	0.266	0.598	0.143
H	0.521	0.246	0.817	3.045	0.130	0.052	1.003	0.086	-9.029	0.007	0.013	0.124	0.180	2.050	0.112	0.085	0.056	0.295	0.157	0.049
C	0.133	0.102	0.037	0.133	0.030	0.019	0.061	0.029	0.007	-1.104	0.013	0.055	0.016	0.188	0.061	0.071	0.021	0.052	0.046	0.029
P	0.197	0.161	0.050	0.113	0.042	0.127	0.053	0.042	0.013	0.013	-2.418	0.122	0.022	0.053	0.219	0.042	0.027	0.175	0.931	0.016
G	9.318	2.930	1.394	0.307	0.556	0.443	0.300	0.208	0.124	0.055	0.122	-60.010	0.141	0.305	0.595	0.633	0.303	0.855	40.777	0.643
W	0.049	0.148	0.102	0.113	0.060	0.069	0.071	0.120	0.180	0.016	0.022	0.141	-17.997	9.304	3.245	1.482	0.219	2.228	0.304	0.125
Y	0.240	0.566	0.523	0.345	0.123	0.132	0.335	0.123	2.050	0.188	0.053	0.305	9.304	-43.202	24.672	1.237	0.339	1.682	0.646	0.338
F	0.379	0.385	0.146	0.104	0.090	0.049	0.251	0.134	0.112	0.061	0.219	0.595	3.245	24.672	-78.969	7.825	4.858	31.890	2.568	1.387
V	0.618	7.994	0.162	0.576	0.151	0.218	0.223	0.100	0.085	0.071	0.042	0.633	1.482	1.237	7.825	-391.517	194.115	131.115	41.268	3.601
I	0.162	1.537	0.079	0.429	0.071	0.040	0.123	0.142	0.056	0.021	0.027	0.303	0.219	0.339	4.858	194.115	-251.467	44.434	2.718	1.793
L	0.510	1.461	0.212	0.444	0.400	0.142	0.361	0.266	0.295	0.052	0.175	0.855	2.228	1.682	31.890	131.115	44.434	-242.428	9.930	15.977
A	17.641	24.893	0.958	0.741	0.360	0.515	0.262	0.598	0.157	0.046	0.931	40.777	0.304	0.646	2.568	41.268	2.718	9.930	-147.777	2.465
M	0.723	5.379	0.559	0.786	0.096	0.114	0.089	0.143	0.049	0.029	0.016	0.643	0.125	0.338	1.387	3.601	1.793	15.977	2.465	-34.312

B. Estimating Q_{out} . Instantaneous substitution rate values estimated for the subset of residues from the transmembrane segments facing the lipid environment (Q_{out}).

Q_{out} : Substitution rate values for the subset of residues from the transmembrane segments facing the lipid environment
Scaling factor: $q_{ij} \times 10^{-4}$

	S	T	N	Q	D	E	R	K	H	C	P	G	W	Y	F	V	I	L	A	M
S	-21.741	7.444	1.569	0.392	0.295	0.075	0.095	0.141	0.236	0.026	0.314	2.878	0.107	0.485	0.459	0.565	0.226	0.585	5.694	0.155
T	7.444	-56.860	3.098	2.569	0.184	0.462	0.531	0.388	0.134	0.101	0.381	4.389	0.192	1.209	0.348	7.530	0.574	3.180	22.296	1.852
N	1.569	3.098	-11.638	1.381	2.049	0.157	0.276	0.263	0.339	0.043	0.036	0.576	0.062	0.534	0.158	0.198	0.081	0.372	0.181	0.264
Q	0.392	2.569	1.381	-12.734	0.390	0.783	0.825	0.421	2.395	0.070	0.168	0.189	0.205	1.428	0.223	0.415	0.131	0.288	0.253	0.206
D	0.295	0.184	2.049	0.390	-5.754	0.297	0.103	0.273	0.056	0.022	0.030	0.618	0.056	0.366	0.100	0.126	0.075	0.540	0.114	0.058
E	0.075	0.462	0.157	0.783	0.297	-3.888	0.104	0.020	0.042	0.011	0.011	0.227	0.074	0.209	0.139	0.357	0.068	0.346	0.483	0.022
R	0.095	0.531	0.276	0.825	0.103	0.104	-5.535	0.546	0.463	0.019	0.031	0.293	0.115	1.108	0.101	0.191	0.153	0.362	0.173	0.045
D	0.141	0.388	0.263	0.421	0.273	0.020	0.546	-3.532	0.092	0.010	0.056	0.121	0.082	0.290	0.196	0.124	0.074	0.267	0.113	0.055
H	0.236	0.134	0.339	2.395	0.056	0.042	0.463	0.092	-8.410	0.017	0.036	0.088	0.312	3.050	0.158	0.132	0.163	0.465	0.180	0.053
C	0.026	0.101	0.043	0.070	0.022	0.011	0.019	0.010	0.017	-1.396	0.029	0.072	0.046	0.340	0.089	0.231	0.065	0.085	0.104	0.019
P	0.314	0.381	0.036	0.168	0.030	0.011	0.031	0.056	0.036	0.029	-3.905	0.452	0.096	0.077	0.484	0.134	0.083	0.470	0.978	0.037
G	2.878	4.389	0.576	0.189	0.618	0.227	0.293	0.121	0.088	0.072	0.452	-62.493	0.234	0.725	1.682	0.933	0.408	2.405	45.843	0.359
W	0.107	0.192	0.062	0.205	0.056	0.074	0.115	0.082	0.312	0.046	0.096	0.234	-34.252	18.012	5.363	3.532	0.550	4.395	0.595	0.223
Y	0.485	1.209	0.534	1.428	0.366	0.209	1.108	0.290	3.050	0.340	0.077	0.725	18.012	-55.681	19.511	1.881	0.600	3.807	1.434	0.615
F	0.459	0.348	0.158	0.223	0.100	0.139	0.101	0.196	0.158	0.089	0.484	1.682	5.363	19.511	-136.508	21.602	9.725	65.440	7.203	3.528
V	0.565	7.530	0.198	0.415	0.126	0.357	0.191	0.124	0.132	0.231	0.134	0.933	3.532	1.881	21.602	-548.101	275.106	168.339	61.303	5.402
I	0.226	0.574	0.081	0.131	0.075	0.068	0.153	0.074	0.163	0.065	0.083	0.408	0.550	0.600	9.725	275.106	-381.698	81.834	7.808	3.972
L	0.585	3.180	0.372	0.288	0.540	0.346	0.362	0.267	0.465	0.085	0.470	2.405	4.395	3.807	65.440	168.339	81.834	-365.387	16.480	15.727
A	5.694	22.296	0.181	0.253	0.114	0.483	0.173	0.113	0.180	0.104	0.978	45.843	0.595	1.434	7.203	61.303	7.808	16.480	-173.182	1.947
M	0.155	1.852	0.264	0.206	0.058	0.022	0.045	0.055	0.053	0.019	0.037	0.359	0.223	0.615	3.528	5.402	3.972	15.727	1.947	-34.540

C. Estimating Q_{in} . Instantaneous substitution rate values estimated for the subset of residues from the transmembrane segments facing the interior of the barrel (Q_{in}).

Q_{in} : Substitution rate values for the subset of residues from the transmembrane segments facing the interior of the barrel
Unit: $q_{ij} \times 10^{-04}$

	S	T	N	Q	D	E	R	K	H	C	P	G	W	Y	F	V	I	L	A	M
S	-187.806	76.525	25.615	5.620	4.276	2.347	3.360	1.567	1.069	0.270	0.513	19.043	0.493	0.397	0.681	2.342	0.885	0.796	37.999	4.010
T	76.525	-146.250	9.066	4.168	1.006	1.433	1.399	2.166	0.536	0.130	0.232	1.416	0.204	1.582	1.434	12.145	3.521	1.788	22.943	4.557
N	25.615	9.066	-64.924	3.878	9.932	0.719	0.825	2.727	1.206	0.145	0.225	3.216	0.330	0.763	0.216	0.630	0.192	0.901	3.060	1.279
Q	5.620	4.168	3.878	-56.578	3.627	19.786	3.569	5.042	1.264	0.165	0.180	0.538	0.203	0.584	0.282	1.558	1.307	2.204	1.796	0.809
D	4.276	1.006	9.932	3.627	-41.038	14.389	0.352	0.291	0.207	0.048	0.136	2.966	0.159	0.248	0.383	0.482	0.134	0.893	1.136	0.372
E	2.347	1.433	0.719	19.786	14.389	-47.877	0.356	0.428	0.168	0.220	0.278	1.002	0.443	0.311	0.203	1.886	0.184	0.440	2.496	0.788
R	3.360	1.399	0.825	3.569	0.352	0.356	-23.582	7.702	1.449	0.174	0.076	0.876	0.085	0.302	0.587	0.717	0.220	0.692	0.664	0.178
D	1.567	2.166	2.727	5.042	0.291	0.428	7.702	-23.477	0.272	0.060	0.139	0.398	0.162	0.101	0.117	0.226	0.307	0.561	1.084	0.138
H	1.069	0.536	1.206	1.264	0.207	0.168	1.449	0.272	-7.364	0.012	0.018	0.242	0.040	0.344	0.060	0.075	0.045	0.193	0.134	0.031
C	0.270	0.130	0.145	0.165	0.048	0.220	0.174	0.050	0.012	-1.861	0.007	0.150	0.016	0.181	0.029	0.067	0.019	0.038	0.118	0.020
P	0.513	0.232	0.225	0.180	0.136	0.278	0.076	0.139	0.018	0.007	-3.094	0.234	0.066	0.116	0.053	0.065	0.038	0.087	0.593	0.039
G	19.043	1.416	3.216	0.538	2.966	1.002	0.876	0.398	0.242	0.150	0.234	-83.068	0.331	0.302	0.268	0.616	0.337	0.561	50.062	0.509
W	0.493	0.204	0.330	0.203	0.159	0.443	0.085	0.162	0.040	0.016	0.066	0.331	-3.887	0.737	0.111	0.063	0.052	0.132	0.188	0.071
Y	0.397	1.582	0.763	0.584	0.248	0.311	0.302	0.101	0.344	0.181	0.116	0.302	0.737	-28.516	21.291	0.310	0.246	0.265	0.259	0.178
F	0.681	1.434	0.216	0.282	0.383	0.203	0.587	0.117	0.060	0.029	0.053	0.268	0.111	21.291	-29.099	0.302	0.356	1.117	0.427	1.184
V	2.342	12.145	0.630	1.558	0.482	1.886	0.717	0.226	0.075	0.067	0.065	0.616	0.063	0.310	0.302	-53.401	15.204	7.038	8.938	0.737
I	0.885	3.521	0.192	1.307	0.134	0.184	0.220	0.307	0.045	0.019	0.038	0.337	0.052	0.246	0.356	15.204	-28.079	2.607	1.458	0.967
L	0.796	1.788	0.901	2.204	0.893	0.440	0.692	0.561	0.193	0.038	0.087	0.561	0.132	0.265	1.117	7.038	2.607	-32.970	7.617	5.037
A	37.999	22.943	3.060	1.796	1.136	2.496	0.664	1.084	0.134	0.118	0.593	50.062	0.188	0.259	0.427	8.938	1.458	7.617	-143.667	2.696
M	4.010	4.557	1.279	0.809	0.372	0.788	0.178	0.138	0.031	0.020	0.039	0.509	0.071	0.178	1.184	0.737	0.967	5.037	2.696	-23.602