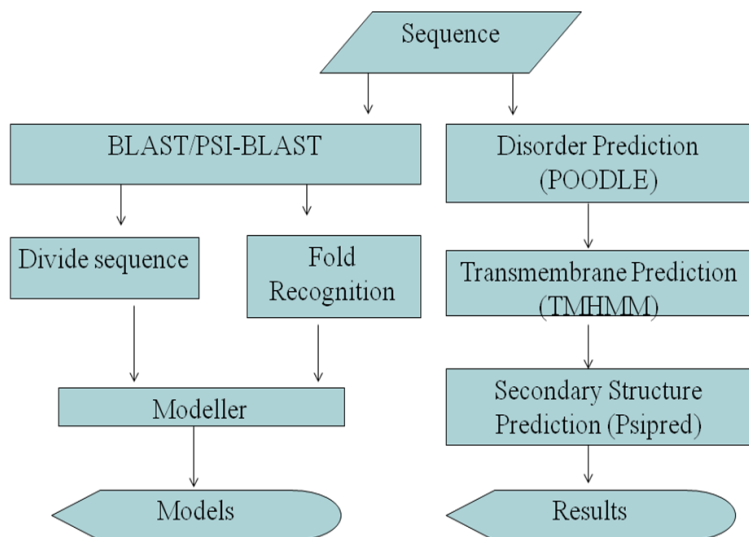


# タンパク質モデリングワークフロー

<http://togo.cbrc.jp>



## ○ タンパク質モデリングワークフローとは

機能未知または立体構造未知のタンパク質やアミノ酸配列を、PDB に登録されている既知の構造と配列がマッチする部分ごとに分割し、その部分ごとに立体構造を予測します。

※構造の予測にカリフォルニア大学サンフランシスコ校（UCSF）で維持・開発されているプログラム MODELLER を使用しているため、事前に MODELLER のサイトからライセンスキーを取得する必要があります。詳細は <http://www.salilab.org/modeller/registration.html> をご覧ください。

## ○ タンパク質モデリングワークフローの特徴

- ・ より多くの配列をカバーしたモデリング結果の提供

BLAST/PSI-BLAST を使い、PDB に登録されている既知の構造と配列がマッチする部分ごとにクエリ配列を分割して構造予測を行ったうえで、マッチしない部分については Fold Recognition を使用し、類似の fold にもとづいて構造を予測します。

（Fold Recognition の使用の有無は選択できます。デフォルト設定では有）

## ○ 利用例

- ・ 立体構造未知のタンパク質やアミノ酸配列について構造に関する示唆を得たいときに。

## ○ 今後の開発予定

- ・ バージョンアップ：不具合箇所の修正、処理時間の短縮、機能拡張などを不定期に実施します。
- ・ ユーザーの要望を積極的に取り入れて、よりよいシステムへと改良していきます。

## ○ ご質問やご意見はこちらまで

[workflow@cbrc.jp](mailto:workflow@cbrc.jp)

(2010年2月現在 ver.2)