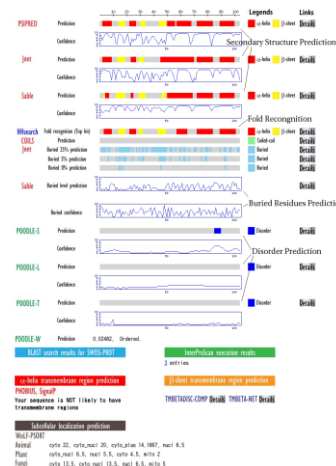
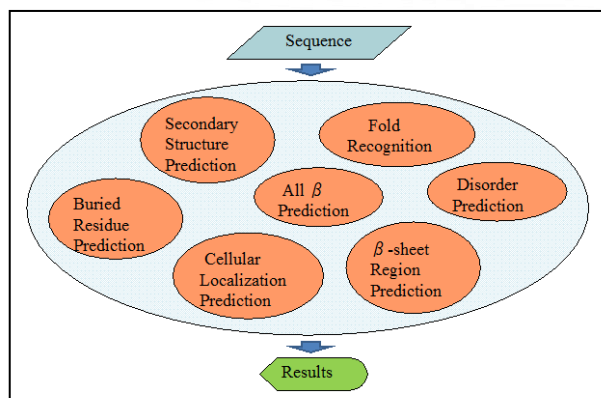


# タンパク質アノテーションワークフロー

<http://togo.cbrc.jp>



## ○ タンパク質アノテーションワークフローとは

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に対してさまざまな予測を行うことで、機能推測や構造推測を支援するものです。どなたでもお使いいただけます。

## ○ タンパク質アノテーションワークフローの特徴

- ・ 作業の単純化、作業時間の短縮  
従来、手間と時間のかかっていた作業をワークフローとして自動化しました。一度の操作でさまざまな予測を行い、得られた情報を整理して、比較的短時間で返します。
- ・ 各種予測プログラムの結果比較が容易  
2次構造予測、ディスオーダー予測、埋もれ残基予測、細胞内局在予測などの結果を、比較解析しやすいよう配置しました。
- ・ 予測プログラムの多様化  
たとえば、2次構造予測であれば複数の異なるアルゴリズム（Pspred, Jnet, Sable）を使用するなど、情報の幅を広げることで予測精度を高めることが可能です。

## ○ 利用例

- ・ 欧米の主要データベース (NCBI や EBI) から有用なアノテーション情報が得られなかった場合、このワークフローによるさまざまな予測手法を用いることで新たな情報が得られます。

## ○ 今後の開発予定

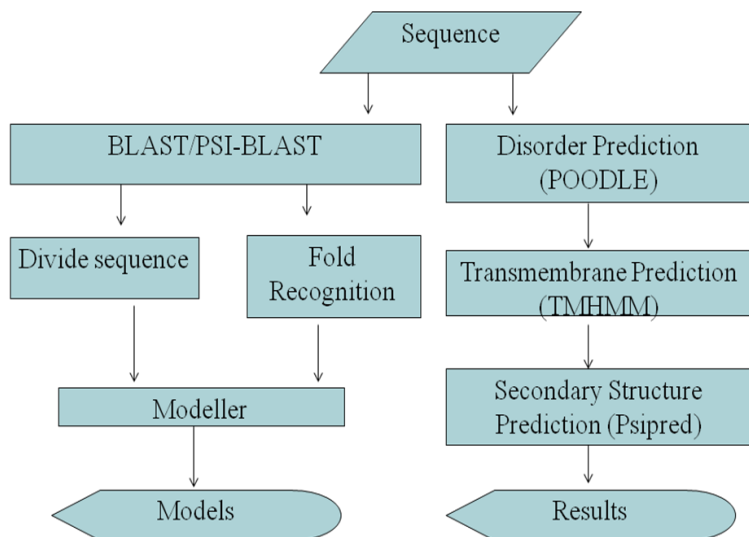
- ・ バージョンアップ：不具合箇所の修正、処理時間の短縮、機能拡張などを不定期に実施します。
- ・ ユーザーの要望を積極的に取り入れて、よりよいシステムに改良していきます。

## ○ 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)

# 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。

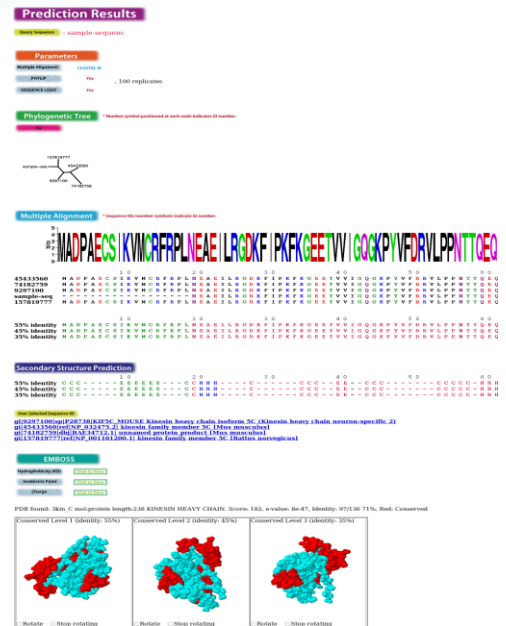
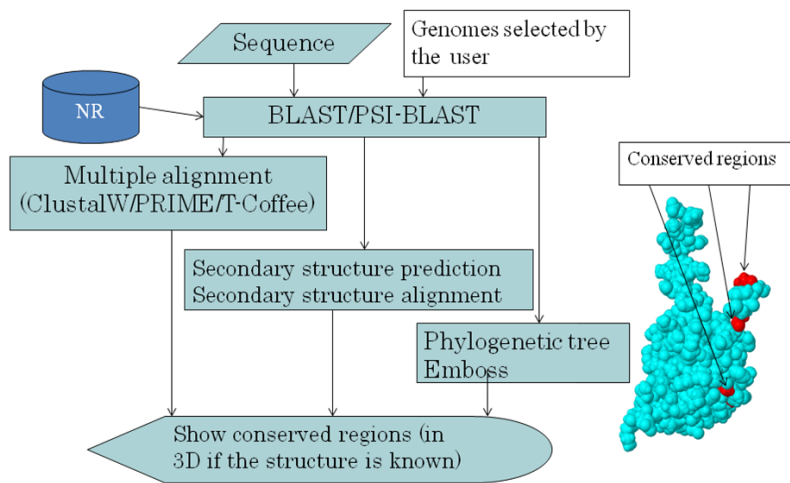
## ○ ご質問やご意見はこちらまで

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

(2010年2月現在 ver.2)

# タンパク質比較情報ワークフロー

<http://togo.cbrc.jp>



## ○ タンパク質比較情報ワークフローとは

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に対し、相同なタンパク質の配列と比較することで、保存部位など構造上の重要な部位を表示します。

## ○ タンパク質比較情報ワークフローの特徴

- ・マルチプルアライメントの指定  
処理速度や精度に応じ、使用するマルチプルアライメントを自身で設定できます。現在は、ClustalW、PRIME、T-Coffeeを選択できます。
- ・2次構造予測によるアライメント  
アミノ酸配列だけでなく、ヘリックス、シートなど2次構造でアライメントすることで、共通する2次構造を的確に把握できます。
- ・ワークフローの使用に際し登録などの必要はなく、どなたでもお使いいただけます。

## ○ 利用例

- ・タンパク質の機能と構造との関係を検証する実験立案の資料に  
たとえば、このワークフローにより、あるタンパク質の保存部位が立体構造上のクレフト表面に存在すると予測された場合、保存部位のアミノ酸変異による機能確認の実験が立案されます。

## ○ 今後の開発予定

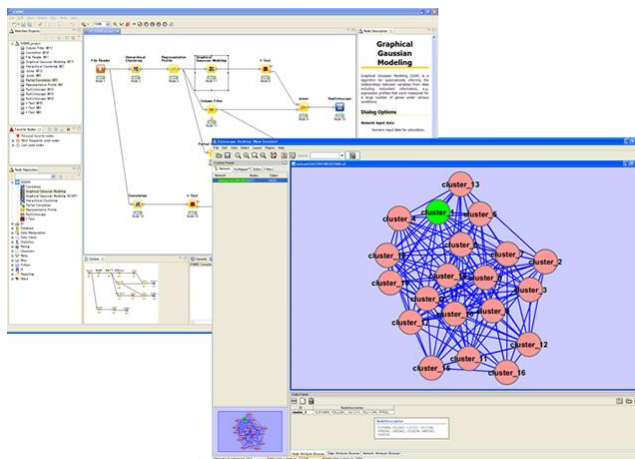
- ・バージョンアップ：不具合箇所の修正、処理時間の短縮、機能拡張などを不定期に実施します。
- ・ユーザーご要望を積極的に取り入れて、よりよいシステムに改良していきます。

## ○ 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)

# アクティブ ASIAN ワークフロー

<http://togo.cbrc.jp>



## ○ アクティブ ASIAN ワークフローとは

生命情報工学研究センターで開発しているネットワーク推定ツール、遺伝子ネットワーク推定システム（ASIAN: Automatic System for Inferring A Network）を、ユーザーがワークフロープラットフォームで利用できるサービスです。

## ○ アクティブ ASIAN ワークフローの特徴

- ・ 目的や用途に応じてカスタマイズ可能

配布しているワークフローは KNIME 環境で作動するため、ユーザーは、ASIAN ワークフローやそれ以外のものなど、さまざまな部品を組み合わせることで画面上でワークフローを構築し、目的・用途に応じてカスタマイズすることができます。

※KNIME: ドイツの Konstanz 大学で開発されたワークフロープラットフォームで、視覚的なワークフローの作成や解析ステップの選択的な実施、データと解析とを別々のウィンドウで表示するなどの特徴があります。詳細は <http://www.knime.org/> をご覧ください。

- ・ Local 版と ThinX (X-server) 版を提供  
Windows 32bit 版と Linux 64bit 版に対応しています。

## ○ 利用例

- ・ ASIAN の実行後、マウスによるドラッグ&ドロップで特定の統計解析などを実行できるようにプログラムを書き換える。

## ○ 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、よりよいシステムに改良していきます。

## ○ ご質問やご意見はこちらまで [workflow@cbrc.jp](mailto:workflow@cbrc.jp)

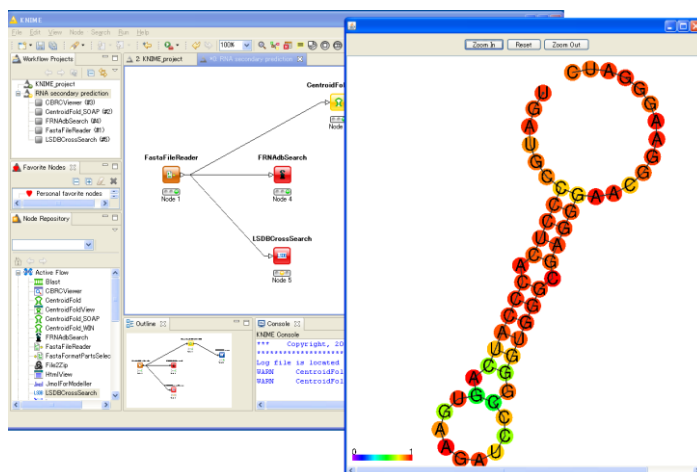
(2010年2月現在 ver.2)





# アクティブ CentroidFold ワークフロー

<http://togo.cbrc.jp>



## ○ アクティブ CentroidFold ワークフローとは

生命情報工学研究センターで開発している RNA の 2 次構造予測ツール CentroidFold を、ユーザーがワークフロープラットフォームで利用できるサービスです。

## ○ アクティブ CentroidFold ワークフローの特徴

- ・ 目的や用途に応じてカスタマイズ可能

配布しているワークフローは、KNIME 環境で作動するため、ユーザーは、CentroidFold ワークフローやそれ以外のものなど、さまざまな部品を組み合わせることで画面上でワークフローを構築し、目的・用途に応じてカスタマイズすることができます。組み合わせる部品には、新規機能性 RNA の発見と機能解析を支援する rRNADB の検索や DBCLS の横断検索もあります。  
 ※KNIME: ドイツの Konstanz 大学で開発されたワークフロープラットフォームで、視覚的なワークフローの作成や解析ステップの選択的な実施、データと解析を別々のウィンドウで表示するなどの特徴があります。詳細は <http://www.knime.org/> をご覧ください。

- ・ Windows 32bit 版に対応しています。

## ○ 利用例

- ・ CentroidFold 実行後、マウスによるドラッグ&ドロップで特定の統計解析などを実行できるようにプログラムを書き換える。

## ○ 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、よりよいシステムに改良していきます。

## ○ ご質問やご意見はこちらまで [workflow@cbrc.jp](mailto:workflow@cbrc.jp)

(2010 年 6 月現在)