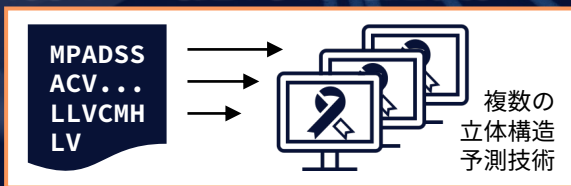


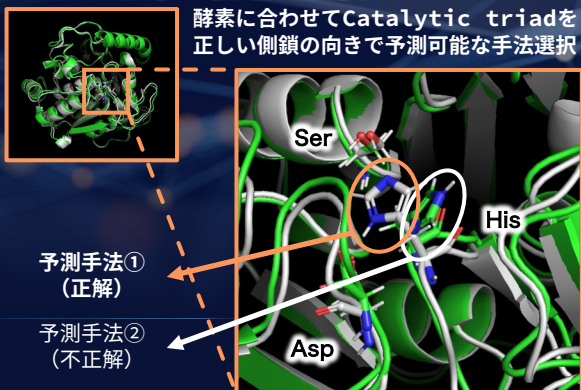
digzymeによる酵素インフォマティクスサービス 立体構造モデリング

“立体構造モデリング”では、3次元構造が決定されていないタンパク質に対して、その3次元構造を予測します。対象のタンパク質の1次配列情報から最適な予測手法を用いて3次元構造を推定し、PDBデータとして提供します。

酵素データ解析のスペシャリストが、対象ごとに最適な手法で構造予測



酵素に合わせた最適な予測手法選択により、正確な構造を提供



立体構造データ

予測結果をPDB形式で提供

応用先
ドッキング解析
MD解析など

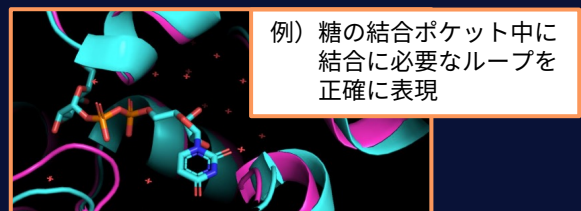
アライメントデータ

A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	A	A	M	E	E	A	A	G
A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	A	A	M	E	E	A	A	G
A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	A	A	M	E	E	A	A	G
A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	A	A	M	E	E	A	A	G
A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	S	A	M	E	E	A	A	G
A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	S	A	M	E	E	A	A	G
A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	S	A	M	E	E	A	A	G
A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	S	A	M	E	E	A	A	G
A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	S	A	M	E	E	A	A	G
A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	S	A	M	E	E	A	A	G
A	A	D	V	-	-	R	-	V	Y	S	A	M	E	E	A	A	G

類似酵素配列とのMSA*

応用先
進化的保存度解析など

PDBのデータベースに公開構造が存在するものよりも、基質が結合した状態を再現可能



主な特徴

- 複数の立体構造予測技術の中から個別の酵素ごとに最適な手法を選択
- Homology Modelingや、Deep Learningを用いた機械学習モデルを利用して3次元構造を予測
- 類似配列の3次元構造が判明していない配列でも構造が予測可能
- 各残基ごとに予測精度の信頼性をスコア化して出力
- 予測に使用した近縁酵素とのアラインメントファイルも提供可能

* MSA: Multiple Sequence Alignmentの略、複数の酵素のアミノ酸配列を同時にアラインメントする手法