一種預測生物分子功能位點的計算方法

本院覽號

28A-1011220C

公告日期

智財權狀態

know-how

摘要

此發明為一個計算機平台 (ISMBLab) 根據以實驗測定的蛋白質結構或是預測模型，預測蛋白質表面的作用位置及推測目標蛋白質序列的功能。總結來說，此計算平台可成為一個核心技術平台，包含以兩千萬結構模型為基礎的詳盡結構預測資料庫，並能應用此資料庫，應對快速增長的基因體序列與結構資訊。

技術優勢

- 無需使用序列或是結構相似性來進行蛋白質功能的預測。
- 蛋白質表面對於不同原子種類的喜好特性可以藉由空間機率分布來描述，此一方法更有助於預測蛋白質功能區域，讓預測更為準確。
- 可預測蛋白質功能區域之外，也預測功能區域裡胺基酸的重要性。
- 每一種原子類型都有獨立的預測模型，此策略幫助準確率的提升。

應用範圍

- 蛋白質工程。
- 抗體的功能預測。

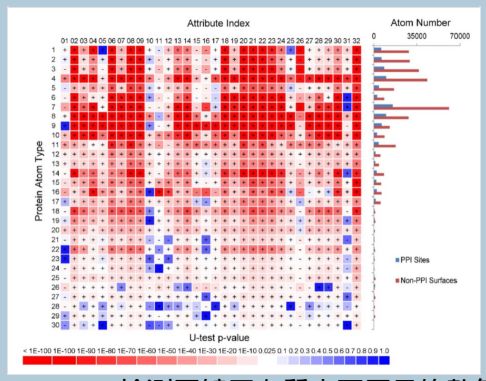

圖1. Mann-Whitney U-檢測圍繞蛋白質表面原子的數值屬性分佈。

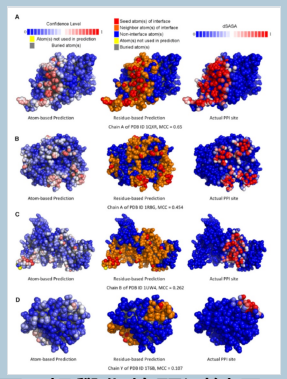

圖2.視覺化的預測結果。

創作人

楊安綏、彭洪斌、簡智偉