産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター

Active ワークフロー 組み合わせ型

ユーザーマニュアル

MolProf, AIST 2016/04/25

目次

はじぬ	5に	1
Activ	e ワークフロー組み合わせ型について	2
Activ	e ワークフロー基本ルール	3
RNA	Structure Prediciton の使用方法	8
4.1 身	译行準備	8
4.2	Y ー ド	9
4.2.1	ノード一覧	9
4.2.2	ノード実行環境設定	. 13
4.2.2.1	SetVariable	. 13
4.2.2.2	FastaFileReader	.14
4.2.2.3	Sparql_AIST	. 15
4.2.2.4	CentroidFold_AIST	. 17
4.2.2.5	IPknot_AIST	. 18
4.2.2.6	RactIP_AIST	. 19
4.2.2.7	Rascal_AIST	. 20
4.2.2.8	RASSIE_AIST	. 21
4.3 身	ミ行と結果参照	. 22
4.3.1	IPknot_AIST	. 22
4.3.2	RactIP_AIST	. 23
4.3.3	Rascal_AIST	.24
4.3.4	RASSIE_AIST	. 25
4.3.5	CentroidFold_AIST	. 26
Prote	in Structure Prediction の使用方法	. 27
5.1 净	写行準備	. 28
5.2 /	アード	. 28
5.2.1	ノード一覧	. 28
5.2.2	ノード実行環境設定	. 34
5.2.2.1	SetVariable	. 34
5.2.2.2	FastaFileReader	. 35
5.2.2.3	Sparql_AIST	. 36
5.2.2.4	BlastForModeller _AIST	. 38
5.2.2.5	HitRegionSelector_AIST	. 39
5.2.2.6	TemplateSelector_AIST	. 41
5.2.2.7	Modeller_AIST	. 42
5.2.2.8	CPHmodels_DTU	. 43
	はじめ Active RNA 4.1 第 4.2 7 4.2.1 4.2.2 4.2.2.1 4.2.2.2 4.2.2.3 4.2.2.4 4.2.2.5 4.2.2.6 4.2.2.7 4.2.2.8 4.3.1 4.3.2 4.3.1 4.3.2 4.3.3 4.3.4 4.3.3 4.3.4 4.3.5 Prote 5.1 第 5.2.2 5.2.2.1 5.2.2.2 5.2.2.1 5.2.2.2 5.2.2.3 5.2.2.4 5.2.2.5 5.2.2.5 5.2.2.5 5.2.2.5	はじめに

PsiPred_AIST	. 44
Poodle_AIST	. 45
TmHmm_DTU	. 46
2 SignalP_DTU	. 47
B ChloroP_DTU	. 48
LipoP_DTU	. 49
5 NetCTL_DTU	. 50
6 NetChop_DTU	. 51
7 NetNES_DTU	. 52
3 NetPhosK_DTU	. 53
0 NetPhos_DTU	. 54
) NetPicoRNA_DTU	. 55
DictyOGlyc_DTU	. 56
2 WolfPsort_AIST	. 57
B TargetP_DTU	. 58
SecretomeP_DTU	. 59
5 DisoPred_AIST	. 60
6 Memsat_AIST	. 61
実行と結果参照	. 62
$BlastForModeller_AIST \rightarrow HtmlView$. 62
$HitRegionSelector_AIST \rightarrow HtmlView$. 63
$TemplateSelector_AIST \rightarrow PDBjMineWeb \dots$. 64
Modeller_AIST \rightarrow JmolForModeller	. 65
$CPH models_DTU \rightarrow JmolForModeller$. 66
$CPH models_DTU \rightarrow HtmlView$. 67
$PsiPred_AIST \rightarrow AISTViewer$. 68
Poodle_AIST \rightarrow AISTViewer	. 70
$TmHmm_DTU \rightarrow HtmlView$. 72
SignalP_DTU \rightarrow HtmlView	. 73
ChloroP_DTU \rightarrow HtmlView	.74
$LipoP_DTU \rightarrow HtmlView$. 75
NetCTL_DTU \rightarrow HtmlView	. 76
NetChop_DTU \rightarrow HtmlView	. 77
NetNES_DTU \rightarrow HtmlView	. 78
NetPhosK_DTU \rightarrow HtmlView	. 79
NetPhos_DTU \rightarrow HtmlView	. 80
	PsiPred_AIST. Poodle_AIST TmHmm_DTU SignalP_DTU ChloroP_DTU LipoP_DTU NetCTL_DTU NetChop_DTU NetPhosK_DTU NetPhosK_DTU NetPhos_DTU NetPicoRNA_DTU NetPicoRNA_DTU NetPicoRNA_DTU SecretomeP_DTU SecretomeP_DTU SecretomeP_DTU BlastForModeller_AIST \rightarrow HtmlView HitRegionSelector_AIST \rightarrow HtmlView HitRegionSelector_AIST \rightarrow HtmlView Poodle_AIST \rightarrow JmolForModeller CPHmodels_DTU \rightarrow HtmlView Pointer_AIST \rightarrow AISTViewer Poodle_AIST \rightarrow AISTViewer Poodle_AIST \rightarrow AISTViewer Poodle_AIST \rightarrow AISTViewer Poodle_AIST \rightarrow AISTViewer Poodle_DTU \rightarrow HtmlView CPHmodels_DTU \rightarrow HtmlView NetProd_DTU \rightarrow HtmlView NetCrL_DTU \rightarrow HtmlView NetCrL_DTU \rightarrow HtmlView NetCrL_DTU \rightarrow HtmlView NetChop_DTU \rightarrow HtmlView NetPhos_DTU \rightarrow HtmlView NetP

	5.3.18	NetPicoRNA_DTU \rightarrow HtmlView	81
	5.3.19	DictyOGlyc_DTU \rightarrow HtmlView	82
	5.3.20	WolfPsort_AIST \rightarrow HtmlView	83
	5.3.21	$TargetP_DTU \rightarrow HtmlView$	84
	5.3.22	SecretomeP_DTU \rightarrow HtmlView	85
	5.3.23	$DisoPred_AIST \rightarrow AISTViewer$	86
	5.3.24	$Memsat_AIST \rightarrow AISTViewer$	87
6	Phylo	genetic Tree の使用方法	89
	6.1 美	至行準備	90
	6.2	アード	90
	6.2.1	ノード一覧	90
	6.2.2	ノード実行環境設定	92
	6.2.2.1	FastaFileReader	92
	6.2.2.2	ClustalW_AIST	93
	6.2.2.3	Mafft_AIST	94
	6.2.2.4	PhylogeneticTree_AIST	95
	6.3 美	至行と結果参照	97
	6.3.1	$ClustalW_AIST \rightarrow AISTViewer$	97
	6.3.2	$Mafft_AIST \rightarrow AISTViewer$	98
	6.3.3	PhylogeneticTreeView	100
7	Moleo	ular Simulation の使用方法	101
	7.1 美	至行準備	102
	7.2	́ — К	102
	7.2.1	ノード一覧	102
	7.2.2	ノード実行環境設定	108
	7.2.2.1	SetVariable	108
	7.2.2.2	FastaFileReader	109
	7.2.2.3	Sparql_AIST	110
	7.2.2.4	BlastForModeller _AIST	112
	7.2.2.5	HitRegionSelector_AIST	113
	7.2.2.6	TemplateSelector_AIST	115
	7.2.2.7	Modeller_AIST	116
	7.2.2.8	CompoundQuery_AIST	117
	7.2.2.9	AutoDock_AIST	120
	7.2.2.10	MMPrep_AIST	121
	7.2.2.11	InitMinMM_AIST	122

	7.2.2.12	MoltrecMD_AIST	123
	7.2.2.13	ResultPathSetter	124
	7.2.2.14	Ammos_AIST	125
	7.2.2.15	fpocket2_AIST	126
	7.2.2.16	PdbFileReader	127
	7.2.2.17	Mol2FileReader	128
	7.3 美	ミ行と結果参照	129
	7.3.1	BlastForModeller_AIST \rightarrow HtmlView	129
	7.3.2	$HitRegionSelector_AIST \rightarrow HtmlView$	130
	7.3.3	$TemplateSelector_AIST \rightarrow PDBjMineWeb \dots \dots$	131
	7.3.4	Modeller_AIST \rightarrow JmolForModeller	132
	7.3.5	AutoDock_AIST \rightarrow JmolForModeller	133
	7.3.6	InitMinMM_AIST \rightarrow JmolForModeller	135
	7.3.7	$MoltrecMD_AIST \rightarrow HtmlView$	136
	7.3.8	$ResultPathSetter \rightarrow JmolForModeller, \ HtmlView$	136
	7.3.9	$fpocket2_AIST \rightarrow JmolForModeller$	137
8	SPAR	2QL ノードの使用方法	138
	8.1	[、] ー ド	138
	8.1.1	ノード一覧	138
	8.1.2	Sparql_AIST $/ - F$	139
	8.1.2.1	実行環境設定	139
	8.1.3	Sparql_AIST_Adv \nearrow \vdash \vdots	142
	8.1.3.1	実行環境設定	142
	8.1.4	SequenceSelector $\mathcal{I} - \mathcal{F}$	143
	8.1.4.1	実行結果	143
	8.1.5	HtmlView $\mathcal{I} - \mathcal{F}$	144
	8.1.5.1	実行結果	144
9	付録		145
	9.1 作	计録 A:LSDBCrossSearch	145
1() おお	っりに	147

1 はじめに

本書は、産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センターにて運用する統合 DB 情報基盤サイトで公開している解析サービスの「Active ワークフロー」のうち、組み合わせ 型について、使用方法を記述したユーザーマニュアルです。

Active ワークフローのインストール方法については別途、インストールマニュアルをご参照 いただき、併せて統合 DB 情報基盤サイト Web サイトをご利用ください。

統合 DB 情報基盤サイト : <u>http://togo.medals.jp/</u>

Active ワークフローは、KNIME 上で実行します。

操作方法は、KNIME に準じているため、本ユーザーマニュアルでは、Active ワークフローの実行についての説明を記しています。

KNIME については、以下のサイトをご参照ください。

KNIME : <u>http://www.knime.org/</u>

2 Active ワークフロー組み合わせ型について

Active ワークフロー組み合わせ型は、現在下表の4種類です。

No.	Active ワークフロー組み合	対応 OS	説明
	わせ型名称		
1	RNA Structure Prediction	Windows32bit	RNA の構造予測を行う
	Active Workflow	Linux 64bit	ワークフロー
		MacOS (OS X	
		10.7 以上)	
2	Protein Structure	Windows32bit	モデリング、ディスオー
	Prediction Active	Linux 64bit	ダー領域予測、細胞内局
	Workflow	MacOS (OS X	在予測、翻訳後修飾予
		10.7 以上)	測、タンパク質機能予測
			等を行うワークフロー
3	PhylogeneticTree Active	Windows32bit	マルチプルアライメン
	Workflow	Linux 64bit	ト、系統樹作成を行うワ
		MacOS (OS X	ークフロー
		10.7 以上)	
4	Molecular Simulation	Windows32bit	分子シミュレーション
	Active Workflow	Linux 64bit	(タンパク質構造のモデ
		MacOS (OS X	リング、ドッキング計
		10.7 以上)	算、エネルギー最小化計
			算、分子力場計算
			(MM)、分子動力学計算
			(MD))を行うワークフ
			<u>п</u> —

2-1 Active ワークフロー組み合わせ型一覧

すべての Active ワークフローに共通するルールは下記のとおりです。

1. ワークフローの起動

起動後の KNIME 画面の左上にある Workflow Projects 欄で、使用する Active ワークフ ローをダブルクリックすることで、中央欄に Active ワークフローが表示され、使用可能 となります。



3-1 例.RNA_Structure_Prediction ワークフローの起動

2. ノード

Active ワークフロー画面に表示される、各フローの基点となるものを、ノードと呼びます。

FastaFileReader



3-2 例. ノード(FastaFileReader)

各ノードについての説明は、ノード選択時、KNIME 画面の右側にある「Node Description」欄に表示されます。

3. ノード進捗表示

ノードの下方にある信号機のマークは、右端の緑色表示時は実行完了を現し、黄色は実 行準備が整った待機状態を現し、赤は実行準備中を現します。 実行中のノードは、濃い青色のバーが動き実行中であることを現します。

ノード進捗表示	表示色	進捗内容		
	赤色	実行準備中		
	黄色	実行準備完了、待機中		
	緑色	実行完了		
	濃青色	実行中		
queued	queued	待機中		

3-3ノード進捗表示一覧

4. ノードの設定

ノードを選択した状態で、右クリックを押下することで、ノードの設定、またはノード の動作を指示します。

主なメニューコマンドとその内容は以下のとおりです。

2	Configure
0	Execute
Ð	Execute and Open Views
0	Cancel
×	Reset
₱	Edit Node Name and Description
0	New Workflow Annotation
Q	View: name of first view
ot	Cut
	Сору
Ē	Paste
\triangleleft	Undo
$\langle \! \! \! \! \rangle$	Redo
×	Delete

3-4 右クリックメニュー

コマンド名	内容	特記事項
Configure	ノードの各種設定を行う	別ウインドウを起動し
	際に使用します。	ます。
Execute	ノードを実行します。	ノード進捗状態表示色
		が黄色以外は、グレーで
		表示され、使用できませ
		\mathcal{N}_{\circ}
Execute and Open Views	結果画面表示を行うノー	ノード進捗状態表示色
	ドの場合、アクティブ表示	が黄色、かつ、結果画面
	となり、ノードを実行する	表示を行うノード以外
	際に使用します。	は、グレーで表示され、
		使用できません。
Cancel	実行中のノードに対し、実	ノード進捗状態表示色
	行をキャンセルする際に	が濃青色の実行中のノ
	使用します。	ード以外は、グレー表示
		され、使用できません。
Reset	設定をリセットします。	ノード進捗状態表示が
		実行完了(緑色)の場合
		に、アクティブ表示とな
		ります。
Edit Node Name and	ノード名の変更や、	別ウインドウを起動し
Description	Description の追記を行う	ます。
	場合に使用します。	
New Workflow Annotation	ワークフロー内にコメン	コメント欄を表示しま
	トを挿入します。	す。
View : [viewer name]	ノードの実行結果画面表	ノードの実行結果画面
	示を行うノードの場合に、	表示を行うノード以外
	アクティブ表示となり、結	は、グレーで表示され、
	果画面参照する際に使用	使用できません。
	します。	別ウインドウを起動し
		ます。
Cut	ノード、コメント等をカッ	特になし
	トします。	
Сору	ノード、コメント等をコピ	特になし
	ーします。	

3-5 表示メニューコマンド一覧

Paste	ノード、コメント等がコピ	特になし
	ーされている場合に、貼り	
	付けます。	
Undo	ノード、コメント等の	特になし
	Cut/Copy/Paste 等の直前	
	の作業を取り消します。	
Redo	Undoを使用し取り消した	特になし
	作業を、元に戻します。	
Delete	ノード、コメント等を削除	特になし
	します。	

5. ノード一括実行

Active ワークフローの設定が必要なノード全てに設定が終わった場合に、一括して実行 を行うことが可能です。 その場合は、起点となるノードを選択した上で、KNIME 画面の上部にあるアイコンを クリックしてください。(Execute all executable nodes (Shift+F7))



6. アラートメッセージとエラーメッセージ

ノードを実行し、アラート発生やエラー発生時には、ポップアップ画面で表示され、ま た、KNIME 画面右下の Console 欄に表示されます。 アラートメッセージとエラーメッセージは、その解決方法を示唆します。 実行に失敗した場合は、各メッセージを読むことで解決へつながります。 以下にメッセージ例と解決方法を示します。

No	メッセージ	原因と解決方法		
1	Console メッセージ:	原因:		
	WARN FastaFileReader 0:2:1	ファイルを指定していません。		
	failed to apply settings: Please specify	解決方法:		
	a filename.	ファイルを指定してください。		
2	ポップアップメッセージ:	原因:		
	SOAP execution error.	SOAP 実行時のエラーです。		
	Please resubmit again later.	SOAP 通信でエラーが発生して		

3-6 メッセージ一覧

Console メッセージ:	いる場合があります。
ERROR CentroidFold_AIST Execute	解決方法:
failed: Error occurred.	時間をおいて再実行してくださ
	۷۰ _۵

4 RNA Structure Prediciton の使用方法

RNA_Structure_Prediction は、RNAの構造予測等を行うワークフローです。



4-1 RNA_Structure_Prediction ワークフロー

4.1 実行準備

実行に必要なファイルは、FASTA フォーマットの配列ファイルです。



4.2 ノード

RNA_Structure_Prediction Active Workflow のノードは複数種類存在します。 ノードは、実行環境の設定が必要な場合があります。 ノード一覧と、ノードの実行環境設定は以下のとおりです。 使用するツリーのノードに応じて、設定を行ってください。

4.2.1ノード一覧

以下の 17 種類です。

No	名前	アイコン	設	説明
			定	
1	SetVariable	SetVariable	要	CASE Switch
		012		Variable を操作
		V		する。ダイアロ
				グ画面で 0、1、
		Node 1		2を設定すると
				$\textbf{CASE Switch}\mathcal{O}$
				第一アウトポー
				トに、1を設定す
				ると第二アウト
				ポートにフロー
				が流れる。
2	CASE Switch	CASE Switch		CASE Switch を
	Variable(Start)	Variable (Start)		行う KNIME ノ
		● case ≠ V		ード。
		Node 2		

4.2.1-1 RNA_Structure_Prediction Active Workflow のノード一覧	4.2.1-1 RNA	Structure	Prediction	Active	Workflow	<i></i> ,	ノー	ド一覧
---	-------------	-----------	------------	--------	----------	-----------	----	-----

3	FastaFileReader	FastaFileReader	要	FASTA フォー
		B - >		マットファイル
				を読み込みま
				す。
		Node 3		
4	LSDBCrossSearch	LSDBCross Search	-	生命科学データ
				ベース横断検索
				を表示します。
		Node d		
		Node 4		
5	Sparql_AIST	Sparql_AIST	要	AIST で公開さ
		T7		れている
				SPARQLエンド
		Node 5		ポイントに対し
		Node 5		て SPARQL 検
				索を実行しま
				す。
6	SequenceSelector	Sequence Selector		SPARQL 検索で
		▶ ■ ▶		取得した配列を
				選択します。
		Node 6		
		100000		
7	CASE Switch	CASE Switch		CASE Switch \mathcal{O}
	Variable (End)			エンドノード。
		Case →		
-		Node 7		
8	CentroidFold_AIST	CentroidFold_AIST	要	CentroidFold を
				実行します。
		Node 8		

9	IPknot_AIST	IPknot_AIST	要	IPknot を実行し
		▶ 🔠 ►		ます。
		Node 9		
10	RNA2DChecker_AIST	RNA2DChecker_AIST		RNA2DChecker
		<mark>▶<mark> </mark></mark>		を実行します。
		Node 10		
11	RASSIE_AIST	RASSIE_AIST	要	RASSIE を実行
				します。
		Node 11		
12	RactIP_AIST	RactIP_AIST	要	RactIP を実行し ナナ
		<mark>.</mark>		より。
		Node 12		
13	Rascal_AIST	Rascal_AIST	要	Rascal を実行し ナナ
		► <mark>≋≋</mark> ►		£9°
		Node 13	Ŧ	ハ明とらずいて
14	Sparql_AIST_Adv	Sparql_AIST_Adv	安	公開されている SPARQLエンド
		€ 3		ポイントに対し
				て SPARQL 検
		Node 14		索を実行しま
1.~				す。
10	AISI viewer	AISTViewer		「側和木を衣小」
				※ビューア表示
				はそれぞれ異な
		Node 15		ります。

16	HtmlView	HtmlView	予測結果を表示
			します。
			※ビューア表示
			はそれぞれ異な
		Node 16	ります。
17	JmolForModeller	JmolForModeller	Jmolを起動しま
		► <u>Swol</u>	す。
		Node 17	

4.2.2.1 SetVariable

CASE Switch Variable (Start)ノードの出力ポートを切り替えます。

- 1) SetVariable ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

	Dialog - 0:75 - SetVariable 🛛 🗖	x
File Options Specify Activ	Flow Variables Memory Policy an active flow variable output port (0:first; 1:second; 2:third) ve flow variable ouput port number (integer: 0 to 2):	
O	Cancel	

4.2.2.1-1 SetVariable : Configure...

0、1、2の3つの数字が CASE Switch Variable(Start)ノードの1~3番目の出力ポートにそれぞれ対応しております。FastaFileReader を使う場合は0を、Sparql_AIST を使う場合は1を指定します。

指定後、[Apply]ボタン、[OK] ボタンを押下します。

実行に使用する RNAの FASTA ファイルを指定します。

- 1) FastaFileReader ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🛓 Dialog - 0:1 - FastaFileReader 📃	
File	
Options Memory Policy	
Selected File:	
Browse	
OK Everyte Apply Caped	
Cancel Appiy	

4.2.2.2-1 FastaFileReader : Configure...

• Options $\not{\mathcal{P}} \not{\mathcal{T}} \rightarrow$ Fasta File \rightarrow SelectedFile:

図の赤枠内に、実行に使用する FASTA フォーマットファイルを入力します。 [Browse...] ボタンを押下し、ファイル選択画面を開き、実行に使用する FASTA フォーマットファイルを選択することも可能です。 指定後、[OK] ボタンを押下します。 AIST で公開されている SPARQL エンドポイントに対して SPARQL 検索を行います。

- 1) Sparql_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

📥 Dialog - 0:60 - Sparql_AIST 🚽 🗖 💌
File
Options Advanced Flow Variables Memory Policy
Output Directory
Selected Directory:
C.¥ Browse
SPARQL endpoints
SEVENS endpoint: http://terdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/
A SPN 0.4 and no int http://www.madala.in/ananyti-anan
UNIPROT endpoint: http://terdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/
PDB endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql
KEGG - pathway endpoint: http://kegg.bio2rdf.org/sparql
SPARQL search conditions
Taxon (not available for UNIPROT)
Keyword
Minimum sequence length 10
Maximum sequence length 60
Paralutian (for PDP) 20
Nesolution (for PDB) 2.6
Pathway (for KEGG-pathway)
Output format
Output format (FASTA for SequenceSelector nod
OK Apply Cancel 🕐

4.2.2.3-1 Sparql_AIST : Configure...

• Options $\mathscr{P} \overrightarrow{\mathcal{I}} \to \text{Output} \to \text{Selected Directory:}$

Sparql_AIST の実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

・Options タブ \rightarrow SPARQL endpoints:

SEVENS、fRNAdb、UNIPROT、PDB、KEGG-pathwayの5つのエンド ポイントをチェックボックスで選択します。本ワークフローではfRNAdb をチ ェックします。

タクソン(Taxon)、キーワード(Keyword)、最小配列長(Minimum)、最大配 列長(Maximum)、解像度(Resolution)、パスウェイ(Pathway)を指定します。 本ワークフローではキーワード、最小配列長、最大配列長が有効です。

• Options $\not{P} \not{ ightarrow} \rightarrow$ Output format:

FASTA または Tab-delimited のラジオボタンを指定します。

指定後、[OK] ボタンを押下します。

出力ディレクトリと CentroidFold の実行パラメータ設定を行います。

- 1) CentroidFold_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🝐 Dialog - 0:33 - CentroidFold_AIST (Node 15) 🛛 🗖 💌
File
Parameters Flow Variables Memory Policy
Format Fasta O ClustalW
Output
Selected Directory.
C:¥ V Browse
Weight of base pairs
Gamma : 2^2 🗸
Advanced Other options
OK Apply Cancel ?

4.2.2.4-1 CentroidFold_AIST : Configure...

• Options $\not{\sigma} \not{\neg} \rightarrow$ Input type \rightarrow Format

このノードの入力に使用するファイルフォーマットを、ラジオボタンで選択します。

CentroidFold_AIST の実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

- Options タブ → Weight of base pairs → Gamma: CentroidFold_AIST の実行パラメータを変更します。 プルダウンメニューより、パラメータを変更してください。 デフォルトでは、「2²」が設定されています。
- Options タブ → Advanced → Other options
 CentroidFold_AIST の gamma 以外の実行パラメータを設定します。
 デフォルトでは、何も設定されていません。

指定後、[OK] ボタンを押下します。

4.2.2.5 IPknot_AIST

出力ディレクトリの設定を行います。

- 1) IPknot_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面を使用します。

🔥 Dialog - 0:12 - IPknot_AIST (Node 26) 🛛 🗖 💌	
File	
Options Flow Variables Memory Policy	i
Selected Directory.	
Advanced Options	
OK Apply Cancel 🕐	

4.2.2.5-1 IPknot_AIST : Configure...

Options タブ → Select Output Directory → Selected Directory:
 図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。 指定後、[OK] ボタンを押下します。

4.2.2.6 RactIP_AIST

出力ディレクトリの設定を行います。

- 1) RactIP_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面を使用します。

🔥 Dialog - 0:20 - RactIP_AIST (Node 37) 🛛 🗕 💌
File
Options Flow Variables Memory Policy
C.¥ V Browse
Advanced Options
OK Appiy Cancel (7

4.2.2.6-1 RactIP_AIST : Configure...

• Options $\not{P} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。 指定後、[OK] ボタンを押下します。

- 1) Rascal_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面を使用します。

△ Dialog - 0:44 - Rascal_AIST (Node 43) - □	x
File	
Options Flow Variables Memory Policy	_
Selected Directory.	
C.¥ Browse	
Advanced Options	
OK Apply Cancel 🕡	

4.2.2.7-1 Rascal_AIST : Configure...

• Options $\not{\beta} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow \text{Advanced}$:

Rascal に対するオプションを指定します。使用する場合はチェックボック スをチェックします。

指定後、[OK] ボタンを押下します。

出力ディレクトリの設定を行います。

- 1) RASSIE_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面を使用します。

🛆 Dialog - 0:34 - RASSIE_AIST (Node 18) 🛛 🗕 🗖 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory
Selected Directory.
C.¥ V Browse
Advanced Options
-q 100 -ins 100 -cist -outcist 10 -ins_chain
OK Apply Cancel

4.2.2.8-1 RASSIE_AIST : Configure...

• Options $\mathscr{P} \overrightarrow{\mathcal{I}} \to$ Select Output Directory \to Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。 指定後、[OK] ボタンを押下します。

4.3 実行と結果参照

4.3.1 IPknot_AIST

1) <u>HtmlView</u>

IPknot_AIST の実行結果は、HtmlView を実行することで、参照することができます。

IPknot の実行結果は、テキスト表示されます。

A Html View - 0:13 - HtmlView	×
Eile	
URL: file:C:/work/KNIME/prg/testData/outdir/2011-11-01/10-43-22-0.023648505524485608/ipknot.out	
>gi 334185880 ref NM_001203122.1 Arabidopsis thaliana RIO kinase 2 (AI3G51270) mRNA, complet	se 🔺
ds GEGTTTAAAAGATTTTCGAGTTCACAAAAAGATTTCCCTGCCTCTACCGCCGCGCTCTCTTCTCTCAGCAAAGGTTGAATCATCAGAAGAAG GEGTTTTACACTGCGGCGTAAAGGATGAAAGCTTGACGTGAAGGTTGAAGATATTTATCCAAAGATGATTTTCGAGTTCCACTGCTGCTGCAG GGGAATGCGAAACCATGAGATTGTTCCTTCTGAGCTTGGAGCGCATTGCTTGTCTAAAAACATGGAGGCACCTACAAGGTCCGAAGAACT TCAAGTATAACTTTGCCACCACGATCCTCTAAATTGAGGATTGGATTCGAGCTACGAGCATCGGGCGCCACGAAGGTGGAACAT TCAAGTATAACATAGCTTGGCGCCGCCGGCGCTGCGAATGGGTTGGATGCAGCTACGAGCACCACGAGGACTGCTGAAGAACT AATGGAGGTACATTAACCGGGCGGCGCCGCGATGGTGGTGGGTAAAGGCACGACCACTACGAGGCACCCACGAAGAGTGGAACATTTCT AATGAAGCTAGCACCCCCCAGATCCTTTAGGCCTGCAAAACTAAAGGCTTGGAGCACCTGCGGCTGCCAAAGACATGGACTGCCGACGACGACGCACGC	AAA GAT IGC GCC ACC CAT ICT ACC SAA IGG GGA CAA
GAAACATACAAGGACAAAGGACGAAAGGACCAAAACTCCAAAACTCCAAGACCACGCAACACCACGCACCACGACGACGACGACG	IGG
GACAGAGAAATTAAAATTATAACGGATATGTTTCTTAATAAATCAAATCCAAATG	

4.3.1-1 HtmlView-IPknot Results

1) <u>HtmlView</u>

RactIP_AIST の実行結果は、HtmlView を実行することで、参照することができます。

RactIP の実行結果は、テキスト表示されます。

🛓 Html View - 0:21 - HtmlView	3
Eile	
URL: file:C:/work/KNIME/prg/testData/outdir/2011-11-01/11-14-33-0.9340077957916748/ractip.out	
<pre>* 0: objval = 0.000000000e+00 infeas = 0.000000000e+00 (0) * 200: objval = 7.444637042e+01 infeas = 0.000000000e+00 (0) * 378: objval = 8.946468091e+01 infeas = 0.000000000e+00 (0) OPTIMAL SOLUTION FOUND</pre>	•
<pre>Integer optimization begins + 378: mip = not found yet <= +inf (1; 0) + 378: >>>> 8.946468091e+01 <= 8.946468091e+01 0.0% (1; 0) + 378: mip = 8.946468091e+01 <= tree is empty 0.0% (0; 1) INTEGER OPTIMAL SOLUTION FOUND >>>>> 2.0123241582800.wsflwW 00123122 14 Arabidencia theliane RIO kinage 2 (AT3651270) mRNA complete </pre>	
<pre>>gil334185880/ref/NM_001203122.1/ Arabidopsis thaliana RIO kinase 2 (AT3G51270) mRNA, complete cds GTGTCTAAAGGATTTTCGAGTTCACAAAAAGAATTTCCTCGCTCTACCGCCGCCGTCTCTCTC</pre>	m
GACAGAGAAAATTAAAATGATATGTTTCTTAATAAATCAAATCCCAAATG ((((((
>gi 28416578 gb BT004574.1 Arabidopsis thaliana At3g03070 gene, complete cds ATGGCGTCGAATCTCCTGAAAGCCCTAATCCGATCTCAGATCTTCCAGCAGGAGGAATTTCAGTGTGGCGACCACACAGCTTGGCATTCC AACAGACGATCTAGTCGGCAATCACCCCCCAAATGGATGCAGGATAGAAGCAAGAAATCACCTATGGAACTGATTAGTGAGGTTCCACCTATCA	-

4.3.2-1 HtmlView-RactIP Results

4.3.3 Rascal_AIST

1) <u>JmolForModeller</u>

Rascal_AIST の実行結果は、JmolForModeller を実行することで、立体構造をモ デリングした結果を参照することができます。

Jmol の詳細については、下記のサイトを参照してください。

Jmol : <u>http://jmol.sourceforge.net/</u>



4.3.3-1 JmolForModeller –Results

Results は、Jmol を利用して、モデリング結果の立体構造を表示します。
Jmol で参照したい結果をラジオボタンで選択し、下部の[Execute Jmol] ボタンを押下します。Jmol が起動し、選択したモデリング結果の立体構造が表示されます。
右下の Jmol 文字列をクリックすることで、Jmol のメニューが表示されます。
Jmol の操作方法は下記を参照してください。
Jmol : <u>http://jmol.sourceforge.net/</u>

4.3.4 RASSIE_AIST

1) <u>JmolForModeller</u>

RASSIE_AIST の実行結果は、JmolForModeller を実行することで、立体構造をモ デリングした結果を参照することができます。

Jmolの詳細については、下記のサイトを参照してください。

Jmol : <u>http://jmol.sourceforge.net/</u>



4.3.4-1 JmolForModeller –Results

Results は、Jmol を利用して、モデリング結果の立体構造を表示します。
Jmol で参照したい結果をラジオボタンで選択し、下部の[Execute Jmol] ボタンを押下します。Jmol が起動し、選択したモデリング結果の立体構造が表示されます。
右下の Jmol 文字列をクリックすることで、Jmol のメニューが表示されます。
Jmol の操作方法は下記を参照してください。
Jmol : http://jmol.sourceforge.net/

4.3.5 CentroidFold_AIST

1) <u>AISTViewer</u>

AISTViewer で CentroidFold_AIST の実行結果を参照することができます。 予測された 2 次構造をクリックすることで、拡大図が別画面で表示されます。



4.3.5-1 AISTViewer - CentroidFold Results

Protein Structure Prediction Active ワークフローは、モデリングやディスオーダー予測等 を行うワークフローです。

モデリングは、SOAP 通信を用いてタンパク質の立体構造モデリングを行います。

まず、ユーザが用意した問い合わせ配列に対し、既存の立体構造のアミノ酸配列(PDB (http://www.rcsb.org/)エントリファイルの ATOM 行から生成したアミノ酸配列) との類似領 域を BLAST、PSI-BLAST を用いて選定します。次に、期待値、アミノ酸一致度、ヒット領 域の割合を基準として、各問い合わせ配列のヒット領域に対して最適と考えられる立体構造を 選定し、高い類似性を示す領域には PDB j Mine Web

(http://service.pdbj.org/mine/index j.html) に登録された立体構造情報を、それ以外の領域に ついては MODELLER (http://salilab.org/modeller/)を用いたタンパク質立体構造の モデリ ングを行います。モデリングされた立体構造は、Jmol (http://jmol.sourceforge.net/) によって 閲覧することができます。

なお、MODELLER の実行にはライセンスキーが必要となりますので、 http://salilab.org/modeller/registration.html より事前に取得してください。



また、PSIPREDを用いたタンパク質の2次構造予測の実行、Poodle、WolfPsort等タンパ ク質の配列解析ソフトウェアの実行を一度に行うワークフローです。

5-1 Protein_Structure_Prediction

実行に必要なファイルは、FASTA フォーマットのアミノ酸配列ファイルです。

※ FASTA フォーマットをつなげた、Multi-Fasta フォーマットファイルは 利用できません。



5.2 ノード

Protein Structure Prediction Active Workflow のノードは複数種類存在します。

ノードは、実行環境の設定が必要な場合があります。 ノード一覧と、ノードの実行環境設定は以下のとおりです。 使用するツリーのノードに応じて、設定を行ってください。

5.2.1ノード一覧

以下の 34 種類です。

5.2.1-1 Protein_Structure_Prediction Active Workflow のノード一覧

No	名前	アイコン	設	説明
			定	
1	SetVariable	SetVariable	要	CASE Switch
				Variable を操作
		0 1		する。ダイアロ
			グ画面で 0、1、	
		Node 1		2を設定すると
				$\textbf{CASE Switch}\mathcal{O}$
				第一アウトポー
				トに、1を設定す
				ると第二アウト
				ポートにフロー
				が流れる。

2	CASE Switch			CASE Switch を
	Variable(Start)	CASE Switch		行為 KNIME /
	Variable(Start)	variable (start)		1J 9 KINIME /
		Node 2		
3	FastaFileReader	FastaFileReader	要	FASTA フォー
		75		マットファイル
				を読み込みま
		0 0		す。
		Node 3		
4	LSDBCrossSearch	L SDBCross Search	-	生命科学データ
				ベース横断検索
				を表示します。
		Node 4		
5	Sparql_AIST		要	AIST で公開さ
		sparqkis1		れている
		59 F		SPARQLエンド
				ポイントに対し
		Node 5		て SPARQL 検
				索を実行しま
				す
6	SequenceSelector	C		、。 SPARQL 検索で
	sequencesciector	Sequence Selector		取得した配列を
		▶ 🔠 ▶		深切します
				歴いしより。
		Node 6		
7	CACE Contract	CARE Suddeb		CACE Contracts of
1		Data (End)		
	Variable (End)	Case		エンドノード。
		A ≠ ►		
		Node 7		

8	BlastForModeller_AIST	BlastForModeller_AIST	要	BLAST もしくは
				PSI-BLAST を実行
				します。
		Node 8		
9	HitRegionSelector_AIST	HitRegion Selector_AIST	要	BLAST もしくは
		—		PSI-BLAST の実行
		* *		結果より、立体構造
				ヒット領域を抽出
		Node 9		します。
10	$TemplateSelector_AIST$	Template Selector_AIST	要	立体構造モデリン
				グのテンプレート
		× 49		を選択します。
		Node 10		
11	Modeller_AIST	Modeller_AIST	要	MODELLER を実
				行します。
		► <mark>18</mark> ►		
		Node 11		
12	CPHmodels_DTU	CPHmodels_DTU	要	ホモロジーモデリ
				ングを実行します。
		Node 12		
13	PsiPred_AIST	PsiPred_AIST	要	PsiPred を実行しま
		▶ <mark>■</mark> ●		す。
		Node 13		
14	Poodle_AIST	Poodle_AIST	要	POODLE を実行し
		► <mark>P</mark> ►		ます。
		Node 14		

15	TmHmm_DTU	TmHmm_DTU	要	TMHMM を実行し
		▶ fff ►		ます。
		Node 15		
16	SignalP DTU	SignalD, DTU	要	SignalP を実行しま
10		SignalP_DT0		す。
		► <mark><</mark> ►		
		Node 16		
17	ChloroP_DTU	ChloroP_DTU	要	ChloroP を実行し
		► <mark>`</mark> ≯ ►		ます。
		Node 17		
18	LipoP_DTU	LipoP_DTU	要	LipoP を実行しま
		▶ <mark>⊯</mark> ▶		す。
		Node 18		
19	NetCTL_DTU	NetCTL_DTU	要	NetCTL を実行し
		► <mark> ኳ</mark> ►		ます。
		Node 19		
20	NetChop_DTU	NetChop_DTU	要	NetChop を実行し
		► <mark> </mark>		よう。
		Node 20		
21	NetNES_DTU	NetNES_DTU	要	NetNES を実行し
		- ► <mark>≩</mark> ►		ます。
		Node 21		
23 NetPhos_DTU NetPhos_DTU 要 NetPhos を実行します。 23 NetPhos_DTU NetPhos_DTU 要 NetPhos を実行します。 24 NetPicoRNA_DTU NetPicoRNA_DTU 要 NetPicoRNA を実行します。				

23 NetPhos_DTU NetPhos_DTU 要 NetPhos を実行します。 23 NetPhos_DTU NetPhos_DTU 要 NetPhos を実行します。 24 NetPicoRNA_DTU NetPicoRNA_DTU 要 NetPicoRNA を実行します。				
Node 22 NetPhos_DTU 23 NetPhos_DTU NetPhos_DTU NetPhos_DTU Node 23 24 NetPicoRNA_DTU NetPicoRNA_DTU NetPicoRNA_DTU				
23 NetPhos_DTU NetPhos_DTU 要 NetPhos を実行します。 ※ Node 23 Node 23 P NetPicoRNA_DTU P 24 NetPicoRNA_DTU NetPicoRNA_DTU 要 NetPicoRNA を実行します。				
24 NetPicoRNA_DTU 要 NetPicoRNA_DTU ※ ※ 行します。				
24 NetPicoRNA_DTU 要 NetPicoRNA を実行します。				
Node 23 Node 23 24 NetPicoRNA_DTU PetPicoRNA_DTU ※ ・				
24 NetPicoRNA_DTU 要 NetPicoRNA_DTU ● 菜 ● 「ひします。				
25 DictyOGlyc_DTU DictyOGlyc_DTU 要 DictyOGlyc を実				
26 WollFSort_AIST WolfPsort_AIST 安 WollF FSORT を 行します。				
Node 26				
27 TargetP AIST 要 TargetP を実行し				
TargetP_DTU Imagen excite tranget tranget tranget tranget tranget tranget tranget tranget				
Node 27				
28 SecretomeP_DTU 要 SecretomePを実				
- SecretomeP_DTU Uます。				
Node 28				

29	DisoPred_AIST	Disopred_AIST	要	DISOPRED を実行
		< <mark>< ≤2</mark> <		します。
		Node 29		
30	Memsat_AIST	Memsat_AIST	要	MEMSAT を実行し
		► <mark>Ⅲ</mark> ►		ます。
		Node 30		
31	Sparql_AIST_Adv	Sparql_AIST_Adv	要	公開されている
		R1		SPARQL エンドポ
		10		イントに対して
		Nede 44		SPARQL 検索を実
		Node 14		行します。
32	AISTViewer	AISTViewer		予測結果を表示し
				ます。
				※ビューア表示は
		Node 15		それぞれ異なりま
		NOUE 15		す。
33	HtmlView	HtmlView		予測結果を表示し
				ます。
				※ビューア表示は
		Node 16		それぞれ異なりま
		Node To		す。
34	JmolForModeller	JmolForModeller		Jmol を起動しま
		► Steel		す。
		Node 17		

5.2.2.1 SetVariable

CASE Switch Variable (Start)ノードの出力ポートを切り替えます。

- 1) SetVariable ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

	Dialog - 0:75 - SetVariable 🛛 🗖	x
File Option Spec Ad	ns Flow Variables Memory Policy ify an active flow variable output port (0:first; 1:second; 2:third) ctive flow variable ouput port number (integer: 0 to 2): 0 =	
	OK Apply Cancel 🕜	

5.2.2.1-1 SetVariable : Configure...

0、1、2の3つの数字が CASE Switch Variable(Start)ノードの1~3番目の出力ポートにそれぞれ対応しております。FastaFileReader を使う場合は0を、Sparql_AIST を使う場合は1を指定します。

指定後、[Apply]ボタン、[OK] ボタンを押下します。

実行に使用するタンパク質の FASTA ファイルを指定します。

- 1) FastaFileReader ノードを右クリックし、"Configure..." を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🛓 Dialog - 0:1 - FastaFileRead	er	
File		
Uptions Memory Policy		
Selected File:		
		✓ Browse
OK - Execute	Apply	Cancel
	1 1.1	

5.2.2.2-1 FastaFileReader : Configure...

• Options $\not{\mathcal{P}} \not{\mathcal{T}} \rightarrow$ Fasta File \rightarrow SelectedFile:

図の赤枠内に、実行に使用する FASTA フォーマットファイルを入力します。 [Browse...] ボタンを押下し、ファイル選択画面を開き、実行に使用する FASTA フォーマットファイルを選択することも可能です。 指定後、[OK] ボタンを押下します。 AIST で公開されている SPARQL エンドポイントに対して SPARQL 検索を行います。

- 1) Sparql_AIST ノードを右クリックし、"Configure..." を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

	Dialog - 2:60 - Sparql_AIST -	
e		
Options	Advanced Flow Variables Memory Policy	
Output Directory		
	Selected Directory	
C:¥ v Browse		
SPARQ	L endpoints	
•	SEVENS endpoint: http://terdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s	
] fRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s	
	UNIPROT endpoint http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/u	
	PDB endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql	
К	EGG - pathway endpoint: http://keggbio2rdf.org/sparql	
SPARQL search conditions		
	Taxon (not available for UNIPROT)	
	Keyword	
	Minimum sequence length 300	
	Maximum sequence length 600	
	Resolution (for PDB) 2.8	
	Pathway (for KEGG-pathway)	
Output	format	
	Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod FASTA O Tab-delimited	
	OK Apply Cancel (?)	

5.2.2.3-1 Sparql_AIST : Configure...

• Options $\not{\beta} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow \text{Output} \rightarrow \text{Selected Directory:}$

Sparql_AIST の実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

・Options タブ \rightarrow SPARQL endpoints:

SEVENS、fRNAdb、UNIPROT、PDB、KEGG-pathwayの5つのエンド ポイントをチェックボックスで選択します。本ワークフローではSEVENS、 UNIPROT、PDB が有効となります。

• Options $\not{PT} \rightarrow \mathbf{SPARQL}$ search conditions:

タクソン(Taxon)、キーワード(Keyword)、最小配列長(Minimum)、最大配 列長(Maximum)、解像度(Resolution)、パスウェイ(Pathway)を指定します。 本ワークフローではタクソン、キーワード、最小配列長、最大配列長、解像度 が有効です。

• Options $\not{\beta} \not{\neg} \rightarrow$ Output format:

FASTA または Tab-delimited のラジオボタンを指定します。

プログラムの選択と出力ディレクトリの設定を行います。

- 1) BlastForModeller_AIST ノードを右クリックし、"Configure..." を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔥 Dialog - 2:2 - BlastForModeller_AIST 🚽 🗖 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy
BLAST version 2.2.18 Execution Type BLAST O PSI-BLAST E-Value 1.0E-5 Interation 3
Select Output Directory Selected Directory: C:¥
OK Apply Cancel 🕜

5.2.2.4-1 BlastForModeller_AIST : Configure...

・Options タブ \rightarrow BLAST version 2.2.18 \rightarrow Execution Type

図の赤枠に、Execution Type をラジオボタンで選択します。

Execution Type は、既存の立体構造のアミノ酸配列との相同性検索を行う ためのプログラムを、BLAST もしくは PSI-BLAST から選択します。

• Options $\not{\mathcal{P}} \not{\mathcal{T}} \rightarrow \text{BLAST}$ version 2.2.18 \rightarrow E-Value

続いて、図の赤枠に、E-value を入力します。

この E-Value は、BLAST もしくは PSI-BLAST 検索において適用される期 待値の閾値となります。

```
デフォルトでは、[1.0E-5] が設定されています。
```

Options タブ → BLAST version 2.2.18 → Iteration
 続いて、図の赤枠に、Iteration を入力します。
 この Iteration は、PSI-BLAST の最大繰り返し検索回数です。なお、
 Execution Type にて BLAST 指定時は関与しません。
 デフォルトでは、[3] が設定されています。

Options タブ → Select Output Directory → Selected Directory:
 図の青枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

指定後、[OK] ボタンを押下します。

5.2.2.5 HitRegionSelector_AIST

BLAST もしくは PSI-BLAST の結果ヒットした配列部の立体構造予測に使用する 条件を設定します。

- HitRegionSelector_AIST ノードを右クリックし、"Configure..." を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔺 Dialog - 2:3 - HitRegionSelector_AIST 🛛 🗖 💌		
File		
Options Flow Variables Memory Policy		
Conditions to select (PSI-)BLAST hit regions (Integer is only permitt		
Coverage (%) 60		
Identity (%) 30		
Minimum Length 30		
OK Apply Cancel 🕜		

5.2.2.5-1 HitRegionSelector_AIST : Configure...

• Options $\not P \not T \rightarrow$ Condition to select (PSI-)BLAST hit regions (Integer is only permitted to input) \rightarrow Coverage(%)

Coverage を設定します。

Coverage は、ヒットした立体構造の全長に対するヒット領域の割合であり、 ヒットの基準閾値とするパーセンテージの値です。

デフォルトでは、[60]が設定されています。

• Options $\not P \not T \rightarrow$ Condition to select (PSI-)BLAST hit regions (Integer is only permitted to input) \rightarrow Identity(%)

Identity を設定します。

Identity は、ヒット領域間のアミノ酸の一致度であり、閾値とするパーセン テージの値です。

デフォルトでは、[30]が設定されています。

```
• Options \not P \not T \rightarrow Condition to select (PSI-)BLAST hit regions (Integer is only permitted to input) \rightarrow Minimum Length
```

Minimum Length を設定します。

Minimum Length は、ヒット領域の最小のアミノ酸長の値であり、閾値として使用します。

デフォルトでは、[30]が設定されています。

数値の入力制限は、以下のとおりです。

ヒット領域に対する立体構造モデリングのためのテンプレートを設定します。

- 1) TemplateSelector_AIST ノードを右クリックし、"Configure..." を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🝐 Dialog - 2:4 - TemplateSelector_AIST 🛛 🗖 🔍
File
Options Flow Variables Memory Policy
Conditions to determine for modelling or for diplaying PDBj Mine web. Coverage (%) 90
Identity (%) 90
OK Apply Cancel 🕐

5.2.2.6-1 TemplateSelector_AIST : Configure...

• Options $\not \forall \vec{\neg} \rightarrow$ Condition to determine for modelling or for displaying PDBj Mine Web. \rightarrow Coverage(%), Identity(%)

Coverate、Identity の値を設定します。

Coverage は、ヒットした立体構造の全長に対するヒット領域の割合です。 Identity は、ヒット領域間のアミノ酸の一致度です。

この2つの値は、ヒットした立体構造と同様の構造を持つことの判定に用い ます。指定した値を超えるヒット領域については、そのヒット領域はヒットし た立体構造と同様であるとみなされ、PDBj Mine による立体構造情報表示の 処理に入ります。指定した値を満たさないヒット領域については、モデリング のテンプレートとする立体構造を選択してモデリングの処理に入ります。

デフォルト値は、Coverage 90%、Identity 90% です。 整数値のみ入力が可能です。

MODELLER で生成するモデル数の最大値を設定と、MODELLER のライセンス キーの入力を行います。

- 1) Modeller_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔥 Dialog - 2:5 - Modeller_AIST 🗕 🗖 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy Condition for Modeller Execution Number of Models for Modelling 5
Modeller License License Key for Modeller (required)
OK Apply Cancel 🕡

5.2.2.7-1 Modeller_AIST : Configure...

・Options タブ \rightarrow Condition for Modeller Execution \rightarrow Number of Models for Modelling

Number of Models for Modelling を入力します。

Number of Models for Modelling は、**MODELLER** で生成するモデル数の 最大値として使用します。

入力範囲は、 1~10 であり、整数値のみの入力が可能です。

• Options $\not \forall \vec{\neg} \rightarrow$ Modeller License \rightarrow License Key for Modeller (required)

License Key for Modeller (required)では、MODELLER 実行のためのライ センスキーを入力します。

- 1) CPHmodels_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔺 Dialog - 2:51 - CPHmodels_DTU (Node 11) 🛛 🗖 💌
File
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory
C.¥ Browse
OK Apply Cancel 🕡

5.2.2.8-1 CPHmodels_DTU : Configure...

• Options $\not P \not T \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) PsiPred_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🙏 🛛 Dialog - 2:11 - PsiPred_AIST (Node 14) 🚽 🗖 💌
File
Options Flow Variables Memory Policy
Select Output Directory Selected Directory
C¥ V Browse
OK Apply Cancel 🕐

5.2.2.9-1 PsiPred_AIST : Configure...

• Options $\not{P} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

POODLE のプログラム選択と出力ディレクトリの設定を行います。

- 1) Poodle_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔥 Dialog - 2:13 - Poodle_AIST (Node 16) 🛛 🗕 🗖 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy
POODLE Type POODLE-S O POODLE-L
Output Selected Directory
C.¥
OK Apply Cancel

5.2.2.10-1 Poodle_AIST : Configure...

・Options タブ \rightarrow Type \rightarrow POODLE Type

実行する POODLE プログラムをラジオボタンで選択します。 POODLE-S は、短いディスオーダー領域を予測します。 POODLE-L は、40 残基程度以上の長いディスオーダー領域を予測します。

• Options $\not{P} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow \text{Output} \rightarrow \text{Selected Directory}$:

Output 欄に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。 [Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用 するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) TmHmm_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔥 🛛 Dialog - 2:21 - TmHmm_DTU (Node 18) 🚽 🗖 💌
File Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory
Selected Directory: C¥
OK Apply Cancel 🕡

5.2.2.11-1 TmHmm_DTU : Configure...

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{T}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

出力ディレクトリと"Organism type"の設定を行います。

- 1) SignalP_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔥 Dialog - 2:19 - SignalP_DTU (Node 20) 🛛 🗕 🔼
File
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory
Selected Directory.
C.¥
Organism type Organism type Eukaryotes v
OK Apply Cancel

5.2.2.12-1 SignalP_DTU : Configure...

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{T}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

・Options タブ \rightarrow Organism Type:

Eukaryotes、Gram-negative bacteria、Gram-positeve bacteria のどれか 一つを選択します。

- 1) ChloroP_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🛆 🛛 Dialog - 2:23 - ChloroP_DTU (Node 22) 🚽 🗖 📕	x
File Options Flow Variables Memory Policy	
Select Output Directory	
C.¥ Browse	
OK Apply Cancel 🔇	

5.2.2.13-1 ChloroP_DTU : Configure...

• Options $\not{P} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) LipoP_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

▲ Dialog - 2:25 - LipoP_DTU (Node 24) — □ ×
File Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory C.¥ Browse
OK Apply Cancel 🝞

5.2.2.14-1 LipoP_DTU : Configure...

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to$ Select Output Directory \to Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

出力ディレクトリと"Supertype"の設定を行います。

- 1) NetCTL_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔥 Dialog - 2:27 - NetCTL_DTU (Node 26) 🛛 🗖 🗖	×
File	
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory	7
Selected Directory	
C.¥ V Browse	
Select Supertype	
Supertype Al supertype V	
	-
OK Apply Cancel ()	

5.2.2.15-1 NetCTL_DTU : Configure...

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{T}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow$ Select Supertype:

A1~A3、A24、A26、B7、B8、B27、B39、B44、B58、B62 から一つ選択 します。

出力ディレクトリと"Prediction method"の設定を行います。

- 1) NetChop_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

▲ Dialog - 2:29 - NetChop_DTU (Node 28) - □ ×
File
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory
Selected Directory.
C¥
Select Prediction method Prediction method C term 3 v
OK Apply Cancel 🕐

5.2.2.16-1 NetChop_DTU : Configure...

・**Options** $\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\mathcal{I}}$ → **Select Output Directory** → **Selected Directory**: 図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to$ Select Prediction method:

C term 3.0、20S 3.0 から一つ選択します。

- 1) NetNES_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔥 Dialog - 2:31 - NetNES_DTU (Node 32) 🛛 🗕 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy
Select Output Directory
Selected Directory
C:¥ ✓ Browse
OK Apply Cancel 🕜

5.2.2.17-1 NetNES_DTU : Configure...

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{T}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) NetPhosK_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔥 Dialog - 2:33 - NetPhosK_DTU (Node 34) 🛛 🗕 🔼
File
Options Flow Variables Memory Policy
Select Output Directory
Selected Directory
C.¥ V Browse
OK Apply Cancel (?)

5.2.2.18-1 NetPhosK_DTU : Configure...

• Options $\not{P} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) NetPhos_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔥 Dialog - 2:35 - NetPhos_DTU (Node 36) 🛛 🗕 💌
File
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory
Selected Directory
C.¥
OK Apply Cancel ၇

5.2.2.19-1 NetPhos_DTU : Configure...

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to$ Select Output Directory \to Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) NetPicoRNA_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

△ Dialog - 2:37 - NetPicoRNA_DTU (Node 38) - □ ×
File Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory
Selected Directory: C.¥
OK Apply Cancel 🕐

5.2.2.20-1 NetPicoRNA_DTU : Configure...

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to$ Select Output Directory \to Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) DictyOGlyc_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔥 Dialog - 2:43 - DictyOGlyc_DTU (Node 44) 🛛 🗖 💌
File
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory
Selected Directory
C.¥ V Browse
OK Apply Cancel 🕖

5.2.2.21-1 DictyOGlyc_DTU : Configure...

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to$ Select Output Directory \to Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

出力ディレクトリと生物界の設定を行います。

- 1) WolfPsort_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🛆 Dialog - 2:15 - WolfPsort_AIST (Node 46) 🛛 🗖 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy
Type
Output -
Selected Directory
C:¥ v Browse
OK Apply Cancel

5.2.2.22-1 WolfPsort_AIST : Configure...

• Options $\not{\sigma} \not{\tau} \rightarrow \text{Kingdom} \rightarrow \text{Type}$

図の赤枠の箇所に、ラジオボタンで animal, plant, fungi のどれか一つを選 択します。

• Options $\not{\mathcal{P}} \not{\mathcal{I}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の青枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

出力ディレクトリと"Organism type"の設定を行います。

- 1) TargetP_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔥 Dialog - 2:17 - TargetP_DTU (Node 48) 🛛 🗕 🗖 💌				
File				
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory				
Selected Directory.				
C:¥ Browse				
Organism type				
Organism type Non-Pla 🗸				
OK Apply Cancel 🕐				

5.2.2.23-1 TargetP_DTU : Configure...

• Options $\mathscr{P} \overrightarrow{\mathcal{I}} \to$ Select Output Directory \to Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

・Options タブ \rightarrow Organism type:

Non-Plant、Plant のどちらかを選択します。

出力ディレクトリと"Organism type"の設定を行います。

- 1) SecretomeP_DTU ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🛆 Dialog - 2:45 - SecretomeP_DTU (Node 50) 🛛 🗕 💌				
File				
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory				
Selected Directory				
C.¥				
⊂Organism type Organism type Gram-negative bacter ∨				
OK Apply Cancel (?)				

5.2.2.24-1 SecretomeP_DTU : Configure...

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{T}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

• Options $\not{\sigma} \not{\tau} \rightarrow$ Organism type:

Gram-negative bacteria、Gram-positive bacteria、Mammalian のどれか 一つを選択します。

- 1) DisoPred_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔥 Dialog - 2:54 - Disopred_AIST 🛛 🗕 💌
File
Options Flow Variables Memory Policy
Selected Directory.
C:¥ ✓ Browse
OK Apply Cancel ၇

5.2.2.25-1 DisoPred_AIST : Configure...

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{T}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) Memsat_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

	Dialog - 2:56 - Memsat_AIST 🛛 🗖 🗖	×
File		
Options	Flow Variables Memory Policy Output Directory	_
Selec	sted Directory.	
C:¥	V Browse	
	OK Apply Cancel	

5.2.2.26-1 Memsat_AIST : Configure...

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{T}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

5.3 実行と結果参照

5.3.1 BlastForModeller_AIST \rightarrow HtmlView

BlastForModeller_AIST の実行結果は、HtmlView ノード上で[Sequence Similarity Report]として表示します。



5.3.1-1 BlastForModeller_AIST の実行結果表示(HtmlView)

5.3.2 HitRegionSelector_AIST \rightarrow HtmlView

HitRegionSelector_AIST の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

🛓 Html View - 0:9 - HtmlView	_
Eile	
URL: file:C:/work/KNIME/prg/testData/outdir/2011-10-27/17-32-361830042473/doms	plit.log
PDB Query Hit Length(aa) Query Coverage(%) Query Hit Range(aa) a) PDB Coverage(%) PDB Hit Range(aa) Identity(%) E-value 1z05A 248 354.29 497-744 246 62.12 135-380 26.77 7.10235e-19	PDB Hit Length(a 🔺

5.3.2-1 HitRegionSelector_AIST の実行結果表示(HtmlView)

5.3.3 TemplateSelector_AIST → PDBjMineWeb

TemplateSelector_AISTの実行結果は、PDBjMineWebノードを実行することで、参照することができます。

この参照画面では、ヒット領域ごとに既知の立体構造情報 (PDB コード+チェイン識別 子)のラジオボタン付きリストが表示されます。

各リストの左側のラジオボタンで選択し、画面下部の Open PDBj Mine Web ボタンをクリックすることにより、ブラウザ上に、PDBJ サイトの PDBj Mine に登録 された立体構造情報が表示されます。

🛓 PDBj Mine - 0:7 - PDBjMineWeb	- 0 ×		
Eile			
A similar region to an existing PDB structure was	found.		
PDB code: 1tw/C hit region: 384-649			
Open PDBj Mine Web			

5.3.3-1 PDBjMineWeb – PDBj Mine



5.3.3-2 PDBjMineWeb – PDBj Mine

5.3.4 Modeller_AIST \rightarrow JmolForModeller

Modeller_AIST の実行結果は、JmolForModeller ノードを実行することで参照することができます。

Results - 0:6 - JmolForModeller	
Results	
Sequence Region (aa): 1-326 Model 1: Objective Function = 14423853 Model 2: Objective Function = 14659855 Model 3: Objective Function = 1478.6036 Model 4: Objective Function = 1497.5812 Model 5: Objective Function = 1760.7408 Sequence Region (aa): 327-381 Model 1: Objective Function = 221.4748 Model 1: Objective Function = 235.2573 Model 2: Objective Function = 260.7991 Model 3: Objective Function = 285.5612 Model 4: Objective Function = 548.8173 Sequence Region (aa): 384-649 PDB: abj/1 twfQ	Jmol
Execute Jmol	56¥domain_1¥ali/usersequence.1-326

5.3.4-1 JmolForModeller – Modeller Results

まず、ラジオボタン付きのモデル番号、Objective Function のリストが表示されます(画 面左)。PDBの構造の場合、Objective Function は表示されません。ここで、参照したいモ デリング結果をラジオボタンで選択し、下部の[Execute Jmol] ボタンを押下します。 Jmol が起動すると、選択したモデリング結果の立体構造が表示されます(画面右)。この時、 表示されたモデリング結果を格納したディレクトリ名もポップアップ表示されます(画面 下)。

右下の Jmol 文字列をクリックすることで、Jmol のメニューが表示されます。 Jmol の操作方法は下記を参照してください。 Jmol : <u>http://jmol.sourceforge.net/</u>

5.3.5 CPHmodels_DTU \rightarrow JmolForModeller

CPHmodels_DTU の実行結果は、JmolForModeller ノードを実行することで参照する ことができます。



5.3.5-1 JmolForModeller – CPHmodels Results

ラジオボタンが選択されたモデルが一つ表示されます(画面左)。下部の[Execute Jmol]ボタンを押下すると、Jmolによってモデリング結果が表示されます(画面右)。この時、表示されたモデリング結果を格納したディレクトリ名もポップアップ表示されます(画面下)。

右下の Jmol 文字列をクリックすることで、Jmol のメニューが表示されます。 Jmol の操作方法は下記を参照してください。

Jmol : <u>http://jmol.sourceforge.net/</u>

5.3.6 CPHmodels_DTU \rightarrow HtmlView

CPHmodels_DTU の実行結果を HtmlView 上でテキスト表示します。

A Html View - 0:6 - HtmlView	_ D _X
File	
URL: file:C:/2013-01-15/18-39-10-1113259450/dtu-result.html	
CPHmodels results	
Query sequence:	
>Sequence MSGGSSCSQTPSRAIPATRRVYLGDGVQLPPGDYSTTPGGTLFSTTPGGTRIIYDRKFLM ECRNSPVTKTPPRDLPTIPGVTSPSSDEPPMEASQSHLRNSPEDKRAGGEESQFEMDI	
Query Mw: 12579 (118 aa) Searching for template	
Round – D. Hits better than threshold: 0.000010: entry: 1WKW chain: B score: 47 E: 8e-06	E
Retrieving template	
Entry: 1wkw Chain: B	
Making profile-profile alignment	
Score: 55.5 bits Identity: 100.0 %	
Query: 47 PGGTRIIYDRKFLMECRNSP 66 PGGTRIIYDRKFLMECRNSP	
Temp1: 1 PGGTKIIYUKKELMECKNSP ZU	
Modeling	-
	4

5.3.6-1 CPHmodels_DTU の実行結果表示(HtmlView)
5.3.7 PsiPred_AIST \rightarrow AISTViewer

PsiPred_AISTの実行結果は、AISTViewerノードを実行することで、PSIPRED Result として参照することができます。

画面右上の TextView ボタンをクリックすることで、拡大図が別画面で表示されます。 PSIPRED の詳細については、下記のサイトを参照してください。

PSIPRED : <u>http://bioinf.cs.ucl.ac.uk/psipred/</u>



5.3.7-1 AISTViewer – PSIPRED Result

🛓 PSI	IPRED						×
# PSI	PRED HFORMAT (P	SIPRED V2.	ō by David	Jones)			^
Conf:	98887871787507	3677111675	3541000371	1357799999	999882376	2159999	
Pred:	CCCCCCCCEEEEC			ЖННННННН		CEEEEEE	
AA:	MNGIEGENETVEESI 10	20 20 vrigversperi	SAPUTTLAEF	WUFSMLAATN 40	FLLIMLGFP 50	INFLILY 60	-
	10	20	00	10	00	00	=
Conf:	87520001450567	7778778878	3872233010	4430113687	658567600	0001116	
Pred:	EEEECHHCCCCCHHH	ННННННННН	HHHCCCHHE	LEECCCEEEE	ECCCCCCCH	CELATIC	
AA.	70	RU 80	-mvruuriii 90	100	110	120	
	10	00				120	
Conf:	72377888877330	267862011	0314676303	1015888887	752577444	2122076	
Pred:	ССНИНИНИНИИ	CEFEFEECCO	COCCOCCEE	EHHHHHHHH	HHHCCCCCC	CHHHHCC	
AA:	GETALWOLVVLATER	1.40	1EO	MGYAFTWYMA 100	170	100 ton	
	150	140	150	100	170	100	
Conf:	57410124441167	5547877267	7223689999	9999998610	120001453	2011210	
Pred:	CCCEECCCCCCCCC	CCCCCCCEE	ЕЕНННННН	ННННННН	НННННННН	НННННН	
AA:	EGMQCSCGIDYYTP	HEETNNESEV 200	210	PLIVIFFCYG	QLVFTVKEA	AAQQQES 2.40	
	190	200	210	220	230	240	
Conf:	11023344457778	39999999997:	2133555899	19840688744	1224530354	3001100	
Pred:	ССНННННННН	ннннннн	HCCCCCEEEE	EEECCCCCCC	CEEEECHHH	HHCCCCC	 -

5.3.7-2 PSIPRED Result – TextView

5.3.8 Poodle_AIST \rightarrow AISTViewer

Poodle_AIST の実行結果は、AISTViewer ノードを実行することで、POODLE Result として参照することができます。

この参照画面は、POODLE-S、または POODLE-L を実行したディスオーダー予測結 果を、ラインプロット表示します。

縦軸は 0.0 から 1.0 までのディスオーダー確率、横軸は残基番号を表します。

ディスオーダー確率が 0.5 の青い線より上の部分、すなわち 0.5 以上の部分をディスオ ーダー領域とします。

ラインプロットの下の FASTA フォーマットの配列は、予測に使用したアミノ酸配列です。

ディスオーダー予測されたアミノ酸は赤色で表示します。

画面上部の [TextView] ボタンは、POODLE Result の実行結果をテキスト表示する際 に使用します。



5.3.8-1 AISTViewer – POODLE Result

S POODLE	
PFRMAT DR	~
REMARK K. Shimizu, Y. Muraoka, S. Hirose, and T. Noguchi	
REMARK "Feature Selection Based on Physicochemical Properties of	
REMARK Redefined N-term Region and C-term Regions for Predicting Disorder"	
REMARK Proc. of IEEE CIBCB 2005, pp262-267.	
METHOD Prediction for short disorder using modified PSSM	=
METHOD	
K D 0.712	
R D 0.696	
E D 0.632	-
V D 0.555	
R O 0.466	
K U U-34	
N U U-39	
A D 0 651	
F D D.709	
S D 0.729	
R D 0.718	
R D 0.693	
K D 0.629	÷



TmHmm_DTUの実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。



5.3.9-1 TmHmm_DTU の実行結果表示(HtmlView)

5.3.10 SignalP_DTU \rightarrow HtmlView

SignalP_DTU の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。



5.3.10-1 SignalP_DTU の実行結果表示(HtmlView)

ChloroP_DTU の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

ChloroP results ### chlorop v1.1 pred Number of query sequen Name Sequence	iction resu nces: 1 Length 118	lts ##### Score 0.509	стР Y	CS- score 1.130	cTP- length 16		
### chlorop v1.1 pred Number of query sequen Name Sequence	iction resu nces: 1 Length 118	lts ##### Score 0.509	стр Y	CS- score 1.130	cTP- length 16		
### chlorop v1.1 pred Number of query sequen Name Sequence	iction resu nces: 1 Length 118	lts ##### Score 0.509	сТР Y	CS- score 1.130	cTP- length 16		
ame equence	Length 118	Score 0.509	сТР 	CS- score 1.130	cTP- length 16		
jequence	118	0.509	Y	score 1.130	length 16 		
equence	118	0.509	Υ	1.130	16		

5.3.11-1 ChloroP_DTU の実行結果表示(HtmlView)

5.3.12 LipoP_DTU \rightarrow HtmlView

LipoP_DTU の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

🔬 Html View -	- 0:13 - HtmlView				
<u>F</u> ile					
$\langle \rangle$	URL: file:C:/2013-01-15/19-21-	18-0.1402	2694363771	405/dtu-result.html	
L inoP re	enlte				•
	54115				
# Sequence C	YT score=-0.200913 margin	=0.9720	77		
# Cut-off=-3	_				
Sequence	LipoP1.0:Best CYT	1	1	-0.200913	
Sequence	LipoP1.0:Margin CYT	1	1	0.972077	
Sequence	LipoP1.0:Class TMH	1	1	-1.17299	

5.3.12-1 LipoP_DTU の実行結果表示(HtmlView)

NetCTL_DTU の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

A Html View - 0:28 - HtmlView		-	_		x
File					
C > URL: file:C:/2013-01-15/19-2	4-8-0.5537612516963457/dt	u-resulthtml			
NetCTL results					
NetCTL-1.2 predictions using MHC su	pertype A1. Threshold	0.750000			
		0.100000			=
1 ID Sequence pep MSGGSSCSQ aff	0.0693 aff_rescale	0.2942 cle 0.0791 tap	-0.1830 COMB	0.2969	
2 ID Sequence pep SGGSSCSQT aff	0.0555 aff_rescale	0.2355 cle 0.0293 tap	-1.0460 COMB	0.1876	
3 ID Sequence pep GGSSCSQTP aff	0.0546 aff_rescale	0.2319 cle 0.0824 tap	-0.2910 COMB	0.2297	
4 ID Sequence pep GSSCSQTPS aff	0.0757 aff_rescale	0.3215 cle 0.0308 tap	-2.4180 COMB	0.2052	
5 ID Sequence pep SSCSQTPSR aff	0.0626 aff_rescale	0.2657 cle 0.2791 tap	1.5570 COMB	0.3854	
6 ID Sequence pep SCSQTPSRA aff	0.0593 aff_rescale	0.2517 cle 0.0662 tap	-0.4120 COMB	0.2410	
7 ID Sequence pep CSQTPSRAI aff	0.0635 aff_rescale	0.2694 cle 0.1013 tap	0.5560 COMB	0.3124	
8 ID Sequence pep SQTPSRAIP aff	0.0528 aff_rescale	0.2241 cle 0.0299 tap	0.1900 COMB	0.2381	
9 ID Sequence pep QTPSRAIPA aff	0.0798 aff_rescale	0.3387 cle 0.1018 tap	-0.5050 COMB	0.3287	
10 ID Sequence pep TPSRAIPAT aff	0.0541 aff_rescale	0.2295 cle 0.2279 tap	-1.0840 COMB	0.2095	
11 ID Sequence pep PSRAIPATR aff	0.0480 aff_rescale	0.2037 cle 0.7916 tap	1.1040 COMB	0.3776	
12 ID Sequence pep SRAIPATRR aff	0.0573 aff_rescale	0.2432 cle 0.7824 tap	1.6160 COMB	0.4413	
13 ID Sequence pep RAIPATRRV aff	0.0648 aff_rescale	0.2752 cle 0.7819 tap	0.7340 COMB	0.4291	
14 ID Sequence pep AIPATRRVV aff	0.0582 aff_rescale	0.2472 cle 0.7038 tap	0.7040 COMB	0.3879	
15 ID Sequence pep IPATRRVVL aff	0.0548 aff_rescale	0.2325 cle 0.9593 tap	0.8440 COMB	0.4186	
16 ID Sequence pep PATRRVVLG aff	0.0540 aff_rescale	0.2294 cle 0.2241 tap	-1.8500 COMB	0.1705	
17 ID Sequence pep AIRKVVLGD aft	U.UbU5 aff_rescale	U.2567 cle U.U455 tap	-1.789U COMB	0.1/41	
18 ID Sequence pep IKKVVLGDG aff	U.U531 aff_rescale	U.2254 cle U.U/28 tap	-1.UU/U COMB	0.1860	
19 ID Sequence pep RRVVLGDGV aff	U.U569 aff_rescale	U.2418 cle U.8836 tap	0.8530 COMB	0.4170	
20 ID Sequence pep RVVLGDGVQ aff	0.0569 aff_rescale	0.2416 cle 0.0761 tap	0.4870 COMB	0.2773	
21 ID Sequence pep VVLGDGVGL aff	0.0572 aff_rescale	0.2430 cle 0.9199 tap	1.3050 COMB	0.4462	
22 ID Sequence pep YLGDGYGLP aff	0.00020 aff_rescale	0.2031 CIE U.ZIU/ tap	0.0700 COMB	U.288Z	
23 ID Sequence pep Laboration aff	0.0000 att_rescale	0.2014 CIE 0.0408 Tap	-0.2070 COMB	0.2741	
25 ID Sequence pep dbdVdLFFd all	0.0400 all_rescale	0.2002 cre 0.0470 tap	-7 3500 COMB	0.1134	
26 ID Sequence per Durverrub all 26 ID Sequence pen GVOLPPGDY aff	0.0401 all_restate	0.4658 cle 0.0010 tap	2.3300 COMB	0.7477	
27 ID Sequence pep Graciful aff	0.0509 aff rescale	0.2159 cle 0.0298 ten	-2.1200 COMB	0.1144	
21 10 bequence pep facil abit all		0.2100 C10 0.0200 Cap	2.1200 0000	0.0047	Ŧ

5.3.13-1 NetCTL_DTU の実行結果表示(HtmlView)

NetChop_DTUの実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

🔬 Ht	ml Vi	ew -	- 0:29 - Html	View		٢
<u>F</u> ile						
		>]	URL: file:C:/2	2013-01-15/19-29	-27-0.5876331447090448/dtu-result.html	
-						
Net	tCh	op	o results			
NetCł	E qor	.0	predictions	using version	C-term. Threshold 0.500000	
						E
					-	
pos	AA	С	score	Ident		
					-	
1	M	S	0.636129	Sequence		
2	8	·	0.062696	Sequence		
3	G	·	0.202478	Sequence		
4	G	•	0.148403	Sequence		
5	5	•	0.056451	Sequence		
6	5	•	0.02/808	δequence		
	U C	÷	0.039821	δequence c		
8	٥ ٥	5	0.070000	Sequence		
9	ų T	•	0.000077	Sequence		
11	I D	•	0.0029277	Sequence		
12	г с	•	0.002301	Sequence		
12	D	•	0.030010	Sequence		
14	n A	•	0.278127	Sequence		
15	T	•	0.000133	Sequence		
16	P	•	0.101300	Sequence		
17	Å	•	0.101801	Sequence		
18	T		0.227901	Sequence		
19	R	2	0.791574	Sequence		
20	R	S	0.782428	Sequence		
21	Ŷ	S	0.781868	Sequence		
22	Ý	S	0.703768	Sequence		
23	L	S	0.959304	Sequence		
24	G		0.224106	Sequence		
25	D		0.045504	Sequence		Ŧ

5.3.14-1 NetChop_DTU の実行結果表示(HtmlView)

NetNES_DTU の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。



5.3.15-1 NetNES_DTU の実行結果表示(HtmlView)

NetPhosK_DTU の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

Eile	> URL	: file:C:/20	13-01-15/19-36-50-0 00723448796424031/dtu-result.html	
NetPh	> URL	: file:C:/20	13-01-15/19-36-50-0.00723448796424031/dtu-result.html	
NetPh	nosK 1			
NetPh	10sK 1			
		results		
Method:	NetPhosk	without	ESS filtering:	
Query: :	Sequence	•		
Site K	inase	Score		
S-2	CKI	0.52		
8-5 C C	CdCZ	0.55		
0-0 0 1	PKC	0.00		
ბ−შ I ⊤10 "'	UNAPK Domady	0.00		
тто ра	JOMAPN	0.00		
1-10 T 10	сака пис	0.00		-
1-10 T_97	DOMADI/	0.03		
т-эт р. т_эт	odo?	0.54		
T-97	cdk5	0.54		
T-45	cdc2	0.55		
T-46 n°	38MAPK	0.00		
T-46	cdk5	0.57		
	38MAPK	0.51		
T-70	cdk5	0.68		
S-83	cdk5	0.63		
S-85	CKII	0.62		
S-94 I	DNAPK	0.64		
S-94	ATM	0.61		
S-96	PKC	0.75		
S-101	GSK3	0.50		
S-112	CKII	0.65		
S-112 I	DNAPK	0.55		
S-112	ATM	0.62		

5.3.16-1 NetPhosK_DTU の実行結果表示(HtmlView)

NetPhos_DTU の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

🔬 Html View	- 0:35 - H	HtmlView			_ 0	x
<u>F</u> ile						
$\langle \rangle$	URL: file	e:C:/2013-01-1	5/19-39-0	0-0.021017865753876763/dtu-result.html		
NetPhos	resul	ts				
118 Sequen MSGGSSCSQTPS VTSPSSDEPPME S.S.T .S.SS Phosphorylat	ce RAIPATRF ASQSHLRM T S ion site	RVVLGDGVQLPP ISPEDKRAGGEE Ss. predicted	GDYSTTP SQFEMDI YT. S	PGGTLFSTTPGGTRIIYDRKFLMECRNSPVTKTPPRDLPTIPG	80 160 80 160	E
	Seri	ine predicti	ons			
Name	Pos	Context v	Score	Pred		
Sequence	2	MSGGSS	0.011	· ·		
Sequence	5	MSGGSSCSQ	0.162			
Sequence	6	SGGSSCSQT	0.944	*S*		
Sequence	8	GSSCSQTPS	0.511	*S*		
Sequence	12	SQTPSRAIP	0.005			
Sequence	35	PGDYSTTPG	0.211			
Sequence	44	GTLFSTTPG	0.055			
Sequence	65	ECRNSPVTK	0.958	*S*		
Sequence	83	PGVTSPSSD	0.991	*S*		
Sequence	85	VTSPSSDEP	0.987	*S*		
Sequence	86	TSPSSDEPP	0.982	*\$*		
Sequence	94	PMEASQSHL	0.084			
Sequence	96	EASQSHLRN	0.644	*5*		
Sequence	101	HLRNSPEDK	0.998	*S*		
Sequence	112	GGEESQFEM ^	0.862	*\;		-

5.3.17-1 NetPhos_DTU の実行結果表示(HtmlView)

NetPicoRNA_DTU の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

A Html View - 0:3	5 - Htm	lView	-	-	-	_ D _ X
Eile						
	file:C:/	/2013-01-1	5/19-46-1	2-0.048198099383693	9/dtu-result.html	
NetPicoRN	A res	sults				
>Sequence MVCLRLPGGSCMAVLT YNQEEYVRFDSDVGEFI QRRVHPKVTVYPSKTQI DWTFQTLVMLETVPRSQ FLGAGLFIYFRNQKGH:	VTEMVES RAVTEE PEQHENE GEVYTCO SGEQPRO	SSPLALAGI GRPDEEYWI LLVCSVSGI QVEHPSVT: GFLS	DTRPRFLE' NSQKDFLEI FYPGSIEVI SPLTVEWR(YSTSECHFFNGTERVRI DRRAAVDTYCRHNYGV RWFRNGQEEKTGVVST ARSESAQSKMLSGVGGI	ELDRYF SESFTV Salihng Vigli	
You have selecter - 2A prediction - 3C prediction - 3CFMDV predict - auto prediction	d the f ion	ollowin.	g option:	3:		
2Apro prediction						
Residue	Pos	Clv	Surf	Sequence	Comment	
G A N	8 29 48	0.049 0.047 0.038	0.695 0.468 0.653	CLRLPGGSCMA SPLALAGDTRP ECHFFNGTERV		

5.3.18-1 NetPicoRNA_DTU の実行結果表示(HtmlView)

DictyOGlyc_DTUの実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

🛓 Html Vi	iew - 0:11	HtmlVie	W		-			x
<u>F</u> ile								
	> URL:	file:C:/201	3-01-15/19-5	53-54-0.6088178	3377901589/dtu-re	sulthtml		
Dictv(OGlve	result	s					-
	o 01) •	100010						-11
Nama · Sa	onionco	1.	anoth• 118	3				
MSGGSSCSC	GTPSRAIPA		GVQLPPGDYS1	, ETPGGTLFSTTP	GGTRIIYDRKFLM	ECRNSPVTKTPPRDLPTIPG	80	
VTSPSSDEF	PPMEASQSH	LRNSPEDK	RAGGEESQFE	MDI				
	G					G	80	
				•••				
				.				
Name F	{esidue	Number	Potential	Threshold	Assignment			E
Sequence	Ser	0002	0.0231	0.3937	•			
Sequence	Ser Com	0005	0.0926	0.4637	•			
Sequence	Ser Ser	0000	0.0743	0.4716	•			
Sequence	Jer Thu	0008	0.0557	0.4710	•			
Sequence	ini Sor	0010	0.0004	0.44447	G			
Sequence	Thr	0012	0.0700	0.4077	ŭ			
Sequence	Ser	0010	0.2623	0.3030	•			
Sequence	Thr	0036	0.0150	0.4527				
Sequence	Thr	0037	0.0385	0.4796				
Sequence	Thr	0041	0.0585	0.5576				
Sequence	Ser	0044	0.2398	0.5646				
Sequence	Thr	0045	0.0229	0.5496				
Sequence	Thr	0046	0.0287	0.5286				
Sequence	Thr	0050	0.2696	0.5735				
Sequence	Ser	0065	0.2373	0.4836				
Sequence	Thr	0068	0.2909	0.4237				
Sequence	Thr	0070	0.5861	0.4037	G			
Sequence	Thr	0077	0.0833	0.4916				
Sequence	Thr	0082	0.2337	0.4786				
Sequence	Ser	0083	0.3293	0.4756	•			-
C	C	0005	0 1500	0 4057				

5.3.19-1 DictyOGlyc_DTU の実行結果表示(HtmlView)

WolfPsort_AIST の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。



5.3.20-1 WolfPsort_AIST の実行結果表示(HtmlView)

TargetP_DTU の実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

Html View - 0:	40 - HtmlView	_						×
Eile								
	L: file:C:/2013-01-	15/19-57-50-0	01006785	95121699	3∕dtu-i	result	html	
TargetP re	sults							
ruigeti ie	54115							
## targetp v1.	1 prediction re	sults #####					######	
umber of query leavage site p	sequences: I redictions incl	uded.						
sing NON-PLANT	networks.							
ame	Len	mTP	SP	other	Loc	RC	TPlen	
equence	266	0.064	0.935	0.026	S	1	29	
utoff		0.000	0.000	0.000				

5.3.21-1 TargetP_DTU の実行結果表示(HtmlView)

SecretomeP_DTUの実行結果を HtmlView ノード上でテキスト表示します。

5.3.22-1 SecretomeP_DTU の実行結果表示(HtmlView)

5.3.23 DisoPred_AIST \rightarrow AISTViewer

DisoPred_AIST の実行結果は、AISTViewer ノードを実行することで、DISOPRED Result として参照することができます。

ディスオーダー領域は赤色で示されております。

画面右上の TextView ボタンをクリックすることで、拡大図が別画面で表示されます。 DISOPRED の詳細については、下記のサイトを参照してください。

DISOPRED : http://bioinf.cs.ucl.ac.uk/index.php?id=806







5.3.23-2 DISOPRED Result – TextView

Memsat_AISTの実行結果は、AISTViewerノードを実行することで、MEMSAT Result として参照することができます。

膜貫通領域(TM)は赤、膜貫通領域外側のヘリックスキャップはマゼンタ、膜貫通領域 内側のヘリックスキャップはオレンジ、細胞外のアミノ酸配列はグレー、細胞内のアミノ 酸配列は黒で示されております。

画面上部の [TextView] ボタンは、MEMSAT Result の実行結果をテキスト表示する 際に使用します。

MEMSAT の詳細については、下記のサイトを参照してください。

MEMSAT : http://bioinf.cs.ucl.ac.uk/software_downloads/memsat/

File	
MEMSAT Result	TextView
Quer	у
Transmembrane (TM)	
Outside helix cap of TM	
Outside sequence	
Inside sequence	
>Query	
MNGTEGPNFYVPFSNKTGVVRSPFEAPQYYLAEPWQF	SMLAAYMFLLIMLGFPINFLTLY
VTVQHKKLRTPLNYILLNLAVADLFMVFGGFTTTLYT	SLHGYFVFGPTGCNLEGFFATLG
GEIALWSLVVLAIERYVVVCKPMSNFRFGENHAIMGV	AFTWVMALACAAPPLVGWSRYIP
EGMQCSCGIDYYTPHEETNNESFVIYMFVVHFIIPLI	VIFFCYGQLVFTVKEAAAQQQES
ATTQKAEKEVTRMVIIMVIAFLICWLPYAGVAFYIFT	HQGSDFGPIFMTIPAFFAKTSAV
YNPVIYIMMNKQFRNCMVTTLCCGKNKREIRLMKNRE	AARECRRKKKEYVKCLENRVAVL
ENQNKTLIEELKTLKDLYSNKMSEEGPQVKIREASKD	NVDFILSNVDLAMANSLRRVMIA
EIPTLAIDSVEVETNTTVLADEFIAHRLGLIPLQSMD	IEQLEYSRDCFCEDHCDKCSVVL
TLQAFGESESTTNVYSKDLVIVSNLMGRNIGHPIIQD	KEGNGVLICKLRKGQELKLTCVA
KKGIAKEHAKWGPAAAIEFEYDPWNKLKHTDYWYEQD	SAKEWPQSKNCEYEDPPNEGDPF
DYKAQADTFYMNVESVGSIPVDQVVVRGIDTLQKKVA	SILLALTQMDQDKVNFASGDNNT
ASNMLGSNEDVMMTGAEQDPYSNASQMGNTGSGGYDN	ΑΨ
	• • • •

5.3.24-1 AISTViewer – Memsat Result

🛃 MEMSAT
seqfile-nn
699 residues read from file.
$u_{\rm plix}$ 1 from 252 (in) to 278 (out) • 25001
Score = 25.881000
Helix 1 from 38 (out) to 62 (in) : 30467
000000XXXXXXXXXXXXXIIIIII++++++++++
Score = 44.105000
Helix 1 from 4 (in) to 23 (out) : 4294962640
Helix 2 from 34 (out) to 54 (in) : 20607
Helix 3 from 57 (in) to 75 (out) : 4294962310
Helix 4 from 78 (out) to 96 (in) : 25178
Helix 5 from 99 (in) to 118 (out) : 10411
Helix 6 from 121 (out) to 140 (in) : 18157
Helix 7 from 152 (in) to 171 (out) : 18411
Helix 8 from 197 (out) to 221 (in) : 25851
Helix 9 from 224 (in) to 242 (out) : 4294961946
Helix 10 from 245 (out) to 263 (in) : 962
Helix 11 from 266 (in) to 284 (out) : 7003
Helix 12 from 287 (out) to 306 (in) : 11757
Helix 13 from 330 (in) to 348 (out) : 4294960008
Helix 14 from 351 (out) to 370 (in) : 4294959329
• <u> </u>

5.3.24-2 Memsat Result – TextView

Phylogenetic Tree Active ワークフローは、マルチプルアライメント、系統樹作成を行うワ ークフローです。

Multi-FASTA フォーマットファイルから、Mafft の実行、ClustalW の実行を行います。 それぞれの結果から Phylogenetic Tree としてビューア上に結果を表示します。 その他、入力配列から生命科学データベース横断検索(LSDB)を行うことが可能です。 このワークフローは、各 SOAP サービスを KNIME のノードとして使用しています。

それぞれのプログラムやデータベースの詳細については、下記のリストより参照してください。

名称	サイト
Mafft	http://mafft.cbrc.jp/alignment/software/
ClustalW	http://www.clustal.org/
Archaeopteryx	https://sites.google.com/site/cmzmasek/home/software
	/archaeopteryx
LSDB	http://biosciencedbc.jp/dbsearch/
(生命科学データベース)	



6-1 Phylogenetic Tree 全体図

実行に必要なファイルは、FASTA フォーマットの塩基配列もしくは、アミノ酸配列を つなげた、Multi-FASTA フォーマットファイルです。

Phylogenetic Tree の実行には、4本以上の配列を用意してください。



6.2 ノード

Phylogenetic Tree Active Workflow のノードは複数種類存在します。 ノードは、実行環境の設定が必要な場合があります。 ノード一覧と、ノードの実行環境設定は以下のとおりです。 使用するツリーのノードに応じて、設定を行ってください。

6.2.1ノード一覧

以下の7種類です。

No	名前	アイコン	設	説明
			定	
1	FastaFileReader	FastaFileReader	要	Multi-FASTA フ
		<u>B</u> - ►		オーマットファイ
				ルを読み込みま
		prepare Multi-FASTA		す。
2	Mafft_AIST	Mafft_AIST	要	Mafft を実行しま
		▶ <mark> = </mark> ►		す。
		Execute MAFFT via SOAP		

6.2.1-1 Phylogenetic Tree Active Workflow のノード一覧

3	ClustalW_AIST	ClustalW_AIST	要	ClustalW を実行
		► <mark></mark> ►		します。
		Execute CLUSTALW via SOAP		
4	PhylogeneticTree_AIST	PhylogeneticTree_AIST	要	PhylogeneticTree
		► <mark> ती</mark> ►		を実行します。
		Create a phylogenetic tree		
5	AISTViewer	AISTViewer		予測結果を表示し
				ます。
				※ビューア表示は
		Display a multiple alignment		それぞれ異なりま
				す。
6	PhylogeneticTreeView	PhylogeneticTreeView		PhylogeneticTree
		▶ 🐙		の実行結果を表示
				します。
		Execute Archaeopteryx		
7	LSDBCrossSearch	LSDBCross Search	-	生命科学データベ
				ース横断検索を表
				示します。
		LSDB cross search		

6.2.2.1 FastaFileReader

実行に使用する塩基配列の Multi-FASTA フォーマットファイルを指定します。

- 1) FastaFileReader ノードを右クリックし、"Configure..." を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔔 Dialog - 0:1 - FastaFileReader
File Options Memory Policy Fasta File Selected File: Browse
OK - Execute Apply Cancel

6.2.2.1-1 FastaFileReader : Configure...

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{T}} \rightarrow \mathbf{Fasta}$ File \rightarrow SelectedFile:

図の赤枠内に、実行に使用する Multi-FASTA フォーマットファイルを入力 します。

[Browse...] ボタンを押下し、ファイル選択画面を開き、実行に使用する FASTA フォーマットファイルを選択することも可能です。

指定後、[OK] ボタンを押下します。

出力ディレクトリの設定を行います。

- 1) ClustalW_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

🔥 Dialog - 3:11 - ClustalW_AIST (Execute CLUS 🗕 🗖 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy Type PROTEIN O DNA
Select Output Directory Selected Directory: C:¥
chi rippiy culleci

6.2.2.2-1 ClustalW_AIST : Configure...

・Options タブ \rightarrow Type

入力配列がタンパク質の場合は"PROTEIN"、核酸配列の場合は"DNA"を選択 します。

• Options $\not{\beta} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。 指定後、[OK] ボタンを押下します。 出力ディレクトリと実行オプションの設定を行います。

- 1) Mafft_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面を使用します。

🔥 Dialog - 3:2 - Mafft_AIST (Execute MAFFT via SOAP) 🛛 🗖 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory C¥
Advanced Options retree 2maxiterate 0bl 62op 1.53ep 0.0clustalout
OK Apply Cancel 🕡

6.2.2.3-1 Mafft_AIST : Configure...

• Options $\not{\beta} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

• Options $\mathscr{P}^{\mathcal{J}} \to \operatorname{Advanced} \to \operatorname{Options}$

実行パラメータを変更する際には、図の青枠内に入力します。 パラメータオプションは、スペース区切りで複数指定することができます。 使用可能なオプションは以下の通りです。

op #	: Gap opening penalty, default: 1.53	
ep #	: Offset (works like gap extension penalty), default: 0.0	
maxiterate # : Maximum number of iterative refinement, defa		
clustalo	ut : Output: clustal format, default: fasta	
reorder : Outorder: aligned, default: input order		
quiet	: Do not report progress	

デフォルト設定は、以下の通りです。

--retree 2 --maxiterate 0 --bl 62 --op 1.53 --ep 0.0 --clustalout

指定後、[OK] ボタンを押下します。

6.2.2.4 PhylogeneticTree_AIST

出力ディレクトリと実行オプションの設定を行います。

- 1) PhylogeneticTree_AIST ノードを右クリックし、"Configure..." を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面を使用します。

🔥 Dialog - 3:4 - PhylogeneticTree_AIST (Create 🗕 🗖 💌
File
Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory C# Browse
Phylogenetic Tree Methods NJ UPGMA BOOTSTRAP (valid for "NJ On On Off Number of BOOTSTRAP 1000
OK Apply Cancel 🖓

6.2.2.4-1 PhylogeneticTree_AIST : Configure...

• Options $\mathscr{P} \overrightarrow{\mathcal{I}} \to$ Select Output Directory \to Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

・Options タブ \rightarrow Phylogenetic Tree

図の青枠内に、実行パラメータを設定します。 基本的には、デフォルト設定で問題ありません。

 $\boldsymbol{\cdot}$ Methods :

NJ 法か、UPGMA 法をラジオボタンで選択します。

• BOOTSTRAP (valid for "NJ") :

On か、Off かをラジオボタンで選択します。

• Number of BOOTSTRAP :

ブートストラップ数を設定します。

デフォルトは、1000 が設定されています。

指定後、[OK] ボタンを押下します。

6.3.1 ClustalW_AIST → AISTViewer

ClustalW_AIST の実行結果は、AISTViewer ノードを実行することで、ClustalW Result として参照することができます。

入力に使用した配列名が、左側に表示され、その右側に、ClustalWの実行の結果ア ライメントされた配列が色分け表示されます。

上部の [TextView] ボタンは、アライメントに使用している配列を Multi-FASTA フ オーマットでテキスト表示を行う際に使用します。



6.3.1-1 AISTViewer – ClustalW Result

الله ClustalW	
>2_gi 21406208 gb AY087471.1 _A	A
	E
CGTTGTTTGGTACAGCTTCACGAACAATCTCTCTCCCGATAGATTCTTCT	
CTGATTAGTGAGGTTCCACCTAT-CAAAGTTGATGGAAGGATTG	
-TTGCTTGTGAAGGAGACACCAATCCGGCCCTAGGTCATCCAATC	
GAGTTCATATGCCTCGACCTAA-ATGAGCCTGCGATCTGCAAGTACTG	
CGGCCTTCGTTATGTTCAAGATCATCACCATTGAGGCAAATTCTGAAAGT	
GAATTGCTGGTCTCTCTCCCCTTTTTATTGC-ATTTTTAAGTT	
TGTGTATTGTTTTTTCTGGTGTGCCTACTACATCTTCAGCTATATTATC	
TAATAAAGGATTCGATCAAAGTCGGGTAAGTTTGATTTTGTTTG	
ACTICAGCACTIGICATGITGIAACATICAATCICIGATATCACTGIYII	
Π	

6.3.1-2 ClustalW Result – TextView

$6.3.2 Mafft_AIST \rightarrow AISTViewer$

Mafft_AISTの実行結果は、AISTViewerノードを実行することで、MAFFT Result として参照することができます。

入力に使用した配列名が、左側に表示され、その右側に、MAFFTの実行の結果アラ インメントされた配列が色分け表示されます。

上部の [TextView] ボタンは、アラインメントに使用している配列を Multi-FASTA フォーマットでテキスト表示を行う際に使用します。

<u>F</u> ile		
MAFFT Res	sult TextView	-
1_gi 334185880 2_gi 21406208 g 3_gi 28416578 g 4_gi 13358228 g 5_gi 110735332	GILGIT CITA A A QUEATITTT CEA A TITA A CEA A A A A GA A TITIC CITCUECTO CITA COCCICCECCETCT. A A TC GA A A A A A A A TA A A TG CE	ш
1_gi 334185880 2_gi 21406208 g 3_gi 28416578 g 4_gi 13358228 g 5_gi 110735332	C TILLE TIC TIC A GI C A A G G TILLG'A A TIC A TIC A GIA GIA A GIA A A G G G TILL TILLA C A C TIGE C G G G A A A G G A	
1_gi 334185880 2_gi 21406208 g 3_gi 28416578 g 4_gi 13358228 g 5_gi 110735932	TIG A A G C T TIG A C G TIG A A TIG TIG A TIA TIA TIA TIC C A A A G A TIG A TIT TIC C A G A TIC TIC C A G TIC TIC C A C TIG	
1_gi 334185880 2_gi 21406208 g 3_gi 28416578 g 4_gi 13358228 g 5_gi 110735932	C TIGTIC G A G A TI G G G A A TIGC G A A A C C A TIGA G A TIGTIC C TICC TIG A G C TIGTIG G A G C G C A TIG	
1_gi 334185880 2_gi 21406208 g 3_gi 28416578 g 4_gi 13358228 g 5_gi 110735932	C TI TI G TI C TI A A A A C A TI G G A G G C A C C TI A C A A G G TI C C TI G A A G A A C TI TI G C TI C A A G I TI A TI A A G C TI TI TI	
1_gi 334185880 2_gi 21406208 g 3_gi 28416578 g 4_gi 13358228 g 5_gi 110735932	TIGICACCACGIANTECCTECTIAAAATTATGACTGGATGGATGCACTCACCCTECCGGCTETCTGGACTTC ACGIAACCAATTC ACGIAACCAATTC ACGIAACCAATTC ACGIAAATTC ACGIAAATTC ACGIAAATTC C	
1_gi 334185880 2_gi 21406208 g 3_gi 28416578 g 4_gi 13358228 g 5_gi 110735932	T T GC C A T T A A A A C A T T G G T C A A C C G G G G T A T A T T T A C C G G T G T C G G T C G T C A G A T T G G T G T C G T T O G T A A C A A T G G T C G T T O G T A A C A A T G G T C G T T G T T G G A A C A A T G G T C G T T G T T G G A A C A A T G G T C G T T G T T G G A A C A A T G G T C G T T G T T G G A A C A A T G G T C G T T G T T G G A A C A A T G G	
•	m	

6.3.2-1 AISTViewer – MAFFT Result



6.3.2-2 MAFFT Result – TextView

6.3.3 PhylogeneticTreeView

PhylogeneticTreeView は、PhylogeneticTree_AIST ノードの実行結果を、

Archaeopteryx ビューアを用いて参照することができます。

PhylogeneticTreeView は ClustalW、Mafft の実行結果を表示します。

PhylogeneticTreeView では、入力に使用した配列の名称とともに、系統分類を表示 します。



6.3.3-1 PhylogeneticTreeView

PhylogeneticTreeView を一度終了し、再度参照したい場合は、まず、該当する PhylogeneticTreeView のノードを選択、右クリックメニューから Reset を押下します。 その後再びノードを選択、右クリックメニューから Execute を押下することで、 Archaeopteryx ビューアを再び起動することができます。

7 Molecular Simulation の使用方法

Molecular Simulation Active Workflow は、分子シミュレーションを行うワークフローです。 具体的には、タンパク質構造のモデリング、得られたテンプレート構造と、検索してヒットした 化合物とのドッキング、さらにエネルギー最小化計算、分子力学計算 (MM)、分子動力学 (MD) 計算を行います。

このワークフローは、モデリング、ドッキング、MDの3つのセクションから構成されており ます。まず、問い合わせ配列のタンパク質について、5章と同様の過程でモデリングが行われま す。次に、モデリングの結果得られた構造をテンプレートとし、AutoDock

(http://autodock.scripps.edu/)を用いて化合物とのドッキング計算を行います。ドッキングに用 いる化合物について、ナミキ商事で公開されている Namiki (http://www.namiki-s.co.jp/)のデー タベースを対象に、ユーザが設定した検索条件を基に化合物情報を取得することができます。続 いて、得られたドッキング結果を用いてエネルギー最小化計算、MM 計算、MD 計算を行いま す。モデリング構造、ドッキング結果、MM 計算結果は、Jmol (http://jmol.sourceforge.net/) に よって閲覧することができます。



7-1 Molecular Simulation Active Workflow

7.1 実行準備

実行に必要なファイルは、FASTA フォーマットのアミノ酸配列ファイルです。

※ FASTA フォーマットをつなげた、Multi-Fasta フォーマットファイルは 利用できません。



7.2 ノード

Molecular Simulation Active Workflow のノードは複数種類存在します。

ノードは、実行環境の設定が必要な場合があります。 ノード一覧と、ノードの実行環境設定は以下のとおりです。 使用するツリーのノードに応じて、設定を行ってください。

7.2.1ノード一覧

以下の29種類です。

7.2.1 1 Molecular Simulation Active Workhow V// 1 是								
No	名前	アイコン	設	説明				
			定					
1	SetVariable	SetVariable	要	CASE Switch				
		Node 1		Variable を操作				
				する。ダイアロ				
				グ画面で 0、1、				
				2を設定すると				
				$\operatorname{CASE}\operatorname{Switch} \mathcal{O}$				
				第一アウトポー				
				トに、1を設定す				
				ると第二アウト				

721-1 Molecular Simulation Active Workflow のノード一覧

ポートにフロー

が流れる。

2	CASE Switch			CASE Switch を
	Variable(Start)	CASE Switch		行為 KNIME /
	Variable(Start)	variable (start)		1J 9 KINIME /
		Node 2		
3	FastaFileReader	FastaFileReader	要	FASTA フォー
		75		マットファイル
				を読み込みま
		0 0		す。
		Node 3		
4	LSDBCrossSearch	L SDBCross Search	-	生命科学データ
				ベース横断検索
				を表示します。
		Node 4		
5	Sparql_AIST		要	AIST で公開さ
		sparqkis1		れている
		59 F		SPARQLエンド
				ポイントに対し
		Node 5		て SPARQL 検
				索を実行しま
				す
6	SequenceSelector	Samana S-1		、 SPARQL 検索で
		SequenceSelector		取得した配列を
		▶ 🔠 ▶		深切します
				速代しより。
		Node 6		
_				CACE C-ital O
1	CASE Switch	Data (End)		CASE Switch 0
	Variable (End)	Case		エンドノード。
		Node 7		
8	BlastForModeller_AIST	BlastForModeller_AIST	要	BLAST もしくは
----	-------------------------	--------------------------	---	---------------
				PSI-BLAST を実行
				します。
		Node 8		
9	HitRegionSelector_AIST	HitRegion Selector_AIST	要	BLAST もしくは
				PSI-BLAST の実行
		u v v		結果より、立体構造
				ヒット領域を抽出
		Node 9		します。
10	TemplateSelector_AIST	Template Selector_AIST	要	立体構造モデリン
		× +2		グのテンプレート
		1 17		を選択します。
		Node 10		
11	Modeller_AIST	Modeller_AIST	要	MODELLER を実
				行します。
		× 18 ×		
		Node 11		
12	DockingTemplateSelector	DockingTemplate Selector	要	モデリングの結果
				から、ドッキングを
				行うためのテンプ
				レート構造を選択
		Node 12		します。
13	PdbFileReader	PdbFileReader	要	PDB ファイルを読
				み込みます。
		Node 13		
14	fpocket2_AIST	fpocket2 AIST	要	fpocket2 を実行し
				ます。
		► <mark></mark> ►		
		Node 14		

15	PocketSelector AutoDock_AIST	PocketSelector	要	fpocket2 実行結果 からポケットサイ トを選択します AutoDock を実行し
		Node 16		ます。
17	CompoundQuery_AIST	CompoundQuery_AIST	要	化合物検索を実行 します。
18	CompoundSelector	Compound Selector		化合物検索結果か ら化合物を選択し ます。
19	Mol2FileReader	Mol2FileReader	要	Mol2 ファイルを読 み込みます。
20	Ammos_AIST	Ammos_AIST	要	Ammos を実行しま す。
21	MergeTargetAndLigand	MergeTargetAndLigand MergeTargetAndLigand Node 21		AutoDock の結果と テンプレート情報 をマージします。

22	SiteAndPoseSelector	SiteAndPose Selector		ドッキング結果を
		▶ 🔳 ▶		指定します。
		Node 22		
23	MMPrep_AIST	MMPrep_AIST	要	MM 計算のための
				準備をします。
		Node 23		
24	InitMinMM_AIST	InitMinMM_AIST	要	エネルギー最小化
		Au -		及び MM 計算を実
				行します。
		Node 24		
25	MoltrecMD_AIST	MoltracMD AIST	要	MD 計算を実行し
				ます。
		Node 25		
26	End IF	End IE		分岐の終了ノード
		Node 26		
27	ResultPathSetter		要	
		ResultPathSetter	~	果を格納したディ
				レクトリを指定す
				ることにより、結果
		Node 27		を閲覧することが
	114 187'			できます。
28	ntm1v1ew	HtmlView		「側柿米を衣小します」
				∽ /。 ※ビューア表示は
				それぞれ異なりま
		Node 28		す。

29	JmolForModeller	JmolForModeller	Jmol を使用したタ ンパク質立体構造 表示を行います。
		Node 29	

7.2.2.1 SetVariable

CASE Switch Variable (Start)ノードの出力ポートを切り替えます。

- 1) SetVariable ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

	Dialog - 0:75 - SetVariable 🛛 🗖	x
File Option Spec Ad	ns Flow Variables Memory Policy ify an active flow variable output port (0:first; 1:second; 2:third) ctive flow variable ouput port number (integer: 0 to 2): 0 =	
	OK Apply Cancel 🕜	

7.2.2.1-1 SetVariable : Configure...

0、1、2の3つの数字が CASE Switch Variable(Start)ノードの1~3番目の出力ポートにそれぞれ対応しております。FastaFileReader を使う場合は0を、Sparql_AIST を使う場合は1を指定します。

指定後、[Apply]ボタン、[OK] ボタンを押下します。

実行に使用するタンパク質の FASTA ファイルを指定します。

- 1) FastaFileReader ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🛓 Dialog - 0:1 - FastaFileReader	
File	
Ordina III III	
- Fasta File	
Selected File	
↓ Browse	
OK - Execute Apply Cancel	

7.2.2.2-1 FastaFileReader : Configure...

• Options $\not{\mathcal{P}} \not{\mathcal{T}} \rightarrow$ Fasta File \rightarrow SelectedFile:

図の赤枠内に、実行に使用する FASTA フォーマットファイルを入力します。 [Browse...] ボタンを押下し、ファイル選択画面を開き、実行に使用する FASTA フォーマットファイルを選択することも可能です。 指定後、[OK] ボタンを押下します。 AIST で公開されている SPARQL エンドポイントに対して SPARQL 検索を行います。

- 1) Sparql_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

le Options Advanced Flow Variables Memory Policy Output Directory Selected Directory: C.¥ Browse. SPARQL endpoints SEVENS endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/: fRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/: fRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/: UNIPROT endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/: PDB endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/: Minimum sequence length for gre/sparql Keyword Minimum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod		Dialog - 2:60 - Sparql_AIST 🛛 🗕 🗖 🎴
Options Advanced Flow Variables Memory Policy Output Directory Selected Directory. Image: Clip Clip Clip Clip Clip Clip Clip Clip	ile	
Output Directory Selected Directory. C:# Browse SPAROL endpoints Image: Selected Directory. C:# Image: Selected Directory. Image: Selected Director	Options	Advanced Flow Verickles Memory Policy
Selected Directory:	Output D	irectory
C# Browse SPARQL endpoints Image: Sevense in the seven in the s		Selected Directory
SPARQL endpoints SEVENS endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/ fRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/ UNIPROT endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/ UNIPROT endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/ PDB endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/ SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword		C:¥ Browse
SPARQL endpoints Image: SEVENS endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s Image: Imag		
SPARQL endpoints Image: SEVENS endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s Image: fRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s Image: fRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s Image: fRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s Image: fRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s Image: frequence in the intermediate	L	
SEVENS endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/: fRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/: UNIPROT endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/: PDB endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql KEGG - pathway endpoint: http://kegg.bio2rdf.org/sparql KEGG - pathway endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql KEGG - pathway endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/: KEGG - pathway endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql KEGG - pathway endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql KEGG - pathway endpoint: http://kegg.bio2rdf.org/sparql SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod FASTA O Tab-delimited	SPARQL	endpoints
 ☐ fRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s ☐ UNIPROT endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s ☐ PDB endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql KEGG - pathway endpoint: http://kegg.bio2rdf.org/sparql SPARQL search conditions	√ s	EVENS endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/:
UNIPROT endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/(PDB endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql KEGG - pathway endpoint: http://kegg.bio2rdf.org/sparql SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword	🗌 🗆 f	RNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/s
PDB endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql KEGG - pathway endpoint: http://kegg.bio2rdf.org/sparql SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod FASTA O Tab-delimited		NIPROT endpoint: http://tgrdf.medals.ip/openrdf-sesame/repositories/
PDB endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql KEGG - pathway endpoint: http://kegg.bio2rdf.org/sparql SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod FASTA O Tab-delimited		
KEGG - pathway endpoint: http://keggbio2rdf.org/sparql SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword		PDB endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod I G FASTA O Tab-delimited	E KE	GG - pathway endpoint: http://kegg.bio2rdf.org/sparql
Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format Other of FASTA Taxon (not available for UNIPROT)	SPARQL	search conditions
Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod I Tab-delimited		Taxon (not available for UNIPROT)
Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway)		Kesseord
Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod ● FASTA O Tab-delimited		(Cyword
Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod		Minimum sequence length 800
Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod ● FASTA O Tab-delimited		Maximum sequence length 600
Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod		Resolution (for PDB) 2.8
Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod FASTA O Tab-delimited		Pathway (for KEGG-pathway)
Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod FASTA O Tab-delimited		
FASTA O Tab-delimited	Output fo	rmat
		FASTA O Tab-delimited
OK Apply Cancel (?)		OK Apply Cancel (?)

7.2.2.3-1 Sparql_AIST : Configure...

• Options $\not{\beta} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow \text{Output} \rightarrow \text{Selected Directory:}$

Sparql_AIST の実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

・Options タブ \rightarrow SPARQL endpoints:

SEVENS、fRNAdb、UNIPROT、PDB、KEGG-pathwayの5つのエンド ポイントをチェックボックスで選択します。本ワークフローではSEVENS、 UNIPROT、PDB が有効となります。

• Options $\not{PT} \rightarrow \mathbf{SPARQL}$ search conditions:

タクソン(Taxon)、キーワード(Keyword)、最小配列長(Minimum)、最大配 列長(Maximum)、解像度(Resolution)、パスウェイ(Pathway)を指定します。 本ワークフローではタクソン、キーワード、最小配列長、最大配列長、解像度 が有効です。

• Options $\not{\beta} \not{\neg} \rightarrow$ Output format:

FASTA または Tab-delimited のラジオボタンを指定します。

プログラムの選択と出力ディレクトリの設定を行います。

- 1) BlastForModeller_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔺 Dialog - 2:2 - BlastForModeller_AIST 🛛 🗕 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy
BLAST version 2.2.18 Execution Type BLAST O PSI-BLAST E-Value 1.0E-5 Interation 3
Select Output Directory Selected Directory: C:¥
OK Apply Cancel 🕥

7.2.2.4-1 BlastForModeller_AIST : Configure...

・Options タブ \rightarrow BLAST version 2.2.18 \rightarrow Execution Type

図の赤枠に、Execution Type をラジオボタンで選択します。

Execution Type は、既存の立体構造のアミノ酸配列との相同性検索を行う ためのプログラムを、BLAST もしくは PSI-BLAST から選択します。

• Options $\not{\mathcal{P}} \not{\mathcal{T}} \rightarrow \text{BLAST}$ version 2.2.18 \rightarrow E-Value

続いて、図の赤枠に、E-value を入力します。

この E-Value は、BLAST もしくは PSI-BLAST 検索において適用される期 待値の閾値となります。

```
デフォルトでは、[1.0E-5] が設定されています。
```

Options タブ → BLAST version 2.2.18 → Iteration
 続いて、図の赤枠に、Iteration を入力します。
 この Iteration は、PSI-BLAST の最大繰り返し検索回数です。なお、
 Execution Type にて BLAST 指定時は関与しません。
 デフォルトでは、[3] が設定されています。

Options タブ → Select Output Directory → Selected Directory:
 図の青枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

指定後、[OK] ボタンを押下します。

7.2.2.5 HitRegionSelector_AIST

BLAST もしくは PSI-BLAST の結果ヒットした配列部の立体構造予測に使用する 条件を設定します。

- HitRegionSelector_AIST ノードを右クリックし、"Configure..." を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔺 Dialog - 2:3 - HitRegionSelector_AIST 🛛 🗖 💌			
File			
Options Flow Variables Memory Policy			
Conditions to select (PSI-)BLAST hit regions (Integer is only permitt			
Coverage (%) 60			
Identity (%) 30			
Minimum Length 30			
OK Apply Cancel			

7.2.2.5-1 HitRegionSelector_AIST : Configure...

• Options $\not{P} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow \text{Condition to select (PSI-)BLAST hit regions (Integer is only permitted to input) <math>\rightarrow \text{Coverage}(\%)$

Coverage を設定します。

Coverage は、ヒットした立体構造の全長に対するヒット領域の割合であり、 ヒットの基準閾値とするパーセンテージの値です。

デフォルトでは、[60]が設定されています。

数値の入力制限は、以下のとおりです。

• Options $\not P \not \to$ Condition to select (PSI-)BLAST hit regions (Integer is only permitted to input) \rightarrow Identity(%)

Identity を設定します。

Identity は、ヒット領域間のアミノ酸の一致度であり、閾値とするパーセン テージの値です。

デフォルトでは、[30]が設定されています。

数値の入力制限は、以下のとおりです。

• Options $\not > \vec{>} \rightarrow$ Condition to select (PSI-)BLAST hit regions (Integer is only permitted to input) \rightarrow Minimum Length

Minimum Length を設定します。

Minimum Length は、ヒット領域の最小のアミノ酸長の値であり、閾値と して使用します。

デフォルトでは、[30]が設定されています。

数値の入力制限は、以下のとおりです。

ヒット領域に対する立体構造モデリングのためのテンプレートを設定します。

- 1) TemplateSelector_AIST ノードを右クリックし、"Configure..." を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🝐 Dialog - 2:4 - TemplateSelector_AIST 🛛 🗖 💌			
File			
Options FL M it I have D K			
Conditions to determine for medalling or for dislaving PDPi Mine Web			
Coverage (%) 90			
Identity (%) 90			
OK Apply Cancel 🕐			

7.2.2.6-1 TemplateSelector_AIST : Configure...

• Options $\not \forall \vec{\neg} \rightarrow$ Condition to determine for modelling or for displaying PDBj Mine Web. \rightarrow Coverage(%), Identity(%)

Coverate、Identity の値を設定します。

Coverage は、ヒットした立体構造の全長に対するヒット領域の割合です。 Identity は、ヒット領域間のアミノ酸の一致度です。

この2つの値は、ヒットした立体構造と同様の構造を持つことの判定に用い ます。指定した値を超えるヒット領域については、そのヒット領域はヒットし た立体構造と同様であるとみなされ、PDBj Mine による立体構造情報表示の 処理に入ります。指定した値を満たさないヒット領域については、モデリング のテンプレートとする立体構造を選択してモデリングの処理に入ります。

デフォルト値は、Coverage 90%、Identity 90% です。 整数値のみ入力が可能です。

MODELLER で生成するモデル数の最大値を設定と、MODELLER のライセンス キーの入力を行います。

- 1) Modeller_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔥 Dialog - 2:5 - Modeller_AIST 🗕 🗖 🗙			
File			
Options Flow Variables Memory Policy Condition for Modeller Execution Number of Models for Modelling 5			
Modeller License License Key for Modeller (required)			
OK Apply Cancel 🕡			

7.2.2.7-1 Modeller_AIST : Configure...

・Options タブ \rightarrow Condition for Modeller Execution \rightarrow Number of Models for Modelling

Number of Models for Modelling を入力します。

Number of Models for Modelling は、MODELLER で生成するモデル数の 最大値として使用します。

入力範囲は、 1~10 であり、整数値のみの入力が可能です。

• Options $\mathscr{P} \not\supset \to$ Modeller License \to License Key for Modeller (required)

License Key for Modeller (required)では、MODELLER 実行のためのライ センスキーを入力します。 設定後、[OK] ボタンを押下します。 化合物の検索条件を設定します。

- 1) CompoundQuery_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面に、実行環境を設定します。

📥 Dialog - 4:62 - Compo	oundQuery_AIST (Nod 🗕 🗖 🗙
File	
Options Output Directory Fla	ow Variables Memory Policy
	Database Namiki
Search Words	
✓ Molecular Weight	from 300.0 to 305.0
✓ logP	from 1.0 to 2.0
TPSA	from 80.0 to 140.0
smiles	
🗌 inchi	
🗌 inchikey	
Number of rotatable b	onds from 3 to 7
Charge	from 0 to 2
H-bond Acceptor	from 3 to 8
H-bond Donor	from 8 to 8
Number of rings	from 1 to 5
[Search Conditi
ОК	Apply Cancel 🕐

7.2.2.8-1 CompoundQuery_AIST : Configure...

・Options タブ

Database:

Namiki が選択されています。

Search Words:

検索するキーワードを入力します。使用する場合はチェックボックスをチェッ クします。

Molecular Weight:

分子量の範囲を指定します(デフォルトは 300.0~305.0)。使用する場合はチェ ックボックスをチェックします(デフォルトでチェック)。

logP:

logPの範囲を指定します(デフォルトは 1.0~2.0)。使用する場合はチェックボ ックスをチェックします(デフォルトでチェック)。

TPSA:

TPSA の範囲を指定します(デフォルトは 80.0~140.0)。使用する場合はチェ ックボックスをチェックします。

smiles:

smiles を入力します。使用する場合はチェックボックスをチェックします。

inchi

inchi を入力します。使用する場合はチェックボックスをチェックします。

inchikey:

inchikey を入力します。使用する場合はチェックボックスをチェックします。

Number of rotatable bonds:

rotatable bond の範囲を指定します(デフォルトは 3~7)。使用する場合はチェ ックボックスをチェックします。

Charge:

Charge の範囲を指定します(デフォルトは 0~2)。使用する場合はチェックボ ックスをチェックします。

H-bond Acceptor:

H-bond Acceptor の範囲を指定します(デフォルトは 3~8)。使用する場合はチ ェックボックスをチェックします。

H-bond Donor:

H-bond Donor の範囲を指定します(デフォルトは 8~8)。使用する場合はチェ ックボックスをチェックします。

Number of rings:

ring の範囲を指定します(デフォルトは 1~5)。使用する場合はチェックボック スをチェックします。

Search Condition:

検索条件"AND"、"OR"のどちらかを指定します(デフォルトは"AND")。

次に、出力結果を格納するディレクトリを指定します。

🔺 Dialog - 4:62 - CompoundQuery_AIST (Nod 🗕 🗖 🗙			
File			
Options Output Directory Flow Variables Memory Policy			
Selected Directory.			
C.¥ V Browse			
OK Apply Cancel			

7.2.2.8-2 CompoundQuery_AIST : Configure...続き

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{T}} \rightarrow$ Select Output Directory \rightarrow Selected Directory:

図の赤枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) AutoDock_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

	Dialog - 4:111 - Auto	DOock_AIST (By specific site)	- 🗆 🗙
File			
Options Flow Variables Memory Policy			
Secify binding site coordinate (X, Y, Z)			
✓ use	x-coordinate 0.0	y-coordinate 0.0	z-coordinate 0.0
-Output	Selected Directory. C:¥	v Browse.	
<u>∧</u> "jp.cbrc.molf.activeflow.soap.autodocl	.coorx", "jp.cbrc.molf.activeflow.soap.aut	odock.coory" and "jp.cbrc.molf.activeflow.soap.ac	utodock.coorz [®] are controlled by variables.
		ОК	Apply Cancel

7.2.2.9-1 AutoDock_AIST : Configure...

・Options タブ \rightarrow XYZ-coordinate

図の赤枠の箇所に、XYZ 座標を指定します。

Options タブ → Select Output Directory → Selected Directory:
 図の青枠内に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) MMprep_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔺 Dialog - 4:65 - MMPrep_AIST (Node 23) 🛛 🗖 💌
File Options Flow Variables Memory Policy Output Selected Directory: C# Browse
OK Apply Cancel 🕐

7.2.2.10-1 MMPrep_AIST : Configure...

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to \text{Output} \to \text{Selected Directory}$:

Output 欄に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用 するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) InitMinMM_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🛆 Dialog - 4:66 - InitMinMM_AIST (Node 24) 🛛 🗕 💌
File Options Flow Variables Memory Policy Output Selected Directory. C# Browse
OK Apply Cancel 🕐

7.2.2.11-1 InitMinMM_AIST : Configure...

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to \text{Output} \to \text{Selected Directory}$:

Output 欄に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用 するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) MoltrecMD_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔥 Dialog - 4:67 - MoltrecMD_AIST (Node 25) 🛛 🗕 🗖	<
File Options Flow Variables Memory Policy Output Selected Directory: C:¥ Browse	
OK Apply Cancel 🕐	

7.2.2.12-1 MoltrecMD_AIST : Configure...

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to \text{Output} \to \text{Selected Directory}$:

Output 欄に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用 するディレクトリを選択することも可能です。

以前に実行した KNIME ノードの結果が格納されたディレクトリ、その KNIME ノード名、問い合わせ配列名(Poodle_AIST、PsiPred_AIST のみ)の設定を行いま す。

- 1) ResultPathSetter ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔺 Dialog - 4:76 - ResultPathSetter (Node 32) 🛛 🗕 💌			
File			
Options Flow Variables Memory Policy Specify an absolute path of directory stored prediction results Selected Directory. Browse			
Select a KNIME node name corresponding to the specified directory path KNIME nodes Ammos_AIST			
Sequence name (for Poodle_AIST and PsiPred_AIST) query			
OK Apply Cancel 🕡			

7.2.2.13-1 ResultPathSetter : Configure...

・Options タブ

Selected Directory :

以前に実行した KNIME ノードの結果を格納したディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用 するディレクトリを選択することも可能です。

KNIME nodes :

実行した KNIME ノード名を選択します。

Sequence Name : (Poodle_AIST、PsiPred_AIST のみ)

結果画面に表示するための問い合わせ配列名を選択します。 指定後、[OK] ボタンを押下します。

- 1) Ammos_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔥 Dialog - 4:110 - Ammos_AIST (Node 36) 🛛 🗕 💌	
File Options Flow Variables Memory Policy Select Output Directory Selected Directory	
C.¥ Browse	
OK Apply Cancel 🖓	

7.2.2.14-1 Ammos_AIST : Configure...

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to \text{Output} \to \text{Selected Directory}$:

Output 欄に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用 するディレクトリを選択することも可能です。

- 1) fpocket2_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔥 Dialog - 4:107 - fpocket2_AIST (Node 13) 🛛 🗖 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy
Select Output Directory
Selected Directory
C¥
OK Apply Cancel

7.2.2.15-1 fpocket_AIST : Configure...

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to \text{Output} \to \text{Selected Directory}$:

Output 欄に、実行結果を出力するディレクトリを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ディレクトリ選択画面を開き、出力に使用 するディレクトリを選択することも可能です。

実行に使用する PDB エントリフォーマットの ATOM ファイルを指定します。

- 1) PdbFileReader ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔥 Dialog - 4:102 - PdbFileReader (Node 37) 🛛 🗕 💌
File Options Flow Variables Memory Policy
Selected File:
OK Apply Cancel 🕐

7.2.2.16-1 PdbFileReader : Configure...

• Options $\not{\mathcal{P}} \not{\mathcal{T}} \rightarrow \text{PDB}$ File \rightarrow SelectedFile:

図の赤枠内に、実行に使用する PDB ファイルを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ファイル選択画面を開き、実行に使用する PDB ファイルを選択することも可能です。

実行に使用する Mol2 フォーマットファイルを指定します。

- 1) Mol2FileReader ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔥 Dialog - 4:109 - Mol2FileReader (Node 35) 🛛 🗕 🗙
File Options Flow Variables Memory Policy MOL2 File Selected File:
V Browse
OK Apply Cancel 👔

7.2.2.17-1 Mol2FileReader : Configure...

・Options タブ → MOL2 File → SelectedFile:

図の赤枠内に、実行に使用する Mol2 ファイルを入力します。

[Browse...] ボタンを押下し、ファイル選択画面を開き、実行に使用する Mol2 ファイルを選択することも可能です。 指定後、[OK] ボタンを押下します。

7.3 実行と結果参照

7.3.1 BlastForModeller_AIST \rightarrow HtmlView

BlastForModeller_AIST に接続している HtmlView では、BlastForModeller_AIST の 実行結果を、[Sequence Similarity Report] として表示します。



7.3.1-1 BlastForModeller_AIST の実行結果表示(HtmlView)

7.3.2 HitRegionSelector_AIST \rightarrow HtmlView

HitRegionSelector_AIST に接続している HtmlView では、HitRegionSelector_AIST の実行結果をテキスト表示します。

🔺 Html	View - 0:9 - HtmlView	- • ×
<u>F</u> ile		
$\langle \rangle$	> URL: file:C:/work/KNIME/prg/testData/outdir/2011-10-27/17-32-361830042473/doms	plit.log
PDB a) 1z05A	Ouery Hit Length(aa) Ouery Coverage(%) Ouery Hit Range(aa) PDB Coverage(%) PDB Hit Range(aa) Identity(%) E-value 248 354.29 497-744 246 62.12 135-380 26.77 7.10235e-19	PDB Hit Length(a 🔺

7.3.2-1 HitRegionSelector_AIST の実行結果表示(HtmlView)

7.3.3TemplateSelector_AIST → PDBjMineWeb

TemplateSelector_AISTの実行結果は、PDBjMineWebノードを実行することで、参照することができます。

この参照画面では、ヒット領域ごとに既知の立体構造情報 (PDB コード+チェイン識別 子)のラジオボタン付きリストが表示されます。

各リストの左側のラジオボタンで選択し、画面下部の Open PDBj Mine Web ボタンをクリックすることにより、ブラウザ上に、PDBJ サイトの PDBj Mine に登録 された立体構造情報が表示されます。

🔔 PDBj Mine - 0:7 - PDBjMineWeb	- 0 ×
Eile	
A similar region to an existing PDB structure was	found.
PDB code: Itw/C hit region: 384-649	
Open PDBj Mine Web	

7.3.3-1 PDBjMineWeb – PDBj Mine



7.3.3-2 PDBjMineWeb – PDBj Mine

7.3.4 Modeller_AIST \rightarrow JmolForModeller

Modeller_AIST の実行結果は、JmolForModeller ノードを実行することで参照することができます。

Results - 0:6 - JmolForModeller	
Results	
Sequence Region (aa): 1-326 Model 1 : Objective Function = 14423853 Model 2 : Objective Function = 14659855 Model 3 : Objective Function = 1478.6036 Model 4 : Objective Function = 1497.5812 Model 5 : Objective Function = 1760.7408 Sequence Region (aa): 327-381 Model 1 : Objective Function = 221.4748 Model 2 : Objective Function = 235.2573 Model 3 : Objective Function = 260.7991 Model 3 : Objective Function = 265.5612 Model 5 : Objective Function = 548.8173 Sequence Region (aa): 384-649 PDB: ali/1twfC	Jmol
Execute Jmol	6¥domain_1¥ali/usersequence.1-326

7.3.4-1 JmolForModeller – Modeller Results

まず、ラジオボタン付きのモデル番号、Objective Function のリストが表示されます(画 面左)。PDBの構造の場合、Objective Function は表示されません。ここで、参照したいモ デリング結果をラジオボタンで選択し、下部の[Execute Jmol] ボタンを押下します。 Jmol が起動すると、選択したモデリング結果の立体構造が表示されます(画面右)。この時、 表示されたモデリング結果を格納したディレクトリ名もポップアップ表示されます(画面 下)。

右下の Jmol 文字列をクリックすることで、Jmol のメニューが表示されます。 Jmol の操作方法は下記を参照してください。 Jmol : <u>http://jmol.sourceforge.net/</u>

7.3.5 AutoDock_AIST \rightarrow JmolForModeller

AutoDock_AIST の実行結果は、JmolForModeller ノードを実行することで参照することができます。



7.3.5-1 JmolForModeller – Results

まず、上画面のドッキングサイトごとの結果画面が表示されます(XYZ 座標を指定した 場合、"Site 1"のみ表示されます)。この画面から、参照したい各ドッキング画像の下部に ある"Site"ボタンをクリックすると、ラジオボタン付きの化合物 - Energy リスト画面が 開きます(左画面)。ここで、Jmol で起動したいドッキング結果をラジオボタンで選択し、 下部の[Execute Jmol] ボタンを押下します。選択したドッキング結果の立体構造(右画面)及び結果格納ディレクトリ名表示ポップアップ(下画面)が表示されます。

右下の Jmol 文字列をクリックすることで、Jmol のメニューが表示されます。 Jmol の操作方法は下記を参照してください。

Jmol : <u>http://jmol.sourceforge.net/</u>

7.3.6 InitMinMM_AIST \rightarrow JmolForModeller

InitMinMM_AIST の実行結果は、JmolForModeller ノードを実行することで参照する ことができます。

Results - 0:334 - JmolForModeller Eile Results Init Min MM: • Model : 1 • Model : 2 Model : 3 Model : 4 Model : 5 Model : 6 Model : 7 Model : 7 Model : 8 Model : 9 Model : 9 Model : 10	
Execute Jmol	Jmol W¥1/PLpdb

7.3.6-1 JmolForModeller –Results

まず、ラジオボタン付きのモデル番号、Scoreのリストが表示されます(画面左)。ここで、参照したいモデリング結果をラジオボタンで選択し、下部の[Execute Jmol]ボタンを押下します。Jmolが起動すると、選択した結果の立体構造が表示されます(画面右)。この時、表示された結果を格納したディレクトリ名もポップアップ表示されます(画面下)。

右下の Jmol 文字列をクリックすることで、Jmol のメニューが表示されます。 Jmol の操作方法は下記を参照してください。

Jmol : <u>http://jmol.sourceforge.net/</u>

7.3.7 MoltrecMD_AIST \rightarrow HtmlView

MoltrecMD_AIST の実行結果は、HtmlView ノードを実行することで参照することができます。

MD 計算のスコアがモデルごとに表示されます。

L Html View - 0:333 - HtmlView	_ D X
File	
C > URL: file:C:/2012-09-24/18-20-27-1290283014/delta-summary	
URL: file:C:/2012-09-24/18-20-27-1290283014/delta-summary 1 0.00747419354837002 2 0.0324193548387243 3 0.0357645161290279	

7.3.7-1 HtmlView – Results

7.3.8 ResultPathSetter → JmolForModeller、HtmlView

ResultPathSetter の実行結果は、JmolForModeller ノードもしくは HtmlView ノード を実行することで参照することができます。ResultPathSetter で指定した KNIME ノー ドに対応した結果画面が表示されます(7.3.1~7.3.7 と同様の結果画面)。

7.3.9 fpocket2_AIST \rightarrow JmolForModeller

fpocket2_AIST の実行結果は、JmolForModeller ノードを実行することで参照することができます。





<u></u>	_		
Pocket	X-coordinate	Y-coordinate	Z-coordinate
SOO	6.421	37.118	-8.423
SO1	-3.060	33.766	3.562
\$02	-1.532	47.385	-3.714
SO 3	9.036	29.645	7.775
\$04	-0.178	24.018	-0.620
\$05	5.684	44.893	-0.247
SO6	-2.260	40.194	10.578
\$07	-4.568	46.258	-18.986
SO8	-10.532	23.535	4.032
SO 9	-5.248	20.618	16.355

7.3.9-1 JmolForModeller –Results

まず、ラジオボタン付きのリストが表示されます(画面上左)。ここで、下部の[Execute Jmol]ボタンを押下します。Jmolが起動すると、選択した結果の立体構造が表示されます (画面上右)。この時、立体構造のポケットサイトの座標画面(画面下左)、表示された結果を 格納したディレクトリ名もポップアップ表示されます(画面下右)。

右下の Jmol 文字列をクリックすることで、Jmol のメニューが表示されます。 Jmol の操作方法は下記を参照してください。

Jmol : <u>http://jmol.sourceforge.net/</u>

SPARQL ノードは、SPARQL を実行するノードであり、2 つの種類があります。

8.1 ノード

8.1.1ノード一覧

以下に2種類のSPARQLノード、及び関連するノード2種類を示します。

No	名前	アイコン	設	説明
			定	
1	Sparql_AIST	T2IA Interne	要	AIST 公開のエン
		Sparqi_AlS1		ドポイントに対
		197 >		し、簡単なキーワ
				ード指定で
		Node 1		SPARQL を実行
				します。
2	Sparql_AIST_Adv	Spargl AIST Adv	要	公開されたエンド
				ポイントに対し、
		14		SPARQL 検索を
		Node 0		実行します。
		Node 2		
3	SequenceSelector	Sequence Selector		SPARQL の実行
				結果をポップアッ
				プ表示し、指定し
				た配列ファイルを
		Node 3		生成します。
4	HtmlView	HtmlView		SPARQL の実行
				結果を表示しま
				す。
		Node 4		

8.1.1-1 SPARQL ノード一覧

8.1.2.1 実行環境設定

- 1) Sparql_AIST ノードを右クリックし、"Configure..."を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🔺 Dialog - 4:104 - Sparql_AIST (Node 30) 🛛 🗖 🔜
File
Options Advanced Flow Variables Memory Policy
Selected Directory
C¥ Browse
SPARQL endpoints
SEVENS endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/
FRNAdb endpoint: http://tgrdf.medals.in/openrdf-sesame/repositories/4
UNIPROT endpoint: http://tgrdf.medals.jp/openrdf-sesame/repositories/i
PDB endpoint: http://pdb.bio2rdf.org/sparql
KEGG - pathway endpoint: http://keggbio2rdf.org/sparql
L SPAPOL search conditions
SPARQL search conditions
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT)
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 28
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway)
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway)
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 800 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod © FASTA Tab-delimited
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format Image: Pathway Image: Pathway
SPARQL search conditions Taxon (not available for UNIPROT) Keyword Minimum sequence length 300 Maximum sequence length 600 Resolution (for PDB) 2.8 Pathway (for KEGG-pathway) Output format Output format ('FASTA' for 'SequenceSelector nod FASTA Tab-delimited

8.1.2.1-1 Sparql_AIST : Configure...


8.1.2.1-2 Sparql_AIST : Configure...

・Options タブ \rightarrow Output Directory:

図の赤枠内に、SPARQLの実行結果を格納するディレクトリを指定します。

• Options $\not{\sigma} \vec{\mathcal{I}} \rightarrow \mathbf{SPARQL}$ Endpoints:

図の青枠内から、使用する SPARQL endpoint を指定・入力します。検索対 象は SEVENS、fRNAdb、UNIPROT、PDB、KEGG-pathway となります。 複数の endpoint の指定が可能です。

• Options $\mathscr{P} \mathcal{I} \to \mathbf{SPARQL}$ search conditions:

図の緑枠内に、SPARQLの検索条件を入力します。検索条件には、1)生物 種検索(Taxon、UNIPROT、KEGG-pathway以外の endpoint で利用可)、2) キーワード検索(KEGG-pathway 以外の endpoint で利用可)、3)配列長検索(最 大配列長、最小配列長、KEGG-pathway 以外の endpoint で利用可)、4)解像 度(Resolution、PDBの endpoint のみ利用可)、5)パスウェイ(Pathway、 KEGG-pathway のみ利用可)があります。

• Options $\not{\sigma} \not{\tau} \rightarrow$ Output format:

図の橙枠内から、FASTA あるいは Tab-limited のどちらかを選択します。 FASTA を選択した場合、SPARQL 実行結果が FASTA フォーマットファイル として生成され、Tab-limited を選択した場合はタブ区切りのテキストファイ ルとして生成されます。SequenceSelector ノードを利用して配列選択を行う 場合は FASTA を選択してください。

・Advanced タブ:

SPARQL 文を入力します。もしこのテキストフィールドに SPARQL 文が入力 された場合、上記で設定した"SPARQL search conditions"は無視されます。 指定後、[OK] ボタンを押下します。 8.1.3.1 実行環境設定

- 1) Sparql_AIST_Adv ノードを右クリックし、"Configure..." を選択します。
- 2) ポップアップで別画面表示されるダイアログ画面で設定します。

🛆 Dialog - 4:128 - Sparql_AIST_Adv 况 = 🗖 🗙
File
Options Flow Variables Memory Policy Output Directory Selected Directory
C:¥ Browse
SPARQL endpoint
r SPARQL
Input SPARQL Query
SELECT * WHERE
{ 2e 2n 2n
} LIMIT 100
OK Apply Cancel

8.1.3.1-1 Sparql_AIST_Adv : Configure...

・Options タブ \rightarrow Output Directory:

図の赤枠内に、SPARQLの実行結果を格納するディレクトリを指定します。

- Options タブ → SPARQL Endpoints:
 図の青枠内から、使用する SPARQL endpoint を入力します。
- Options タブ → Input SPARQL Query:
 図の緑枠内に、SPARQL 文を入力します。
 指定後、[OK] ボタンを押下します。

8.1.4 SequenceSelector $\mathcal{I} - \mathcal{F}$

8.1.4.1 実行結果

SequenceSelector ノードのアイコンを右クリックして Execute を選択するすると、 SequenceSelector ノードが実行され、SPARQL の実行結果が表示されます。この ノードは、Sparql_AIST ノードにおいて FASTA フォーマットでの SPARQL 検索 を行った場合に利用可能となります。

Select a row, then click SUBINT button. Submit Cancel ID Description Sequence CBRC-HSAP-02-0037 Adrenergic receptors MDHODPYSY0ATAIAAATILLFTFICNALVLAI. CBRC-HSAP-04-0004 Adrenergic receptors MDGPALXAALXWAAAGPNASGACERGSGCWA CBRC-HSAP-04-0014 Adrenergic receptors MGSPALXAALXWAAAGPNASGACERGSGCWA CBRC-HSAP-05-0044 Adrenergic receptors MMVPLDTGHTNSEARAPURGELNNANT IGPNOT CBRC-HSAP-05-0018 Adrenergic receptors MVFLSGNASDSSNCTOPPAPVINISKALLEXVILG CBRC-HSAP-08-0018 Adrenergic receptors MVFLSGNASDSSNCTOPPAPVINISKALLEXVILG CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGAGVLVLCASEPCNLSSAAPLPDCAATAARLL CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MGAGVLVLCASEPCNLSSAAPLPDCAATAARLL CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MGAGVLVLCASEPCNLSSAAPLPDCAATAARLL	• ×		_	SPARQL Results
ID Description Sequence CBRC-HSAP-02-0037 Adrenergic receptors MDHODPYSYOATAAAAATTILLFTIFCNALVILAX CBRC-HSAP-04-0004 Adrenergic receptors MGOPCNG3AFLLAPNOSHAPDHD/TOERDEV CBRC-HSAP-05-0044 Adrenergic receptors MMCPDLOTENDEV CBRC-HSAP-05-0047 Adrenergic receptors MMVPLSCNASDSNOTOPPAPVINISKALLEVILC CBRC-HSAP-08-0018 Adrenergic receptors MVFLSCNASDSSNOTOPPAPVINISKALLEVILC CBRC-HSAP-10-0036 Adrenergic receptors MGGVU/LCASEPCNLSSAAPLPDGCATAAPTLS CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGGVU/LCASEPCNLSSAAPLPDGCATAAPTLS CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MGGVU/LCASEPCNLSSAAPLPDGCATAAPTLS CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MTFRDLLSVSFEGPRPDSSAGGSSAGGGGGS		Cancel	Submit	Select a row, then click SUBMIT button.
CBRC-HSAP-02-0037 Adrenergic receptors MOHQDP/SVQATAAIAATTELLET/TECNALULA CBRC-HSAP-04-0004 Adrenergic receptors MASPALAAAAUAVAACGPUTCERSGGVAN CBRC-HSAP-05-0044 Adrenergic receptors MGSPALAAAUAVAACGPUTCERDEV CBRC-HSAP-05-0044 Adrenergic receptors MGPDI/SUATAAUAVAACGPUTCERDEV CBRC-HSAP-05-0044 Adrenergic receptors MMPDLDTCERDEV CBRC-HSAP-05-0047 Adrenergic receptors MMPDLDTCHTNESEAPHINGELKNANFTGPNOT CBRC-HSAP-06-0018 Adrenergic receptors MVFLSGNASDSSINCTOPPAP/WIJSKALLCVILC CBRC-HSAP-10-0033 Adrenergic receptors MGSLOPDACMASWNOTEAPGGRAFTPSLC CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGSLOPDACMASWNOTEAPGGRAFTPSLC CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGGRU/LCASEFEONLSARPLPDCAATAREL CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MTRDLLSVSFEOPRPDSSAGGSSAGGGGGS		Sequence	Description	ID
CBRC-HSAP-04-0004 Adrenergic receptors MASPALAAALAVAAAGCPNASGAGERGSGGVM CBRC-HSAP-05-0044 Adrenergic receptors MGCPCNGSAFLLAPNESHAPDHDVTCERDEV CBRC-HSAP-05-0047 Adrenergic receptors MNFDLDTGHNTSAPAHWGELKNANFTGPNOT CBRC-HSAP-08-0018 Adrenergic receptors MVFLSGNASDSBNOT0PPAPVINISKALLEVILC CBRC-HSAP-08-0018 Adrenergic receptors MVFLSGNASDSBNOT0PPAPVINISKALLEVILC CBRC-HSAP-10-0038 Adrenergic receptors MGSLDPAGNASWNOTEPPAPVINISKALLEVILC CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGGAULU.CASEPCNLSSSAPLPDCAATARLL CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MGAGVLV.CASEPCNLSSSAPLPDCAATARLL	WLTSRSLR	MDHQDPYSVQATAAIAAAITFLILFTIFGNALVILAVLTSR:	Adrenergic receptors	CBRC-HSAP-02-0037
CBRC-HSAP-05-0044 Adrenergic receptors MGOPONGSAFLLAPNOSHAPDHDVTGEPDDY CBRC-HSAP-05-0047 Adrenergic receptors MNPDLDTGHNTSAPAHunGELKNANFTGPNOT CBRC-HSAP-08-0018 Adrenergic receptors MVFLSGNASDSSNCTOPPAPVINISKALLEXUL CBRC-HSAP-08-0018 Adrenergic receptors MGSLQPDACIASWINGTEAPGGGARATPYSLQ CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGSLQPDACIASWINGTEAPGGGARATPYSLQ CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGAGVLLGASEFGNLSSAAFLPDGAATARALL CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MTRDLLSVSFEGPRPDSSAGGSSAGGGGGS	NASGASW	MASPALAAALAVAAAAGPNASGAGERGSGGVANASGA	Adrenergic receptors	CBRC-HSAP-04-0004
CBRC-HSAP-05-0047 Adrenergic receptors MNPELDTGHNTSAPAHWGELKNANFTGPNDT CBRC-HSAP-05-0047 Adrenergic receptors MVFLSGKADSDSSNCTDPAPAVNISKALL CWLC CBRC-HSAP-10-0036 Adrenergic receptors MGSLQPDAGNASWINGTEAPGGGARATPYSLQ CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGAGVLVLGASEPGNLSSAAPLPDGAATARLL CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGAGVLVLGASEPGNLSSAAPLPDGAATARLL CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MGAGVLVLGASEPGNLSSAAPLPDGAATARLL	VWVVGMGI	MGQPGNGSAFLLAPNGSHAPDHDVTQERDEVWVVG	Adrenergic receptors	CBRC-HSAP-05-0044
LCBRC-HSAP-08-0018 Adrenergic receptors MVFLSGNASDSSNCTOPPAPVNISKALLCVIC CBRC-HSAP-10-0036 Adrenergic receptors MGSLOPAGNASSMCSTAPPGGGARATPYSLO CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGAGVLVLGASEPGNLSSAPLPDGAATAARLL CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MITRDLLSVSFEGPRPDSSAGGSSAGGGGGS	TSSNSTLP	MNPDLDTGHNTSAPAHWGELKNANFTGPNQTSSNS	Adrenergic receptors	CBRC-HSAP-05-0047
CBRC-HSAP-10-0036 Adrenergic receptors MGSLQPDAGNASWNOTEAPGGGARATPYSLQ CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGAGVLUCASEPEONLSSAPLPDCAATAARLL CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MGTAGVLUCASEPEONLSSAPLPDCAATAARLL	GGLILFGVL	MVFLSGNASDSSNCTQPPAPVNISKAILLGVILGGLILF	Adrenergic receptors	CBRC-HSAP-08-0018
CBRC-HSAP-10-0037 Adrenergic receptors MGAGYLVLGASEPGNLSSAAPLPDGAATAARLL CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MTFRDLLSVSFEGPRPDSSAGGSSAGGGGGS	QVTLTLVCL	MGSLQPDAGNASWNGTEAPGGGARATPYSLQVTLTL	Adrenergic receptors	CBRC-HSAP-10-0036
CBRC-HSAP-20-0001 Adrenergic receptors MTFRDLLSVSFEGPRPDSSAGGSSAGGGGGS	LVPASPPA	MGAGVLVLGASEPGNLSSAAPLPDGAATAARLLVPASE	Adrenergic receptors	CBRC-HSAP-10-0037
	SAGGAAPS	MTFRDLLSVSFEGPRPDSSAGGSSAGGGGGSAGGAA	Adrenergic receptors	CBRC-HSAP-20-0001

8.1.4.1-1 SequenceSelector 実行結果

一つの配列情報を選択することが可能であり、Submit ボタンをクリックすると SequenceSelector ノードの out port に選択した配列の FASTA フォーマットファ イルが設定されます。この out port を配列解析ノードの in port に接続することに より、各種配列解析を行うことが可能です。

8.1.5.1 実行結果

HtmlView ノードのアイコンを右クリックして Execute を選択するすると、

HtmlView ノードが実行されます。このノードは、Sparql_AIST、

Sparql_AIST_Adv の各ノードにおいて行った SPARQL 検索の結果を表示するこ とができます。



8.1.5.1-1 HtmlView 実行結果

9 付録

9.1 付録 A: LSDBCrossSearch

LSDBCrossSearch ノードが実行完了後、緑色表示の場合に、生命科学データベース横断検 索を実行することができます。

生命科学データベース横断検索サイトは、文部科学省 統合データベースプロジェクトにお いて開発されました。

LSDBCrossSearch ノードを選択し、右クリックを押下、表示メニューから"View: name of first view"を選択すると、LSABCrossSearch ノードの View 画面が表示されます。

🛓 name of first view - 0:4 - LSDBCrossSearch (Node 4)	×
Eile	
FASTA Header Lists	
1: >gi 334185880 ref NM_001203122.1 Arabidopsis thaliana RIO kinase 2: >gi 21406208 gb AY087471.1 Arabidopsis thaliana At3g03070 gene, 3: >gi 28416578 gb BT004574.1 Arabidopsis thaliana At3g03070 gene, 4: >gi 1358228 gb AF325039.2 Arabidopsis thaliana AT3g03070 (AT3g0 5: >gi 110735932 dbj AK227975.1 Arabidopsis thaliana mRNA for hypot	
۲	
LSDB Cross Search	
Search Words : LSDB Cross Search	
How to input search keywords	
AND:->'space' e.g. network socket	
OR -> ' ' eg. network socket	
XOR ->!' eg. network ! socket	
Wild card: -> '*' e.g. inter*, *sphere	
Priority order: ' ' > ' '(space), '!'	

9.1-1 LSDBCrossSearch View 画面

FASTA Header Lists には、LSDBCrossSearch ノードの入力に使用した FASTA ファイ ルのヘッダ行が表示されます。

LSDB Cross Search のテキストボックスには、横断検索を実行するためのキーワードを入 力します。 キーワードの複合検索を行う場合は、以下の検索記号を使用します。

- ・AND 検索 : スペース""
- ・OR 検索 :パイプ"丨"
- ・排他的論理和検索 :エクスクラメーションマーク"!"
- ・ワイルドカード検索 :アスタリスク"*"

なお、検索では OR 検索が優先されます。

キーワードを入力後、LSDB Cross Search ボタンをクリックすると、生命科学データベー ス横断検索の Web ブラウザが開き、横断検索が実行されます。



詳細は、下記の生命科学データベース横断検索サイトより HELP を参照してください。 生命科学データベース横断検索サイト:<u>http://biosciencedbc.jp/dbsearch/</u> ご質問やご意見は下記のメールアドレスにお願いいたします。 workflow@molprof.jp

産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター 情報統合班では、 利用者のご要望を積極的に取り入れ、より良いシステムにしていく計画です。

> 産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター 情報統合班 http://togo.medals.jp

〒135-0064 東京都江東区青海 2-4-7 産総研 臨海副都心センター別館(バイオ・IT 融合研究棟)