VLP结构：VIPERdb数据库 350+个icosahedral virus capsid structures二十面体病毒衣壳结构

（[VIPERdb2 : an enhanced and web API enabled relational database for structural virology](https://sci-hub.tw/10.1093/nar/gkn840)病毒壳体结构和计算分析中产生的数据的描述和比较）

怎么确定VLP结构：x射线晶体学或低温电子显微镜（文章如上）

局限：1，但结晶结构可能不代表在溶解条件下的蛋白质。

2，仅限于静态构象，没有给出生物系统动力学的详细信息

计算方法在大多数情况下是对MPI结构分析方法的补充，并且结合起来提供了一种生成假设、指导实验和帮助数据解释的方法

新

生物信息学和三维结构预测（<https://sci-hub.tw/10.1155/2010/218590>预测t细胞，b细胞的免疫表位等等，生信在免疫学的应用review）

计算技术被应用在生物研究和药物发现

VLPs的计算机建模主要集中在VLPs的自组装动力学（Ding et al.，2010；Pankavich and Ortoleva，2012；Roldao et al.，2012），旨在最小化加工过程中的蛋白质聚集。

计算建模的问题：计算量大

Multiscale models应用

计算机对整个病毒的大分子结构的电子研究<https://sci-hub.tw/10.1016/j.jmgm.2012.06.009>