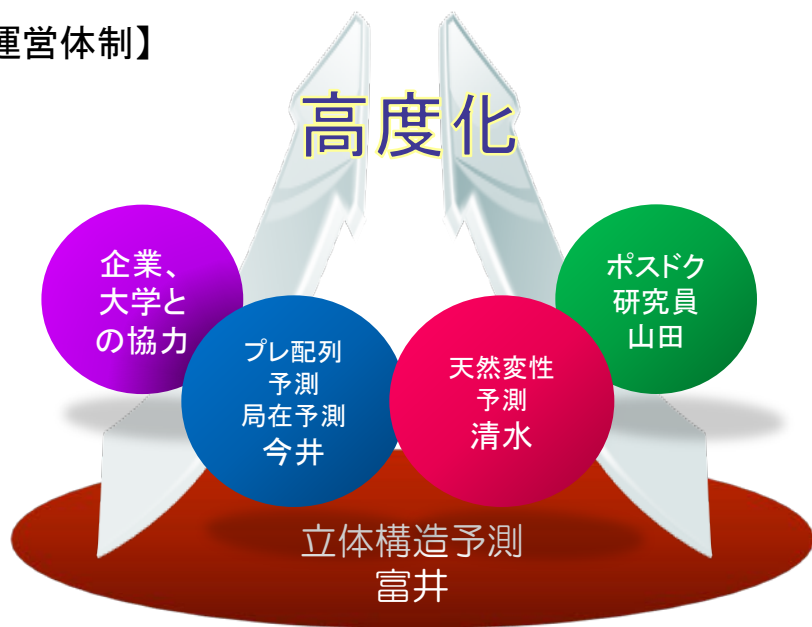


【課題概要】

タンパク質ドメインの効率的な発見・単離・解析のために、これまでに開発したタンパク質立体構造及び相互作用部位予測/推定技術やプレ配列予測技術等のインフォマティクス技術に基づき、立体構造解析研究者と共同研究を行う。またインフォマティクス技術の高度化を図るため、1)立体構造予測手法の高度化、2)プレ配列予測手法の高度化、3)天然変性領域予測法の高度化などの研究開発を行う。そして、こうした研究開発の成果を用いた、より一層の構造解析支援体制の確立を目的とする。

【運営体制】



【連絡先】 産業技術総合研究所(AIST)  
生命情報工学研究センター(CBRC)  
富井健太郎、03-3599-8080  
cbrc2-proteinbi-ml@aist.go.jp

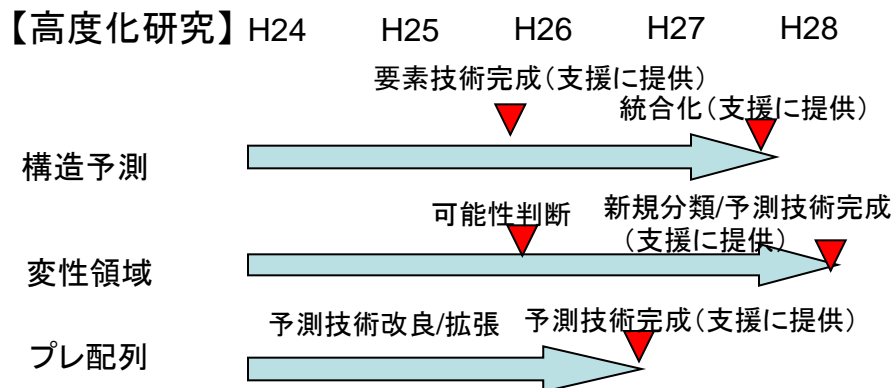
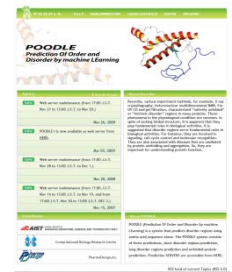
【支援に供する技術】

立体構造予測:  
FORTE (<http://www.cbrc.jp/forte/>)

低分子化合物相互作用:  
PoSSuM (<http://possum.cbrc.jp/PoSSuM>)  
**Pocket Similarity Search using  
Multiple-Sketches**

天然変性領域予測:  
Poodle (<http://mbs.cbrc.jp/poodle/>)  
**Prediction Of Order and Disorder  
by machine LEarning**

プレ配列予測(ミトコンドリア、小胞体、葉緑体)  
細胞内局在部位予測

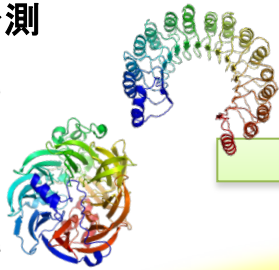


# 【これまでの研究実績と創薬等PFにおける事業内容】

## ● 立体構造予測



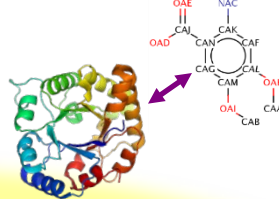
<http://www.cbrc.jp/forte/>



## ● 低分子化合物結合(候補)部位DB



<http://possum.cbrc.jp/PoSSuM/>



## ● 天然変性領域予測



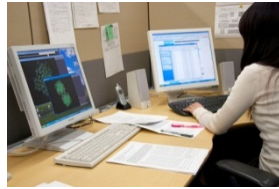
3種類の予測モジュールによるフレキシブルな予測



3種類のモジュールを、目的に応じて組み合わせることによって、個々のユーザーの要求に対してより効果的な予測が可能。



設備の充実



協力連携体制  
(企業、大学等)



会場での研究

## ● プレ配列予測精度の評価

Methods	Precision (精度)	Recall (再現率)	MCC
Our Method	0.81	0.72	0.74
Predotar	0.70	0.79	0.70
TargetP	0.61	0.81	0.65

プレ配列を持つ  
ミトコンドリア  
タンパク質の予測

$Precision = TP / (TP + FP)$   
 $Recall = TP / (TP + FN)$   
学習データと類似性のないテストデータ(配列類似度25%以下)を用いて評価

$$MCC = \frac{TP \times TN - FP \times FN}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}}$$

## ● ミトコンドリアβ型外膜タンパク質予測精度の評価

Methods	Precision (精度)	Recall (再現率)	MCC
Our Method	0.96	0.79	0.87
BOMP	0.32	0.26	0.26
TMB-Hunt	0.16	0.35	0.21

$Precision = TP / (TP + FP)$   
 $Recall = TP / (TP + FN)$

$$MCC = \frac{TP \times TN - FP \times FN}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}}$$

Cell, 135, 1158-1159 (2008)  
BMC Genomics, 12:79 (2011)