

タンパク質の立体構造予測

[技術の概要]

- タンパク質の配列から、立体構造を予測します。
- あらゆるレベルに応じた対応をします。
 - モデリング可能なもの
高精度モデリングを行います。
 - モデリングが難しいもの
技術の粋をこらして鑄型を探します。
人工鑄型も作成します。
 - 構造がないもの
天然変性領域を予測します。
- 支援に供する設備名など。
 - 832コアを有するクラスタマシン
 - 天然変性領域予測:DICHOT
- CASP(構造予測の世界大会)に参加して、技術向上に努めています。

[技術の利用例]

- 立体構造は実験アイデアの源です。
 - 機能を類推したい。
 - 相互作用を検討したい。
 - リガンドを探索したい。
 - ミュータント実験をしたい。
 - 構造ドメインを知りたい。
- 全て、立体構造があってこそ！

連絡先

[所属] 名古屋大学情報科学研究科

[名前] 太田元規

[E-mail] mota@is.nagoya-u.ac.jp

プロテオームのアノテーション

[技術の概要]

- プロテオーム規模のデータに対し様々なアノテーションを提供します。
 - 配列ホモロジー
 - 構造ドメインアサインメント
 - 天然変性予測
 - ファミリー分類
- 支援に供する設備名など
 - プロテオームデータベース:GTOP
 - 天然変性領域予測:DICHOT
 - 天然変性データベース:IDEAL
- 比較ゲノム研究の経験を生かし、生物種特有のタンパク質情報と機能情報を提供します。

[技術の利用例]

- ゲノムを決定した。
- 大量のプロテオーム情報がある。
- 大量の発現情報がある。

これら大規模データを解析して、生物種特有の現象をプロテオームの観点から探ります。

有害菌特有のタンパク質が見つければ
有力な薬剤ターゲットになります。

連絡先

[所属] 前橋工科大学工学部

[名前] 福地佐斗志

[E-mail] sfukuchi@maebashi-it.ac.jp

配列解析によるプロテオミクス解析技術

[技術の概要]



- Caspase-3の基質とその切断部位を高精度に予測する手法。(ScreenCap3)
- ミトコンドリアターゲティング配列とその切断部位を高精度に予測する手法。(MitoFates)

既存手法に比べ、大規模データに対しても少ない擬陽性での予測が可能のため、caspase-3の基質やミトコンドリアタンパク質のスクリーニングの支援ツールとして最適。目的に応じ、創薬標的や疾患関連遺伝子の絞り込みにも利用可能。

(ScreenCap3サーバー)

<http://scap.cbrc.jp/ScreenCap3/>

(MitoFatesサーバー)

<http://mitf.cbrc.jp/MitoFates/>

[技術の利用例]

- Caspase-3が関わる細胞制御機構(アポトーシスなど)における新規因子のスクリーニング支援
- ミトコンドリア関連疾患に関わる新規ミトコンドリア局在遺伝子のスクリーニング支援
- 高精度の局在化シグナル配列領域の予測によるN末端の決定の支援

連絡先

[所属] 国立研究開発法人
産業技術総合研究所

[名前] 富井健太郎

[E-mail] k-tomii@aist.go.jp

タンパク質立体構造予測／類縁関係検索技術

[技術の概要]

FORTE a profile-profile comparison tool for protein fold recognition. **DELTA-FORTE**

- プロファイル比較による高感度・高精度なアラインメント技術 (FORTE、DELTA-FORTE)
- 高感度な遠縁類似配列検索に適したアミノ酸置換行列 (MIQS)

立体構造予測や機能解析などに重要となる高精度なアラインメントを提供可能な技術。近年、急激に増大する配列データを最大限利用し、遠縁タンパク質や構造類似タンパク質を高感度で検索可能。一般向け(非営利目的)に、以下のwebサーバを用意している。

(プロファイル比較による類似性検索)

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

(MIQSを用いた配列検索システム)

<http://csas.cbrc.jp/Ssearch/>

[技術の利用例]

- 構造未知タンパク質のアミノ酸配列を問い合わせとして、構造既知データベース中の類似タンパク質を検索。また高精度なアラインメントを計算 (例: 比較モデリングなどに利用可能)。
- BLASTなどの検索では見つからない遠縁の類縁タンパク質を高感度に検索可能 (例: 近縁種のゲノムがないなど、類似配列を見つけにくい生物種の遺伝子などの解析に有効)。

連絡先

[所属] 国立研究開発法人
産業技術総合研究所

[名前] 富井健太郎

[E-mail] k-tomii@aist.go.jp

有用データベースのカタログによる タンパク質解析支援

[技術の概要]

構造生命科学のデータベースとタンパク質の計算機解析ツールを収集したカタログを公開しています。

<http://p4d-info.nig.ac.jp/useful.html>

実施したい解析や検索したい内容でカタログを検索することで、必要なツールやデータベースにたどりつくことができます。



[技術の利用例]

アラインメントや構造の重ね合わせなどの基本的ツールから、立体構造予測ツールや相互作用構造の予測ツールなどがあります。

データベースには、今までのナショナルプロジェクトの成果をはじめ、構造ゲノミクスの成果なども含まれています。



連絡先

[所属] 国立遺伝学研究所
PDIS情報拠点担当部

[名前] 五條堀 孝

[E-mail] p4d-info@nig.ac.jp

VaProSによるタンパク質総合情報取得支援

[技術の概要]

研究対象タンパク質の既知情報(ゲノム情報を含む)を一手に収集し、関連づけされた情報を自動提供します。

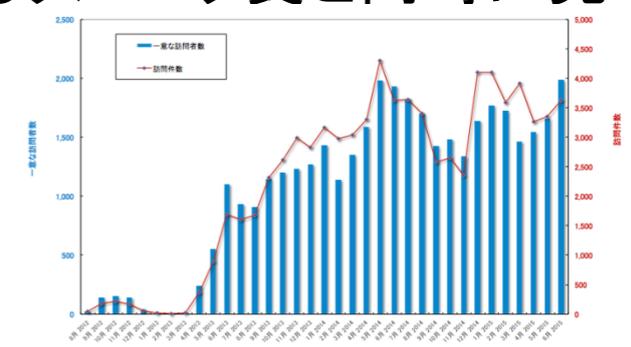
<http://p4d-info.nig.ac.jp/>

人の手を介さずに、多数のデータベースをユーザーが簡単に同時検索し、関連情報を自動的に取得する支援を実現しています。

The screenshot shows the VaProS web interface. At the top, there is an 'EXECUTION HISTORY' tab. Below it, the VaProS logo and navigation links (HOME, ABOUT, TUTORIAL) are visible. The main search area has two tabs: 'Keyword' and 'Sequence'. Under 'Keyword', there is a search input field with the text 'Keywords' and a 'Search' button. Below the input field, a query example is provided: 'Query: gene/protein, compound or disease name, UniProtKB ID/AC, EntrezGene ID, EMBL, Ensembl, Ensembl_TRS, Ensembl_PRO, OMIM ID, ... (e.g. beta galactosidase, galactosemia, BGAL_HUMAN, ENSP00000308920, M27507, AC112211)'. To the right of the search area is a 3D protein structure visualization. At the bottom, there is a brief description of VaProS: 'VaProS: VARIation effect on PROtein Structure and function. VaProS, VARIation effect on PROtein Structure and function, is a new data cloud for Structural Life Science and is the core technology to lead the collaboration between the discipline in Structural Biology and the whole Life Sciences. Led by the initiative of National Institute of Genetics, VaProS has been developed around the Integrated Structural Biology Database at Institute for Protein Research in Osaka University, together with the selected outcomes from Protein 3000 Project, Targeted Proteins Research Program, Genome Network Project and Cell Innovation Project. more...'

[技術の利用例]

- ・疾患名から原因タンパク質(候補)を検索。そのタンパク質と相互作用する全タンパク質も同時検索。
- ・タンパク質名から、立体構造既知部分を検索。相互作用する低分子も同時検索。
- ・遺伝子名からコードするタンパク質と同時に発現するタンパク質を検索。そのタンパク質の関連キーワードを自動解析。



連絡先

[所属] 国立遺伝学研究所
PDIS情報拠点担当部

[名前] 五條堀 孝

[E-mail] p4d-info@nig.ac.jp

S-VAR: タンパク質1残基変異の影響を推定する

[技術の概要]

S-VARは、タンパク質コード領域に見られる変異が、タンパク質にどのような影響を与えるのかを推定します。

<http://p4d-info.nig.ac.jp/s-var/>

アミノ酸配列と、変異を入力することで、その変異の影響をさまざまな手法で自動推定し、すべての結果を表示します。

Enter your sequence variations * Mandatory fields

Amino acid sequence(FASTA format) *

```
>Sample
MALWMRLLPLLALLALWGPDPAAAFVNQHLCGSHLVEALYLVCGERGFFYTPKTR
REAEDLQVGGQVELGGGPGAGSLQPLALEGSLQKRGIVEQCCTSICSLYQLENYCN
```

[\[Sample\]](#)

Variations *

```
R6H
A15T
G84R
Y103C
```

[\[Sample1\]](#) [\[Sample2\]](#)

Prediction tools *

PolyPhen2 SIFT PROVEAN PANTHER

E-mail

Optional, but strongly recommended.

[技術の利用例]

既存の予測方法 (PolyPhen2, SIFT, PROVEAN, PANTHER) を組み合わせ、それらを統合した結果を回答します。すでに多くのユーザーが利用しています。

Prediction results

[About score](#)

JobID: 150726204318210_xi

[Download Results](#)

Variations	Prediction tools			
	PolyPhen2	SIFT	PROVEAN	PANTHER
R6H	benign (0.004)	TOLERATED (0.36)	neutral (-1.682)	neutral (-2.08906)
A15T	benign (0.034)	TOLERATED (0.16)	neutral (-2.069)	neutral (-1.28185)
G84R	probably damaging (0.973)	TOLERATED (0.35)	neutral (-1.028)	neutral (-1.13512)
Y103C	probably damaging (1.0)	DELETERIOUS (0.0)	Deleterious (-4.991)	Deleterious (-4.56464)

Your query sequence

```
>Sample
MALWMRLLPLLALLALWGPDPAAAFVNQHLCGSHLVEALYLVCGERGFFYTPKTR
REAEDLQVGGQVELGGGPGAGSLQPLALEGSLQKRGIVEQCCTSICSLYQLENYCN
```

連絡先

[所属] 国立遺伝学研究所
PDIS情報拠点担当部

[名前] 五條堀 孝

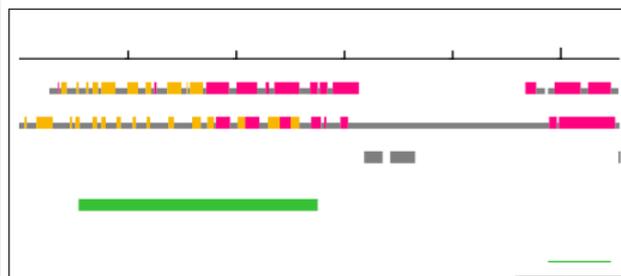
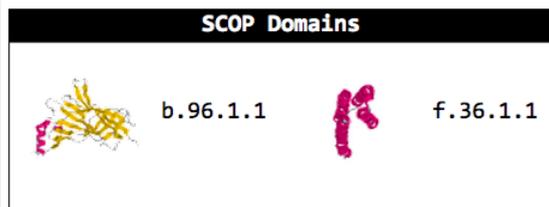
[E-mail] p4d-info@nig.ac.jp

ゲノムから立体構造情報へ

[技術の概要]

hGtoP

http://p4d-info.nig.ac.jp/hGTOP_db/



root	Eukaryota	Metazoa	Chordata	Mammalia	Rodentia
					view Rodentia 108 hits
					view Muridae 108 hits
				view Mus 55 hits	
				view Rattus 53 hits	

-Detail-	
genus/Mus	
28 hits	
ID	Name
B2RX82	"Cholinergic nicotinic,"
B7ZB07	"Neuronal receptor"
D3YXW7	"Protein (Fragment)"
E9QLC0	"5-hydroxytryptamine 3A"
F8VQK4	"Acetylcholine subunit"
G3X8Z7	"MCG5735 musculus"
O78174	"Neuronal receptor"
P02716	"Acetylcholine subunit"
P04756	"Acetylcholine subunit"
P04760	"Acetylcholine subunit"
P04760-2	"Isoform of"
P09690	"Acetylcholine subunit"
P20782	"Acetylcholine subunit"
P23979	"5-hydroxytryptamine 3A"
P23979-2	"Isoform of"
P49582	"Neuronal receptor"
Q0VBK4	"Cholinergic nicotinic,"
Q2MKAS	"Neuronal receptor"
Q2MKAS-2	"Isoform of"
Q55XG9	"Acetylcholine subunit"
Q88MN3	"Neuronal receptor"
Q88MN3-2	"Isoform of"
Q8R493	"Neuronal receptor"
Q8R4G9	"Neuronal receptor"
Q91X60	"Neuronal receptor"
Q9ERK7	"Neuronal receptor"
Q93HJ5	"5-hydroxytryptamine 3B"
Q9R0W9	"Neuronal receptor"

ヒト、マウス蛋白質の

- 構造
- モデリング可能性
- モデル生物170種におけるホモログのサマリーを出力

[技術の利用例]

- ヒトの構造未決定蛋白質は？
- 現時点でモデリング不可能なものは？
- 各タンパク質の構造的な特徴(二次構造・天然変性領域・膜貫通部位など)は？

これらの問いに答え、ターゲット蛋白質選びの指針に。

連絡先

[所属] 大阪大学蛋白質研究所

[名前] 金城 玲

[E-mail] akinjo@protein.osaka-u.ac.jp

構造生命科学データクラウドVaProSの活用支援

[技術の概要]

構造生命科学データクラウドVaProSの活用

VaProSは <http://p4d-info.nig.ac.jp/vapros/>にて公開されているツールで、タンパク質・遺伝子・疾患名を入力すると、以下の情報を一度に出力します。研究計画を立てる際および実験データの解釈をする際に役立ちます。

- ① 遺伝子のゲノム中の位置
- ② 遺伝子とタンパク質構造・機能との関係
- ③ タンパク質と各種化合物の相互作用
- ④ タンパク質と天然リガンドとの相互作用
- ⑤ 遺伝子の発現
- ⑥ 遺伝子の共発現
- ⑦ 遺伝子と化合物の関係
- ⑧ 遺伝子と他の遺伝子の関係
- ⑨ 遺伝子やタンパク質と疾患との関係
- ⑩ タンパク質の変異と疾患との関係
- ⑪ 遺伝子やタンパク質に関連する語句

VaProSに興味をお持ちの方に使い方を説明します。

[技術の利用例]

□ VaProSチュートリアルをご参照ください

<http://p4d-info.nig.ac.jp/dcwiki/index.php/>

1. 構造解析を試みるタンパク質を結晶化する際に役立つ情報を抽出する。
3. インスリン受容体のリガンド結合と病気に関連する残基を調べる。



連絡先

[所属] 東京大学大学院農学生命科学研究科

[名前] 永田宏次

[E-mail] aknagata@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp