

開発中の主なデータベースとツール

九州工業大学 情報工学部 生命情報工学科 〒820-8502 福岡県飯塚市川津 680-4



Tel: 0948-29-7811, Fax: 0948-29-7841, E-mail: sarai@bse.kyutech.ac.jp

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/jouhoubank.html>

生体分子統合データベース 3DinSight

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/3dinsight/3DinSight.html>

生体分子の構造、機能と物性に関するデータを関係データベース上に統合したバックボーンデータベース。構造、機能、物性を組み合わせたさまざまな検索を行い、これらの間の関係についての洞察を得ることができる。機能情報として、モチーフ、リガンド結合情報、病気と関連するアミノ酸変異などを蛋白質3次元構造上にマップしている。SNP などの情報も同様に統合してゆく予定。物性情報は、蛋白質の安定性、蛋白質と核酸やリガンドとの相互作用に関する熱力学データを文献から収集している。

J. An, T. Nakama, Y. Kubota and A. Sarai "3DinSight: An Integrated Relational Database and Search Tool for Structure, Function and Property of Biomolecules" *Bioinformatics* 14, 188-195 (1998).

J. An and A. Sarai "3DinSight: An Integrated Relational Database and Search Tool for Structure, Function and Property of Biomolecules" *Trends in Glycoscience and Glycotechnology* 11, 429-437 (1999).

蛋白質熱力学データベース ProTherm

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/Protherm/protherm.html>

蛋白質や変異体の安定性に関する種々の熱力学量(変性温度、変性自由エネルギー、実験条件、実験方法、文献情報など)を文献から集めたデータベースで、蛋白質の構造形成原理の研究や蛋白質工学などの応用にとって有用。すでに、15,000 件以上のデータを集録。アミノ酸変異による安定性変化を予測するツールも開発している。

K.A. Bava, M.M. Gromiha, H. Uedaira, K. Kitajima and A. Sarai "ProTherm, version 4.0: Thermodynamic Database for Proteins and Mutants" *Nucleic Acids Res.* 32, D120-D121 (2004).

A. Sarai, M. Gromiha, J. An, P. Prabakaran, S. Selvaraj, H. Kono, M. Oobatake and H. Uedaira "Thermodynamic Databases for Proteins and Protein-Nucleic Acid Interactions" *Biopolymers* 61, 121-126 (2002).

上平初穂, M. Michael Gromiha, 安江虹, 皿井明倫 "タンパク質と変異体の熱力学データベース" 熱測定 27, 250-256 (2000).

皿井明倫 "蛋白質とその相互作用の熱力学データベース" 蛋白質核酸酵素「構造プロテオミックス」47, 1071-1075 (2002).

蛋白質・核酸相互作用データベース ProNIT

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/pronit/pronit.html>

蛋白質と核酸の相互作用に関する実験データ(結合定数、実験条件、実験方法、文献情報など)を文献から集めたデータベース。すでに約3,500件の実験データを収集。今後のプロテオーム研究で、蛋白質と核酸の相互作用や遺伝子発現ネットワークの解析などに有用。

P. Prabakaran, J. An, M. Gromiha, S. Selvaraj, H. Uedaira, H. Kono and A. Sarai "Thermodynamic Database for Protein-Nucleic Acid Interactions (ProNIT)" *Bioinformatics* 17, 1027-1034 (2001).

A. Sarai, M. Gromiha, J. An, P. Prabakaran, S. Selvaraj, H. Kono, M. Oobatake and H. Uedaira

"Thermodynamic Databases for Proteins and Protein-Nucleic Acid Interactions" *Biopolymers* 61, 121 (2002).

皿井明倫: "蛋白質とその相互作用の熱力学データベース" 蛋白質核酸酵素「構造プロテオミックス」47, 1071-1075 (2002).

蛋白質・リガンド相互作用データベース ProLINT

生体分子とリガンドの相互作用に関する実験データ(結合定数、リガンド構造、実験方法、文献情報など)を集めたデータベース。創薬などの研究にとって有用。すでに、kinase と protease について約24,000件の相互作用データを収集した。

翻訳シグナルデータベース TRSIG

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/trsig/trsig.html>

遺伝子発現は転写だけでなく、翻訳のレベルでも制御されている。そこで、mRNA の翻訳レベルでのシグナル配列と機能活性データを集めたデータベースを開発している。現在は、植物のさまざまなストレス応答シグナルに関するデータを収集している。植物の分子生物、遺伝子工学、創薬などに有用。

A.V. Kochetov, D.A. Grigorovich, I.I. Titov, D.G. Vorobiev, O.A. Sirmik, O.V. Vishnevsky, A. Sarai, N.A. Kolchanov "Computer system mRNA-FAST (mRNA – Function, Activity, STructure)" *Molecular Biology* 35, 890-897 (2001).

転写因子予測システム TransPred

ゲノム解析から得られる機能未知の遺伝子から転写因子とそのターゲット部位や遺伝子をゲノムスケールで予測するシステムを開発している。我々が独自に開発した予測方法を用いている。転写因子の機能解析や遺伝子発現ネットワークの解析など、今後の機能ゲノム研究やプロテオーム研究にとって重要となる。

- A. Sarai and H. Kono "Protein-DNA Recognition Patterns and Predictions" *Ann. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* 34, 379-398 (2005).
- S. Ahmad and A. Sarai "PSSM-based prediction of DNA binding sites in proteins" *BMC Bioinformatics*, 6, 33 (2005).
- S. Ahmad and A. Sarai "Moment-based Prediction of DNA-binding Proteins" *J. Mol. Biol.* 341, 65-71 (2004).
- Ahmad, S., Gromiha, M.M. and Sarai, A. "Analysis and Prediction of DNA-Binding Proteins and Their Binding Residues Based on Composition, Sequence and Structural Information" *Bioinformatics*, 20, 477-489 (2004).
- M.M. Gromiha, J.G. Siebers, S. Selvaraj, H. Kono and A. Sarai "Intermolecular and Intramolecular Readout Mechanisms in Protein-DNA Recognition" *J. Mol. Biol.* 337, 285-294 (2004).
- Selvaraj, S., Kono, H. and Sarai, A. Specificity of Protein-DNA Recognition Revealed by Structure-Based Potentials: Symmetric/Asymmetric and Cognate/Noncognate Binding. *J. Mol. Biol.* 322, 907-915 (2002).
- Kono, H. and Sarai, A. Structure-based prediction of DNA target sites by regulatory proteins *Proteins* 35:114-131 (1999).

DNA 結合蛋白質予測ツール DNA-PRED

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/shandar/netasa/dbs-pred/>

蛋白質のアミノ酸配列からその蛋白質が DNA に結合するかどうか、また、どのアミノ酸が結合にかかわるかを予測するツールである。サーバにアミノ酸配列を投げることにより結果がただちに表示される。方法は、アミノ酸組成に基づくが、電荷やモーメントなどの構造情報あるいは進化的情報を取り入れたより精度の高い方法も開発している。

- S. Ahmad and A. Sarai "PSSM-based prediction of DNA binding sites in proteins" *BMC Bioinformatics*, 6, 33 (2005).
- S. Ahmad and A. Sarai "Moment-based Prediction of DNA-binding Proteins" *J. Mol. Biol.* 341, 65-71 (2004).
- Ahmad, S., Gromiha, M.M. and Sarai, A. "Analysis and Prediction of DNA-Binding Proteins and Their Binding Residues Based on Composition, Sequence and Structural Information" *Bioinformatics*, 20, 477-489 (2004).
- Ahmad, S., Gromiha, M.M. and Sarai, A. "Analysis and Prediction of DNA-Binding Proteins and Their Binding Residues Based on Composition, Sequence and Structural Information" *Bioinformatics*, 20, 477-489 (2004).

蛋白質露出表面積予測ツール RVP-net

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/shandar/netasa/rvp-net/>

蛋白質のアミノ酸が表面に露出するかどうかを予測することは、構造予測だけでなく機能予測にとっても重要である。このツールはアミノ酸配列に基づき露出表面積の値を予測する。サーバにアミノ酸配列を投げることにより結果がただちに表示される。

- S. Ahmad, M.M. Gromiha, and A. Sarai "RVP-net: Online Prediction of Real Valued Accessible Surface Area of Proteins from Single Sequences" *Bioinformatics*, 19, 1849-1851 (2003).

蛋白質露出表面積表示ツール ASA View

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/shandar/netasa/asaview/>

このツールは、蛋白質中のアミノ酸の露出表面積を表示する。スパイラルやバー形式などでアミノ酸の露出度を視覚的にとらえることができる。

S. Ahmad, M.M. Gromiha, H. Fawareh, and A. Sarai "ASAView: Database and tool for solvent accessibility representation in proteins" *BMC Bioinformatics*, 5, 51 (2004).



遺伝子分類・機能予測ツール、ORI-GENE

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/ORI-GENE3/>

ゲノム情報と進化情報に基づいて、遺伝子の分類や機能予測を行うツール。現在は Macintosh のみに対応。ローカルにプログラムをインストールして使用。GUI により Blast の結果をグラフィカルに進化系統樹の上にマップすることができる。

H. Mizuno, Y. Tanaka, K. Nakai and A. Sarai "ORI-GENE: A Tool for Functional Classification of Genes Based on the Evolutionary Tree" *Bioinformatics*, 17, 167-173 (2001).



蛋白質の電荷・疎水性クラスター探索ツール、QGrid

<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/shandar/netasa/qgrid/>

蛋白質の電荷や疎水性残基は、その構造安定性や他分子との相互作用にとって重要な役割を果たしている。このツールは、蛋白質の電荷や疎水性残基のかたまった領域を自動的に探索し、それらをクラスターツリーの形で表示する。