

PDFAMSシリーズ タンパク質立体構造予測ツール

ポストゲノム時代において、創薬プロセスにおいてもCADD(Computer-Aided Drug Design)が注目されています。特に膨大な数の化合物候補の中からターゲットに適合するリガンド探索には精度のよい構造予測ソフトウェアが必要不可欠です。インシリコサイエンス社は北里大学梅山秀明教授からの技術移転を受けて、タンパク質構造予測の国際コンテストで最優秀の成績を収めているプログラムを、PDFAMSシリーズとして製品化いたしました。製品の販売及び技術サポートは日本SGI株式会社が行っています。

特長

■ホモロジーモデリング法による構造予測

既に実験的に構造決定されたタンパク質を鋳型にして構造予測を行う、ホモロジーモデリング法を採用しているため、信頼のおける立体構造モデルを構築することが可能です。

■洗練された立体構造構築アルゴリズム

タンパク質をC α 原子、主鎖全体、構造保存領域の側鎖も含めた主鎖、および全原子の4段階に分け、各段階で最適化を行うため、構造骨格から側鎖の細部にいたるまで一貫して精度の高い構造が得られます。

■世界でトップクラスのプログラム

2002年に開かれた世界コンテストCAFASP3において、比較モデリングの通常サーバ部門で世界第一位の成績を収めたFAMSと同じモデリングアルゴリズムを採用しています。

■アミノ酸配列を指定するだけの簡単な使用方法

従来、ホモロジーモデリングは熟練を要する手法でしたが、PDFAMSではそのような複雑な作業が一切ありません。配列を指定するだけで、立体構造の計算結果を出力します。

■Webユーザ・インターフェース

操作は全てWebブラウザをインターフェースとして行うため、お手持ちのWindowsやMacintoshなどのPCをクライアントとしてモデリングを実行することができます。

Core Algorithm

PDFAMS Pro+は、与えられたアミノ酸配列に対し、ホモロジー検索からモデリングまでを全自動で行い、結果はPDBフォーマットで出力されます。PDFAMS Pro+は高精度の構造予測を実現する以下のアルゴリズムを装備しています。

SARSウイルスタンパク質のモデリング



X線構造 (PDB ID: 1Q2W)



PDFAMS Pro+による
モデリング

1. 配列検索にはRPS-BLASTを使用
2. ヒットした参照タンパク質間で構造アラインメント:
最適なテンプレートの選出
3. 4段階に分けての構造構築及び最適化
4. 実験構造の統計に基づいた独自の側鎖構成法

最適化で評価される擬似ポテンシャルには、空間的に近い残基のみで評価されるホモロジーによって重み付けを行っています。この方法により、ターゲットとテンプレートとの**構造アラインメントを行っているのと同じ効果**が得られ、信頼度の高いモデリングが可能です。また、独自の側鎖構成法と、それを活かすための、側鎖角を動かさない最適化方法により、他のモデリングプログラムに比べて特に**側鎖の角度の予測に高い精度**を誇っています。

Web User Interface (WebUI)



PDFAMS Pro+はユーザ・インタフェースとしてWebUIを装備しており、配列の検索から、モデリングの実行、更にはモデリング結果の可視化^(注1)まで、すべて使い慣れたWebブラウザを通して、簡単なマウス操作のみで作業することができます。



WebUIを採用しているため、PDFAMSの作業が、WindowsやMacintoshなどのユーザ端末からでもネットワークを通してご利用になれます。



作業の結果はPDFAMSサーバに格納され、簡易データベースとしてもお使いいただけます。



(注1) 可視化はrasmolなどの外部プログラムをブラウザの設定により呼び出しています。

動作環境

・オペレーティングシステム

Red Hat® 7.x 以降

IRIX® 6.5

・使用言語

Perl-5.0, bash, csh, C

・WebUI

apache 2.0を使用

・推奨CPU速度

Intel® Pentium® III / 1.0GHz 相当以上

MIPS® R10000® 以上

・ディスク占有容量

約1.2ギガバイト以上 (PDBデータベースを除く)

約5.0ギガバイト以上 (PDBデータベースを含む)

©2004 SGI Japan, Ltd. All rights reserved. SGIとIRIXはSilicon Graphics, Inc.の登録商標です。IntelとPentiumはIntel Corporationの登録商標です。Red HatはRed Hat Inc.の登録商標です。MIPSとR10000はMIPS Technologies, Inc.の登録商標です。Silicon Graphics, Inc.はMIPSの使用ライセンスを受けています。その他の商標については商標の所有者に所有権が属しています。(06/2004)

株式会社インシリコサイエンス

(販売元)

E-mail : iss-support@pd-fams.com

<http://www.pd-fams.com>

日本SGI株式会社

(販売代理、技術サポート)

PDFAMS販売窓口

〒150-6031 東京都渋谷区恵比寿4丁目20番3号

恵比寿ガーデンプレイスタワー31F

TEL : 03-5488-1811 FAX : 03-5420-7030

E-mail : pdfams-support@sgi.co.jp

<http://www.sgi.co.jp>