

ユーザーによる処理の追加可能なproteome解析プラットフォームJobRequestと それを利用したタンパク質同定ツールProteoAnalysis

JobRequest and ProteoAnalysis – an user-customizable bioinformatics software platform for proteomics analysis and its application for protein identification



○田畑剛¹・吉沢明康²・山本昇¹・青島健¹・小田吉哉¹・梶原茂樹²・田中耕一² 1:エーザイ株式会社 バイオマーカー&パーソナライズドメディスン機能ユニット 2:島津製作所 田中最先端研究所

○ Tsuyoshi Tabata¹, Akiyasu C. Yoshizawa², Noboru Yamamoto¹, Ken Aoshima¹, Yoshiya Oda¹, Shigeki Kajihara², Koichi Tanaka²

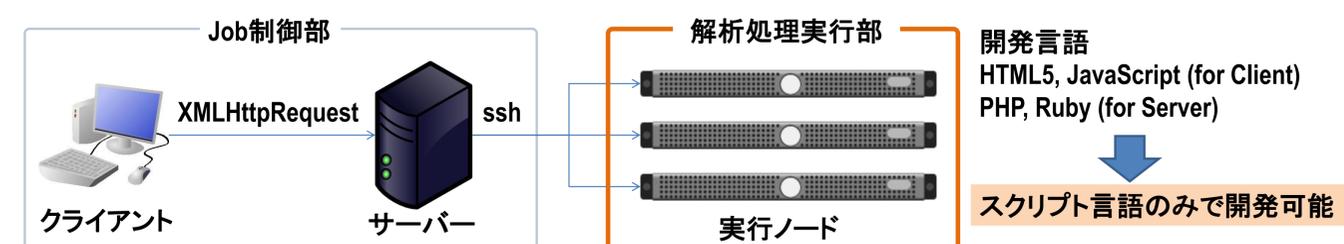
1:Biomarkers and Personalized Medicine, Eisai Product Creation Systems, 2:Koichi Tanaka Laboratory of Advanced Science and Technology, Shimadzu Corporation

1. Introduction

皆さんは実験データの解析にどのようなソフトウェアを使用されているでしょうか。販売されている解析ソフトウェアでは、自分のアイデアを形に出来なく、不満をお持ちではありませんでしょうか？

我々は、解析アイデアのプログラミングと実行を比較的簡単に行える、解析プラットフォーム『JobRequest』を作成しました。このプラットフォームは、実際の解析処理とは関係のない、ハードウェアの管理などを全て自動で処理します。このため、作成した解析フローをこのプラットフォーム上で実行すると、複数のPCに自動的に処理を分散して解析が実行されます。今回、このプラットフォームを用いた開発の実例として、我々のプロテオーム解析のアイデアをwebツールとして作成しました。

2. JobRequestの概要



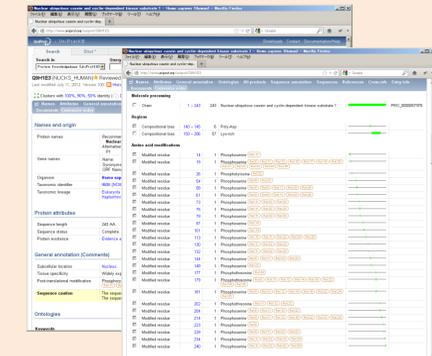
クライアントからサーバーにJobが登録されると自動でCPU負荷の低いノードを使い複数の処理を並列に実行します。

3. JobRequestを適応したアプリケーション : ProteoAnalysis

[ベースとなったアイデア]

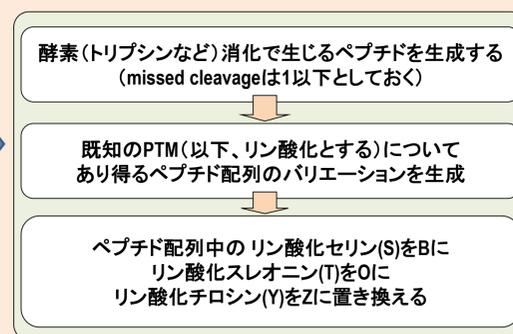
- 翻訳後修飾の従来法variable modification法では、多数の仮想配列をメモリ中に生成するため、計算時間やE-valueなどに問題が生じることが多い。
- そこで、「検索エンジンで使われていないアミノ酸コード(B, O, Zなどを)、「修飾されたアミノ酸」を表す記号として用いる(MSPTM-DB)ことにより、既知の修飾を通常法で高速検索できないか。このアイデアをJobRequestを使い実装した。

①既知の修飾情報 (Swiss-Prot)



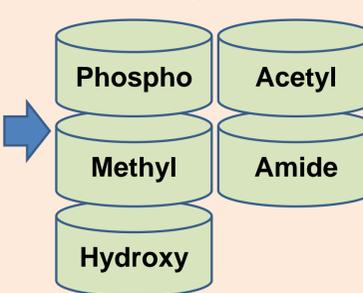
X!Tandem用MSPTM-DBの作成

② FASTAファイルへの変換フロー

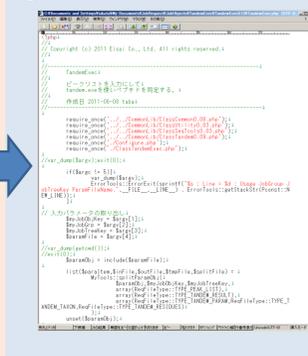


JobRequestへの適応

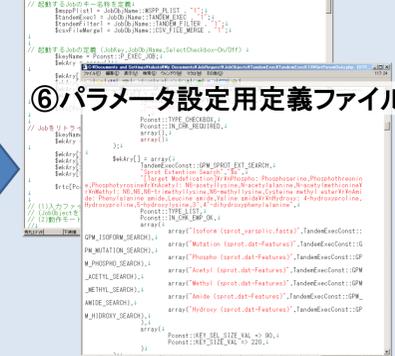
③ X!Tandem用のFASTAに変換 (XXXX.fasta.pro files)



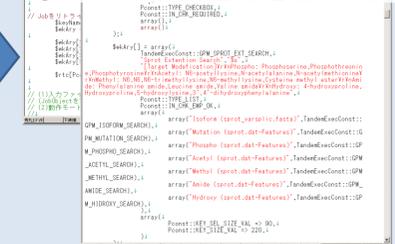
④ X!Tandem実行用スクリプト



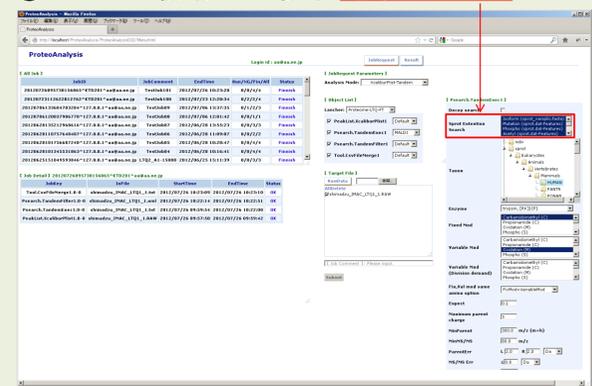
⑤ Jobコントロール用定義ファイル



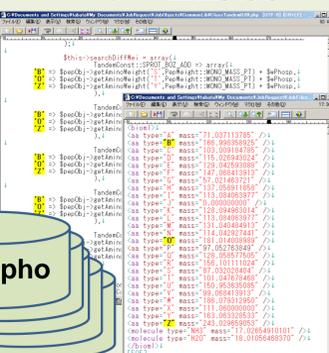
⑥ パラメータ設定用定義ファイル



⑦ X!Tandem 検索のJob要求画面 (PTM search : ON)



⑧ X!Tandemの実行 (アミノ酸の重量変更)



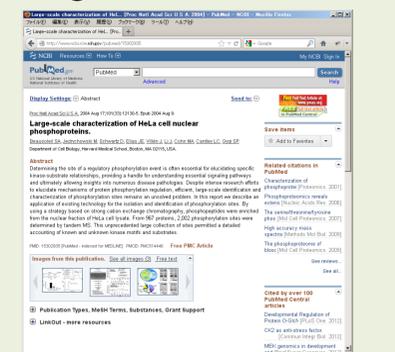
ProteoAnalysisを使いJobを実行

1回のjobで実行された、複数の生データの検索結果が、単一のcsvファイルとして得られます。このファイルはExcelを使って開くことができます。

⑨ SearchResult.csv

AccNum	: sp Q9H1E3 NUCKS_HUMAN
ProtName	: Nuclear ubiquitous casein and cyclin-dependent kinases substrate OS=Homo sapiens GN=NUCKS1 PE=1 SV=1
Seq	: VVDYSQFQESDDADEYGRDSGPPTK
Mod	: Phospho (S)
ModPosition	: 79.9663@S:10
JournalInfo	: [Journal Article (2004) PMID: 15302935 Cervix carcinoma] Large-scale characterization of HeLa cell nuclear phosphoproteins.

⑩ PubMedへのリンク



Access to <http://www.first-ms3d.jp/english/achievement/software>

4. 適用MSシステムの拡大

- (1) Thermo Scientific社 Q-Exactive + 独自のPeak Picking + Mascot
- (2) AB Sciex社 TripleTOF 5600 + 独自のPeak Picking + Mascot/ProteinPilot (京都大学薬学研究科 石濱研究室と連携して研究進行中)

5. Summary

- このJobRequestプラットフォームを使うことで、実際の解析処理部分のプログラミングのみで、システムを作成することが出来た。(HTML5 やJavaScriptの画面部分の知識が不要)
- 既知PTMの検索の高速化と、PTM情報の根拠となったジャーナル情報を表示可能なシステムを構築できた。

Reference

[1] Anal. Chem.; (2003) 75:768-774.

Acknowledgment

本研究は、日本学術振興会の最先端研究開発支援(FIRST)プログラムによる助成を受けて行われた。