

アミノ酸、塩基配列の
アライメント解析ソフトウェア

eGAlign Ver.3.0
(イージーアライン)

開発・販売元



株式会社 情報数理バイオ

目 次

1. eGAlignの機能および用途・・・・・・・・・・ 1
2. eGAlignの動作環境・・・・・・・・・・ 1
3. eGAlign Ver. 3.0・・・・・・・・・・ 2

2012年9月

○お問合せ先

株式会社情報数理バイオ 営業部

〒170-0012 東京都豊島区東池袋4-21-1 アウルタワー6F

TEL 03-6907-0315

FAX 03-6907-0316

e-mail info@imsbio.co.jp

eGAlignの機能および用途

eGAlignはアミノ酸、塩基配列データの編集（手動アライメント）、アライメント解析、系統樹作成をするソフトウェアです。主な機能は以下の通りです。

- マルチFASTA形式の配列データファイルを読み込み編集（手動アライメント）可能
- アライメント表示のMS-Word出力が可能
- 配列データは、アミノ酸、核酸データを自動判別
- ClustalWなどより精度の良い手法を含めた3通りの手法でアライメント解析
- アライメント解析した配列結果のスコア値による比較や再編集が可能
- 2通りの手法で進化系統樹の作成・印刷が可能
- PDBデータからタンパク質の立体構造表示が可能
- ホモロジーモデリング計算プログラムModellerの入力ファイル作成・実行が可能

eGAlign動作環境

機種、OS	Windows7 が動作する機種
必要メモリー	256MB (512MB 以上推奨)

価格

製品名	価格（別途消費税）
eGAlign Ver. 3.0 バイナリー版	お問い合わせください

eGAlign Ver.3.0

1. 概要

eGAlignは、アミノ酸、塩基配列のアライメント解析ソフトウェアです。

2. 用途

- (1) 塩基、アミノ酸多重配列の編集（手動アライメント）とMS-Word出力
- (2) 塩基、アミノ酸配列のアライメント解析
- (3) アライメント解析結果のスコア値による評価と再編集
- (4) 進化系統樹の作成・印刷
- (5) タンパク質立体構造表示
- (6) ホモロジーモデリング計算プログラムModeller用の入力ファイル作成と実行

3. 機能

○アミノ酸、塩基配列データの編集

- (1) FASTA形式でファイル保存された複数のアミノ酸、塩基配列を読み込み編集できます。主な編集機能は、ギャップの挿入・削除、前方・後方シフトです。
- (2) ギャップの挿入・削除や前方・後方シフトは簡単なマウス操作で、1残基、複数残基、1カラム（縦列）全部の編集が可能です。指定したカラム（縦列）を固定して編集することも可能です。
- (3) コンセンサス（一致）カラムを自動的に表示します。その閾値の設定ができます。
- (4) 残基をユーザの指定したフォントや色（文字色・背景色）で表示できます。
- (5) マルチプルアライメントの表示画面を、縦2分割にして表示・編集できます。
- (6) アライメント表示の色指定が可能で、指定した残基に下線が書け、MS-Word形式出力ができます。

○マルチプルアライメント解析

- (1) 3通りの解析手法でマルチプルアライメント解析が可能です。
- (2) 3通りとは、ツリーベース(Tree-base)法、ツリーベース・ラウンドロビン(Tree-based Round-robin)法、ツリーベース・ラウンドロビン反復改善(Tree-based Round-robin Iterative)法です。ツリーベース法は、ClustalWやPileUp(GCG)で用いられている方法ですが、ツリーベース・ラウンドロビン法やツリーベース・ラウンドロビン反復改善法は、それらより精度の高いマルチプルアライメント解析が可能です。
- (3) 類似度評価行列（スコア表）として、PAM20、PAM60、PAM120、PAM250、BLOSUM30、BLOSUM40、BLOSUM45、BLOSUM50、BLOSUM62、BLOSUM80の10通りの行列から選択が可能です。
- (4) 3種類のギャップコスト（ギャップ開始、ギャップ延長、ギャップ外側）と、DP（ダイナミックプログラム）カットオフ率を設定できます。
- (5) マルチプルアライメント解析を行う配列の範囲をマウス操作で指定できます。
- (6) 配列範囲を指定したマルチプルアライメント解析結果を、元の配列に挿入することができます。
- (7) マルチプルアライメント解析結果をスコア値で比較評価できます。

○進化系統樹の作成

- (1) マルチプルアライメント解析や手動アライメントの結果配列の進化系統樹が2通りの手法で作図・印刷できます。
- (2) 2通りとは、UPGMA法と近接結合(Neighbor Joining)法です。

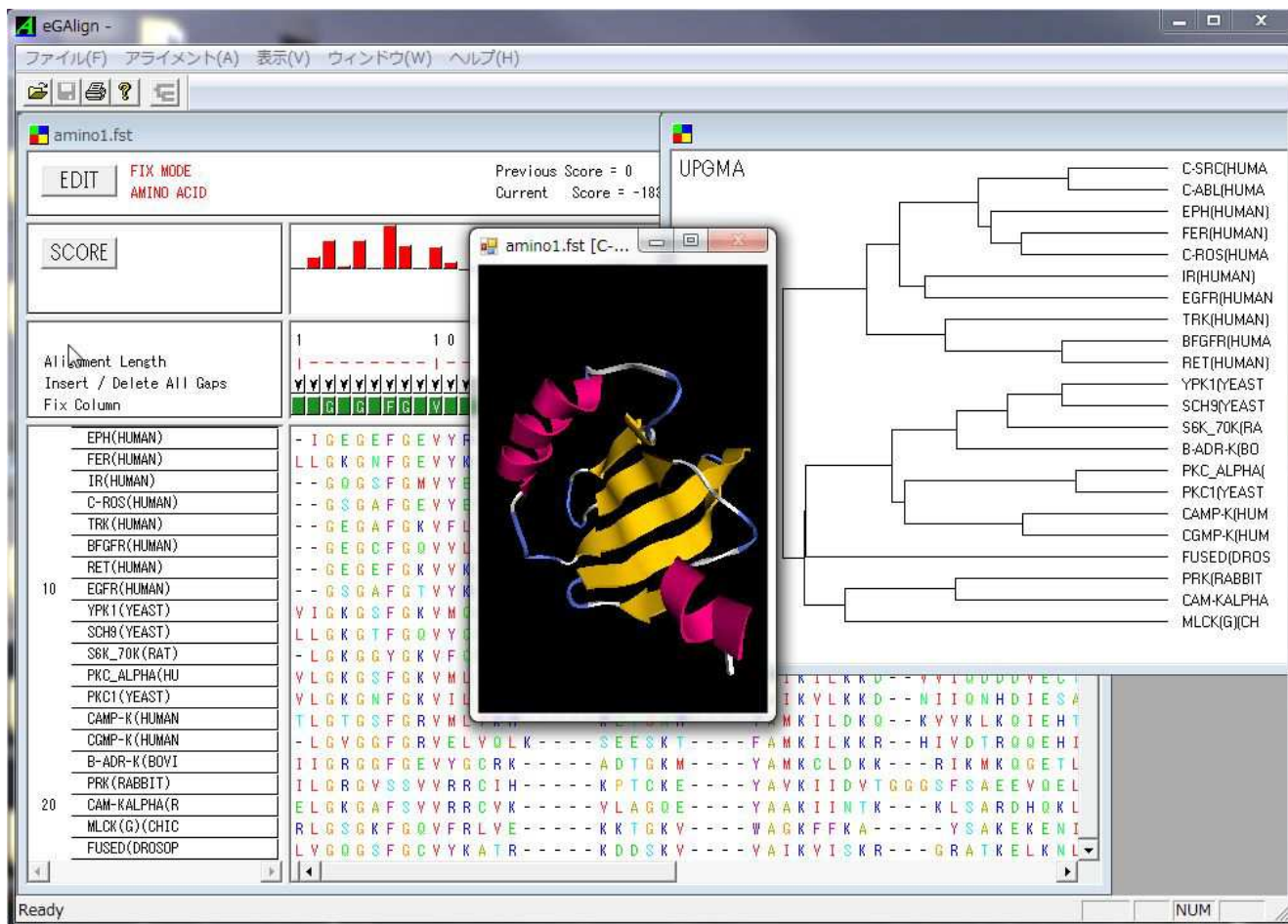
○タンパク質立体構造表示

- (1) アミノ酸配列のアライメント表示に対応する立体構造データ(PDB)をユーザが指定できます。指定したPDBのタンパク質立体構造表示ができます。
- (2) アミノ酸配列のアライメント表示でユーザが指定した残基を識別するための色をつけて立体構造表示できます。

○ホモロジーモデリング計算プログラム用の入力ファイル作成

- (1) ホモロジーモデリング計算プログラムであるModeller(*1)の入力ファイルを作成できます。
 - (2) 作成した入力ファイルを使ってModellerを実行してホモロジーモデリングができます。
(Modellerはライセンスを持つユーザが別途、Windowsに標準インストールすることが必要)
- (*1)UCSF Sali研究室のホモロジーモデリングプログラム

4. 表示例



eGAlign 使用例

複数のアミノ酸配列でマルチプルアライメントした結果表示と、その系統樹(UPGMA 法)と、既知のタンパク質立体構造を同時に表示した例。

既知のタンパク質立体構造は、複数のアミノ酸配列中の一配列に対して PDB ファイルを読み込ませることによってユーザが指定できます。

アライメント表示で残基(保存残基など)を指定すると、指定した残基が色付きで立体構造上に表示できます。

表示したタンパク質の立体構造は、通常のタンパク質立体構造 Viewer と同じ機能(拡大、縮小、回転など)を持ち、空間充填表現やリボン表現なども可能です。