

Analysis

Huang LiChuang of Wie-Biotech

Contents

1	摘要	1
2	使用说明	2
2.1	安装	2
2.1.1	安装依赖	2
2.1.2	安装	2
2.2	使用示例	2
2.2.1	示例 1	2
2.2.2	示例 2	3
2.3	结果呈现	3

List of Figures

1	Index	3
2	Infomation	4
3	Protein structure eg 1	5

List of Tables

1 摘要

创建了可呈现蛋白质基本信息（分子量、活性位点、结合位点）和结构信息（3D 结构）的 R 包。用户可通过该 R 包，获取存储任意的蛋白质信息。运行指令后，可获得 html（网页）文件，以浏览器打开（已附示例的 html 文件）。

注：touchPDB_0.0.0.9000.tar.gz 为 R 包，annotation.html 为示例的结果。

2 使用说明

2.1 安装

2.1.1 安装依赖

以下安装已经过 conda 新建独立环境完成测试 (R 4.2)。

```
lapply(c("cli", "pbapply", "R.utils", "r3dmol", "RCurl",
        "rmarkdown", "utils", "XML", "shiny", "BiocManager"),
function(pkg) {
  if (!requireNamespace(pkg))
    install.packages(pkg)
})

BiocManager::install(c("BiocStyle", "UniProt.ws"))
```

注：如果是在 Linux 下安装，可能面临需要安装 libcurl 的问题。可以使用 `sudo apt install libcurl4-openssl-dev` 解决；如果是 conda 环境下，请使用 `conda install -c conda-forge r-curl` 安装 libcurl。

2.1.2 安装

请确保安装包在当前目录下，如果不在，请输入正确的路径。

```
install.packages("touchPDB_0.0.0.9000.tar.gz")
```

2.2 使用示例

在 R 命令行中：

2.2.1 示例 1

```
## 加载包
require(touchPDB)

## 需要查询的蛋白质的 Symbol (任意数量)
syms <- c("ERBB4", "Pik3r1", "AHR", "TP53")

## 新建项目
pd <- new_pdb()

## 获取文件
pd <- via_symbol(pd, syms)

## 生成注释网页 (本地 html 文件)
anno(pd, syms)
```

2.2.2 示例 2

```
require(touchPDB)

pd <- new_pdb()
pd <- via_symbol(pd, c("ERBB4"))
anno(pd, syms)
```

2.3 结果呈现

以下展示示例 1（2.2.1）运行结果的截图。

Figure 1为图 index 概览。

(对应文件为 ~/Pictures/Screenshots/Screenshot from 2023-09-19 10-12-28.png)

Proteins Infomation

19 September 2023

Contents

- 1 ERBB4
 - 1.1 Information
 - 1.2 Active sites
 - 1.3 Binding sites
 - 1.4 Structure View
- 2 Pik3r1
 - 2.1 Information
 - 2.2 Active sites
 - 2.3 Binding sites
 - 2.4 Structure View
- 3 AHR
 - 3.1 Information
 - 3.2 Active sites
 - 3.3 Binding sites
 - 3.4 Structure View
- 4 TP53
 - 4.1 Information
 - 4.2 Active sites
 - 4.3 Binding sites
 - 4.4 Structure View

1 ERBB4

1.1 Information

- Symbol: ERBB4

Figure 1: Index

Figure 2为图 Infomation 概览。

(对应文件为 ~/Pictures/Screenshots/Screenshot from 2023-09-19 10-13-28.png)

1 ERBB4

1.1 Information

- Symbol: ERBB4
- UniProtKB Swiss Prot: Q15303
- Mass: 146808

1.2 Active sites

- Proton acceptor
 - location
 - position: 843

1.3 Binding sites

- binding site
 - location
 - begin position: 724
 - end position: 732
 - ligand
 - name:
 - ATP
 - dbReference: CHEBI:30616
- binding site
 - location
 - position position: 751
 - ligand
 - name:
 - ATP
 - dbReference: CHEBI:30616
- binding site
 - location
 - begin position: 707

Figure 2: Infomation

Figure 3为图 protein structure eg 1 概览。

(对应文件为 ~/Pictures/Screenshots/Screenshot from 2023-09-19 10-14-19.png)

1.4 Structure View

PDB ID: 2AHX

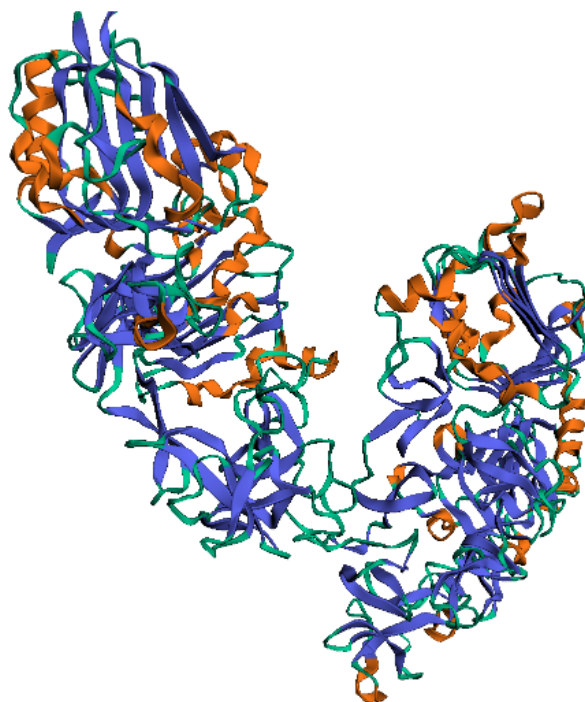


Figure 3: Protein structure eg 1