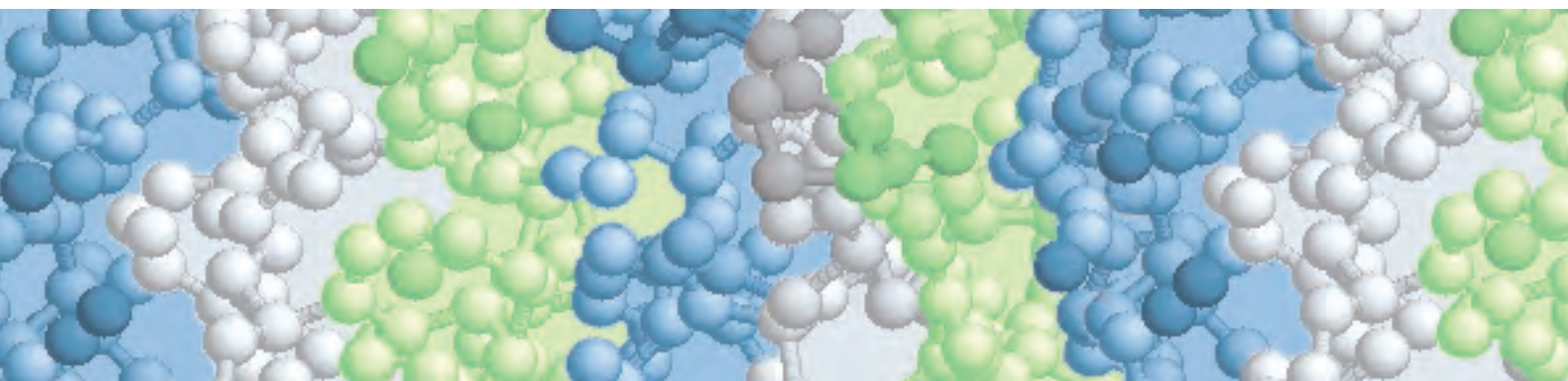


News Letter Vol. 8, No. 1

2006 年 6 月



PDBj は大阪大学蛋白質研究所が（独）科学技術振興機構の支援によって運営しています。

ニュース

ご挨拶

PDBj (Protein Data Bank Japan: 日本蛋白質構造データバンク) は、科学技術振興機構 (JST) バイオインフォマティクス推進センター (BIRD) の支援を受け、2006年4月から、新たに「蛋白質構造データバンクの国際的な構築と高度化」という名称のプロジェクトとして、蛋白質立体構造データベースの開発研究を継続することになりました。

wwPDB (worldwide Protein Data Bank) では、世界中で決定された蛋白質・核酸等の生体高分子の立体構造を年間 6000 件以上登録し、2006 年 6 月には計 37,000 件以上を公開しております。PDBj では、wwPDB のメンバーの一員として、他のメンバーである米国 RCSB-PDB、欧州 MSD-EBI、および生体分子の核磁気共鳴スペクトル (NMR) のデータベースである BMRB (BioMagResBank) と協力し、国際的な協力作業による PDB データベースの維持・管理と、独自のサービス・システムの開発・高度化を推進しております。

2006 年度からの活動につきましては、国際協力のもと、データ品質を保ちつつ、さらに大量のデータの登録・編集とその維持・管理・高度化を進める一方で、固体 NMR データ、電子顕微鏡による電子密度情報等の新たなデータベース構築を進めるとともに、グリッド技術等の最新の情報科学技術を積極的に活用して、さらに高度で利用しやすい基幹データベースとする計画です。

特に、生体超分子や膜蛋白質を中心とする、高分解能の電子顕微鏡画像 (電子密度マップ) や単粒子解析、トモグラフによる分子画像のデータベースの登録と構築に協力し、日本国内からの寄与も多いこれらデータベースの開発を開始いたします。2006 年度からは、PDBj に新たに電子顕微鏡の専門家を加え、電子顕微鏡画像にフィットした原子座標が統合された電子密度マップのデータベース構築に、EBI および RCSB-PDB と協力して本格的に取り組む計画です。

また、PDB には原子位置座標という本質的にアナログな情報が記述されておりますので、生体高分子の「かたち」や「表面形状」というアナログデータ検索の高速な実施が望めます。PDBj では、最新のグリッド技術を活用し、日本中に分散している計算機にタフなアナログデータ検索の計算を割り振って実行させて、高速処理を実現する予定です。さらに、これまで PDBj にて開発してまいりましたサービス群を統合し、蛋白質に関する機能情報と進化情報を引き出すことができるポータルサイトの構築を目指し、新規に構造決定された蛋白質の機能アノテーションを飛躍的に効率化させることを計画しております。

2006 年 10 月には、東京で wwPDBAC を開催することが予定されており、世界中の wwPDB メンバーと国際諮問委員が集合して、wwPDB の現状と今後の PDB データベースの推進課題が討議されることになっております。

今年度以降も、分子グラフィックス・ビューア (jV) や教育用データベースである蛋白質構造百科 (eProtS) の開発と公開を進め、また一般向けの利用講習会も行う予定です。

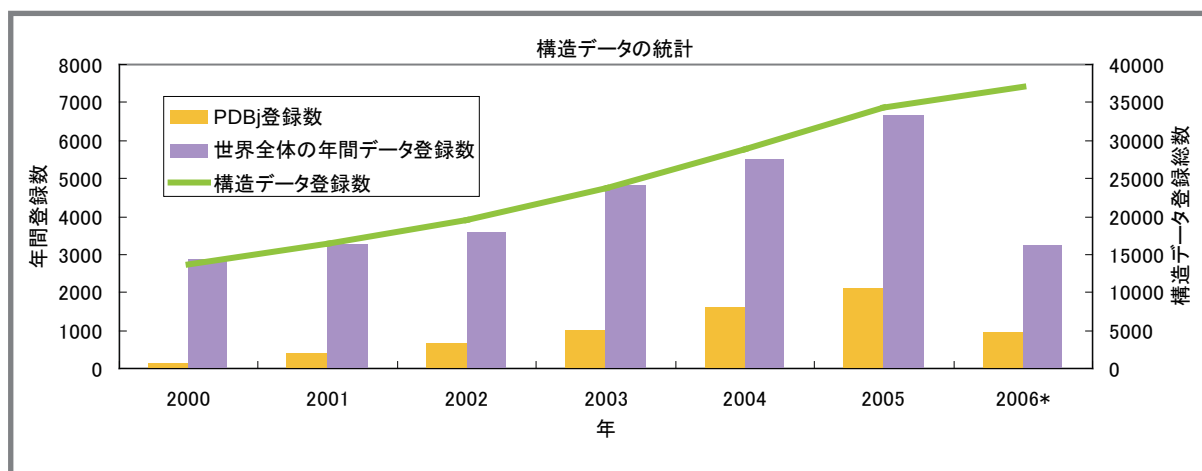
今後とも、皆様のご支援とご協力をお願いいたします。

第 6 回日本蛋白質科学会年会

第 6 回日本蛋白質科学会年会が、2006 年 4 月 24-26 日に国立京都国際会館で開催されました。PDBj では、最終、26 日にランチョンセミナーを行い、私たちの活動と検索サービスについて紹介しました。120 名以上もの方に参加いただき、セミナー後のアンケートから、多数の貴重なご意見をお寄せいただきました。

PDBj 構造登録データ統計

統計データは wwwPDB の WEB ページ (<http://www.wwpdb.org/stats.html>) においてご覧になれます。



* 2006 年 6 月付けデータ

サービス

eF-site

これまで PDBj で開発を行ってきました、分子表面と物性（静電ポテンシャルおよび疎水性度）のデータベース eF-site (electrostatic surface of functional site) の機能が增强されました。eF-site では、ほぼ全ての PDB データに対して、chain 毎、および複合体としての分子表面とその表面上の物性が計算され、毎週 PDB データが更新されるのに従って自動的に更新されます。2006 年 6 月 17 日の時点において、205,536 件の分子表面データがおさめられています。

さらに、PDBj ではデータベースのミラー化を進めており、eF-site データベースにつきましては、東京大学医科学研究所の eF-site サーバ (<http://ef-site.hgc.jp/ef-site/>) と大阪大学蛋白質研究所のサーバ (<http://ef-site.protein.osaka-u.ac.jp/ef-site/>) が同期して稼働しておりますので、ネットワークの状態が良い方を選んでご利用いただけます。

jV3.2

蛋白質立体構造表示ソフトウェアである jV のバージョンが 3.2 になりました。以前のバージョンと比べて、外部データベースとの連携のためのコマンドとして show site コマンドを追加したほか、いくつかのバグフィックスによる安定性が向上しました。また、新たに追加されたコマンドを含め、jV のユーザーマニュアルを公開しました (http://ef-site.hgc.jp/ef-site/jV/jV3_User'sGuide.pdf)。バージョンが上がるに従って高機能化してきた jV の機能を、チュートリアル形式でわかりやすく解説してありますので、是非一度ご覧下さい。

eF-site のトップページ。

Structure Navigator RT (β版)

PDBj では、構造そのものを検索するサービスの提供を実施したいと考えておりましたが、ようやく、リアルタイムの構造検索サービスが、Structure Navigator RT (β版) によって可能となりました。Structure Navigator RT (β版) では、まず検索する構造を PDB 中の代表構造に対して迅速にアライメントを行い、その後、それ以外の PDB の構造とのアライメントを行います。この行程によって数秒から数分の間で、全ての構造検索を行うことができます。

Structure Navigator RT の構築の当初の目的は、Rapid ASH (RASH) と呼ばれる速く検索できる構造アライメント・アルゴリズムを開発することでした。図 1 は、RASH と DaliLite、CE、そして GASH との検索速度を比較したものです。また、図 2 は ROC 曲線によって検索の精度を示しています。この精度は、Kolodny らによって採用されている (J. Mol. Biol. (2005) 346, 1173-1188)、8,581,970 の構造ペアに基づいて評価したものです。

RASH は DaliLite や CE よりもずっと高速ではありますが、リアルタイムの構造検索として十分な高速性を備えてはいませんでした。そこで私たちは、検索構造に対して、構造が類似していると思われるアラインメントをあらかじめソートしておく方法を採用しました。内部のデータベース中に、構造全体の大きさ、 α -ヘリックスの割合、 β -構造の割合、回転半径、およびコンタクト・オーダーの値を組み込んでおき、検索を行う構造と各テンプレートに対して、それらをベクトルで定義しました。Structure Navigator RT では、これらの記述ベクトルを使用し、テンプレートを高速にアラインメントすることができるようになりました。

Structure Navigator RT のトップページは、PDB フォーマット・ファイルのアップロード・ウィンドウがある以外は、Structure Navigator のトップページとよく似ています (図 3)。数秒から数分で、類似配列によってクラスター化された検索結果が返ってきます (図 4)。実際の構造のアライメントとスーパーポーズの結果は、Structure Navigator のフォーマットと似ており、オンラインで可視化され、またダウンロードされます。

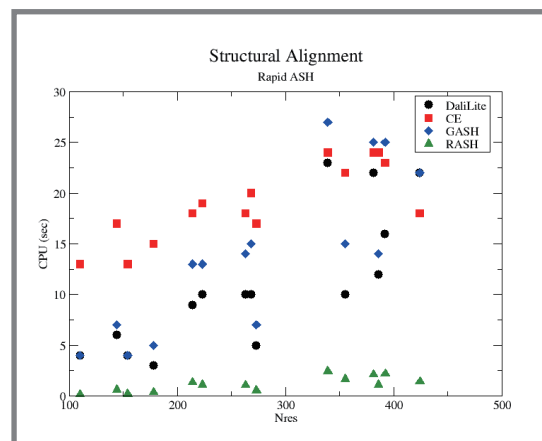


図 1

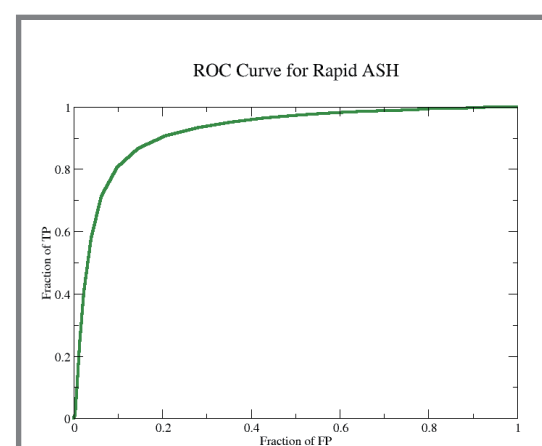


図 2

図 3

Template	NER	%NER	%Seq ID	RMSD	Details	Seq Homs
1whxA	59	76	23	3.085	alignment	NA
1a9nB	58	75	23	3.139	alignment	homologs
2c9yA	58	75	19	3.026	alignment	homologs
1wvwhA	58	75	20	2.954	alignment	NA
2c9hA	57	74	32	2.485	alignment	NA
1x5sA	56	72	30	3.432	alignment	homologs
1weyA	55	71	12	2.658	alignment	NA
1x4dA	54	70	24	3.476	alignment	homologs
1w24A	54	70	21	3.067	alignment	homologs
1jmtA	52	67	19	3.826	alignment	NA
1u2fA	51	66	24	2.785	alignment	NA
1o0pA	51	66	17	3.588	alignment	NA
2ula	50	64	22	3.824	alignment	NA
1uw4A	49	63	16	3.150	alignment	NA
2b4vA	49	63	13	3.144	alignment	NA
2cz4A	47	61	9	5.496	alignment	NA
1owxA	47	61	16	3.281	alignment	NA
1nn2A	47	61	10	3.191	alignment	NA
1uckA	46	59	10	2.866	alignment	NA
2f06A	45	58	12	3.060	alignment	NA
2bj3D	45	58	6	3.427	alignment	homologs
2fedA	44	57	8	4.080	alignment	homologs

図 4

スタッフ

統括責任者

中村春木（大阪大学蛋白質研究所・教授）

PDBj データベース管理運営グループ

楠木正巳（大阪大学蛋白質研究所・助教授）

小佐田高史（大阪大学蛋白質研究所）

五十嵐令子（JST-BIRD）

見学有美子（JST-BIRD）

池川恭代（JST-BIRD）

松浦かな（JST-BIRD）

PDBj 国際運営高度化グループ

Standley, Daron M.（JST-BIRD, 大阪大学臨床医工学融合研究教育センター・招聘助教授）

岩崎憲治（大阪大学蛋白質研究所・助教授）

鈴木博文（大阪大学蛋白質研究所）

山下鈴子（JST-BIRD）

清水有希子（JST-BIRD）

BMRB データベース管理運営グループ

阿久津秀雄（大阪大学蛋白質研究所・教授）

高山裕生（大阪大学蛋白質研究所）

中谷英一（JST-BIRD）

原野陽子（大阪大学蛋白質研究所）

九州大学生体防御医学研究所グループ

藤博幸（九州大学生体防御医学研究所・教授）

東京医科歯科大学大学院グループ

伊藤暢聡（東京医科歯科大学大学院・教授）

関連データベース

木下賢吾（東京大学医科学研究所・助教授）

輪湖博（早稲田大学社会科学部・教授）

研究チーム事務員

鎌田知佐（JST-BIRD）

連絡先

PDBj

〒565-0871

大阪府吹田市山田丘3-2

大阪大学蛋白質研究所・附属プロテオミクス総合研究センター内

PDBj事務局：TEL (06) 6879-4311、FAX (06) 6879-8636

PDBjデータベース登録業務：TEL (06) 6879-8638、FAX (06) 6879-8636

URL: <http://www.pdbj.org/>