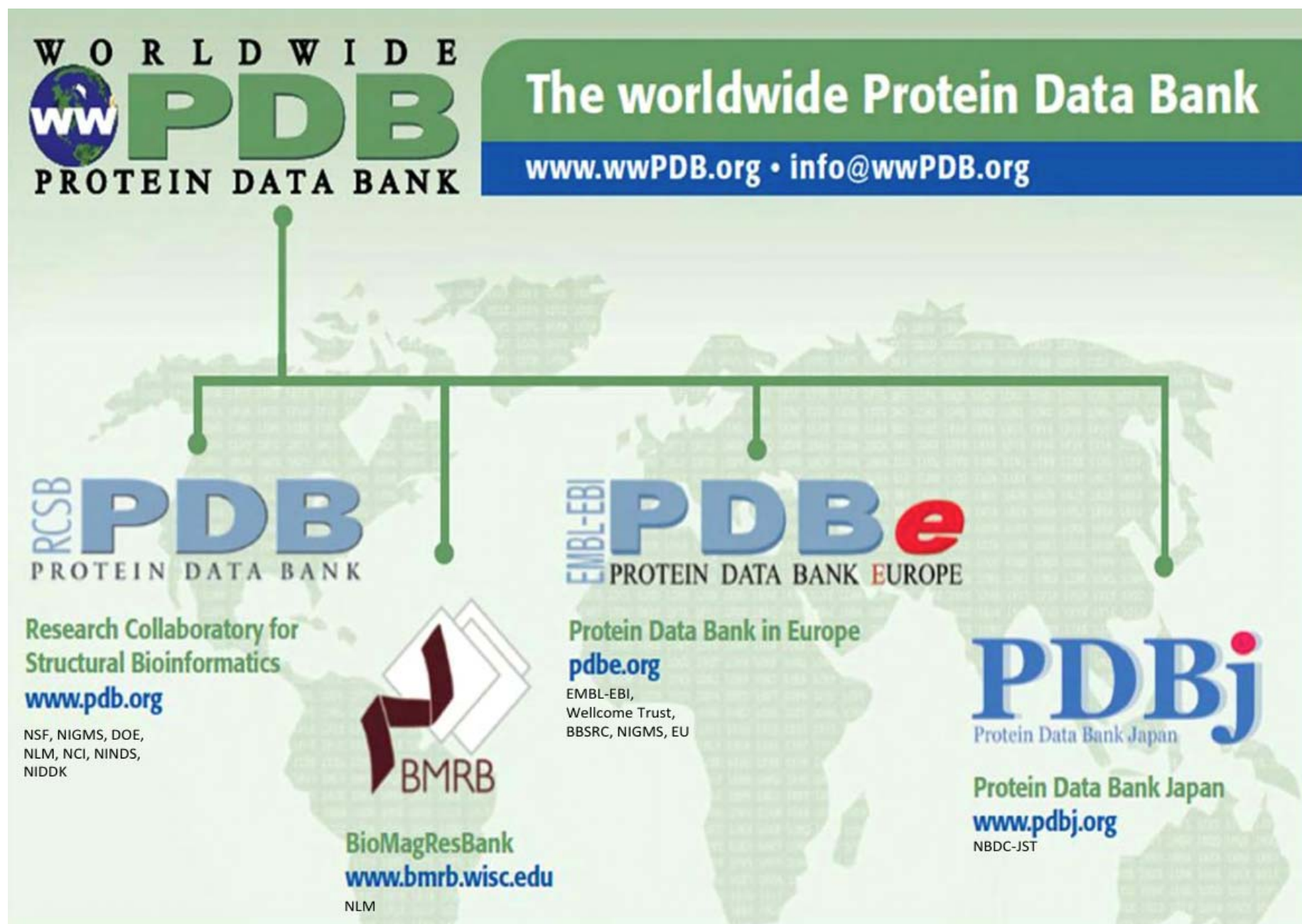


クラウドコンピューティング、仮想化技術と 生体高分子NMRのデータベースの有効利用

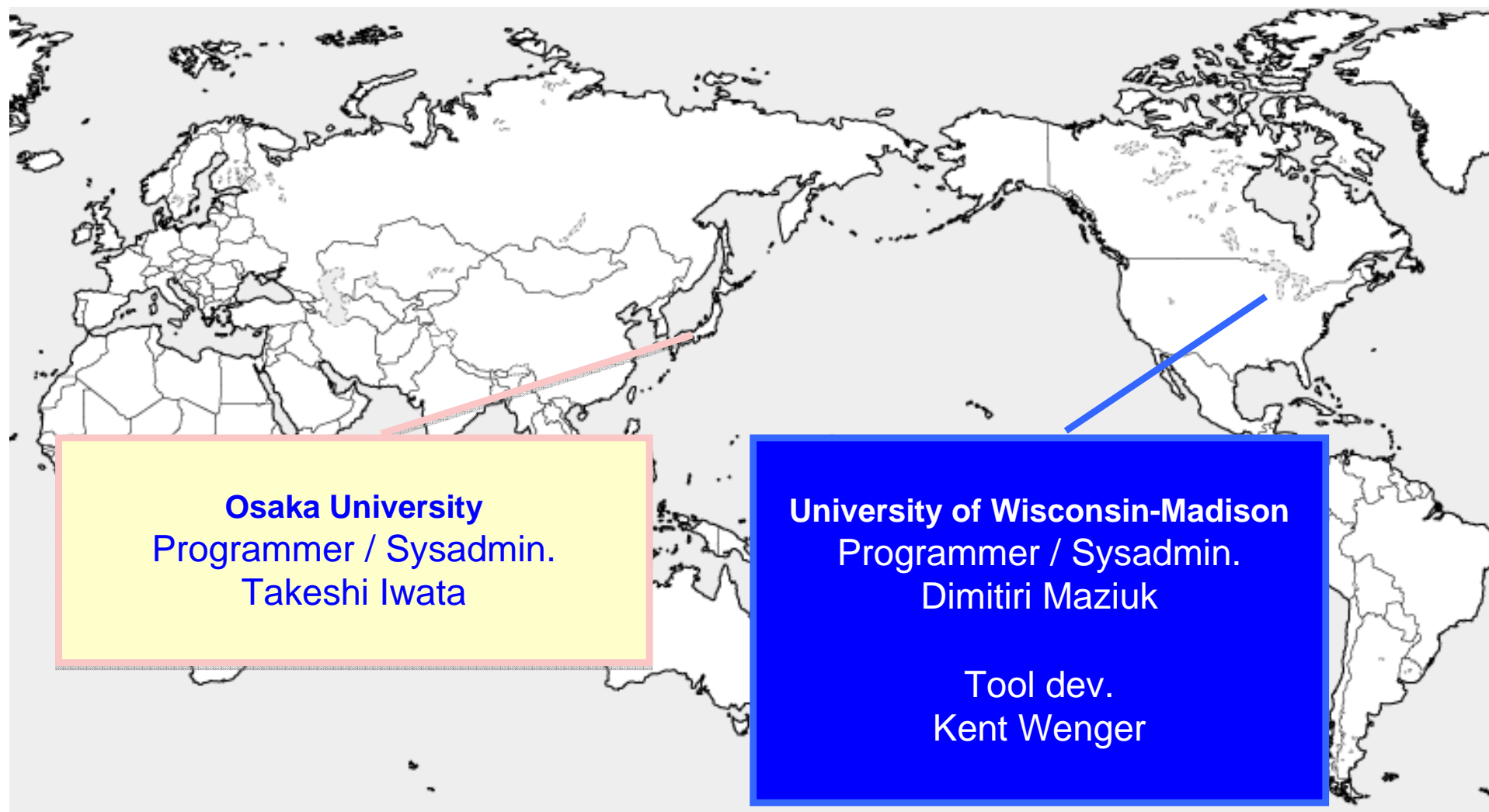
大阪大学 蛋白質研究所： 小林直宏

PDBj-BMRBの紹介

wwPDB: 世界4拠点によるデータベースの開発と運営



NMRデータベースの運用・開発とその連携



NMRデータの登録サイト、公開サイト

The image displays two overlapping web browser windows. The background window is the 'ADIT-NMR Entry Start Page' in Mozilla Firefox, showing instructions for creating new or continuing existing NMR depositions. The foreground window is 'Access to BMRB Biological NMR Data' in a standard browser, showing a search interface with various navigation links and search options.

ADIT-NMR Entry Start Page (Background Window):


- URL: nmradit.protein.osaka-u.ac.jp/bmr-b-adit/
- Logos: RCSB PDB, BMRB, ADIT-NMR
- Text: "ADIT-NMR tool for creating individual or combined depositions"
- Link: "The PDB entry requirements can be found on this page: <http://www.wwpdb.org/>"
- Section: "To create a new ADIT-NMR deposition (including an NMR structure based on a previously deposited structure)"
- Buttons: "New ADIT-NMR", "BEGIN"
- Section: "To continue with an existing session from a previous deposition"
- Buttons: "Continue Previous Session", "Session Restart ID" (example: 2008-07-01.serverhostname.9999.1234)
- Section: "To begin a new deposition using a previously deposited structure"
- Buttons: "New Session Copied From Previous Deposition", "Previous Session's Restart ID" (example: 2006-07-01.serverhostname.9999.1234)
- Contact info: deposit@deposit.rcsb.org, bmrhelp@bmr.wisc.edu

Access to BMRB Biological NMR Data (Foreground Window):

- URL: www.bmr.wisc.edu/search/
- Logo: BMRB
- Text: "Biological Magnetic Resonance Data Bank", "A Repository for Data from NMR Spectroscopy on Proteins, Peptides, Nucleic Acids, and other Biomolecules"
- Navigation Links: Search Archive, Validation Tools, Deposit Data, NMR Statistics, Spectroscopists' Corner, Programmers' Corner, Home, Site Map, FTP Access, Structural Genomics and other "omics", Metabolomics, Educational Outreach, NMR Data Formats, Useful NMR Links
- Section: "Search" (with a molecular structure graphic)
- Section: "Access to BMRB Biological NMR Data"
- Form: "Retrieve entry by BMRB accession number" with an input field and "Open" button
- Text: "By: ☒ Accession number ☐ Deposition code (explain the difference)"
- Form: "Find BMRB entries by" with a dropdown menu (set to "PDB"), an input field for "ID", and a "Search" button
- Text: "Search references provided by entry author" (radio button), "Search references generated by weekly BLAST search" (radio button, selected)
- Text: "Lookup table for the 'find BMRB entries' form above:"
- Text: "Matched submitted BMRB-PDB entries:"
- Text: "list of matches derived from BLAST search, with extra information. See [README](#) for details."
- Text: "entries submitted to PDB and BMRB from the same deposition session"
- Form: "Search for substring(s) in entry titles" with an input field and "Search" button
- Form: "View NMR restraints by PDB ID" with an input field and "Open" button
- Section: "Experimental [Chemical Shift Query](#)"

PDBj-BMRBのポータルサイト

[English](#)



PDBj-BMRBでは生体高分子のNMR実験データの登録受付・公開をPDBjグループの一員として行っています。

BMRB Search

Retrieve entry by BMRB accession No.

☒ Accession number ☐ Deposition code

登録後の処理状況もAcc.No.で検索すると確認できます。

Retrieve by keywords [Google]

☒ BMRB Database ☐ www

Deposit Data

ADIT-NMR

生体高分子のNMR実験データの登録はこちら。







SMS-Dep

低分子量生体分子のNMR実験データと原子座標データ登録

BMRB Database

Osaka site

BMRBウェブサイトはこちら。



Contents

Over view of the Submission Process

BMRB(データバンク)へデータ登録の流れ

Submitting data

登録サイトADIT-NMRの使い方、登録項目

ADIT-NMR or SMS-Dep

どちらに登録するべきか

FAQ

よく寄せられるご質問をまとめています

NMR Tool BOX

帰属解析ツール

BMRBxTool

データベース活用ツール

Tool List

Validation Tool
Deposit Tool
PDBj-BMRB Tool

Contact us

お問い合わせ

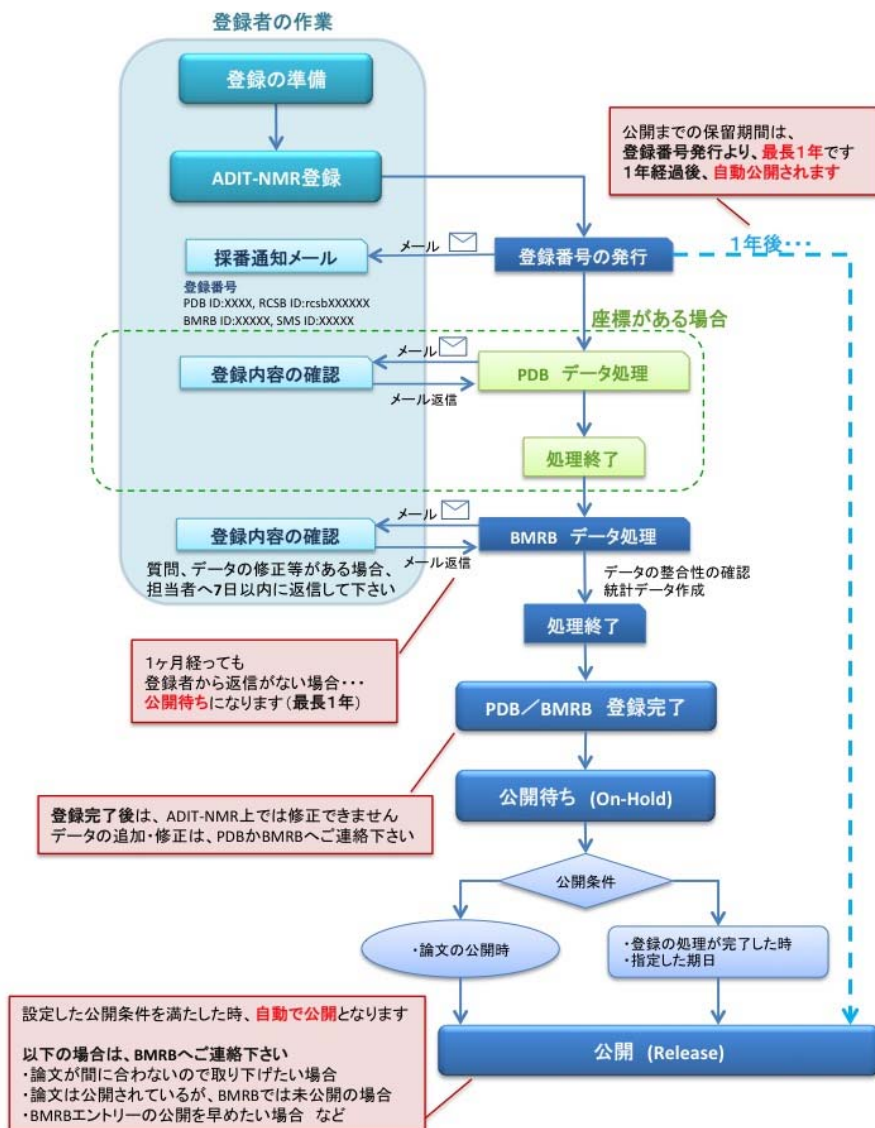
Information

Feb. 04-2013 2013年2月6日以降にADIT-NMRにてPDBに登録される座標と実験データは、同じ公開条件(ステータス)に従います。(リンク)

ポータルサイトのコンテンツ

BMRB登録作業のフロー

FAQ



よくあるお問い合わせ

- 1. BMRBデータの内容・登録について
- 2. データの公開・検索サービスについて
- 3. 化学シフトについて
- 4. トラブルシューティング
- 5. その他

1. BMRBデータの内容・登録について

Q 1-1 初めて登録をするのですが、どうしたらいいですか。

A トップページ上のSubmitting dataをクリックすると、データ登録の手引きがご覧いただけます。
データ登録の手引きでは、下記以外の「提出するファイル」や「ADIT-NMR 入力項目についての解説」の詳細も載せています。

- * 登録を始める前に：登録の際に、留意していただきたい事項
- * 登録の流れについて：登録から公開までのフローチャート
- * 入力項目と記入例：実際に入力する項目の一覧表

Q 1-2 ADIT-NMRの操作方法を知りたい。

Q 1-3 NMR-STARフォーマットについて詳しく知りたい。

Q 1-4 NMR構造データは既にPDB登録済みで、その構造を得るために行ったNMR実験データをBMRBに登録したい。

Q 1-5 NMR実験データは既にBMRB登録済みで、その実験から得たNMR構造データをPDBに登録したい。

Q 1-6 既存BMRB・PDB登録を利用して、新しいNMRデータを登録したい。

Q 1-7 既存BMRB登録の内容を修正したい。

Q 1-8 既存PDB登録の内容を修正したい。

2. データの公開・検索サービスについて

Q 2-1 登録データの公開時期はどのように設定できますか。

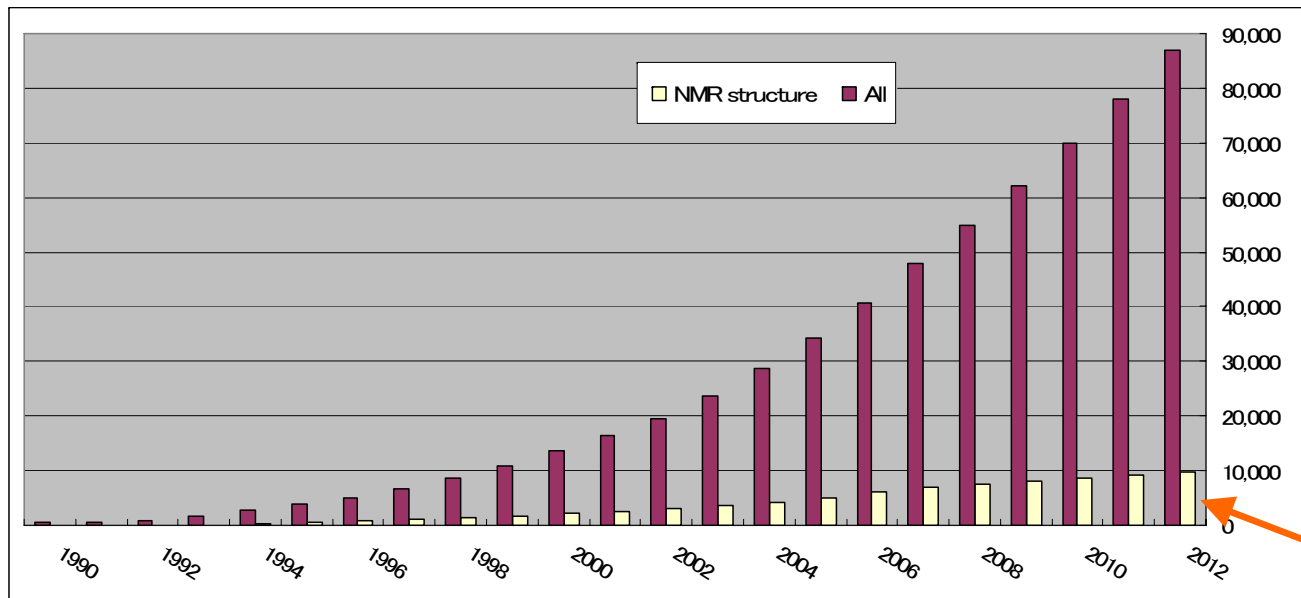
Q 2-2 BMRB登録の処理状況を教えてください。

Q 2-3 論文に掲載されていたBMRB登録がまだ公開されていません。いつ頃公開されるか判りますか。

Q 2-4 PDB登録を取り下げた(WITHDRAWN)のですが、関連するBMRB登録も取り下げする必要がありますか。

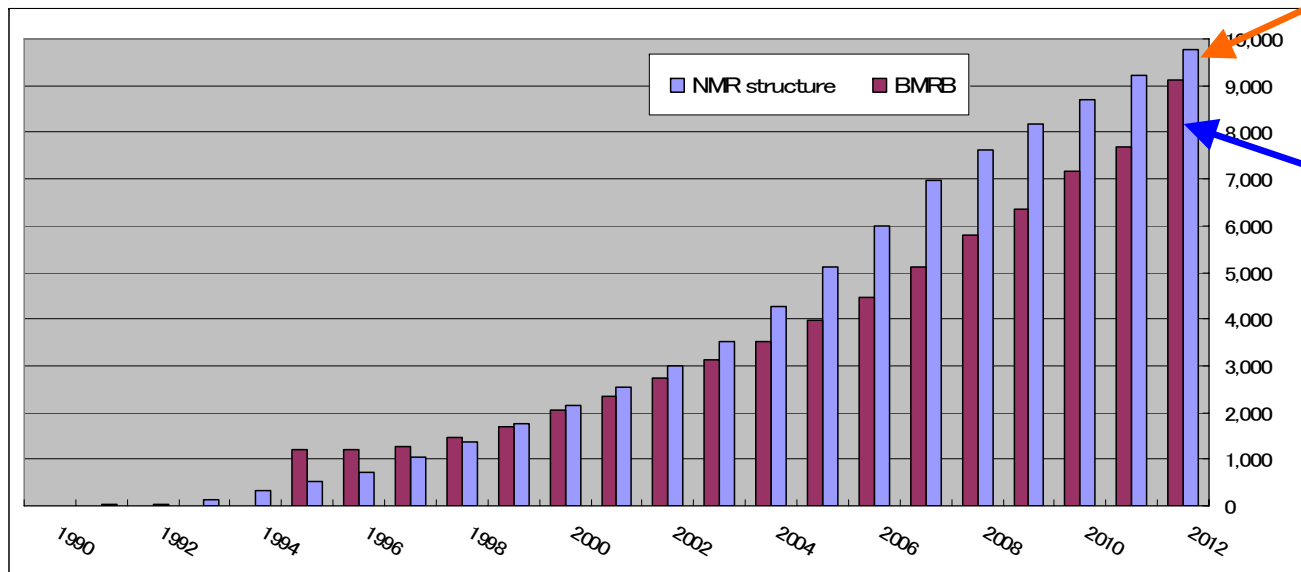
Q 2-5 他データベースの登録データに関連したNMR実験データを見たいのですが、BMRB登録番号が判りません

BMRB (BioMagResBank): 生体高分子NMRデータベース



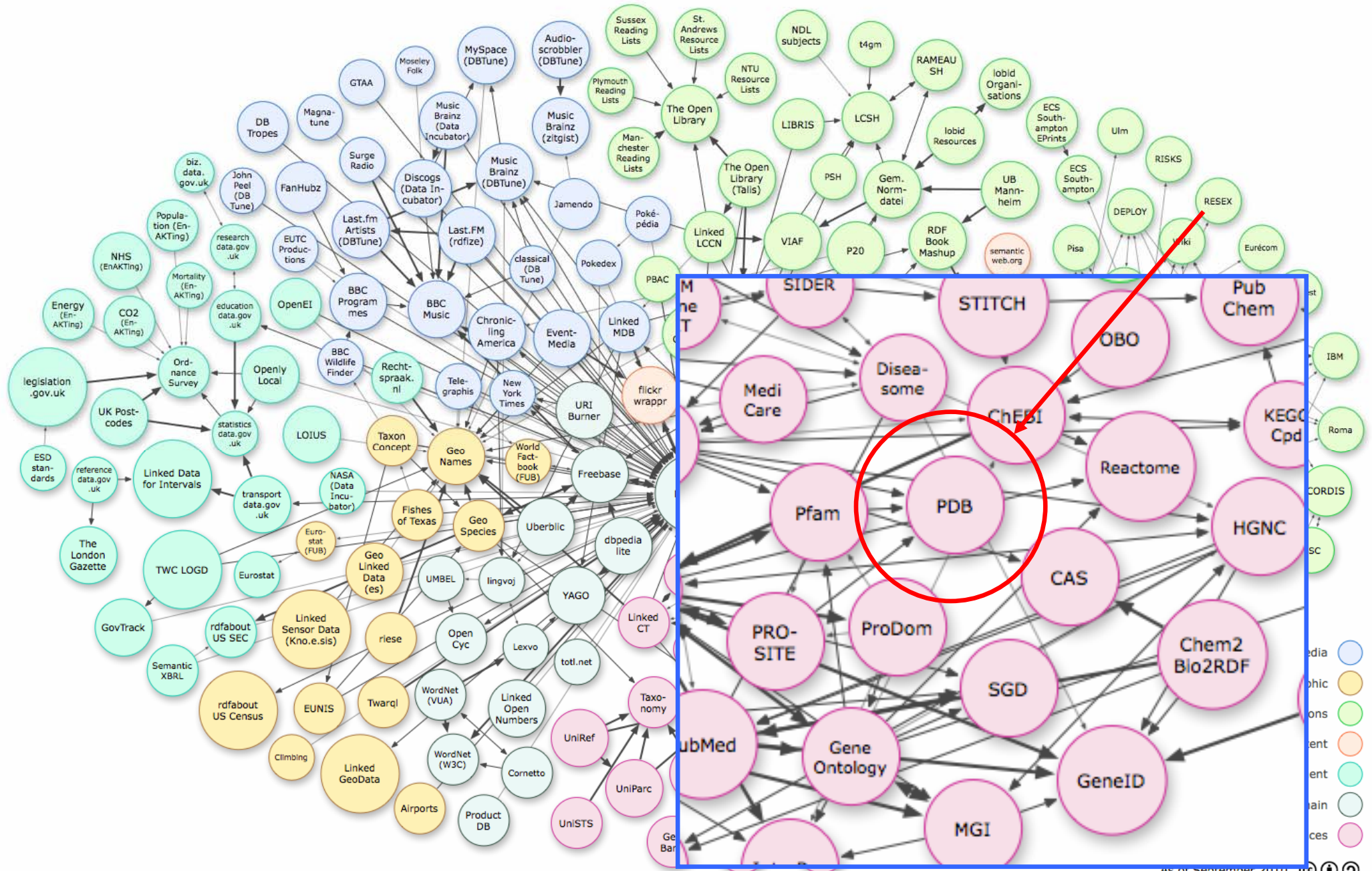
NMR構造は年間500件以上
BMRBエントリーは700件以上
のペースで増え続けている

2013年8月末の時点で
NMR構造は10,077件



BMRBエントリーは約9,000件
を越えた

ビッグデータ時代の到来: ライフサイエンスにおける LOD (Linked Open Data)



BMRBエントリのXML化とRDF化の実際

NMR-STAR v3

BMRBoTool

BMRBxTool

BMRB/RDF **BMRB/XML**

```
submission_date>
/>

_experimental_method_subtype>

version>
original_nmr_star_version>

category>
framecode>
submission_date>
Backbone and side chain chemical shift assignments of the F153-to-5-fluoro
BMRBx:title>
```

ical
nt c
ate

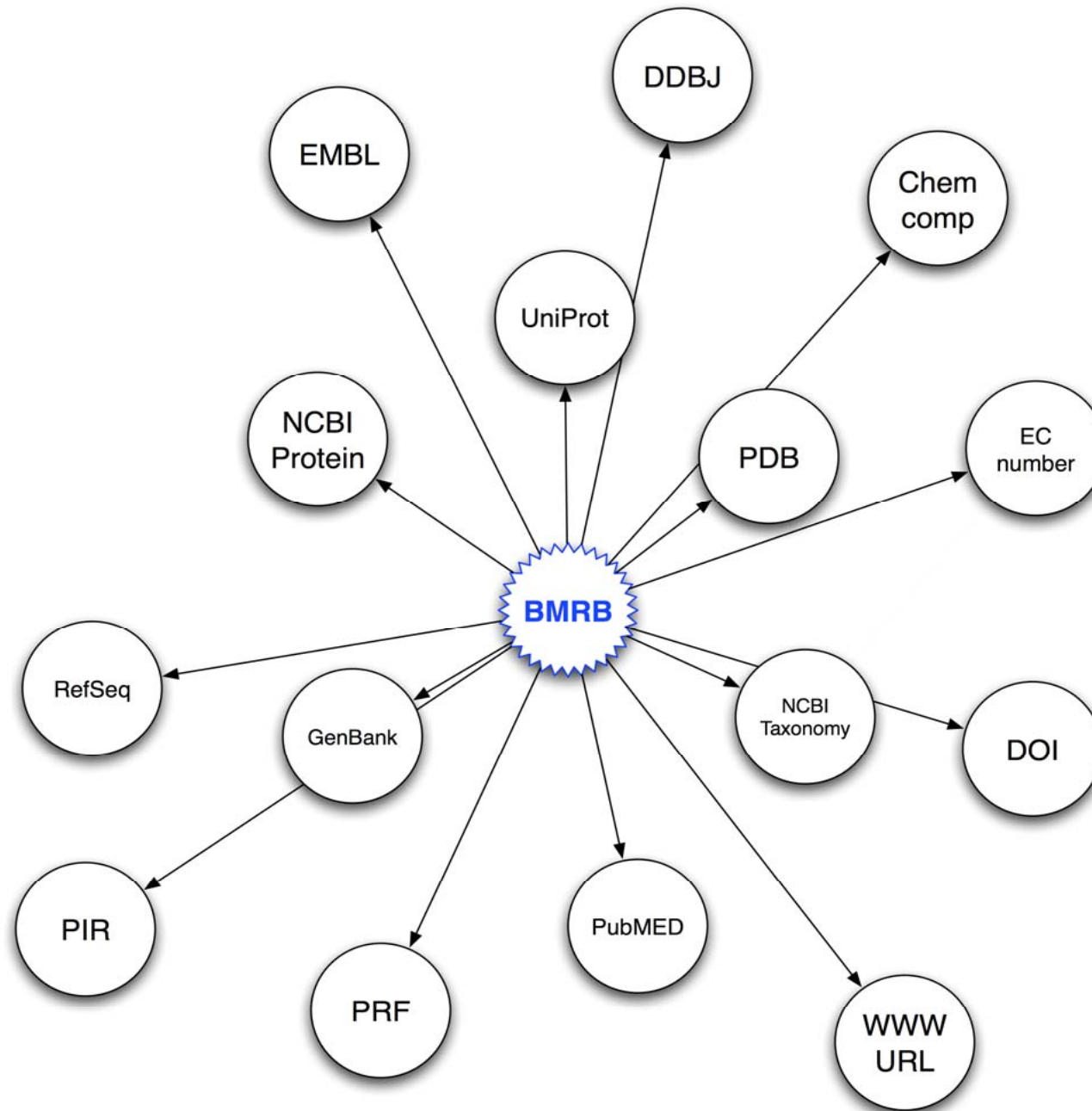
```
<BMRBo:has_entryCategory>
  <BMRBo:entryCategory rdf:about="http://bmrpub.protein.osaka-u.ac.jp/rdf/bmr15400/entryCategory">
    <BMRBo:has_entry>
      <BMRBo:entry rdf:about="http://bmrpub.protein.osaka-u.ac.jp/rdf/bmr15400/entry/15400">
        <BMRBo:of_datablock rdf:resource="http://bmrpub.protein.osaka-u.ac.jp/rdf/bmr15400"/>
        <BMRBo:entry.id>15400</BMRBo:entry.id>
        <BMRBo:entry.accession_date>2006-12-07+09:00</BMRBo:entry.accession_date>
        <BMRBo:entry.experimental_method>NMR</BMRBo:entry.experimental_method>
        <BMRBo:entry.experimental_method_subtype>SOLUTION</BMRBo:entry.experimental_method_subtype>
        <BMRBo:entry.nmr_star_version>3.0.8.100</BMRBo:entry.nmr_star_version>
        <BMRBo:entry.original_nmr_star_version>3.0.8.100</BMRBo:entry.original_nmr_star_version>
        <BMRBo:entry.origination>author</BMRBo:entry.origination>
        <BMRBo:entry.sf_category>entry_information</BMRBo:entry.sf_category>
        <BMRBo:entry.sf_framecode>entry_information</BMRBo:entry.sf_framecode>
        <BMRBo:entry.submission_date>2006-12-07+09:00</BMRBo:entry.submission_date>
        <BMRBo:entry.title>Backbone and side chain chemical shift assignments of the F153-to-5-fluoro
        tryptophan mutant of human cardiac troponin C</BMRBo:entry.title>
        <BMRBo:entry.version_type>original</BMRBo:entry.version_type>
      </BMRBo:entry>
    </BMRBo:has_entry>
  </BMRBo:entryCategory>
</BMRBo:has_entryCategory>
```

```
_Entry.Original_NMR_STAR_version  
_Entry.Experimental_method  
_Entry.Experimental_method_subtype solution  
_Entry.Details .  
_Entry.BMRB_internal_directory_name .
```

bmr15400.xml
bmr15400.rdf

bmr15400.str

RDF化されたBMRBエン트리と外部データベースとのリンク



仮想化技術について

仮想化技術の利点

少電力化、省スペース化(たくさんのOSが1台に)

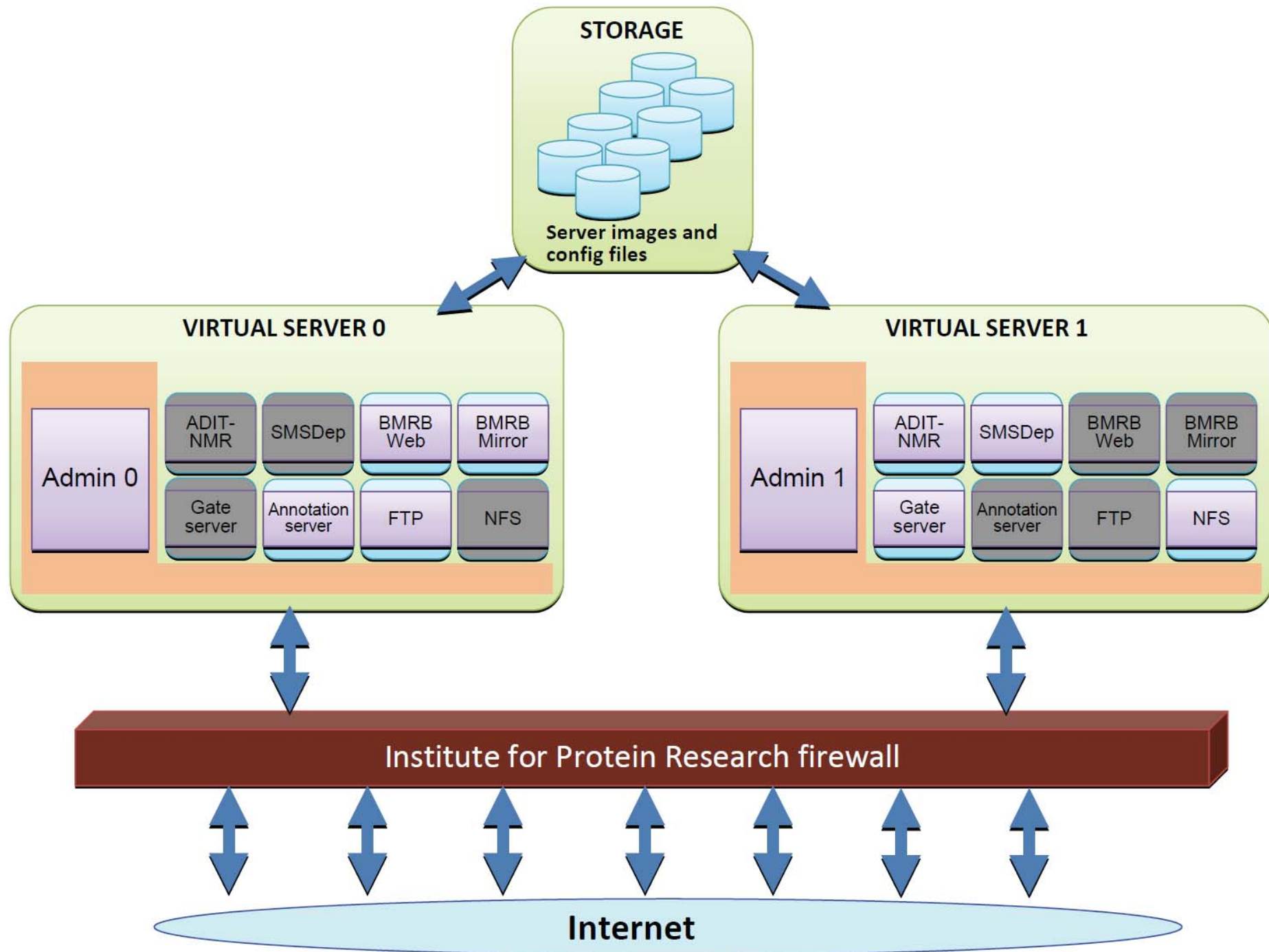
耐障害性向上(仮想サーバーを冗長的に構築)

バックアップ、復元操作が容易
(仮想OSイメージをコピーすればいい)

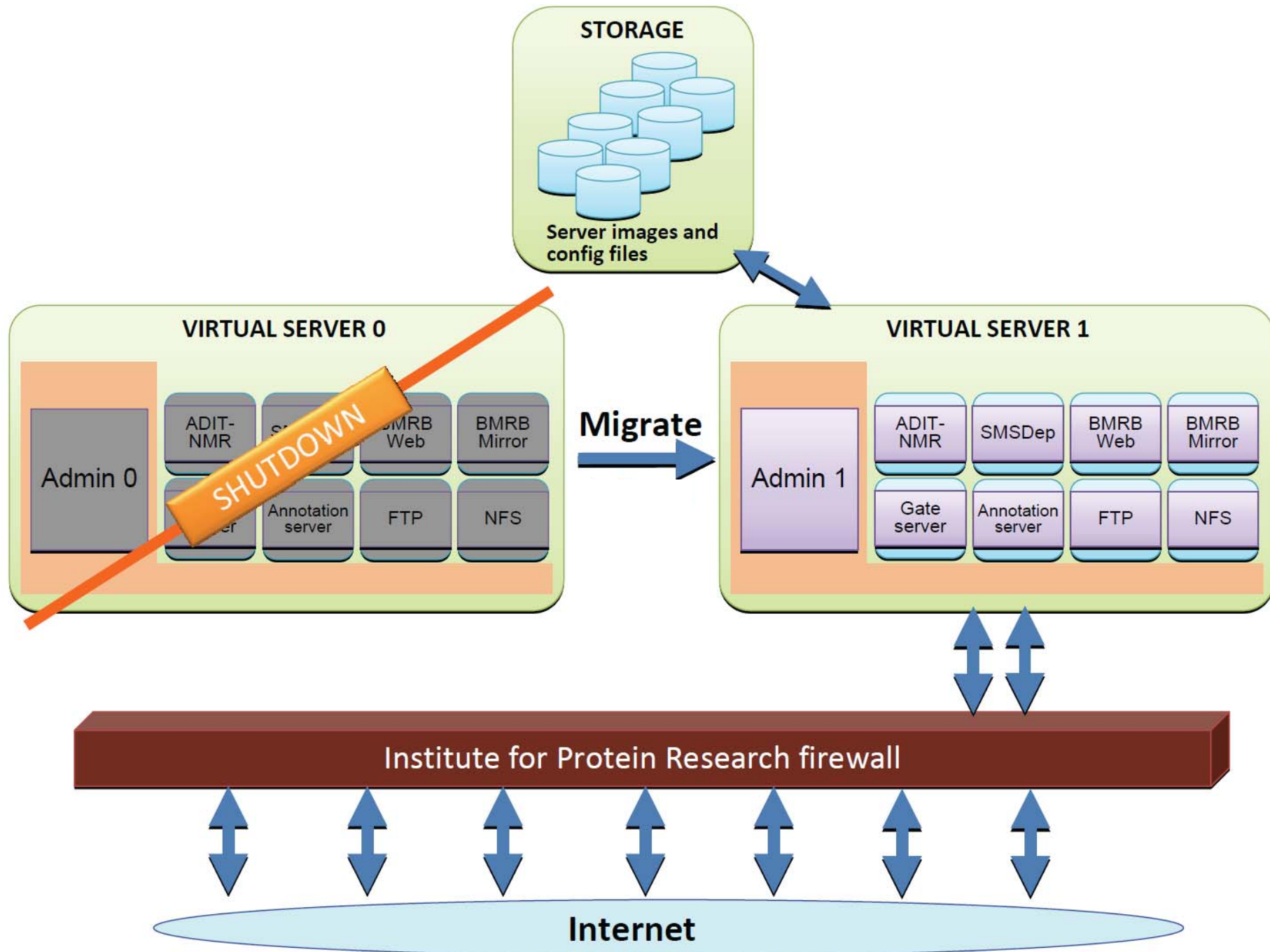
アプリケーションなどの長期運用が可能
ハードウェアの寿命、故障等の心配から解放される・・・？

仮想マシンといっても意外と速い・・・

サーバー群仮想化による耐障害性の強化



サーバー群仮想化による耐障害性の強化



デスクトップPCで仮想マシンを
構築してみよう

どのくらいのスペックが必要か



サーバー向け

Xeon 560番台、6-Core X 2 (12-Core)

32GB メモリ

256GB SSD (~300MB/sec)

2TB RAID1+0 / 2TB RAID1+0 mirror

ホストOS: CentOS 5.7-64bit / Xen



デスクトップ向け

Core i7-2600 (4-Core)

12GBメモリ

128G SSD (~400MB/sec)

1TB ソフトウェアRAID1

USB3.0 (~300MB/sec)

ホストOS: Windows7-64bit / VirtualBox

コア数、搭載メモリも多めに
ストレージの転送速度も重要

Downloads - Oracle VM VirtualBox - Mozilla Firefox

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 履歴(S) ブックマーク(B) ツール(T) ヘルプ(H)

https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads

VirtualBox

About
Screenshots
Downloads
Documentation
End-user docs
Technical docs
Contribute
Community

Download VirtualBox

Here, you will find links to VirtualBox binaries :

VirtualBox binaries

By downloading, you agree to the terms and conditions of the respective license.

- **VirtualBox platform packages.** The binaries are released under the terms of the GPL version 2.
 - VirtualBox 4.2.6 for Windows hosts → x86/amd64
 - VirtualBox 4.2.6 for OS X hosts → x86/amd64
 - VirtualBox 4.2.6 for Linux hosts
 - VirtualBox 4.2.6 for Solaris hosts → x86/amd64
- **VirtualBox 4.2.6 Oracle VM VirtualBox Extension Pack** → All supported platforms
Support for USB 2.0 devices, VirtualBox RDP and PXE boot for Intel cards. See [this chapter from the User Manual](#) for an introduction to this Extension Pack. The Extension Pack binaries are released under the [VirtualBox Personal Use and Evaluation License \(PUEL\)](#).
Please install the extension pack with the same version as your installed version of VirtualBox!
*If you are using **VirtualBox 4.1.24**, please download the extension pack [here](#).*
*If you are using **VirtualBox 4.0.18**, please download the extension pack [here](#).*
- **VirtualBox 4.2.6 Software Development Kit**

See the [changelog](#) for what has changed.
You might want to compare the

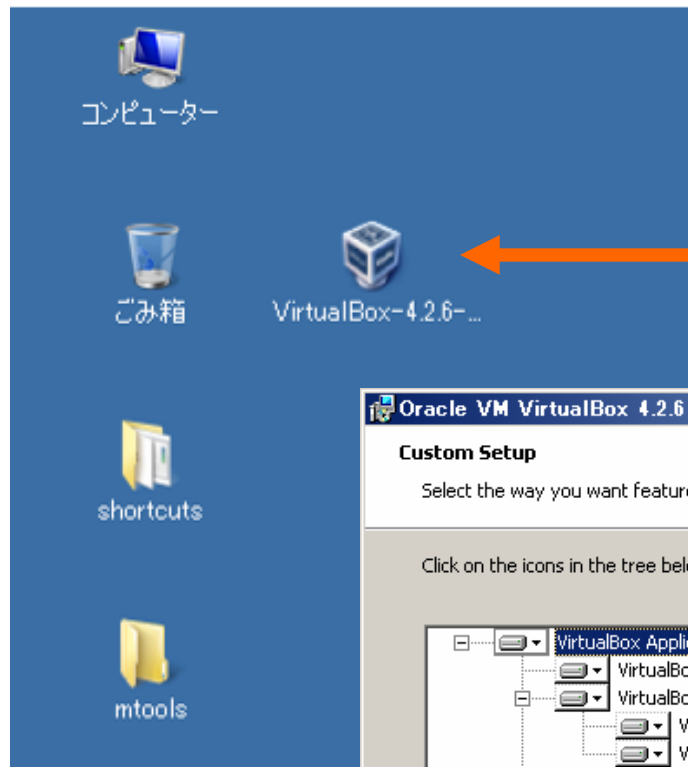
- → [SHA256](#) checksums or the
- → [MD5](#) checksums

to verify the integrity of downloaded packages.
The SHA256 checksums should be favored as the MD5 algorithm must be treated as insecure!

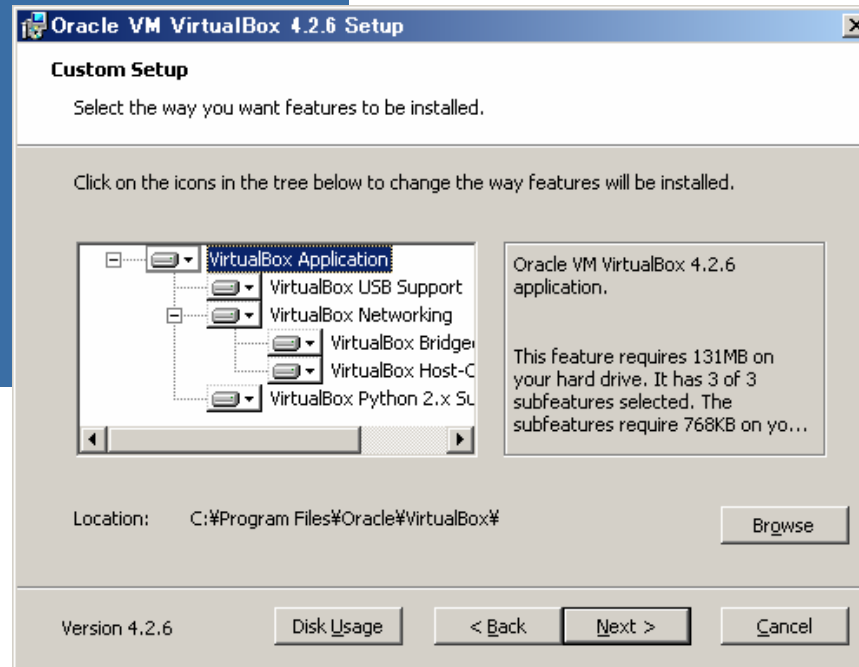
本体のダウンロード (~100MB)

拡張パックのダウンロード (~10MB)

VirtualBoxのインストール (5～10分)



ダブルクリック

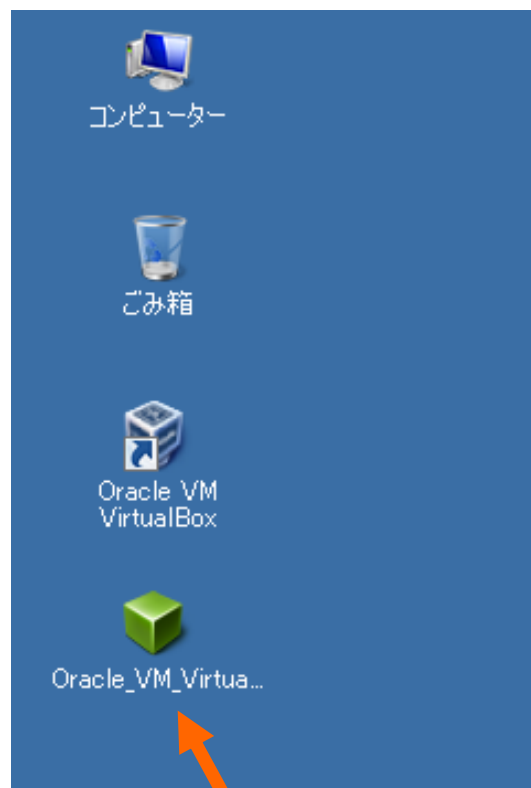


→ → → 終了！

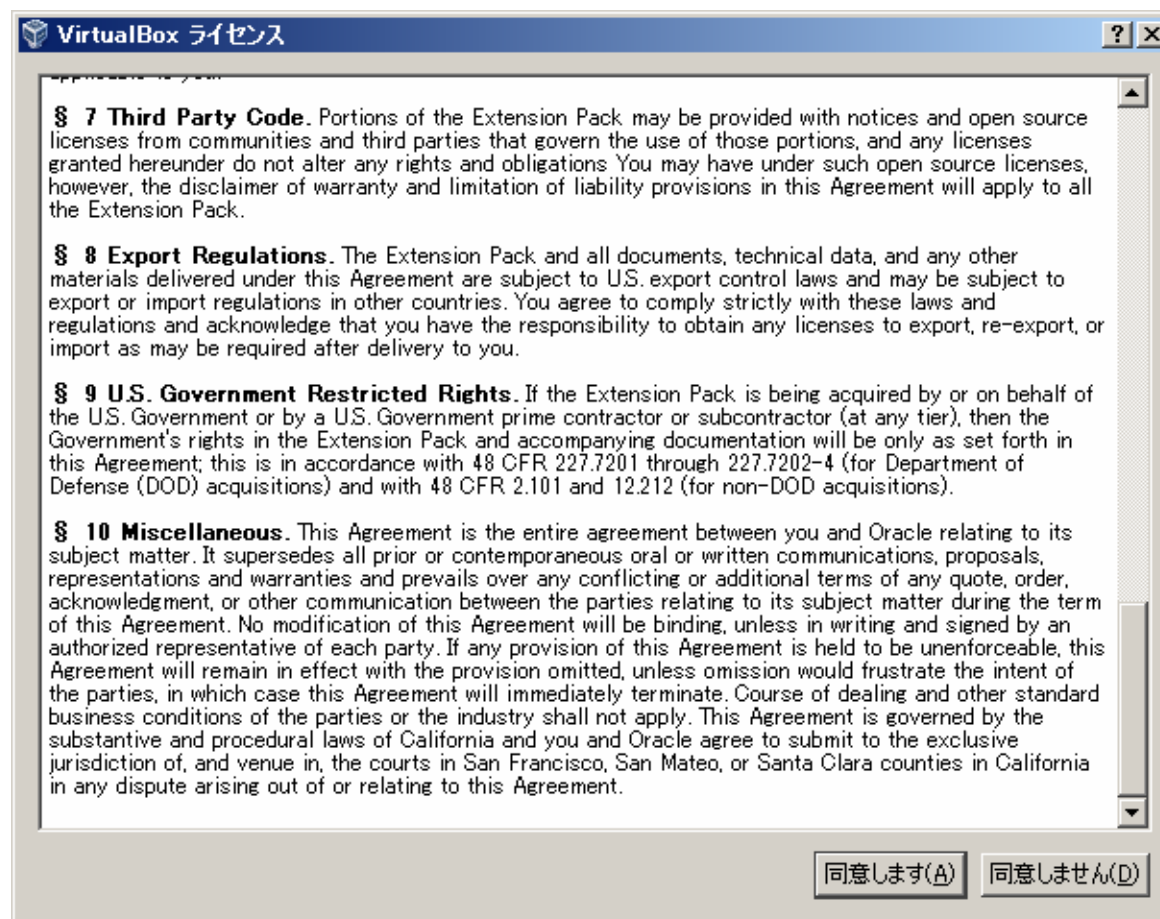
割となすがままでクリックしてみる...

ディスクの残り容量に注意！
～40GBくらいは欲しいです

拡張パックのインストール(~1分)



ダブルクリック

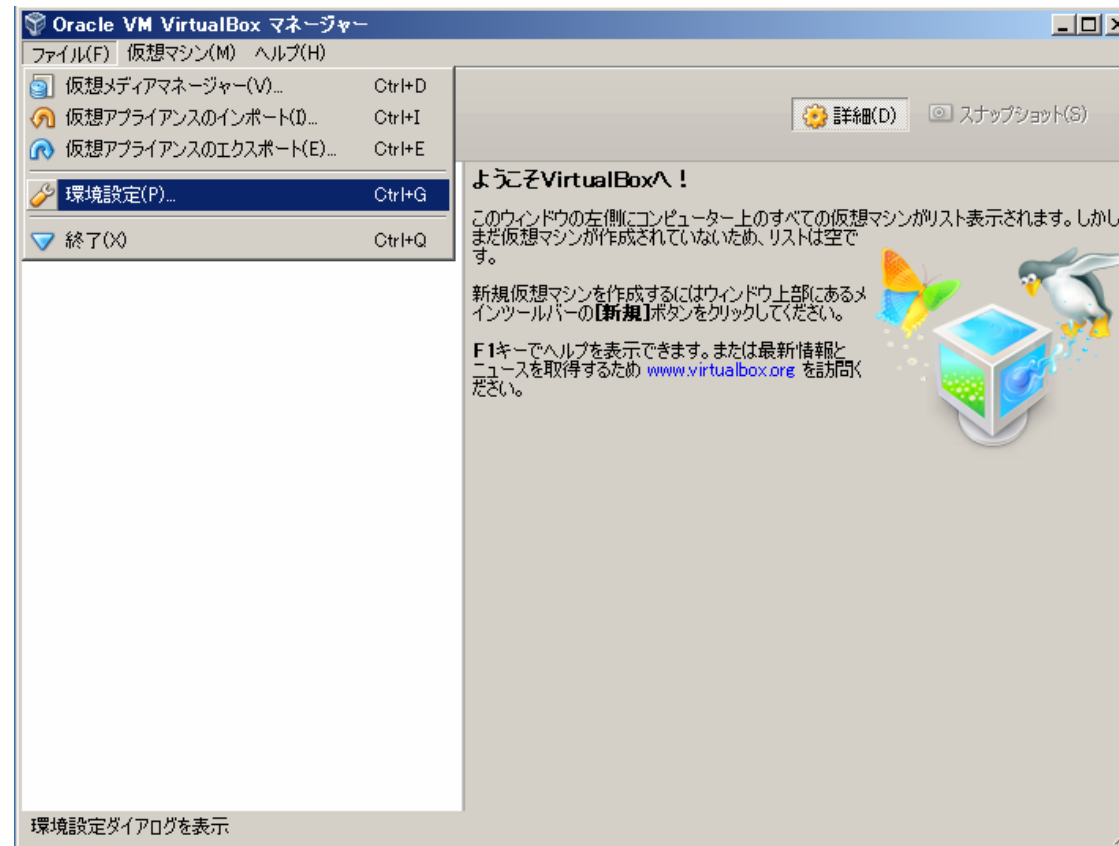


同意してインストールするだけ

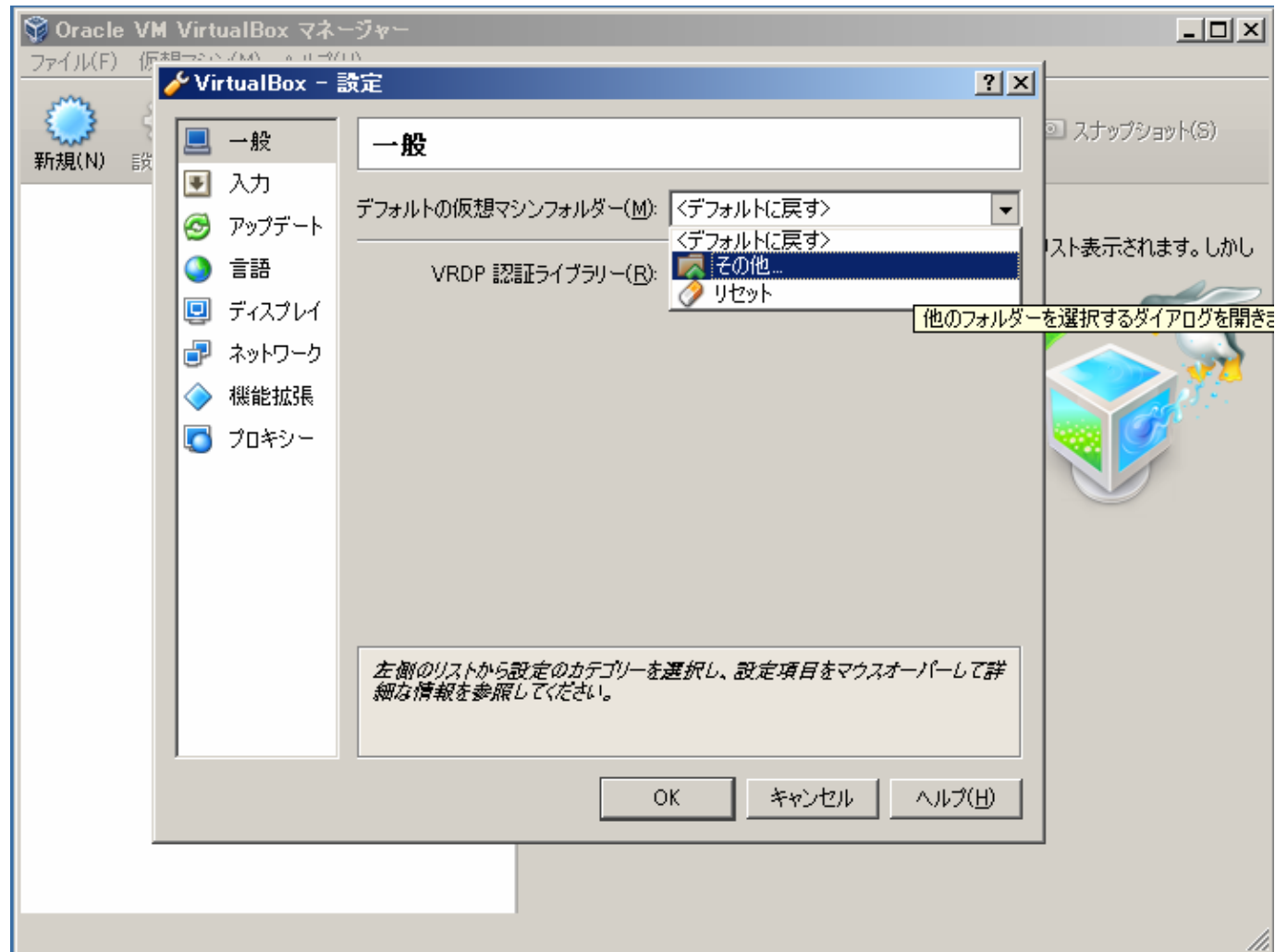
VirtualBoxの環境設定(~5分)



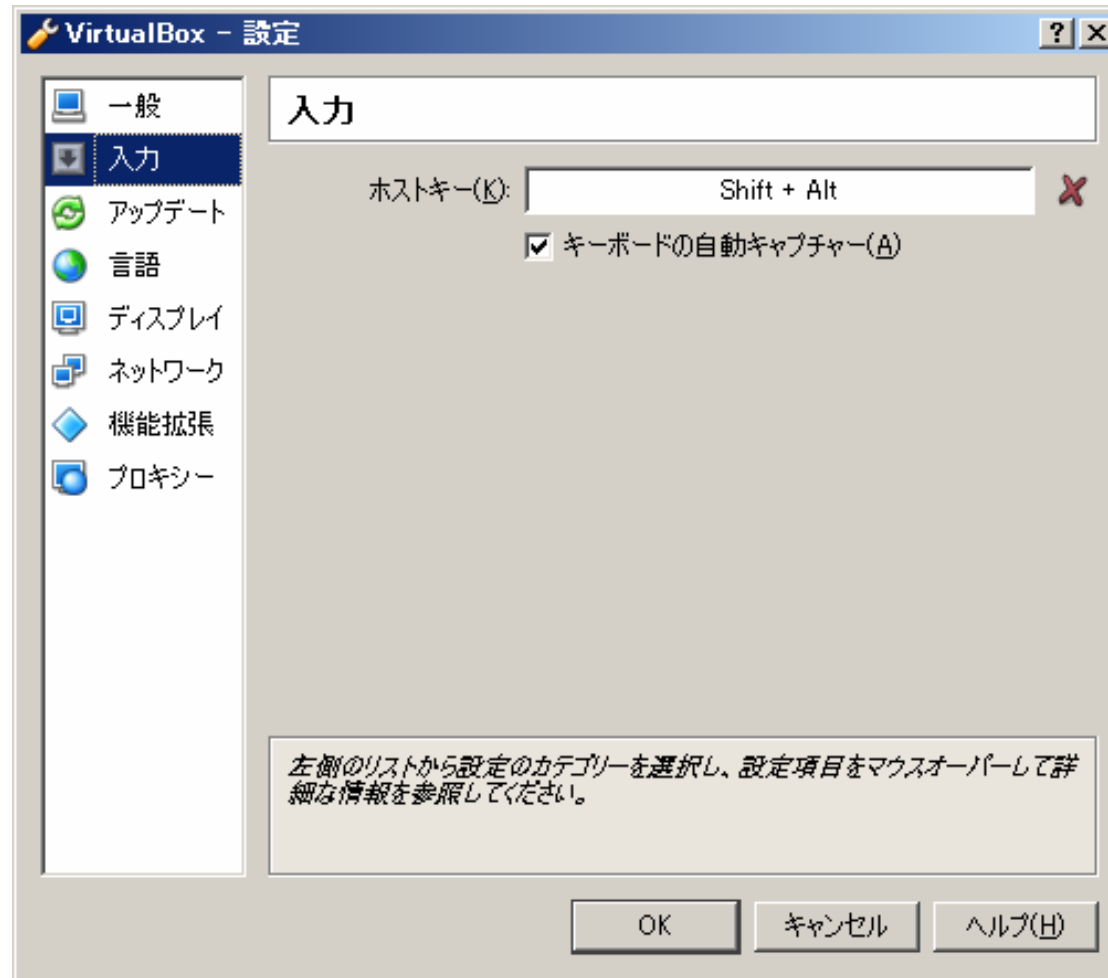
ダブルクリック



仮想イメージ置き場の指定

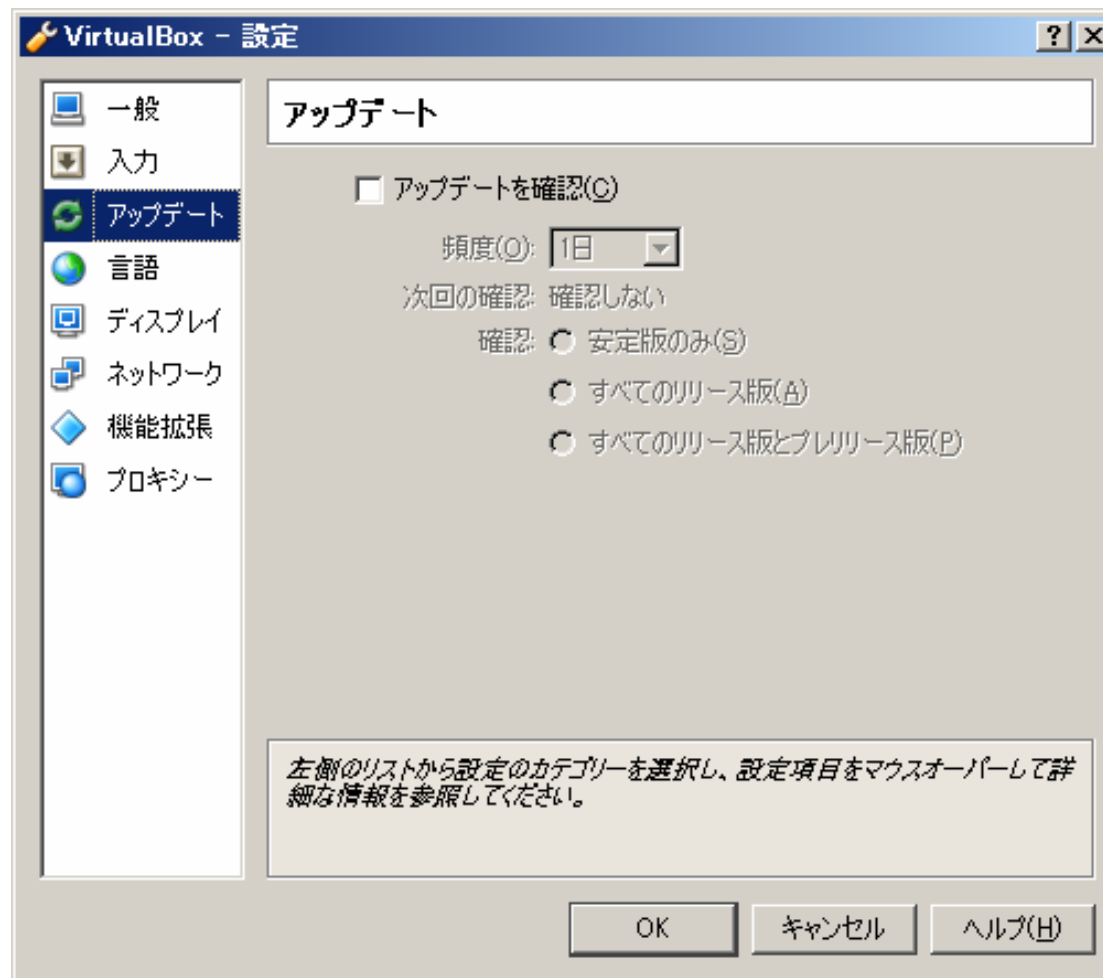


仮想画面から出るためのキー設定



結構大事・・・押せるキーじゃないと駄目
忘れないようにメモっておこう

アップデートは慎重に・・・

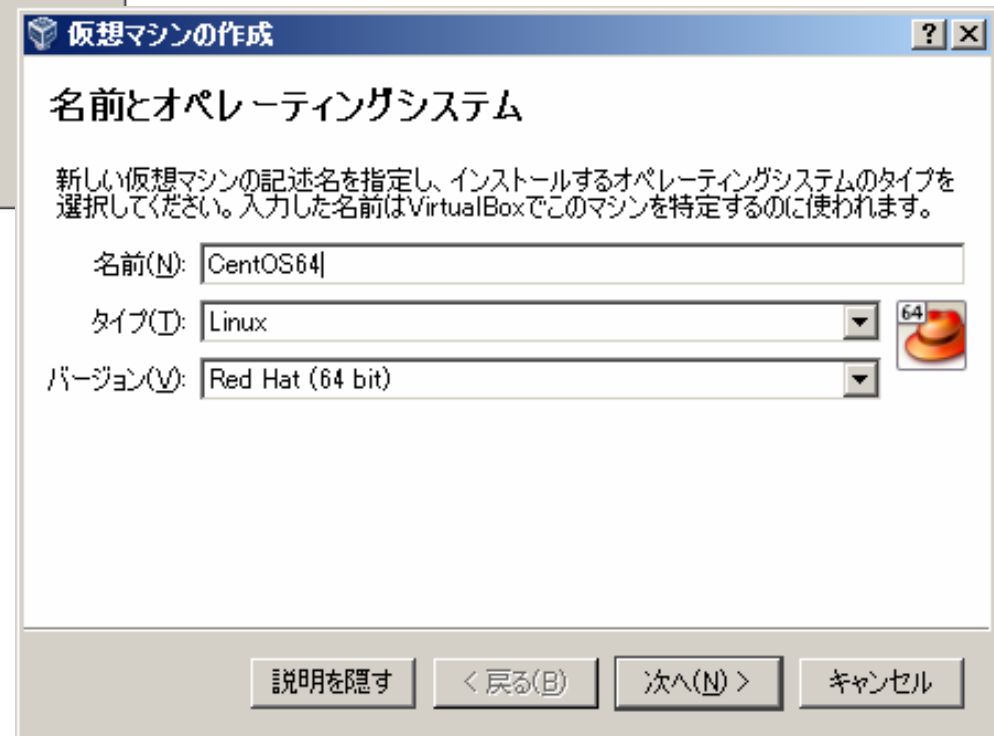
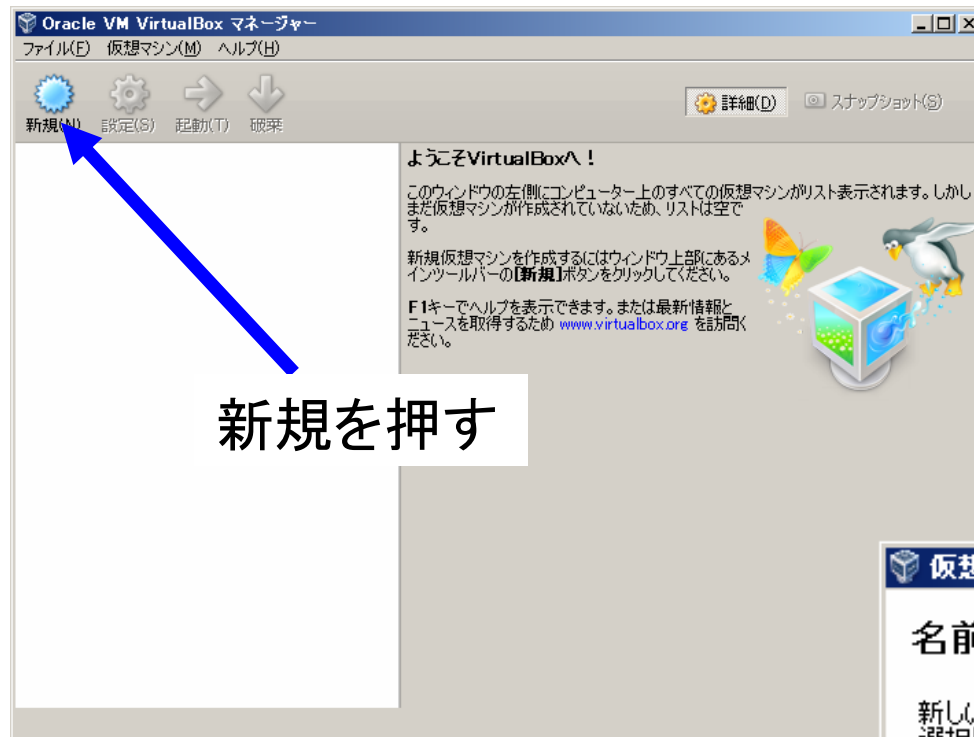


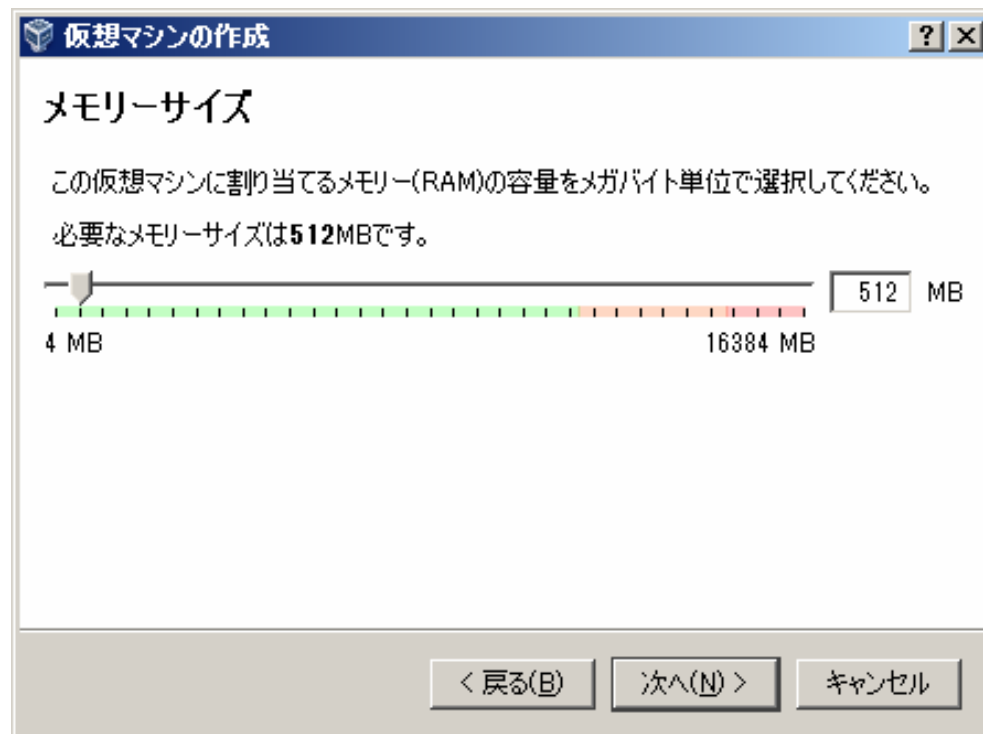
最新版にして不具合が出ることも直ることもあります

仮想OSをインストールしてみる

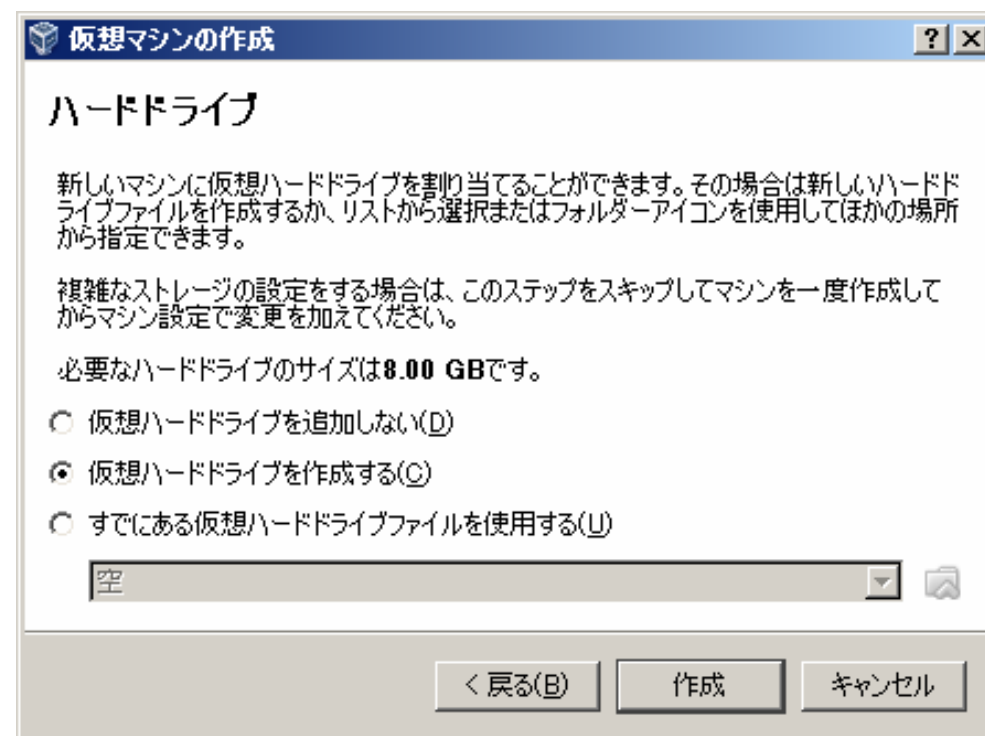
CentOS5.7 64bit

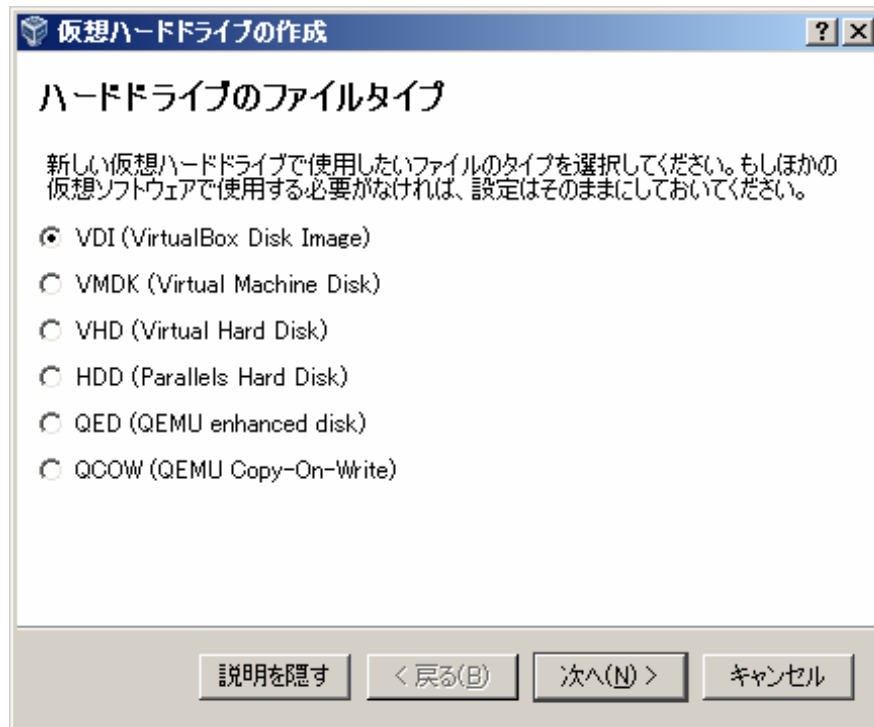
仮想OSのインストール準備（～5分）





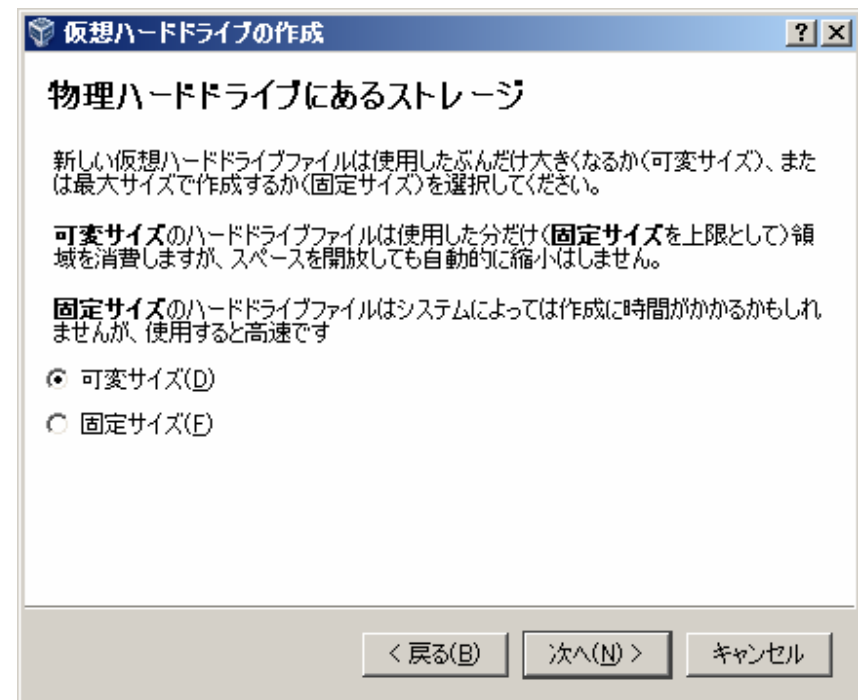
メモリのサイズは後で変更できます



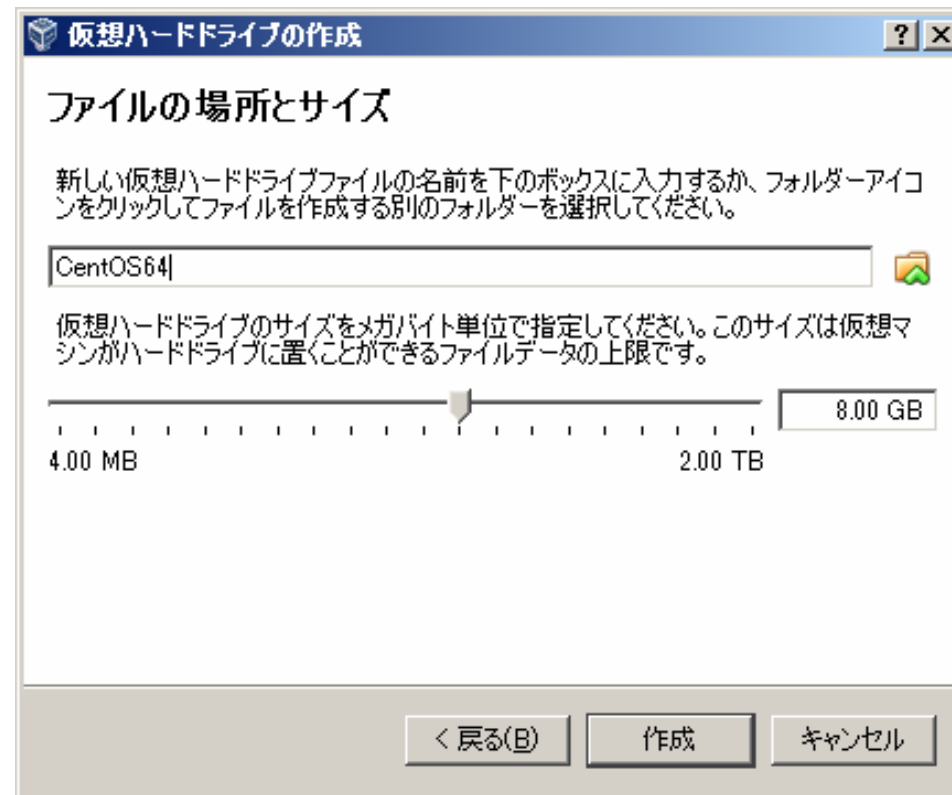


とりあえずVDIを選びます

可変サイズをお勧めします



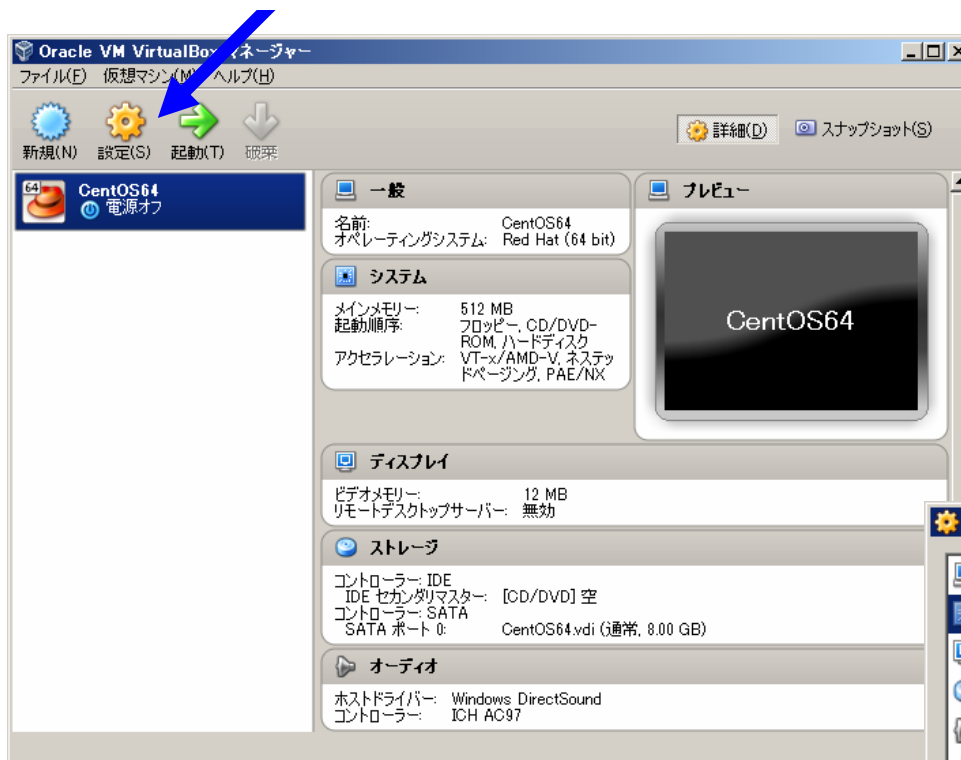
ファイルのサイズを決めるが結構大事です



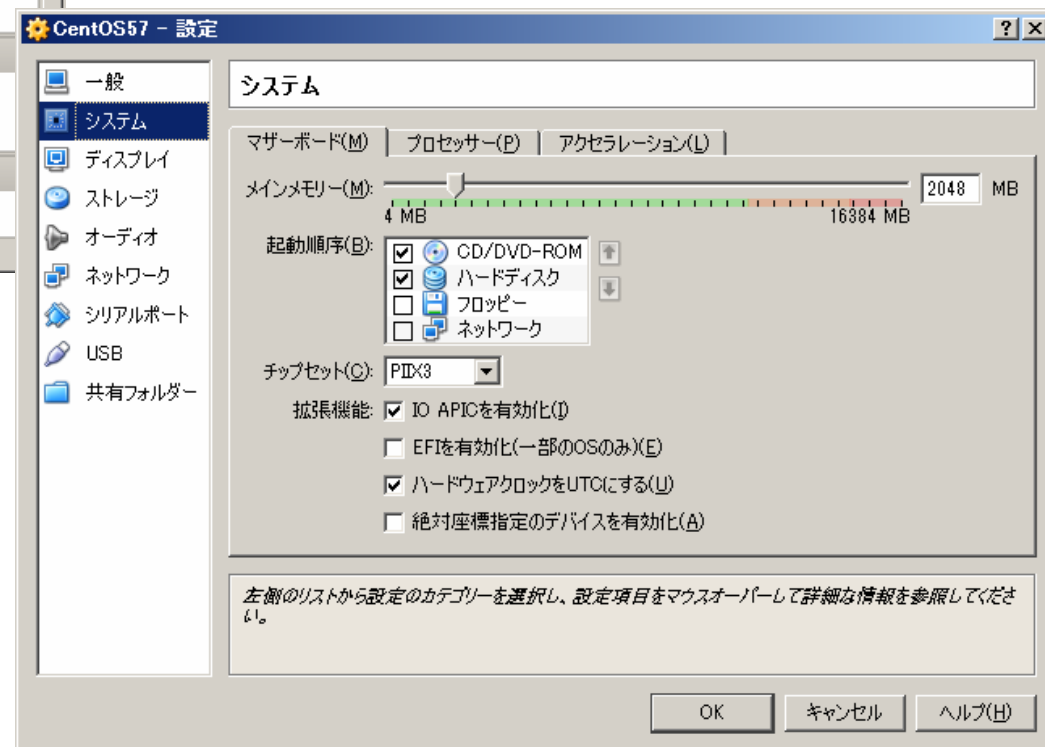
後でサイズを小さくするのは**とても大変です**！
一方、パーティションを増やす、削除するのは簡単です

仮想OSインストール設定（～5分）

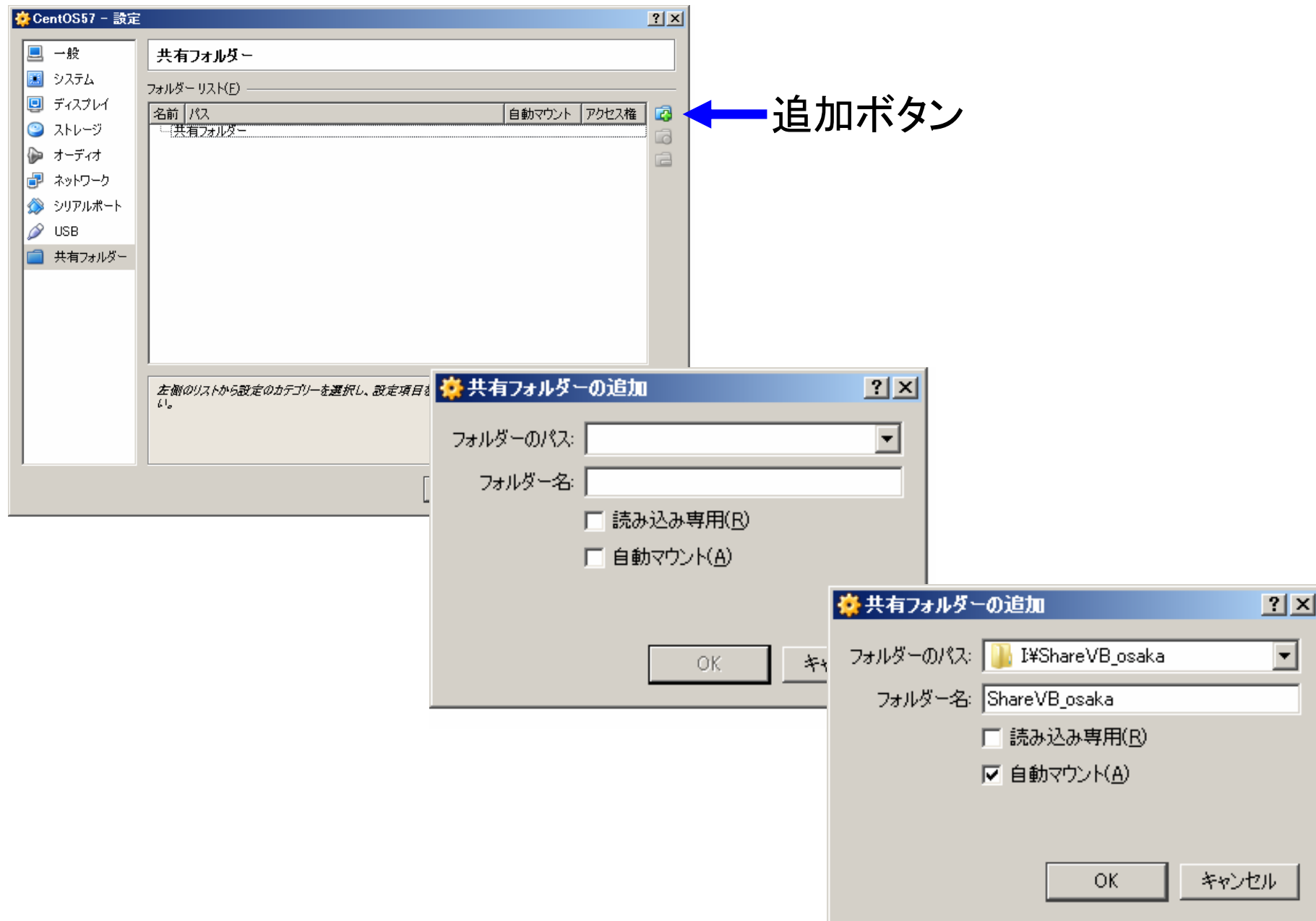
設定ボタンから



搭載メモリ、CPU数などの設定

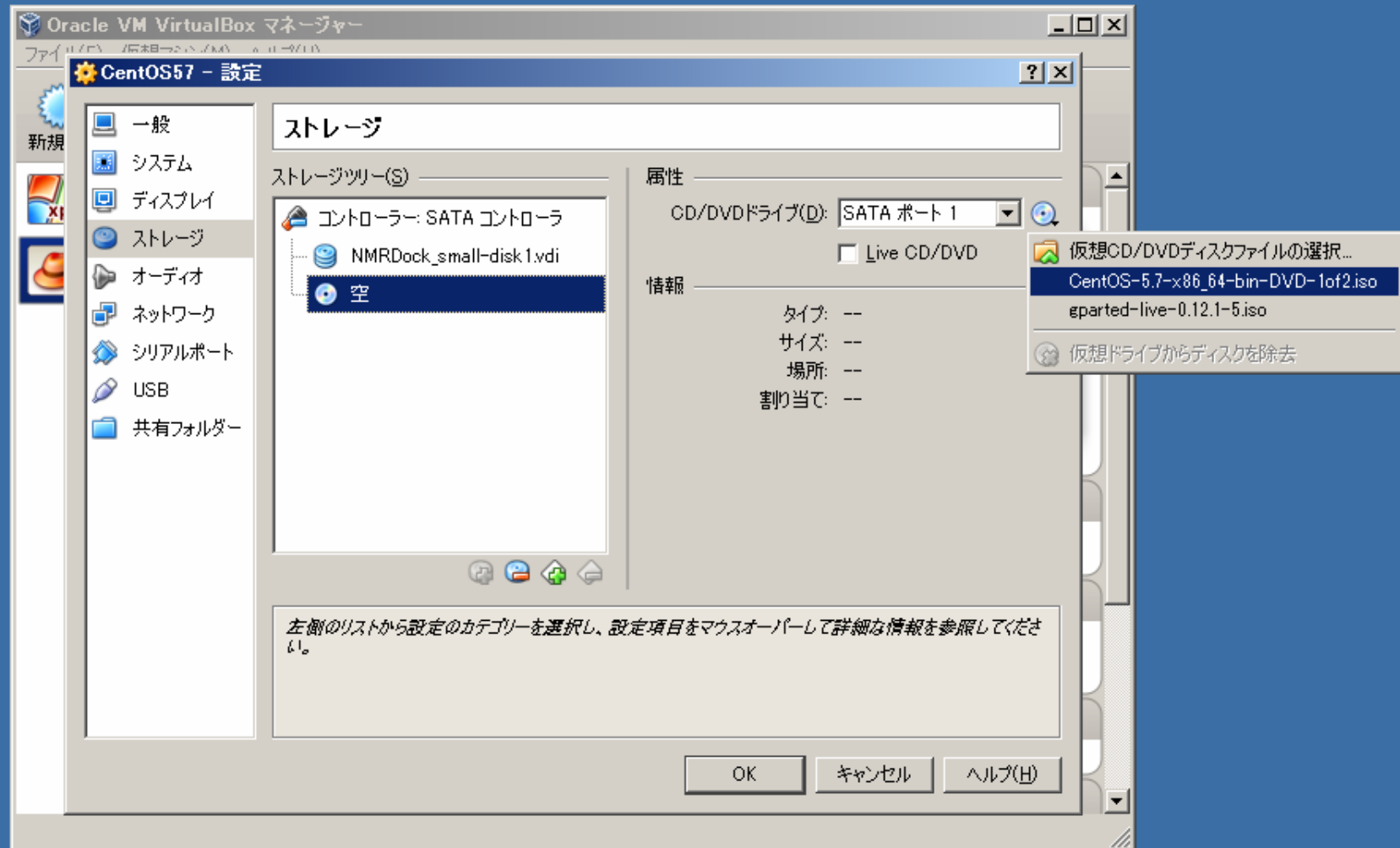


共有フォルダーの設定（～5分）

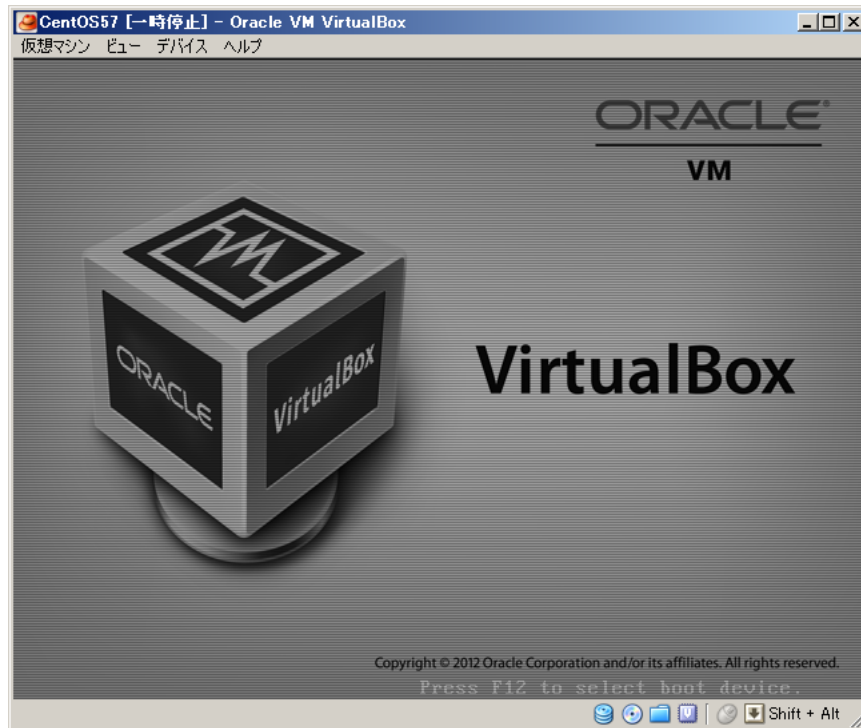


仮想OSインストールの設定（～5分）

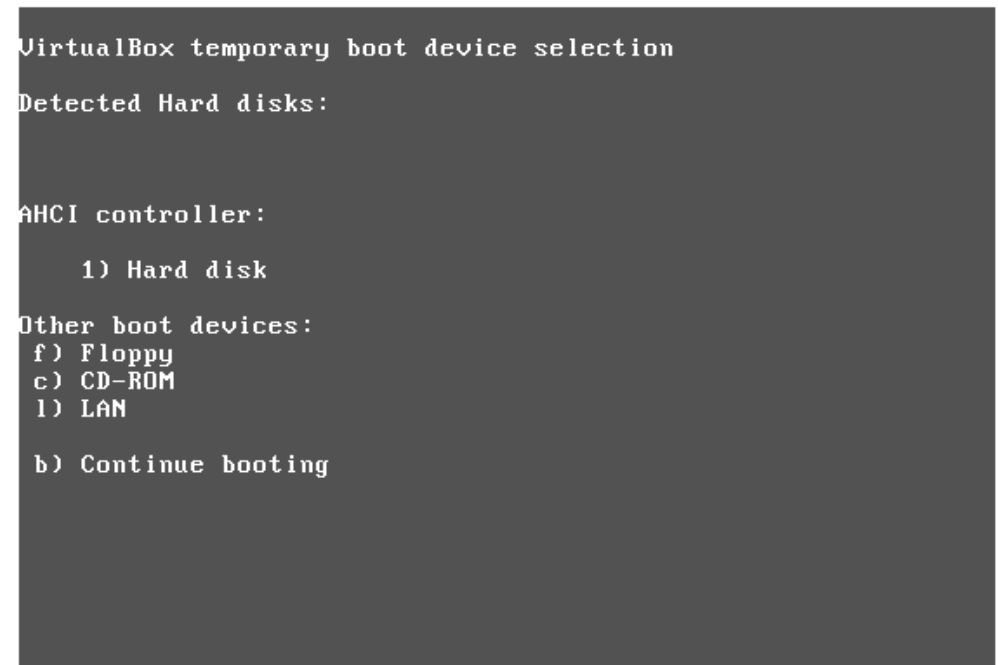
先ほどダウンロードしてきたCentOSインストールファイルを指定



仮想OSインストールの開始



この画面で素早くF12を押します

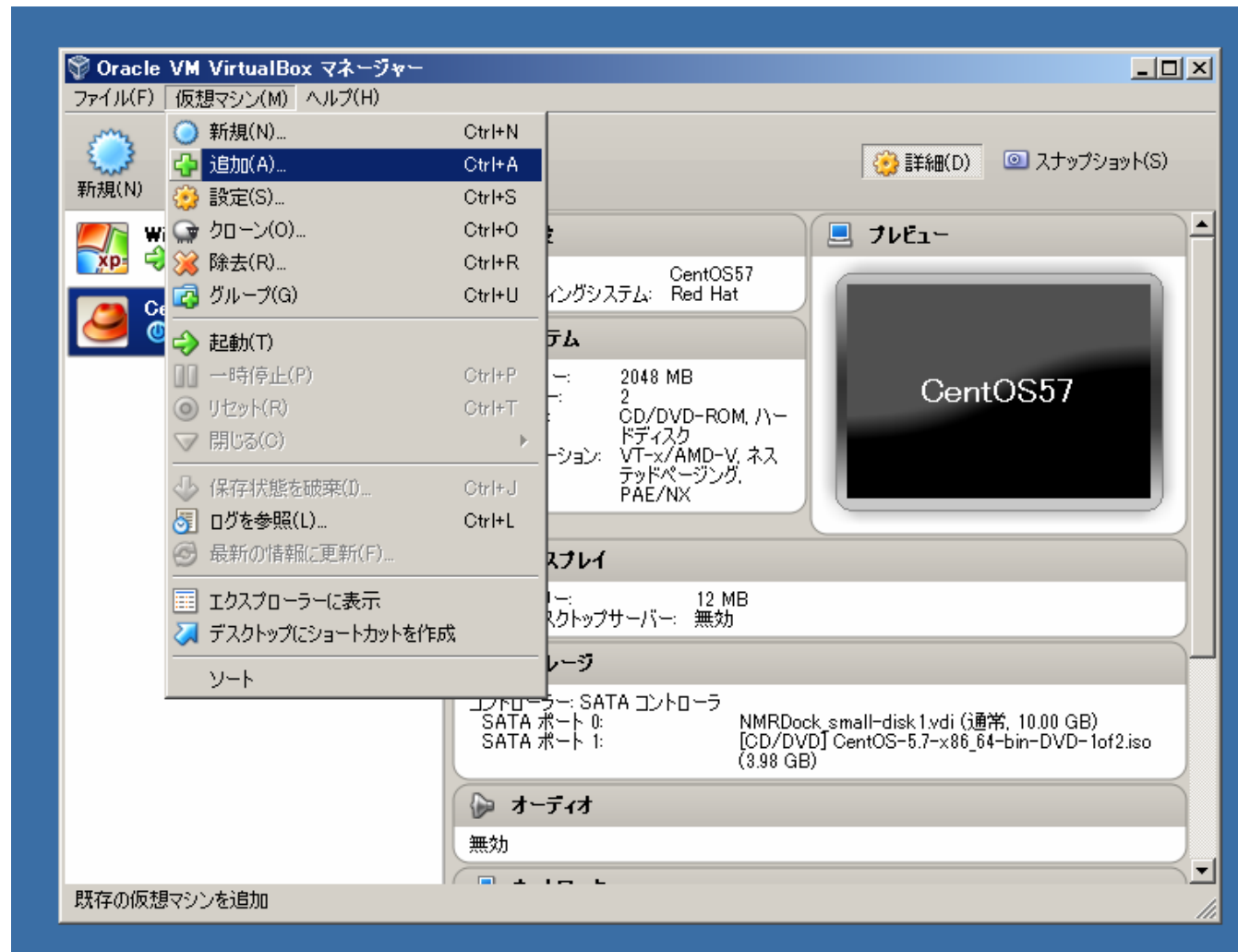


Cを押します

これ以降は通常のCentOSのインストールです・・・
慣れないと結構時間が掛かります

仮想OSイメージの運用

仮想OSイメージの読み込み

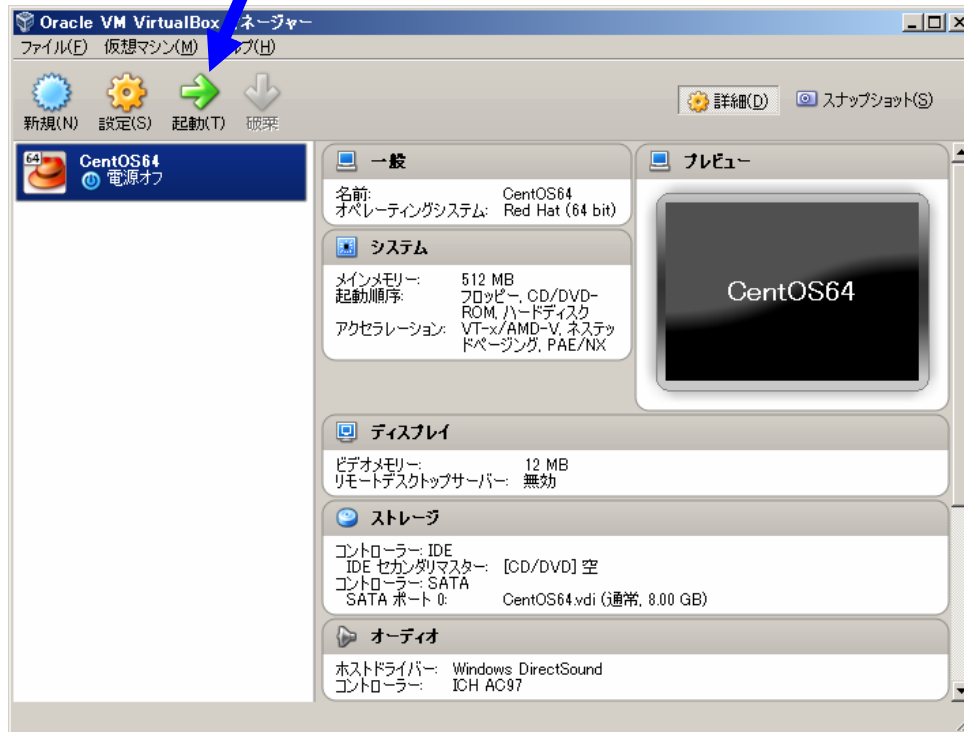


ただ読み込むだけ、エラーが出なければOK!

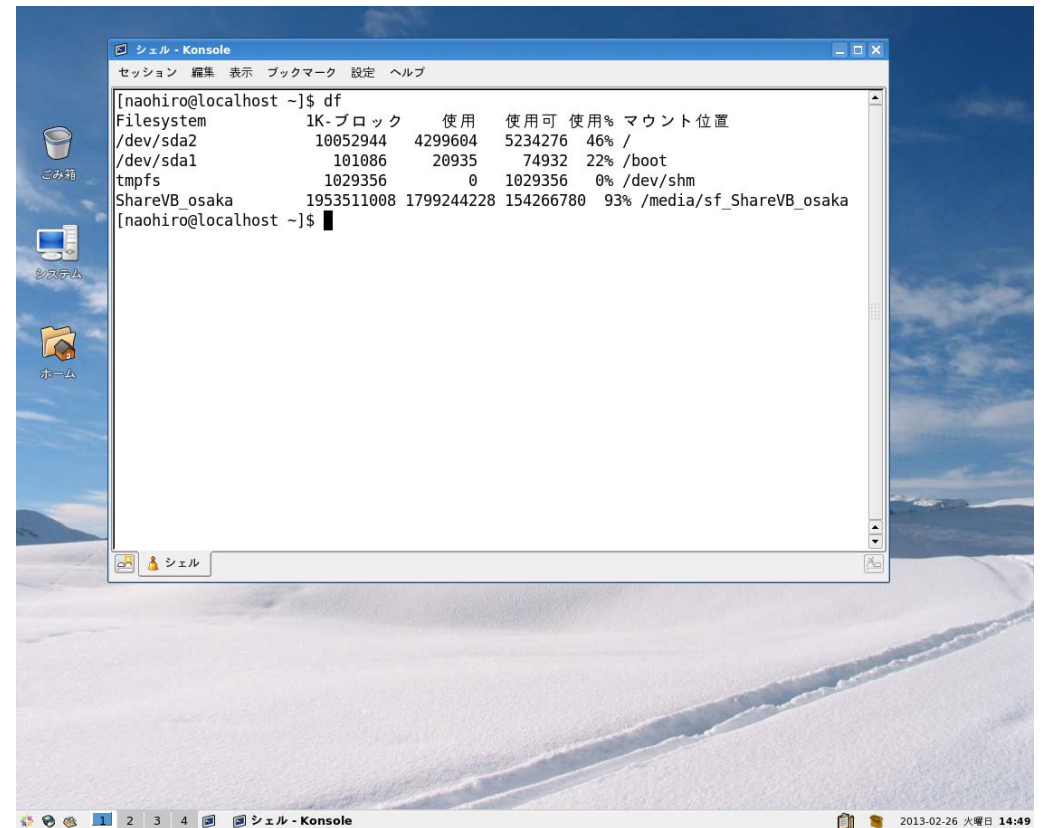
メモリ、CPU数、共有フォルダなどは再設定します

仮想OSイメージの起動

起動ボタン



これもエラーが出なければOK!

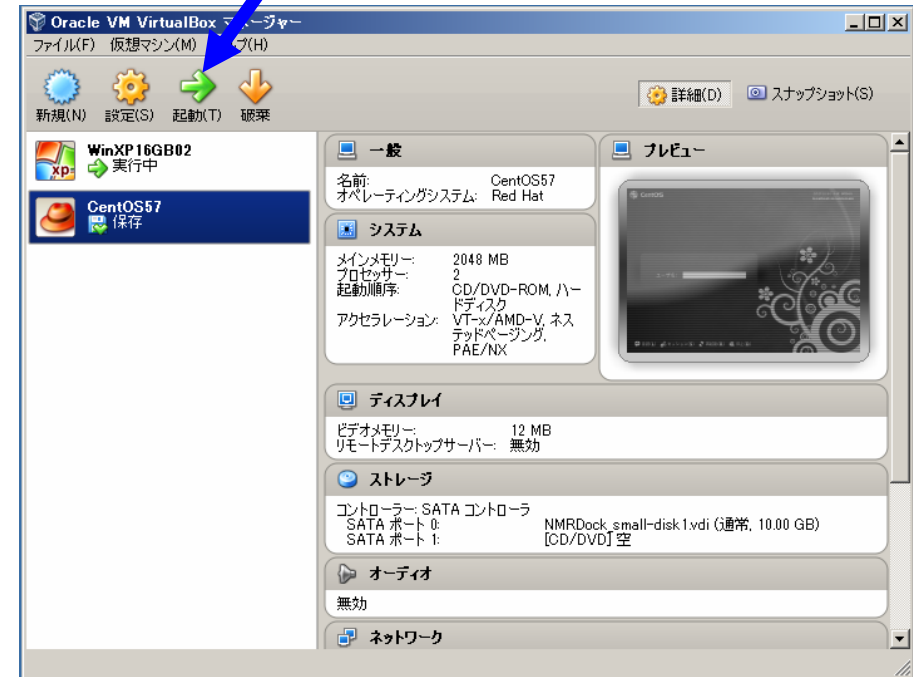


めでたく起動できました！

仮想OSイメージの一時停止

Windowを閉じるだけ

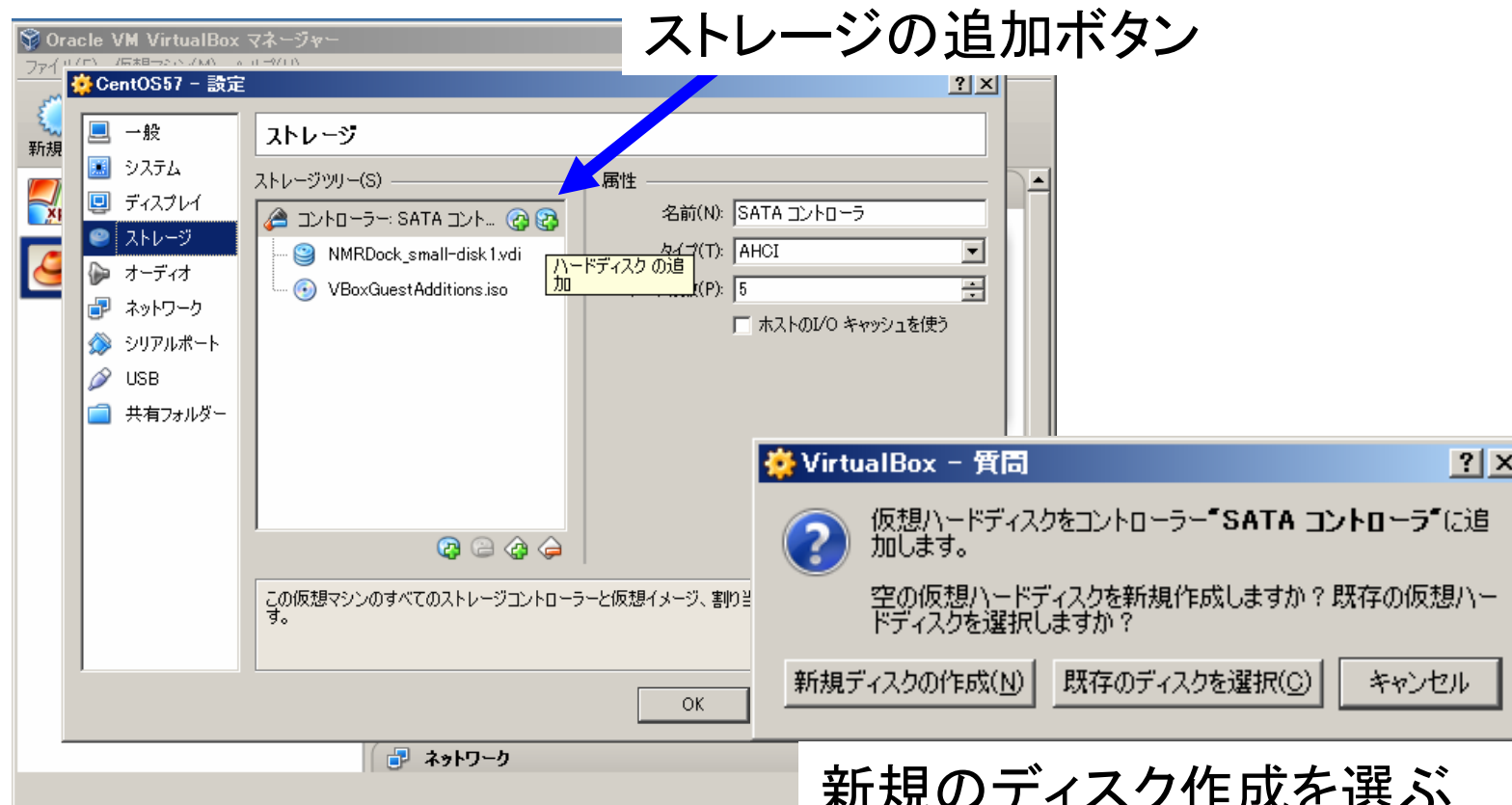
一時停止状態から復帰できる



仮想マシンの状態を保存する

(注)たまに復帰できないことがあります！

仮想ハードディスクの追加（削除）



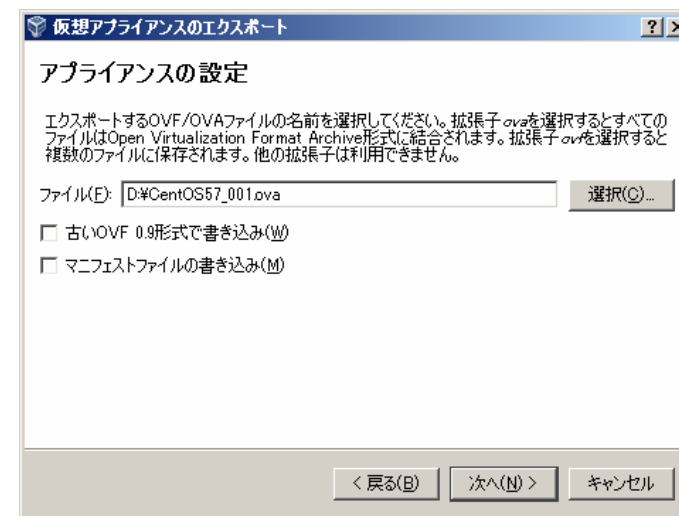
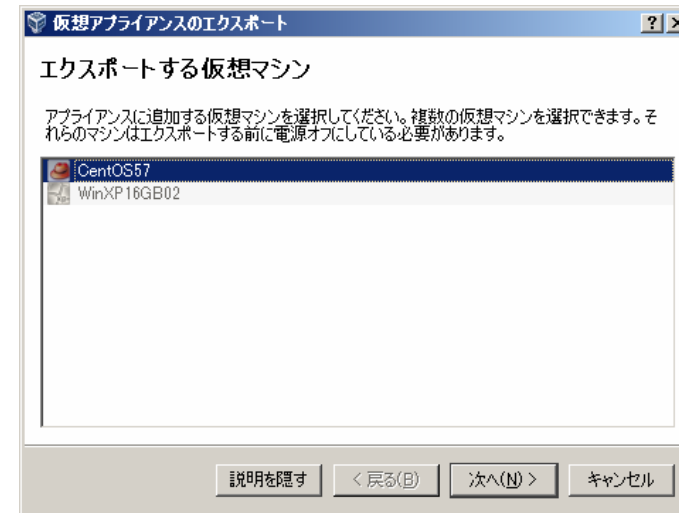
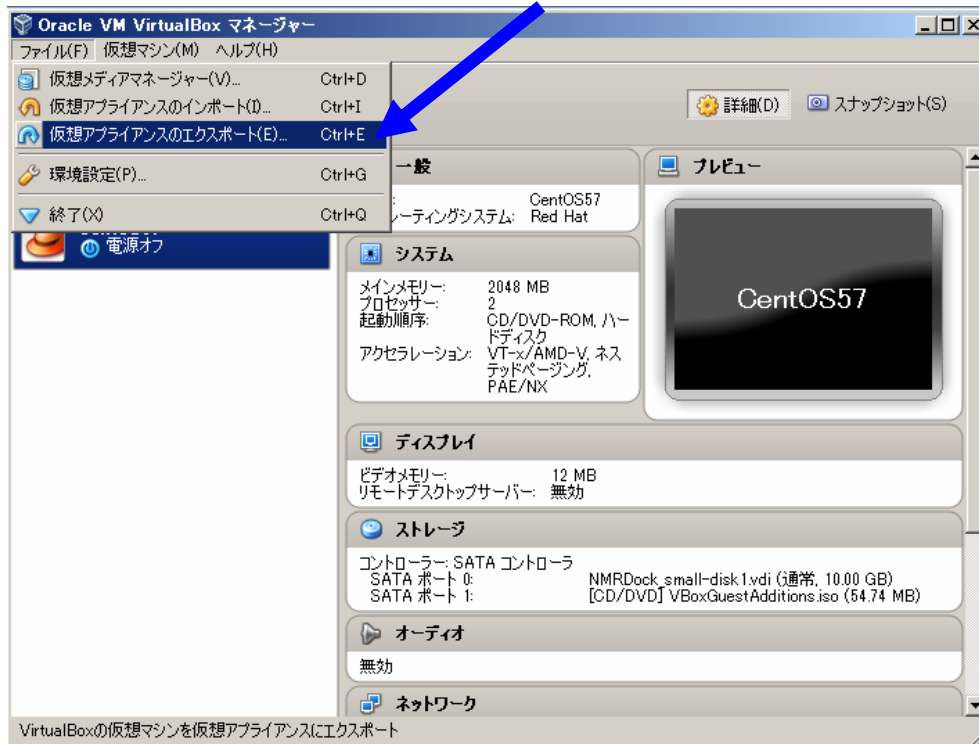
この後はVDI、可変サイズなどを選んでサイズを決めます
くれぐれもあまり大きなサイズにしないように
(8GBくらいがよいでしょう)

ディスクの削除は逆の操作を行います

仮想アプライアンスの利用

仮想アプライアンスの作成

仮想アプライアンスのエクスポートを選びます



アプライアンスの保存場所とファイル名を指定します

仮想アプライアンスの作成（つづき）

仮想アプライアンスの設定

仮想アプライアンスのエクスポート

アプライアンスの設定

これは仮想アプライアンスに追加する詳細な情報です。各行をダブルクリックすることによって変更できます。

説明	構成
仮想システム 1	
名前	CentOS57
製品	
製品URL	
ベンダー	
ベンダーURL	
バージョン	
説明	CentOS5.7-64bit gcc3.4/ntfs (-)home/(-)opt
ライセンス	

デフォルト値に戻す < 戻る(B) エクスポート キャンセル

CRM84GB (D:)

コンピューター > CRM84GB (D:) > CRM84GB (D:)の検索

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) ツール(T) ヘルプ(H)

整理 ライブラリに追加 共有 新しいフォルダー

名前	更新日時	種類	サイズ
ShareVB_temp	2012/12/26 17:38	ファイル フォルダー	
tools	2013/02/26 10:24	ファイル フォルダー	
CentOS-5.9-x86_64-bin-DVD-1of2.iso	2013/02/26 12:16	ディスク イメージ ファ...	4,574,650 KB
CentOS57.ova	2013/02/26 16:31	Open Virtualization...	1,797,371 KB

4 個の項目

エクスポートを押すとovaファイル作成が始まります
数分掛かりますが、3分の1ほどのサイズになります

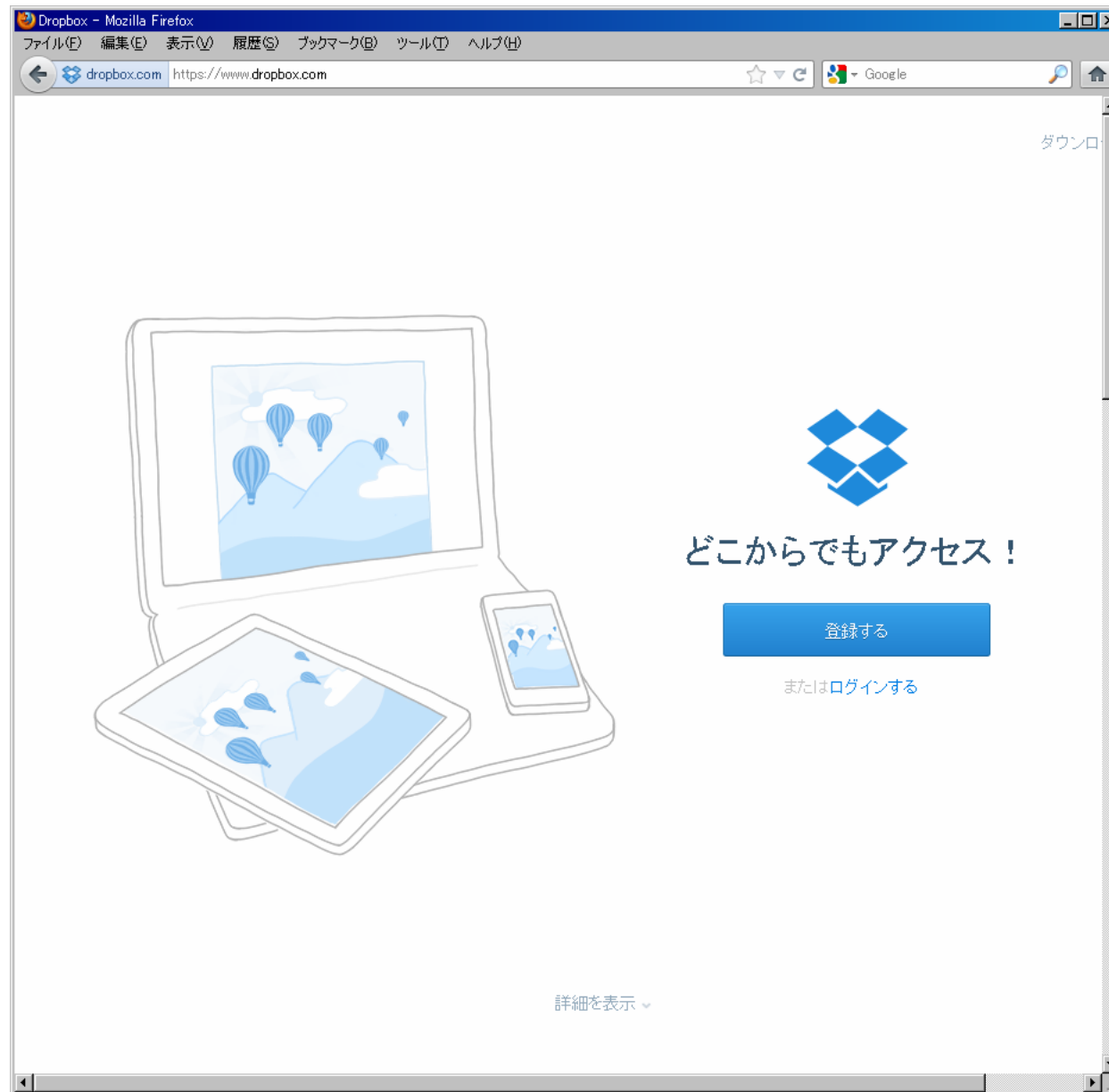
仮想アプライアンスの読み込み



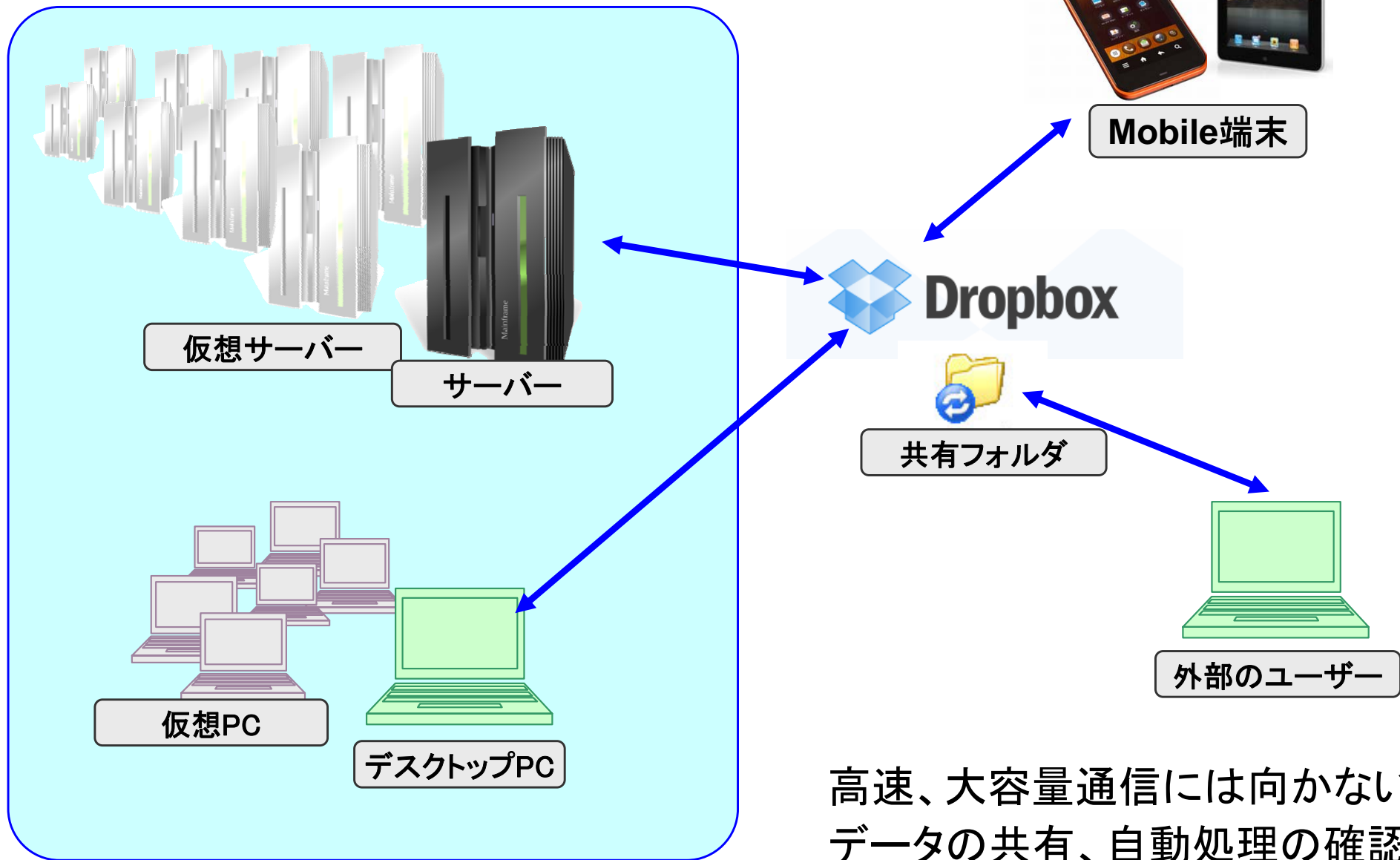
ovaファイルを指定するだけです。
エラーが出なければ成功！

仮想OSとクラウドコンピューティング

Dropboxを使う



Dropboxを利用したファイル共有



高速、大容量通信には向かない
データの共有、自動処理の確認
などに利用できる

仮想OSの運用事例

仮想化応用事例： (GIRAF) 複合体相互作用部位の相同性検索サーバーの構築

GIRAF: Similarity Search for Ligand Binding Sites - Mozilla Firefox
ファイル(E) 編集(E) 表示(V) 履歴(S) ブックマーク(B) ツール(T) ヘルプ(H)

ipr.pdbj.org/giraf/

PDBj GIRAF (beta 4)
Similarity Search for Ligand Binding Sites at Atomic Resolution [Help]

Given a query protein structure, GIRAF searches for ligand binding sites in the PDB that are structurally similar to substructures of the query. As a query, you can specify a PDB ID or upload your own PDB-formatted file. For more information, please refer to the [help](#) page.

Note: This service is currently under development. Submitted jobs may be terminated prematurely at any time.

GIRAF query upload

Interface type

- ☒ nonpolymer binding
- ☐ DNA and RNA binding
- ☐ all types of ligands (nonpolymer, DNA, RNA, peptides, and others).
- ☐ PPI (protein-protein interfaces).
- ☐ all (ligands + PPI).

Input PDB ID:

or upload a PDB file:

Chain IDs (optional): (comma-separated multiple IDs [e.g., "A,B"] or "all" are allowed.)

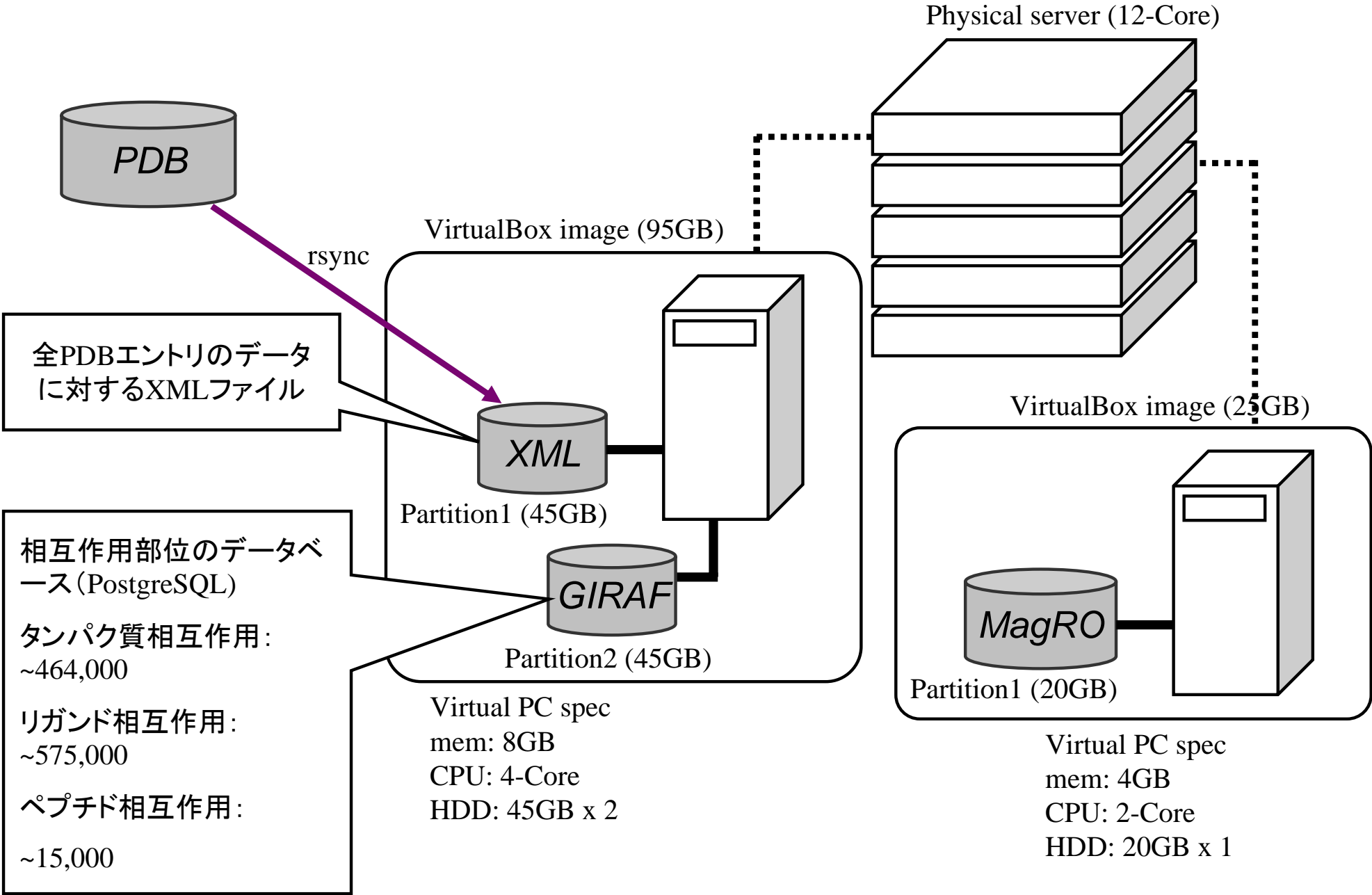
Limit target PDB entries (optional): (comma-separated multiple IDs [e.g., "101m,1a00"] or "all" are allowed.)

Number of displayed results (optional):

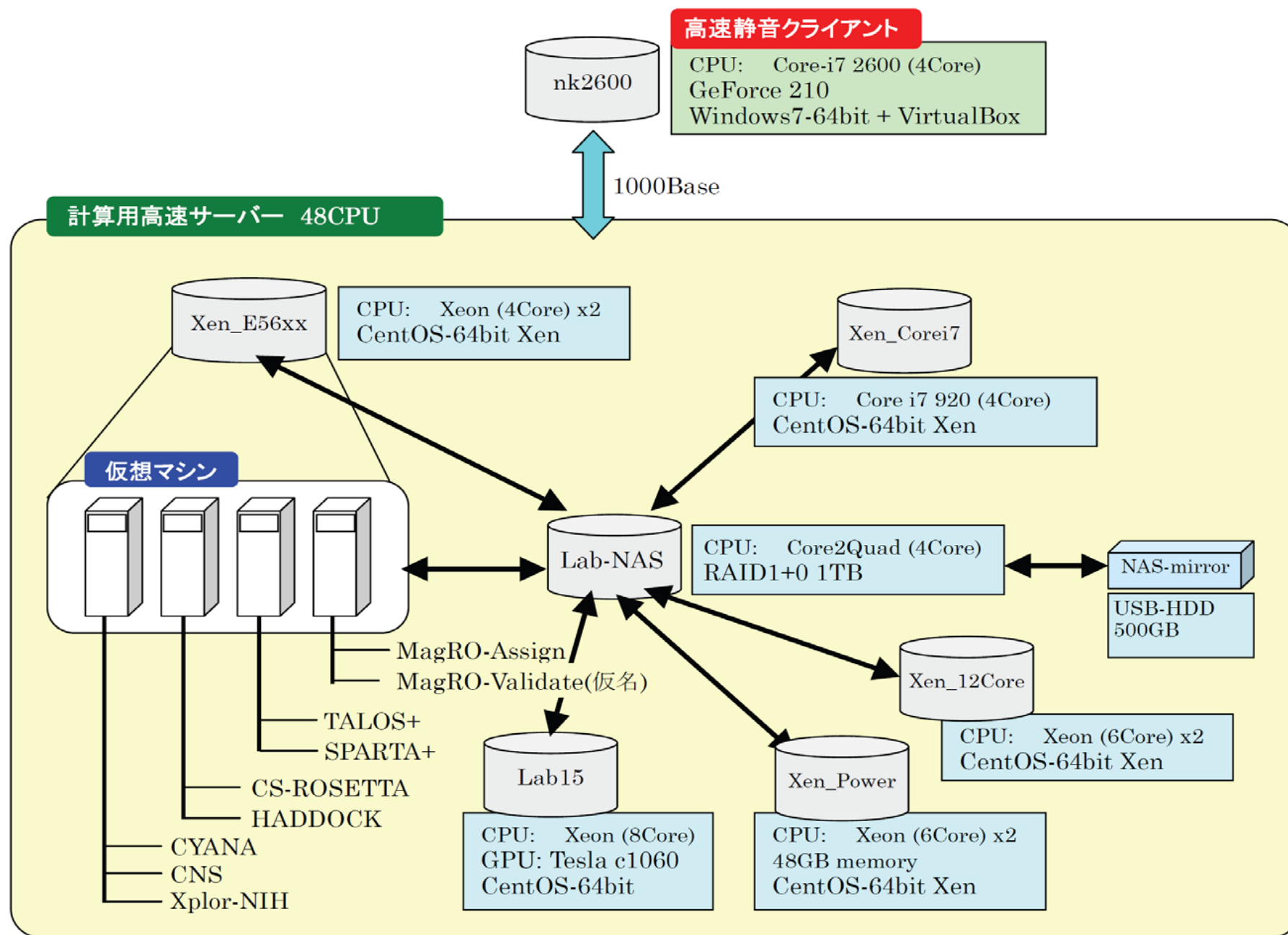
Your email address (optional):

DB version: 2013-07-27: 718863 interfaces

仮想化技術でローカルの解析環境にGIRAFサーバーを構築



小規模内部ネットワークに実装された解析用サーバー群



ご清聴ありがとうございました