

1. 「PDB データの検索・見方」

工藤 高裕 (大阪大学蛋白質研究所)

PDBj では PDB データを検索するためのウェブインタフェース「PDBj Mine」を提供しています。このインタフェースは大元となる PDB データファイルの内容を関係データベースに取り込み、ウェブ経由で PDB データを検索できるようにしたものです。PDBj Mine ではキーワードで検索できるだけでなく、公開日、著者名、生物種、鎖のタイプや長さ、含まれるリガンドなど様々な条件で結果を絞り込むこともできます。各 PDB エントリの情報ページには、よく参照される情報を構造、機能などのカテゴリごとに分類して表示しています。また分子をマウス等で対話的に操作することができる分子ビューアを埋め込んだインタフェースも用意しています。本講習会ではこの PDBj Mine を使った検索と結果の閲覧について紹介と演習を行います。

2. 「万見 (Yorodumi) で 3 次元構造を眺める」

鈴木 博文 (大阪大学蛋白質研究所)

この講習では、PDB と EMDB に登録されている 3 次元構造を、「自分の手を動かして自分の目で見る」ことを体験します。構造生物学を専門としていない方を対象としますが、少し高度なことにもふれる予定です。講習では、PDBj が公開している「万見」(<http://pdj.org/yorodumi>)というウェブサイトを中心に利用します。万見は、3 次元構造とデータベースの付随情報とを結びつけるサービスです。近年登録数が増している複雑な構造をわかりやすく眺めるためのツールとして開発していますが、一般的な構造データをより気軽に眺めるのにも役立ちます。簡単なマウス操作で、表示スタイルの変更、構造中の各チェーンの配置や配列モチーフの位置の確認、リガンドやその結合部位の確認、生物学的複合体の表示などを行うことができます。

3. 「SEALA の利用法」

藤 博幸 (産総研・生命情報工学センター)

SEALA は、アミノ酸配列アラインメントから機能部位情報を推定するための既存のツールを収集したサーバです。保存度/変異度については、スコアマトリクスに基づくもの、エントロピーに基づくもの、アミノ酸の物理化学的性質に基づくものなどが利用できます。解析結果は、テキスト形式、PDB 形式(温度因子部分を変更)、

グラフィクスなどの形で出力できます。また、パラログ間の機能差を決定するサイトの推定法として、進化トレース法、定量的進化トレース法、累積相対エントロピー法などが利用でき、保存度/変異度と同様の形で出力されます。本講習会では、SEALA について簡単に紹介したあと、SEALA の利用について、実習しながら説明します。

4. 「PDB データの読み解き方：mmCIF と PDBML」

金城 玲 (大阪大学蛋白質研究所)

近年、超巨大複合体の構造解析が盛んになっていますが、従来の PDB フォーマットのファイルでは様々な制約のために、それらの構造には対応できません。また、最近では PDB とその他のデータベースを連携させようという要求がありますが、従来の PDB フォーマットの REMARK 行では十分な対応が出来ませんでした。これらの問題を解決するため、wwPDB では PDB exchange dictionary (PDBx) に基づいた二つのファイルフォーマット、mmCIF と PDBML を用意しており、2014 年からは、mmCIF と PDBML でのみ公開される エントリが出てくると予想されます。長年使われてきた PDB フォーマットに慣れている利用者也、これからは PDBx/mmCIF に移行する必要性に迫られています。本講義では PDBx の基本的な考え方と mmCIF ファイルの読み方、mmCIF と PDBML の対応関係、各フォーマットの利点と欠点などを簡単な演習問題を通じて解説します。

5. 「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 データベースの利用法」

小林 直宏 (大阪大学蛋白質研究所)

PDBj-BMRB グループは米国 BMRB および wwPDB と連携して、NMR データベースである BioMagResBank(BMRB)の開発、および登録・公開拠点としてサイトの構築と運営を行っています。BMRB グループが開発してきたツール群、クラウドコンピューティング、仮想化技術のノウハウについて解説します。