

## 第 17 回日本蛋白質科学会年会ランチンセミナー

日時 6 月 22 日 (木) 11:15 ~ 12:05

会場 E 会場 (仙台国際センター 展示棟 会議室 4)

### 1. PDBj と wwPDB の最近の活動について

栗栖 源嗣 (大阪大学蛋白質研究所)

PDBj (Protein Data Bank Japan, <http://pd bj.org/>) は、worldwide PDB (wwPDB, <http://wwpdb.org/>) のメンバーとして国際的な共同作業により、蛋白質等の生体高分子の構造を登録し、PDB (Protein Data Bank) データとして座標と実験データを全世界へ無償で公開しています。今回のセミナーでは、X 線結晶解析、NMR 解析、電子顕微鏡解析など複数手法で決定された構造モデルを登録する共通システムの紹介と、データ検証ファイルの詳細、さらに 2016 年 wwPDB 諮問委員会で議論された PDB ID のバージョン化など最近の活動を紹介します。

### 2. Molmil: A versatile WebGL based molecular viewer

BEKKER, Gert-Jan (大阪大学蛋白質研究所)

The evolution of web browsers from displaying simple text based web pages into providing a platform for dynamic and interactive content has given rise to advanced web based applications. We previously developed jV, a Java based application and also enhanced our services by using Java web applets on our website. Support from modern web browsers for Java however has significantly diminished, as well as support from Java's main developer, Oracle. Although JavaScript, which is a programming language supported by all modern web browsers, has made significant improvements in performance over the past decade, rendering complex molecular structures can still be quite challenging using simply JavaScript. Modern web browsers however provide access to a client's GPU device using the WebGL API. Furthermore, the WebGL API is available on a wide range of devices from smartphones to workstations. Molmil uses WebGL to accelerate the rendering of structures in high quality. The PDBj website now uses Molmil as its primary molecular viewer for many of its services. Molmil however is not only suitable as a simple viewer, but also as an analysis tool. Molmil can e.g. load and render Molecular Dynamics trajectories and can also be used to make MP4 movies. By building custom scripts which rely on Molmil, advanced rendering and analysis tools can also be easily created. In summary, Molmil is a modern molecular viewer which can be used for the analysis of protein structures and render high quality images ready for publication.

### 3. 人工知能世代の NMR データベースと解析

小林 直宏 (大阪大学蛋白質研究所)

近年の情報科学技術の急速な進歩により、様々な分野で人工知能が応用される時代が到来しました。PDBj-BMRB グループは生体高分子系 NMR 実験データベースある BioMagResBank (BMRB) を運営し、wwPDB との国際的な連携により NMR 実験データの登録、管理、公開を継続的に運営しています。我々のグループは BMRB におけるデータを XML/RDF 化する事で機械が理解出来るレベルにまでそのシステムを高度化させてきました。その応用としてセミナーでは他の生命科学系データベースを連携させたシステムとして高度な検索ツールを紹介いたします。また深層学習を利用した NMR スペクトルの完全自動解析システム、次世代 MagRO のプロトタイプについても解説いたします。

問 合 せ

PDBj 事務局 tel: (06) 6879-4311, Fax: (06) 6879-8636

PDBj データベース登録事務局 tel: (06) 6879-8634, Fax: (06) 6879-8636