

PSILO 2022.02 の新機能



PSILO は、生体高分子やタンパク質-リガンド複合体構造情報のデータベースシステムです。公共データやインハウスデータを統合的に管理し、独自の検索機能や解析機能により創薬研究を支援します。PSILO 2022.02 では、データベースの連携機能が新たに追加されました。さらに、構造バリデーション機能やタンパク質ファミリーの管理機能が強化され、より便利に使いやすくなりました。本稿では、PSILO 2022.02 で追加される新機能を紹介します。

■ データベースの連携

従来の PSILO ではすべての構造データが1つのデータベースに格納されていましたが、新バージョンの PSILO ではインハウスのデータや公共のデータなどを別々のデータベースとして管理しつつ、それらのデータベースを1つの連携データベースとして扱えるようになりました。これにより、検索の際は1つの連携データベースを参照しながらも、データベースごとにデータのインポートやエクスポートなどができるようになりました。

■ AlphaFold

AlphaFold のデータがサポートされるようになりました。AlphaFold Protein Structure Database¹⁾ のデータが CCG 社から提供されます。PSILO にインポートされた AlphaFold の構造データは、pLDDT スコアにより AlphaFold のウェブサイトと同じ方法で色分けされ、予測構造の各残基の信頼度スコアを確認することができます。

■ 構造バリデーション機能の強化

構造をデポジットする際にバリデーションルールを設定できるようになりました(図1)。バリデーションルールはカスタマイズできるようになっており、例えば、欠損原子数が5000未満、B-factorが0でない、などのルールを設けることができます。ルールを満たさない構造があるときの挙動もカスタマイズでき、デポジットをブロックしたり、警告を出したりすることができます。



図1. バリデーションルールの設定と適用

■ ファミリーの管理機能の強化

PSILO のファミリータンパク質の管理ページがリニューアルされ、以下の機能が追加されました(図2)。

- ・MDB形式のサンプルデータが作成できるようになり、

ファミリー全体の更新を待たずにファミリーの変更をすぐに確認することができます。

- ・系統樹により、ファミリーの基準となる構造のどの配列が冗長でどの配列を追加すべきかを特定することができます。
- ・ベン図により、現在の PSILO ファミリーと他の PSILO ファミリー、または1つ以上の PFAM ファミリーなどを視覚的に比較することができます。これに基づきファミリーの E-value のカットオフ値を調整することができます。

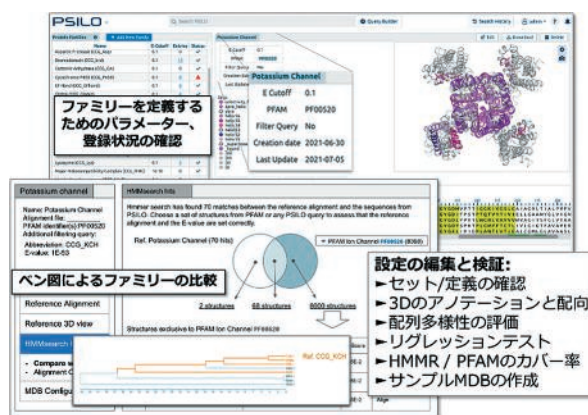


図2. リニューアルされたファミリー管理ページ

■ MOE との連携

MOE から PSILO のデータを直接閲覧・検索できるようになりました。

■ その他の新機能

- ・Entity タブ に Symbol Nomenclature for Glycans (SNFG) 記号が追加され、デポジットされたデータの糖鎖を容易に確認できるようになりました。
- ・非標準残基 (HET) に基づくソート機能により、より現実的な生物学的オリゴマー状態を生成できるようになりました。
- ・EMDB から構造のポテンシャルマップをダウンロード・インポートすることができるようになりました。これらのマップは、通常の電子密度マップと同様に PSILO で表示することができます。

1) <https://alphafold.ebi.ac.uk/>