タンパク質立体構造データベースシステム　PSILO

PSILO 2024.06 リリース

Chemical Computing Group

PSILO は、ウェブブラウザーを介して利用するタンパク質立体構造データベースシステムです。分散する公共データやインハウスデータを一元管理し、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 2024.06 では、RNA ファミリー、クライオ電子顕微鏡法（CryoEM）、AlphaFold 構造、インフラ関連の機能がアップデートされ、これまで以上に立体構造の管理や評価がしやすくなりました。本稿では、PSILO 2024.06 で追加された新機能・機能強化を紹介します。

RNA 配列のアノテーション

立体構造データに RNA が含まれている場合、RNA の配列が Rfam データベースと照合され、ファミリーのアノテーションが付与されるようになりました。アノテーションは立体構造の詳細ページで確認できます（図 1）。

Rfam の ID やキーワードは検索で指定でき、目的の RNA ファミリーを含む立体構造を絞り込めます。

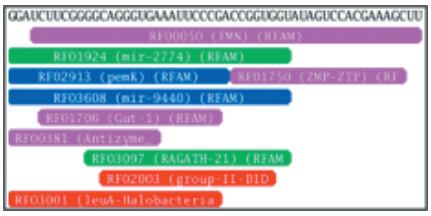

図 1. RNA 配列のアノテーション付け

表示の高速化とファミリーのアノテーション表示

立体構造ページの読み込みが 10 倍以上高速化され、タンパク質ファミリーのアノテーション情報が 3 次元ビューアーに表示されるようになりました（図 2）。

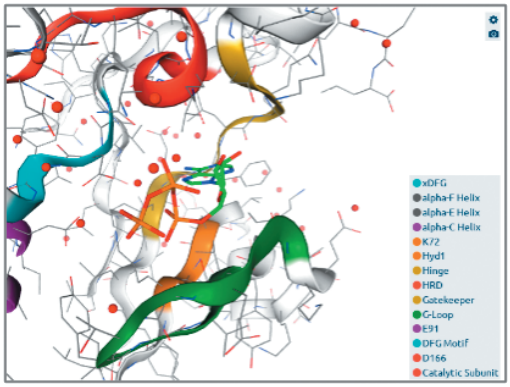

図 2. 3 次元ビューアー上でのタンパク質ファミリーのアノテーション表示

CryoEM 関連のアップデート

実験手法の項目に CryoEM が追加され、実験条件や構造決定の詳細をわかりやすく確認できるようになりました。

CryoEM の電子密度マップは、ユーザーが必要な数だけ登録できます。2 つのハーフマップを登録すると、Fourier Shell Correlation（FSC）プロットが構造品質評価の項目の 1 つとして表示されます。FSC プロットにより、立体構造の解像度を推定できます。

AlphaFold 構造の PAE プロットのサポート

AlphaFold の立体構造をインポートすると、PAE（Predicted Aligned Error）プロットが AlphaFold サーバーからダウンロードされ、構造品質評価の項目に表示されるようになりました。PAE プロットは予測構造の信頼性評価に役立ちます。

生物学的機能単位の定義と表示

回転、並進等の対称操作に基づき、複数の生物学的機能単位を 3 次元のビューアーで対話的に定義できるようになりました（図 3）。定義した生物学的機能単位はすべて立体構造ページで確認できます。

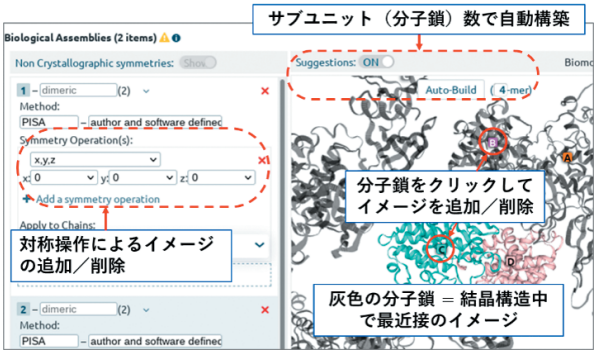

図 3. 生物学的機能単位の編集画面

インフラ関連のアップデート

新バージョンではインフラ関連の機能が次のようにアップデートされました。

リモートデータベース

Amazon RDS などのリモートデータベースをインポート・エクスポートできるようになりました。さらに、サードパーティが管理するリモートの MySQL または Oracle データベースを読み取り専用でマウントできるようになりました。

OKTA による認証

OKTA は企業や組織が安全にユーザー認証やアクセス制御を行うためのツールです。PSILO 2024.06 では OKTA をサポートし、OKTA を使用して PSILO にログインできるようになりました。

認証用の API キー

PSILO API でのログイン時に API キーが生成されるようになりました。API コールの際、その API キーを渡すことで、再度ログインしたり、セッション ID を受け渡したりする必要がなくなります。