

タンパク質立体構造情報データベースシステム

PSILOとMOEの連携機能のご紹介



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。タンパク質立体構造データを整理して、多様な条件で検索可能にし、データ共有を支援します。公共データやin-houseデータなどの分散するタンパク質立体構造データを統合し、Webベースのインターフェースから容易にアクセスすることができます。ここでは、PSILOとMOEの連携機能を中心にPSILOの機能を紹介します。

■MOEのデータベース更新

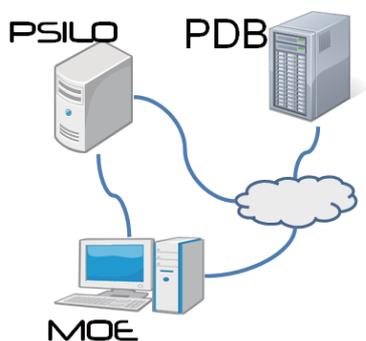


図1: MOE, PSILO, PDBの接続イメージ

MOEには、特殊なタンパク質立体構造データベースとして、抗体データベース、キナーゼデータベース、GPCRデータベースが搭載されています。これらのデータベースには、タンパク質立体構造データのほかに様々な構造アノテーション、配列アノテーション情報が含まれており、通常はMOEのバージョンアップに合わせて、データベースも更新されます。

一方PSILOには、RCSB Protein Data Bank (PDB)の公共データと合わせてin-houseデータを登録することができます。ユーザーが独自に解析したタンパク質立体構造データ、モデリングにより求めたデータなどを保存することができます。

MOE 2011.10から新規導入された'Protein Database Update'を使うと、PDBやPSILOのタンパク質立体構造データベースから自動的に、抗体データベース、キナーゼデータベース、GPCRデータベースを更新することができます。特に、PSILOを利用することで、高速にin-houseデータをMOEの専用データベースに取り込むことができます。

MOE2011.10の抗体データベース、キナーゼデータベースには、それぞれ2011年9月27日、2011年10月24日時点でPDBで公開されていたデータが含まれています。これらのデータベースと比較して、2012年5月30日現在PDBでは、抗体データについては50件、キナーゼについては92件のデータの新規登録及び更新がありました。

これらの更新データをMOEの各データベースに取り込み、抗体のモデリングを行ったり、キナーゼの各アノテーション情報を用いた構造検索を行うことができます。

■PSILOからMOEへのデータの取り込み

PSILOには、タンパク質立体構造を表示するページの全てに、'Launch MOE'ボタンが配置されています。'Launch MOE'ボタンをクリックすると、ローカルにインストールしているMOEを起動し、PSILOのデータを自動的に取り込むとともに、表示を簡単に切り替えるための専用のパネルを作ります。

例えば、PSILOの類似ポケット検索を行った場合、ポケットにおける残基配置の類似性でタンパク質立体構造を重ね合わせることができますが、'Launch MOE'により、この重ね合わせた座標のまますぐにMOEにデータを取り込むことができます。

また、3D相互作用検索の結果をPSILOで表示した場合は、検索でヒットした該当箇所がハイライトされます。'Launch MOE'ボタンにより読み込まれたタンパク質立体構造データでも同様にヒット箇所がハイライトされます。

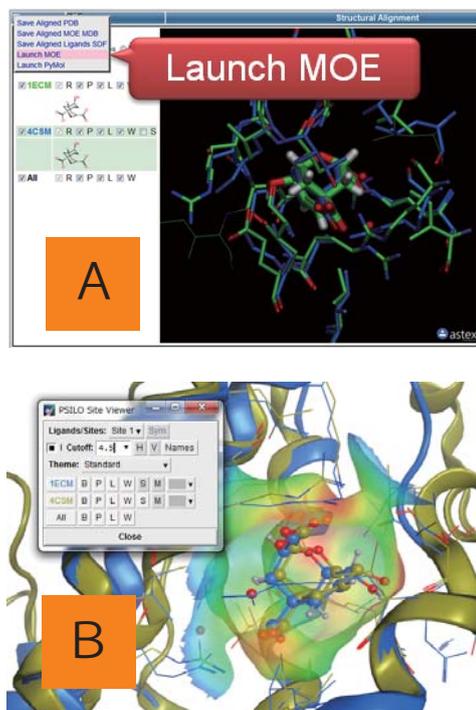


図2: 類似ポケット重ね合わせ構造からのLaunch MOE によるMOEへのデータ取り込み。A図のLaunch MOEボタンによりB図のMOEの画面が自動的に表示される。