

タンパク質立体構造データベースシステム

PSILO 2014.12リリース



PSILO(サイロ)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、情報共有を支援します。公共データやインハウス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 2014.12について新機能を中心に紹介します。

MOE Projectとの連携

MOE 2014.09に新たに搭載されたSBDDプロジェクトデータを自動収集する機能であるMOE-Project(前頁参照)との連携が強化されました。MOE 2014.09に標準搭載されている標的タンパク質データベースや、ユーザー定義によるプロジェクトデータベースの更新を簡単に行うことができます。また、MOEではできない絞り込み条件として、ユーザーがPSILOに登録しているお気に入りの検索条件を用いることが可能です。

また、登録されたファミリー構造データについて、夜間のバッチ処理などにより、MOEの使用頻度が低い時間帯を活用して定期的に自動更新することもできます。MOEユーザーは、サーバーに保存されたファミリーデータベースをローカルマシンにコピーすることで、常に公共の最新データとインハウスデータを組み合わせた標的タンパク質データベースを利用することができます。

MOEによる3D相互作用検索結果の表示

PSILOでは、リガンド(もしくは部分構造)とタンパク質の相対位置を、距離、角度、二面角により指定することで、立体構造情報に基づく検索を行うことができます。

PSILO 2014.12では、3D相互作用検索でヒットした構造をMOEもしくは、MDBファイルに読み込んだ場合、ヒットした部分構造がハイライトされるようになりました。

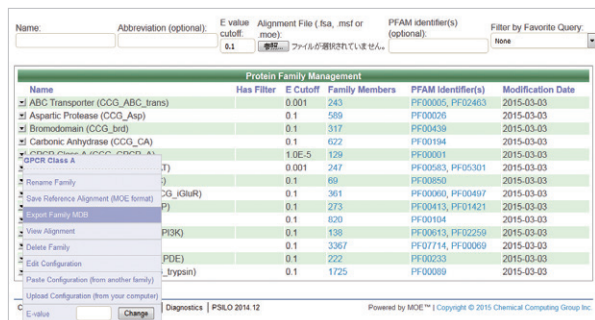


図1 PSILOのProtein Family Managementパネル。登録されたファミリーの情報が一覧され、リストごとにデータのダウンロードや設定変更が可能。

PSILOの「Protein Family Management」機能では、リファレンス配列のアラインメントの参照と保存、ファミリーデータベースのダウンロード、GUIによる設定変更、ファミリー構築の設定のインポートとエクスポート、E-valueカットオフの変更を行うことが可能です。

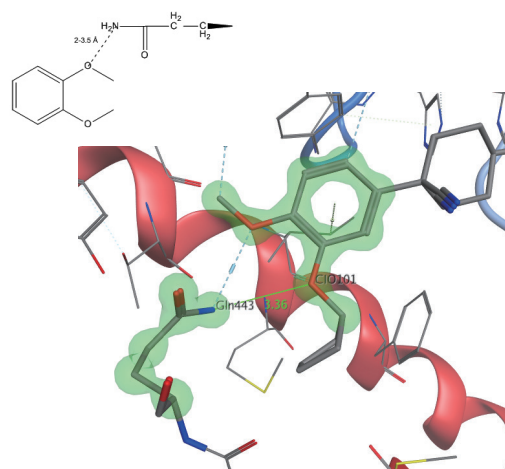


図3 3D相互作用検索結果にMOEによる表示。ジメトキシベンゼンの酸素原子とグルタミン酸のNδが2~3.5Å以内にある構造を検索。ヒットした部分構造が緑色でハイライトされる。

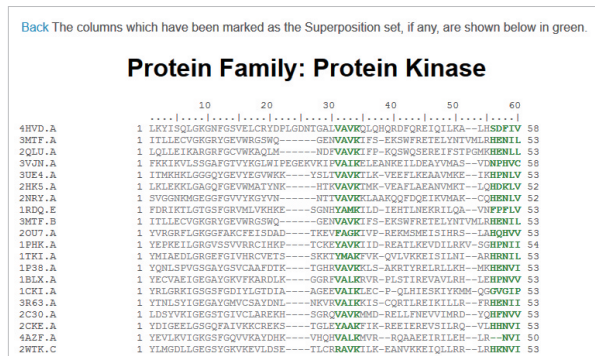


図2 ファミリータンパク質のアラインメント表示。Family Managementパネルからリンクされる。各アノテーション部分は、緑色で表示。

MOE System Managerとの連携強化

PSILOからLaunchMOE機能や、MDBファイル出力によりMOEに分子構造データを読み込んだ場合、MOEのSystem Managerでグループごとのレンダリングの管理ができるようになりました。