

PSILOは生体高分子やタンパク質ー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、データの共有を支援します。公共データやインハウスデータなどの散在するタンパク質立体構造データを統合し、ウェブベースのインターフェースから容易に活用することができます。ここでは、PSILO 2018の新機能を紹介します。

■ MOE Project データベース

PSILOにはタンパク質ファミリーデータベース(MOE Projectデータベース)の管理機能が搭載されています。すでに登録されている15種類のMOE Projectデータベースに加えて、主要組織適合遺伝子複合体(MHC)抗原とT細胞受容体(TCR)、さらにそれらの複合体(MHC-TCR)のファミリーも追加され、16種類となりました(表1)。これらのデータベースは、タスクスケジューリングにより自動で更新が行われます。PSILO 2018では、MOE Projectデータベースの更新が並列処理できるようになり、更新時間が大幅に短縮されます。

表1. PSILO 2018で登録されている MOE Project データベース

ABC Transporter	Antibody	Aspartic Protease	Bromodomain
Carbonic Anhydrase	GPCR Class A	Histone Acyltransferase	Histone Deacetylase
Ionotropic Glutamate Receptor	Matrix Metalloprotease	MHC-TCR	Nuclear Receptor
Protein Kinase	Protein Phosphodiesterase	Phosphoinositide 3-Kinase	Trypsin-like Serine Protease

■ NGL 3D Visualizerのサポート

PSILOの3D構造ビューワーにJava非依存のNGL 3D Visualizerが新たにサポートされました。多くのウェブブラウザでJavaがサポート対象外になりつつあり、Java依存のビューワーの置きかえとして利用できます。

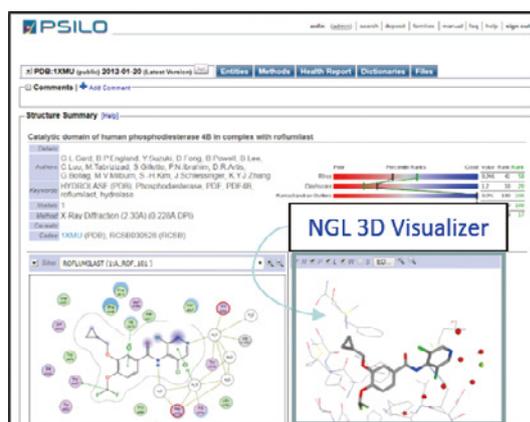


図1. PSILOのレコード表示画面と NGL Visualizer

■ ブラウザーベースのスケッチャー

PSILOではリガンド構造/部分構造/類似構造による検索が行えるほか、タンパク質原子との距離、角度、二面角を指定した3D相互作用検索も行えます。これらの検索のクエリーは2Dスケッチャーで描画し容易に作成できます。

PSILO 2018で新たにPSILO独自の2Dスケッチャーが搭載されました。旧バージョンで必要としていたサードパーティ製品を利用せずにリガンドのクエリーを作成できるようになりました。新しいスケッチャーは3D相互作用クエリーの構築もサポートしています。

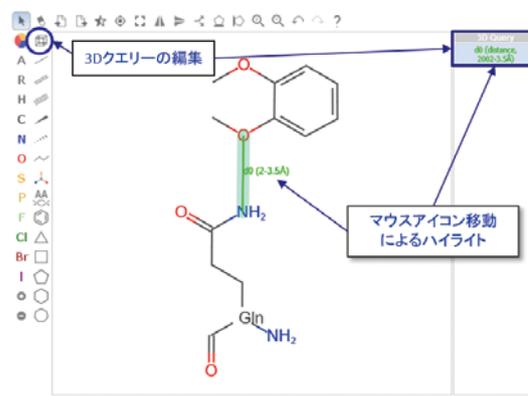


図2. PSILO 2018の2Dスケッチャー

■ MMTF フォーマット出力

PSILOの出力形式にMMTFフォーマットが追加されました。従来のファイルフォーマットの1/4程度の容量でデータが保存できるため、図3のCapsidタンパク質のような大きなタンパク質でもファイルサイズは数MBです。また、MOEでMMTFファイルの読み込みが可能になりました。

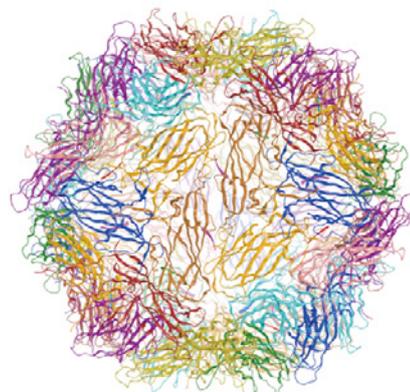


図3. Capsidタンパク質 60量体

■ MOEからのファイルアクセス

MOE上でPSILO/RCSBから電子密度データの読み込みが可能になりました。PSILOとMOEの連携がさらに強化され、電子密度の確認が容易に行えます。