



| | |
|--------------|---|
| Title | 蛋白質データベースをIRIS-4Dで可視化する方法 |
| Author(s) | 小林, 一男 |
| Citation | 大阪大学大型計算機センターニュース. 1993, 88, p. 87-93 |
| Version Type | VoR |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/66005 |
| rights | |
| Note | |

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

蛋白質データベースを I R I S - 4 D で可視化する方法

大阪大学大型計算機センター システム管理掛

小林 一男

w60164a@center.osaka-u.ac.jp

1. 蛋白質データベース (PROTEIN-DB) の可視化について

蛋白質データベースは、蛋白質・酵素・核酸の立体構造データを検索し図示するシステムで、汎用機上でサービスされています[1,2]。従来は、N6922 もしくは PC9801 端末を利用して図 1^{*1}のような図形表示を得ていました。今回は先日導入されたグラフィックワークステーション I R I S - 4 D [3] を利用し、蛋白質データベースからデータだけを抽出して、蛋白質モデルの可視化を Explorer[4,5] を使って行ってみました。

Explorer を使って作図すると、モデルの回転、拡大縮小がマウスの操作だけで行える他、高彩度フルカラープリンタにも出力できる等、利用者にとって非常に使い勝手の良いものになります。

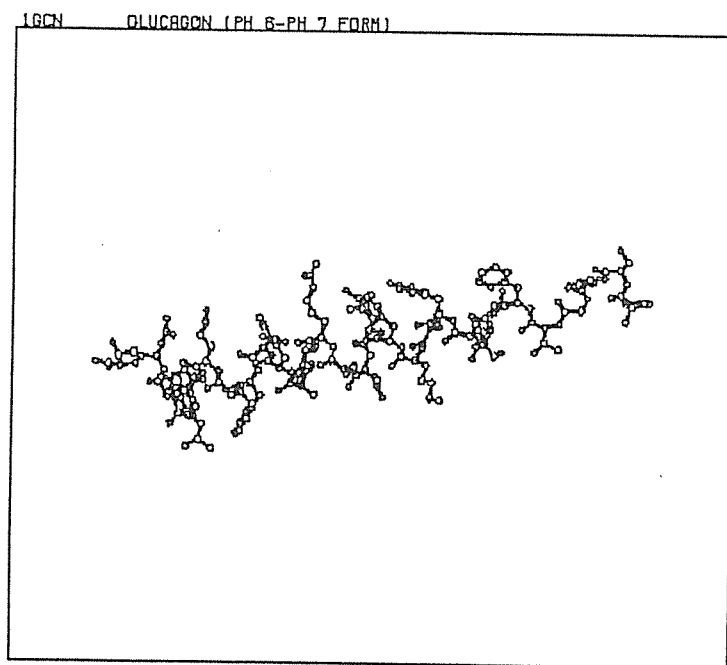


図 1 PC9801 端末で出力した結果

^{*1} 端末ソフト ASTER を使用してプリンターへハードコピー

2. Explorer で可視化するまで

まず、蛋白質データベースからある物質のデータを取り出しますが、蛋白質データベースは汎用機上 (ACOS2000) に登録していますので、まず IRIS から汎用機に接続します。次に蛋白質データベースを呼び出し、検索を行い物質のデータを取り出しそのデータを IRIS にファイル転送[6]します。その後、汎用可視化ツール Explorer を起動して、蛋白質データの可視化を行います。すでに Explorer には ReadPDB という入力モジュールがありますのでこれを利用します。

主な手順は下記のようになります。

- ① IRIS から ACOS システムに接続
- ② 蛋白質データベースを呼び出して必要なモデルを検索
- ③ ②で検索したデータを ACOS のファイルにセーブする
- ④ ③のファイルを IRIS に転送
- ⑤ Explorer を起動して作図をおこなう

3. 実際の操作手順

以下では IGCN という結晶を作図する例を紹介します。

下線部は利用者が端末から入力する所で、 は ENTER キー入力を表します。

① IRIS から ACOS システムに接続

```
% telnet
telnet> o acos
Trying 133.1.4.102...
Connected to acos.
Escape character is '^['.
```

```
TELOO1 ENTER $$$CON CMD. VO8
$$$CON,TSS
```

```
HANDAI TSS(MVX R1.0) ON 09/07/92 AT 11:39:19.....
```

```
USER ID - A99999;A
PASSWORD - PASS
```

② 蛋白質データベースを呼び出して必要なモデルを検索

```
SYSTEM ? PROT
```

```
*****
*** WELCOME TO PROTEIN-DB ***
*****
```

```
MODULE ?
```

```
=STRU
```

```
=== STRUCTURE ===
```

```
MODE ?
```

```
=NALL IGCN
```

```
IGCN WAS FOUND
THE NAME OF IGCN IS
```

GULUCAGON (PH 6-PH 7 FORM)

DISPLAY THE SEQUENCE OF 1GCN? (YES OR NO)

=NO

MAKING JOIN DATA

TOTAL 246 ATOMS

DATA SAVED FILE'08'

=== STRUCTURE ===

MODE ?

=□

MODULE ?

=□

GOOD-BYE

- ③②で検索したデータを ACOS のファイルにセーブ
ここでは、DATA という名前でセーブしました。

SYSTEM ? PERM 08;DATA

SYSTEM ? BYE

- ④③のファイル DATA を IRIS に転送
IRIS 上でのファイル名は wsdata としました。

```
% ftp acos
Connected to acos.
220-HANDAI TSS(MVX R1.0) ON 09/07/92 . . .
220 ENTER USER ID.
Name (acos:a99999a): a99999
331 USER ID OKAY; ENTER PASSWORD.
PASSWORD: pass
332 PASSWORD OKAY; ENTER ACCOUNT CODE.
Account: a
230 SUCCESSFULLY LOGGED-ON, PROCEED.
ftp > get data wsdata
      ↓
ftp > bye
```

- ⑤ Explorer を起動して作図
ここではサンプルマップ chemistry を用いる方法を紹介します。まず、
Explorer を起動します。

```
% /usr/explorer/bin/explorer
```

- ⑤-1 Explorer でモジュールライブラリ (localhost) からサンプルマップ
chemistry をマウスでドラッグ&ドロップによってマップエディターに呼
び出します。(図2)

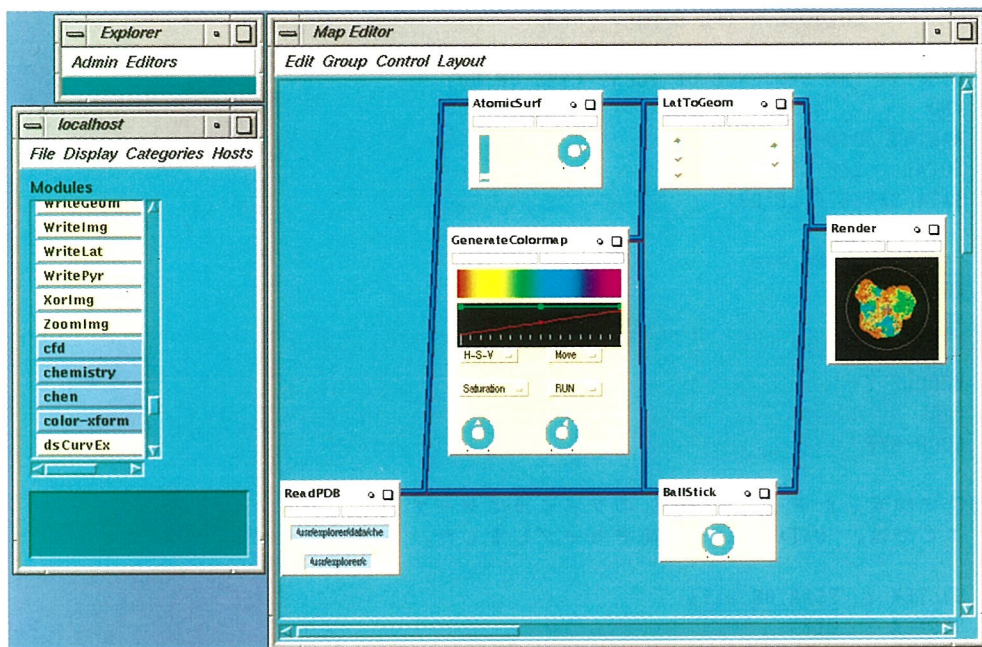
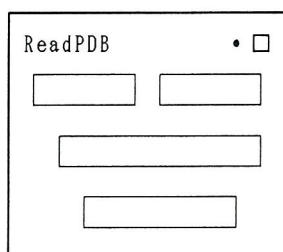


図2 サンプルマップ chemistry

- ⑤-2サンプルが表示されたら Read PDB モジュール (図3) の PDB File をフルスケールサイズにして (図4) Filename を wsdata (が利用者の入力した所) と入力後 ENTER キー入力します。



READ モジュールは図3の様にミニサイズかマイクロサイズになっていますが、右上の □ をマウスでクリックしてフルスケールサイズにします。

図3 ReadPDB モジュール (ミニサイズ)

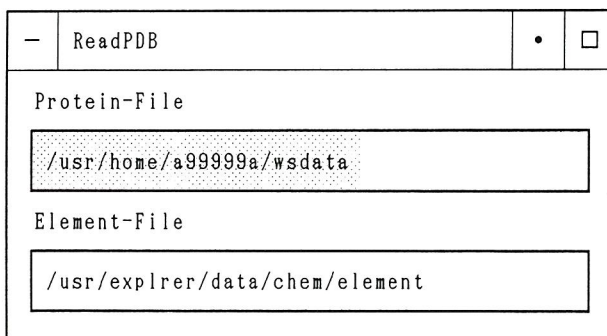


図4 ReadPDB モジュール (フルスケールサイズ)

しばらくしてから Render のウインドウの中でマウスの右ボタンを押してメニューをポップアップさせ（図5）、そのままドラッグして View All を選択します。これは視点の位置を初期設定するものです。すると Render に目的の蛋白質の構造が可視化されます（図6）。さらにマップのモジュール接続やパラメータを変更した出力例を示します（図7～9）。

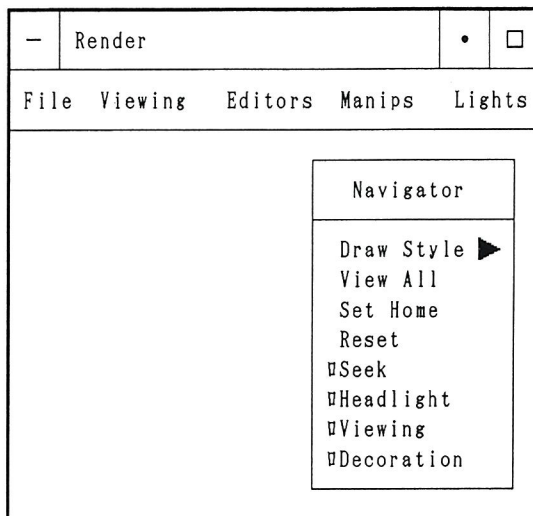


図5 Render モジュールとポップアップメニュー（フルスケール時）

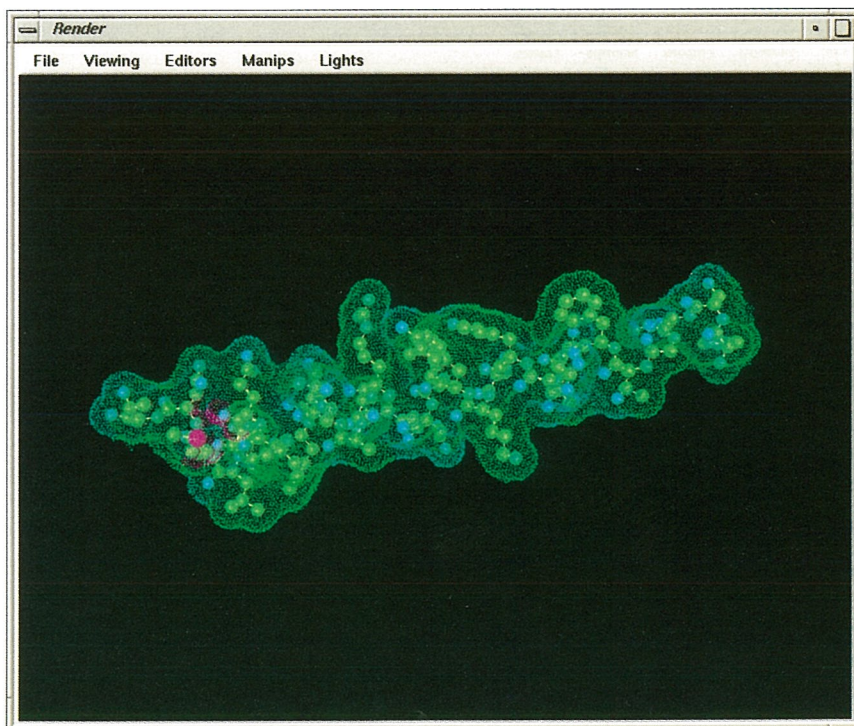


図6 蛋白質モデルの可視化（”3. 実際の操作手順”の出力）

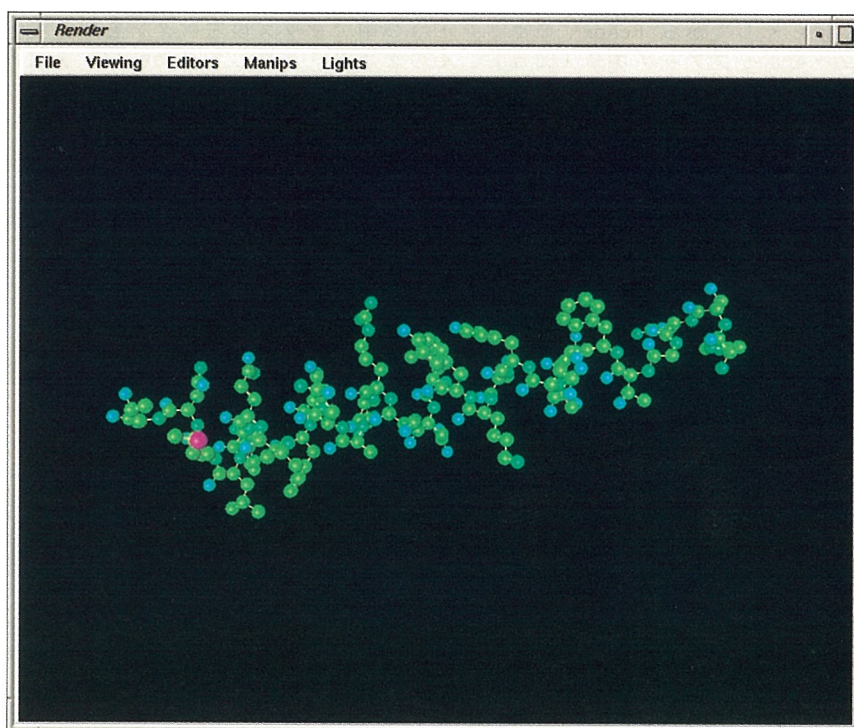


図 7 モジュール LatToGeom の出力を切断した時

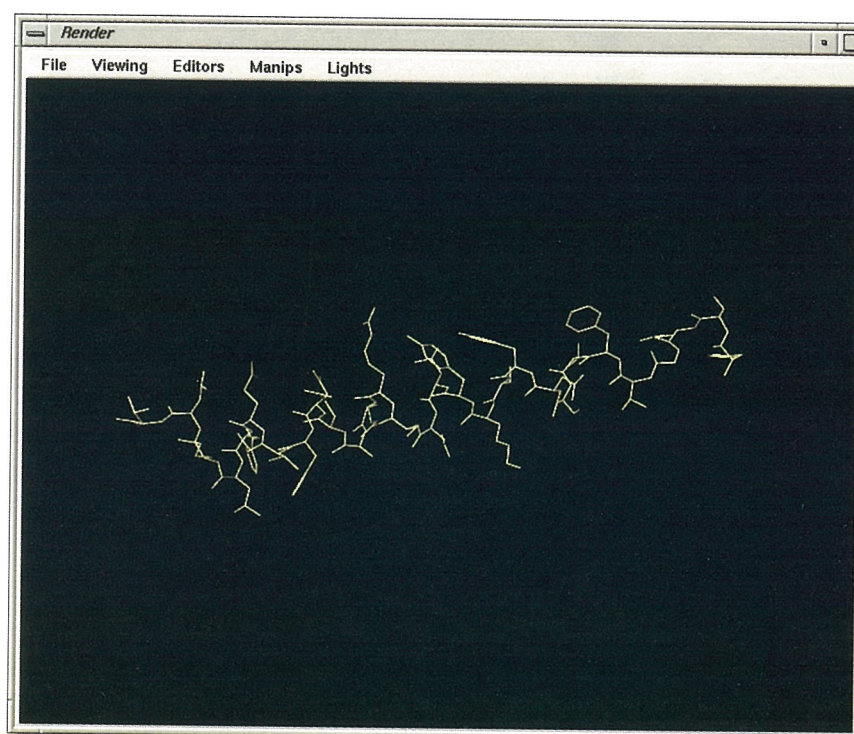


図 8 " 図 7 " からモジュール BallStick の Radius 値を 0 にした時

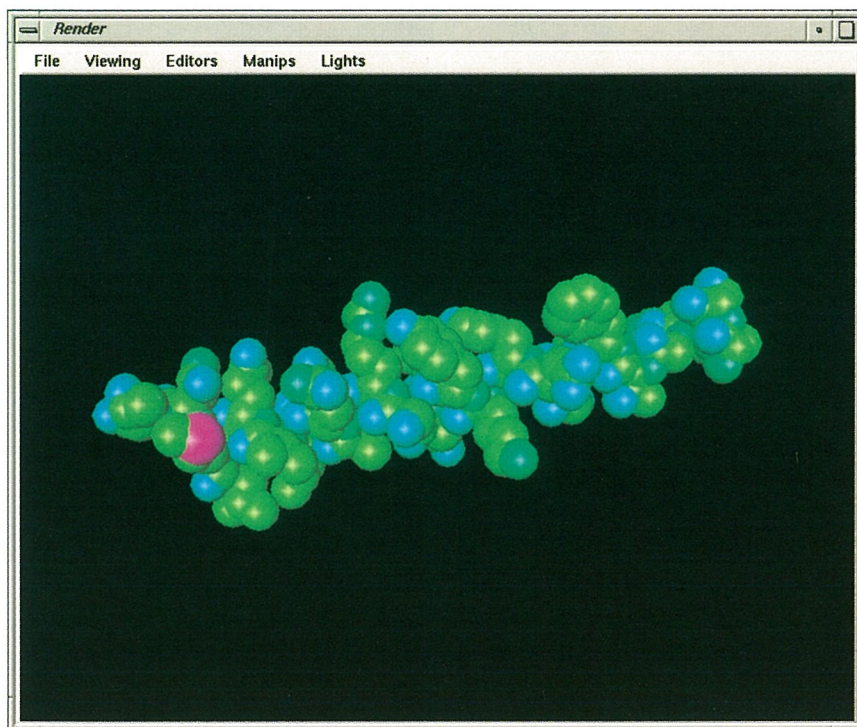


図9 “図7”からモジュール BallStick の Radius 値を 1.0 にした時

参考文献

- [1].たんぱく質データベースエンドユーザ言語利用説明書, 大阪大学大型計算機センター(1981-9).
- [2].タンパク質立体構造データベースの新しいコマンドについて, 大阪大学大型計算機センターニュース, Vol.15, No4(1986-2).
- [3].小林一男: グラフィックワークステーション I R I S 4 D の概要と利用法 大阪大学大型計算機センターニュース, Vol.22, No2(1992-8).
- [4].出口 弘: 汎用可視化ツール Explorer の使い方, 大阪大学大型計算機センターニュース, Vol.22, No2(1992-8).
- [5].Sillicon Graphics Inc: IRI S Explorer™ User's Guide.
- [6].中島重雄: ファイル転送のまとめ, 大阪大学大型計算機センターニュース Vol.21, No1(1991-5).