

平成20年度科学技術試験研究委託事業  
「生体分子の熱力学データと構造データの統合」  
20年度 委託業務研究成果報告書

平成21年3月

国立大学法人九州工業大学 大学院情報工学研究院 教授 皿井 明倫

本報告書は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務として、国立大学法人九州工業大学が実施した平成20年度「生体分子の熱力学データと構造データの統合」の成果を取りまとめたものです。

# 成果報告書

## 委託業務の題目

「生体分子の熱力学データと構造データの統合」

## 実施機関

住 所 福岡県北九州市戸畑区仙水町 1 - 1

機関名 国立大学法人 九州工業大学

担当者 皿井明倫

## 1. 委託業務の目的

中核機関である情報・システム研究機構では、ライフサイエンスやバイオ産業に従事する研究者や技術者がいわゆるゲノムプロジェクト・ポストゲノムプロジェクトの成果や多様な DB や解析ツールをストレスなく利用してより高度な研究開発が効率よくできる環境（統合 DB）を実現することを目的とする。このため、参画機関と共同で、戦略立案・実行評価、統合データベース開発、および、統合データベース支援を行うこととしている。

本研究では、情報・システム研究機構が進める統合化を補完するため、蛋白質の安定性や相互作用の網羅的な熱力学データを構造データと統合する。これにより、生体分子の機能に関する研究を促進する。また、構造データベースを構築する PDBj とも連携して、XML などのデータ交換フォーマットの整備、オントロジーなどの統合化技術の開発を行う。さらに、情報・システム研究機構による統合検索との連携を可能にするために、情報・システム研究機構と連携して開発を進める。

## 2. 平成20年度（報告年度）の実施内容

### 2.1 実施計画

#### ①蛋白質と変異体の熱力学データベースの構築と統合

平成20年度に収集する蛋白質およびその変異体の構造安定性に関する熱力学データ（約1,500件を予定）について、熱力学データと構造データを対応づけるクロスレファレンステーブルを作成する。また、情報・システム研究機構による統合検索と連携するため、データの提供、インデックス作成などの準備を始める。一方、情報・システム研究機構と連携して、テキストマイニングによるデータの自動収集や自動抽出法の開発の準備を始める。

#### ②蛋白質・核酸相互作用の熱力学データベースの構築と統合

平成20年度に収集する蛋白質と核酸の相互作用の定量的な熱力学実験データ（約1,300件を予定）について、蛋白質・核酸複合体の構造データがあるものについて熱力学データと構造データを対応づけるクロスレファレンステーブルを作成する。また、情報・システム研究機構による統合検索と連携するため、データの提供、インデックス作成などの準備を始める。一方、情報・システム研究機構と連携して、テキストマイニングによるデータの自動収集や自動抽出法の開発の準備を始める。

### ③蛋白質・蛋白質相互作用データの生成と統合

蛋白質・蛋白質相互作用データについては、まだ実験データが当機関から生成されていないので、平成20年度はまず入れ物となるデータベースのプロトタイプ的设计を継続し、試験的に既存のデータを組み込み本格運用の準備を進める。

### ④XMLデータフォーマットやオントロジーなどの統合化技術の開発

熱力学データについては、これまでにオントロジーやデータフォーマットなどの整備があまり行われていない。そこでまず、平成19年度に引き続きオントロジーについて調査を行い、オントロジー構築の準備を行う。平成19年度に、熱力学データについて試験的なXMLフォーマットを作成したが、プロトタイプを完成させる。また、XMLと他のフォーマットの変換を行うためのプログラムの作成を進める。これらの開発にあたっては、構造データの我が国の代表機関としてすでに活動しているPDBjと連携して進める。

## 2.2 実施内容(成果)

### ① 蛋白質と変異体の熱力学データベースの構築と統合

平成20年度に発生した蛋白質およびその変異体の構造安定性に関する熱力学データ約1,100件について、熱力学データと構造データを対応づけるクロスレファレンステータブルを作成した。すなわち、熱力学データベースに記載されたPDBの構造データ(PDBcode)およびそれと100%同じ配列のPDBcodeと対応するすべての熱力学データをリストしたテーブルと、配列の類似(95%以上の類似度)するすべての構造と対応するすべての熱力学データをリストしたテーブルを作成した。蛋白質と変異体の熱力学データベースの検索画面とデータベースの内容については、それぞれ別紙参考資料1-(1)、1-(3)を参照。クロスレファレンステータブルについては、別紙参考資料1-(4)を参照。

情報・システム研究機構がすすめる統合検索と連携するため、インデックス作成のための1次データの提供を行った。また、統合DBセンターが関連機関のデータをメタデータ付きでダウンロードできるサイトを構築する計画なので、それに必要な情報とダウンロードデータを提供した。また、ダウンロードデータの利用許諾について検討を行った。

我々の構築しているデータベースは熱力学データの含まれている文献を収集し、論文を研究者が読んでデータの抽出を行っている。その後データの入力から照合・チェック、データベースへの登録までをほとんど手動で行っている。特に、研究者が論文からデータを抽出する部分が最も手間がかかる作業となっている。そこで、テキストマイニングの手法などを取り入れて、文献の自動収集や文献からのデータの自動抽出を行い、データベース構築の省力化を計ろうとしている。このためまず、情報・システム研究機構が開発しているテキストマイニングツール、TogoDoc、Wired-Markerをそのような目的のために応用できるかどうかの評価を行った。我々の側からは、これまでに収集した文献、蛋白質名、キーワードのリストや、マーキングした論文のサンプルなどをセンター側に提供した。TogoDocについては類似文献検索、Wired-Markerではテキストからの情報の自動抽出について我々のデータベース構築の有効性の観点から評価を行った。具体的には、Wired-Markerは一般的なツールとしてはすばらしいが、我々の目的に使用する上では、論文の表の任意の行と列からのデータの抽出、特殊文字の扱い、図からのデータ

抽出、XML からの必要データの抽出、PDF の文献からのデータ抽出、などの点で対応できればさらに使いやすくなることを指摘した。また TogoDoc と関連して、あらかじめ我々がマーキングした文献の情報を使って学習し類似文献を収集する機能、類似文献収集の精度向上、あらかじめ指定したキーワードなどのハイライト表示、インタラクティブに辞書を編集してハイライト表示させる機能、マーキングした PDF を利用した学習、などについて対応可能か検討を行った。

なお、蛋白質と変異体の熱力学データベース、ProTherm、のアクセス統計データを別紙参考資料 1-(6) に示した。利用者層としては、企業からのアクセスが過半数を占めている。このデータベースのデータは世界中の研究者に利用され、その成果が発表された論文はすでに 100 件以上になっている。論文のリストは以下の URL を参照。

[http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/Protherm/ProTherm\\_References.htm](http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/Protherm/ProTherm_References.htm)

## ② 蛋白質・核酸相互作用の熱力学データベースの構築と統合

平成 20 年度に今年度発生した蛋白質と核酸の相互作用の定量的な熱力学実験データ約 700 件について、蛋白質・核酸複合体の構造データがあるものについて熱力学データと構造データを対応づけるクロスレファレンステーブルを作成した。すなわち、熱力学データベースに記載された PDB の構造データ (PDBcode) およびそれと 100% 同じ配列の PDBcode と対応するすべての熱力学データをリストしたテーブルと、配列の類似 (95% 以上の類似度) するすべての構造と対応するすべての熱力学データをリストしたテーブルを作成した。蛋白質・核酸相互作用の熱力学データベースの検索画面とデータベースの内容については、それぞれ別紙参考資料 1-(1)、1-(3) を参照。クロスレファレンステーブルについては、別紙参考資料 1-(5) を参照。

情報・システム研究機構の統合検索については、蛋白質と変異体の熱力学データベースの部分と同様、メタデータ、ダウンロードデータなどを提供した。また、ダウンロードデータの利用許諾について検討を行った。

テキストマイニングについても蛋白質と変異体の熱力学データベースの部分と同様、情報・システム研究機構と連携して、テキストマイニングツール、TogoDoc、Wired-Marker の評価を行った。詳細は、前節「蛋白質と変異体の熱力学データベースの構築と統合」の部分参照。

蛋白質・核酸相互作用の熱力学データベース、ProNIT、のアクセス統計データは別紙参考資料 1-(6) に示した。利用者層としては、やはり企業からのアクセスが過半数を占める。このデータベースを利用してその成果が発表された論文のリストは以下の URL を参照。

[http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/pronit/pronit\\_ref.html](http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/pronit/pronit_ref.html)

## ③ 蛋白質・蛋白質相互作用データの生成と統合

蛋白質・蛋白質相互作用データを格納するデータベースのプロトタイプ的设计を行い、既存データの格納の試験を行った。まず、データベーススキーマとして別紙参考資料 2 のような項目から構成し、関係データベースシステム MySQL 上にデータベースを構築した。この中に既存のデータサンプルを試験的に格納した。検索は、PHP を用いてインターフェイスを作成しつつある。

#### ④ XML データフォーマットやオントロジーなどの統合化技術の開発

熱力学データと構造データの統合を効率的にすすめるため、熱力学データに関するオントロジーについて調査を行った。生命情報に関してはすでに多くのドメインでオントロジーが整備されつつあるが、熱力学データに関するオントロジーはまだ整備されていないので、まずは我々が構築している熱力学データベースについて Controlled Vocabulary の作成を行った（別紙参考資料 3 を参照）。これに基づいて、蛋白質・核酸相互作用の熱力学データベースについて、データの XML フォーマット化を行った（XML データのサンプルは別紙参考資料 4-(1) を参照）。このために、これまでのフラットフォーマットから変換するプログラムの作成を行った（変換のステップは別紙参考資料 4-(2) を参照）。これらのオントロジー整備や XML フォーマット作成にあたっては、構造データベースの代表機関である PDBj や海外の関係機関と意見交換を行っている。

また、本プロジェクトに関する最新情報を提供したり、更新データのダウンロードを行えるように、プロジェクト専用の Web ページを作成した（別紙参考資料 5 を参照）。

## 2.3 成果の外部への発表

### 論文寄稿

業務コード	実施年度	和誌/洋誌	論文タイトル	発表者名	発表誌名	巻	号	ページ	掲載年月	メモ

### 講演

業務コード	実施年度	国内/国際	講演タイトル	発表者名	講演会名	発表年月日	メモ
1	20	国内	Integration of Thermodynamic and Structural Data	皿井明倫	生物物理学会	2008年12月4日	
1	20	国内	ProNIT: Database Development and Integration	M. D. Shaji Kumar, P. Prabakaran, M. M. Gromiha, H. Uedaira, K. Kitajima, and A. Sarai	日本バイオ インフォマティクス 学会年会	2008年12月 15日~16日	

### プレス発表

業務コード	実施年度	発表タイトル	掲載新聞名	掲載日

## 2.4 活動（運営委員会等の活動等）

### 中核機関、協力機関との会合の履歴

件名：テキストマイニング、補完課題の進捗状況について

日時：2008年4月25日（金）PM1:00～2:40

場所：ライフサイエンス統合データベースセンター センター長室

参加者：九工大：皿井、統合DBセンター：西川、山本、大野

件名：テキストマイニング、補完課題の進捗状況について

日時：2008年5月28日（水）PM1:30～3:10

場所：ライフサイエンス統合データベースセンター

参加者：九工大：皿井、蛋白研：中村、統合DBセンター：西川、八塚、山本、大野

件名：テキストマイニング、中核機関との連携について

日時：2008年6月27日（金）PM3:00～4:00

場所：ライフサイエンス統合データベースセンター408号室

参加者：九工大：皿井、統合DBセンター：西川、八塚、大野

件名：テキストマイニング、補完課題の進捗状況について

日時：2008年11月25日（火）PM3:00～4:20

場所：ライフサイエンス統合データベースセンター・九州工業大学間のTV会議

参加者：九工大：皿井、Kumar、統合DBセンター：西川、八塚、大野

件名：テキストマイニング、データの利用許諾、プロジェクト説明サイトについて

日時：2009年1月22日（木）PM2:30～3:30

場所：ライフサイエンス統合データベースセンター・九州工業大学間のTV会議

参加者：九工大：皿井、Kumar、統合DBセンター：熊谷、西川、八塚、山本、大野

件名：テキストマイニングについて

日時：2009年1月29日（木）11:00～12:00

場所：ライフサイエンス統合データベースセンター

参加者：九工大：皿井、Kumar、統合DBセンター：西川、山本、大野

件名：研究運営委員会作業部会分科会

日時：2009年1月29日（木）13:30～16:30

場所：ライフサイエンス統合データベースセンター



## 2.5 実施体制

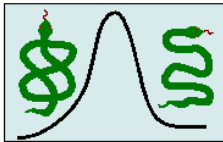
研究項目	担当機関等	研究担当者
1. 蛋白質と変異体の熱力学データベースの構築と統合 2. 蛋白質・核酸相互作用の熱力学データベースの構築と統合 3. 蛋白質・蛋白質相互作用データの生成と統合 4. XML データフォーマットやオントロジーなどの統合化技術の開発	九州工業大学情報工学部  九州工業大学情報工学部  九州工業大学情報工学部 九州工業大学情報工学部	◎○皿井 明倫  ○Shaji Kumar  ○末田 慎二 ○藤井 聡

注1. ◎:課題代表者、○:サブテーマ代表者

注2. 本業務に携わっている方は、全て記入。

別紙参考資料 1

(1) 蛋白質熱力学データベース ProTherm の検索画面



## ProTherm

### Thermodynamic Database for Proteins and Mutants

Data updated July 25

Home 3DinSight ProTherm ProNIT Protein-DNA Recognition Biomolecules Gallery

**ProTherm Search**

Please fill or choose necessary entries below, set display and sorting options.  
Explanations for the terms are [here](#)

---

Advanced Search

**Overview**

**What's New**

**Statistics**

**Tutorial**

**More About ProTherm**

**Cross-References**

**Acknowledgement**

**Members**

**Reference**

**Known Problems**

**Register**

**Contact us**

**Entry**  -

**Protein**

**Mol-weight**  To

**Mutation**  To   Single  Double  Multiple  Wild Type

**Sec.Structure**  Helix  Sheet  Turn  Coil

**Accessibility**  Any  Buried  Partially Buried  Exposed  ASA  To  %

**Measure**  Absorbance  CD  DSC  Fluorescence  NMR  Others

**Method**  Thermal  Denaturants  Others

**pH**  To

**dTm/Tm/T**   To   C

**dH/dCp/dG/dG<sub>H2O</sub>**   To   energy unit:  kcal

**ddG/ddG<sub>H2O</sub>**   To

**State**  2  3  >3

**Reversibility**

**Keyword**   OR

**Author**   OR

**Year** Since  Until

---

**Display Option**

<input checked="" type="checkbox"/> ENTRY	<input checked="" type="checkbox"/> PROTEIN	<input checked="" type="checkbox"/> SOURCE	<input type="checkbox"/> AMINO LENGTH	<input type="checkbox"/> MOL-WEIGHT	<input type="checkbox"/> PIR
<input type="checkbox"/> E.C.NUMBER	<input type="checkbox"/> PMD.NO	<input type="checkbox"/> PDB_wild	<input type="checkbox"/> PDB_mutant	<input checked="" type="checkbox"/> MUTATION	<input type="checkbox"/> SEC.STR.
<input type="checkbox"/> ASA	<input type="checkbox"/> STATE	<input checked="" type="checkbox"/> dG_H2O	<input type="checkbox"/> ddG_H2O	<input checked="" type="checkbox"/> dG	<input type="checkbox"/> ddG
<input checked="" type="checkbox"/> T	<input checked="" type="checkbox"/> Tm	<input type="checkbox"/> dTm	<input type="checkbox"/> dHvH	<input checked="" type="checkbox"/> dHcal	<input checked="" type="checkbox"/> m
<input checked="" type="checkbox"/> Cm	<input type="checkbox"/> dCp	<input checked="" type="checkbox"/> pH	<input type="checkbox"/> BUFFER_NAME	<input type="checkbox"/> ION_NAME	<input checked="" type="checkbox"/> MEASURE
<input checked="" type="checkbox"/> METHOD	<input type="checkbox"/> Reversibility	<input type="checkbox"/> ACTIVITY	<input type="checkbox"/> ACTIVITY_Km	<input type="checkbox"/> ACTIVITY_Kcat	<input type="checkbox"/> ACTIVITY_Kd
<input type="checkbox"/> KEY_WORDS	<input checked="" type="checkbox"/> REFERENCE	<input type="checkbox"/> AUTHOR	<input type="checkbox"/> REMARKS		

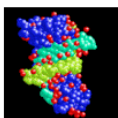
**Sorting By**  OFF   OFF   OFF   OFF

ASCENDING

Display hit list from No.  1  To  300

10

(2) 蛋白質・核酸相互作用熱力学データベース ProNIT の検索画面



# ProNIT

## Thermodynamic Database for Protein-Nucleic Acid Interactions

Quick Search

Welcome to ProNIT Database

- [ProNIT Home](#)
- [What's New](#)
- [About ProNIT](#)
- [Release Notes](#)
- [Statistics](#)
- [Tutorial](#)
- [Members](#)
- [Reference](#)
- [Contact us](#)
- [Copyright](#)
- [Acknowledgement](#)

### Advanced Search

Please fill or choose necessary entries below, set display and sorting options.

ProNIT Entry  -    [Entry List](#)

Protein Name  [Protein List](#)

Protein Source  [Source List](#)

PDB\_Code  [PDB List](#)

Protein Sequence

Mutation  To   Single  Double  Multiple  Wild

Sec.Str  Helix  Sheet  Turn  Coil

ASA\_Free  To  %

Nucleic Acid Name

Nucleic Acid Source

Nucleic Acid Type  dsDNA  ssDNA  RNA

NDB\_Code  [NDB List](#)

Nucleic Acid Sequence

Method  1.Calorimetry  2.Footprint  3.Filter binding  4.Fluorescence

T  To  °C

pH  To

Kd  x 10  To  x 10  M

dG  To  kcal/mol

dH  To  kcal/mol

dCp  To  kcal/mol/K

Author  AND  [Author List](#)

Year  To  [Reference List](#)

Keywords  AND

#### Display Options

<input checked="" type="checkbox"/> Protein Name	<input checked="" type="checkbox"/> Protein Source	<input type="checkbox"/> Biological_unit	<input type="checkbox"/> Fragment	<input type="checkbox"/> E.C.Number
<input type="checkbox"/> PIR_No.	<input type="checkbox"/> SWISSPROT_NO	<input type="checkbox"/> PDB_Free	<input checked="" type="checkbox"/> PDB_Complex	<input type="checkbox"/> NDB_Complex
<input checked="" type="checkbox"/> Mutation protein	<input type="checkbox"/> ASA_Free	<input type="checkbox"/> ASA_Complex	<input type="checkbox"/> ProTherm_No.	<input type="checkbox"/> Sec_Str
<input type="checkbox"/> Nucleic Acid Name	<input type="checkbox"/> Nucleic Acid Source	<input type="checkbox"/> Nucleic Acid Type	<input type="checkbox"/> GenBank_No.	<input type="checkbox"/> Complex_DB_No
<input type="checkbox"/> Ligand	<input checked="" type="checkbox"/> T	<input checked="" type="checkbox"/> pH	<input type="checkbox"/> Buffer_Name	<input type="checkbox"/> Buffer_Conc
<input type="checkbox"/> Additives	<input type="checkbox"/> Ion Name	<input type="checkbox"/> Ion_Conc	<input checked="" type="checkbox"/> Method	<input checked="" type="checkbox"/> Kd_Wild
<input type="checkbox"/> Kd_Mutant	<input type="checkbox"/> Ka_Wild	<input type="checkbox"/> Ka_Mutant	<input checked="" type="checkbox"/> dG_Wild	<input type="checkbox"/> dG_Mutant
<input type="checkbox"/> dH_Wild	<input type="checkbox"/> dH_Mutant	<input type="checkbox"/> dCp_Wild	<input type="checkbox"/> dCp_Mutant	<input type="checkbox"/> Stoichiometry
<input type="checkbox"/> Activity_Km	<input type="checkbox"/> Activity_Kcat	<input type="checkbox"/> Author	<input checked="" type="checkbox"/> Reference	

#### Sorting Options

Priority 1	Priority 2	Priority 3	Priority 4	Order
OFF <input type="button" value="v"/>	OFF <input type="button" value="v"/>	OFF <input type="button" value="v"/>	OFF <input type="button" value="v"/>	ASCENDING <input type="button" value="v"/>

Entries per page :

### (3) 熱力学データベースの内容

①蛋白質熱力学データベース **ProTherm** に含まれる主な内容は以下のようである。蛋白質情報：名前、由来種、対応する配列や構造の ID、天然状態における集合数など。変異情報：変異アミノ酸とその位置、2次構造と **Accessible Surface Area (ASA)** など。実験情報：測定方法や、温度、pH、バッファ、イオン、蛋白質濃度などの実験条件。熱力学データ：熱変性の場合、変性の自由エネルギー変化 ( $\Delta G$ )、エンタルピー変化 ( $\Delta H$ )、熱容量変化 ( $\Delta C_p$ )、変性温度 ( $T_m$ )、変性の可逆性、変性剤変性の場合、変性剤濃度ゼロに外挿した変性自由エネルギー変化 ( $\Delta G^{H_2O}$ )、変性曲線の傾き ( $m$ ) と変性中点の変性剤濃度 ( $C_m$ ) など。その他の情報：酵素活性値 ( $K_m$ ,  $k_{cat}$ )、解離定数 ( $K_d$ )、転移の状態数。文献情報：ジャーナル名、著者名、出版年、キーワード、リマークなど。

②蛋白質・核酸相互作用熱力学データベース **ProNIT** に含まれる主な内容は以下のようである。蛋白質情報：名前、由来種、対応する配列や構造の ID など。アミノ酸変異情報：変異アミノ酸とその位置、2次構造と **ASA** など。核酸情報：名前、由来種、対応する配列や構造などの ID。塩基変異情報：変異塩基とその位置。複合体情報：複合体構造の ID、複合体形成に伴う構造変化などの記述。実験情報：測定方法や、温度、pH、バッファ、イオン、蛋白質濃度などの実験条件。熱力学データ：解離定数 ( $K_d$ )、結合の自由エネルギー変化 ( $\Delta G$ )、エンタルピー変化 ( $\Delta H$ )、熱容量変化 ( $\Delta C_p$ )、結合の **stoichiometry**。その他の情報：酵素活性値 ( $K_m$ ,  $k_{cat}$ )。文献情報：ジャーナル名、著者名、出版年、キーワード、リマークなど。

(4) クロスレファレンステーブル。ProTherm データベースに含まれる構造データの PDBcode と 100% 同じ配列に対応する蛋白質の熱力学データの対応表の一部。

Cross-Reference to PDB	
PDB_ID	ProTherm_EntryNo
<a href="#">1BAL</a>	<a href="#">18200</a> , <a href="#">18201</a> , <a href="#">18202</a> , <a href="#">18203</a> , <a href="#">18204</a> , <a href="#">18205</a> , <a href="#">18206</a> , <a href="#">18207</a> , <a href="#">18208</a> , <a href="#">18209</a>
<a href="#">2TCT</a>	<a href="#">6413</a> , <a href="#">6414</a>
<a href="#">1IKL</a>	<a href="#">23670</a> , <a href="#">23671</a> , <a href="#">23672</a> , <a href="#">23673</a> , <a href="#">23674</a> , <a href="#">23675</a>
<a href="#">1PUC</a>	<a href="#">10219</a> , <a href="#">10220</a> , <a href="#">10221</a> , <a href="#">10222</a> , <a href="#">10223</a> , <a href="#">10224</a> , <a href="#">10225</a> , <a href="#">10226</a> , <a href="#">10227</a> , <a href="#">10228</a> , <a href="#">10229</a> , <a href="#">10230</a> , <a href="#">10231</a> , <a href="#">10232</a> , <a href="#">10233</a> , <a href="#">10234</a> , <a href="#">10235</a>
<a href="#">1TIO</a>	<a href="#">7485</a> , <a href="#">7486</a> , <a href="#">7487</a> , <a href="#">7488</a> , <a href="#">7489</a> , <a href="#">9882</a> , <a href="#">16833</a>
<a href="#">1IKM</a>	<a href="#">23670</a> , <a href="#">23671</a> , <a href="#">23672</a> , <a href="#">23673</a> , <a href="#">23674</a> , <a href="#">23675</a>
<a href="#">1BAV</a>	<a href="#">15105</a> , <a href="#">15106</a>
<a href="#">1TIU</a>	<a href="#">15280</a> , <a href="#">15281</a> , <a href="#">17002</a> , <a href="#">17003</a> , <a href="#">17013</a> , <a href="#">17014</a> , <a href="#">17628</a> , <a href="#">17629</a> , <a href="#">17630</a> , <a href="#">17631</a> , <a href="#">17632</a> , <a href="#">17633</a> , <a href="#">17634</a>
<a href="#">1F6H</a>	<a href="#">248</a> , <a href="#">249</a> , <a href="#">250</a> , <a href="#">251</a> , <a href="#">252</a> , <a href="#">253</a> , <a href="#">254</a> , <a href="#">255</a> , <a href="#">256</a> , <a href="#">257</a> , <a href="#">258</a> , <a href="#">259</a> , <a href="#">260</a> , <a href="#">261</a> , <a href="#">262</a> , <a href="#">263</a> , <a href="#">264</a> , <a href="#">265</a> , <a href="#">266</a> , <a href="#">267</a> , <a href="#">268</a> , <a href="#">269</a> , <a href="#">270</a> , <a href="#">271</a> , <a href="#">328</a> , <a href="#">329</a> , <a href="#">330</a> , <a href="#">331</a> , <a href="#">527</a> , <a href="#">528</a> , <a href="#">529</a> , <a href="#">530</a> , <a href="#">531</a> , <a href="#">532</a> , <a href="#">533</a> , <a href="#">534</a> , <a href="#">535</a> , <a href="#">536</a> , <a href="#">537</a> , <a href="#">538</a> , <a href="#">539</a> , <a href="#">540</a> , <a href="#">541</a> , <a href="#">542</a> , <a href="#">2091</a> , <a href="#">2092</a> , <a href="#">2093</a> , <a href="#">2094</a> , <a href="#">2095</a> , <a href="#">2096</a> , <a href="#">2097</a> , <a href="#">2098</a> , <a href="#">2099</a> , <a href="#">2812</a> , <a href="#">2813</a> , <a href="#">2814</a> , <a href="#">2815</a> , <a href="#">2816</a> , <a href="#">2817</a> , <a href="#">2818</a> , <a href="#">2819</a> , <a href="#">2820</a> , <a href="#">2821</a> , <a href="#">2822</a> , <a href="#">2823</a> , <a href="#">2824</a> , <a href="#">2825</a> , <a href="#">2826</a> , <a href="#">2827</a> , <a href="#">2828</a> , <a href="#">2829</a> , <a href="#">4545</a> , <a href="#">4546</a> , <a href="#">5899</a> , <a href="#">5900</a> , <a href="#">5901</a> , <a href="#">5902</a> , <a href="#">5903</a> , <a href="#">5904</a> , <a href="#">5905</a> , <a href="#">5906</a> , <a href="#">5907</a> , <a href="#">5908</a> , <a href="#">5909</a> , <a href="#">5910</a> , <a href="#">5911</a> , <a href="#">5912</a> , <a href="#">6215</a> , <a href="#">6216</a> , <a href="#">6503</a> , <a href="#">6504</a> , <a href="#">6505</a> , <a href="#">6506</a> , <a href="#">6507</a> , <a href="#">6508</a> , <a href="#">6509</a> , <a href="#">6510</a> , <a href="#">6511</a> , <a href="#">6512</a> , <a href="#">6513</a> , <a href="#">6514</a> , <a href="#">6515</a> , <a href="#">6516</a> , <a href="#">6517</a> , <a href="#">6518</a> , <a href="#">6519</a> , <a href="#">6520</a> , <a href="#">6521</a> , <a href="#">6522</a> , <a href="#">6523</a> , <a href="#">6524</a> , <a href="#">6525</a> , <a href="#">6526</a> , <a href="#">6527</a> , <a href="#">6528</a> , <a href="#">6529</a> , <a href="#">6530</a> , <a href="#">6531</a> , <a href="#">6532</a> , <a href="#">6533</a> , <a href="#">6534</a> , <a href="#">6535</a> , <a href="#">6536</a> , <a href="#">6537</a> , <a href="#">6538</a> , <a href="#">6539</a> , <a href="#">6540</a> , <a href="#">6541</a> , <a href="#">6542</a> , <a href="#">6543</a> , <a href="#">6544</a> , <a href="#">6545</a> , <a href="#">6546</a> , <a href="#">7408</a> , <a href="#">7409</a> , <a href="#">7410</a> , <a href="#">7411</a> , <a href="#">7493</a> , <a href="#">7494</a> , <a href="#">7495</a> , <a href="#">7496</a> , <a href="#">7497</a> , <a href="#">7498</a> , <a href="#">7499</a> , <a href="#">7500</a> , <a href="#">7501</a> , <a href="#">7502</a> , <a href="#">7503</a> , <a href="#">7504</a> , <a href="#">7505</a> , <a href="#">7506</a> , <a href="#">7507</a> , <a href="#">7508</a> , <a href="#">7509</a> , <a href="#">7510</a> , <a href="#">7511</a> , <a href="#">7512</a> , <a href="#">7513</a> , <a href="#">7514</a> , <a href="#">7847</a> , <a href="#">10124</a> , <a href="#">10139</a> , <a href="#">10140</a> , <a href="#">10141</a> , <a href="#">10142</a> , <a href="#">10143</a> , <a href="#">10144</a> , <a href="#">10145</a> , <a href="#">10146</a> , <a href="#">10147</a> , <a href="#">10148</a> , <a href="#">10149</a> , <a href="#">10150</a> , <a href="#">10151</a> , <a href="#">10152</a> , <a href="#">10153</a> , <a href="#">10154</a> , <a href="#">10155</a> , <a href="#">10156</a> , <a href="#">10157</a> , <a href="#">10158</a> , <a href="#">10159</a> , <a href="#">10160</a> , <a href="#">11133</a> , <a href="#">11134</a> , <a href="#">11135</a> , <a href="#">11136</a> , <a href="#">11137</a> , <a href="#">11138</a> , <a href="#">11139</a> , <a href="#">11140</a> , <a href="#">11141</a> , <a href="#">11142</a> , <a href="#">11143</a> , <a href="#">11144</a> , <a href="#">11145</a> , <a href="#">11146</a> , <a href="#">11147</a> , <a href="#">11148</a> , <a href="#">11149</a> , <a href="#">11150</a> , <a href="#">11151</a> , <a href="#">11152</a> , <a href="#">11153</a> , <a href="#">11154</a> , <a href="#">11155</a> , <a href="#">11156</a> , <a href="#">11157</a> , <a href="#">11158</a> , <a href="#">11159</a> , <a href="#">11160</a> , <a href="#">11233</a> , <a href="#">12362</a> , <a href="#">13271</a> , <a href="#">13272</a> , <a href="#">13273</a> , <a href="#">13274</a> , <a href="#">13275</a> , <a href="#">13276</a> , <a href="#">13277</a> , <a href="#">13278</a> , <a href="#">13279</a> , <a href="#">13280</a> , <a href="#">13281</a> , <a href="#">13282</a> , <a href="#">13283</a> , <a href="#">13284</a> , <a href="#">13285</a> , <a href="#">13286</a> , <a href="#">13287</a> , <a href="#">13288</a> , <a href="#">13289</a> , <a href="#">13290</a> , <a href="#">13291</a> , <a href="#">13292</a> , <a href="#">13293</a> , <a href="#">13328</a> , <a href="#">13329</a> , <a href="#">13330</a> , <a href="#">13331</a> , <a href="#">13332</a> , <a href="#">13333</a> , <a href="#">13334</a> , <a href="#">13335</a> , <a href="#">13336</a> , <a href="#">13337</a> , <a href="#">13338</a> , <a href="#">13339</a> , <a href="#">13340</a> , <a href="#">13341</a> , <a href="#">13342</a> , <a href="#">14518</a> , <a href="#">14519</a> , <a href="#">14520</a> , <a href="#">14521</a> , <a href="#">14522</a>

(5) クロスレファレンステーブル。ProNIT データベースに含まれる構造データの PDBcode と 100%同じ配列に対応する蛋白質・核酸相互作用の熱力学データの対応表の一部。

1A1L	<a href="#">2719</a> , <a href="#">2720</a> , <a href="#">2721</a> , <a href="#">2722</a> , <a href="#">2723</a> , <a href="#">2724</a> , <a href="#">2744</a> , <a href="#">2745</a> , <a href="#">2746</a> , <a href="#">2747</a> , <a href="#">2748</a> , <a href="#">2749</a> , <a href="#">2750</a> , <a href="#">2751</a> , <a href="#">2752</a> , <a href="#">2753</a> , <a href="#">2754</a> , <a href="#">2755</a> , <a href="#">2756</a> , <a href="#">2757</a> , <a href="#">2758</a> , <a href="#">2759</a> , <a href="#">3289</a> , <a href="#">3290</a> , <a href="#">3291</a> , <a href="#">3292</a> , <a href="#">3293</a> , <a href="#">3294</a> , <a href="#">3295</a> , <a href="#">3296</a> , <a href="#">3297</a> , <a href="#">3298</a> , <a href="#">3299</a> , <a href="#">6303</a> , <a href="#">6306</a>
1A28	<a href="#">5959</a> , <a href="#">5963</a>
1A3C	<a href="#">5592</a> , <a href="#">5593</a> , <a href="#">5594</a> , <a href="#">5595</a> , <a href="#">5596</a> , <a href="#">5597</a> , <a href="#">5598</a> , <a href="#">5599</a> , <a href="#">5600</a> , <a href="#">5601</a> , <a href="#">5602</a> , <a href="#">5603</a> , <a href="#">5604</a> , <a href="#">5605</a> , <a href="#">5606</a> , <a href="#">5607</a> , <a href="#">5608</a> , <a href="#">5609</a> , <a href="#">5610</a> , <a href="#">5611</a> , <a href="#">5612</a> , <a href="#">5613</a> , <a href="#">5614</a> , <a href="#">5615</a> , <a href="#">5616</a> , <a href="#">5617</a> , <a href="#">5618</a> , <a href="#">5619</a> , <a href="#">5620</a> , <a href="#">5621</a> , <a href="#">5622</a> , <a href="#">5623</a> , <a href="#">5624</a> , <a href="#">5625</a> , <a href="#">5626</a> , <a href="#">5627</a> , <a href="#">5628</a> , <a href="#">5629</a> , <a href="#">5630</a> , <a href="#">5631</a> , <a href="#">5632</a> , <a href="#">5633</a> , <a href="#">5634</a>
1A41	<a href="#">6117</a> , <a href="#">6118</a> , <a href="#">6119</a> , <a href="#">6120</a> , <a href="#">6121</a> , <a href="#">6122</a> , <a href="#">6123</a> , <a href="#">6124</a> , <a href="#">6125</a> , <a href="#">6126</a> , <a href="#">6127</a> , <a href="#">6128</a> , <a href="#">6129</a> , <a href="#">6130</a> , <a href="#">6131</a> , <a href="#">6132</a> , <a href="#">6133</a> , <a href="#">6134</a> , <a href="#">6135</a> , <a href="#">6136</a> , <a href="#">6137</a> , <a href="#">6138</a> , <a href="#">6139</a> , <a href="#">6140</a> , <a href="#">6141</a> , <a href="#">6142</a> , <a href="#">6969</a> , <a href="#">6970</a> , <a href="#">6971</a> , <a href="#">6972</a> , <a href="#">6973</a> , <a href="#">6974</a> , <a href="#">6975</a> , <a href="#">6976</a> , <a href="#">6977</a> , <a href="#">6978</a> , <a href="#">6979</a> , <a href="#">6980</a> , <a href="#">6981</a> , <a href="#">6982</a> , <a href="#">6983</a> , <a href="#">6984</a> , <a href="#">6985</a> , <a href="#">6986</a> , <a href="#">6987</a> , <a href="#">6988</a> , <a href="#">6989</a> , <a href="#">6990</a> , <a href="#">6991</a> , <a href="#">6992</a> , <a href="#">6993</a> , <a href="#">6994</a> , <a href="#">6995</a> , <a href="#">6996</a> , <a href="#">6997</a> , <a href="#">6998</a> , <a href="#">6999</a> , <a href="#">7000</a> , <a href="#">7001</a> , <a href="#">7002</a> , <a href="#">7003</a> , <a href="#">7004</a>
1A43	<a href="#">8505</a> , <a href="#">8509</a> , <a href="#">8512</a> , <a href="#">8515</a> , <a href="#">8517</a> , <a href="#">8519</a> , <a href="#">8521</a> , <a href="#">8523</a> , <a href="#">8525</a>
1A4T	<a href="#">7665</a> , <a href="#">7666</a> , <a href="#">7667</a> , <a href="#">7668</a> , <a href="#">7669</a> , <a href="#">7670</a> , <a href="#">7671</a> , <a href="#">7672</a> , <a href="#">7673</a> , <a href="#">7674</a> , <a href="#">7675</a> , <a href="#">7676</a> , <a href="#">7677</a> , <a href="#">7678</a> , <a href="#">7699</a> , <a href="#">7700</a> , <a href="#">7701</a> , <a href="#">7702</a> , <a href="#">7731</a> , <a href="#">7732</a> , <a href="#">7795</a> , <a href="#">7796</a> , <a href="#">7797</a> , <a href="#">7798</a> , <a href="#">7799</a> , <a href="#">7800</a> , <a href="#">7809</a> , <a href="#">7810</a> , <a href="#">7811</a> , <a href="#">7812</a> , <a href="#">7813</a> , <a href="#">7814</a> , <a href="#">7815</a> , <a href="#">7816</a>
1A4X	<a href="#">5592</a> , <a href="#">5593</a> , <a href="#">5594</a> , <a href="#">5595</a> , <a href="#">5596</a> , <a href="#">5597</a> , <a href="#">5598</a> , <a href="#">5599</a> , <a href="#">5600</a> , <a href="#">5601</a> , <a href="#">5602</a> , <a href="#">5603</a> , <a href="#">5604</a> , <a href="#">5605</a> , <a href="#">5606</a> , <a href="#">5607</a> , <a href="#">5608</a> , <a href="#">5609</a> , <a href="#">5610</a> , <a href="#">5611</a> , <a href="#">5612</a> , <a href="#">5613</a> , <a href="#">5614</a> , <a href="#">5615</a> , <a href="#">5616</a> , <a href="#">5617</a> , <a href="#">5618</a> , <a href="#">5619</a> , <a href="#">5620</a> , <a href="#">5621</a> , <a href="#">5622</a> , <a href="#">5623</a> , <a href="#">5624</a> , <a href="#">5625</a> , <a href="#">5626</a> , <a href="#">5627</a> , <a href="#">5628</a> , <a href="#">5629</a> , <a href="#">5630</a> , <a href="#">5631</a> , <a href="#">5632</a> , <a href="#">5633</a> , <a href="#">5634</a>
1A73	<a href="#">1227</a> , <a href="#">1228</a> , <a href="#">1229</a> , <a href="#">1230</a> , <a href="#">1231</a> , <a href="#">1232</a> , <a href="#">1233</a> , <a href="#">1234</a> , <a href="#">1235</a> , <a href="#">1236</a> , <a href="#">1237</a> , <a href="#">1238</a> , <a href="#">1239</a> , <a href="#">3364</a> , <a href="#">3365</a>
1A74	<a href="#">1227</a> , <a href="#">1228</a> , <a href="#">1229</a> , <a href="#">1230</a> , <a href="#">1231</a> , <a href="#">1232</a> , <a href="#">1233</a> , <a href="#">1234</a> , <a href="#">1235</a> , <a href="#">1236</a> , <a href="#">1237</a> , <a href="#">1238</a> , <a href="#">1239</a> , <a href="#">3364</a> , <a href="#">3365</a>
1AAB	<a href="#">3173</a> , <a href="#">3174</a> , <a href="#">3175</a> , <a href="#">3176</a> , <a href="#">3177</a> , <a href="#">3178</a> , <a href="#">3179</a> , <a href="#">3180</a> , <a href="#">3181</a> , <a href="#">3182</a> , <a href="#">3183</a> , <a href="#">3184</a> , <a href="#">3185</a> , <a href="#">3186</a> , <a href="#">3187</a> , <a href="#">3188</a> , <a href="#">3189</a> , <a href="#">3190</a> , <a href="#">3191</a> , <a href="#">3192</a> , <a href="#">3193</a> , <a href="#">3194</a> , <a href="#">3195</a> , <a href="#">3196</a> , <a href="#">3197</a> , <a href="#">3198</a> , <a href="#">3199</a> , <a href="#">3200</a> , <a href="#">3201</a> , <a href="#">3202</a> , <a href="#">3203</a> , <a href="#">3204</a> , <a href="#">3242</a> , <a href="#">3243</a> , <a href="#">3244</a> , <a href="#">3245</a> , <a href="#">3246</a> , <a href="#">3247</a> , <a href="#">3248</a> , <a href="#">3249</a> , <a href="#">3250</a> , <a href="#">3251</a> , <a href="#">3252</a> , <a href="#">3434</a> , <a href="#">3435</a> , <a href="#">3436</a> , <a href="#">3437</a> , <a href="#">3438</a> , <a href="#">3439</a> , <a href="#">3440</a> , <a href="#">3441</a>
1AAZ	<a href="#">2719</a> , <a href="#">2720</a> , <a href="#">2721</a> , <a href="#">2722</a> , <a href="#">2723</a> , <a href="#">2724</a> , <a href="#">2744</a> , <a href="#">2745</a> , <a href="#">2746</a> , <a href="#">2747</a> , <a href="#">2748</a> , <a href="#">2749</a> , <a href="#">2750</a> , <a href="#">2751</a> , <a href="#">2752</a> , <a href="#">2753</a> , <a href="#">2754</a> , <a href="#">2755</a> , <a href="#">2756</a> , <a href="#">2757</a> , <a href="#">2758</a> , <a href="#">2759</a> , <a href="#">3289</a> , <a href="#">3290</a> , <a href="#">3291</a> , <a href="#">3292</a> , <a href="#">3293</a> , <a href="#">3294</a> , <a href="#">3295</a> , <a href="#">3296</a> , <a href="#">3297</a> , <a href="#">3298</a> , <a href="#">3299</a> , <a href="#">6303</a> , <a href="#">6306</a>
1AF5	<a href="#">3366</a> , <a href="#">3367</a> , <a href="#">3368</a> , <a href="#">3369</a> , <a href="#">3370</a> , <a href="#">3371</a> , <a href="#">3372</a>
1AHD	<a href="#">5938</a> , <a href="#">5939</a> , <a href="#">5944</a> , <a href="#">5945</a> , <a href="#">5950</a> , <a href="#">5951</a>
1AIE	<a href="#">1919</a> , <a href="#">1920</a> , <a href="#">1921</a> , <a href="#">1922</a> , <a href="#">1923</a> , <a href="#">1924</a> , <a href="#">2237</a> , <a href="#">2238</a> , <a href="#">2239</a> , <a href="#">2240</a> , <a href="#">2241</a> , <a href="#">2242</a> , <a href="#">2243</a> , <a href="#">2244</a> , <a href="#">2245</a> , <a href="#">2246</a> , <a href="#">2247</a> , <a href="#">750</a> , <a href="#">751</a> , <a href="#">752</a> , <a href="#">753</a> , <a href="#">754</a>
1AIS	<a href="#">1557</a> , <a href="#">1558</a> , <a href="#">1559</a> , <a href="#">1560</a> , <a href="#">1561</a> , <a href="#">1562</a> , <a href="#">1563</a> , <a href="#">1564</a> , <a href="#">1565</a> , <a href="#">1566</a> , <a href="#">1567</a> , <a href="#">1568</a> , <a href="#">1569</a> , <a href="#">1570</a> , <a href="#">1571</a> , <a href="#">1572</a> , <a href="#">1573</a> , <a href="#">1574</a> , <a href="#">1575</a> , <a href="#">1576</a> , <a href="#">1577</a> , <a href="#">1578</a> , <a href="#">1579</a> , <a href="#">1580</a> , <a href="#">1581</a> , <a href="#">1582</a> , <a href="#">1583</a> , <a href="#">1584</a> , <a href="#">1585</a> , <a href="#">1586</a> , <a href="#">1587</a> , <a href="#">1588</a> , <a href="#">1589</a> , <a href="#">1590</a> , <a href="#">1591</a> , <a href="#">1592</a> , <a href="#">1593</a> , <a href="#">1594</a> , <a href="#">1595</a> , <a href="#">1596</a> , <a href="#">1597</a> , <a href="#">1598</a> , <a href="#">1599</a> , <a href="#">2202</a> , <a href="#">2203</a> , <a href="#">2204</a> , <a href="#">2205</a> , <a href="#">2206</a> , <a href="#">2207</a> , <a href="#">2208</a> , <a href="#">2209</a> , <a href="#">2210</a> , <a href="#">2211</a> , <a href="#">2212</a> , <a href="#">2213</a> , <a href="#">2214</a> , <a href="#">2215</a> , <a href="#">2216</a> , <a href="#">2217</a> , <a href="#">2218</a> , <a href="#">2219</a> , <a href="#">2220</a> , <a href="#">4404</a> , <a href="#">4405</a> , <a href="#">4406</a> , <a href="#">4407</a> , <a href="#">4408</a> , <a href="#">4409</a> , <a href="#">4410</a> , <a href="#">4411</a> , <a href="#">4412</a> , <a href="#">4413</a> , <a href="#">4414</a> , <a href="#">4415</a> , <a href="#">4416</a> , <a href="#">4417</a> , <a href="#">4418</a> , <a href="#">4419</a> , <a href="#">4420</a> , <a href="#">4421</a> , <a href="#">4422</a> , <a href="#">4423</a> , <a href="#">4424</a> , <a href="#">4425</a>

(6) 2008年度のアクセス推移:

1) ProThermの月別アクセス統計

月:	リクエスト総数:	ページリクエスト数
Apr 2008:	36412:	2931:
May 2008:	36340:	3273:
Jun 2008:	36074:	2754:
Jul 2008:	30745:	3013:
Aug 2008:	72981:	3578:
Sep 2008:	62330:	2595:
Oct 2008:	67265:	3312:
Nov 2008:	60118:	3166:
Dec 2008:	67798:	2830:
Jan 2009:	78906:	2701:
Feb 2009:	103574:	2970:
Mar 2009:	52711:	3241:
Apr 2009:	58353:	2495:

2) ProThermのアクセスドメイン:TOP10

1041626:	54.38%:	.com (Commercial)
244142:	17.96%:	[unresolved numerical addresses]
71821:	4.79%:	.net (Networks)
18812:	4.29%:	.edu (USA Higher Education)
53668:	3.79%:	.jp (Japan)
25302:	1.60%:	.be (Belgium)
19576:	1.57%:	.ie (Ireland)
41135:	1.47%:	.il (Israel)
35905:	1.43%:	.tw (Taiwan)
25382:	1.42%:	.br (Brazil)

3) ProThermのリクエストページ:TOP5

1290212:	8/May/09 15:24:	/cgi-bin/jouhou/prothem/pp_entry.pl (個別エントリーのCGI)
138363:	8/May/09 15:15:	/cgi-bin/jouhou/prothem/pp_mutation.sh (mutation表示のCGI)
44363:	8/May/09 12:50:	/jouhou/Prothem/prothem.html (ProThermのホーム)
41419:	8/May/09 13:03:	/cgi-bin/jouhou/prothem/prothem.pl (データ検索のCGI)
16943:	0.68%:	8/May/09 12:58:/jouhou/Prothem/prothem_search.html (検索画面)

4) ProNIT の月別アクセス統計

月:	リクエスト総数:	ページリクエスト数
Apr 2008:	37876:	2626:
May 2008:	50533:	2627:
Jun 2008:	43835:	2269:
Jul 2008:	49352:	2504:
Aug 2008:	69912:	2497:
Sep 2008:	47086:	1935:
Oct 2008:	80121:	2545:
Nov 2008:	47333:	2397:
Dec 2008:	56741:	2394:
Jan 2009:	34563:	2115:
Feb 2009:	42481:	2341:
Mar 2009:	49881:	2340:

5) ProNIT のアクセスドメイン:TOP10

617128:	62.66%:	.com (Commercial)
130525:	15.76%:	[unresolved numerical addresses]
57936:	8.20%:	.net (Networks)
26357:	7.44%:	.jp (Japan)
10403:	2.09%:	.edu (USA Higher Education)
2350:	0.60%:	[unknown domain]
2909:	0.45%:	.in (India)
2864:	0.45%:	.tw (Taiwan)
1969:	0.38%:	.de (Germany)
1072:	0.28%:	.it (Italy)

6) ProNIT のリクエストページ:TOP5

730151:	8/May/09 15:20:	/cgi-bin/jouhou/pronit/new/bind_entry.pl	(個別エントリーの CGI)
421351:	8/May/09 14:38:	/jouhou/pronit/pronit.html	(ProNIT ホーム)
8607:	8/May/09 09:21:	/jouhou/pronit/pronit_search.html	(検索画面)
5291:	24/Jul/05 15:39:	/cgi-bin/jouhou/pronit/new/pronit_search.pl	(データ検索 CGI)
4366:	8/May/09 07:11:	/cgi-bin/jouhou/pronit/new/pronit_stat.pl	(Statistics の CGI)



## 別紙参考資料2

### 蛋白質・蛋白質相互作用データベースのプロトタイプ

entrynumber
<b>protein information:</b>
protein1 name
protein1 synonyms
protein1 source
protein1 sequence
protein1 biologicalunit
protein1 uniprot
protein1 pdb
protein1 mutation
protein1 asa
protein1 secstr
protein1 prothemnumber:
protein2 name
protein2 synonyms
protein2 source
protein2 sequence
protein2 biologicalunit
protein2 uniprot
protein2 pdb
protein2 mutation
protein2 asa
protein2 secstr
protein2 prothemnumber
<b>Complex information:</b>
pdb complex
ligand
conformation
<b>Experimental Condition:</b>
Temperature
pH
BufferName
BufferConcentration
Additives
protein1 Concentration
protein2 Concentration
Ion Name
Ion Concentration
Method
<b>Binding Data:</b>
Kd
Kd Mutant
Ka
Ka Mutant
dG
dG Mutant
dH
dH Mutant
dCp
dCp Mutant
Stoichiometry
<b>Literature:</b>
Reference
Author
Keywords
Remarks
RelatedEntries

## 別紙参考資料3

### 熱力学データの Controlled Vocabulary

#### Controlled Vocabulary for Thermodynamic Databases at KIT

This is a controlled vocabulary for all of our databases in Bioinfo Bank at KIT. Here we define each terms in our databases and later plan to unify it as a Biological Thermodynamic Ontology (BTO), an ontology for all biological thermodynamic databases. Here we follow our database structure. Later we will follow a more generic structure. This work is under development.

#### Controlled Vocabulary for Thermodynamic Databases

---

[Expand All](#) [Collapse All](#)

- [ProNIT](#)
  - [Protein Information](#)
  - [Nucleic Acid Information](#)
  - [Complex Information](#)
  - [Experimental Details](#)
  - [Binding Data](#)
  - [Literature](#)
  - [General](#)
- [ProTherm](#)
  - [Sequence and Structural Information](#)
  - [Experimental Details](#)
  - [Thermodynamic Data](#)
  - [Literature](#)
  - [General](#)

## 別紙参考資料 4

### (1) XML フォーマットによる ProNIT データの一部

```
<pronit xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
        xsi:noNamespaceSchemaLocation="file:pronit.xsd">
  <entry>
    <entryNumber>1</entryNumber>
    <proteinDetails>
      <name>Myb proto-oncogene protein</name>
      <synonyms>c-Myb protein; Transforming protein myb</synonyms>
      <source>Mus musculus (Mouse)</source>
      <fragment>89-193</fragment>
      <sequence>MARRPRHSIYSSDEDEDEIEMCDHDYDGLLPK</sequence>
      <biologicalUnit>1</biologicalUnit>
      <dbReference type="PIR">TVMSMB</dbReference>
      <dbReference type="SWISSPROT">MYB_MOUSE (P06876)</dbReference>
      <dbReference type="PDBFREE">1MBE, 1MBG, 1MBJ</dbReference>
      <dbReference type="PROTHERM">786 787 788 789</dbReference>
      <mutation>wild</mutation>
    </proteinDetails>
    <nucleicAcidDetails>
      <name>MBS-I (22-mer)</name>
      <source>Synthetic</source>
      <type>DDS</type>
      <sequenceTopWild>caccctaactgacacacattct</sequenceTopWild>
      <sequenceBottomWild>agaatgtgtgtcagttagggtg</sequenceBottomWild>
      <mutation>wild</mutation>
      <dbReference type="GENBANK">M33654</dbReference>
    </nucleicAcidDetails>
    <complexDetails>
      <dbReference type="PDBCOMPLEX">1MSE</dbReference>
      <dbReference type="PRONUC">86</dbReference>
      <proteinConformation>R2 and R3</proteinConformation>
      <nucAcidConformation>The base pairs</nucAcidConformation>
    </complexDetails>
    <exptDetails>
      <temperature>20.2 C</temperature>
      <pH>7.5</pH>
      <bufferName>Potassium phosphate</bufferName>
      <bufferConc>100 mM</bufferConc>
      <ionNameOne>Potassium chloride (KCl)</ionNameOne>
      <ionConcOne>20 mM</ionConcOne>
      <method>Isothermal titration calorimetry (ITC)</method>
    </exptDetails>
    <bindingData>
      <Kd_Wild>5.00e-08 M</Kd_Wild>
      <Ka_Wild>2.00e+07 1/M</Ka_Wild>
      <dG_Wild>-1.21e+01 kcal/mol</dG_Wild>
      <dH_Wild>-1.25e+01 kcal/mol</dH_Wild>
      <dCp_Wild>-6.20e-01 kcal/mol/K</dCp_Wild>
      <stoichiometry>1.01</stoichiometry>
    </bindingData>
    <citation>
      <reference>J Mol Biol. 1998; 276(3):571-590 PMID: 9551098</reference>
      <author>Oda M, Furukawa K, Ogata K, Sarai A, Nakamura H</author>
      <keywords>c-Myb; DNA-binding; ITC</keywords>
    </citation>
    <miscellaneous>
      <remarks>R2R3* (C 130 I), a stable mutant</remarks>
      <relatedEntries>2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11</relatedEntries>
    </miscellaneous>
  </entry>
</pronit>
```

(2) フラットフォーマットから XML フォーマットに変換する手順

1. フラットファイルからデータ構造の情報を取得
2. この情報から XML スキーマを定義
3. XML スキーマの情報をプログラムにインプリメント
4. フラットファイルのすべての項目の読み込みと修正
5. フラットファイルから HTML 情報部分を削除
6. フラットファイルから項目とデータ列を分離
7. 各列を読み込み CSV ファイルに書き出し
8. CSV ファイルを読み込みブランク部位は削除
9. CSV ファイルからデータを抽出し XML スキーマに従って XML ファイルを生成
10. XML 構文をチェックし XML ファイルをバリデート

1. Get the data structure from the flat file
2. Define the XML schema based on this structure
3. Incorporate the XML schema structure information into the program
4. Read the flat file and check all the fields. If there is any error, correct it.
5. Remove the HTML content from the flat file
6. The flat file contains two columns. Split the columns
7. Read the columns and convert the column data into a CSV file
8. Read the CSV file and remove the fields having null data
9. Extract the data from the CSV file and create the XML file as per the XML Schema
10. Verify the XML syntax and validate the XML file.

別紙参考資料5

九工大補完課題プロジェクト専用のWeb ページ

[English](#)


## 統合データベースプロジェクト

### 生体分子の熱力学データと構造データの統合

ホーム
プロジェクト
最新情報
メンバー
コンタクト

リンク (内部)

- 血井研究室
- BioInfoBank
- ProTherm
- ProNIT
- Controlled Vocabulary for Thermodynamic Databases

リンク (外部)

- 文科省統合データベースプロジェクト
- 統合データベースセンター(LSDB)
- PDBj
- The National Center For Biomedical Ontology
- Protein Ontology
- Biochemical Thermodynamics
- IUBMB
- The Gene Ontology

ダウンロード リンク

- ProTherm-Data-Download
- ProNIT-Data-Download
- Cross-Reference of ProTherm
- Cross-Reference of ProNIT

概要

九工大では、文科省の統合データベースプロジェクトの一環として、蛋白質の安定性や相互作用の網羅的な熱力学データと構造データとの統合を進めています。

統合化として具体的には以下のことを進めています。

- 熱力学情報と構造情報のクロスリファレンスの作成  
九工大の熱力学データとPDBjの構造データを対応づけるクロスリファレンステーブルを作成します。クロスリファレンステーブルを元に、九工大が以前から構築している蛋白質熱力学データベース (ProTherm)、蛋白質・核酸相互作用データベース (ProNIT) と、PDBjとの間に、双方向にリンクを作成します。

ProTherm: 蛋白質の熱力学データベース  
ProNIT: 蛋白質・核酸相互作用データベース

- オントロジーの整備  
熱力学データのオントロジーを整備します。  
Controlled Vocabulary for Thermodynamic Databases
- データ交換フォーマットの整備  
XMLなど、熱力学データのデータ交換フォーマットを整備します。  
ProThermのXMLデータ  
ProNITのXMLデータ (暫定版)

また、ライフサイエンス統合データベースセンターと連携して、テキストマイニングによる論文の自動収集やデータの自動抽出を実施します。

最新情報

- 熱力学データと構造・配列データのクロスリファレンスの更新 (2009年01月08日) [詳細....](#)
- ProNITデータの更新 (2009年01月08日) [詳細....](#)
- 熱力学データと構造・配列データのクロスリファレンスの更新 (2008年12月22日) [詳細....](#)
- ProThermデータの更新 (2008年12月19日) [詳細....](#)
- 熱力学データと構造・配列データのクロスリファレンスの更新 (2008年12月02日) [詳細....](#)
- ProNITデータの更新 (2008年12月02日) [詳細....](#)
- 熱力学データと構造・配列データのクロスリファレンスの更新 (2008年10月29日) [詳細....](#)
- ProNITのXMLデータ (暫定版) (2008年10月20日) [詳細....](#)
- ProThermデータの更新 (2008年9月8日) [詳細....](#)
- 熱力学データのポキャブラリー (2008年8月15日) [詳細....](#)



生体分子の熱力学データと構造データの統合

## 整備実績一覧【代表機関名：九州工業大学】

## (1) 保有データ情報

## (1-1) データの種類

①生物種	
②試料・ライブラリ 一等の種類、数	①蛋白質およびその変異体の構造安定性に関する熱力学データ約 23,000 件 ②蛋白質と核酸の相互作用の定量的な熱力学実験データ約 9,000 件
③測定方法	熱測定、分光測定など
④データの内容	書誌情報、数値情報、画像情報。内容の詳細は別紙参考資料参照。
⑤その他、特記事項	

## (1-2) データソース

①現在のデータ量	
②データ区分	■ 自前    ■ 第三者    ■ 文献データ    □ 計算結果等の二次データ □その他（下欄に詳細を記述）
③将来の増加の見込み	蛋白質の安定性および蛋白質・核酸相互作用の熱力学データともに、年間 2,000~3,000 件程度の新規データが発生。
④権利関係	所有者（データベース作成者及び九州工業大学） 公開（■可 □否 □その他 [ ]）
⑤その他、特記事項	①ProTherm: <a href="http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/protherm/protherm.html">http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/protherm/protherm.html</a> ②ProNIT: <a href="http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/pronit/pronit.html">http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/pronit/pronit.html</a>

## (1-3) データの管理状況

①更新頻度等の管理 状況、体制	月に 1 回程度更新。データベースサーバーは無休でアクセス可能。
②その他、特記事項	なし。

(1-4) データベース関係

①DB 管理者数	1 名
②キュレータ・アナテ ータ数	2 名
③データ構造	リレーショナル
④DB 管理ソフト	SYBASE
⑤サーバの OS	Linux
⑥サーバ規模	ワークステーション
⑦DB へのアクセス数	年間約 10 万件
⑧独立 IP 数	約 1 万個
⑨その他、特記事項	DB の検索メニューの画面コピーは別紙参考資料添付。 オントロジーは今後整備。

(2) データ (又は DB) の連結、統合化整備 (※試験的、限定的公開済みのものも含む。)

通 番	データ (又は DB) の名称	公開/ 未公開	概要 (データの種類 (生物種)・数量 (kB 等)、本プロジェクトで実施した特徴点、進捗状況、今後の計画・課題などを簡潔にわかりやすく記述)
1	ProTherm	公開	構造データベース PDBj とクロスレファレンスにより連結
2	ProNIT	公開	構造データベース PDBj とクロスレファレンスにより連結

(3) DB 基盤システム、ツール等開発成果物の整備 (※試験的、限定的公開済みのものも含む。)

通 番	DB 基盤システム、ツール等の 名称	公開/ 未公開	概要 (主な機能・特徴点、進捗状況、今後の計画などを簡潔にわかりやすく記述)
1	XML 化の変換プログラム	非公開 (XML デ ータは 公開)	ProNIT のデータ XML 形式への変換プログラムの作成

(4) その他の成果物 ((2)、(3) に該当しないもの)

通番	名称	公開／ 未公開	概要