

核酸塩基配列データベースシステムGENASの使用方法 (3)

古市, 恵美子
福岡女子短期大学

松尾, 文碩
九州大学工学部

高木, 利久
九州大学情報処理教育センター

二村, 祥一
大分大学工学部組織工学科

他

<https://doi.org/10.15017/1470177>

出版情報：九州大学大型計算機センター広報. 24 (1), pp.1-18, 1991-01-25. 九州大学大型計算機センター

バージョン：

権利関係：

核酸塩基配列データベースシステムGENASの使用法(3)

古市恵美子*, 松尾文碩**, 高木利久***,
二村祥一****, 榑 佳之*****, 久原 哲*****

1. はじめに

昭和58年7月に公開されたGENAS [1, 2, 3] は, European Molecular Biology Laboratory (EMBL), National Biomedical Research Foundation (NBRF) および GenBank のデータを原データとした, 核酸とタンパク質の1次構造に関するデータベースとして運用されてきた。しかしながら, 高分子の機能を推定するためには1次構造だけではなく, 3次構造データの利用が必要となってきた。そこで, タンパク質と核酸の3次構造のデータベース Protein Data Bank (PDB) のデータ [4] を追加して, 核酸およびタンパク質のデータベースの充実をはかった。併せて応用プログラムとして, 3種類の3D-表示プログラムとPDBデータのコピーのためのプログラムを導入した。なおGENASに登録されているデータは, 1990年4月24日付で, タンパク質483件, 核酸41件, その他10件の合計534件となっている。

2. PDBデータベースについて

PDBは, 米国の Brookhaven National Laboratory が作成しているタンパク質と核酸の3次構造のデータベースであり, 日本では大阪大学蛋白質研究所蛋白質工学基礎研究センターから配布されている。このデータベースは年3~4回の更新が行なわれている。PDBデータの書式を図1に示す [5]。

```

HEADER      HYDROLASE (O-GLYCOSYL)                20-OCT-88    2LZ2      2LZ2
COMPND      LYSOZYME (E.C.3.2.1.17)                2LZ2
SOURCE      TURKEY (MELEAGRIS $GALLOPAVO) EGG WHITE 2LZ2
AUTHOR      M.R.PARSONS,S.E.V.PHILLIPS              2LZ2
REVDAT      1 15-OCT-89 2LZ2 0                    2LZ2
JRNL        AUTH  M.R.PARSONS,S.E.V.PHILLIPS      2LZ2
JRNL        TITL  THE THREE DIMENSIONAL STRUCTURE OF TURKEY EGG WHITE 2LZ2
JRNL        TITL 2 LYSOZYME AT 2.2 ANGSTROMS RESOLUTION 2LZ2
JRNL        REF   TO BE PUBLISHED                2LZ2
REMARK      1                                         2LZ2
REMARK      2 RESOLUTION. 2.2 ANGSTROMS.          2LZ2
SEQRES      1 129 LYS VAL TYR GLY ARG CYS GLU LEU ALA ALA ALA MET LYS 2LZ2
    
```

図1 PDBのデータ書式

平成2年11月26日受理

* 福岡女子短期大学

** 九州大学工学部

*** 九州大学情報処理教育センター

**** 大分大学工学部組織工学科

***** 九州大学遺伝情報実験施設

***** 九州大学遺伝子資源工学専攻

```

HELIX      1  H1 ARG          5  LEU          15  1                2LZ2
SHEET      1  S1  2 LYS          1  TYR          3  0                2LZ2
SSBOND     1  CYS          6          CYS          127                2LZ2
ATOM       1  N      LYS          1          -7.237  14.795 -10.161  1.00 58.48  2LZ2
ATOM       2  CA     LYS          1          -6.682  13.509 -9.562  1.00 57.62  2LZ2
ATOM       3  C      LYS          1          -6.904  13.768 -8.083  1.00 49.27  2LZ2
ATOM       4  O      LYS          1          -6.436  14.842 -7.821  1.00 46.31  2LZ2
ATOM       5  CB     LYS          1          -5.227  13.264 -9.843  1.00 47.34  2LZ2
ATOM       6  CG     LYS          1          -4.509  11.995 -9.589  1.00 40.83  2LZ2
    
```

図1 PDBのデータ書式(つづき)

各行の最初の6文字はコードになっており、この中で重要なものについては表1に示す。第1行目に分子の一般名称、登録年月日、IDコードが記載されている。2行目以降には、前半部分は著者名や文献情報などの一般情報、後半部分に各原子のX、Y、Z座標値が記載されている。また典型的なアミノ酸・ヌクレオチド以外の特殊残基や、酸・糖などが分子中に含まれている場合には、HETおよびHETATMとして別に取り扱われている。

表1 PDBデータのコード

| コード | 記 載 内 容 |
|---------|------------------------|
| HEADER | 一般名称、登録年月日、IDコード |
| COMPND | 定 義 |
| AUTHOR | 著者名 |
| REVDAT | 修正年月日 |
| JRNL | 主発表文献名 |
| REMARK | 参考文献及び一般情報 |
| SEQRES | 配列情報 |
| HET | 特殊残基の名称及び分子式 |
| HELIX | ヘリックスに関する情報 |
| SHEET | シートに関する情報 |
| TURN | ヘアピンターンに関する情報 |
| SSBOND | ジスルフィド結合に関する情報 |
| ATOM | アミノ酸、ヌクレオチドの各原子のXYZ座標値 |
| HETATM | 特殊残基の各原子のXYZ座標値 |
| TER | 鎖の終了情報 |
| CONNECT | HETATMの結合情報 |

3. 3次構造データベースシステムの起動方法

3次構造のデータベースを取り扱うためには、まずGENAS1と入力してGENASを起動させなければならない。GENAS1状態では、表示されたメニュー画面にしたがってデータベースの選択を行なう。1次構造のデータベースの場合はSQ、3次構造のデータベースの場合は3Dと入力する。また1次構造のみのデータベースは、従来通りGENASコマンドでも使用できる。この例を図2に示す。これ以後の検索方法は今までのGENASの場合と同様である。検索型コマンドの使用法については文献1、2を参照してほしい。

```

READY
1) GENAS1
    **** GENAS NEWS ****
    EMBL      DATA (RELEASE 18.0) IS UPDATED AT   03/AUG/1989
    GENBANK(R) DATA (RELEASE 58.0) IS UPDATED AT   03/AUG/1989
    NBRF PROTEIN DATA (RELEASE 20.0) IS UPDATED AT 03/AUG/1989
    *****
    NEW PROG. "PICKALL" PICKS UP ALL SEQUENCES RETREIVED
    PLEASE      LIST 'A70512C.PICKALL.TEXT' NONUM
    OR COPY THAT DATASET AND LIST
    TO CALL 641-1101 EX 6201      KUHARA

    NOW AVAILABLE DATABASE
    SEQUENCE DB:      SQ
    3-D PROTEIN DB:  3D
2) SELECT DB NAME? 3D
   =T
3) . F KW=ALCOHOL
   =4
4) . D DEF
   =1
   DEF= APO-LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE (E.C.1.1.1.1) COMPLEX WITH ADP-RIBOSE
   =2
   DEF= HOLO-LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE (E.C.1.1.1.1) COMPLEX WITH NAD AND DMSO
   =3
   DEF= ISONICOTINIMIDYLATED LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE      (E.C.1.1.1.1)
   =4
   DEF= APO-LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE (E.C.1.1.99.8)
5) . D BI
   =1
   BI= ASTM NATUAS  UK ISSN 0028-0836  006H.EKLUND,T.A.JONES
   =2
   BI= H.EKLUND, J.-*P.SAMAMA, L.WALLEN, C.-*I.BRANDEN,
       A.AKESON, T.A.JONES
       STRUCTURE OF TRICLINIC TERNARY COMPLEX OF HORSE
       LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE AT 2.9 ANGSTROMS
       RESOLUTION
       J.MOL.BIOL.  V. 146  561 1981
       ASTM JMOBAC  UK ISSN 0022-2836  070
   =3
   BI= B.V.PLAPP, H.EKLUND, T.A.JONES, C.-*I.BRANDEN
       THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF ISONICOTINIMIDYLATE
       LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE
       J.BIOL.CHEM.  V. 258  5537 1983
       ASTM JBCHA3  US ISSN 0021-9258  071
   =4
   BI= 353T.A.JONES, H.EKLUND
6) . END
    READY
    
```

下線部は入力を示す。

- 1) GENASを起動する。
- 2) 3次構造データベースを選択する。
- 3) キーワードにALCOHOLを持つエントリーを探す。
- 4) DEF(定義)を表示することを指示。
- 5) BI(文献データ)を表示することを指示。
- 6) GENASの終了。

図2 起動方法および検索型コマンドの使用例

4. 応用プログラム

4. 1 応用プログラムの概要

PDBのデータはXYZ座標値であり、これらの数値データは人間の目で見て理解することは困難である。このため数値データを図形化・イメージ化する表示プログラムをGENASの応用プログラムとして今回登録した。3種類の3D-表示プログラムである。またPDBデータのコピープログラムも用意した。その内容を以下に示す。

- WIRE : 任意のタンパク質または核酸をワイヤーモデルで表示する。
- HELIX&SHEET : 任意のタンパク質をヘリックス&シートモデルで表示する。
- SPHERE : 任意のタンパク質または核酸を空間充填モデルで表示する。
- COPY : 任意のタンパク質または核酸のPDBデータをユーザーの課題番号のデータセットにコピーする。

これらの表示プログラムは、富士通の科学技術計算用コンピュータ・グラフィックス・動画システム(CGMS)を利用している[6]。CGMSは会話型とバッチ型とからなり、応用プログラムではサブルーチン・ライブラリの形で提供されているバッチ型を用いている。これによりユーザーはCGMSコマンドに直接タッチせずに、表示、回転、移動などの操作が可能になっている。

CGMSではオブジェクト座標系とワールド座標系の2つの座標系があり、PDBのデータはオブジェクト座標系で表わされている(図3)。作画や文字、マーカーの大きさを決めたり、ビューイング・パラメータなどを決める時の基準になるのはワールド座標系である。このためオブジェクト座標系からワールド座標系へ変換する必要がある。ここではX、Y、Z座標値の中心点を原点(0, 0, 0)として、ワールド座標系の1ユニットを1オングストロームに対応するように変換を行なっている。これにより、ユーザーは座標系を特に意識しなくてもよい。

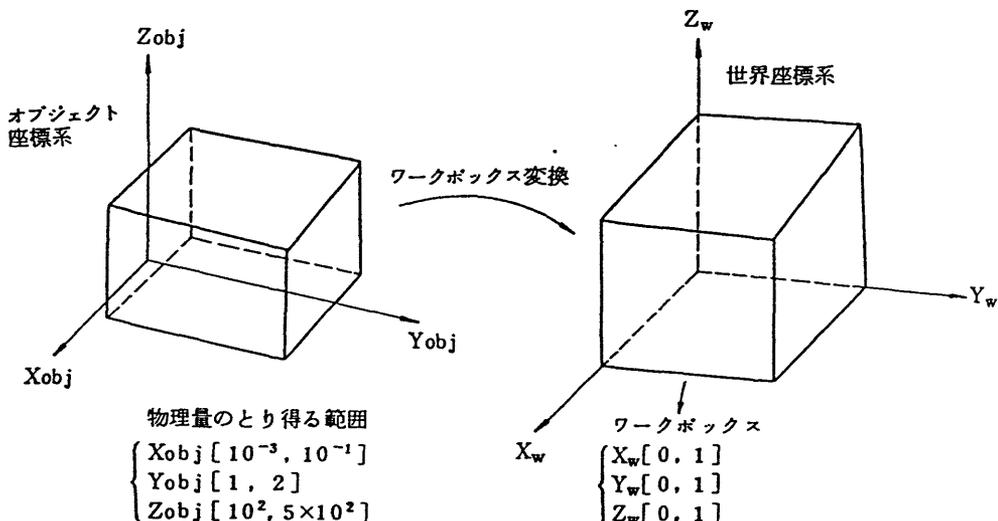


図3 CGMSの座標系

3次元物体に対してCGMSで用意されている簡易平行投影法では、物体のどこを見つめるか（注視点Vc）、どこから見るか（視点Eye）、およびウィンドウの大きさを与えればビューイング・パラメタが自動的に設定されるようになっている（図4）。導入した3D表示プログラムの初期設定では、注視点（Vc）は原点、また視点（Eye）はその分子の中心残基になっている。ビューポイントは、視点（Eye）となる残基番号を入力することにより変更できる。ウィンドウサイズは分子全体が入る大きさに設定している。

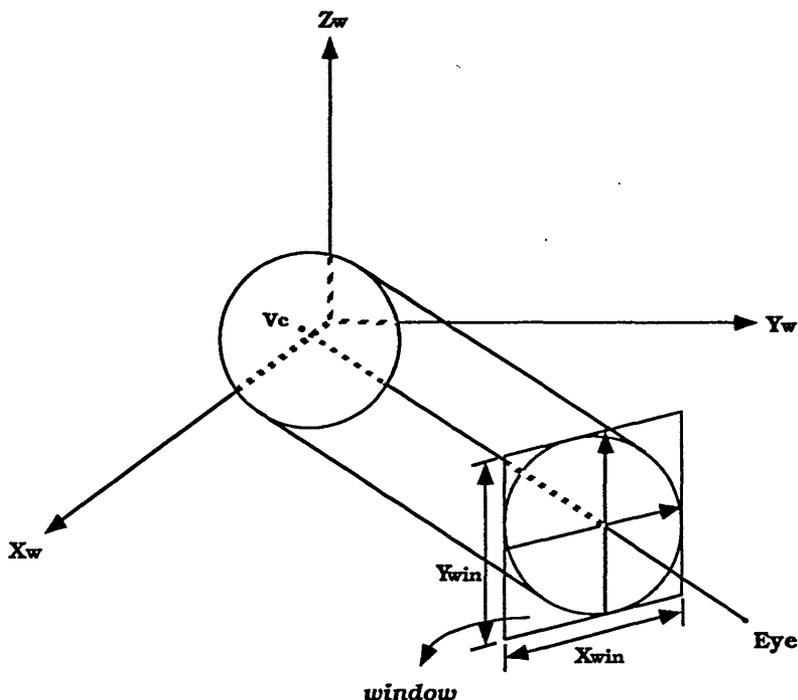


図4 簡易平行投影

これらの表示プログラムは、大型計算機センターオープン端末室内のFIVIS端末、オープン端末室および端末分室のグラフィック端末（F6242、F6683）、センター外のパソコン端末（テクノロジエのエミュレータを持っているもの：PC-9801シリーズなど）で使用可能である。センター外端末で本プログラムを使用する場合には、LOGON後に、TTY F9432A と入力してグラフィックの設定を行なう必要がある。

空間充填モデルおよびヘリックス&シートモデルでは陰影処理が可能である。陰影処理を施した画像は、オープン端末室内のFIVIS端末のみで表示可能である。その他の端末では線画しか得ることができない。特に空間充填モデルで画像を出力させる時は、原子数によってはかなりの計算時間を要すると思われるので、TSSでのCPU TIMEの制限値をオーバーしないように注意することが必要である。

4. 2 応用プログラムの起動方法

CGMSはメモリを非常に多く必要とし、システムの制約から1次構造の場合とは異なり、検索をした後すぐに応用プログラムを起動させることはできない。このため応用プログラムを使用するには、一度GENASを終了させてから応用プログラムを起動させなければならない。将来はGENASから応用プログラムを起動できるようにする予定である。

応用プログラムを起動するには、検索後にGENASを終了し、READY状態でMGSと入力すればよい。MGS状態では、表示されたメニュー画面にしたがって応用プログラムの選択を行なう。次に検索した集合を選択する。直前に検索した集合であればENTERキーを連続して入力していけば検索結果のIDが表示される。この集合から目的とするものを選択する。この例を図5に示す。PDBのデータの中には、座標値が登録されていないものや大きすぎて表示不可能なものがあり、これらのデータについては選択後にメッセージを出力するので、次の段階でEXITを選択しなければならない。

```

READY
1) MGS

*** 1 WIRE MODEL ***
*** 2 HELIX AND SHEET MODEL ***
*** 3 SPHERE MODEL ***
*** 4 COPY ***
*** 5 END ***

2) INPUT NO ? 1
INPUT ONE DATASET NAME SAVED IN GENAS
3) IF YOU USE LAST SAVED SET , ONLY HIT RETURN CR
NAME=A70XXX.SYSWORK0.$$$TSUNO
4) INPUT "N" (NO DISPLAY ID CODE), "Y" (DISPLAY ID CODE) Y
NOW GENAS DISPLAY SAVED ID
NO= 4 ID= 8ADH
NO= 3 ID= 7ADH
NO= 2 ID= 6ADH
NO= 1 ID= 5ADH
5) SELECT ABOVE INFORMATION, INPUT NO. ? 4
1 CONTINUE
2 EXIT
6) INPUT NO ? 1
    
```

下線部は入力を示す。

- 1) 応用プログラムを起動する。
- 2) ワイヤーモデルを表示するプログラムを選択する。
- 3) 検索した集合を選択する。直前に検索した集合であればENTERキーを押す。
- 4) IDコードの表示を指示。
- 5) ID=8ADHを選択する。
- 6) 表示プログラムを実行する。

図5 応用プログラムの起動方法

4.3 応用プログラムの使用法

4.3.1 WIRE

このアプリケーションプログラムは任意のタンパク質あるいは核酸をワイヤーフレームモデルで表示する。初期設定では、主鎖だけを表示するようにしている。この他に残基番号（黄色）、X、Y、Z座標軸の方向（白）、原点（緑）なども表示する。

1) DEVICE NUMBER (FIVIS ->2, F9430 ->4, F6242,F6684 ->5) **A**

```
*****
* <<<      C O M M A N D      >>> *
* DISPLAY MOLECULES ; D   DISPLAY SIDE CHAIN      ; M *
* DISPLAY 3D-AXIS   ; X   DISPLAY RESIDUE NUMBER ; N *
* DISPLAY ORIGIN    ; O   DISPLAY HETATM         ; H *
2) * ROTATE          ; R   CHANGE CENTER POSITION  ; Y *
* SCALE             ; S   CHANGE DISPLAY REGION  ; A *
* TRANSLATE         ; T   CHANGE WINDOW SIZE     ; W *
* MAGNIFY           ; G   CHANGE LINE COLOR      ; C *
* ERASE             ; F   CHANGE LINE WIDTH      ; L *
* END               ; E   RESET INITIAL CONDITION ; I *
*****
```

3) COMMAND = **D**

@

4) COMMAND = **E**

@

5) COMMAND = **M**

DISPLAY SIDE CHAIN (ON -> Y , OFF -> N) **Y**

6) COMMAND = **X**

DISPLAY 3D-AXIS (ON -> Y , OFF -> N) **Y**

7) COMMAND = **N**

DISPLAY RESIDUE NUMBER (ON -> Y , OFF -> N) **Y**

INTERVAL RESIDUE NUMBER **50**

8) COMMAND = **O**

DISPLAY ORIGIN (ON -> Y , OFF -> N) **Y**

9) COMMAND = **H**

DISPLAY HETATM (ON -> Y , OFF -> N) **N**

COMMAND = **D**

@

COMMAND = **E**

@

10) COMMAND = **Y**

RESIDUE NUMBER : 1 --> 374

RESIDUE NUMBER **100**

11) COMMAND = **A**

RESIDUE NUMBER : 1 --> 374

RESIDUE NUMBER OF REGION (START, END) **50,150**

12) COMMAND = **W**

WINDOW SIZE **0.8**

COMMAND = **D**

@

COMMAND = **E**

@

図6 ワイヤーモデル表示プログラムの実行例

```

13) COMMAND = C
*****
*      <<<  S U B C O M M A N D  >>>      *
*  CHANGE COLOR OF BACKBONE & SIDE CHAIN    ; 1 *
*  CHANGE COLOR OF RESIDUES ( START, END )   ; 2 *
*  CHANGE COLOR OF SPECIFIED RESIDUES       ; 3 *
*  CHANGE COLOR OF S-S BOND                  ; 4 *
*  CHANGE COLOR OF HETATM                    ; 5 *
*  CHANGE COLOR OF RESIDUE NUMBER           ; 6 *
*  END                                        ; 7 *
*****

a) SUBCOMMAND = 1
COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
INDEX 1 2 3 4 5 6 7 8
COLOR INDEX OF BACKBONE & SIDE CHAIN ( INDEX,INDEX ) 7,4

b) SUBCOMMAND = 2
RESIDUE NUMBER : 1 --> 374
COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
INDEX 1 2 3 4 5 6 7 8
RESIDUE NUMBER OF REGION AND COLOR INDEX ( START,END,INDEX ) 70,80,6

c) SUBCOMMAND = 3
COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
INDEX 1 2 3 4 5 6 7 8
SPECIFIED AMINO ACID NAME<THREE CHARACTER> AND COLOR INDEX ( AA,INDEX ) ALA,5

d) SUBCOMMAND = 4
COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
INDEX 1 2 3 4 5 6 7 8
COLOR INDEX NUMBER OF S-S BOND 4

e) SUBCOMMAND = 5
COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
INDEX 1 2 3 4 5 6 7 8
COLOR INDEX NUMBER OF HETATM 1

f) SUBCOMMAND = 6
COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
INDEX 1 2 3 4 5 6 7 8
COLOR INDEX OF RESIDUE NUMBER 7

g) SUBCOMMAND = 7
*****
*      <<<  C O M M A N D  >>>      *
*  DISPLAY MOLECULES ; D  DISPLAY SIDE CHAIN    ; M *
*  DISPLAY 3D-AXIS   ; X  DISPLAY RESIDUE NUMBER ; N *
*  DISPLAY ORIGIN    ; O  DISPLAY HETATM        ; H *
*  ROTATE            ; R  CHANGE CENTER POSITION ; Y *
*  SCALE             ; S  CHANGE DISPLAY REGION ; A *
*  TRANSLATE         ; T  CHANGE WINDOW SIZE    ; W *
*  MAGNIFY           ; G  CHANGE LINE COLOR     ; C *
*  ERASE             ; F  CHANGE LINE WIDTH     ; L *
*  END              ; E  RESET INITIAL CONDITION ; I *
*****

```

図6 ワイヤーモデル表示プログラムの実行例 (つづき)

```

COMMAND = D
@

COMMAND = E
@

14) COMMAND = L
CURRENT LINE WIDTH = 3
LINE WIDTH ( 1 -> 10 ) CR

15) COMMAND = R
ROTATION ANGLE ( X,Y,Z ) 0.0,90.0,0.0 .

COMMAND = D
@

COMMAND = E
@

16) COMMAND = S
RESIDUE NUMBER :      1 --> 374
RESIDUE NO OF CENTER, SCALING FACTOR ( NO,FACTOR ) 100,3.0

COMMAND = D
@

COMMAND = E
@

17) COMMAND = T
TRANSFER UNIT ( X,Y,Z ) 0,-20.0

COMMAND = D
@

COMMAND = E
@

18) COMMAND = I

19) COMMAND = G
@
RESIDUE NUMBER :      1 --> 374
CENTER RESIDUE NO. & RADIUS<ANGSTROM> & WINDOW SIZE ( NO,R,W ) 70,5.0,1.0
@

20) COMMAND = E
@

READY

```

図6 ワイヤーモデル表示プログラムの実行例(つづき)

下線部は入力を示す。

- 1) 使用する端末のデバイスナンバーを指定する。
大型計算機センターオープン端末室のFIVIS端末は2, グラフィック端末は5, センター外パソコン端末(PC-9800など)は4を指定する。
- 2) 使用できるコマンドはメニュー形式で表示される。
- 3) グラフィック画面上に画像として出力する。(最初は初期設定値)
DISPLAYコマンドを選択すると画像として出力される。
- 4) グラフィック画面をクリアする。
- 5) 主鎖のみ,あるいは側鎖を同時に表示するかどうか。
側鎖を表示するように設定すると,タンパク質の場合にはジスルフィド結合が存在すればジスルフィド結合も表示するかどうかをたずねる。
- 6) X, Y, Z座標軸の方向を表示するかどうか。
- 7) モデル表示時に残基番号を表示するかどうか。
残基番号を表示する場合は,何残基おきに表示するかをたずねる。
- 8) 原点を表示するかどうか。
原点はXYZ軸の交点として表示され,各軸の長さは1オングストロームである。
- 9) HETATMを表示するかどうか。
- 10) 視点を変更する。新しい視点になる残基番号を入力する。
- 11) 表示する範囲を変更する。
始めの残基から終わりの残基までというように入力する。
- 12) ウィンドウサイズを変更する。
現在のウィンドウサイズを1とし,ウィンドウサイズを大きくすればその比率に従って表示される分子は小さくなり,ウィンドウサイズを小さくすればその比率に従って表示される分子は大きくなる。
- 13) 表示色の変更。(このコマンドを選択するとサブコマンドモードになる)
 - a) 主鎖と側鎖の表示色を変更する。主鎖の表示色,側鎖の表示色の順序で入力する。
 - b) 1残基あるいは数残基の表示色を変更する。
表示色を変更する範囲(始め,終わり)と表示色を入力する。
 - c) 分子中のある特定残基の表示色を変更する。
例えば,分子中のすべてのアラニンの位置を見たい時などに利用できる。アミノ酸の場合は3文字の略号,ヌクレオチドの場合は1文字の略号と表示色を入力する。
 - d) ジスルフィド結合の表示色を変更する。
 - e) HETATMの表示色を変更する。
 - f) 残基番号の表示色を変更する。
 - g) サブコマンドモードを終了する。
- 14) 線幅の設定値を表示および変更する。(初期設定値は3)
現在の線幅の設定値が表示される。変更しない場合は,ここでENTERキーを押す。
- 15) X, Y, Z軸のまわりに回転させる。
この場合はY軸のまわりに90°回転させることになる。(各軸の時計回りが正の回転方向)回転させた図を表示したい場合には,ROTATEコマンド後にDISPLAYコマンドを選択する。ROTATE, SCALE, TRANSLATEの場合は設定値を変更した後,DISPLAYコマンドで画面表示さ

図6 ワイヤモデル表示プログラムの実行例(つづき)

せるとその設定はクリアされる。

したがって、X軸に対して60°回転させてDISPLAYし、さらに60°回転させたいというような場合には、ROTATEコマンドを選択してX軸に対して120°回転させるようにする。

- 16) ある特定残基に注目してその周辺を拡大して表示する。

残基番号と拡大・縮小量を入力する。

設定値を変更した後、DISPLAYコマンドで画面表示させるとその設定はクリアされる。

- 17) X, Y, Z方向に平行移動させる。

X, Y, Z方向の移動量を入力する。1ユニットは1オングストロームである。

設定値を変更した後、DISPLAYコマンドで画面表示させるとその設定はクリアされる。

- 18) 変更した設定値を初期設定値にもどす。

- 19) ある特定残基を中心として指定した半径内に存在する残基をすべて表示する。このコマンドを指定した場合には自動的に表示するように設定している。

- 20) プログラムを終了する。

図6 ワイヤーモデル表示プログラムの実行例(つづき)

4. 3. 2 HELIX & SHEET

このアプリケーションプログラムは任意のタンパク質について、ヘリックス構造をシリンダーで、シート構造をリボンで表示する。本プログラムでは主鎖のみを表示する。初期設定では、ヘリックスは緑色、シートは黄色で表示し、この他に残基番号(黄色)とX, Y, Z座標軸の方向(白)も表示する。

```

1) DEVICE NUMBER ( FIVIS ->2, F9430 ->4, F6242,F6684 ->5 ) 4
*****
*          <<<      C O M M A N D      >>>          *
* DISPLAY MOLECULES ; D   DISPLAY RESIDUE NUMBER ; N *
* DISPLAY 3D-AXIS   ; X   DISPLAY HETATM         ; H *
* DISPLAY ORIGIN    ; O   CHANGE POWER OF LIGHT  ; P *
* ROTATE            ; R   CHANGE CENTER POSITION   ; Y *
* SCALE             ; S   CHANGE DISPLAY REGION   ; A *
* TRANSLATE         ; T   CHANGE WINDOW SIZE     ; W *
* ERASE             ; F   CHANGE LINE COLOR       ; C *
* END               ; E   CHANGE LINE WIDTH      ; L *
*                   ;     SET INITIAL CONDITION  ; I *
*****
2) COMMAND = D
@
3) COMMAND = P
CURRENT POWER OF LIGHT = 1.8, 1.8, 1.8,
POWER OF LIGHT ( X,Y,Z ) CR
4) COMMAND = X
RESIDUE NUMBER OF 1-CHAIN 1 -> 21
RESIDUE NUMBER OF 2-CHAIN 2 -> 30
RESIDUE NUMBER OF 3-CHAIN 1 -> 21
RESIDUE NUMBER OF 4-CHAIN 2 -> 30
CHAIN NUMBER & RESIDUE NUMBER ( NO,NO ) 1,20
COMMAND = D
@

```

図7 ヘリックス&シートモデル表示プログラムの実行例

```

5)  COMMAND = A
    RESIDUE NUMBER OF 1-CHAIN  1 ->  21
    RESIDUE NUMBER OF 2-CHAIN  2 ->  30
    RESIDUE NUMBER OF 3-CHAIN  1 ->  21
    RESIDUE NUMBER OF 4-CHAIN  2 ->  30
    CHAIN NO. & RESIDUE NO. OF START AND CHAIN NO. & RESIDUE NO. OF
    END ( NO,NO,NO,NO ) 1,1,2,30

    COMMAND = D
@
6)  COMMAND = C
*****
*      <<<  S U B C O M M A N D  >>>      .      *
*  CHANGE COLOR OF RESIDUES ( START, END ) ; 1 *
*  CHANGE COLOR OF SPECIFIED RESIDUES     ; 2 *
*  CHANGE COLOR OF HELIX                  ; 3 *
*  CHANGE COLOR OF SHEET                  ; 4 *
*  CHANGE COLOR OF HETATM                 ; 5 *
*  CHANGE COLOR OF RESIDUE NUMBER         ; 6 *
*  END                                     ; 7 *
*****
a)  SUBCOMMAND = 1
    RESIDUE NUMBER OF 1-CHAIN  1 ->  21
    RESIDUE NUMBER OF 2-CHAIN  2 ->  30
    RESIDUE NUMBER OF 3-CHAIN  1 ->  21
    RESIDUE NUMBER OF 4-CHAIN  2 ->  30
    COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
    INDEX 1  2  3  4  5  6  7  8
    CHAIN & RESIDUE REGION AND COLOR INDEX ( NO,START,END,INDEX ) 1,1,21,1
b)  SUBCOMMAND = 2
    COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
    INDEX 1  2  3  4  5  6  7  8
    SPECIFIED AMINO ACID NAME<THREE CHARACTER> AND COLOR INDEX ( AA,INDEX ) PHE,4
c)  SUBCOMMAND = 3
    COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
    INDEX 1  2  3  4  5  6  7  8
    COLOR INDEX NUMBER OF HELIX 6
d)  SUBCOMMAND = 4
    COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
    INDEX 1  2  3  4  5  6  7  8
    COLOR INDEX NUMBER OF SHEET 5
e)  SUBCOMMAND = 7
*****
*      <<<      C O M M A N D      >>>      *
*  DISPLAY MOLECULES ; D  DISPLAY RESIDUE NUMBER ; N *
*  DISPLAY 3D-AXIS   ; X  DISPLAY HETATM         ; H *
*  DISPLAY ORIGIN    ; O  CHANGE POWER OF LIGHT ; P *
*  ROTATE            ; R  CHANGE CENTER POSITION ; Y *
*  SCALE             ; S  CHANGE DISPLAY REGION ; A *
*  TRANSLATE         ; T  CHANGE WINDOW SIZE    ; W *
*  ERASE             ; F  CHANGE LINE COLOR     ; C *
*  END               ; E  CHANGE LINE WIDTH     ; L *
*                                     SET INITIAL CONDITION ; I *
*****
    COMMAND = D
@
7)  COMMAND = B
    ROTATION ANGLE ( X,Y,Z ) 60,0,0

```

図7 ヘリックス&シートモデル表示プログラムの実行例(つづき)

```

COMMAND = D
@
8) COMMAND = S
RESIDUE NUMBER OF 1-CHAIN    1 ->  21
RESIDUE NUMBER OF 2-CHAIN    2 ->  30
RESIDUE NUMBER OF 3-CHAIN    1 ->  21
RESIDUE NUMBER OF 4-CHAIN    2 ->  30
CHAIN NO & RESIDUE NO OF CENTER, SCALING FACTOR ( NO,NO,FACTOR ) 2,10,2.0

COMMAND = D
@
9) COMMAND = T
TRANSFER UNIT ( X,Y,Z ) 10,0,-10

COMMAND = D
@
10) COMMAND = E

READY

```

下線部は入力を示す。

- 1) 使用する端末のデバイスナンバーを指定する。
- 2) 初期設定値により、ヘリックスを緑、シートを黄色で表示する。
- 3) 光源の輝度値（第1成分～第3成分）を表示および変更する。
現在の輝度値が表示される。輝度値を変更しない場合はENTERキーを押す。ヘリックス&シートモデルおよび空間充填モデルでは、光源を設定して陰影処理を施している。この効果はFIVIS端末のみで見ることができる。
- 4) 視点を変更する。新しい視点になる残基番号を入力する。
分子中に1本以上の鎖が存在する場合には、鎖の番号と残基番号を入力する。
- 5) 表示する範囲を変更する。
分子中に1本以上の鎖が存在する場合には、始めの残基の鎖の番号と残基番号、終わりの残基の鎖の番号と残基番号とを入力する。
- 6) 表示色の変更。（このコマンドを選択するとサブコマンドモードになる）
 - a) 1残基あるいは数残基の表示色を変更する。分子中に1本以上の鎖が存在する場合には、鎖の番号と始めの残基番号、終わりの残基番号、色番号とを入力する。
 - b) 分子中のある特定残基の表示色を変更する。
 - c) ヘリックスの表示色を変更する。
 - d) シートの表示色を変更する。
 - e) サブコマンドモードを終了する。
- 7) X軸のまわりに60°回転させる。
- 8) ある特定残基に注目してその周辺を拡大して表示する。
分子中に1本以上の鎖が存在する場合には、注目する残基の鎖の番号、残基番号、拡大率とを入力する。
- 9) X方向に10、Z方向に-10平行移動させる。
- 10) プログラムを終了する。

図7 ヘリックス&シートモデル表示プログラムの実行例（つづき）

4. 3. 3 S P H E R E

このアプリケーションプログラムは任意のタンパク質あるいは核酸を空間充填モデルで表示する。タンパク質や核酸のような分子量の大きな物質を空間充填モデルで表示するためには、多くの記憶領域を必要とする。このため空間充填モデルを表示させる場合は、原則としてFIVIS端末を使用し、AEモードで実行させなければならない。AEモードは、LOGON時に以下のように入力して選択する。

LOGON TSS 課題番号/パスワード S(6000)

- ```

1) <<< PLEASE WAIT A FEW MOMENTS , CGMS INITIALIZING. >>>
2) >OPEN-DEVICE 2 UNIT(C40) MMC(C48) ZBUF (OPEN-DEVICE 4 ZBUF)

@
3) >CALL SPH

* <<< C O M M A N D >>> *
* DISPLAY MOLECULES ; D DISPLAY HETATM ; H *
* DISPLAY 3D-AXIS ; X CHANGE POWER OF LIGHT ; P *
* ROTATE ; R CHANGE CENTER POSITION ; Y *
* SCALE ; S CHANGE DISPLAY REGION ; A *
* TRANSLATE ; T CHANGE WINDOW SIZE ; W *
* ERASE ; F CHANGE MOLECULE COLOR ; C *
* END ; E RESET INITIAL CONDITION ; I *

4) COMMAND = D
@
5) COMMAND = Y
RESIDUE NUMBER OF 1-CHAIN 1 -> 21
RESIDUE NUMBER OF 2-CHAIN 2 -> 30
RESIDUE NUMBER OF 3-CHAIN 1 -> 21
RESIDUE NUMBER OF 4-CHAIN 2 -> 30
CHAIN NUMBER & RESIDUE NUMBER (NO,NO) 1,10

COMMAND = D
@
6) COMMAND = P
CURRENT POWER OF LIGHT = 1.8, 1.8, 1.8,
POWER OF LIGHT (P1,P2,P3) 0.8,0.8,0.8

COMMAND = D
@
COMMAND = P
CURRENT POWER OF LIGHT = 0.8, 0.8, 0.8,
POWER OF LIGHT (P1,P2,P3) 1.8,1.8,1.8

7) COMMAND = R
ROTATION ANGLE (X,Y,Z) 60,0,0

COMMAND = D
@

```

図8 空間充填モデル表示プログラムの実行例

```

COMMAND = C

* <<< S U B C O M M A N D >>> *
* CHANGE COLOR OF RESIDUES (START, END) ; 1 *
* CHANGE COLOR OF SPECIFIED RESIDUES ; 2 *
* CHANGE COLOR OF HETATM ; 3 *
* END ; 4 *

8) SUBCOMMAND = 1
RESIDUE NUMBER OF 1-CHAIN 1 -> 21
RESIDUE NUMBER OF 2-CHAIN 2 -> 30
RESIDUE NUMBER OF 3-CHAIN 1 -> 21
RESIDUE NUMBER OF 4-CHAIN 2 -> 30
COLOR RED GREEN BLUE CYAN YELLOW MAGENTA WHITE BLACK
INDEX 1 2 3 4 5 6 7 8
CHAIN & RESIDUE REGION AND COLOR INDEX (NO,START,END,INDEX) 1.10.10.2

SUBCOMMAND = 4

* <<< C O M M A N D >>> *
* DISPLAY MOLECULES ; D DISPLAY HETATM ; H *
* DISPLAY 3D-AXIS ; X CHANGE POWER OF LIGHT ; P *
* ROTATE ; R CHANGE CENTER POSITION ; Y *
* SCALE ; S CHANGE DISPLAY REGION ; A *
* TRANSLATE ; T CHANGE WINDOW SIZE ; W *
* ERASE ; F CHANGE MOLECULE COLOR ; C *
* END ; E RESET INITIAL CONDITION ; I *

COMMAND = D
@
@

9) COMMAND = E

10) >ERASE
@
11) >CLOSE-DEVICE
12) >STOP
13) <<< ALLOCATED STORAGE =800KB , USED STORAGE =0KB >>>
14) READY

```

下線部は入力を示す。

- 1) 空間充填モデルを選択すると会話型CGMSに入るためのメッセージが現われる。
- 2) デバイスナンバーを指定する。FIVIS端末の場合はこのように入力する。  
センター外パソコン端末の場合には( )内のように入力する。
- 3) 空間充填モデルの表示プログラムを起動する。
- 4) グラフィック画面上に画像として出力する。  
計算時間が長い場合、出力までにある程度時間を要する。
- 5) 視点を変更する。視点となる残基の選び方により陰影がかなり変わるので、影の分量が多い画像の場合は、別の残基を視点にとるようにすれば明るい画像が得られる。
- 6) 光源の輝度値の変更。(初期値は3成分とも1.8)  
暗い画像を出力させたい場合には、輝度値を小さくする。
- 7) X軸のまわりに60°回転させる。
- 8) 1番目の鎖の10残基目を緑色に変更する。
- 9) プログラムを終了する。

図8 空間充填モデル表示プログラムの実行例(つづき)

- 10) プログラム中で画面をクリアしなかった場合には、ここでグラフィック画面をクリアする。
- 11) 使用したデバイスをクローズする。
- 12) CGMSを終了する。
- 13) CGMS終了のメッセージが出力される。
- 14) READY状態にもどる。

図8 空間充填モデル表示プログラムの実行例(つづき)

AEモードでのCPU TIMEの制限値は120秒であるので、特に原子数の多い物質を表示する場合には2回以上出力できない可能性も考えられる。この場合は、ワイヤーモデルなどで視点位置などの条件をあらかじめ決めておくとよい。参考までに、インシュリンでは1回の表示に約20秒かかる。

FIVIS端末に出力させた画像はファイルに保存しておくことができるが、このファイルは大容量ファイルになるので、ディスク容量の問題とファイル保管料金の点からあまり勧められない。参考までに、ファイル保存の方法は次の通りである。

- 1) レコード長1280, レコード形式FまたはFB, ファイル容量3842KBのファイルをあらかじめ作成しておく。(ファイル名を例えば AXXXXA.PXXX.DATA とする)
- 2) プログラムを実行させて、保存したい画像を出力する。
- 3) プログラムを終了させる。プログラム終了後も画像はグラフィック画面に残しておく。

CGMSのコマンドラインにもどったところで、以下のようにして画像を保存する。

- 4) >OPEN-WRITE-PIXEL 1 'AXXXXXA.PXXX.DATA' (ファイルオープン)
- 5) >WRITE-PIXEL 1 (ファイルに書き込む)
- 6) >CLOSE-WRITE-PIXEL (ファイルクローズ)
- 7) あとは図8の(10)~(14)の通りにCGMSを終了する。

また、ファイルに保存しておいた画像の再表示は、図9のように会話型CGMSで行なう。

```

READY
1) CGMS
 <<< PLEASE WAIT A FEW MOMENTS , CGMS INITIALIZING. >>>
2) >OPEN-DEVICE 2

e
3) >OPEN-READ-PIXEL 1 'AXXXXXA.PXXX.DATA'
4) >READ-PIXEL 1
5) >DISPLAY

6) >ERASE
7) >CLOSE-READ-PIXEL
8) >CLOSE-DEVICE
9) >STOP
 <<< ALLOCATED STORAGE =800KB , USED STORAGE =0KB >>>
10) READY

```

下線部は入力を示す。

- 1) READY状態でCGMSと入力して、CGMSに入る。
- 2) デバイスをオープンする。
- 3) 画像を保存しておいたファイルをオープンする。
- 4) ファイルから画像データを読み込む。
- 5) DISPLAYコマンドで出力させる。
- 6) DISPLAYが終わったら、グラフィック画面をクリアする。
- 7) ファイルをクローズする。
- 8) デバイスをクローズする。
- 9) CGMSを終了する。
- 10) READY状態にもどる。

図9 ファイルからの画像の表示例

#### 4.3.4 COPY

このアプリケーションプログラムはGENASで検索した集合の1つの要素を利用者のデータセットに複写するものである。

まず、検索した集合を選択する。直前に検索した集合であればENTERキーを連続して入力していけば検索結果のIDが表示される。この集合から目的とするものを選択し、格納する個人のデータセットの名前を入力する。その結果、PDBに格納してあるデータが個人のデータとして利用できるようになる。

READY  
MGS

```

*** 1 WIRE MODEL ***
*** 2 HELIX AND SHEET MODEL ***
*** 3 SPHERE MODEL ***
*** 4 COPY ***
*** 5 END ***

```

- 1) INPUT NO ? 4
- 2) IF USE YOUR PRIVATE DATASET, INPUT "PR" ? CR  
INPUT ONE DATASET NAME SAVED IN GENAS
- 3) IF YOU USE LAST SAVED SET , ONLY HIT RETURN CR
- 4) INPUT "N" (NO DISPLAY ID CODE), "Y" (DISPLAY ID CODE) Y

NOW GENAS DISPLAY SAVED ID

```

NO= 4 ID= 8ADH
NO= 3 ID= 7ADH
NO= 2 ID= 6ADH
NO= 1 ID= 5ADH

```

- 5) SELECT ABOVE INFORMATION, INPUT NO. ? 4  
FILE=A70512B.PDB23.TEXT(ADH8)
- 6) ARE YOU SURE ? (Y) OR (N) Y
- 7) OUTPUT DATA SET NAME ? ADH8

READY

下線部は入力を示す。

- 1) コピープログラムを選択する。
- 2) 個人のデータセットを利用するかどうか。する場合はPRと入力し、しない場合はENTERキーを押す。
- 3) 直前に検索した集合を選択する。直前に検索した集合であれば、ENTERキーを押す。
- 4) IDコードの表示を指示。
- 5) ID=8ADHを選択する。
- 6) 確認をしたらYと入力する。
- 7) コピー先のデータセット名を入力する。この場合は、使用している課題番号にADH8.DATAというデータセットができ、これにコピーされる。

図10 コピープログラムの実行例

#### 参考文献

1. 久原 哲, 榑 佳之, 高木利久, 松尾文碩, 二村祥一, 鬼塚千代子 核酸塩基配列データベースシステムGENASの使用法(1), 九州大学大型計算機センター広報, 16, 5, 1983, 497-521
2. 久原 哲, 榑 佳之, 高木利久, 松尾文碩, 二村祥一 核酸塩基配列データベースシステムGENASの使用法(2), 九州大学大型計算機センター広報, 18, 6, 1985, 533-551
3. Kuhara, S., Matsuo, F., Futamura, S., Fujita, A., Shinohara, T., Takagi, T. and Sakaki, Y., GENAS: a database system for nucleic acid sequence analysis. Nuc. Acids Res., 12, 1984, 89-99
4. Protein Data Bank (PDB) 24-Apr-90, Brookhaven National Laboratory Associated Universities, INC., 1990
5. Protein Data Bank Atomic Coordinate Entry Format Description, Brookhaven National Laboratory Associated Universities, INC., 1983
6. 計算機マニュアル, FACOM OS IV/F4 MSP CGMS説明書, 富士通㈱