

○課題名：蛋白質構造データバンクの国際的な構築と高度化 (PDBj)

代表研究者：中村春木（大阪大学蛋白質研究所）

K-5

PDBj Mine: 日本蛋白質構造データバンクの新しい検索システム

金城玲、中村春木、山下鈴子

（大阪大学蛋白質研究所）

PDBjの持続的運用と広範な利用形態を促進するため、PDBjの根幹データベースをオープンソースのソフトのみを用いて設計および実装した。このシステム（PDBj Mine）はPDBjの特徴であるPDBMLplus（PDBの標準XML形式にPDBj独自のアノテーションを加えたもの）を生かしつつ、関係データベースへのスケーラブルなマッピングを自動化する工夫を施した。すなわち、XML文書を深さ優先探索の要領でポインタで表現し、可能なすべてのXPathに対応するテーブルをPDBMLplusのXML Schemaファイルから自動生成することによって、関係データベースが定義される。現在β版をテスト運用中であるが、従来の商用native XML DBと比較しても遜色ない検索性能を示している。

○課題名：メタボロームMSスペクトル統合データベースの開発 (Metabolome-Mass Spectral Database)

代表研究者：西岡孝明（慶應義塾大学先端生命科学研究所）

K-6

マススペクトルデータベースMassBankの新機能

—データベース管理環境、Web API、ピーク同定情報の検索—

蓬萊尚幸、二瓶義人、池田奨、尾畷雄也、西岡孝明

（慶應義塾大学先端生命科学研究所）

マススペクトルデータベースMassBankに関して、以下を開発した。

1. MassBankへの登録を簡便に行うためのデータベース管理環境。実験からデータベース登録までが容易に行えるようになり、データベースに格納されているスペクトルデータが増大することが期待される。
2. 外部ソフトウェアからMassBankへの検索を可能にするためのSOAP Web API。様々なスペクトル解析ソフトウェアにおいてMassBankを利用できるようになり、利用者および利用用途の拡大が期待される。
3. フラグメントライブラリの構築と化学式によるピーク検索。MassBankに格納されているスペクトルに対するピーク同定作業の結果を対象とする検索が可能になり、今後のマススペクトルに関するインフォマティクスの基盤になることが期待される。