## 平成20年度理研:植物オミックス情報および蛋白質構造情報

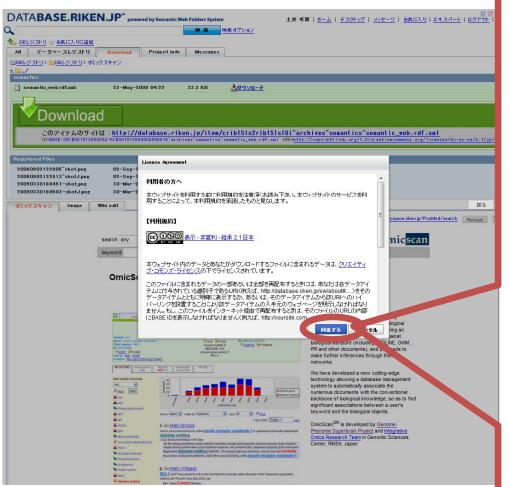


文科省統合DB委託研究事業で理研が担当するデータを http://database.riken.jp から公開

## 統合DBセンターからの依頼で理研データベース のメタデータを作成しデータ提供を開始



# メタデータ(RDF)のダウンロード機能



```
<rdf:RDF xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"</pre>
 xmlns:dcterms="http://purl.org/dc/terms/#"
 xmlns:BASE="http://database.riken.jp/sw/about#"
 xmlns:owl="http://www.w3.org/2002/07/owl#"
 xmlns:xsd="http://www.w3.org/2001/XMLSchema#"
 xmlns:rdfs="http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#">
 <owl:Class rdf:about="http://database.riken.jp/sw/about#CRIA00035U000004">
   <BASE:hasSite>http://database.riken.jp/item/cria35u4</BASE:hasSite>
     <BASE:recommendedPrimaryId>BASE:CRIA00035U000004</BASE:recommendedPrimaryId>
     <BASE:getRdf>http://database.riken.jp/sw/rdf/CRIA00035U000004</BASE:getRdf>
 <owl:Class rdf:about="http://database.riken.jp/sw/about#CRIA00035U000003">
   <BASE:hasSite>http://database.riken.jp/item/cria35u3</BASE:hasSite>
     <BASE:recommendedPrimaryId>BASE:CRIA00035U000003</BASE:recommendedPrimaryId>
     <BASE:getRdf>http://database.riken.jp/sw/rdf/CRIA00035U000003</BASE:getRdf>
 <owl:Class rdf:about="http://database.riken.jp/sw/about#CRIA00034S000002">
   <BASE:hasDescriptionForDataInput
     xml:lang="ja">http://database.riken.jp/sw/wikiForDataInput/CRIA00034S000002?
    lang=ia</BASE:hasDescriptionForDataInput>
   <BASE:hasDefinition
    xml:lang="ja">http://database.riken.jp/sw/wiki/CRIA00034S000002?
    lang=ja</BASE:hasDefinition>
     xml:lang="en">http://database.riken.jp/sw/wiki/CRIA00034S000002?
    lang=en</BASE:hasDefinition>
   <BASE:hasSite>http://database.riken.jp/item/cria34s2</BASE:hasSite>
     <BASE:recommendedPrimaryId>BASE:CRIA00034S000002</BASE:recommendedPrimaryId>
     <BASE:getRdf>http://database.riken.jp/sw/rdf/CRIA00034S000002</BASE:getRdf>
- <owl:Class rdf:about="http://database.riken.jp/sw/about#CRIA00035U000001">
   <BASE:hasSite>http://database.riken.jp/item/cria35u1</BASE:hasSite>
     <BASE:recommendedPrimaryId>BASE:CRIA00035U000001</BASE:recommendedPrimaryId>
     <BASE:getKdf>http://database.riken.jp/sw/rdf/CKIAUUU35UUUUUU1</BASE:getKdf>
- <owl:Class rdf:about="http://database.riken.jp/sw/about#CRIA00035U000002">
   <BASE:hasSite>http://database.riken.jp/item/cria35u2</BASE:hasSite>
     <BASE:recommendedPrimaryId>BASE:CRIA00035U000002</BASE:recommendedPrimaryId>
     <BASE:getRdf>http://database.riken.jp/sw/rdf/CRIA00035U0000002</BASE:getRdf>
  </owl:Class>
- <owl:Class rdf:about="http://database.riken.jp/sw/about#CRIA00035U000005">
   <BASE:hasSite>http://database.riken.jp/item/cria35u5</BASE:hasSite>
     <BASE:recommendedPrimaryId>BASE:CRIA00035U000005</BASE:recommendedPrimaryId>
```

## シロイヌナズナオミックスDB群の形式をそろえて公開化

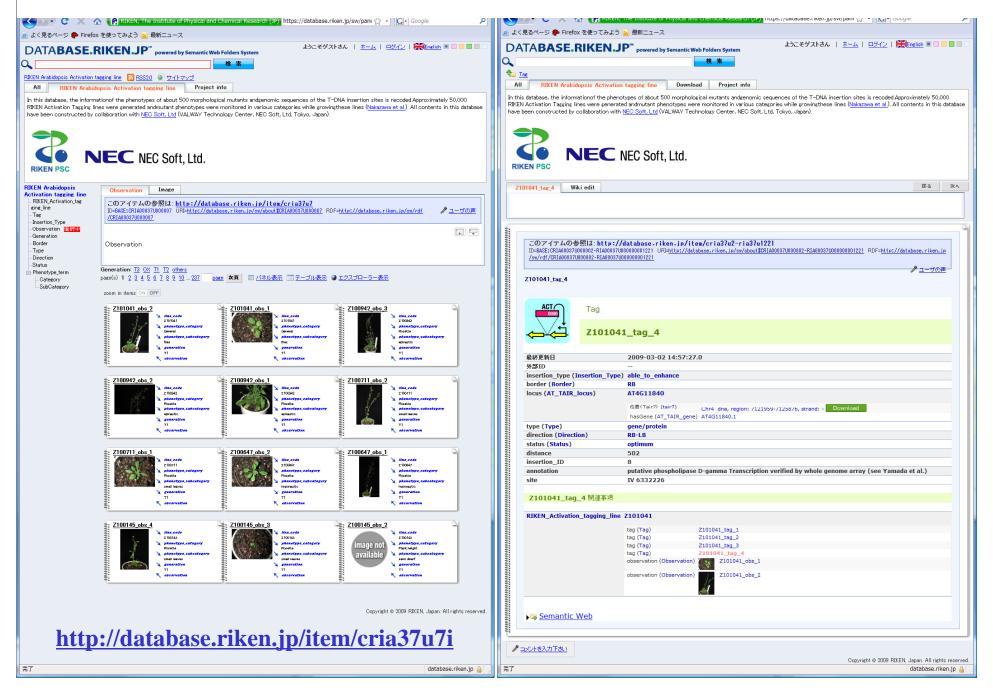


シロイヌナズナ関連のデータベースをカテゴライズして収録

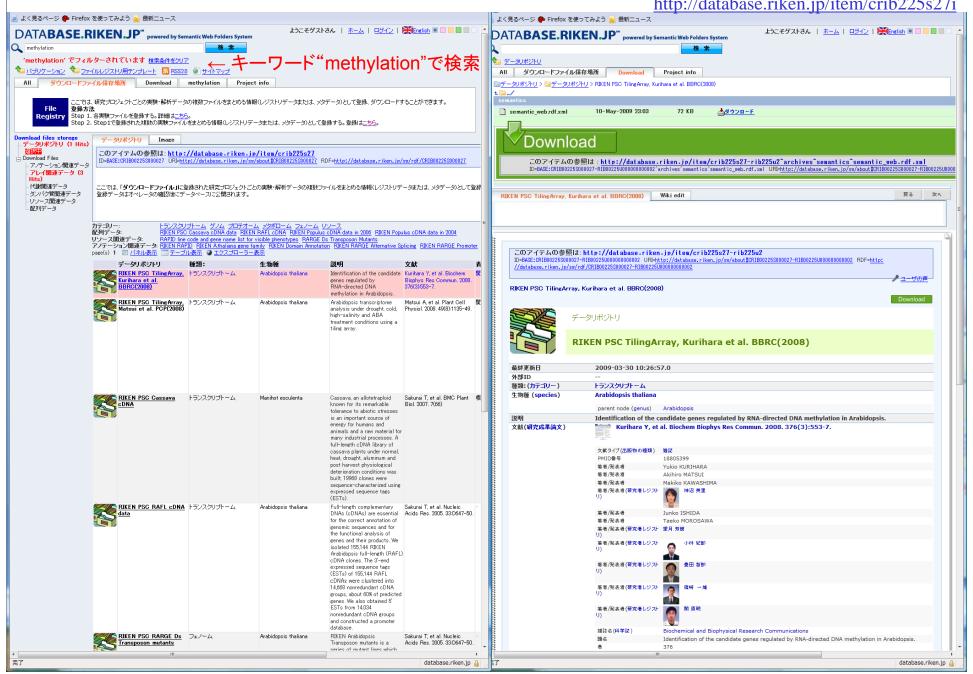


http://database.riken.ip/item/crib32s20i

## 例: NECとPSCが共同運用していたシロイヌナズナ表現型DBを再アノテーションして移管



シロイヌナズナオミックス実験データファイルの公開 http://database.riken.jp/item/crib225s27i



## 平成21年度業務計画 (豊田)

#### <最終成果目標>

シロイヌナズナにおけるオミックス情報のキュレーションやアノテーションを行い付加価値を高めて公開し、統合DB事業に提供する将来的に理研の他のデータベースも統合化していくためのモデルケースをつくる

#### <H21年度業務計画>

これまでに公開したデータについてアノテーションを行い、アノテーションデータを公開する

オミックスデータの統合解析から見つかった新規転写物などのアノテーション公開したデータベースの相互の関連付けに関するアノテーション国際的なデータベースとの関連付けに関するアノテーション

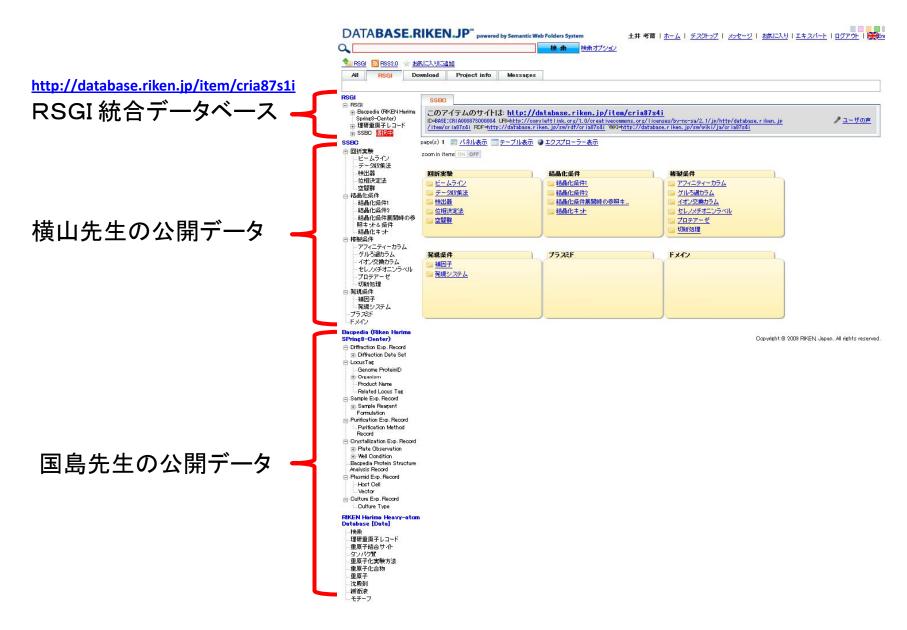
#### それ以外のデータについても国際的な合意を得つつ、データ公開を進める

マウスフェノタイプ関連のデータ公開を国際的な合意を得て推進 理研データベースのメタデータの更新 その他、データベース公開希望者へのデータ公開化支援

#### 作成されたアノテーションを国際的な合意をえた基準で公開データに変換する

セマンティックウェブ形式でのデータ公開 GFFなど標準フォーマットでのデータ公開 ダウンロードを可能にするための国際的なライセンスへの対応

## 蛋白質構造情報データベースの公開

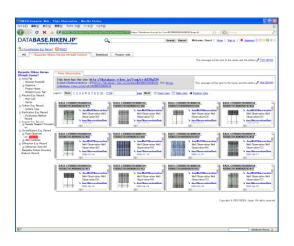


### 平成20年度実績(国島)

H20年度はH19年度回収したデータのクレンジング作業を進め、データをアノテーションシステム(豊田)に登録し公開した。 H20年度公開分(閲覧まで)については近々アノテーションシステム上からダウンロードできる予定。

#### <H20年度成果報告>

データのクレンジング作業を進め、①微生物由来蛋白質に関わる試料調製(発現プラスミド構築実験 1万、培養実験 5千、精製実験 3千)、結晶化実験データ(結晶化条件:90万件、観察1000万件)並びに200件の回折実験データ(データセット数)をアノテーションシステムに登録し公開した。また、②変異導入蛋白質に関わる実験データ150件、③重原子導入蛋白質に関わるデータ500件をアノテーションシステムに登録し公開した。



#### 結晶解析実験データのWebページ

①微生物由来タンパク質のX線結晶構造解析実験情報及び②微生物由来変異導入タンパク質の結晶構造に関する均一で詳細なデータ (http://database.riken.jp/item/crib220u234)



#### 重原子実験データのWebページ

③重原子実験情報

(http://database.riken.jp/item/crib108u1)

### 平成21年度業務計画 (国島)

#### <最終成果目標>

理研播磨研究所における微生物由来の蛋白質構造データに付随する実験データに標準的なオントロジーやIDに基づくアノテーションをつけてXMLやテーブル形式でのダウンロードを可能にする。

#### <H21年度業務計画>

平成20年度に公開したデータについてアノテーション作業を行い、アノテーションデータを公開する。またそれ以外のデータについても国際的な合意を得つつデータ公開を進める。

- 1. H20年度公開データをダウンロード可能にする。
- 2. データの追加(項目の追加も含む)及び更新を進める。

データのクレンジング作業等を行い、実データのアノテーション基盤(豊田グループ)への送付及びデータの登録(追加・更新等の編集)を 進める。またデータ項目の追加・変更等を必要に応じて行う。

①微生物由来タンパク質のX線結晶構造解析実験情報

H21年度は特に回折実験の段階のデータ(約500件(データセット数))を中心にアノテーション基盤へ登録し公開する。その他の段階は試料調製(発現プラスミド構築実験約1800件、培養実験約2700件、精製実験約600件)、結晶化実験データ(観察画像約250万枚画像と付随する結晶化条件)の登録を想定している。H21年度分は既にクレンジングが完了したものから順次登録を開始している。またデータ項目の追加やその作業に伴うデータの回収・整理等も必要に応じて行う。

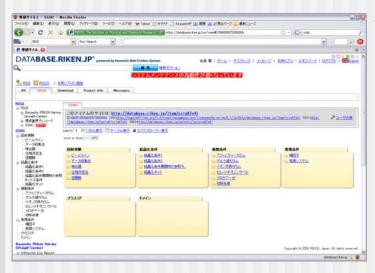
- ②変異導入蛋白質に関わる実験データを約20件(データセット数)及び付随データを追加する。データ項目の追加等も必要に応じて実施する。
- ③重原子導入蛋白質に関わるデータは約2000件を追加する。
- 3. H20年度に公開したデータについてアノテーション作業及びまたそれ以外のデータについても国際的な合意を得つつデータ公開を進める。

H20年度に公開したデータは数が膨大(特に結晶観察画像)であったため、1回のクローリング及びダウンロード準備にかなり実行時間がかかり基盤上でかなりのリソースを消費している事が登録・公開後にわかった。検討の結果、SWF構造(アノテーション基盤上でのデータ構造)を変更すれば、リソースを節約する事が可能であることがわかったため、H20年度公開済みデータ(今年度登録予定のデータも含めて)のSWFデータ構造等を可能な限り変更し、登録からダウンロード可能になるまでの時間を短縮する。同時にアノテーション基盤上でデータのアノテーション作業を進め、国際的な合意を得つつデータ公開を進める。アノテーション基盤上でのシステム的な対応は豊田グループに行って頂く。

## 平成20年度実績(横山)

### H20年度実施内容(成果)

■ 高等動植物タンパク質の試料調製に関わる発現検討実験 (無細胞タンパク質発現用発現系構築実験3万件,スモールスケール発現実験4万件)に基づいて X 線結晶構造解析のための大量調製実験 (大量合成および大量発現実験3千件、精製実験3千4百件)を行い、結晶化実験 (結晶化条件 80 万件、結晶観察 881 万件)へと進め、タンパク3000プロジェクトで解明されたタンパク質構造データのうち平成20年度は2万件の回折実験データを公開した。この2万件は、平成20年度成果目標である「高等動植物由来蛋白質構造データに付随する実験データ30件」についての回折実験の画像データ枚数であり、これにより平成20年度成果目標に達した。



### 試料調製, 結晶化及び構造解析(高等動植物)実験 データ公開用 Web site

- 高等動植物由来タンパク質の試料調製,結晶化及びX線結晶構造解析実験情報の閲覧が可能. 回折画像データを含めダウンロードサービスは 今年度開始予定.
- URL: http://database.riken.jp/item/cria87s4i

## 平成21年度業務計画(横山)

### 最終成果目標

■ タンパク3000プロジェクト(RSGI)で解明された高等動植物等由来の蛋白質構造データに付随する実験データに標準的なオントロジーやIDに基づくアノテーションをつけてXMLやテーブル形式でのダウンロードを可能にする.

### H21年度業務計画

- 1. H20年度公開データをダウンロード可能にする.
- 2. データの追加及び更新を進める.
  - ①高等動植物由来タンパク質の試料調製、結晶化及びX線結晶構造解析実験情報
    - ・ H20年度公開したドメインに関連する実験データを追加登録・公開を行う. 発現・ 精製実験約40件,結晶化実験約150件,回折実験約20件(データセット)を想定 している. また. 発現チェック画像・結晶観察画像を収集し. 登録・公開を行う.
  - ②微生物由来タンパク質の試料調製. 結晶化及びX線結晶構造解析実験情報
    - RSGIで解かれた微生物由来タンパク質の試料調製,結晶化及び構造解析実験情報を収集・整理しアノテーション基盤への登録・公開を行う. PDB約200件,培養実験約2800件,精製実験約1800件,結晶化実験約900件,回折実験約200件(データセット)を想定している. また,関連する発現チェック画像,結晶観察画像の収集を行う.
- 3. RSGI共通データ形式の策定を行う.