

JAERI-Data/Code  
2004-008



JP0550630



バイオインフォマティクス整備  
— タンパク質立体構造予測システム構築 —

2004年2月

木村 英雄・酒井 智

日本原子力研究所  
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。  
入手の間合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越してください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 2005

編集兼発行 日本原子力研究所

## バイオインフォマティクス整備

### ータンパク質立体構造予測システム構築ー

日本原子力研究所 計算科学技術推進センター

木村 英雄・酒井 智

(2004年2月6日受理)

アミノ酸配列からのタンパク質立体構造予測は非常に難しい問題であり、50年来解決されないまま今日に至っている。物理化学的側面から見て、この問題の難しさの原因は、大きく分けて2つある。1つは、可能性のある立体構造を探索することの難しさであり、もう1つは、タンパク質の天然状態を安定に保っている相互作用エネルギーを精度よく計算することの難しさである。

このように命題が簡単であるにもかかわらず解くことの難しい問題は、多くの人を魅了する。多くの研究者がこの難題を解き明かすべく研究を進める中、神戸大学、奈良先端科学技術大学院大学、日本原子力研究所の3機関が協力し、精度の高いタンパク質立体構造予測を行うためのシステムを開発している。

本書では、3機関で開発を進めているタンパク質立体構造予測システムのうち、日本原子力研究所が開発を進めているシステムについて報告する。

Bioinformatics

- Construction of Protein 3D Structure Prediction System -

Hideo KIMURA and Tomo SAKAI

Center for Promotion of Computational Science and Engineering

Japan Atomic Energy Research Institute

Kizu-cho, Souraku-gun, Kyoto

(Received February 6, 2004)

Protein 3D structure prediction from amino acid sequence is a difficult issue, and has not been solved for 50 years. From the viewpoint of physicochemistry, the causes of this difficulty lie in: (1) the difficulty in an efficient conformational searching, and (2) the difficulty in finding an accurate algorithm to calculate potential energy of the native state. The simplicities of the problem have been attracted a lot of researchers. While many scholars research this difficult problem, Kobe University, Nara Institute of Science and Technology, and Japan Atomic Energy Research Institute cooperate to develop the system that enables to get extremely precise protein structures. Here, we report the part that Japan Atomic Energy Research Institute takes charge of in the system.

**Keywords:** Protein 3D Structure Prediction, Conformational Searching, Potential Energy Function

## 目次

|        |                       |    |
|--------|-----------------------|----|
| 1.     | はじめに .....            | 1  |
| 2.     | タンパク質立体構造予測システム ..... | 2  |
| 2.1.   | タンパク質立体構造予測解析 .....   | 2  |
| 2.1.1. | ワークフロー .....          | 2  |
| 2.1.2. | 解析プログラム .....         | 3  |
| 2.2.   | システム概要 .....          | 5  |
| 2.2.1. | 特徴 .....              | 5  |
| 2.2.2. | 機能 .....              | 5  |
| 2.2.3. | システム構成 .....          | 6  |
| 2.2.4. | 製作担当分担 .....          | 7  |
| 3.     | 解析結果データベース .....      | 8  |
| 3.1.   | 概要 .....              | 8  |
| 3.2.   | データ種別 .....           | 8  |
| 3.3.   | ディレクトリ構成 .....        | 8  |
| 3.4.   | データ変換 .....           | 11 |
| 3.5.   | 共通データ .....           | 13 |
| 3.6.   | エネルギーリストデータ .....     | 13 |
| 3.6.1. | 抽出情報 .....            | 13 |
| 3.6.2. | データ形式 .....           | 14 |
| 3.6.3. | RMSD 計算 .....         | 15 |
| 3.6.4. | ファイル作成 .....          | 15 |
| 3.7.   | ID .....              | 17 |
| 4.     | 解析結果表示システム .....      | 18 |
| 4.1.   | システム概要 .....          | 18 |
| 4.1.1. | 目的 .....              | 18 |
| 4.1.2. | 設計思想 .....            | 18 |
| 4.1.3. | システム構成 .....          | 18 |
| 4.2.   | Web 画面 .....          | 19 |
| 4.2.1. | 概要 .....              | 19 |
| 4.2.2. | エネルギーリスト画面 .....      | 19 |

|                                 |    |
|---------------------------------|----|
| 4.2.3. 分布図画面 .....              | 20 |
| 4.3. 機能 .....                   | 22 |
| 4.3.1. 概要 .....                 | 22 |
| 4.3.2. エネルギーリスト表示 .....         | 22 |
| 4.3.3. 分布図表示 .....              | 24 |
| 4.3.4. タンパク質立体構造データダウンロード ..... | 25 |
| 4.3.5. タンパク質立体構造表示 .....        | 26 |
| 4.3.6. ページコントロール .....          | 29 |
| 4.4. プログラム .....                | 30 |
| 4.4.1. 構成 .....                 | 30 |
| 4.4.2. クラス詳細 .....              | 31 |
| 4.5. メンテナンス .....               | 31 |
| 4.5.1. 起動 .....                 | 31 |
| 4.5.2. ディレクトリ構成 .....           | 32 |
| 4.5.3. 設定 .....                 | 33 |
| 謝辞 .....                        | 41 |
| 参考文献 .....                      | 41 |

## Contents

|        |   |     |
|--------|---|-----|
| 1.     | Introduction.....                         | 1   |
| 2.     | Protein Structure Prediction System ..... | 2   |
| 2.1.   | Protein Structure Prediction.....         | 2   |
| 2.1.1. | Work Flow .....                           | 2   |
| 2.1.2. | Program.....                              | 3   |
| 2.2.   | Outline.....                              | 5   |
| 2.2.1. | Specific Feature .....                    | 5   |
| 2.2.2. | Function .....                            | 5   |
| 2.2.3. | Construction of the System.....           | 6   |
| 2.2.4. | Assignment of Production.....             | 7   |
| 3.     | Data Base .....                           | 8   |
| 3.1.   | Outline.....                              | 8   |
| 3.2.   | Kind of Data.....                         | 8   |
| 3.3.   | Construction of Directory.....            | 8   |
| 3.4.   | Converting Data .....                     | 1 1 |
| 3.5.   | Common Data .....                         | 1 3 |
| 3.6.   | Energy List Data .....                    | 1 3 |
| 3.6.1. | Getting Information from Data .....       | 1 3 |
| 3.6.2. | Form of Data.....                         | 1 4 |
| 3.6.3. | Calculation of RMSD.....                  | 1 5 |
| 3.6.4. | Making File.....                          | 1 5 |
| 3.7.   | ID .....                                  | 1 7 |
| 4.     | Prediction Result Viewer System .....     | 1 8 |
| 4.1.   | Outline.....                              | 1 8 |
| 4.1.1. | Purpose.....                              | 1 8 |
| 4.1.2. | Idea of Design .....                      | 1 8 |
| 4.1.3. | Construction of the System.....           | 1 8 |
| 4.2.   | Web Screen.....                           | 1 9 |
| 4.2.1. | Outline.....                              | 1 9 |
| 4.2.2. | Energy List Screen .....                  | 1 9 |
| 4.2.3. | Distribution Screen .....                 | 2 0 |

|                     |                                     |     |
|---------------------|-------------------------------------|-----|
| 4.3.                | Function.....                       | 2 2 |
| 4.3.1.              | Outline.....                        | 2 2 |
| 4.3.2.              | Displaying Energy List .....        | 2 2 |
| 4.3.3.              | Displaying Distribution .....       | 2 4 |
| 4.3.4.              | Downloading Protein Structure ..... | 2 5 |
| 4.3.5.              | Displaying Protein Structure .....  | 2 6 |
| 4.3.6.              | Control of Page .....               | 2 9 |
| 4.4.                | Program.....                        | 3 0 |
| 4.4.1.              | Construction .....                  | 3 0 |
| 4.4.2.              | Detail.....                         | 3 1 |
| 4.5.                | Maintenance.....                    | 3 1 |
| 4.5.1.              | Boot.....                           | 3 1 |
| 4.5.2.              | Construction of Directory.....      | 3 2 |
| 4.5.3.              | Configure.....                      | 3 3 |
| Acknowledgment..... |                                     | 4 1 |
| References.....     |                                     | 4 1 |



## 1. はじめに

IT 分野では Grid の研究が盛んに行われ、大規模な Grid 環境を構築するための多くのプロジェクトが進行中である。そのうちの 1 つである BioGrid プロジェクトでは、Grid 上で生物学の解析を行うための環境構築を進めている。BioGrid プロジェクトではさまざまな研究が進められているが、プロジェクト参加機関のうち、神戸大学、奈良先端科学技術大学院大学、日本原子力研究所の 3 機関は、神戸大学高田研究室で行っているタンパク質立体構造予測解析を Grid 上で実現するための環境構築を進めている。

神戸大学高田研究室では、以下の特徴をもつ粗視化相互作用モデルを用いてタンパク質立体構造予測を独自に行っている。

- フラグメントアセンブリ法

配列類似性のある局所構造をデータベースから抽出し、組み合わせることで立体構造を構築する。

- マルチカノニカルアンサンブルモンテカルロ法

構造空間の徹底的サンプリングをする。

モンテカルロ計算は、独立した複数の計算を行うことで多数のサンプルを取得する。サンプルをより多く集めることで精度の高い結果が得られるため、できるだけ多くの計算を実行することが望ましい。一方、Grid は複数の計算を並行して実行できる分散環境を提供する。そのため、独立している複数の計算を 1 台の計算機で逐次処理している場合、それらの計算を Grid 上へ分散させることで、同じ時間でより多くの計算を実行することが可能となる。したがって高田研究室にて行っているタンパク質立体構造予測解析を Grid 上で実行する環境を構築することで、短時間でより精度の高い結果を得ることが期待できる。

本報告書では、2 章において 3 機関で開発しているタンパク質立体構造予測システムの概要について報告し、3 章以降で日本原子力研究所が開発を担当したシステムについて報告する。

## 2. タンパク質立体構造予測システム

### 2.1. タンパク質立体構造予測解析

#### 2.1.1. ワークフロー

本システムが対象とするタンパク質立体構造予測解析の作業は、図 1 に示すワークフローで進められる。本システムは、「本処理」で行われる解析を Grid 上で実現させる。

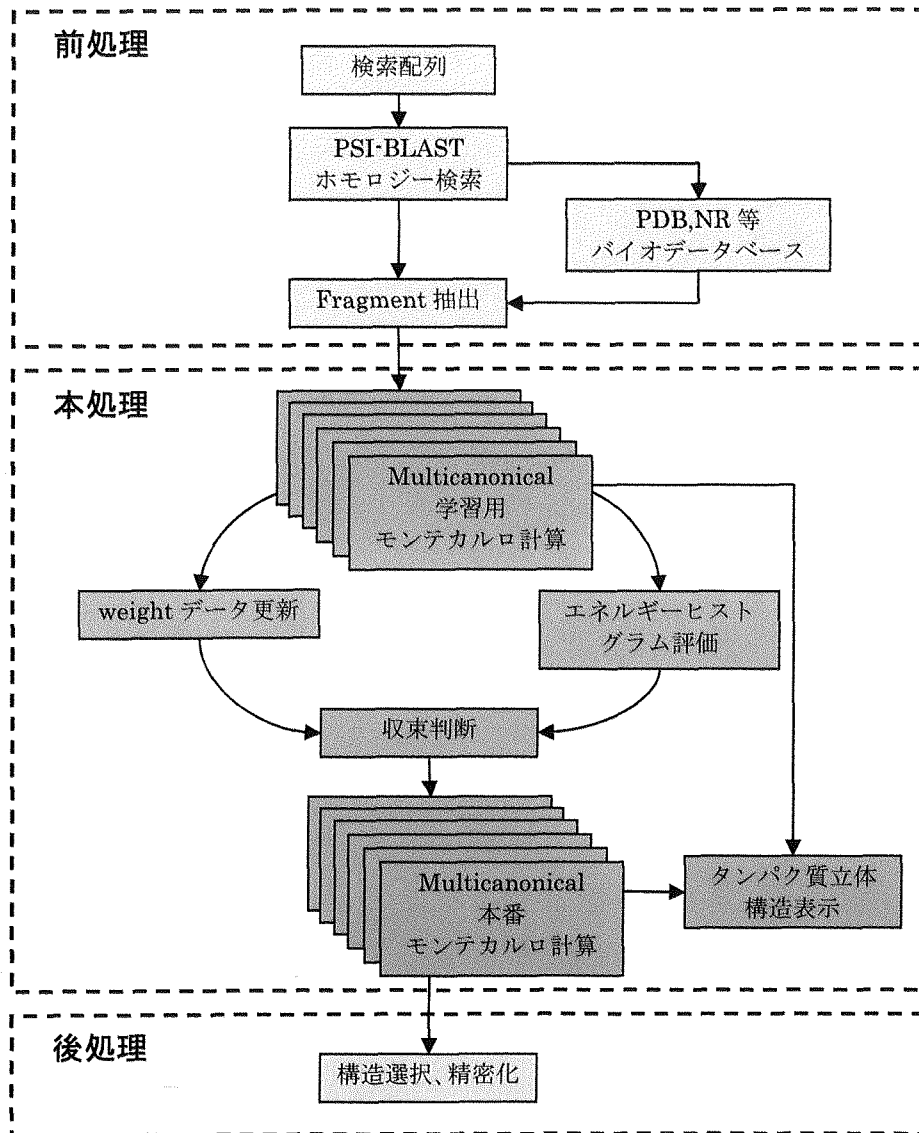


図 1 タンパク質立体構造予測解析ワークフロー

## 2.1.2. 解析プログラム

## 2.1.2.1. モンテカルロ計算

タンパク質立体構造予測のモンテカルロ計算を行うプログラムは、神戸大学高田研究室で開発しているプログラム(以降、SimFold と呼ぶ)を使用する。SimFold を用いてモンテカルロ計算を繰り返し実行する際、各モンテカルロ計算の結果を反映させた weight データを次のモンテカルロ計算で用いることにより、より精度の高い結果を求めていく。例としてタンパク質 Protein G (56 残基)の立体構造予測を行った場合、精度の良い結果を得るためには、おおよそ表 1 で示す計算量が必要となる。

表 1 Protein G 計算量

| 繰り返し数 | 総ステップ数(単位 : 100 万) |
|-------|--------------------|
| 1     | 1                  |
| 2     | 10                 |
| 3     | 30                 |
| 4     | 120                |
| 5     | 240                |
| 6     | 240                |
| 7     | 480                |
| 8     | 480                |

2.1.2.2. データ

SimFold は表 2 に示す 2 つのデータを入力し、3 つのデータを出力する。なお、これらのデータはすべてフラットファイルである。

表 2 SimFold 関連ファイル一覧

| データ種別 | データ名   | 使用状況<br>(○:使用 ×:未使用) | 内容                                |
|-------|--------|----------------------|-----------------------------------|
| 入力データ | Inp    | ○                    | 乱数、ステップ数等 1 回の繰り返し計算に必要なデータを記述する。 |
|       | weight | ○                    | 計算を重ねる毎に更新されるデータを記述する。            |
| 出力データ | Data   | ○                    | 計算の結果得られたエネルギーデータを記述する。           |
|       | Movie  | ○                    | 計算の結果得られたタンパク質立体構造データを記述する。       |
|       | PDB    | ×                    | —                                 |

※) PDB データは SimFold より出力されるが、本システムでは使用しない。

2.1.2.3. 計算の流れ

SimFold において n 回目の繰り返し計算を行う場合、計算の流れは図 2 の通り。なお、1 回目の計算については、weight ファイルの入力を行わない。

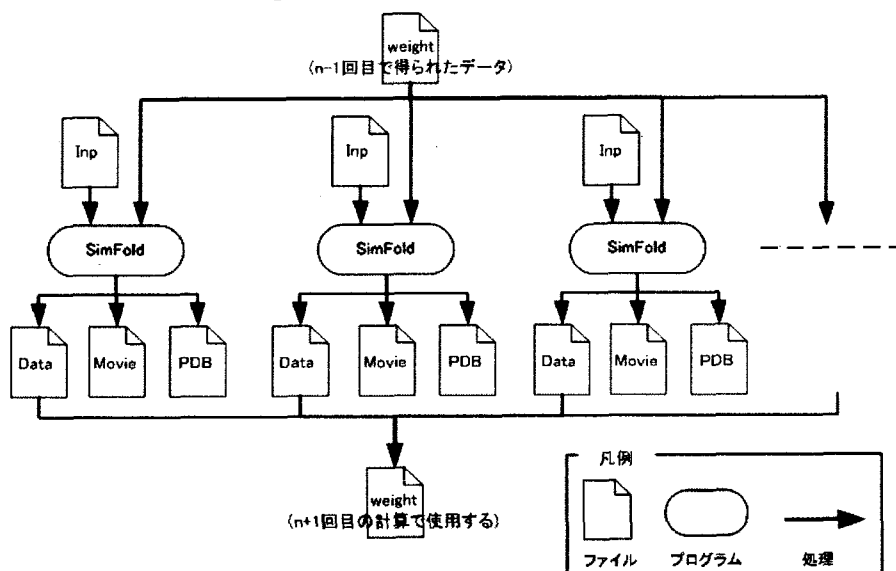


図 2 n 回目の繰り返し計算の流れ

## 2.2. システム概要

### 2.2.1. 特徴

本システムは、「2.1 タンパク質立体構造予測解析」において解説した解析を Grid 上で実行することを目的としたシステムである。Grid 上で複数のモンテカルロ計算を同時に実行することによって、短時間でより多くのサンプルを収集することができる。

本システムは、通常他の目的で使用している計算機(以降、一般利用計算機と呼ぶ)を使用して構成される。一般利用計算機の使用履歴を定期的に収集し、使用されない時間を確率的に導き出す。そして、一般利用計算機使用履歴データをもとに、ユーザが想定する時間内にジョブを終了させるためのジョブスケジューリングを行う。

なお、本システムではジョブの投入、ジョブ実行状況確認、ジョブ実行結果の確認を Web 画面で行う機能を備えており、ユーザは端末のブラウザより簡単にシステムを利用することが可能である。

### 2.2.2. 機能

本システムは以下の機能を実現する。

#### ① ジョブ投入

タンパク質立体構造予測を行うジョブを Web 画面より実行する。

#### ② ジョブスケジューリング

投入したジョブを複数の計算サーバで実行するためのスケジューリングを行う。

#### ③ ジョブ実行状況表示

ジョブを実行している計算機の状態を Web 画面へ表示する。

#### ④ ジョブ実行結果表示

ジョブ実行結果をデータベースで管理し、Web 画面へ表示する。

### 2.2.3. システム構成

本システムは以下のマシンで構成される。

- ① ユーザ端末  
ユーザが使用する端末。
- ② Web サーバ  
ユーザへ Web 機能を提供するサーバ。
- ③ マスタサーバ  
ジョブのスケジューリングを行い、ジョブを計算サーバへ割りふるサーバ。
- ④ 計算サーバ  
ジョブを実行するサーバ。一般利用計算機を使用する。
- ⑤ ファイルサーバ  
ジョブの実行に関係するファイルを格納するサーバ。解析結果データベースを保持する。解析結果データベースの詳細は「3 解析結果データベース」を参照のこと。

システム構成図を図 3 に示す。

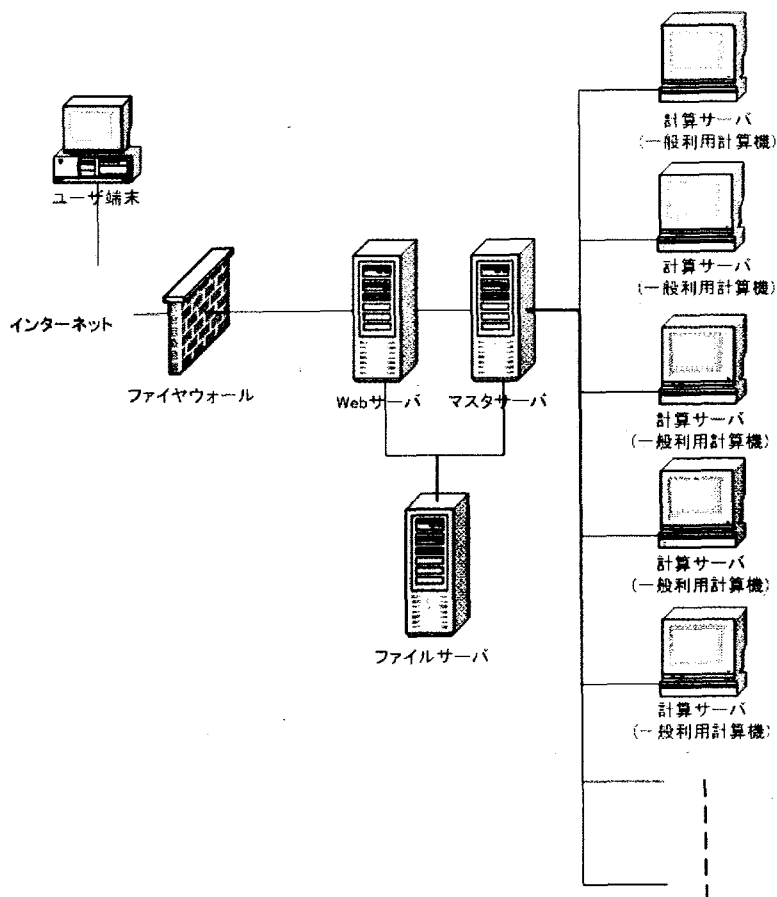


図 3 タンパク質立体構造予測システム構成図

#### 2.2.4. 製作担当分担

本システムの製作は、神戸大学、及び奈良先端科学技術大学院大学と協力して行っている。「2.2.2 機能」で示す機能のうち、①、②、③を奈良先端科学技術大学院大学が製作し、④を日本原子力研究所が製作する。なお、神戸大学はタンパク質立体構造予測の解析方法を提供する。

3章以降は、日本原子力研究所が担当している解析結果データベース、及び解析結果表示システムの詳細について報告する。神戸大学、及び奈良先端科学技術大学院大学が担当している作業の詳細報告は割愛する。

### 3. 解析結果データベース

#### 3.1. 概要

タンパク質立体構造予測解析に関連するデータは、解析結果データベースへ格納する。解析結果データベースはファイルサーバ内に配置し、すべてのデータをファイル、及びディレクトリで管理する。

#### 3.2. データ種別

解析結果データベースで管理するデータは以下の通り。

① Inp データ

SimFold 入力データのうちの1つ。詳細は「2.1.2.2 データ」を参照のこと。

② weight データ

SimFold 入力データのうちの1つ。詳細は「2.1.2.2 データ」を参照のこと。

③ テンプレートデータ

立体構造予測を行うタンパク質についての情報。

④ 予測結果データ

タンパク質立体構造予測解析の結果データ。SimFold が出力する Movie データをシステム用に変換したもの。変換方法は「3.4 データ変換」を参照のこと。また、Movie データについての詳細は「2.1.2.2 データ」を参照のこと。

⑤ オリジナルタンパク質立体構造データ

予測するタンパク質のオリジナル立体構造データ。

⑥ エネルギーリストデータ

複数の予測結果データより特定の情報を取得し、リストアップしたデータ。

#### 3.3. ディレクトリ構成

ディレクトリ構成を次頁図 4 に示す。なお、\$ROOT は解析結果データベースのルートディレクトリを示す。



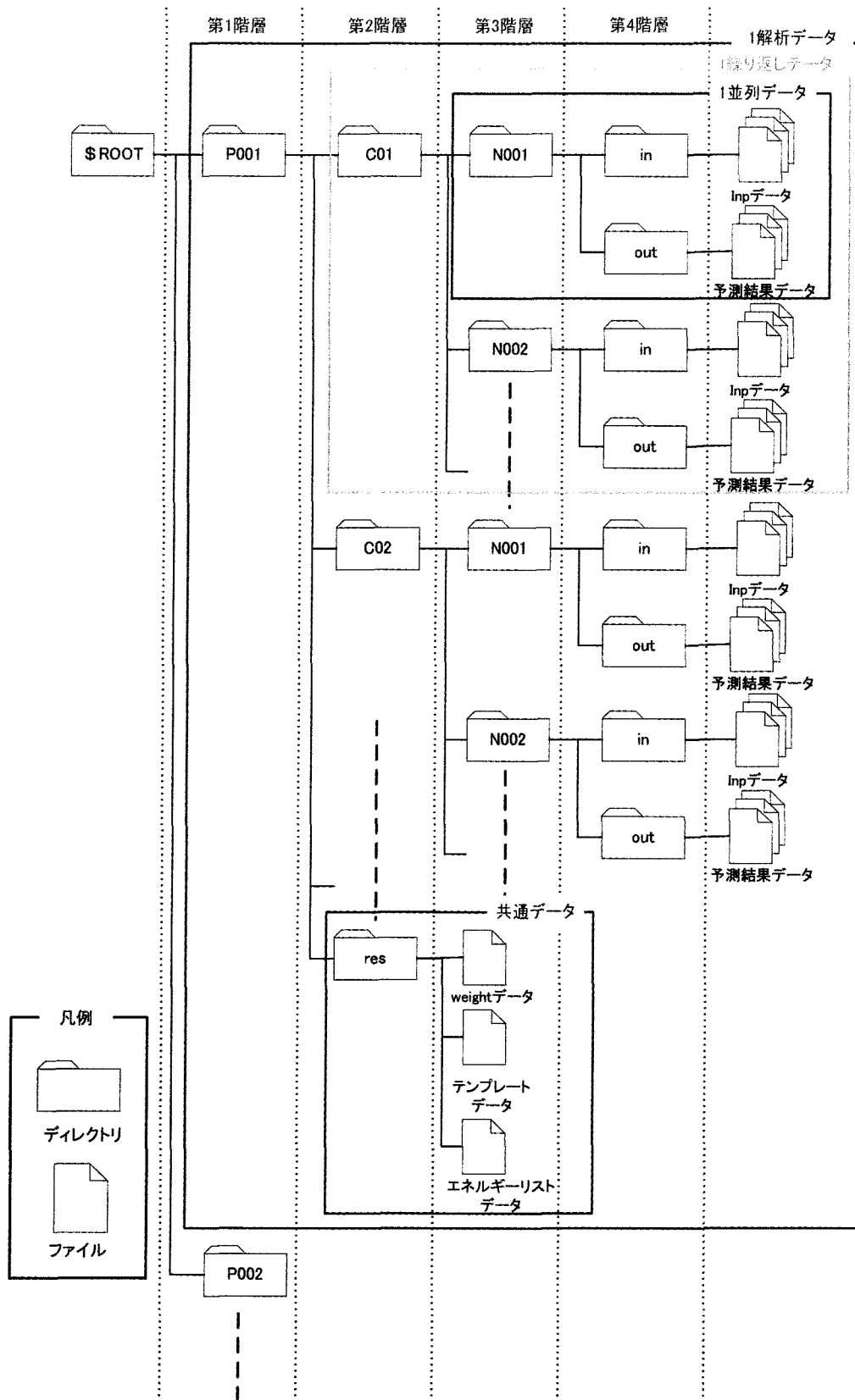


図 4 解析結果データベースディレクトリ構成図

各ディレクトリ名、及びファイル名の命名規則を表 3 に示す。

表 3 ディレクトリ/ファイル命名規則

| ディレクトリ<br>(ファイル)          | 命名規則   |
|---------------------------|--|
| 第1階層ディレクトリ                | <b>Pxxx</b><br>xxx は 3 桁の連番。数字が 1 桁、あるは 2 桁の場合は数字の前に 0 を付け 3 桁にする。<br>この文字列を <b>解析 No.</b> とする。<br>(1 回の解析に対し 1 つの解析 No. を付与する。) |
| 第2階層ディレクトリ<br>(共通データ保存)   | <b>res</b>   |
| 第2階層ディレクトリ<br>(共通データ以外保存) | <b>Cxx</b><br>xx は 2 桁の連番。数字が 1 桁の場合は数字の前に 0 を付け 2 桁にする。<br>この文字列を <b>繰り返し No.</b> とする。  |
| 第3階層ディレクトリ                | <b>Nxxx</b><br>xxx は 3 桁の連番。数字が 1 桁、あるは 2 桁の場合は数字の前に 0 を付け 3 桁にする。<br>この文字列を <b>並列 No.</b> とする。                                  |
| 第4階層ディレクトリ<br>(Inp データ保存) | <b>in</b>  |
| 第4階層ディレクトリ<br>(予測結果データ保存) | <b>out</b>   |
| 予測結果データファイル               | <b>Dxxx.pdb</b><br>xxx は 3 桁の連番。数字が 1 桁、あるは 2 桁の場合は数字の前に 0 を付け 3 桁にする。<br>「Dxxx」を <b>予測結果データ No.</b> とする。                        |

ディレクトリの作成規則は以下の通り。

- 1回の解析で得られたデータに対し、第1階層ディレクトリが1つ割り当てられる(解析 No.が1つ付与される)。
- 各解析について1回の繰り返し計算で得られたデータに対し、第2階層ディレクトリ(共通データ以外保存)が1つ割り当てられる(繰り返し No.が1つ付与される)。
- 各繰り返し計算について1つの計算サーバによる計算で得られたデータに対し、第3階層ディレクトリが1つ割り当てられる(並列 No.が1つ付与される)。

なお、同じタンパク質に対する解析を複数回行った場合、各解析に対し異なるディレクトリ(解析 No.)が割り当てられるため、各解析をユニークな解析 No.で識別することが可能である。

### 3.4. データ変換

SimFold が出力する解析結果を保存する際、Movie データを以下の方法で変換して保存する。

- Movie データに記述されている複数の立体構造データを、1つの立体構造データ毎に分割し1ファイルへ保存する。分割後のデータ(ファイル)を予測結果データとする。

変換処理はプログラム divmov.pl<sup>1</sup>で行う。divmov.pl の使用方法は以下の通り。

**【使用方法】** divmov.pl Movie ファイル名 予測結果データ保存先ディレクトリパス

**【例】** divmov.pl /xx/1pdb\_001.movie /dt/P001/C01/N001/out/

注) 予測結果データ保存先ディレクトリパスを指定しない場合は、カレントディレクトリに予測結果データファイルが保存される。

データ変換処理の概念図を次頁図 5 に示す。

---

<sup>1</sup> 神戸大学が作成した Movie ファイル分割プログラム。

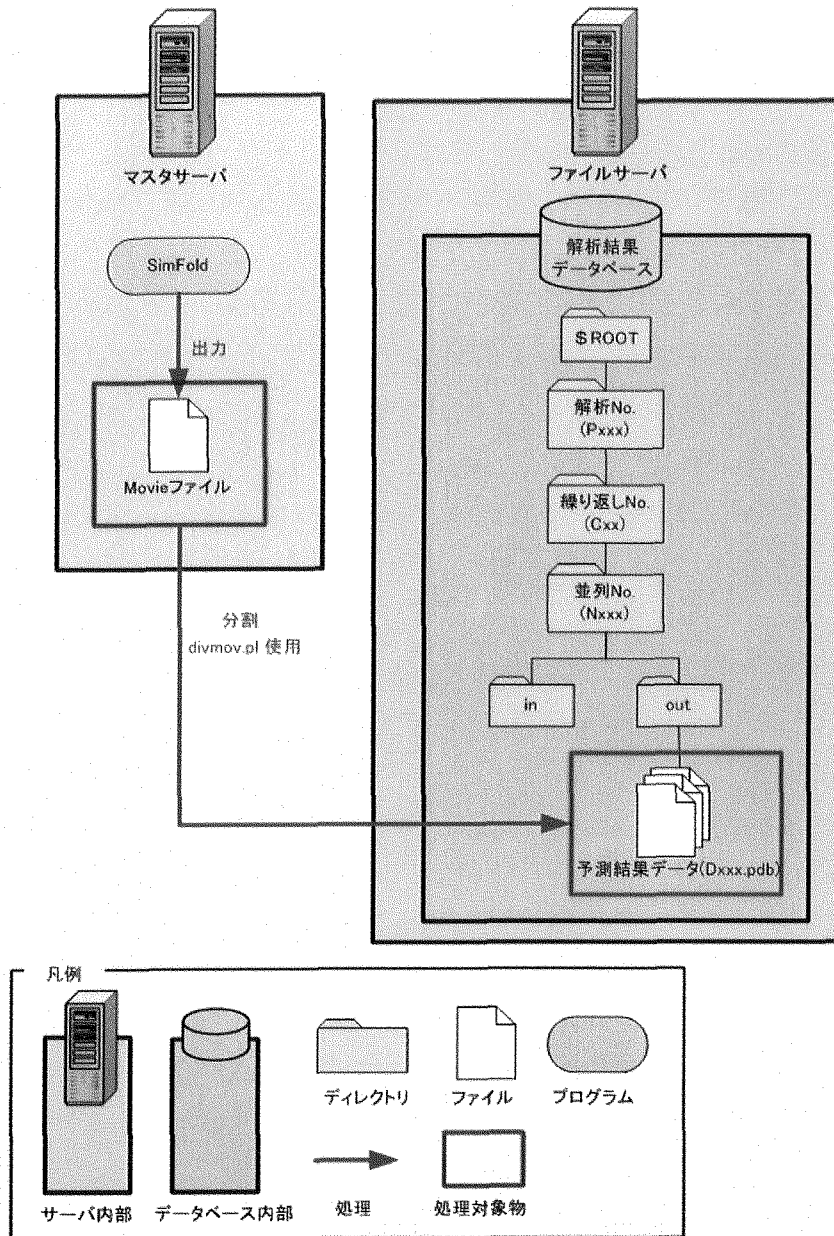


図 5 データ変換処理概念図

### 3.5. 共通データ

第2階層ディレクトリのうち、res ディレクトリに保存する共通データは以下の2つである。

#### ① テンプレートデータ

解析対象となるタンパク質の情報を記述した PDB 形式のデータ。解析を行う前に、ユーザがあらかじめ用意する。

#### ② エネルギーリストデータ

Inp データ、及び予測結果データから特定の情報を抽出し、エネルギー値の小さいデータから順にリストアップしたデータ。

### 3.6. エネルギーリストデータ

#### 3.6.1. 抽出情報

Inp データ、及び予測結果データから抽出し、エネルギーリストデータへ記述する情報を表 4 に示す。

表 4 抽出情報

| ファイル種別  | 抽出情報  |
|---------|---|
| Inp データ | タンパク質名。   |
| 予測結果データ | 以下の5つの値。<br><ul style="list-style-type: none"> <li>●V_tot</li> <li>●R_G</li> <li>●#hel</li> <li>●#ab</li> <li>●#pb</li> </ul> |

3.6.2. データ形式

エネルギーリストデータの形式を図 6 に示す。

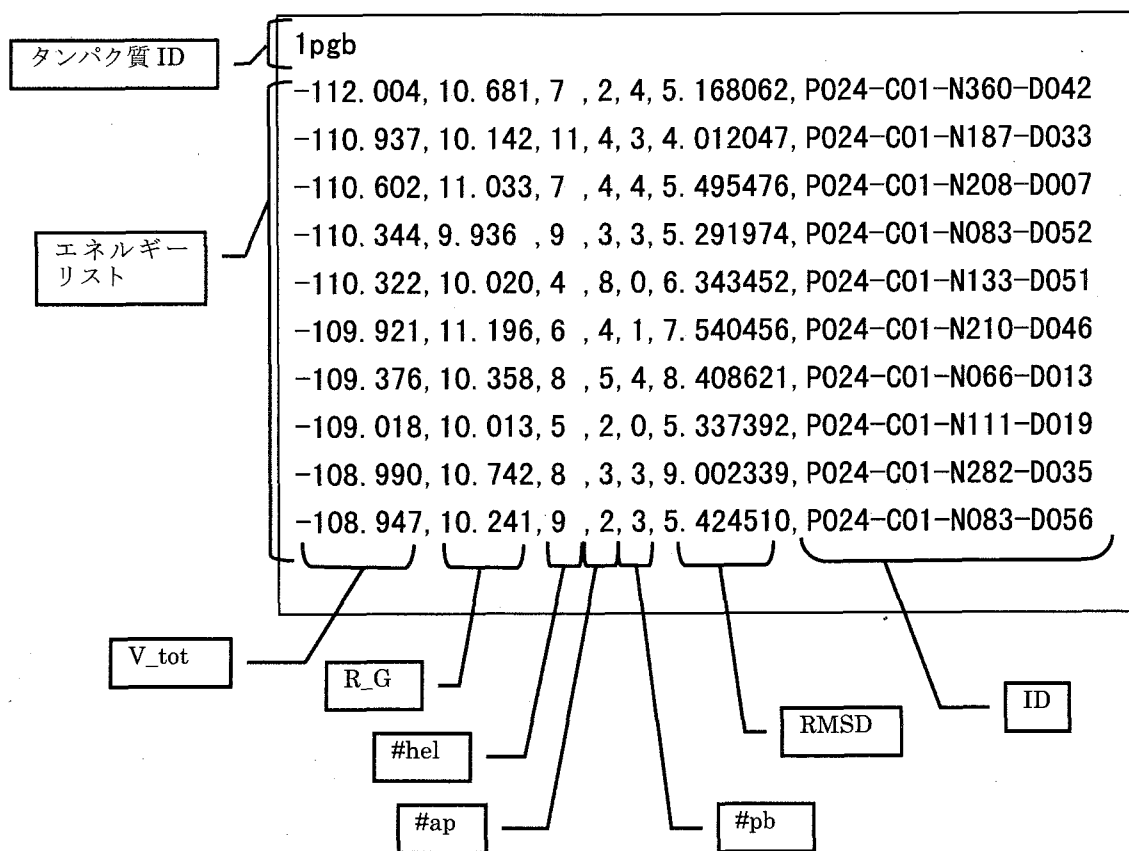


図 6 エネルギーリストデータ形式

エネルギーリストデータは、1行目にタンパク質 ID を記述し、2行目以降にエネルギーリストを記述する。エネルギーリストは、1行につき1データを表す。1データは、V\_tot、R\_G、#hel、#ap、#pb、RMSD、ID の順にカンマ(,)で区切って記述する。ID の詳細は「3.7 ID」を参照のこと。

### 3.6.3. RMSD 計算

エネルギーリストデータの各データがもつ RMSD は、各予測結果データとテンプレートデータより計算する。RMSD の計算には `bstfit_GC2` を使用する。`bstfit_GC` の使用方法は以下の通り。

【使用方法】 `bstfit_GC` テンプレートファイルパス 予測結果データファイルパス

【例】 `bstfit_GC /dt/P001/res/1pgb.template /dt/P001/C01/N001/out/D001.pdb`

### 3.6.4. ファイル作成

エネルギーリストデータファイルの作成には `makeEngLst.sh` を使用する。`makeEngLst.sh` の使用方法は以下の通り。

【使用方法】 `makeEngLst.sh` 解析結果データベースのルートディレクトリパス  
(\$ROOT) 予測結果データ保存先ディレクトリパス(\$ROOT 以下のパス)

【例】 予測結果データ保存先ディレクトリの構成が図 7 の場合。

`makeEngLst.sh /data/ P001/C01/N001/out`

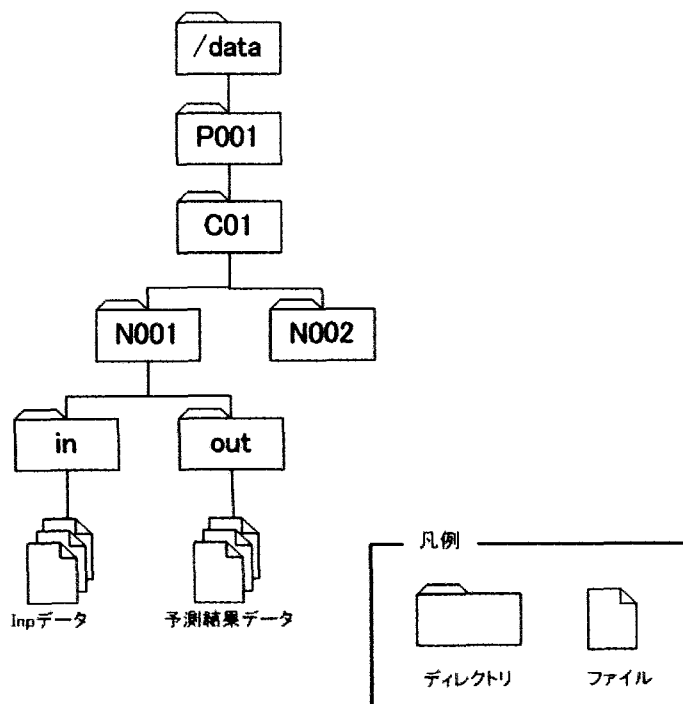


図 7 予測結果データ保存先ディレクトリ構成例

<sup>2</sup> 神戸大学が作成した RMSD 計算プログラム。

既にエネルギーリストデータが存在する場合は、データを追記する。

makeEngLst.sh は内部で makeEngLst.class を実行し、エネルギーリストデータファイルを作成する<sup>3</sup>。なお、makeEngLst.class は Java 実行ファイルであるため、実行するサーバの Java 実行環境を makeEngLst.sh 内に設定すること。

エネルギーリストデータファイル作成処理の概念図を図 8 に示す。

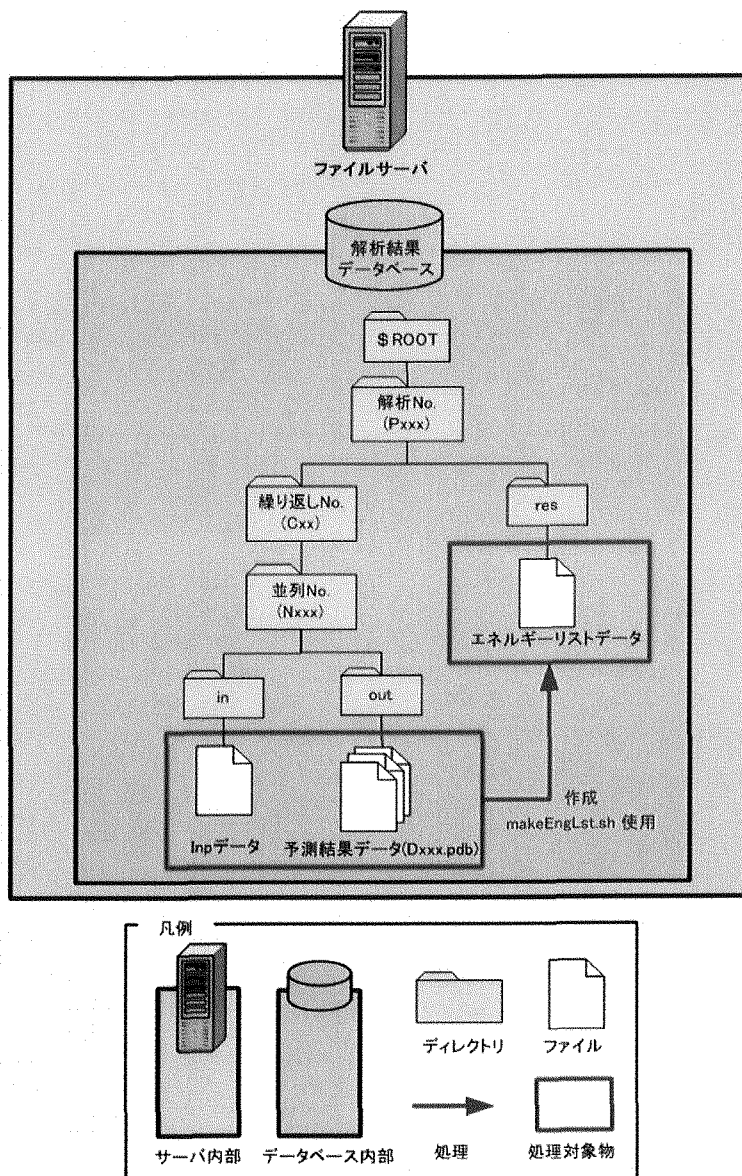


図 8 エネルギーリストデータファイル作成処理概念図

<sup>3</sup> makeEngLst.sh と makeEngLst.class は同じディレクトリに保存する。



### 3.7.ID

システム上で予測結果データをユニークに識別するために、各予測結果データへ ID を付与する。ID 形式を図 9 に示す。

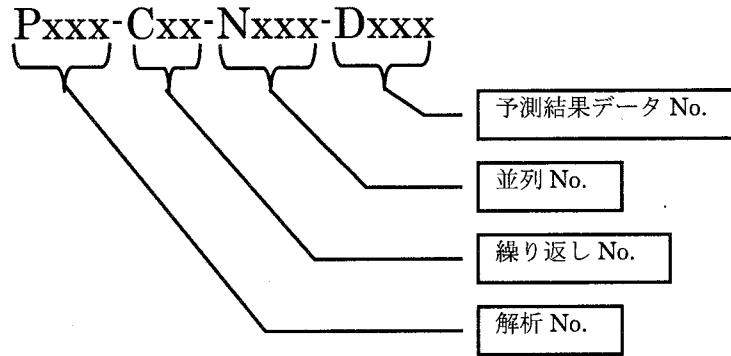


図 9 ID 形式

ID と予測結果データファイルパスは 1 対 1 で対応する。ID が分かっている場合、予測結果データファイルパスが特定できるため、該当の予測結果データを取得することが可能である。また、予測結果データファイルパスが分かっている場合、そのデータの ID を作成することが可能である。

【例 1】 ID(P001-C01-N001-D001)が分かっている場合、予測結果データファイルパスは、「\$ROOT/P001/C01/N001/out/D001.pdb」である。

【例 2】 予測結果データファイルパス(\$ROOT/P001/C01/N001/out/D001.pdb)が分かっている場合、ID は「P001-C01-N001-D001」である。

## 4. 解析結果表示システム

### 4.1. システム概要

#### 4.1.1. 目的

解析結果表示システムは、「2.2.2機能」で示したタンパク質立体構造予測システムの機能のうち、④ジョブ実行結果表示機能を実現するためのシステムである。本システムを利用することで、タンパク質立体構造予測の結果を Web 画面で簡単に確認することができる。

#### 4.1.2. 設計思想

本システムは、Web サーバ、ファイルサーバ、マスタサーバが分散環境にあることを前提としている。また、「2.2.2機能」で示した機能のうち、①、②、③を実現するシステムと、④を実現する本システムは独立しており、それぞれのシステムの動作がお互いのシステムに影響することはない。

なお、本システムは Servlet、及び JSP で構成し、Java で実装する。

#### 4.1.3. システム構成

本システムのシステム構成を図 10 に示す。

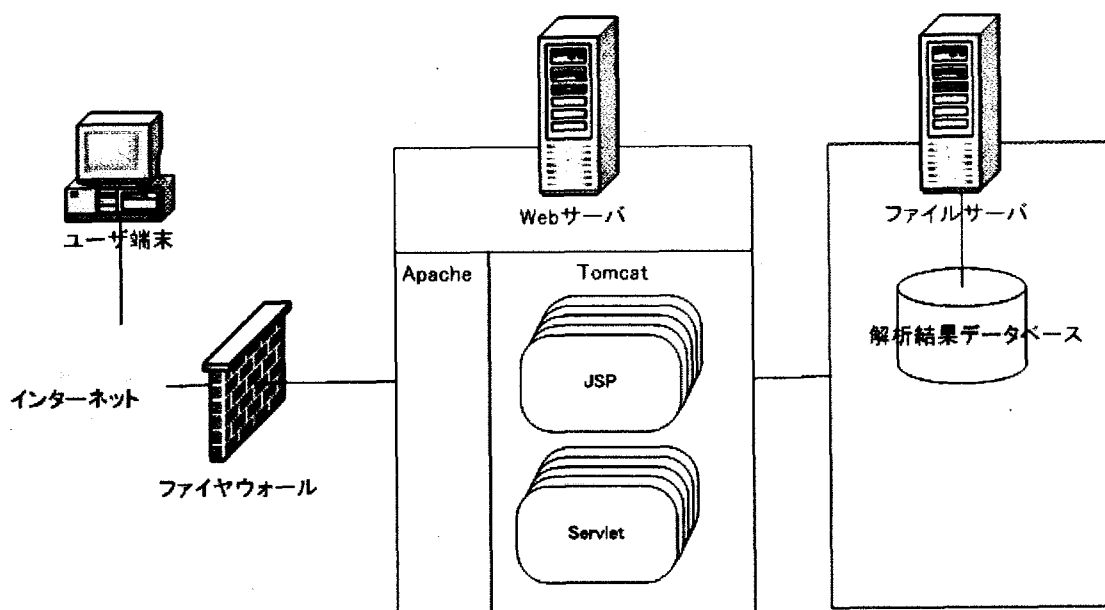


図 10 解析結果表示システム構成図

## 4.2.Web 画面

### 4.2.1.概要

タンパク質立体構造予測解析の結果を表示するための Web 画面は以下の 2 つである。

① エネルギーリスト画面

解析で得られたデータをエネルギーの小さいデータから順にリスト表示する。

② 分布図画面

横軸を RMSD、縦軸をエネルギー値とし、予測結果データの分布を表示する。

### 4.2.2.エネルギーリスト画面

予測結果データをエネルギーの小さいデータから順にリスト表示する。各データにはデータを識別するための ID を付与する。

本画面では、以下の操作を提供する。

- ① オリジナルのタンパク質立体構造表示。
- ② 各予測結果データのタンパク質立体構造表示。
- ③ 1 ページで表示するデータ数指定。  
(デフォルトは 10 データ)
- ④ 分布図画面表示。
- ⑤ 表示するデータのエネルギー値指定。  
(デフォルトは最も小さいエネルギー値)
- ⑥ 次ページ表示。
- ⑦ 前ページ表示。

本画面を次頁図 11 に示す。

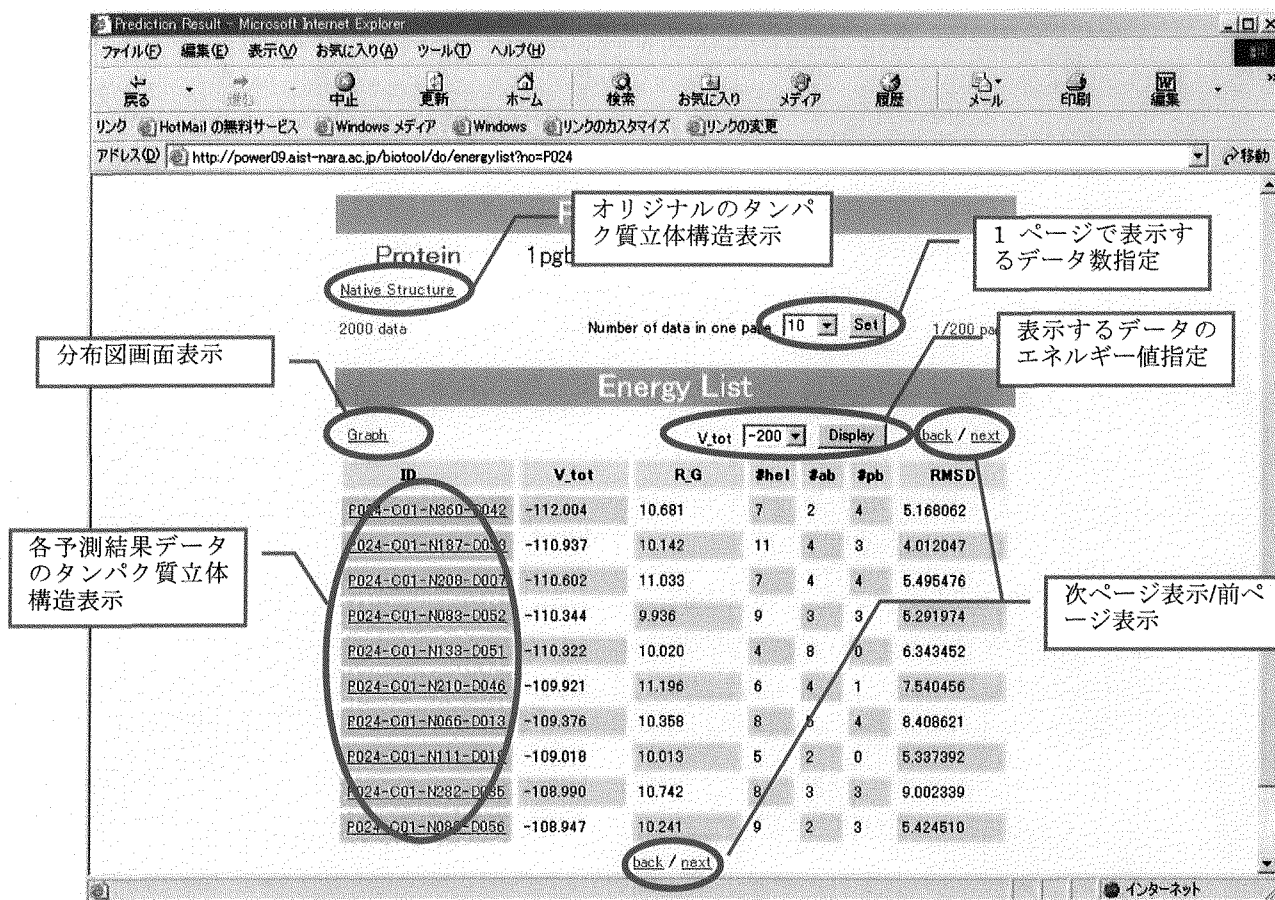


図 11 エネルギーリスト画面

#### 4.2.3. 分布図画面

横軸を RMSD、縦軸をエネルギー値とし、予測結果データの分布を表示する。

本画面では、以下の操作を提供する。

- ① 各データ(プロット)に対応するタンパク質立体構造表示。
- ② オリジナルのタンパク質立体構造表示。

本画面を次頁図 12 に示す。

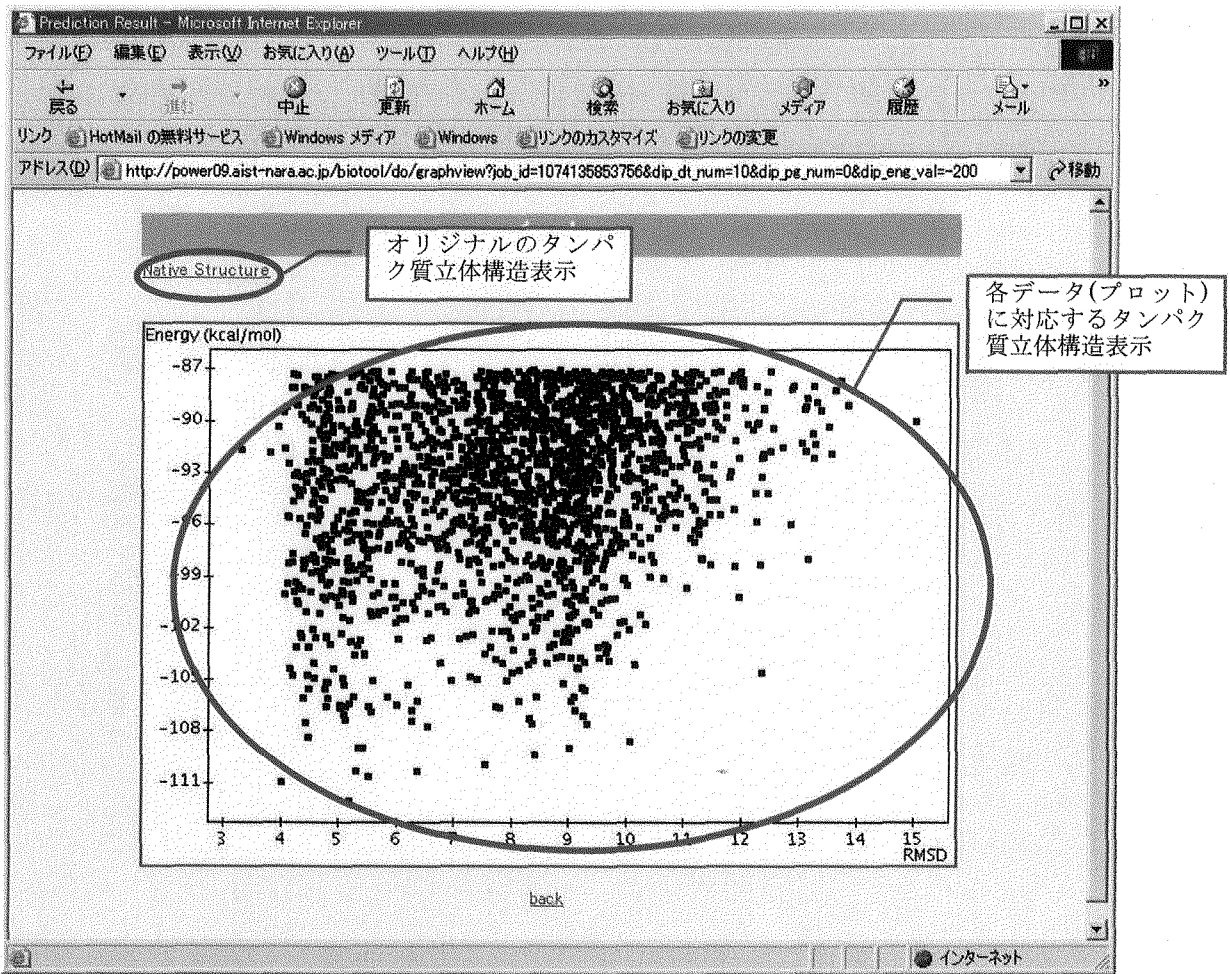


図 12 分布図画面

## 4.3.機能

### 4.3.1.概要

本システムは以下の機能を実現する。

- ① エネルギーリスト表示  
解析結果データベースのエネルギーリストデータを解析し、エネルギーリスト画面へデータを表示する。
- ② 分布図表示  
エネルギーリスト画面に表示しているデータを解析し、分布図画面へ分布図を表示する。
- ③ タンパク質立体構造データダウンロード  
エネルギーリスト画面、及び分布図画面において、ある特定のタンパク質立体構造データをダウンロードする操作が選択された場合、該当するタンパク質立体構造データ(予測結果データ)をダウンロードする。
- ④ タンパク質立体構造表示  
エネルギーリスト画面、及び分布図画面において、ある特定のデータについてタンパク質立体構造を表示する操作が選択された場合、該当するタンパク質立体構造を表示する。
- ⑤ ページコントロール  
エネルギーリスト画面のページ表示操作を制御する。

### 4.3.2.エネルギーリスト表示

解析結果データベースのエネルギーリストデータを解析し、エネルギーリスト画面へデータを表示するまでの処理の流れは以下の通り。

- ① エネルギーリストデータをファイルサーバから Web サーバへコピー scp)する。
- ② Web サーバにおいて、エネルギーリストデータをメモリへ記憶させる。
- ③ メモリへ記憶したデータを、エネルギーリスト画面で表示する。
- ④ Web サーバのエネルギーリストデータを削除する。

処理の流れの概念図を次頁図 13 に示す。

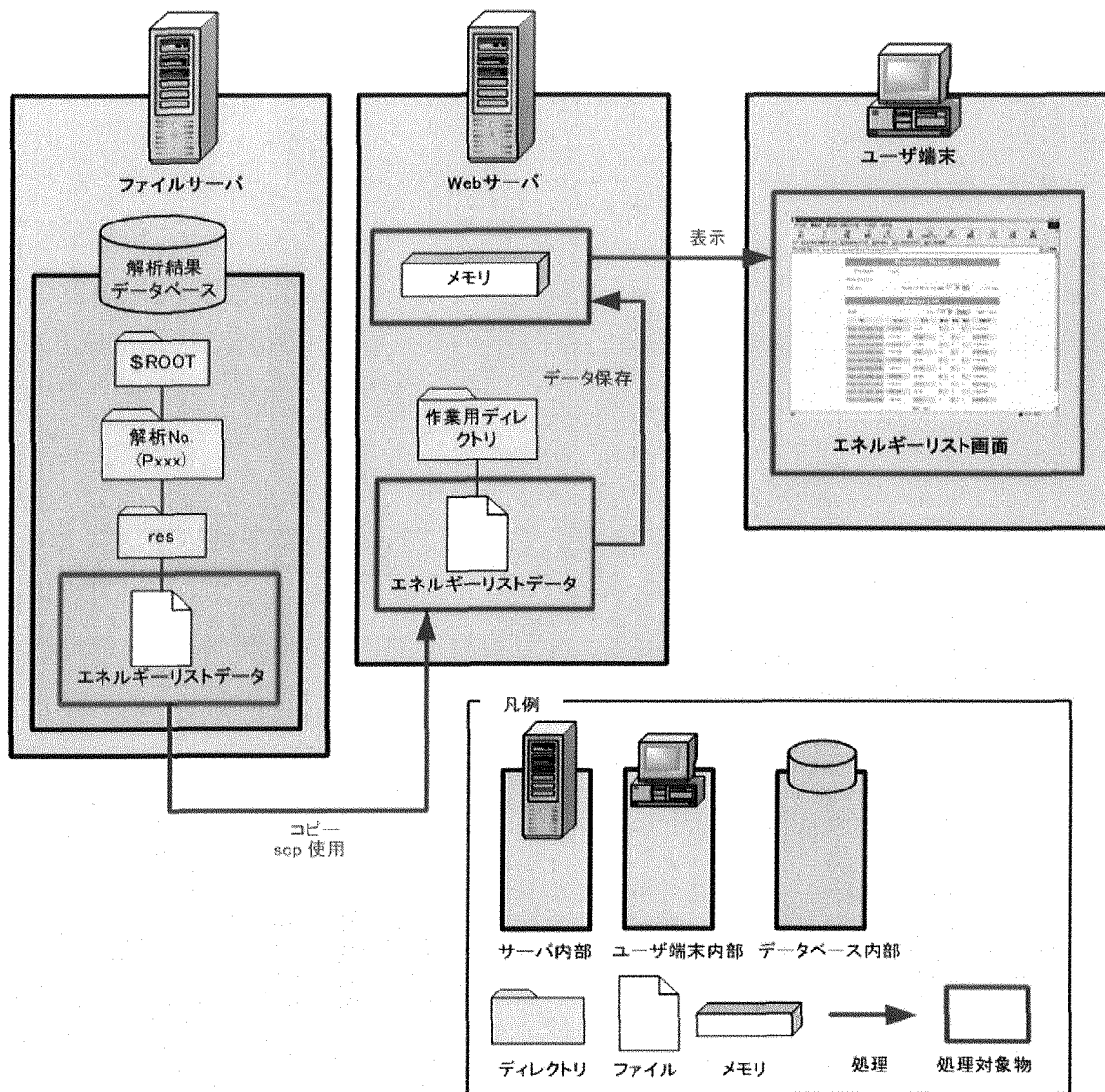


図 13 エネルギーリスト表示処理概念図

### 4.3.3. 分布図表示

エネルギーリスト画面に表示しているデータを解析し、分布図画面へ分布図を表示するまでの処理の流れは以下の通り。

- ① メモリに記憶させている各データからエネルギー値( $V_{tot}$ )と、RMSD 値を取得し、縦軸をエネルギー値、横軸を RMSD 値とした分布図(JPEG ファイル)を作成する。
- ② 分布図を分布図画面で表示する。

処理の流れの概念図を図 14 に示す。

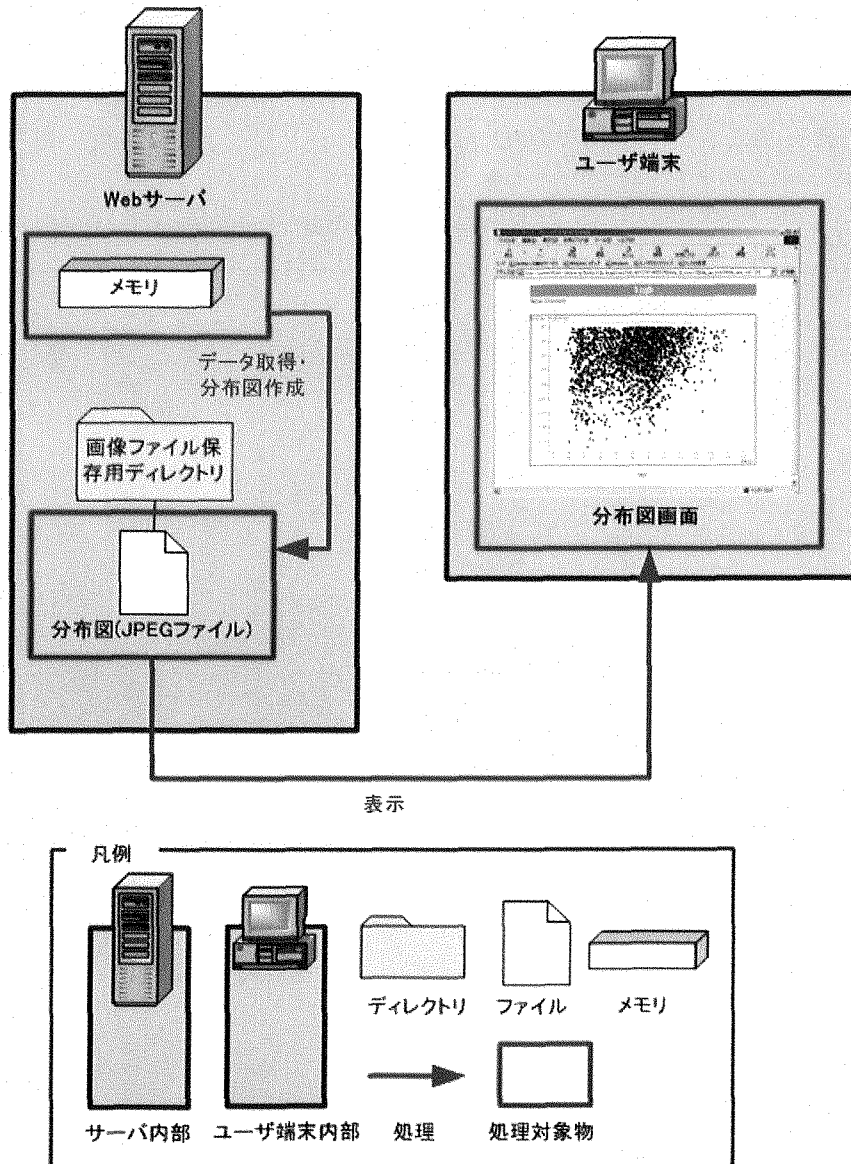


図 14 分布図表示処理概念図



#### 4.3.4. タンパク質立体構造データダウンロード

エネルギーリスト画面、及び分布図画面において、ある特定のタンパク質立体構造データ(予測結果データ)をダウンロードするまでの処理の流れは以下の通り。

- ① 該当データの予測結果データを、ファイルサーバから Web サーバへコピー scp する。
- ② Web サーバ上の予測結果データを、ユーザ端末へダウンロードする。
- ③ Web サーバ上の予測結果データを削除する。

処理の流れの概念図を図 15 に示す。

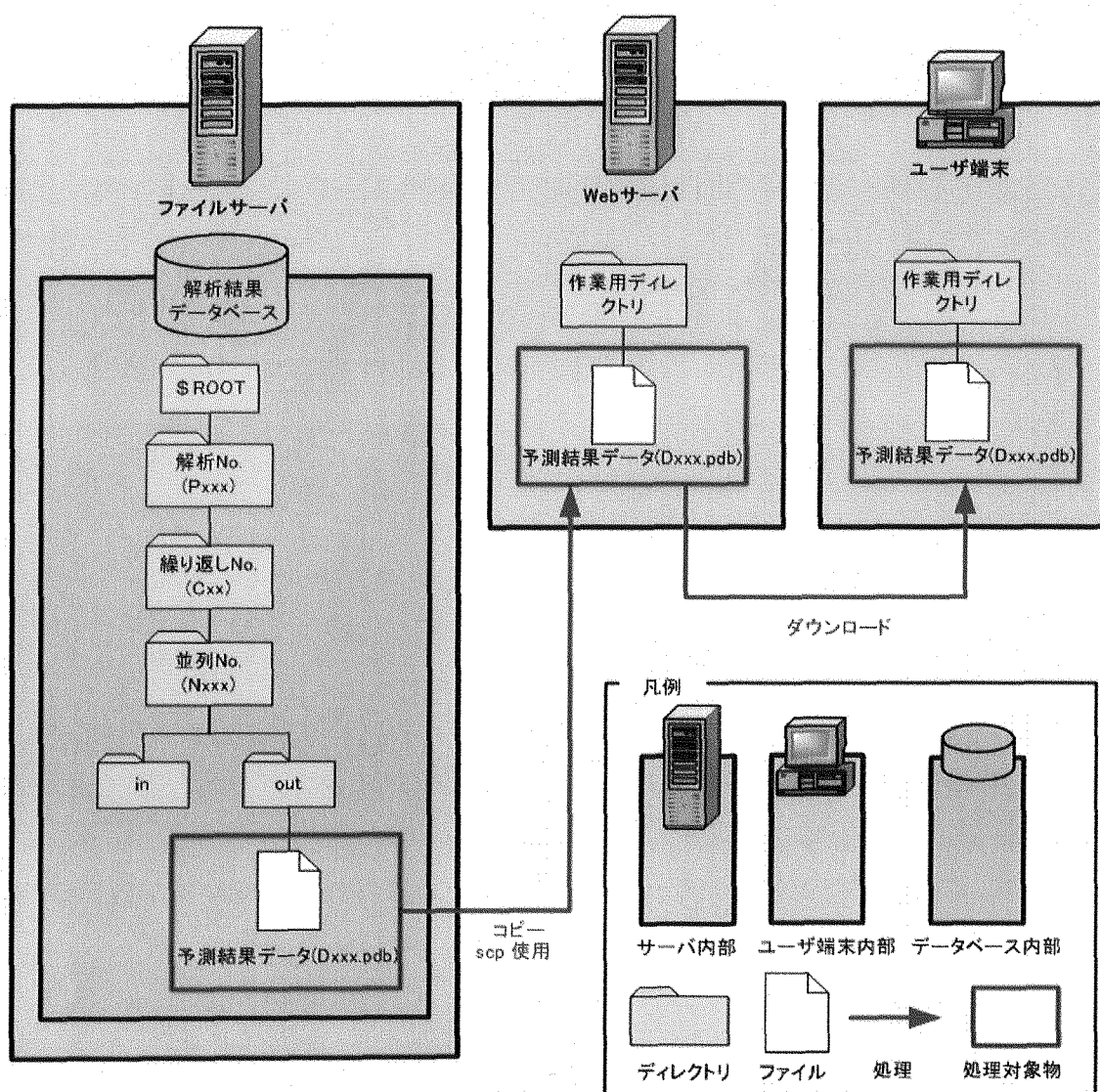


図 15 タンパク質立体構造データダウンロード処理概念図

#### 4.3.5.タンパク質立体構造表示

エネルギーリスト画面、及び分布図画面において、ある特定のタンパク質立体構造を表示するまでの処理の流れは以下の通り。

- ① 該当データの予測結果データを、ファイルサーバから Web サーバへコピー scp)する。
- ② Web サーバ上の予測結果データを、ユーザ端末へダウンロードする。
- ③ ユーザ端末において RasMol を起動し、タンパク質立体構造を表示する。
- ④ Web サーバ上の予測結果データを削除する。

処理の流れの概念図を図 16 に示す。

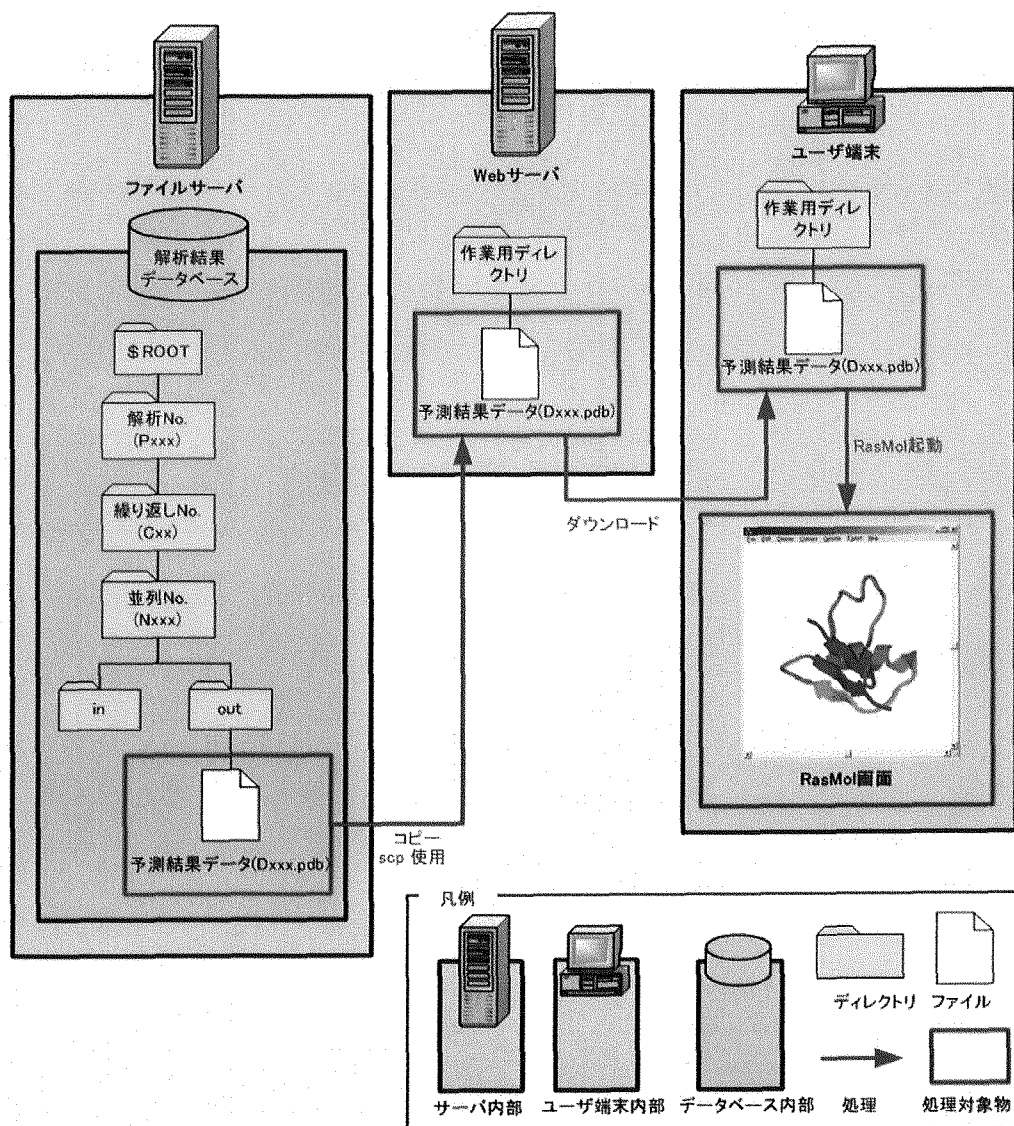


図 16 タンパク質立体構造表示処理概念図

なお、ユーザ端末において RasMol を起動するためには、ブラウザに対して以下に記述する設定を行う必要がある。その際、RasMol のタンパク質立体構造の表示色を見易くするために、color.ras を用意する。color.ras の内容は図 17 の通り。

```
cartoons
wireframe off
color group
background white
```

図 17 color.ras 内容

#### 【Linux 端末における RasMol 起動設定方法】

- ① Web サイト <http://www.openrasmol.org/> より、RasMol 実行ファイル(rasmol)を取得する。
- ② /usr/local/bin 以下に RasMol 実行ファイル(rasmol)を保存する。
- ③ color.ras をホームディレクトリ(\${HOME})へ保存する。
- ④ color.ras を使用して RasMol を起動するためのスクリプト /usr/local/bin/rasmol\_rs を作成する。/usr/local/bin/rasmol\_rs の内容は図 18 の通り。

```
#!/bin/sh
xterm -T "RasMol" -e /usr/local/bin/rasmol -pdb $1 -script ${HOME}/color.ras
```

図 18 rasmol\_rs 内容

- ⑤ ブラウザの MIME タイプ設定に、以下の設定を追加する。
  - MIME : application/x-rasmol
  - application : /usr/local/bin/rasmol\_rs

## 【Windows 端末における RasMol 起動設定方法】

- ① Web サイト <http://www.openrasmol.org/> より、RasMol 実行ファイル(raswin.exe) を取得する。
- ② C:\¥rasmol 以下に RasMol 実行ファイル(raswin.exe)を保存する。
- ③ color.ras を C:\¥rasmol へ保存する。
- ④ color.ras を使用して RasMol を起動するためのプログラム C:\¥rasmol¥ rasmol\_script.c を作成する。C:\¥rasmol¥ rasmol\_script.c の内容は 図 19 の通り。

```

#include <string.h>
#include <stdlib.h>

int main ( int argc, char ** argv, char ** env ) {
int i;
char S[1000];
strcpy ( S,"C:\¥¥rasmol¥¥raswin.exe -pdb " );
for (i=1;i<argc;i++) {
    strcat ( S," " );
    strcat ( S,argv[i] );
}
strcat ( S," -script C:\¥¥rasmol¥¥color.ras" );
system ( S );
/* return 0; */
exit(0);
}

```

図 19 rasmol\_script.c 内容

- ⑤ C:\¥rasmol¥ rasmol\_script.c をコンパイルして、実行ファイル C:\¥rasmol¥ rasmol\_script.exe を作成する。
- ⑥ ブラウザの MIME タイプ設定に、以下の設定を追加する。
  - MIME : application/x-rasmol
  - application : C:\¥rasmol¥rasmol\_script.exe

#### 4.3.6. ページコントロール

エネルギーリスト画面では、以下のページ表示操作を行うことができる。

- ① 次ページの表示
- ② 前ページの表示
- ③ 1 ページで表示するデータ数指定
- ④ 表示するデータのエネルギー値指定

これらのページ表示操作を制御する処理の流れは以下の通り。

- ① Web サーバ上のメモリに記憶しているエネルギーリストデータのページ情報を更新する。
- ② Web サーバ上のメモリに記憶しているエネルギーリストデータを、エネルギーリスト画面で再表示する。

処理の流れの概念図を図 20 に示す。

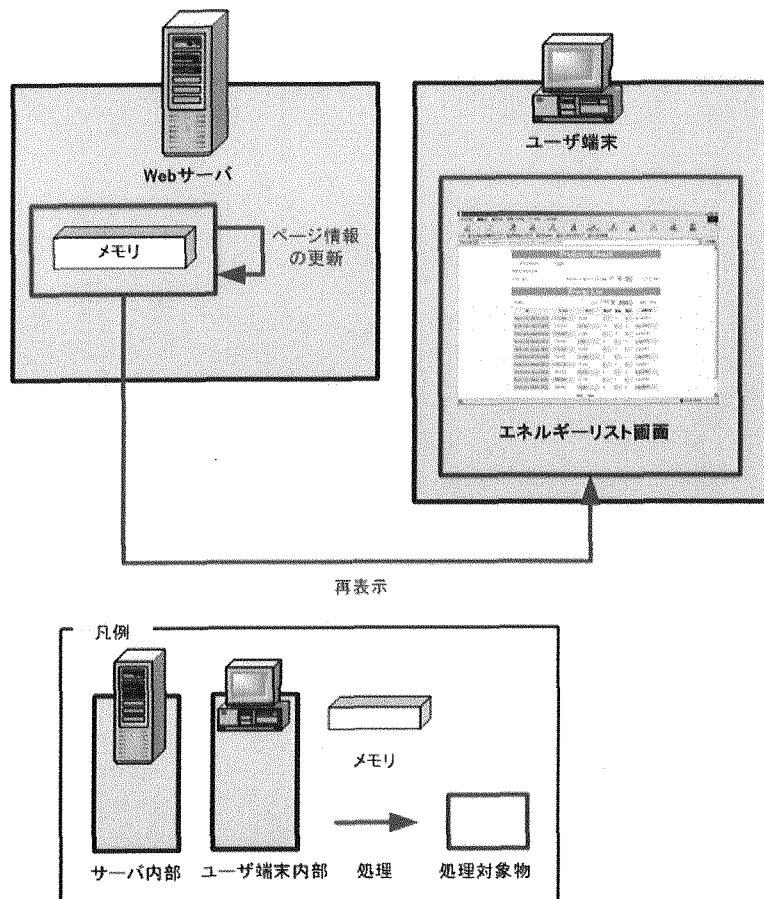


図 20 ページコントロール処理概念図

## 4.4. プログラム

## 4.4.1. 構成

Java プログラムで構成している本システムのプログラムは、4 つに分類される。プログラムカテゴリについて表 5 に示す。

表 5 プログラムカテゴリ一覧

| カテゴリ                  | 概要  | ファイル種別               | 実行計算機   |
|-----------------------|---|----------------------|---------|
| Servlet               | サーバ側で動作する Java アプレット。HTTP リクエストの解析、結果の生成、HTTP リスponse作成などを行う。 | クラスファイル <sup>4</sup> | Web サーバ |
| Web ユーティリティ           | Web サーバ上の処理で使用するユーティリティプログラム。                                 | クラスファイル              | Web サーバ |
| JavaServer Pages(JSP) | サーバ上で動作する Java のコードを HTML に埋め込んだプログラム。                        | JSP ファイル             | Web サーバ |
| カスタムタグプログラム           | システム専用に作成した、JSP タグのライブラリ。                                     | クラスファイル              | Web サーバ |

プログラム構成図を次頁図 21 に示す。

---

<sup>4</sup> Java プログラムの実行ファイル。

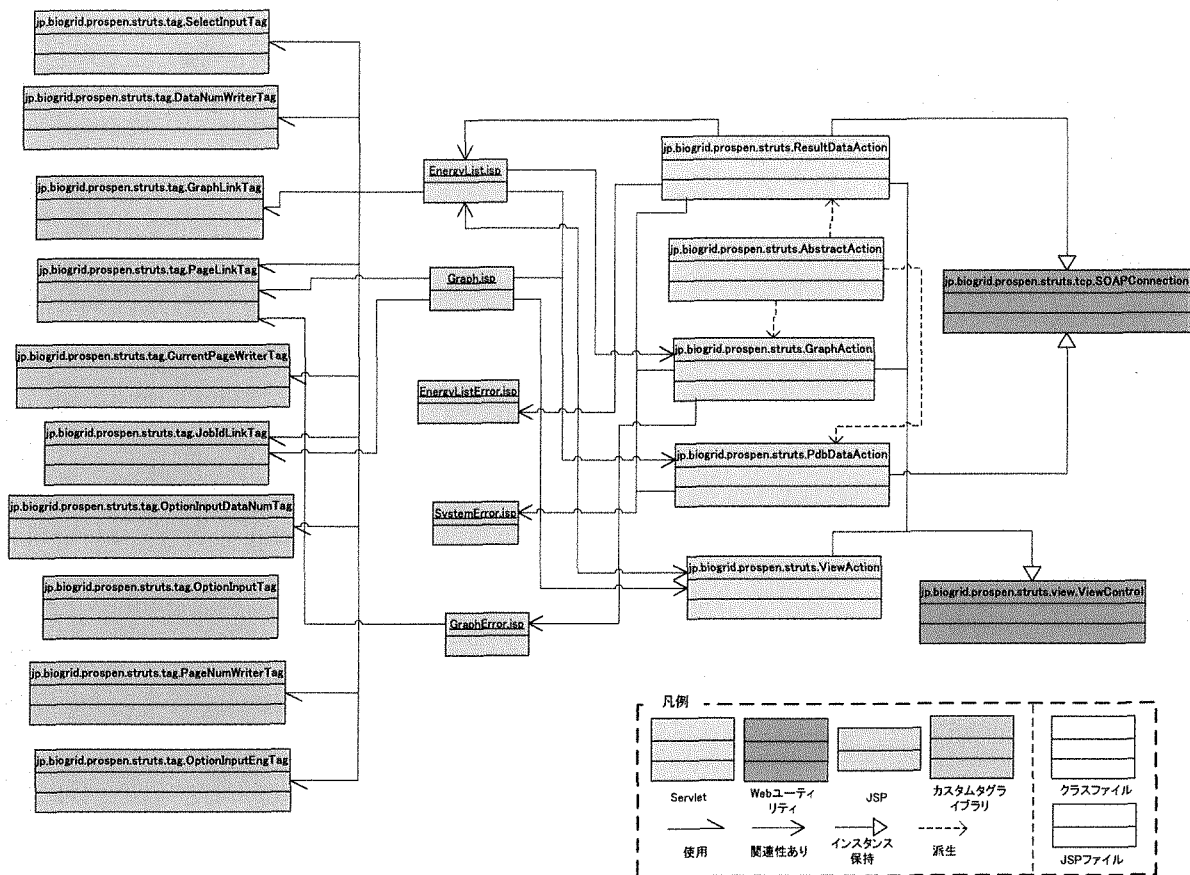


図 21 プログラム構成図

#### 4.4.2. クラス詳細

プログラムを構成するクラスファイルについての詳細は、「解析結果表示システム Java プログラムマニュアル」を参照のこと。

#### 4.5. メンテナンス

##### 4.5.1. 起動

本システム特有の起動作業はなく、Web サーバにインストールされている Apache、及び Tomcat の起動を本システムの起動とする。

#### 4.5.2.ディレクトリ構成

本システムのディレクトリ構成を図 22 に示す。なお、\$TOMCAT\_ROOT は、Tomcat のルートディレクトリを示す。

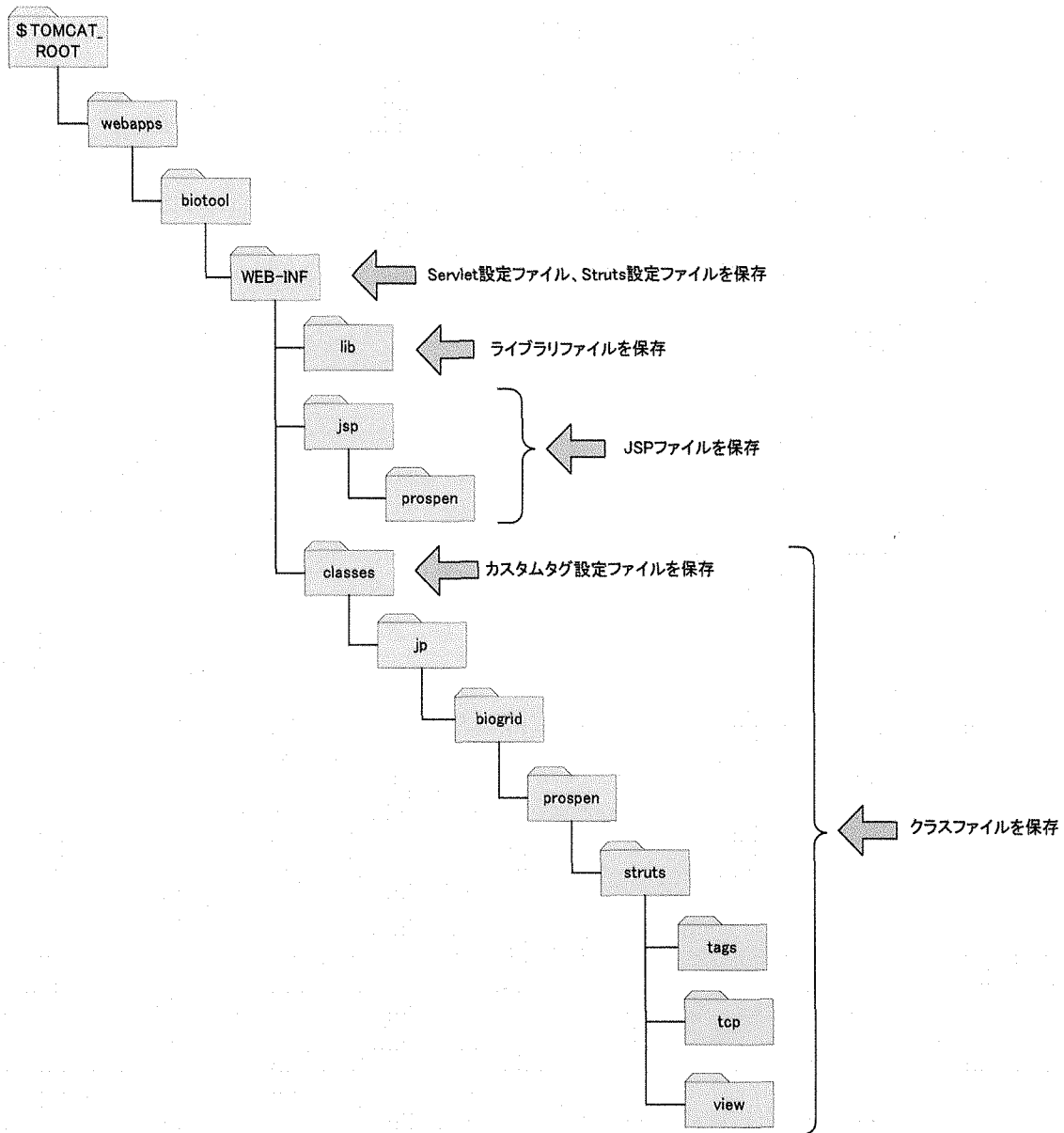


図 22 解析結果表示システムディレクトリ構成図



## 4.5.3. 設定

## 4.5.3.1. Servlet 設定ファイル

Servlet 設定ファイルの概要を表 6 にまとめる。また、ファイル内容を図 23 に示す。

表 6 Servlet 設定ファイル概要

|           |   |
|-----------|---|
| 保存先ディレクトリ | \$TOMCAT_ROOT/webapps/biotool/WEB-INF/classes                   |
| ファイル名     | ApplicationResources.properties                                 |
| 用途        | Servlet が使用する可変情報の設定。   |
| 更新内容反映    | Servlet 設定ファイルの内容を更新した場合は、更新内容を反映させるために、Web サーバの tomcat を再起動する。 |

```
#ファイルセパレータ
file_separator=/
#CSV セパレータ
csv_separator=,
#ID セパレータ
id_separator=-
#PDB ファイル拡張子
pdb_extension=.pdb
#テンプレートファイル拡張子
template_extension=.template
#ファイル一時保存ディレクトリ(Web サーバ)
prospen_work_path=/prospen-work/tmp
#エネルギーリストファイル名
energy_file_name=energy.list
#グラフファイル名
graph_file_name=graph.jpeg
#解析結果格納ディレクトリ名(ファイルサーバ)
res_dir=res
#オリジナルタンパク質 PDB データ格納ディレクトリ名(ファイルサーバ)
org_dir=res
#グラフのポイントがクリックされたときにリンクする URL の固定部分
url_header=http://power09.aist-nara.ac.jp/biotool/do/pdbview?data_id=
#グラフファイルを保存しているディレクトリ PATH
image_dir=/usr/local/tomcat/webapps/biotool/img
#古いグラフファイルを保存する期間(単位: 時間)
graph_term=48
```

図 23 Servlet 設定ファイル内容

## 4.5.3.2. Struts 設定ファイル

Struts 設定ファイルの概要を表 7 にまとめる。また、ファイル内容を次頁図 24 に示す。

表 7 Struts 設定ファイル概要

|           |  |
|-----------|--|
| 保存先ディレクトリ | \$TOMCAT_ROOT/webapps/biotool/WEB-INF                          |
| ファイル名     | struts-config.xml  |
| 用途        | フォームの定義と、ActionMapping の設定。                                    |
| 更新内容反映    | Struts 設定ファイルの内容を更新した場合は、更新内容を反映させるために、Web サーバの tomcat を再起動する。 |

```

<?xml version="1.0" encoding="ISO-8859-1" ?>
<!DOCTYPE struts-config PUBLIC
    "-//Apache Software Foundation//DTD Struts Configuration 1.0//EN"
    "http://jakarta.apache.org/struts/dtds/struts-config_1_0.dtd">
<struts-config>
  <!-- ===== Form Bean Definitions ===== -->
  <form-beans>
    <form-bean      name="prospenForm"
                    type="jp.biogrid.prospen.struts.SimpleToolForm"/>
  </form-beans>
  <!-- ===== Global Forward Definitions ===== -->
  <global-forwards>
    <forward name="systemerror"      path="/WEB-INF/jsp/SystemError.jsp"/>
    <forward name="energylisterror"  path="/WEB-INF/jsp/EnergyListError.jsp"/>
    <forward name="grapherror"       path="/WEB-INF/jsp/GraphError.jsp"/>
  </global-forwards>
  <!-- ===== Action Mapping Definitions ===== -->
  <action-mappings>
    <action path="/prospenresult"
            type="jp.biogrid.prospen.struts.FormAction">
      <forward name="form"          path="/WEB-INF/jsp/prospen/Result.jsp"/>
    </action>
    <action path="/energylist"
            type="jp.biogrid.prospen.struts.ResultDataAction"
            name="prospenForm"
            scope="request"
            input="/WEB-INF/jsp/prospen/Result.jsp">
      <forward name="created"       path="/WEB-INF/jsp/prospen/EnergyList.jsp"/>
    </action>
    <action path="/energyview"
            type="jp.biogrid.prospen.struts.ViewAction"
            name="prospenForm"
            scope="request"
            input="/WEB-INF/jsp/prospen/EnergyList.jsp">
      <forward name="created"       path="/WEB-INF/jsp/prospen/EnergyList.jsp"/>
    </action>
    <action path="/pdbview"
            type="jp.biogrid.prospen.struts.PdbDataAction"
            parameter="Application/x-rasmol">
    </action>
    <action path="/graphview"
            type="jp.biogrid.prospen.struts.GraphAction"
            name="prospenForm"
            scope="request"
            input="/WEB-INF/jsp/prospen/EnergyList.jsp">
      <forward name="created"       path="/WEB-INF/jsp/prospen/Graph.jsp"/>
    </action>
  </action-mappings>
</struts-config>

```

図 24 Struts 設定ファイル内容

## 4.5.3.3. カスタムタグ設定ファイル

カスタムタグ設定ファイルの概要を表 8 にまとめる。また、ファイル内容を次頁以降の図 25 に示す。

表 8 カスタムタグ設定ファイル概要

|           |   |
|-----------|---|
| 保存先ディレクトリ | \$TOMCAT_ROOT/webapps/biotool/WEB-INF                         |
| ファイル名     | prospen.tld   |
| 用途        | Struts のカスタムタグの設定。  |
| 更新内容反映    | カスタムタグ設定ファイルの内容を更新した場合は、更新内容を反映させるために、Web サーバの tomcat を再起動する。 |

```

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<!DOCTYPE taglib PUBLIC "-//Sun Microsystems, Inc.//DTD JSP Tag Library 1.1//EN"
"http://java.sun.com/j2ee/dtds/web-jsptaglibrary_1_1.dtd">
<taglib>
  <tlibversion>1.0</tlibversion>
  <jspversion>1.1</jspversion>
  <shortname>search</shortname>
  <uri></uri>
  <tag>
    <name>currentpage</name>
    <tagclass>jp.biogrid.prospen.struts.tags.CurrentPageWriterTag</tagclass>
    <bodycontent>EMPTY</bodycontent>
    <attribute>
      <name>name</name>
      <required>true</required>
      <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
  </tag>
  <tag>
    <name>datanum</name>
    <tagclass>jp.biogrid.prospen.struts.tags.DataNumWriterTag</tagclass>
    <bodycontent>EMPTY</bodycontent>
    <attribute>
      <name>name</name>
      <required>true</required>
      <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
  </tag>
  <tag>
    <name>select</name>
    <tagclass>jp.biogrid.prospen.struts.tags.SelectInputTag</tagclass>
    <bodycontent>JSP</bodycontent>
    <attribute>
      <name>name</name>
      <required>true</required>
      <rtexprvalue>>false</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
      <name>size</name>
      <required>>false</required>
      <rtexprvalue>>false</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
      <name>multiple</name>
      <required>>false</required>
      <rtexprvalue>>false</rtexprvalue>
    </attribute>
  </tag>
  <tag>
    <name>option_datanum</name>
    <tagclass>jp.biogrid.prospen.struts.tags.OptionInputDataNumTag</tagclass>
    <bodycontent>JSP</bodycontent>

```

(次頁に続く)

```
<attribute>
  <name>value</name>
  <required>true</required>
  <rtexprvalue>>false</rtexprvalue>
</attribute>
<attribute>
  <name>selected</name>
  <required>>false</required>
  <rtexprvalue>>false</rtexprvalue>
</attribute>
</tag>
<tag>
  <name>option_eng</name>
  <tagclass>jp.biogrid.prospen.struts.tags.OptionInputEngTag</tagclass>
  <bodycontent>JSP</bodycontent>
  <attribute>
    <name>value</name>
    <required>true</required>
    <rtexprvalue>>false</rtexprvalue>
  </attribute>
  <attribute>
    <name>selected</name>
    <required>>false</required>
    <rtexprvalue>>false</rtexprvalue>
  </attribute>
</tag>
<tag>
  <name>pagenum</name>
  <tagclass>jp.biogrid.prospen.struts.tags.PageNumWriterTag</tagclass>
  <bodycontent>EMPTY</bodycontent>
  <attribute>
    <name>name</name>
    <required>true</required>
    <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
  </attribute>
</tag>
<tag>
  <name>pageLink</name>
  <tagclass>jp.biogrid.prospen.struts.tags.PageLinkTag</tagclass>
  <attribute>
    <name>kind</name>
    <required>true</required>
    <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
  </attribute>
  <attribute>
    <name>job_id</name>
    <required>true</required>
    <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
  </attribute>
  <attribute>
```

(次頁に続く)

```
        <name>dip_dt_num</name>
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>dip_pg_num</name>
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>dip_eng_val</name>
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>page</name>
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>target</name>
        <required>false</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
</tag>
<tag>
    <name>graphLink</name>
    <tagclass>jp.biogrid.prospen.struts.tags.GraphLinkTag</tagclass>
    <attribute>
        <name>job_id</name>
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>dip_dt_num</name>
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>dip_pg_num</name>
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>dip_eng_val</name>
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>page</name>
```

```
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>target</name>
        <required>false</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
</tag>
<tag>
    <name>jobidLink</name>
    <tagclass>jp.biogrid.prospen.struts.tags.JobIdLinkTag</tagclass>
    <attribute>
        <name>job_id</name>
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>page</name>
        <required>true</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
    <attribute>
        <name>target</name>
        <required>false</required>
        <rtexprvalue>true</rtexprvalue>
    </attribute>
</tag>
</taglib>
```

図 25 カスタムタグ設定ファイル内容



## 謝辞

本報告書の執筆の機会を与えて下さった ITBL 利用推進室の相川次長と、ITBL 利用推進室の皆様にご感謝いたします。また、解析結果データベース整備、及び解析結果表示システムを構築するにあたり、数々のご協力やご助言を頂きました神戸大学高田研究室の皆様、奈良先端科学技術大学院大学砂原研究室の皆様、ITBL 利用推進室の皆様にご感謝いたします。

## 参考文献

- 1) 高田研究室 研究紹介 <http://theory.chem.sci.kobe-u.ac.jp/researchj.html>
- 2) George Chikenji, Yoshimi Fujitsuka, Shoji Takada : The Journal of Chemical Physics, Vol. 119, No. 13, pp. 6895–6903, 1 October 2003 「A reversible fragment assembly method for *de novo* protein structure prediction」
- 3) BioGrid プロジェクト <http://www.biogrid.jp/>

This is a blank page.

# 国際単位系 (SI) と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

| 量     | 名称     | 記号  |
|-------|--------|-----|
| 長さ    | メートル   | m   |
| 質量    | キログラム  | kg  |
| 時間    | 秒      | s   |
| 電流    | アンペア   | A   |
| 熱力学温度 | ケルビン   | K   |
| 物質質量  | モル     | mol |
| 光度    | カンデラ   | cd  |
| 平面角   | ラジアン   | rad |
| 立体角   | ステラジアン | sr  |

表3 固有の名称をもつSI組立単位

| 量             | 名称     | 記号 | 他のSI単位による表現         |
|---------------|--------|----|---------------------|
| 周波数           | ヘルツ    | Hz | s <sup>-1</sup>     |
| 力             | ニュートン  | N  | m·kg/s <sup>2</sup> |
| 圧力, 応力        | パスカル   | Pa | N/m <sup>2</sup>    |
| エネルギー, 仕事, 熱量 | ジュール   | J  | N·m                 |
| 工率, 放射束       | ワット    | W  | J/s                 |
| 電気量, 電荷       | クーロン   | C  | A·s                 |
| 電位, 電圧, 起電力   | ボルト    | V  | W/A                 |
| 静電容量          | ファラド   | F  | C/V                 |
| 電気抵抗          | オーム    | Ω  | V/A                 |
| コンダクタンス       | ジーメンズ  | S  | A/V                 |
| 磁束            | ウェーバ   | Wb | V·s                 |
| 磁束密度          | テスラ    | T  | Wb/m <sup>2</sup>   |
| インダクタンス       | ヘンリー   | H  | Wb/A                |
| セルシウス温度       | セルシウス度 | °C |                     |
| 光度            | ルーメン   | lm | cd·sr               |
| 照射度           | ルクス    | lx | lm/m <sup>2</sup>   |
| 放射能           | ベクレル   | Bq | s <sup>-1</sup>     |
| 吸収線量          | グレイ    | Gy | J/kg                |
| 線量等量          | シーベルト  | Sv | J/kg                |

表2 SIと併用される単位

| 名称      | 記号        |
|---------|-----------|
| 分, 時, 日 | min, h, d |
| 度, 分, 秒 | °, ', "   |
| リットル    | l, L      |
| トン      | t         |
| 電子ボルト   | eV        |
| 原子質量単位  | u         |

1 eV=1.60218×10<sup>-19</sup>J

1 u=1.66054×10<sup>-27</sup>kg

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

| 名称       | 記号  |
|----------|-----|
| オングストローム | Å   |
| バイン      | b   |
| バル       | bar |
| ガール      | Gal |
| キュリー     | Ci  |
| レントゲン    | R   |
| ラド       | rad |
| レム       | rem |

1 Å=0.1nm=10<sup>-10</sup>m

1 b=100fm<sup>2</sup>=10<sup>-28</sup>m<sup>2</sup>

1 bar=0.1MPa=10<sup>5</sup>Pa

1 Gal=1cm/s<sup>2</sup>=10<sup>-2</sup>m/s<sup>2</sup>

1 Ci=3.7×10<sup>10</sup>Bq

1 R=2.58×10<sup>-4</sup>C/kg

1 rad=1cGy=10<sup>-2</sup>Gy

1 rem=1cSv=10<sup>-2</sup>Sv

表5 SI接頭語

| 倍数                | 接頭語  | 記号 |
|-------------------|------|----|
| 10 <sup>18</sup>  | エクサ  | E  |
| 10 <sup>15</sup>  | ペタ   | P  |
| 10 <sup>12</sup>  | テラ   | T  |
| 10 <sup>9</sup>   | ギガ   | G  |
| 10 <sup>6</sup>   | メガ   | M  |
| 10 <sup>3</sup>   | キロ   | k  |
| 10 <sup>2</sup>   | ヘクト  | h  |
| 10 <sup>1</sup>   | デカ   | da |
| 10 <sup>-1</sup>  | デシ   | d  |
| 10 <sup>-2</sup>  | センチ  | c  |
| 10 <sup>-3</sup>  | ミリ   | m  |
| 10 <sup>-6</sup>  | マイクロ | μ  |
| 10 <sup>-9</sup>  | ナノ   | n  |
| 10 <sup>-12</sup> | ピコ   | p  |
| 10 <sup>-15</sup> | フェムト | f  |
| 10 <sup>-18</sup> | アト   | a  |

(注)

- 表1-5は「国際単位系」第5版, 国際度量衡局1985年刊行による。ただし, 1eVおよび1uの値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里, ノット, アール, ヘクトールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは, JISでは流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリに分類されている。
- E C閣僚理事会指令では bar, barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリに入れている。

## 換算表

| 力 | N(=10 <sup>5</sup> dyn) | kgf      | lbf      |
|---|-------------------------|----------|----------|
|   | 1                       | 0.101972 | 0.224809 |
|   | 9.80665                 | 1        | 2.20462  |
|   | 4.44822                 | 0.453592 | 1        |

粘度 1 Pa·s(N·s/m<sup>2</sup>)=10 P (ポアズ)(g/(cm·s))

動粘度 1 m<sup>2</sup>/s=10<sup>4</sup>St(ストークス)(cm<sup>2</sup>/s)

| 圧 | MPa(=10bar)              | kgf/cm <sup>2</sup>      | atm                      | mmHg(Torr)              | lbf/in <sup>2</sup> (psi) |
|---|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------------|
|   | 1                        | 10.1972                  | 9.86923                  | 7.50062×10 <sup>3</sup> | 145.038                   |
| 力 | 0.0980665                | 1                        | 0.967841                 | 735.559                 | 14.2233                   |
|   | 0.101325                 | 1.03323                  | 1                        | 760                     | 14.6959                   |
|   | 1.33322×10 <sup>-4</sup> | 1.35951×10 <sup>-3</sup> | 1.31579×10 <sup>-3</sup> | 1                       | 1.93368×10 <sup>-2</sup>  |
|   | 6.89476×10 <sup>-3</sup> | 7.03070×10 <sup>-2</sup> | 6.80460×10 <sup>-2</sup> | 51.7149                 | 1                         |

| エネルギー・仕事・熱量 | J(=10 <sup>7</sup> erg)   | kgf·m                     | kW·h                      | cal(計量法)                  | Btu                       | ft·lbf                    | eV                       |
|-------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|--------------------------|
|             | 1                         | 0.101972                  | 2.77778×10 <sup>-7</sup>  | 0.238889                  | 9.47813×10 <sup>-4</sup>  | 0.737562                  | 6.24150×10 <sup>18</sup> |
|             | 9.80665                   | 1                         | 2.72407×10 <sup>-6</sup>  | 2.34270                   | 9.29487×10 <sup>-3</sup>  | 7.23301                   | 6.12082×10 <sup>19</sup> |
|             | 3.6×10 <sup>6</sup>       | 3.67098×10 <sup>5</sup>   | 1                         | 8.59999×10 <sup>5</sup>   | 3412.13                   | 2.65522×10 <sup>6</sup>   | 2.24694×10 <sup>25</sup> |
|             | 4.18605                   | 0.426858                  | 1.16279×10 <sup>-6</sup>  | 1                         | 3.96759×10 <sup>-3</sup>  | 3.08747                   | 2.61272×10 <sup>19</sup> |
|             | 1055.06                   | 107.586                   | 2.93072×10 <sup>-4</sup>  | 252.042                   | 1                         | 778.172                   | 6.58515×10 <sup>21</sup> |
|             | 1.35582                   | 0.138255                  | 3.76616×10 <sup>-7</sup>  | 0.323890                  | 1.28506×10 <sup>-3</sup>  | 1                         | 8.46233×10 <sup>18</sup> |
|             | 1.60218×10 <sup>-19</sup> | 1.63377×10 <sup>-20</sup> | 4.45050×10 <sup>-26</sup> | 3.82743×10 <sup>-20</sup> | 1.51857×10 <sup>-22</sup> | 1.18171×10 <sup>-19</sup> | 1                        |

1 cal= 4.18605J (計量法)  
 = 4.184J (熱化学)  
 = 4.1855J (15°C)  
 = 4.1868J (国際蒸気表)  
 仕事率 1 PS(仏馬力)  
 = 75 kgf·m/s  
 = 735.499W

| 放射能 | Bq                   | Ci                        |
|-----|----------------------|---------------------------|
|     | 1                    | 2.70270×10 <sup>-11</sup> |
|     | 3.7×10 <sup>10</sup> | 1                         |

| 吸収線量 | Gy   | rad |
|------|------|-----|
|      | 1    | 100 |
|      | 0.01 | 1   |

| 照射線量 | C/kg                  | R    |
|------|-----------------------|------|
|      | 1                     | 3876 |
|      | 2.58×10 <sup>-4</sup> | 1    |

| 線量当量 | Sv   | rem |
|------|------|-----|
|      | 1    | 100 |
|      | 0.01 | 1   |

バイオインフォマティクス整備！タンパク質立体構造予測システム構築！

**R100**

古紙配合率100%  
白紙度70%再生紙を使用しています