

産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター

セマンティックWEB 解析サービス(SIO 版)

ユーザーマニュアル

1. Sync 同期型解析サービスについて	1
1.0. Sync 同期型解析サービスの利用方法	1
1.1. Blast	5
1.1.1. 入力 RDF の準備	5
1.1.2. 実行コマンド	7
1.1.3. 実行結果	8
1.2. CentroidFold.....	18
1.2.1. 入力 RDF の準備	18
1.2.2. 実行コマンド	21
1.2.3. 実行結果	21
1.3. ClustalW.....	23
1.3.1. 入力 RDF の準備	23
1.3.2. 実行コマンド	25
1.3.3. 実行結果	25
1.4. IPknot.....	27
1.4.1. 入力 RDF の準備	27
1.4.2. 実行コマンド	29
1.4.3. 実行結果	29
1.5. Mafft.....	31
1.5.1. 入力 RDF の準備	31
1.5.2. 実行コマンド	33
1.5.3. 実行結果	33
1.6. Psipred.....	35
1.6.1. 入力 RDF の準備	35
1.6.2. 実行コマンド	36
1.6.3. 実行結果	37
1.7. Raccess	39
1.7.1. 入力 RDF の準備	39
1.7.2. 実行コマンド	41
1.7.3. 実行結果	42
1.8. RactIP.....	44
1.8.1. 入力 RDF の準備	44
1.8.2. 実行コマンド	46
1.8.3. 実行結果	46
1.9. Wolfpsort.....	49
1.9.1. 入力 RDF の準備	49

1.9.2.	実行コマンド	50
1.9.3.	実行結果	51
2.	Async 非同期型解析サービスについて	53
2.0.	Async 同期型解析サービスの利用方法	53
2.1.	Last	55
2.1.1.	入力 RDF の準備	55
2.1.2.	実行コマンド	58
2.1.3.	実行結果	59
2.2.	Modelling	61
2.2.1.	入力 RDF の準備	61
2.2.2.	実行コマンド	68
2.2.3.	実行結果	70
2.3.	PoodleL	80
2.3.1.	入力 RDF の準備	80
2.3.2.	実行コマンド	81
2.3.3.	実行結果	83
2.4.	PoodleS	86
2.4.1.	入力 RDF の準備	86
2.4.2.	実行コマンド	87
2.4.3.	実行結果	89
2.5.	Rassie	92
2.5.1.	入力 RDF の準備	92
2.5.2.	実行コマンド	94
2.5.3.	実行結果	96
おわりに		98

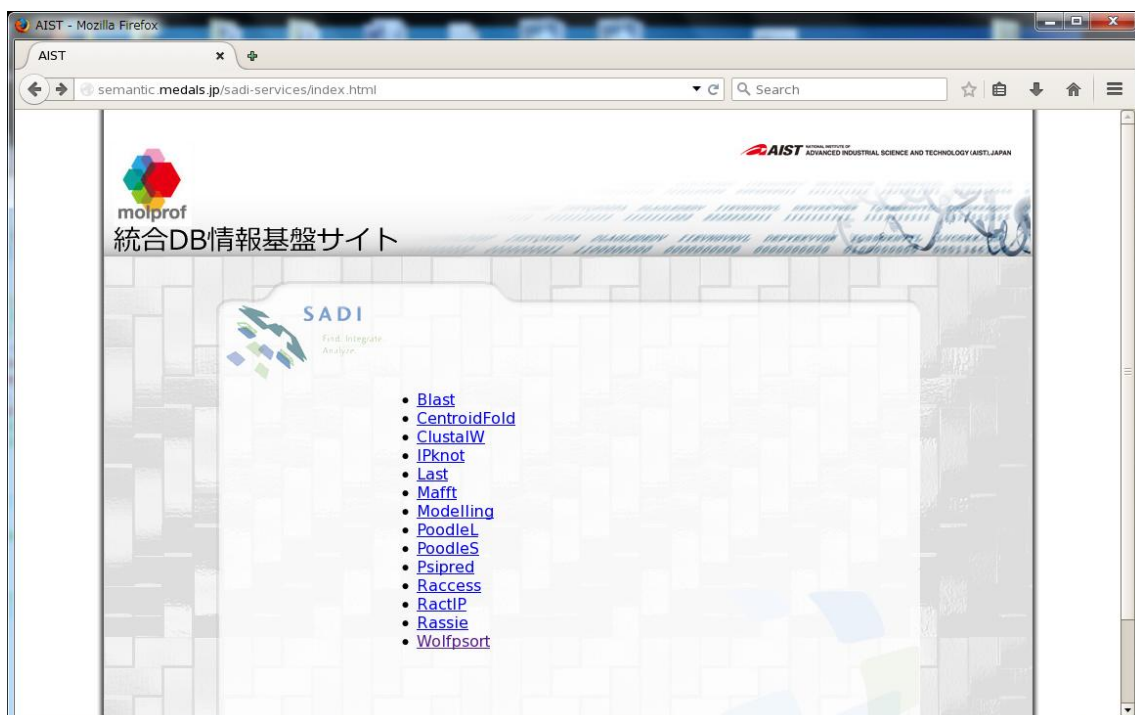
解析サービス名		入力 RDF を定義した OWL クラス
Blast	S	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#BlastInput
CentroidFold	S	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#CentroidFoldInput
ClustalW	S	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#ClustalWInput
IPknot	S	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#IPknotInput
Mafft	S	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#MafftInput
Psipred	S	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#PsiPredInput
Raccess	S	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#RaccessInput
RactIP	S	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#RactIPInput
Wolfpsort	S	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#WolfPsortInput
Last	A	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#LastInput
Modelling	A	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#ModellingInput
PoodleL	A	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#PoodleLInput
PoodleS	A	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#PoodleSInput
Rassie	A	http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#RassieInput

表 1-A 入力となる RDF を定義した OWL クラス： S（同期型），A（非同期型）

1. Sync 同期型解析サービスについて

1.0. Sync 同期型解析サービスの利用方法

まず、<http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/index.html> にアクセスすると、利用可能な SADI の解析サービス一覧が表示される。



SADI サービス

このうち、Sync 同期型解析サービス(Blast, CentroidFold, ClustalW, IPknot, Mafft, Psipred, Raccess, RactIP, Wolfpsort)について、以下の cURL コマンドを用いて各解析サービスを実行する。

```
% curl --data-binary @入力 RDF 名
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/解析サービス名 (表 1-A 参照) -o 出力 RDF 名
```

例えば、input.rdf を入力 RDF として用意し、Wolfpsort を実行、その実行結果を output.rdf という RDF で出力する場合、以下のコマンドとなる。

```
% curl --data-binary @input.rdf
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Wolfpsort -o output.rdf
```

用意する入力 RDF のフォーマットは以下の通りである。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">
  <aistls:WolfPsortInput
    rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/wolfpsort.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <aistls:Kingdom rdf:about="#plant"/>
    </sio:SIO_000230>
    <aistls:SIO_000230>
      <sio:SIO_010015>
        <sio:SIO_000300>
          >sp|P35413|GPR3_MOUSE G-protein coupled receptor 3 OS=Mus musculus GN=Gpr3 PE=2 SV=1
          MMWGAGSSMAWFSAGSGSVNVSSVDPVEEPTGTPATLLPSPRAWVVLCSIGTLVSCENAL
          VVAIIVGTPAFRAPMFLLVGSLAVADLLAGLGLVLHFAADFCIGSPMSLMLVGVLAMAF
          TASIGSLLAITVDRLSLYNALTYSETTVTRTYVMLALVWVGALGLGLVPVLAWNCRDG
          LTTCGVVYPLSKNHLVVLAIAFFMVFGIMQLYAQICRIVCRHAQQIALQRHLLPASHYV
          ATRKGIATLAVVLGAFAACWLPFTVYCLLGADSPRLYTYLTLLPATYNSMINPVIYAFR
          NQDVQKVLWAICCCSTSKIPFRSRSPSDV
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_010015>
    </aistls:SIO_000230>
  </aistls:WolfPsortInput>
</rdf:RDF>
```

Wolfpsort 用入力 RDF

- ・ 黒文字部分
→RDF の開始終了タグ(各解析サービス共通)
- ・ 緑文字部分
→名前空間指定(各解析サービス共通)
- ・ 赤文字部分

→入力 RDF を定義した OWL クラス(表 1-A 参照)及び URI(任意)を指定

<Wolfpsort の場合>

入力 RDF を定義した OWL クラス : aistls:WolfPsortInput

URI(任意) : <http://www.molprof.jp/ontologies/wolfpsort.rdf#1>

- 青文字部分

→各解析サービス実行に必要なトリプルを指定

<Wolfpsort の場合>

=界情報=

主語 : WolfPsortInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 : Kingdom(rdf:about="#plant"(animal、plant、fungi から一つ選択))

=アミノ酸配列=

主語 : WolfPsortInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_010015 (protein sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (アミノ酸配列)

なお、入力用 RDF のサンプルファイルを入手することができる。SADI サービスページ(<http://togo.medals.jp/semantic.html#2>)にアクセスし、Wolfpsort の入力用 RDF を入手する場合であれば wolfpsortInput (SIO)をクリックする。



SADI サービスページ

実行結果が格納される出力 RDF のフォーマットは以下の通りである。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">
  <aistls:WolfPsortOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/wolfpsort.rdf#2">
    <sio:SIO_000229>
      <sio:SIO_000785>
        <sio:SIO_000300># k used for kNN is: 14
        sp|P35413|GPR3_MOUSE cyto 7, extr 3, plas 2, E.R. 2, E.R._plas 2
      </sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_000785>
  </sio:SIO_000229>
</aistls:WolfPsortOutput>
</rdf:RDF>
```

Wolfpsort 用出力 RDF

- ・ 赤文字部分
→出力 RDF を定義した OWL クラス(表 1-A 参照)及び入力 RDF で指定した URI
- ・ 青文字部分
→各解析サービスの実行結果がトリプル形式で格納

<Wolfpsort の場合>

主語 : WolfPsortOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : SIO_000785 (answer)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (WolfPsort 実行結果)

*cURL をインストールする必要がある際 (WINDOWS など) は、下記のサイトよりダウンロード可能です。

<http://curl.haxx.se/>



1.1. Blast

1.1.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で Blast の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は BlastInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
<aistls:BlastInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/blast.rdf#1">
```

- 問い合わせ配列のトリプルを定義する。

主語 : BlastInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000030 (biopolymer sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (問い合わせ配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_000030>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      問い合わせ配列
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_000030>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- Blast プログラム名のトリプルを定義する。

主語 : BlastInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : BlastProgram (rdf:about="#blastp"(blastp、blastn、blastx、
tblastn、tblastx のうち一つを選択))

```
<sio:SIO_000230>
```

```
<aistls:BlastProgram rdf:about="#blastp"/>
</sio:SIO_000230>
```

- ターゲットデータベース名のトリプルを定義する。

主語 : BlastInput

述語 : SIO_000300 (has input)

目的語 (主語) : BlastDatabase

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : 文字列(SWISS, TREMBL, UNIPROT, PROTEIN, PDB etc.)

*その他データベース名は DDBj サイト参照のこと

<http://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi>

```
<sio:SIO_000230>
  <aistls:BlastDatabase>
    <sio:SIO_000300>
      SWISS
    </sio:SIO_000300>
  </aistls:BlastDatabase>
</sio:SIO_000230>
```

- E-value のトリプルを定義する。

主語 : BlastInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_001021 (expected value)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : double (E-value)

```
<sio:SIO_000230>
  <sio:SIO_001021>
    <sio:SIO_000300>
      1.0e-30
    </sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_001021>
</sio:SIO_000230>
```

この定義に基づいて Blast の入力 RDF を作成すると以下となる。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistls.sio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">

  <aistls:BlastInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/blast.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_000030>
        <sio:SIO_000300>
          >sp|P35413|GPR3_MOUSE G-protein coupled receptor 3 OS=Mus musculus GN=Gpr3 PE=2 SV=1
          MMWGAGSSMAWFSAGSGSVNVSSVDPVEEPTGPATLLPSPRAWDVVLCSISGTLVSCENAL
          VVAIIIVGTPAFRAPMFLVGSIAVADLLAGLGLVLHFAADFCIGSPMSMLVGVLAMAF
          TASIGSLLAITVDRLSLYNALTYSETTVTRTYVMLALVWVGALGLGLVPVLAWNCRDG
          LTTGCVVYPLSKNHLVLAIAFFMVFGIMLQLYAQICRIVCRHAQQIALQRHLLPASHYV
          ATRKGIATLAVVLGAFAACWLPFTVYCLLGADSPRLYTLTLLPATYNSMINPVIYAFR
          NQDVQKVLWAICCCCSTSKIPFRSRSPSDV
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000030>
    </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <aistls:BlastDatabase>
        <sio:SIO_000300>nr</sio:SIO_000300>
      </aistls:BlastDatabase>
    </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <aistls:BlastProgram rdf:about="#blastp"/>
    </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_001021>
        <sio:SIO_000300>1.0e-30</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_001021>
    </sio:SIO_000230>
  </aistls:BlastInput>
</rdf:RDF>
```

Blast 用入力 RDF

1.1.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

% curl --data-binary @入力 RDF 名

http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Blast -o 出力 RDF 名

1.1.3. 実行結果

以下の定義に従い、Blast の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

<rdf:RDF

xmlns:rdf “http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#”

xmlns:aistls “http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#”

xmlns:sio “http://semanticscience.org/resource/”>

- 主語は BlastOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものがそのまま指定される。

<aistls:BlastOutput rdf:about=”http://www.molprof.jp/ontologies/blast.rdf#1”>

- Blast のテキスト実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : BlastOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : BlastResult

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 (主語) : BlastParameter

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 (主語) : BlastFilter

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : literal (“T” or “F”)

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 (主語) : BlastMatrix

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : literal (bl62、bl50、pam250 など)

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : scoreMismatch

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : integer (数値)

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : scoreMatch

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : integer (数値)

述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : gapOpenPenalty
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (数値)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : gapExtendPenalty
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (数値)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_001021 (expected value)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : double (10e-30 など)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : BlastProgram
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : string (blastp、blastn、blastx、tblastn、tblastx)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : SIO_000176 (reference)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : string (リファレンス)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : SIO_000135 (definition)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : literal (記述)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : BlastDatabase
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : string (nr、swissprot など)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : SIO_000654 (software version label)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : literal (BLAST バージョン)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : BlastHit
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : SIO_000135 (definition)

述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : literal (記述)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : BlastAlignment
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : query
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : SIO_000030 (biopolymer
 sequence)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : string (問い合わせ配列)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : frame
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (整数値)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000791 (sequence start
 position)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (配列開始番号)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000792 (sequence end
 position)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (配列終了番号)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : subject
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : SIO_000030 (biopolymer
 sequence)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : string (問い合わせ配列)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : sequenceLength
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (配列長)

述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : frame
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (整数値)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000791 (sequence start
 position)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (配列開始番号)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000792 (sequence end
 position)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (配列終了番号)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : SIO_010068 (pairwise sequence
 alignment)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : string (アラインメント)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : bitScore
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : double (570.852 など)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_001021 (expected value)
 述語 : SIO_000300 (has vlaue)
 目的語 : double (10e-30 など)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : numberOfGap
 述語 : SIO_000300 (has vlaue)
 目的語 : integer (ギャップの数)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : numberOfIdentity
 述語 : SIO_000300 (has vlaue)
 目的語 : integer (一致数)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : alignmentLength
 述語 : SIO_000300 (has vlaue)
 目的語 : integer (アラインメント長)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : score
 述語 : SIO_000300 (has vlaue)
 目的語 : double (1422.0 など)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : numberOfPositive
 述語 : SIO_000300 (has vlaue)
 目的語 : integer (positive 数)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : sequenceLength
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (配列長)
 述語 : SIO_000216 (has attribute)
 目的語 (主語) : SIO_000794 (count)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (ヒットカウント数)
 述語 : SIO_000673 (has unique identifier)
 目的語 (主語) : SIO_000729 (record identifier)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : Literal (ヒット ID)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : iteration
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (iteration 数)
 述語 : SIO_000673 (has unique identifier)
 目的語 (主語) : SIO_000675 (unique identifier)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (ユニーク ID)

<sio:SIO_000229>
 <aistls:BlastResult>
 <sio:SIO_000008>
 <aistls:BlastHit>
 <sio:SIO_000008>

```

<aistls:BlastAlignment>
  <sio:SIO_000216>
    <aistls:numberOfPositive>
      <sio:SIO_000300>503</sio:SIO_000300>
    </aistls:numberOfPositive>
  </sio:SIO_000216>
  <sio:SIO_000008>
    <aistls:query>
      <sio:SIO_000008>
        <sio:SIO_000030>
          <sio:SIO_000300>
            問い合わせヒット配列
          </sio:SIO_000300>
        </sio:SIO_000030>
      </sio:SIO_000008>
    </aistls:query>
    <sio:SIO_000216>
      <aistls:frame>
        <sio:SIO_000300>
          1
        </sio:SIO_000300>
      </aistls:frame>
    </sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000216>
      <sio:SIO_000792>
        <sio:SIO_000300>
          613
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000792>
    </sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000216>
      <sio:SIO_000791>
        <sio:SIO_000300>
          66
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000791>
    </sio:SIO_000216>
  </sio:SIO_000008>
</aistls:BlastAlignment>

```

```

        </aistls:query>
    </sio:SIO_000008>
    <sio:SIO_000216>
        <aistls:alignmentLength>
            <sio:SIO_000300>551</sio:SIO_000300>
        </aistls:alignmentLength>
    </sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000216>
        <aistls:score>
            <sio:SIO_000300>828.0</sio:SIO_000300>
        </aistls:score>
    </sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000008>
        <sio:SIO_010068>
            <sio:SIO_000300>
                アラインメント
            </sio:SIO_000300>
        </sio:SIO_010068>
    </sio:SIO_000008>
    <sio:SIO_000216>
        <aistls:numberOfGap>
            <sio:SIO_000300>11</sio:SIO_000300>
        </aistls:numberOfGap>
    </sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000216>
        <aistls:bitScore>
            <sio:SIO_000300>747.881</sio:SIO_000300>
        </aistls:bitScore>
    </sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000216>
        <aistls:numberOfIdentity>
            <sio:SIO_000300>503</sio:SIO_000300>
        </aistls:numberOfIdentity>
    </sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000216>
        <sio:SIO_001021>

```

```

        <sio:SIO_000300>0.0</sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_001021>
</sio:SIO_000216>
<sio:SIO_000008>
    <aistls:subject>
        <sio:SIO_000008>
            <sio:SIO_000030>
                <sio:SIO_000300>
                    ターゲットヒット配列
                </sio:SIO_000300>
            </sio:SIO_000030>
        </sio:SIO_000008>
    <sio:SIO_000216>
        <aistls:frame>
            <sio:SIO_000300>
                1
            </sio:SIO_000300>
        </aistls:frame>
    </sio:SIO_000216>
<sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000792>
        <sio:SIO_000300>
            543
        </sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_000792>
</sio:SIO_000216>
<sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000791>
        <sio:SIO_000300>
            1
        </sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_000791>
</sio:SIO_000216>
</aistls:subject>
</sio:SIO_000008>
</aistls:BlastAlignment>

```

```

</sio:SIO_000008>
<sio:SIO_000216>
  <aistls:sequenceLength>
    <sio:SIO_000300>8162</sio:SIO_000300>
  </aistls:sequenceLength>
</sio:SIO_000216>
<sio:SIO_000008>
  <sio:SIO_000729>
    <sio:SIO_000300>XM_004010367</sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000729>
</sio:SIO_000008>
<sio:SIO_000008>
  <sio:SIO_000135>
    <sio:SIO_000300>PREDICTED: Ovis aries
chromodomain helicase DNA binding protein 8 (CHD8), mRNA</sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000135>
</sio:SIO_000008>
<sio:SIO_000216>
  <sio:SIO_000794>
    <sio:SIO_000300>58</sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000794>
</sio:SIO_000216>
</aistls:BlastHit>
</sio:SIO_000008>
</aistls:BlastResult>
</sio:SIO_000300>

```

Blast の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">
  <aistls:BlastOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/blast.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <aistls:BlastResult>
        <sio:SIO_000008>
          <aistls:BlastHit>
            <sio:SIO_000008>
              <aistls:BlastAlignment>
                <sio:SIO_000008>
                  <aistls:subject>
                    <sio:SIO_000008>
                      <sio:SIO_000030>

<sio:SIO_000300>QLPSGPQGLLRSAVNPWDVLLCVSGTVIAGENAL-VVALIASTPALRTPMFVLVGLATADLLAGCGLILH
FVFQYLPSETVSLLMVGFLVASFA-ASVSSLLAITVDRYLSVYNALTYYSRRTLLGVHLLLAATWTVSLGLGLMPVLGWNCL-AEQ
ATCSVVRPLTRSHVALLSAAFFAVFGIMLHLYVRICQVVRHAHQIALQQHCLAPPH-LAATRKGVGTLAVVLGTFGASWLPFAIYC
VVGSRREDPAVYTYATLLPATYNSMINPIIYAFR-NQEIQRALWLLFCGCSQSKVPFRSRSPSEV</sio:SIO_000300>
                </sio:SIO_000030>
              </sio:SIO_000008>
            <sio:SIO_000216>
              <aistls:frame>
                <sio:SIO_000300>0</sio:SIO_000300>
              </aistls:frame>
            </sio:SIO_000216>
          <sio:SIO_000216>
            <sio:SIO_000792>
              <sio:SIO_000300>365</sio:SIO_000300>
            </sio:SIO_000792>
          </sio:SIO_000216>
        <sio:SIO_000216>
          .....
          .....
          </sio:SIO_000216>
        <sio:SIO_000008>
          <sio:SIO_000729>
            <sio:SIO_000300>XP_005529726</sio:SIO_000300>
          </sio:SIO_000729>
        </sio:SIO_000008>
      <sio:SIO_000008>
        <sio:SIO_000135>
          <sio:SIO_000300>PREDICTED: G-protein coupled receptor 12-like [Pseudopodoces
humilis]</sio:SIO_000300>
        </sio:SIO_000135>
      </sio:SIO_000008>
    <sio:SIO_000216>
      <sio:SIO_000794>
        <sio:SIO_000300>60</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000794>
    </sio:SIO_000216>
  </aistls:BlastHit>
</sio:SIO_000008>
</aistls:BlastResult>
</sio:SIO_000229>
</aistls:BlastOutput>
</rdf:RDF>
```

Blast 出力結果

1.2. CentroidFold

1.2.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で CentroidFold の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/"
```

- 主語は CentroidFoldInput クラス、rdf:about 属性を任意に指定する。

```
<aistls:CentroidFoldInput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/centroidfold
  .rdf#1">
```

- RNA 配列を入力とする場合、RNA 配列のトリプルを定義する。

主語 : CentroidFoldInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_010017 (ribonucleic acid sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (RNA 配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_010017>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      RNA 配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_010017>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- ClustalW 形式のマルチプルアラインメントを入力とする場合、ClustalW 形式マルチプルアラインメントのトリプルを定義する。

主語 : CentroidFoldInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : ClustalWMultipleAlignment

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (ClustalW 実行結果)

<sio:SIO_000230 >

<aistls:ClustalWMultipleAlignment>

<sio:SIO_000300>

ClustalW 形式マルチプルアラインメント

</sio:SIO_000300>

</aistls:ClustalWMultipleAlignment>

</sio:SIO_000230>

- コマンドラインオプションのトリプルを定義する。

主語 : CentroidFoldInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000144 (parameter)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (CentroidFold オプション)

<sio:SIO_000230>

<sio:SIO_000144>

<sio:SIO_000300>

-g 4

</sio:SIO_000300>

</sio:SIO_000144>

</sio:SIO_000230>

この定義に基づいて CentroidFold の入力 RDF を作成する。

```
(use an RNA sequence)
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  <aistls:CentroidFoldInput
    rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/centroidfold.rdf#1">
      <sio:SIO_000230>
        <sio:SIO_010017>
          <sio:SIO_000300>
>FR123027|AF375583|transfer messenger RNA (tmRNA), 10Sa RNA|tmRNA|u1607 NONCODE
GATAGTTCGAGCTTGATTTGCGAGTCGGGGGATCGTCCTCGTTATCAACGTCAAAGCCAATAATAACTG
GCAAAGAAAAACAAACCTAGCTTTTCGCTGCCTAATAAGCAGTAGCATAGCTGATCCTCCGTGCATCGCC
CATGTGCTACGGTAAGGGTCTCACTCTAAGTGGGCTACACTAGTTAATCTCCGTCTGAGGTTAAATAGAA
GAGCTTAATCAGACTAGCTGAATGGAAGCCTGTTACCGGGCTGATGTTTATGCGAAATGCTAATACGGTG
ACTACGCTCGTAGATATTCAAGTGCCGATATTCTGGACGT
          </sio:SIO_000300>
        </sio:SIO_010017>
      </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_000144>
        <sio:SIO_000300>-g 4</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000144>
    </sio:SIO_000230>
  </aistls:CentroidFoldInput>
</rdf:RDF>

(use Multiple alignment)
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  <aistls:CentroidFoldInput
    rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/centroidfold.rdf#2">
      <sio:SIO_000230>
        <aistls:ClustalWMultipleAlignment>
          <sio:SIO_000300>
CLUSTAL W (1.83) multiple sequence alignment
FR167351|CR382122_CR382124_CR3      GGTTC AATTCCCCGTCGCGGAG---
FR376599|AE016814_AE016815_AE0      GGTTC AATTCCCCGTCGCGGAG---
CR382135_CR382136_CR382137_CR3      GGTTC AATTCCCCGTCGCGGAG---
FR139547|J03573|transfer            GGTTC AATTCCCCGTCGGGGAG---
AJ347710_Y08491|transfer            GGTTC GATCCCCGCAAGAGAG---
                                   ** * * * * *
          </sio:SIO_000300>
        </aistls:ClustalWMultipleAlignment>
      </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_000144>
        <sio:SIO_000300>-g 4</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000144>
    </sio:SIO_000230>
  </aistls:CentroidFoldInput>
</rdf:RDF>
```

CentroidFold 用入力 RDF

1.2.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

```
% curl --data-binary @入力 RDF 名  
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/CentroidFold -o 出力 RDF 名
```

1.2.3. 実行結果

以下の定義に従い、CentroidFold の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF  
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"  
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"  
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```
- 主語は CentroidFoldOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものがそのまま指定される。

```
<aistls:CentroidFoldOutput  
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/centroidfold.rdf#1">
```
- CentroidFold のテキスト実行結果のトリプルは以下となる。
主語 : CentroidFoldOutput
述語 : SIO_000229 (has output)
目的語 (主語) : secondaryStructureModel
述語 : SIO_000300 (has value)
目的語 : string (RNA2 次構造)

```
<sio:SIO_000229>  
  <aistls:secondaryStructureModel>  
    <sio:SIO_000300>  
      RNA2 次構造  
    </sio:SIO_000300>  
  </aistls:secondaryStructureModel>  
</sio:SIO_000229>
```

- CentroidFold の PNG 画像->Base64 変換結果のトリプルは以下となる。

主語 : CentroidFoldOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : Base64

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (PNG 画像->Base64 変換結果)

<sio:SIO_000229>

<aistls:Base64>

<sio:SIO_000300>

PNG 画像->Base64 変換結果

</sio:SIO_000300>

</aistls:Base64>

</sio:SIO_000229>

*入力 RDF ファイルの<sio:SIO_000144>に”-noimage”を追加すると、この情報は出力されない。

CentroidFold の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">
  <aistls:CentroidFoldOutput
rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/centroidfold.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <aistls:secondaryStructureModel>
        <sio:SIO_000300>>FR014095|AJ316556|transfer
UCCGYGAUAGUUUAAUGGUYAGAAUKSGCGCYUGUCRCGUGCCAGAUCCGGGUUCAAUCCCCGUCGCGGMG---
(((((((.....((((.....))))....((((.....))))))))....
(g=4,th=0.2,e=-14.5964)
      </sio:SIO_000300>
    </aistls:secondaryStructureModel>
  </sio:SIO_000229>
</aistls:CentroidFoldOutput>
<aistls:Base64/>
</rdf:RDF>
```

CentroidFold 出力結果

1.3. ClustalW

1.3.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で ClustalW の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は ClustalWInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
  <aistls:ClustalWInput
```

```
    rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/clustalw.rdf#1">
```

- 配列のトリプルを定義する。

主語 : ClustalWInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000030 (biopolymer sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Multi-FASTA 配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_000030>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      Multi-FASTA 配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_000030>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- コマンドラインオプションのトリプルを定義する。

主語 : ClustalWInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000144 (parameter)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (ClustalW オプション)

```

<sio:SIO_000230>
  <sio:SIO_000144>
    <sio:SIO_000300>
      -GAPOPEN=10 -GAPEXT=0.5
    </sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000144>
</sio:SIO_000230>

```

この定義に基づいて ClustalW の入力 RDF を作成する。

```

<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">

  <aistls:ClustalWInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/clustalw.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_000030>
        <sio:SIO_000300>
          >1LYLA
          FNDELNRNRREKLAALRQQGVAFPNDFRRDHTSDQLHEEFDAKDNQELESNIEVSVAGRM
          MTRRIMGKASFVTIQDVGGRIQLYVARDSLPEGVYNDQFKKWDLGDIIGARGTLFKTQTG
          ELSIHCTELRLLTKALRPLPDQEVRYRQRYLDLIANDKSRQTFVVRSKILAAIRQFMVAR
          GFMEVETPMMQVIPGGASARPFITHHNALDLDMYLRIAPELYLKRLVVGGFERVFEINRN
          FRNEGISVRHNPEFTMMELYMAYADYHDLIELTESLFRTLAQEVLGTTKVITYGEHVDFG
          KPFEKLTMRBAIKKYRPETDMADLDNFDAKALAESIGITVEKSWGLGRIVTEIFDEVAE
          AHLIQPTFITEYPAEVSPLARRNDVNPEITDRFEFFIGGREIGNGFSELNDAEDQAERFQ
          EQVNAKAAGDDEAMFYDEDYVTALEYGLPPTAGLGIGIDRMIMLFTNSHTIRDVILFPAM
          RP
          >1B8AA
          MYRTHYSSEITEELNGQVKVAGVWVEVKDLGGIKFLWIRDRDGIVQITAPKKKVDPELF
          KLIPKLRSEDVAVEGVNVNTPKAKLGFEILPEKIVVLNRAETPLPLDPTGKVKAEILDTR
          LNNRFMDLRRPEVMAIFKIRSSVFKAVRDFFHENGFIETPKIIATATEGGTELFPMKY
          FEEDAFLAESPQLYKEIMMASGLDRVYEIAPIFRAEEHNTTRHLNEAWSIDSEMAFIEDE
          EEVMSFLERLVAHAINYVREHNAKELDILNFELEEPKLPFRVSYDKALEILGDLGKEIP
          WGEDIDTEGERLLGKYMMENENAPLYFLYQYPSEAKPFYIMKYDNKPEICRAFDLEYRGV
          EISSGGQREHRHDILVEQIKEKGLNPESFEFYLKAFRYGMPPHGGFGLGAERLIKQMLDL
          PNIREVILFPRDRRLTP
          >B64744 9209 proline--tRNA ligase (EC 6.1.1.15) - Escherichia coli
          MRTSQYLLSTLKETPADAEVISHQLMLRAGMIRKLASGLYTWLPTGVRVLKKVENIVREE
          MNAGAIEVSMPPVQPADLWQESGRWEQYGPELLRFVDRGERPFVLGPTHEEVIDTLIRN
          ELSSYQLPLNFIYQIQTKFRDEVPRPFGVMRSREFLMKDAYSFHTSQESLQETYDAMYAA
          YSKIFSRMGLDFRAVQADTGSIGGSASHEFQVLAQSGEDDVVFSDTSDYAANIELAEIA
          PKEPRAAATQEMTLVDTPNAKTIAELVEQFNLPIEKTVKTLVVKAVEGSSFPQVALLVRG
          DHELNEVKAEKLPQVASPLTFATEEEIRAVVKAGPGSLGPVNMPPIPVVIDRTVAAMSDFA
          AGANIDGKHYPGINWDRDVATPEVADIRNVVAGDPSPDGQGRLLIKRGIEVGHIFQLGTK
          YSEALKASVQGEDGRNQILTMGCYGIGVTRVVAAAIEQNYDERGIVWPDATAPFQVAILP
          MNMHKSFRVQELAEKLYSELRAQGI EVLLDDRKERPGVMFADMELIGIPHTIVLGDRNLD
          NDDIEYKYRRNGEKQLIKTGDIVEYLVKQIKG
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000030>
    </sio:SIO_000230>
  </sio:SIO_000230>
  <sio:SIO_000144>
    <sio:SIO_000300>-TYPE=PROTEIN -GAPOPEN=10 -GAPEXT=0.5</sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000144>
</sio:SIO_000230>
</aistls:ClustalWInput>
</rdf:RDF>

```

ClustalW 用入力 RDF

1.3.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

```
% curl --data-binary @入力 RDF 名
```

```
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/ClustalW -o 出力 RDF 名
```

1.3.3. 実行結果

以下の定義に従い、ClustalW の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は ClustalWOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものがそのまま指定される。

```
<aistls:ClustalWOutput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/clustalw.rdf#1">
```

- ClustalW のテキスト実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : ClustalWOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : ClustalWMultipleAlignment

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (ClustalW 実行結果)

```
<sio:SIO_000229>
```

```
  <aistls:ClustalWMultipleAlignment>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      ClustalW 実行結果
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </aistls:ClustalWMultipleAlignment>
```

```
</sio:SIO_000229>
```

ClustalW の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  <aistls:ClustalWOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/clustalw.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <aistls:ClustalWMultipleAlignment>
        <sio:SIO_000300>CLUSTAL 2.0.9 multiple sequence alignment

1ATIA      -----AASSLDELVALCKRRGFIFQSSE
E64328     -----MEKDIYEKIMDLAKRRGYLWSSFE
1B8AA      -----MYRTHYSSEITEEL
1ASZB      -----EDTAKDNYGKLP LIQSRSDRTGQKRVKFVDLDEAKD
1SESA      -----MVDLKLRL
A26400     -----MLDPNLL
JT0942     -----MRTEYCGQLRLSHVGQVTL CGWVNRRRDLGSLIFIDM
1LYLA      -----FNDELNRNRREKLAALRQQGVAFPNDFR
S56383     -----
G64424     -----MIVMFQ
1ADJA      -----TAR
B64744     -----MRTSQYLLSTLKETPADAEVISHQLMLRAGMIRK
E64454     -----LEFSEWYS DILEKAEIYDVRY
1PYSA      -----
y|Pyrococcus  -----MRLGYNEKLVLLKLAE LKNATVEEL
D64449     -----LRDNMKMLLIHSDYLEFEAKEKTKIAEETENLKGK LDECLACFIAVEREDENNP
G64930     MPVITLPDGSQRHYDHAVSPMDVALDIGPGLAKACIAGRVNGELVDACDLIENDAQLSII
.....
.....
.....
.....
.....

G64424      KKVIIVGEKELNEGKVTVKDMITGEQKLIGIDELTNF-----
1ADJA      AFAGFLGEDEL RAGEVTLKRLATGEQVRLSREEVPGYLLQALG-----
B64744      PHTIVLGDRNL DNDIEYKYRRNGEKQLIKTG DIVEYLVKQIKG-----
E64454      VILVPFKEEIYN EEELEEKVEATILGETEYKGNKYIAIAKTY-----
1PYSA      GLGVERLAMLR YGIPDIRYFFGGRLKFLEQFKGVL-----
y|Pyrococcus  GIKVPVIAWGI GIDRLAMFKLGVD DIRYLF SYDLKWLRESKLIW-----
D64449      PYVVIGDEEMES DKLTVTIREKSTLKKPYKEKMTLDELIERIKKETANYPYRPLPLPIR
G64930      PYMLVCGDKVEVESGKVAVRTRRGKDLGSM DVNEVIEKLQQEIRSRSLKQLEE-----

1ATIA      -----
E64328     -----
1B8AA      -----
1ASZB      -----
1SESA      -----
A26400     -----
JT0942     VVKKAENN
1LYLA      -----
S56383     -----
G64424     -----
1ADJA      -----
B64744     -----
E64454     -----
1PYSA      -----
y|Pyrococcus  -----
D64449     CSLQPKFH
G64930     -----
</sio:SIO_000300>
  </aistls:ClustalWMultipleAlignment>
</sio:SIO_000229>
</aistls:ClustalWOutput>
</rdf:RDF>
```

ClustalW 出力結果

1.4. IPknot

1.4.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で IPknot の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は IPknotInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。
<aistls:IPknotInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/ipknot.rdf#1">
- RNA 配列を入力とする場合、RNA 配列のトリプルを定義する。

主語 : IPknotInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_010017 (ribonucleic acid sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (RNA 配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_010017>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      RNA 配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_010017>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- ClustalW 形式のマルチプルアラインメントを入力とする場合、ClustalW 形式マルチプルアラインメントのトリプルを定義する。

主語 : IPknotInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : ClustalWMultipleAlignment

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (ClustalW 形式マルチプルアラインメント)

```

<sio:SIO_000230>
  <aistls:ClustalWMultipleAlignment>
    <sio:SIO_000300>
      ClustalW 形式マルチプルアラインメント
    </sio:SIO_000300>
  </aistls:ClustalWMultipleAlignment>
</sio:SIO_000230>

```

- コマンドラインオプションのトリプルを定義する。

主語 : IPknotInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000144 (parameter)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (ClustalW オプション)

```

<sio:SIO_000230>
  <sio:SIO_000144>
    <sio:SIO_000300>
      -i
    </sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000144>
</sio:SIO_000230>

```

この定義に基づいて IPknot の入力 RDF を作成する。

```

<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">

  <aistls:IPknotInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/ipknot.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_010017>
        <sio:SIO_000300>
          >MIDV
          UUCUUUUUUAGUGGCAGUAAGCCUGGAAUGGGGCGACCCAGGCGUAUGAACAUAGUGUAACGCUCUCCCC
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_010017>
    </sio:SIO_000230>
  </aistls:IPknotInput>
</rdf:RDF>

```

IPknot 用入力 RDF

1.4.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

```
% curl --data-binary @入力 RDF 名
```

```
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/IPknot -o 出力 RDF 名
```

1.4.3. 実行結果

以下の定義に従い、IPknot の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は IPknotOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものがそのまま指定される。

```
<aistls:IPknotOutput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/ipknot.rdf#1">
```

- IPknot の実行結果のトリプルは以下となる。

```
  主語 : IPknotOutput
```

```
  述語 : SIO_000229 (has output)
```

```
  目的語 (主語) : SIO_000785 (answer)
```

```
    述語 : SIO_000300 (has value)
```

```
    目的語 : string (IPknot 実行結果)
```

```
<sio:SIO_000229>
```

```
  <sio:SIO_000785>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      IPknot 実行結果
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_000785>
```

```
</sio:SIO_000229>
```

IPknot の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  <aistls:IPknotOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/ipknot.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <sio:SIO_000785>
        <sio:SIO_000300>&gt;MIDV
        UUCUUUUUAGUGGCAGUAAGCCUGGGAAUGGGGCGACCCAGGCGUAUGAACAUAGUGUAACGCUCUCCC
        .....((((((...[[[[[[(.)]]]]))....]]]]]]].
      </sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_000785>
  </sio:SIO_000229>
</aistls:IPknotOutput>
</rdf:RDF>
```

IPknot 出力結果

1.5. Mafft

1.5.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で Mafft の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlsio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は MafftInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。
<aistls:MafftInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/mafft.rdf#1">
- 配列のトリプルを定義する。

主語 : MafftInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000030 (biopolymer sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Multi-FASTA 配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_000030>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      Multi-FASTA 配列(3 つ以上の配列が必要)
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_000030>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- コマンドラインオプションのトリプルを定義する。

主語 : MafftInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000144 (parameter)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Mafft オプション)

```
<sio:SIO_000230 >
```

```

<sio:SIO_000144>
  <sio:SIO_000300>
    --retree 2 --maxiterate 0 --bl 62 --op 1.53 --ep 0.0 --clustalout
  </sio:SIO_000300>
</sio:SIO_000144>
</sio:SIO_000230>

```

この定義に基づいて Mafft の入力 RDF を作成する。

```

<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"

  <aistls:MafftInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/mafft.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_000030>
        <sio:SIO_000300>
>X02729 Methanococcus vannielli. #
tattctattaccctaccctggggaatggcttggttgaaacgccgatgaaggacgtggtaa
gctgcgataagcctagcgagcgcaacagcctttgaacctaggatttccgaatgggact
tcctacttttgaatccgtaaggattggaacgcgggggattgaagcatcttagtaccg
caggaaaagaatcaactgagattccgttagtagagcgattgaacacggatcagggcaa
actgaatcccttcggggagatgtggtgttataggccttcttttcgcctgttgagaaaag
ctgaagttgactggaacgtcacactatagaggtgaaagtcccgtaagcgcaatcgattc
aggtttgaagtgtccctgagtagcgtgcttggtatcgcgcggggaatttgggagggcatc
aactccaactctaatactgatttcaagaccgatagcgtagtagtaccgcgagggaaaagt
gaaaagcacccttaacagggtggtgaaaagagcctgaaacccaggtaggtatggaatggc
gtggcccccagggaactgttctgaaggaaacgcgtcgcaaggcggtgtacgaagaacag
agccagggttgcgtcctccgtttcgaaaaacggcgccgggagtgattgttggcgagc
ttaagatcttcacgatcgaaggcgtagggaaaccaacaagtccgcagaatcttagggac
ggggtcttaaggcccgaggtcacagcaatacgaccgaaacggcgcatcaggccggg
gcaaggtgaagtccctcaattgagggatggaggcctgcagagttgttgccgttcgaagca
ctcttctgacctcggtctagggtgaaaggccaatcgagcccgagatagctggttcccc
.....
.....
.....
aaagcggggcctcacgatccttctgaccttttgggttttaagcaggaggtgtcagaaaag
ttaccacagggataactggcttgttgccgccaagcgttcatagcgacgtcgctttttgat
ccttcgatgtcggtccttctctatcatgtgtaagcagaattcgccaagcgttgattgttc
accactaatagggaacgtgagctgggttttagaccgtcgtagacaggttagttttacc
tactgatgatgtgttgttgccatggtaatcctgctcagtagaggaacccgaggttca
gacatttgggtgatgtgcttggtgagggagccaatggggcgaagctaccatctgtgggat
tatgactgaacgcctctaagtacagaatcccgcccaggcgaacgatacggcgagcgccgg
agcctcggttggcctcgatagccggtccccgcctgtccccgcggcgggcgccccc
cctccacgcgccccgcgggagggcgcggtgccccgcgcgcgcgggacggggtccg
gtgcggagtgcccttctgctcctgggaaacggggcgcgccggaaaggcgggcgcccccctcg
ccgctacgcgacgcaggttcgtggggaacctggcgctaaccattcgtagacgacctgc
ttctgggtcggggttctgtacgtagcagagcagctccctcgctgcgatctattgaaagtc
agccctcgacacaagggtttgtc
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000030>
    </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_000144>
        <sio:SIO_000300>
          --retree 2 --maxiterate 0 --bl 62 --op 1.53 --ep 0.0 --clustalout
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000144>
    </sio:SIO_000230>
  </aistls:MafftInput>

```

Mafft 用入力 RDF

1.5.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

```
% curl --data-binary @入力 RDF 名
```

```
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Mafft -o 出力 RDF 名
```

1.5.3. 実行結果

以下の定義に従い、Mafft の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は MafftOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものがそのまま指定される。

```
<aistls:MafftOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/mafft.rdf#1">
```

- Mafft の実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : MafftOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : ClustalWMultipleAlignment

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Mafft 形式マルチプルアラインメント)

```
<sio:SIO_000229>
```

```
  <aistls:ClustalWMultipleAlignment>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      Mafft 形式マルチプルアラインメント
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </aistls:ClustalWMultipleAlignment>
```

```
</sio:SIO_000229>
```

Mafft の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">
  <aistls:MafftOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/mafft.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <aistls:ClustalWMultipleAlignment>
        <sio:SIO_000300>CLUSTAL format alignment by MAFFT FFT-NS-2 (v6.717b)

X02729      -----tattctattaccctaccctggggaatggcttggcttgaacgccgatgaag
X15364      -----cttttttatgcc--gtctgggggatggcttggcttgagtcgctgatgaag
M61738      -----ttcttacgcc--tgtcagtggaatggctcggttcggg-tgccgacgaag
M64487      ---cggcgaa-----tatccc--ggccggtggatggctcggttc--gggcgccgacgaag
M32298      -----gtgctctgctaactct--gcctagaggatggcttgggttc--gggcgccgaagaag
M64487      ---ggggcagagaacctaaagcc--gtctggtggatggctcggttcgggcgccgacgaag
X03407      -----g-tggctactgtgcc--acctggtggatagctcggttcgga-tgccgacgaag
M67497      tatatcaactggctactgtgcc--agctggtggatagctcggttcgag-agccgatgacg
X13738      -----gttggctactatgcc--agctggtggatgtctcggttcagg-cgctgatgaag
X05481      -----ggctactatgcc--aactggtgaatagctcggttcgag-tgccgatgaag
X05481      ---gcacgg-----tcaagcc--gcccgggtggatggctcggttc--gggcgccgaggaag
X14835      ---cggc-g-----ctaagcc--accggtggatggctcggttc--gggcgccgaggaag
M67495      ---taccag-gggccgaagcc--tcccgggtggatggctcggttc--gggcaccgaagaag
X05480      ---cgac-g-----acgcc--gcccgggtggatggctcggttc--gggcgccgaggaag
M67498      -----ggtcaaggt-actaagggcacgcggtggatgccttggcgccgggagggcgatgaag
X12612,     -----ggtcaagat-ggtaagggccacggtggatgcctcggc-accgagccgatgaag
X07408      tttgtggtcaagct-attaagggcgtatgggggatgtcttggatcagaaggcgatgaag
M62806      -----n-acgaagggcgcatgggggatgcctaggctctcagaggcgaagaag
X06485      -----aatcaagcgcgagaagggcggttggatgccttggcagcaagaggcgatgaag

.....
.....
.....
K00637      -----t-----
X01387      -----a-----
X53361      ctgacagagtgggtg
Y00055      t--ctgggact----
X14553      tcacaagatct----
V01159      ttttgtcggc-----
X54512      tccttagatttat--
X54004      tccttagatttat--
X16108      ttttctgattgttc
J01355      ttgtctgatttgt--
M11585      cgcacggattcgt--
X52320      cgctaagattcga--
X58118      cgcttcgattcgt--
X03680      tgattgagtttttg
X53538      atctacgatttgt--
M21017      cttgatgattcgt--
X00136      ccaagc-----
X00525      cacaagggtttgt--
X01069      cacaagggtttgt--
M11167      cacaagggtttgt-c

    </sio:SIO_000300>
  </aistls:ClustalWMultipleAlignment>
</sio:SIO_000229>
</aistls:MafftOutput>
</rdf:RDF>
```

Mafft 出力結果

1.6. Psipred

1.6.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で Psipred の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は PsiPredInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
<aistls:PsiPredInput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/psipred.rdf#1">
```

- アミノ酸配列のトリプルを定義する。

```
  主語 : PsiPredInput
```

```
  述語 : SIO_000230
```

```
  目的語 (主語) : SIO_010015 (protein sequence)
```

```
    述語 : SIO_000300 (has value)
```

```
    目的語 : string (アミノ酸配列)
```

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_010015>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      アミノ酸配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_010015>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

この定義に基づいて Psipred の入力 RDF を作成する。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">

  <aistls:PsiPredInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/psipred.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_010015>
        <sio:SIO_000300>
          >sp|P04156|PRIO_HUMAN Major prion protein OS=Homo sapiens GN=PRNP PE=1 SV=1
          MANLGCWMLVLFVATWSDLGLCKRKPGGWNTGGSRYPGQSPGGNRYPPQGGGGWGQP
          HGGGWGQPHGGGWGQPHGGGWGQPHGGGWGQGGGTHSQWNKPSKPKTNMKHMAGAAAAGA
          VVGGLGGYMLGSAMSRPIIHFGSDYEDRYRENMHRYPNQVYRPMDEYSNQNNFVHDCV
          NITIKQHTVTTTTKGENFTETDVKMMERVVEQMCITQYERESQAYYQRGSSMVLFSPPV
          ILLISFLIFLIVG
          </sio:SIO_000300>
        </sio:SIO_010015>
      </sio:SIO_000230>
    </aistls:PsiPredInput>
  </rdf:RDF>
```

Psipred 用入力 RDF

1.6.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

% curl --data-binary @入力 RDF 名

http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Psipred -o 出力 RDF 名

1.6.3. 実行結果

以下の定義に従い、Psipred の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は PsiPredOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものをそのまま指定する。

```
<aistls:PsiPredOutput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/psipred.rdf#1">
```

- Psipred の実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : PsiPredOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : SIO_000785 (answer)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Psipred 実行結果)

```
<sio:SIO_000229>
```

```
  <sio:SIO_000785>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      Psipred 実行結果
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_000785>
```

```
</sio:SIO_000229>
```

Psipred の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">
  <aistls:PsiPredOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/psipred.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <sio:SIO_000785>
        <sio:SIO_000300># PSIPRED HFORMAT (PSIPRED V2.5 by David Jones)

Conf: 965203422130431010011012789987678875689888999888869888899988
Pred: CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
AA: MANLGCWMLVLFVATWSDLGLCKRKP KPGGWNTGGSRYPGQGSPGGNRYPPQGGGGWGQP
      10      20      30      40      50      60

Conf: 88889898888898888888988888767788724334688777333143200001124
Pred: CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
AA: HGGGWGQPHGGGWGQPHGGGWGQPHGGGWGQGGGTHSQWNKPSKPKTNMKHMAGAAAAGA
      70      80      90      100      110      120

Conf: 541000354322320732104774303456665664762125411243285453031100
Pred: HHHHHHHHHHHHHHCCCECCCCCHHHHHHHHHHHCCCCCECCCHHHCCCCCEEEEE
AA: VVGGLGGYMLGSAMSRPIIHFGSDYEDRYRENMHRYPNQVYYRPMDEYSNQNNFVHDCV
      130      140      150      160      170      180

Conf: 115640033310378754333489999999876423543223465432860588569730
Pred: EEEEEEEEEEECCCCCHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHH
AA: NITIKQHTVTTTTTKGENFTETDVKMMERVVEQMCITQYERESQAYYQRGSSMVLFSPPV
      190      200      210      220      230      240

Conf: 3333668832009
Pred: HHHHHHHHHHCCC
AA: ILLISFLIFLIVG
      250

    </sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000785>
</sio:SIO_000229>
</aistls:PsiPredOutput>
</rdf:RDF>
```

Psipred 出力結果

1.7. Raccess

1.7.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で Raccess の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は RaccessInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
<aistls:RaccessInput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/raccess.rdf#1">
```

- RNA 配列のトリプルを定義する。

主語 : RaccessInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_010017 (ribonucleic acid sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (RNA 配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_010017>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      RNA 配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_010017>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- コマンドラインオプションのトリプルを定義する。

主語 : RaccessInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000144 (parameter)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Raccess 実行結果)

```
<sio:SIO_000230>  
  <sio:SIO_000144>  
    <sio:SIO_000300>  
      -access_len=50  
    </sio:SIO_000300>  
  </sio:SIO_000144>  
</sio:SIO_000230>
```

この定義に基づいて Raccess の入力 RDF を作成する。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">

  <aistls:RaccessInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/raccess.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_010017>
        <sio:SIO_000300>
          >gi|187607315|ref|NM_014909.4| Homo sapiens vasohibin 1 (VASH1), mRNA
          GCCCCGTGCGCGCCGCCCCGAGCCGGTCCCGCTGAGCCGCGGGCCCCGTGCCCTGCGATGGCTCGGCTGGTG
          CAGCGCGGCGCCAGGTGCCAGCCGTCTCCCGCTGAGACGCGCCCCGAGTGGGGACCCGCTGGGCCTCGGG
          GCTCGCAGCCTTCGCTCCCGCGCGCCGCTCCCTTTCTGGGGACTCCGCGCTGTTTCTGGGGACGA
          GGGGACAGGGGACCCAGACAAAGCCCACTTTGTGCAGGGAGTTGGCCGCGAGGCGGGGAATGTGCGCGTCG
          GCGCGCGCCCCCTCCCGCTCCCGGCCAGCTGCGAGTCTTGGCTCCCGGACTTGTCTCGTCGCGTCGGAG
          AAATCGCCCCCAGCGCCGCTCTCCCGCCCCGGGGTCTTGGTTCGAGCTCGCGCGGCGGGAGTCCGCT
          CGGTCTTCCTGGGGCGCGCGCAGATGTGAGCGTGCGAGAGTTGTGTAGGGGATTTTGTTCCTCCGAAA
          CTGAGACCCAGGGCGCCAGTGGGCACCCGTGCCTTGACTCTGTCTTTCTGCAGCCGCTGGTCCGAGCT
          GTCTGGCCTCAGTTTCCCTCCGACTTTTCTCGCTCTGCCAGCCCTCACTGCTGCCGCTCATGTTCCTCG
          CAGTTAGATGGGGTGCTTTGTGACGGCTGCCAAGTTGGGGTGTGTTCTCTTTATTCGTTTTTCAAACA
          GAACAAGGCCTCCAAGGCTGACCCAGACAAACCCCTCGGACCCCTAATTACCTTATTGCACTGAT
          TTTTTTTATCAAGTCGTATTTTATTGTACAGGAGCCACGCCCTGATTCTTAAAGGCGCCTTGCACTCTG
          GCCATGTGTATCTCTGCAGCCGGTGTGTGGGAGGCCTCTTGTGAGCCAGTTGTTTTCCCGCTCCACCA
          CCCCCCTCGAAGATTTAGGGATGCCAGGGGGAAGAAGGTGGCTGGGGGTGGCAGCAGCGGTGCCACTCC
          AACGTCCGCTGCGGGCCACCGCCCTCTGGGGTCAAGCGTTGGAGACCAAGGAACCTCAGCCAG
          AGAGATGAGGAGCCAGAAGAGGAAGGGGAAGAGGACCTGCGAGACGAGGCGTCCCTTCTTTGTCAACC
          GGGGTGGGCTACCTGTGGATGAGGCCACCTGGGAAAGGATGTGGAACACGTGGCCAAAGATCCACCCCGA
          TGGAGAGAAGGTGGCGCAACGGATCCGTGGGGCCACAGACCTGCCCAAGATCCCCATACCGAGTGTGCCT
          ACGTTCAGCCGTCTACACCTGTCCCTGAGCGCCTGGAAGCTGTGACGCGCTACATCAGAGAGCTGCAGT
          ACAATCACACAGGGACACAGTTCTTTGAAATTAAGAAGAGCAGACCTCTGACAGGGCTGATGGACCTGGC
          CAAGGAAATGACCAAGAGGCCCTGCCAATCAAATGCCTGGAAGCCGTGATCCTGGGAATTTACCTCACC
          AACAGCATGCCCACCTTGAGCGCTTCCCCATCAGCTTCAAGACCTACTTCTCAGGGAACCTACTTCCGCC
          .....
          .....
          .....
          GCTCCATCTTGGTCTCCGGAGTCCCAAGTTTCCTTTTCATCAAATCTGACAAGAGAGAAGAAACATGGG
          TGTGCTTGGCCACAGGGCCTGGTGGTGATGGACCTCCCCGCTCCCTCAAGCTCTGGATGGCTGCAGTGT
          TGTACTAGACTTTGTTCAAGCTGTTCTCATCTCAGTATTGCCCTTCCTTTCACTTTACACTTCATCTC
          ATTCTGTTGTCACTTTCCCGAAACGAATAAAGTCTCCCCAGCTCCTGCTGTGTAGGCTGGGCAGAAAC
          CACAACACGT

        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_010017>
    </sio:SIO_000230>
  </sio:SIO_000230>
  <sio:SIO_000144>
    <sio:SIO_000300></sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000144>
</sio:SIO_000230>
</aistls:RaccessInput>
</rdf:RDF>
```

Raccess 用入力 RDF

1.7.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

% curl --data-binary @入力 RDF 名

http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Raccess -o 出力 RDF 名

1.7.3. 実行結果

以下の定義に従い、Raccess の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は RaccessOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものがそのまま指定される。

```
<aistls:RaccessOutput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/raccess.rdf#1">
```

- Raccess の実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : RaccessOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : SIO_000785 (answer)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Raccess 実行結果)

```
<sio:SIO_000229>
```

```
  <sio:SIO_000785>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      Raccess 実行結果
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_000785>
```

```
</sio:SIO_000229>
```

Raccess の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  <aistls:RaccessOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/raccess.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <sio:SIO_000785>
        <sio:SIO_000300>&gt;gi|187607315|ref|NM_014909.4| Homo sapiens vasohibin 1 (VASH1),
mRNA
6020      6029      0.62373
6019      6028      0.623859
6018      6027      0.623156
6017      6026      0.622921
6016      6025      0.648241
6015      6024      1.34601
6014      6023      2.08364
6013      6022      2.71933
6012      6021      4.96686
6011      6020      5.51342
6010      6019      5.52994
6009      6018      6.77058
6008      6017      8.45003
6007      6016      9.02248
6006      6015      9.61892
6005      6014      8.96482
6004      6013      8.98464
6003      6012      9.37755
6002      6011      9.11376
6001      6010      9.45949
6000      6009      8.523
5999      6008      9.24843
.....
.....
.....
23      32      5.6887
22      31      7.51701
21      30      10.8552
20      29      12.0541
19      28      11.9882
18      27      10.2528
17      26      10.2699
16      25      10.0945
15      24      9.04197
14      23      10.665
13      22      11.1913
12      21      11.1897
11      20      11.5702
10      19      11.5887
9       18      11.4777
8       17      11.4848
7       16      13.0533
6       15      12.7788
5       14      10.5224
4       13      11.3123
3       12      10.8754
2       11      10.6341
1       10      9.07663
0       9       6.90453

</sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000785>
</sio:SIO_000229>
</aistls:RaccessOutput>
</rdf:RDF>
```

Raccess 出力結果

1.8. RactIP

1.8.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で RactIP の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は RactIPInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
<aistls:RactIPInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/ractip.rdf#1">
```

- 問い合わせ RNA 配列のトリプルを定義する。

主語 : RactIPInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_010017 (ribonucleic acid sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (RNA 配列)

```
<sio:SIO_000230 >
```

```
  <sio:SIO_010017>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      RNA 配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_010017>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- ターゲット RNA 配列のトリプルを定義する。

主語 : RactIPInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_010017 (ribonucleic acid sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (RNA 配列)

```
<sio:SIO_000230 >
```

```

    <sio:SIO_010017>
      <sio:SIO_000300>
        RNA 配列
      </sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_010017>
  </sio:SIO_000230>

```

- コマンドラインオプションのトリプルを定義する。

主語 : RactIPInput
 述語 : SIO_000230 (has input)
 目的語 (主語) : SIO_000144 (parameter)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : string (RactIP オプション)

```

  <sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000144>
      <sio:SIO_000300>
        -i
      </sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_000144>
  </sio:SIO_000230>

```

この定義に基づいて RactIP の入力 RDF を作成する。

```

<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">

  <aistls:RactIPInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/ractip.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_010017>
        <sio:SIO_000300>
          </sio:SIO_000300>
        </sio:SIO_010017>
      </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_010017>
        <sio:SIO_000300>
          </sio:SIO_000300>
        </sio:SIO_010017>
      </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_000144>
        <sio:SIO_000300></sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000144>
    </sio:SIO_000230>
  </aistls:RactIPInput>
</rdf:RDF>

```

RactIP 用入力 RDF

1.8.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

```
% curl --data-binary @入力 RDF 名  
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/RactIP -o 出力 RDF 名
```

1.8.3. 実行結果

以下の定義に従い、RactIP の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF  
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"  
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"  
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```
- 主語は RactIPOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものがそのまま指定される。

```
<aistls:RactIPOutput  
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/ractip.rdf#1">
```
- RactIP の実行結果のトリプルは以下となる。
主語 : RactIPOutput
述語 : SIO_000229 (has output)
目的語 (主語) : SIO_000785 (answer)
述語 : SIO_000300 (has value)
目的語 : string (RactIP 実行結果)

```
<sio:SIO_000229>  
  <sio:SIO_000785>  
    <sio:SIO_000300>  
      RactIP 実行結果  
    </sio:SIO_000300>  
  </sio:SIO_000785>  
</sio:SIO_000229>
```


RactIP の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  <aistls:RactIPOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/ractip.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <sio:SIO_000785>
        <sio:SIO_000300>GLPK Simplex Optimizer, v4.51
160 rows, 30 columns, 234 non-zeros
*   0: obj =  0.000000000e+00 infeas =  0.000e+00 (0)
*  37: obj =  1.604045469e+01 infeas =  0.000e+00 (0)
OPTIMAL SOLUTION FOUND
GLPK Integer Optimizer, v4.51
160 rows, 30 columns, 234 non-zeros
30 integer variables, all of which are binary
Integer optimization begins...
+   37: mip =      not found yet <=          +inf          (1; 0)
+   37: >>>>>>>>>>>> 1.604045469e+01 <=  1.604045469e+01   0.0% (1; 0)
+   37: mip =  1.604045469e+01 <=      tree is empty   0.0% (0; 1)
INTEGER OPTIMAL SOLUTION FOUND
<>R2inv
GCACCGAACCAUCCGGUGC
((((([[[[[]]]]])))
<>R1inv
GGCAACGGAUGGUUCGUUGCC
((((([[]]]]]]]]])))
</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000785>
    </sio:SIO_000229>
  </aistls:RactIPOutput>
</rdf:RDF>
```

RactIP 出力結果

1.9. Wolfpsort

1.9.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で Wolfpsort の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は WolfPsortInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
<aistls:WolfPsortInput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/wolfpsort.rdf#1">
```

- 界情報のトリプルを以下のように定義する。

主語 : WolfPsortInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 : Kingdom (rdf:about="#plant"(animal、plant、fungi から一つ選択))

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <aistls:Kingdom rdf:about="#animal">
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- アミノ酸配列のトリプルを定義する。

主語 : WolfPsortInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_010015 (protein sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (アミノ酸配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_010015>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      アミノ酸配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_010015>
```

</sio:SIO_000230>

この定義に基づいて Wolfpsort の入力 RDF を作成する。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">
  <aistls:WolfPsortInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/wolfpsort.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <aistls:Kingdom rdf:about="#animal"/>
    </sio:SIO_000230>
    <aistls:SIO_000230>
      <sio:SIO_010015>
        <sio:SIO_000300>
          >sp|P35413|GPR3 MOUSE G-protein coupled receptor 3 OS=Mus musculus GN=Gpr3 PE=2 SV=1
          MMWGAGSSMAWFSAGSGSVNVSSVDPVEPTGPATLLPSRAWDDVLCISGTLVSCENAL
          VVAIIIVGTPAFRAPMFLVGLAVADLLAGLGLVLHFAADFCIGSPMSLMLVGVLAMAF
          TASIGSLLAITVDYRLSLYNALTYSETTVTRTYVMLALVWVGALGLGLVPVLAWNCRDG
          LTTTCGVVYPLSKNHLVVLAIFFMVFGIMLQLYAQICRIVCRHAQQIALQRHLLPASHYV
          ATRKGIATLAVVLGAFAACWLPFTVYCLLGADSPRLYTYLTLTPATYNSMINPVIYAFR
          NQDVQKVLWAICCCCTSKIPFRSRSPSDV
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_010015>
    </aistls:SIO_000230>
  </aistls:WolfPsortInput>
</rdf:RDF>
```

Wolfpsort 用入力 RDF

1.9.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

% curl --data-binary @入力 RDF 名

http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Wolfpsort -o 出力 RDF 名

1.9.3. 実行結果

以下の定義に従い、Wolfpsort の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下とする。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は WolfPsortOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものをそのまま指定する。

```
<aistls:WolfPsortOutput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/wolfpsort.rdf#1">
```

- Wolfpsort の実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : WolfPsortOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : SIO_000785 (answer)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Wolfpsort 実行結果)

```
<sio:SIO_000229>
```

```
  <sio:SIO_000785>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      Wolfpsort 実行結果
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_000785>
```

```
</sio:SIO_000229>
```

Wolfpsort の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">
  <aistls:WolfPsortOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/wolfpsort.rdf#2">
    <sio:SIO_000229>
      <sio:SIO_000785>
        <sio:SIO_000300># k used for kNN is: 14
        sp|P35413|GPR3_MOUSE cyto 7, extr 3, plas 2, E.R. 2, E.R._plas 2
      </sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_000785>
  </sio:SIO_000229>
</aistls:WolfPsortOutput>
</rdf:RDF>
```

Wolfpsort 出力結果

2. Async 非同期型解析サービスについて

2.0. Async 同期型解析サービスの利用方法

Async 同期型解析サービス (Last, Modelling, PoodleL, PoodleS, Rassie) の場合、以下の 3 つの手順で各解析サービスを実行する。

1) ポーリング URI の取得

```
% curl --data-binary @入力 RDF 名  
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/解析サービス名 (表 1-A 参照)
```

例えば、input.rdf を入力 RDF として用意し、PoodleL を実行する場合、以下のコマンドとなる。

```
% curl --data-binary @input.rdf  
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleL
```

ポーリング URI を格納した RDF が標準出力される。

```
<rdf:RDF  
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"  
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">  
  <aistls:PoodleLOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/poodlel.rdf#1">  
    <rdfs:isDefinedBy  
      rdf:resource="http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleL?poll=1"/>  
    </aistls:PoodleLOutput>  
  </rdf:RDF>
```

ポーリング URI (赤文字部分) を含む RDF

2) SADI サーバへポーリング

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/解析サービス名?poll=任意の 16  
進数
```

例えば 1) の PoodleL を実行した場合は以下のコマンドとなる。

```
%curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleL?poll=1
```

サービスの実行が終了すると、COMPLETE:出力結果 URL が標準出力される。

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleL?poll=1
```

```
COMPLETE: http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/poodleLResult.rdf
```

3) 実行結果の取得

```
% curl http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/ poodleLResult.rdf -o 出力 RDF 名
```

入力 RDF フォーマット、出力 RDF フォーマットについては、章 1.0 の Sync 同期型解析サービスの利用方法を参考にしてください。

2.1. Last

2.1.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で Last の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は LastInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
<aistls:LastInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/last.rdf#1">
```

- 問い合わせ配列のトリプルを定義する。

主語 : LastInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000030 (biopolymer sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (問い合わせ配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_000030>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      問い合わせ配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_000030>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- ターゲット配列のトリプルを定義する。

主語 : LastInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000030 (biopolymer sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (ターゲット配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```

    <sio:SIO_000030>
      <sio:SIO_000300>
        ターゲット配列
      </sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_000030>
  </sio:SIO_000230>

```

- Lastdb 用コマンドラインオプションのトリプルを定義する。
 主語 : LastInput
 述語 : SIO_000230 (has input)
 目的語 (主語) : lastdbParameter
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : string (Lastdb 用コマンドラインオプション)

```

  <sio:SIO_000230>
    <aistls:lastdbParameter>
      <sio:SIO_000300>
        -m110 -w1
      </sio:SIO_000300>
    </aistls:lastdbParameter>
  </sio:SIO_000230>

```

- Lastal 用コマンドラインオプションのトリプルを定義する。
 主語 : LastInput
 述語 : SIO_000230 (has input)
 目的語 (主語) : lastalParameter
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : string (Lastal 用コマンドラインオプション)

```

  <sio:SIO_000230>
    <aistls:lastdbParameter>
      <sio:SIO_000300>
        -j4 -u0 -m10 -l1 -k1 -w0 -g1.0 -s2 -e30
      </sio:SIO_000300>
    </aistls:lastdbParameter>
  </sio:SIO_000230>

```

この定義に基づいて Last の入力 RDF を作成する。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">

  <aistls:LastInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/last.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_000030>
        <sio:SIO_000300>
>chickenMito
AATTTTATTTTAACTAACCCTACTAAGTGTACCCCCCTTTCCC
CAGGGGGGTATACATATGCATAATCGTGCATACATTTATATACCACATAT
ATTATGGTACCGGTAATATATACTATATATGTACTAAACCCATTATATGT
ATACGGGCATTAACCTATATTCCACATTTCTCCCAATGTCCATTCTATGC
ATGATCTAGGACATACTCATTTACCCCTCCCCATAGACAGTTCCAAACCAC
TATCAAGCCCACTAAGTATGAATGGTTACAGGACATAAATCTCACTCTCA
TGTTCTCCCCCAACAAGTCACTAAGTATGAATGGTTACAGGACATACA
TTTAAGTACCATGTTCTAACCATTGGTTATGCTCGCCGTATCAGATGG
ATTTATGTATCGTCCACCTACGAGAGATCAGCAACCCCTGCCTGTAATG
.....
.....
.....
GAAACAAAAGAAACACCCAAACTCACTAACCACCCACATCCTATCACAGA
CGCTACCACCAACCCACCACCCATAATACGGCGAAGGATTAGACGCCA
CAGCTAAAACCCCGACATAAAACAATCCCAAGAAAAATCACAAAATAA
GTCATATTATTCCTGCTGGTTAGACCCCAAGGACTACGGCTTGAAAAGC
CATTGTTGTTCTCACTACGGGAAC
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000030>
    </sio:SIO_000230>
  <sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000030>
      <sio:SIO_000300>
>fuguMito
GCTAGCGTAGCTTAACCAAAGCAGAGTACTGAAGATGCTAAGATGGGCCC
TGAAAAGTCCCGCAGGCACAAAAGCTTGGTCCTGACTTTACTAACAACCTC
TGATCAAACTTACACATGCAAGTATCCGCATCCAGTGAAaatgcccccc
gccccccgctCGGAAATAGGGAGTTGGTATCAGGCACACAAATTTGTAGC
CCATGACACCTAGCTTTGCCACGCCCCCAAGGGAATTCAGCAGTGATAAA
CATTAGCCATAAGTGAACCTTGACTTAGTTATGATCTAAAGAGTCGGT
.....
.....
.....
TAGGAGAGACCTTTAAGTTTGAACCAAGCTCTCCActtaattaaatatc
atcatattattatcatatattataatattataataatataattatat
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000030>
    </sio:SIO_000230>
  <sio:SIO_000230>
    <aistls:lastdbParameter>
      <sio:SIO_000300>-m110 -w1</sio:SIO_000300>
    </aistls:lastdbParameter>
  </sio:SIO_000230>
  <sio:SIO_000230>
    <aistls:lastalParameter>
      <sio:SIO_000300>-j4 -u0 -m10 -l1 -k1 -w0 -g1.0 -s2 -e30</sio:SIO_000300>
    </aistls:lastalParameter>
  </sio:SIO_000230>
</aistls:LastInput>
</rdf:RDF>
```

Last 用入力 RDF

2.1.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

```
% curl --data-binary @入力 RDF 名  
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Last
```

Last は非同期通信となるため、まずポーリングに必要な URI を格納した RDF が返却される。次に、この RDF の isDefinedBy で定義された

”http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Last?poll=任意の 16 進数”
を用いて SADI サーバへのポーリングを行う。

```
<rdf:RDF  
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"  
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">  
  <aistls:LastOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/last.rdf#1">  
    <rdfs:isDefinedBy  
rdf:resource="http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Last?poll=8"/>  
    </aistls:LastOutput>  
  </rdf:RDF>
```

ポーリングのための URI を格納した RDF

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Last?poll=8 (上図の場合 8)  
%
```

Last が終了すると、Last の実行結果を格納した URL が標準出力に返却される。

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Last?poll=8 (上図の場合 8)  
COMPLETE: http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/seq1_seq2Result.rdf  
%
```

出力された URL を用いて、以下のコマンドで結果を取得する。

```
% curl http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/seq1_seq2Result.rdf -o 出力 RDF 名
```

2.1.3. 実行結果

以下の定義に従い、Last の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は LastOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定されたものがそのまま指定される。

```
<aistls:LastOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/last.rdf#1">
```

- Last の実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : LastOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : SIO_000785 (answer)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Last の実行結果)

```
<sio:SIO_000229>
```

```
  <sio:SIO_000785>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      Last 実行結果
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_000785>
```

```
</sio:SIO_000229>
```

- Last の PNG 画像->Base64 変換結果のトリプルは以下となる。

主語 : LastOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : Base64

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Last PNG 画像->Base64 変換結果)

```
<sio:SIO_000229>
```

```
  <aistls:Base64>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

Last PNG 画像->Base64 変換結果

<sio:SIO_000300>

</aistls:Base64>

</sio:SIO_000229>

</aistls:requiresResultInBase64BinaryFormat>

*入力 RDF ファイルの **lastalOptions** に”noimage”を追加すると、このトリプルは出力されない。

Last の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  <aistls:LastOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/last.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <aistls:Base64>

<sio:SIO_000300>iVBORw0KGgoAAAANSUHEUgAAA9MAAAPmCAAAAADC0ZOHAAAOaE1EQVR42u3dQVLbMABAUd3
/sj5C
mHHiiISxgoAtX+nqvlDC1i6DkI8lJnHEAJcMQgKZZ4ZYd48fvXp/QNisk/X3KP/8fNM2cs/Tp7Pa8
eH59fTz/+bowXppmjXn6a8efH8fXT6LWNAs3PTStaUpNn3/ev6lpTbPMfvq6ePv6VfX7Vtp+WtMs
OmujaTpzt1HYs+kHsDxNg6YBTQOaBjQNmtY0aBrQNKBPQNOgaU2DpgFNA5oGNA2a1jRoGtA0oG1A
.....
.....
.....
aRPaTQ9Ng6g1DaLWNOWYtaahFbWmoRWlpqEVtaahFbWmoRWlpqEVtaahFbWmoRWlpqEVtaahFbWm
oRWlpqEVtaahFbWmoRWlpqEV9Qf2BZeqhG6eZQAAAABJRU5ErkJggg==</sio:SIO_000300>
      </aistls:Base64>
    </sio:SIO_000229>
    <sio:SIO_000229>
      <sio:SIO_000785>
        <sio:SIO_000300># LAST version 58
#
# a=7 b=1 c=100000 e=30 d=18 x=27 y=10
# u=0 s=2 m=10 l=1 k=1 i=134217728 w=0 t=0.910239 g=1 j=4
# seq1
#
#   A   C   G   T
.....
.....
.....
a score=40
s fuguMito   13752 126 + 16447
AACTGCTCGAAGAGCCCCCGACCCAGCCCCCGACCCAGCTCTAATACTACAAGCAACGTCATAACAAGACCCAGGCCCCCAATAG
TAATACTCCCCCACCCTAGATAATATATAAGTGAAACCCC
s chickenMito 16186 126 + 16775
AACCGCCCGAATTGCCCCCGAGACAACCCACGCACACAAGCTCTAGTACAACAAACAAAGCTAACAACAAACCTCACCCAGCCACCAA
AAACAACCCCAACCCCATGAATAAAACACCGCAACTCC
p 0.681 0.832 0.883 0.9 0.95 0.967 0.973 0.989 0.995 0.997 0.997 0.998 0.998 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 0.999 0.999 0.998 0.996 0.988 0.985 0.984 0.98 0.979 0.976 0.967 0.963 0.962 0.959 0.958
0.958 0.957 0.955 0.948 0.945 0.945 0.942 0.941 0.941 0.94 0.938 0.937 0.935 0.934 0.933
0.933 0.93 0.93 0.929 0.929 0.928 0.928 0.925 0.924 0.922 0.921 0.921 0.92 0.918 0.911 0.89
0.828 0.807 0.745 0.724 0.717 0.696 0.69 0.687 0.68 0.678 0.671 0.65 0.588 0.567 0.505
# CPU time: 0.22 seconds
    </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000785>
    </sio:SIO_000229>
  </aistls:LastOutput>
</rdf:RDF>
```

Last 出力結果

2.2. Modelling

2.2.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で Modelling の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は ModellingInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
<aistls:ModellingInput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/modelling.rdf#1">
```

- アミノ酸配列のトリプルを定義する。

主語 : ModellingInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_010015 (protein sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (アミノ酸配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_010015>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      アミノ酸配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_010015>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- BLAST 名のトリプルを定義する。

主語 : ModellingInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : BlastSearch

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 : BlastProgram (rdf:about="#BLAST" (BLAST or PSI-BLAST))

```

<sio:SIO_000230>
  <aistls:BlastSearch>
    <sio:SIO_000008>
      <aistls:BlastProgram rdf:about="#PSI-BLAST"/>
    </sio:SIO_000008>
  </aistls:BlastSearch>
</sio:SIO_000230>

```

- Iteration 数のトリプルを定義する (PSI-BLAST 選択時のみ)。

主語 : ModellingInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : BlastSearch

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : iteration

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : integer (Iteration 数(>1 を指定))

```

<sio:SIO_000230>
  <aistls:BlastSearch>
    <sio:SIO_000216>
      <aistls:iteration>
        <sio:SIO_000300>2</sio:SIO_000300>
      </aistls:iteration>
    </sio:SIO_000216>
  </aistls:BlastSearch>
</sio:SIO_000230>

```

- E-Value のトリプルを定義する。

主語 : ModellingInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : BlastSearch

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : SIO_001021 (expected value)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : double (10e-30 など)

```

<sio:SIO_000230>
  <aistls:BlastSearch>
    <sio:SIO_000216>
      <sio:SIO_001021>

```

```

        <sio:SIO_000300>0.00005</sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_001021>
</sio:SIO_000216>
</aistls:BlastSearch>
</sio:SIO_000230>
• ヒット領域カバレッジ閾値のトリプルを定義する。
  主語 : ModellingInput
  述語 : SIO_000230 (has input)
  目的語 (主語) : BlastSearch
    述語 : SIO_000216 (has measurement value)
    目的語 (主語) : coverage
      述語 : SIO_000300 (has value)
      目的語 : double (ヒット領域カバレッジの閾値)
<sio:SIO_000230>
  <aistls:BlastSearch>
    <sio:SIO_000216>
      <aistls:coverage>
        <sio:SIO_000300>55.0</sio:SIO_000300>
      </aistls:coverage>
    </sio:SIO_000216>
  </aistls:BlastSearch>
</sio:SIO_000230>
• ヒット領域一致度閾値のトリプルを定義する。
  主語 : ModellingInput
  述語 : SIO_000230 (has input)
  目的語 (主語) : BlastSearch
    述語 : SIO_000216 (has measurement value)
    目的語 (主語) : identity
      述語 : SIO_000300 (has value)
      目的語 : double (ヒット領域一致度の閾値)
<sio:SIO_000230>
  <aistls:BlastSearch>
    <sio:SIO_000216>
      <aistls:identity>
        <sio:SIO_000300>35.0</sio:SIO_000300>
      </aistls:identity>

```

```

        </sio:SIO_000216>
    </aistls:BlastSearch>
</sio:SIO_000230>
• 最小配列長閾値のトリプルを定義する。
  主語 : ModellingInput
  述語 : SIO_000230 (has input)
  目的語 (主語) : BlastSearch
    述語 : SIO_000216 (has measurement value)
    目的語 (主語) : minSequenceLength
      述語 : SIO_000300 (has value)
      目的語 : integer (最小配列長の閾値)
<sio:SIO_000230>
  <aistls:BlastSearch>
    <sio:SIO_000216>
      <aistls:minSequenceLength>
        <sio:SIO_000300>31</sio:SIO_000300>
      </aistls:minSequenceLength>
    </sio:SIO_000216>
  </aistls:BlastSearch>
</sio:SIO_000230>
• テンプレートカバレッジ閾値のトリプルを定義する。
  主語 : ModellingInput
  述語 : SIO_000230 (has input)
  目的語 (主語) : templateSearch
    述語 : SIO_000216 (has measurement value)
    目的語 (主語) : coverage
      述語 : SIO_000300 (has value)
      目的語 : double (テンプレートカバレッジの閾値)
<sio:SIO_000230>
  <aistls:templateSearch>
    <sio:SIO_000216>
      <aistls:coverage>
        <sio:SIO_000300>96.0</sio:SIO_000300>
      </aistls:coverage>
    </sio:SIO_000216>
  </aistls:templateSearch>

```

```

</sio:SIO_000230>
<aistls:setupTemplateCoverageThreshold>90.0
</aistls:setupTemplateCoverageThreshold>
• テンプレート一致度閾値のトリプルを定義する。
  主語 : ModellingInput
  述語 : SIO_000230 (has input)
  目的語 (主語) : templateSearch
    述語 : SIO_000216 (has measurement value)
    目的語 (主語) : identity
      述語 : SIO_000300 (has value)
      目的語 : double (テンプレート一致度の閾値)
<sio:SIO_000230>
  <aistls:templateSearch>
    <sio:SIO_000216>
      <aistls:identity>
        <sio:SIO_000300>96.0</sio:SIO_000300>
      </aistls:identity>
    </sio:SIO_000216>
  </aistls:templateSearch>
</sio:SIO_000230>
• MODELLER ラインセンスキーのトリプルを定義する。
  主語 : ModellingInput
  述語 : SIO_000230 (has input)
  目的語 (主語) : modeller
    述語 : SIO_0000008 (has attribute)
    目的語 (主語) : LicenseKey
      述語 : SIO_000300 (has value)
      目的語 : string (MODELLER ラインセンスキー)
<sio:SIO_000230>
  <aistls:modeller>
    <sio:SIO_0000008>
      <aistls:LicenseKey>
        <sio:SIO_000300>****</sio:SIO_000300>
      </aistls:LicenseKey>
    </sio:SIO_0000008>
  </aistls:modeller>

```

</sio:SIO_000230>

***MODELLER** ライセンスキーがないと **Modelling** は利用できません。

MODELLER の Web サイト(<http://saliab.org/modeller/registration.html>)より、
ライセンスキー取得のための登録を行ってください。

- 生成モデル数閾値のトリプルを定義する。

主語 : **ModellingInput**

述語 : **SIO_000229** (has input)

目的語 (主語) : **modeller**

述語 : **SIO_000216** (has measurement value)

目的語 (主語) : **numberOfModel**

述語 : **SIO_000300** (has value)

目的語 : **integer** (生成モデル数の閾値)

<sio:SIO_000230>

<aistls:modeller>

<sio:SIO_000216>

<aistls:numberOfModel>

<sio:SIO_000300>3</sio:SIO_000300>

</aistls:numberOfModel>

</sio:SIO_000216>

</aistls:modeller>

</sio:SIO_000230>

この定義に基づいて **Modelling** の入力 RDF を作成する。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">
  <aistls:ModellingInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/modelling.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_010015>
        <sio:SIO_000300>
          >sp|P04156|PRIO_HUMAN Major prion protein OS=Homo sapiens GN=PRNP PE=1 SV=1
          MANLGCWMLVLFVATWSDLGLCKKRPKPGGWNTGGSRYPGQGSPPGNNRYPPQGGGGWGQP
          HGGGWGQPHGGGWGQPHGGGWGQPHGGGWGQGGGTHSQWNKPSKPKTNMKHMAGAAAAGA
          VVGGLGGYMLGSAMSRPIIHFGSDYEDRYRENMHRYPNQVYRPMDEYSNQNNFVHDCV
          NITIKQHTVTTTTKGENFTETDVKMMERVVEQMCITQYERESQAYYQRGSSMVLFSPPV
          ILLISFLIFLIVG
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_010015>
    </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <aistls:BlastSearch>
        <sio:SIO_000008>
          <aistls:BlastProgram rdf:about="#PSI-BLAST"/>
        </sio:SIO_000008>
      </aistls:BlastSearch>
    </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <aistls:BlastSearch>
        <sio:SIO_000216>
          <aistls:iteration>
            <sio:SIO_000300>2</sio:SIO_000300>
          </aistls:iteration>
        </sio:SIO_000216>
      </aistls:BlastSearch>
    </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <aistls:BlastSearch>
        <sio:SIO_000216>
          <sio:SIO_001021>
            <sio:SIO_000300>0.00005</sio:SIO_000300>
          </sio:SIO_001021>
        </sio:SIO_000216>
      </aistls:BlastSearch>
    </sio:SIO_000230>
    .....
    .....
    .....
    <sio:SIO_000230>
      <aistls:modeller>
        <sio:SIO_000008>
          <aistls:LicenseKey>
            <sio:SIO_000300>****</sio:SIO_000300>
          </aistls:LicenseKey>
        </sio:SIO_000008>
      </aistls:modeller>
    </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <aistls:modeller>
        <sio:SIO_000216>
          <aistls:numberOfModel>
            <sio:SIO_000300>3</sio:SIO_000300>
          </aistls:numberOfModel>
        </sio:SIO_000216>
      </aistls:modeller>
    </sio:SIO_000230>
  </aistls:ModellingInput>
</rdf:RDF>
```

Modelling 用入力 RDF

2.2.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

```
% curl --data-binary @入力 RDF 名  
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Modelling
```

Modelling は非同期通信となるため、まずポーリングに必要な URI を格納した RDF が返却される。次に、この RDF の isDefinedBy で定義された
”http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Modelling?poll=任意の 16 進数”
を用いて SADI サーバへのポーリングを行う。

```
<rdf:RDF  
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"  
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">  
  <aistls:ModellingOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/modelling.rdf#1">  
    <rdfs:isDefinedBy  
rdf:resource="http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Modelling?poll=10"/>  
    </aistls:ModellingOutput>  
  </rdf:RDF>
```

ポーリングのための URI を格納した RDF

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Modelling?poll=10 (上図の場合  
10)  
%
```

Modelling が終了すると、Modelling の実行結果を格納した URL が標準出力に返却される。

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Modelling?poll=10  
COMPLETE: http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/modellingResult.rdf  
%
```

出力された URL を用いて、以下のコマンドで結果を取得する。

```
% curl http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/modellingResult.rdf -o 出力 RDF 名
```

2.2.3. 実行結果

以下の定義に従い、Modelling の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は ModellingOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものがそのまま指定される。

```
<aistls:ModellingOutput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/modelling.rdf#1">
```

- アミノ酸配列のトリプルは以下となる。

主語 : ModellingOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : SIO_010015 (protein sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (アミノ酸配列)

```
<sio:SIO_000229>
```

```
  <sio:SIO_010015>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      アミノ酸配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_010015>
```

```
</sio:SIO_000229>
```

- BLAST 実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : ModellingOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : BlastHit

述語 : SIO_000673 (has unique identifier)

目的語 (主語) : SIO_000729 (record identifier)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (ヒット配列 ID)

述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000794 (count)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (ヒットカウント)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : BlastAlignment
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : query
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000792 (sequence end position)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (残基終了番号)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000791 (sequence start position)
 述語 : SIO_000300 (has sequence)
 目的語 : integer (残基開始番号)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : coverage
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : double (%)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : sequenceLength
 述語 : SIO_000300 (has sequence)
 目的語 : integer (配列長)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : subject
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000792 (sequence end position)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (残基終了番号)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000791 (sequence start position)
 述語 : SIO_000300 (has sequence)
 目的語 : integer (残基開始番号)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : coverage

述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : double (%)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : sequenceLength
 述語 : SIO_000300 (has sequence)
 目的語 : integer (配列長)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_001021 (expected value)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : double (10e-30 など)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : identity
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : double (%)
 <sio:SIO_000229>
 <aistls:BlastHit>
 <sio:SIO_000008>
 <aistls:BlastAlignment>
 <sio:SIO_000008>
 <aistls:subject>
 <sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000792>
 <sio:SIO_000300>117</sio:SIO_000300>
 </sio:SIO_000792>
 </sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000791>
 <sio:SIO_000300>1</sio:SIO_000300>
 </sio:SIO_000791>
 </sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000216>
 <aistls:coverage>
 <sio:SIO_000300>100.00</sio:SIO_000300>
 </aistls:coverage>
 </sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000216>

```

        <aistls:sequenceLength>
            <sio:SIO_000300>117</sio:SIO_000300>
        </aistls:sequenceLength>
    </sio:SIO_000216>
</aistls:subject>
</sio:SIO_000008>
<sio:SIO_000008>
    <aistls:query>
        <sio:SIO_000216>
            <sio:SIO_000792>
                <sio:SIO_000300>225</sio:SIO_000300>
            </sio:SIO_000792>
        </sio:SIO_000216>
        <sio:SIO_000216>
            <sio:SIO_000791>
                <sio:SIO_000300>119</sio:SIO_000300>
            </sio:SIO_000791>
        </sio:SIO_000216>
        <sio:SIO_000216>
            <aistls:coverage>
                <sio:SIO_000300>42.29</sio:SIO_000300>
            </aistls:coverage>
        </sio:SIO_000216>
        <sio:SIO_000216>
            <aistls:sequenceLength>
                <sio:SIO_000300>107</sio:SIO_000300>
            </aistls:sequenceLength>
        </sio:SIO_000216>
    </aistls:query>
</sio:SIO_000008>
<sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_001021>
        <sio:SIO_000300>6.7286e-43</sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_001021>
</sio:SIO_000216>
<sio:SIO_000216>

```

```

        <aistls:identity>
            <sio:SIO_000300>38.46</sio:SIO_000300>
        </aistls:identity>
    </sio:SIO_000216>
</aistls:BlastAlignment>
</sio:SIO_000008>
<sio:SIO_000673>
    <sio:SIO_000729>
        <sio:SIO_000300>1u3mA</sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_000729>
</sio:SIO_000673>
<sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000794>
        <sio:SIO_000300>17</sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_000794>
</sio:SIO_000216>
</aistls:BlastHit>
</sio:SIO_000229>

```

- ヒット情報抽出結果のトリプルは以下となる。

主語 : ModellingOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : TemplateHit

述語 : SIO_000673 (has unique identifier)

目的語 (主語) : SIO_000729 (record identifier)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (ヒット配列 ID)

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : SIO_000794 (count)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : integer (ヒットカウント)

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 (主語) : query

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : SIO_000792 (sequence end position)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : integer (残基終了番号)

述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000791 (sequence start position)
 述語 : SIO_000300 (has sequence)
 目的語 : integer (残基開始番号)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : coverage
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : double (%)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : sequenceLength
 述語 : SIO_000300 (has sequence)
 目的語 : integer (配列長)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : subject
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000792 (sequence end position)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : integer (残基終了番号)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_000791 (sequence start position)
 述語 : SIO_000300 (has sequence)
 目的語 : integer (残基開始番号)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : coverage
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : double (%)
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : sequenceLength
 述語 : SIO_000300 (has sequence)
 目的語 : integer (配列長)
 述語 : SIO_000008 (has attribute)
 目的語 (主語) : BlastAlignment
 述語 : SIO_000216 (has measurement value)
 目的語 (主語) : SIO_001021 (expected value)
 述語 : SIO_000300 (has value)
 目的語 : double (10e-30 など)

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : identity

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : double (%)

<sio:SIO_000229>

<aistls:templateHit>

<sio:SIO_000008>

<aistls:subject>

<sio:SIO_000216>

<sio:SIO_000792>

<sio:SIO_000300>111</sio:SIO_000300>

</sio:SIO_000792>

</sio:SIO_000216>

<sio:SIO_000216>

<sio:SIO_000791>

<sio:SIO_000300>1</sio:SIO_000300>

</sio:SIO_000791>

</sio:SIO_000216>

<sio:SIO_000216>

<aistls:coverage>

<sio:SIO_000300>100.00</sio:SIO_000300>

</aistls:coverage>

</sio:SIO_000216>

<sio:SIO_000216>

<aistls:sequenceLength>

<sio:SIO_000300>111</sio:SIO_000300>

</aistls:sequenceLength>

</sio:SIO_000216>

</aistls:subject>

</sio:SIO_000008>

<sio:SIO_000008>

<aistls:query>

<sio:SIO_000216>

<sio:SIO_000792>

<sio:SIO_000300>231</sio:SIO_000300>

</sio:SIO_000792>

```

</sio:SIO_000216>
<sio:SIO_000216>
  <sio:SIO_000791>
    <sio:SIO_000300>121</sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000791>
</sio:SIO_000216>
<sio:SIO_000216>
  <aistls:coverage>
    <sio:SIO_000300>43.87</sio:SIO_000300>
  </aistls:coverage>
</sio:SIO_000216>
<sio:SIO_000216>
  <aistls:sequenceLength>
    <sio:SIO_000300>111</sio:SIO_000300>
  </aistls:sequenceLength>
</sio:SIO_000216>
</aistls:query>
</sio:SIO_000008>
<sio:SIO_000008>
  <aistls:BlastAlignment>
    <sio:SIO_000216>
      <sio:SIO_001021>
        <sio:SIO_000300>5.25043e-64</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_001021>
    </sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000216>
      <aistls:identity>
        <sio:SIO_000300>90.99</sio:SIO_000300>
      </aistls:identity>
    </sio:SIO_000216>
  </aistls:BlastAlignment>
</sio:SIO_000008>
<sio:SIO_000673>
  <sio:SIO_000729>
    <sio:SIO_000300>1xyuA</sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_000729>

```

```

    </sio:SIO_000673>
    <sio:SIO_000216>
      <sio:SIO_000794>
        <sio:SIO_000300>1</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000794>
    </sio:SIO_000216>
  </aistls:templateHit>
</sio:SIO_000229>
• MODELLER 実行結果のトリプルを定義する。
  主語 : ModellingOutput
  述語 : SIO_000229 (has output)
  目的語 (主語) : PdbFormatStructureModel
    述語 : SIO_000300 (has value)
    目的語 : string (MODELLER 実行結果)
<sio:SIO_000229>
  <aistls:PdbFormatStructureModel>
    <sio:SIO_000300>
      MODELLER 実行結果
    </sio:SIO_000300>
  </aistls:PdbFormatStructureModel>
</sio:SIO_000229>

```

Modelling の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  <aistls:ModellingOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/modelling.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <aistls:BlastHit>
        <sio:SIO_000008>
          <aistls:BlastAlignment>
            <sio:SIO_000008>
              <aistls:subject>
                <sio:SIO_000216>
                  <sio:SIO_000792>
                    <sio:SIO_000300>117</sio:SIO_000300>
                  </sio:SIO_000792>
                </sio:SIO_000216>
              <sio:SIO_000216>
                <sio:SIO_000791>
                  <sio:SIO_000300>1</sio:SIO_000300>
                </sio:SIO_000791>
              </sio:SIO_000216>
            <sio:SIO_000216>
              <aistls:coverage>
                <sio:SIO_000300>100.00</sio:SIO_000300>
              </aistls:coverage>
            </sio:SIO_000216>
          <sio:SIO_000216>
            <aistls:sequenceLength>
              <sio:SIO_000300>117</sio:SIO_000300>
            </aistls:sequenceLength>
          </sio:SIO_000216>
        </aistls:BlastAlignment>
      </aistls:BlastHit>
    </sio:SIO_000229>
  </aistls:ModellingOutput>
</rdf:RDF>
```

.....

.....

.....

```
<sio:SIO_000229>
  <sio:SIO_010015>
    <sio:SIO_000300>
      &gt;sp|P04156|PRIO_HUMAN Major prion protein OS=Homo sapiens GN=PRNP PE=1 SV=1
      MANLGCWMLVLFVATWSDLGLCKKRPKPGGWNTGGSRYPGQGSPGGNRYPPQGGGGWGQP
      HGGGWGQPHGGGWGQPHGGGWGQGGGTHSQWNKPSKPKTNMKHMAGAAAAGA
      VVGGLGGYMLGSAMSRPIIHFGSDYEDRYRENMHRYPNQVYYRPMDEYSNQNNFVHDCV
      NITIKQHTVTTTTKGENFTETDVKMMERVVEQMCITQYERESQAYYQRGSSMVLFSPPV
      ILLISFLIFLIVG
    </sio:SIO_000300>
  </sio:SIO_010015>
</sio:SIO_000229>
```

.....

.....

.....

```
<sio:SIO_000229>
  <aistls:PdbFormatStructureModel>
    <sio:SIO_000300>MODEL:2      Query hit region:121-231
EXPDTA   THEORETICAL MODEL, MODELLER 9v5 2013/12/26 17:27:52
REMARK   6 MODELLER OBJECTIVE FUNCTION:      629.3421
REMARK   6 MODELLER BEST TEMPLATE % SEQ ID:  90.991
ATOM      1  N   VAL   121      17.477 -11.772  -0.651  1.00  89.30      N
ATOM      2  CA  VAL   121      16.995 -11.872  -2.041  1.00  89.30      C
ATOM      3  CB  VAL   121      17.764 -12.926  -2.780  1.00  89.30      C
ATOM      4  CG1 VAL   121      17.518 -14.283  -2.094  1.00  89.30      C
ATOM      5  CG2 VAL   121      17.351 -12.873  -4.259  1.00  89.30      C
.....
.....
.....
  </sio:SIO_000229>
</aistls:ModellingOutput>
</rdf:RDF>
```

Modelling 出力結果

2.3. PoodleL

2.3.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で PoodleL の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は PoodleLInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
<aistls:PoodleLInput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/poodlel.rdf#1">
```

- アミノ酸配列のトリプルを定義する。

主語 : PoodleLInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_010015 (protein sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (アミノ酸配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_010015>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      アミノ酸配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_010015>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

この定義に基づいて PoodleL の入力 RDF を作成する。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">

  <aistls:PoodleLInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/poodlel.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_010015>
        <sio:SIO_000300>
>sp|P04156|PRIO_HUMAN Major prion protein OS=Homo sapiens GN=PRNP PE=1 SV=1
MANLGCWMLVLFVATWSDLGLCKKRPKPGGWNTGGSRYPGQGSPPGGNRYPPQGGGGWGQP
HGGGWGQPHGGGWGQPHGGGWGQPHGGGWGQGGGTHSQWNKPSKPKTNMKHMAGAAAAGA
VVGGLGGYMLGSAMSRPIIHFGSDYEDRYRENMHRYPNQVYRPMDEYSNQNNFVHDCV
NITIKQHTVTTTTKGENFTETDVKMMERVVEQMCITQYERESQAYYQRGSSMVLFSPPV
ILLISFLIFLIVG
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_010015>
    </sio:SIO_000230>
  </aistls:PoodleLInput>
</rdf:RDF>
```

PoodleL 用入力 RDF

2.3.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

% curl --data-binary @入力 RDF 名

http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleL

PoodleL は非同期通信となるため、まずポーリングに必要な URI を格納した RDF が返却される。次に、この RDF の isDefinedBy で定義された

”http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleL?poll=任意の 16 進数”

を用いて SADI サーバへのポーリングを行う。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">

  <aistls:PoodleLOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/poodlel.rdf#1">

    <rdfs:isDefinedBy
rdf:resource="http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleL?poll=21"/>

    </aistls:PoodleLOutput>
  </aistls:PoodleLOutput>
</rdf:RDF>
```

ポーリングのための URI を格納した RDF

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleL?poll=21 (上図の場合 21)
%
```

PoodleLが終了すると、PoodleLの実行結果を格納した URL が標準出力に返却される。

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleL?poll=21
COMPLETE: http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/poodleLResult.rdf
%
```

出力された URL を用いて、以下のコマンドで結果を取得する。

```
% curl http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/ poodleLResult.rdf -o 出力 RDF 名
```

2.3.3. 実行結果

以下の定義に従い、PoodleL の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

<rdf:RDF

xmlns:rdf “http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#”

xmlns:aistls “http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#”

xmlns:sio “http://semanticscience.org/resource/”>

- 主語は PoodleLOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものがそのまま指定される。

<aistls:PoodleLOutput

rdf:about=”http://www.molprof.jp/ontologies/poodlel.rdf#1”>

- PoodleL の実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : PoodleLOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : PoodleResult

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 (主語) : disorderPrediction

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : SIO_000765 (probability value)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : double (ディスオーダー確率)

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : SIO_000789 (sequence element position)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : double (残基番号)

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 (主語) : SIO_010074 (amino acid residue)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (アミノ酸残基)

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 : SIO_000758 (disordered)

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 : SIO_001093 (rigid)
 <sio:SIO_000229>
 <aistls:PoodleResult>
 <sio:SIO_000008>
 <aistls:disorderPrediction>
 <sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000765>
 <sio:SIO_000300>0.1024</sio:SIO_000300>
 </sio:SIO_000765>
 </sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000008>
 <sio:SIO_001093/>
 </sio:SIO_000008>
 <sio:SIO_000008>
 <sio:SIO_010074>
 <sio:SIO_000300>T</sio:SIO_000300>
 </sio:SIO_010074>
 </sio:SIO_000008>
 <sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000789>
 <sio:SIO_000300>192</sio:SIO_000300>
 </sio:SIO_000789>
 </sio:SIO_000216>
 </aistls:disorderPrediction>
 </sio:SIO_000008>
 </aistls:PoodleResult>
 </sio:SIO_000229>

PoodleL の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  <aistls:PoodleLOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/poodlel.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <aistls:PoodleResult>
        <sio:SIO_000008>
          <aistls:disorderPrediction>
            <sio:SIO_000216>
              <sio:SIO_000765>
                <sio:SIO_000300>0.9723</sio:SIO_000300>
              </sio:SIO_000765>
            </sio:SIO_000216>
          <sio:SIO_000008>
            <sio:SIO_000758/>
          </sio:SIO_000008>
          <sio:SIO_000008>
            <sio:SIO_010074>
              <sio:SIO_000300>P</sio:SIO_000300>
            </sio:SIO_010074>
          </sio:SIO_000008>
          <sio:SIO_000216>
            <sio:SIO_000789>
              <sio:SIO_000300>76</sio:SIO_000300>
            </sio:SIO_000789>
          </sio:SIO_000216>
        </aistls:disorderPrediction>
      </sio:SIO_000008>
    .....
    .....
    .....
      <sio:SIO_000789>
        <sio:SIO_000300>165</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000789>
    </sio:SIO_000216>
  </aistls:disorderPrediction>
</sio:SIO_000008>
<sio:SIO_000008>
  <aistls:disorderPrediction>
    <sio:SIO_000216>
      <sio:SIO_000765>
        <sio:SIO_000300>0.1024</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000765>
    </sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000008>
      <sio:SIO_001093/>
    </sio:SIO_000008>
    <sio:SIO_000008>
      <sio:SIO_010074>
        <sio:SIO_000300>T</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_010074>
    </sio:SIO_000008>
    <sio:SIO_000216>
      <sio:SIO_000789>
        <sio:SIO_000300>192</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000789>
    </sio:SIO_000216>
  </aistls:disorderPrediction>
</sio:SIO_000008>
</aistls:PoodleResult>
</sio:SIO_000229>
</aistls:PoodleLOutput>
</rdf:RDF>
```

PoodleL 出力結果

2.4. PoodleS

2.4.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で PoodleS の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は PoodleSInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
<aistls:PoodleSInput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/poodles.rdf#1">
```

- アミノ酸配列のトリプルを定義する。

主語 : PoodleSInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_010015 (protein sequence)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (アミノ酸配列)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <sio:SIO_010015>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      アミノ酸配列
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </sio:SIO_010015>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

この定義に基づいて PoodleS の入力 RDF を作成する。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">

  <aistls:PoodleSInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/poodles.rdf#2">
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_010015>
        <sio:SIO_000300>
          >sp|P35413|GPR3_MOUSE G-protein coupled receptor 3 OS=Mus musculus GN=Gpr3 PE=2 SV=1
          MMWGAGSSMAWFSAGSGSVNVSSVDPVEEPTGTPATLLPSPRAWDVVLCSGTLVSCENAL
          VVAIIIVGTPAFRAPMFLLVGSLAVADLLAGLGLVLHFAADFCIGSPMSMLVGVLAMAF
          TASIGSLLAITVDRLSLYNALTYSETTVTRTYVMLALVWVGALGLGLVPVLAWNCRDG
          LTTCGVVYPLSKNHLVVLAIAFFMVFGIMLQLYAQICRIVCRHAQQIALQRHLLPASHYV
          ATRKGIATLAVVLGAFAACWLFPFTVYCLLGADSPRLYTYLTLLPATYNSMINPVIYAFR
          NQDVQKVLWAICCCSTSKIPFRSRSPSDV
        </sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_010015>
    </sio:SIO_000230>
  </aistls:PoodleSInput>
</rdf:RDF>
```

PoodleS 用入力 RDF

2.4.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

% curl --data-binary @入力 RDF 名

http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleS

PoodleS は非同期通信となるため、まずポーリングに必要な URI を格納した RDF が返却される。次に、この RDF の isDefinedBy で定義された

”http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleS?poll=任意の 16 進数”

を用いて SADI サーバへのポーリングを行う。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  <aistls:PoodleSOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/poodles.rdf#1">
    <rdfs:isDefinedBy
      rdf:resource="http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleS?poll=3F"/>
    </aistls:PoodleSOutput>
  </rdf:RDF>
```

ポーリングのための URI を格納した RDF

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleS?poll=3F (上図の場合  
3F)  
%
```

PoodleS が終了すると、PoodleS の実行結果を格納した URL が標準出力に返却される。

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/PoodleS?poll=3F  
COMPLETE: http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/poodleSResult.rdf  
%
```

出力された URL を用いて、以下のコマンドで結果を取得する。

```
% curl http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/ poodleSResult.rdf -o 出力 RDF 名
```

2.4.3. 実行結果

以下の定義に従い、PoodleS の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は PoodleSOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定されたものがそのまま指定される。

```
<aistls:PoodleSOutput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/poodles.rdf#1">
```

- PoodleS の実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : PoodleSOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : PoodleResult

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 (主語) : disorderPrediction

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : SIO_000765 (probability value)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : double (ディスオーダー確率)

述語 : SIO_000216 (has measurement value)

目的語 (主語) : SIO_000789 (sequence element position)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : double (残基番号)

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 (主語) : SIO_010074 (amino acid residue)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (アミノ酸残基)

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 : SIO_000758 (disordered)

述語 : SIO_000008 (has attribute)

目的語 : SIO_001093 (rigid)
 <sio:SIO_000229>
 <aistls:PoodleResult>
 <sio:SIO_000008>
 <aistls:disorderPrediction>
 <sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000765>
 <sio:SIO_000300>0.1024</sio:SIO_000300>
 </sio:SIO_000765>
 </sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000008>
 <sio:SIO_001093/>
 </sio:SIO_000008>
 <sio:SIO_000008>
 <sio:SIO_010074>
 <sio:SIO_000300>T</sio:SIO_000300>
 </sio:SIO_010074>
 </sio:SIO_000008>
 <sio:SIO_000216>
 <sio:SIO_000789>
 <sio:SIO_000300>192</sio:SIO_000300>
 </sio:SIO_000789>
 </sio:SIO_000216>
 </aistls:disorderPrediction>
 </sio:SIO_000008>
 </aistls:PoodleResult>
 </sio:SIO_000229>

PoodleS の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  <aistls:PoodleSOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/poodles.rdf#2">
    <sio:SIO_000229>
      <aistls:PoodleResult>
        <sio:SIO_000008>
          <aistls:disorderPrediction>
            <sio:SIO_000216>
              <sio:SIO_000765>
                <sio:SIO_000300>0.0209</sio:SIO_000300>
              </sio:SIO_000765>
            </sio:SIO_000216>
          <sio:SIO_000008>
            <sio:SIO_001093/>
          </sio:SIO_000008>
          <sio:SIO_000008>
            <sio:SIO_010074>
              <sio:SIO_000300>G</sio:SIO_000300>
            </sio:SIO_010074>
          </sio:SIO_000008>
          <sio:SIO_000216>
            <sio:SIO_000789>
              <sio:SIO_000300>254</sio:SIO_000300>
            </sio:SIO_000789>
          </sio:SIO_000216>
        </aistls:disorderPrediction>
      </sio:SIO_000008>
    .....
    .....
    .....
      <sio:SIO_000216>
        <sio:SIO_000789>
          <sio:SIO_000300>260</sio:SIO_000300>
        </sio:SIO_000789>
      </sio:SIO_000216>
    </aistls:disorderPrediction>
  </sio:SIO_000008>
  <sio:SIO_000008>
    <aistls:disorderPrediction>
      <sio:SIO_000216>
        <sio:SIO_000765>
          <sio:SIO_000300>0.0347</sio:SIO_000300>
        </sio:SIO_000765>
      </sio:SIO_000216>
    <sio:SIO_000008>
      <sio:SIO_001093/>
    </sio:SIO_000008>
    <sio:SIO_000008>
      <sio:SIO_010074>
        <sio:SIO_000300>D</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_010074>
    </sio:SIO_000008>
    <sio:SIO_000216>
      <sio:SIO_000789>
        <sio:SIO_000300>86</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000789>
    </sio:SIO_000216>
    </aistls:disorderPrediction>
  </sio:SIO_000008>
</aistls:PoodleResult>
</sio:SIO_000229>
</aistls:PoodleSOutput>
</rdf:RDF>
```

PoodleS 出力結果

2.5. Rassie

2.5.1. 入力 RDF の準備

以下の方法で Rassie の入力 RDF を作成する。

- RDF のヘッダに使用語彙 RDF、AISTLS SIO OWL を以下のように定義する。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は RassieInput クラス、rdf:about 属性は任意とする。

```
<aistls:RassieInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/rassie.rdf#1">
```

- RNA2 次構造のトリプルを定義する。

主語 : RassieInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : secondaryStructureModel

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (RNA2 次構造)

```
<sio:SIO_000230>
```

```
  <aistls:secondaryStructureModel>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      RNA2次構造
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </aistls:secondaryStructureModel>
```

```
</sio:SIO_000230>
```

- コマンドラインオプションのトリプルを定義する。

主語 : RassieInput

述語 : SIO_000230 (has input)

目的語 (主語) : SIO_000144 (parameter)

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Rassie オプション)

```
<sio:SIO_000230>
```

```

    <sio:SIO_000144>
        <sio:SIO_000300> -q 100 -ins 100 -clst -outclst 10
-ins_chain</sio:SIO_000300>
    </sio:SIO_000144>
</sio:SIO_000230>

```

この定義に基づいて **Rassie** の入力 RDF を作成する。

```

<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/">

  <aistls:RassieInput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/rassie.rdf#1">
    <sio:SIO_000230>
      <aistls:secondaryStructureModel>
        <sio:SIO_000300>
          >1CQ5
          GGCGUUUACCAGGUCAGGUCCGGAAGGAAGCAGCCAAGGCGCC
          ((((((....(((....(((....)))....)))..)))))) (g=4,th=0.2)
        </sio:SIO_000300>
      </aistls:secondaryStructureModel>
    </sio:SIO_000230>
    <sio:SIO_000230>
      <sio:SIO_000144>
        <sio:SIO_000300> -q 100 -ins 100 -clst -outclst 10 -ins_chain</sio:SIO_000300>
      </sio:SIO_000144>
    </sio:SIO_000230>
  </aistls:RassieInput>
</rdf:RDF>

```

Rassie 用入力 RDF

2.5.2. 実行コマンド

利用するマシンから以下のコマンドを実行する。

```
% curl --data-binary @入力 RDF 名  
http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Rassie
```

Rassie は非同期通信となるため、まずポーリングに必要な URI を格納した RDF が返却される。次に、この RDF の isDefinedBy で定義された
”http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Rassie?poll=任意の 16 進数”
を用いて SADI サーバへのポーリングを行う。

```
<rdf:RDF  
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"  
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#">  
  <aistls:RassieOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/rassie.rdf#1">  
    <rdfs:isDefinedBy  
rdf:resource="http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Rassie?poll=30"/>  
  </aistls:RassieOutput>  
</rdf:RDF>
```

ポーリングへの URI を格納した RDF

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Rassie?poll=30 (上図の場合 30)  
COMPLETE: http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/rna3dResult.rdf  
%
```

Rassie が終了すると、Rassie の実行結果を格納した URL が標準出力に返却される。

```
% curl http://semantic.medals.jp:8090/sadi-services/Rassie?poll=30  
COMPLETE: http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/rna3dResult.rdf  
%
```

出力された URL を用いて、以下のコマンドで結果を取得する。

```
% curl http://semantic.medals.jp/tmp/xxx/yyyy/ rna3dResult.rdf -o 出力 RDF 名
```


2.5.3. 実行結果

以下の定義に従い、Rassie の実行結果が RDF 形式で出力される。

- RDF のヘッダは以下となる。

```
<rdf:RDF
```

```
  xmlns:rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:aistls "http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  xmlns:sio "http://semanticscience.org/resource/">
```

- 主語は RassieOutput クラス、rdf:about 属性は入力 RDF ファイルで指定したものがそのまま指定される。

```
<aistls:RassieOutput
```

```
  rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/rassie.rdf#1">
```

- Rassie の実行結果のトリプルは以下となる。

主語 : RassieOutput

述語 : SIO_000229 (has output)

目的語 (主語) : PdbFormatStructureModel

述語 : SIO_000300 (has value)

目的語 : string (Rassie の実行結果)

```
<sio:SIO_000229>
```

```
  <aistls:PdbFormatStructureModel>
```

```
    <sio:SIO_000300>
```

```
      Rassie の実行結果
```

```
    </sio:SIO_000300>
```

```
  </aistls:PdbFormatStructureModel>
```

```
</sio:SIO_000229>
```

Rassie の出力結果の例を以下に示す。

```
<rdf:RDF
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:sio="http://semanticscience.org/resource/"
  xmlns:aistls="http://www.molprof.jp/ontologies/aistlssio.owl#"
  <aistls:RassieOutput rdf:about="http://www.molprof.jp/ontologies/rassie.rdf#1">
    <sio:SIO_000229>
      <aistls:PdbFormatStructureModel>
        <sio:SIO_000300>MODEL 6
          ATOM      1 P      G X  1      -5.811  -0.107  0.010
          ATOM      2 O5'    G X  1      -4.838  -1.143  0.726
          ATOM      3 C5'    G X  1      -3.724  -0.694  1.493
          ATOM      4 C4'    G X  1      -2.458  -0.946  0.723
          ATOM      5 C3'    G X  1      -1.340  -1.526  1.580
          ATOM      6 O3'    G X  1      -1.452  -2.938  1.663
          ATOM      7 O4'    G X  1      -1.910   0.339  0.313
          ATOM      8 C2'    G X  1      -0.093  -1.133  0.801
          ATOM      9 C1'    G X  1      -0.501   0.232  0.241
          ATOM     10 N9      G X  1       0.158   1.395  0.842
          ATOM     11 C4      G X  1       1.521   1.457  0.889
          ATOM     12 C8      G X  1      -0.294   2.576  1.393
          ATOM     15 N7      G X  1       0.629   3.367  1.803
          ATOM     16 C5      G X  1       1.819   2.702  1.505
          ATOM     17 C6      G X  1       3.160   3.093  1.733
          ATOM     18 N1      G X  1       4.061   2.116  1.279
          ATOM     19 C2      G X  1       3.696   0.918  0.680
          ATOM     20 N3      G X  1       2.443   0.552  0.475
          ATOM     21 O2'    G X  1      -0.659  -2.130  0.294
          ATOM     22 O6      G X  1       3.590   4.130  2.242
          ATOM     23 N2      G X  1       4.712   0.130  0.323
          ATOM     24 P      G X  2      -1.513  -3.641  3.101
          .....
          .....
          .....
          ATOM     907 O2'    C X  42       1.150   0.253 -8.802
          ATOM     908 N4     C X  42       5.681   3.921 -4.083
          ATOM     909 P      C X  43       3.185   0.660 -11.758
          ATOM     910 O5'    C X  43       2.379   1.987 -11.301
          ATOM     911 C5'    C X  43       0.972   2.127 -11.562
          ATOM     912 C4'    C X  43       0.451   3.512 -11.167
          ATOM     913 C3'    C X  43       1.156   4.609 -11.935
          ATOM     914 O3'    C X  43       0.484   4.915 -13.168
          ATOM     915 O4'    C X  43       0.669   3.787 -9.764
          ATOM     916 C2'    C X  43       1.161   5.780 -10.999
          ATOM     917 C1'    C X  43       1.061   5.177 -9.610
          ATOM     918 N1     C X  43       2.353   5.287 -8.898
          ATOM     919 C2     C X  43       2.503   6.326 -7.995
          ATOM     920 C6     C X  43       3.366   4.397 -9.135
          ATOM     923 C5     C X  43       4.549   4.501 -8.481
          ATOM     924 C4     C X  43       4.684   5.584 -7.541
          ATOM     925 N3     C X  43       3.686   6.447 -7.321
          ATOM     926 O2     C X  43       1.561   7.102 -7.815
          ATOM     927 O2'    C X  43      -0.524   6.471 -10.816
          ATOM     928 N4     C X  43       5.808   5.737 -6.865
          TER
          END
        </sio:SIO_000300>
      </aistls:PdbFormatStructureModel>
    </sio:SIO_000229>
  </aistls:RassieOutput>
</rdf:RDF>
```

Rassie 出力結果

おわりに

ご質問やご意見は下記のメールアドレスにお願いいたします。

workflow@molprof.jp

産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター 情報統合班では、利用者のご要望を積極的に取り入れ、より良いシステムにしていく計画です。

産業技術総合研究所
創薬分子プロファイリング研究センター
情報統合班 <http://togo.medals.jp>

〒135-0064 東京都江東区青海 2-4-7

産総研 臨海副都心センター別館（バイオ・IT 融合研究棟）