

ライフサイエンスデータベース統合推進事業
統合化推進プログラム
研究開発課題
「蛋白質構造データベースの国際的な構築と統合化」

研究開発終了報告書

研究開発期間：平成23年4月～平成26年3月

研究代表者：中村 春木

(国立大学法人大阪大学蛋白質研究所、教授)



§ 1 研究開発実施の概要

(1) 実施概要

- 生命活動はゲノム情報が物理的に発現した蛋白質によって担われており、それらの原子レベルの分解能の立体構造に基づいて高次の生命機序までが合理的に説明される。これらの蛋白質立体構造情報は、PDB(Protein Data Bank, 蛋白質立体構造データバンク)へ全て登録され全人類に無償で提供されている。一方、NMR 解析は生体高分子の立体構造を与えるだけでなくリガンド相互作用、動的構造転移などの機能解明に寄与する情報を与える。NMR 実験データの豊富な情報を有効利用するためには高度に組織化したデータ登録と管理、公開のための仕組みが必要とされる。
- 本研究開発においては、大阪大学蛋白質研究所内に、日本蛋白質構造データバンク(PDBj: PDB Japan)なる組織を構築し、米国(RCSB-PDB)、欧州(EBI-PDBe)およびNMR 実験情報のデータバンクであるBMRB(BioMagResBank)と協力して国際蛋白質構造データバンク(wwPDB)を運営し、PDB の構造情報と NMR 実験データを wwPDB とBMRB の一翼を担って主にアジア・オセアニア地区から収集し、厳しい品質管理を行いつつ人手をできるだけかけないコスト・パフォーマンスが優れたデータベース構築と公開を行った。PDBj では 4 名のアノテータ体制で 2011 年 4 月から 2013 年 12 月末までに 5,406 件の立体構造データの検証・編集・登録の処理を行った。PDBj-BMRB では 2 名のアノテータ体制で同時期に 160 件の立体構造データの検証・編集・登録の処理を行った。また、セキュアなデータベース運営を行うため、バイオサイエンスデータベースセンター(NBDC)と協力して、NBDC のデータセンターにも PDBj および PDBj-BMRB のポータルを設置し、通常メインサイトを NBDC に置き大阪大学側はミラーとする安全性の高い冗長化したデータベース運営を実施した。特に PDBj-BMRB では、複雑化するサーバー群について仮想化技術を用いた管理運営の効率化を進め、省電力、耐障害についての性能を向上させた。
- PDBj および PDBj-BMRB において、データ管理・配布システム、構造データのオントロジー、データ記載のフォーマット、ユーザインターフェース等の開発・改良を実施し、国内外の様々な生命科学データベースと統合化が実施できる環境を整備した。具体的には、PDBj では他の wwPDB メンバーと協力して新たな PDB フォーマットや登録システムの開発を実施するとともに、独自にセマンティック・ウェブの標準フォーマットである RDF を開発し、PDB/RDF のデータを wwPDB の国際標準として確立し公開した。PDBj-BMRB においても米国のBMRBと協力してXML化したデータ記述法を開発しRDF化も実施する一方、NMRデータの登録・アノテーション業務をシームレスに実現し、複雑なデータ構造を持つ命名法やフォーマットの変換を効率化、自動化を行うツールの開発と公開を行った。
- 上記のように開発したXML化やRDF化等の統合化環境に基づき、蛋白質機能情報および高次生命機能情報と、蛋白質構造情報や NMR 実験情報との統合化システムを開発し、具体的に他のデータベースとも統合することによって、配列情報から構造情報を基に蛋白質機能を同定・予測し高次生命機能に対する原子レベルでの合理的な解釈を可能とする仕組みを開発・公開した。
- データ寄託・登録者に対する高品質のデータ整理と登録手法やデータベース利用者に対する初歩的および高度なデータ利用法の講習会を適宜開催し、さらに高校生や一般社会人に対する啓蒙活動を行った。一方、キュレータおよびアノテータに対しては、他の wwPDB メンバーが主催する face-to-face の講習会や TV 会議に参加させ、on-the-job-training によって人材養成を行った。

(2) 研究開発成果のデータベース等

研究開発期間中に構築、公開したデータベースとサービスへのアクセス数について、下記に示す。蓄積レコード数を有するデータベースについては、別紙1に記載した。

・ 研究代表者(中村 春木)

※2011 年度と 2012 年度はロボットアクセスを含む統計値であるが、2013 年度はアクセス集計方法の変更により検索エンジンによるロボットアクセスは除去されている。

(参考のためロボットアクセスを除去しない 2013 年度の数値を()内に記す。)

データベース名:PDB

URL:<http://pdj.org/>

データベースの概要:日米欧の3極で運営する wwPDB による生体高分子(蛋白質・核酸・糖鎖など)の立体構造データのデータバンク。

公開日: 2002 年 4 月

累積データ登録数(2013 年 12 月末):96,596 件

内 PDBj が処理した件数:(2013 年 12 月末までの総数)22,131 件、2011 年度 1,836 件、
2012 年度 1,947 件、2013 年度(4 月 1 日~12 月末)1,623 件

アクセス数:下記にサービス毎に示す

【主要なサービス・ウェブツールの内訳】

・ 新版 PDBj-Mine (RDB 検索システム)

URL:<http://pdj.org/mine/>

作成者:Gert-Jan Bekker

サービスの概要 :PDB のデータを検索するためのウェブインタフェース

公開日:2013 年 4 月

アクセス数:523,609(2013 年 4 月~12 月末、ロボット込み 7,402,378 件)

・ 旧版 PDBj-Mine (RDB 検索システム)

URL:<http://service.pdj.org/mine/>

作成者:金城 玲

サービスの概要:PDB のデータを検索するためのウェブインタフェース

公開日:2009 年 10 月

アクセス数:9,897,022(2011 年度)、14,030,736(2012 年度)、
283,011(2013 年 4 月~12 月末、ロボット込み 4,104,068 件)

・ PDB Archive のデータファイルダウンロード(http, ftp, rsync)

URL:<http://pdj.org/>、<ftp://ftp.pdj.org/>、
<rsync://ftp.pdj.org/>

サービスの概要:PDB のデータファイルのダウンロード

ダウンロード数:37,939,730(2011 年度)、25,299,732(2012 年度)、
37,885,220(2013 年 4 月~12 月末)

・ PDBj トップページ(新サイト)

URL:<http://pdj.org/>

サービスの概要:PDBj の各種情報および各サービスへのフロントエンドを提供

公開日:2013 年 4 月

アクセス数:197,459(2013 年 4 月~12 月末)

・ PDBj トップページ(旧サイト)

URL:http://legacy.pdj.org/index*.html

サービスの概要:PDBj の各種情報および各サービスへのフロントエンドを提供

公開日:2002 年 4 月

アクセス数:205,791(2011 年度)、242,320(2012 年度)、
211,922(2013 年 4 月~12 月末)

・ PDBj 登録サーバページ(構造データ登録用)

URL:<http://pdbdep.protein.osaka-u.ac.jp/>

サービスの概要: PDB データの登録窓口
公開日:2000 年 6 月
アクセス数:229,813(2011 年度)、258,236(2012 年度)、
184,123(2013 年 4 月～12 月末)

作成データベース:eF-site

URL:<http://ef-site.hgc.jp/ef-site>
作成者:木下 賢吾
データベースの概要: 蛋白質の分子表面の形状と物性(静電ポテンシャルと疎水性度および機能部位のデータベース。
公開日:2000 年 5 月(試作版)、2002 年 3 月(修正版)
アクセス数:89,030(2011 年度)、88,826(2012 年度)、
60,741(2013 年 4 月～12 月末)

ウェブツール名:eF-surf

URL:<http://ef-site.hgc.jp/ef-surf>
作成者:木下 賢吾
データベースの概要: 蛋白質の分子表面の形状と物性(静電ポテンシャルと疎水性度)を計算するウェブサービス
公開日:2006 年 3 月
アクセス数:667(2011 年度)、447(2012 年度)、
3,365(2013 年 4 月～12 月末)

ウェブツール名:eF-seek

URL:<http://ef-site.hgc.jp/ef-seek>
作成者:木下 賢吾
サービスの概要: 入力された構造と似た表面を持つ構造を検索し、それに基づいて機能部位を予測するウェブサービス
公開日:2006 年 3 月
アクセス数:397(2011 年度)、128(2012 年度)、
3,247(2013 年 4 月～12 月末)

ツール名:jV (PDBj Viewer)

URL:<http://pdbj.org/jv/>、<http://ef-site.hgc.jp/jv/>
作成者:木下 賢吾
サービスの概要: stand alone アプリケーションとしても applet としても使える、Java による分子閲覧ソフトウェア
公開日:2004 年 1 月(ソースコード公開開始)
アクセス数:95,708(2011 年度)、197,315(2012 年度)、
421,574(2013 年 4 月～12 月末)
※ソフトウェアのダウンロード、ドキュメントへのアクセス、applet ページへのアクセスによるソフトウェアの利用を含む。

ウェブツール名:ProMode-Elastic

URL: <http://pdbj.org/promode-elastic>
http://promode.pdbj.org/promode_elastic/
作成者:輪湖 博、猿渡 茂、中村 春木
サービスの概要: 二面角を変数とする基準振動解析プログラムによって計算された蛋白質のダイナミクス・データベース。2013 年 12 月末時点で 22,594(PDB ID 数、鎖数では 103529)件を公開。
公開日:2003 年 4 月

アクセス数:43,719(2011年度)、107,819(2012年度)、
16,001(2013年4月～12月末、ロボット込み 226,931)

作成データベース:eProtS(蛋白質構造百科事典)

URL: http://pdj.org/eptoms/index_en.cgi (英語版)
http://pdj.org/eptoms/index_ja.cgi (日本語版)

作成者:PDBj メンバー(代表:中村 春木)

データベースの概要: 高校生以上の学生を含む一般を対象とした、蛋白質の構造と機能の解説記事を集めた百科事典。2013年12月末時点で日本語版 356件、英語版 353件を公開。

公開日:2003年9月

アクセス数:388,215(2011年度)、394,236(2012年度)、
79,137(2013年4月～12月末、ロボット込み 294,418)

作成データベース:今月の分子(Molecule of the Month)

URL: <http://pdj.org/mom> (新インタフェース)
<http://legacy.pdj.org/mom/> (旧インタフェース)

作成者:工藤 高裕、中村 春木

データベースの概要: RCSB-PDBより毎月提供されている分子解説記事「Molecule of the Month」を日本語に訳したもの。社会で話題となっている内容に関わる分子を蛋白質構造データベース(PDB)から選び、機能と構造に関して解説している。2013年12月末時点で168件を公開。

公開日:2008年4月

アクセス数:260,352(2011年度)、438,179(2012年度)、
242,953(2013年4月～12月末)

ウェブツール名:Sequence Navigator

URL: <http://pdj.org/seqnavi> (新インタフェース)
<http://service.pdj.org/seqnavix/> (旧インタフェース)

作成者:Daron Standley

サービスの概要: 入力されたアミノ酸配列と似た配列を持つ構造をPDBの中から探索するサービス

公開日:2004年9月

アクセス数:25,979(2011年度)、19,192(2012年度)、
12,995(2013年4月～12月末、ロボット込み 64,433)

ウェブツール名:Structure Navigator

URL: <http://pdj.org/strucnavi> (新インタフェース)
<http://service.pdj.org/stnavix/> (旧インタフェース)

作成者:Daron Standley

サービスの概要: 入力された分子の構造と似た立体構造を持つ分子をPDBの中から探索するサービス

公開日:2004年12月

アクセス数:2,910(2011年度)、3,017(2012年度)、
768(2013年4月～12月末)

ウェブツール名:EM Navigator

URL: <http://pdj.org/emnavi/>

作成者:鈴木 博文

サービスの概要: EMDBとPDBを基にした電子顕微鏡による生体分子、細胞、組織の三次元再構成像と、それに関連したPubMed等の閲覧インタフェースを提供する

公開日:2007年5月
アクセス数:4,925,433(2011年度)、5,848,932(2012年度)、
243,177(2013年4月~12月末、ロボット込み 16,874,723)

ウェブツール名:万見(よろづみ)・万見プライム

URL: <http://pd bj.org/yorodumi/>
作成者:鈴木 博文
サービスの概要: EMDB・PDB 両データベースの構造を手軽に閲覧できるようにするためのウェブインタフェース

公開日:2007年5月
アクセス数:8,231,530(2011年度)、7,546,702(2012年度)、
31,289(2013年4月~12月末、ロボット込み 3,798,683)

ウェブツール名:GIRAF

URL: <http://pd bj.org/giraf/>
作成者:金城 玲
サービスの概要: 入力された構造または指定された PDB エントリーの構造と似たりガンド結合部位を持つ分子を PDB 内で検索するサービス

公開日:2008年12月
アクセス数:4,946(2011年度)、5,072(2012年度)、
18,245(2013年4月~12月末、ロボット込み 32,320)

ウェブツール名:CRNPRED

URL: <http://pd bj.org/crnpred/>
作成者:金城 玲
サービスの概要: 蛋白質のアミノ酸配列から二次構造を予測するサービス

公開日:2009年6月
アクセス数:6,060(2011年度)、7,284(2012年度)、
7,846(2013年4月~12月末、ロボット込み 10,894)

ウェブツール名:Protein Globe

URL: <http://pd bj.org/globe/>
作成者:金城 玲
サービスの概要: PDB に登録されている各蛋白質を点で示し、構造のタイプが似ているもの程距離が近くなるよう球上に配置した、構造閲覧インタフェース。

公開日:2007年12月
アクセス数:72,278(2011年度)、5,048(2012年度)、
960(2013年4月~12月末、ロボット込み 2,828)

ウェブツール名:SeSAW

URL: <http://pd bj.org/sesaw/>
作成者:Daron Standley
サービスの概要: 機能未知の蛋白質構造データに対して、構造の類似性だけでなく、局所のおよび全体的なアミノ酸配列の類似性も加味して、ファミリーあるいはスーパーファミリーを推定し、推定される生化学的機能を提示するサービス

公開日:2008年9月
アクセス数:4,283(2011年度)、2,683(2012年度)、
12,845(2013年4月~12月末)

ウェブツール名:MAFFTash

URL: <http://pd bj.org/mafftash/>

作成者:Daron Standley、加藤 和貴

サービスの概要: 構造アラインメントの出力を制約条件として、配列・構造統合アラインメントを構築するシステム

公開日:2008年12月

アクセス数:3,292(2011年度)、2,770(2012年度)、
5,079(2013年4月~12月末)

ウェブツール名:Spanner

URL: <http://pdj.org/spanner/>

作成者:Daron Standley

サービスの概要: 指定した Template 構造に基づき、ループ部分には fragment 法を用いて、アミノ酸配列の構造モデルを作成するホモロジーモデル作成サービス

公開日:2009年8月

アクセス数:4,339(2011年度)、3,883(2012年度)、
1,954(2013年4月~12月末)

ウェブツール名:SFAS

URL: <http://pdj.org/sfas/>

作成者:Daron Standley

サービスの概要: アミノ酸配列からホモロジーモデルを構築し、機能を推定するサービス

公開日:2009年8月(2010年度まではプロトタイプ)

アクセス数:2,474(2011年度)、4,695(2012年度)、
2,779(2013年4月~12月末)

・ 主たる共同研究者(藤原 敏道)

データベース名:BMRB (BioResMagBank)

URL: <http://bmrprotein.osaka-u.ac.jp/>

作成者: Eldon L. Ulrich、Steve Mading、John Markley、阿久津秀雄、中谷英一、原野陽子、小林直宏、藤原敏道、中村春木

データベースの概要: BMRB (BioMagResBank、Biological Magnetic Resonance Data Bank) はペプチド、タンパク質、核酸など生体高分子を対象としたの国際的データベースであり、化学シフト、緩和データ、相互作用データ等の核磁気共鳴法(NMR)の実験データを網羅的に取り扱っている。

公開日:2002年3月

アクセス数:167,230(2011年度)、282,342(2012年度)、150,610(2013年4月~12月末)
累積データ登録数:9,934件、内 PDBj-NMR が 2013年12月までに処理した実数は910件

データベース名:BMRB/XML/RDF

URL: <http://bmrpub.protein.osaka-u.ac.jp/>

作成者: 横地政志、小林直宏、藤原敏道、中村春木、Eldon L. Ulrich、John Markley

データベースの概要: BMRBに登録されているNMR実験情報の全エントリーに関して、NMRSTAR dictionary に完全準拠させたXMLスタイルシートを基にして構築されたXMLエントリー群、XMLスタイルシートからOWLにより記述されたオントロジーを作成し、Uniprot、PDB、PubMedなどの主要なライフサイエンス系データベースへのリンクを埋め込んだRDFエントリー群として公開している。

公開日:2013年8月

アクセス総数:549,742件(2013年8月~2013年12月の統計)
累積データ登録数:9,934件。BMRBデータベースと同期している

§2. 研究開発構想(および構想計画に対する達成状況)

(1) 当初の研究開発構想

・蛋白質や核酸、糖鎖等の生体高分子の原子レベルの分解能での立体構造データと NMR 実験データを、国際的なデータベース wwPDB と BMRB の一翼を担って収集し、厳しい品質管理を行いつつコスト・パフォーマンスが優れたデータベース構築と公開を行う PDBj および NMR 実験データベース(PDBj-BMRB)の活動を実施する。具体的には、H24 年度の中旬までに、国際協力に基づいたソフトウェア開発により、品質精査を伴う登録業務作業のさらなる共通化・合理化・自動化を推進するとともに、実験データの品質と記載の検証の精度を高める。また、H24 年度までに高分解能の電子顕微鏡実験や X 線および中性子線による小角散乱実験からの構造情報のデータベース化を開始する。wwPDB の国際諮問委員会(wwPDBAC)の会合が、H23 年度は英国 EBI-PDBe、H24 年度は我々 PDBj、H25 年度は米国 RCSB-PDB にてそれぞれ開催される予定であり、H23、25 年度における参加と H24 年度における主催を行う。また、この PDBj および PDBj-BMRB の活動を通して、恒久的に持続可能な統合的バイオサイエンス・データベースのありかたを、本研究開発終了時までにはバイオサイエンスデータベースセンター(NBDC)と協力して確立する。

・PDBj および PDBj-BMRB において、データ管理・配布システム、構造データのオントロジー、データ記載のフォーマット、ユーザインターフェース等の開発・改良を実施し、国内外の様々な生命科学データベースと統合化が実施できる環境を整備する。

・上記した統合化環境に基づき、蛋白質機能情報および高次生命機能情報と、蛋白質構造情報との統合化システムを開発し、具体的に他のデータベースとも統合することによって、1300 万件を越すデータ量の配列情報と約 7 万件の構造情報とのギャップを埋める。こうして、配列情報から構造情報を基に蛋白質機能を同定・予測するサービスを提示・公開し、高次生命機能に対する原子レベルでの合理的な解釈を可能とする。

・データ寄託・登録者に対する高品質のデータ整理と登録についての教育、データベース利用者に対する初歩的および高度なデータ利用法についての教育、さらにキュレータおよびアナテータに対する on-the-job-training による専門的技術指導等の、種々の人材養成を行う。

(2) 新たに追加・修正など変更した研究開発構想

・登録業務の標準化・自動化の開発のため、wwPDB として大規模で緻密な国際的なシステム(Common Deposition and Annotation System)を開発しており H24 年度中にプロトタイプがほぼ完成した。プロトタイプに対してほぼ1年間の世界中への周知期間を設け、利用者およびアナテータからのフィードバックを受けて完成度を上げて、2014 年 1 月に正式な公開を行った。このため、研究の進展につき1年間延長を行った。

・電子顕微鏡および X 線小角散乱の構造情報 DB の構築と公開につき、電子顕微鏡のデータベース(EMDB)については計画通りに 2012 年 3 月に wwPDB に加わり PDBj でも電子顕微鏡によって解析された構造の PDB データベースへの登録処理を H24 年度から開始した。一方、X 線小角散乱による構造情報については、原子レベルの分解能を直接有するわけではないため、PDB への登録に関するタスクフォースを 2013 年 6 月に wwPDB が開催し、PDBj からも代表者が参加した。そのタスクフォースにおける議論の結果、wwPDB の組織内に別のアーカイブを構築して X 線小角散乱の実験データとそれに基づく構造モデルについてのデータベースを構築する方向となり、現在、データ検証方法についての議論が進められている。以上の国際的な状況の変化に PDBj は積極的に対応し、当初計画を修正した。

・wwPDB では wwPDB Foundation と称する NPO 法人を設立し、社会に対する国際的アウトリーチ活動を積極的に行う事になった。講演会として、H23 年度には、PDB 開設から 40 年となるのを記念し H23 年 10 月に国際学術集会「PDB 40 周年記念シンポジウム」を米国コールド・スプリング・ハーバー研究所において開催、H24 年度には一般社会人や高校生を含む学生向けの講演会「PDB データバンク:タンパク質のかたちが支える生命科学と創薬への応用」を H24 年 10 月に

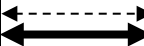
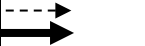

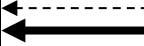
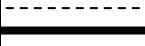
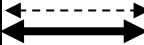
大阪梅田にて開催、H25 年度には米国ラトガース大学にて国際学術集会「A Celebration of Open Access in Structural Biology」開催することが計画され、PDBj も日本での主催を初めとして協力を行う。また、2014 年が国際結晶年となることから、2014 年のカレンダーを wwPDB メンバーが協力して企画・作成することとなった。

- NBDC との協力による統合化推進の具体的な方策として、H23 年度中に、これまで開発してきた PDBj および PDBj-BMRB の Web ポータルを NBDC のサーバにも設置し、PDBj および PDBj-BMRB のシステムと冗長化して、分散・統合的な環境で構造データベースを公開する体制を構築する。これにより、停電や、地震、火災にも対処できる危機管理体制を作ることとした。

- データベース統合化の新しい方向性として、当初から BMRB データのセマンティック・ウェブ対応を考えており、H24 年度に BMRB データの XML 化と RDF 化を行う開発を開始した。PDB データの RDF 化の経験を活かし、予定より早く H25 年度の前半に開発が終了した。その結果、全 BMRB データを XML 化および RDF 化し、BMRB/XML、BMRB/RDF サーバによって包括的に公開し、運用を開始することができた。RDF 化による配列情報、文献情報、化合物情報などの豊富なリンクは広く生命科学分野の研究者にとって有用なものになると考えられる。

(3) 達成状況

研究項目	H23 年度	H24 年度	H25 年度	変更点
<p>1. PDBデータおよびNMR実験情報の登録・編纂の国際連携による実施とデータ検証法の開発</p> <ul style="list-style-type: none"> ・蛋白質構造情報と登録(中村グループ) ・NMR実験情報の登録(藤原グループ) ・登録業務の標準化・自動化の開発(中村グループ) 				<p>予定通り</p> <p>予定通り</p> <p>プロトタイプ開発は予定通りだが世界中のユーザーへの周知とフィードバックのため延長。</p>
<ul style="list-style-type: none"> ・wwPDB 活動の推進(中村グループ、藤原グループ) ・電子顕微鏡および X 線小角散乱の構造情報 DB の構築と公開(中村グループ) ・NBDC との統合的データベース運営の仕組みを構築し実施(中村グループ) 				<p>予定通り</p> <p>X 線小角散乱の DB は国際的討議により延期</p> <p>予定通り</p>
<p>2. 統合化に向けたデータベースの高度化</p> <ul style="list-style-type: none"> ・構造情報のRDF形式等による高度化と配布(中村グループ) ・構造情報のオントロジー化(中村グループ) ・構造データの新フォーマットの開発・改良(中村グループ) 				<p>予定通り</p> <p>予定通り</p> <p>プロトタイプ開発は予定通りだが世界中のユーザーへの周知とフィードバックのため延長。</p>
<ul style="list-style-type: none"> ・ユーザーインターフェースの改良と高度化(中村グループ、藤原グループ) ・NMR 化学シフトデータの管理 ・配布システムの高度化(藤原グループ) (STAR 形式への変換) (XML 形式への変換) ・新たな NMR 実験データのデータベース化と登録システムの開発(藤原グループ) 				<p>予定通り</p> <p>予定通り</p> <p>予定通り</p> <p>全登録データの包括的 XML 化と RDF 化を実現し、予定を早めて公開。</p>

<p>3. 機能情報と構造情報との統合化システムの開発</p> <ul style="list-style-type: none"> ・蛋白質相互作用部位データベースの改良と PDB データとの統合化 (中村グループ) ・配列情報を入力とした構造情報に基づく機能の解析 ・推定パイプラインの構築 (中村グループ) <p>(パイプライン化と公開) (GIRAF、eF²-seekの組込) (システムの確立と公開)</p>				<p>予定通り</p> <p>予定通り</p> <p>予定通り</p>
<p>4. 人材養成の実施</p> <ul style="list-style-type: none"> ・データ寄託者・登録者に対する教育・講習会の実施 (中村グループ、藤原グループ) ・データ利用者に対する教育 ・講習会の実施 (中村グループ、藤原グループ) ・キュレータ・アナレータの人材育成 (中村グループ、藤原グループ) 				<p>予定通り</p> <p>予定通り</p> <p>予定通り</p>

(4) 研究開発の今後の展開について

・PDBj および PDBj-BMRB が国際協力によってこれまで構築・運営してきたデータベースは、生命科学の基盤的データベースとして国際的に大きな寄与をしてきており、本研究開発終了後も、その登録・編集・公開作業を引き続き進める必要がある。そのため、蛋白質・核酸等に対する X 線結晶解析、電子顕微鏡解析、NMR 解析等の専門家がいる PDBj において、登録・編集・品質管理作業によるデータの収集とアノテーションを行ってデータベースを継続的に構築していきたい。そして、高速なネットワークと高度な計算機資源を用いて、NBDC などの日本を代表するデータベース・センターから、他の生命科学データベースとネットワークを通じて統合化された形で、分散・統合的な生体高分子の構造データが継続的に発信されていく姿が望ましいと考えている。また、本プロジェクトで開発した統合化システムがさらに有効に利用されて新たな知識発見が行われるようにするため、最新の知識を常に加えて更新していく必要がある。

・PDBj-BMRB では、クラウドコンピューティング技術を用いた NMR 実験データの統合的管理システム構築を進め、コアとなる仮想サーバを、既に NBDC センターに移設されたサーバ群とともに安定かつ継続的な運用を進めていく必要がある。オントロジーにより正しく記述された XML 化あるいは RDF 化されたデータベースをもとにすることで、より高度で有用なデータベースの運用を可能にする技術基盤が推進されよう。また、NMR 実験データと構造座標データとの理論的整合性を検証することで、より高度に品質管理されたデータベースの開発と公開が行われよう。日本をはじめアジア・オセアニアの NMR プロテオミクス・サイトや研究室に蓄積されている貴重な NMR 実験データ群の登録を推進していき、最終的にはこれらのツール群を豊富な機能関連情報と連携したツール群へと開発することで、生命科学系研究者のみならず製薬企業や化学系企業等における民間の化学者生物学者に対して利用しやすい統合データベースとして構築公開していきたい。

・シーケンサの技術革新によるゲノム配列情報の急増に対し、生体高分子の立体構造情報を産出

するスピードは遅いものの、構造ゲノム科学やターゲットタンパク研究の世界的なプロジェクトおよび製薬企業での医薬品開発等により、蛋白質構造および蛋白質複合体構造解析は量だけでなく質的にも急速に進展している。さらに、生体高分子の原子レベルの分解能での立体構造を決定することを主な目標としていた「構造生物学」研究は、構造を基にした生命科学という概念の「構造生命科学」に進化しており、生命科学、医薬学、農学等と強く結びつき、バイオ産業への応用により社会還元(イノベーション)へも向かおうとしている。実際、蛋白質機能が発揮される部位の立体構造やそのダイナミクスの情報を基に、その部位をブロックする低分子化合物は医薬品の良い候補となるため、**Structure-Based Drug Development (SBDD)**に応用されている。また、天然蛋白質の部分的な改変や、全く新たな機能を付与して人工蛋白質を設計・創製する蛋白質工学は、蛋白質構造によるガイドがなければ達成不可能である。このように、本研究開発で構築したデータベースは、医・薬学を含む生命科学研究者だけでなく、工学系研究者および製薬メーカーなどの産業界に対しても、構造データをフリーで使いやすい形で統合的に提供することで、産学を問わず、社会に大きく寄与しよう。これらの高品質の情報は、近い将来、ビッグデータの一部を形成し、データ駆動科学(データ科学)を推進して、イノベーションの基礎となる情報を社会へ与えられよう。

・このように、生体高分子の静的および動的構造は、生命科学の基盤データとしてその発展と医学・薬学・工学への応用に極めて重要な意味を持ち、現在進展している構造生命科学を支えている。これらの構造情報を他の生命科学データベースと統合して利用できる環境が本研究開発にて整備され(データ管理・配布システム、構造データのオントロジー、データ記載のフォーマット、**RDF**化、ユーザインターフェースの開発・改良等)、分子レベルでの生化学的な研究だけでなく、細胞生物学や医科学における高次生命機能の研究に役立つデータベースとして情報提供が可能となっている。このようなPDBjおよびPDBj-BMRBの今後の活動を通して、日本における基盤的なライフサイエンスデータベースの統合化を確立できるものと信じている。

§3 研究開発実施体制

(1) 研究チームの体制について

①「(研究代表者: 中村春木) PDBj 国際的な運営高度化」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	研究開発項目	参加時期
中村 春木	大阪大学 蛋白質研究所	教授	総括	H23.4～H26.3
金城 玲	大阪大学 蛋白質研究所	准教授	統合化に向けたオントロジー開発、統合化システムの開発	H23.4～H26.3
岩崎 憲治	大阪大学 蛋白質研究所	准教授	電子顕微鏡構造データベースの開発	H23.4～H26.3
鈴木 博文	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	電子顕微鏡構造データベースの開発	H23.4～H26.3
山下 鈴子	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	PDBj 高度化・統合化のためのソフト開発	H23.4～H26.3
工藤 高裕	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	PDBj 計算機システムの管理・運営および統合化ソフト開発	H23.4～H26.3
西川 建	大阪大学 蛋白質研究所	客員教授	ゲノム情報と構造情報の統合化	H23.7～H26.3
Bekker, Gert-Jan	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	PDB の新フォーマットの開発	H24.2～H26.3
晴氣 菜穂子	大阪大学 蛋白質研究所	特任事務職員	グループ全体の事務全般に関わる業務	H23.5～H26.3

②「(研究分担者: 中川敦史) PDBj データベース構築」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	研究開発項目	参加時期
中川 敦史	大阪大学 蛋白質研究所	教授	PDB 構造データの登録・編纂業務とデータ検証法開発	H23.4～H26.3
松田 真	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	wwPDB 共同事業における共通登録用ソフトウェア開発	H23.11～H26.3
五十嵐 令子	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	構造データアノテーション	H23.4～H26.3
見学 有美子	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	構造データアノテーション	H23.4～H26.3
張 羽澄	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	構造データアノテーション	H23.4～H26.3
池川 恭代	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	構造データアノテーション	H23.4～H26.3
佐藤 純子	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	構造データアノテーション	H24.4～H25.7

高野 朋子	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	構造データアノテーション	H23.7～H24.2
-------	----------------	-------	--------------	-------------

③「(研究分担者:藤原敏道)BMRB データベース管理運営」グループ
研究参加者

氏名	所属	役職	研究開発項目	参加時期
藤原 敏道	大阪大学 蛋白質研究所	教授	NMR 実験データベース開発・統合化の統括	H23.4～H26.3
児嶋 長次郎	大阪大学 蛋白質研究所	准教授	NMR 実験データの高度化・統合化のためのソフト開発	H23.4～H26.3
小林 直宏	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	NMR 実験データの高度化・統合化のためのソフト開発	H23.4～H26.3
岩田 武史	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	NMR 実験データアノテーション・システム管理	H23.8～H26.3
高橋 あみ	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	NMR 実験データアノテーション	H24.1～H26.3
横地 政志	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	NMR 実験データの高度化・統合化のためのソフト開発	H24.11～H26.3
原野 陽子	大阪大学 蛋白質研究所	特任研究員	NMR 実験データアノテーション	H23.5～H23.11

④研究協力者

氏名	所属	役職	研究開発項目	参加時期
Daron M. Standley	大阪大学免疫学フロンティア研究センター	准教授	統合化システムの開発	H23.4～H26.3
木下 賢吾	東北大学大学院情報科学研究科	教授	jV/eF-site/eF-surf/eF-Seekの改良・高度化	H23.4～H26.3
輪湖 博	早稲田大学社会科学総合学術院	教授	ProMode サービスの改良	H23.4～H26.3
伊藤 暢聡	東京医科歯科大学大学院	教授	PDB の新フォーマットの開発	H23.4～H26.3

(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

PDBj および PDBj-BMRB は、日本国内をはじめアジア・オセアニア地域から生体高分子構造および NMR 実験情報の登録を実施しており、データ生産者である構造生物学研究者との直接的な連携に基づいて運営され、強い日常的な連携体制が形成されている。

組織として、国内においては、大阪大学蛋白質研究所内に共同利用・共同研究拠点として設置されている「共同利用・共同研究委員会」の下に、Photon Factory や SPring-8 の研究者を含むデータ生産者である構造生物学の専門家とバイオインフォマティクスの利用者からなる「蛋白質立体構造データベース専門部会」を置き、年1回以上の委員会の開催によって PDBj の運営に対す

る助言を与える外部委員会として 2002 年から 12 年近く活動を継続している。日本分子生物学会、日本蛋白質科学会、日本生物物理学会、日本結晶学会、日本核磁気共鳴学会の各学会年会でのブース展示やランチョンセミナー、シンポジウムを通して、PDB および BMRB の紹介や利用法についての講習会を行い、構造生物学の研究者である登録者、およびより広い分野の利用者や製薬企業等の利用者との密接な交流を継続的に行っている。海外でも、国際結晶学連合会議 (IUCr: International Union of Crystallography)、国際生体系磁気共鳴学会、アジア結晶学会 (AsCA: Asian Crystallographic Association) 年会、アジア・太平洋諸国蛋白質研究連合 (APPA: Asia Pacific Protein Association) の会合にて、ブースやセミナー等での発表をそれぞれ毎回実施している。

wwPDB を 2003 年に設立してから 10 年間が経過したため、2013 年 3 月に "Charter of the wwPDB" を update し、PDBj を代表して中村春木と大阪大学蛋白質研究所所長の長谷俊治教授が、更新された wwPDB の Charter に署名をした。この wwPDB が設置している wwPDB Advisory Committee (wwPDBAC) が年 1 回、米国、欧州、日本の持ち回りで開催され、各 wwPDB のメンバーおよびその諮問委員と、構造生物学の国際学会の代表が 20 名ほど集合して、wwPDB 全体と各メンバーの活動に対するコミュニティからの意見が集約され、時限を決められたミッションが実行される仕組みとなっている。H23 年度は英国 EBI-PDBe が主催し、H24 年度は我々 PDBj が主催した。H25 年度は米国 RCSB-PDB にて開催された。この仕組みにより、フォーマットの変更、実験データの登録必須化、新たな登録システムと検証レポートの配布等、極めて重要な事項がコミュニティの賛意をもって決められ実現している。

また PDBj-BMRB では、国際的な NMR 研究者代表から成る BMRB Scientific Advisory Board のメンバーとして活動し、米国 BMRB および wwPDB と連携してデータベースの開発・構築運営を行っている。wwPDB が主催する NMR Validation Task Force メンバーとして NMR データの評価方法について議論し、データベースの品質管理についての新たな取り組みにも、積極的に参加している。一方、研究開発場所である大阪大学蛋白質研究所は生体系 NMR の共同研究拠点として整備されており、同所を利用する国内外の多数の NMR 研究者と協力関係を築きながらデータベース利用ツールなどの開発を行っている。

産業界との直接の連携は少ないが、国内の製薬企業等による本データベースの利用は多く、利用法に関する PDBj への問い合わせもしばしばいただいている。新たなフォーマットについての IT 企業の関心も高く、他の創薬関係の国家プロジェクトを通じた連携を継続する。

§4 研究実施内容及び成果

4.1 研究課題名: PDBj における蛋白質構造データバンクの構築と統合化 (大阪大学 中村グループ)

研究開発実施内容及び成果

研究開発実施項目

PDBj では 4 名のアナテータ体制で H23 年度 1836 件、H24 年度 1947 件、H25 年 4 月～12 月末まで 1623 件の立体構造データの検証・編集・登録の処理を行った(図1)。また、これらのデータのダウンロード件数は 33,861,275 (H23 年度)、22,788,917 (H24 年度)、37,182,442 (H25 年 4 月～12 月末)であった。

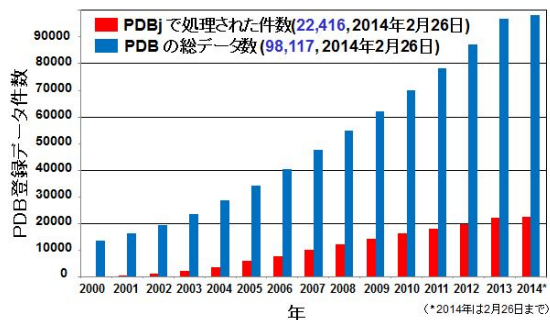


図 1: PDBj におけるデータ登録処理積算数 (赤)と世界全体 (wwPDB) で利用可能なデータ積算数 (青)



図 2: 2012 年 10 月 12 日に大阪大学蛋白質研究所にて行われた wwPDBAC (国際諮問委員会) のメンバー

wwPDB の国際諮問委員会 (wwPDBAC) の会合が、H23 年度は英国 EBI-PDBe が主催して 2011 年 9 月 30 日に EBI にて行われ、H24 年度は我々 PDBj が主催して 2012 年 10 月 12 日に大阪大学にて行い (図 2)、H25 年度は米国 RCSB-PDB が主催して 2013 年 9 月 27 日にラトガース大学にて開催された。wwPDB のメンバーとして H23, 25 年度における参加と H24 年度における主催を行った。

H23 年度から登録業務の標準化・自動化の開発のため、wwPDB として大規模で緻密な国際的なシステム (Common Deposition and Annotation System) を開発しており H24 年度中にプロトタイプがほぼ完成し、最終的に 2014 年 1 月から新規の登録システムの一般利用を開始した。PDBj ではデータ検証部分を担当・実施した。また、PDBj の金城玲准教授が wwPDB の PDBx/mmCIF ワーキンググループのメンバーとなり、現行の mmCIF における改良すべき点、一般ユーザおよびプログラマに対する周知戦略等について、RCSB および PDBe のメンバーらと議論し、新フォーマットである PDBx/mmCIF の策定を行った。2013 年 9 月に新しいフォーマット PDBx/mmCIF が公開された。

電子顕微鏡および X 線小角散乱の構造情報 DB の構築と公開につき、電子顕微鏡 (EM) のデータベース (EMDB) については計画通りに 2012 年 3 月に wwPDB に加わり PDBj でも電子顕微鏡によって解析された構造の PDB データベースへの登録処理を H24 年度から開始した。EM 画像を検索・表示する EM Navigator では全動画を再作成し、HTML5 の動画配信方式に切り替え携帯電話端末などでの閲覧を可能にした。EMDB スキーマ、バージョン 1.9 への更新に対応し、データ管理システムの改変を行った。さらに PDBj の原子座標と同時に可視化できる Yorodumi (万見) を開発・公開した (図 3)。一方、X 線小角散乱による構造情報については、原子レベルの分解能を直接有するわけではないため、PDB への登録に関するタスクフォースを 2013 年 6 月に wwPDB が開催し、PDBj からも代表者が参加した。そのタスクフォースでの議論の結果、wwPDB の組織内に別のアーカイブを構築して X 線小角散乱の実験データとそれに基づく構造モデルについてのデータベースを構築する方向となった。

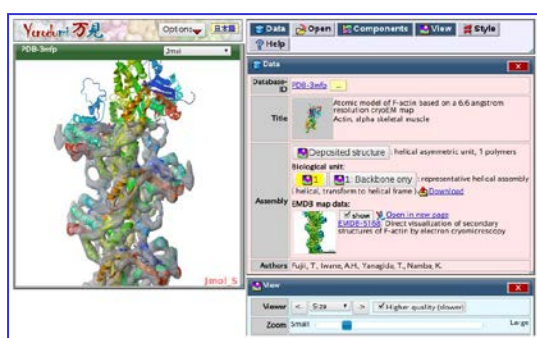


図 3: Yorodumi によるアクチン線維の構造表示



図 4: PDBj が新たに開発したトップページ (日本語版)

PDBj のウェブサイトをよりダイナミックに行えるようにし、利用者自身がよく使う項目を中心にカスタマイズする機能や、これまで REST サービスでのみ利用ができた検索結果のダウンロード機能を追加し、HTML5 技術を利用したダイナミックなウェブサイトを開発・公開した(図 4)。ProMode-Elastic については、受託計算機能と大量データへの対応を行った。

PDBj にてオリジナルにグラフィックビューアを開発した。従来から開発してきた jV は改良を重ね、色分け立体視表示機能の追加や pyMol との互換性を保つため pyMol で使用されていた分子表面のフォーマットである CGO 形式への対応を行った他、Java 認証やアップデートに伴う問題の対処を行った。またタブレット端末用に新たに molmil と称する分子グラフィックビューアを開発し、β版を公開した。

JST-NBDC と協力し、NBDC のデータセンターに冗長化した PDBj のポータルを設置し、2012 年 12 月から本格的に開始し、より安全で円滑なデータベース運営が可能な体制とした。また、これら PDB は基盤データベースであり、類似の研究開発はない。

2) 統合化にむけたデータ管理・配布システム、構造データのオントロジー、データ記載のフォーマット、ユーザインターフェースの開発

PDBj では、以前からカノニカルな XML 表記である PDBML を開発しその利用を推進してきた。本統合化推進プログラムでは、wwPDB で従来から用いられている PDBx/mmCIF 辞書に基づいて、それと互換な OWL オントロジーを構築した。さらに、このオントロジーに基づいて PDB の各エントリーの PDBML ファイルから対応する RDF (Resource Description Framework) ファイルを自動生成する仕組みを開発し、毎週のエントリー更新に合わせて自動的に対応するようにした。各エントリーの各カテゴリーの RDF データをユニークな URL で参照して、ウェブ上で取得する仕組みを、簡易検索機能とともに実装し、公開した。同様な仕組みを wwPDB の低分子化合物データライブラリについても開発して公開した(図 5)。この Semantic Web のために我々が開発したフォーマットは、PDB/RDF として wwPDB の正規フォーマットとして採用され、実際に wwPDB ドメインで公開されたのを受けて UniProt が PDB/RDF のデータへのリンクを追加している。PDBj-BMRB のグループとも協力し、RDF の仕組みにより UniProt、RefSeq、PubMed などの外部データベースとのリンクを持たせ他のデータベースと統合化するための基盤を構築した(図 6)。PDB に対する RDF 化の試みは他でもなされているが、wwPDB として正規のフォーマットとして開発しているのは我々のグループのみである。

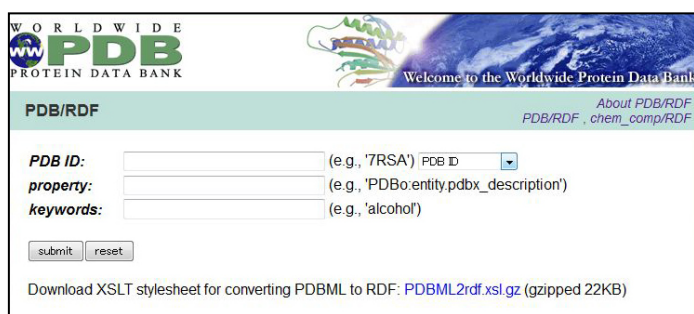


図 5: PDB/RDF のトップページ。PDB/RDF について説明されている

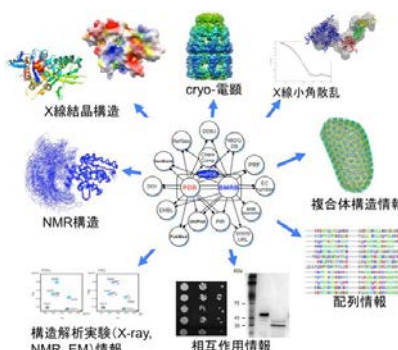


図 6: PDBj-BMRB グループとも協力し RDF 化による統合化を実現した

3) 蛋白質機能情報および高次生命機能情報と、蛋白質構造情報との統合化システムの開発

網羅的構造比較プログラム GIRAF を改良し、より効率的な構造データベース検索と柔軟な原子アラインメントが行えるようにするとともに、GIRAF における相互作用部位の structural motif data の統合化を ROIS-DBCLS と共同で構築し、http://pdbj.org/giraf/cmotif/ から配布した。さらに、GIRAF による蛋白質相互作用部位データベースの PDB データとの統合化を行い、蛋白質のリガンド(低分子化合物、蛋白質、核酸)結合部位の基本構造モチーフ(Elementary Motif)と、その組み合わせによる複合構造モチーフ(Composite Motif)の同定手法を開発し、蛋白質の固有の高次生命機能をより厳密に整理し、高次生命機能情報へ原子レベルの情報を統合化でき

る環境を整え、Compotifとして公開した(図7)。

蛋白質の分子表面構造のデータベースeF-siteをさらに高度化して蛋白質機能の推定に利用するため、蛋白質のリガンド結合部位の分子表面について all-against-all の解析を実施し、クラスタリングを施す事によって代表的な分子表面パッチを抽出した。この新たな分子表面パッチのデータベース eF-patch が、蛋白質機能の推定に有効であることを示すとともに、公開した(図8)。

Disorder 領域の推定、配列と構造の同時アラインメントを行う MAFFTash、高精度のメタ・スレッディングサーバ、ホモロジー・モデラーとして開発してきた Spanner、配列と構造の双方の情報から機能推定を行う SeSAW のサービスを整理して、構造情報に基づく機能の解析・推定パイプラインを SFAS (Sequence to Function Annotation Server)として構築・公開した(図9)。また、これらのサーバを用いて、実験科学者との共同研究に応用した。

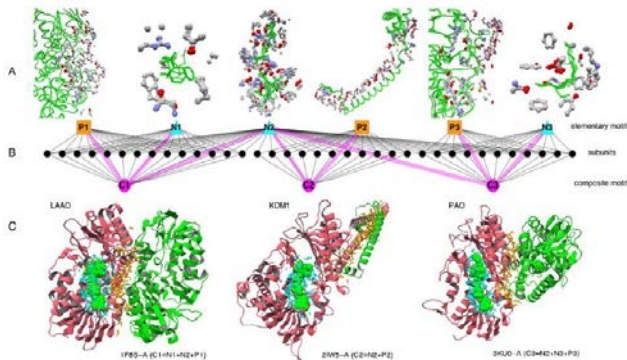


図7: Compotif の概念: 中心の●は個々のサブユニット、上部が Elementary motif、下部が Composite motif



図8: eF-patch のトップページ (<http://ef-patch.hgc.jp>)

上記のサービス(Compotif, eF-patch, SFAS)のそれぞれの結果を machine readable にしてセマンティック・ウェブ化し、本研究開発によって開発した統合化環境に基づいて整理した。こうして、蛋白質機能情報および高次生命機能情報と蛋白質構造情報との統合化システムを確立するため、UniProt 等の他のデータベースとも統合することによって、配列情報から構造情報を基に蛋白質機能を同定・予測し、高次生命機能に対する原子レベルでの合理的な解釈を可能とする仕組みを開発した(図10)。配列から機能の推定を行うサービスは他にもあるが、構造を通して複合的な観点から機能推定を行うところに、本研究のオリジナルな点がある。また、我々が開発した統合化環境の具体例を示した。

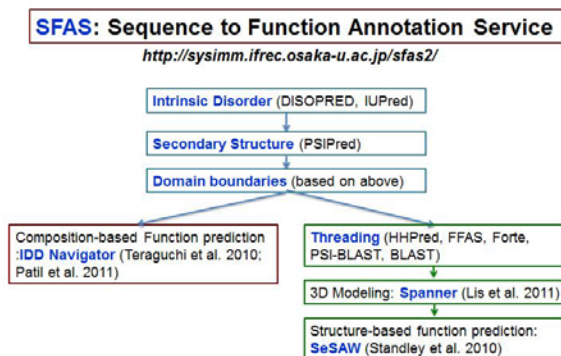


図9: SFAS パイプラインのフロー

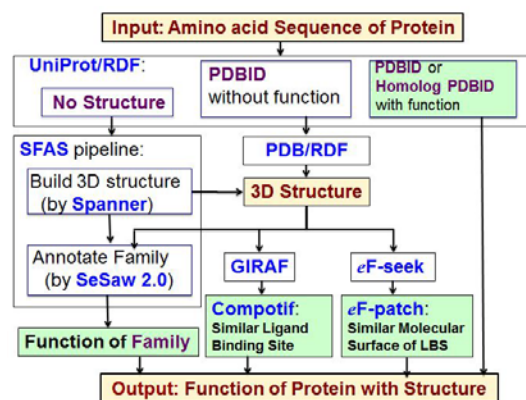


図10: 開発した Compotif, eF-patch, SFAS を統合化し配列情報から機能情報の同定・予測を行う

4) 人材養成の実施

データ寄託・登録者に対する高品質のデータ整理と登録手法、ならびにデータベース利用者に対する初歩的および高度なデータ利用法について、国内外の種々の学会年会でのセミナーや一般講習会として年に 4~5 回ほど適宜開催し、さらに高校生や一般社会人に対する啓蒙活動も行

った。一方、アノデータに対しては、他の wwPDB メンバーが主催する face-to-face の講習会や TV 会議に参加させ、on-the-job-training によって人材養成を行った。



図 11 :
2012 年 10 月 13 日に
大阪梅田で wwPDB
Foundation として
開催した一般社会人
向けの講演会のポス
ター



図 12: 国際結晶年 2014 年を記念して wwPDB
が作成したカレンダー

wwPDB では wwPDB Foundation と称する NPO 法人を設立し、社会に対する国際的アウトリーチ活動を積極的に行う事になった。講演会として、H23 年度には PDB 開設から 40 年となるのを記念し 2011 年 10 月 28-30 日に国際学術集会「PDB 40 周年記念シンポジウム」を米国コールド・スプリング・ハーバー研究所において開催した。日本学術振興会からの援助を受けて、日本の若手研究者 10 名をこの集会へ派遣し、講演を聴講するとともにポスター発表を行った。H24 年度には、PDBj が wwPDBAC 会議を大阪で主催したこともあり、一般社会人や高校生を含む学生向けの講演会「PDB データバンク: タンパク質のかたちが支える生命科学と創薬への応用」を 2012 年 10 月 13 日に大阪梅田にて開催した(図 11)。H25 年度には米国ワトガース大学にて国際学術集会「A Celebration of Open Access in Structural Biology」を 2013 年 9 月 26 日に開催した。また、2014 年が国際結晶年となることから、2014 年のカレンダーを wwPDB メンバーが企画・作成することとなり、PDBj は日本人研究者にゆかりがあるものを中心に、5、6、11、12 月の 4 ヶ月を担当し作成を行った(図 12)。海外においては、平成 23 年度は国際結晶学会 (IUCr2011) でのブース発表を wwPDB として実施したほか、2012 年はオーストラリア・アデレード、2013 年は香港にて開催された AsCA (アジア結晶学会) にて PDBj として発表し、また 2011 年 5 月 6~8 日は中国・上海大学にて開催された APPA (Asia Pacific Protein Association) においてブース発表をおこなった。

日本国内では、毎年、主にデータ生産者が集まる日本結晶学会年会のランチョンセミナーにて、データの validation と円滑な登録法について紹介をする一方、データ利用者が多く集まる日本蛋白質科学会や日本生物物理学会、日本分子生物学会では、初歩的および高度な利用法について紹介した。また、毎年、PC を用いた講習会も、九州、北海道、東京、大阪等、日本各地で実施した。さらに、小学生から一般社会人を対象としたアウトリーチ活動も行い、平成 24 年度と 25 年度には、サイエンスアゴラ 2012、2013 で出展し、より簡易な構造閲覧サービス「万見プライム」を作成して紹介した。

4.2 研究課題名: PDBj-BMRB における NMR 実験データベースの構築と統合化 (大阪大学 藤原グループ)

研究開発実施内容及び成果

本研究開発において PDBj-BMRB はタンパク質の動的状態、機能発現に関する動的構造データベースとして構築運営し、立体構造座標の静的構造をデータベースとしての PDBj によるデータベースと相補的な統合を実現する。

- 1) 生体系 NMR データベース BMRB とのデータベース間統合するためのシステム開発
BMRB と外部データベースとのインターフェース・システムの開発を行い、BMRB データの XML

等への変換やオントロジーにより記述された高度な検索操作や他のオーキスとの連携を目標とした。

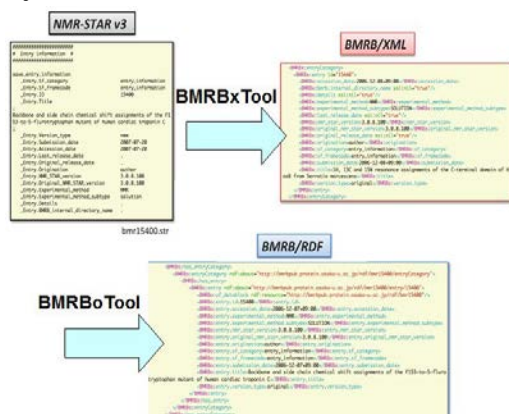


図13: NMR-STARからBMRB/XMLおよびBMRB/RDFへの変換



図14: BMRB/RDFからPDB/RDFへのリンク例

H23年度中に開発されたデータ構造をSTAR形式へ変換するツールを開発した。H24年度においては登録エントリーをXML化するツールの開発を開始し、H24年度において全登録エントリーに対してNMR-STARフォーマットからXML形式に変換することを実現した。データ構造についてはNMR-STARディクショナリーを完全に準拠させたXMLスキーマを作成し、BMRB/XMLとしてPDBj-BMRBのポータルサイトより一般公開した。更にXMLスキーマをOWLに変換するXSLTスキーマを開発し、BMRB/OWLを作成しNMR-STARディクショナリーについて完全に準拠したオントロジーの構築を行い、BMRB/XMLについて全てのエントリーについてRDF化を行った(図13)。RDF化されたBMRBエントリーはPDBを始めとしてUniProt、RefSeq、PubMed、ChemCompなど15を超える外部データベースとのリンクを持たせ一般公開した(図6, 14)。

2) 統合を推進する生体系NMRデータ群の網羅的登録

これまで蓄積されている事実上未公開のNMRデータ群などについて、インタラクティブな外部データベースと関連が高いNMRデータを抽出、登録を推進することを目標とした。複雑なデータ構造を持つNMR実験データを統合管理し、データ解析とデータベース登録の両面を支援するプログラムであるMagROを開発し、NMRToolBoxにおいて公開した。またNMR立体構造アンサンブルから収束領域を自動検出して分離するプログラムFitRobotも開発を完了し、同様に公開した。登録者用ポータルサイトをリニューアルし、登録に関するFAQ、登録手順を視覚的に表現したページなどを含めPHP/MODxによる高度に効率化されたWEBポータルとして再開発を行い公開した(図15)。これらプログラムおよびWEBサービスは登録データの妥当性評価の点で登録者の負担軽減だけでなくデータベースの質的向上に大きく貢献すると期待できる。

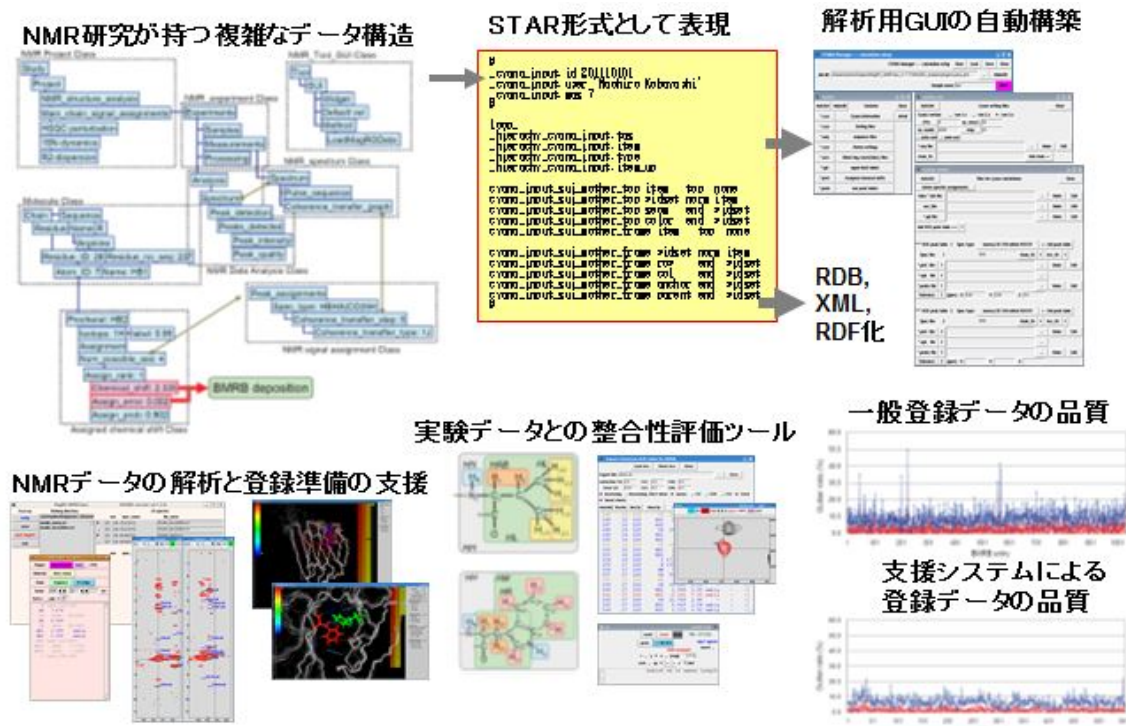


図15: 複雑なNMRデータ構造をオントロジーにより記述し、解析と登録作業を統合した支援システムを開発、配布することで高品質なデータベースを実現

3) 生体系NMRデータの統合した国際的なアノテーション、登録受付、公開、人材養成

NMR データベースに関する国際的な協調の下に、生体系 NMR データのより効率的な収集、登録、公開を 3 年間継続して行うこと、国際的な運営を担う人材も育成することを目標とした。米国およびヨーロッパの BMRB 関連グループとこれまでのように協力し、データベース技術の進歩を取り入れてハードウェア・ソフトウェアの上で国際的に統合して、効率的なデータベース運営体制を作った。

PDBj-BMRB では 2 名のアノテータ体制で H23 年度 62 件、H24 年度 47 件、2013 年 4 月～12 月末まで 51 件の立体構造データの検診・編集・登録の処理を行った。また、BMRB データベースに対する総アクセス件数は 16,102,053 件であった。これらを通じてコミュニティにおける認知度とデータ生産者である NMR 研究者との連携を強めてきた。また、大阪大学蛋白質研究所における生体系 NMR の共同研究拠点を通じて内外多数の NMR 研究者と協力関係を築きながらデータベース利用ツールなどの開発を行った。H25年度においてはNMR データ公開用サーバとポータルサイトサーバを北海道 NBDC 移設し、仮想サーバによる運用を開始した。これによりコストパフォーマンスの向上と安定稼働、省電力などを実現すると共に大阪大学蛋白質研究所のミラーサーバとの冗長性確保により耐障害性の向上を実現した。さらに、wwPDB が主催する NMR Validation Task Force メンバーとして参加し、NMR データの評価方法について議論し、データベースのクオリティコントロールについての新しい取り組みについての話し合いに積極的に参加した。日本分子生物学会、日本核磁気共鳴学会などでの学会発表あるいはランチョンセミナーなどの広報活動を行った。これらの国際的な協力関係によるデータベースの運営活動を通じてデータ管理技術者、アノテータの人材養成を行った。

§ 5 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 0 件、国際(欧文)誌 56 件)

①発行済論文数(国内(和文) 0 件、国際(欧文) 56 件)

②未発行論文数(国内(和文) 0 件、国際(欧文) 0 件)

〈国際〉

- A-1. Hiroshi Wako and Shigeru Endo, "Ligand-induced conformational change of a protein reproduced by a linear combination of displacement vectors obtained from normal mode analysis." *Biophys. Chem.* vol.159, pp.257-266, 2011 [DOI:10.1016/j.bpc.2011.07.004]
- A-2. Daron M. Standley and Mark van der Giezen, "Modeling the alternative oxidase from the human pathogen *Blastocystis* using automated hybrid structural template assembly." *Research and Reports in Biochemistry*, vol.2, pp.1-8, 2011 [DOI: 10.2147/RRBC.S26820]
- A-3. Ashwini Patil, Shunsuke Teraguchi, Huy Dinh, Kenta Nakai, and Daron M. Standley, "Functional Annotation of Intrinsically Disordered Domains by Their Amino Acid Content Using Idd Navigator." *Pac. Symp. Biocomput.*, vol.17, pp.164-175, 2011 [DOI: 10.1142/9789814366496_0016]
- A-4. Sarel J. Fleishman, Timothy A. Whitehead, Eva-Maria Strauch, Jacob E. Corn, Sanbo Qin, Huan-Xiang Zhou, Julie C. Mitchell, Omar N.A. Demerdash, Mayuko Takeda-Shitaka, Genki Terashi, Iain H. Moal, Xiaofan Li, Paul A. Bates, Martin Zacharias, Hahnbeom Park, Jun-su Ko, Hasup Lee, Chaok Seok, Thomas Bourquard, Julie Bernauer, Anne Poupon, Jérôme Azé, Seren Soner, Şefik Kerem Ovalı, Pemra Ozbek, Nir Ben Tal, Türkan Haliloglu, Howook Hwang, Thom Vreven, Brian G. Pierce, Zhiping Weng, Laura Pérez-Cano, Carles Pons, Juan Fernández-Recio, Fan Jiang, Feng Yang, Xinqi Gong, Libin Cao, Xianjin Xu, Bin Liu, Panwen Wang, Chunhua Li, Cunxin Wang, Charles H. Robert, Mainak Guharoy, Shiyong Liu, Yangyu Huang, Lin Li, Dachuan Guo, Ying Chen, Yi Xiao, Nir London, Zohar Itzhaki, Ora Schueler-Furman, Yuval Inbar, Vladimir Potapov, Mati Cohen, Gideon Schreiber, Yuko Tsuchiya, Eiji Kanamori, Daron M. Standley, Haruki Nakamura, Kengo Kinoshita, Camden M. Driggers, Robert G. Hall, Jessica L. Morgan, Victor L. Hsu, Jian Zhan, Yuedong Yang, Yaoqi Zhou, Panagiotis L. Kastritis, Alexandre M.J.J. Bonvin, Weiyi Zhang, Carlos J. Camacho, Krishna P. Kilambi, Aroop Sircar, Jeffrey J. Gray, Masahito Ohue, Nobuyuki Uchikoga, Yuri Matsuzaki, Takashi Ishida, Yutaka Akiyama, Raed Khashan, Stephen Bush, Denis Fouches, Alexander Tropsha, Juan Esquivel-Rodríguez, Daisuke Kihara, P. Benjamin Stranges, Ron Jacak, Brian Kuhlman, Sheng-You Huang, Xiaoqin Zou, Shoshana J. Wodak, Joel Janin, and David Baker, "Community-wide assessment of protein-interface modeling suggests improvements to design methodology." *Journal of Molecular Biology*, vol. 414, pp.289-302, 2011 [DOI : 10.1016/j.jmb.2011.09.031]
- A-5. Toshiaki Katayama, Mark D. Wilkinson, Rutger Vos, Takeshi, Kawashima, Shuichi Kawashima, Mitsuteru Nakao, Yasunori Yamamoto, Hong-Woo Chun, Atsuko Yamaguchi, Shin Kawano, Jan Aerts, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Kazuharu Arakawa, Bruno Aranda, Raoul JP Bonnal, José M Fernández, Takatomo Fujisawa, Paul M.K. Gordon, Naohisa Goto, Syed Haider, Todd Harris, Takashi Hatakeyama, Isaac Ho, Masumi Itoh, Arek Kasprzyk, Nobuhiro Kido, Young-Joo Kim, Akira R. Kinjo, Fumikazu, Konishi, Yulia Kovarskaya, Greg von Kuster, Alberto Labarga,

- Vachiraneer Limvipphuvadh, Luke McCarthy, Yasukazu Nakamura, Yunsun Nam, Kozo Nishida, Kunihiro Nishimura, Tatsuya Nishizawa, Soichi Ogishima, Tom Oinn, Shinobu Okamoto, Shujiro Okuda, Keiichiro Ono, Kazuki Oshita, Keun-Joon Park, Nicholas Putnam, Martin Senger, Jessica Severin, Yasumasa Shigemoto, Hideaki Sugawara, James Taylor, Oswaldo Trelles, Chisato Yamasaki, Riu Yamashita, Noriyuki Satoh and Toshihisa Takagi, "The 2nd DBCLS BioHackathon: interoperable bioinformatics Web services for integrated applications." *Journal of Biomedical Semantics*, vol. 2, ID: 4, 2011 [DOI:10.1186/2041-1480-2-4]
- A-6. Akira R. Kinjo, Yutaro Kumagai, Huy Dinh, Osamu Takeuchi and Daron M. Standley. "Functional characterization of protein domains common to animal viruses and mouse." *BMC Genomics*, vol.12, ID: S21, 2011 [DOI:10.1186/1471-2164-12-S3-S21]
- A-7. Hiroshi Wako and Shigeru Endo, "ProMode-Oligomer: Database of normal mode analysis in dihedral angle space for a full-atom system of oligomeric proteins." *The Open Bioinformatics Journal*, vol.6, pp.9-19, 2012 [DOI:10.2174/1875036201206010009]
- A-8. Akira R. Kinjo, Hirofumi Suzuki, Reiko Yamashita, Yasuyo Ikegawa, Takahiro Kudo, Reiko Igarashi, Yumiko Kengaku, Hasumi Cho, Daron M. Standley, Atsushi Nakagawa, and Haruki Nakamura, "Protein Data Bank Japan (PDBj): Maintaining a structural data archive and Resource Description Framework format." *Nucleic Acids Research*, vol. 40, pp.D453-D460, 2012 [DOI:10.1093/nar/gkr811]
- A-9. Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura, "Composite structural motifs of binding sites for delineating biological functions of proteins." *PLoS One*, vol.7, ID:e31437, 2012 [DOI:10.1371/journal.pone.0031437]
- A-10. Shide Liang, Chi Zhang, Jamica Sarmiento, Daron M. Standley. "Protein Loop Modeling with Optimized Backbone Potential Functions." *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol.8 (5), pp.1820-27, 2012 [DOI: 10.1021/ct300131p]
- A-11. Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura, "GIRAF: a method for fast search and flexible alignment of ligand binding interfaces in proteins at atomic resolution", *Biophysics*, vol. 8, pp.79-94, 2012 [DOI:10.2142/biophysics.8.79]
- A-12. Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura, "Functional Structural Motifs for Protein–Ligand, Protein–Protein, and Protein–Nucleic Acid Interactions and their Connection to Supersecondary Structures." *Methods in Molecular Biology*, vol..932, pp. 295-315, 2012 [DOI: 10.1007/978-1-62703-065-6_18]
- A-13. Alexis Vandenbon, Shunsuke Teraguchi, Shizuo Akira, Kiyoshi Takeda, Daron M. Standley, "Systems biology approaches to toll-like receptor signaling." *Wiley Interdisciplinary Reviews-Systems Biology and Medicine*, vol.4 (5), pp.497-507, 2012 [DOI: 10.1002/wsbm.1178]
- A-14. Yuko Tsuchiya, Kengo Kinoshita, Shigeru Endo and Hiroshi Wako, "Dynamic features of homodimer interfaces calculated by normal-mode analysis." *Protein Sci.*, vol. 21 (10), pp.1503-13, 2012 [DOI: 10.1002/pro.2140]
- A-15. Ashwini Patil, Shunsuke Teraguchi, Huy Dinh, Kenta Nakai, and Daron M. Standley, "Functional annotation of intrinsically disordered domains by their amino acid content using IDD Navigator." *Pac Symp Biocomput*, vol.17, pp.164-175, 2012 [DOI: 9789814366496_0016]
- A-16. Bhaskar Dasgupta, Haruki Nakamura and Akira R. Kinjo, "Counterbalance of ligand- and self-coupled motions characterizes multi-specificity of Ubiquitin." *Protein Science*, vol. 22, pp.168-178, 2012 [DOI:10.1002/pro.2195]
- A-17. Alexis Vandenbon, Yutaro Kumagai, Akira Shizuo, Daron M. Standley, "A novel

- unbiased measure for motif co-occurrence predicts combinatorial regulation of transcription.” *BMC Genomics*, vol.13, 2012 [DOI: 10.1186/1471-2164-13-S7-S11]
- A-18. Kenta Maruyama, Masahiro Fukasaka, Alexis Vandenbon, Tatsuya Saitoh, Takumi Kawasaki, Takeshi Kondo, Kazunari K. Yokoyama, Hiroyasu Kidoya, Nobuyuki Takakura, Daron M. Standley, Osamu Takeuchi, Shizuo Akira, “The Transcription Factor Jdp2 Controls Bone Homeostasis and Antibacterial Immunity by Regulating Osteoclast and Neutrophil Differentiation.” *Immunity*, vol. 37 (6), pp. 1024-36, 2012 [DOI: 10.1016/j.immuni.2012.08.022]
- A-19. Daisuke Kuroda, Hiroki Shirai, Matthew P. Jacobson, Haruki Nakamura, “Computer-aided antibody design.” *Protein Engineering, Design and Selection*, vol.25(10), pp.507-21, 2012 [DOI: 10.1093/protein/gzs024]
- A-20. Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura, “Composite structural motifs of binding sites for delineating biological functions of proteins.” *PLoS One*, vol.7, pp.e31437, 2012 [DOI:10.1371/journal.pone.0031437]
- A-21. Alexis Vandenbon, Yutaro Kumagai, Shunsuke Teraguchi, Karlou Mar Amada, Shizuo Akira and Daron M. Standley, “Parzen window-based approach for the detection of locally enriched transcription factor binding sites.” *BMC Bioinformatics*, vol. 14, pp.26, 2013 [DOI: 10.1186/1471-2105-14-26]
- A-22. Hiroshi Wako, Shigeru Endo, “Normal mode analysis based on an elastic network model for biomolecules in the Protein Data Bank, which uses dihedral angles as independent variables.” *Comp. Biol. Chem.*, vol. 44, pp.22-30, 2013 [DOI:10.1016/j.compbiolchem.2013.02.006]
- A-23. Kazutaka Katoh, Daron M. Standley, “MAFFT Multiple Sequence Alignment Software Version 7: Improvements in Performance and Usability”, *Mol Biol Evol*, vol. 30 (4), pp.772-80, 2013 [DOI: 10.1093/molbev/mst010]
- A-24. Toshiaki Katayama, Mark D Wilkinson, Gos Micklem, Shuichi Kawashima, Atsuko Yamaguchi, Mitsuteru Nakao, Yasunori Yamamoto, Shinobu Okamoto, Kenta Oouchida, Hong-Woo Chun, Jan Aerts, Hammad Afzal, Erick Antezana, Kazuharu Arakawa, Bruno Aranda, Francois Belleau, Jerven Bolleman, Raoul JP Bonnal, Brad Chapman, Peter JA Cock, Tore Eriksson, Paul MK Gordon, Naohisa Goto, Kazuhiro Hayashi, Heiko Horn, Ryosuke Ishiwata, Eli Kaminuma, Arek Kasprzyk, Hideya Kawaji, Nobuhiro Kido, Young Joo Kim, Akira R Kinjo, Fumikazu Konishi, Kyung-Hoon Kwon, Alberto Labarga, Anna-Lena Lamprecht, Yu Lin, Pierre Lindenbaum, Luke McCarthy, Hideyuki Morita, Katsuhiko Murakami, Koji Nagao, Kozo Nishida, Kunihiro Nishimura, Tatsuya Nishizawa, Soichi Ogishima, Keiichiro Ono, Kazuki Oshita, Keun-Joon Park, Pjotr Prins, Taro L Saito, Matthias Samwald, Venkata P Satagopam, Yasumasa Shigemoto, Richard Smith, Andrea Splendiani, Hideaki Sugawara, James Taylor, Rutger A Vos, David Withers, Chisato Yamasaki, Christian M Zmasek, Shoko Kawamoto, Kosaku Okubo, Kiyoshi Asai and Toshihisa Takagi, “The 3rd DBCLS BioHackathon: improving life science data integration with Semantic Web technologies.” *Journal of Biomedical Semantics*, vol. 4, p.6, 2013 [DOI:10.1186/2041-1480-4-6]
- A-25. Takuya Uehata, Osamu Takeuchi, Hidenori Iwasaki, Alexis Vandenbon, Akira Shizuo, Daron M. Standley, “Malt1-Induced Cleavage of Regnase-1 in CD4+ Helper T Cells Regulates Immune Activation.” *Cell.*, vol. 153(5), pp.1036-49, 2013 [DOI: 10.1016/j.cell.2013.04.034]
- A-26. Junko Sato, Kouji Kozaki, Susumu Handa, Takashi Ikeda, Ryotaro Saka, Kohei Tomizuka, Yugo Nishiyama, Toshiyuki Okumura, Shinichi Hirai, Tadashi

Ohno, Mamoru Ohta, Susumu Date, Haruki Nakamura, “Protein Experimental Information Management System (PREIMS) Based on Ontology: Development and Applications.” *IP SJ Transactions on Bioinformatics*, vol. 6, pp.9–17, 2013 [DOI: 10.2197/ipsjtbio.6.9]

- A-27. Takuya Uehata, Hidenori Iwasaki, Alexis Vandenbon, Kazufumi Matsushita, Eduardo Hernandez-Cuellar, Kanako Kuniyoshi, Takashi Satoh, Takashi Mino, Yutaka Suzuki, Daron M. Standley, Tohru Tsujimura, Hiromi Rakugi, Yoshitaka Isaka, Osamu Takeuchi and Shizuo Akira, “Malt1-induced cleavage of regnase-1 in CD4(+) helper T cells regulates immune activation.” *Cell*, vol. 153(5), pp.1036-49, 2013 [DOI: 10.1016/j.cell.2013.04.034]
- A-28. Rocco Moretti, Sarel J. Fleishman, Rudi Agius, Mieczyslaw Torchala, Paul A. Bates, Panagiotis L. Kastritis, João P. G. L. M. Rodrigues, Mikaël Trellet, Alexandre M. J. J. Bonvin, Meng Cui, Marianne Rooman, Dimitri Gillis, Yves Dehouck, Iain Moal, Miguel Romero-Durana, Laura Perez-Cano, Chiara Pallara, Brian Jimenez, Juan Fernandez-Recio, Samuel Flores, Michael Pacella, Krishna Praneeth Kilambi, Jeffrey J. Gray, Petr Popov, Sergei Grudinin, Juan Esquivel-Rodríguez, Daisuke Kihara, Nan Zhao, Dmitry Korokin, Xiaolei Zhu, Omar N. A. Demerdash, Julie C. Mitchell, Eiji Kanamori, Yuko Tsuchiya, Haruki Nakamura, Hasup Lee, Hahnbeom Park, Chaok Seok, Jamica Sarmiento, Shide Liang, Shusuke Teraguchi, Daron M. Standley, Hiromitsu Shimoyama, Genki Terashi, Mayuko Takeda-Shitaka, Mitsuo Iwadata, Hideaki Umeyama, Dmitri Beglov, David R. Hall, Dima Kozakov, Sandor Vajda, Brian G. Pierce, Howook Hwang, Thom Vreven, Zhiping Weng, Yangyu Huang, Haotian Li, Xiufeng Yang, Xiaofeng Ji, Shiyong Liu, Yi Xiao, Martin Zacharias, Sanbo Qin, Huan-Xiang Zhou, Sheng-You Huang, Xiaoqin Zou, Sameer Velankar, Joël Janin, Shoshana J. Wodak and David Baker. “Community-wide evaluation of methods for predicting the effect of mutations on protein-protein interactions.” *Proteins*, vol.81, pp.1980-87, 2013 [DOI: 10.1002/prot.24356]
- A-29. Shide Liang, Dandan Zheng, Daron M. Standley, Huarong Guo and Chi Zhang, “A novel function prediction approach using protein overlap networks.” *BMC Syst Biol*, vol.7, pp.61, 2013 [DOI: 10.1186/1752-0509-7-61]
- A-30. Takumi Kawasaki, Naoki Takemura, Daron M. Standley, Shizuo Akira and Taro Kawai, “The second messenger phosphatidylinositol-5-phosphate facilitates antiviral innate immune signaling.” *Cell Host Microbe*, vol.4(2), pp.148-58, 2013 [DOI: 10.1016/j.chom.2013.07.011]
- A-31. Alison J. Hobro, Daron M. Standley, Shandar Ahmad and Nicholas I. Smith, “Deconstructing RNA: optical measurement of composition and structure.” *Phys Chem Chem Phys*, vol.15(31), pp.13199-208, 2013 [DOI: 10.1039/c3cp52406j]
- A-32. Yoshiaki Enokizono, Hiroyuki Kumeta, Kenji Funami, Masataka Horiuchi, Joy Sarmiento, Kazuo Yamashita, Daron M. Standley, Misako Matsumoto, Tsukasa Seya and Fuyuhiko Inagaki, “Structures and interface mapping of the TIR domain-containing adaptor molecules involved in interferon signaling.” *Proc Natl Acad Sci U S A*, vol.110(49), pp.19908-13, 2013 [DOI:10.1073/pnas.1222811110]
- A-33. Helen M. Berman, Gerard Kleywegt, Haruki Nakamura, John L. Markley, “How community has shaped the Protein Data Bank.” *Structure* vol.21(9), pp.1485-1491, 2013 [DOI: 10.1016/j.str.2013.07.010.]
- A-34. Yoichi Murakami, Kengo Kinoshita, Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura, “Exhaustive comparison and classification of ligand-binding surfaces in proteins.” *Protein Science*, vol.22, pp.1379-1391, 2013 [DOI:10.1002/pro.2329]

- A-35. Toshiaki Katayama, Mark D Wilkinson, Gos Micklem, Shuichi Kawashima, Atsuko Yamaguchi, Mitsuteru Nakao, Yasunori Yamamoto, Shinobu Okamoto, Kenta Oouchida, Hong-Woo Chun, Jan Aerts, Hammad Afzal, Erick Antezana, Kazuharu Arakawa, Bruno Aranda, Francois Belleau, Jerven Bolleman, Raoul JP Bonnal, Brad Chapman, Peter JA Cock, Tore Eriksson, Paul MK Gordon, Naohisa Goto, Kazuhiro Hayashi, Heiko Horn, Ryosuke Ishiwata, Eli Kaminuma, Arek Kasprzyk, Hideya Kawaji, Nobuhiro Kido, Young Joo Kim, Akira R Kinjo, Fumikazu Konishi, Kyung-Hoon Kwon, Alberto Labarga, Anna-Lena Lamprecht, Yu Lin, Pierre Lindenbaum, Luke McCarthy, Hideyuki Morita, Katsuhiko Murakami, Koji Nagao, Kozo Nishida, Kunihiro Nishimura, Tatsuya Nishizawa, Soichi Ogishima, Keiichiro Ono, Kazuki Oshita, Keun-Joon Park, Pjotr Prins, Taro L Saito, Matthias Samwald, Venkata P Satagopam, Yasumasa Shigemoto, Richard Smith, Andrea Splendiani, Hideaki Sugawara, James Taylor, Rutger A Vos, David Withers, Chisato Yamasaki, Christian M Zmasek, Shoko Kawamoto, Kosaku Okubo, Kiyoshi Asai and Toshihisa Takagi, "The 3rd DBCLS BioHackathon: improving life science data integration with semantic Web technologies." *Journal of Biomedical Semantics*, vol.4, p6, 2013 [DOI:10.1186/2041-1480-4-6]
- A-36. Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura, "Functional structural motifs for protein-ligand, protein-protein and protein-nucleic acid interactions and their connection to supersecondary structures." *Methods in Molecular Biology*, vol.932, pp.295-315, 2013 [DOI:10.1007/978-1-62703-065-6_18]
- A-37. Marc F. Lensink, Iain H. Moal, Paul A. Bates, Panagiotis L. Kastiris, Adrien S. J. Melquiond, Ezgi Karaca, Christophe Schmitz, Marc van Dijk, Alexandre M. J. J. Bonvin, Miriam Eisenstein, Brian Jiménez-García, Solène Grosdidier, Albert Solernou, Laura Pérez-Cano, Chiara Pallara, Juan Fernández-Recio, Jianqing Xu, Pravin Muthu, Krishna Praneeth Kilambi, Jeffrey J. Gray, Sergei Grudinin, Georgy Derevyanko, Julie C. Mitchell, John Wieting, Eiji Kanamori, Yuko Tsuchiya, Yoichi Murakami, Joy Sarmiento, Daron M. Standley, Matsuyuki Shirota, Kengo Kinoshita, Haruki Nakamura, Matthieu Chavent, David W. Ritchie, Hahnbeom Park, Junsu Ko, Hasup Lee, Chaok Seok, Yang Shen, Dima Kozakov, Sandor Vajda, Petras J. Kundrotas, Ilya A. Vakser, Brian G. Pierce, Howook Hwang, Thom Vreven, Zhiping Weng, Idit Buch, Efrat Farkash, Haim J. Wolfson, Martin Zacharias, Sanbo Qin, Huan-Xiang Zhou, Shen-You Huang, Xiaoqin Zou, Justyna A. Wojdyla, Colin Kleanthous and Shoshana J. Wodak."Blind prediction of interfacial water positions in CAPRI." *Proteins*, 2013 [DOI: 10.1002/prot.24439]
- A-38. Kazutaka Katoh and Daron M. Standley. "MAFFT: iterative refinement and additional methods." *Methods Mol Biol*, vol.1079, pp.131-46, Jan 2014 [DOI: 10.1007/978-1-62703-646-7_8]
- B-1. Keisuke Ikeda, Tomoshi Kameda, Erisa Harada, Hideo Akutsu, and Toshimichi Fujiwara, "Combined use of replica-exchange molecular dynamics and magic-angle-spinning solid-state NMR spectral simulations for determining the structure and orientation of membrane-bound peptide." *Journal of Physical Chemistry B*, vol.115, pp.9327-9336, 2011 [DOI: 10.1021/jp205290]
- B-2. Kengo Tsuda, Tatsuhiro Someya, Kanako Kuwasako, Mari Takahashi, FaHu He, Satoru Unzai, Makoto Inoue, Takushi Harada, Satoru Watanabe, Takako Terada, Naohiro Kobayashi, Mikako Shirouzu, Takanori Kigawa, Akiko Tanaka, Sumio

- Sugano, Peter Güntert, Shigeyuki Yokoyama, and Yutaka Muto, "Structural basis for the dual RNA-recognition modes of human Tra2-beta RRM." *Nucleic Acids Research*, vol. 39, pp.1538-1553, 2011 [DOI: 10.1093/nar/gkq854]
- B-3. Shino Mizuno, Hirokazu Amida, Naohiro Kobayashi, Shin-Ichi Aizawa, and Shin-Ichi Tate, "The NMR Structure of FliK, the Trigger for the Switch of Substrate Specificity in the Flagellar Type III Secretion Apparatus." *Journal of Molecular Biology*, vol.409, pp.558-573, 2011 [DOI: 10.1016/j.jmb.2011.04.008]
- B-4. FaHu He, Makoto Inoue, Takanori Kigawa, Mari Takahashi, Kanako Kuwasako, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Takako Terada, Mikako Shirouzu, Peter Güntert, Shigeyuki Yokoyama, and Yutaka Muto, "Solution structure of the splicing factor motif of the human Prp18 protein." *Proteins*, vol. 80, pp. 968-974, 2012 [DOI: 10.1002/prot.24003]
- B-5. Takako Ohyama, Takashi Nagata, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Takako Imai, Hideyuki Okano, Toshio Yamazaki, and Masato Katahira, "Structure of Musashi1 in a complex with target RNA: the role of aromatic stacking interactions." *Nucleic Acids Research*, vol. 40, pp.3218-3231, 2012 [DOI: 10.1093/nar/gkr1139]
- B-6. Takashi Nagata, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Mikako Shirouzu, Takanori Kigawa, Peter Güntert, Shigeyuki Yokoyama, and Yutaka Muto, "Solution structures of the double-stranded RNA-binding domains from rna helicase A." *Proteins*, 2012 [DOI: 10.1002/prot.24059]
- B-7. Takashi Nagata T, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Peter Güntert, Shigeyuki Yokoyama, and Yutaka Muto, "¹H, ¹³C, and ¹⁵N resonance assignments of the dsRBDs of mouse RNA helicase A." *Biomolecular NMR Assignment*, 2012 [DOI: 10.1007/s12104-012-9380-3]
- B-8. Takako Ohyama, Takashi Nagata, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Takako Imai, Hideyuki Okano, Toshio Yamazaki, and Masato Katahira, "Structure of Musashi1 in a complex with target RNA: the role of aromatic stacking interactions." *Nucleic Acids Research*, vol. 40, pp.3218-31, 2012 [DOI: 10.1093/nar/gkr1139]
- B-9. Ayako Furukawa, Hideyasu Okamura, Ryo Morishita, Satoko Matsunaga, Naohiro Kobayashi, Takahisa Ikegami, Tsutomu Kodaki, Akifumi Takaori-Kondo, Ryo Akihida, Takashi Nagata, Masato Katahira, "NMR study of xenotropic murine leukemia virus-related virus protease in a complex with amprenavir." *Biochem Biophys Res Commun.*, vol. 24, 425(2), pp.284-289, 2012 [DOI: 10.1016/j.bbrc.2012.07.083.]
- B-10. Naohiro Kobayashi, Yoko Harano, Naoya Tochio, Eiichi Nakatani, Takanori Kigawa, Shigeyuki Yokoyama, Steven Mading, Eldon L. Ulrich, John L. Markley, Hideo Akutsu and Toshimichi Fujiwara, "An automated system designed for large scale NMR data deposition and annotation: Application to over 600 assigned chemical shift data entries to the BioMagResBank from the RIKEN Structural Genomics/Proteomics Initiative internal database." *J. Biomol. NMR*, vol. 53(4), pp.311-320, 2012 [DOI: 10.1007/s10858-012-9641-6.]
- B-11. Fahu He, Kengo Tsuda, Mari Takahashi, Keiko Kuwasako, Takako Terada, Mikako Shirouzu, Satoru Watanabe, Takanori Kigawa, Naohiro Kobayashi, Peter Güntert, Shigeyuki Yokoyama, Yutaka Muto, "Structural insight into the interaction of ADP-ribose with the PARP WWE domains." *FEBS Lett.*, vol. 586(21), pp.3858-64, 2012 [doi: 10.1016/j.febslet.2012.09.009.]
- B-12. Keisuke Ikeda, Ayako Egawa, and Toshimichi Fujiwara, "Secondary Structural Analysis of Proteins Based on ¹³C Chemical Shift Assignments in Unresolved Solid-State NMR Spectra Enhanced by Fragmented Structure Database." *J. Biomol.*

- NMR, vol. 55, pp.189-200, 2013 [DOI: 10.1007/s10858-012-9701-y.]
- B-13. Yoshikazu Hattori, Kyoko Furuita, Izuru Ohki, Takahisa Ikegami, Harumi Fukada, Masahiro Shirakawa, Toshimichi Fujiwara and Chojiro Kojima, "Utilization of lysine ^{13}C -methylation NMR for protein-protein interaction studies." J. Biomol. NMR, vol. 55, pp.19-31, 2013 [DOI: 10.1007/s10858-012-9675-9]
- B-14. Keisuke Ikeda, Ayako Egawa, and Toshimichi Fujiwara, "Secondary Structural Analysis of Proteins Based on ^{13}C Chemical Shift Assignments in Unresolved Solid-State NMR Spectra Enhanced by Fragmented Structure Database." J. Biomol. NMR, vol.55, pp.189-200, 2013 [DOI: 10.1007/s10858-012-9701-y]
- B-15. Jing Wang, Naoya Tochio, Aya Takeuchi, Jun-ichi Uewaki, Naohiro Kobayashi, Tate, Shin-ichi, "Redox-sensitive structural change in the A-domain of HMGB1 and its implication for the binding to cisplatin modified DNA." Biochem. Biophys. Res. Comm. vol.441(4), pp.701-706, 2013 [DOI: 10.1016/j.bbrc.2013.10.085]
- B-16. Takashi Nagata, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Peter Güntert P, Shigeyuki Yokoyama, Yutaka Muto, " ^1H , ^{13}C , and ^{15}N resonance assignments of the dsRBDs of mouse RNA helicase A." Biomol. NMR Assign. vol.7(1), pp.69-72, 2013 [DOI: 10.1007/s12104-012-9380-3]
- B-17. Su-Jin Kang, Yasuto Todokoro, Ikuko Yumen, Bo Shen, Iku Iwasaki, Toshiharu Suzuki, Atsushi Miyagi, Masasuke Yoshida, Toshimichi Fujiwara, and Hideo Akutsu, "Active-Site Structure of Thermophilic F_{oc} Subunit Ring in Membranes Elucidated by Solid-State NMR." Biophysical J., vol.106(2), pp.390-398, Jan 2014 [DOI: 10.1016/j.bpj.]
- B-18. Naohiro Kobayashi, "A robust method for quantitative identification of ordered cores in an ensemble of biomolecular structures by non-linear multi-dimensional scaling using inter-atomic distance variance matrix." J. Biomol. NMR. Vol.58(1), pp.61-67, Jan 2014 [DOI: 10.1007/s10858-013-9805-z]

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

- A-1. PDBj News Letter, vol. 13, 2011
- A-2. (Review)Helen M. Berman, Gerard J. Kleywegt, Haruki Nakamura, John L. Markley, "The Protein Data Bank at 40: Reflecting on the Past to Prepare for the Future." Structure vol.20, pp.391-396, MAR. 2012 [DOI 10.1016/j.str.2012.01.010]
- A-3. PDBj News Letter, vol. 14, 2012
- A-4. (Review) Helen M. Berman, Gerard J. Kleywegt, Haruki Nakamura, John L. Markley, "The future of the protein data bank." Biopolymers, vol. 99, pp.218-222, 2012 [DOI:10.1002/bip.22132]
- A-5. (A Chapter of a book) Eiji Kanamori, Yoichi Murakami, Joy Sarmiento, Shide Liang, Daron M. Standley, Matsuyuki Shirota, Kengo Kinoshita, Yuko Tsuchiya, Junichi Higo, Haruki Nakamura, "Prediction of Protein-Protein Complex Structures", Biomolecular Forms and Functions: A Celebration of 50 years of the Ramachandran Map (Eds. Manju Bansal & N. Srinivasan), World Scientific Publishing, pp. 160-172, 2013
- A-6. (総説) 中村春木「ビッグデータ時代に向けた Protein Data Bank (PDB)の取り組み」、生物物理、vol. 53(1)、pp.44-46、2013年
- A-7. (書籍) 中村春木「プロローグ-人体は何でできているのか?」「タンパク質は形が命」、

Newton 別冊、pp.6-18、pp.84-116、2013 年
A-8. PDBj News Letter vol. 15 no.1, no.2, 2013

- B-1. 小林直宏、“ビッグデータ時代の生体高分子NMRデータベース、BioMagResBank (BMRB) その有効利用とわが国における現状” 日本核磁気共鳴学会機関誌 vol.4、pp.121-124、2013 年
B-2. 古板恭子、服部良一、児嶋長次郎、“NMR 滴定実験と蛋白質の化学修飾” 日本核磁気共鳴学会機関誌 vol.4、pp.93-98、2013 年

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 22 件、国際会議 11 件)

〈国内〉

- A-1. 中村春木、“大量データと大規模計算機による蛋白質の分子シミュレーション”、第 8 回大阪大学医工学情報連携シンポジウム、大阪大学銀杏会館(吹田市)、2011 年 7 月 6 日
A-2. 児嶋長次郎、“超高磁場 NMR のための高感度測定技術”、H23 年蛋白研セミナー「先端的 NMR 拠点から生まれる新たな潮流:最新成果、役割、利用」、大阪大学蛋白質研究所(吹田市)、2011 年 7 月 28-29 日
A-3. 金城玲、“Composite structural motifs of binding sites for delineating biological functions of proteins.”、第 3 回生体分子研究会、名古屋工業大学(名古屋市)、2011 年 12 月 20 日
A-4. 金城 玲、“PDB データの読み解き方: mmCIF と PDBML”、バイオインフォマティクス講習会 2012 生物情報データベース入門、北海道大学(札幌市)、2012 年 8 月 9 日
A-5. Daron M. Standley, “A structural view of immunology”, RIKEN RCAI Seminar Series 2012 Toward Integrative Medical Biology, 横浜市、2012 年 12 月 18 日
A-6. Daron M. Standley, “Antibody Design, Modeling, and Applications “Kotai antibody builder: a pipeline for antibody modeling and design.” H25 年蛋白研セミナー、大阪大学蛋白質研究所(吹田市)、2013 年 1 月 14-15 日
A-7. 中村春木、“Drug Development for a GPCR with in-silico screening”、Nagoya symposium、名古屋大学豊田講堂(名古屋市)、2013 年 1 月 24 日
A-8. 中村春木、“生命科学における情報科学・計算科学”、第 6 回三大学連携シンポジウム、神戸大学統合研究拠点(神戸市)、2013 年 2 月 22 日
A-9. 金城 玲、“On the optimal contact potential and sequence conservation modes of proteins”、タンパク質討論会、産総研 CBRC(東京)、2013 年 3 月 2 日
A-10. 金城 玲、“On the optimal contact potential and sequence conservation modes of proteins.” 蛋白質討論会、産総研 CBRC(東京)、2013 年 3 月 3 日
A-11. 金城 玲、“Composite structural motifs for delineating biological functions of proteins”、第 54 回植物生理学会、岡山大学(岡山市)、2013 年 3 月 21 日
A-12. 木下賢吾、“ヒト生命情報統合解析とその情報基盤”、H24 年蛋白研セミナー、大阪大学蛋白質研究所(吹田市)、2013 年 3 月 8 日
A-13. 金城 玲、“Composite structural motifs of binding sites of proteins for annotating functional differences.” International Conference on Structural Genomics 2013、札幌市、2013 年 7 月 29 日
A-14. Daron M. Standley, “3D Molecular Modeling of antibodies and protein-RNA interactions”、Institute for Viral Research, Colloquium、京都大学(京都市)、2013 年 8 月 26 日

- A-15. 中村春木、“ゲノム情報(1D)から蛋白質の動的構造情報(4D)へ”、日本学術会議公開シンポジウム“医学・生命科学の革新的発展に資する統合バイオイメージングの展望”、日本学術会議講堂(東京)、2013年9月17日
- A-16. 金城 玲、“蛋白質の結合部位の構造パターンと生物学的機能を結ぶ”、第6回定量生物学の会年会、大阪大学銀杏会館(吹田市)、2013年11月24日
- A-17. 金城 玲、“PDB Exchange Dictionary: 新フォーマットの読み解き方と使い道”、第345回CBI学会研究講演会、東京大学山上会館(東京)、2014年1月9日
- B-1. 小林直宏、“NMR データと構造アンサンブル、解析手法の基礎と応用”、第2回若手育成講習会 NMR によるタンパク質解析法の基礎的理解(概論と実習)、大阪大学蛋白質研究所(吹田市)、2011年4月26日
- B-2. 藤原敏道、“蛋白研における NMR 共同利用拠点”、H25 年蛋白研セミナー、千里ライフサイエンスセンター(大阪府吹田市)、2013年8月5-6日
- B-3. 小林直宏、“ビッグデータ時代の NMR データ解析”、H25 年蛋白研セミナー、千里ライフサイエンスセンター(大阪府吹田市)、2013年8月6日
- B-4. 藤原敏道、“蛋白研での先端核磁気共鳴装置群利用プログラム、よこはまNMR構造生物学研究会:NMR共用プラットフォーム、「蛋白研での先端核磁気共鳴装置群利用プログラム」”、理化学研究所横浜事業所(横浜市)、2013年9月9日
- B-5. 児嶋長次郎、“先端的 NMR 施設における試料調整と NMR 計測”、H25 年蛋白研セミナー、千里ライフサイエンスセンター(大阪府吹田市)、2013年8月5日

〈国際〉

- A-1. Haruki Nakamura, “Intrinsically Disordered Proteins and Development of Corresponding Drugs (Plenary Lecture)”, Computer Aided Drug Design 2011, Penang-Malaysia, Dec 5, 2011
- A-2. Daron M. Standley, “Functional Annotation of Intrinsically Disordered Domains by Their Amino Acid Content Using IDD Navigator”, Pacific Symposium on Biocomputing, Hawaii, USA, Jan 6, 2012
- A-3. Haruki Nakamura, “Prediction of protein-protein complex structures, International Conference on Biomolecular Forms and Functions”, Indian Institute of Science, Bangalore, India, Jan 10, 2013
- A-4. Haruki Nakamura, “A new non-Ewald scheme: The zero-dipole summation method and its applications to molecular dynamics simulations for homogeneous and inhomogeneous biomolecular systems”, National Symposium on Frontiers of Biophysics, Biotechnology & Bioinformatics and 37th Annual Meeting of Indian Biophysical Society, University of Mumbai, India, Jan 14, 2013
- A-5. Haruki Nakamura, “Computational Prediction and Analysis of Protein-Protein Interactions: Qualitative and Quantitative Approaches”, Special Seminar at Academia Sinica, Shanghai, Jan 18, 2013
- A-6. Yoichi Murakami, Eiji Kanamori, Joy Sarmiento, Shide Liang, Daron M. Standley, Matsuyuki Shirota, Kengo Kinoshita, Yuko Tsuchiya, Haruki Nakamura, “An Automatic and Semi-automatic Approach for Predicting Protein-Protein Complex Structures.” CAPRI Meeting, Utrecht, Portland, Apr 17, 2013
- A-7. Akira R. Kinjo, “Composite structural motifs of binding sites for delineating biological functions of proteins Recent advances in physical and chemical biology.” Saha Institute of nuclear physics, Kolkata, India, May 5-7, 2013
- A-8. Akira R. Kinjo, “On the optimal contact potential and sequence conservation modes of proteins.” 日中韓バイオインフォマティクストレーニングコース、Suzhou (蘇州大

学)、 June 18, 2013

- A-9. Haruki Nakamura, "New Approaches to Dynamic Properties of Proteins and their Applications to Drug Discover of GPCR." CADD'13, Bandung, Indonesia, Dec 12, 2013
- A-10. Haruki Nakamura, "Computational Protein Science: Structural Bioinformatics and Molecular Simulations." CDAST symposium, Jember University, Indonesia, Dec 14, 2013
- B-1. Naohiro Kobayashi, "Highly automated and secure pipelines to study and validate NMR structures and complexes of biomolecules performed by a stand-alone cloud computing platform using virtual machine servers." International Conference on Structural Genomics 2013, 札幌市, July 29, 2013

② 口頭発表(国内会議 24 件、国際会議 3 件)

〈国内〉

- A-1. 鈴木博文, "万見で PDB のデータを体験する", 第 11 回日本蛋白質科学会年会 PDBj サテライトワークショップ、大阪大学銀杏会館(吹田市)、2011 年 6 月 6 日
- A-2. 鈴木博文, "ウェブブラウザで複雑な 3 次元構造を気軽に眺める", 第 11 回日本蛋白質科学会年会、ホテル阪急エキスポパーク、(大阪府吹田市)、2011 年 6 月 7 日
- A-3. Ashwini Patil, Kengo Kinoshita, Haruki Nakamura, Kenta Nakai, "Structural properties of hub proteins in interaction networks and its implications on interaction promiscuity." 第 11 回日本蛋白質科学会年会、ホテル阪急エキスポパーク、(大阪府吹田市)、2011 年 6 月 7 日
- A-4. 金城 玲, "Composite structural motifs of interaction interfaces for delineating biological functions of proteins.", 第 49 回日本生物物理学会年会、兵庫県立大学(姫路市)、2011 年 9 月 16-18 日
- A-5. 鈴木博文、中村春木, "Evaluation and improvement of low-resolution structure comparison system for extensive 3D electron microscopy data.", 第 49 回日本生物物理学会年会、兵庫県立大学(姫路市)、2011 年 9 月 17 日
- A-6. 輪湖博、猿渡茂, "基準振動変位ベクトルの線形結合による立体構造変化の再現", 第 49 回日本生物物理学会年会、兵庫県立大学(姫路市)、2011 年 9 月 18 日
- A-7. 金城 玲, "Composite structural motifs of interaction interfaces for delineating biological functions of proteins", H23 年蛋白研セミナー、大阪大学蛋白質研究所(吹田市)、2011 年 11 月 16 日
- A-8. 鈴木博文, "複雑な構造の見方、H23 年蛋白研セミナー「PDBj 講習会」-in 福岡-", 九州大学(福岡市)、2012 年 2 月 7 日
- A-9. 木下賢吾, "次世代生命科学研究に必要な計算機インフラについて", シンポジウム『データ駆動型生命情報科学の挑戦』、仙台市、2012年5月10日
- A-10. 中村春木, "PDBj(日本蛋白質構造データバンク)のデータベース高度化・統合化について", 第 12 回蛋白質科学会年会、名古屋国際会議場(名古屋市)、2012 年 6 月 20 日
- A-11. 中村春木, "Big data 時代に向けた wwPDB と PDBj の役割", 第 50 回日本生物物理学会年会、名古屋大学東山キャンパス(名古屋市)、2012 年 9 月 23 日
- A-12. 中村春木, "生命科学における蛋白質構造データバンク(PDB)の役割", wwPDB Outreach 講演会、ハートンホール毎日新聞ビル(大阪市)、2012 年 10 月 13 日
- A-13. 中村春木, "PDBj (PDB japan)の活動と wwPDB", H24 年日本結晶年会、東北大学(仙台市)、2012 年 10 月 26 日
- A-14. 鈴木博文, "万見"で 3 次元構造を見る", H24 年 PDBj 講習会 in 東京、東京農工大

学(東京)、2013年3月7日

- A-15. 中村春木、“ビッグデータ時代における生命科学データベース”、H24年蛋白研セミナー『ビッグデータ時代に向けた医データベース』、大阪大学中之島センター(大阪市)、2013年3月8日
- B-1. 藤原敏道、“先端的 NMR 拠点から生まれる新たな潮流:最新成果、役割、利用”、H23年蛋白研セミナー「先端的 NMR 拠点から生まれる新たな潮流:最新成果、役割、利用」、大阪大学蛋白質研究所(吹田市)、2011年7月28日
- B-2. 小林直宏、“仮想化技術を活用した生体高分子の解析研究のすすめ”、第12回蛋白質科学会年会、名古屋国際会議場(名古屋市)、2012年6月20日
- B-3. 藤原敏道、“磁気共鳴の先端計測技術と生体系への展開”、H24年蛋白研セミナー、大阪大学蛋白質研究所(吹田市)、2012年7月31日
- B-4. 小林直宏、“仮想化技術を用いた NMR データの統合的解析環境”、第50回日本生物物理学会年会、名古屋大学(名古屋市)、2012年9月23日
- B-5. 藤原敏道、“蛋白研の NMR とその利用”、H24年蛋白研セミナー、大阪大学銀杏会館(吹田市)、2012年10月17日
- B-6. 小林直宏、“仮想化技術で始める超快適な生体高分子解析環境のレシピ”、H24年 PDBj 講習会、東京農工大学(東京)、2013年3月7日
- B-7. 岩田武史、“生体高分子 NMR データバンク(BMRB)新ポータルサイト”、第13回日本蛋白質科学会年会、とりぎん文化会館(鳥取市)、2013年6月12日
- B-8. 小林直宏、“クラウドコンピューティング、仮想化技術と生体高分子 NMR データベースの利用法”、H25年 PDBj 講習会、大阪大学中ノ島センター(大阪市)、2013年8月23日
- B-9. 横地政史、“PDBj-BMRB: Publishing NMR Spectroscopy Derived Data of BioMagResBank in Structured Data Formats, XML and RDF”、第51回日本生物物理学会年会、国立京都国際会館、(京都市)、2013年10月28日

〈国際〉

- A-1. Akira R. Kinjo, “Functional characterization of protein domains common to animal viruses and mouse.” InCoB 2011, Kuala Lumpur, Nov 30- Dec 2, 2011
- A-2. Daron M. Standley, “Functional Annotation of Intrinsically Disordered Domains by Their Amino Acid Content Using IDD Navigator” Pacific Symposium on Biocomputing, Hawaii, USA, Jan 6, 2012
- A-3. Genji Kurisu, Atsushi Nakagawa, Haruki Nakamura, “Modifications to the Protein Data Bank (PDB)”, AsCA2013, Hong Kong, Dec 8, 2013

③ ポスター発表(国内会議 20 件、国際会議 12 件)

〈国内〉

- A-1. 猿渡茂、輪湖博、“二面角系弾性ネットワークモデルによる基準振動解析:タンパク質-DNA 複合体における内部運動と外部運動”、第11回日本蛋白質科学会年会、ホテル阪急エキスポパーク(吹田市)、2011年6月7日
- A-2. 輪湖博、猿渡茂、“基質結合にともなうタンパク質の構造変化の基準振動解析による再現”、第11回日本蛋白質科学会年会、ホテル阪急エキスポパーク(吹田市)、2011年6月7日
- A-3. 鈴木博文、中村春木、“分子構造ビューア - 万見(Yorodumi)”、第11回日本蛋白質科学会年会、ホテル阪急エキスポパーク(吹田市)、2011年6月9日
- A-4. 金城 玲、“Composite structural motifs of interaction interfaces for delineating biological functions of proteins.” 第49回日本生物物理学会年会、兵庫県立大学(姫路市)、2011年9月16-18日

- A-5. 鈴木博文、中村春木、“低分解能3次元電子顕微鏡データの構造比較システムの評価と改善”、第12回日本蛋白質科学会年会、名古屋国際会議場(名古屋市)、2012年6月21日
- A-6. 鈴木博文、中村春木、“低分解能3D電子顕微鏡構造データの類似構造検索システム”、第50回日本生物物理学会年会、名古屋大学(名古屋市)、2012年9月22日
- A-7. 土屋裕子、木下賢吾、猿渡茂、輪湖博、“基準振動解析に基づくホモダイマー相互作用面の動的な特徴”、第13回日本蛋白質科学会年会、とりぎん記念会館(鳥取市)、2013年6月13日
- A-8. 猿渡茂、輪湖博、“結晶中のタンパク質分子に対する2面角系弾性ネットワークモデル”、第13回日本蛋白質科学会年会、とりぎん記念会館(鳥取市)、2013年6月13日
- A-9. 猿渡茂、輪湖博、“結晶環境における弾性ネットワークモデルを用いた高分解能X線構造における温度因子の再現”、第51回日本生物物理学会年会、京都国際会館(京都市)、2013年10月30日
- B-1. 小林直宏、“仮想化技術による生体高分子NMR解析環境およびBMRBデータベースサーバーの統合化”、トーゴの日シンポジウム2012、時事通信ホール(東京)、2012年10月5日
- B-2. 小林直宏、“化学シフトデータベースを利用した高精度なNMR構造評価システム”、第51回NMR討論会、ウインクあいち(名古屋市)、2012年11月9日
- B-3. 片岡沙織、古板恭子、小林直宏、建部恒、村山真一、塩崎一裕、藤原敏道、児嶋長次郎、“常磁性緩和効果を用いたTORC2構成蛋白質Sin1のNMR立体構造解析”第13回日本蛋白質科学会年会、とりぎん文化会館(鳥取市)、2013年6月12-14日
- B-4. 小林直宏、横地政史、岩田武史、高橋あみ、児嶋長次郎、藤原敏道、“生体高分子NMRデータベース、BMRBにおけるデータベース統合化の新展開”、トーゴの日シンポジウム2013、時事通信ホール(東京)、2013年10月4-5日
- B-5. 北沢創一郎、小林直宏、井上沙紀、大前英司、北原亮“高圧力NMR法によるジヒドロ葉酸還元酵素の構造揺らぎ研究”第52回NMR討論会、石川県立音楽堂(金沢市)、2013年11月12-14日
- B-6. 古板恭子、片岡沙織、小林直宏、村山真一、建部恒、塩崎一裕、藤原敏道、児嶋長次郎、“常磁性緩和効果を用いたタンパク質の溶液構造解析法の開発”第52回NMR討論会、石川県立音楽堂(金沢市)、2013年11月12-14日
- B-7. 永田崇、白川貴恵、小林直宏、始平堂弘和、片平正人、堀澤健一、土居信英、柳川弘志“TVV法により取得した高選択的MDM2結合ペプチドによるMDM2:p53結合阻害の構造基盤”第52回NMR討論会、石川県立音楽堂(金沢市)、2013年11月12-14日
- B-8. 小林直宏、横地政志、岩田武史、高橋あみ、児嶋長次郎、藤原敏道、“統合化に向けてリニューアルされたBioMagResBank”第52回NMR討論会、石川県立音楽堂(金沢市)、2013年11月12-14日
- B-9. 片岡沙織、古板恭子、小林直宏、建部恒、村山真一、塩崎一裕、藤原敏道、児嶋長次郎、“常磁性緩和効果を用いたSin1のNMR構造解析”第36回日本分子生物学会年会、神戸国際会議場(神戸市)、2013年12月5日
- B-10. 天野亮、野村祐介、永田崇、小林直宏、森瑤子、福永淳一、田中陽一郎、片平正人、中村義一、神津知子、坂本泰一、“転写因子AML1に対して複数の結合部位を持つ高親和性RNAアプタマーの解析”第36回日本分子生物学会年会、神戸国際会議場(神戸市)2013年12月6日
- B-11. 天野亮、野村祐介、永田崇、小林直宏、森瑤子、福永淳一、田中陽一郎、片平正人、中村義一、神津知子、坂本泰一、“Multi-site binding of high affinity aptamer against AML1 Runt domain”第40回国際核酸化学シンポジウム、神奈川大学(横浜市)、2013年12月3-6日

〈国際〉

- A-1. Akira R. Kinjo, "Composite structural motifs of ligand binding interfaces for delineating biological functions of proteins." Asia-Pacific Protein Association Conference, Shanghai, China, May 5-9, 2011
- A-2. Naohiro Kobayashi, Ayako Furukawa, Soichiro Kitazawa, Takashi Nagata, Ryo Kitahara, Masato Katahira and Toshimichi Fujiwara, "MagRO-Assign: a tool for automated sequence specific assignment of chemical shifts for NMR signals of protein backbone." EUROMAR2011, Frankfurt, Germany, Aug 21-25, 2011
- A-3. Akira R. Kinjo, "Protein Data Bank on the Semantic Web." IUCr 2011, Madrid, Spain, Aug 22-29, 2011
- A-4. Hiroshi Wako, Shigeru Endo, "Characterization of a conformational change of protein with elastic-network-model based normal mode analysis in dihedral angle space." The 17th International Biophysics Congress(第 17 回国際生物物理学会)、Beijing, China, Oct 31, 2011
- A-5. Daron M. Standley, "Function prediction of structured and unstructured proteins." 5th China Medical Biotech Forum (CMBF-2011), Beijing, China, Nov. 8, 2011
- A-6. Daron M. Standley, "Prediction of dinucleotide-specific RNA- binding sites in proteins." Kuala Lumpur, Malaysia, Nov 14, 2011
- A-7. Keisuke Ikeda, Tomoshi Kameda, Ayako Egawa, Hideo Akutsu, Toshimichi Fujiwara, "Simulation of Magic-Angle Spinning Solid-State NMR Spectral Fitting for Proteins and Peptides using Replica-Exchange Monte Carlo Algorithm." 第 50 回記念 NMR 討論会国際シンポジウム、横浜市、Nov 15-18, 2011
- A-8. Naohiro Kobayashi, Takeshi Iwata, Yoko Harano, Chojiro Kojima, Haruki Nakamura, Toshimichi Fujiwara, "New server systems based on virtual computing for the database BMRB and MagRO-Tools for NMR analysis." 第 50 回記念 NMR 討論会国際シンポジウム、横浜市、Nov 15-18, 2011
- A-9. Daron M. Standley, "Functional Annotation of Intrinsically Disordered Domains by Their Amino Acid Content Using IDD Navigator." Pacific Symposium on Biocomputing, Hawaii, USA, Jan 6, 2012
- A-10. Akira R. Kinjo, Hirofumi Suzuki, Reiko Yamashita, Yasuyo Ikegawa, Takahiro Kudou, Reiko Igarashi, Yumiko Kengaku, Hasumi Cho, Nahoko Haruki, Daron M. Standley, Atsushi Nakagawa, and Haruki Nakamura, "Data-in and Data-out Services of Protein Data Bank Japan (PDBj) as a member of the wwPDB." AsCA2012, Aderade, Australia, Dec 3, 2012
- A-11. Haruki Nakamura, Akira R. Kinjo, Hirofumi Suzuki, Reiko Yamashita, Yasuyo Ikegawa, Takahiro Kudou, Gert-Jan Bekker, Reiko Igarashi, Yumiko Kengaku, Hasumi Cho, Junko Sato, Nahoko Haruki, Daron M. Standley, Atsushi Nakagawa, "Protein Data Bank Japan (PDBj): maintaining structural data archive and integration of structure data with other life sciences data resources by semantic web technologies" AsCA2013, Hong Kong, Dec 8-10, 2013
- B-1. Masashi Yokochi, Naohiro Kobayashi, Ami Takahashi, Eldon L. Ulrich, John L. Markley, Haruki Nakamura, Chojiro Kojima and Toshimichi Fujiwara, "Translation of data entries in BioMagResBank from NMR-STAR format into XML format based on the curated dictionary and XML Schema", International Conference on Structural Genomics 2013、札幌市、July 29- Aug 1, 2013

(4)知財出願

①国内出願 (0 件)

②海外出願 (0 件)

③その他の知的財産権

商標登録証 商標 PDBj 登録第 5181648 号(2008 年 11 月 21 日登録)2013 年に継続措置を取った。

(5)受賞・報道等

①受賞(顕著な受賞の前に*を付記してください)

*金城 玲:文部科学大臣表彰「若手科学者賞」受賞(2012 年 4 月)

「蛋白質立体構造のデータベース技術と博物学の研究」

中村 春木:平成24年度大阪大学総長顕彰(社会・国際貢献部門) 受賞(2012 年 8 月)

「蛋白質構造データバンクの国際的な構築と高度化・統合化」

②マスコミ(新聞・TV等)報道(プレス発表をした場合にはその概要もお書き下さい。)

特にナシ

③その他

特にナシ

§6 研究開発期間中に主催した会議等

主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
H23 年 5 月 6 日-8 日	第 3 回 APPA 国際会議 での ブース 展 示 「Protein Data Bank Japan」	上海大学(中 国)	—	PDBj データベースサービスの 展示、紹介。
H23 年 6 月 6 日	第 11 回日本蛋白質科学 会 PDBj サテライトワーク ショップ in 大阪	大阪大学、銀 杏会館(吹田 市)	23 名	データ利用者に対する DB 利用の実習。
H23 年 6 月 7 日	第 11 回日本蛋白質科学 会年会ランチョンセミナー 「PDBj(日本蛋白質構 造データバンク)」	ホテル阪急エキ スポパーク(大 阪府吹田市)	110 名	データ利用者に対する DB 利用についての紹介。
H23 年 6 月 28 日-7 月 3 日	BMRB Advisory Board Meeting	ウィスコンシン 大学(USA)	22 名 (PDBj から 2 名 参 加)	ADIT-NMR, SMSDep, BMRB サーバに関する情 報交換及び開発指針討議。
H23 年 8 月 23 日-28 日	IUCr2011 国際結晶学 会ブース展示「wwPDB」	マドリード、スペ イン		PDB データベースサービスの 展示、紹介。
H23 年 9 月 16 日	第 49 回生物物理学会年 会 PDBj ランチョンセミナ ー in 兵庫ー	兵庫県立大 学、姫路書写キ ャンパス(姫路 市)	110 名	データ利用者に対するデー タ利用についての紹介。

H23年9月30日	wwPDB Advisory Committee meeting	EBI(UK)	20名 (PDBjから3名参加)	wwPDB 活動に対する国際諮問委員会。
H23年10月28日-30日	PDB40: Symposium celebrating the 40 th Anniversary of the Protein Data Bank	Cold Spring Harbor Laboratory (NY, USA)	242名	PDB40周年記念シンポジウムを主催。 *wwPDB 主催
H23年11月8日	CBI/JSBi2011 合同大会スポンサードセッション:PDBj	神戸国際会議場(兵庫県)	50名	3名の講演者を招いた講演会を主催。
H23年11月16-17日	“IFReC-IPR Joint Symposium on Systems Biology”	大阪大学免疫学フロンティア研究センター(吹田市)	83名	ゲノム、構造、ネットワークに関連する公開ワークショップの開催。
H23年11月24日-25日	H23年日本結晶学会ブース展示”Protein Data Bank Japan”	北海道大学、学術交流会館(札幌市)	—	PDBjデータベースサービスの展示、紹介。
H23年11月25日	H23年日本結晶学会年会ランチョンセミナー in 北海道—	北海道大学、学術交流会館(札幌市)	95名	データ利用者に対するデータ整理と登録についての教育。
H23年12月13日-16日	第34回日本分子生物学会展示”Protein Data Bank Japan”	パシフィコ横浜(神奈川県)	—	PDBjデータベースサービスの展示、紹介。
H24年2月7日	H23年蛋白研セミナー”PDBj講習会”in 福岡	九州大学、病院キャンパス(博多)	34名	データ利用者に対する DB 利用の実習を主催。
H24年3月14日-19日	電子顕微鏡研究とデータベース運用についての meeting	Instruct Image Processing Center(マドリード、スペイン)	4名 (PDBjから1名参加)	電子顕微鏡研究と DB 運用についての情報交換及び意見交換。
H24年4月30日	大阪大学いちょう祭・蛋白研イベント”蛋白質を知ろう”	大阪大学蛋白質研究所(吹田市)	35名	分子閲覧ソフトによる三次元構造の観察や、蛋白質 PC ゲームを使って蛋白質解析を分かりやすく一般へ紹介。
H24年6月20日	第12回蛋白質科学会年会 PDBj ランチョンセミナー in 名古屋	名古屋国際会議場(名古屋市)	105名	PDBjの組織およびウェブサービスや BMRB による新しい解析研究について紹介。
H24年5月8日	PDBj-BMRB 糖鎖データベース グループ間ミーティング	大阪大学	6名	糖鎖 NMR データの統合化に関する打ち合わせ
平成24年5月13-16日	wwPDB common D&A meeting	EBI(UK)	20名 (PDBjより2名、PDBj-BMRBより1名参加)	NMR データ登録共通 UI 開発のための打ち合わせ

H24年6月 25-29日	Annotation of EMDB dataトレーニングワーク ショップ	RCSB, Rutgers University (USA)	3名	EM データ、chemical shift データの処理等についての トレーニング。 *wwPDB 主催。
H24年8月 9日	バイオインフォマティクス 講習会 2012-生物情報 データベース入門	北海道大学 (札幌市)	44名	生物情報データベースの利用 者向けの PC を使用した 実習。
H24年9月 23日	第50回生物物理学会年 会 PDBj ランチョンセミ ナー in 名古屋	名古屋大学 (名古屋市)	120名	Big Data 時代における PDB の意義と仮想化技術 による NMR データの統合 的解析環境について紹介。
H24年10 月12日	9th wwPDB Advisory Committee Meeting	大阪大学蛋白 質研究所 (吹田市)	20名	wwPDB 諮問委員、関係 組織の代表研究者を招き、 wwPDB の年次報告およ び今後の運営と方針につ いて討議。
H24年10 月13日	wwPDB Outreach 講演 会 in 大阪	ハートンホール 毎日新聞ビル (大阪市)	52名	PDB と創薬開発、生命科学 研究への関わりを主題とし た一般向け講演会を実施。
H24年10 月18日	H24年日本結晶学会年 会 ランチョンセミナー in 東北	東北大学 (仙台市)	100名	PDB と wwPDB、また PDB の登録について紹介。
H24年11 月2日	H24年 CCP4 講習会	九州大学 (福岡市)	29名	X 線結晶解析プログラム CCP4 の利用により、特に PDBj へのデータ登録手法 について紹介。
H24年11 月10-11日	サイエンスアゴラ 2012	東京お台場	—	分子構造を 3D 画像で分か りやすく展示、紹介。
H24年12 月11-14日	第35回日本分子生物学 会年会・バイオデータベ ースコーナー展示	マリンメッセ福 岡(福岡市)	—	PDBj データベースを分か りやすく紹介する企画展 示を実施。
H24年12 月26日	H24年第3回データベ ース講習会	産総研関西セ ンター(大阪府 池田市)	30名	PDBj のサービスの利用 法について PC を使用し ながら実習。
H25年3月 7日	H24年 PDBj 講習会 —in 東京—	東京農工大学 (小金井市)	43名	PDBj の Web サービスの 利用法について PC を使 用しながら実習。
平成25年1 月22日	PDBj-BMRB 糖鎖デー タベース グループ間ミ ーティング	NBDC 東京本 部	6名	糖鎖 NMR データの統合 化に関する打ち合わせ
H25年3月 8日	H24年蛋白研セミナー	大阪大学中之 島センター(大 阪市)	49人	ビッグデータ時代に向けた 医データベースと題する 7 題のセミナーを実施し、科 学データベースと医療デー タベースの融合について企 業研究者も含め発表、討 論。
H25年5月 3日	大阪大学いちょう祭・蛋 白研イベント“蛋白質の かたちを知ると何が分 るの?”	大阪大学蛋白 質研究所(吹田 市)	10名	分子閲覧ソフトによる三 次元構造の観察や、蛋白 質 PC ゲームを使って蛋 白質解析を分かりやすく 一般へ紹介。

H25年6月 12日	第13回日本蛋白質科学 会年会 PDBj ランチョン セミナー in 鳥取	とりぎん文化会 館(鳥取市)	100名	PDBj ウェブの新インターフ ェースや新 PDB フォーマツ ト、BMRB による新しい解析 研究について紹介。
H25年6月 18日	第11回日韓中バイオイ ンフォマティクストレーニ ングコース	蘇州大学(中 国)	27名	蛋白質の最適コンタクトポテ ンシャルと配列の保存モー ドについて講義
H25年8月 23日	H25年 PDBj 講習会	大阪大学中之 島センター(大 阪市)	20名	PDBj のサービスの利用法 について PC を使用しながら 実習。
H25年9月 27日	10 th wwPDB Advisory Committee Meeting	RCSB, Rutgers University (USA)	20名	wwPDB 諮問委員、関係 組織の代表研究者を招き、 wwPDB の年次報告およ び今後の運営と方針につい て討議。
H25年10 月4日	トーゴーの日シンポジウ ム 2013	時事通信ホー ル(東京)	—	PDBj の活動および今後の 運営について紹介。
H25年10 月13日	H25年日本結晶学会年 会 PDBj ランチョンセミナ ー	熊本大学(熊本 市)	80名	wwPDB の紹介および具体 的な登録方法の紹介
H25年 21-22日	第3回理論モデルの検 証についてのワーキン グ・グループ会議	RCSB, Rutgers University (USA)	50名	論文発表された計算による モデルのアーカイブ設立に ついての討議
H25年10 月28日	第51回日本生物物理学 会年会 PDBj ランチョン セミナー in 京都	京都国際会館 (京都市)	100名	wwPDB および PDBj の活 動や PDBj ウェブの新インテ ーフェース、BMRB による 新しい解析研究について紹 介。
H25年11 月9-10日	サイエンスアゴラ 2013	東京お台場	—	分子構造を 3D 画像や立体 模型で分かりやすく展示、 紹介。
H25年11 月18-19日	wwPDB validation task force meeting	EBI(UK)	14名 (PDBj- BMRB より1名 参加)	NMR データベースフォーマ ット、データクォリティー管理 に関する打ち合わせ
H25年 20-21日	PDBx/mmCIF format ワークショップ for programers	EBI(UK)	30名	コンピュータ・プログラムを作 成する技術者のための新しい フォーマット (PDBx/mmCIF) 講習会
H25年12 月3-5日	第36回日本分子生物学 会年会・バイオデータベ ースコーナー展示	神戸国際会議 場(神戸市)	—	PDBj データベースを分かり やすく紹介する企画展示を 実施。

§ 7 ユーザー評価結果への対応

《平成 25 年 7 月に実施した「NBDC における事業活動のユーザー評価」(<http://biosciencedbc.jp/user-hyouka-2013/result-summary>)で得られたユーザーの意見、提案等（詳細は別紙 2 を参照）に対し、実施済み若しくは実施予定の対応策等を具体的に記載してください。》

コメント: サービス&ソフトウェアのリンク先の中に、実際の使用にはもう少し詳しい使用方法等の説明が必要なものがある。また、機能別にリストアップするなどの表示をしてもらえると便利である。

対応: ①実施済み

どのようなサービスがあるのかを、目的別に分かりやすく探せるように、トップページに「サービスを探す (Find the service you need)」を掲載して、機能別にサービスをリストアップした。また、Help ページの記述を充実させた。

コメント: 状況に応じて動くツールと動かないツールがあるように見えるので、ビューアーの環境依存性が無くなると非常に嬉しいです。

対応: ①実施済み

ツールが稼働しない理由の多くは、JAVA と利用者のプラットフォーム(ブラウザ)のバージョンの問題がからんでおり、JAVA のバージョンが上がる都度に対応をしている。今後とも、不具合がみつかりしだい、対応をする。

コメント: 今回の「国際的な構築と統合化の取り組み」で何が変わったのかわかりません。

対応: ①実施済み

統合化にとって基本的な PDB/RDF, BMRB/XML, BMRB/RDF 等の Semantic Web 用のフォーマットはこれまで国際的にも開発がなされておらず、PDBj および PDBj-BMRB の本プロジェクトの活動により初めて開発され、かつ国際的に正規のフォーマットとして採用されている。

コメント: より積極的に宣伝、普及、啓蒙活動をしていただけると大変ありがたいです。

対応: ①実施済み

毎年、国内外の学会年会でのセミナーやブースでの宣伝や、データベースへの登録や利用に関する講習会を開催した。また、2012 年には大阪梅田にて一般社会人向け講演会を **wwPDB Foundation** として実施したほか、2012 年と 2013 年には東京お台場にてサイエンスアゴラへの出展も行い、啓蒙活動も積極的に行っている。

コメント: PDB/RDF 版の URI で一部誤りがある (UniProt taxonomy, enzyme へのリンクにおいて、対象の ID が変更された記述をもつ箇所)。PDBML/XML にあり、RDF に含まれていないレコードを対応させて欲しい。

対応: ①実施済み

PDBML (XML) にあり、PDB/RDF に含まれていないレコードの一部に関しては、最新の PDBML スキーマに対応した RDF を作成することで対応した。ただし、一部の PDBx カテゴリー (entity_poly_seq など一残基毎の情報が redundant に記述されているもの) については、そのまま RDF 化を行うと redundant にも関わらずデータ量が膨大になるため、むしろ RDF 化を行っていない。

① 実施予定

PDB/RDF の URI で一部誤りがある件に関しては、外部リソースの ID 変更に PDB の元データが対応できていないことが原因であるため、**wwPDB** として国際的に常時実施している **remediation** 作業によって対応する。

コメント: PDBj ならではの機能が今後も増えると嬉しいです。中国、台湾、韓国からの利用が今後増えると思いますので、大変でしょうが応援しています。

対応: ①実施済み

2012 年 12 月に香港で行われた **AsCA2012** (アジア結晶学会) にて、PDBj の活動を口頭で紹介し、フォーマットや登録方法の変更が行われることを日本だけでなく、中国、台湾、韓国の研究者

に周知した。今後とも、様々な機会にそれらの国々の研究者との交流をはかる。

コメント:PDBとの差別化を更に進めてもらいたい。

対応:①実施済み

PDBjはwwPDBのメンバーの一員であり、データ登録処理については世界共通の基準による品質管理を保つ必要があるため、wwPDBの他のメンバーと歩調を合わせて行っている。一方、データの日本語・中国語・ハンゲル等による閲覧法、分子表面データベース(eF-site)や基準振動解析によるダイナミクスのデータベース(ProMode)等二次データベースや検索サービスについては他のwwPDBメンバーが実施していない独自の開発と公開を行っている。また、セマンティック・ウェブ技術に対応したPDB/RDFやBMRB/RDFはPDBjが進んで開発を行い、差別化というよりはむしろwwPDBの正規な標準フォーマットとしている。このように、今後とも国際的に協力をしつつ、オリジナルな研究開発も進めていく。

コメント:PDBj-BMRBの認知度に対する低さを指摘され、積極的な情報発信が必要であるという意見があった。

対応:これまでのPDBj-BMRBの活動の大部分は貴重なNMR実験データをデータベースへ登録し、管理運営にすることに注力してきた。これにより多くのNMR関連研究を支援し、特にデータベースを利用したツール開発について貢献してきたと言える。今後の活動についてはNMR研究者あるいはNMRツール開発者といったNMRの専門家ばかりではなく、広く生体分子構造に関わる研究者が興味を持ち、有効活用できるようなデータベースへと発展させていくことが必要であると考えている。

①実施済み

平成25年度にBMRBデータをXML化、RDF化し、相互作用情報、疾患関連情報などの他のデータベースとの有機的な統合を進め、BMRB/XMLおよびBMRB/RDFとして公開した。

②実施予定

NMRデータと生体分子構造・機能を結びつける役割を演じる独自のBMRBポータルサイトを開発公開することを計画している。

§8 その他

(1)研究代表者として、研究開発、プロジェクト運営等について、上記以外に報告したいことがあれば、自由に記載してください。

本研究開発は、海外との連携・協力関係が欠かせない。実際、wwPDBの他のメンバー(RCSB-PDB, PDBe, BMRB)とは、アノテータ間のメールのやりとりは毎日行われており、システムの開発等についても毎週のようにTV会議が行われている。機会があるごとに、アノテータやプログラマがこれら海外のwwPDBメンバーの場所で開催されるワークショップへも参加し、緊密な交流が行われている。

大阪大学蛋白質研究所は「共同利用・共同研究拠点」の役割の一つとしてデータベース構築と運営を掲げており、附置研究所の業務としての統合データベース活動が2013年度に行われた拠点の中間評価において評価された。すなわち、附置研究所の役割の一つとして、研究コミュニティの成果をまとめあげデータベース化することが国レベルで認められたとも言え、今後、ビッグデータの基となる、品質が保証された研究成果のデータベース構築が処々でなされよう。また、研究代表者の中村春木は、DBCLSの客員教授も務めており、国内のライフサイエンス・データベースの統合化に尽力をしている。附置研究所と大学共同利用機関法人情報・システム研究機構とが協力し、基盤的データベースの長期的な運用が可能な体制をなるべく早期に確立したいと考えている。

以上