

PDB 登録システム OneDep の更新および構造登録と情報提供の進展

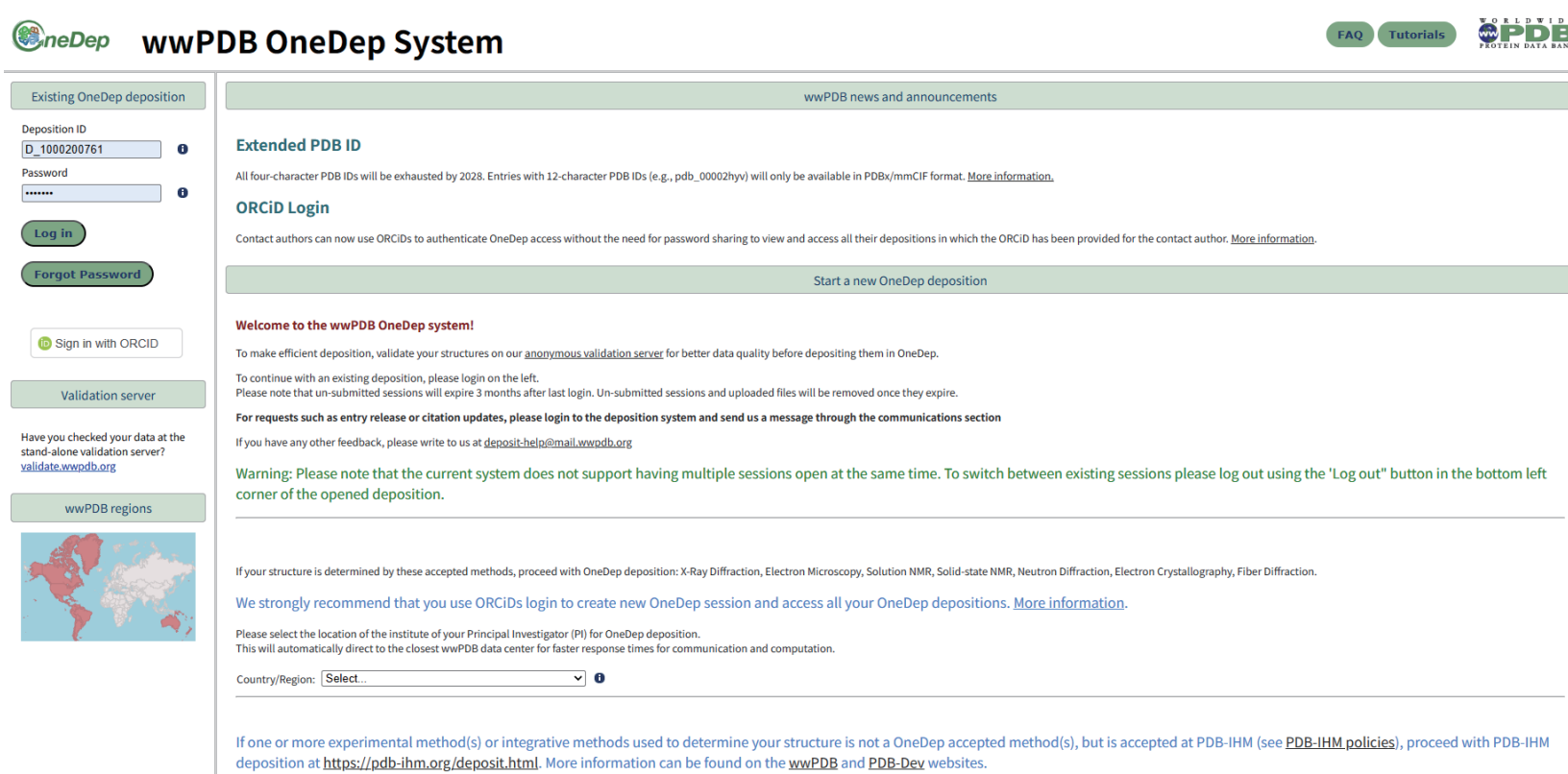
于健⁽¹⁾、Gert-Jan Bekker⁽¹⁾、横地政志⁽¹⁾、岩田武史⁽¹⁾、丹羽 智美⁽¹⁾、
池川恭代⁽¹⁾、多久和綾子⁽¹⁾、栗栖源嗣⁽¹⁾
(1) 大阪大学蛋白質研究所

日本蛋白質構造データバンク (PDBj) は、2000年7月より大阪大学蛋白質研究所にて、蛋白質立体構造データの新規登録事業を開始しました。現在、wwPDBメンバーの一員として、主にアジア地域からの登録を担当しています。正確なデータキュレーションと構造情報の品質評価を行う検証レポートの提供を通じて、wwPDB全体で24万件を超えるエントリを収録し、高品質なデータアーカイブを構築してきました。これにより、高分子構造データを活用する多様な研究・産業分野のコミュニティに貢献しています。

wwPDBの構造登録システムであるOneDepは、国際的な協力により開発され、各諮問委員会の助言に基づいて新機能を追加することで、最新の実験手法にも対応可能な形へと継続的に改良されています。構造解析に用いた生データの収集も引き続き強化しており、結晶回折および電子顕微鏡データに関しては、それぞれXRDAおよびEMPIAR-PDBjのサービスを提供しています。さらに、NMRデータについては、既存のBMRBに加え、より柔軟性の高い新サービスであるBMRbigによるデータも受け付けています。また、統合的モデリング法によって得られた構造の登録システムPDB-IHMの日本語ウェブサイトも新たに開設しました。

機能拡張を続けるPDB登録システム

登録・検証・アノテーションを行うパイプラインシステム

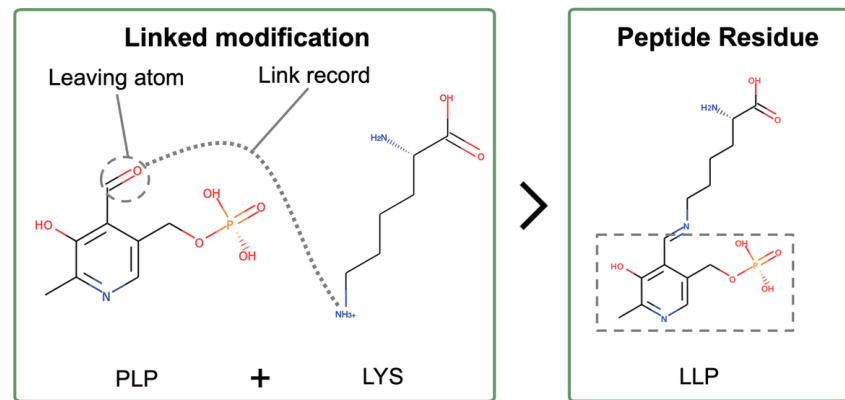


wwPDBが開発した、登録・検証・アノテーションを行うパイプライン・システムメンバーサイト (RCSB PDB, PDBe, PDBj) で共通のシステムを使用している。X線結晶解析、NMR、EM等の実験手法に対応。登録者PIの国・地域によって、担当処理サイト (RCSB PDB, PDBe, PDBj) へ自動的に振り分けられる。PDBx/mmCIFフォーマットを使用し、アーカイブ上のデータ品質の向上にも貢献するとともに、各諮問委員の提言をもとにシステム全体の機能拡張を続けている。

最近の機能拡張や変更内容

- PDBIDは8桁、CCDIDは5桁へ
- ORCID-IDを使用してOneDepシステムにアクセス可能に
- 修飾表現の標準化

PDBにおいて、タンパク質鎖の修飾に関する表現方法を標準化するプロジェクトを進めています。これにより検索性の向上が期待できる。



蛋白質立体構造解析手法別の生データ受付サービス

結晶回折



MicroED画像

212 entries (MicroED 40)

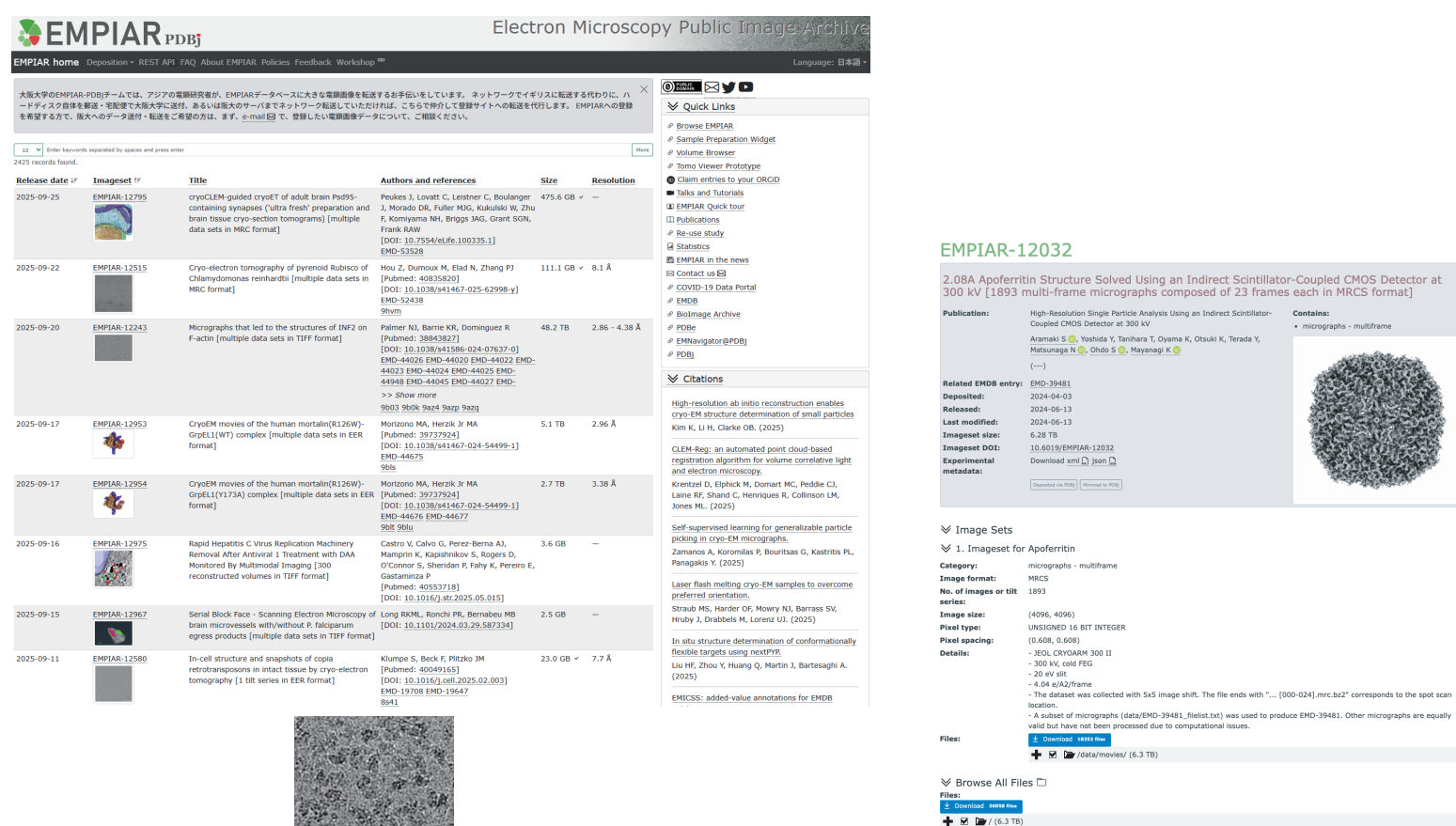


XRDa (Xtal Raw Data Archive) は、PDBj独自開発によるX線回折画像のデータベース。wwPDBメンバーの強みを活かしてOneDep登録後、構造エントリ情報がXRDa内のORCID-IDに自動的にリンクされる。OneDepへ登録したPDBID情報ともリンクして表示されるため、登録者と利用者がどちらもエントリ検索しやすいシステムである。構造データ登録前に生データを先行登録することも可能で、その場合も後からリンクすることが可能である。また、低分子量の回折データなど、PDBの登録基準に満たない生データも登録が可能となっている。

Integrative/Hybridモデリング



電子顕微鏡



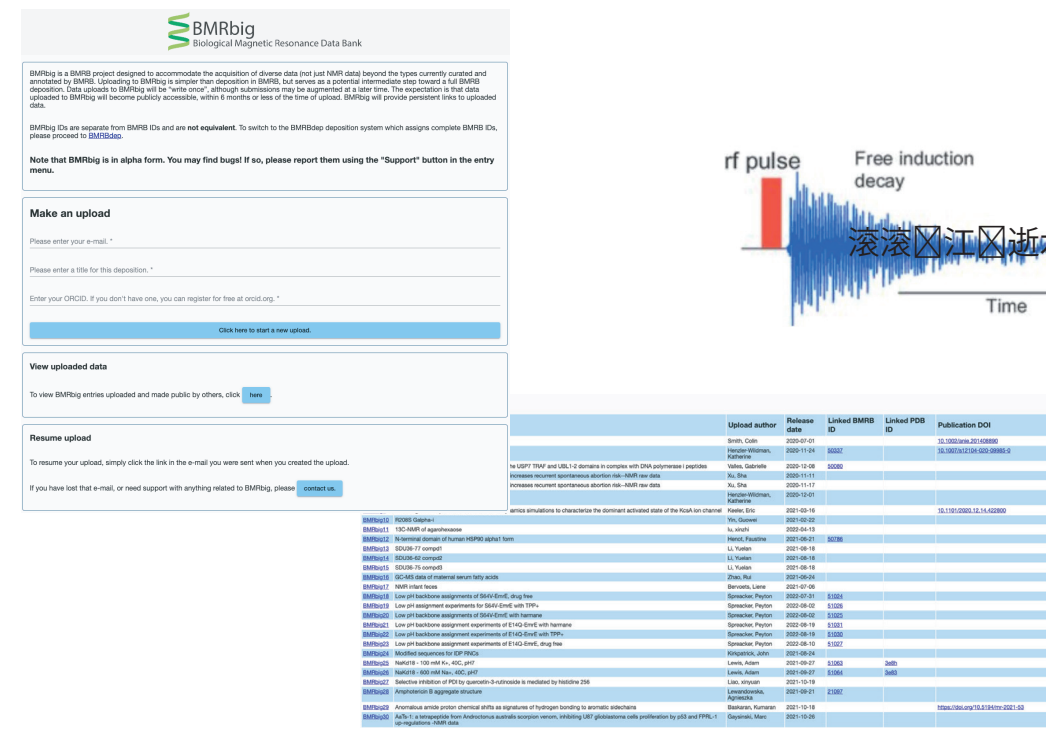
電子顕微鏡画像

2425 entries



EMPIAR (Electron Microscopy Public Image Archive) は、3Dバイオイメージング実験から得られた生の2次元画像データおよび特定の3Dバイオイメージングデータセットのデータベース。公開された生データを使って三次元構造を再構成することにより、解析ツールの開発や解析手法の研究に用いられ、分解能向上に役立つことが想定されている。Webインターフェースに加えて、JSONファイルによるエントリ作成にも対応しているため、複数の登録やバージョン管理システムによる制御を行いたい場合であっても登録者側にとって最適な方法で登録を行える。

核磁気共鳴



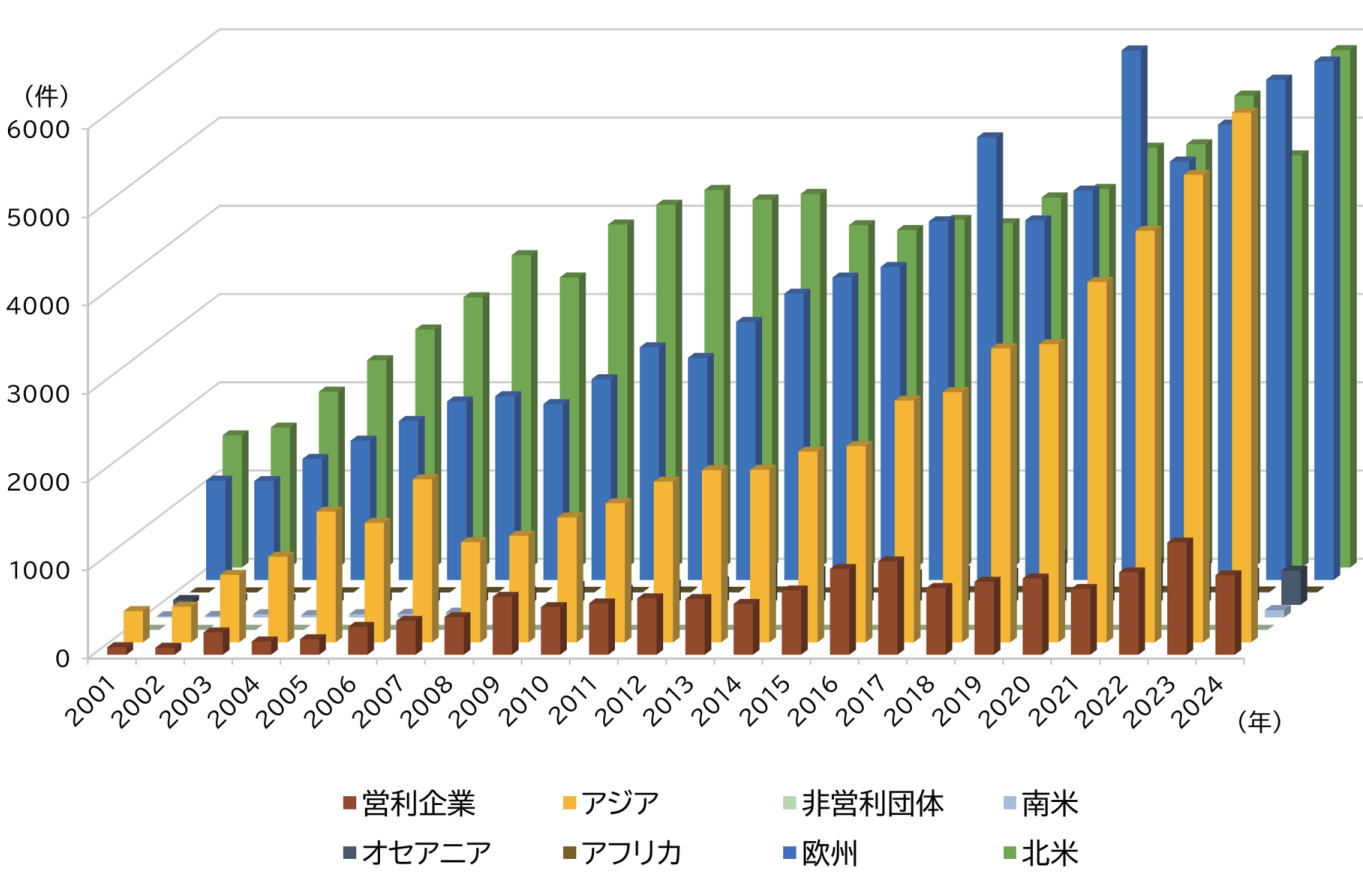
134 entries



BMRbigはFID (Free Induction Decay) やピークリストなどNMRによる測定で得られるすべて情報をアーカイブするデータベース。多数のサンプルによる実験を一つのエントリとして扱えるなど柔軟なデータ受け入れを行っている。大規模な研究プロジェクトにおいて、NMR分光計からBMRbigに直接送信して、実験データを逐次整理しておくことで、プロジェクト公開時のデータ共有の迅速化を図ることが想定されている。BMRbigでは、全てのデータファイルがバージョン管理され、公開後もデータファイルの追加、更新が可能である。

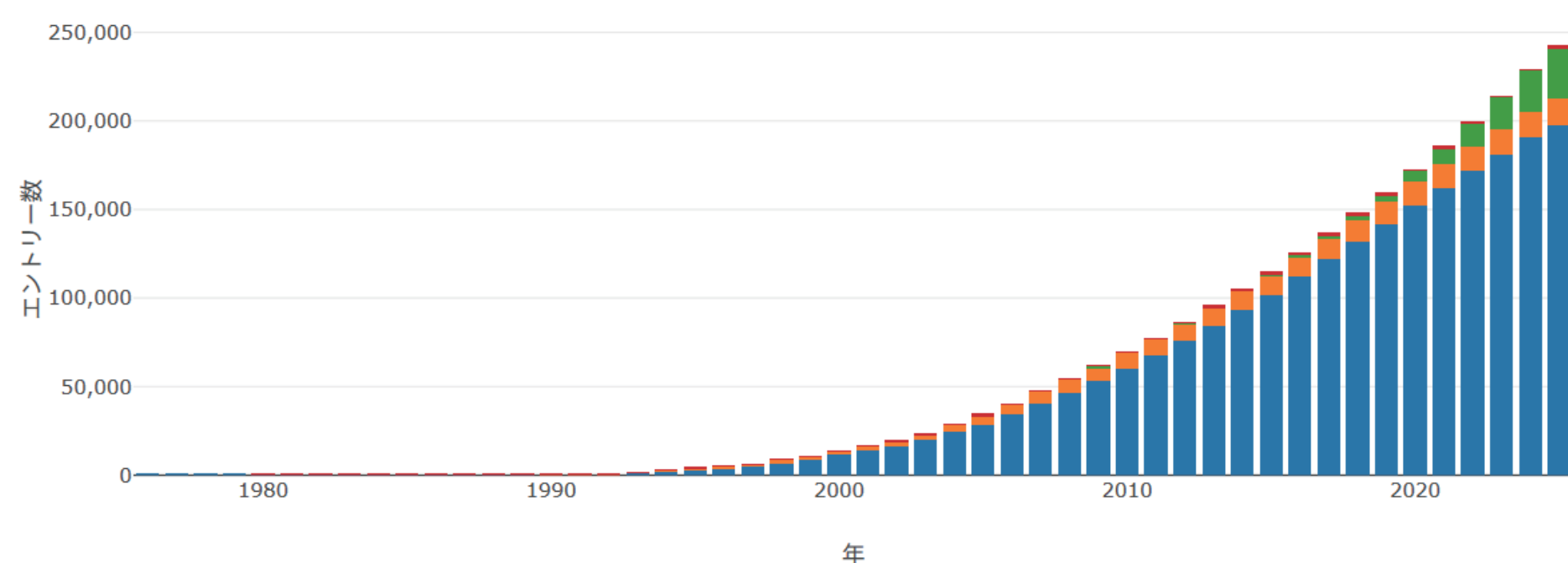
登録・処理状況と解析手法の内訳

wwPDB全体での地域別PDB登録数



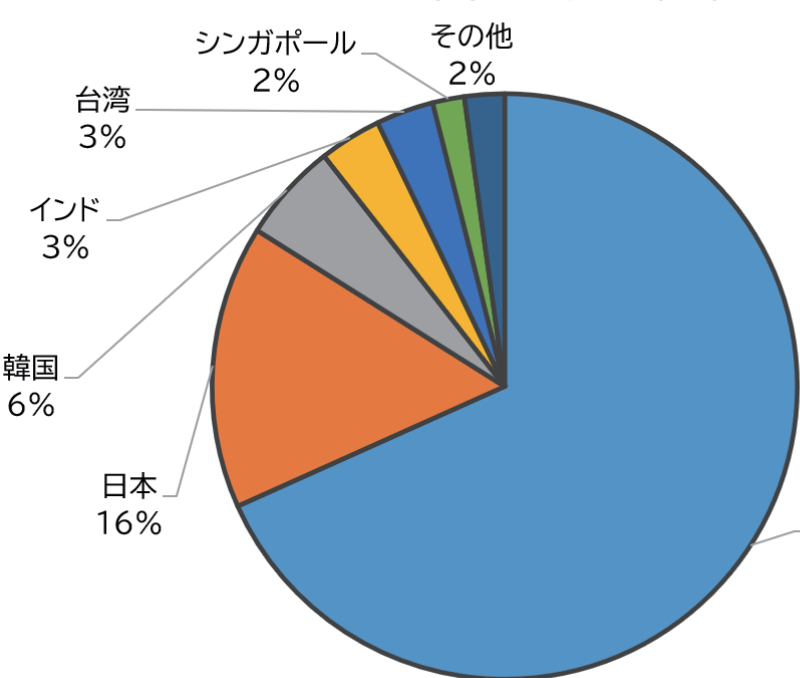
アジア発のデータ登録数は欧米に並ぶまで急速に伸びている。2024年はアジア地区の増加率は他地域より多く、登録・処理割合は約34%に増加。

実験手法別の公開PDBエントリ数



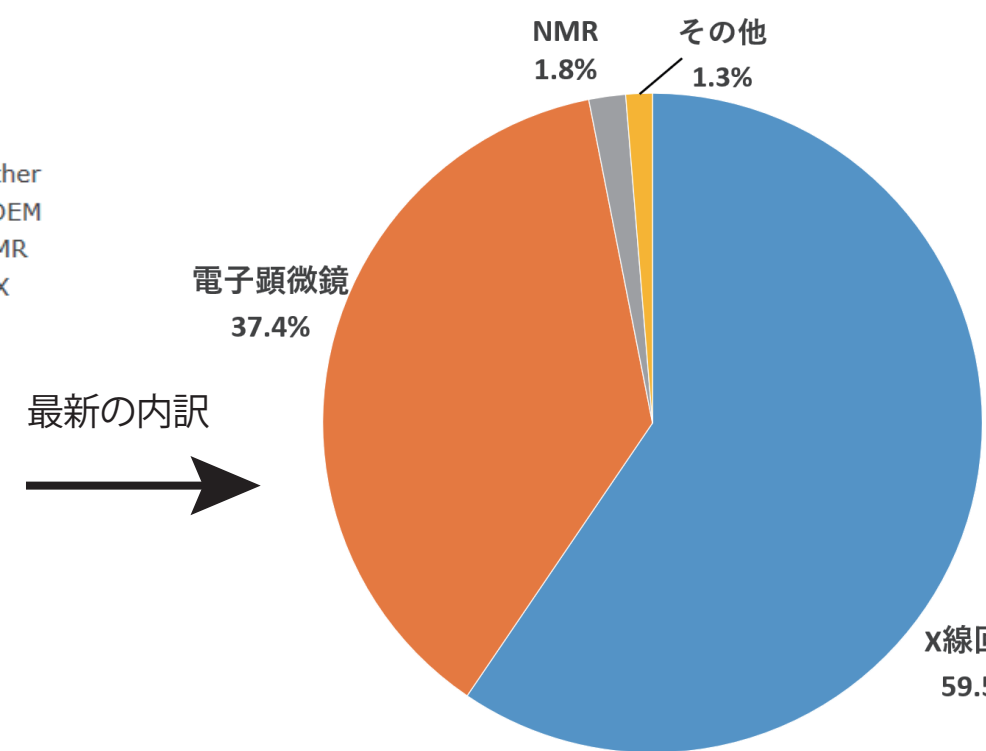
PDBへの登録数は年々増加、登録数は24万件に上っている。解析手法はX線回折や核磁気共鳴に加え、近年は電子顕微鏡によって構造が決定された登録が大幅に増加している。

PDBj+PDBcが登録処理したPDBエントリの国・地域分布 (2024年)



2022年よりPDBcがAssociate memberとして中国大陆のデータの処理を担当。(登録は全てPDBjにて受付)

2024年の解析手法別登録数



最新の内訳

2021年に28%程度だった全登録に占める電子顕微鏡による構造決定の割合が2024年には40 %近くを占めるまで増加した。主要3手法による構造決定が大多数を占めている。