

蛋白質構造データベース PDBj における OneDep およびデータインの最新動向

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⁾

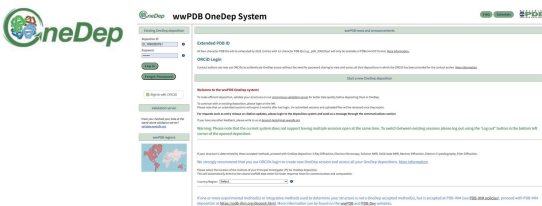
(1) 大阪大学蛋白質研究所

日本蛋白質構造データバンク(PDBj)は、2000年より大阪大学蛋白質研究所において蛋白質立体構造データの登録事業を開始し、現在は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および構造情報の品質評価を実施し、2026年8月までにwwPDB全体で25万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の構築と構造情報を利用する研究・産業分野への貢献を進めています。

PDBjでは、X線回折、クライオ電子顕微鏡、NMRデータについて、それぞれXRDA、EMPIAR-PDBj、BMRbigなどのサービスを通じて関連データの収集・公開を推進しています。最近の更新として、構造登録システムOneDepおよびPDBjデータインでは、検証レポートに新たな構造評価指標が導入され、構造情報の品質評価機能が強化されています。NMR構造登録に必要な実験データの標準化と登録の円滑化を目的としたNMRデータ変換サービスを構築しました。この変換サービスは、PDBおよびBMRBにおける登録・アノテーション作業の効率化に今後広く活用される見込みです。また、PDBjではオンラインで利用可能なmmCIF Editorを提供しています。さらに、将来的な拡張PDB IDへの移行に向けてPDBベータアーカイブが提供されており、拡張性およびスケーラビリティを考慮した構成のもと、すべてのファイルは拡張PDB IDに基づいて再編成されています。本発表ではPDBjの活動概要とOneDepおよびPDBjデータインにおける最新の取り組みについて報告します

機能拡張を続けるPDB登録システム

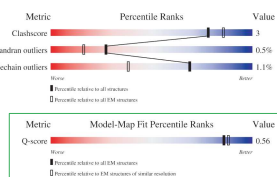
登録・検証・アノテーションを行うパイプラインシステム



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。

最新の機能拡張や変更内容

- PDBIDは8桁、CCDIDは5桁へ
- PDB Beta archive
- Q-score slider



Q-Score percentile sliders

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



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

新規mmCIFエディタの開発

PDBjでは、mmCIFエディタを開発しました：
- 利用可能なURL：
<https://pdbj.org/cif-editor/>;
<https://gitlab.com/pdbjapan/cif-editor/wikis/home>
- 複数の実験手法で得られたデータの編集に対応しています。
- 現在も開発中であり、今後、新たな機能を追加する予定です。
- ご要望がございましたら、下記よりご連絡ください：
<https://pdbj.org/contact>
- または、下記のGitHubページからIssueを作成してください：
<https://gitlab.com/pdbjapan/cif-editor/issues>

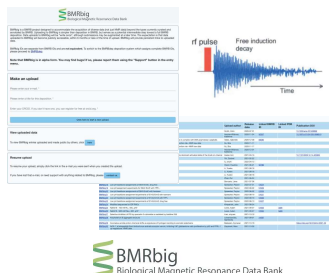
Prepare Metadata Using PDBj CIF Editor



PDB Beta Archive: <https://files-beta.pdbj.org/>

2028年までに、4文字のPDB ID (例: 1abc) がすべて使い切られる予定です。その後、新規エントリには拡張PDB IDのみが付与されます。移行期間における拡張PDB IDおよびPDBx/mmCIF形式の導入を支援するため、PDB Beta Archiveを利用できます。

核磁気共鳴



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。

NMRデータファイル変換サービス

入力: 手持ちのデータファイル
- 座標 (モデル) ファイルPDBx/mmCIFまたはPDB形式
- 帰属済み化学シフト11形式に対応
- 制限情報 12形式に対応
- スペクトルピークリスト11形式に対応
- 解析ソフト固有の形式のままでよい



出力: 登録に使える標準形式
- NMR データ: NMR-STAR V3 (可能な場合は NEF)
- 座標: PDBx/mmCIF
- 変換レポート (人が読めるPDFとJSONファイル)
- そのまま OneDep / BMRbdep の登録作業へ

日本蛋白質構造データバンク (PDBj)

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2

大阪大学蛋白質研究所・構造解析研究棟 3F

蛋白質構造データバンク構築研究室内

TEL: 06-6879-4311 (全般)

06-6879-8634 (PDB登録)

Web問い合わせ: <https://pdbj.org/contact>

