

研究開発実施報告

□概要

研究開発課題名	蛋白質構造データバンクのデータ検証高度化と統合化
開発対象データベースの名称 (URL)	日本蛋白質構造データバンク (PDBj) (https://pdbj.org)
研究代表者氏名	栗栖 源嗣
所属・役職	大阪大学 蛋白質研究所 教授 (2020年3月時点)

□目次

§1. 研究実施体制.....	2		
§2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等.....	3	②	招待講演..... 11
(1) データベース一覧.....	3	③	口頭講演..... 11
(2) ツール等一覧.....	3	④	ポスター発表..... 11
§3. 実施内容.....	4	(4)	知的財産権の出願..... 11
(1) 本年度の研究開発計画と達成目標.....	4	(5)	受賞・報道等..... 12
(2) 進捗状況.....	5	①	受賞..... 12
§4. 成果発表等.....	10	②	メディア報道..... 12
(1) 原著論文発表.....	10	③	その他の成果発表..... 12
① 論文数概要.....	10	§5. 研究開発期間中に主催した活動 (ワークショップ等)	13
② 論文詳細情報.....	10	1. 進捗ミーティング.....	13
(2) その他の著作物 (総説、書籍など).....	10	2. 主催したワークショップ、シンポジウム、アウトリー	
(3) 国際学会および国内学会発表.....	10	チ活動等.....	13
① 概要.....	10		



§1. 研究実施体制

グループ名	研究代表者または 主たる共同研究者 氏名	所属機関・役職名	研究題目
栗栖グループ	栗栖 源嗣	大阪大学・教授	PDBおよびBMRBアーカイブの構築および高度化・統合化
藤グループ	藤 博幸	関西学院大学・教授	ASHビューアの開発

§2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等

(1) データベース一覧

【主なデータベース】

No.	名称	別称・略称	URL
1	PDB Archive	PDB Archive	https://pdbj.org/

【その他のデータベース】

No.	名称	別称・略称	URL
1	BMRB	BMRB	https://bmrdep.pdbj.org
2	eF-site	eF-site	https://pdbj.org/eF-site/
3	ProMode elastic	ProMod	https://pdbj.org/promode-elastic/
4	MoM	MoM	https://pdbj.org/mom/

(2) ツール等一覧

No.	名称	別称・略称	URL
1	EM Navigator	EM Navi	https://pdbj.org/emnavi/
2	ASH		https://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/ash_service/
3	MolMil		https://pdbj.org/molmil2/
4	ASHviewer		開発中のため、未だない

§3. 実施内容

(1) 本年度の研究開発計画と達成目標

1) 国際組織 wwPDB メンバーとしての蛋白質構造 (PDB) アーカイブの構築・データ検証・公開

引き続き、wwPDB の欧米のメンバーと協力し、PDBj(PDB Japan)および PDBj-BMRB が厳しい品質管理を行いつつ、増加する一方の立体構造情報と NMR 実験情報に対応する。具体的には、横地研究員が One Dep 開発チームに加わり、岩田研究員が進める BMRBdep の開発と並行して登録業務の自動化をより進めた。システム管理を行っている池川研究員にも、データ登録が多いときにはアノテーションに加わってもらえるよう教育を行い、季節的なデータ登録数の一時的増加に対応できるようアノテータの体制を強化する。第3年次には、引き続き EM および NMR により解析された構造データの品質を検証する手法を wwPDB の欧米メンバーと協力して確立することに重点を置いて対応する。現在、X 線解析法のデータにのみ先行して進んでいるセマンティック化を、PDB 全データの品質管理に対して進めることを目指したが、NMR とクライオ電子顕微鏡の構造に関してはコミュニティとの間で肝心の検証方針の策定に時間がかかっている。さらに、検証レポートの構築法がほぼ確立した X 線結晶構造解析のデータに関しては、計画を発展的に修正して、平易に記述できる SPARQL 検索を PDBj-Mine へ実装したいと思い、年度の後半に対応を計画していた。しかし、新型コロナウイルス感染症の拡大への懸念が生じ、研究員の DBCLS 訪問と打ち合わせがキャンセルとなったため、本連携開発項目は 2020 年度に繰り越して対応する。

2) 他のデータベースとの統合化および高度化

2-1) 前年度に行った The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) との連携強化の相談に基づいて、PDB の Chemical Reference Data を積極的に活用し、CSD データベースとの統合化を図る。CSD との統合化プロジェクトは、wwPDB や CSD を作成している The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) と連携して進める。PDBj-mine に CSD ID による検索を実装すると共に、CSD と共通の 2 次元スケッチャーを導入して相互検索のバリアを下げる計画であったが、CCDC の執行部交代と担当者の退職により 2020 年度に繰り越して対応する。CSD の企業向けの窓口となっている化学情報協会とも連携して、日本の製薬企業からのリクエストを聞きながらデータベースの統合化を進める体制を整える。

2-2) PDB データを用いた 3D 構造同士の構造アラインメント・サービス (ASH: Alignment of Structural Homologs) の高度化

2019 年度は、(1) アラインメントからの機能部位推測機能の作成、(2) 機能部位の立体構造への反映機能の作成を行う。(1) の機能部位推測は、アラインメントから計算される各サイトの保存度/変異度に基づき行う。そのため、(1-1) メニューから保存度/変異度の計算手法の選択機能、taxonomic bias の除去手法の選択機能の導入、(1-2) 選択された手法に基づく計算機能、(1-3) 計算結果の可視化機能を導入する。2017 年度に、Valder & Thronton による保村度計算手法および Argos & Vingron による taxonomic bias の除去手法、またその可視化システムを既に構築しており、それをベースに開発する。(2) の立体構造表示機能は、PDBj で開発された分子グラフィクス MolMil を使って、(1) の計算結果を立体構造上に表示する機能である。そのため、(2-1) mmCIF format の座標データを読み込む機能、(2-2) (1) の計算結果に従って温度因子部分を保存度/変異度に変更する機能、(2-3) MolMil を起動し、立体構造を表示させる機能を導入する。MolMil は既にダウンロードしてあり、メニューから MolMil を起動する機能は 2017 年度に作成されているので、それをベースに作成していく。また、2018 年度に NBDC の山口敦子准教授の協力のもと SPARQL 検索機能を実装したが、検索できる linked open data のメニューを増やし機能をさらに充実させる。また、本システムは Java で開発しているが、2019 年より有償化されたため、Open JDK に切り替える予定であり、それに伴う動作確認も行う。

2-3) 各アミノ酸の蛋白質立体構造中における位置情報の自動アノテーションとその応用

蛋白質分子内コンタクトの情報は、すでに別のサービス(GIRAF)で内部的に利用しているプログラムを改変することにより、PDB アーカイブの mmCIF ファイルから抽出できる。そこで、このデータを単純なスキーマのテーブルで表現し、PDBj Mine2 の関係データベースに追加して、立体構造そのものから得られる情報と、その構造に関するメタデータが統合的に検索できるようにする計画であった。担当者の栄転により、実質的に開発が停止している状況なので、追加支援が頂けたなら検証レポートのセマンティック化実装を担当予定の新研究員に、本開発テーマを副テーマとして担当してもらい、開発を完了したいと考えている。

2-4) 統合化された NMR データベースおよび関連ツールの活用

NMR データベースの登録業務の自動化と簡略化を推進するため、wwPDB メンバーである米 Madison-Wisconsin 大学と共同で統合登録ツール(BMRBdep)の共同開発を継続し、第三年次中に運用開始する。引き続き NMR 構造座標、実験データとの整合性に関する評価ツールを wwPDB との協力を通じて開発し、BMRB データベースの検証ファイルを完成させ、XML ファイルで公開し、RDF 化を進める。BMRB データベースを活用した自動解析支援ツールを完成させ、企業研究者からのバッチ登録へ対応できるようパッケージ化を進める。

3) データベースの利用促進・人材育成

3-1) 利用者・研究者コミュニティとの連携および講習会等の開催

- PDB の国内諮問委員会である大阪大学蛋白質研究所「蛋白質立体構造データベース専門部会」を定期的に開催し、開発方針やデータベースの方針変更の是非について諮問を頂く予定である。
- 利用者・研究者向けのセミナーや講習会については、他のデータベースとも協力し、第3年次も PDBj 講習会や学会年会中あるいは前後での利用講習会を実施する。
- これまでも参加してきたサイエンス・アゴラの代わりに地元の青少年のための科学の祭典(サイエンスフェスタ)大阪大会など、一般社会人向けの生命科学におけるデータサイエンスの振興も積極的に実施する。

3-2) アノテータの育成・国際協力

- OneDep 登録システムの開発に PDBj から人材を提供し、世界で同一の品質管理によるデータ登録に貢献すると共に、継続して国際連携によるアノテータ教育を進める。具体的には、TV 会議による講習会と、米国 RCSB-PDB あるいは欧州 EBI-PDBe での合同講習会へ参加するとともに、日本でも合同講習会の開催を検討する。中国、韓国出身のアノテータが揃ったので、今後も中国語と韓国語の PDBj ホームページの多言語化を積極的に進める。

(2)進捗状況

1)国際組織 wwPDB メンバーとしての蛋白質構造(PDB)アーカイブの構築・データ検証・公開

本年度も引き続き、wwPDB の欧米のメンバーと協力して、厳しい品質管理を行いつつ増加する一方の立体構造情報と NMR 実験情報のキュレーションをおこなった。第3年次も、wwPDB で分担しているアジア・中東地域からの全データを 100%処理し、各エントリーの論文発表に合わせて遅滞なく全世界に公開することができた。具体的には、平成31年(令和元年)度中に PDB は 11,650 件増加し、そのうち 3359 件を PDBj が登録処理した。BMRB は全体で 826 件増加し、そのうち 107 件を PDBj から新規登録した。

PDB 全データの品質管理のための検証レポートのセマンティック化を進めた。特に、検証レポートの構築法がほぼ確立している X 線結晶構造解析のデータについては全ての登録を PDBx/mmCIF により行うことを利用者に広報し、2019年7月より完全に PDBx/mmCIF への移行を完了した(1,2)。これによりデータ登録・検証の各ステップの省力化が進行した。検証レポートの RDF 化も、他の wwPDB メンバーと dictionary の整合

を確認し、PDBj-Mine へも実装して、週次更新に合わせて RDF の更新を行うシステムの構築を行った。

本年度は、EM および NMR により解析された構造データの品質を検証する手法を wwPDB の欧米メンバーと協力して確立することに重点を置いた。具体的には、2020 年 1 月 23-24 日のスケジュールで EMBL-EBI において Single particle EM data-management workshop を開催し、EM コミュニティーからの意見を収集し EM の検証レポートの高度化を進めた。NMR については、データ検証システムを組み込んだ新しいデータ登録ツール(BMRBdep)の開発を進めた。平成 31 年度は PDBj がホストとなり wwPDB 運営諮問会議を大阪大学蛋白質研究所で開催し、引き続き OneDep システムの高度化を進め、新たに BMRBdep を導入し登録システムの更なる効率化を進めることを再確認した(図 1)(3)。

全世界の蛋白質構造データ処理のうち、PDBj で地域分担しているアジア・中東地域では、中国からの登録数が増え続けており、2015 年に日本からの登録数を上回った。その後も中国からの登録は増え続けているため、データ生産量に比例してその国で責任をもってデータ処理を行うという方針の下、wwPDB の枠組みで中国に PDB の拠点を受け入れる準備を進めた。wwPDB と相談のうえ進められた PDB China の代表に国立蛋白質科学研究所上海の許文青(Wenqing Xu)教授が選任され、大阪大学で開催した wwPDB 運営諮問会議にもオブザーバー参加していただいた。地理的に近い PDBj が主となって PDB China の立ち上げに協力することを決定した。

2) 他のデータベースとの統合化および高度化

2-1) 前年度に行った The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)との連携強化の相談に基づいて、PDB の Chemical Reference Data を積極的に活用し、CSD データベースとの統合化を図った。CSD との統合化プロジェクトは The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)と連携して進め、PDBj-mine に CSD ID による検索を実装した。さらに CSD と共通の 2 次元スケッチャーを導入して相互検索のバリアを下げる計画であったが、CCDC の執行部交代と CCDC の担当者(Amy Sarjeant)の退職により、年度内に共通の 2 次元スケッチャーの導入はできなかった。引き続き CCDC と連携して、日本の製薬企業などからのリクエストも聞きながらデータベースの統合化を進める。



図 1. 2019 年 wwPDB 運営諮問会議

2-2) 各アミノ酸の蛋白質立体構造中における位置情報の自動アノテーションとその応用

蛋白質分子内コンタクトの情報は、すでに別のサービス(GIRAF)で内部的に利用しているプログラムを改変することにより、PDB アーカイブの mmCIF ファイルから抽出できる。そこで、このデータを単純なスキーマのテーブルで表現し、PDBj Mine2 の関係データベースに追加して、立体構造そのものから得られる情報と、その構造に関するメタデータが統合的に検索できるようにした。現在は、分子表面への距離と、結合している化合物への距離を事前に計算し、追加のアノテーションとしてテーブル化している。今後、追加でアノテーションする物性情報を増やしていき、より利用しやすい機能に育てていく予定である。

2-3) 統合化された NMR データベースおよび関連ツールの活用

NMR データベースの登録業務の自動化と簡略化を推進するため、米国 BMRB と共同で統合登録ツール(BMRBdep)の共同開発を継続し PDBj-BMRB で稼働させた。NMR 構造座標、実験データとの整合性に関する評価ツールを wwPDB との協力を通じて開発し、BMRB データベースの検証ファイルを完成させ、XML ファイルで公開し、RDF 化を進めた。もっとも肝となっていた他種多様なデータ形式を NMR-STAR で統一し

でデータ登録できる様にした。BMRB データベースを活用した自動解析支援ツールを完成させ(NMR Tool Box)最新版を公開した。

3) データベースの利用促進・人材育成

3-1) 利用者・研究者コミュニティとの連携および講習会等の開催

PDB の国内諮問委員会である大阪大学蛋白質研究所「蛋白質立体構造データベース専門部会」を2020年2月28日にZoomを用いてオンラインで開催し、今年から韓国、台湾のユーザー代表にも出席していただき要望や意見交換を行った。特に、PDB China の始動準備にPDBjが積極的に協力することとなり、台湾のユーザー代表には、事前にコミュニティーで登録・利用の意向調査をして頂けるようお願いした。長年勤めていただいた井上委員(阪大薬)、由良委員(お茶大)、上村委員(帝人ファーマ)に交代をお願いし、新しく電子顕微鏡の専門家に加わっていただくこととした(新委員表を以下に記す)。

氏名	所属機関	役職
栗栖源嗣	大阪大学蛋白質研究所	教授・委員長
藤原敏道	大阪大学蛋白質研究所	教授
水口賢司#	大阪大学蛋白質研究所	教授
光岡 薫*	大阪大学超高压電子顕微鏡センター	教授
神田大輔	九州大学生体防御医学研究所	教授
千田俊哉	高エネルギー加速研究機構物質構造科学研究所	教授
山本雅貴	理化学研究所	部長
李 奉振	ソウル国立大学薬学部 (韓国)	教授
蕭 傳鑑	中央研究院分子生物学研究所 (台湾)	副研究所長
齋藤純一*	協和キリン (株) 低分子医薬研究所	副研究所長

*:新任, #PDBj の高度化メンバーに加わったが, 医薬基盤研とのクロスアポイントが終了した時点で委員就任予定。

利用者・研究者向けのセミナーや講習会については、データ登録者の学術団体である日本結晶学会と日本蛋白質科学会の年会中に、ランチョンセミナーを開催して、データ登録への継続的な協力と、データ受付方針の変更点などを説明し理解していただいた。また、データ利用者の学術団体である日本生物物理学会と生命医薬情報学連合大会においてもランチョンセミナーを開催して、利用者の声をアンケートの形で集めた。今年度は、初めて韓国の国内学会においてランチョンセミナーを行う機会をいただき、韓国から日本へのデータ登録に引き続き協力を依頼するとともに、PDBjの韓国語ページの利用促進を図った。2020年1月29日(水)、30日(木)には、以下の様な講習会を開催し、CSDとPDBの積極的な統合利用を図った。

2019年度 PDBj 主催講習会概要

会場 大阪大学 蛋白質研究所 講堂

2020年1月29日(水)

13:00-13:15

「趣旨説明 & Intro」 栗栖 源嗣 (大阪大学 蛋白質研究所)

13:15-14:00

「CSD-System:ConQuest, Mercury」 岡村 高明 (大阪大学・理) / 藤内 謙光 (大阪大学・工)

14:00-14:15

「Deposit Structures と enCIFer」 藤内 謙光 (大阪大学・工) / 岡村 高明 (大阪大学・理)

14:15-14:30

休憩

14:30-15:00

「Mogul & IsoStar (+ FIM/SuperStar)」 桜井 尋海 (化学情報協会)

15:00-15:45

「CSD-Materials: DASH, Mercury-Materials」 植草 秀裕 (東工大)

15:45-16:15

休憩

16:15-17:00

「CSD-Discovery」 ケンブリッジ結晶学データセンター(CCDC)スタッフ(※TV 会議による)

2020 年 1 月 30 日(木)

10:30-10:35

「本講習会の趣旨について」 栗栖源嗣 (大阪大学 蛋白質研究所)

10:35 - 12:00

「HOMCOS による PDB 内の低分子化合物の検索とモデリング」 川端 猛 (大阪大学 蛋白質研究所)
[講義資料]

12:00 - 13:00

休憩 (昼食)

13:00-14:00

「大阪大学創薬サイエンス研究支援拠点における BINDS 支援」 布村 一人 (大阪大学・薬・附属
化合物ライブラリー・スクリーニングセンター)

藤井 晋太郎 (大阪大学・薬・附属創薬センター 構造展開ユニット)

14:05 - 15:05

「インシリコスクリーニングによる医薬品候補化合物の探索」

広川 貴次 (産総研・創薬分子プロファイリング研究センター)

15:25 - 16:25

「Application of structural alignment in immunology」

John Rozewicki, Daron Standley (大阪大学 微生物研究所)

16:30 - 17:30

「Drug Target Excavator (DTX)による創薬ターゲット探索」 土方敦司・白井 剛(長浜バイオ大
学)

2019 年 8 月 18 日(日)に開催された第29回青少年のための科学の祭典(サイエンスフェスタ)大阪大会
と、2019 年 11 月 30 日(土)に「ららぽーと EXPOCITY」で開催された大阪大学共創 DAY@EXPOCITY に参
加し、一般人向けの生命科学におけるデータサイエンスの振興のため、積極的な啓蒙活動を行った(図3)。

2019 年 12 月 17~20 日にシンガポール・シンガポール国立大学で開催されたアジア結晶学会において、

昨年度に続き PDBj ポスター賞をスポンサーして、アジア地区からのベストポスターを PDBj が懸賞した(受賞者は, Ruchika BHUJBALRAO, Indian Institute of Technology Bombay, India; 図 4)。今後も毎年 PDBj ポスター賞の表彰をおこなっていく予定である。

新型コロナウイルス(SARS-CoV-2)は中国で発生したこともあって、1月26日に中国の研究者から最初の関連構造情報が PDBj に登録された。緊急でオンライン会議を行い、wwPDB は新型コロナウイルスの構造情報がデータベースに登録された場合に、個別に登録者と連絡をとり論文発表を待たずに即時公開することを強く勧めることとした。SARS-CoV-2 が既知のコロナウイルスとよく似た遺伝子を持っていることに併せて、国際的な分類基準が決定される前に構造データが登録されたこともあり、当初は SARS-CoV-2 の情報だけを抽出することが難しい状況であった。PDBj では、データ検証と編集・登録作業の過程で正確な情報を収集し、SARS-CoV-2 と類縁ウイルスと厳密に区別して SARS-CoV-2 の構造情報データのみを正確に集約して、日英中韓の各言語で特集ページを公開している(<https://pdbj.org/featured/covid-19/>)。

3-2) アノテータの育成・国際協力

OneDep 登録システムの開発に加わり、世界で同一の品質管理によるデータ登録を実施した。具体的には、PDBj-BMRB があるため第3年次は NMR の登録システムの開発を担当した。また、糖鎖科学の木下チームの野口研究所と連携して PDB エントリーの糖鎖分子の表現改良プロジェクトに PDBj からの提案を盛り込んだ。継続して国際連携による教育を進めるために、隔週金曜日におこなっている TV 会議により情報共有と人材育成につとめた。wwPDB の欧米拠点のアノテーターを PDBj に招いて、OneDep 会議を計画していたが新型コロナウイルス感染症拡大を受けて 2020 年度に延期することとした(今現在は10月を予定)。中国、韓国出身のアノテータが揃ったため、中国語と韓国語の PDBj ホームページの多言語化に積極的に取り組んだ。具体的には、新型コロナウイルス特集ページなど、注目度の高いページから他言語化を進めている。



図 4. アジア結晶学会での PDBj ポスター賞表彰風景 (左) PDBj のスポンサーロゴ (右)

§4. 成果発表等

(1) 原著論文発表

① 論文数概要

種別	国内外	件数
発行済論文	国内 (和文)	2 件
	国際 (欧文)	2 件
未発行論文 (accepted, in press 等)	国内 (和文)	0 件
	国際 (欧文)	0 件

② 論文詳細情報

1. Adams PD, Afonine PV, Baskaran K, Berman HM, Berrisford J, Bricogne G, Brown DG, Burley SK, Chen M, Feng Z, Flensburg C, Gutmanas A, Hoch JC, Ikegawa Y, Kengaku Y, Krissinel E, Kurisu G, Liang Y, Liebschner D, Mak L, Markley JL, Moriarty NW, Murshudov GN, Noble M, Peisach E, Persikova I, Poon BK, Sobolev OV, Ulrich EL, Velankar S, Vonrhein C, Westbrook J, Wojdyr M, Yokochi M, Young JY, "Announcing mandatory submission of PDBx/mmCIF format files for crystallographic depositions to the Protein Data Bank (PDB).", *Acta crystallographica. Section D, Structural biology*, vol. 75, Pt 4, pp.451-454, 2019 (DOI: 10.1107/S2059798319004522, PMID:30988261).
2. Gert-Jan Bekker, 工藤高裕, 池川恭代, 山下鈴子, 栗栖源嗣, "Protein Data Bank で利用する PDBx/mmCIF 形式について", *日本結晶学会誌*, vol. 61, No. 3, pp. 159-160. (DOI: 10.5940/jcrsj.61.159).



図 3. サイエンスフェスタ大阪大会 2019 の PDBj コーナー

3. Romero PR, Kobayashi N, Wendell JR, Baskaran K, Iwata T, Yokochi M, Maziuk D, Yao H, Fujiwara T, Kurisu G, Ulrich EL, Hoch JC, Markley JL, "BioMagResBank (BMRB) as a Resource for Structural Biology", *Methods Mol Biol*, vol. 2112, pp. 187-217, 2020. (DOI: 10.1007/978-1-0716-0270-6_14).
4. 栗栖源嗣, "生体高分子の構造データ検索と解析なら PDBj", *実験医学*, vol. 38, No. 5, pp. 889-896, 2020. (DOI: なし).

(2) その他の著作物(総説、書籍など)

1. 著者名、発表論文タイトル、掲載誌(誌名、巻、号、発表年)

(3) 国際学会および国内学会発表

① 概要

種別	国内外	件数
招待講演	国内	1件
	国際	1件
口頭発表	国内	2件
	国際	0件
ポスター発表	国内	2件
	国際	1件

② 招待講演

〈国内〉

1. 栗栖源嗣, Protein Data Bank における低分子/薬剤化合物の表示と検証レポート, 第 411 回 CBI 学会講演会(兼第 21 回 FMO 研究会), 東京工業大学キャンパスイノベーションセンター(東京), 2019 年 12 月 11 日

〈国際〉

1. Genji Kurisu, Protein Data Bank Japan (PDBj): A member of the worldwide Protein Data Bank, Bioinformatics Institute, Singapore, 2019 年 12 月 18 日

③ 口頭講演

〈国内〉

1. 栗栖源嗣, Protein Data Bank とデータの品質管理, CBI 学会, タワーホール船堀(東京), 2019 年 10 月 23 日
2. 工藤高裕, Protein Data Bank Japan (PDBj), 第 42 回 日本分子生物学会年会フォーラム, 福岡国際会議場(福岡県福岡市), 2019 年 12 月 3 日

〈国際〉

1. 発表者、タイトル、学会名、場所、月日

④ ポスター発表

〈国内〉

1. 工藤高裕, Gert-Jan Bekker, 山下鈴子, 鈴木博文, 横地政志, 由良敬, 栗栖源嗣, 蛋白質構造データバンク(PDBj)の高度化と統合的運用, トーゴの日シンポジウム、日本未来館(東京都江東区)、2019 年 10 月 5 日
2. 岩田武史, 横地政志, 見学有美子, 張羽澄, 池川恭代, 佐藤純子, 金宙妍, 中川敦史, 宮ノ入洋平, 児嶋長次郎, 藤原敏道, 栗栖源嗣, PDB 検証レポートの高度化と NMR 統合ファイル検証機能の開発, トーゴの日シンポジウム、日本未来館(東京都江東区)、2019 年 10 月 5 日

〈国際〉

1. Toh, H., Yamaguchi, A. Alignment Viewer with a Function to Collect Annotation of Proteins from LOD. InCob 2019 (2019) Jakarta. 9 月 11 日

(4) 知的財産権の出願

該当なし

(5)受賞・報道等

① 受賞

該当なし

② メディア報道

1. 日本経済新聞記事、新型コロナの創薬標的たんぱく質を紹介 阪大がサイト、2020年3月10日 21:27 (電子版)
2. 朝日新聞記事、新型コロナの構造データ公開、大阪大、論文の発表前に、2020年3月12日 17:00(電子版)
3. 日刊工業新聞記事、新型コロナ 創薬支援、2020年3月12日
4. NHK テレビニュース(関西地方)、ウイルスのたんぱく質構造データベース化、2020年3月17日
5. 毎日放送情報番組「ミント！」(関西地方)、『タンパク質』のデータバンクが“研究成果”を先駆け公開...新型コロナ治療薬開発には『タンパク質』がカギ！、2020年3月17日
6. 日経産業新聞記事、新型コロナ、創薬標的候補公開、2020年3月18日

③ その他の成果発表

1. 大阪大学プレスリリース:-大阪大学から蛋白質構造データベース(PDB)を正確に発信中- 新型コロナウィルスの蛋白質構造情報を集約して3/11から公開、2020年3月10日
http://www.protein.osaka-u.ac.jp/wp-content/uploads/2020/03/press-release20200310_pdbj.pdf

§5. 研究開発期間中に主催した活動(ワークショップ等)

1. 進捗ミーティング

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2019年4月1日～2020年3月31日 (毎週開催)	PDBj開発者会議 (非公開)	大阪大学蛋白質研究所 2階中会議室	10人	研究進捗報告のためのミーティング
2019年4月1日～2020年3月31日 (隔週開催)	PDBj Primary Ann otator's meeting (非公開)	大阪大学蛋白質研究所 2階中会議室	14人	同上
2019年4月1日～2020年3月31日 (毎週開催)	BMRB テクニカルス タッフミーティング	大阪大学蛋白質研究所 4階藤原研	5人	同上
2019年4月1日～2020年3月31日 (不定期)	wwPDB PI ミーティン グ	Zoom	4人	wwPDB を構成するデータベースの各 PI による方針決定会議
2019年4月1日～2020年3月31日 (毎週)	OneDep リーダー会 議	Zoom	10人	wwPDBを構成するデータベースのリー ドアナテータが出席して、OneDepによる 処理の方針を相談する会議
2019年4月1日～2020年3月31日 (毎週)	OneDep 開発者会議	Zoom	8人	OneDep の開発者が開発状況をシェア し、開発項目を整理する会議

2. 主催したワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ活動等

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2019年5月3日	第60回 大阪大学いちょう祭 蛋白研イベント	大阪大学蛋白質研究所 (大阪府吹田市)	200人	PDBj および蛋白質研究所の活動紹介 (蛋白質研究所広報室との共同出展)
2019年6月26日	第19回日本蛋白質科学 会年会 PDBjランチョン セミナー	神戸国際会 議場(兵庫県神戸市)	100人	学会参加者に向けたPDBjとサービスの 紹介
2019年8月18日	青少年の科学の祭典(サイ エンスフェスタ)大阪 大会	ハービスホ ール(大阪市)	350人	PDBj および蛋白質研究所の活動紹介 (蛋白質研究所広報室との共同出展)
2019年9月10日	第8回生命医薬情報学 連合大会 PDBjランチョ ンセミナー	東京工業大 学くらまえホ ール(東京)	80人	学会参加者に向けたPDBjとサービスの 紹介

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
		都目黒区)		
2019年9月24日	第57回日本生物物理学会年会 PDBjランチョンセミナー	シーガイア・コンベンションセンター (宮崎県宮崎市)	100人	学会参加者に向けたPDBjとサービスの紹介
2019年10月5日	トーゴの日シンポジウム2019 ワークショップ	日本科学未来館(東京都江東区)	120人	生命科学分野のデータ統合にまつわる問題とともに考え、議論を深めるためのシンポジウム
2019年10月24,25日	日本コンピュータ化学会2019秋季年会	JMS アステールプラザ (広島県広島市)	200人	日本コンピュータ化学会2019秋季年会参加者ならびに学生を含む一般対象のブース出展
2019年10月26日	日本・アジア青少年さくらサイエンス交流事業	関西学院大学理工学部	17人	インドネシアの学部学生に対して日本の科学技術について講義を行う。藤が代表となって開催し、その中でタンパク質の構造を使った情報解析をPDBjのサイトを使って紹介した。
2019年10月26日	日本コンピュータ化学会2019秋季年会	JMS アステールプラザ (広島県広島市)	80人	一般向けの「タンパク質の化学 - 計算機でみるはたらく薬」と題した講演
2019年11月19日	日本結晶学会 R1 年度年会 PDBjランチョンセミナー	金沢市文化ホール(石川県金沢市)	80人	学会参加者に向けたPDBjとサービスの紹介
2019年11月30日	大阪大学共創 DAY@EXPOCITY	ららぽーとEXPOCITY (大阪府吹田市)	300人	一般対象のブース展示。PDBjの活動と蛋白質研究所の紹介。
2019年12月3-6日	第42回日本分子生物学会年会	マリンメッセ福岡(福岡県福岡市)	100人	学生含む研究者向けにブース展示。PDBj各サービスの紹介。
2019年12月17-20日	第16回アジア結晶学会	シンガポール国立大学(シンガポール)	200人	ポスターセッションにおけるPDBj賞のスポンサー
2020年1月10日	2020年韓国生体分子科学連合学会学術大会(FKSBS)	光州科学技術院(大韓民国光州広域市)	200人	学会参加者に向けたPDBjとサービスの紹介

以上

別紙1 既公開のデータベース・ウェブツール等

No.	正式名称	別称・略称	概要	URL	公開日	状態	分類	関連論文
1	Protein Data Bank	PDB Archive	生体高分子の立体構造データベース， wwPDBと協力して構築，RDFを開発，公開	https://pdbj.org	2002/4/1	維持・発展	データベース等	1,2
2	Biological Magnetic Resonance Data Bank	BMRB	生体高分子の化学シフト，緩和データ， 相互作用データ等のNMRの実験データの データベース	https://bmrdep.pdbj.org	2011/4/1	維持・発展	データベース等	3
3	eF-site	同左	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）を機能部位情報 と結合したデータベース．維持・更新の み	https://pdbj.org/eF-site/	2002/3/1	維持・発展	データベース等	
4	ProMode elastic	同左	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．維持・更新の み	https://pdbj.org/promode-elastic/	2003/4/1	維持・発展	データベース等	
5	MoM	MoM	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PDBから選び，機能 と構造に関して解説．維持・更新のみ．	https://pdbj.org/mom/	2008/4/1	維持・発展	データベース等	
6	EM Navigator	同左	生体分子や生体組織の3次元電子顕微鏡 データ(EMDB)閲覧用web site	https://pdbj.org/emnavi/	2007/5/1	維持・発展	ツール等	
7	ASH	同左	PDBデータを基にした構造アラインメン ト	https://sysimm.ifreec.osaka-u.ac.jp/ash_servic		維持・発展	ツール等	
8	Molmil	同左	インターネット上のweb環境で稼働する JavaScriptによる分子構造ビューア	https://pdbj.org/help/molmil	2014/9/1	維持・発展	ツール等	