

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)

研究開発中間報告書

「蛋白質構造データバンクの データ駆動型研究基盤への拡張」

栗栖 源嗣

大阪大学 蛋白質研究所 教授



©2023 栗栖 源嗣(大阪大学) Licensed under CC BY 4.0

目次

§1. 研究開発実施内容の概要	4
§2. 研究開発実施体制	5
1. 各グループの担当項目	5
(1) 栗栖グループ（蛋白質研究所）	5
(2) 栗栖グループ（蛋白質研究奨励会）	5
2. 有識者会議等.....	6
(1) 会議概要	6
(2) 委員一覧	6
(3) 開催歴	6
§3. 研究開発の実施計画、実施内容及び成果.....	8
1. 研究開発対象のデータベース・ツール.....	8
(1) データベース	8
(2) ツール等	8
2. 中間評価時までの達成目標及び達成状況.....	9
(1) 当初計画における中間評価時までの達成目標と達成状況.....	9
(2) 期間中に追加・削除・変更した実施計画及び達成目標	10
3. 実施内容	11
(1) 中間評価時までに実施した研究開発の内容.....	11
(2) 若手研究者の多様なキャリアパスの支援	15
§4. 主要なデータベースの利活用状況.....	16
1. アクセス数	16
(1) 実績.....	16
(2) 分析.....	16
2. データベースを利用して得られた研究成果・産業応用の例.....	16
3. その他.....	17
§5. 今後の研究実施計画	18
§6. 自己評価.....	19
§7. 外部発表等	20
1. 原著論文発表.....	20
(1) 論文数概要.....	20
(2) 論文詳細情報	20

2. その他の著作物（総説、書籍など）	21
3. 国際学会発表及び主要な国内学会発表.....	22
(1) 概要.....	22
(2) 招待講演	22
(3) 口頭講演	22
(4) ポスター発表	23
4. 知財出願.....	23
(1) 出願件数	23
(2) 一覧.....	23
5. 受賞・報道等.....	24
(1) 受賞.....	24
(2) メディア報道	24
(3) その他.....	24
§8. 研究開発期間中の活動.....	25
1. 進捗ミーティング	25
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	26

§1. 研究開発実施内容の概要

蛋白質や核酸、糖鎖など生体高分子の立体構造情報に基づいて、高次の生命機能まで合理的に説明しようとする構造生物学が、医学、薬学、農学等と強く結びつき、創薬などのバイオ産業への応用によりイノベーションに大きく貢献している。本研究開発課題は、構造生物学の基盤データベースである PDB(蛋白質立体構造データバンク)と BMRB(NMR 実験情報データバンク)を、日米欧の国際パートナーシップである worldwide Protein Data Bank (wwPDB)の枠組みの下で安定的に構築・公開することを目的の1つとしている。また、データ品質管理のための検証レポートを、AI による構造予測を併用したデータ登録にも拡張し拡充を図るとともに、セマンティック化されたすべてのコンテンツを生かした PDB 統合利用ポータルを構築して、データ科学研究に資する機械学習用選抜データセットを公開する計画である。さらに、蛋白質の種々の機能情報が迅速に利用できるツール群を開発し、データベースの利用を促進するため、国内外の関連機関や研究者コミュニティとの幅広い連携を計画した。

2022 年度からの 2 年半の期間中に次の 3 つの大きな開発項目を実施した。まず、i) 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・公開を行った。日米欧の国際協力により、進展著しい AI による予測構造を併用したデータ登録にも対応しながら、PDB と BMRB を継続的に構築・検証・公開した。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。次に、ii) 他のデータベースとの統合化および高度化についても、PDB および BMRB の利用者・登録者と直接対話しながら仕様を策定し、 β バージョンを完成させた。2024 年のトーゴーの日で内容を発表し、フィードバックを反映させた後に 2024 年 10 月中の一般公開を予定している。最後に、iii) データベースの安定運用と利用促進、国際協力については、分担機関である(一財)蛋白質研究奨励会にバックアップサーバーを整備し、大阪大学蛋白質研究所のメインサーバーと DNS を切り替えることにより 365 日安定運用できる体制を構築した。2024 年 10 月 1 日以降は SINET の正式加盟機関として(一財)蛋白質研究奨励会からも 10Gbps でのバックアップサービスを開始する予定である。また、PDB China の始動を wwPDB の枠組みの中で主導し、2022 年夏以降は上海で勤務する PDB China のアノテーター4名と共に、欧米に比べて著しい登録数の増加が続くアジア・中東地区からのエントリーに完全に対応した。

§2. 研究開発実施体制

1. 各グループの担当項目

(1) 栗栖グループ(蛋白質研究所)

i) 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

世界レベルで急増するデータのうち、我が国を中心としたアジア圏からの登録を漏れなく編集する体制を構築し、生命科学に資する基盤データベースとして PDB と BMRB を発展させた。特に検証レポートのさらなる拡充と、OneDep 登録システムの高度化を図り、利用者が統合的に安心して利活用できる仕組みを構築した。

ii) 他のデータベースとの統合化および高度化

これまでの PDB/RDF 構築実績の上に立ち、PDB の統合利用ポータルを構築を進める。併せて、化合物情報に特化した機械学習用データセットを公開し、蛋白質立体構造中におけるアミノ酸レベルの位置情報、特に分子ポケット情報の自動アノテーションを進める。さらに、NMR 制限情報の標準化と NMR 構造検証結果の可視化を進めた。

iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力

世界中で利用される情報基盤として、365 日 24 時間安定に稼働する基幹データベースとして運用した。企業と PDB および wwPDB との連携を図った。これまでと同様に利用者・研究者向けのセミナーや講習会を実施し、一層の利用の促進を図った。PDB および BMRB のデータベース構築・検証を実施する新たなアノテータを育成し、OneDep 登録システムを活用した国際連携による教育を進めた。

(2) 栗栖グループ(蛋白質研究奨励会)

i) 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

世界レベルで急増するデータのうち、我が国を中心としたアジア圏からの登録を漏れなく編集する体制を構築し、生命科学に資するデータベースとして PDB と BMRB を発展させた。

iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力

世界中で利用される情報基盤として、365 日 24 時間安定に稼働する基幹データベースとして運用した。

2. 有識者会議等

(1) 会議概要

名称	蛋白質研究所「共同利用・共同研究」委員会・蛋白質立体構造データベース専門部会
目的	毎年の活動評価や将来の開発内容について、国内およびアジアの関連研究者・利用者の代表から意見や助言を受けるために設置された有識者会議
委員数	9人

(2) 委員一覧

委員氏名	所属・役職
栗栖 源嗣	大阪大学蛋白質研究所・教授
古賀 信康	大阪大学蛋白質研究所・教授 (R6 年度より)
藤原 敏道	大阪大学蛋白質研究所・教授 (R4 年度まで)
宮ノ入 洋平	大阪大学蛋白質研究所・准教授
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 (R5 年度まで)
千田 俊哉	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所・教授 (wwPDB AC メンバー)
山本 雅貴	理化学研究所放射光科学総合研究センター・部門長
曾我部 智	Axcelead Drug Discovery Partners 株式会社・主任研究員 (R5 年度より)
齋藤 純一	協和キリン株式会社・低分子医薬研究所副所長 (R4年度まで)
Kyeong Kyu Kim	韓国, 成均館大学校医科大学・教授 (R5 年度から) (wwPDB AC メンバー)
李 奉振	韓国, ソウル大学校薬学大学・教授 (R4年度まで)
Nei-Li Chan	台湾, 国立台湾大学医学院・教授 (R6年度から)
蕭 傳鐙	台湾, 中央研究院分子生物学研究所・副所長 (R5 年度まで)

(3) 開催歴

年月日	場所	主な議題・指摘事項等
2022 年 10 月 14 日	RCSB PDB を主催者として Zoom オンライン会議	【主な議題】 ・Funding ・Governance ・Outreach ・OneDep

年月日	場所	主な議題・指摘事項等
		•PDB Archive •EMDB Archive •BMRB Archive •Joint Project 【指摘事項】 • Funding situation of BMRB is concerning. •Collaboration between partners is an asset when seeking funding. •The wwPDB AC is pleased to note that PDB China has been admitted as an Associate Member.
2023 年 3 月 6 日	大阪大学を主催者として Zoom オンライン会議	【主な議題】 •2022 年度蛋白質立体構造データベースの運営状況について •2023 年度蛋白質立体構造データベースの運営計画について 【指摘事項】 •持続的な運用のため人材および予算についてのサポート体制の充実が指摘された
2023 年 10 月 27 日	EBI Genome Campus, Hinxton, U.K.と Zoom オ ンラインの Hybrid 開催	【主な議題】 •Possible threats to wwPDB OA Model •Future of OneDep Development •BMRB Funding Update •Future of Data Archiving 【指摘事項】 •The wwPDB AC recommended caution in tackling issues of control of OA, at this time. •The wwPDB AC support the planned development of OneDep. • The wwPDB AC agree that diversifying BMRB funding sources is sensible and recommend exploring the other possibilities.
2024 年 3 月 13 日	大阪大学を主催者として Zoom オンライン会議	【主な議題】 •2023 年度蛋白質立体構造データベースの運営状況について •2024 年度蛋白質立体構造データベースの運営計画について 【指摘事項】 •PDB China 本格始動後のアジア地区における蛋白質構造データ管理の責任体制を明確にすることが指摘された

§3. 研究開発の実施計画、実施内容及び成果

1. 研究開発対象のデータベース・ツール

(1) データベース

① 主要なもの

正式名称	略称	概要
PDB Archive	PDB	生体高分子の立体構造データベース。自身もメンバーである国際連携組織 worldwide Protein Data Bank (wwPDB) と協力して構築している。RDF を開発・公開済み。

② 上記以外のもの

正式名称	略称	概要
BMRB Archive	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バンク。米国 BMRB と協力して構築。RDF を開発・公開済み。PDB Archive と連携して開発。
eF-site	eF-site	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。
ProMode elastic	ProMod	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。
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蛋白質構造データバンク (PDB) から選び、機能と構造に関して解説。維持・更新のみ。

(2) ツール等

正式名称	略称	概要
EM Navigator	EM Navi	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
DASH	DASH	PDB データを基にした構造アラインメントツール
MolMil2	MolMil	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
OneDep	OneDep	アジア地区からのデータ寄託を受け付ける登録/編集/検証システム。日米欧で共同開発。

※データベース、ツールの詳細は別紙参照。

2. 中間評価時までの達成目標及び達成状況

(1) 当初計画における中間評価時までの達成目標と達成状況

i)「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」	
達成目標	達成状況
・本研究開発では、wwPDB の欧米のメンバーと協力し、PDBj および BMRBj が厳しい品質管理を行いつつ、4-1 で上述の通り、増加する一方の構造情報とNMR 実験情報に対応する。具体的には、OneDep システムの自動化・高度化を進めて、アノテーターの数を増やすことなく、データ登録に関わる時間を低減させることで、継続的に世界標準のデータベースを構築し公開する。2024 年9月の時点で、wwPDB で割り当てられた地域分担のすべてのエントリーを処理し切ることを指標とする。 ・PDB 全データの品質管理のために、今後急増することが想定される AlphFold 2 や RosettaFold を併用した構造登録に対応する検証レポートを拡充し、利用者が安心して利活用できる仕組みを構築する。検証タスクフォース(Validation Task Force:VTF)を組織し、あらたな検証レポート作成に道筋がついていることを2024 年9月の時点の達成目標とする。	・2022 年に世界中で wwPDB に寄託された構造データは合計 16,344 件であった。そのうち PDBj に登録されたものは 4,749 件で世界中の 29%に相当する。2023 年は世界中で 17,064 件であり、そのうち PDBj への登録は31.5%に相当する 5,376 件であった。2024 年9月の時点で世界中で 12,787 件の登録があり、そのうち 32.1%に相当する 4,100 件が PDBj に登録された。2024 年9月の時点で割り当てられた地域分担のすべてのエントリーを PDB China と協力して漏れなく登録している。 ・PDB データの品質管理のために、AlphFold2や RosettaFold を併用して構造解析したエントリーを登録する際に、予測構造をどう活用したのか情報を収集する仕組みを実装した。検証タスクフォース(Validation Task Force:VTF)を組織し、予測構造を併用した解析の検証レポート作成の検討を開始して、まずマスターフォーマットである PDBx/mmCIF の拡張版である IHMCIF を定義し論文発表した。
ii)「他のデータベースとの統合化および高度化」	
達成目標	達成状況
・PDB 統合利用ポータルについては、PDB/RDF アーカイブの拡充を進め、統合利用に向けたプログラム類、データベースの検討選定が完了し、AI 開発の動向や生物学・化学の視点からの検索等に関する需要の調査と予備解析を進め、2024 年9月までに実装に向けた準備を完了する。 ・化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開については、選抜基準の策定と必要とする検証パラメータの検討を終了し、選抜データセットの自動更新と公開に向けた準備を完了する。	・PDB 統合利用ポータルの構築にむけて2022 年度中に利用動向の調査を丁寧に実施し、統合利用ポータルで提供するデータベースとして東北大学で整備されている jMorp を選定した。日本人のゲノムバリエーション情報を PDB もしくは AlphaFold 構造の上にマップし、生物学・化学の視点からの検索結果を表示する準備を完了した。 ・化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開について 2022 年度中に丁寧な利用動向調査を行った。その結果を基に、Chemie の検索結果に PDBj 独自の選抜基

	準を策定して構造情報を選抜する検証パラメータの検討を終了した。
・NMR 制限情報の標準化と検証結果の可視化については、NMR 制限情報と原子座標を対応づけし直し、標準化されたデータファイルを作成して公開する	・NMR 制限情報の標準化については PDBj の NMR 部門である BMRBj が導入を主導してシステムを完成させた。NMR の検証結果の可視化については、追加支援で実施した BMRB のデータ処理システムの自動化を含めたアップグレードにエフォートを割かれたために、今年度以降に計画を後ろ倒しして実施中である。
・蛋白質立体構造中におけるアミノ酸レベルの位置情報、分子ポケット情報の自動アノテーションについては、リソースの都合上、NMR 制限情報の標準化と検証結果の可視化の目処がついた段階で、研究開発に取り組む。	・蛋白質立体構造中におけるアミノ酸レベルの位置情報、分子ポケット情報の自動アノテーションについては、人的リソースの都合上、現在進行中の NMR 検証結果の可視化の目処がついた段階で、研究開発に取り組む。
iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力	
達成目標	達成状況
・データベースの安定運用については、2024 年 9 月の時点では PDBj のメインサーバーおよび BMRBj のメインサーバー共に、365 日 24 時間安定稼働し、wwPDB で割り当てられた地域分担のすべてのエントリーを処理し切ることを指標とする。	・PDBj のメインサーバーおよび BMRBj のメインサーバーに不具合やメンテナンスが必要な場合に、(一財)蛋白質研究奨励会のバックアップサーバーと DNS を切り替えることで 365 日 24 時間サービスを提供した。wwPDB で割り当てられた地域分担のすべてのエントリーは、PDBj のサーバーで 100%登録された。
・利用者・研究者コミュニティとの連携については、PDBj 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、wwPDB Foundation の定期会議にも出席して、利用者と PDB との連携を継続する。	・利用者・研究者コミュニティとの連携については、PDBj 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、wwPDB Foundation の定期会議にも出席して、利用者と PDB との連携を継続した。
・国際協力については、新たな若手アノテータ候補者を非常勤として雇用し育成を図る。今後とも更新されていく OneDep 登録システムを活用した世界で同一の品質管理によるデータ登録を実施する必要がある、国際連携による教育を進める。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 と共同で開催する OneDep サミットへ参加し、スキルアップしていただく。	・30 代前半の新たな若手アノテータ 1 名を新規に雇用し Lead Annotator 会議および wwPDB サミットに参加させて国際協力下でのデータ管理を学ばせた。30 代若手の OneDep 登録システム管理者 1 名も新規に雇用して、PDB China の登録・アノテーションシステム管理を担当させることで国際連携による教育を進めている。

(2) 期間中に追加・削除・変更した実施計画及び達成目標

BMRB は PDB に紐づく NMR 実験情報のアーカイブであり、NMR による構造解析情報を PDB に登録する際には必ずセットで登録する必要がある。wwPDB では PDB、EMDB と同様にコア・アーカイブと位置付けており、日米の地域拠点で協力してアーカイブを整備して

きた(欧州は NMR の実験データ処理には貢献していない)。2023 年度に、米国にて BMRB のグラント更新がスムーズに行われない案件が発生した。半年の間、繋ぎファンドと大学予算による暫定的な運用がなされるという事態が発生し、PDBj の NMR 部門である BMRBj の存在意義が大きくクローズアップされた。そこで、NBDC の追加支援により BMRBj でのデータ処理システムの高度化・アップグレードを 2023 年度に実施した。開発したシステムはパフォーマンスが高く、米国コネチカット大の BMRB にも移植することとなった。今現在、日米で PDBj で開発した処理システムを用いて BMRB のデータ処理が行われている。PDBj の NMR 部門である BMRBj の存在意義を大きく発展させ、日本の世界でのプレゼンスを向上させることができた。

3. 実施内容

(1) 中間評価時までに実施した研究開発の内容

i) 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

i-1) 国際基準での登録・編集・検証・公開

2022 年度から現在まで、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構造情報と NMR 実験情報のキュレーションをおこなった(見学、張、佐藤、金、丹羽、岩田)。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ている(Bekker、工藤、山下、岩田)。具体的には、2023 年度に PDB 全体では 21,786 件エントリーが増加し、そのうち PDBj は 6,738 件を処理した。PDBj が処理したエントリー数のうち、1,555 件は PDB China 用のサーバーにデータを転送し PDBj の指導の下で PDB China のアノデータが登録処理した件数となる。BMRB は全体で 775 件増加し、そのうち 102 件を PDBj から新規登録した。

予測構造と低分解能の実験情報とを組み合わせた新しいタイプの構造解析に対応するため、ベイズ統計の手法を用いて予測構造自身を評価し、予測構造と実験構造が混合した場合に、構造データ全体をどう評価し活用していくのを検討するタスクフォースを組織した。そこでまず初期モデルに AlphaFold の構造を用いたのか完全に実験で決定したのかを厳密にする目的で、新しい PDBx/mmCIF カテゴリ `pdbx_initial_refinement_model` を導入して、結晶解析、電子顕微鏡、NMR 法の初期モデルに関する情報収集を改善した。これにより、実験的に得られた初期モデルと計算で得られたモデルが区別される。また、構造予測の割合が大きい構造モデルの場合には、PDBx/mmCIF の拡張版である IHMCIF を策定して、構造予測や他の実験手法に関わるメタデータのボキャブラリーを厳密に定義した²⁾。

2022 年 10 月に wwPDB 運営諮問会議を RCSB PDB 主催で Zoom において開催し、BMRB の運転資金の問題や PDB China の立ち上げについて議論が行われた(図 1 上)。

2023 年 10 月には英国 EBI とオンラインのハイブリッド形式で wwPDB 運営諮問会議が開催されて、OneDep と構造解析ソフトとの連携やウクライナ戦争に伴うロシアやベラルーシからのエントリーの受付や PDB のデータ登録およびダウンロード制限の可能性について議論がなされた(図1下)。

i-2) OneDep 登録システムの高度化

継続して 2 名の研究者が OneDep 登録システムの高度化に取り組んでいる。1 名は構造化学検証モジュール(MolProbity)を担当し(干)、1 名は NMR 解析全般を担当している(横地)。NMR の実験データは、様々なフォーマットが存在するが wwPDB では NEF および NMR-STAR フォーマットを標準としている。

OneDep 登録システムの高度化により PDB エントリーの NMR データを 1 つの NMR-STAR/NEF ファイルに統合して提供できるようにした(図 2)³⁾。wwPDB では、NMR データ(距離制限、化学シフト、場合によってはピークリスト)の NMR-STAR/NEF 形式での単一ファイルのアップロードを進めており、将来的には OneDep でのソフトウェア固有の形式でのアップロードを廃止する予定である。この改善により NMR 構造の 1 エントリーの処理にかかる時間を削減することが期待される。コロナ禍前に設置したクライオ電子顕微鏡の Validation Task Force (VTF)での議論をベースに、クライオ電子顕微鏡の専門家が承認する新たな検証項目(実験データと原子座標の consistency)を追加した⁴⁾。



図 1. wwPDB 運営諮問会議

(上) 2022 年 (下) 2023 年

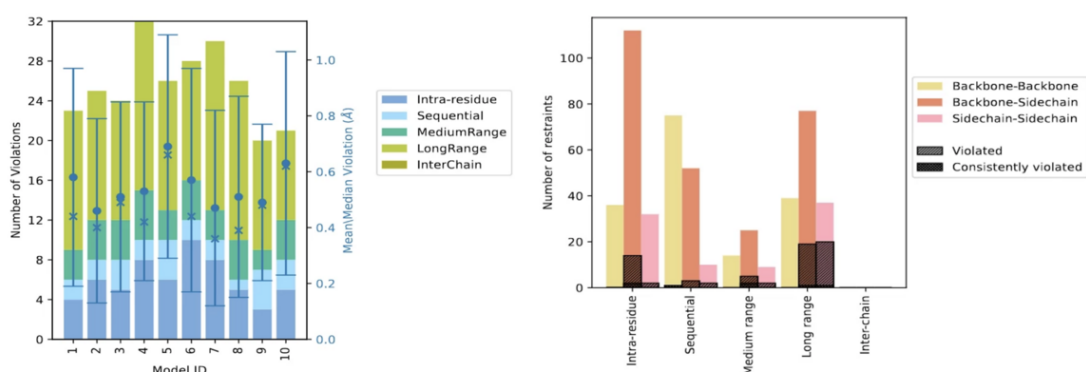


図 1.統一 NMR データで拡張して計算された検証レポート

ii-1) 他のデータベースとの統合化および高度化

ii-1-1. PDB/RDF アーカイブの拡充

PDBj が主体となって開発した PDB の RDF 表現のアーカイブ(PDB/RDF)は、第 III 期

プロジェクト期間中に拡張して、全ての PDB コアアーカイブ (PDB, CCD, BIRD, VRPT, SIFTS) を網羅した。一方、PDB/RDF アーカイブのポータルサイト (<https://rdf.www.pdb.org>) で閲覧可能なアーカイブは、PDB と CCD だけであり、エントリー ID のみ検索可能な状態に留まっている。そこで、上記の全ての PDB コアアーカイブの RDF 表現を閲覧可能にするとともに、クエリ文の入力による検索を可能にする計画であった(横地)。招聘教授をお願いしている DBCLS の片山博士と具体の検討は開始しているが、担当者が i-2) OneDep 登録システムの高度化において NMR 構造を登録する際に問題となる NMR データファイルの統一システムの高度化・自動化を進める開発項目に予定以上の時間を取られてしまい、rdf.www.pdb.org の拡充に時間を割くことができなかった。令和 6 年度以降に優先的に対応する予定である。

ii-1-2. 統合利用に向けたプログラム類、データベースの検討選定

wwPDB と UniProt や Pfam, GO, SCOP, CATH などとの残基レベルでのマッピングを行っている SIFTS に含まれていないデータベースとの PDB との統合利用に関して、NBDC/DBCLS で開発されている、RDF 化されたデータベースを統合的に検索するためのフレームワーク TogoDX (<https://togodx.dbcls.jp/human/>) について調査した(長尾、Bekker)。PDB と Reactome のパスウェイデータや医薬品類似化合物のデータベース ChEMBL に含まれる活性データと薬効データなどを組み合わせて検索できることを確認した。また、2022 年度に日本蛋白質科学会、生命医薬情報学連合大会、日本生物物理学会、CBI 学会、日本結晶学会、ライフインテリジェンスコンソーシアムなどで、利用者がこれまでどのようなデータベースと関連付けて PDB を利用してきたか、また今後したいと考えているかについて詳細な調査を実施し意見を収集した。この意見をもとに、ゲノム情報との統合利用の需要が大きいと判断し、まずは日本発のコホート調査のデータを基に作成された jMorp (日本人多層オミクス参照パネル) との連携を進めた (Bekker, 長尾)。東北大学の jMorp グループに DBCLS の片山大阪大学招聘教授にも加わって頂いて、毎月定期的にオンライン会議を実施して jMorp のデータを PDB データと統合利用するためには、まず UniProt ベースのサマリーページを用意し、どの PDB エントリーを選ぶのが最適であるかサジェストする必要があると判断した。エントリー毎の Region explorer や Chain Topology の表示などの新機能を開発し、PDBj への実装準備を進めている

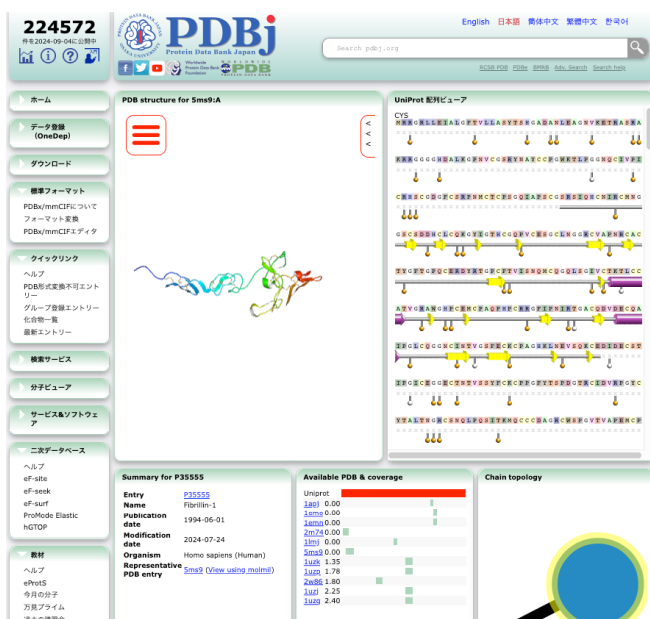


図 3. 開発途中の UniProt サマリーページ 右上に jMorp のデータが示されており、真ん中下に UniProt のカバー率と各 PDB エントリーの関係が表示されている。

jMorp (日本人多層オミクス参照パネル) との連携を進めた (Bekker, 長尾)。東北大学の jMorp グループに DBCLS の片山大阪大学招聘教授にも加わって頂いて、毎月定期的にオンライン会議を実施して jMorp のデータを PDB データと統合利用するためには、まず UniProt ベースのサマリーページを用意し、どの PDB エントリーを選ぶのが最適であるかサジェストする必要があると判断した。エントリー毎の Region explorer や Chain Topology の表示などの新機能を開発し、PDBj への実装準備を進めている

(図 3) (Bekker、長尾)。

ii-2) 化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開

創薬候補化合物のターゲット蛋白質へのドッキングシミュレーションの精度を高めたり、補欠分子属や基質分子の結合様式を考察する化学的知見を高めたりする上で、利用者が必要とする構造制度は目的によって異なってくる。化合物に特化した機械学習用のデータセットを選択する上で、目的別に実験データとの整合性をどの程度、どういった視点で検証し、フィルタリングするのが最適であるのか、利用者の声を聞くために、2022 年度に日本蛋白質科学会、生命医薬情報学連合大会、日本生物物理学会、CBI 学会、日本結晶学会で詳細な利用動向調査を実施した。目的ごとの機械学習用データセット選定のための基準作りを進めており、検証方法の確立している X 線結晶解析については概ね方法を固定した(栗栖、Bekker)。最近エントリー数が急増しているクライオ電子顕微鏡構造については、検証方法が確立していないが Purdue 大学の木原教授らが開発している DAQ-score を用いることとした。木原教授には、大阪大学蛋白質研究所の客員教授となって頂いて、定期的な技術交流を行なっている(Bekker、栗栖)。

iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力

iii-1) データベースの安定運用

PDBj のメインサーバーは大阪大学蛋白質研究所に設置しているが、計画停電や学内ネットワークや計算機の定期および不定期なメンテナンスの際に、(一財)蛋白質研究奨励会に設置したバックアップサーバーに DNS を切り替えることで、365 日サービスを提供している(工藤、山下)。2022 年度には、アノテーション業務の一部も(一財)蛋白質研究奨励会のデータベース研究支援部門にて実施する体制を構築し、経験抱負な専属アノテータと OneDep のディベロッパーを新たに蛋白質研究奨励会で雇用して安定かつ信頼性の高いデータベース運用を行った(見学、張、常住、池川)。懸案であった(一財)蛋白質研究奨励会のネットワーク環境の整備にも道筋をつけることができ、2024 年 10 月 1 日から 10Gbps で SINET6 に直接接続する予定である。

iii-2) 利用者・研究者コミュニティとの連携

研究代表者である栗栖が Vice President(無報酬)を務めている wwPDB Foundation (米国内の NPO 財団)の枠組みを利用して、構造予測ソフト AlphaFold を開発した DeepMind 社と意見交換をおこなった。i-1)でも触れた通り、ベイズ統計の手法を用いて予測構造自身を評価し、予測構造と実験構造とが混合したエントリーにおいて、構造データの評価法を検討するタスクフォースを財政的に支援していただく案を提出していた。大変残念なことに、DeepMind 社内で支援の可否と規模を検討していただいたが、最終的に支援は行えないという回答を得た。並行して、Cell 誌の Editor から「PDB のリリース前データを査読の際に査読者が見られる仕組みを作ってもらえないか？」という問い合わせが来ていた。他の国際誌を出版する編集社からも同様の相談を受けていた。そこで、各出版社からデータベースを査読者に

公開するシステムを開発する費用を負担していただけないか、現在問い合わせ中である。

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 2023 年 3 月 6 日と 2024 年 3 月 13 日にオンラインで開催した。Zoom にて韓国、台湾のユーザー代表にも出席していただいた(NBDC から陪席していただいた)。PDBj の活動報告と、次年度計画について報告を行い、委員の皆様から運営について専門的な諮問をいただいた。特に、PDB China の立ち上げや今後のデータ量の増加に対する対応、配列データベースとの統合利用の方向性について意見交換が行われた。

iii-3) 国際協力

2022 年度に立ち上がった PDB China(PDBc:国立蛋白質研究センター上海)6)のメンバーとして PDB China の Wenqing Xu 所長(兼 PDBc 代表)と、毎月定例の Zoom 会議を開催し必要なアドバイスをを行った。2023 年 9 月 21 日に上海で開催された PDB China の設立記念シンポには、PDBj 代表の栗栖がオンラインで参加して記念講演を行った。PDBc が完全に立ち上がるまでは、アジア地区からの登録エントリー受付は全て PDBj で行い、PDBc のアノテータの習熟度に応じて、適切な数および種類のエントリーを PDBc 用に PDBj が準備したサーバーに転送することで上海からリモートでデータ処理を進めている(池川、多久和)。PDBc でのデータ処理量が増えて、PDBj のアノテータに余裕ができてきた場合には、オーストラリアとニュージーランドからのエントリーを PDBj で受け付ける予定となっている。PDBc と PDBj とは対抗するのではなく、同一のデータベースを構築する仲間として、引き続き国際協力しながらデータ科学の発展に寄与していきたい。

(2) 若手研究者の多様なキャリアパスの支援

データベース構築・検証にはコンピュータの利用だけでなく英語力と、wwPDB で採用している STAR 形式の PDBx/mmCIF フォーマットに対する深い知識、および何よりアノテーション業務に携わった経験がものをいう。しかし、アノテータに対する雇い止めや自己都合による退職が発生すると、データベースの安定運用に大きな懸念が生じる。問題点を先取りして対応するため、(一財)蛋白質研究奨励会の客員研究員を兼務する栗栖が、若手を含む経験抱負な専属アノテータを蛋白質研究奨励会で雇用して安定かつ信頼性の高いデータベースとして運用を行うとともに、若手研究者のキャリアパスを確保した。

§4. 主要なデータベースの利活用状況

1. アクセス数

(1) 実績

表 研究開発対象の主要なデータベースの利用状況(月間平均)

種別	2022 年度	2023 年度	2024 年度 (8 月末時点)
訪問数 (Visit)	167,268	303,475	293,478
訪問者数 (Unique)	74,274	135,579	107,715
閲覧ページ数 (Views)	3,342,641	4,500,163	5,163,153

(2) 分析

上記数値は、大阪大学に設置しているメインサーバーpdbjlvh1(最近 pdbjlc1 に移行)とバックアップサーバーpdbjbk1、それに(一財)蛋白質研究奨励会に設置しているバックアップサーバーpdbjpw1 の3つのサーバーへの各アクセスログから該当サービス URL へのアクセス分だけを抽出し、それぞれ AWStats で集計した値を月数で割った値になる。rsync 等で機械的アクセスされるものを集計しているため、訪問者数は IP アドレスで辿れる範囲になる。<https://data.pdbj.org> などのプロトコルを用いて Web ベースでダウンロードされたものは含まれない。基本的に rsync 等で週次更新分をまとめて毎週ダウンロードされている利用者が多いと判断している。2023 年度に訪問数、訪問者数、閲覧ページ数とも 30～80%増加しており、関連学会への出展やランチョンセミナー等で継続的にアピールに務めていることが影響したと思われる。

wwPDB パートナシップの下で、日米欧の各地域拠点のサーバーに全く同じデータを毎週水曜日の 9 時(日本時間)に更新している。PDBe が 2024 年度に rsync によるサービスを停止して全て Globus に移行したので、利用者が Globus を志向しているかどうか動向に注目している。

2. データベースを利用して得られた研究成果・産業応用の例

1. 大阪大学の古賀教授らは、PDB のデータを詳細に調べて、これまでに組み合わせの無い新しい $\alpha\beta$ -fold を持つ新規蛋白質を人工的にデザインし、その NMR 構造を決定した。この結果は、多様で複雑な形状のタンパク質を設計することにつながるため、機能性タンパク質の創出につながる事が期待される。
関連: Shintaro Minami, Naohiro Kobayashi, Tohsihiko Sugiki, Toshio Nagashima,

Toshimichi Fujiwara, Rie Tatsumi-Koga, George Chikenji and Nobuyasu Koga, “Exploration of novel $\alpha\beta$ -protein folds through de novo design”, Nature Struct. Mol. Biol., vol. 30, pp.1132-1140, 2023 (DOI: 10.1038/s41594-023-01029-0).

3. その他

1次データベースである PDB は wwPDB パートナースHIPの下、日米欧で個別に処理した地域データを週末に事前交換し、全く同じデータセットとして水曜日 9 時(日本時間)に日米欧三拠点から同時に公開している。そのため、wwPDB の HP ではアクセス統計については各パートナーサイトの合計数が実態を表しているとの考え方をとっている。以下にその数字を示す。

	2022 年度	2023 年度	2024 年度 (9 月 2 日迄)
ダウンロード総数	2,135,291,607	2,035,853,611	1,239,510,634
ウェブアクセス総数	999,405,827	1,066,189,890	989,418,638

§5. 今後の研究実施計画

【中間評価以降、重点的に取り組む研究開発内容】

Data-in では、PDB China を Full member として受け入れるマイルストーンを具体的に整備し、PDB China が高い倫理観を持って国際的なルールに則って wwPDB パートナシップに加わるよう支援を続ける。Data-out では、PDB 統合利用ポータルの拡充を進めてより広く専門家以外に使っていただけるデータリソースとしての基盤整備に重点的に取り組む。低分解能の実験データに AlphaFold などの予測構造を組み合わせることで構造登録され論文発表されたケースで、研究倫理の観点から『行きすぎた解釈が行われた』として論文取り下げ騒ぎが起き始めている。wwPDB のメンバーと協力して、こういった予測構造と組み合わせた登録例に対して適切な検証レポートの充実を早急に進める。

【達成目標やスケジュール等の変更】

米国 BMRB のグラント更新がスムーズにいかず、再申請の結果 NIH からは維持と管理の費用のみが措置された。PDBj では 2023 年度に NBDC から追加支援を受けて BMRB データ処理システムのアップグレードを緊急実施した。BMRB データ処理システム更新と NMR 制限情報の標準化にエフォートを割かれたために、「NMR 制限情報と原子座標を対応づけし直し、可視化する開発」、「蛋白質立体構造中におけるアミノ酸レベルの位置情報、分子ポケット情報の自動アノテーション」については、今年度以降に計画を後ろ倒しして実施予定である。

§6. 自己評価

【目標の達成状況や実施内容に対する研究代表者自身の評価】

引き続き中国から大量のデータ登録があり、PDB China の活動を軌道に乗せることが非常に重要となっている。PDBj のリーダーシップで wwPDB として PDB China の活動を支援し、アジア地区のデータ急増に対応している⁶⁾。米国にて BMRB のグラント更新がスムーズに行われない問題が発生し、半年の間、BMRB が繋ぎファンドと大学予算で暫定的に運営される事態が発生した。PDBj の NMR 部門である BMRBj の存在意義が大きくクローズアップされ、データ処理システムの高度化・アップグレードを BMRBj が実施して安定運用に大きく貢献した。

本プログラムと関連する他プロジェクトとの連携(木下チーム、大浪チーム)も行っており、100 点満点とはいかないが、合格点で PDBj を運用できていると自己評価している。

【本プログラムの趣旨に対する、本研究開発課題への貢献の程度】

『研究開発を通じて公共データ利活用のための情報環境整備を行う』という点では、DBC LS との連携を深めて、より使いやすい情報環境の整備ができるはずであると自己評価している。大阪大学に招聘している DBCLS の片山俊明招聘教授との連携を進めて、本プログラムの後半では、より一層の情報環境整備を進め、使いやすく大規模解析にも耐えうる情報基盤としてデータ提供できる仕組みの完成度を高めていきたい。

『利用者の知識発見や課題解決への寄与及び国際的なオープンサイエンスへの貢献』の観点では、PDBj は 100% の貢献ができていると自負している。

§7. 外部発表等

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)	0 件
	国際(欧文)	10 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. Preeti Choudhary, Zukang Feng, John Berrisford, Henry Chao, Yasuyo Ikegawa, Ezra Peisach, Dennis W Piehl, James Smith, Ahsan Tanweer, Mihaly Varadi, John D Westbrook, Jasmine Y Young, Ardan Patwardhan, Kyle L Morris, Jeffrey C Hoch, Genji Kurisu, Sameer Velankar, Stephen K Burley, "PDB NextGen Archive: centralizing access to integrated annotations and enriched structural information by the Worldwide Protein Data Bank", *Database* (Oxford), 2024:baae041, 2024 (DOI: 10.1093/database/baae041).
2. Brinda Vallat, Benjamin M Webb, John D Westbrook, Thomas D Goddard, Christian A Hanke, Andrea Graziadei, Ezra Peisach, Arthur Zalevsky, Jared Sagendorf, Hongsuda Tangmunarunkit, Serban Voinea, Monica Sekharan, Jian Yu, Alexander A M J J Bonvin, Frank DiMaio, Gerhard Hummer, Jens Meiler, Emad Tajkhorshid, Thomas E Ferrin, Catherine L Lawson, Alexander Leitner, Juri Rappsilber, Claus A M Seidel, Cy M Jeffries, Stephen K Burley, Jeffrey C Hoch, Genji Kurisu, Kyle Morris, Ardan Patwardhan, Sameer Velankar, Torsten Schwede, Jill Trehwella, Carl Kesselman, Helen M Berman, Andrej Sali "IHMCIFF: An Extension of the PDBx/mmCIF Data Standard for Integrative Structure Determination Methods", *J. Mol. Biol.*, online ahead of print (DOI: 10.1016/j.jmb.2024.168546)
概要: マスターフォーマットである PDBx/mmCIF の拡張版である IHMCIFF を定義し、構造予測などの手法を交えた構造データの記述法を確立し論文発表した。
3. Kumaran Baskaran, Eliza Ploskon, Roberto Tejero, Masashi Yokochi, Deborah Harrus, Yuhe Liang, Ezra Peisach, Irina Persikova, Theresa A Ramelot, Monica Sekharan, James Tolchard, John D Westbrook, Benjamin Bardiaux, Charles D Schwieters, Ardan Patwardhan, Sameer Velankar, Stephen K Burley, Genji Kurisu, Jeffrey C Hoch, Gaetano T Montelione, Geerten W Vuister, Jasmine Y Young, "Restraint validation of biomolecular structures determined by NMR in the Protein Data Bank", *Structure*, vol32, 824-837, 2024 (DOI: 10.1016/j.str.2024.02.011).
4. Gerard J Kleywegt, Paul D Adams, Sarah J Butcher, Catherine L Lawson, Alexis

Rohou, Peter B Rosenthal, Sriram Subramaniam, Maya Topf, Sanja Abbott, Philip R Baldwin, John M Berrisford, Gérard Bricogne, Preeti Choudhary, Tristan I Croll, Radostin Danev, Sai J Ganesan, Timothy Grant, Aleksandras Gutmanas, Richard Henderson, J Bernard Heymann, Juha T Huiskonen, Andrei Istrate, Takayuki Kato, Gabriel C Lander, Shee Mei Lok, Steven J Ludtke, Garib N Murshudov, Ryan Pye, Grigore D Pintilie, Jane S Richardson, Carsten Sachse, Osman Salih, Sjors H W Scheres, Gunnar F Schroeder, Carlos Oscar S Sorzano, Scott M Stagg, Zhe Wang, Rangana Warshamanage, John D Westbrook, Martyn D Winn, Jasmine Y Young, Stephen K Burley, Jeffrey C Hoch, Genji Kurisu, Kyle Morris, Ardan Patwardhan, Sameer Velankar, "Community recommendations on cryoEM data archiving and validation", *IUCrJ*, vol 11, 140-151, 2024 (DOI: 10.1107/S2052252524001246.)

5. wwPDB Consortium, "EMDB-the Electron Microscopy Data Bank", *Nucleic Acids Res.*, vol 52(D1), D456-D465, 2024 (DOI: 10.1093/nar/gkad1019.)
 6. Wenqing Xu, Sameer Velankar, Ardan Patwardhan, Jeffrey C Hoch, Stephen K Burley, Genji Kurisu, "Announcing the launch of Protein Data Bank China as an Associate Member of the Worldwide Protein Data Bank Partnership", *Acta Cryst D Struct Biol.*, vol 79, 792-795, 2023 (DOI: 10.1107/S2059798323006381)
- 概要:PDB China の活動開始をアナウンスし、現状の准会員としての活動内容を紹介している。PDBj が Last Author となり、論文の原稿を準備して発表した。
7. Brinda Vallat, Gerardo Tauriello, Stefan Bienert, Juergen Haas, Benjamin M Webb, Augustin Židek, Wei Zheng, Ezra Peisach, Dennis W Piehl, Ivan Anischanka, Ian Sillitoe, James Tolchard, Mihaly Varadi, David Baker, Christine Orengo, Yang Zhang, Jeffrey C Hoch, Genji Kurisu, Ardan Patwardhan, Sameer Velankar, Stephen K Burley, Andrej Sali, Torsten Schwede, Helen M Berman, John D Westbrook, "ModelCIF: An Extension of PDBx/mmCIF Data Representation for Computed Structure Models", *J. Mol. Biol.*, vol 435, 168021, 2023 (DOI: 10.1016/j.jmb.2023.168021)
 8. Jeffrey C Hoch, Kumaran Baskaran, Harrison Burr, John Chin, Hamid R Eghbalian, Toshimichi Fujiwara, Michael R Gryk, Takeshi Iwata, Chojiro Kojima, Genji Kurisu, Dmitri Maziuk, Yohei Miyanoiri, Jonathan R Wedell, Colin Wilburn, Hongyang Yao, Masashi Yokochi, "Biological Magnetic Resonance Data Bank", *Nucleic Acids Res.*, vol 51(D1), D368-D376, 2023 (DOI: 10.1093/nar/gkac1050)

2. その他の著作物(総説、書籍など)

1. Genji Kurisu, Gert-Jan Bekker, Atsushi Nakagawa, "History of Protein Data Bank Japan: standing at the beginning of the age of structural genomics", *Biophys Rev.*, vol 14, 1233-1238, 2022 (DOI: 10.1007/s12551-022-01021-w)
2. John D Westbrook, Jasmine Y Young, Chenghua Shao, Zukang Feng, Vladimir Guranovic, Catherine L Lawson, Brinda Vallat, Paul D Adams, John M Berrisford, Gerard Bricogne, Kay Diederichs, Robbie P Joosten, Peter Keller, Nigel W Moriarty, Oleg V Sobolev, Sameer Velankar, Clemens Vonrhein, David G Waterman, Genji Kurisu, Helen M Berman, Stephen K Burley, Ezra Peisach, "PDBx/mmCIF Ecosystem: Foundational Semantic Tools for Structural Biology", *J. Mol. Biol.*, vol 434, 167599, 2022 (DOI: 10.1016/j.jmb.2022.167599)

3. 国際学会発表及び主要な国内学会発表

(1) 概要

種別	国内外	件数
招待講演	国内	2 件
	国際	3 件
口頭発表	国内	2 件
	国際	1 件
ポスター発表	国内	4 件
	国際	0 件

(2) 招待講演

〈国内〉

1. 栗栖源嗣、PDBj のツールを使って α の構造情報を得る、第 7 回タンパク質結晶構造解析ビームライン中級者向け講習会、オンライン開催、2022 年 11 月 24 日
2. 栗栖源嗣、蛋白質データバンク(PDB): 阪大にある世界で唯一の蛋白質構造データベース、大阪大学レーザー科学研究所、2024 年 3 月 4 日

〈国際〉

1. Genji Kurisu, Gert-Jan Bekker, X-tal Raw Data Archive (XRDa): A crystallographic raw diffraction image archive in Asia、26th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Melbourne, Australia, Aug 22, 2023
2. Genji Kurisu. Protein Data Bank Japan. Kick-off Symposium of Protein Data Bank China. Zoom Online, Sep 21, 2023.
3. Genji Kurisu. Protein Data Bank: A single global archive of experimentally determined macromolecular structures. foundingGIDE Kick-off meeting. Zoom Online, Feb 15, 2024

(3) 口頭講演

〈国内〉

1. 栗栖源嗣、蛋白質構造データバンクのデータ駆動型研究基盤への拡張、トーゴの日シンポジウム、オンライン、10 月 5 日

2. 栗栖源嗣, AlphaFold 時代の Protein Data Bank, トーゴの日シンポジウム, 日本未来館, 2023 年 10 月 5 日

〈国際〉

1. Genji Kurisu, Protein Data Bank Japan: the Asian Hub of 3D macromolecular structural data, 26th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Melbourne, Australia, Aug 29, 2023

(4) ポスター発表

〈国内〉

1. 工藤高裕、蛋白質構造データバンク(PDB)および BMRB、EMDB、トーゴの日シンポジウム、オンライン、2022 年 10 月 5 日
2. 常住規代、電子顕微鏡生データアーカイブ EMPIAR の紹介、トーゴの日シンポジウム、オンライン、2022 年 10 月 5 日
3. Gert-Jan Bekker, Querying PDB data using the Mine 2 RDB service, トーゴの日シンポジウム, 日本未来館, 2023 年 10 月 5 日
4. 横地政志、NMR 実験データ標準化へのあゆみ、トーゴの日シンポジウム, 日本未来館, 10 月 5 日

〈国際〉

1. 該当なし

4. 知財出願

(1) 出願件数

種別		件数
特許出願	国内	0 件
	国外	0 件
その他の知的財産出願		0 件

(2) 一覧

① 国内出願

1. 該当なし

② 海外出願

1. 該当なし

③ その他の知的財産権

1. 該当なし

5. 受賞・報道等

(1) 受賞

1. 2022JB 審査員賞、栗栖源嗣、2022 年11月 10 日

(2) メディア報道

1. 朝日新聞社、「たんぱく質構造解析 AI が一石」、2022 年7月29日
2. プレスプレスリリース ”大阪大学が世界の蛋白質構造データバンク(PDB)を運営して 20 年- 世界の PDB データの 4 分の1相当 5 万件に到達！”，
<http://www.protein.osaka-u.ac.jp/achievements/20230511> 2023 年 5 月 11 日

(3) その他

1. Global Biodata Coalition (GBC)が認定する Global Core Biodata Resource に認定、2022 年 12 月 20 日

§8. 研究開発期間中の活動

1. 進捗ミーティング

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
毎週金曜日 10:30-12:00	PDB j 開発者会議 (非公開)	Zoom	10 人	研究進捗報告のためのミーティング
隔週金曜日 10:00-10:30	PDBj アノテータ会議 (非公開)	Zoom	14 人	研究進捗報告のためのミーティング
月末金曜日 14:00-15:00	BMRBj 技術者会議 (非公開)	大阪大学蛋白質 研究所 4 階	5 人	研究進捗報告のためのミーティング
毎月不定期 21:00-23:00	wwPDB PIs 会議 (非公開)	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
毎週木曜日 22:00-23:00	OneDep リーダー 会議 (非公開)	Zoom	10 人	wwPDB を構成するデータベースのリードアノテータが出席して, OneDep による処理の方針を相談する会議
毎週金曜日 9:00-9:30	OneDep 開発者会議 (非公開)	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
毎週水曜日 22:00-23:00	Lead Annotator 会議 (非公開)	Zoom	5 人	データ登録システムに関する問題点・注意点を日米欧で共有するための会議
毎月第 3 水曜日 20:30-21:00	PDBc-PDBj PI 会議 (非公開)	Zoom	3 人	PDB China の立ち上げに協力するため, 問題点や技術支援を進める相談をする会議
2023 年 10 月 28-30 日	wwPDB サミット (非公開)	EMBL-EBI	30 人	wwPDB の Primary Annotator と OneDep 開発者, および PI が集まって 1 年間の開発方針を決める会議
2024 年 10 月 15-19 日 (予定)	wwPDB サミット (非公開)	千里ライフサイ エンスセンター ビル会議室 (大阪 府豊中市)	30 人	wwPDB の Primary Annotator と OneDep 開発者, および PI が集まって 1 年間の開発方針を決める会議
年に 4 回 23:00-24:00	wwPDB Foundation 会議	Zoom	7 人	米国に設立した wwPDB 財団へ Deep Mind 社や大手製薬メーカー等からの寄付を模索する会議

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
2022 年 6 月	第 22 回日本蛋白質科学会年会 PDB j ランチョンセミナー	筑波国際会議場（茨城県つくば市）	100 人	学会参加者に向けた PDB j とサービスの紹介と、利用動向調査を行なった
2022 年 8 月 8 日	高校生のための蛋白研セミナー	大阪大学蛋白質研究所（大阪府吹田市）	50 人	高校生向けに PDBj の一般向けサイト「PDBj 入門」を用いて分子構造の立体視などを体験してもらった
2022 年 8 月 20-21 日	サイエンス・フェスタ 2022	大谷中学・高等学校（大阪府大阪市）	236 人 （再生回数）	一般向けに「タンパク質」についてオンライン動画で講演
2022 年 9 月 13-15 日	第 11 回生命医薬情報学連合大会	千里ライフサイエンスセンター（大阪府豊中市）	102 人	学会参加者に向けて PDB j の活動説明と、高度利用について講演し、利用動向調査を行なった
2022 年 9 月 28-30 日	第 60 回日本生物物理学会年会 PDB j 展示会	函館アリーナ（北海道函館市）	136 人	学会参加者に向けた PDB j とサービスの紹介し、利用動向調査を行った
2022 年 10 月 31 日	2022 年アジア結晶学連合	ラマダプラザ済州島（韓国・済州島）	100 人	学会参加者に向け PDB j への登録時の注意事項とサービスを紹介した。 優秀な学生発表に PDBj 賞をスポンサーした
2022 年 11 月 26 日	令和 4 年度日本結晶学会年会	関西学院大学（兵庫県西宮市）	85 人	学会参加者に向けた PDB j とサービスの紹介し、利用動向調査を行った
2022 年 11 月 30 日	第 44 回日本分子生物学会年会	幕張メッセ（千葉県幕張市）	60 人	学会参加者に向けた PDB j とサービスを紹介した
2023 年 5 月 18 日	第 27 回台湾生物物理学会	慈済大学（台湾花蓮市）	240 人	学会参加者に向け PDB j への登録時の注意事項とサービスを紹介した
2023 年 7 月 5 日	第 23 回日本蛋白質科学会年会 PDB j ランチョンセミナー	名古屋国際会議場（愛知県名古屋市）	100 人	学会参加者に向けた PDB j とサービスの紹介と、利用動向調査を行なった
2023 年 7 月 8 日	大阪大学共創 DAY@EXPOCITY2023 出展	ららぽーと EXPCITY	参加者多数でカウントできず	体験イベント、ミニレクチャー、展示などを通して、大阪大学のさまざまな研究成果を紹介する取り組みに参加
2023 年 7 月 29 日, 8 月 1 日	高校生のための蛋白研セミナー	蛋白研講堂	計 100 人	蛋白質に興味のある高校生に、PDBj の一般向けページを用いて模擬講義を実施
2023 年 8 月 22-29 日	第 26 回国際結晶学連合会議ブース展示	メルボルン国際会議場（オースト	参加者多数	wwPDB メンバーとしてブースを費用折半（日米欧で

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
		ラリア)		等分)にて出展し、PDBの活動を登録者に周知
2023年9月8日	第12回生命医薬情報学連合大会ランチョンセミナー	柏の葉カンファレンスセンター(千葉県柏市)	100人	学会参加者に向けてPDBjの活動説明と、高度利用について講演し、利用動向調査を行なった
2023年10月29日	令和5年度日本結晶学会年会ランチョンセミナー	山口大学(山口県宇部市)	85人	学会参加者に向けたPDBjとサービスの紹介し、利用動向調査を行った
2023年11月15日	第61回日本生物物理学会年会ランチョンセミナー	名古屋国際会議場(愛知県名古屋市)	100人	学会参加者に向けたPDBjとサービスの紹介し、RCSB PDBのBurley教授の講演を実施した 優秀な学生発表にPDBj賞をスポンサーした
2024年6月13日	第24回日本蛋白質科学会年会PDBjランチョンセミナー	札幌コンベンションセンター(北海道札幌市)	100人	学会参加者に向けたPDBjとサービスの紹介と、利用動向調査を行なった
2024年6月29日	大阪大学共創DAY@EXPOCITY2024出展	ららぽーとEXPCITY	参加者多数でカウントできず	体験イベント、ミニレクチャー、展示などを通して、大阪大学のさまざまな研究成果を紹介する取り組みに参加
2024年6月24-28日	第21回国際生物物理学会ブース展示	京都国際会議場(京都府京都市)	参加者多数	PDBjとしてブース出展し、PDBの活動を利用者に周知
2024年8月8日	高校生のための蛋白研セミナー	蛋白研講堂	50人	蛋白質に興味のある高校生に、PDBjの一般向けページを用いて模擬講義を実施
2024年8月22日	第30回国際生物系核磁気共鳴学会PDBjランチョンセミナー	COEX 国際会議場(韓国ソウル市)	200人	学会参加者に向けてPDBjとBMRBjの活動を紹介し、今後のデータ登録方針について説明した

以上

別紙 研究開発対象のデータベース等

No.	正式名称	別称	概要	URL	公開日	状態	分類	生命科学系データベースアーカイブ	NBDCヒトデータベース	NBDC RDFポータル	関連文献 (論文リストに記載があれば、その番号でも可)
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	継続・発展	データベース等				Sameer Velankar, Stephen K. Burley, Genji Kurisu, Jeffery C. Hoch, Joh L. Markley, "The Protein Data Bank Archive", Methods Mol Biol., 2305, 3-21, 2021 (DOI: 10.1007/978-1-0716-1406-8_1)
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バンク	http://bmrj.pdbj.org	2011/4/1	継続・発展	データベース等				Jeffery C. Hoch, Kumaran Baskaran, Harrison Burr, Joh Chin, Hamid R. Eghbaltia, Toshimichi Fujiwara, Michael R. Gryk, Takeshi Iwata, Chojiro Kojima, Genji Kurisu, Dmitri Maziuk, Yohei Miyanoiri, Jonathan R. Wedell, Colin Wilburn, Hongyang Yao, Masashi Yokochi, "Biological Magnetic Resonance Data Bank", Nucleic Acids Res., 51:D368-D376, 2023 (DOI: 10.1093/nar/gkac1050)
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	継続・発展	データベース等				維持・更新のみ
4	ProMode elastic	ProMode	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	継続・発展	データベース等				維持・更新のみ
5	Molecule of the Month	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	継続・発展	データベース等				維持・更新のみ
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	継続・発展	ツール等				維持・更新のみ
7	DASH	同左	PDBデータを基にした構造アラインメント(旧ASH)	https://sysimm.org/dash/		継続・発展	ツール等				維持・更新のみ
8	MolMil2	MolMil	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	継続・発展	ツール等				維持・更新のみ