

2024 年度 研究開発実施報告

概要

研究開発課題名	蛋白質構造データベースのデータ駆動型研究基盤への拡張
開発対象データベースの名称(URL)	日本蛋白質構造データベース(PDBj) (https://pdbj.org)
研究代表者氏名	栗栖 源嗣 (90294131)
所属・役職	大阪大学 蛋白質研究所 教授 (2025 年 3 月時点)



□目次

概要	1
§1. 研究実施体制	4
§2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等	5
(1) データベース一覧	5
(2) ツール等一覧	5
§3. 実施内容	6
(1) 本年度に計画されていた研究開発項目・タスク	6
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	6
ii) 他のデータベースとの統合化および高度化	6
iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力	6
(2) 進捗状況	6
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	7
ii) 他のデータベースとの統合化および高度化	7
iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力	9
§4. 成果発表等	10
(1) 原著論文発表	10
① 論文数概要	10
② 論文詳細情報	10
(2) その他の著作物(総説、書籍など)	10
(3) 国際学会および国内学会発表	10
① 概要	10
② 招待講演	11
③ 口頭講演	11
④ ポスター発表	11
(4) 知的財産権の出願 (国内の出願件数のみ公開)	11
① 出願件数	11
② 一覧	11
(5) 受賞・報道等	12
① 受賞	12
② メディア報道	12
③ その他の成果発表	12
§5. 主要なデータベースの利活用状況	13
1. アクセス数	13
① 実績	13
② 分析	13
2. データベースの利用状況を示すアクセス数以外の指標	13
3. データベースの利活用により得られた研究成果(生命科学研究への波及効果)	14
4. データベースの利活用によりもたらされた産業への波及効果や科学技術のイノベーション(産業や科	

学技術への波及効果)	14
§6. 研究開発期間中に主催した活動(ワークショップ等)	16
(1) 進捗ミーティング	16
(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	16

§1. 研究実施体制

グループ名	研究代表者・研究分担者氏名	所属機関・役職名	研究題目
研究代表者グループ (大阪大学グループ)	栗栖 源嗣	大阪大学・教授	蛋白質構造データベースの構築・検証・公開、統合化および高度化と利用促進、国際協力
研究分担者グループ (蛋白質研究奨励会グループ)	栗栖 源嗣	(財)蛋白質研究奨励会・客員研究員	蛋白質構造データベースの構築・検証・公開と安定運用

§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://pd bj.org

【その他のデータベース】

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

(2) ツール等一覧

No.	名称	別称・略称	URL
1	EM Navigator	EM Navi	https://pd bj.org/emnavi/
2	MolMil2	MolMil	https://pd bj.org/molmil2/
3	OneDep	OneDep	https://deposit-pdbj.wwpdb.org/deposition

§3. 実施内容

(1) 本年度に計画されていた研究開発項目・タスク

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

- ・ 国際基準での登録・編集・検証・公開
- ・ OneDep 登録システムの高度化

ii) 他のデータベースとの統合化および高度化

- ・ PDB 統合利用ポータル構築 (PDB/RDF アーカイブの拡充)
- ・ PDB 統合利用ポータル構築 (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)
- ・ PDB 統合利用ポータル構築 (AI 開発の動向、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)
- ・ 化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開 (機械学習用データセットの公開)
- ・ NMR 制限情報の標準化と検証結果の可視化

iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力

- ・ データベースの安定運用
- ・ 利用者・研究者コミュニティとの連携
- ・ 国際協力

(2) 進捗状況

開発項目「PDB 統合利用ポータル構築 (AI 開発の動向、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)」は、β 版の構築までを 2024 年度の当初計画としていたが、ユーザーからのフィードバックが重要との判断から初版として 10 月にサイトを公開し、当初計画より早めに実施した。当初 2025 年に実施を後ろ倒しする予定であった「蛋白質立体構造中におけるアミノ酸レベルの位置情報」についても、統合利用ポータルの中で Chain Topology としてデータベース化を完了し、後ろ倒しすることなく実施した。

それに対して、開発項目「化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開 (機械学習用データセットの公開)」については、PDB 統合利用ポータル構築の方にリソースを割かれてしまった結果、モックアップのアイデア構築までは進んだが化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開までは至らなかった。2025 年中には必ず公開する予定である。

開発項目「分子ポケット情報の自動アノテーション」については、2024 年度計画で言及したとおり人員配置の都合上 2025 年度より実施する。

PDBj の熟練のアノテータ 2 名を(財)蛋白質研究奨励会において非常勤として再雇用したことで、上海での処理数増と大阪での処理数減を絶妙に調整して、アジア地区からのデータ登録数の増加に対応した(データ登録は全て PDBj に対して行われ、データ処理は PDBj と上海とで分担している)。PDB China が立ち上がりつつあることにより 2017 年以降続いている中国大陆からの急激な登録データ増に対して PDBj がアノテータを追加雇用して対応する必要がなくなり、より Data-out にリソースを割けるようになることの意義は非常に大きい。

以下、項目ごとに 2024 年度に実施した内容を記載する。

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

・ 国際基準での登録・編集・検証・公開

習熟した専従研究員(アノテータ)が、X 線結晶解析、クライオ電子顕微鏡構造解析、NMR 構造解析の実験研究者から登録された蛋白質構造データ(原子座標とメタデータ)と NMR の実験情報データ(化学シフトなど)を、世界共通のアノテーション手法により厳密な品質を管理しつつ登録・編纂を行って、統合化に必要なキュレーション・アノテーションを継続的に実施した。wwPDB の他メンバー(RCSB-PDB, PDBe, BMRB, EMDB)や、アジア諸国の関連研究者との国際合意に基づいて、wwPDB で割り当てられた地域範囲を一つの漏れなく分担してアジア・中東地区で生産されるデータの 100%を処理した。次項で述べる登録・編集・検証システム(OneDep システム)の高度化を継続することで、アノテータの数を増やすことなく増加し続ける構造データの処理に対応した。

2024 年度も、上海で活動を開始した PDB China のメンタリングを継続した。PDB China のアノテーション用に NMR 構造のデータ処理システムを構築して、12 月に中国大陆発のデータのほぼ全てを上海のアノテータが処理できるようになり、アノテーション業務の指導を完了した。12 月以降、PDBj のアノテータは、これまで PDBe が担当していたロシアのエントリーの処理を正式に開始し、wwPDB の地域拠点間で不平等感が出ずかつ持続可能な蛋白質構造データ処理を実現した。

機械学習により配列情報から高精度に立体構造を予測する手法(AlphaFold 2 システムおよび RoseTTAFold システム)が開発され、低分解能の実験情報と予測構造とを組み合わせた解析例が急速に増えている。10 月に NBDC からの追加支援を頂き無事に wwPDB サミットおよび wwPDB 運営諮問会議を大阪で主催して、予測構造を含むエントリーに対して検証を議論するタスクフォースで議論すべき項目を整理し、2025 年 10 月に米国にて関係者を集めたタスクフォース会議を開催することを決定した。タスクフォースはカリフォルニア大学サンフランシスコ校で Modeller などのソフトを開発してきた Andrej Sali 教授が座長を務める。会議後に検証方針を示した White Paper を出版することも決定した。

・ OneDep 登録システムの高度化

第3期までの活動により、X線結晶解析、クライオ電子顕微鏡構造解析、NMR 構造解析の3手法全てに対して、検証レポート(Validation Report)が提供できる状況となった。構造解析の論文を投稿する際に、wwPDB の正式検証レポートを添付して投稿することを必須要件とするよう、Nature, Science をはじめ主要な学術誌に依頼済みで、多くの Journal で投稿必須要件となっている。それにより wwPDB の各サイトに登録されるエントリーの品質が著しく向上し、アノテータがエントリーの修正を依頼する回数の減少に貢献している。データ数の増加が著しいクライオ電子顕微鏡構造解析について、Validation Task Force (VTF)での議論をベースに、2024 年度も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 チェック)の追加を継続して検討した。新しい検証項目の実装は 2025 年度以降に実施予定である。

2023 年度の本課題追加実施項目として NMR の実験データを処理する BMRBdep システムの高度化を完了した。2024 年度は、これを欧米の NMR データを処理している米国コネチカット大学の BMRB に提供し実装した。これにより欧米における NMR データの処理効率向上に貢献した。

ii) 他のデータベースとの統合化および高度化

・ PDB 統合利用ポータル構築(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3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.wwpdb.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。担当者が BMRBdep の高度化および米国 BMRB への移植に集中していたため対応が遅れていたが、2024 年度は上記全ての PDB コアアーカイブの RDF 表現を閲覧可能にし、クエリ文の入力による検索を可能にする為の開発を継続した。

- **PDB 統合利用ポータルの構築(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)**

データ統合の方法について検討した結果、すでに RDF 化されて公開されているデータベースに関しては、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 を通して、統合することが容易であると判断した。個々のデータベースのみからでは得られない統合的な検索でユーザーの需要が高いと考えられる検索例のリストアップと、RDF 化されていないデータベースの扱いについては、検討を継続し、以下に述べる統合利用ポータルに組み込む予定である。

- **PDB 統合利用ポータルの構築(AI 開発の動向、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)**

高度な検索および部分データ取得システムを構築するため、他のデータベースとの統合的な利活用ができるよう PDB/RDF アーカイブの拡充と PDB 統合利用に向けたプログラム類、データベース検討選定を実施した結果、日本発の配列データベースである日本人多層オミックス参照パネル (jMorp) との統合利用ポータルの構築を最初のターゲットに設定した。2024 年度は、jMorp と PDBj との統合利用ポータルの初版を完成させ 10 月に公開した (Bekker et al., *Protein Sci.* 2025)。トーゴの日シンポジウムやアジア地区の国際学会で統合利用ポータルの利用開始をアナウンスしたところ、関係者からフィードバックを頂戴した。継続して、機能アップデートを実施している。

- **化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開(機械学習用データセットの公開)**

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。化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開のための選抜基準の策定と必要とする検証パラメータの検討は 2023 年度中に終了していた。2024 年度は実装済みの RDF 化した検証レポートの恩恵を最大限に活かし、利用者の声を聞いた結果をフィードバックして、第一弾の選抜データセットの公開を行う計画であった。化学データベースコミュニティの会議に参加し、IUPAC の基準で化合物を記述する標準化の方針を策定して、PubChem を中心にデータ統合を進めるところまで決定した。しかし、上述の PDB 統合利用ポータルを先行して公開する方に時間を割かれたため、モックアップのアイデア構築までは進んだが化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開までには至っていない。2025 年度に少し後ろ倒しして完了させる。

- **NMR 制限情報の標準化と検証結果の可視化**

NMR を用いて実験的に決定された立体構造を PDB に登録する際、化学シフトと NMR 制限情報などの実験データの提出が義務付けられている。このうち化学シフトは、NMR-STAR フォーマットで標準化され、原子座標と適切に対応づけられ、最終的に BMRB コアアーカイブとして公開される。一方で NMR 制限情報については、OneDep 登録システムのサポートが不十分な状態が続いていた。PDBj の NMR 部門である BMRBj が米国 BMRB と協力して開発したシステムを用いて、NMR を実験手法とする全ての PDB エントリーの NMR 制限情報について一括して NMR-STAR フォーマットに標準化して公開する作業を実施した。

2024 年度には、米国 BMRB と協力して NMR 制限情報の標準化を完了した。2024 年度は継続し

て NMR 実験データの可視化に向けて必要なツール類の整備を進めた。2025 年度中に可視化ツールの整備を完了する予定である。

iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力

・データベースの安定運用

大阪大学蛋白質研究所とは地理的に 6km ほど離れた位置にある(財)蛋白質研究奨励会に、蛋白質研究所が費用を折半する形でサーバー室を借用し、PDBj および BMRBj のバックアップサーバーを構築して、定期メンテナンスやメインサーバーの機種更新の際に活用した。2022 年からは、アノテーション業務の一部も(財)蛋白質研究奨励会のデータベース研究支援部門において実施し、安定的なデータベース活動を継続して実施した。2024 年度中に、ハードウェアやネットワークの構築も担当できる研究員を(財)蛋白質研究奨励会で雇用し、バックアップサーバーを文部科学省の学術情報ネットワーク SINET6 の下に専用回線で接続して高速インターフェースで運用できる環境を整備した。

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の語学力と、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長い経験がものをいう。(財)蛋白質研究奨励会の研究員を兼務する栗栖が、大阪大学を定年退職した経験抱負な専属アノテータ 2 名を蛋白質研究奨励会で非常勤研究員として再雇用し、データ処理体制に万全を期した。

・利用者・研究者コミュニティとの連携

国内の製薬企業も創薬の現場において PDB データを多用している。この状況に対応して企業ユーザーからの要望を聞く機会として、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」のメンバーに企業のシニア研究者に加わっていただいていた。また、PDB China の始動により、現在の地域分担を再構築する際に問題となるであろう台湾・香港の研究者を代表して、2024 年度から国立台湾大学医学部で副学部長を務めておられる Nei-Li Chan 教授に専門部会のメンバーに加わっていただいた。第 4 期の統合化プロジェクト期間中に想定される、PDB China の准メンバーから正メンバーへの昇格*に適切に対応できるよう、地域のコミュニティとの連携を強めるため、2024 年 8 月には韓国ソウルでの国際生物系 NMR 会議に参加しセミナーを実施し、12 月にはマレーシア・クアラルンプールでのアジア結晶学連合会議においてブース展示を実施した。(*注:PDB China の正メンバーへの昇格は、量的に中国全土からのエントリーを漏れなく処理できる能力を示し、かつ質的に校正でフェアな運用実績を有することを、他の wwPDB メンバーが全員一致で承認する必要がある。wwPDB サミットでは 2027 年頃を想定することが議論された。)

・国際協力

発展著しい中国とインドに wwPDB のフランチャイズを増やす可能性が長く議論されてきた。この議論をベースに、wwPDB の運営諮問委員会において、アジア圏を代表している PDBj が、積極的にこれらの地域を支援し、グローバルなデータベース活動に貢献していくことが求められてきた。2024 年度も継続して PDB China 代表の Wenqing Xu 教授と、毎月定例の Zoom 会議を開催し必要な協力を継続して実施した。インドについては、クライオ電子顕微鏡が複数台導入されたというニュースが入ったものの、2024 年度中には大きな登録数の変化は見られなかった。

PDB China が立ち上がってきたが、対抗するのではなく同一のデータベースを構築する国際協力機関として協力している。

§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)	1件
	国際(欧文)	6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. Gert-Jan Bekker, Chioko Nagao, Matsuyuki Shirota, Tsukasa Nakamura, Toshiaki Katayama, Daisuke Kihara, Kengo Kinoshita, Genji Kurisu. Protein Data Bank Japan: Improved tools for sequence-oriented analysis of protein structures. Protein Science (2025) 34: 3 (10.1002/pro.70052)
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 Trewhella, Carl Kesselman, Helen M Berman, Andrej Sali. IHMCIF: An Extension of the PDBx/mmCIF Data Standard for Integrative Structure Determination Methods.. Journal of molecular biology (2024) 436: 17168546-168546 (10.1016/j.jmb.2024.168546)
3. 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, The Journal of Biological Databases and Curation (2024) 2024 (10.1093/database/baae041)

(2) その他の著作物(総説、書籍など)

該当なし。

(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	0件
	国際	1件
口頭発表	国内	2件

種別	国内外	件数
	国際	0 件
ポスター発表	国内	2 件
	国際	0 件

② 招待講演

〈国内〉

該当なし。

〈国際〉

1. Genji Kurisu, Protein Data Bank: the single global archive of 3D macromolecular structural data, Asian Crystallographic Association, Kuala Lumpur Malaysia, Dec. 6, 2024

③ 口頭講演

〈国内〉

1. 栗栖源嗣、タンパク質の中性子結晶構造解析と PDB、2024 年度第 2 回 iBix 研究会、オンライン、11 月 12 日
2. 栗栖源嗣、国際連携で運営している世界で唯一の蛋白質構造データベース、量子ビームサイエンスフェスタ2025、つくば市、3 月 13 日

〈国際〉

該当なし。

④ ポスター発表

〈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、品川ザ・グランドホール、10 月 5 日
2. 岩田武史、PDB 登録システムの進展と蛋白質立体構造解析手法別の実験生データ収集活動、トーゴの日シンポジウム、品川ザ・グランドホール、10 月 5 日

〈国際〉

該当なし。

(4) 知的財産権の出願（国内の出願件数のみ公開）

① 出願件数

種別		件数
特許出願	国内	0 件

② 一覧

- ・ 国内出願

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. 東京新聞、タンパク質の設計と予測にノーベル化学賞、10月27日(PDBについて言及があり記者から確認依頼)
2. プレスリリース” 遺伝子変異とタンパク質の立体構造をつなぐ 新しいポータルサイトを公開！ ～創薬への応用に期待～”，<https://www.protein.osaka-u.ac.jp/achievements/20241031/>

③ その他の成果発表

1. タンパク質デザインと構造予測技術の開発に対してノーベル化学賞が授与された。受賞者らは、標準化されたフォーマットで構造情報と配列情報が高精度に記述されている PDB の果たした役割は非常に大きいと言及がある。<https://www.protein.osaka-u.ac.jp/notice/20241010-3/>

§5. 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 1 研究開発対象の主要なデータベースの利用状況

名称	種別	2024 年度(月間平均値)
PDB Archive	訪問者数	680,398
	訪問数	1,220,538
	ページ数	7,540,402
BMRB	訪問者数	4,780
	訪問数	16,050
	ページ数	129,588
eF-site	訪問者数	1,662
	訪問数	4,928
	ページ数	9,341
ProMode elastic	訪問者数	24,516
	訪問数	39,827
	ページ数	124,279
MoM	訪問者数	23,022
	訪問数	36,578
	ページ数	80,206

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 とバックアップサーバーpdbjbk1, それに(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の URL へのアクセス分だけを抽出し、それぞれを AWStats で集計した月ごとの値を 2024 年度分 1 年間で合計し 12 ヶ月で割った値になります。

PDB Archive, BMRB は 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ります。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みません。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おります。

アクセス数の増減で判断すると、ノーベル化学賞受賞決定の 10 月以降アクセス数が急増していましたが、こここのところ落ち着いてきていると考察しております。

2. データベースの利用状況を示すアクセス数以外の指標

データベースの登録数で見ると、2024 年に世界中で wwPDB に寄託された構造データは合計 19,322 件

(前年 17,064 件)であり、そのうち 34%に相当する 6,579 件が PDBj へ登録されている。

データベースの引用数でみると、wwPDB で発表した PDB に関する論文の引用件数が 824 件となった(最新の「Protein Data Bank: the single global archive for 3D macromolecular structure data, Nucleic Acids Research, vol. 47, D520-D528, 2019」で判断)。PDB ID の引用でみると、200,881 個の PDB エントリーが 88,000 報を超える論文で報告されていて、その引用件数は 6,690,000 件を超えている。1,000 件を超える引用をもつ PDB エントリーは 126 個、500 件を超える引用をもつ PDB エントリーは 754 エントリーである。

3. データベースの利活用により得られた研究成果(生命科学研究への波及効果)

1. 理研の本間グループと阪大の福澤グループは共同で Fragment Molecular Orbital (FMO) 法による量子化学計算により、タンパク質や結合したリガンド分子との性格な情報抽出に取り組んでおられる。FMO 計算実行のためのツールを開発し、実際に SARS-Cov_2 の M^{Pro} や金属プロテアーゼで計算を実行して詳細な相互作用情報を可視化することができた。PDBj と FMO 計算結果のデータベース化で協力を開始した。

関連: Hiroto Morikawa, Yusuke Kawashima, Chiduru Watanabe, Kikuko Kamisaka, Yoshio Okiyama, Kaori Fukuzawa and Teruki Honma, "FMOe: Preprocessing and Visualizing Package of the Fragment Molecular Orbital Method for Molecular Operating Environment and Its Applications in Covalent Ligand and Metalloprotein Analyses", J. Chem. Inf. Model., vol. 64, pp. 6927-6937, 2024 (DOI: 10.1021/acs.jcim.4c01169)

2. お茶の水女子大学の由良教授のグループでは、PDB の構造とバクテリアの配列 DB を利用しタンパク質間相互作用の共進化情報を抽出してバクテリアがもつ OmpR と NarL のレスポンスレギュレーター の機能改変の指針を得た。

関連: Mayu Shibata, Xingcheng Lin, José N. Onuchic, Kei Yura and Ryan R. Cheng, "Residue coevolution and mutational landscape for OmpR and NarL response regulator subfamilies", Biophys. J., vol. 123, No.6, pp. 681-692, 2024 (DOI: 10.1016/j.bpj.2024.01.028)

3. 米国 Purdue 大学の木原教授のグループでは、低分解能のクライオ電子顕微鏡マップに AlphaFold2 の予測構造と PDB の構造を用いて diffusion model により分子モデルを構築する DiffModeler を開発した。低分解能構造の評価にもつながる手法開発である。

関連: Xiao Wang, Han Zhu, Genki Terashi, Manav Taluja and Daisuke Kihara, "DiffModeler: large macromolecular structure modeling for cryo-EM maps using a diffusion model", Nature Methods, vol. 21, pp.2307-2317, 2024 (DOI: <https://doi.org/10.1038/s41592-024-02479-0>)

4. データベースの利活用によりもたらされた産業への波及効果や科学技術のイノベーション(産業や科学技術への波及効果)

1. 製薬会社(AbbVie・武田・Johnson & Johnson・Sanofi・Boehringer Ingelheim など)が AI Structural Biology Consortium <https://www.apheris.com/join-a-network/aisb> というコンソーシアムを作って OpenFold3 に PDB にプラスして各社がもつ未公開構造を追加して訓練することで、リガンド結合の予想精度を上げようという試み。RCSB PDB の Stephen K. Burley がコメントしている(事前の情報共有あり)。

関連: Ewen Callaway, "As AlphaFold runs out of data, drug firms make their own model", Nature, vol 640, pp. 297-298, 2025 (DOI: 10.1038/d41586-025-00868-9)

2. 2024 年ノーベル化学賞の受賞を受けて、PDB の設立者の一人である前 RCSB PDB 代表の Helen Berman 教授が Nature 誌よりインタビューを受けて、PDB がどのように科学技術イノベーション(この場合 AlphaFold や RosettaFold の開発)に繋がり波及していったのか、データベースの貢献についてまとめている。

関連: Ewen Callaway, "The huge protein database that spawned AlphaFold and biology's AI revolution", Nature, vol. 634, pp. 1028-1029, 2025 (DOI: 10.1038/d41586-024-03423-0)

§6. 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
2024年4月1日～ 2025年3月31日 (毎週開催)	PDBj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
2024年4月1日～ 2025年3月31日 (隔週開催)	PDBj Primary Annotator's meeting (非公開)	Zoom	14人	同上
2024年4月1日～ 2025年3月31日 (毎月開催)	BMRBj 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 セミナー室	5人	同上
2024年4月1日 ～2025年3月31日 (毎月開催)	wwPDB PI ミーティング	Zoom	5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
2024年4月1日 ～2025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タが出席して、OneDep による処理の方針を相談する会議
2024年4月1日 ～2025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
2024年4月1日 ～2025年3月31日 (毎月)	PDBc・PDBj PI 会議	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
2024年10月18日	wwPDB 運営諮問 会議	Zoom+大阪からの現地参加	22人	wwPDB の運営に関して今後の方針や問題点を議論し、運営方針を諮問する会議
2024年10月15-17日	wwPDB サミット	大阪千里ライフサイエンスセンター	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

(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
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、PDB-IHM の登録について説明を行なった
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	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

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
				て模擬講義を実施
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 でブース出展し, PDBj および wwPDB の活動を利用者に周知
2024 年 6 月 29 日	大阪大学共創 DAY @EXPOCITY2024 出展	ららぽーと EXPCITY(大阪府吹田市)	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 10 月 24 日	APBJC2024 ランチオンセミナー	那覇文化芸術劇場なはーと(沖縄県那覇市)	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
2024 年 11 月 10 日	令和 6 年度日本結晶学会年会ランチオンセミナー	名古屋大学(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, PDB-IHM の登録について説明を行なった
2024 年 12 月 1-6 日	第 18 回アジア結晶学連合会議ブース展示	クアラルンプール国際会議場(マレーシア)	参加者多数	PDBj でブース出展し, PDBj および wwPDB の活動を登録者に周知

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	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://bmrjb.pdbj.org	2011/4/1	維持・発展	データベース等	Jeffery C. Hoch, Kumaran Baskaran, Harrison Burr, Joh Chin, Hamid R. Eghbalnia, 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	維持・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/pro-mode-elastic/	2003/4/1	維持・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	維持・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/emn-avi/	2007/5/1	維持・発展	ツール等	維持・更新のみ
7	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	維持・発展	ツール等	維持・更新のみ