2025 年度年次報告書

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

【研究課題名】「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」

研究代表者：
栗栖　源嗣（大阪大学　蛋白質研究所　教授）

研究分担者：
栗栖 源嗣（蛋白質研究奨励会　データベース研究支援部門　客員研究員）

©2025 栗栖 源嗣(大阪大学) licensed under CC表示4.0国際

1. 研究進捗状況と成果

令和 7 年度は、wwPDB の一員として PDB アーカイブの安定運用と高度化を推進し、世界共通基準に基づく高品質なキュレーションとアノテーションを継続して、PDBj に登録された全データを漏れなく処理した。また、PDB China に対する技術支援・人材育成を継続した。構造検証に関しては、AlphaFold3 や RoseTTAFold など AI 予測構造と低分解能実験データを組み合わせた解析の普及を背景に、新たな検証法の開発を推進した。2025 年 10 月には米国プリンストンで Validation Task Force 会議を開催し、ベイズ推定を活用した新たな検証レポート開発方針を White Paper としてまとめた。また、クライオ電子顕微鏡構造解析向けに Q-score を用いた新規検証機能を OneDep へ実装するとともに、複数構造を一括登録可能なマルチエントリー登録機能を欧米パートナーと共同開発した（実装待ち）。さらに、生成 AI を活用した Chatbot 型支援機能について、日米欧 3 極で共同開発を開始した。

データ統合利用基盤の開発では、PDB/RDF アーカイブの閲覧・検索機能の高度化については、一部開発が継続課題となっており、令和 8 年度中の完成を目指している。また、KEGG Pathway との統合利用の可能性を検討し、タンパク質の構造状態を考慮した創薬研究向け情報基盤構築に向けた課題整理を行った。さらに、wwPDB 全体として Data-out 活動強化を進め、Chatbot を活用した情報提供の高度化方針を共有した。

利用者向けサービスとしては、UniProt ポータルの改良を進めたほか、高品質なリガンド構造を選別可能な PubChem ポータルを新たに構築した。このポータルでは、実験データとの一致度や化学構造妥当性に基づきデータを抽出・一括取得でき、機械学習用データセット構築への利用が期待される。また、PDB 全エントリーに対して分子表面ポケット情報を事前計算し、自動アノテーション化を進めた。

運用面では、バックアップサーバーを活用した 365 日 24 時間体制の安定運用を継続した。国内外の研究者・企業との連携も強化し、国内諮問委員会では製薬企業の意見を取り入れた運営を行ったほか、2026 年 IUCr 国際会議における wwPDB ワークショップ開催も決定した。さらに、中国拠点 PDBc の立ち上げ支援を継続し、国際協力体制の下でアジア地域の構造生物学データ基盤強化を推進した。

2. 代表的な成果事例

1. Zalevsky, A.O., Vallat, B., Webb, B.M., Tangmunarunkit, H., Sekharan, M.R., Shafaeibejestan, A., Ganesan, S., Sagendorf, J., Jeffries, C.M., Trewhella, J., Graziadei, A., Vizcaíno, J.A., Leitner, A., Rappsilber, J., Peisach, E., Flatt, J.W., Young, J.Y., Majila, K., Viswanath, S., Kesselman, C., Hoch, J.C., Kurisu, G., Morris, K.L., Velankar, S., Berman, H.M., Burley, S.K., Sali, A. IHMValidation: Assessment of Integrative Structural Models Deposited to the Protein Data Bank. *J. Mol. Biol.*, Dec 18:169598 (2025).

概要：複合的な手法で構造解析された PDB エントリーの検証方法を検討した報告である。実験データとの整合性や構造モデルの品質を評価するパイプラインについて紹介している。

2. Bekker, G.J., Nagao, C., Shirota, M., Nakamura, T., Katayama, T., Kihara, D., Kinoshita, K., Kurisu. G. Protein Data Bank Japan: Computational Resources for Analysis of Protein Structure. *J. Mol. Biol.*, **437**:169013 (2025)

概要：PDBj で開発した Sequence Navigator Pro など新しいツールの説明と合わせて UniProt ポータルなどを紹介している。