

# 平成 24 年度 研究開発実施報告書

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」

研究代表者

中村 春木

大阪大学蛋白質研究所・教授

蛋白質構造データバンクの国際的な構築と統合化

## § 1. 研究実施体制

### (1) PDBj グループ (A)

① 研究代表者: 中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所、教授)

研究参加者: 中川 敦史、岩崎 憲治、金城 玲、鈴木 博文、工藤 高裕、山下 鈴子、五十嵐 令子、見学 有美子、張 羽澄、池川 恭代、佐藤 純子、松田 真、Gert-Jan Bekker、西川 建、晴氣 菜穂子(大阪大学蛋白質研究所)  
Daron M. Standley(大阪大学免疫学フロンティア研究センター、准教授)  
木下 賢吾(東北大学大学院情報科学研究科、教授)、  
輪湖 博(早稲田大学社会科学総合学術院、教授)  
伊藤 暢聡(東京医科歯科大学大学院、教授)

### ② 研究項目

- ・PDB 構造データ登録・編纂の国際連携による実施とデータ検証法の開発
- ・統合化にむけたデータ管理・配布システム、構造データのオントロジー、データ記載のフォーマット、ユーザインターフェースの開発
- ・蛋白質機能情報および高次生命機能情報と蛋白質構造情報との統合化システムの開発
- ・人材養成の実施

### (2) PDBj-BMRB グループ (B)

① 主たる共同研究者: 藤原 敏道 (大阪大学蛋白質研究所、教授)

研究参加者: 児嶋 長次郎、小林 直宏、岩田武史、高橋あみ、横地政志  
(大阪大学蛋白質研究所)

### ② 研究項目



・生体高分子 NMR 実験データのデータベース構築、運営、高度化

## §2. 研究実施内容

### 【研究の目的】

国際協力のもと、蛋白質構造データバンク(PDB)の構築・運営を実施するとともに、NMR 実験情報のデータバンク(BMRB)、電子顕微鏡や X 線小角散乱による構造情報データベース(DB)を構築し公開する。オントロジー、データ管理システム、新たなデータ書式、利用者インターフェースや二次的 DB および種々のサービスも開発して公開し、PDB の高度化・統合化を図り、人材育成も実施して、他の生命 DB との統合化による高次生命機能の理解に資する研究開発を行う。

### 【概要】

大阪大学蛋白質研究所内に、日本蛋白質構造データバンク(PDBj: Protein Data Bank Japan)なる組織を組織し、米国(RCSB-PDB)、欧州(EBI-PDBe)およびNMRのスペクトル情報DBであるBMRB(BioMagResBank)と協力して国際蛋白質構造データバンク(wwPDB)を運営し、国際協力に基づき、蛋白質・核酸等の生体高分子立体構造の主にアジア・オセアニア地区からの構造データとNMR情報を受け登録作業を行っている。構造データについては、2012年4月1日～2013年3月末までの間に1,938件の処理を行い(世界全体の同時期の全登録数9,929件)、NMR情報については同期間に47件の登録を行った(米国のBMRBと合わせた同時期の全登録数788件)。さらに、登録業務の標準化・自動化システム開発を国際協力により進めて8版を作製した他、wwPDB諮問会議を阪大蛋白研にて2012年10月12日に開催する等、wwPDB活動を推進した。

一方、統合のためのセマンティック・ウェブ技術として昨年度提案・公開したRDF化したPDBデータは、wwPDBの正式フォーマットとなり、UniProt等と協力した統合化環境を整備した。PDBj-BMRBでは、プログラムMagRO関連ツール群を開発・公開し、複雑なデータ構造をオントロジー工学を応用することでNMR実験データの登録・アノテーション業務を効率化し、多くのNMR研究者を支援した

機能情報と構造情報との統合化システムの開発として、配列情報を入力とした、構造情報に基づく機能の解析・推定パイプラインSFAS(Sequence to Function Annotation Server)を高度化し、アミノ酸配列から推定される天然変性ドメインをIDD\_Navigator(3-1)A-6によってまず同定し、種々のthreading/アラインメント手法(HHPred, FFAS, FORTE, PSIBLAST, and BLAST)を組み合わせて構造モデルを作成し(3-1)A-1、パイプラインによる機能推定が行える仕組みを完成し公開した。

人材養成として、データ寄託・登録者、データベース利用者に対する講習会を、学会のランチョンセミナーおよび公開の講習会等を開催して実施した。さらに、5名のアノテータを育成した。

### 【進捗状況と研究成果】

#### (1) PDBデータおよびNMR実験情報の登録・編纂の国際連携による実施とデータ検証法の開発

・Primary Annotatorsによる欧米との協力によるデータ登録の継続的实施を行い、平成24年度は、1,938件の構造情報と47件のNMR実験情報の登録処理を行った。

・登録業務の標準化・自動化システム開発を、国際協力によりデータ検証部分の高度化を担当する一方、8版の利用法に対してアナテータからの意見をフィードバックした。

・wwPDB 活動を推進し、阪大蛋白研での国際諮問委員会の主催に加え、梅田ハートンホールにて、高校生を含めた一般社会人向けのアウトリーチ講演会を開催した。

・グラフィックビューアjVを改良し、色分け立体視表示機能の追加実装を行い、2分割立体視に不慣れなユーザも色めがねを使って容易に立体視ができるようにした。また、JavaやJOGLのアップデートに伴うトラブルが発生したため、その対処を行った。

・NBDC の統合的データベース運営として、NBDC のデータセンターに PDBj のポータルを設置し、阪大蛋白研のポータルと同期した運用を 2012 年 12 月から本格的に開始した。

・2013 年中に新しいフォーマット PDBx が公開される予定であるが、PDBj の金城玲准教授が wwPDB の PDBx/mmCIF ワーキンググループのメンバーとなり、現行の mmCIF における改良すべき点、一般ユーザおよびプログラマに対する周知戦略等について、RCSB および PDBe のメンバーらと議論し、新フォーマットである PDBx の策定を行っている。

・PDBj のウェブサイトをよりダイナミックに行えるようにし、利用者自身がよく使う項目を中心にカスタマイズする機能や、これまで REST サービスでのみ利用ができた検索結果のダウンロード機能を追加し、HTML5 技術を利用したダイナミックなウェブサイトの 8 版を開発・公開した。

・EM Navigator では全動画を再作成し、HTML5 の動画配信方式に切り替え携帯電話端末などでの閲覧を可能にした。EMDB スキーマバージョン 1.9 への更新に対応し、データ管理システムの改変を行った。アウトリーチ活動であるサイエンスアゴラ 2012 のため、構造閲覧サービス「万見」の一般向け版「万見プライム」を作成し、公開した。

## (2) 統合化に向けたデータベースの高度化

・wwPDB で従来から用いられている PDBx/mmCIF 辞書に基づいて、それと互換な OWL オントロジーを構築した。さらに、このオントロジーに基づいて PDB の各エントリーの PDBML ファイルから対応する RDF ファイルを自動生成する仕組みを開発し、毎週のエントリー更新に自動的に対応するようにした。各エントリーの各カテゴリーの RDF データをユニークな URL で参照して、ウェブ上で取得する仕組みを、簡易検索機能とともに実装し、公開した(3-1)A-13。同様な仕組みを wwPDB の低分子化合物データライブラリについても開発して公開した。wwPDB/RDF が wwPDB のカノニカルなフォーマットとして認められ、実際に wwPDB ドメインで公開されたのを受けて、UniProt が wwPDB/RDF のデータへのリンクを追加している。

・昨年度に開発された MagRO-Validation の機能により、オントロジーを考慮した NMR データ構造を mmCIF の記述法により作成を可能とした。1586 件の BMRB データについて構造データと NMR 実験データとの整合性を解析し国際誌に報告した(3-1)B-3。同様の機能を実装した MagRO-NMRView を公開し、多数の NMR ユーザの解析とデータベース登録を支援した(3-1)B-3~B-8。

## (3) 機能情報と構造情報との統合化システムの開発

・近縁蛋白質間で見られる複合構造モチーフの差異と生物学的機能の差異との対応を調べ、蛋白質の類似性に基づく機能推定とは異なったアプローチにより機能注釈が行える可能性を示した。

別の応用として、蛋白質の低分子リガンド、蛋白質、および核酸相互作用部位のモチーフと超二次構造のモチーフの対応関係も調べた(3-1)A-3。また、網羅的構造比較プログラム GIRAF を改良し、より効率的な構造データベース検索と柔軟な原子アラインメントが行えるようになった(3-1)A-2。

・配列と構造の同時アラインメントを行う MAFFTash (3-1)A12、配列と構造の双方の情報から機能推定を行う SeSAW、それらのパイプライン化による SFAS と、複合体構造モデルを得る surFit パイプラインを構築・公開し、実験科学者との共同研究に応用した(3-1)A-4,A-14。

#### (4) 人材養成の実施

・データ寄託者・登録者に対する教育を日本結晶学会年会のランチョンセミナーにて行った。特に、新しいフォーマット PDBx とその導入についてのアナウンスを行った。

・データ利用者に対する初歩的および高度な利用法についての教育・実習を、学会のランチョンセミナー、サテライト講習会等で実施した。

・国際的な on-the-job training を実施し、米国 RCSB-PDB、英国 EBI-PDBe や米国 Wisconsin 大学との交流により、国際感覚を身に付けた 5 名のアノテータを育成した。

#### **【今後の見通し】**

##### (1) PDB データおよび NMR 実験情報の登録・編纂の国際連携による実施とデータ検証法の開発

・データ登録の継続的に実施と、wwPDB 活動を継続して推進(2013 年 9 月 27 日に wwPDB 諮問委員会を米国ラトガース大学で開催。アウトリーチ活動として公開シンポジウムを 2013 年 9 月 26 日に実施)。登録業務の標準化・自動化の新たな仕組みを開始。電子顕微鏡および X 線小角散乱の構造情報データベースの構築・運営を国際協力により実施。クラウドコンピューティング技術を用いた NMR 実験データの統合的管理システムを構築。

##### (2) 統合化に向けたデータベースの高度化

・2013 年に wwPDB として新たな PDBx フォーマットへの移行を開始するため、PDBx についての技術的な詳細をさらにつめるとともに、有力なソフトウェアの作成者らと連絡を取り、PDBx に正式に移行する前に、ある程度コミュニティのサポートを獲得するよう努力する。

・新しい PDBj のポータルについては、利用者からのフィードバックを取り込んで、使い勝手をさらに改良するとともに、NBDC のサーバへの移植を行う。HTML5 に完全に対応していないレガシーブラウザへの対応もある程度行う。阪大蛋白研と NBDC の両方で正常動作が確認できた時点で正式公開とする。

・クラウドコンピューティング技術を用いた NMR 実験データの統合的管理システム構築を進め、コアとなる仮想サーバを、NBDC センターに移設し、統合化を進める。

・RDF については、講習会や BioHackathon 等を通じて wwPDB/RDF の知名度を高めるとともに、実際にこれらのデータと外部データベースを結合した検索やデータベース解析等の具体例を積み上げる。一方、オントロジー工学に基づく標準的な XML 記述された NMR 実験データ群を公開し、標準的な RDF 化を進める。

##### (3) 機能情報と構造情報との統合化システムの開発

配列情報からの機能解析・推定パイプライン・システムの確立と公開。

#### (4) 人材養成の継続的实施

データ寄託者・登録者およびデータ利用者に対する教育・講習会を継続的に実施。wwPDB メンバーとの交流により、国際感覚を身に付けたキュレータ、アナレータを継続的に育成。



### §3. 成果発表等

#### (3-1) 原著論文発表

①発行済論文数(国内(和文)0件、国際(欧文)18件)

②未発行論文数(国内(和文)0件、国際(欧文)1件)

#### ③論文詳細情報

〈国際〉

A-1. Shide Liang, Chi Zhang, Jamica Sarmiento, Daron M. Standley. “Protein Loop Modeling with Optimized Backbone Potential Functions”, *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 8 (5), pp.1820-27, MAY 2012 [DOI: 10.1021/ct300131p]

A-2. Akira R. Kinjo and Haruki Nakamura. “GIRAF: a method for fast search and flexible alignment of ligand binding interfaces in proteins at atomic resolution”, *BIOPHYSICS*, vol. 8, pp. 79-94, MAY 2012 [DOI:10.2142/biophysics.8.79]

\*A-3. Akira R. Kinjo and Haruki Nakamura. “Functional Structural Motifs for Protein–Ligand, Protein–Protein, and Protein–Nucleic Acid Interactions and their Connection to Supersecondary Structures”, *Methods in Molecular Biology*, vol. 932, pp. 295-315, SEP. 2012 [DOI: 10.1007/978-1-62703-065-6\_18]

蛋白質の低分子リガンド、蛋白質および核酸相互作用モチーフと超二次構造モチーフの対応関係を調べ、原子配置と分子機能を超二次構造という粗視化を通して関係付けた。

A-4. Alexis Vandenberg, Shunsuke Teraguchi, Shizuo Akira, Kiyoshi Takeda, Daron M. Standley. “Systems biology approaches to toll-like receptor signaling”, *Wiley Interdisciplinary Reviews-Systems Biology and Medicine*, vol. 4 (5), pp.497-507, SEP-OCT 2012 [DOI: 10.1002/wsbm.1178]

A-5. Yuko Tsuchiya, Kengo Kinoshita, Shigeru Endo and Hiroshi Wako. “Dynamic features of homodimer interfaces calculated by normal-mode analysis”, *Protein Sci.*, vol. 21(10), pp.1503-13, OCT 2012 [DOI: 10.1002/pro.2140]

A-6. Ashwini Patil, Shunsuke Teraguchi, Huy Dinh, Kenta Nakai, and Daron M. Standley. “Functional annotation of intrinsically disordered domains by their amino acid content using IDD Navigator”, *Pac Symp Biocomput*, vol. 17, pp.164-175, OCT. 2012 [DOI: 9789814366496\_0016]

A-7. Bhaskar Dasgupta, Haruki Nakamura and Akira R. Kinjo. “Counterbalance of ligand- and self-coupled motions characterizes multi-specificity of Ubiquitin” *Protein Science*, vol. 22, pp. 168-178, NOV. 2012 [DOI:10.1002/pro.2195]

A-8. Alexis Vandenberg, Yutaro Kumagai, Akira Shizuo, Daron M. Standley. “A novel unbiased measure for motif co-occurrence predicts combinatorial regulation of

- transcription”, *Bmc Genomics*, vol. 13, DEC. 2012 [DOI: 10.1186/1471-2164-13-S7-S11]
- A-9. Kenta Maruyama, Masahiro Fukasaka, Alexis Vandenberg, Tatsuya Saitoh, Takumi Kawasaki, Takeshi Kondo, Kazunari K. Yokoyama, Hiroyasu Kidoya, Nobuyuki Takakura, Daron Standley, Osamu Takeuchi, Shizuo Akira. “The Transcription Factor Jdp2 Controls Bone Homeostasis and Antibacterial Immunity by Regulating Osteoclast and Neutrophil Differentiation”, *Immunity*, vol. 37 (6), pp. 1024-36, DEC. 2012, Times Cited: 0 [DOI: 10.1016/j.immuni.2012.08.022]
- A-10. Alexis Vandenberg, Yutaro Kumagai, Shunsuke Teraguchi, Karlou Mar Amada, Shizuo Akira and Daron M Standley. “Parzen window-based approach for the detection of locally enriched transcription factor binding sites”, *BMC Bioinformatics*, vol. 14, pp.26, JAN. 2013 [DOI: 10.1186/1471-2105-14-26]
- A-11. Hiroshi Wako, Shigeru Endo. “Normal mode analysis based on an elastic network model for biomolecules in the Protein Data Bank, which uses dihedral angles as independent variables”, *Comp. Biol. Chem.*, vol. 44, pp.22-30, JAN. 2013
- A-12. Kazutaka Katoh, Daron M. Standley. “MAFFT Multiple Sequence Alignment Software Version 7: Improvements in Performance and Usability”, *Mol Biol Evol*, vol. 30 (4), pp.772-80, JAN. 2013 [DOI: 10.1093/molbev/mst010]
- A-13. Toshiaki Katayama, Mark D Wilkinson, Gos Micklem, Shuichi Kawashima, Atsuko Yamaguchi, Mitsuteru Nakao, Yasunori Yamamoto, Shinobu Okamoto, Kenta Oouchida, Hong-Woo Chun, Jan Aerts, Hammad Afzal, Erick Antezana, Kazuharu Arakawa, Bruno Aranda, Francois Belleau, Jerven Bolleman, Raoul JP Bonnal, Brad Chapman, Peter JA Cock, Tore Eriksson, Paul MK Gordon, Naohisa Goto, Kazuhiro Hayashi, Heiko Horn, Ryosuke Ishiwata, Eli Kaminuma, Arek Kasprzyk, Hideya Kawaji, Nobuhiro Kido, Young Joo Kim, Akira R Kinjo, Fumikazu Konishi, Kyung-Hoon Kwon, Alberto Labarga, Anna-Lena Lamprecht, Yu Lin, Pierre Lindenbaum, Luke McCarthy, Hideyuki Morita, Katsuhiko Murakami, Koji Nagao, Kozo Nishida, Kunihiro Nishimura, Tatsuya Nishizawa, Soichi Ogishima, Keiichiro Ono, Kazuki Oshita, Keun-Joon Park, Pjotr Prins, Taro L Saito, Matthias Samwald, Venkata P Satagopam, Yasumasa Shigemoto, Richard Smith, Andrea Splendiani, Hideaki Sugawara, James Taylor, Rutger A Vos, David Withers, Chisato Yamasaki, Christian M Zmasek, Shoko Kawamoto, Kosaku Okubo, Kiyoshi Asai and Toshihisa Takagi. “The 3rd DBCLS BioHackathon: improving life science data integration with Semantic Web technologies”, *Journal of Biomedical Semantics*, vol. 4, p.6, FEB. 2013 [DOI:10.1186/2041-1480-4-6]
- A-14. Takuya Uehata, Osamu Takeuchi, Hidenori Iwasaki, Alexis Vandenberg, Akira

Shizuo, Daron M. Standley. "Malt1-Induced Cleavage of Regnase-1 in CD4+ Helper T Cells Regulates Immune Activation", *Cell.*, in press.

- B-1. Takako Ohyama, Takashi Nagata, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Takako Imai, Hideyuki Okano, Toshio Yamazaki, and Masato Katahira. "Structure of Musashi1 in a complex with target RNA: the role of aromatic stacking interactions", *Nucleic Acids Research*, vol. 40, pp.3218-31, APR. 2012 [DOI: 10.1093/nar/gkr1139]
- B-2. Ayako Furukawa, Hideyasu Okamura, Ryo Morishita, Satoko Matsunaga, Naohiro Kobayashi, Takahisa Ikegami, Tsutomu Kodaki, Akifumi Takaori-Kondo, Ryo Akihide, Takashi Nagata, Masato Katahira. "NMR study of xenotropic murine leukemia virus-related virus protease in a complex with amprenavir", *Biochem Biophys Res Commun.*, vol. 24, 425(2), pp.284-289, AUG. 2012 [DOI: 10.1016/j.bbrc.2012.07.083.]
- \*B-3. Naohiro Kobayashi, Yoko Harano, Naoya Tochio, Eiichi Nakatani, Takanori Kigawa, Shigeyuki Yokoyama, Steven Mading, Eldon L. Ulrich, John L. Markley, Hideo Akutsu and Toshimichi Fujiwara. "An automated system designed for large scale NMR data deposition and annotation: Application to over 600 assigned chemical shift data entries to the BioMagResBank from the RIKEN Structural Genomics/Proteomics Initiative internal database", *J. Biomol. NMR*, vol. 53(4), pp.311-320, AUG. 2012 [DOI: 10.1007/s10858-012-9641-6.]
- Kujira*(理研が開発) と *BESS*(阪大が開発) によりNMRデータおよび立体構造の登録を高度に自動化し、総計600件以上に上るデータの登録を達成した。また他の登録と比較してクオリティの高いデータとして登録されていることが示された。
- B-4. Fahu He, Kengo Tsuda, Mari Takahashi, Keiko Kuwasako, Takako Terada, Mikako Shirouzu, Satoru Watanabe, Takanori Kigawa, Naohiro Kobayashi, Peter Güntert, Shigeyuki Yokoyama, Yutaka Muto. "Structural insight into the interaction of ADP-ribose with the PARP WWE domains", *FEBS Lett.*, vol. 586(21), pp.3858-64, SEP. 2012 [doi: 10.1016/j.febslet.2012.09.009.]
- B-5. Keisuke Ikeda, Ayako Egawa, and Toshimichi Fujiwara. "Secondary Structural Analysis of Proteins Based on <sup>13</sup>C Chemical Shift Assignments in Unresolved Solid-State NMR Spectra Enhanced by Fragmented Structure Database", *J. Biomol. NMR*, vol. 55, pp.189-200, FEB. 2013 [DOI: 10.1007/s10858-012-9701-y.]

### (3-2) データベースおよびウェブツール等の構築と公開

公開中のデータベース・ウェブツール等

別紙を参照





### (3-3) その他の著作物(総説、書籍など)

1. PDBj News Letter, Volume 14, 2012 年
2. (Review) Helen M. Berman, Gerard J. Kleywegt, Haruki Nakamura, John L. Markley, "The future of the protein data bank." *Biopolymers*, vol. 99, pp.218-222, 2012.
3. (A Chapter of a book) Eiji Kanamori, Yoichi Murakami, Joy Sarmiento, Shide Liang, Daron M. Standley, Matsuyuki Shirota, Kengo Kinoshita, Yuko Tsuchiya, Junichi Higo, Haruki Nakamura, "Prediction of Protein-Protein Complex Structures", *Biomolecular Forms and Functions: A Celebration of 50 years of the Ramachandran Map* (Eds. Manju Bansal & N. Srinivasan), World Scientific Publishing, pp. 160-172, 2013.
4. (総説) 中村春木「ビッグデータ時代に向けた Protein Data Bank (PDB)の取り組み」、*生物物理*, vol. 53(1)、pp.44-46、2013 年
5. (書籍) 中村春木「プロローグ-人体は何でできているのか?」「タンパク質は形が命」、*Newton 別冊*, pp.6-18、pp.84-116、2013 年

### (3-4) 国際学会および国内学会発表

#### ① 招待講演 (国内 6 件、国際 4 件)

##### 〈国内〉

1. 金城玲、“PDB データの読み解き方: mmCIF と PDBML” バイオインフォマティクス講習会 2012 生物情報データベース入門、北海道大学、2012 年 8 月 9 日
2. Daron M. Standley, “A structural view of immunology”, RIKEN RCAI Seminar Series 2012 Toward Integrative Medical Biology, Yokohama, 2012 年 12 月 18 日
3. 中村春木、“Drug Development for a GPCR with in-silico screening”, Nagoya symposium, 名古屋大学豊田講堂, 2013 年 1 月 24 日
4. 中村春木、“生命科学における情報科学・計算科学”、第 6 回三大学連携シンポジウム, 神戸大学 統合研究拠点, 2013 年 2 月 22 日
5. 金城玲、“On the optimal contact potential and sequence conservation modes of proteins”、タンパク質討論会、産総研 CBRC(東京)、2013 年 3 月 2 日
6. 金城玲、“Composite structural motifs for delineating biological functions of proteins”、第 54 回植物生理学会、岡山大学、2013 年 3 月 21 日

##### 〈国際〉

- \*1. Daron M. Standley, “Functional Annotation of Intrinsically Disordered Domains by Their Amino Acid Content Using IDD Navigator”, Pacific Symposium on

Biocomputing, Hawaii, USA, Jan 6, 2012

- \*2. Haruki Nakamura, "Prediction of protein-protein complex structures, International Conference on Biomolecular Forms and Functions", Indian Institute of Science, Bangalore, India, Jan 10, 2013
3. Haruki Nakamura, A new non-Ewald scheme: The zero-dipole summation method and its applications to molecular dynamics simulations for homogeneous and inhomogeneous biomolecular systems, National Symposium on Frontiers of Biophysics, Biotechnology & Bioinformatics and 37'th Annual Meeting of Indian Biophysical Society, University of Mumbai, India, Jan 14, 2013.
4. Haruki Nakamura, Computational Prediction and Analysis of Protein-Protein Interactions: Qualitative and Quantitative Approaches, Special Seminar at Academia Sinica, Shanghai, Jan 18, 2013.

② 口頭講演 (国内 12 件、国際 0 件)

〈国内〉

1. 木下賢吾, "次世代生命科学研究に必要な計算機インフラについて", シンポジウム『データ駆動型生命情報科学の挑戦』, 仙台, 2012年5月10日
2. 中村春木, "PDBj(日本蛋白質構造データバンク)のデータベース高度化・統合化について", 第12回蛋白質科学会年会, 名古屋国際会議場, 2012年6月20日
3. 小林直宏, "仮想化技術を活用した生体高分子の解析研究のすすめ", 第12回蛋白質科学会年会, 名古屋国際会議場, 2012年6月20日
4. 小林直宏, "仮想化技術を用いた NMR データの統合的解析環境", 第50回日本生物物理学会年会, 名古屋大学東山キャンパス, 2012年9月23日
5. 中村春木, "Big data 時代に向けた wwPDB と PDBj の役割", 第50回日本生物物理学会年会, 名古屋大学東山キャンパス, 2012年9月23日
6. 中村春木, "生命科学における蛋白質構造データバンク(PDB)の役割"wwPDB Outreach 講演会, ハートンホール毎日新聞ビル(大阪), 2012年10月13日
7. 中村春木, "PDBj (PDB japan)の活動と wwPDB", 2012年日本結晶学会年会, 東北大学(仙台), 2012年10月26日
8. 藤原敏道, "蛋白研の NMR とその利用", 大阪大学銀杏会館, 2012年10月17日
9. 藤原敏道, "磁気共鳴の先端計測技術と生体系への展開", 蛋白研セミナー「生体系磁気共鳴の先端計測技術」, 大阪大学蛋白質研究所, 2012年7月31日
10. 小林直宏, "仮想化技術で始める超快適な生体高分子解析環境のレシピ", H24年度 PDBj 講習会, 東京農工大, 2013年3月7日
11. 鈴木博文, "万見"で3次元構造を見る", 平成24年度 PDBj 講習会 in 東京, 東京農工大, 2013年3月7日
12. 中村春木, "ビッグデータ時代における生命科学データベース", 蛋白研セミナー『ビッグデー



タ時代に向けた医データベース』、大阪大学中之島センター、2013年3月8日

③ ポスター発表 (国内4件、国際0件)

〈国内〉

1. 鈴木博文、中村春木、“低分解能 3次元電子顕微鏡データの構造比較システムの評価と改善”、第12回 日本蛋白質科学会年会、名古屋、2012年6月21日
2. 鈴木博文、中村春木、“低分解能 3D 電子顕微鏡構造データの類似構造検索システム”、第50回 日本生物物理学会年会、名古屋大学、2012年9月22日
3. 小林直宏、“仮想化技術による生体高分子 NMR 解析環境および BMRB データベースサーバーの統合化”、トーゴの日シンポジウム 2012、時事通信ホール(東京)、2012年10月5日
4. 小林直宏、“化学シフトデータベースを利用した高精度な NMR 構造評価システム”、第51回 NMR 討論会、ウインクあいち(名古屋)、2012年11月9日

(3-5) 知財出願

- ① 平成年度特許出願件数(国内 0件、海外 0件)
- ② 研究機関累積件数(国内 0件、海外 0件)
- ③ その他の知的財産権 0件

(3-6) 受賞・報道等

① 受賞

- \*1. 文部科学大臣表彰若手科学者賞、金城玲、2012年4月9日
2. 平成24年大阪大学総長顕彰(社会・国際貢献部門)、中村春木、2012年8月1日

② 新聞報道

1. 中村春木、“生命科学における情報科学・計算科学”、第6回神戸大学・大阪大学・京都大学連携シンポジウム(2013年3月22日神戸新聞掲載記事)

③ その他の成果発表

特に無し

#### §4. 研究期間中に主催した活動(主催したワークショップ等)

年月日	名称	場所	参加人数	概要
平成 24 年 4 月 30 日	大阪大学いちよう祭・蛋白研イベント-蛋白質を知ろう	大阪大学蛋白質研究所(吹田市)	35 名	分子閲覧ソフトを使用した三次元構造の観察や、蛋白質 PC ゲームを使って、最新の蛋白質解析を分かりやすく一般に紹介した。
平成 24 年 6 月 20 日	第 12 回蛋白質科学会年会ランチョンセミナー in 名古屋	名古屋国際会議場(名古屋市)	105 名	PDBj の組織およびウェブサービスや BMRB による新しい解析研究について講演を行った。
平成 24 年 6 月 25-29 日	Annotation of EMDB data トレーニングワークショップ	RCSB, Rutgers University (USA)	3 名	EM データ、chemical shift データの処理等についてトレーニングを行った。 *wwPDB 主催。
平成 24 年 8 月 9 日	バイオインフォマティクス講習会 2012- 生物情報データベース入門	北海道大学(札幌市)	44 名	PC を使用しながら生物情報データベースの利用法を実地で体験して頂く講習を行った。
平成 24 年 9 月 23 日	第 50 回生物物理学会年会 ランチョンセミナー in 名古屋	名古屋大学(名古屋市)	120 名	Big Data 時代における PDB の意義と仮想化技術による NMR データの統合的解析環境について講演を行った。
平成 24 年 10 月 12 日	9 <sup>th</sup> wwPDB Advisory Committee Meeting	大阪大学蛋白質研究所(吹田市)	20 名	wwPDB 諮問委員、関係組織の代表研究者を招き、wwPDB の年次報告および今後の運営と方針について討議した。
平成 24 年 10 月 13 日	wwPDB Outreach 講演会 in 大阪	ハートンホール毎日新聞ビル(大阪市)	52 名	PDB と創薬開発、生命科学研究への関わりを主題とした講演会を行った。
平成 24 年 10 月 18 日	2012 年日本結晶学会年会 ランチョンセミナー in 東北	東北大学(仙台市)	100 名	PDB と wwPDB、また PDB の登録についての講演を行った。
平成 24 年 11 月 2 日	2012 年 CCP4 講習会	九州大学(福岡市)	29 名	X 線結晶解析プログラム CCP4 の利用により、特に PDBj へのデータ登録手法について紹介した。
平成 24 年 11 月 10-11 日	サイエンスアゴラ 2012	東京お台場	—	分子構造を 3D 画像で分かりやすく紹介する展示を行った。

平成 24 年 12 月 11-14 日	第 35 回日本分子 生物学会・バイオ データベースコー ナー展示	マリンメッセ 福岡 (福岡市)	—	PDBj データベースを分かり やすく紹介する企画展示を行 った。
平成 24 年 12 月 26 日	平成 24 年度第 3 回データベース講 習会	産総研関西 センター (大阪府池田 市)	30 名	PDBj のサービスの利用法を PC を使用しながら実際に経 験して頂く講習を行った。
平成 25 年 3 月 7 日	平成 24 年度 PDBj 講習会 — in 東京—	東京農工大 学(小金井 市)	43 名	PDBj のサービスの利用法を PC を使用しながら実際に経 験して頂く講習を行った。
平成 25 年 3 月 8 日	大阪大学蛋白質 研究所セミナー	東京農工大 学(小金井 市)	49 人	ビッグデータ時代に向けた医 データベースと題する 7 題の セミナーを行い科学データベ ースと医療データベースの融 合について企業研究者も含め た発表と討論を行った。