


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検証高度化と統合化」  
栗栖源嗣 | 大阪大学 蛋白質研究所 教授

 ©2019 栗栖 源嗣(大阪大学) Licensed under CC BY 4.0

## §1. 研究開発実施の概要

【研究開発の目的】 本提案で構築するデータベース PDB (Protein Data Bank: 蛋白質立体構造データベース) と BMRB (BioMagResBank: NMR 実験情報データベース) は、生命科学を支える基盤データベースとしての役割を担っている。特に創薬の現場では、PDB や BMRB を活用した構造生物学をベースとする研究手法が、確立した創薬基盤技術のひとつになっている。PDBj (<https://pdj.org>) は、2003 年に欧米のパートナーと一緒に国際蛋白質立体構造データベース (worldwide Protein Data Bank: wwPDB, <https://wwpdb.org>) を設立し、その一翼を担ってデータを収集して厳しい品質管理を行いつつデータベース構築と公開を継続してきた。PDB と BMRB のデータ登録・利用においては、個々のデータの質を利用者へ示す検証レポートの重要性が増している。本研究開発では、PDB と BMRB の利用者・登録者に、個別の品質管理データや独自アノテーション等を RDF 形式で提供して、統合データベースとしての発展的な利用を促進することを目的とする。

【方法】以下の個別項目を開発し、PDB と BMRB の利用者・登録者に提供する方法をとった。i) 検証レポートを全ての実験手法で確立し、検証レポートを RDF 化して利用者に提供すること。ii) 蛋白質に結合する化合物の情報を効率よく収集・利用できるよう、既存の低分子化合物構造データベース (CSD) との連携・統合化を進めること。iii) 分子系統樹情報を利用した可視化により、配列データが大量であっても効率的な情報抽出を可能にするツールを開発すること。iv) 利用者が希望する構造情報 (原子座標という形でなく、分子立体構造上のどの位置で、どのような性質を持ち、どのようなダイナミクスの特徴があるか? という情報) を PDBj 独自のアノテーション情報として提供すること。v) BMRB のデータをもれなく収集・利用できるよう、新しいツールを継続開発し、wwPDB パートナーはもとより一般ユーザーに提供すること。vi) アノテータやユーザーの人材育成に積極的に取組み、基盤データベースとしての PDB と BMRB を継続的に維持・管理・利用できる体制を構築すること。

【結果】日米欧の国際協力により、進展著しい電子顕微鏡による構造解析にも完全に対応して、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。PDBj オリジナルの活動として、特にデータ品質管理のための検証レポートの拡充と RDF 化を図る一方、位置情報の自動アノテーション、CSD との連携、NMR データ登録・検証の高度化を行った。また、ASH viewer の開発を進め、実装については計画通りで開発でき、可読性の高いツールを構築できた。データベースの利用促進と人材育成に関して特筆すべき結果として、PDB China と PDB India の開始に道筋をつけたことが挙げられる。

## §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(研究代表者グループ)

日米欧の国際協力により進展著しい電子顕微鏡による構造解析にも完全に対応して、PDB と BMRB を継続的に構築・検証・公開した。その際、特にデータ品質管理のための検証レポートの拡充と RDF 化を図る一方、位置情報の自動アノテーション、CSD との連携、NMR データ登録・検証の高度化を行った。また、データベースの利用促進と人材育成にも注力して、PDB China と PDB India の開始に道筋をつけた。

#### (2) 「藤」グループ(主たる共同研究者グループ(1))

ASH viewer の開発を進め、実装については計画通りで開発でき、可読性の高いツールを構築できた。DBCLS の山口准教授との協力の下で LOD の利用として、GO、source organisms、active sites のみを用いたが、今後応用も見据えて Viewer で扱える RDF 化されたデータを増やしていきたいと考えている。

### 2. 有識者会議等

#### (1) 会議概要

名称	蛋白質立体構造データベース専門部会
目的	PDBj は大阪大学蛋白質研究所の共同利用・共同研究拠点活動の一部と位置づけられており、研究所の「共同利用・共同研究委員会」の下に、関係者である構造生物学の専門家からなる「蛋白質立体構造データベース専門部会」を置いている。PDBj の運営に対する外部委員会からの助言・意見・要望などの収集を行う。本有識者会議(部会)から輪番で毎年 2 名の委員を wwPDB の国際運営諮問会議に派遣し、wwPDB 全体での運営についても諮問していただいている。
委員数	のべ 10 人(内部委員 4 名を含む)

#### (2) 委員一覧

氏名	所属・役職
栗栖源嗣	大阪大学蛋白質研究所・教授(委員長)
中村春木	大阪大学蛋白質研究所・教授(H30年3月に退職)
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(R1年中に委員委嘱予定)
井上 豪	大阪大学大学院薬学研究科・教授(wwPDB ACメンバー)
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 SPring-8 センター・部長(wwPDB ACメンバー)
由良 敬	お茶の水女子大学人間文化創成科学研究科・教授

氏名	所属・役職
上村みどり	帝人ファーマ(株) 生物医学総合研究所・上席研究員
Chwan-Deng (David) Hsiao	Institute of Molecular Biology, Academia Sinica, Taiwan, Research Fellow (R1 年中に委員委嘱予定)

### (3) 開催歴

年月日	場所	主な議題・指摘事項等
平成 30 年 2 月 28 日	大阪大学 蛋白質研究所 大会議室	<ul style="list-style-type: none"> <li>平成 29 年度蛋白質立体構造データベースの運営状況について</li> <li>平成 30 年度蛋白質立体構造データベースの運営計画について</li> </ul>
平成 30 年 1 1 月 2 日	Madingley Hall, Cambridge, U.K.	<ul style="list-style-type: none"> <li>Introduction/Status of wwPDB</li> <li>PDB Core Archive Plan</li> <li>BMRB Core Archive Plan</li> <li>EMDB Core Archive Plan</li> </ul>
平成 31 年 2 月 5 日	大阪大学 蛋白質研究所 中会議室(大阪大学東京 オフィスに TV 会議システム で中継)	<ul style="list-style-type: none"> <li>平成 30 年度蛋白質立体構造データベースの運営状況について</li> <li>平成 31 年度蛋白質立体構造データベースの運営計画について</li> <li>検索クエリーの平易化を積極的に進めるべきとの指摘があった</li> <li>CSD と PDB のクロス検索や、同一の 2 次元スケッチャーを用いたユーザーインターフェイスの統一を奨励するべきとの指摘があった</li> </ul>
令和 1 年 10 月 18 日	大阪大学 蛋白質研究所 大会議室	<ul style="list-style-type: none"> <li>Introduction/Status of wwPDB</li> <li>PDB Core Archive Plan</li> <li>BMRB Core Archive Plan</li> <li>EMDB Core Archive Plan</li> </ul>

注) 各回の議事録・報告書は PDBj の HP と wwPDB の HP から公開されている  
<https://pdbj.org/info/pdbjac>  
<https://www.wwpdb.org/about/advisory>

### §3. 研究開発の目的、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

###### 主要なもの

正式名称	略称	概要
PDB Core Archive	PDB	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

###### 上記以外のもの

正式名称	略称	概要
BMRB Core 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
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	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。
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。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)閲覧用ツール
ASH	ASH	PDB データを基にした構造アラインメント
MolMil	MolMil	インターネット上の web 環境で稼働する分子構造ビューア
ASH viewer	ASH viewer	PDBj、UniProt などのデータベースから得られる配列、あるいは構造のアラインメントから、その機能や機能部位に関連する情報の抽出を支援するツール

#### 2. 達成目標及び実施計画

##### (1) 当初の実実施計画・達成目標

###### 3年間の実施計画

##### 1) 実施計画

###### 1) 国際組織 wwPDB メンバーとしての PDB アーカイブの構築・データ検証・公開

習熟した専従作業員(primary annotator)が、研究者からの蛋白質構造情報と NMR 実験情報データを、世界共通のアノテーション手法により、厳密な品質を保ちつつ登録・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 2022 年度まで実施する。wwPDB のメンバー(RCSB-PDB、PDBe、BMRB)やアジア諸国の関連研究者との国際連携に基づいて、開発中の登録・検証(validation)システム(OneDep システム:X 線結晶構造の登録については 2016 年に完成し運用中)によって、実験データの品質と検証記載の精度を高めて、恒久的に持続可能な蛋白質構造データバンクを実現する計画である。特に NMR と電子顕微

鏡による立体構造情報の検証システムの組込みを、現在 wwPDB として進めている。

今後のデータサイエンスの推進において、基礎となるデータの検証と品質管理が極めて重要な課題として認識されている。wwPDB では、データ生産を行う専門家によるデータ検証のための国際的なタスクフォースを組織し、その提言に基づいて構造データに対する検証レポート(Validation Report)の自動生成と公開を行ってきた。しかし、現状の検証レポートは人間が眺めるための PDF 版とその元となっている XML 版のみしか存在していない。2017 年度から追加する新たな PDBj の研究開発事業として、上記した検証レポートおよび今後拡充される予定の NMR、電子顕微鏡とそれらのハイブリッドによる構造の検証レポートの RDF 化とその応用を実施し、利用者がゲノム等の他のデータベースとの統合的な利用の際に活用できるよう、以下を実施する。

1. 検証レポートの各項目の辞書を確立し、RDF 化した検証レポートを構築
2. 検証レポート中の特定の項目(信頼度の値、カテゴリ等)が検索できる仕組みの構築
3. データの信頼度を 3D 可視化するための Molmil のプラグインによる構造上へのマッピング
4. 検証レポート中のグラフを動的に拡大し、プロット上でリンクを作る仕組みの構築
5. 検証に用いたプログラム類へのリンク情報の整理
6. wwPDB/RDF & SIFTS/RDF と組み合わせ、ある UniProt エントリーを含む PDB エントリーから一定の基準で選択する

## 2) 他のデータベースとの統合化および高度化

### 2-1) CSD データベースとの統合化

PDB には蛋白質ポリペプチド鎖の原子座標のみが含まれている訳ではない。PDB データの実に 75%近くが非蛋白質分子、すなわち「リガンド化合物」を含んでいる。この PDB に含まれるリガンド化合物の原子座標は、構造化学的に精度が低いものがあり、実験的に得られた電子密度マップとの整合性の点で信頼度の低い構造も含まれている。現在では、登録時に **Ligand Validation** を行い、データ提供者がリガンド化合物の化学組成や構造化学情報(立体配座やキラル位置)、結合情報(単結合や二重結合の位置)の確認と入力を行っている。これら PDB に含まれるリガンド化合物の情報は、**Chemical Reference Data** として wwPDB の ftp サイトに別ファイルとして収納されているが、一般ユーザには決して利用しやすい形態とはなっていない。

PDB とは別に、低分子化合物の結晶構造データベースである CSD には、850,000 件を超える原子座標が **metadata** つきで収録されている。2017 年度から行う PDBj の新規事業として、**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 と緊密に連携をとることで CSD をベースとした検索、PDB をベースとした検索の両方で有効に情報を共有できる利用者の立場で活用しやすい環境を整備する。CSD との統合化プロジェクトは、CSD を作成している **The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)** と連携して進める。

### 2-2) ASH の高度化

アラインメントと分子系統樹を入力として、分子系統樹に基づいて 10~30 程度のクラスタを自動同定し、各クラスタに対応するアラインメントのコンセンサス配列を表示する。系統樹もク

クラスタ間の系統関係として粗視化して表示し、ノードのクリックにより系統樹の展開/圧縮ができ、それに伴ってコンセンサス配列も再構築されるようにする。また、クラスタに含まれる配列や構造について、由来する生物の情報や機能の情報を要約して表示できるようにする。さらにクラスタを指定することで、機能部位やクラスタ間の機能差に関連するサイトを推定し、その結果をコンセンサス配列上で表示して、グラフィクスを使って立体構造上にも反映する。蛋白質の情報については、注釈行に含まれる情報に加えて RDF 化された種々のデータベースからネットを介して情報を集取できるようにする。

アラインメントは FASTA 形式、あるいは clustal 形式に対応するファイルを読み込めるようにする。また、分子系統樹は Newick 形式のファイルを読み込めるようにする。ビューアは Java で開発する。JavaFX と Java2D を使ってビューアを開発する。プログラム内部でのデータベースの取り扱いには、JDBC を使って SQLite で処理する。RDF データの検索には Jena を使って SPARQL エンドポイントにアクセスする。立体構造の表示には PDBj で開発された Molmil を使用する。機能解析には、これまで行ってきた保存度や変異度に基づく解析に加え、Kullback-Leibler 情報量や相対 von Neumann entropy を利用したパラログ間の機能差を決定する手法も導入する。

まずビューアの基本となるアラインメントと系統樹の入力部分と、その表示部分を作成する。順次、クラスタの情報要約、機能解析、立体構造へのマッピング、RDF 化されたデータベースの検索と得られた情報のアラインメントや構造へのマッピングなどの機能を付け加えていく。

### 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

蛋白質立体構造データからしか得られない情報として、分子内及び分子間の原子レベルないし残基レベルの相互作用情報がある。これらは原子座標として既に PDB のデータに含まれているが、原子座標の値そのものは構造決定実験の座標系に依存するため意味がない。座標系に依存しない相互作用情報の記述法として、残基間ないし原子間コンタクトをリストアップすることが考えられる。そこでまず、分子内コンタクト及び分子間コンタクトをデータベース化し、既に運用されている PDBj Mine に統合・公開する。さらにこのコンタクトの情報を適切なオントロジーを付して RDF として公開することにより、核酸配列を含む様々なアノテーションリソースと統合できるようにする。これにより、例えばゲノム上の変異が蛋白質の安定性やリガンドとの相互作用に及ぼす影響などを解析する際に必要なリンク情報が容易に取得できるようになる。

### 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 研究においては特殊同位体ラベル、超高速マジック角試料回転、1.2GHz 超高磁場マグネット、DNP 感度増大法、細胞内 NMR、非線形サンプリング法による多次元 NMR などの測定解析技術、複数の構造解析法を組み合わせたハイブリッド解析法など多くの技術革新が芽生えつつある。第一年次、二年次には、これら多様化が予想される登録データの科学的意味を喪失することなく machine readable な形式として高品質な情報として電子化し、データベースとして公開していく。実験データの直感的な参照を行うための UI の充実、特にデータ品質に関わるパラメータを可視化する WEB ツールの開発を行う。アクセスログの解析などからユーザのトレンドを解析し、UI をより洗練され持続性の高いデータベース、WEB ツールとして最終年度まで開発を行う。

### 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

従来は、アカデミアのデータ提供者およびデータ利用者との連携を中心に実施してきたが、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。この状況に対応するため、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」のメンバーに企業研究者に入っていただき、企業からの要望等を集めて緊密な連携体制をとる。

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、2016年までと同様に All-in-one 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。

一方、これまでも参加してきたサイエンス・アゴラの活動等、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

PDB および BMRB のデータベース構築・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特殊な知識および経験が必要であるが、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恐れがある。問題点を先取りして対応するため、新たにアノテータ候補を非常勤として雇用し育成を図っておく必要がある。

2020 年頃には、現状の構造データの生産・利用状況から、中国の PDB China (PDBc) およびインドの PDB India (PDBi) が、wwPDB のフランチャイズに加わることが想定されており、アジア圏を代表している我々 PDBj は、積極的にこれらの組織を支援し、それら新たな組織におけるアノテータの育成に協力して、グローバルなデータベース活動に拡充していく。

### 3年間の達成目標

達成目標	タスク
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	<ul style="list-style-type: none"><li>• wwPDB の欧米メンバーと協力して、厳しい品質管理を行いつつ、増加する立体構造情報を登録・検証・公開する</li><li>• 勃興する EM 構造を中心に検証レポートの高度化を進める。</li><li>• 全 PDB データの検証レポートの XML 化、RDF 化を行うツールを wwPDB の国際的な協力関係においてプロトタイプを開発し、RDF 化を進める。</li><li>• CSD データベースとの統合化を進める</li><li>• 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を進める。</li></ul>
NMR 構造、EM 構造の品質検証の国際標準化	<ul style="list-style-type: none"><li>• wwPDB との国際的な協議により標準化を進め、On eDep 次期バージョンへの搭載を協力していく</li></ul>
ASHviewer の基本となる機能を Java で構築する。	<ul style="list-style-type: none"><li>• アラインメントと系統樹の入力機能の実装</li><li>• クラスタ化に基づく可視化機能の実装</li></ul>



達成目標	タスク
	<ul style="list-style-type: none"> <li>・クラスタの展開、圧縮、要約機能の実装</li> <li>・アラインメントからの機能部位推測機能と、その結果の立体構造への反映機能の実装</li> </ul>
データベースの利用促進・人材育成・国際連携	<ul style="list-style-type: none"> <li>・利用者・研究者コミュニティとの連携を進める。</li> <li>・アノテータを継続的に育成する</li> <li>・中国、インドを中心に国際連携を進める</li> </ul>

## (2) 期間中に追加・削除・変更した実施計画・達成目標

- ・開発項目「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」のタスクのうち、『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を進める』については、実施担当者の異動があり当初計画から1年程度の計画の遅れが発生した。後任を設定し、令和1年中にそのバックアップを行った。
- ・開発項目「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」のタスクのうち、『全 PDB データの検証レポートの XML 化、RDF 化を行うツールを wwPDB の国際的な協力関係においてプロトタイプを開発し、RDF 化を進める。』については、先行するX線結晶構造解析のデータについては当初計画よりも早く RDF 化を進めることができた。平成 31 年度(令和1年度)に追加支援をいただいて SPARQL 検索を平易な文章で利用できるような改良を進めている。

## 3. 実施内容

### (1) 実施内容

#### 1) 国際組織 wwPDB メンバーとしての PDB アーカイブの構築・データ検証・公開

新プロジェクト開始後も引き続き、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(見学、張、佐藤、金、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、平成 29、30 年度の合計で PDB と BMRB を合わせて 6291 件を PDB j から新規登録した。これは全世界の登録の約 24%に相当する<sup>6)</sup>。データ検証レポートの活用に関しては、クライオ電子顕微鏡(Cryo-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確立することに重点を置いた。具体的には、wwPDB のパートナーと協力して Cryo-EM validation task force を組織して専門家からの意見収



図 1. wwPDB 運営諮問会議

(上) 2018 年英国 (下) 2019 年大阪

集に注力した(平成 31 年 1 月に英国 EBI における第一回会議に参加、令和 2 年 1 月にも同所で第二回会議を開催予定である。PDBj からは東京大学、大阪大学、北京大学、上海蛋白質科学センター、シンガポール国立大学の専門家を派遣)。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(横地、池川)。PDB データのうちX線結晶解析のデータについて、品質管理のための検証レポートのセマンティック対応を進めた(横地)。先行して X 線結晶構造解析の検証レポートを RDF 化し、他の wwPDB メンバーと dictionary の整合を確認した。今年度前半に PDBj-Mine2 への実装が完了し、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(Bekker、山下)。

平成 30 年 11 月に wwPDB 運営諮問会議を英国 Cambridge において開催し、引き続き OneDep システムの高度化を進め<sup>4)</sup>、新たに BMRBdep を導入して登録システムの更なる効率化を進めていくこととした(図 1 上)。令和 1 年 10 月に大阪大学で開催した wwPDB 運営諮問会議では、OneDep と BMRBdep とのより一層の連携が諮問された(図1下)。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うなぎ登りに増えている。wwPDB では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を立てて 2020 年 4 月に新しい MoU として公開する予定である。

## 2) 他のデータベースとの統合化および高度化

### 2-1) 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「非公開部分(完成するまで公開しない)」

#### 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した。セキュリティおよびサーバ稼働状況の監視システムの運用を開始した(小林、岩田)。米 Madison-Wisconsin 大学を中心とした wwPDB メンバーで新しい登録システム(BMRBdep)を共同開発することにより、作業時間を現在より大幅に短縮できた。現在は、OneDep と BMRBdep の連携モジュールの開発を進めている(横地)。PDB アーカイブと同様に BMRB もデータの検証ファイルの作成と活用が非常に重要となってきた。NMR 構造座標、実験データとの整合性に関する検証ツールを wwPDB との協力を通じて開発し、データ検証レポート(validation report)を作成して、その内容の充実を進めた(横地)。X線、NMR、Cryo-EM ともに構造解析ツールから

直接データベースにデータ登録できるパイプラインの開発が急務である。それによりアノテーションの効率が著しく向上することが期待されるからである。PDBj では BMRB データベースを活用した自動解析支援ツール(NMR Tool Box)の最新版を公開した。

### 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」を平成 30 年 2 月 28 日と平成 31 年 2 月 5 日に開催し、企業を含めたユーザからの要望や意見交換を行った。第1年次に利用促進の呼び水となるよう行った研究成果を効果的に発信し、生物工学会に参加するなどして代謝工学やシステム生物学の研究者と意見交換を行った。利用者・研究者向けのセミナーや講習会については、毎年テーマを変えて開催しており(平成 30 年 2 月 20 日は検索利用について、平成 31 年 2 月 19 日は NMR 構造解析について)ユーザーの利用促進や人材育成に役立っている。

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て、毎年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では第一年次に DDBJ と協力してランチョンセミナーを開催し、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毎年開催して、利用者の声をアンケートの形で集めて、PDB j Mine2 や web に利用者の声を反映した改修を施している。

#### 3-2) アノテータの育成・国際協力

2017 年から新しいアノテータを雇用していたが、出産・育児にともない残念ながら自己都合退職された。その後も、新しいアノテータを育成するべく、適任者のリクルートを継続している。2019 年 10 月に大阪で開催した wwPDB の運営諮問会議では、PDB China と PDB India 設立を計画しているグループをそれぞれ大阪に招き、wwPDB の枠組みで中国とインドに PDB の拠点を設立する具体的な手順や環境整備について議論を行った。2020 年中に特に PDB China がデータ処理を開始できるよう、PDBj が中心となって人材育成に協力する予定である。

#### (2) 「対象とするデータベース条件」のうち採択時に未達成であった項目の対応状況

該当しない

#### (3) 統合化推進プログラムの他のチームや DBCLS との連携

統合化推進プログラムの木下チームと連携して、糖鎖構造を含む PDB データの改修プロジェクトで連携を進めている。木下チームの山田一作研究員に、PDBj の consultant に就任していただき、wwPDB の糖鎖構造 remediation に専門家として意見をいただいている。

栗栖チーム、藤チームとも DBCLS の山口敦子准教授の協力の下で、RDF 化したデータの利用に関する共同研究を行っている。

## §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	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度 (9月末時点)
ユニーク IP 数	43,915	44,811	46,651	58,551
ページ数	1,439,400	1,419,731	2,073,618	1,926,928

#### (2) 分析

訪問者数、ページ数ともに 2018 年度に 46%以上増加した。本プロジェクト開始以降、欧米のパートナーサイトと全く同一コンテンツを提供していることを前面に押し出して、PDBj の利用を宣伝している。毎年出展している日本結晶学会、日本蛋白質科学会、日本生物物理学会、生命医薬情報学連合大会以外に、2017 年は日本薬学会、日本生物工学会においてアピールに努めたこと、2019 年 1 月に *Nucleic Acids Research* 誌へ wwPDB partnership に基づいた PDB の現状と運営方針を記した Primary citation となる関連論文を掲載したことが影響したと思われる。

#### 2. その他

wwPDB では各パートナーサイトは全く同一のデータを ftp サイトにて提供していることを鑑みて、ftp のダウンロード数については、wwPDB 各パートナーサイトの合計数で発表する方針に変更した(図4上)。

実際の wwPDB ブランドの ftp サイト(ftp://ftp.wwpdb.org)は米国 RCSB PDB の UCSD サイトに物理的に存在する。また、各 Journal からのリンク先として、wwPDB ブランドの DOI landing page を共同で準備して 2019 年 10 月から提供を開始した(図4下:これまでは米国サイトにリンクされていた)。

## PDB Core Archive Downloads

Year	Total	Total FTP Archive	Total Website
2018	749,356,769*	N/A	N/A
2017	679,421,200	454,723,083	224,698,117
2016	591,876,087	366,677,897	225,198,190
2015	534,339,871	368,244,766	166,095,105
2014	512,227,251	339,193,721	173,033,530
2013	441,262,210	296,176,290	145,085,920
2012	376,944,070	255,837,735	121,106,335
2011	383,131,048	276,952,286	106,178,762
2010	294,326,976	213,180,966	81,146,010
2009	328,362,536	271,116,934	57,245,602

More than 2 million/day!

N.B.: Some 2018 data estimated due to GDPR. Hope to be on track for 2019→.



## wwPDB DOI Resolution

- PDB ID with DOI  
10.2210/pdb5AT1/  
pdb
- Redirect→wwPDB  
landing page via  
CrossRef (doi.org)
- Provides access to  
all data files and  
websites.
- Communication  
plan with journals  
under development

**PDB entry - 5AT1** (Status - Released)

Summary Information

**Title:** STRUCTURAL CONSEQUENCES OF EFFECTOR BINDING TO THE T STATE OF ASPARTATE CARBAMOYLTRANSFERASE. CRYSTAL STRUCTURES OF THE UNLIGATED AND ATP- AND CTP-COMPLEXED ENZYMES AT 2.6-ANGSTROMS RESOLUTION

**DOI:** 10.2210/pdb5at1.pdb

**Primary publication DOI:** 10.1021/b004856019

**Entry authors:** R.C. Stevens, J.E. Geisul, W.N. Lipscomb

**Initial deposition on:** 1 January 1990

**Initial release on:** 10 October 1990

**Latest revision on:** 13 July 2011

**Latest revision number:** 1.3

Downloads:

- Structure coordinates (PDB/mmCIF)
- Structure coordinates (PDBML)
- Structure coordinates (PDB)
- Structure coordinates (RDF)
- X-ray diffraction data (PDB/mmCIF)
- Validation report (PDF)

Links to more resources for 5AT1 at:

[PDBj](#) [PDB](#) [PDBe](#)

Download Archive

RCSB PDB | PDB-Id | PDBj | PDB | PDB Instructions

Archive Snapshots

RCSB PDB | PDBj

Core Seal

View wwPDB: [Nature Structural Biology](#) 10, 880 (2003)  
doi: 10.1038/987033892  
More publications

wwPDB Foundation

図4. wwPDB 全体での ftp ダウンロード数と DOI landing page

## §5. 今後の展開

【研究開発終了後、残された課題や取り組みたい研究開発等】

PDB を活用した創薬研究は既に確立した手法となっている。しかし、一般には PDB や関連する BMRB データの品質には大きなばらつきがある。特に結合しているリガンド化合物については、品質のばらつきが大きく、創薬研究の成否を大きく左右するレベルにある(蛋白質部分は高分解能で解析されていても、化合物部分の精度が著しく低いなど)。本研究プロジェクトにより、これまで解像度(分解能)にのみ依存してきたデータ選別基準が、より具体的な目標化合物に着目した基準に置き換わり、かつ、機械的に選別できるようになることは大変有益である。本研究開発課題終了後には、現在の品質管理方針に一層踏み込んで、既存の古いデータをどのように高品質に update していき、データベース全体の品質を向上させていくのかについても取り組んでいきたいと考えている。

【将来的に想定される生命科学分野、その他の研究分野、産業に対する波及効果、科学技術イノベーションへの貢献】

クライオ電子顕微鏡の急速な発展により、オルガネラレベル、細胞レベルの構造情報の分解能が著しく向上している。クライオトモグラフィーとよばれる手法で集められた細胞やオルガネラの 3D イメージは蛋白質粒子を判定できるレベルになり、PDB がもつ原子レベルの構造情報と組み合わせることで、非常に有用な構造情報となりうる可能性を秘めている。急速に発展する高分解能イメージング技術とうまく連携することで、分子細胞生物学などの研究分野や、製薬業界(創薬科学分野)に大きなインパクトを与えると確信している。欧米を中心に、細胞イメージングセンターや、それに準ずるデータセンターの設置が進むが、PDBj も日本国内で同様のセンターの設置・運用に積極的に協力していきたいと考えている。

## §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】

平成 31 年 1 月の旧正月前に、中国から大量のデータ登録があり、PDBj のデータ処理能力を超えていると判断せざるを得ない状況に陥った。急遽、以前にアノデータをしていた方に協力をお願いして事なきを得たが、OneDep 登録・評価システムのより一層の効率化と、余裕のある人員での運用が、安定で信頼性のあるデータベース運用の根幹であることを実感した。wwPDB の各パートナーサイトとの連携、個別タスクの進捗管理、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、DBBj 有田代表)も行っており、100 点満点とはいかないが、なんとか合格点で 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】

『わが国の生命科学研究等によって産出された研究データを広く収集するデータベースを対象とし、より多くの多様な研究者にとってより価値のあるものへと発展させる研究開発を推進』という点では、PDBj は 100%の貢献ができていると自負している。

『他に開発されているデータベースとの連携・統合化とそれに必要な技術開発』の観点では、DBCLS や NBDC との連携を深めて、より目に見える形での貢献ができるはずであるが、resource が不足しており少し物足りないと感じる。本プログラムの後半では、より一層の連携を進めて、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。

『研究者コミュニティ、食品業界、製薬業界などの産業コミュニティとの緊密な連携』の観点では、産業界との連携がやや手薄であり、もっと緊密な共同研究ができるのではないかと考えている。実際、PDBj で行っているデータの厳しい品質管理については、産業界がフォローしにくい項目であり、社内にねむる数多くの unpublished データを PDB と同じ品質基準で産業界が整理・アーカイブすることは難しくなっている。産業界とのコミュニケーションをより一層深めていき、データの品質管理の領域で、産業界と協力できるようになりたいと考えている。

## §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)	1 件
	国際(欧文)	6 件
未発行論文 (accepted, in press 等)	国内(和文)	1 件
	国際(欧文)	1 件

#### (2) 論文詳細情報

1. Schober D, Jacob D, Wilson M, Cruz JA, Marcu A, Grant JR, Moing A, Deborde C, de Figueiredo LF, Haug K, Rocca-Serra P, Easton J, Ebbels TMD, Hao J, Ludwig C, Gunther UL, Rosato A, Klein MS, Lewis IA, Luchinat C, Jones AR, Grauslys A, Larralde M, Yokochi M, Kobayashi N, Porzel A, Griffin JL, Viant MR, Wishart DS, Steinbeck C, Salek RM, Neumann S. “nmrML: A Community Supported Open Data Standard for the Description, Storage, and Exchange of NMR Data”, *Analytical Chemistry*. Vol. 90, No.1, pp.649-656, 2017 (DOI: 10.1021/acs.analchem.7b02795)
2. Akira R. Kinjo, Gert-Jan Bekker, Hiroshi Wako, Shigeru Endo, Yuko Tsuchiya, Hiromu Sato, Hafumi Nishi, Kengo Kinoshita, Hirofumi Suzuki, Takeshi Kawabata, Masashi Yokochi, Takeshi Iwata, Naohiro Kobayashi, Toshimichi Fujiwara, Genji Kurisu, Haruki Nakamura, “New tools and functions in data-out activities at Protein Data Bank Japan (PDBj)”, *Protein Science*, vol. 27, No. 1, pp.95-102, 2017 (DOI: 10.1002/pro.3273).
3. Gore S, García ES, Hendrickx PMS, Gutmanas A, Westbrook JD, Yang H, Feng Z, Baskaran K, Berrisford JM, Conroy M, Hudson BP, Ikegawa Y, Kobayashi N, Lawson CL, Mading S, Mak L, Mukhopadhyay A, Oldfield TJ, Patwardhan A, Peisach E, Sahni GS, Sekharan MR, Sen S, Shao C, Smart OS, Ulrich EL, Yamashita R, Quesada M, Young JY, Nakamura H, Markley JL, Berman HM, Burley SK, Velankar S, Kleywegt GJ, “Validation of the Structures in the Protein Data Bank”, *Structure*, Vol. 25, pp.1916-27. 2017 (DOI: 10.1016/j.str.2017.10.009)
4. Young JY, Westbrook JD, Feng Z, Peisach E, Persikova I, Sala R, Sen S, Berrisford JM, Swaminathan GJ, Oldfield TJ, Gutmanas A, Igarashi R, Armstrong DR, Baskaran K, Chen L, Chen M, Clark AR, Di Castanzo L, Dimitropoulos D, Gao G, Ghosh S, Gore S, Guranovic V, Hendrickx PMS, Hudson BP, Ikegawa Y, Kengaku Y, Lawson CL, Liang Y, Mak L, Mukhopadhyay A, Narayanan B, Nishiyama K, Patwardhan A, Sahni G, Sanz-García E, Sato J, Sekharan MR, Shao C, Smart OS, Tan L, van Ginkel G, Yang H, Zhuravleva MA, Markley JL, Nakamura H, Kurisu G, Kleywegt GJ, Velankar S, Berman HM, Burley SK. “Worldwide Protein Data Bank biocuration supporting open access to high-quality 3D structural biology data”, *Database (Oxford)*, Jan 1, 2018 (DOI:10.1093/database/bay002)
5. Burley SK, Kurisu G, Markley JL, Nakamura H, Velankar S, Berman HM, Sali A,



- Schwede T, Trewhella J. PDB-Dev: a Prototype System for Depositing Integrative/Hybrid Structural Models. *Structure*, 2017, 25, 1317-1318, (doi: 10.1016/j.str.2017.08.001).
6. wwPDB consortium, "Protein Data Bank: the single global archive for 3D macromolecular structure data", *Nucleic Acids Research*, vol. 47, No. D1, pp D520-528, 2019 (DOI: 10.1093/nar/gky949).
  7. Berman HM, Adams PD, Bonvin AA, Burley SK, Carragher B, Chiu W, DiMaio F, Ferrin TE, Gabanyi M, Griffin PR, Haas J, Hoch JC, Hummer G, Kurisu G, Lawson CL, Leitner A, Markley JL, Meiler J, Montelione GT, Phillips, Jr. GN, Prisner T, Rappasilber J, Schriemer DC, Schwede T, Seidel CAM, Svergun DI, Tajkhorshid E, Trewhella J, Vallat B, Velankar S, Vuister GW, Westbrook JD, White KL, Sali A. "FEDERATING STRUCTURAL MODELS AND DATA: OUTCOMES FROM A WORKSHOP ON THE ARCHIVING OF INTEGRATIVE STRUCTURES" *Structure*, accepted for publication

## 2. その他の著作物(総説、書籍など)

1. 中村春木, 栗栖源嗣, 「データサイエンスと日本蛋白質構造データバンク PDBj の活動」, *生物物理*, Vol. 58, No. 2, pp71-77, 2018年, DOI: 10.2142/biophys.58.071
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」, *日本結晶学誌*, 印刷中, DOI:10.5940/jcrsj.61.159

### 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	0 件
	国際	2 件
口頭発表	国内	24 件
	国際	2 件
ポスター発表	国内	10 件
	国際	2 件

#### (2) 招待講演

〈国内〉

なし

〈国際〉

1. Kurisu G, "Small molecule ligand/drug representation and validation in the Protein Data Bank", 24th International Union of Crystallography Congress, Hyderabad, 2017/8/22
2. Kurisu G, "Ligand representation and validation in the Protein Data Bank", International LifeScience Integration Workshop, Tokyo, 2018/3/6

#### (3) 口頭講演

〈国内〉

1. 栗栖 源嗣、Recent activities of PDBj and wwPDB (PDBj と wwPDB の最近の活動について)、第 17 回蛋白質科学会年会、仙台国際センター(宮城県仙台市)、2017(平成 29)年 6 月 22 日(木)
2. BEKKER Gert-Jan、Molmil: A versatile WebGL based molecular viewer(モル見る: WebGL を使用の多彩な分子ビューア)、第 17 回蛋白質科学会年会、仙台国際センター(宮城県仙台市)、2017(平成 29)年 6 月 22 日(木)
3. 小林 直宏、NMR database and analysis in AI generation(人工知能世代の NMR データベースと解析)、第 17 回蛋白質科学会年会、仙台国際センター(宮城県仙台市)、2017(平成 29)年 6 月 22 日(木)
4. 栗栖 源嗣、Recent activities of PDBj and wwPDB (PDBj と wwPDB の最近の活動について)、第 55 回 日本生物物理学会年会、熊本大学 黒髪北地区(熊本県熊本市)、2017(平成 29)年 09 月 21 日
5. 金城 玲、Querying the PDBj Mine2 relational database(PDBj Mine2 関係データベースを検索する)、第 55 回 日本生物物理学会年会、熊本大学 黒髪北地区(熊本県熊本市)、2017(平成 29)年 09 月 21 日
6. 鈴木 博文、Situation, utilization and visualization of cryo-EM structure data(クライオ電子顕微鏡データの現状、見方、使い方)、第 55 回 日本生物物理学会年会、熊本

- 大学 黒髪北地区(熊本県熊本市)、2017(平成 29)年 09 月 21 日
7. 栗栖 源嗣、PDBj と wwPDB の活動方針について、第 6 回 生命医薬情報学連合大会 (IIBMP2017)、北海道大学大学院情報科学研究科(北海道札幌市)、2017(平成 29)年 09 月 27 日
  8. 栗栖 源嗣、蛋白質構造データバンクのデータ検証高度化と統合化、トーゴの日シンポジウム 2017、東京大学弥生講堂一条ホール アネックス(東京都文京区)、2017(平成 29)年 10 月 05 日
  9. 栗栖 源嗣、PDBj と wwPDB の活動方針について(Recent activities of PDBj and wwPDB)、平成 29 年度 日本結晶学会年会、JMS アステールプラザ(広島県広島市)、2017(平成 29)年 11 月 24 日(金)
  10. 中川 敦史、Protein Data Bank の新しい登録システムと構造評価ツール(New deposition system and a validation tool of Protein Data Bank)、平成 29 年度 日本結晶学会年会、JMS アステールプラザ(広島県広島市)、2017(平成 29)年 11 月 24 日(金)
  11. 鈴木 博文、Protein Data Bank Japan (PDBj)、ConBio2017(2017 年度生命科学系学会合同年次大会)、神戸ポートピアホテル(兵庫県神戸市)、2017(平成 29)年 12 月 09 日
  12. 栗栖 源嗣、PDBj と wwPDB の活動方針について、日本薬学会第 138 年会、ホテル金沢(石川県金沢市)、2018(平成 30)年 03 月 27 日
  13. 小林 直宏、PDB と BMRB: データベースの高度化と機械学習への応用(PDB and BMRB: Innovation of database and application to machine learning)、第 18 回 日本蛋白質科学会年会、2018(平成 30)年 06 月 28 日
  14. 横地 政志、wwPDB 検証レポートの活用法(Making full use of the wwPDB validation reports)、第 56 回 日本生物物理学会年会、岡山大学 津島キャンパス(岡山県岡山市)、2018(平成 30)年 09 月 16 日
  15. BEKKER Gert-Jan、Introduction to PDBj services for searching and exploring the PDB、第 7 回 生命医薬情報学連合大会(IIBMP2018)、荘銀タクト鶴岡(鶴岡市文化会館、山形県鶴岡市)、2018(平成 30)年 09 月 20 日
  16. 栗栖 源嗣、PDBj と wwPDB の最近の活動について、第 7 回 生命医薬情報学連合大会(IIBMP2018)、荘銀タクト鶴岡(鶴岡市文化会館、山形県鶴岡市)、2018(平成 30)年 09 月 20 日
  17. 栗栖 源嗣、蛋白質構造データバンクのデータ検証高度化・統合化と創薬研究、トーゴの日シンポジウム 2018、日本科学未来館(東京都江東区)、2018(平成 30)年 10 月 05 日
  18. 2018 年度 日本結晶学会年会、東京工業大学 大岡山キャンパス(東京都目黒区)、2018(平成 30)年 11 月 10 日、
  19. 栗栖 源嗣、「PDBj と wwPDB の今後の活動方針について」(Activity plan of PDBj and wwPDB)、第 19 回 日本蛋白質科学会年会、神戸国際会議場(兵庫県神戸市)、2019(令和元)年 06 月 26 日
  20. 横地 政志、「wwPDB 検証レポートの利用法と PDB/BMRB 登録システムの紹介」(Introduction of PDB/BMRB deposition system along with usage of wwPDB validation reports)

- on reports)、第 19 回 日本蛋白質科学会年会、神戸国際会議場(兵庫県神戸市)、2019(令和元)年 06 月 26 日
21. 横地 政志、PDB 検証レポートを利用した PDBj 検索サービスの紹介、第 8 回生命医薬情報学連合大会(IIBMP2019)、東京工業大学 大岡山キャンパス くらまえホール(東京都目黒区)、2019(令和元)年 09 月 10 日
  22. 栗栖 源嗣、「PDBj と wwPDB の今後の活動方針について」(Recent activities of PDBj and wwPDB)、第 57 回 日本生物物理学会年会、シーガイア コンベンションセンター(宮崎県宮崎市)、2019(令和元)年 09 月 24 日
  23. BEKKER Gert-Jan、「構造データを編集するための新ツールについて」(New tools for editing and annotating structural data)、第 57 回 日本生物物理学会年会、シーガイア コンベンションセンター(宮崎県宮崎市)、2019(令和元)年 09 月 24 日
  24. 工藤 高裕・横地 政志、PDBj Mine(PDB 検索サービス)の紹介、トーゴの日シンポジウム 2019、日本科学未来館(東京都江東区)、2019(令和元)年 10 月 05 日

〈国際〉

1. Kurisu G., “The Protein Data Bank Japan (PDBj): A Partner of the wwPDB Accepting Structure Depositions through One Dep System”, International Symposium on Establishment of Structural Biology Network in Asia and Oceania, 新竹・台湾, 2017/12/6-7
2. Yamaguchi, A., Toh, H. “Implementing LOD Surfer as a search system for the annotation of multiple protein sequence alignment”. JIST 2018:The 8<sup>th</sup> Joint International Semantic Technology Conference, 淡路・日本, 2018/11/27

**(4) ポスター発表**

〈国内〉

1. 藤 博幸、ASH Viewer の開発、トーゴの日シンポジウム 2017、東京大学弥生講堂一条ホール アネックス(東京都文京区)、2017(平成 29)年 10 月 4 日(水)、5 日(木)
2. 栗栖 源嗣、蛋白質構造データバンク(PDBj)の検証高度化と統合化、トーゴの日シンポジウム 2017、東京大学弥生講堂一条ホール アネックス(東京都文京区)、2017(平成 29)年 10 月 4 日(水)、5 日(木)
3. 小林 直宏、PDBj-BMRB における統合化データベースの取り組み:高度な WEB 検索表示機能への応用、トーゴの日シンポジウム 2017、東京大学弥生講堂一条ホール アネックス(東京都文京区)、2017(平成 29)年 10 月 4 日(水)、5 日(木)
4. 藤博幸, 山口敦子、工藤高祐、山下鈴子 Linked open data を利用するアラインメントビューアの開発 第 18 回蛋白質科学会年会, 朱鷺メッセ (新潟市), 2018(平成 30)年 6 月 26 日
5. 藤 博幸、Linked Open Data を利用するアラインメントビューアの開発、トーゴの日シンポジウム 2018、日本科学未来館(東京都江東区)、2018(平成 30)年 10 月 05 日
6. 横地 政志、PDB アーカイブの検証レポートの RDF 化、トーゴの日シンポジウム 2018、日本科学未来館(東京都江東区)、2018(平成 30)年 10 月 05 日

7. 小林 直宏、統合化された NMR データベース、BMRB と深層学習への応用、トーゴの日シンポジウム 2018、日本科学未来館(東京都江東区)、2018(平成 30)年 10 月 05 日
8. Yamaguchi, A., Toh, H. “Collecting Annotation of Proteins from Linked Open Data for Alignment Viewer”. 日本バイオインフォマティクス学会 2019 年年会 第 8 回生命医薬情報学連合大会、東京工業大学・大岡山キャンパス (東京都目黒区)、2019(令和元)年 09 月 10 日
9. 岩田 武史、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 2019、日本科学未来館(東京都江東区)、2019(令和元)年 10 月 05 日
10. 工藤 高裕、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 2019、日本科学未来館(東京都江東区)、2019(令和元)年 10 月 05 日

〈国際〉

1. Yamaguchi, A., Toh, H. “Annotation of Proteins from LOD for a Viewer of Multiple Protein Sequence Alignment”. 11th International Semantic Web Application and Tools for Health Care and Life Sciences Conference, Antwerp, Belgium. 2018/12/04
2. Toh, H., Yamaguchi, A. “Alignment Viewer with a Function to Collect Annotation of Proteins from LOD”. InCob2019, Jakarta, Indonesia. 2019/09/10.

**4. 知財出願**

該当なし

**5. 受賞・報道等**

該当なし

## §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	PDBj 開発者会議(非公開)	大阪大学(関西学院大学、早稲田大学からは Internet 参加)	9 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)	大阪大学(関西学院大学、早稲田大学からは Internet 参加)	14 人	同上
月末金曜日 14:00-15:00	PDBj-BMRB 技術者会議	大阪大学	6 人	同上
毎月不定期 21:00-23:00	wwPDB PIs 会議	Zoom にて開催	5 人	wwPDB の運営進捗に関する会議
毎週木曜日 22:00-23:00	OneDep Leader Team 会議	Zoom にて開催	11 人	データ登録システムの維持・運用のための会議
毎週金曜日 9:00-9:30	OneDep Developer 会議	Zoom にて開催	2 名	データ登録システムの共同開発に関する会議
毎週水曜日 22:00-23:00	Lead Annotator 会議	Zoom にて開催	4 名	データ登録システムに関する問題点・注意点を世界拠点で共有のための会議

### 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
2017(平成29)年04月30日	第 58 回 大阪大学いちよう祭 蛋白研イベント	大阪大学 蛋白質研究所 (大阪府吹田市)	66 人	一般の方を対象に蛋白質の分子を立体視、3D プリンタ造形モデル、VR などさまざまな方法を使って紹介する。
2018(平成30)年02月20日	大阪大学蛋白研セミナー / PDBj & BINDS 合同講習会	大阪大学 蛋白質研究所 (大阪府吹田市)	50 人	立体構造データの検索法、分子表示ソフトの使い方、ホモロジー・モデリングの方法などを、初心者にもわかりやすく説明する。また最近注目されているクライオ電子顕微鏡によ

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
				るデータの解説なども行う。
2018(平成30)年11月17日	大阪大学共創 DAY@EXPOCITY	ららぽーと EXPOCITY(大阪府吹田市)	700人	一般の方を対象に蛋白質の分子を立体視、3D プリンタ造形モデル、VR などさまざまな方法を使って紹介する。
2019(平成31)年02月19日	BINDS-PDBj 合同講習会「NMR による構造計算入門」	大阪大学 蛋白質研究所(大阪府吹田市)	10人	生体高分子の構造解析・運動解析に役立つ核磁気共鳴(NMR)分光法による構造決定の初心者を対象に、立体構造データベース PDB と NMR のデータベース BMRB の概説、NMR の計測原理の説明を行った後、実際に計算機を用いて、NMR データの自動解析プログラム(自動信号帰属、自動構造計算)を操作していただく実習を行う。
2019(令和元)年05月03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)	64人	一般の方を対象に蛋白質の分子を立体視、3D プリンタ造形モデル、VR などさまざまな方法を使って紹介する。
2019(令和元)年08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(大阪府大阪市)	360人	一般の方を対象に蛋白質の分子を立体視、3D プリンタ造形モデル、VR などさまざまな方法を使って紹介する。また構造解析手法(X線結晶解析、NMR、電子顕微鏡)についても解説する。
2019(令和元)年10月26日	さくらサイエンスプラン(日本・アジア青少年サイエンス交流事業) 関西学院大学・神戸三田キャンパス	関西学院大学・神戸三田キャンパス(兵庫県三田市)	17人	さくらサイエンスプランに参加しているインドネシアの学部学生を対象に「Introduction to Protein Bioinformatics」というタイトルで、天然ゴムの生成に関与すると考えられるパラゴムノキ由来の酵素について、BLAST による相同配列収集、MAFFT によるアラインメント、SWISS-MODEL によるホモ

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
				ロジモデリング、MOLMILによるモデル構造上での保存残基の表示の一連の解析の実習を行う。

以上