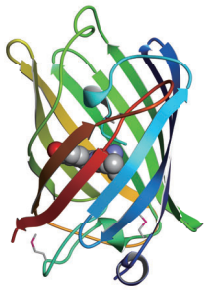
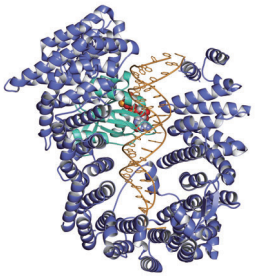
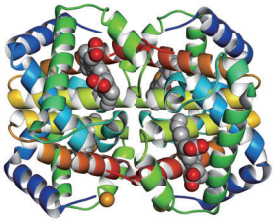



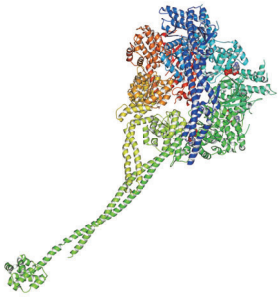
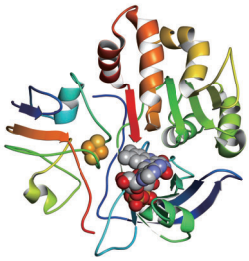
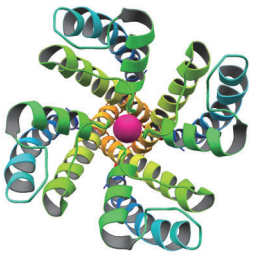
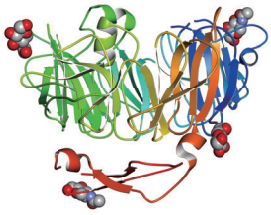
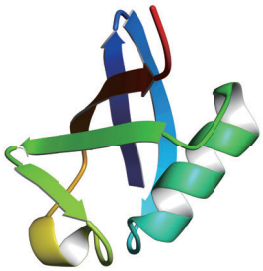
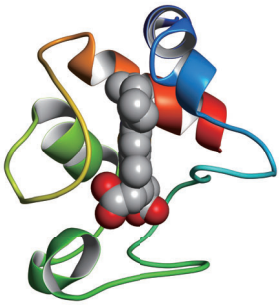
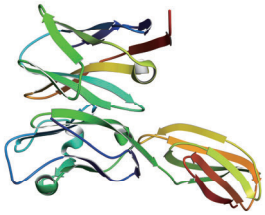
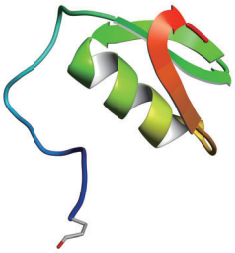
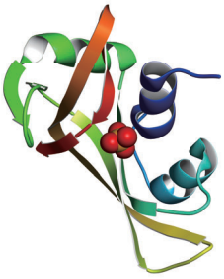
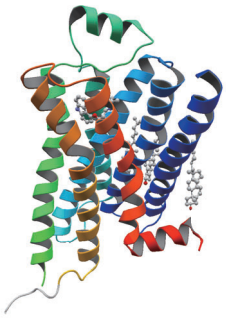
PDBj

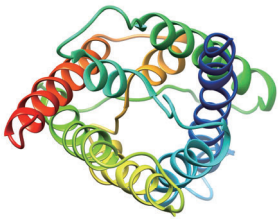
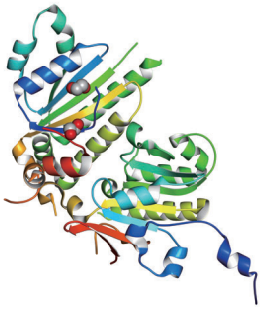
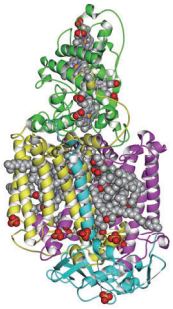
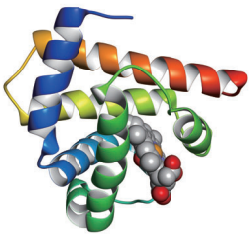
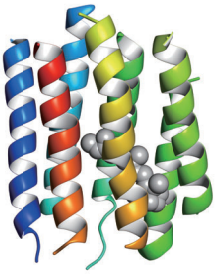
Newsletter

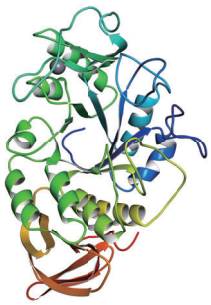
2020年3月

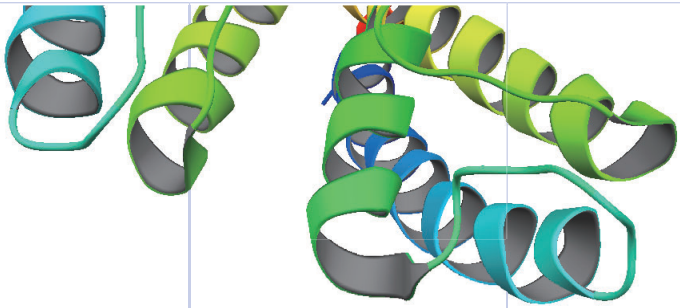
Vol.21







第16回 国際蛋白質構造データバンク諮問委員会の開催

第16回wwPDB
国際諮問委員会の参加者

国際蛋白質構造データバンク (wwPDB)では、国際諮問委員会（wwPDB Advisory Committee meeting）を4メンバー(米国RCSB-PDB/欧州PDBe/米国BMRB/日本PDBj)持ち回りで毎年開催しています。2019年、第16回目となる会議が10月18日に大阪大学蛋白質研究所で行われ、Peter Rosenthal博士（EM分野代表）が議長を務めました。

国際諮問委員会は、4メンバーの代表研究者, 各拠点から選ばれた委員（各2名）、結晶学分野(IUCr)、電子顕微鏡解析分野（EM）、NMR構造解析分野(ISMAR)の代表者（各1名）と、地域代表者として中国・インドからの准委員で構成されます。RCSB-PDB からは、Paul Adams 教授とKirk L. Clark 教授、PDBe からは、David Brown 教授とSusan Lea 教授、BMRB からは、甲斐荘正恒教授とArthur Edison 教授、EMDBからは、Sarah Butcher 教授とJuha Huiskonen 教授、PDBj からは、井上豪教授と山本雅貴教授が参加しました。他委員はGerard Kleywegt 教授（EBI）、Edward Baker教授（IUCr）、R. Andrew Byrd 教授(ISMAR)、Wenqing Xu 教授とZhipu Luo 教授（中国）、Debasisa Mohanty 教授（インド）です。

会議ではまず、PDBjの栗栖源嗣教授が、wwPDB新組織、wwPDBの今後の展望と使命、この1年間における開発・活動、各コアアーカイブ (PDB/BMRB/EMDB)の登録状況・ダウンロード数・公開数などの統計値、OneDep System改善の進捗状況や今後の具体的な目標について説明しました。

次に、wwPDBの准メンバーとなる、PDBc(PDB-China)のWenqing Xu教授とPDBi (PDB-India)のDebasisa Mohanty教授が、Data-in / Data-out およびスタッフの育成などについて、今後３年間の活動計画を説明しました。

午後よりPDBeのSameer Velankar教授が、PDBのコアアーカイブの今後、リガンドvalidationの改善、原子座標の置き換えによるversion管理システム、ORCiD（Open Researcher and Contributor ID）システムの利用、電子密度マップ係数の登録者への提供、旧登録システムによって登録されたエントリーのversion管理、糖鎖データの改善（矛盾の解消）についてそれぞれ作業の進捗と今後の計画を報告しました。また、各メンバーのFTPサイトについて説明があり、各メンバーが独自で付加しているデータは今後構築するβバージョンのFTPサイトでまとめて提供する計画についても説明されました。BMRBのJohn L. Markley教授からは、BMRBコアアーカイブ、NMR-STAR辞書の開発継続、NMRFAM、低分子用のBMRBdepのβバージョン公開についてなど今後の取り組みについて説明されました。また、2020年4月に代表研究者がJeffrey Hoch教授に代わることも合わせて報告されました。続いて、EMDBのArdan Patwardhan教授の代わりにEBIのGerard Kleywegt教授が、EMDBコアアーカイブ、EM validationの進捗、今後のmap segmentation dataの追加について説明しました。最後に、RCSB-PDBのStephen K. Burley 教授から、国際諮問委員会のメンバーに対していくつかの質問がなされ、議論の後にACメンバーか

次回のwwPDB 国際諮問委員会は、2020 年秋に、
米国Wisconsin-Madison大学にて、BMRB の主催により開催される予定です。

The Federation of Korean Societies for Molecular & Biomedical Sciences (FKSBS)

2020年1月9～11日の期間, 韓国光州市で開催された韓国生体分子科学連合学会において、李映昊教授（韓国基礎科学研究所）ご助力の下、学会期間中の1月10日にPDBjセミナーを開催しました。韓国でPDBjセミナーを開催するのは初でPDBjからは代表の栗栖と研究員の金が出席し、中川敦史教授（阪大）と伊藤暢聡教授（医科歯科大）が講演を行いました。本セミナーの主目的は、OneDep登録時の注意事項、Validation reportやVersioningなどの新しい編集方針、結晶構造解析法におけるPDBx/mmCIFフォーマットでの登録必須化について韓国の研究者にアナウンスすることです。Q&Aのコーナーでは、電子顕微鏡構造解析（3DEM）の登録や検証レポートを含めいくつかの疑問点について質問・コメントが寄せられました。PDBの活動は研究者コミュニティーとの信頼の上に成り立っていることを改めて感じました。最後にPDBjからの参加者を歓迎していただいた韓国の学会関係者の皆様に厚くお礼申し上げます。（栗栖源嗣）

PDBj

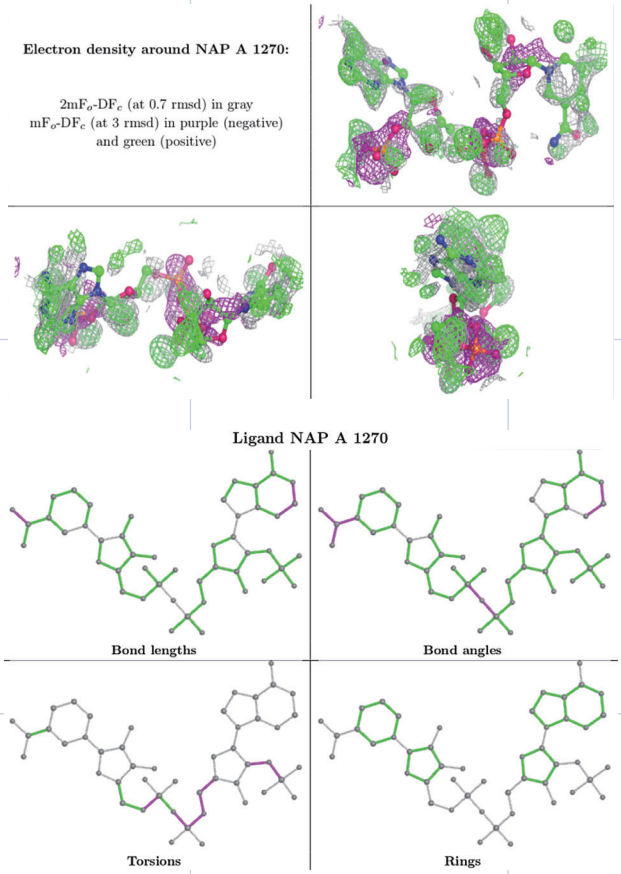
OneDep Topics

OneDepシステムの改善点

1 リガンドの検証結果と電子密度マップについて検証レポートを改良

2019.6

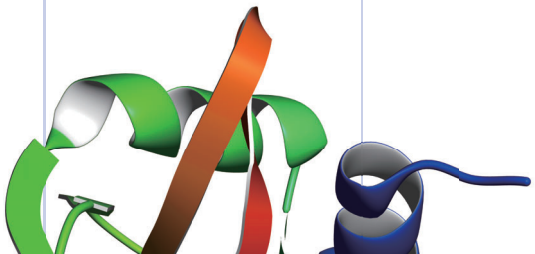
検証レポートの改良により、リガンドの検証情報が非常に明確になりました。リガンドの幾何学的な検証情報が追加されたことに加え、X線結晶構造のPDBエントリーに対しては、リガンドとその周辺の電子密度マップを表す画像が、wwPDBの検証レポートに追加表示されます。検証レポートのために生成された電子密度マップの係数(2mFo-DFc と mFo-DFc)は、新しいエントリーについては公開時に、既存エントリーについては今後PDBアーカイブに追加されます。



2 結晶構造の登録において、PDBx/mmCIFフォーマットファイルが必須になりました

2019.7

2019年7月1日より、中性子、繊維、電子線の各回折法を含む、高分子の結晶構造解析によるPDB構造の登録について、OneDepではPDBx/mmCIFフォーマットのみを受け付けることになりました。



3 PDB IDを変更せずに、公開済みのPDBエントリーの座標を改善できます

2019.8

PDBバージョニングシステムにより、公開済みPDBエントリーに対して、同じPDBアクセションコードを保持したまま座標の更新ができるようになりました。この更新は、2019年8月からOneDepシステムから登録されたPDBエントリーに対してのみ可能でしたが、2020年2月18日からは、レガシーシステム（ADITやAutodep等）で登録されたエントリーについても可能になりました。なお、このシステムでは、登録済みの実験データは変更できません。

4 PDBエントリーのDOI参照先を見直しました

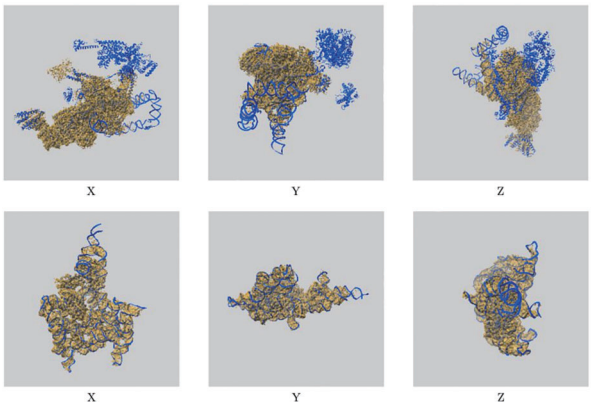
2019.10

各PDBエントリーのデジタルオブジェクト識別子（DOI）はこれまでPDBフォーマットファイルそのものを参照していましたが、新たに作成した概要ページを参照するよう変更しました。このページには、対応するエントリーの基本的な情報と、座標や実験データ、検証レポートをダウンロードできるwwPDB FTPサイトへのリンクを掲載しています。また、より詳細な情報を参照できるよう、wwPDBパートナーの各ウェブサイトへのリンクも張っています（例：https://doi.org/10.2210/pdb6l4p/pdb）。

5 OneDepにEMマップの検証機能を追加しました

2019.11

OneDepシステムで提供されるwwPDBの検証レポートに、電子顕微鏡法（EM）のマップの検証機能が追加され、データの不一致を確認しやすくなりました。PDB構造モデルとEMDBマップの重なり具合の解析が検証処理に含まれ、アミノ酸レベルでの残基プロパティプロット図や、マップとモデル全体を視覚的に重ね合わせた図で示されます。また、ハーフマップ又はFSCデータが登録された場合には、レポートにFSC曲線も表示され、登録者による分解能と検証ソフトによる分解能の値を比較することができます。



図の下段はEMマップと構造モデルの重なりが良い例

6 EMDBのポリシーと処理手順に関する文書を公開しました【2020年1月】

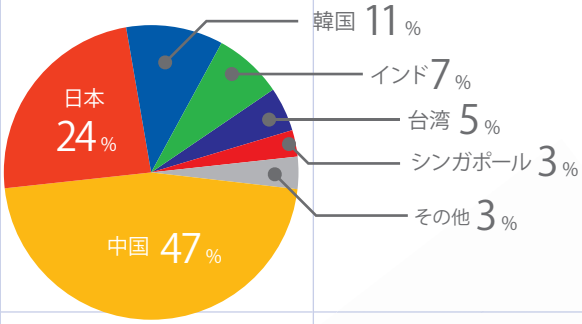
2020.1

EMDBデータに対する首尾一貫したルールを確認するため、EMDBチームは、アーカイブに対する包括的なポリシーと処理手順に関する文書を作成しました。データ登録の要件や受付可能なフォーマット、エントリーの修正や公開について書かれており、EMDBのウェブサイトから公開されています。

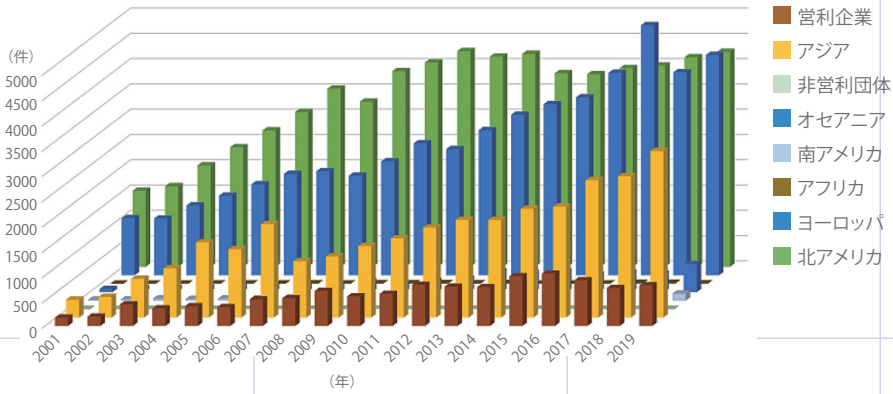
PDBj

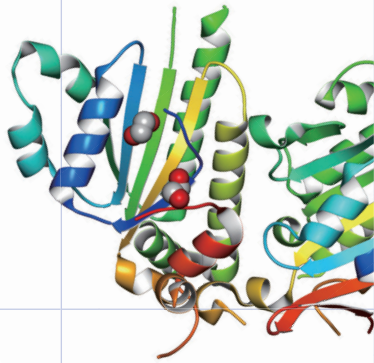
Data Growth

PDBjが処理したPDBエントリーの国・地域別分布



wwPDB全体での国・地域別、区分別PDB登録数





PDBj

BMRB Report

BMRB ACミーティングに参加、NMRデータ登録システムの更新

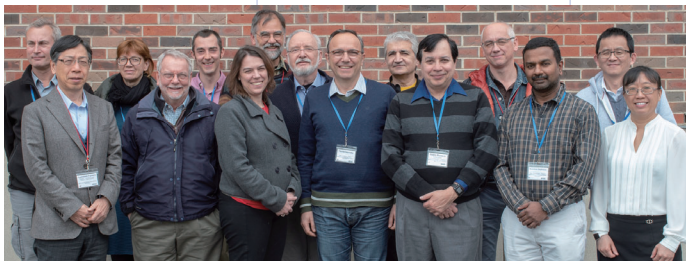
2019年3月30日、米ウィスコンシン大学マディソン校において開催されたBioMagResBank Advisory Committee (BMRB AC) に、PDBj-BMRBを代表して藤原敏道教授が参加しました [写真]。本会議では、新しいNMRデータ登録システムBMRBDepの紹介が行われました。ウィスコンシン大学は、既にBMRBDepによるNMRデータ受付を始めています。PDBj-BMRBも、2020年5月よりBMRBDepによるNMRデータ受付を始め、登録環境の大きな改善を図って参ります。

参考文献：doi: 10.1007/978-1-0716-0270-6_14

NMR-STARまたはNEF形式の単一ファイルによるOneDepデータ登録の開始

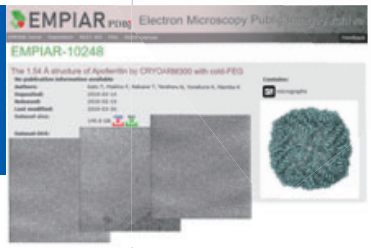
PDBj-BMRBは、wwPDBの登録受付システムOneDepの開発に協力しています。2020年3月から、OneDepシステムは、NMR-STARまたはNEF形式の単一ファイルでNMRデータのアップロードの受付けを開始します。NEFは、NMR構造決定において主流のソフトウェアがサポートしていて、異なる構造計算ソフトウェアの間でNMR実験データ交換が可能になります。またNMR実験データの保管や配布が簡単になるだけでなく、OneDep登録過程においても、NMRデータに関する豊富な検証情報の提供によって、NMRデータの質の向上、その再利用を促進することも期待されてます。

参考文献：doi: 10.1007/s10858-018-0220-3, doi: 10.1038/nsmb.3041



PDBj

EMPIAR-PDBj



電子顕微鏡で決定された3次元の原子モデルが数多くPDBに登録されるようになってきました。その元となる3次元密度マップデータはEMDBへ同時に登録されます。さらに、そのマップの基となる2次元の電顕画像データは、イギリスEBIのEMPIARというデータベースで収集・公開されています。公開された2D画像は、3次元密度マップの検証のほか、教材や新しい電顕画像処理法の開発などに活用できます。しかし、1つのマップに必要な2D画像は1セットで100GBから10 TBほどの大きさとなるため、その登録・配布を円滑に行うには、複数の拠点の設営が必要です。そこで、我々は、アジア地区のミラーサイトとして、EMPIAR-PDBj(https://empiar.pdbj.org)を2018年に立ち上げました。ファイル転送には、ftp、rsync以外に高速転送ソフトAsperaも使えます。また、EMPIARデータベースへの登録支援も行っています。ハードディスク自体を送るか阪大サーバまでデータ転送していただければ、こちらでイギリスの登録サイトまでの転送を代行します。この支援をご希望される方は、まず電子メールempiar-help@protein.osaka-u.ac.jpまでご相談ください。

PDBj

BSM-Arc

in silico構造生物学の分子構造アーカイブBSM-Arc

分子動力学法、ホモロジーモデリング法などの計算で得られた構造のデータベースBSM-Arc (Biological Structure Model Archive; https://bsma.pdbj.org)を開発・公開しました。論文で使われた理論計算モデルであれば、どなたでもデータを登録して公開することができます。

PDBj

Outreach 2019

PDBjは様々な機会に、ランチョンセミナーや講習会、企画展示を行い、
データベースの具体的な利用法やPDBの最新の活動について紹介しています。
一般向けのイベントにも積極的に参加し、タンパク質科学の普及に貢献しています。

PDBjでは、8/18（日）に「サイエンスフェスタ2019」（ハービスホール（大阪府大阪市））、11/30（土）に「大阪大学共創DAY@EXPOCITY」（ららぽーとEXPOCITY（大阪府吹田市））でそれぞれブースを出展しました。来場者は子供から大人まで幅広く、それぞれのイベントで300～400名ほどの方にお越しいただきました。また同様の内容を5/3（金）の「第60回 大阪大学いちょう祭 蛋白研イベント」、10/26（土）の「日本コンピュータ化学会2019秋季年会 一般公開イベント」（広島市立大学サテライトキャンパス（広島県広島市））でも出展しました。ブースで出展した内容は以下の通りです。

ペーパーモデル

紙を切ったり折ったり貼ったりして、タンパク質やDNAの分子をかたどったペーパーモデルをつくりました。この工作によって、たくさんのアミノ酸が連なった1本のひもが、コンパクトに折りたたまる仕組みを理解することができます。ペーパーモデルの型紙にはRCSB PDBの許諾を得て和訳した型紙と、PDBjで独自に作成した型紙があり、いずれもPDBj入門（PDBjの一般向けサービスページ https://numon.pdbj.org/）でPDFデータを提供しています。

3Dプリンタ出力モデル

3Dプリンタを使ってプラスチック製の分子立体模型をつくることができます。まずPDBに登録されている分子構造データを3Dプリンタオブジェクトファイル（STL）に変換します。データサイズとできる構造物の強度を考慮し、表面（surface）モデルで表現したものを出力するのが一般的です。小さな分子の場合は各原子を球で表現した空間充填表現（spacefill）を用いることもあります。このデータを3Dプリンタに入力して造形物の出力を行います。ただし、方式によっては出力後に支持棒を取り除くなどの整形作業が必要です。また分割して出力し、後で接着するなどの工夫が必要となる場合もあります。この3Dモデルを使って、酵素の活性部位にあるくぼみの形などの情報が薬の開発に役立っている事例などを紹介しました。

タンパク質分子の立体視

赤青立体視メガネと赤青立体視に対応した一般向けウェブサービス「万見プライム」（よろづみプライム）を使ってPDBに登録されているデータに親しんでいただき、さまざまな解説を行いました。万見プライムには分子の画像と簡単な説明があり、マウスや指操作で分子を回転したり拡大縮小したりすることができます。また、立体視モードに切り替えることもできます。

実験設備のAR体験

構造解析に用いられる蛋白質研究所の実験設備を360°カメラで撮影してつくったウェブサービスで、あたかも現場で設備を見学しているような体験をしていただきました。

○その他のアウトリーチ活動

- 統合データベース講習会：AJACS徳島
  2019年6月6日、大塚製薬株式会社（徳島）
- 第19回 日本蛋白質科学会年会・ランチョンセミナー
  2019年6月26日、神戸国際会議場（兵庫）
- 第8回生命医薬情報学連合大会・ランチョンセミナー
  2019年9月10日、東京工業大学　大岡山キャンパス（東京）
- 第57回 日本生物物理学会年会・ランチョンセミナー
  2019年9月24日、シーガイア コンベンションセンター（宮崎）
- トーゴーの日シンポジウム2019 ポスター発表・ワークショップ
  2019年10月5日、日本科学未来館（東京）
- 情報計算化学生物学会2019年大会 シンポジウム
  2019年10月23日、タワーホール船堀（東京）
- 日本結晶学会令和元年度年会・ランチョンセミナー
  2019年11月19日、金沢市文化ホール（石川）
- BINDS連携セミナー
  2019年11月27日、愛媛大学城北キャンパス（愛媛）
- 第42回 日本分子生物学会年会
  フォーラム（チュートリアル企画）生命科学のデータベース活用法
  2019年12月3日、福岡国際会議場（福岡）
- 2020年韓国生体分子科学連合学会学術大会・ランチョンセミナー
  2020年1月10日、光州科学技術院（韓国 光州）
- 蛋白研セミナー：PDBj・BINDSユニット連携講習会
  2020年1月30日、大阪大学蛋白質研究所（大阪）

*セミナーや講習会の資料はPDBj webpage『過去の講習会』よりダウンロードできます。https://pdbj.org/info/previous-workshop

PDBj

代表あいさつ

2019年度も様々な事がありました。本年度は10月にwwPDBの国際運営諮問会議を大阪で開催しました。様々な議題が議論されて、無事に会議を終了する事ができましたが、これもPDBjのメンバーや蛋白質研究奨励会のサポートがあったからこそと思っております。改めてお礼申し上げます。wwPDB ACの思い出を一つ紹介させて頂きます。2019年5月にwwPDBのACメンバーを務めていただいていたPurdue 大学のMichael G. Rossmann教授がお亡くなりになりました。私にとってMichael Rossmannといえば蛋白質結晶学の英雄の一人ですが、Purdueに在籍していた当時、直接いろいろ研究上の相談にものっていただいた隣人でもありました。特に思い出深いのは2014年にCambridgeでwwPDB AC会議が開催された際, たまたま二人でDinnerの会場からホテルに歩いて戻った時のことです。彼が「世界で最初に蛋白質の構造が解かれた場所に行ってみたいか？」と聞くので、私は即座に「はい、もちろん」と答え、今は別研究室となっている構内のひっそりとした場所に連れて行ってくれたのです。私にとってMichaelとの忘れられない思い出になりました。前任の中村春木教授からも、以下のような追悼文をご提供いただいています。「故マイケル G ロスマン教授は、2009年から2014年まで国際蛋白質データバンク(wwPDB)の諮問委員会委員を務められ、大阪大学には2009年と2012年の2回にわたり委員としてお越しいただきました。当時私は日本蛋白質データバンク（PDBj）の総括としてwwPDBの主宰者の一員でしたが、wwPDB 諮問委員会ではwwPDBの活動に対する彼の思慮深い発言・忠告にいつも感銘を受けておりました。とりわけ、PDBの構造データの品質管理を大変心配し、結晶回折実験に伴う生データの維持・管理を主張しておりました。しかし、当時は現在のようなビッグデータ科学が始まる前でしたので、これは容易なことではありませんでした。現在では、ビッグデータを蓄積する技術が急激に進歩し、彼のアイデアは現実的なものになりつつあります。ロスマン教授は米国ナショナルサイエンス・ボードのメンバーであったことがあり、そこでは科学データの収集が議論されておりました。そこでの議論を基に2005年に発刊されたレポート『永続的なディジタルデータの収集: 21世紀の科学技術を実現するために』から、私は科学データの蓄積と検証に関して多くを学びました。彼は、実験の生データを蓄積することの重要性を理解しており、データ科学の振興を何年も以前から行っていたわけです。その意味で、構造生物学とウィルス学に対するロスマン教授の多大な貢献だけでなく、今日のデータ科学に対する貢献についてもロスマン教授に感謝をいたしたく存じます。」

改めて、Rossmann先生のご冥福をお祈りいたします。

PDBj代表　大阪大学蛋白質研究所 教授　栗栖 源嗣

日本蛋白質構造データバンク（PDBj: Protein Data Bank Japan）は、大阪大学蛋白質研究所の共同利用・共同研究拠点活動として運営され、米国RCSB-PDB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、国際的に統一化された生体高分子の立体構造データベースを運営するとともに、解析ツールや関連データベースを提供しています。JST-NBDCとAMED-BINDSの支援を受けて活動しています。

Protein Data Bank Japan

Staff

統括責任者　栗栖 源嗣 (大阪大学蛋白質研究所・教授)

PDBjデータベース構築グループ

中川 敦史　（大阪大学蛋白質研究所・教授）
見学 有美子（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
張 羽澄　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
池川 恭代　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
佐藤 純子　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
金 宙妍　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

BMRBデータベース管理運営グループ

藤原 敏道　（大阪大学蛋白質研究所・教授）
児嶋 長次郎（横浜国立大学工学部・教授）
宮ノ入 洋平（大阪大学蛋白質研究所・准教授）
岩田 武史　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
横地 政志　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

EMPIARデータベース管理グループ

川端 猛　（大阪大学蛋白質研究所・特任准教授）

PDBj国際的な運営高度化グループ

藤 博幸　（関西学院大学理工学部・教授）
山下 鈴子　（大阪大学蛋白質研究所・技術専門職員）
工藤 高裕　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
Bekker, Gert-Jan (大阪大学蛋白質研究所・特任助教)

研究協力者

中村 春木　（大阪大学蛋白質研究所・名誉教授）
金城 玲　（ブルネイ・ダルサラーム大学・准教授）
由良 敬　（早稲田大学先進理工学部・教授）for EM Navigator
鈴木 博文　（早稲田大学先進理工学部・次席研究員）for EM Navigator
小林 直宏　（理化学研究所横浜放射光科学研究センター・上級研究員）
輪湖 博　（早稲田大学社会科学総合学術院・教授）for ProMode
猿渡 茂　（北里大学理学部・准教授）for ProMode
伊藤 暢聡　（東京医科歯科大学大学院・教授）
木下 賢吾　（東北大学大学院情報科学研究科・教授）for eF-site
Standley, M.Daron（大阪大学微生物病研究所・教授）
for SeqNavi, StructNavi, SeSAW, ASH, MAFFTash, Spanner and SFAS
加藤 和貴　（大阪大学微生物病研究所・准教授）for MAFFTash

秘書　佐久間 量子（大阪大学蛋白質研究所・特任事務職員）

Contact

PDBj 事務局　Tel: (06)6879-4311
PDBj 登録事務局　Tel: (06)6879-8634
〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2
大阪大学蛋白質研究所 附属蛋白質解析先端研究センター内

ご質問やご要望は
ウェブページ左にある「お問い合わせ」
https://pdbj.org/contact
から常時受け付けています

2020年3月 発行