

## 2022 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) ( <a href="https://pdbj.org">https://pdbj.org</a> )
研究代表者氏名	栗栖 源嗣
所属・役職	大阪大学 蛋白質研究所・教授 (2023年3月時点)



## □目次

§1. 研究実施体制 .....	3
§2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等 .....	4
(1) データベース一覧 .....	4
(2) ツール等一覧 .....	4
§3. 実施内容 .....	5
(1) 本年度の研究開発計画と達成目標 .....	5
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 .....	5
ii) 他のデータベースとの統合化および高度化 .....	5
iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力 .....	7
(2) 進捗状況 .....	8
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 .....	8
ii) 他のデータベースとの統合化および高度化 .....	9
iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力 .....	10
§4. 成果発表等 .....	12
(1) 原著論文発表 .....	12
i) 論文数概要 .....	12
ii) 論文詳細情報 .....	12
(2) その他の著作物 (総説、書籍など) .....	12
(3) 国際学会および国内学会発表 .....	12
i) 概要 .....	12
ii) 招待講演 .....	13
iii) 口頭講演 .....	13
iv) ポスター発表 .....	13
(4) 知的財産権の出願 (国内の出願件数のみ公開) .....	13
i) 出願件数 .....	13
(5) 受賞・報道等 .....	13
i) 受賞 .....	13
ii) メディア報道 .....	14
iii) その他の成果発表 .....	14
§5. 研究開発期間中に主催した活動 (ワークショップ等) .....	14
(1) 進捗ミーティング .....	14
(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 .....	15

## §1. 研究実施体制

グループ名	研究代表者または主たる共同研究者氏名	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	<a href="https://pdj.org">https://pdj.org</a>

#### 【その他のデータベース】

No.	名称	別称・略称	URL
1	BMRB	BMRB	<a href="https://bmrj.pdj.org">https://bmrj.pdj.org</a>
2	eF-site	eF-site	<a href="https://pdj.org/eF-site/">https://pdj.org/eF-site/</a>
3	ProMode elastic	ProMod	<a href="https://pdj.org/promode-elastic/">https://pdj.org/promode-elastic/</a>
4	MoM	MoM	<a href="https://pdj.org/mom/">https://pdj.org/mom/</a>

### (2) ツール等一覧

No.	名称	別称・略称	URL
1	EM Navigator	EM Navi	<a href="https://pdj.org/emnavi/">https://pdj.org/emnavi/</a>
2	DASH	DASH	<a href="https://sysimm.org/dash/">https://sysimm.org/dash/</a>
3	MolMil2	MolMil	<a href="https://pdj.org/molmil2/">https://pdj.org/molmil2/</a>
4	OneDep	OneDep	<a href="https://deposit-pdj.wwwpdb.org/deposition">https://deposit-pdj.wwwpdb.org/deposition</a>

### §3. 実施内容

#### (1) 本年度の研究開発計画と達成目標

本申請は、2011 年度からの統合化推進プログラムにて構築・運営された PDBj および BMRBj (PDBj-BMRB を改称)をさらに発展させ、国内外の他のデータベースとの統合化を図り、研究者コミュニティや関連する製薬企業等の産業界が必須としている基盤的データを提供するものであり、完全な接続性を保つ。2022 年度の具体的な実施計画と達成目標を以下に示す。

#### 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

##### i-1) 国際基準での登録・編集・検証・公開

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完全にデータ処理を行う。以下に述べる登録・編集・検証システム (OneDep システム) の高度化によって、構造データの品質を検証する記載精度を高めつつ、アノータの数を増やすことなく増加し続ける構造データ処理に対応し、持続可能な蛋白質構造データバンクを実現する。

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 (AlphaFold2 システムおよび RoseTTAFold システム) が開発され一般公開されている。予測構造と低分解能の実験情報とを組み合わせた新しいタイプの構造解析が、急速に研究者コミュニティから発信され始めている。そこで、予測構造と実験構造が混合した場合に、どう評価し活用していくのが最良であるのか、wwPDB の他メンバーとともにタスクフォースを組織して、予想構造を含めた統合的な検証レポートの検討の開始を予定である。

##### i-2) 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ている。しかし、特にクライオ電顕の構造エントリーは、分子サイズが大きく、構造が複雑で、かつ構造解析の分解能が低い場合が多いので、エントリーの処理に著しい時間を取られていた。コロナ禍前に設置して議論したクライオ電子顕微鏡の Validation Task Force (VTF) での議論の内容をベースに、クライオ電子顕微鏡の専門家が承認する最低限の新たな検証項目 (実験データと原子座標の consistency) の追加を予定する。

#### ii) 他のデータベースとの統合化および高度化

##### ii-1) PDB 統合利用ポータル構築

2022 年度から実施する新たな PDBj の研究開発項目として、RDF 形式などによる (メタ) データを活用した、高度な検索および部分データ取得システムを構築する。情報科学や結晶学に詳しくないユーザーが生物学・化学的興味から適切なデータを発見するのと、情報科学研究者が機械学習などに必要なデータセットをプログラム的に生成するという両面を支援し、ゲノム等の他のデータベースとの統合的な利活用ができるよう、2022 年度は

以下の実施を予定した。

#### ii-1-1. 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 III 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。そこで、上記の全ての PDB コアアーカイブの RDF 表現を閲覧可能にするとともに、クエリ文の入力による検索を可能にする予定であった。

#### ii-1-2. 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

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、比較的容易に統合利用を検討することができると考えられる。例えば、Endpoint Browser (<https://sparql-support.dbcls.jp/endpoint-browser.html>) を用いて各 RDF データベースの中身を解析し、個々のデータベースのみからは得られない統合的な検索例を作成する。一方、生命科学分野のデータベースは RDF 化されていないものも数多く存在する。それらとの統合のために、統合データウェアハウスを構築するフレームワークの 1 つである、InterMine (<http://intermine.org>) の活用について検討を行う。

#### ii-2) 化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開

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。PDBj では構造生物学実験の専門家がデータベースの構築に深く関与している環境を生かし、これら実験データとの整合性を専門的に評価する豊富な指標を駆使して、高精度・高品質のデータを事前に選抜した選抜データセットを公開するため、2022 年度は以下を実施する計画であった。

#### ii-2-1. 選抜基準の策定と必要とする検証パラメータの検討

創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。2022 年度から行う PDBj の新規事業として、化合物に特化した機械学習用のデータセットを選択する上で、目的別に実験データとの整合性をどの程度、こういった視点で検証し、フィルタリングするのが最適であるのかを、利用者の声を聞きながら検討し、目的ごとの機械学習用データセット選定のための基準作りを行う。

#### ii-4) 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。しかし、過去に登録されたエントリーの NMR 制限情報は、化学シフトと異なるデータの再利用と検証が困難な古い Format のままの状態が続いていた。従って NMR 制限情報と原子座標を対応づけし直し、標準化されたデータファイルを整備して公開することが求められている。先のプロジェクトの開発成果により、OneDep 登録システムでは化学シフトと NMR 制限情報を一つのファイルにまとめた標準フォーマットを用いた NMR 実験データの記述が可能になった。2022 年は、このシステムを応用して、過去の NMR エントリーの NMR 制限情報を標準化、再検証を行う。

### iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力

#### iii-1) データベースの安定運用

世界的な生命科学の主要情報基盤であると自負している PDB および BMRB の安定運用が、電気、ガス、水道と同様に、1 日も途切れることなく求められている。(財)蛋白質研究奨励会に、蛋白質研究所の経費でサーバー室を借用し、2019 年から PDBj および BMRBj のバックアップサーバーを構築して、大阪大学での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を開始している。このバックアップサーバーの機能を維持・拡張し、本年度には、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する体制を構築して、より安定的なデータベース運用を開始する。(財)蛋白質研究奨励会の研究員を兼務する栗栖が、経験豊富な専属アノテータ 2 名を新たに蛋白質研究奨励会で雇用して安定かつ信頼性の高いデータベースとして運用を開始する。

#### iii-2) 利用者・研究者コミュニティとの連携

研究代表者である栗栖が Vice President (無報酬)を務めている wwPDB Foundation (米国内の NPO 財団)の枠組みを利用して、企業と wwPDB との連携も図る。具体的には、今後は構造予測ソフト AlphaFold2 で注目を集めている DeepMind 社の意見を聞けるよう交渉中であり、wwPDB の活動に対する支援とともに科学的な意見を聞ける体制の構築を目指す。国内諮問委員になっていただく企業研究者からの具体的な要望を受けて、日本の製薬企業からも欧米と同程度にデータ登録が行える環境整備を継続して進めていく。

#### iii-3) 国際協力

国立蛋白質研究センター上海(National Facility/Center for Protein Science in Shanghai)の Wenqing Xu 所長(兼 PDBc 代表)と、毎月定例の Zoom 会議を開催し、PDBc の立ち上げに必要な協力を行なう。本年度中に PDBc を wwPDB の准メンバーとして迎え、その間にアノテータのトレーニングや、実際のデータベース運用のノウハウなどを wwPDB の他メンバーと分担しながら支援していく。PDBc および PDBi が設立され稼働を始めた場合には、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く。実際、大阪大学蛋白質研究所と学术交流協定も締結して、より一層の国際交流を進めていく。

## (2) 進捗状況

### 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

#### i-1) 国際基準での登録・編集・検証・公開

本年度も引き続き、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。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。具体的には、令和 4 年度に PDB 全体では 19,239 件エントリーが増加し、そのうち PDBj は 5319 件を処理した。PDBj が処理したエントリー数のうち、664 件は PDB China 用のサーバーにデータを転送し PDBj の指導の下で PDBc のアナテータが登録処理した件数となる。BMRB は全体で 741 件増加し、そのうち 95 件を PDBj から新規登録した。

予測構造と低分解能の実験情報とを組み合わせた新しいタイプの構造解析に対応するため、ベイズ統計の手法を用いて予測構造自身を評価し、予測構造と実験構造が混合した場合に、構造データ全体をどう評価し活用していくのを検討するタスクフォースを組織することを決定した。このプロジェクトは、AlphaFold2 を開発した Deep Mind 社による経済的支援(主にタスクフォースメンバーの旅費、滞在費)を要請することとし、Deep Mind 社に提案書を提出した。現在、Deep Mind 社内で支援の可否が検討されているところである。支援が決定すれば、緊急性が高いため年に 2 回のペースでタスクフォース会議を開催する計画である。

#### i-2) OneDep 登録システムの高度化

本年度は、OneDep 登録システムの高度化案件として、クライオ電子顕微鏡の専門家が承認する最低限の新たな検証項目(実験データと原子座標の consistency を表す Q-score)を導入した。2022 年 9 月 23 日より Q-score を検証レポートに実装し、クライオ電子顕微鏡により構造解析された構造を評価する指標として定着させた。これにより、登録者が事前に各エントリーを wwPDB の基準で評価することが可能となり、1エントリーの処理にかかる時間を削減することが期待される。



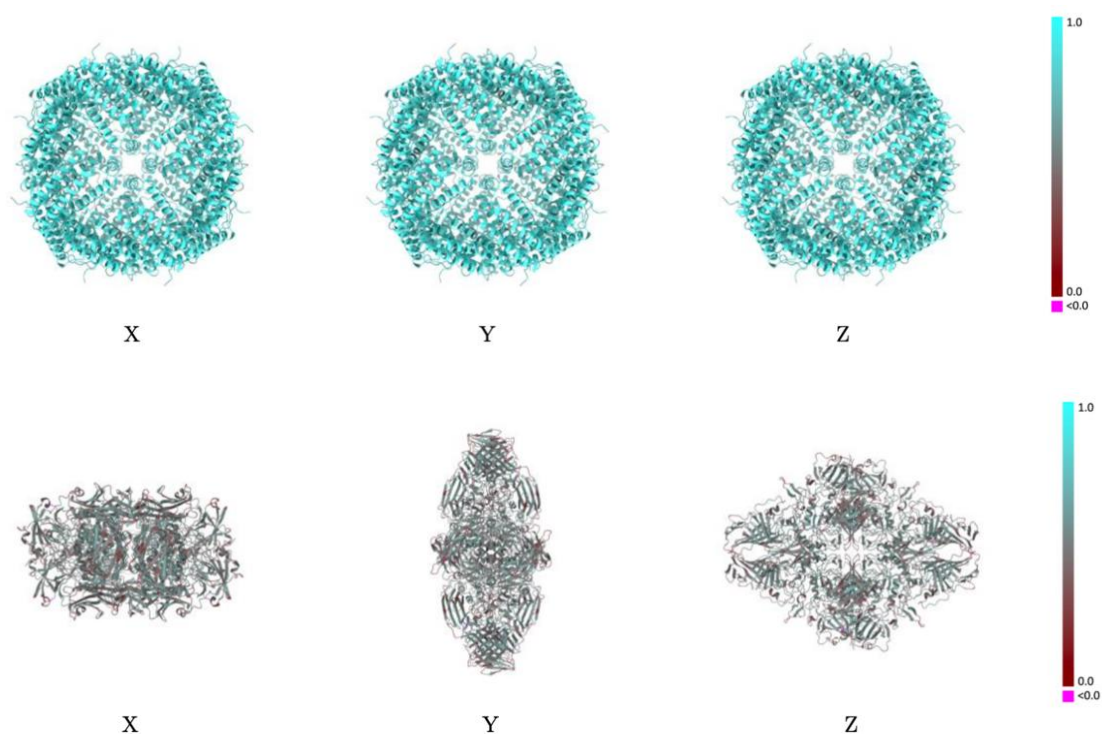


図 1. クライオ EM 構造の検証に導入された Q-score : 一致度の高い例 (上) と悪い例 (下)

## ii) 他のデータベースとの統合化および高度化

### ii-1-1. 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 III 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。そこで、上記の全ての PDB コアアーカイブの RDF 表現を閲覧可能にするとともに、クエリ文の入力による検索を可能にする計画であった。しかし、担当者が ii-4) NMR 制限情報の標準化と検証結果の可視化の開発項目に予定以上の時間を取られてしまい、[rdf.wwpdb.org](https://rdf.wwpdb.org) の拡充に時間を割くことができなかった。次年度へ積み残した課題として、令和 5 年度に優先的に対応する予定である。

### ii-1-2. 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

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 に含まれていないデータベースとの PDB との統合利用に関して、NBDC/DBCLS で開発されている、RDF 化されたデータベースを統合的に検索するためのフレームワーク TogoDX (<https://togodx.dbcls.jp/human/>) について調査した。PDB と Reactome のパスウェイデータや医薬品類似化合物のデータベース ChEMBL に含まれる活性デー

タなどを組み合わせて検索できることを確認した。また、日本蛋白質科学会、生命医薬情報学連合大会、日本生物物理学会、CBI 学会、日本結晶学会、ライフインテリジェンスコンソーシアムなどで、利用者がこれまでにどのようなデータベースと関連付けて PDB を利用してきたか、また今後したいと考えているかについて詳細な調査を実施し、216 件の意見を収集することができた。この意見をもとに、統合利用に向けたデータベースの選考を進めている。

## ii-2) 化合物情報に特化した機械学習用データセットの公開

### ii-2-1. 選抜基準の策定と必要とする検証パラメータの検討

創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。化合物に特化した機械学習用のデータセットを選択する上で、目的別に実験データとの整合性をどの程度、どういった視点で検証し、フィルタリングするのが最適であるのか、利用者の声を聞くために、日本蛋白質科学会、生命医薬情報学連合大会、日本生物物理学会、CBI 学会、日本結晶学会で詳細な利用動向調査を実施した。全部で 327 件の細部わたる意見を収集することができた。目的ごとの機械学習用データセット選定のための基準作りを進めている。

## ii-4) 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。先のプロジェクトの開発成果により、OneDep 登録システムで化学シフトと NMR 制限情報を一つのファイルにまとめた標準フォーマットを使えるようになった。2022 年は、このシステムを応用して、過去の NMR エントリーの NMR 制限情報を標準化し再検証を行う Remediation の準備を進めた。令和 5 年度の早い段階(6 月中を予定)で過去の全 NMR エントリーに対して再検証を実施する予定である。

## iii) データベースの安定運用と利用促進, 国際協力

### iii-1) データベースの安定運用

前年度と同様に PDBj のメインサービスは、計画停電や学内ネットワークの定期メンテナンスの際にも、(財)蛋白質研究奨励会に設置したバックアップサーバーを活用することで、365 日 24 時間サービスを提供することができた。2022 年度には、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て実施する体制を構築し、経験抱負な専属アノテータ 2 名(のべ 4 名)を新たに蛋白質研究奨励会で雇用して安定かつ信頼性の高いデータベース運用を行った。

### iii-2) 利用者・研究者コミュニティとの連携

研究代表者である栗栖が Vice President (無報酬)を務めている wwPDB Foundation (米国内の NPO 財団)の枠組みを利用して、構造予測ソフト AlphaFold2 を開発した DeepMind 社と意見交換をおこなった。i-1)でも触

れた通り、バイズ統計の手法を用いて予測構造自身を評価し、予測構造と実験構造とが混合したエントリーにおいて、構造データの評価法を検討するタスクフォースを財政的に支援していただく案を提出し、現在、DeepMind 社内で支援の可否と規模を検討していただいているところである。

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 2023 年 3 月 6 日にオンラインで開催した。Zoom にて韓国、台湾のユーザー代表にも出席していただいた(NBDC から、伊藤総括、川口調査役、岩島部長、太田主任調査員に陪席していただいた)。PDBj の活動報告と、次年度計画について報告を行い、委員の皆様から運営について専門的な諮問をいただいた。特に、PDB China の活動開始に関連して、今後の方針を含めて意見交換をおこなった。

### iii-3) 国際協力

国立蛋白質研究センター上海(National Facility/Center for Protein Science in Shanghai)の Wenqing Xu 所長(兼 PDBc 代表)と、毎月定例の Zoom 会議を開催し、PDBc の立ち上げに必要な協力を行なった。2022 年 9 月に PDBc から 2 名のアノテータ(馬博士、張博士)を PDBj に迎え入れて、アノテーションのトレーニングを実施した。また、PDBj の Gert-Jan Bekker 博士に Zoom 会議に同席してもらい、PDB のデータベース構築のノウハウを共有した。PDBc が完全に立ち上がるまでは、アジア地区からの登録エントリー受付は全て PDBj で行い、PDBc のアノテータの習熟度に応じて、適切な数および種類のエントリーを PDBc 用に PDBj が準備したサーバーに転送することで上海からリモートでデータ処理を進めている。PDBc と PDBj とは対抗するのではなく、同一のデータベースを構築する仲間として、国際協力しながらデータ科学の発展に寄与していきたい。

## §4. 成果発表等

### (1) 原著論文発表

#### i) 論文数概要

種別	国内外	件数
発行済論文	国内(和文)	0 件
	国際(欧文)	5 件
未発行論文 (accepted, in press 等)	国内(和文)	0 件
	国際(欧文)	0 件

#### ii) 論文詳細情報

1. Genji Kurisu, Gert-Jan Bekker, Atsushi Nakagawa. History of Protein Data Bank Japan: standing at the beginning of the age of structural genomics. *Biophysical Reviews* 2022. 14:1233-1238. doi: 10.1007/s12551-022-01021-w.
2. Jeffrey C Hoch, Kumaran Baskaran, Harrison Burr, John 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 Research* 2022. 51:D368-D376. doi: 10.1093/nar/gkac1050.
3. John D Westbrook, Jasmine Y Young, Chenghua Shao, Zukang Feng, Vladimir Guranovic, Catherine L Lawson, Brinda Vallat, Paul D Adams, John M Berrisford, Gerard Bricogne, Kay Diederichs, Robbie P Joosten, Peter Keller, Nigel W Moriarty, Oleg V Sobolev, Sameer Velankar, Clemens Vonrhein, David G Waterman, Genji Kurisu, Helen M Berman, Stephen K Burley, Ezra Peisach. PDBx/mmCIF Ecosystem: Foundational Semantic Tools for Structural Biology. *Journal of molecular biology* 2022. 434(11):167599-167599. doi: 10.1016/j.jmb.2022.167599.
4. Genji Kurisu. Fifty years of Protein Data Bank in the *Journal of Biochemistry*. *The Journal of Biochemistry* 2022. 171(1):3-11. doi: 10.1093/jb/mvab133.
5. Gert-Jan Bekker, Masashi Yokochi, Hirofumi Suzuki, Yasuyo Ikegawa, Takeshi Iwata, Takahiro Kudou, Kei Yura, Toshimichi Fujiwara, Takeshi Kawabata, Genji Kurisu. Protein Data Bank Japan: Celebrating our 20th anniversary during a global pandemic as the Asian hub of three dimensional macromolecular structural data. *Protein Science* 2022. 31(1):173-186. doi: 10.1002/pro.4211.

### (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

#### i) 概要

種別	国内外	件数
招待講演	国内	1 件
	国際	0 件
口頭発表	国内	1 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

ii) 招待講演

〈国内〉

1. 栗栖源嗣、PDBj のツールを使って+ $\alpha$  の構造情報を得る、第 7 回タンパク質結晶構造解析ビームライン中級者向け講習会、オンライン開催、11 月 24 日

〈国際〉

該当なし

iii) 口頭講演

〈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、オンライン、10 月 5 日

〈国際〉

該当なし

iv) ポスター発表

〈国内〉

1. 工藤高裕、蛋白質構造データバンク(PDB) および BMRB、EMDB、トーゴの日シンポジウム、オンライン、10 月 5 日
2. 常住規代、電子顕微鏡生データアーカイブ EMPIAR の紹介、トーゴの日シンポジウム、オンライン、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)

i) 出願件数

種別	件数
特許出願(国内)	0 件

(5) 受賞・報道等

i) 受賞

該当なし

ii) メディア報道

該当なし

iii) その他の成果発表

1. Global Biodata Coalition (GBC)が認定する Global Core Biodata Resource に認定、12月20日

§5. 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
2022年4月1日～2023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
2022年4月1日～2023年3月31日 (隔週開催)	PDBj Primary Annotator's meeting (非公開)	Zoom	14人	同上
2022年4月1日～2023年3月31日 (毎週開催)	BMRB 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 4階藤原研	5人	同上
2022年4月1日～2023年3月31日 (毎月不定期)	wwPDB PI ミーティング	Zoom	4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
2022年4月1日～2023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レータが出席して、OneDepによる処理の方針を相談する会議
2022年4月1日～2023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
2022年4月～2023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

(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
2022年6月	第22回日本蛋白質科学会年会 PDBjランチオンセミナー	筑波国際会議場(茨城県つくば市)	100人	学会参加者に向けた PDBjとサービスの紹介と、利用動向調査を行なった
2022年8月8日	高校生のための蛋白研セミナー	大阪大学蛋白質研究所(大阪府吹田市)	50人	高校生向けに PDBj の一般向けサイト「PDBj 入門」を用いて分子構造の立体視などを体験してもらった
2022年8月20-21日	サイエンス・フェスタ 2022	大谷中学・高等学校(大阪府大阪市)	236人(再生回数)	一般向けに「タンパク質」についてオンライン動画で講演
2022年9月13-15日	第11回生命医薬情報学連合大会	千里ライフサイエンスセンター(大阪府豊中市)	102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
2022年9月28-30日	第60回日本生物物理学会年会 PDBj展示会	函館アリーナ(北海道函館市)	136人	学会参加者に向けた PDBjとサービスの紹介し、利用動向調査を行った
2022年10月31日	2022年アジア結晶学連合	ラマダプラザ 濟州島(韓国・濟州島)	100人	学会参加者に向け PDBjへの登録時の注意事項とサービスを紹介した
2022年11月26日	令和4年度日本結晶学会年会	関西学院大学(兵庫県西宮市)	85人	学会参加者に向けた PDBjとサービスの紹介し、利用動向調査を行った
2022年11月30日	第44回日本分子生物学会年会	幕張メッセ(千葉県幕張市)	60人	学会参加者に向けた PDBjとサービスを紹介した

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	<a href="https://pdbj.org">https://pdbj.org</a>	2002/4/1	維持・発展	データベース等	Sameer Velankar, Stephen K. Burley, Genji Kurisu, Jeferry C. Hoch, Joh L. Markley, "The Protein Data Bank Archive", <i>Methods Mol Biol</i> , 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	<a href="http://bmrj.pdbj.org">http://bmrj.pdbj.org</a>	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", <i>Nucleic Acids Res.</i> , 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	<a href="https://pdbj.org/eF-site/">https://pdbj.org/eF-site/</a>	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.	<a href="https://pdbj.org/promod-e-elastic/">https://pdbj.org/promod-e-elastic/</a>	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	<a href="https://pdbj.org/mom/">https://pdbj.org/mom/</a>	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	<a href="https://pdbj.org/emnavi/">https://pdbj.org/emnavi/</a>	2007/5/1	維持・発展	ツール等	維持・更新のみ
7	DASH	同左	PDBデータを基にした構造アラインメント(旧ASH)	<a href="https://sysimm.org/dash/">https://sysimm.org/dash/</a>		維持・発展	ツール等	維持・更新のみ
8	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	<a href="https://pdbj.org/help/molmil">https://pdbj.org/help/molmil</a>	2014/9/1	維持・発展	ツール等	維持・更新のみ