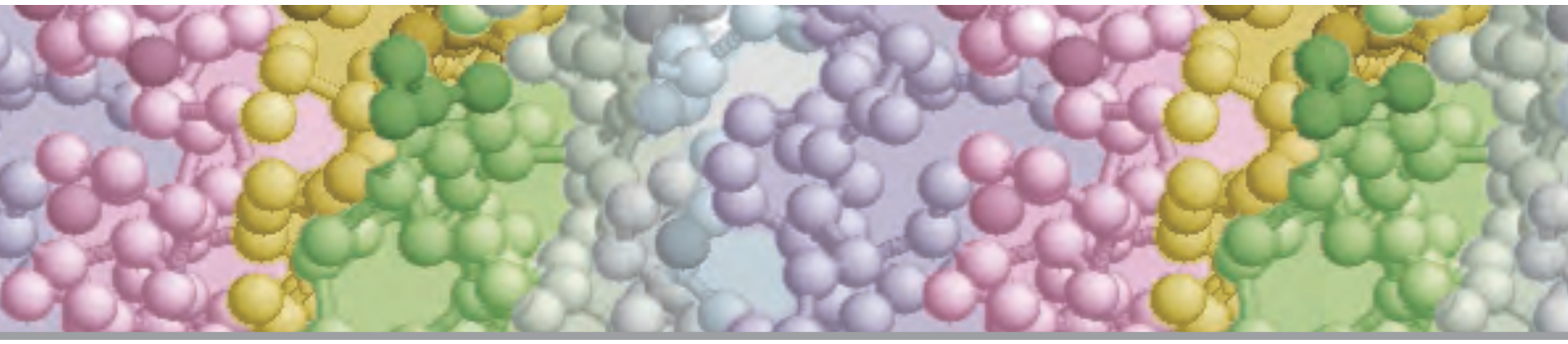
PDBj
Protein Data Bank Japan

http://www.pdbj.org/

日本蛋白質構造データバンク

Newsletter Vol. 12, No.2

2011年3月



PDBj は大阪大学蛋白質研究所が（独）科学技術振興機構の支援によって運営しています。

PDBj は、JST-BIRD（独立行政法人科学技術振興機構 - バイオインフォマティクス推進センター）による「生命情報データベースの高度化・標準化」プログラムの支援を 2001 年度から受け、wwPDB 設立メンバーの一員として、RCSB-PDB、PDBe、および BMRB との協力作業により、蛋白質構造データバンクと NMR 実験データバンクの構築を行ってまいりました。特にアジア、オセアニア地区からの登録を PDBj は wwPDB 内では分担しており、その地域の研究者（登録者とデータ閲覧等の利用者）のため、英語以外に日本語、中国語（簡体字と繁体字）、韓国語の解説ページを設け、利用者の便宜を図っております。

PDBj では、2010 年 12 月末までに 16,345 件の構造データに対する検証・編集・登録の処理をしてまいりました。世界全体では同期間の総登録処理数は 66,490 件であり、その約 25% を PDBj にて分担処理してきたことになります（次頁参照：PDBj 構造登録データ統計グラフ図）。ちなみに、1970 年代からの世界全体での総累積は、2011 年 3 月中旬には 71,800 件に達しています。

この JST-BIRD のプログラムが 2011 年 3 月末で一旦終了するにあたり、2011 年 3 月 8 日に、東京において、JST-BIRD プロジェクトの研究報告会「知識発見への挑戦」が開催されました。PDBj からも、「蛋白質構造データバンクの国際的な構築と高度化（PDBj）」と題して、研究代表者の中村春木（大阪大学教授）により、次の３つのミッションの達成についてまず報告されました。

１）米国および欧州との国際協力によって、生体高分子の立体構造データベース（PDB）の品質を保ちつつ、大量のデータの登録・編集とその維持・管理・標準化を行うこと。

２）核磁気共鳴実験、電子顕微鏡、計算機シミュレーションによるモデリング等の新たなデータベースやサービスの構築を進めること。

３）テキストベースの検索に加えて、蛋白質の骨格や分子表面の形状などのアナログ情報の検索を高速に可能とするシステムを実現すること。

そして、具体的な蛋白質分子構造からの知識発見について、類似のフォールドの探索から remote homolog が発見され分子機能の推定に至った例［文献 1, 2］、類似の局所的な原子配置の探索により、ligand binding site と蛋白質間相互作用部位の解析がなされた例［文献 3,4］、および類似の分子表面の探索によって機能部位と分子表面の相関・予測がなされた例［文献 5］についての紹介が行われました。

なお、2011 年 4 月には JST-BIRD は改組され、新たに JST 内にバイオサイエンス・データベースセンター（NBDC）が設立される運びです。PDBj は、この NBDC と協力し、大阪大学蛋白質研究所の共同利用・共同研究拠点事業の一つとしても、継続して蛋白質構造データベースの構築・維持・管理および高度化と統合化に努めていく所存です。今後とも、皆様のご支援とご指導ご鞭撻をたまわりたくお願いいたします。

【参考文献】

[1] D. M. Standley, H. Toh, H. Nakamura, Functional annotation by sequence-weighted structure alignments: Statistical analysis and case studies from the Protein 3000 structural genomics project in Japan. *PROTEINS* 72, 1333-1351 (2008)

[2] K. Matsushita, O. Takeuchi, D. M. Standley, Y. Kumagai, T. Kawagoe, T. Miyake, T. Sato, H. Kato, T. Tsujimura, H. Nakamura, S. Akira, The CCCH-type zinc finger protein, Zc3h12a, is a ribonuclease essential for controlling immune responses by regulating mRNA decay. *Nature* 458, 1185-1190 (2009)

[3] A. R. Kinjo, H. Nakamura, Comprehensive structural classification of ligand binding motifs in proteins. *Structure* 17, 234-246 (2009)

[4] A. R. Kinjo, H. Nakamura, Geometric similarities of protein-protein interfaces at atomic resolution are only observed within homologous families: An exhaustive structural classification study. *J. Mol. Biol.* 399, 526-540 (2010)

[5] K. Kinoshita, Y. Murakami, H. Nakamura, eF-seek: Prediction of the functional sites of proteins by searching for similar electrostatic potential and molecular surface shape. *Nucl. Acids Res.* 35, W398-W402 (2007)

ニュース

平成 22 年度日本結晶学会年会

2010 年 12 月 3-5 日、大阪大学コンベンションセンターにて平成 22 年度日本結晶学会年会が開催されました。PDBj では期間中、ブース展示を行い、4 日にはランチョンセミナーを開催しました。セミナー後実施したアンケートでは、PDB データの登録者であるユーザーが多く参加されていたこともあり、これまでにない様々な質問や要望が寄せられました。

BMB2010: 第 33 回日本分子生物学会、第 83 回日本生化学会大会合同学会

2010 年 12 月 7-10 日、神戸ポートアイランドにて BMB2010: 第 33 回日本分子生物学会、第 83 回日本生化学会大会合同学会が開催されました。展示会場にてブース出展をし、PDBj で提供しているサービスやデータの紹介をしました。

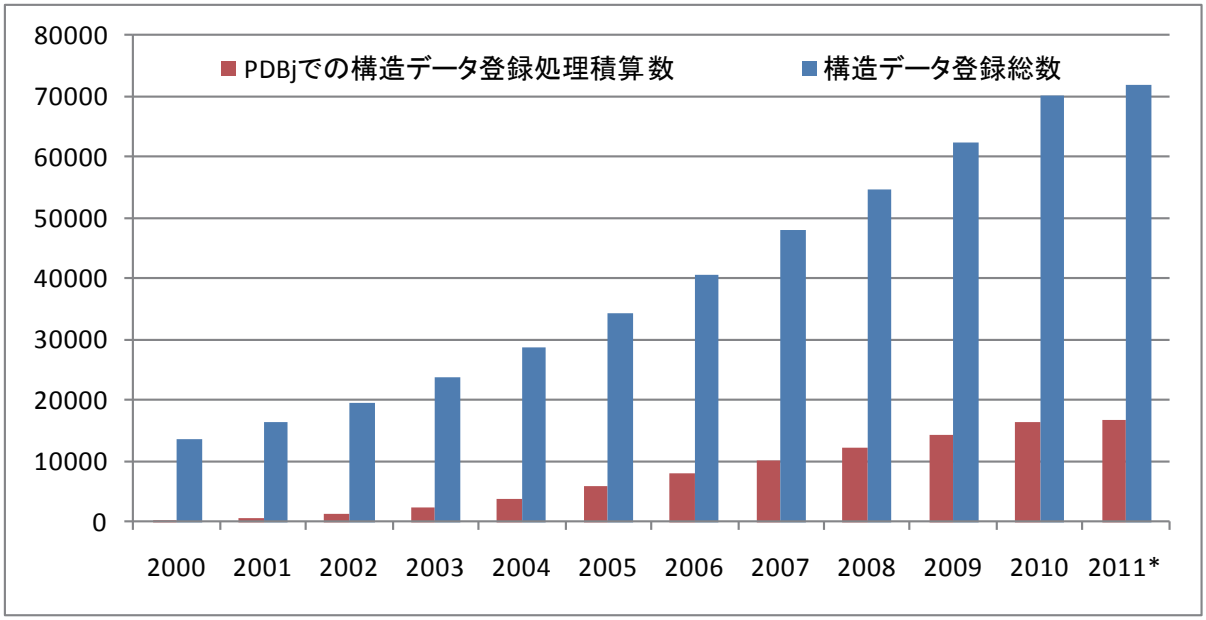
DDBJing 講習会 (23) & PDBj 講習会 in 長浜

DDBJ と PDBj で協力して、2011 年 1 月 17-18 日、長浜バイオ大学にて「DDBJing 講習会 (23) & PDBj 講習会 in 長浜」と題した実習形式の講習会を開催しました。開催日は大雪に見舞われたにも関わらず、ほぼ予定通りの受講者の方々にご参加いただきましたこと、スタッフ一同、お礼を申し上げます。なお、講習会の資料は PDBj の web 上でも公開しております (http://www.pdbj.org/pdbj_prev_workshop_j.html)。

会場の様子 (左から平成 22 年度日本結晶学会年会、BMB2010、DDBJing 講習会 & PDBj 講習会 in 長浜)。

PDBj 構造登録データ統計

統計データは wwPDB の WEB ページ (http://www.wwpdb.org/stats.html) においてご覧になれます。



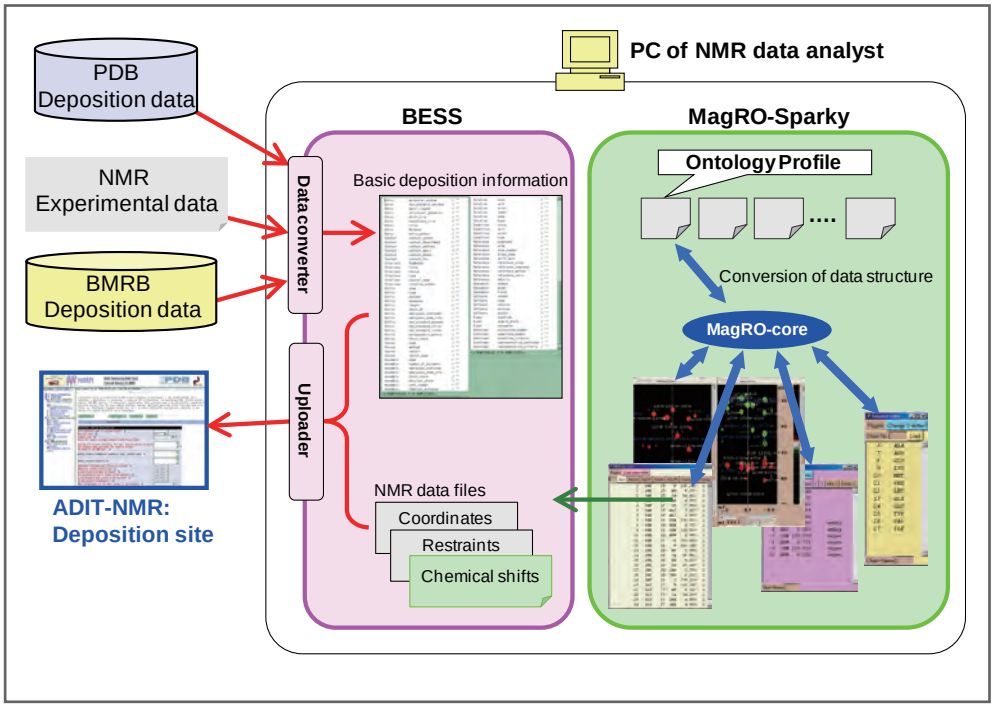
*2011 年 3 月 16 日付データ。

サービス

PDBj-BMRB グループの活動

PDBj-BMRB グループでは、NMR 実験データバンクの構築を行っている米国ウィスコンシン大学マディソン校（John L. Markley 教授）と協力して、生体高分子 NMR データバンクを維持・管理し、NMR 実験データの登録処理を行っています。PDBj-BMRB がデータ登録を 2005 年に始めて以来、2011 年 12 月末までに 760 件の登録処理を実施しております。この登録件数は、これまで BMRB 全体に蓄積されたデータの約 12%（総数 6,424 件）に相当します。2010 年 12 月からは、NMR によって決定された原子座標の登録と実験データの同時登録を行うことが必須となり、アノテーション業務を含めて、wwPDB のメンバーとして対応をしております。

NMR 解析は、構造情報以外にもリガンド相互作用、動的状態、構造転移等の生体高分子の機能解明に関与する空間、時間分解能の高い情報を与えます。この NMR 実験情報を利用価値の高いデータベースとして実現するためには、多様な試料状態と実験法、取得データに応じた、高度に組織化されたデータ構造が必要となります。PDBj-BMRB では、この多様な情報のために複雑化していた登録・アノテーション作業をシームレスに実現するプログラム BESS を 2009 年度に開発し、年間 300 件以上の理化学研究所からの NMR 化学シフトデータの登録を少人数で実現することに成功しました。さらに、複雑な NMR データ構造をオントロジー工学で容易に内部構築し、フォーマットの変換を行うコアプログラム MagRO を開発し、標準的な NMR 解析ソフトウエアである Sparky にプラグインとして実装し公開しました（下図）。また NMR 立体構造アンサンブルから収束領域を自動検出し分離するプログラム fit_robot、および NMR データと立体構造との矛盾点を表示する分子モデルビュアー MagMol も開発、公開しております。これらは、登録者の負担軽減だけでなくデータベースの質的向上に大きく貢献すると期待されています。これらのプログラムは、PDBj-BMRB の web サイトから入手可能です。



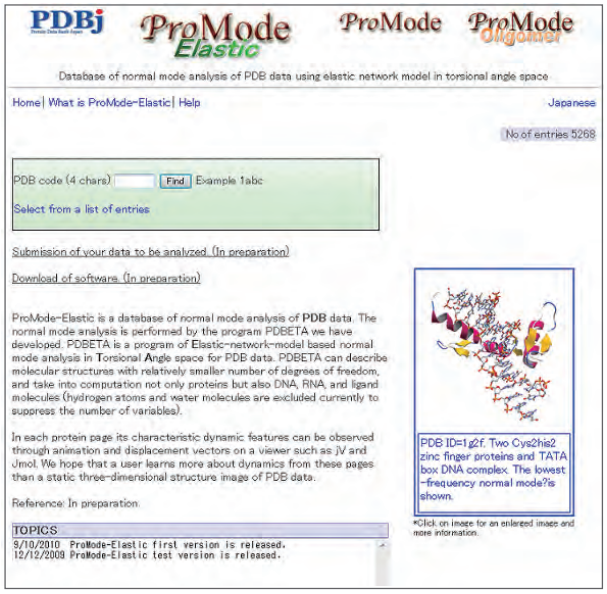
PDBj-BMRB により開発された登録支援ツール群。NMR データ解析支援（MagRO-Sparky）と BMRB 登録支援（BESS）。

蛋白質ダイナミクスデータベース ProMode-Elastic の開発と公開

蛋白質の構造は本質的にダイナミックなものであり、相互作用する相手の蛋白質と複合体を形成する際や、溶媒や膜分子などの環境にも依存して、その立体構造を変形させることが良く知られています。この蛋白質構造の動的性質は、その機能の発現においても極めて重要ですし、薬物による蛋白質の制御の面からも重大な関心がはらわれています。PDB に登録されている蛋白質の立体構造は、そのダイナミックな構造のうちのあるスナップショットのみが観測された静的なもの、とも言えます。

これら PDB に登録された蛋白質の静的立体構造データからその動的特性を引き出すため、PDBj の輪湖らにより精密な基準振動解析が行われ、その解析結果がデータベース ProMode [6] として PDBj のサイトから公開されてきました。しかし、オリジナルの ProMode では、正統的な分子力学に基づくアルゴリズムによりヘシアン行列まで計算して二面角系による厳密な力場における極小値をまず計算する必要があり、巨大な蛋白質複合体に対しては計算時間や内部メモリが巨大化するため、登録された PDB の全ての系に対するデータベース化には至っておりませんでした。

輪湖らは、二面角を独立変数とする弾性ネットワークモデルによる基準振動解析プログラムを新たに開発することで、この問題を解決し、ProMode-Elastic [7] として公開を始めています。この仕組みでは、PDB に登録された構造を安定なエネルギー極小構造と仮定するため、エネルギー極小化の計算を必要とせず、きわめて短い計算時間で PDB データで与えられる任意の系について、基準振動解析計算が可能となっています。ProMode-Elastic の特徴は、二面角を独立変数として採用することで変数の数を大幅に減らすことができたため、他の多くの弾性ネットワークモデルが各アミノ酸を Cα原子1つで代表させた解析を行っているのに対して、全原子を考慮した分子モデルでの計算を行っていることにあります。また、リガンド、DNA、RNA、糖鎖など蛋白質以外の分子を含む系の計算も可能です。既に PDB に登録された構造に対する網羅的な解析を進めておりますが、一方、利用者が自身の蛋白質構造を upload し、その NMA 計算を実行させるサービスも公開される予定です。



ProMode-Elastic のトップページ。

[6] H. Wako, M. Kato, S. Endo, ProMode: a database of normal mode analyses on protein molecules with a full-atom model. *Bioinformatics* 20, 2035-2043 (2004), http://promode.socs.waseda.ac.jp/
[7] http://promode.socs.waseda.ac.jp/promode_elastic/

Soon!

第 11 回日本蛋白質科学会年会にて「PDBj サテライトワークショップ」を開催します

日時：6 月 6 日（月）14:00-16:00
場所：大阪大学銀杏会館　3 階会議室 B、C
予定プログラム：
会議室 B 入門編　（PDB フォーマットの見方、基本的な検索方法、サービス紹介など）
会議室 C 中級編　（SQL などを利用した高度な検索方法など）
定員：各 30 名程度
事前登録不要
実習形式の講習会を行いますので、是非ご参加ください。ご質問も受け付けます。
※各自、ご自身のノートパソコンをお持ち下さい。
（会場では、無線 LAN がご利用頂けます。）

スタッフ

統括責任者
中村春木（大阪大学蛋白質研究所・教授 ）

PDBj データベース管理運営グループ
中川敦史（大阪大学蛋白質研究所・教授）
松浦孝範（大阪大学蛋白質研究所）
五十嵐令子（JST-BIRD）
見学有美子（JST-BIRD）
松浦かんな（JST-BIRD）
Chen, Minyu（大阪大学蛋白質研究所）

PDBj 国際運営高度化グループ
金城玲（大阪大学蛋白質研究所・准教授）
岩崎憲治（大阪大学蛋白質研究所・准教授）
鈴木博文（大阪大学蛋白質研究所）
山下鈴子（JST-BIRD）
鎌田知佐（JST-BIRD）
清水有希子（JST-BIRD）
工藤高裕（大阪大学蛋白質研究所）
池川恭代（大阪大学蛋白質研究所）

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）
阿久津秀雄（大阪大学蛋白質研究所・客員教授）
小林直宏（大阪大学蛋白質研究所）
中谷英一（JST-BIRD）
原野陽子（大阪大学蛋白質研究所）

研究協力者
藤博幸（産業技術総合研究所生命情報工学研究センター・副研究センター長)
輪湖博（早稲田大学社会科学部・教授）
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）
Standley, Daron M.（大阪大学免疫学フロンティア研究センター・准教授）
加藤和貴（産業技術総合研究所生命情報工学研究センター）
土屋裕子（お茶の水女子大学大学院）

連絡先

PDBj
〒565-0871
大阪府吹田市山田丘3－2
大阪大学蛋白質研究所・附属プロテオミクス総合研究センター内
PDBj事務局：TEL(06)6879-4311、FAX(06)6879-8636
PDBjデータベース登録業務：TEL(06)6879-8634、FAX(06)6879-8636