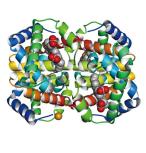
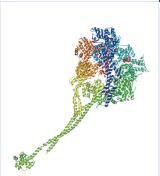


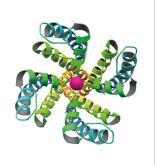


vol. 23

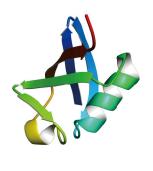


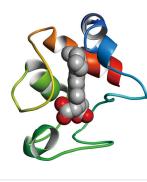










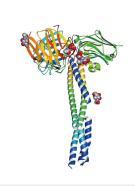












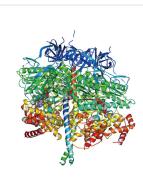


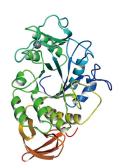












PDBj

Activities

wwPDB諮問委員会

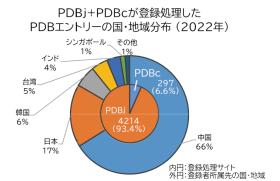
2022年11月14日の日本時間21時30分より24:25まで、オンラインでwwPDB 運営諮問委員会(AC会議)が開催されました。PDBjの専門部会からは、KEKの千田教授と台湾中央研究院分子生物学研究所副所長の蕭教授に出席していただきました。会議に先立ち事前にpptファイルで、PDB、EMDB、BMRBの各コアアーカイブの現状と今後の課題、各拠点の活動報告と活動計画が報告されました。AC会議では、PDB Chinaの立ち上げ支援プラン、構造予測グループ CASP や CAPRI との連携、



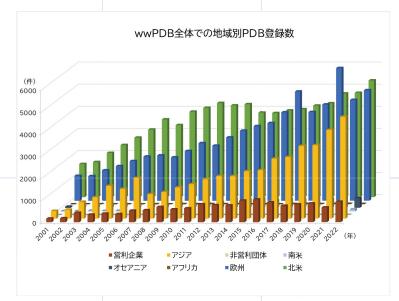
PanDDA に代表されるフラグメント解析のグループ登録の取り扱い,BMRB の研究資金更新問題,FTP サービスの停止時期,について議論が行われました。AC からの運営諮問の正式回答が届き次第,wwPDBの Web に公開予定です。深夜の会議にご参加いただきまして,2名のアドバイザーに深く感謝申し上げます。

PDBj

Data Growth







PDBc の 2 人のアノテータは PDBj での現地実習のあと, 2022 年 9 月に実際のエントリーの登録処理を開始しました。当面は PDBj に設置したサーバーを用いて PDBj が割り当てたエントリーをリモートで処理します。 2022 年中に 297 件の登録処理を行いました。これは PDBj+PDBc に登録したエントリーの 6.6%, 中国から登録されたエントリーの約 10% にあたります。



蛋白質立体構造データベース専門部会

2022年3月10日の10時30分から約2時間、PDBjのアドバイザー会議に相当する共同利用・共同研究委員会の蛋白質立体構造データベース専門部会をZoomオンライン会議システムを用いて開催しました。主たる運営資金を提供してくださっているJST NBDC から伊藤総括を含む7名の方にも陪席していただきました。部会では、2021年度の活動報告と次年度の活動計画が報告されました。2021年はPDB50周年の年にあたり、2件のシンポジウムを開催したこと、日本生化学会の英文誌であるJ. Biochem. に特集記事を掲載したことなども報告されました。急速に増えるクライオ電顕による構造やAlphaFold2による予測構造へのwwPDBとしての対応方針なども活発に議論されました。2022年はPDBjのグラント更新の年にあたり、栗栖代表から(財)蛋白質研究奨励会をPDBjの分担機関とする新しい運営体制の説明があり、アドバイザーからは新体制を含めてJST-NBDCからの継続的なサポートへの期待が述べられました。最後に、栗栖代表が韓国からPDBjのアドバイザーを務めてくださっているソウル大学校の李奉振教授が定年退職される予定であり、次年度からは成均館大学校のKyeong Kyu Kim教授に委員が交代する予定であると報告がありました。李教授のこれまでのご貢献に深い謝辞が述べられました。

OneDep Summit 2022

2022年5月10日(火)から5月12日(木),PDB共通のデータ登録システムOneDepの開発者会議がオンラインで開催されました。例年この会議においてOneDepシステムの長期開発目標が設定されます。ここで議論された話題のうち、すぐに登録者に影響が及ぶものは、CCDIDの5桁化とORCiD等のユーザー認証を用いたログイン方法の追加です。

第4回RDFサミット



2023年1月26日(木)から1月30日(月),生物学的データベースの代表が京都市内に集まり、データベース間の連携強化、再利用推進を目標とする第4回RDFサミットが開催され、PDBjからは横地が参加しました。会議では、DDBJ、UniProt、PDBj、PubChemなどが抱える巨大データの更新に関わる技術的課題、共通の言語を用いたデータモデルの作成に関わる課題、それらを維持する技術や財政的基盤整備を議論しました。また異なるデータモデルの理解を進めるための可視化技術が披露されました。

AsCA PDBjポスター賞

PDBj では、PDBj が登録に責任を持つアジア・中東地区の学会で優秀な若手研究者による発表に対して 2018 年より PDBj ポスター賞を授与しています。2022 年 10 月30 日~11 月 2 日に韓国のラマダプラザ済州ホテルで開催された第 17 回 アジア結晶学連合(AsCA2022)では第3回 PDBj ポスター賞受賞者を表彰しました。





受賞者は Hyunmin Kim (Seoul National University, Korea) 氏で、ポスター発表のタイトルは「Molecular basis for effector protein recognition by Legionella Type IVB coupling protein complex」で し た。台 湾 NSRRC の Chun-Jung Chen 教授より、表彰状および副賞として書籍と PDBj ノベルティグッズを授与しました。

選考はAsCA2022の実行委員会が委嘱した選考委員によって行われました。現地実行委員会と選考委員の皆さんに感謝申し上げます。

PDBj

Topics

PDBアーカイブのFTPプロトコルでの提供終了について

現在, PDB アーカイブのダウンロードサービスは https, ftp, rsync のプロトコルで提供していますが, wwpdb.org ドメインの ftp プロトコルでの提供は 2024 年11月1日で廃止する予定です。 pdbj.org ドメインでは当面の間はこれら 3 プロトコルでの提供を継続します。

(2022年11月2日)

wwPDB定款の更新

2021年に更新された wwPDB 定款では,正規メンバーとして 3 つの創設メンバー (米国 RCSB PDB, 英国 PDBe, 日本 PDBj) と 2 つの専門データリソースメンバー (米国・日本 BMRB, 英国 EMDB) が規定されおり、協力して 3 つのコアデータアーカイブ (PDB, BMRB, EMDB) を運営しています。 また准メンバーについても規定され, PDB China を准メンバーに加えました。

(2022年10月13日)

PDBアーカイブのドメイン名変更について

現在, wwpdb.org サイトでの PDB アーカイブダウンロード サービスはプロトコルに関わらず ftp.wwpdb.org ドメインで提供していますが、以下の通りプロトコルごとにホスト名を変更します。 2023 年 9 月より、下記ホスト名でしかアクセスできなくないます

FTP: ftp.wwpdb.org
HTTPS: files.wwpdb.org
RSYNC: rsync.wwpdb.org

(2022年8月24日)

CCDIDとPDBIDの拡張

ID の枯渇を見据え、現在 3 文字以内となっている CCDID (化合物 ID) は 5 文字に、4 文字となっている PDBID は 8 文字に拡張することが予定されています。 PDB フォーマットはこれらの拡張された ID を表記できないため、拡張された ID を含むエントリーについては PDB フォーマットでのデータ提供を行いません。 PDBx/mmCIF 形式などで表記されたデータをご利用ください。

(2022年10月13日)

Qスコアを用いたEM構造検証レポートの改良 について

2022 年9月 23 日より、wwPDB が提供する EM 構造 の検証レポートに Q スコアを取り込み、実験データと構造データの検証を改良しています。

(2022年7月26日)

PDBx/mmCIFフォーマットに関する論文

wwPDB と PDBx/mmCIF 作業部会メンバーによる,構造生物学における基本的な情報記述ツールとなる PDBx/mmCIF フォーマットに関する論文が Journal of Molecular Biology 誌の特集号「分子生物学のための計算資源 2022」に掲載されました。

PDBx/mmCIF Ecosystem: Foundational Semantic Tools for Structural Biology
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

(2022) Journal of Molecular Biology 434: 167599 doi: 10.1016/j.jmb.2022.167599

この論文は、PDBx/mmCIF データ辞書とフォーマットを確立し、現代の蛋白質データバンク(PDB)アーカイブ(wwPDB.org)の基礎をつくった 故 John D. Westbrook に捧げるものです。

(2022年6月29日)

PDBj

Outreach

トーゴーの日シンポジウム2022

2022年10月5日 (火), オンラインで開催されたトーゴーの日シンポジウム2022において、PDB に関する口頭発表を行いました。また PDB・BMRB・EMDB および EMPIAR に関するポスター発表を行いました。

高校生のための蛋白研セミナー

2022年7月30日(土)と8月8日(月)に高校生を対象として大阪大学蛋白質研究所にて開催した蛋白研セミナーで、PDBjの一般向けサイト「PDBj入門」を用いて分子の立体視などを体感してもらう実習を行いました。

第22回日本蛋白質科学会年会 ランチョンセミナー

2022 年 6 月 9 日 (木) つくば国際会議場で開催された第 22 回日本蛋白質科学会年会にてランチョンセミナーを開催し、PDBj の最近の活動と wwPDB の今後の活動方針について紹介しました。また、PDBj が提供する、構造データを分析、編集・登録するためのツールやサービスについても紹介しました。

第31回 青少年のための科学の祭典 大阪大会

2022年8月20日(土)~21日(日)に大谷中学・ 高校で開催された第31回青少年のための科学の祭典 (サイエンスフェスタ)大阪大会に、新型コロナウイルスの タンパク質を解説する動画を出展しました。

https://youtu.be/8c2lD-Ol3gw



IIBMP2022 ランチョンセミナー

2022年09月13日(火)に千里ライフサイエンスセンター(大阪府豊中市)で開催された2022年日本バイオインフォマティクス学会年会・第11回生命医薬情報学連合大会(IIBMP2022)でランチョンセミナーを開催し、PDBjの最近の活動とPDBデータの高度利用と活用促進に向けた今後の活動方針について紹介しました。また、PDBのデータ利活用を促進し、新しい統合利用ポータルを設計するためのアンケート調査を実施しました。

日本結晶学会 令和4年(2022年)度年会

2022 (令和 4) 年 11 月 26 日 (土) に関西学院大学西宮上ヶ原キャンパスで開催された日本結晶学会 令和 4 年 (2022 年) 度年会の企業セミナーにて講演を行いました。 PDBj からは「PDBj の最近の活動と wwPDB の今後の活動方針について」と題して登録者向けに活動紹介を行いました。 85 名の参加があり、 withdrawn したエントリーの再登録や、 XRDa への巨大エントリーの登録の可能性など、 活発な質疑応答が行われました。

日本分子生物学会 フォーラム

2022 年 11 月 30 日 (水) に幕張メッセで開催された第 44 回 日本分子生物学会年会のフォーラム「生命科学のデータベース活用法」において、PDB および PDBj の活動についての紹介を行いました。会場およびオンラインでの参加者を合わせ約 60 名の方にご参加いただきました。

第60回 日本生物物理学会年会 ブース出展

2022年9月28日(水)~30日(金)に、北海道・ 函館市の函館アリーナ・函館市民会館で開催された第60回日本生物物理学会の年会において、ブース展示を 行いました。JST NBDC の新プロジェクトで開発する統合ポータルに関連して詳細な統合データ利用のアンケート を実施し、多数の来場者があり多くのアンケートを回収することができました。

第17回 アジア結晶学連合会議 ランチョンセミナー

2022 年 10 月 31 日 (月), 韓国済州島で開催された第 17 回アジア結晶学連合会議 (17th Conference of the Asian Crystallographic Association, AsCA2022) でランチョンセミナーを開催し, PDB に関する最近の活動と PDB 共通の登録システム OneDep について紹介しました。





PDB₁

Episode



飲水思源

中国の故事成語に「飲水思源」という言葉がある。 学校では "井戸の水を飲む時には、井戸を掘った人の苦労を思え"という意味だと習っ た。Biophysical Reviews 誌 に History of Protein Data Bank Japan: standing at the beginning of the age of structural genomics と題した Commentary を書いた際に思いだした言葉である。この記事は,中村春木名誉教授の 70 歳を記念 して出された特集号への寄稿だった。 中村先生着任前の Brookhaven PDB のミラーサイトに始まり,2000 年に RCSB PDB の強力 な技術支援の下で開始した Data-in の活動や,2003 年の wwPDB の設立,それから PDBj がアジアの構造生物学のハブとして活動 するに至った歴史を振り返っている (https://doi.org/10.1007/s12551-022-01021-w)。 PDBj がデータ登録処理を開始し た 2000 年の実績は,全世界のたった 5%だったが,2022 年には実に全エントリーの 28% を処理する地域拠点に成長した。私は Biophysical Reviews の記事の中で 2 つの点を強調した。1 つは中村先生が先見の明を持って予算を確保し、単なるミラーサイトで はないデータ登録拠点として整備し独自サービスやツールも開発されたこと。2 つ目はデータ登録処理を開始した当時,RCSB PDB の 強力な技術的なサポートがあったことである。 2022 年の PDBj へ登録された PDB エントリー数 (4749 件) は PDBe に登録された 数(4757 件)とほぼ同数となった。 5 年前は PDBj に 2801 件で PDBe に 4025 件なので, アジアからの登録の伸びが顕著であ ることは明らかである。 こうした背景から, wwPDB AC の助言を受け入れて 2022 年に PDB China を wwPDB の准メンバーに迎 え入れた。2022 年 8 月には上海から 2 名のアノテータを PDBj に受け入れて、約 2 ヶ月のオンサイトトレーニングも実施した。22 年 前には教えてもらう立場であった我々が,今は積極的に新拠点のアノテータを指導する立場にある。井戸を掘ってくれた人々の苦労に思 いを馳せながら、アジア地域の構造生物学ひいては生命科学の飛躍に協力できるよう着実にそして時期を逃さず対応していかければなら 大阪大学蛋白質研究所 栗栖源嗣 ないと強く感じている。

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)

PDB/EMDB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)

于 健 (大阪大学蛋白質研究所·特任准教授) 見学 有美子 (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)

丹羽 智美 (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)

EMPIARデータベース管理グループ

中根 崇智 (大阪大学蛋白質研究所·特任准教授)

PRF分室

栗栖 源嗣 ((財)蛋白質研究奨励会・招へい研究員) 磯山 正治 ((財)蛋白質研究奨励会・情報室長) 横地 政志 ((財)蛋白質研究奨励会・特任研究員) 張 羽澄 ((財)蛋白質研究奨励会・特任研究員) 常住 規代 ((財)蛋白質研究奨励会・特任研究員)

PDB/EMDBデータベース高度化グループ

水口 賢司 (大阪大学蛋白質研究所·教授)

Bekker, Gert-Jan (大阪大学蛋白質研究所·特任講師)

長尾 知生子(大阪大学蛋白質研究所·助教)

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)

研究協力者

中村 春木 (大阪大学・名誉教授)

由良 敬 (お茶の水女子大学 教授/文理融合AI・データサイエンス

センター 副センター長) for EMPIAR-PDBj 藤 博幸 (関西学院大学 生命環境学部・教授)

川端 猛 (東北大学大学院 情報科学研究科・特任准教授)

for HOMCOS、gmfit、EMPIAR-PDBj

鈴木 博文 (東北大学大学院 情報科学研究科·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・名誉教授) for ProMode 猿渡 茂 (大阪大学・招へい准教授) 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, DASH, 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」

ウェフペーシ左にある「お問い合わせ https://pdbj.org/contact から常時受け付けています

