

Protein Data Bank Japan NEWS LETTER vol.17

PDBj と wwPDB - その活動について

2000 年 7 月に日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) が大阪大学蛋白質研究所に創設されました。PDBj は、米国 RCSB-PDB、欧州 PDBe-EBI、米国 BMRB とともに、国際蛋白質構造データバンク wwPDB (worldwide PDB) の 4 つのメンバーの一員として、主にアジア・オセアニア地域の構造生物学研究者から蛋白質・核酸等の生体高分子立体構造のデータを受け入れ、登録作業を行い、品質の高い共通な国際的データベースを構築しています (図 1)。さらに、独自の特徴があるウェブサービスを開発し、世界中の構造生物学者およびバイオインフォマティクス研究者に無償で公開しています。また PDBj 内に PDBj-BMRB (BioMagResBank) グループを作り、米国 BMRB と共同で NMR 化学シフトデータの登録作業を実施するとともに、データの公開と解析ツール等の開発と配布を行っています。これら PDBj の活動は、独立行政法人・日本科学技術振興機構 (JST) バイオサイエンスデータベースセンター (NBDC) と大阪大学によって支援されています。

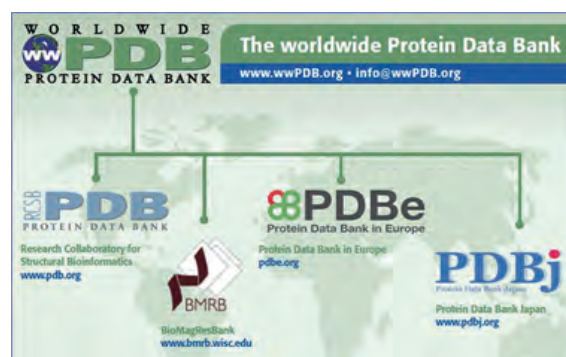


図 1: wwPDB 組織図

wwPDB では、毎年、世界中の研究者によって決定された 10,000 件を超える生体高分子の構造が登録されており、2015 年 12 月の時点では総計 114,000 件を超える構造データが蓄積されています。これまで、PDBj では、wwPDB の他のメンバーと協力して、全体の 22% の構造データの登録を行ってきました。これらの活動は、4 つのメンバーが緊密に連携し、情報共有を行うことで支えられています。

リガンド検証に関する第 1 回 wwPDB/CCDC/D3R 合同ワーキンググループ会議

PDB データ中のリガンド分子とその構造の検証に関する第 1 回 wwPDB/CCDC (Cambridge Crystallographic Data Centre)/D3R (Drug Design Data Resource) 合同ワーキンググループが、2015 年 7 月 30-31 日に米国ニュージャージー州ラトガース大学で開催されました (図 2)。

リガンド分子と受容体蛋白質の共結晶構造解析は、X 線結晶解析とコンピュータ化学によるソフトウェアで進められますが、これらの開発を行っているアカデミアと企業に所属する専門家が集まりました。このワーキンググループ会議では、冒頭で GKS グラクソ・スミスクライン株式会社の Cathy Peishoff 博士によるキーノート講演によりこの

会議の趣旨が述べられた後、4 つの小グループに分かれて以下の問題が議論されました。リガンド分子に関するどのようなデータを収集すべきか？どのようにリガンド分子と受容体蛋白質の複合体構造を検証すべきか？どのようにリガンド分子を表現すべきか？リガンド分子と受容体蛋白質の複合体構造を論文として出版する場合に、どのような情報が付随されるべきか？

最後に、全参加者が集合して、集約された意見をもとに勧告文を作成しました。その勧告をもとに白書がまとめられ、近々出版されることになっています。



図 2: リガンド検証に関する第 1 回 wwPDB/CCDC/D3R 合同ワーキンググループ会議の参加者たち

第 12 回国際蛋白質構造データバンク諮問委員会の開催

国際蛋白質構造データバンク (wwPDB) では、毎年、国際諮問委員会 (wwPDB Advisory Committee meeting) が 4 メンバーの持ち回りで開催されていますが、2015 年は、大阪大学蛋白質研究所にて、第 12 回目となる会議が、10 月 2 日に行われました。R. Andrew Byrd 博士 (Center for Cancer Research, NCI) が、若槻 壮市 教授に替わって議長を務めました。

この国際諮問委員会には、RCSB-PDB の委員として Cynthia Wolberger 博士 (Johns Hopkins 大学)、Paul Adams (Lawrence Berkeley National Laboratory, UC Berkeley) が参加し、PDBe の委員として、Helen Saibil 教授 (Birkbeck College London) と David Brown 教授 (Kent 大学)、BMRB の委員として甲斐正恒教授 (首都大学) と Angela M. Gronenborn 教授 (ピッツバーグ大学)、PDBj の委員として神田 大輔 教授 (九州大学) と栗栖 源嗣 教授 (阪大蛋白研) が参加しました。さらに電子顕微鏡解析の国際組織代表として Wah Chiu 教授 (Baylor College of Medicine) と、国際結晶学会の代表として Edward Baker 教授 (Auckland 大学)、生体系 NMR の国際組織 ICMRBS の代表として前記の R. Andrew Byrd 博士が参加しました。また、中国の Jianping Ding 教授 (Shanghai Institutes for Biological Sciences, Chinese Academy of Sciences) とインドの Manju Bansal 教授 (Indian Institute for Science) も、准委員として参加しました。また、オブザーバとして John Westbrook 博士、Jasmine Young 博士 (どちらも RCSB-PDB, ラトガース大学) と Rolf Apweiler 博士 (EBI) も参加しました (図 3)。



図 3: 第 12 回 wwPDB 国際諮問委員会の参加者たち

会議では、wwPDB メンバーである PDBj の中村 春木 教授 (大阪大学蛋白質研究所)、RCSB-PDB の Stephen K. Burley 教授と、BMRB の John L. Markley 教授 (Wisconsin-Madison 大学)、PDBe の Gerard Kleywegt 博士の代理として Sameer Velankar 博士 (EBI) が、国際諮問委員会のメンバーに対して wwPDB の活動を紹介し、将来の方向性について議論がなされました。

冒頭で PDBj の中村 春木 教授 (大阪大学蛋白質研究所) が、これまでの 1 年間の活動の概略と、新たな問題に対する wwPDB の対応の提案、wwPDB のアウトリーチについて説明を行いました。続いて、新しい共通の登録フローとデータ検証作業 (アノテーション) のパイプラインについて、wwPDB の Common Deposition and Annotation (D & A) 開発チームを代表して、RCSB-PDB の Stephen K. Burley 教授がその進捗状況を紹介しました。次に、BMRB の John L. Markley 教授 (Wisconsin-Madison 大学) から、BMRB の資金状況、スタッフの変更、登録数の推移について紹介され、2015 年 1 月に行われた BMRB の検証タスクフォースのレポートが述べられました。特に、NMR の距離拘束情報の共通フォーマットとして新たに開発された NEF (NMR Exchange Format) の詳細が紹介されました。PDBe の代表である Gerard Kleywegt 博士が欠席したため、代理として来日した Sameer Velankar 博士が、EMDB (Electron Microscopy Data Bank) と EMPIAR (Electron Microscopy Pilot Image Archive) の状況と電子顕微鏡 (EM) データの検証問題について紹介しました。

今回の wwPDBAC 会議では、X 線結晶構造だけでなく NMR および EM による構造の登録、アノテーションと検証を行う D & A version 2 の開発の遅れが問題となりました。そこで、D&A version 2 の開発状況が議論され新たなロードマップが作られ、最終的に 4 つの wwPDB サイト間の強い共同作業により、2016 年 1 月に完成させ公開されることが計画されました。

さらに、下記のいくつかの新しい問題が議論されました。1) wwPDB では登録時に著者の特定のために ORCID (Open Researcher and Contributor ID) のシステムを利用すること、2) 統合的なハイブリッド法による立体構造モデルのアーカイブは原則として PDB と連携していくが、それらの登録、アノテーション、検証と配布を wwPDB は支援すること、3) wwPDB は、新たな version 管理を行うこと、等です。

最後に、次回の wwPDBAC 会議が米国 Wisconsin-Madison 大学にて、2016 年 10 月初めに開催されることがアナウンスされました。

wwPDB 国際シンポジウムの開催

2015 年 10 月 3 日 (土)、大阪大学豊中キャンパス内大阪大学会館 (大阪大学旧イ号館) にて、世界的な生命科学の新たな潮流である統合的なハイブリッド法による構造生命科学 (Integrative Structural Biology) に関するシンポジウムを開催しました (図 4)。

最近話題になっているクライオ電子顕微鏡だけでなく、クロスリンク、質量分析、FRET、超高分解像度電子顕微鏡、X 線回折、NMR、コンピュータモデリング等の様々な手法を統合化し (ハイブリッド法と呼ばれます)、蛋白質などの分子からその集合体である細胞内の生体内装置からさらに細胞・個体までをも俯瞰的に観測して、その動的構造を研究するものです。



図 4: wwPDB 国際シンポジウムポスター

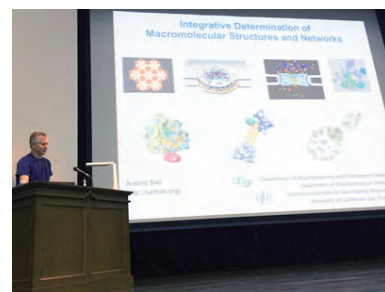


図 5: 招待講演者である Andrej Sali 教授 (UCSF) の講演



図 6: 招待講演者である Helen M. Berman 教授 (ラトガース大学: 左側) と、座長の John L. Markley 教授 (Wisconsin-Madison 大学: 右側)

Topics

wwPDB の新しい登録システム (D&A version 2) への移行について

2016 年 1 月に、新しい登録システム (D&A version 2) が開始されます。この登録システムでは、電子顕微鏡 (EM) や核磁気共鳴法 (NMR) によって決定された構造も登録ができ、原子座標を登録する PDB、EM の電子密度マップを登録する EMDB、NMR の化学シフトなどの実験情報を登録する BMRB との協調した運営がなされ、PDB と EMDB あるいは BMRB の双方のアクセッション番号が同時に発行されます。さらに、この新システムでは、X 線結晶解析による構造だけでなく、NMR および EM による構造に対する検証レポートが作られます。

少なくとも 2016 年上半期中は、登録者はこの新システムと同時に、これまでの登録システム (EM-Dep, ADIT-NMR, AutoDep) を用いた新規登録が可能です。ただし、新システムの安定な稼働が確認された後は、従来の登録システムは、データ登録が終了するのを十分待った後に終了する予定です。

様々な質問がありますが、ご遠慮なく PDBj の「お問い合わせ」ページからお知らせください。

お問い合わせ <http://pd bj.org/contact>

電子顕微鏡や小角散乱の構造も探せる Omokage 検索

<http://pd bj.org/emnavi/omo-search.php>

Omokage 検索 *1 に新しいタイプのデータを追加しました。Omokage 検索は、「形状」で構造データを探さるサービスです。原子モデルと密度マップを横断して検索するために、タンパク質であろうと、DNA であろうと、何だか分からないクーロンポテンシャルの塊であろうと、全体のカタチが似ていれば「似ている」と判断する比較手法を利用しています。これまでは PDB の原子モデルと EMDB の 3 次元密度マップに対応していましたが、今回、生体試料小角散乱データバンク (SASBDB) *2 のモデルデータが新たに追加され、3 つのデータバンクを横断した構造検索が可能になりました (図 7)。SASBDB は小角散乱プロファイルのデータバンクですが、通常の原子モデルや、ダミー原子モデル、それらの混合モデルも付随登録されています。その ID を Omokage 検索のページに入力するだけで検索を始められます。検索結果には 3 つのデータバンクからのデータが入り混じって表示されます。

「分解能革命」とも呼ばれる技術革新によって、電子顕微鏡解析は X 線結晶学や NMR に匹敵する原子座標決定手法となり、EMDB の登録データ数も急増しています。また近年、柔軟な生体分子の溶液構造に対する関心の高まりに応じて、BIOISIS や SASBDB といったデータバンクも設立され、小角散乱データの共有も始まっています。PDB では扱うことのできない立体構造に関するデータの種類の数は、これからも増加していくでしょう。PDBj ではそういったデータの複雑化にも、Omokage 検索などのツールを通じて対応していきたいと考えています。

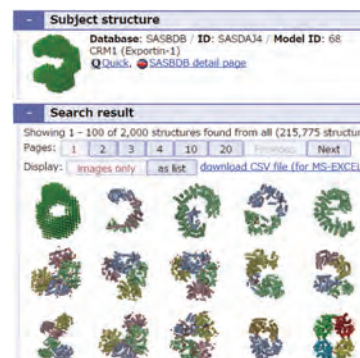


図 7: SASBDB データ、SASDA34 を利用した検索の例

*1: Suzuki H, Kawabata T, Nakamura H. Omokage search: shape similarity search service for biomolecular structures in both the PDB and EMDB. Bioinformatics. 2015 btv614.

*2: SABDB: <http://www.sasbdb.org/>

PDBj-BMRB グループはこれまでに生体高分子の NMR のデータベースである BioMagResBank (BMRB) における全データを XML 化、RDF 化し、他の生命科学系データベースとの連携させたデータベース間検索を実現しました。これにより化学シフトデータや構造情報と共に、

機能情報、一塩基置換情報、疾患関連情報などが柔軟に得られるようになりました。そして、最近それらの情報をモデル構造と連携させることで、NMR 創薬研究を支援可能な 2 次データベースを構築しました (図 8)。

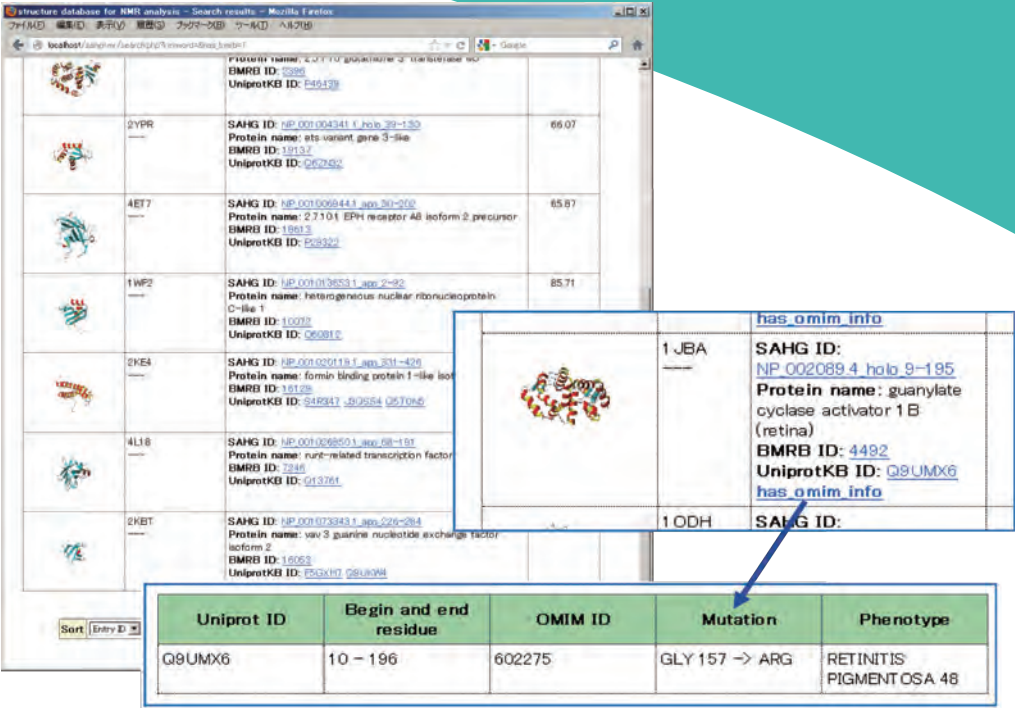


図 8 : XML、RDF を利用したモデル構造の 2 次的データベース

NMR Validation Task Force 会議

PDBj-BMRB グループは、2015 年 1 月 7-9 日に米ラトガース大学において開催された NMR Validation Task Force (NMR-VTF) ミーティングに参加しました (図 9)。ミーティングにおいては、NMR 登録データの質的向上を図るため、構造決定時に使用される制限情報の共通フォーマットの策定について議論され、NEF フォーマットが完成しました。その詳細については論文発表として 6 月に国際誌に掲載されました *3。

*3 : NMR Exchange Format: a unified and open standard for representation of NMR restraint data.
Gutmanas A., Adams P. D., Bardiaux B., Berman H. M., Case D. A., Fogh R. H., Güntert P., Hendrickx P. M., Herrmann T., Kleywegt G. J., Kobayashi N., Lange O. F., Markley J. L., Montelione G. T., Nilges M., Ragan T. J., Schwieters C. D., Tejero R., Ulrich E. L., Velankar S., Vranken W. F., Wedell J. R.,



図 9 : NMR VTF 会議の参加者たち

wwPDB と PDBj における構造データの登録数推移

ー統計データは wwPDB の web page (<http://wwpdb.org/stats.html>) でもご覧になれます。

■ wwPDB 全体での構造データ登録総数

■ PDBj での構造データ登録処理積算数

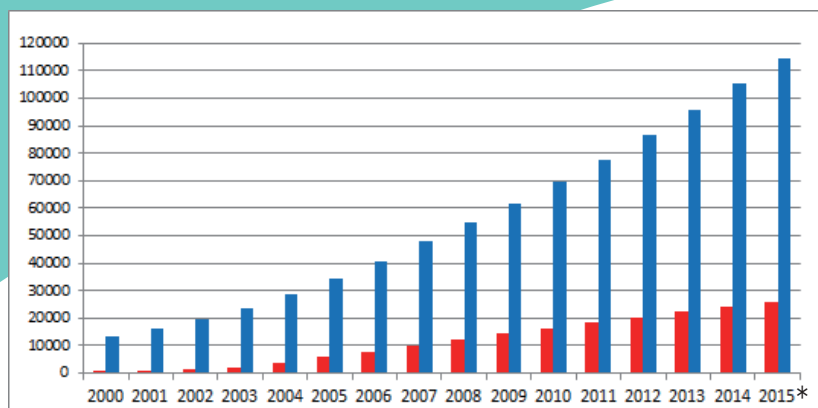


図 10: 登録数推移グラフ

*2015 年 12 月 30 日

Event Report

ー 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 の最新の活動状況について、ご紹介しています。

- 大阪大学いちょう祭 - 一般向け蛋白質立体構造の展示
2015 年 5 月 2 日、大阪大学蛋白研 (吹田市)
- H27 年 PDBjing & 創薬等情報拠点講習会
『見てわかるタンパク質 - 生命科学のための立体構造データの利用法』
2015 年 6 月 13 日、科学技術振興機構 東京本部別館
- 第 15 回日本蛋白質科学会年会
PDBj& 創薬等支援技術基盤プラットフォームランチョンセミナー
2015 年 6 月 24 日、あわぎんホール (徳島市)
- 初めての All-in-one 合同講習会 ~ 生命科学データベースの使い方 ~
2015 年 7 月 18 日、大阪大学中之島センター (大阪市)
*NBDC (バイオサイエンスデータベースセンター)、DDBJ (国立遺伝学研究所)、DBCLS (ライフサイエンス統合データベースセンター) と PDBj 合同の、生物科学データベースについての PC ワークショップを行いました。
- 第 53 回日本生物物理学会年会・PDBj ランチョンセミナー
2015 年 9 月 13 日、金沢大学 角間キャンパス
- H27 年度日本結晶学会年会・PDBj ランチョンセミナー
2015 年 10 月 18 日、大阪府立大学 中百舌鳥キャンパス (堺市)
- 生命医薬情報学連合大会 2015
PDBj& 創薬等支援技術基盤プラットフォームランチョンセミナー
2015 年 10 月 29 日、京都大学黄檗キャンパス (宇治市)
- サイエンスアゴラ 2015
2015 年 11 月 13-15 日、日本科学未来館 (東京お台場)
* 日本科学技術振興機構主催の一般向け科学イベントで、蛋白質立体構造をテーマに展示ブースを出展しました。
- 第 38 回日本分子生物学会年会・データベース展示企画
“使ってみようバイオデータベース - つながるデータ、広がる世界”
2015 年 12 月 1-3 日、神戸国際展示場



3D プリンタで蛋白質構造を製作

いちょう祭 - 3D モデルの紹介や折り紙製作



日本結晶学会 ランチョンセミナー風景



科学技術振興機構でのデータベース講習会風景



サイエンスアゴラ - 蛋白質構造を一般向けにわかりやすく紹介

※講習会のテキストやセミナー資料は、PDBj Web
『過去の講習会』ページ
(<http://pdbj.org/info/previous-workshop>)
よりご自由にダウンロード頂けます。

統括責任者 中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所・教授)

PDBj データベース構築グループ

中川 敦史 (大阪大学蛋白質研究所・教授)
五十嵐 令子 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)
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)

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 (大阪大学蛋白質研究所・准教授)
小林 直宏 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)
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)

事務職員 晴氣 菜穂子
(大阪大学蛋白質研究所・特任事務職員)

PDBj 国際的な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・特任研究員)
山下 鈴子 (大阪大学蛋白質研究所・特任技術専門職員)
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・特任研究員)

研究協力者

輪湖 博 (早稲田大学社会科学総合学術院・教授)
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 for eF-site
(東北大学大学院情報科学研究科・教授)
STANDLEY, M. Daron
(京都大学ウイルス研究所・教授)
for SeqNavi, StructNavi, SeSAW and ASH
加藤 和貴 for MAFFTash
(大阪大学免疫学フロンティア研究センター・特任准教授)

Protein Data Bank Japan

連絡先

PDBj 事務局
PDBj データベース登録事務局

〒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

Tel: (06)6879-4311, Fax: (06)6879-8636
Tel: (06)6879-8634, Fax: (06)6879-8636

<http://pdbj.org/>

※ご質問やご要望は常時 PDBj webpage 左「問合せ」より
受付けております。

問合せ : [http:// pdbj.org/pdbj_contact_j.html](http://pdbj.org/pdbj_contact_j.html)

