

NEWS LETTER vol.19

PDBj と wwPDB およびその活動について

2000年7月に日本蛋白質構造データバンク(PDBj; Protein Data Bank Japan, <https://pdbj.org/>)が大阪大学蛋白質研究所に創設されました。

以来、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, <https://wwpdb.org/>)のメンバーの一員として、アジア・中東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、登録作業を行って品質の高い共通の国際的データベースを構築しています。

2017年4月に、PDBjの総括責任者は大阪大学蛋白質研究所の中村春木教授から、同研究所の栗栖源嗣教授に交代いたしました。

PDBjでは、独自の特徴を持つ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、当初から米国BMRBと共同でNMR実験データの登録作業を実施するとともに、最近

ではクライオ電子顕微鏡によって決定された構造データの登録も実施し、様々な手法による生体高分子立体構造データの公開と、解析ツール等の開発・配布を行っています。これらPDBjの活動は、国立研究開発法人・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。

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を登録しており、2017年12月末の時点では総計136,000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、3つの他のwwPDBのメンバーと協力して、全体の22%の構造データの登録をしてまいりました。これらのwwPDBのメンバーは、データフォーマットの改良、データ登録や検証の方法など、様々な問題を討議し将来の発展を目指して頻繁に情報共有を行っています。

新代表ごあいさつ



大阪大学蛋白質研究所 教授 栗栖源嗣

2017年4月に中村春木教授からPDBjの代表を引き継ぎました栗栖源嗣です。簡単に自己紹介させて頂きます。専門はX線結晶構造解析で、1997年3月に博士号(大阪大学)を取得しました。同年4月から蛋白質研究所助手(当時)に着任し、2002年から2年間米国パデュー大学へ留学後、2004年から5年間、東京大学大学院総合文化研究科で助教授(准教授)を務めました。2009年に母校の教授(蛋白質結晶学研究室主任)として戻ってまいりました。主にデータ寄託者としてこれまでに77件の結晶構造を登録しております。2010年から蛋白質立体構造データベース専門部会の委員としてPDBjの運営を諮問する立場にありましたが、中村教授の定年退職を控えた2017年4月から代表としてPDBjの運営に直接携わっております。長い歴史もあり成熟した感のあるPDBですが、クライオ電子顕微鏡の急速な発展や、複合的な手法により解析された構造情報の蓄積など、新たに対応すべき課題も数多くあります。微力ですがこれから精一杯運営に携わってまいりますので、引き続き支援頂きますよう宜しくお願い申し上げます。

2017年度 wwPDB 諮問委員会 参加報告

2017年度のworldwide Protein Data Bankアドバイザリー会議(wwPDB-AC)は、2017年10月13日の終日、米国Rutgers大学の統合プロテオミクス研究センター棟において開催されました。本会議は、各PDBのデータセンターから選ばれたアドバイザー2名ずつと、結晶学分野(IUCr)と電子顕微鏡解析分野の代表者が1人ずつ、それに中国、インドの地域代表者の各1名から構成されています。PDBjからは、大阪大学大学院工学研究科の井上豪教授と、お茶の水女子大学シミュレーション科学・生命情報学教育研究センターの由良敬教授にご出席頂きました。会議では、この1年間のwwPDBとしての活動報告が、X線結晶解析、NMR溶液構造解析、電子顕微鏡構造解析の順で報告された後、幾つかの重要な運営方針について議論されました。一つ目は、wwPDBが出版社に提供するDOIのサマリーページ運用開始についてです。各wwPDBメンバーのサイトへのリンクを提供する公式なLandingページを作成することに決定しました。二つ目はwwPDB-ACの主査と副査を決定するルール作りです。各wwPDBメンバーとは独立した主査を地域バランスと分野バランスに配慮しながら輪番する仕組みを作成しました。三つ目はwwPDBのメンバーとしてEMDBを招待することが公式に決定しました。BMRB

と同様な仕組みでwwPDBに加わって頂けることが望まれます。次に、新たに特定の地域や国を代表するメンバーとしてwwPDBに加わるルールを策定しました。これから登録数の増加が見込まれる中国やインドを想定しています。最後に、ケンブリッジ結晶構造データベース(Mogul)を用いて評価されている化学結合や結合角などの参照情報を、事前にユーザーに提供する基本方針が確認されています。次年度の会議は2018年11月2日(金)に英国ケンブリッジで開催することを決めて閉会しました。



Activities

国際結晶学連合会議（IUCr）にてブース出展

2017年8月21日～27日、インド・ハイデラバードにおいて国際結晶学連合の第27回定期例会合（IUCr 2017）が開催されました。この会合ではデータベースの教育的な活用を主題とした「Structural databases as teaching tools - Part A macromolecules」というタイトルのシンポジウムが開催され、Proteopedia の Jaime Prilusky、RCSB PDB の Shuchismita Dutta、PDBe の Sameer Velankar らが、それぞれのウェブサイトや活動の紹介を行いました。PDBj からは鈴木が「Play with 3D structure data of biomolecules」というタイトルで、PDBj の教育関連コンテンツやサイエンスアゴラでのブース出展などのアウトリーチ活動について発表しました。また、登録方法などの質問に答えたり意見や疑問点の収集など来場者と直接コミュニケーションを行うため、wwPDB 主催のブース出展を行いました。今回の会合ではクライオ電子顕微鏡に関するキーノートレクチャーとマイクロシンポジウムがいくつも開催され、この分野の急速な発展を感じられました。



左から Matthew Conroy (PDBe), 鈴木博文 (PDBj), 陳俊榮 (NSRRC), 中川敦史 (PDBj)



ギブアウェイとして wwPDB 扇子を配布

Topics

PDBj Mine 関係データベースの拡張

PDBj Mine 関係データベース (RDB) は、PDBj のウェブサイトの裏で使われているバックエンドデータベースですが、利用者が自身の計算機にインストールしたり (<https://pdbe.org/help/mine2-rdb-local-install>)、RESTful ウェブサービスを介して利用することもできます (<https://pdbe.org/help/rest-interface>)。全 PDB エントリを含んだ RDB ダンプファイルと毎週の更新の差分ファイルも用意されています。RDB のスキーマ (<https://pdbe.org/mine-rdb-docs>) は PDBx/mmCIF 辞書に基づいており、多くの SQL クエリの例が用意されている (<https://pdbe.org/help/mine2-sql>) ので、学習も比較的容易だと思われます。

wwPDB では、通常の PDB エントリー以外にも、Chemical Component Dictionary (CCD) やそれをケンブリッジ構造データベースと統合した Chemical Component Model (CCM) および Biologically Interesting Molecule Reference Dictionary (BIRD) などのデータを PDBx/mmCIF 形式で公開しています。詳しくは <https://www.wwpdb.org/data/ccd> および <https://www.wwpdb.org/data/bird> をご参照ください。今年、PDBj Mine にこれらのデータリソースが統合され、CCD、CCM、BIRD に関連するテーブルが、それぞれ cc、ccmodel、prd というスキーマ下で参照できます。これらのデータと PDB エントリーを組み合わせることで、例えば、特定の化合物を含む PDB エントリーを化合物の InchKey や CSD (Cambridge Structure Database) の ID で検索することが可能になります。いくつかの簡単な例が <https://pdbe.org/help/mine2-sql> にありますのでご参照ください。

OneDep システム、PDB アーカイブの主な変更

1. PDB アーカイブのモデル構造ファイルが OneDep データ基準に準拠した V5.0 へ更新されました。[2017 年 7 月]

PDB アーカイブ中の全てのモデル構造ファイルが V5.0 の PDBx/mmCIF ディクショナリに従うよう更新されました。V4.0 と比べて V5.0 では、wwPDB の OneDep システムで使用されている改定データモデルにより良く従い、より整理された内容になっています。標準フォーマットと位置づけられている PDBx/mmCIF フォーマットと XML フォーマットの両方が更新されていますが、旧フォーマットである PDB フォーマットのファイルには、修正情報が含まれない場合があります。（<https://pdbj.org/news/20170712>）

2. OneDep を通じて、X 線小角散乱のデータ登録が可能になりました。[2017 年 7 月下旬]

OneDep を利用して X 線小角散乱と中性子小角散乱のデータ登録が始まりました。SAXS/SANS データに対しては、登録者は関連する SASBDB のアクセス番号を入力したり、SASBDB へ登録するよう求められます。セッションのステータスや OneDep 登録 ID、引用文献情報など、いくつかの限られた情報が、SASBDB と共有されます。

3. バージョン化と改訂履歴を導入した新しい PDB アーカイブの管理法について [2017 年 10 月]

現在は、既存の公開済み PDB エントリーに対して原子座標を改訂する場合、新しい PDB アクセションコードが発行され、以前の PDB エントリーは廃止されます。wwPDB は、登録者が、既に公開された自身のエントリーの内容をアクセションコードを変更せずに更新できるよう、新たにファイル・バージョニングシステムを導入しました。

2017 年 10 月には第一段階として、新しいバージョン化用の FTP アーカイブ (<ftp://ftp-versioned.pdbj.org/>) から、モデル構造ファイル (PDBx/mmCIF、PDBML フォーマット) を公開しました。バージョン化用 FTP アーカイブ内のファイル名は、新しい命名スキームに従います。例えば、PDB エントリー 1abc について、最初に公開される原子座標ファイルは、pdb_00001abc_xyz_v1-0.cif.gz となります（ここで、pdb_00001abc は PDB エントリー 1abc の新しい PDB アクセションコード、xyz は座標ファイル、cif はファイルのフォーマットの意味）。詳細は、過去のニュースをご覧ください。（<https://pdbj.org/news/20171005>）

2018 年中には、登録者が公開済みの自身のエントリーの座標を改訂できるようになる予定です。

4. PDB 登録への 5 つのステップ

OneDep を利用した登録を、5 つのシンプルなステップにまとめたパンフレット（英語版）を、wwPDB サイトからダウンロード頂けます。PDBj では、日本語、中国語（繁体字・簡体字）、韓国語版も作成しました。PDBj サイトからダウンロードしてご利用ください。

<https://pdbj.org/info/data-deposition>



日本語

简体中国語

繁体中国語

韓国語

Validation Report の XML、RDF フォーマットへの変換ツール開発

OneDep における構造座標登録時に wwPDB より発行される Validation Report は登録データの詳細、客観評価として重要な情報が記載され、多くの国際誌における査読審査における標準的基準としての重要な役割を持っています。PDBj-BMRB グループは Validation Report のデータを XML および RDF 化するための自動変換ツールを開発し、公開しています。このツールは Kinjo ら、Yokochi らおよび wwPDB との国際的な共同開発により実現しました (Kinjo et al., Nuc. Acid. Res. 2012, 40, Yokochi et al. J. Biomed. Sem. 2016, 7(16))。今後はデータクオリティの客観評価の自動化や Web 上での効果的かつ直感的な表現の実現など様々な応用が期待できます。

米 Sunday River において開催された NEF meeting (2017 年 6 月 12-15 日)

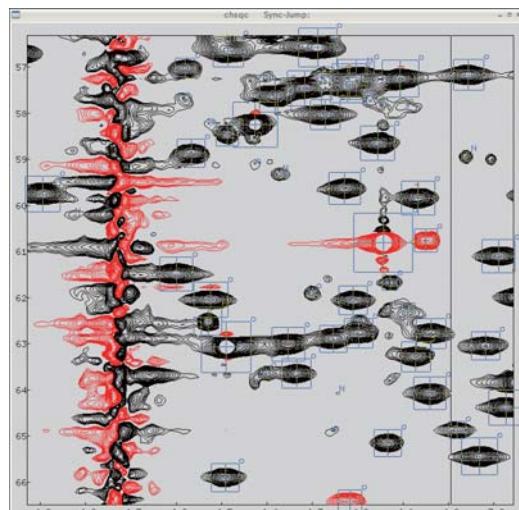
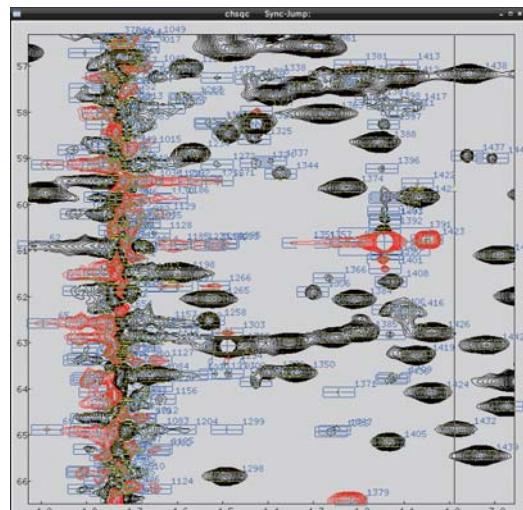
生体高分子 NMR データの国際的標準フォーマットとして NMR data Exchange Format (NEF) を開発してきた wwPDB 主催による Validation Task Force meeting が Gordon Research Conference 2017 の開催に合わせ 2017 年 6 月 12-15 日に米 Sunday River において開催されました。現行の wwPDB のフォーマットである PDBx/mmCIF から NEF への変換ツールと関連する dictionary の開発と実装の年間計画について議論されました。更に、より実用性の高いデータ品質の客観評価法に関しても議論され、より具体的に距離制限情報の基盤的データである NOE ピークテーブルの登録時提出の必須化についても検討されました。



米 Sunday River において開催された NMR-VTF NEF meeting の参加者

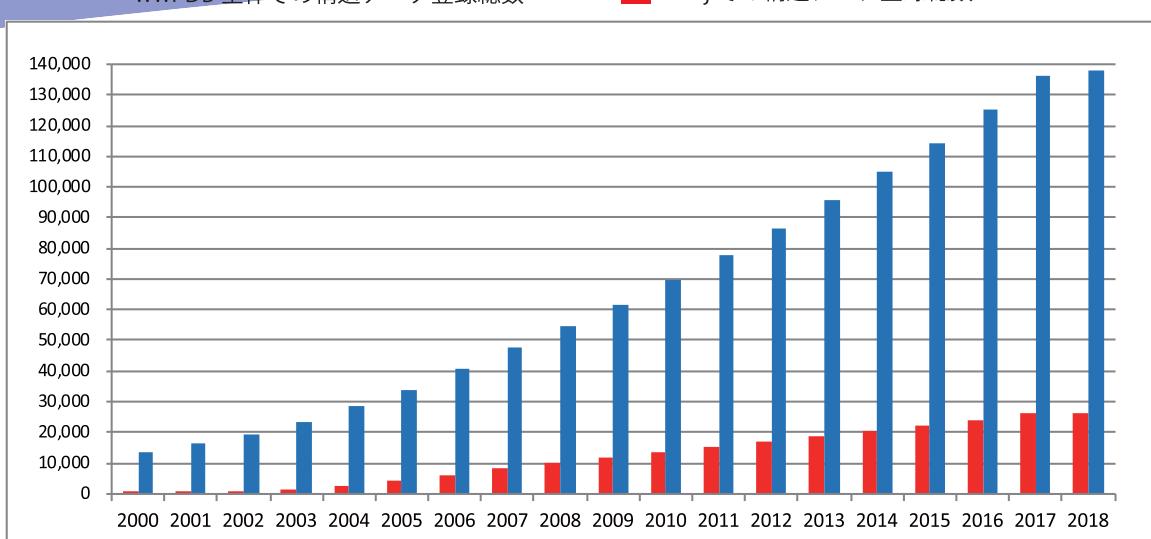
深層学習によって高度に自動化された解析ツール, MagRO の公開

NMR データの統合的解析ツール MagRO の新バージョンをリリースしました。新バージョンでは深層学習技術による画像認識機能により、従来では長時間に及ぶ手作業的によって排除していたノイズピークを高精度に自動除去する事が可能になりました。これはコンピュータがほぼ人間の視覚に近い直感的性能を獲得した事により実験データ解析への応用が可能である事を示した点で興味深く、今後の自動化への大きな寄与が期待出来ます (Kobayashi et al., under review)。



2D ^{13}C -CT HSQC spectrum,
深層学習フィルタ前 (左)
と処理後 (右)

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



※2018 年 2 月 14 日時点で公開中の PDB エントリー数 (obsolete エントリーを除く)

Event Report

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
2017 年 4 月 30 日、大阪大学蛋白質研究所（吹田市）



いちょう祭での3Dプリンタによるタンパク質構造の展示

All-in-one 合同講習会 2017 ~生命科学の最先端に触れてみよう~
2017 年 5 月 27 日、三島市文化会館（三島市）



生物物理学会でのランチョンセミナー

第 17 回日本蛋白質科学会年会 PDBj ランチョンセミナー
2017 年 6 月 22 日、仙台国際センター（仙台市）



結晶学会でのランチョンセミナー

第 55 回日本生物物理学会年会・PDBj ランチョンセミナー
2017 年 9 月 21 日、熊本大学黒髪北地区（熊本市）



サイエンスアゴラでの一般向け展示

第 6 回生命医薬情報学連合大会・PDBj ランチョンセミナー
2017 年 9 月 27 日、北海道大学（札幌市）



PDBj & BINDS 合同講習会

サイエンスアゴラ 2017
2017 年 11 月 24-26 日、テレコムセンター（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。

日本結晶学会 H29 年度年会・PDBj ランチョンセミナー
2017 年 11 月 24 日、JMS アステールプラザ（広島市）

生命科学系学会合同年次大会 (ConBio) 2017・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”
2017 年 12 月 6 - 9 日、神戸国際展示場（神戸市）

PDBj & BINDS 合同講習会
2018 年 2 月 20 日、大阪大学銀杏会館（吹田市）

日本薬学会・PDBj ランチョンセミナー
2018 年 3 月 27 日、金沢県立音楽堂（金沢市）

* 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>

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)
西山 夏代子 (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)
小林 直宏 (大阪大学蛋白質研究所・特任准教授)
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)

事務職員

清水 朋子 (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

中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所・教授)
藤 博幸 (関西学院大学理工学部・教授)
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・特任助教)
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・特任助教)

研究協力者

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 暁聰 (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, Scanner and SFAS

Protein Data Bank Japan

Contact

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

※ご質問やご要望は常時 webpage 左「お問い合わせ」より
受付けております。

お問い合わせ <https://pdbj.org/contact>

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



<https://pdbj.org/>