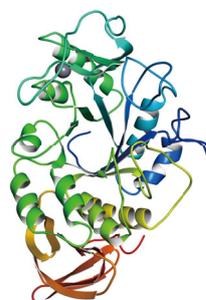
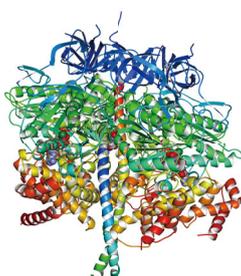
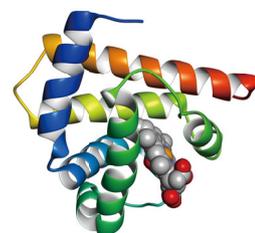
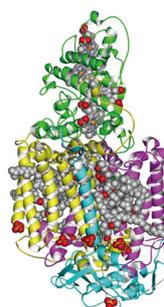
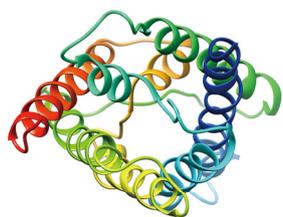
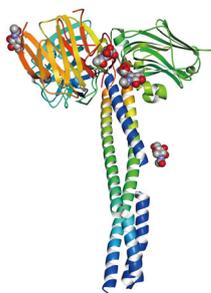
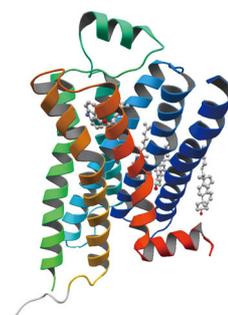
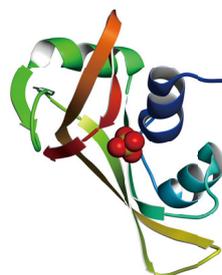
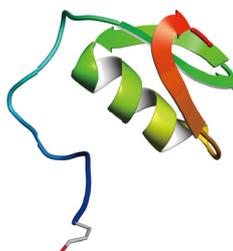
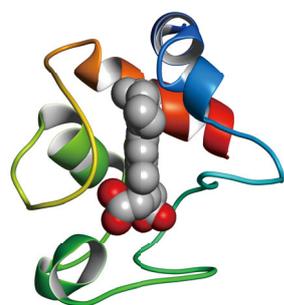
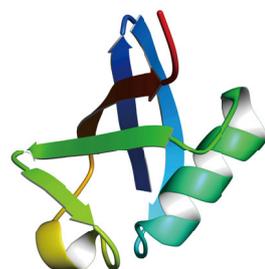
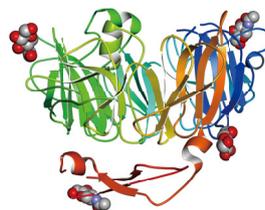
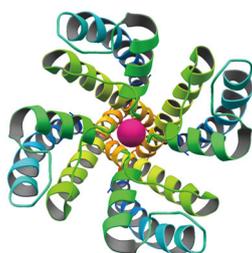
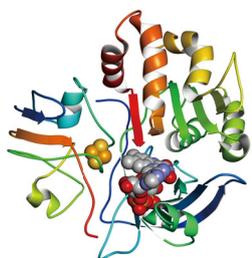
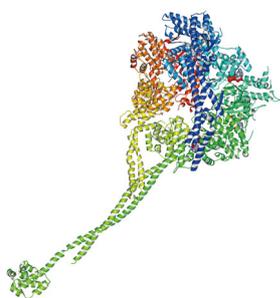
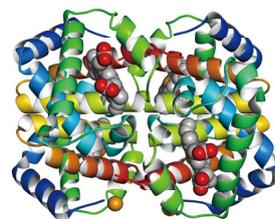


# PDBj Newsletter

2021年12月

## Vol. 22





## 第17回wwPDB諮問委員会

wwPDB の運営諮問委員会は毎年秋に wwPDB のパートナーが順番にホストを務めて開催されます。第 17 回 wwPDB 諮問委員会は、BMRB がホストとしてコネチカット大学で開催される予定でしたが、新型コロナウイルス感染症拡大を受けて、2020 年 9 月 30 日と 10 月 1 日の 2 日間に渡ってオンラインで開催されました。PDBj からは代表の栗栖に加えて、専門部会の山本雅貴委員（理研 SPring-8）と神田大輔委員（九州大学）に部会を代表して出席していただきました。コロナ禍での wwPDB 各サイトの運営状況や、2021 年に締結更新が予定さ



れている新しい wwPDB の定款の内容、さらには BMRB の運営拠点がウィスコンシン大学からコネチカット大学に移管された経緯が説明されました。wwPDB の将来像についても議論がなされ、EMDB を正式メンバーとして受け入れるとともに、中国とインドに PDB のフランチャイズを設けるスケジュールや準備状況が話し合われました。委員のみなさんには、時差の関係で日本を含む一部の方には大変遅い時間の開催にもかかわらず、専門的かつ建設的なご意見を頂戴し大変感謝申し上げます。

## BMRB諮問委員会

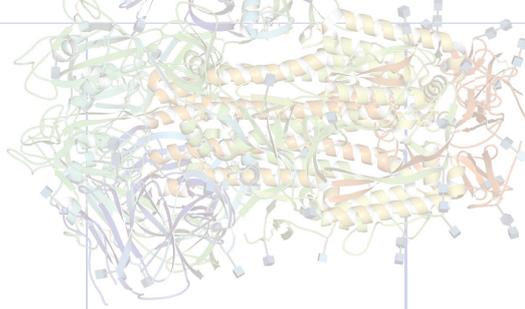
BMRB の運営諮問委員会は、例年春に米国で BMRB を運営していたウィスコンシン大学で開催されていましたが、2021 年からは運営母体がコネチカット大学に移管されたため、コネチカット大学で開催予定でした。しかし wwPDB の諮問会議と同様に、COVID-19 の影響をうけて 2021 年 5 月 11, 12 日の両日にオンラインで開催されました。PDBj からは代表の栗栖が参加し、BMRBj の活動報告を行うとともに今後の BMRBj の運営方針を説明しました。今後、新しい外部資金を申請し BMRB の高度化を強力に進めるべきであることが議論され、統合的なデータベース運用の点でも BMRBj の継続的かつ発展的な貢献が期待されるとの答申を得ています。

## wwPDBの定款を更新し、RDFが公式フォーマットの一つになりました

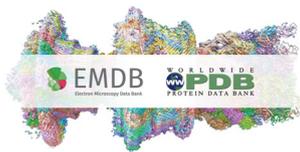
これまでの wwPDB の定款 (Charter) は 2013 年に合意したもので、幾つか現状にそぐわない点がでていました。そこで、新しい定款を作成し 2021 年 1 月に合意しました。EMDB は 2002 年に欧州バイオインフォマティクス研究所 (EBI) によって設立されました。それ以来、EMDB と wwPDB はデータの登録、アノテーション、検証に関する問題で協力してきました。2012 年以降、EMDB のマップデー

タは、wwPDB アーカイブ (ftp://ftp.pdbj.org/pub/) の一部として配布されています。新しい定款は、EMDB と wwPDB の長年の非公式な関係を正式なものとするものです。また、新しい定款では准メンバーというカテゴリーが新設されたので、今後、中国とインドを念頭に wwPDB の新しい地域拠点を設置することが可能となりました。定款の附則として、wwPDB が認める公式データフォーマットについて記載しました。PDBx/mmCIF フォーマットが Primary format であることを正式に記載し、PDBML(XML) と RDF の 2 つのフォーマットを公式な Secondary format に指定しました。データベースの統合利用に優れた RDF フォーマットの作成と利用を推進してきた PDBj としては大変重要な変更点です。代わりに、古くて限界の多い PDB フォーマットは正式なフォーマットとして記載されていません。PDB は 50 年前の創設以来、FAIR 原則（検索、アクセス、相互運用、再利用可能）に則った公共の資産として広く活用されてきました。wwPDB では、この度の定款改正で、FAIR 原則に賛同することを明記するとともにデータのアクセスライセンスを、クリエイティブ・コモンズの標準的なオープンソースライセンスである「CC0 1.0 全世界 (CC0 1.0) パブリック・ドメイン提供」として公開することを明記しました。従来のライセンスと同様に、PDB データは商用ユーザーを含むすべての方が自由にご利用いただけます。





## EMDBがwwPDBの正式パートナーになりました



クライオ電子顕微鏡マップおよび高分子複合体や細胞より小さなレベルでの構造の断面映像を収めた公開リポジトリ「電子顕微鏡データバンク」(EMDB)が、国際蛋白質構造データバンク(wwPDB)の正式なパートナーになりました。

(2021年6月25日)

## PDBx/mmCIFでの検証レポート提供開始

OneDepによるすべてのPDB登録において、PDBx/mmCIFフォーマットでのwwPDB検証レポートの提供を開始しました。PDBの構造データと同じ書式なので、構造データと検証レポートの両方で互いに参照しやすくなります。またデータの記述がより論理的になりデータベースで取り扱いやすくなります。PDBx/mmCIF形式での検証レポートは、PDBアーカイブおよびEMDBアーカイブ内で配布します。

(2021年6月1日)

## PDBIDと化合物IDの桁数追加

wwPDBでは、PDBx/mmCIF作業部会と協力し、PDBと化合物辞書(CCD)のID桁数を将来増やす検討を行っています。桁数の増えたIDを含むエントリーについては、従来のPDBフォーマットでのデータ提供ができなくなります。

(2021年4月20日)

## バイオキュレータの偉業: PDBjのキュレータが登録処理数10000件を達成!

wwPDBの見学有美子さんが10,000件登録処理を行いました、おめでとうございます! 見学さんは2000年、彼女の母校である大阪大学にPDBjが設立された当初からバイオキュレータとして務めてきました。wwPDBのバイオキュレータで登録処理数が10,000件を超えたのは彼女が最初です。



(2021年4月6日)

## 2021年6月移行のSHEETとSITEの対応について

PDBに登録される構造が大きくなり、複雑さが増してきたことにより、従来のPDBフォーマットを提供する範囲をさらに制限する必要が出てきました。そこで2021年6月8日より、SHEETに記述できないようなβシートを持つ構造については、従来のPDBフォーマットでのデータ提供は中止しました。これらの構造については、PDBx/mmCIFフォーマットで引き続きらせんやシートの情報を提供します。

(2021年3月16日)



PDB:7cwu

## EM検証レポートの提供開始

電子顕微鏡で解かれたPDBの各構造について、PDBの原子座標とEMDBのマップの検証レポート提供を始めました。この検証レポートにより、構造の品質を定量的かつ視覚的に評価し、アーカイブ全体の中で構造を比較することができるようになります。

(2021年1月12日)

## PDBにおける糖類の表現改良について

PDBでは、高分子構造に含まれる糖類の検索性や、他のデータベースとの相互参照性を向上させるため、以下に示す新たな糖類の表現方法を導入しました。

- ・化合物辞書における化合物の命名法を、IUPAC-IUBMB勧告にしたがった形式で標準化
- ・一貫したオリゴ糖の表記法を導入
- ・糖鎖科学で使われるツールを活用し、この業界で一般的に使われる線形記述法を採用
- ・PDB構造における糖鎖修飾部位の説明を追加

(2020年7月28日)

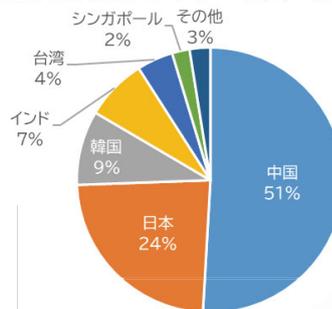
## OneDepでNMR距離制限情報の検証レポート提供開始

NMRで解かれたエントリーについて、OneDepで提供するwwPDB検証レポートに距離制限に関する検証結果も含めるようになりました。このデータを使って、データ内の潜在的な矛盾を見極めることができます。

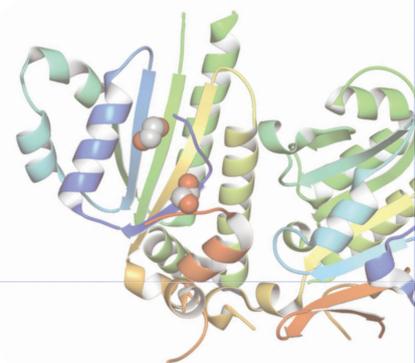
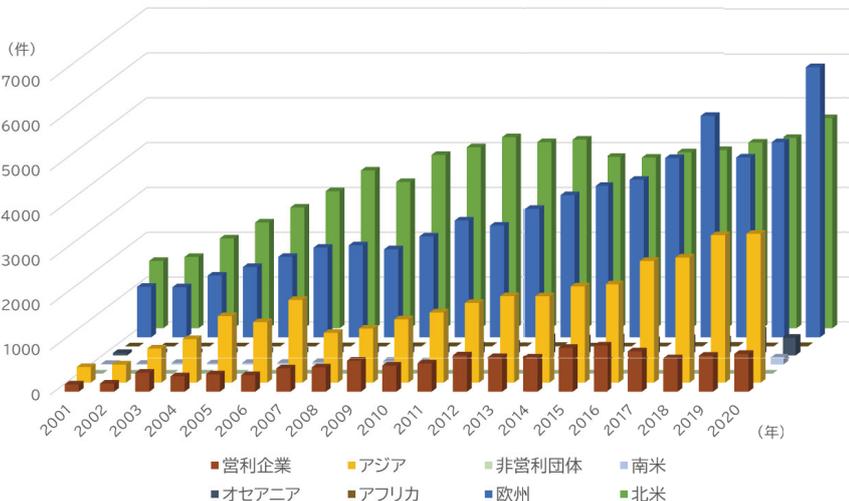
(2020年12月6日)

# PDBj Data Growth

PDBjが処理したPDBエントリーの国・地域分布（2020年）



wwPDB全体での地域別PDB登録数



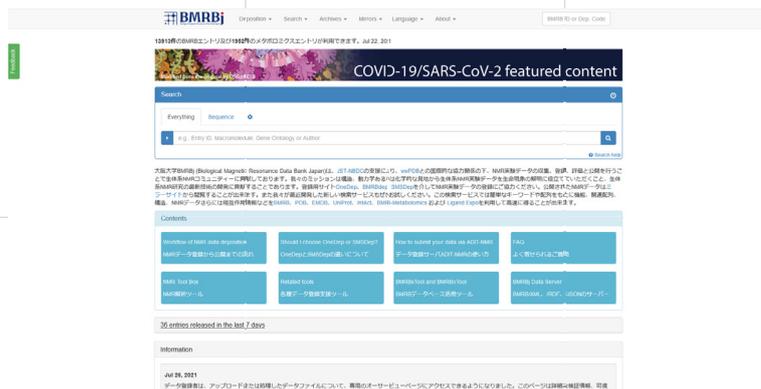
# PDBj BMRBj



BMRBj (Biological Magnetic Resonance Data Bank Japan, 旧称 PDBj-BMRB) は、PDBj における NMR データリポジトリサイトのグループ名です。今後も NMR コミュニティに向けたサービスを提供していきます。現在、OneDep, BMRBdep, および SMSDep システムを介して NMR 実験データを受け入れています。

OneDep システムは、NMR 実験データのアップロードに関して NEF (NMR Exchange Format) または NMR-STAR 形式の単一ファイルを受け入れています。これにより、NMR データのアーカイブ、配布、および再利用が容易になります。一方、既存の PDB-BMRB 共同エントリーの大部分については、BMRBj は NEF アーカイブを配布しています。各 NEF データは、エントリー検索ページ中で可視化コンテンツとして表示されます。

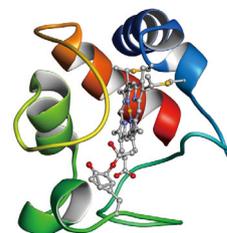
データ登録者は、アップロードまたは処理したデータファイルについて、専用のオーサビューページにアクセスできるようになりました。このページは詳細な検証情報、可視化された要約コンテンツを含みます。



# PDBj New Logo



PDBj では新たなロゴを作成しました。このロゴは、日本で最初に決定された構造「シトクロム c」(PDBID:1cyc) に基づきデザインしたものです。

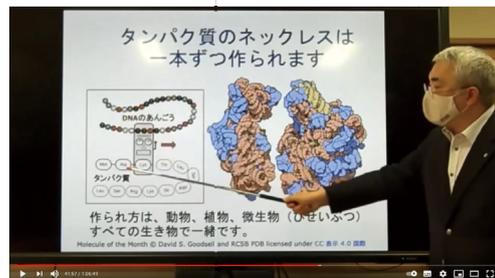


## サイエンスアゴラ2020

2020年11月22日(日)サイエンスアゴラ2020にてPDBj代表の栗栖がライブ配信を行い、約100名の方々に視聴していただきました。小学校高学年を想定した内容で、実演を交えタンパク質について解説しました。

録画映像はYoutubeで見ることができます。

<https://youtu.be/J60FFW85vyk>



## サイエンスフェスタ2021

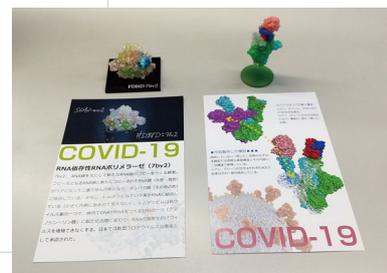
2021年8月21日(土)から約1年間オンライン開催される青少年向け科学イベントに出展しています。新型コロナウイルスのタンパク質の立体構造を説明するWEBページを作成し、そのページを説明する動画を作成しました。Webページは<https://numon.pdbj.org>から見ることができます。動画もYouTubeから視聴できます。

<https://youtu.be/31hkRkvGn9w>



## 利用事例

PDBに登録されている構造のデータと3Dプリンタを使ってつくった分子モデルが販売されています。以下はスタジオミダス社から販売された、新型コロナウイルスタンパク質のモデルです。



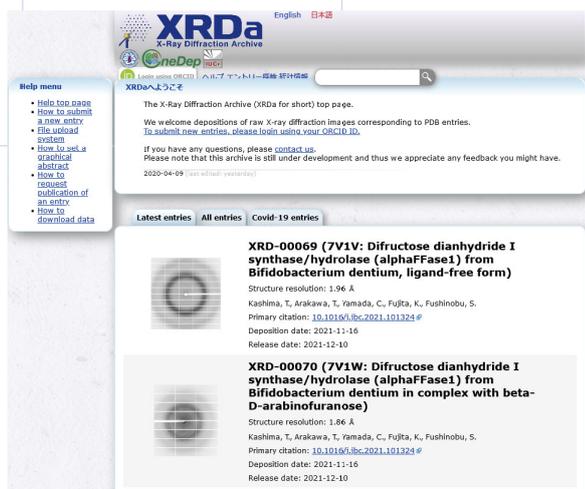
## BINDS-PDBj講習会「PDBから見てわかるタンパク質の最新研究」

2021年9月30日(木)13:00-17:30にリモート講習会を開催しました。講習会では、X線、電顕、NMRの研究者の方々の最新の研究成果の講演と同時に、研究で使われた立体構造データを受講者の皆さんに分子ビューアで観察してもらう講習も行いました。当日の講義資料、講演動画の一部はWebページから公開されています。<https://pdbj.org/news/workshop20210930>



## PDBエントリーに紐づいた回折イメージの登録ができるようになりました

現在 wwPDB が責任を持って編集・管理・公開するアーカイブは、原子座標と構造因子を含むPDB, NMRの実験データのアーカイブであるBMRB, それにクライオ電子顕微鏡によるマップを集めたEMDBの3つです。アジア地区では、PDBjがBMRBのミラーサイトを開設しNMRの実験データの登録業務を分担しています。また、2018年にEMBL-EBIと学術交流協定を締結して開始したEMPIARの活動では、アジア地区からのクライオ電子顕微鏡の2次元生画像をアーカイブに登録する支援業務を行っていますが、これまでX線や電子線・中性子線の回折イメージをアーカイブする活動は行ってきませんでした。PDBエントリーに直結する回折イメージをアーカイブしているデータベースは、欧米を中心にいくつか存在しますが、そのどれもwwPDBのメンバーが行っている活動ではありませんでした。2020年にPDBjは独自にPDBエントリーに紐づいた回折イメージのアーカイブ(X-ray Diffraction Archive: XRDa, <https://xrda.pdbj.org>)を開始しました。アジア・中東地区で回折法により構造解析されたPDBエントリーに紐づいた回折データを収集しています。ORCID iDにより認証されるMy entriesページから簡単に登録できるので、ぜひご活用ください。





2020年から2021年にかけて、世界中は新型コロナウイルス感染症（COVID-19）と闘ってきました。今現在も、大阪では毎日新規患者数が報告され、PDBjのメンバーの一部も自宅での勤務を余儀なくされています。多くの学会やシンポジウムが延期・オンライン開催となり、非常に不自由な状態が続き生活が大きく変貌してしまいました。PDBjが参加する会合も、OneDep 開発者会議（2020年4月）がオンラインでの開催となり、wwPDB AC 会議（2020年10月）もBMRBのホストでオンライン開催となりました。そして事前に準備を進めてきたPDB設立50周年をお祝いする4つのイベント（wwPDB財団が2021年5月4、5日に開催したPDB設立50周年記念特別シンポジウム、RCSBが主催した米国でのPDB設立50周年記念セッション、PDBeがEMBL会議として開催した欧州でのPDB50周年シンポジウム、そしてPDBjが日本生物物理学会のサテライトシンポジウムとして主催したアジアでのPDB50周年記念シンポジウム）も、全てがオンライン開催となりました。PDBjがホストとなって11月24日に開催したPDB50周年記念シンポジウム『アジア地区構造生物学の最先端とProtein Data Bank 50年の歩み』にご参加頂きました皆様には、改めてお礼申し上げます。大変盛会のうちに会議を終了することができました。このアジア地区でのPDB50周年企画は、大阪大学蛋白質研究所、日本生物物理学会、そして（一財）蛋白質研究奨励会のサポートにより参加費無料で開催されたことを追記させていただきます。

印象に残っているCOVID-19に直接関係する話題の一つ、お話しさせていただきます。新型コロナウイルス（SARS-CoV-2）は中国で発生したこともあり、

2020年1月26日に中国の研究者から最初の関連構造がPDBjのOneDepに登録されました。構造生物学のコミュニティーでは構造解析した蛋白質の構造情報は、必ず日米欧のいずれかのサイトで事前にPDBに登録する約束になっています。通常、登録済みPDBデータは、該当の情報を含む研究が論文として発表されるまで非公開とされ、実験のオリジナリティーが担保される仕組みです。しかし、蛋白質の構造情報は、立体構造に基づいた創薬研究に積極的に活用される基盤情報であり、新型コロナウイルスの構造情報も、できるだけ早い構造データの蓄積と公開が期待されていました。そこで我々は日米欧の合意の下、新型コロナウイルスの構造情報がPDBに登録された場合、個別に登録者（研究者）と連絡をとり、論文発表を待たずに即時公開することを強く勧めることにしました（アジア・中東地区のデータ登録者にはPDBjが連絡します）。最初のSARS-CoV-2関連エントリーに登録した中国の研究グループは、我々の依頼に快く応じてくださりました。その後続く1000件以上のエントリーについても、ほとんどの研究者が即時公開の依頼に誠実に対応してくださっています。構造生物学コミュニティーの底力を感じた出来事でした。協力して下さった研究者の方々に改めて感謝申し上げます。

## 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）  
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）  
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）  
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）  
横地 政志（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

川端 猛（蛋白質研究奨励会・研究員/  
大阪大学生命機能研究科招へい准教授）  
中根 崇智（大阪大学蛋白質研究所・特任講師）  
常住 規代（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

秘書 佐久間 量子（大阪大学蛋白質研究所・特任事務職員）

#### PDB/EMDBデータベース高度化グループ

藤 博幸（関西学院大学理工学部・教授）  
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・特任助教）  
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（大阪大学蛋白質研究所・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 EM Navigator  
鈴木 博文（早稲田大学先進理工学部・次席研究員）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 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, StructNavi, 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

### 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 附属蛋白質解析先端研究センター内

ご質問やご要望は  
ウェブページ左にある「お問い合わせ」  
<https://pdbj.org/contact>  
から常時受け付けています

