

Protein Data Bank Japan

(日本蛋白質構造データバンク)



THE CAMBRIDGE
CRYSTALLOGRAPHIC
DATA CENTRE

第 18 回日本蛋白質科学会年会ランチョンセミナー

日時 2018 年 6 月 28 日 (木) 11:45-12:35

会場 C 会場 (朱鷺メッセ 中会議室 302B)

1. PDB and BMRB: Innovation of database and application to machine learning PDB と BMRB: データベースの高度化と機械学習への応用

小林 直宏 (大阪大学蛋白質研究所)

大阪大学蛋白質研究所は、世界的な生体高分子の立体構造データベースである PDB(Protein Data Bank) のアジア拠点として Protein Data Bank Japan (PDBj) を組織し、国際組織 worldwide PDB (wwPDB) の構成メンバーとして活動しています。また、生体高分子核磁気共鳴法のデータベースである BMRB の日本サイトとしても活動しており、PDBj-BMRB を運営してきました。PDBj では、主として X 線結晶解析、NMR 解析、電子顕微鏡解析により得られた構造座標の登録、アノテーション、データの無償公開を行い、特にデータのオントロジーにより厳密に記述された XML 形式、更には machine readable な言語として RDF による公開と SPARQL エンドポイントの公開も行っております。近年ではデータ品質を評価する Validation report の RDF 化に取り組みそれらの効果的な応用について紹介いたします。

また、我々は機械学習の一種である深層学習を応用する事で永らく自動解析の障害となっていたノイズを効果的に除去する方法を開発し、従来法に比べて解析の効率を数百倍程度向上させることに成功しました (Kobayashi N. et al., under review)。セミナーでは新世代の解析ツール Deep MagRO の詳細について解説します。

2. The Cambridge Structural Database (CSD) - An invaluable resource for drug discovery

ケンブリッジ結晶構造データベース (CSD) - 創薬のための極めて重要なリソース

Dr. Paul Sanschagrin, Cambridge Crystallographic Data Centre, USA

CCDC より新しいツール : CSD-CrossMiner をご紹介いたします

The modern researcher is awash in structural information including enzymatic drug targets, biologic medicines, and biological assemblies. In addition to these biological structures, knowledge of small molecule structures alone can also play a significant role in understanding biological processes and accelerating drug discovery. The Cambridge Structural Database (CSD) is the world's repository of small molecule crystallographic structures, containing over 940,000 professionally curated entries. The CSD provides a wealth of information for understanding molecular geometry and molecular interactions that has found use in a breadth of fields including drug discovery, materials science, and chemical education. The first part of this presentation will provide several examples where the CSD and CCDC tools have made an impact in drug discovery.

Together with the Protein Data Bank (PDB), the CSD represents an invaluable resource of information for the drug discovery process. With an effective use of these databases it is possible not only to characterize protein-ligand interaction, but also to design novel molecular motifs that mimic established ligands. This year CCDC released CSD CrossMiner, a novel software that allow to extensively mine PDB and CSD databases in terms of pharmacophore queries. The second part of the presentation will provide a brief introduction to CSD CrossMiner and its application in drug discovery process.

◆PDBj に関する問合せ

PDBj 事務局 Tel: (06) 6879-4311, Fax: (06) 6879-8636

PDBj データベース登録事務局 Tel: (06) 6879-8634, Fax: (06) 6879-8636

◆CSD に関する問合せ

化学情報協会 Tel: (03) 5978-3622 <http://www.jaici.or.jp/>