

大阪大学蛋白質研究所「共同利用・共同研究」委員会  
蛋白質立体構造データベース専門部会  
議事要旨

日 時： 平成 31 年 2 月 5 日（火）13 時 30 分～15 時 5 分  
場 所： 大阪大学蛋白質研究所 本館 2 階 中会議室 （テレビ会議システム使用）  
大阪大学東京オフィス 多目的室 1  
出 席 者： 大阪大学蛋白質研究所  
栗栖源嗣（大阪大学蛋白質研究所）、藤原敏道（大阪大学蛋白質研究所）、  
井上 豪（大阪大学大学院工学研究科）、神田大輔（九州大学生体防御医学研究所）、  
山本雅貴（理化学研究所放射光科学総合研究センター）  
大阪大学東京オフィス  
由良 敬（お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科）、  
上村みどり（帝人ファーマ(株)生物医学総合研究所）  
欠 席 者： 千田俊哉（高エネルギー加速研究機構物質構造科学研究所）  
陪席者： 国立研究開発法人 科学技術振興機構 バイオサイエンスデータベースセンター企画運営室  
舘澤 博子（研究開発推進グループ 調査役）、  
眞後 俊幸（研究開発推進グループ 主査）、  
畠中 秀樹（研究チーム 研究員）

議事に先立ち、栗栖部会長から、今回は、昨年の会議で検討課題としてあがっていたテレビ会議システムを利用しての会議を開催することとした旨の説明があった。なお、これに伴い、東京オフィスには、由良委員、上村委員のほかに、国立研究開発法人 科学技術振興機構（JST）から 3 名の担当者 に陪席いただいているとの発言があり、JST の 3 名の担当者から自己紹介があった。

引き続き、栗栖部会長から、（資料-0）に基づき、前回議事要旨の確認依頼の後、（資料-1）に基づき、本部会の位置づけ及び所掌等についての説明、並びに（資料-2）に基づき、委員の紹介があり、今年度で任期満了の委員については、議題のその他で改めて説明するが、来年度の就任をお願いしたいとの発言があった。

【協議・承認事項】

議事 1. 蛋白質立体構造データベースの運営状況について

栗栖部会長から、（資料-3）に基づき、平成 30 年度の蛋白質立体構造データベースの運営状況について報告があった。

- 2018 年 PDBj の活動、月別 PDB 登録数、国別 PDB 登録数、EM 登録数、BMRB 登録数、PDBj 利用状況、開発項目 1：データ検証レポートの高度化、開発項目 2：NMR データベース関連ツールの開発、開発項目 3：EMPIAR データベース、人材育成について数値に基づく実績報告があった。
- 運営にあたり、内部会議は、毎週のように開催しているほか、学外の会議についても、頻繁に開催または参加しているとの報告があった。

- Worldwide PDB 諮問会議は、2018 年 11 月 2 日に英国ケンブリッジで開催され、本部会からは、井上委員と山本委員に参加いただいた。なお、次回は、2019 年 10 月 18 日に本研究所で開催される予定である。
- 由良委員より、PDBj へのデータ登録数と電子顕微鏡やビームラインの数で割り、各国の悪テレビーを検証することはできないかとの質問があった。井上委員が、AMED の PO として課題を引き取り、AMED-BINDS で検討して頂くことになった。
- 由良委員より、検証レポートの RDF 化が進んで実験データとの一致度を指標として検索が可能になることを評価するコメントがあった。しかし、検索クエリーの作成が極めて専門的なため、講習会等を開催してはどうかとのコメントがあった。栗栖部会長から、DBCLS との共同研究として、検索クエリーの平易化を検討しており、より使って頂きやすいサービスとしていきたいとの回答があった。

## 議題 2. 2019 年度蛋白質立体構造データベースの運営計画について

- 栗栖部会長から、(資料-4)に基づき、2019 年度の蛋白質立体構造データベースの運営計画について説明があった。
- 運営、国際連携、運営諮問会議、登録者・ユーザー会議、開発項目 1：CCDC との連携による CSD との統合化、開発項目 2：データ検証レポートの高度化、開発項目 3：EMPIAR データベースの登録開始、開発項目 4：wwPDB と協力して mmCIF エディターの開発、人材育成について活動計画が紹介された。
- 本年の BMRB 運営諮問会議には、藤原委員と BMRB-PDBj の岩田研究員が出席予定であることが報告された。
- 来年度の Worldwide PDB 諮問会議は、2019 年 10 月 18 日に本研究所で開催されるが、本会議への参加者は 3 年を目処に交代することが wwPDB AC で推奨されているため、来年度も、井上委員と山本委員に参加いただきたい旨の説明があった。なお、井上委員が 3 年目となるため、井上委員の後任は、神田委員にお願いしたいとの発言があり了承された。
- CCDC 関連の活動について、国立大学の法人化以前の古い枠組みで行っていた CCDC の契約処理の流れを変更し、2020 年から蛋白質研究奨励会に外国送金を委託する新たなフローで実施する予定である旨説明があった。
- CCDC の学内ユーザーへの課金も 2019 年度から実施することとし、既に学内ユーザーには通知したとの説明があった。
- PDBj と CCDC の統合化案について、説明があった。
- 上村委員より、PDBj と CCDC の統合化案の詳細について質問があり、栗栖部会長から、データベース構築の部分は、運営方針の違いにより統合することはできないとの説明があった。また、CCDC と PDB のクロス検索や、同一の 2 次元スケッチャーを用いたユーザーインターフェイスの統一を進めていきたいとの説明があった。
- 昨年の本会議でもお願いしたが、アノテータの人材確保に苦慮しているとの説明があり、適任者をご存知であれば紹介いただきたい旨の発言があった。
- アノテータに合わせて EMPIAR データベース管理運営グループの新しい研究者を雇用する必要がある、適任者をご存知であれば紹介いただきたい旨の発言があった。
- 山本委員から、mmCIF エディターの開発方針について質問があった。栗栖部会長から、参考資料を用いて現在の PDB フォーマットの利用を停止する方針に至った経緯が説明され、mmCIF フォーマットはテキスト編集ができないため、エディターの開発・配布が必須との認識が示された。

### 議題 3. その他

栗栖部会長から、上村委員の任期が今年度で満了となるが、引き続き、委員として協力をお願いしたい旨の発言の後、任期については、同部会の他の委員の任期と合わせたく、今回は 1 年間でお願いしたいとの発言があり、了承された。

また、来年度の本部会も今回と同様、テレビ会議にて蛋白研と東京オフィスで開催することとしたい旨の発言があった。

### 配布資料：

(資料-0) 平成 29 年度 蛋白質立体構造データベース専門部会(H30.2.28) 議事要旨

(資料-1) 蛋白質研究所「共同利用・共同研究」委員会 内規

〃

専門部会内規

(資料-2) 蛋白質立体構造データベース専門部会 委員名簿

(資料-3) 蛋白質構造データベースの運営状況について

(資料-4) 蛋白質構造データベースの運営計画について

(参考資料) wwPDB AC meeting 資料