

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： 令和 2 年 2 月 28 日（金） 15 時～16 時 40 分

場 所： 大阪大学蛋白質研究所 本館 4 階 セミナー室（Zoom テレビ会議システム使用）

出席者： <大阪>

栗栖源嗣（大阪大学蛋白質研究所）

<東京>

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）

<福岡>

神田大輔（九州大学生体防御医学研究所）

<大韓民国・ソウル>

Bong-Jin Lee（ソウル大学校 薬学大学）

<台湾・台北>

Chwan-Deng Hsiao（台湾 中央研究院）

欠席者： 藤原敏道（大阪大学蛋白質研究所）、井上 豪（大阪大学大学院薬学研究科）、

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）、

山本雅貴（理化学研究所放射光科学総合研究センター）

陪席者： <大阪>

加藤貴之（大阪大学蛋白質研究所）

<東京>

眞後俊幸（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)企画運営室）

議事に先立ち、栗栖部会長から、新型コロナウイルス（COVID-19）の感染拡大防止の観点から、本研究所及び大阪大学東京オフィスでのテレビ会議システムによる委員会開催に代わって、Zoom ビデオ会議システムを通じての開催となったことについて説明があった。

引き続き、本日参加いただいている委員及び欠席委員並びに陪席者の紹介の後、昨年の議事要旨についての確認が行われた。なお、委員からのコメントは特になかった。

【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、令和元年度の蛋白質立体構造データベース(PDBj)の運営状況について報告があった。

○2019 年 PDBj 内の活動（運営、研究者向け会合、アウトリーチ活動を含む）、PDBj におけるデータ処理状況（月別 PDB 登録数、国・地域別 PDB 登録数、World-wide PDB (wwPDB) での EM 登録数、国・地域別統計、BMRB の登録数と国・地域別統計、EMPIAR データベースについて、PDBj へのアクセス数及び利用状況について報告があった。

○wwPDB の活動は、インターネット会議だけでなく日米欧の各拠点で直接会ってプロジェクトを進める必要性もあることから、日本のほかアメリカと英国にある拠点で開催するワークショップや

- 会議にもスタッフが参加しているとの報告があった。
- 最新の電子顕微鏡構造解析法（3DEM）で deposit されるデータの登録基準や検証方法について、新たな policy を策定する必要があり、1月に英国で専門家による会議を行ったので、そのアウトプットを学術誌で公表する予定である。
 - 次に、PDBj への登録状況については、2016 年を境に中国からの登録数が日本より多くなり、アジア地域の半分程度を占めることとなっている。のちに詳しく報告するが、2020 年には、PDB China が活動を開始する計画となっている。
 - 3DEM の登録数についてもアジアでは中国からが多い。世界に目を転じると、半分近くが北米からの登録となっている。ただし、データのサイズが大きく処理が相当に複雑であることから、PDB China が始動した初期には、中国からの登録も PDBj が引き続き担当する計画である。
 - BMRB の登録の新方針について報告があった。
 - Data-out の活動では、2019 年の PDBj へのアクセスは、6 月が多くなっているが、その理由は不明である。論文の準備開始時期とも推測される。
 - EMPIAR への登録も増えている。未だ PDBj でデータ処理することができないので、英国の EMPIAR データベースに送っているが、PDBj から英国にデータを転送するだけで 4、5 日かかる場合もあった。将来的には PDBj でアノテートできることを計画している。
 - 2019 年 10 月 18 日に、Worldwide PDB (wwPDB) の国際運営諮問委員会を当研究所で開催し、成功裡のうちに終えることができた。
 - シャオ委員より、3DEM のデータ登録の際のデータの質をどう保っているのかについての質問があった。栗栖部会長から現状について回答があった。
 - 上村委員からは、EMPIAR データベースの日英の同期をとる仕組みについて質問があった。栗栖部会長から現状について説明された。

議題 2. 2020 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、2020 年度の蛋白質立体構造データベース(PDBj)の運営計画等について報告があった。
- PDB China の始動が予定されており、2019 年 10 月の国際運営諮問委員会において、事務所の所在地、主要なスタッフ、予算等の概要について報告があった。中国からのデータは量だけでなく、データに寄っては複雑なものもあるので、最初の 1-2 年は PDBj の指導のもと、比較的単純で容易な X 線結晶解析のデータからアノテーションを始め、徐々にすべての手法によるデータに移行していくことを計画していると報告された。具体的には COVID-19 が落ち着いた後に栗栖部会長と PDBj スタッフが事務所を訪問し、ネットや機器の環境を確認した後、2 名程度のアノテーション業務担当者を研修のために日本に招へいし、2020 年末までには、基本的な業務が遂行できる体制を取れるようにしたい。
 - これに関して大きな課題となるのは、香港と台湾からの登録をどう扱うかということである。栗栖部会長から、シャオ委員には、地域の関係者のアドバイスや示唆をいただけるようお願いしたいとの依頼があった。
 - 由良委員より、PDB China の具体的所在地について質問があり、栗栖部会長より、上海科技大学と上海国立蛋白質科学センターの 2 か所が共同で設置するとの説明があった。
 - オブザーバーの加藤教授より、中国特有のインターネット環境はデータを処理するうえで問題とならないかというコメントがあり、栗栖部会長から、これについては大きな検討課題であるとの発言があった。OneDep の処理はいくつかの検証ルーチンやデータベースをリンクしながら運用するため、複数のシステムを利用して多くの段階を経て進めていくものであり、システムも頻りにアップデートされている。稼働中の拠点でもシステムのインストールや更新が追いついていない時もある。中国の Data-in 担当者にはこれらの全体像を理解する必要がある。最初は PDBj のゲス

- トアノテーターとして研修を受け、リモートでの登録を経験して初めてPDBのOneDepシステムを上海に整えるという順序で、慎重に進める予定であるとの説明があった。
- 2020年の活動予定に戻る。OneDep Developer SummitはCOVID-19の影響でZoomによる会議開催となった。米国・英国・日本との時差の大きさが再び課題となるが、非常に重要な会議であり、年に2回程度の開催は必須と考えているとの説明があった。
 - 2020年1月の、韓国生体分子科学連合学会学術大会でのランチョンセミナーは新しい試みであったが、リー委員と委員の研究室スタッフならびに学生の支援に謝意が示された。
 - 2020年1月には、Single particle EM data management workshopが英国で開催された。登録されるデータを適切に検証するため、そのルール作りが急がれるが、登録必須データと推奨データの切り分けや、1つの構造に複数のマップがあるSegmentation mapの登録指針が議論された。夏をめどに合意事項をまとめた論文を執筆予定である。専門家として参加していただいた加藤教授に謝意が述べられた。
 - 長期的には、PDBが50周年を迎えるため、2021年5月5日に米国・インディアナポリスで記念のシンポジウムを予定していることについても説明があった。また、2021年にマレーシアで開催予定のアジア結晶学連合会議(AsCA)では、アジア地域の研究者向けにPDBjがPDB50周年記念ワークショップを主催する。韓国や台湾からのキーパーソンの招へいを計画しているため、シャオ委員・リー委員への協力が依頼された。
 - 引き続き、栗栖部会長から、資料3に基づいて、PDB/EMDB/BMRB コアアーカイブの今後について活動計画が説明された。

議題3. その他

- 栗栖部会長から、本日予定していた議事は終了したが、各委員からの質問及びコメントがあればお願いしたいとの発言があり、以下の質疑応答等があった。
- リー委員から、イタリアにあるBMRBミラーサイトとPDBjの違いについての質問があり、栗栖部会長から、イタリアはBMRBのData-outサービスだけで、現地でデータ処理などを行っているわけではない旨の説明があった。
 - 上村委員より、wwPDBとしてのEMDBに関する将来の計画や予定について意見を求められ、栗栖部会長より、今は単粒子構造解析に注力しているが、これからはサブトモグラムアベラージュなどでも高分解能構造データが得られるようになってきたので、対応を検討している旨の回答があった。
 - シャオ委員より、韓国の学会でランチョンセミナーを催したことは、PDBjの活動を紹介する機会としてよかったのではないかとのコメントがあった。台湾でも生物物理学会などの機会にセミナーを実施してはどうかとの提案があった。
 - 最後に栗栖部会長より、上村委員、井上委員、由良委員、の任期が満了となることから、これまでのご協力に感謝するとともに、2020年4月からの次期委員として新たに、大阪大学超高压電子顕微鏡センターの光岡薫教授と、協和キリン株式会社低分子医薬研究所 齋藤純一副研究所長が委員として加わられるとの報告があった。さらに、神田委員と山本委員がPDBjの代表として、wwPDBの諮問委員会に参加される旨の発言があり了承された。