

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3年3月17日（水）11時～
場 所： 大阪大学蛋白質研究所 本館2階 大会議室（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）
藤原敏道（大阪大学蛋白質研究所）
光岡薫（大阪大学超高压電子顕微鏡センター）
<福岡>
神田大輔（九州大学生体防御医学研究所）
<つくば>
千田俊哉（高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所）
<静岡>
齋藤純一（協和キリン株式会社 低分子医薬研究所）
<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： 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： 伊藤隆司（NBDC 統合化推進プログラム 総括、
九州大学大学院医学研究院 医化学分野 教授）
川口哲（バイオサイエンスデータベースセンター（NBDC） 調査役）
井手隆広（バイオサイエンスデータベースセンター（NBDC） 研究員）
太田紀夫（バイオサイエンスデータベースセンター（NBDC） 主任調査員）

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、本年も、本研究所および各委員の本務先等を結ぶ Zoom テレビ会議システムによる委員会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ならびに陪席者の紹介の後、前回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2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。

○2020年の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、PDBjへのアクセス数及び利用状況について報告があった。

○COVID-19の影響を受け、予定されていたほとんどの学会やアウトリーチ活動が延期やオンライン開催に移行するなどして影響を受けた中、2020年1月に韓国・光州市の光州科学技術院で開催さ

- れた、2020 年韓国生体分子科学連合学会学術大会でランチョンセミナーを実施して PDB の活動を
紹介できたことは大きな一歩となった。国外（アジア）の学会で、このような機会を持ったのは
初めてである。今後も機会があれば検討したい。
- 登録作業に関わるスタッフも COVID-19 の影響でリモートワークが増えた。自宅でも作業できる環
境を整え、処理の遅延などがなくアノテーション作業を進めることができた。
 - 今回は PDBj の専門部会（アドバイザー会議という位置付け）なので、PDBj 個別のデータアクセ
ス数などをお示ししているが、wwPDB は同一のデータを日米欧の 4 極から同時公開しているので、
アクセス数やデータ処理数については、wwPDB 各拠点の合算数を政府機関等に示すよう共同方針
を立てて対応していく。
 - また、新たな活動としてクライオ電子顕微鏡の 2D 生画像のアーカイブである EMPIAR のブローカ
ーサイトとしての活動を開始した。これは英国 EBI との 2 拠点間共同研究である。
 - EMPIAR-PDBj としては、英国の EMPIAR データベースのミラーリングを 24 時間行っているが、デ
ータの大きさが膨大であるため、少しずつ追いついているというのが実情である。また、日本か
らの EMPIAR への登録は PDBj で代行業務を行っている。国内の研究者が登録データの入ったハー
ドディスクを PDBj へてに郵送し、登録が完了したらそれを返送するという方法で数件の登録を支
援した。
 - wwPDB では組織改編とそれに伴う新しい覚書(2021 年 1 月 1 日発効)と設立許可証を締結するところ
で、現在各拠点での最終的な法務チェックを行っている。これにより、正式に上海を拠点とする PDB
China をメンバーとして迎えることになる。
 - 歴史的経緯から各種ジャーナルから PDB へのリンク先が RCSB となっているケースが多く、英国や
日本にアクセスを希望するといった地域性は全く反映されていない。そこで、wwPDB では DOI の
付与にかかる課題解消策についても検討を行っている。現在 PDB に登録されたすべての構造デー
タには DOI を付与しているが、より多くのジャーナルにランディングページへのリンクを確立し
てもらえるよう主要学術誌を発行する出版社に働きかけを行っている。そうすることで、希望す
る地域拠点のウェブを利用可能となるので、委員のおられる台湾や韓国においても、協力願える
とありがたい。
 - 重要なプロジェクトとして、wwPDB では構造データのバージョニングを引き続き受け付けている。
同じ実験データでより高精度の構造に差し替えたり、公開データの誤りを登録者が修正したりす
る仕組みのことである。現在も使われている OneDep システムを介して登録された比較的新しいデ
ータのバージョニングは比較的容易だが、それ以前の古いエントリーについて可能となっている。
新型コロナウイルス感染症の影響で、バージョニングの希望例が増えており、これは、データベ
ースの品質向上という意味で歓迎すべき方向性だと考えている。
 - 各拠点に目を向けると、2020 年 4 月 1 日付で予定されていた、BMRB の次期副総括責任者の着任が
キャンセルとなった。ウィスコンシン大学（副）とコネチカット大学（主）の共同運営体制で NIH
からの補助金が入り下りたが、最終的にウィスコンシン大学はプロジェクトから撤退し、コネティカ
ット大学単独で運営することになった。ウィスコンシン大学からコネチカット大学（Uconn
Health）への研究員の異動も滞りなく完了し、ジェフ・ホッホ氏が単独 PI となった。問題が表面
化した際には PDBj への影響も危惧されたが、最終的に移転による PDBj への影響はなかった。
 - 次に、クライオ EM による構造データの検証について報告された。コロナ禍前の 2020 年 1 月に EBI
でワークショップを共催し、その議論の結果を踏まえて新しい検証レポートの作成を 2021 年 1
月に開始した。2021 年 1 月のワークショップには、日本から栗栖部会長の他に光岡委員（阪大超
高圧電顕センター）、加藤貴之教授（阪大蛋白研）、Radostin Danev 教授（東大院医）に出席して
いただいた。この新しい検証レポートは、EM マップ自体の検証と、EM マップと PDB 構造の一致度

の検証の両方を含んでおり、品質向上に必須の第一歩となった。関連して、栗栖部会長より 2020 年度の wwPDB AC 会議において問題提起された意見について紹介がなされた。wwPDB AC 会議の席上で 1 人のアドバイザーから「EM のマップの分解能が低くホモロジーモデルを当てはめただけの構造が PDB に散見されるが、これは計算予測構造を含めないという PDB のポリシーに反しないか？」という質問があった。今後、継続して議論することになった旨が紹介された。

- Hsiao 委員より、EMPIAR あるいは類似のデータベースが米国拠点にはないのかということについてのコメントがあった。光岡委員からも英国の EMPIAR のデータが膨大過ぎて管理できなくなる問題は日本でも起こるのではないかと、千田委員からも解決方法が見つかれば研究者にとっても大変に助けとなるのではないかとコメントがあった。

議事 2. 2021 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、2021 年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。

- COVID-19 には引き続き影響を受けると予想されるため、wwPDB 国際諮問委員会を含む内部のミーティング、国内外を含めた学術会議やセミナーなども、ほとんどがオンライン、あるいは対面とのハイブリッド開催となりそうである。
- 国際諮問委員会には PDBj から 2 名の代表者が必要であり、栗栖部会長より神田委員と千田委員のご協力をお願いしたいとの依頼があった。
- PDB China や PDB India のスタッフに対する Data-out, Data-in にかかる研修が成功するよう、プランの立案が計画されている。Data-in に関しては簡単な X 線構造データから始め、データ登録の質が wwPDB の各拠点と同等になるよう研修を行わなければならない。中国のスタッフが、確実にデータを処理できるまでは、研修は厳しいものになると予想されている。昨年度の国際諮問委員会でも、特に中国特有のインターネット環境についての課題についての議論が行われた。当初は 2020 年に研修やその準備を開始する予定であったが、COVID-19 の影響で遅れているが 2021 年には開始した。
- PDB China の One-dep システムを取り入れることについても、日本で開始したのと同じ筋書きで行うことを予定している。すなわち PDBj に設置した OneDep システムを使ってデータ処理を開始することになる。
- 栗栖部会長から Hsiao 委員に、例えば、台湾や香港の研究者が、上海に設置される PDBc を通じて PDB に登録することについてどう考えるか？との質問があったが、登録者によっても意見が異なるので、今現在は PI の所属国(地域)で自動で割り振られる登録サイトを、PDBc と PDBj を選択できればありがたいとのコメントがあった。栗栖部会長は参考になる意見をいただいたので wwPDB の打ち合わせなどでも検討したいと返答した。
- 栗栖部会長から、これまでアジア地区にだけ X 線回折実験の生画像をアーカイブするデータベースが存在していなかった事情が説明された。それに対して、PDBj が独自に新しい X 線回折イメージのアーカイブを開始したので、積極的に活用していただきたいという連絡がなされた。
- 5 月には、PDB 設立 50 周年を記念したシンポジウムも予定されている。アメリカ東部時間で行われるため日本では深夜の開催となるが、PDB 運営の中心メンバーが揃って参加し、貴重な発表を聞ける機会となる予定だ。時差の関係で難しいかもしれないが、全ての諮問委員を招待するので、ぜひ参加していただきたい。また会議にかかる情報の拡散にご協力いただきたいとの依頼があった。
- PDB 設立 50 周年にかかるアジア地域での記念行事は、第 59 回日本生物物理学会年会で共催シンポジウムを行う(2021 年 11 月 24 日に予定)ことになっている。栗栖部会長より、国外の委

員には、講演者の推薦にご協力いただきたいとの依頼があった。

- Lee 委員より、コロナ禍により PDB の構造登録に影響はあったかどうかについて質問があった。栗栖部会長から、多くの放射光施設がロックダウンにより当初使えなかったため、一定の影響はあったと考えている旨の回答があった。

議事 3. その他

栗栖部会長から、本日より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。

- Hsiao 委員より、現在の EM の検証レポートの改良の方向性について質問があった。栗栖部会長から、以前の EM 検証レポートは構造的なジオメトリチェックだけであったが、今はマップ自体の分解能評価やマップとモデルの一致度の評価がなされているという説明があった。今後は、より Half map や複数種のマップの登録を必須化するなどして、実験データに対する PDB 構造の検証が強化される方向性であると説明された。
- 続けて、Hsiao 委員より、台湾でも国内の生物学系学会が企画されており、対面でもオンラインの場合でも、PDBj にはぜひセミナーを実施してはどうかとのアドバイスがあった。
- 千田委員からは、To be published のステータスで公開されている PDB エントリーに対して、登録者情報を開示してほしいという wwPDB に対して出された依頼の趣旨が説明された。栗栖部会長から、本件は wwPDB AC でも議論された、現在は AC からの諮問を待っている状況である旨が伝えられた。
- 齋藤委員からは、個人的な意見として製薬会社がもっている沢山の構造情報は wwPDB に登録できるものもあるが、社内手続き的に難しい面がある旨が説明された。栗栖部会長から、Group Deposition のシステム自身は完成していて、現在は RCSB でのみ利用可能となっていると説明された。必要があれば、PDBj にも導入するので意見をいただきたい旨の説明があった。