

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4年3月10日（水）10時30分～

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）

<兵庫>

山本雅貴（理化学研究所放射光科学総合研究センター）

<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： 齋藤純一（協和キリン株式会社 低分子医薬研究所）

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）

岩島真理（バイオサイエンスデータベースセンター（NBDC）室長）

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）

木下いづみ（バイオサイエンスデータベースセンター（NBDC）調査員）

岡本幸子（バイオサイエンスデータベースセンター（NBDC）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、本年も当研究所および各委員の本務先等を結ぶ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、新規委員、欠席委員ならびにバイオサイエンスデータベースセンター（NBDC）陪席者の紹介があった。

【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

初めに栗栖部会長から、令和3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。

○2021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、すべてオンライン）、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、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、XRDaとBSMAに関する登録状況と合わせて、PDBjへのアクセス数及び利用状況について報告があった。

- 今年度はPDB 設立 50 年となったことから 2 つの記念シンポジウムが開催された。5 月には wwPDB が共同主催してシンポジウムを実施し、コロナ禍で完全オンラインでの開催であった。11 月には PDBj がホストとなって「PDB アジア地区 50 周年記念シンポジウム」と題し 8 名の講演者を迎えたイベントをおこなった。その際に、講師の 1 人であった上海の蛋白質研究センター所長の Wenqing Xu 教授から PDB China が正式に活動を開始するとの報告があった。国内ならびにアジアからのべ 300 名以上が積極的に参加し盛会となった。
- 関連して、Journal of Biochemistry で特集号を組み、PDB 設立 50 周年を記念した記事を複数掲載し、表紙にも採用された。
- 季節的な変動はあるが、アジアや中東からの登録は全体として増え続けており、その 5-6 割が中国本土からのものである。中でも EM 登録数は急激に伸びている。この地域における高性能機器の導入が増えつつあるとの推察ができる。
- wwPDB の国際諮問委員会は現地時間 2021 年 10 月 19 日に EMBL-EMDB の主催でオンライン開催された。時差にもかかわらず、PDBj の専門部会を代表して千田委員と神田委員に議論に参加していただいた。その多大なご協力に感謝する。会議では、wwPDB の次期議長として、アジア大洋州地域からの選出であり PDBj が推薦したジェニファー・L. マーティン教授（オーストラリア・ウーロンゴン大学）が指名されたことを申し添える。
- 国際諮問委員会での数々の議論の中で最新の話題と言えば、実験の生データと AI 構造予測技術を使用した構造データモデルの扱いである。これらの新しい分野の研究者と交流を持ちながら、今後の方針や問題点について検討していく予定である。
- 2021 年度の報告について委員からの以下のような質問があった
- 千田委員から、クライオ EM の PDB モデルオンリー登録について、マップの登録とセットで行われるべきではないかという質問があった。栗栖部会長より、マップとモデルの登録時期がずれるケースはありうるが必ず PDB モデルの登録には該当する EM マップが存在するという説明がなされた。併せて EM マップと PDB モデルの整合を確認する検証レポートの高度化が進んでいることも説明された。
- 千田委員から、PDB China の wwPDB への参加の方法について質問があり、栗栖部会長から PDB China はまず准メンバーとなり、その後にパフォーマンスが検証されて正会員になる計画で、段階を踏んだ貢献の仕方が議論されてルール化されている旨が説明された。
- Hsiao 委員より、AlphaFold や RosettaFold で予測した構造を PDB に登録できるのか、そう入ったケースは想定されないのかという質問があった。栗栖部会長から、純粋に予測だけで建てられた構造は PDB には登録できないが、予測構造と XL-MS や SAXS 等とセットにした Integrated/Hybrid methods によって建てられた構造は PDB-Dev に登録するようアナウンスしていることが説明された。ゆくゆくは PDB-Dev も PDB に統合される予定である。
- 山本委員より、結晶解析と電子顕微鏡の登録の割合がアジアと他地域とで違いがあるかという質問があった。また、結晶解析と電子顕微鏡とで分解能や平均の分子サイズに違いがあるかという質問もあった。栗栖部会長から、世界的には電子顕微鏡構造の登録の伸びが著しいが、アジア地区はそのトレンドが少し遅れてきているように感じていると回答された。また、電子顕微鏡の平均の分解能は上昇基調で、分子サイズも小さなものが対象になってきていると感じているとコメントされた。光岡委員より、分解能の向上は少し話が違うかもしれないという発言があった。
- 千田委員より、アジア地区、特に日本からの登録の傾向（結晶 vs 電子顕微鏡）のデータは公開可能かという質問があった。栗栖部会長より、現状では各国別の統計は公表していないが特別な目的で数字が必要な場合には、個別に相談してほしい旨説明があった。

## 議題 2. 2022 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、2022 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。

- 引き続き COVID-19 には影響を受けると予想されるため、国内外を含めたイベントはオンラインあるいは対面とのハイブリッド開催が予定されている。
- 国際諮問委員会には PDBj から 2 名の代表者が必要であり、栗栖部会長より新たに、千田委員と Hsiao 委員に PDBj 代表としてのご協力を依頼し両委員のご承諾をいただいた。米国 RCSB がホストとなる 2022 年度の wwPDB 国際諮問委員会は現在のところ対面開催が予定されているが、各委員出発国の海外渡航に関する規則やガイドラインを十分参照してから参加を決定していただきたい。オンラインでの参加も可能。
- 研究を支援していただく資金についても最新状況を報告する。まず、文部科学省より、大阪大学蛋白質研究所の共同利用・共同研究拠点活動としての PDBj の次期活動計画が承認された。2022 年 4 月から 5 年間の JST-NBDC（統合化推進プログラム）の研究課題(延長)は採択審議中である。新しい申請書では、AI 構造予測技術に対応するためのデータ駆動型研究基盤を整えることに焦点を当てている。同じく 2022 年 4 月から 5 年間の AMED からの研究助成申請(延長)については、単独ではなく構造生物学のコンソーシアムの一部として申請し、同じく採択審議中である。
- 大阪大学に近い一般財団法人蛋白質研究奨励会内に、新たに拠点となる PDBj 分室が設けられた。2022 年 4 月から正式にその活動を開始する。
- wwPDB の下で Associate Database を指定し、タンパク質構造の Data Ecosystem を完成させるべく、構造予測や実験生データのアーカイブ群との連携を強める事が説明された。
- PDBj が主管となる PDB China の立ち上げ計画が wwPDB において承認された。中国のアノテーション担当スタッフは、できれば 4 月に上海から来日できるよう準備を整えつつある。最初から重要な研修が続くが、倫理規範やアノテーションに必要な機器のセットアップ等については、細心の注意を払いながらひとつひとつ進めていく予定である。

## 議題 3. その他

栗栖部会長から、本日予定し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。

- 千田委員より、例えば 10 年先など、持続的な運用のための長期的な人員確保計画について質問があった。栗栖部会長から現状が説明され、2022 年 4 月より 1 名、若手アノテーターを採用予定であることが報告された。
- 千田委員より、サブトモグラフアベレーシングの登録は増えているかという質問があった。栗栖部会長から、増えていくと考えているが、これから対応すべき将来的課題であるとの回答があった。
- 山本委員より、各 Funding の割合と 5 年後の Funding の見込みについて質問があり、栗栖部会長から概数が説明された。
- 千田委員からは更に、長期的な資金調達の目途についても踏み込んだ質問があり、山本委員も次期 5 年の競争的資金が終了した後 PDBj を安定して管理・運営するための財源について懸念が示された。栗栖部会長は、NBDC からのご支援が 20 年を超えていることの謝意とともに、この活動の拠点が日本では唯一大阪大学にあることに対してさらなる支援を得よう大学本部協議していくこと、この活動が研究者のコミュニティだけではなく、産業界にとっても極めて重要であ

ることを鑑み、国内だけではなく世界規模でのサポート確保の方策を検討することが強調された。  
千田委員からはぜひその方向で進めるべきである支持するコメントがあった。

- 最後に、韓国の Bong-Jin Lee 委員が 2022 年 3 月で任期満了になることが報告された。後任として、同・成均館大学校の Kyeong Kyu Kim 教授に委員の交代が打診済みで、ご内諾をいただいていると報告があった。

以上