

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 5 年 3 月 6 日（月）10 時 00 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）

宮ノ入洋平（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・水原市>

Kyeong Kyu Kim（韓国 成均館大学校）

<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 JST NBDC 事業推進部
川口哲 同上
井谷睦己 同上
太田紀夫 同上

議事に先立ち栗栖部会長から、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り、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 JST NBDC 事業部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。

○特筆すべき話題としてまず、Protein Data Bank China (PDBc) のアノテーターによるリモートのデータ処理が 2022 年 9 月に開始されたことが報告された。ただし現在は、中国本土からのものであっても、NMR や Cryo EM, その他複雑なエントリーは PDBj にてデータ処理を行っている。この順調なスタートは、上海より 2 名のアノテーターが来日して PDBj の主導のもとに研修を受講した成果によるものである。講師を担った PDBj アノテーターは研修期間中処理作業ができなかったため、事前に計画したとおり、他の PDB 拠点担当者がアジアからのエントリー処理作業を分担した。

○2022 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、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。

○蛋白質研究奨励会に PDBj の分室を設置し、JST-NBDC の支援により PDB/BMRB/EMDB の登録作業が開始されたことが報告された。

○wwPDB の国際諮問委員会には、現地（米国東海岸時間）2022 年 10 月 14 日に RCSB-PDB の主催で開催され、PDBj からは時差にもかかわらず千田委員と Hsiao 委員にオンラインで参加していただいた。そこでは、PDBc の準会員参加が正式に認められた。正会員には、現正会員各機関が満場一致で承認した時点での昇格となる。PDBj は引き続き PDBc のメンターを務める。

○PDBj の Data-out に関する www, ftp, rsync のアクセス総数が報告された。

○PDBj のアウトリーチ活動について報告があり、特に 2022 年 11 月に韓国済州島で開催された AsCA2022 会議において PDBj ポスター賞がソウル国立大学の Hyunmin Kim 博士に送られたことが報告された。

○2022 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、アジア地域からのデータエントリーについて、その処理は PDBj と PDBc の間ではどのような割合で分担しているのかとの質問があった。栗栖部会長より、当初より比較的シンプルなエントリーのみを PDBj のシニアアナレーターが PDBc に割り振っており、それはアジア全体からの 6%にとどまるとの説明があった。データのエントリーとその処理については、正会員である PDBj が責任を持っている。将来的に PDBc での全てのデータが問題なく処理できるようになったら、現在米国 RCSB で受け付けているオセアニア地域からのエントリーも PDBj が担当するであろうとの追加の説明があった。

千田委員から、PDBj にある EMPIAR データベースの現状について質問があった。栗栖部会長より、PDBj は EMPIAR の登録支援を行っており、この活動は順調であるとの説明があった。また、EMPIAR の全てのデータは一旦 PDBj にダウンロードされたのちに、古いエントリーや注目度の低いエントリーを LTO テープに保存してディスクスペースを確保していることが紹介された。現在の PDBj にある EMPIAR のミラーサーバーのディスク容量は 2.5 PB である。

山本委員から、LTO テープに保存したエントリーへのアクセス方法について質問があった。栗栖部会長より、PDBj に LTO からディスクへの展開を依頼してもらい準備が完了したら連絡する方法、もう一つは EBI の EMPIAR から globus で直接ダウンロードしてもらう方法の 2 つが解説された。

山本委員より、PDBj はどのような生実験画像を収集しようと思っているのかという質問があった。栗栖部会長より、PDB や EMDB に紐づいた生画像を収集することに意味があると思っているとの回答があった。具体には、sub-tomogram 平均化を目的としない通常の細胞を撮影したような画像は対象外とし、中性子回折や MicroED の回折画像は対象となるとの説明があった。XFEL をもちいた SFX の回折像については、ディスクスペースの問題があるので要相談であるとの追加説明があった。

議題 2. 2023 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、2023 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。

- IUCr2023にて wwPDB の一員としてブースを出展すること、台湾の生物物理学会でランチョンセミナーを行うこと、などが重要な計画として紹介された。イベントはほぼ対面形式に戻る予定である。
- PDB-Dev の日本語版が準備されて近日中に公開される予定であると報告があった。
- 昨年度に引き続き千田委員と Hsiao 委員が PDBj 代表として wwPDB 国際諮問委員会ご協力をいただき、10 月に英国 EMDB がホストとなる 2023 年度の wwPDB 国際諮問委員会にオンラインで参加される予定である。
- 希望的には 2-3 年のうちに PDBc が完全に始動するまで、メンターとして PDBc へのサポートは継続する。wwPDB 国際諮問委員会では、始動までの確実に明確なタイムラインを示すことと定期的に研修の振り返り評価を行うことを助言されている。
- 研究の運転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ている。次に、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)は無事採択され、新しい申請書として 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)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たが、同じく採択された。

○2022 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

千田委員より、MicroED による低分子とタンパク質の構造解析比率について質問があった。栗栖部会長から、圧倒的に低分子の解析例が多く、タンパク質の例はまだ 100 例に満たないとの報告があった。さらに、低分子の登録は CCDC の CSD に登録されるので、直接 PDB とは関係はないが多重散乱の影響により R 値が高くなる傾向があるので、精密化法が確立するまでは生の回折イメージを公的に保存する意義が高いとの説明があった。栗栖部会長は、CCDC の National Affiliated Data Center の代表を務めている。

Hisao 委員から、PDBj は日本だけでなく全アジアの生イメージ画像の収集ができるのかとの質問があった。栗栖部会長から、できますとの回答があった。

議題 3. その他

栗栖部会長から、本日本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った。

- まず、栗栖部会長より、この諮問委員会では台湾と韓国から代表をしていただいているが、東アジアの研究者のみなさんのサポートを感謝申し上げるとのコメントがあった。
- 最後に、この諮問委員会の企業からの委員について 2023 年度より Axcelead Drug Discovery Partners 株式会社、医薬探索研究、主任研究員の曾我部 智氏に交替されることが報告された。すでに打診済で内諾をいただいている。
- 栗栖部会長より、台湾の生物物理学会で PDBj がスポンサーセミナーを開催することを助言いただいた Hisao 委員に謝辞が述べられた。

○最後に栗栖部会長より、全ての委員に追加の質問がないか問い合わせがなされた。併せて、PDB China のスムーズな立ち上げが、アジア地区の PDB 活動にとって非常に重要であると強調され、引き続きコミュニティの皆さんの協力が呼び掛けられた。

以上