

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 6 年 3 月 13 日（水）13 時 00 分～（オンライン）
出席者： 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）
山本雅貴（理化学研究所放射光科学総合研究センター）
曾我部智（Axlead Drug Discovery Partners 株式会社）
Chwan-Deng Hsiao（台湾 中央研究院）
Kyeong Kyu Kim（韓国 成均館大学校）
欠席者： 神田大輔（九州大学生体防御医学研究所）
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）
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）
吉岡健 JST NBDC 事業推進部 主任専門員
太田紀夫 同上

議事に先立ち栗栖部会長から、本日ご参加の委員、新規委員、欠席委員ならびにご陪席の JST NBDC 事業部担当者の紹介があった。また、昨年度の議事録案が了承された。

【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

令和 5 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。

- 令和 5 年度 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，アクセス数及び利用状況について報告があった。
- 各学会がほぼ対面開催へと戻ったため，国内の学会にいくつか参加した。どの学会においてもランチョンセミナーや展示は盛況で，PDBj や wwPDB とともにある一定程度以上の存在感を示すこととなった。
- 名古屋で行われた第 61 回日本生物物理学会年会において，wwPDB 設立 20 周年を記念した PDB Student Prize が，優秀な口頭発表を行った 3 名の学生に授与された。wwPDB を代表し PDBj はこの受賞に関する運営を担った。
- PDB China の登録処理を行うことへの強力なサポートは継続した。PDB j のリードアナテーターが登録申請を吟味し，中国のアノテーターに処理依頼を送っている。PDBc で処理できる件数が増え，PDBj が管轄する総処理数のうち 24%を中国で担当できるようになった。
- EMPIAR-PDBj についても順調にデータ登録支援をおこなっている。EMPIAR のミラーサイトの運営については，100%のミラーは難しいのでアジア地区からのエントリーやダウンロードの多いエントリーに絞って公開し，それ以外は LTO テープにバックアップして on demand でデータ提供する方針を EBI と相談していると報告された。
- wwPDB の国際諮問委員会は，現地(英国・グリニッジ標準時)令和 5 年 10 月 27 日に EMDB の主

催で開催された。時差にもかかわらず、前年度に引き続き PDBj を代表して千田委員と Hsiao 委員が、オンラインで参加された。そこでは、カイル・モリス氏が新しい統括責任者として EMDB に加わっていることが発表された。

- PDBc が正式に wwPDB の準メンバーとなったことについて論文が発表された。他のデータセンターが PDBc をチームの一員として迎え入れる手続きや、そのために整えた運営の仕組みなどが紹介された。

議題 2. 令和 6 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、令和 6 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、登録者とデータベース使用者を同等に対象として、国内の複数の学会でランチョンセミナーやブース出展などを計画していると報告された。国際的には、8 月に韓国・ソウルで開催の ICMRBS2024 でランチョンセミナーを行うことが決まっており、ここに参加の宮ノ入委員が講演者の一人での予定であることが紹介された。
- また、wwPDB 国際諮問委員会は PDBj がホストとして、10 月中旬に大阪大学蛋白質研究所において開催される。重要な業務のひとつとなるため、PDBj からは日常業務に差し障りのない範囲でできるだけ多くのメンバーが参加する予定であると説明された。この専門委員会からは、千田委員と Kim 委員に PDBj の運営諮問委員会代表として会議に参加していただくことが了承された。
- 研究資金について最新状況が報告された。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。2024 年 3 月に所属機関を退職される Hsiao 委員に代わり、国立台湾大学医学部の Nei-Li Chan 教授がこの部会の委員となることが承認された。次に、令和 4 年 4 月から研究を開始している JST-NBDC (統合化推進プログラム) の研究課題では、AI 技術に代表されるようにデータ駆動型の研究基盤として整備することに焦点を当てていることが説明された。まずは東北大学で整備されている jMorp との連携を進めていると報告があった。同じく令和 4 年 4 月から 5 年間の支援を受けている AMED からの研究助成申請では、単独ではなく構造生物学の大きなコンソーシアムの一部として相関構造解析を支援する役割を担っていることが説明された。
- PDBj が分室を置く、一般財団法人蛋白質研究奨励会においても、登録処理は順調に進んでおり件数も順調に増える予想であることが説明された。
- PDBc の完全な業務開始に向けて、PDBj は引き続き強力にその登録作業サポートを継続することが説明された。
- 最後に、Hsiao 委員のこれまでの多大な貢献について PDBj として感謝が表明された。特に、台湾や香港からの研究者が登録を行う際の、「登録地」に選択肢を設けることができるように方針が決まった際には、Hsiao 委員の知見や、委員を通して集められた地域の研究者の声が最適解を導くにあたり必要不可欠であったとコメントされた。

3. コメントと質疑応答

栗栖部会長から、本日子定した議題は以上であるが、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。

- Kim 委員から AlphaFold DB との関係と、今後予測構造をどのように取り扱っていくのか質問があった。栗栖委員長から、PDBc が AlphaFold DB を開発した Deep Mind 社 (Google 傘下) と共同研究関係にあるが、wwPDB および PDBj としては AlphaFold との提携状況にはないこと

が説明された。PDBjとしては、実験構造情報とは厳密に区別しながら AlphaFold DB の情報を提供する予定であることが説明された。

- 曾我部委員から、jMorp との連携について期待が述べられた。また、ヒト配列データの公開および企業からのデータ登録の可能性について質問があった。栗栖委員長から、jMorp の公開データ部分との連携であることが説明され、企業からのデータ登録についても中村前代表の時代に開発された自動精密化パイプラインが PDBj にはあるので、それを活用したグループ登録の道を活用した積極的なデータ登録への期待が述べられた。
- 山本委員から、XRDa や EMPIAR への生画像登録について、ファイルサーバの容量限界があると思うので、どう言った種類のデータをどれだけ集めるのか、データアーカイブの方針について質問がなされた。栗栖委員長からは、研究者は自分の実験データを保管する義務があるが、特に引用の多いもしくは目新しい実験データについてはぜひ XRDa や EMPIAR に登録して欲しい旨の説明がなされた。また、ディスク容量については現在は 3PB が PDBj として維持できる限界であり、それ以上は LTO や BlueRay Disk を併用した体制になることが説明された。
- 光岡委員から、Cryo-EM のデータ登録に関して変更予定の有無が質問された。栗栖委員から、Cryo-EM については検証レポートを含めて色々と改善すべき点が多く、コミュニティの皆さまの協力が不可欠である旨説明された。
- オブザーバ参加の JST NBDC プログラム総括の伊藤教授から、委員の皆様へのお礼と共に DICP プログラムは本年度中旬に中間ヒアリングが予定されていると情報共有があった。また、jMorp との統合利用ポータルの開発に対して強い期待が寄せられた。

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、部会は 14:30 に閉会した。

以上