

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8年2月26日（金）14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）
古賀信康（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（大阪大学超高圧電子顕微鏡センター）
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）
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（Axelead Drug Discovery Partners 株式会社）
Nei-Li Chan（台湾 国立台湾大学）
Kyeong Kyu Kim（韓国 成均館大学校）

陪席者： 白井剛（統合化推進プログラム（DICP）研究アドバイザー
長浜バイオ大学バイオサイエンス学部）
馬場健史（統合化推進プログラム（DICP）研究アドバイザー
九州大学生体防御医学研究所）
植田奈穂子（JST NBDC事業推進室 統合化推進プログラム（DICP））
太田紀夫（JST NBDC 事業推進室 統合化推進プログラム（DICP））

議事に先立ち、栗栖部会長が部会PDBj諮問委員会のメンバーと、助成機関のひとつである陪席参加のJST-NBDC事業推進室担当者を歓迎する挨拶で始まり、この部会の目的について説明した。委員の任期についても確認が行われ、次期2年間も引き続き委員を務めていただくことなどが話し合われた。

栗栖部会長はまた、wwPDB諮問委員会に参加された千田俊哉教授とKyeong Kyu Kim教授に対して、wwPDBの将来の方向性に関する議論においてPDBjコミュニティを代表して尽力されたことへの謝意を述べた。

続いて、前回会議の議事録内容の確認を行い、委員には、会議終了後に修正点やコメントがあれば提出するよう依頼された。

【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7年度の蛋白質立体構造データベース（以下 PDBj）の活動報告があった。

○ 定期的なプロジェクト会議およびデータセンター間の連携

wwPDBの中核となるアーカイブの持続可能な運用を確保するため、定期的なプロジェクト会議およびデータセンター間の会議を継続して開催した。データベースシステムに直接関わる技術的な課題や問題を議論するための開発者会議が定期的に行われているほか、データ処理の運用方法を共有し、個々のデータ登録やアノテーションに関する問題を検討するためのアノテーター会議も定期的に行われた。さらに、必要に応じてBMRB/BMRBjチームや他のwwPDB各拠点間の会議も行われた。こうした定期的な連携は、国際的なPDB、BMRB、およびEMDBの各アーカイブを安定して運用していく上で不可欠なものとして重視している。

○ アウトリーチ活動ならびに地域での広報活動

国内で行われた日本蛋白質科学会、DICPネットワーク会議、IIBMP2025、日本生物物理学会、

および大阪大学蛋白質研究所でのイベントなど、数多くの学術会議、ワークショップ、アウトリーチ活動に参加した。また、台湾・台北で開催されたアジア結晶学会議をはじめ、アジア地域における国際的な活動にも参加して展示ブースを運営し、PDBjおよびwwPDBの活動に関する情報提供を行った。さらに、東京のテレコムセンターでJST（科学技術振興機構）が主催したイベントにも参加し、タンパク質の構造情報を紹介するブースを運営した。

○ データ登録に関する統計

PDB、EMDB、およびBMRBの登録に関する統計を報告した。PDBおよびEMDBの登録のかなりの割合はアジア諸国からのものである。特にEM登録に関しては引き続き中国が大きな割合を占めた。この状況は、アジアにおける今後のデータ登録業務の体制構築に重要な示唆を与えるものである。令和7年度に処理されたEM登録の総数は約15,000件で、NMR登録も引き続き増加傾向にあり、約780件であった。BMRBjは、米国のBMRBから回された分を含め約170件の登録を処理した。PDBjは今後も、地域の担当範囲や利用可能なリソースに応じて登録およびアノテーションの業務負荷を分担するため、他のwwPDBデータセンターと連携を続けていく。

○ PDBjへのアクセス数統計

アクセス数は年間を通じて変動し、特定の時期には増加が見られる。米欧の他のデータセンターと比較するとPDBjのアクセス数は小規模だが、依然として特にアジアを中心に多数のユーザーにサービスを提供し続けている。世界的なPDBアーカイブの管理は、主要な3つの地域データセンター間での連携がますます強化されており、PDBjは引き続きアジアやその他の地域のユーザーに向けてデータ提供サービスを行っていく。

○ EMPIAR@PDBj

PDBjは、アジアのユーザー向けにEMPIARデータの提供を継続した。EMPIARのアーカイブ全体は非常に巨大な容量に達しているため、PDBjではローカルストレージへの保存に関して選択的な戦略を採用している。アジアに関連するエントリやアクセスの多いエントリは高速アクセス可能なディスクに優先的に保存している一方、アクセスの少ないその他のエントリはテープに保存している。現在PDBjで運用可能なディスク容量は約3.5PBで、この選択的な保存戦略は、ユーザーが欧州からデータをダウンロードすることなく、ローカル環境で高速にデータにアクセスできるため、アジアのユーザーにとって有効であると報告された。また、PDBjはアジアの研究者に対し、クライオ電子顕微鏡（cryo-EM）の生データをEMPIARに登録するよう引き続き働きかけている。

○ Xtal Raw Diffraction Archive (XRDa)

会議の時点で、XRDaには243件のデータセット（約12.2 TB相当）が登録されており、将来の構造解析や再現性の確保において、回折生画像の保存が重要であることが強調された。XRDaは、PDB構造や関連する構造研究に紐づく回折生データへのアクセスを提供するという点で極めて特徴的なリソースである。PDBjは今後、国際的な結晶学会やPDBjのアウトリーチ活動などを通じて、XRDaへのデータ登録をさらに推進していく計画である。

○ Biological Structural Model Archive (BSMA)

PDBjは、分子動力学シミュレーションの軌跡データを格納するBSMAについても報告した。現在、このアーカイブには68件のエントリと約61TBのデータが格納されている。非常に大規模な分子動力学データセットの保存に伴う課題を含め、現在アーカイブの将来的な拡張に関する議論を継続している。

○ 国際的なwwPDBの活動

BMRBが主催するwwPDBサミットおよびwwPDB諮問委員会の活動に参加した。wwPDBの各パートナ

一は、PDB-Chinaの継続的な開発や、中国からのデータ登録に関する処理業務の移管を含め、グローバルなデータセンターの今後のあり方について協議を行った。PDBjはPDB-Chinaの立ち上げを支援している。中国本土からのデータ登録数が非常に多いことから、PDB-Chinaは今後ますます重要な役割を担うと期待される。PDB-ChinaがOneDep関連のインフラストラクチャの運用・保守を段階的に自ら行えるよう、上海からシステムエンジニアリングを招聘してトレーニングする体制を構築する計画についても議論された。

○ PDBjの新しいポータルサービス

UniProtベースの統合ポータルの立ち上げに続き、PubChemベースの新しいポータルの開発を進めた。この新ポータルは、特に専門家以外のユーザーが、化学成分を含む適切なPDBエントリーを特定できるようにすることを目的としている。たとえば、アスピリンのような化合物について、ユーザーはその化合物を含む構造の概要を確認したり、実空間相関係数や分解能といった指標を用いて、高品質な実験構造を特定したりすることが可能である。また、本ポータルには、フィルタリング機能や一括ダウンロード機能の搭載が予定されている。PDBjは、諮問委員会での審議を経てこの新ポータルを公開する計画であり、委員からのフィードバックを歓迎している。

○ 出版物およびアウトリーチ活動に関する賞の協賛

計算リソースや解析ツールに関する最近の発表についても報告した。また、アジアの結晶学コミュニティにおけるwwPDB/PDBj関連の表彰活動についても紹介した。PDBjは台北で開催された2025年アジア結晶学会（AsCA2025）では、若手科学者を支援しこの地域における構造生物学の活動を促進するため、優れた発表に賞状と賞品を授与した。

議題2. 令和8年度 蛋白質立体構造データベースの運営計画について

栗栖部会長は、チームミーティング、国内外の学会におけるセミナー、およびアウトリーチ活動を含む、令和8年度の活動計画を報告した。

データベースの継続的維持・運用のために定期的なミーティングの重要性が改めて強調された。

○ wwPDBの定例会議およびOneDepの開発

PDBjは、開発者、アノテーター、およびプロジェクトに関する定例会議を継続して実施する。また、令和8年度はEBIが主催するOneDepサミットや関連会議に参加する。特に複雑化・大規模化するデータ登録に伴うデータ処理上の課題について議論するため、バイオキュレーターを派遣する予定である。

○ 国際会議やワークショップ

PDBjは2026年、IUCr2026をはじめ、構造生物学、結晶学、クライオ電子顕微鏡法、データ駆動型科学に関連する主要な国際会議やワークショップに参加する予定である。また、統合・ハイブリッドモデルを含むPDBへのデータ登録や検証に関するワークショップにも貢献する。さらに、アジア地域での活動への参加や、国内の学術集会でのアウトリーチ活動も継続していく。

○ データ登録（Data-in）活動の拡大

データ登録（Data-in）業務の担当範囲をオーストラリアおよびニュージーランドにまで拡大する。この新たな体制は2026年1月に開始された。PDBjは今後も登録統計を継続的に監視し、地域データセンター間におけるアノテーション業務の分担を適宜調整していく。栗栖部会長は、データ登録業務の地域的な割り当ては、単なる地理的要因に基づくのではなく、登録統計や実質的な業務量に基づいて決定されるべきであると説明した。

○ PDB-China

PDB-Chinaは、今後もwwPDBの重要な地域パートナーとして展開する予定である。PDBjは、データ処理業務の移行に関してPDB-Chinaの担当者と定期的に協議を行っている。主要な目標の一つは、PDB-Chinaが独自のOneDep環境を運用・保守できるよう、上海において十分なシステムエンジニアリングの専門知識を確立することであり、OneDepシステムの保守・運用を担うシステムエンジニアの育成は目的を達成するための重要なステップと位置づけられている。現在PDB-ChinaはwwPDBの準会員（Associate Member）であり、活動のさらなる展開については、wwPDBの各パートナーと連携して進められる。

○ 香港と台湾からのデータ登録

PDB Chinaのさらなる発展に伴って、PDBjおよびwwPDBは香港や台湾のデータ登録者が適切な地域の登録センターを選択できるようにする計画である。このしくみは、当該地域の研究者に柔軟性を提供する上で重要であると考えている。

○ 韓国における連携およびバックアップ・インフラ

KBSI、KISTI、GISTといった韓国の機関との連携では、現在、日本から韓国のインフラヘリモートアクセスを可能にするための協議やセキュリティ確認が進められている。構築が予定されている韓国側のインフラは、PDBデータの地域的なミラー（複製）またはバックアップとしての役割を担うことになる。当初はPDBデータを対象とするが、将来的にはBMRBやEMDB、その他のサービスへと対象を拡大する可能性がある。このインフラは韓国のユーザー、特にKISTIのスーパーコンピュータ施設を利用するユーザーにとっても有益であり、彼らはPDBデータにローカル環境からアクセスできるようになる。

○ 蛋白質研究奨励会におけるPDBj分室の活動

PDBjは、蛋白質研究奨励会（Protein Research Foundation）に設置された分室の体制強化に向けた進捗状況を報告した。この分室はSINETに接続されており、高速インターネット回線も整備されている。現在バックアップ用サーバーの準備やオフィス設備の拡充が進められており、2名の専任スタッフが常駐している。同分室は、PDBjの業務およびデータサービスにおける重要なバックアップ機能を担うものと期待されている。

○ IUCr2026での活動

PDBjは、PDBデータ、データ登録、検証、およびデータ駆動型科学に関連するワークショップやマイクロシンポジウムなど、IUCr2026（カナダ・カルガリー）の活動に貢献する。そのうち2つのワークショップでは、統合型／ハイブリッド型モデルを対象としたPDBへのデータ登録および検証の実務について取り上げる。また、PDBとデータ駆動型科学に関するマイクロシンポジウムの共同議長を務める。PDBjはこれらの機会を活かし、データの登録や再利用、そして構造生物学データベースの将来的な役割について広く発信していく予定である。

○ PDB-IHMとその検証

PDB-IHMは、統合構造モデルの登録および解析においてその重要性を増している。統合モデルは複数の実験手法や計算アプローチを組み合わせることができるため、その検証（バリデーション）が依然として大きな課題である。IUCr2026では、X線結晶構造解析、単粒子クライオ電子顕微鏡法、NMRの研究者が参加するPDB-IHM検証ワークショップが計画されている。また、wwPDBは、統合／ハイブリッドモデルの検証に対するベイズ的アプローチに関するホワイトペーパーの作成を進めている。PDBjは今後も、PDB-IHMに適した検証手法の開発に向けた議論に貢献していく。

○ 構造生物学ソフトウェアからの直接登録

wwPDBは、構造決定ソフトウェアから構造データをより直接的に登録（デポジション）できるようにするため、CCP4やPhenixの開発者と協力する。その目的は、ユーザーがソフトウェア環境から直接PDBへの登録情報を送信できるようにし、ユーザーの負担を軽減するとともに、登録手順に関する専門知識の必要性を最小限に抑えることである。計画中のAPIベースのシステムでは、適切なユーザー認証を行った後、必要な情報をPDB登録サーバーへ転送できるようになる。試料調製、発現系、その他の実験条件といった情報を含む生物学のおよび実験的なメタデータの収集については、さらなる検討が必要である。また、PDBjを含むwwPDBの各メンバーは、フラグメントスクリーニング実験などで得られる一連の関連構造について、より効率的な登録ワークフローを構築するための協議も行う予定である。

○ 新たな分析ツールおよびAI・データ主導型のアプローチ

PDBjは、PDBの科学的価値を高めるための解析ツールの開発を継続する。その一例として、PDB構造に関連する静電ポテンシャル情報の高度化に向けた開発が挙げられる。これは、特定の結晶化条件、pH、イオン強度、および関連パラメータを計算に組み込むことを目指す。こうした情報は、実験による構造データがまだ得られていないタンパク質について、その構造や結晶化特性を予測するAIベースの手法と組み合わせて活用できる可能性がある。PDBjは今後も、データベース情報、計算科学、そしてAIの統合に向けた取り組みを推進していく。

○ RDFベースのデータサービス

PDBjは、RDFベースのPDBデータサービスに関して、ライフサイエンス統合データベースセンター（DBCLS）との連携を継続する。現在、PDBjのRDFサーバー・インフラの刷新および新しいRDFポータルの開発が進められており、令和8年度中の公開を予定している。

3. コメントと質疑応答

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った。

○ PDB-Chinaの発展に伴うPDBjの今後の役割

PDB Chinaが中国本土からの大量のデータ登録処理を担うようになることでPDBjの役割がどう変化するのか、またPDBjに新規サービスを開発する余力が生まれるのかという質問があった。これに対し、栗栖部会長は、データ登録（data-in）業務の地域的な分担は、登録統計や業務量に基づいて決定されていると説明した。PDB-Chinaの整備が進めば、大阪における中国からのデータ登録処理に伴う業務負担は大幅に軽減される。PDBjがこれまで長年にわたりアジアからのデータ登録業務を支えてきた実績を強調し、今後もオーストラリアやニュージーランドを含む地域的な役割を拡大していく方針を示した。PDB-Chinaの展開により、PDBjはデータ提供（data-out）サービスや新規ツールの開発、その他の活動により多くのリソースを充てられるようになることを期待している。また、中国以外の多くの国や地域では登録件数が比較的同程度の水準にあるのに対し、中国は登録数が極めて多いため例外的なケースであるという点も指摘した。

○ オーストラリアとニュージーランドからのデータ登録に対する地域の責任

オーストラリアからのデータ登録をPDBjが処理するようになった場合、各wwPDBデータセンターの業務負担がおおむね均等になるかどうかという質問があった。これに対し栗栖部会長は、地域ごとの登録分担に基づき、業務負担はおおむね均衡するだろうと回答した。将来的な地域ごとの分担変更の可能性については、登録統計や新たな地域センターの設立状況次第となる。

○ 香港と台湾からの登録

香港からのデータがPDB-ChinaとPDBjのどちらで処理されるかという質問があった。これに対し栗栖部会長は、新システムの導入後は、香港や台湾のデータ登録者がPDB-ChinaとPDBjのいずれかを選択できるようになると説明した。こうした登録者による選択の仕組みは、当該地域の研究者にとって特に重要であると考ええる。

○ PubChemベースのポータル

PDBjの助成機関であるJSTの研究アドバイザーから、新たに構築されたPubChemベースのポータルとPubChem自体との関係について質問があった。これに対し栗栖部会長は、このPDBjポータルがPubChemの識別子を利用し、化学コンポーネントとそれに対応するPDBエントリーを関連付けていると説明した。このポータルは、特定の化学コンポーネントを含む高品質な構造をユーザーが特定できるようにすることを目的としている。構造の評価には、分解能や実空間相関係数といった実験データの品質指標を用いることが可能、また、同ポータルでは化学コンポーネントの相互作用に関する情報も提供されるほか、品質に基づくフィルタリングや一括ダウンロードといった機能も利用できるようになる予定である。

○ XRDaの登録とアクセス

XRDaへの登録にPDB座標データが必要かどうか質問があった。これに対し栗栖部会長は、回折生データは単独でも登録可能であり、適切な場合にはPDBエントリーとXRDaデータを関連付けることもできると説明した。また、回折画像については、対応するPDBエントリーの公開に合わせて公開することが可能で、栗栖部会長は、回折生データが将来の科学的解析において重要であると強調し、PDBjとしてXRDaへの登録数を増やしていきたいと述べた。さらに、XRDaのダウンロード統計に関する質問があり、栗栖部会長はダウンロードログは取得可能であり、次の会議では、PDBjがそのログを分析した上で統計データを報告する予定であると説明した。

○ PDB-IHMと動的構造情報

PDBおよびPDB-IHMにおける構造ダイナミクス、構造多型、その他の種類の情報の今後の取り扱いについて質問があった。これに対し栗栖部会長は、PDB-IHMは特に統合的構造解析に関連するものであること、またデータ登録の運用を改善するためのワークショップが企画されていることを説明した。検証（バリデーション）は依然として主要な課題の一つであり、PDB-IHMの検証に関するワークショップの計画や、検証へのベイズ的手法の導入に向けた開発状況について紹介がなされた。また、実験の生データと構造解釈とを結びつける上で、AIや計算科学が果たしうる役割の重要性についても議論の中で強調された。

○ AIとデータ駆動型科学

AI手法の開発、特にクライオ電子顕微鏡（cryo-EM）の分野において生データが重要であると指摘し、EMPIAR@PDBjの進展を歓迎するとの委員のコメントがあった。また、タンパク質のデノボ（新規）設計や構造解析といった用途において、PDBjの新たな解析ツールが持つ潜在的な価値についても言及があった。栗栖部会長は、AIやデータ駆動型科学において実験生データの重要性が高まっていることに同意し、データベース・インフラと計算科学を融合させることの重要性を強調した。

○ EMPIARデータと大規模ストレージ

現在大学等に保管されているものを含め、日本で生成されたEMPIARデータをPDBjで受け入れ・公開できないかとの質問があった。これに対し栗栖部会長は、十分なストレージおよびネットワークリソースが確保できれば技術的には可能であると説明した。大規模なストレージ・インフラや高速ネットワーク接続の整備、さらには国の研究インフラとの連携があれば、こうしたサービス

の実現が可能になると指摘した。PDBjは、特に日本国内でAIを活用した科学研究への関心が高まっていることを踏まえ、こうした連携に対して前向きな姿勢を示している。

○ 韓国のバックアップサイト

計画中の韓国のバックアップサイトではどのような種類のデータが維持されるのかとの質問があった。これに対し栗栖部会長は、当初はPDBアーカイブを主眼とし、データの定期的な同期を行うと説明した。将来的には、BMRBやEMDB、その他のサービスも対象に加えられる可能性があり、この韓国のシステムは、主に地域的なミラー／バックアップサイトとして機能すると同時に、韓国のスーパーコンピューティング施設の利用者を含む現地のユーザーに対して、より高速なアクセス環境を提供する役割も担うことになる。

蛋白質立体構造データベース専門部会は、令和7年度の活動報告および令和8年度の活動計画案について審議を行った。PDBjが担う地域的なデータ登録・提供（data-in/data-out）活動、PDB-Chinaの構築、オーストラリアおよびニュージーランドへの地域的役割の拡大、韓国との連携、構造生データの保存、そしてデータ駆動型かつAIを活用した新規サービスの開発といった取り組みが、引き続き重要であることを確認した。特に、PDB-IHMの今後の展開、統合・ハイブリッドモデルの検証、XRDaおよびEMPIAR、構造生物学ソフトウェアを介した直接登録、ならびに解析ツールやRDFベースのサービスの開発といった事項に重点が置かれた。

栗栖部会長は全委員および陪席者の参加に謝意を表するとともに、会議の報告書に関する追加のコメントがあれば、後日提出するよう求めた。出席者はすべての審議事項を承認し、部会は閉会した。

以上