

研究開発課題別中間評価結果

➤ 課題情報

研究開発課題名 「蛋白質構造データバンクのデータ検証高度化と統合化」

研究代表名 栗栖 源嗣

➤ 中間評価結果

PDB（Protein Data Bank：蛋白質立体構造データバンク）と BMRB（BioMagResBank：NMR 実験情報データバンク）について、日米欧の国際連携のもとで維持・公開するとともに、wwPDB の検証レポートの拡充とセマンティック化、化合物データベース CSD との統合化を図る研究開発課題である。

wwPDB を中心に各拠点と密接にコミュニケーションを取り、連携強化に務めた。PDBj からのデータ登録数は wwPDB の 1/4 を占め、レポジトリサイトとして国際的に大きく貢献している。また、オントロジーの整備と RDF 化を着実に実施するとともに、検証レポート高度化や PDB オリジナルのアノテーション、SPARQL 検索への対応、CSD との統合化など、PDBj 独自の活動も着実に実施した。検証レポートの高度化については、日欧米の各サイトの検証レポートが既存の検証レポートとは別の FTP サイトに集約され、閲覧できるようになった。さらに、PDBj 独自の立体構造アラインメント・サービスも計画通りに開発を進め、2019 年度末までに公開見込みとなっている。アノテータやデータ寄託者・登録者の教育などについても計画通り実施した。

PDB と BMRB は、構造生物学を支える基盤的データベースである。月間のユニーク IP アドレス数、ページ数はともに開発期間前と比べて 3 割以上増加している。有用物質生産研究や創薬研究など幅広い産業における基盤としての役割を果たしており、また今後も重要性を増すことは間違いない。

上記のように、進捗状況と今後の成果見込みは大変優れており、今後も現計画通りに推進していただきたい。構造アラインメント・サービスについては開発中のため現時点では評価できないが、多くのユーザーを獲得できるようなインターフェースが実装されることを期待する。一方、欧米を中心として関連する議論が進められているクライオ電子顕微鏡由来データ等、日本としても貢献すべき項目について、世界中からのアクセス数増加による計算負荷の増大、PDB チャイナの立ち上がりなどを睨みつつも、適時、適切にハード・人材面を拡張することが望ましい。

以上