

## 研究開発実施報告

### □概要

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
開発対象データベースの名称 (URL)	PDBj (Protein Data Bank Japan) ( <a href="https://pdj.org/">https://pdj.org/</a> )
研究代表者氏名	栗栖 源嗣
所属・役職	大阪大学 蛋白質研究所 教授 (2021年3月時点)

### □目次

§ 1. 研究実施体制 .....	2		
§ 2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等 .....	3	③	口頭講演 .....
(1) データベース一覧 .....	3	④	ポスター発表 .....
(2) ツール等一覧 .....	3	(4)	知的財産権の出願 (国内の出願件数のみ公開) ....
§ 3. 実施内容 .....	4	①	出願件数 .....
(1) 本年度の研究開発計画と達成目標 .....	4	②	一覧 .....
(2) 進捗状況 .....	6	(5)	受賞・報道等 .....
§ 4. 成果発表等 .....	9	①	受賞 .....
(1) 原著論文発表 .....	9	②	メディア報道 .....
① 論文数概要 .....	9	③	その他の成果発表 .....
② 論文詳細情報 .....	9	§ 5.	研究開発期間中に主催した活動(ワークショップ等) ...
(2) その他の著作物(総説、書籍など) .....	10	1.	進捗ミーティング .....
(3) 国際学会および国内学会発表 .....	10	2.	主催したワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ活動 等 .....
① 概要 .....	10		12
② 招待講演 .....	10		



## §1. 研究実施体制

グループ名	研究代表者または主たる共同研究者氏名	所属機関・役職名	研究題目
栗栖グループ	栗栖 源嗣	大阪大学・教授	PDBおよびBMRBアーカイブの構築および高度化・統合化
藤グループ	藤 博幸	関西学院大学・教授	ASHビューアの開発

## §2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等

### (1) データベース一覧

#### 【主なデータベース】

No.	名称	別称・略称	URL
1	PDB Archive	PDB Archive	<a href="https://pdj.org/">https://pdj.org/</a>

#### 【その他のデータベース】

No.	名称	別称・略称	URL
1	BMRB	BMRB	<a href="https://bmrj.pdj.org">https://bmrj.pdj.org</a>
2	eF-site	eF-site	<a href="https://pdj.org/eF-site/">https://pdj.org/eF-site/</a>
3	ProMode elastic	ProMod	<a href="https://pdj.org/promode-elastic/">https://pdj.org/promode-elastic/</a>
4	MoM	MoM	<a href="https://pdj.org/mom/">https://pdj.org/mom/</a>
5			

### (2) ツール等一覧

No.	名称	別称・略称	URL
1	EM Navigator	EM Navi	<a href="https://pdj.org/emnavi/">https://pdj.org/emnavi/</a>
2	ASH		<a href="https://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/ash_service/">https://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/ash_service/</a>
3	MolMil		<a href="https://pdj.org/molmil2/">https://pdj.org/molmil2/</a>
4	ASHviewer		開発中のため、未だない

## §3. 実施内容

### (1) 本年度の研究開発計画と達成目標

#### 1) 国際組織 wwPDB メンバーとしての蛋白質構造(PDB)アーカイブの構築・データ検証・公開

引き続き、wwPDB の欧米のメンバーと協力し、PDBj(PDB Japan) および PDBj-BMRB(R2 年度末をもって、BMRBj と名称変更; <https://bmrbi.pdbj.org/>) が厳しい品質管理を行いつつ、増加する一方の立体構造情報と NMR 実験情報に対応する。具体的には、PDBj も OneDep 開発チームに加わり、特に電子顕微鏡構造解析に対応した新フォーマット(PDBx/mmCIF)の充実と電子顕微鏡構造解析のデータ検証強化に貢献できる人材を補強し、データ処理の効率化を進める。現在、X 線解析法のデータにのみ先行して進んでいる検証レポートを NMR と EM の検証レポートに拡張し、分子サイズが大きな構造データを含め全て PDBj で作成できる体制を完成させる。

検証レポートの構築法が確立している X 線結晶構造解析のデータに関しては、当初計画を発展的に修正して進めた SPARQL 検索の PDBj-Mine へ実装をさらに進め、DBCLS との連携を強めて検索クエリーの平易化を進める。システム管理の点では、PDB China の登録サーバー、アノテーションサーバーは当初全て PDBj が管理する方針となったため、これまで以上に注力してシステム管理を行う。将来的な wwPDB の効率運営のためにも PDB China との協力体制を強化する。

これまで学内の電気および通信メンテナンスのため年間のうち数日は PDBj のサーバーにアクセスできない状況が発生していた。これを回避する目的で、学外にバックアップサーバーを設置して、本年度より 365 日 24 時間体制の運用を行う。さらに、バックアップ装置を一部更新してデータをセキュアにアーカイブできる体制を強化する。

#### 2) 他のデータベースとの統合化および高度化

##### 2-1) CSD データベースとの統合化

第 3 年次に実装した The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) との連携に基づく CSD ID による検索機能を発展的に高度化し、化合物と蛋白質の相互作用を表示できる機能を追加する。化合物と蛋白質の相互作用解析については、理化学研究所で開発されている FMO DB (<https://drugdesign.riken.jp/FMO DB/>) との連携を開始し、より包括的に化合物サイドから蛋白質との相互作用を検索可能とする。引き続き、CSD の企業向けの窓口となっている化学情報協会とも連携して、日本の製薬企業からのリクエストを聞きながら化合物データベースの統合化を進める。

##### 2-2) PDB データを用いた 3D 構造同士の構造アラインメント・サービス (ASH: Alignment of Structural Homologs) の高度化

2020 年度は、RDF 化された情報を収集し、そこから新たな情報を得るための新規手法として、PSurfer によって収集された情報をテンソル分解することで、アラインメントされている配列データをクラスタ分解する手法の開発を行なった。予備的な解析は既に 2019 年度に行われていたが、実装に用いる言語やクラスタ分析の部分についての検討を行なった。具体的には、NJ 法による系統樹構築に利用している距離行列を類似度行列に変換した行列、PSurfer で収集された Biological Process, Biochemical Function, Cellular Component の 3 種の GO term に関する配列間類似性を Jaccard 係数で表現したもの、また PSurfer で収集された生物種の情報から再構築された系統分類情報から、配列間の類似性をハミング距離で表現したものの 5 種類の類似度行列を集めて 3 階のテンソルとして表現し、これをタッカー分解した。テンソル分解には R 言語を用い

た。次に分解された要素を X mean 法を使って、クラスタ数を自動同定する形でクラスタ分解を行なえるようにした。GO term の類似行列作成については、Jaccard 係数ではなく、Simpson 係数を用いた方が類似性を正しく評価できる可能性があること、また得られた分解はやや細かすぎるように見えたので、クラスタ分解の結果にさらに X mean 法を適用することを検討しており、更なる改良を行いビューアに組み込む予定である。

### 2-3) 各アミノ酸の蛋白質立体構造中における位置情報の自動アノテーションとその応用

蛋白質分子内コンタクトの情報アノテーションは、第3年次中に、情報を単純なスキーマのテーブルで表現する仕組みを構築して、PDBj Mine2 の関係データベースに追加実装済みである。引き続き、毎週の新規データ更新に合わせて位置情報の自動アノテーションを進め、PDB 利用者に利用促進をはかる。

### 2-4) 統合化された NMR データベースおよび関連ツールの活用

NMR データベースの登録業務の自動化と簡略化を推進するため、wwPDB メンバーである BMRB (米 Madison-Wisconsin 大学<sup>[註]</sup>) と共同で統合登録ツール (BMRBdep) の共同開発を継続する。OneDep と連携したデータ登録が 2020 年 3 月に運用開始される予定であり、NMR により決定された PDB 構造座標と実験データとの整合性に関する評価ツールを wwPDB との協力を通じて継続開発して、長く時間がかかっている NMR 検証レポートを完成させる。[注: 米 Madison-Wisconsin 大学の前 BMRB 代表 Markley 教授の後継教授と NIH との間で合意に至らず、本年、米 Connecticut 大学の副代表 Hoch 教授の研究室に完全移管した]

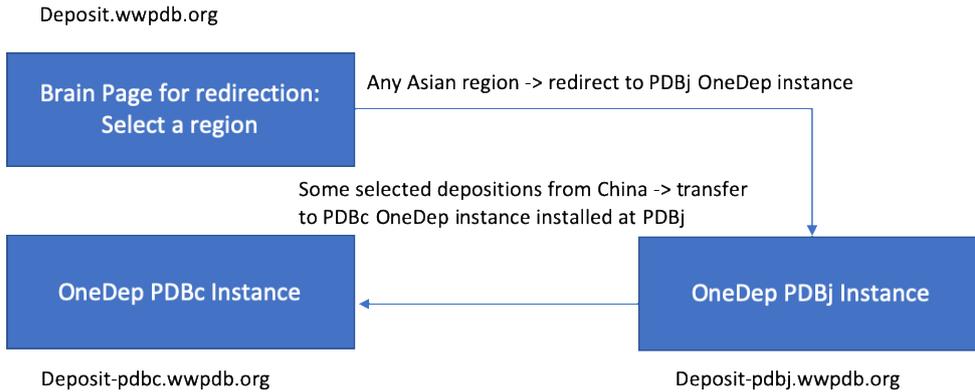
## 3) データベースの利用促進・人材育成

### 3-1) 利用者・研究者コミュニティとの連携および講習会等の開催

- ・PDB の国内諮問委員会である大阪大学蛋白質研究所「蛋白質立体構造データベース専門部会」に台湾と韓国から委員を選定し、開発方針やデータベースの方針変更の是非について諮問を頂く。
- ・利用者・研究者向けのセミナーや講習会については、他のデータベースとも協力し、第4年次も PDBj 講習会や学会年会中あるいは前後での利用講習会を実施する。
- ・これまでも参加してきたサイエンス・フェスタ大阪大会の活動等、一般社会人向けの生命科学におけるデータサイエンスの振興も積極的に実施する。

### 3-2) アノテータの育成・国際協力

- ・OneDep 登録システムの開発に PDBj から人材を提供し、世界で同一の品質管理によるデータ登録に貢献すると共に、継続して国際連携によるアノテータ教育を進める。具体的には、TV 会議による講習会参加と、米国 RCSB-PDB および欧州 EBI-PDBe との face-to-face 合同講習会を日本で開催する。PDB China の wwPDB への参加承認により、正式に中国での活動が始動する予定である。wwPDB の他メンバーと事前に十分な検討をおこなった結果、時差の少ない PDBj が主導権をもって PDB China のトレーニングを行うこととなった。まず、PDB China 専用の登録サーバー、アノテーションサーバー、検証サーバーを PDBj に別途インストールし、中国からの登録のうち比較的アノテーションの容易なエントリーを PDB China のサーバーにデータ転送する状態からスタートする(下図参照)。データ処理開始後の初期には、中国人アノテータを PDBj に招聘して、on-site トレーニングも実施する計画である。



図：PDB China (PDBc)へのデータ転送の仕組み概略図

## (2)進捗状況

### 1)国際組織 wwPDB メンバーとしての蛋白質構造(PDB)アーカイブの構築・データ検証・公開

本年度も引き続き、wwPDB の欧米のメンバーと協力して、厳しい品質管理を行いつつ増加する一方の立体構造情報と NMR 実験情報のキュレーションをおこなった。第4年次も、wwPDB で分担しているアジア・中東地域からの全データを 100%処理し、各エントリーの論文発表に合わせて遅滞なく全世界に公開することができた。具体的には、令和 2 年度(2020 年 4 月–2021 年 3 月)中に PDB は 17,108 件増加し、そのうち 3789 件を PDBj が登録処理した。BMRB は全体で 1023 件増加し、そのうち 90 件を PDBj から新規登録した。

PDBj も OneDep 開発チームに加わり、NMR と EM による構造データ検証強化に貢献した。具体には、NMR 実験データを統合フォーマットで登録できる仕組みづくりを担当した。EM 構造に関しては、昨年度末の 2020 年 1 月 23-24 日に wwPDB が EBI で開催した Single particle EM data-management workshop で集めたコミュニティからの要望を盛り込み、2020 年 9 月 23 日から PDB 構造モデルと EMDB MAP の重なるの検証や EMDB マップ自体の検証を可能とした高度化された EM の検証レポートの公開を始めた。更に、検証レポートの作成についてもサーバーを増強することにより PDBj に登録された全ての登録に対して完全に大阪で検証レポートを作成できるようにした。検証レポートの構築法が確立している X 線結晶構造解析のデータに関しては、SPARQL 検索の PDBj-Mine へ実装を完了し週次更新している。DBCLS との連携を強めるべく検索クエリーの平易化を目指し、検索クエリーを直感的に構築できるインターフェースの構築を進めている。

本年度は、wwPDB の他メンバーおよび創価大学木下チームの GlyYouCan のメンバーとも協力して、PDB に含まれる 12,000 以上のエントリーの記述について、メタデータや外部データベースとのリンク情報の更新プロジェクトを推進した(図 1)。

システム管理の点では、PDB China の登録サーバー、アノテーションサーバーは当初全て PDBj が管理する方針となったため、Firewall を跨いだ日中間の連携運用の仕組みやサーバーの設定について準備を進めた。将来的な wwPDB の効率運営のためにも、PDB China の代表である Xu 教授と毎月の定例会議(オンライン)を行い、協力体制を強化した。これまで学内の電気および通信メンテナンスのため年間のうち数日は PDBj のサーバーにアクセスできない状況が発生していた。これを回避する目的で、学外にバックアップサーバーを設置して、本年度より 365 日 24 時間体制の運用を行った。さらに、バックアップ装置を一部更新してデータをセキュアにアーカイブできる体制を強化した。

**WORLDWIDE PDB PROTEIN DATA BANK**  
wwPDB.org

### Improving Carbohydrates in the PDB for 2020

-10% of PDB structures contain carbohydrates.

To improve the ability to search for these structures and their complex chemistry (e.g., stereo-isomers, anomeric configurations, branched chains), wwPDB is embarking on a new remediation effort that will:

- Standardize Chemical Component Dictionary definitions
- Adopt carbohydrate nomenclature following IUPAC-IUBMB recommendations
- Provide a uniform representation for oligosaccharides
- Adopt glycoscience community naming conventions
- Incorporate glycoscience community tools to properly identify, validate, and biocurate glycosylation sites in PDB structures

**Implementation**

**New sequence descriptions will be included in PDB structure data files:**

**Condensed IUPAC:**  
[L]Fucpa1-4[D]Manpa1-3[D]Manpb1-4[D]GlcpNAcb1-4[...][L]Fucpa1-3[D]GlcpNAcb1-ASN

**LINUCS:**  
[([ASN])([4+1])[B]-D-GlcpNAc][([3+1])[a-L-Fucp]][[4+1][B]-D-GlcpNAc][[4+1][B]-D-Manp][[3+1][a-D-Manp][[([R+1])[a-L-Fucp]]]

**These descriptions can be translated into Symbolic representations used by glycoscientists:**

**Symbolic:**

Example based on PDB Entry 5cmg

This project is described at [wwpdb.org/documentation/carbohydrate-remediation](http://wwpdb.org/documentation/carbohydrate-remediation) and examples are available at [github](https://github.com), [github.com/wwPDB/wwPDB](https://github.com/wwPDB/wwPDB)

Information about this project will be updated at [wwPDB.org](http://wwPDB.org).

図 1. PDB の糖鎖情報更新の詳細内容

## 2) 他のデータベースとの統合化および高度化

2-1) CSD との統合化プロジェクトは The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)と連携して進め、PDBj-mine に CSD ID による検索は実装済みである。新たに CSD と共通の 2 次元スケッチャーを導入して相互検索のバリアを下げる計画であったが、CSD の 2 次元スケッチャーは2種類あり、現在 CCDC で 2 次元スケッチャー機能を統合した新しいスケッチャーを開発中である。新型コロナウイルス感染症の影響もあって、CCDC の開発が遅れているため R2 年度中の実装が叶わなかった。次年度に引き継いで対応予定である。CCDC の日本の代表加盟機関としての活動 (<http://www.protein.osaka-u.ac.jp/CSD/>)と並行して、更なるデータベースの統合化を進める。

### 2-2) 各アミノ酸の蛋白質立体構造中における位置情報の自動アノテーションとその応用

・蛋白質分子内コンタクトの情報アノテーションは、第 3 年次中に、情報を単純なスキーマのテーブルで表現する仕組みを構築して、PDBj Mine の関係データベースに追加実装済みである。引き続き、毎週の新規データ更新に合わせて位置情報の自動アノテーションを進め、PDB 利用者に利用促進をはかった。

### 2-3) 統合化された NMR データベースおよび関連ツールの活用

・NMR データベースの登録業務の自動化と簡略化を推進するため、wwPDB メンバーである BMRB (米 Connecticut 大学)と共同で統合登録ツール (BMRBdep) の共同開発を行なった。それにより、OneDep と連携したデータ登録を 2020 年 4 月に運用開始した。NMR により決定された PDB 構造座標と実験データとの整合性に関する評価ツールを wwPDB との協力を通じて継続開発して、2020 年 12 月に NMR 距離制限情報による検証を可能とすることができ、長く時間がかかっていた NMR 検証レポートを完成させた。

### 3) データベースの利用促進・人材育成

#### 3-1) 利用者・研究者コミュニティとの連携および講習会等の開催

・PDB の国内諮問委員会である大阪大学蛋白質研究所「蛋白質立体構造データベース専門部会」を 2021 年 3 月 17 日に Zoom を用いてオンラインで開催し、韓国、台湾のユーザー代表にも出席していただいて要望や意見交換を行った(NBDC からも、伊藤総括、川口調査役、井手研究員、太田主任調査員に陪席していただいた)。PDBj の活動報告と、次年度計画について報告を行い、運営について専門的な諮問をいただいた。特に、PDB China の始動準備に関連して、台湾や香港からのエントリーをどう扱うべきか意見交換していただいた。

氏名	所属機関	役職
栗栖源嗣	大阪大学蛋白質研究所	教授・委員長
藤原敏道	大阪大学蛋白質研究所	教授
水口賢司#	大阪大学蛋白質研究所	教授
光岡 薫	大阪大学超高压電子顕微鏡センター	教授
神田大輔	九州大学生体防御医学研究所	教授
千田俊哉	高エネルギー加速研究機構物質構造科学研究所	教授
山本雅貴	理化学研究所	部長
李 奉振	ソウル国立大学薬学部 (韓国)	教授
蕭 傳鑑	中央研究院分子生物学研究所 (台湾)	副研究所長
齋藤純一	協和キリン (株) 低分子医薬研究所	副研究所長

# PDBj の高度化メンバーに加わったが、医薬基盤研とのクロスアポイントが終了した時点で委員就任予定。

・利用者・研究者向けのセミナーや講習会については、データ登録者の学術団体である日本結晶学会と日本蛋白質学会の年会中に、ランチョンセミナーを開催して、データ登録への継続的な協力をお願いする予定であったが、新型コロナウイルス感染症の影響で当初予定通りには実施することが困難であった。日本蛋白質学会については、学会からの提案によりチラシを電子メールと郵送で配布する代替えにてデータ受付方針の変更点などを説明し理解していただいた。また、データ利用者の学術団体である日本生物物理学会と生命医薬情報学連合大会においてもランチョンセミナーを開催して、利用者の声をアンケートの形で集める予定であったが同様に新型コロナウイルス感染症の影響から、当初予定通りには実施できなかった。学会側のご協力により、日本生物物理学会においてはオンライン展示を開催することができた。2021 年 1 月 20 日(水)には、以下の様なオンライン講習会を開催し、PDBj が管理・運営するデータベースへの効率的な登録を促す機会をもった。

#### 2020 年度 PDBj 主催講習会概要

会場 大阪大学 蛋白質研究所 大会議室からのオンライン中継

2021 年 1 月 20 日(水)

14:00-14:05

「開会の挨拶」栗栖 源嗣 (大阪大学 蛋白質研究所)

14:05-14:30

「最近の PDB の動向」栗栖 源嗣(大阪大学 蛋白質研究所)

14:30-15:00

「X線結晶構造の登録」白井 剛(長浜バイオ大学)

15:00-15:30

「NMR 構造・データの登録」横地 政志(大阪大学 蛋白質研究所)  
 休憩  
 15:45-16:00  
 「X線画像アーカイブ XRDa 」栗栖 源嗣(大阪大学 蛋白質研究所)  
 16:00-16:15  
 「モデル構造アーカイブ BSM-Arc」Gert-Jan Bekker(大阪大学 蛋白質研究所)  
 16:15-16:30  
 「電顕2D 画像アーカイブ EMPIAR」川端 猛(大阪大学 蛋白質研究所)  
 16:30-17:00  
 「電子顕微鏡の構造・マップの登録」山下恵太郎(英国 MRC 分子生物学研究所)  
 全体を通じた質問  
 17:25-17:30  
 「閉会の挨拶」栗栖 源嗣(大阪大学 蛋白質研究所)

・2020年11月22日(日)に開催されたサイエンスアゴラ2020に「ようこそ、タンパク質ワンダーランドへ！」という企画を提出し、一般人向けの生命科学におけるデータサイエンスの振興のため、積極的な啓蒙活動を行った。

・2020年8月にチェコ・プラハで開催予定であった国際結晶学連合会議(International Union of Crystallography)において wwPDB として展示ブースを出す予定であったが、新型コロナウイルス感染症の影響で2021年8月に延期となった。そのため令和2年度はポスター賞をスポンサーすることができなかった。令和3年度以降に改めてベストポスターを PDBj として懸賞したい。

### 3-2) アノテータの育成・国際協力

OneDep 登録システムの開発に加わり、世界で同一の品質管理によるデータ登録を実施した。具体的には、PDBj-BMRB(2020年3月に BMRBj と改称)を持つため、第4年次も NMR の登録システムと NMR 構造の検証に関する開発を主に担当した。また、糖鎖科学の木下チームの野口研究所と連携して、PDBj からの提案を盛り込んで実装した。継続して国際連携による教育を進めるために、隔週金曜日におこなっている TV 会議により情報共有と人材育成につとめた。wwPDB の欧米拠点のアノテータを PDBj に招いて、OneDep 会議を2020年4月に主催する計画であったが、新型コロナウイルス感染症拡大を受けてオンラインで開催した。中国、韓国出身のアノテータが揃っているため、引き続き中国語と韓国語の PDBj ホームページの多言語化に積極的に取り組んだ。

## §4. 成果発表等

### (1) 原著論文発表

#### ① 論文数概要

種別	国内外	件数
発行済論文	国内(和文)	1件
	国際(欧文)	1件
未発行論文 (accepted, in press 等)	国内(和文)	0件
	国際(欧文)	0件

#### ② 論文詳細情報

(直接的な成果論文のほかに関係データベースを利用した間接的な成果論文を含む場合があります)

1. Zukang Feng, John D. Westbrook, Raul Sala, Oliver S. Smart, Gérard Bricogne, Masaaki Matsubara, Issaku Yamada, Shinichiro Tsuchiya, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Jeffrey C. Hoch, Genji Kurisu, Sameer Velankar, Stephen K. Burley, Jasmine Y. Young, "Enhanced validation of small-molecule ligands and carbohydrates in the Protein Data Bank", *Structure*, vol. 29, No. 4, pp. 393-400.e1, 2021 (DOI: 10.1016/j.str.2021.02.004).
2. 栗栖 源嗣「新型コロナウイルスに関する蛋白質構造データベースの開発と応用」, *ファームステージ*, vol. 20, No. 4, pp. 67-70, 2020 (DOI: なし).

(2) その他の著作物(総説、書籍など)

該当なし。

(3) 国際学会および国内学会発表

① 概要

種別	国内外	件数
招待講演	国内	1 件
	国際	0 件
口頭発表	国内	0 件
	国際	0 件
ポスター発表	国内	2 件
	国際	0 件

② 招待講演

〈国内〉

1. 栗栖源嗣、新型コロナウイルス感染症と立体構造データベースー蛋白質科学の視点から、日本学術会議主催公開 WEB シンポジウム、オンライン、11 月 29 日

〈国際〉

該当なし。

③ 口頭講演

〈国内〉

該当なし。

〈国際〉

該当なし。

④ ポスター発表

〈国内〉

1. 工藤高裕, Gert-Jan Bekker, 山下鈴子, 鈴木博文, 横地政志, 由良敬, 栗栖源嗣、蛋白質構造データベース(PDB)の高度化と統合的運用、トーゴの日シンポジウム、オンライン、10 月 5 日
2. 横地政志, 岩田武史, 池川恭代, Gert-Jan Bekker, 宮ノ入洋平, 児嶋長次郎, 藤原敏道, 栗栖源嗣、PDB/BMRB のデータ登録システム改善および PDB エントリーの糖鎖データ表現方法の改訂、トーゴの日シンポジウム、オンライン、10 月 5 日

〈国際〉

該当なし。

#### (4) 知的財産権の出願

##### ① 出願件数

種別		件数
特許出願	国内	0 件
	国外	0 件
その他の知的財産出願		0 件

##### ② 一覧

###### 1) 国内出願

該当なし。

###### 2) 海外出願

該当なし。

###### 3) その他の知的財産権

該当なし。

#### (5) 受賞・報道等

##### ① 受賞

1. \* 文部科学大臣表彰科学技術賞科学技術振興部門、中村春木, 栗栖源嗣、4月7日

##### ② メディア報道

該当なし。

##### ③ その他の成果発表

該当なし。

#### §5. 研究開発期間中に主催した活動(ワークショップ等)

##### 1. 進捗ミーティング

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2020年4月1日～ 2021年3月31日 (毎週開催)	PDBj開発者会議 (非公開)	Zoom	10人	研究進捗報告のためのミーティング
2020年4月1日～ 2021年3月31日 (隔週開催)	PDBj Primary A nnotator's meeti ng (非公開)	Zoom	14人	同上
2020年4月1日～ 2021年3月31日 (毎週開催)	BMRB テクニカル スタッフミーティ ング	大阪大学蛋 白質研究所 4階藤原研	5人	同上
2020年4月1日～ 2021年3月31日 (毎月不定期)	wwPDB PI ミー ティング	Zoom	4人	wwPDB を構成するデータベースの 各 PI による方針決定会議
2020年4月1日～ 2021年3月31日 (毎週)	OneDep リーダー 会議	Zoom	10人	wwPDB を構成するデータベースの リードアナテータが出席して, OneDe p による処理の方針を相談する会議
2020年4月1日～ 2021年3月31日 (毎週)	OneDep 開発者会 議	Zoom	8人	OneDep の開発者が開発状況をシェ アし, 開発項目を整理する会議

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2020年11月～ 2021年3月31日 (毎月不定期)	PDBc-PDBj PI 会議	Zoom	2人	PDB China の立ち上げに協力するため、問題点や技術支援を進める相談をする会議

## 2. 主催したワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ活動等

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2020年7月	第20回日本蛋白質科学会年会 PDBj ランチョンセミナー(代替えでチラシ配布)	神戸国際会議場(兵庫県神戸市)	421人	学会参加者に向けた PDBj とサービスの紹介
2020年9月16日～18日	第58回日本生物物理学会年会 PDBj オンライン展示会	オンライン開催	136人	学会参加者に向けた PDBj とサービスの紹介
2020年11月22日	サイエンスアゴラ2020	オンライン開催	77人	一般向けに「タンパク質」について講演
2021年1月20日	PDBj 講習会「データベース登録ノウハウ講習会」	オンライン開催	76人	PDBj の活動紹介とデータベース登録のノウハウを紹介

以上

別紙1 既公開のデータベース・ウェブツール等

No.	正式名称	別称・略称	概要	URL	公開日	状態	分類	関連論文
1	Protein Data Bank	PDB Archive	生体高分子の立体構造データベース, wwPDBと協力して構築, RDFを開発, 公開	<a href="https://pdbj.org">https://pdbj.org</a>	2002/4/1	維持・発展	データベース等	1,2
2	Biological Magnetic Resonance Data Bank	BMRB	生体高分子の化学シフト, 緩和データ, 相互作用データ等のNMRの実験データのデータベース	<a href="https://bmrj.pdbj.org">https://bmrj.pdbj.org</a>	2011/4/1	維持・発展	データベース等	3
3	eF-site	同左	蛋白質の分子表面の形状と物性(静電ポテンシャルと疎水性度)を機能部位情報と結合したデータベース. 維持・更新のみ	<a href="https://pdbj.org/eF-site/">https://pdbj.org/eF-site/</a>	2002/3/1	維持・発展	データベース等	
4	ProMode elastic	同左	二面角を変数とする基準振動解析プログラムによって計算された蛋白質のダイナミクス・データベース. 維持・更新のみ.	<a href="https://pdbj.org/promode-elastic/">https://pdbj.org/promode-elastic/</a>	2003/4/1	維持・発展	データベース等	
5	MoM	MoM	RCSB-PDBより毎月提供されている分子解説記事「Molecule of the Month」を日本語に訳したもの. 社会で話題となっている内容に関わる分子をPDBから選び, 機能と構造に関して解説. 維持・更新のみ.	<a href="https://pdbj.org/mom/">https://pdbj.org/mom/</a>	2008/4/1	維持・発展	データベース等	
6	EM Navigator	同左	生体分子や生体組織の3次元電子顕微鏡データ(EMDB)閲覧用web site	<a href="https://pdbj.org/emnavi/">https://pdbj.org/emnavi/</a>	2007/5/1	維持・発展	ツール等	
7	ASH	同左	PDBデータを基にした構造アラインメント	<a href="https://sysimm.ifre.c.osaka-u.ac.jp/ash_service/">https://sysimm.ifre.c.osaka-u.ac.jp/ash_service/</a>		維持・発展	ツール等	
8	Molmil	同左	インターネット上のweb環境で稼働するJavaScriptによる分子構造ビューア	<a href="https://pdbj.org/help/molmil">https://pdbj.org/help/molmil</a>	2014/9/1	維持・発展	ツール等	