

平成 27 年度 研究開発実施報告書

ライフサイエンスデータベース統合推進事業（統合化推進プログラム）

研究代表者

中村 春木

大阪大学 蛋白質研究所

所長／教授

「蛋白質構造データバンクの高度化と統合的 運用」



©2016 中村 春木(大阪大学) licensed under CC表示2.1 日本

§1. 研究実施体制

(1) PDBj グループ(A)

① 研究代表者: 中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所、所長/教授)

研究参加者: 中川 敦史、岩崎 憲治、金城 玲、鈴木 博文、工藤 高裕、山下 鈴子、五十嵐 令子、見学 有美子、張 羽澄、池川 恭代、佐藤 純子、Gert-Jan Bekker、晴氣 菜穂子(大阪大学蛋白質研究所)

Daron M. Standley(京都大学ウイルス研究所、教授)

加藤 和貴(大阪大学免疫学フロンティア研究センター・准教授)

猿渡 茂(北里大学理学部物理学科、准教授)

木下 賢吾(東北大学大学院情報科学研究科、教授)、

輪湖 博(早稲田大学社会科学総合学術院、教授)

伊藤 暢聡(東京医科歯科大学大学院、教授)

② 研究項目: 蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用

- ・国際組織 wwPDB のメンバーとして蛋白質構造アーカイブの構築・公開
- ・異なる階層のデータと蛋白質構造情報との統合化
- ・人材養成の実施

(2) PDBj-BMRB グループ(B)

① 主たる共同研究者: 藤原敏道 (大阪大学蛋白質研究所 教授)

研究参加者: 児嶋 長次郎、小林 直宏、岩田武史、横地政志 (大阪大学蛋白質研究所)

② 研究項目

- ・生体高分子 NMR 実験データのデータベース構築、運営、高度化

§2. 研究実施内容

(1) 通期及び本年度の研究開発計画と達成目標

構造生命科学の基盤的データベース開発として、PDB と BMRB のデータを wwPDB の一翼を担って収集し、厳しい品質管理を行いつつデータベース構築と公開を継続して行う。また、製薬企業等に蓄積された受容体蛋白質とリガンドとの複合体構造情報のアーカイブ化をはかる。一方、第 I 期の統合化推進プログラムにおいて PDBj および PDBj-BMRB が整備した統合化環境をさらに高度化・充実させ、異なる階層のデータと蛋白質構造情報・NMR 実験情報とを統合化して、構造変化やダイナミクスの情報も含めて利用者に統合的なデータとして提供する。さらに、生体高分子構造データと NMR 実験データの双方において、データ寄託・登録者に対する高精度のデータ整理と登録についての教育、データ利用者に対する初歩的および高度なデータ利用法とバイオインフォマティクスの教育、さらにアノデータに対する品質管理も含めた専門的技術指導等の、種々の人材養成を行う。

平成 27 年度の PDBj グループ (A) による研究項目「蛋白質構造データバンクの高度化と統合的運用」については、下記の 3 点を実施する。

- ・国際組織 wwPDB のメンバーとして蛋白質構造アーカイブの構築・公開
- ・異なる階層のデータと蛋白質構造情報との統合化
- ・人材養成の実施

一方、PDBj-BMRB グループ (B) による研究項目「生体高分子 NMR 実験データのデータベース構築、運営、高度化」について平成 27 年度においては、生体系 NMR 実験データの効率的な収集、登録、公開を米国およびヨーロッパの PDB および BMRB 関連グループとの協力関係を保ちながら実現していく。統合化のための最新技術を取り入れ、登録支援ツールの開発を行うことでより効率的なデータベース運営体制を構築する。NMR データのフォーマットあるいは登録公開サイトのシステムなどさまざまな技術的、運営上の取り決めに関しても国際的なリーダーシップを取って積極的に協力し、データベースの国際的な統合を推進していく。

(2) 本年度の研究開発進捗状況

(2-1) 国際組織 wwPDB のメンバーとして蛋白質構造アーカイブの構築・公開

平成 27 年度には 2,077 件の構造データの登録処理 (wwPDB における世界の 19% に対応) を行い、総計 117,438 件の構造データを公開した。また、NMR と電子顕微鏡による構造登録・annotation・validation 作業が X 線結晶構造に対するものと統合化されるシステムの開発を wwPDB と協力して進め、2016 年 1 月から新システムを稼働した。これにより、NMR および電子顕微鏡による構造の validation レポートも発行されるようになった。

平成 27 年 7 月 30-31 日に、PDB データ中のリガンド分子とその構造の検証に関する第 1 回 wwPDB/CCDC (Cambridge Crystallographic Data Centre)/D3R (Drug Design Data Resource) 合同ワーキンググループを、米国ニュージャージー州ラトガース大学にて wwPDB のメンバーとして共催し、アカデミアと企業に所属する専門家を集め、リガンド分子と受容体蛋白質の複合体構造の validation 法などを議論し、結果を論文として

出版した[A-1]。平成 27 年 10 月 2 日に、wwPDB メンバーと諮問委員ら総計 20 名による国際諮問委員会を大阪大学蛋白質研究所にて開催し、X 線結晶構造だけでなく NMR および EM による構造の登録・annotation・validation 行う D & A version 2 の開発、登録時における著者の特定のための ORCID システムの導入、新たな version 管理の導入など、今後の方向性が議論された。

一方、受容体蛋白質とリガンドとの複合体構造情報のアーカイブ化を目標として、PDB の基準に合った構造精密化のパイプラインを稼働させ、種々のリガンドによる 8 つのモデルケースについて実施し問題点を洗い出した。

(2-2) 蛋白質複合体に対する多面的解析ツールおよびサービスの開発と公開

PDBj の Mine2 関係データベース (RDB) に、PDBe と UniProt が開発した SIFTS データを統合した。PDBj Mine2 と SIFTS を組み合わせることにより、ユーザは SQL 検索を使って PDB アーカイブ中のタンパク質配列の様々なアノテーションを検索することができ、Gene Ontology や、分類学 (生物種)、構造的な分類 (SCOP や CATH)、酵素番号、UniProt 配列との対応を付けられるようにした。eF-site および ProMode-elastic については、巨大複合体へ対応する改良を行い、それらを含む 654,786 件と 118,017 件をそれぞれ公開し、molmil での表示を追加した。PDB と電子顕微鏡画像データベースである EMDB を統合的に探索し、類似形状を探索するサービス「Omokage 検索」を改良し、高速性と高精度化および小角散乱データベース(SASBDB)を含む仕組みとした[A-2]。Web 上で稼働する分子グラフィックスソフトとして JAVA script を用い、汎用性が高い molmil を開発・公開した。

(2-3) 人材養成の実施

データ寄託者・登録者および利用者に対する教育や新しいフォーマット PDBx のアナウンス・実習等を、学会のランチョンセミナーや講習会等で実施した。一方、他の wwPDB メンバーと交流し、国際感覚を身に付けた 5 名のアノテータを育成した。

(2-4) 生体系 NMR データベースの構築、運営と高度化

PDBj-BMRB グループは、ウィスコンシン大学 BMRB との協力関係の下、NMR 実験データの登録とアノテーションおよび公開のための業務を行い、合計 10,770 件のデータを公開した。平成 27 年 4 月から平成 28 年 4 月までの全 NMR データの登録件数は 736 件であり、そのうち 12%(92 件)を PDBj-BMRB グループが処理した。また、BMRB および世界の NMR 研究者との協力により NMR Exchange Format (NEF)を開発した[B-1]。

NMR 解析からデータベース登録までを支援するツールである MagRO を開発公開し、NMR 研究者への支援を行った。更に、XML 化、RDF 化された全 NMR データについては米国 Wisconsin 大学と協調的に公開を実現し、それらの定期的な update および remediation を半自動的に行うツールの共有を行うことで国際的な協力関係を実現した。本年度においては MagRO に PDBj-BMRB グループが構築公開している RDF エンドポイントに対して SPARQL クエリを実行する機能を搭載した。また、モデル構造と他の生命化学系データベースと連携させた NMR 創薬を支援する 2 次的データベースを Multiple Protein Model Search として構築し、公開した。BMRB/XML を利用した BMRB, PDB, UniProt, IntAct など複数のデータベース検索を高速に実行する WEB ツールの開

発も行い、PDBj-BMRB グループのポータルサイトに実装公開した[B-5]。

§3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

- ① 発行済論文数 (国内 (和文) 0 件、国際 (欧文) 12 件)
- ② 未発行論文数 (国内 (和文) 0 件、国際 (欧文) 0 件)
- ③ 論文詳細情報

- A-1. Andrej Sali, Helen M. Berman, Torsten Schwede, Jill Trewhella, Gerard Kleywegt, Stephen K. Burley, John Markley, Haruki Nakamura, Paul Adams, Alexandre M. J. J. Bonvin, Wah Chiu, Matteo Dal Peraro, Frank Di Maio, Thomas E. Ferrin, Kay Grünewald, Aleksandras Gutmanas, Richard Henderson, Gerhard Hummer, Kenji Iwasaki, Graham Johnson, Catherine L. Lawson, Jens Meiler, Marc A. Marti-Renom, Gaetano T. Montelione, 24, Michael Nilges, 26, Ruth Nussinov, Ardan Patwardhan, Juri Rappsilber, Randy J. Read, Helen Saibil, Gunnar F. Schröder, Charles D. Schwieters, Claus A. M. Seidel, Dmitri Svergun, Maya Topf, Eldon L. Ulrich, Sameer Velankar, John D. Westbrook (8th in 38 authors), “Outcome of the First wwPDB Hybrid/Integrative Methods Task Force Workshop” Structure vol.23 (7), pp.1156-1167, 2015 (DOI: 10.1016/j.str.2015.05.013)
- A-2. Hirofumi Suzuki, Takeshi Kawabata, Haruki Nakamura, “Omokage search: shape similarity search service for biomolecular structures in both the PDB and EMDB”, Bioinformatics, vol.32 (4), pp.619-620, March 2016 (DOI: 10.1093/bioinformatics/btv614)
- A-3. Akira R. Kinjo, “Liquid-theory analogy of direct-coupling analysis of multiple-sequence alignment and its implications for protein structure prediction”, Biophysics and Physicobiology, vol. 12, pp. 117-119, 2015 (DOI: 10.2142/biophysico.12.0_117)
- A-4. Akira R. Kinjo, “A unified statistical model of protein multiple sequence alignment integrating direct coupling and insertions”, Biophysics and Physicobiology, vol. 13, pp. 45-62, 2016 (DOI: 10.2142/biophysico.13.0_45)
- A-5. Takashi Mino, Yasuhiro Murakawa, Akira Fukao, Alexis Vandenbon, Hans-Hermann Wessels, Daisuke Orii, Takuya Uehata, Sarang Tartey, Shizuo Akira, Yutaka Suzuki, Carola G. Vinuesa, Uwe Ohler, Daron M. Standley, Markus Landthaler, Toshinobu Fujiwara, Osamu Takeuchi, “Regnase-1 and Roquin Regulate a Common Element in Inflammatory mRNAs by Spatiotemporally Distinct Mechanisms”, Cell, vol.161, pp.1058-1073, 2015 (DOI: 10.1016/j.cell.2015.04.029)
- A-6. Jun Ohshima, Miwa Sasai, Jianfa Liu, Kazuo Yamashita, Ji Su Ma, Youngae Lee, Hironori Bando, Jonathan C. Howard, Shigeyuki Ebisu, Mikako Hayashi, Kiyoshi Takeda, Daron M. Standley, Eva-Maria Frickel, and Masahiro Yamamoto,

“RabGDIalpha is a negative regulator of interferon-gamma-inducible GTPase-dependent cell-autonomous immunity to *Toxoplasma gondii*”, *Proc Natl Acad Sci U S A*, vol.112, E4581-4590, 2015 (DOI: 10.1073/pnas.1510031112).

A-7.Motoyasu Onishi, Koji Ozasa, Kouji Kobiyama, Keiichi Ohata, Mitsutaka Kitano, Keiichi Taniguchi, Tomoyuki Homma, Masanori Kobayashi, Akihiko Sato, Yuko Katakai, Yasuhiro Yasutomi, Edward Wijaya, Yoshinobu Igarashi, Noriyuki Nakatsu, Wataru Ise, Takeshi Inoue, Hiroshi Yamada, Alexis Vandenbon, Daron M. Standley, Tomohiro Kurosaki, Cevayir Coban, Taiki Aoshi, Etsushi Kuroda, and Ken J. Ishii, “Hydroxypropyl- β -Cyclodextrin Spikes Local Inflammation That Induces Th2 Cell and T Follicular Helper Cell Responses to the Coadministered Antigen”, *Journal of immunology*, vol.194, pp.2673-2682, 2015, (DOI: 10.4049/jimmunol.1402027)

B-1.Aleksandras Gutmanas, Paul D. Adams, Benjamin Bardiaux, Helen M. Berman, David A. Case, Rasmus H. Fogh, Peter Güntert, Pieter M. S. Hendrickx, Torsten Herrmann, Gerard J. Kleywegt, Naohiro Kobayashi, Oliver F. Lange, John L. Markley, Gaetano T. Montelione, Michael Nilges, Timothy J. Ragan, Charles D. Schwieters, Roberto Tejero, Eldon L. Ulrich, Sameer Velankar, Wim F. Vranken, Jonathan R. Wedell, John Westbrook, David S. Wishart & Geerten W. Vuister”, *NMR Exchange Format: a unified and open standard for representation of NMR restraint data*”, *Nature Struct. & Mol. Biol.*, vol. 22, No. 6, pp433-434 (2015) (DOI: 10.1021/jacs.5b12954)

B-2.Kyoko Furuita, Saori Kataoka, Toshihiko Sugiki, Yoshikazu Hattori, Naohiro Kobayashi, Takahisa Ikegami, Kazuhiro Shiozaki, Toshimichi Fujiwara and Chojiro Kojima, “Utilization of paramagnetic relaxation enhancements for high-resolution NMR structure determination of a soluble loop-rich protein with sparse NOE distance restraints”, *J. Biomol. NMR*, vol. 61, No. 1, pp55-64 (2015) (DOI: 10.1007/s10858-014-9882-7).

B-3.Yoh Matsuki, Toshitaka Idehara, Jun Fukazawa, and Toshimichi Fujiwara. “Advanced instrumentation for DNP-enhanced MAS NMR for higher magnetic fields and lower temperatures”, *J. Magn. Reson.*, 264, pp107-115 (2016). (DOI: 10.1016/j.jmr.2016.01.022)

B-4.Hajime Tamaki, Ayako Egawa, Kouki Kido, Tomoshi Kameda, Masakatsu Kamiya, Takashi Kikukawa, Tomoyasu Aizawa, Toshimichi Fujiwara and Makoto Demura, “Structure determination of uniformly ^{13}C , ^{15}N labeled protein using qualitative distance restraints from MAS solid-state ^{13}C -NMR observed paramagnetic relaxation enhancement”, *J. Biomol. NMR*, vol. 64, No. 1, pp87-101 (2016). (DOI: 10.1007/s10858-015-0010-0)

B-5. Masashi Yokochi, Naohiro Kobayashi, Eldon L. Ulrich, Akira R. Kinjo, Takeshi Iwata, Yannis E. Ioannidis, Miron Livny, John L. Markley, Haruki Nakamura, Chojiro Kojima, Toshimichi Fujiwara, “Publication of nuclear magnetic resonance experimental data with semantic web technology and the application thereof to biomedical research of proteins”, J. Biomed. Semantics, vol. 7, No. 16 (2016). DOI: 10.1186/s13326-016-0057-1

(3-2) データベースおよびウェブツール等の構築と公開

別紙1参照。

(3-3) その他の著作物(総説、書籍など)

該当なし

(3-4) 国際学会および国内学会発表

① 招待講演 (国内 3 件、国際 7 件)

〈国内〉

A-1. Haruki Nakamura, “BigData to Knowledge to Wisdom”, Data Sharing Symposium, 東京大学一橋講堂、2016 年 2 月 29 日

B-1. 藤原敏道, “先端 NMR 法と生体系への応用”, 蛋白研セミナー、大阪府吹田市、平成 27 年 4 月 28 日

B-2. 児嶋長次郎, “創薬スクリーニングによる人工花成ホルモンの探索”, 蛋白研セミナー、大阪府吹田市、平成 27 年 4 月 28 日

〈国際〉

A-1. Haruki Nakamura, “Computational analysis on electrostatic properties of proteins and their assembly”, The first trilateral workshop for frontier protein studies, Peking University, China, 2015 年 4 月 23 日

A-2. Haruki Nakamura, “Prediction of protein-protein and protein-ligand interactions, and application to drug discovery”, The 9th Asian Biophysics Association Symposium (ABA2015), Hangzhou, China, 2015 年 5 月 10 日

A-3. Haruki Nakamura, “Computational Approaches to Coupled Folding and Binding in Protein-Protein Interactions”, 19th KPPS (Korean Peptide Protein Symposium) Symposium, Resom Ocean Castle Resort, Korea, 2015 年 7 月 7 日

A-4. Haruki Nakamura, “A specific interaction among many fuzzy complexes regulated by phosphorylation: Molecular simulation approach”, RSC/IPR Joint Symposium “Protein Structure and Function”, Australian National University (Canberra), 2015 年 11 月 14 日

A-5. Haruki Nakamura, “Computational approach to find a specific interaction among many IDR relating fuzzy complexes”, International Symposium on Structure and

Folding of Disease Related Proteins, Seoul National University, Korea, 2015 年 12 月 4 日

A-6. Nobutoshi Ito, "Protein Data Bank and Structure Deposition at PDBj", OIST/CCP4 Workshop, Okinawa, 2015 年 11 月 7 日.

B-1. Chojiro Kojima, "Utilization of Paramagnetic NMR techniques for protein structure determination", APNMR 2015, Hong Kong, 平成 27 年 8 月 14 日

② 口頭講演 (国内 5 件、国際 1 件)

〈国内〉

B-1. 小林直宏, "BMRB と他の生命科学系データベースとの統合的検索", 第 15 回日本蛋白質科学会, 徳島市, 平成 27 年 6 月 24 日

B-2. 服部良一, 山口拓実, Ying Zhang, 亀田倫史, 加藤晃一, 藤原敏道, 児嶋長次郎, "新規ラントキレート剤を用いた蛋白質の NMR 構造解析法の開発", 第 54 回 NMR 討論会, 千葉市, 平成 27 年 11 月 6 日

B-3. 横地政志, "PDBj&創薬等ランチョンセミナー「生体高分子の立体構造データをめぐる最近の動向」", 生命医薬情報学連合大会 2015, 京都市, 平成 27 年 10 月 29 日

B-4. 杉木俊彦, 藤原敏道, 児嶋長次郎, "Scrambling free なアミノ酸選択的 ^{13}C 標識法と ^{13}C 標識の高選択性を利用したアミノ酸選択的 ^{15}N シグナル抽出法の開発", 第 54 回 NMR 討論会, 千葉市, 平成 27 年 11 月 6 日

B-5. 古板恭子, 大樂武範, 児嶋長次郎, 田中好幸, "C-Ag(I)-C 塩基対を含むメタロ DNA の立体構造解析", 第 54 回 NMR 討論会, 千葉市, 平成 27 年 11 月 6 日

〈国際〉

B-1. Naohiro Kobayashi, Masashi Yokochi, Takeshi Iwata, Bikash Ranjan Sahoo, Takashi Nagata, John L. Markley, Eldon L. Ulrich, Elena Schmidt, Peter Güntert, Chojiro Kojima and Toshimichi Fujiwara, "New strategy for high-throughput NMR analysis of biomolecules using the NMR database BMRB and tools for automated NMR analysis, MagRO, FLYA and CYANA", ISMAR 2015, Shanghai, 2015 年 8 月 21 日

③ ポスター発表 (国内 15 件、国際 1 件)

〈国内〉

A-1. 鈴木博文, 川端猛, 中村春木, EMDB と PDB を対象とした形状類似性検索: Omokage 検索, 第 15 回日本蛋白質科学会年会, あわぎんホール(徳島市), 2015 年 6 月 24~ 26 日

A-2. 鈴木博文, 川端猛, 中村春木, EMDB と PDB データの形状類似検索: Omokage 検索, 第 53 回日本生物物理学会年会, 金沢大学角間キャンパス(金沢市), 2015 年 9 月 13~ 15 日

A-3. 川端猛, 鈴木博文, 中村春木, 低解像度密度マップへの複数のサブユニットのあてはめ計算-実験情報による拘束の利用-, 第 53 回日本生物物理学会年会, 金沢大学角間キャンパス(金沢市), 2015 年 9 月 13~ 15 日

- A-4.金城玲、Unified statistical model of protein multiple-sequence alignment、日本生物物理学会、金沢大学角間キャンパス(金沢市)、2015年9月14日
- A-5.猿渡茂、輪湖博、Parallelization of the program for normal mode analysis in torsional angle space and application to supramolecules、第53回日本生物物理学会年会、金沢大学角間キャンパス(金沢市)、2015年9月15日
- B-1.古板恭子、西ヶ谷有輝、JunGooJee、田中利好、河野俊之、加藤悦子、山崎俊正、児嶋長次郎、”低濃度溶液 NMR 解析から明らかとなったイネフィトクロム B の HKRD ドメインの構造と機能”、第15回日本蛋白質科学会、徳島市、平成27年6月26日
- B-2.服部 良一、山口 拓実、Ying Zhang、亀田 倫史、加藤 晃一、藤原 敏道、児嶋 長次郎、”硬直な構造をもつ新規ランタニドキレート剤のタンパク質への導入およびその常磁性 NMR 研究”、第15回日本蛋白質科学会、徳島市、平成27年6月26日
- B-3.小林直宏、横地政史、岩田武史、児嶋長次郎、藤原敏道、”生体高分子NMRデータベース(BioMagResBank)の統合化とその応用”、トーゴーの日シンポジウム 2015、東京、平成27年10月6日
- B-4.Masashi Yokochi, Naohiro Kobayashi, Takeshi Iwata, Eldon L. Ulrich, John L. Markley, Akira R. Kinjo, Haruki Nakamura, Chojiro Kojima and Toshimichi Fujiwara、”PDBj-BMRB: a web search service for biological NMR data and beyond”、生命医薬情報学連合大会 2015、京都市、平成27年10月30日
- B-5.河原郁美、亀田倫史、池端悠介、芦原悠太、古板恭子、杉木俊彦、浜田道昭、藤原敏道、河野憲二、田中好幸、児嶋長次郎、”小胞体ストレスセンサーIre1p RNase ドメインの基質認識機構”、第54回 NMR 討論会、千葉市、平成27年11月8日
- B-6.斉藤優太、田巻初、江川文子、菊川峰志、神谷昌克、相沢智康、藤原敏道、出村誠、”固体 NMR 法を用いたナトリウムポンプ型ロドプシンの構造解析”、第54回 NMR 討論会、千葉市、平成27年11月6日
- B-7.田巻初、斉藤優太、江川文子、菊川峰志、神谷昌克、相沢智康、藤原敏道、出村誠、”固体 NMR によるタンパク質測定への圧縮センシングの応用”、第54回 NMR 討論会、千葉市、平成27年11月8日
- B-8.小林直宏、横地政史、岩田武史、本野千恵、廣明秀一、児嶋長次郎、藤原敏道、”NMR データベース BioMagResBank の統合的拡張と公開”、第54回 NMR 討論会、千葉市、平成27年11月6日
- B-9.杉木俊彦、Alsanousi Nesreen、古板恭子、藤原敏道、児嶋長次郎、”ヒト内在性神経保護ペプチド Humanin の立体構造および機能発現に関する NMR 解析”、第38回日本分子生物学会、神戸市、平成27年12月1日
- B-10. 小池雅昭、池端悠介、柳谷耕太、今川佑介、河原郁美、児嶋長次郎、河野憲二、”小胞体ストレスセンサーIRE1aによるXBP1u mRNA スプライシングに必須な構造の解析”、第38回日本分子生物学会、神戸市、平成27年12月3日

〈国際〉

- A-1.金城玲、Unified statistical model of protein multiple-sequence alignment integrating direct coupling and insertions The 13th conference of the Asian

(3-5) 知的財産権の出願

該当無し

(3-6) 受賞・報道等

該当無し

§4. 研究開発期間中に主催した活動(主催したワークショップ等)

2015 年 5 月 2 日	第 56 回大阪大学いちよう祭・蛋白研展示『生体分子ビューア”万見”を使ってタンパク質のかたちを見る』	大阪大学 (吹田市)	62 人	分子閲覧ソフトによる三次元構造の観察や、蛋白質 PC ゲームを使って蛋白質解析を分かりやすく一般へ紹介した。
2015 年 6 月 13 日	PDBj & 創薬等情報拠点講習会『見てわかるタンパク質-生命科学のための立体構造データの利用法』	JST 東京 本部別館 (千代田区)	17 人	PDBj の基本的な使い方や新フォーマットの読み解き方、ホモロジーモデリングについて PC を使った実習を含む講義を行った。
2015 年 6 月 24 日	第 15 回日本蛋白質科学会年会・PDBj ランチョンセミナー	あわぎん ホール(徳島市)	100 人	PDB の最新情報や PDBj の開発ツールについて紹介した。
2015 年 7 月 18 日	初めての All-in-one 合同講習会 ~生命科学データベースの使い方~	大阪大学 中之島センター(大阪市)	34 人	NBDC, DBCLS, DDBJ, PDBj 合同でデータベース講習会を開催した。
2015 年 9 月 1 日 ~ 4 日	JASIS(日本分析科学機器展示会) 2015	幕張メッセ 国際展示場(千葉市)	-	特別展示「ビッグデータとインフォマティクス」の一角に設置される NBDC ブースの出展に参加し、PDBj の紹介や質疑への対応を行った。
2015 年 9 月 3 日	AJACS 津軽	弘前大学 総合情報処理センター(青森県弘前市)	のべ 51 人	NBDC が主催するデータベース講習会 AJACS にて、PC を使った実習をまじえ PDB や PDBj の組織体制や PDBj 検索サービスなどの紹介を行った。
2015 年 9 月 13 日	第 53 回日本生物物理学会・PDBj ランチョンセミナー	金沢大学 (金沢市)	100 人	クライオ電子顕微鏡の進歩による原子座標データベースの増加や、PDB の新登録システムについて紹介した。
2015 年 10 月 2 日	wwPDBAC meeting 2015	大阪大学 (吹田市)	24 人	wwPDB 諮問委員、関係組織の代表研究者を招き、wwPDB の年次報告および今後の運営と方針について討

				議した。
2015年 10月3日	The wwPDB Foundation 主催国際シ ンポジウム “Integrative Structural Biology with Hybrid Methods”	大阪大学 (豊中市)	94人	マルチスケールの構造生命 科学(Integrative Structural Biology)をテー マに国際シンポジウムを開催 した。
2015年 10月14日 ～16日	BioJapan(バイオ関連産 業展示会) 2015	パシフィコ 横浜展示 ホール(神 奈川県横 浜市)	—	KEGG、MicrobeDB.jp、 PGDBjとともに NBDC のブ ース出展に参加し、PDBj の 紹介や質疑への対応を行っ た。
2015年 10月18日	H27年度日本結晶学会年 会・PDBj ランチョンセミナ ー	大阪府立 大学中百 舌鳥キャン パス(堺 市)	80人	PDB の最新情報や新登録シ ステムについて紹介した。
2015年 10月29日	生命医薬情報学連合大会 2015・PDBj&創薬等情報 拠点ランチョンセミナー	京都大学 (宇治市)	80人	PDB の最新ビューアソフトや モデリング、ゲノム変異解釈へ の立体構造情報の活用につ いて紹介した。
2015年 11月13日 ～15日	サイエンスアゴラ 2015	日本科学 未来館 (東京都 江東区)	—	社会のさまざまな立場の人々 の間で科学についての交流 を深めるための一般向けイベ ントで、3D メガネを使った分 子立体視、分子のペーパーク ラフト工作などを使って分子 構造データに親しんでもらう 活動を行った。
2015年 12月1日 - 3日	第38回日本分子生物学 学会年会・企画展示「使って みようバイオデータベース —広がるデータ、つながる 世界」	神戸国際 展示場 (神戸市)	—	wwPDBとPDBjの活動や開 発ツールを紹介するブース展 示を行った。
平成28年 3月15日	H27年度 PDBj & 創薬 等 PF 情報拠点 VaProS 第4回利用講習会	大阪大学 (吹田市)	36人	PC を使った実習をまじえ PDB や PDBj の組織体制や PDBj 検索サービスなどの紹 介、ホモロジーモデリングの解 説を行った。

以上

別紙1 既公開のデータベース・ウェブツール等

No.	研究開発課題名	データベース、ウェブツール等の名称	概要	URL	公開開始日	関連論文 (論文リストに記載があれば、その番号でも可)
01	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	PDB	日米欧の3極によるwwPDBの分担による蛋白質・核酸・糖鎖などの生体高分子の立体構造データのデータベースです。	http://pdj.org/	2002年4月	
02	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	PDBj Mine	PDBエントリ検索	http://service.pdbj.org/mine/ (旧) http://pdj.org/mine/ (新)	2009年10月(旧) 2013年4月(新)	
03	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	PDBj構造検証/登録ポータルサイト	研究者が構造データを妥当性の検証後にPDBjに登録できるように構築した、構造検証サーバと構造登録システムへのポータルサイトです。	http://pdbdep.protein.osaka-u.ac.jp/	2000年6月	
04	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	eF-site	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)及び機能部位のデータベースです。	http://service.ipr.pdbj.org/eF-site/	2000年5月(試作版)、2002年3月(修正版)	
05	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	eF-seek	PDBフォーマットのファイルを入力とした、表面の類似性検索による機能部位の予測法のwebサーバです。	http://ef-site.hgc.jp/eF-seek	2006年3月	
06	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	eF-surf	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)を計算するwebサーバです。	http://ef-site.hgc.jp/eF-surf	2006年3月	
07	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	jV (PDBj Viewer) プログラム・ダウンロード・サイト	stand aloneおよびappletとしても使える、独自開発のJAVAによる分子グラフィックス・プログラムです。	http://pdj.org/jv/	2004年1月	
08	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	ProMode Elastic	弾性ネットワークモデルの基準振動解析データベース	http://legacy.ipr.pdbj.org/promode_elastic/ (旧) http://pdj.org/promode_elastic (新)	2003年4月	
09	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	eProtS(蛋白質構造百科事典)	高校生以上の学生および一般社会人に、蛋白質の構造と機能を平易に説明した百科事典です。	http://pdj.org/epts/index.ja.cgi http://pdj.org/epts/index_english.html	2003年9月	
10	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	今月の分子 (Molecule of the Month)	社会で話題となっている内容に関わる分子を蛋白質構造データベース(PDB)から選び、機能と構造に関して解説しています。	http://pdj.org/mom/	2008年4月	
11	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	Sequence Navigator	アミノ酸配列を入力し、PDB中に登録されているホモログ蛋白質を探索するサービスです。	http://service.pdbj.org/seqnavix/ (旧) http://pdj.org/seq-navi (新)	2004年9月	
12	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	Structure Navigator	蛋白質立体構造を入力し、PDB中に登録されている類似の立体構造を持つ蛋白質を探索するサービスです。	http://service.pdbj.org/stnavix/ (旧) http://pdj.org/struc-navi	2004年12月	
13	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	EM Navigator	EMDBとPDBを基にした電子顕微鏡による生体分子、細胞、組織の三次元再構成像と、それに関連したPubMed等が閲覧できます。	http://pdj.org/emnavi/	2007年5月	
14	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	GIRAF	蛋白質のリガンド結合部位の類似局所構造を検索するサービスです。	http://www.ipr.pdbj.org/giraf/	2008年12月	
15	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	CRNPRED	蛋白質のアミノ酸配列から二次構造を高精度で予測するサービスです。	http://ipr.pdbj.org/crnpred/	2009年6月	
16	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	SeSAW	機能未知の蛋白質構造データに対して、構造の類似性検索に基づき、局所および大域的なアミノ酸配列の類似性も加味し、ファミリーあるいはスーパーファミリーを推定して、生化学的機能のアノテーションを行うサービスです。	http://pdj.org/sesaw/	2007年12月	

17	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	MAFFTash	構造アラインメントの出力を制約条件として、配列・構造統合アラインメントを構築するシステムです。	http://pdj.org/mafftash/	2008年12月	
18	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	Spanner	Templateを指定しループ部分はfragment法によるホモロジーモデルを作成するサービスです。	http://pdj.org/spanner/	2009年8月	
19	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	SFAS	アミノ酸配列を入力し、パイプラインによってホモロジーモデルを構築して機能を推定するサービスです。	http://pdj.org/sfas/	2009年8月(2010年度まではプロトタイプ)	
20	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	ASH (GASH / RASH)	三次元構造アライメントを行うプログラム	http://pdj.org/gash/ http://pdj.org/rash/		
21	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	万見 (Yorodumi)	3次元構造とメタ情報を簡単にブラウズするためのツール	http://pdj.org/yorodumi/ http://pdj.org/emnavi/viewtop.php (開発版)	2007年5月	
22	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	wwPDB/RDF	Resource Description Framework (RDF) 形式で書かれたPDBデータを提供するサービス	http://rdf.wwpdb.org/		
23	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	BMRB	本DBは、ADIT-NMR、SMSDepにより登録された生体高分子のNMR実験データを公開しています。データの検索、各データエントリーからPDBなど他のデータベースへのリンク、データ可視化サイトより構成	http://bmr.pdbj.org/	2011年4月	Ulrich, E. L. et al. (2008) BioMagResBank. Nucleic Acids Res. 36:D402-D408.
24	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	ADIT-NMR	タンパク質、核酸、糖鎖といった生体高分子に関するNMR実験情報をBMRBに登録するウェブツールです。	http://nmradit.protein.osaka-u.ac.jp/bmr-adit/	2011年4月	
25	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	SMSDep	生体高分子として、特に低分子化合物に関するNMR実験情報をBMRBに登録するウェブツールです。アミノ酸配列数24残基以内の短いペプチドなどPDBの登録条件に該当しない高分子化合物が登録対象となっています。	http://smsdep.protein.osaka-u.ac.jp/bmr-adit/	2011年4月	
26	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	PDBj-BMRBポータル	BMRBへのデータ登録を目的とした、マニュアルや各種ツール、検索機能を提供するポータルサイトです。	http://bmrdep.protein.osaka-u.ac.jp/	2012年1月	https://jbiomedsem.biomedcentral.com/articles/10.1186/s13326-016-0057-1
27	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	BMRB-pub	PDBj-BMRBが独自に開発したBMRBデータのXML、RDFフォーマットのエン트리と変換ツールを公開	http://bmrpub.protein.osaka-u.ac.jp	2014年8月	https://jbiomedsem.biomedcentral.com/articles/10.1186/s13326-016-0057-1
28	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	Multiple Protein Model Search	高精度なモデル構造のデータベースであるSAHGに登録されたエン트리とそれに関連するPDB、UniProt、BMRB、IntAct、OMIMのリンクを持つものを検索できる2次データベースです。	http://bmrdep.pdbj.org/en/mp_search.html	2016年2月	
29	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	ADIT (旧登録システム)	wwPDBへ蛋白質構造を登録するためのシステムです。2015年現在、NMRや電子顕微鏡法などX線結晶解析以外の手法による構造の登録のみ受け付けています。	http://pdbdep.protein.osaka-u.ac.jp/adit/	2000年6月	
30	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	wwPDB Depositon Tool (新登録システム)	wwPDBの新しい蛋白質構造登録・編集システムです。2015年現在はX線結晶構造の登録にのみご利用頂けます。近い将来に、NMRや電子顕微鏡によって解析された構造も登録できるようになります。	http://deposit-pdbj.wwpdb.org/deposition/	2015年5月	
31	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	Omokage検索	生体超分子の形状類似性検索サービスです。細部を無視した全体の形状のみの比較により、類似データを検索します。	http://pdj.org/omokage/	2014年9月	
32	蛋白質構造データベースの高度化と統合的運用	gmfit	混合正規分布を用いて高速に立体の重ね合わせを行うプログラム。2つのEMDBの密度マップやPDBの構造の重ね合わせ計算を行うサービスPairwiseGmfitを提供中。	http://pdj.org/gmfit/pairgmfit.html	2014年9月	Takeshi Kawabata. "Multiple subunit fitting into a low-resolution density map of a macromolecular complex using a gaussian mixture model". Biophys.J. (2008) vol 95, pp :4643-58.

33	蛋白質構造データバンクの高度化と統合的運用	万見プライム (Yorodumi Prime)	PDBとEMDBに登録されている立体構造を使って、生物学を楽しみながら学ぶためのサービスです。小中学生の学習にも使えるページを目指しています。立体視用の赤青メガネを利用すると、簡単に立体的に見ることができます。	http://pdj.org/prime/	2012年10月	
34	蛋白質構造データバンクの高度化と統合的運用	Molmil (WebGL分子ビューア)		http://pdj.org/molmil/	2014年9月	
35	蛋白質構造データバンクの高度化と統合的運用	Chemie (化合物検索)		http://pdj.org/chemie-search	2014年9月	