

研究開発実施報告

□概要

研究開発課題名	蛋白質構造データベース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)	日本蛋白質構造データベース (PDBj) (https://pdbj.org)
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

□目次

§1. 研究実施体制	2	① 概要	10
§2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等	3	② 招待講演	10
(1) データベース一覧	3	③ 口頭講演	10
(2) ツール等一覧	3	④ ポスター発表	10
§3. 実施内容	4	(4) 知的財産権の出願	11
(1) 本年度の研究開発計画と達成目標	4	(5) 受賞・報道等	11
(2) 進捗状況	5	§5. 研究開発期間中に主催した活動 (ワークショップ等)	
§4. 成果発表等	9	11
(1) 原著論文発表	9	1. 進捗ミーティング	11
① 論文数概要	9	2. 主催したワークショップ、シンポジウム、アウトリー	
② 論文詳細情報	9	チ活動等	12
(2) その他の著作物 (総説、書籍など)	10		
(3) 国際学会および国内学会発表	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
清水グループ (2017.10-18.3)	清水 浩	大阪大学・教授	代謝工学へのPDBの適用

§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	Protein Data Bank	PDB Archive	https://pdbj.org

【その他のデータベース】

No.	名称	別称・略称	URL
1	Biological Magnetic Resonance Data Bank	BMRB	http://bmrdep.pdbj.org
2	eF-site	同左	https://pdbj.org/eF-site/
3	ProMode elastic	同左	https://pdbj.org/promode-elastic/
4	Molecule of the Month	MoM	https://pdbj.org/mom/

(2) ツール等一覧

No.	名称	別称・略称	URL
1	EM Navigator	同左	https://pdbj.org/emnavi/
2	ASH	同左	https://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/ash_service/
3	MolMil	同左	https://pdbj.org/help/molmil
4	ASH viewer	同左	開発中のため非公開

§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

- 本研究開発では、wwPDB の欧米のメンバーと協力し、PDBj (PDB Japan) および PDBj-BMRB 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、アノテーターの数を増やすことなく、世界標準のデータベースとして継続的にデータ構築し公開する。特に、電子顕微鏡による構造解析例が急増しており、NMR による構造解析例を凌駕するに至った。第1年次には、EM および NMR により解析された構造データの品質を検証する手法を wwPDB の欧米メンバーと協力して確立することに重点を置いて対応する。
- PDB 全データの品質管理のための検証レポートの拡充とセマンティック化を進める。特に、検証レポートの構築法がほぼ確立している X 線結晶構造解析のデータを先行して行う。

2) 他のデータベースとの統合化および高度化

2-1) 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

本年度は、開発のベースとなるビューアの骨格部分を Java で開発する。まず、ビューアを系統樹表示パネル、アラインメント表示パネル、情報抽出パネルの3つのパネルから構成される形で設計する。次に、メニューバーにファイル選択機能を持たせ、アラインメントファイル (FASTA 形式) と系統樹ファイル (Newick 形式) を入力できるようにする。読み込まれた分子系統樹の構文解析を行い、各ノードに末端ノードからの平均距離を持たせ、それに基づいて 10 個程度のクラスタを自動同定できるようにする。得られたクラスタ情報に基づき、粗視化された系統樹を系統樹表示パネルに、各クラスタに対応するアラインメントのコンセンサス配列を、アラインメント表示パネルに出力する。コンセンサス配列は、2019 年度導入予定の機能部位解析の手法の中の保存度の計算のいずれかをデフォルトとして、クラスタごとのサイトの保存度に基づく色分けの機能を持たせる。機能部位解析の導入は上記のように 2019 年度実施予定であるが、Kullback-Leibler 情報量や相対 von Neumann エントロピーを利用した手法の実装の検討は、本年度から実施する。また系統樹表示パネルに表示されている粗視化された系統樹の各ノードは、2018 年度開発のノードの圧縮・展開のために、マウスのクリックによるイベントを処理できるようにする。また、次年度実施予定の各クラスタに含まれるタンパク質の情報の要約のため、FASTA ファイルの注釈行の構文解析を行えるようにするが、それと並行して注釈行に頼らずに RDF 化されたデータベースから必要な情報を取得する方法 (2020 年度実施予定) の検討も行う。

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をデータベース化し、既に運用されている PDBj Mine に統合・公開する計画で、続いて同様のことを分子間コンタクト (蛋白質間相互作用、蛋白質-リガンド間相互作用など) に対しても行う予定であった。しかし、開発担当者が本プロジェクト期間中に海外に異動することが決まり、蛋白質とリガンドに着目した統合化を選択して先に進める事とした。具体的には、(1) Chemical Component Dictionary (CC)、(2) Chemical Component Model (CC model)、(3) Biologically Interesting Molecule Reference Dictionary (BIRD) との連携を図ることにした。

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を図り、セキュリティおよびサーバ稼働状況の監視システムのプロトタイプを開発する。具体的には、現在、1件辺りの登録業務平均時間は2~3時間であり、登録者との通信業務、更新作業はおおむね2~3時間を要している。これらを米国 BMRB (ウィスコンシン-マディソン大学) と協力して、作業時間として現在の~75%になるよう簡略化・自動化する。

NMR 構造座標、実験データとの整合性に関する評価ツールを wwPDB との協力を通じて開発し、データの品質維持を客観評価可能な次世代技術について議論し、開発およびツールとしての公開を進める。

国内企業との連携により、BMRB データベースを活用した自動解析支援ツールの試用を行う。創薬研究へ利用できるパイプラインの構築と実際に応用可能であることを示す。

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」のメンバーに2017年度から企業研究者に入っていただき、企業からの要望等を集める。また wwPDB Foundation (米国内の NPO 法人) の枠組みによる企業と wwPDB との連携を継続する。学振169委員会に PDBj を代表するメンバーとして加わり、企業ユーザの声を集める。

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1年次も All-in-one 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・アゴラの活動等、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

新たなアノテータ候補を非常勤として雇用し育成を図る。アノテータの教育については、今後とも更新されていく OneDep 登録システムを活用した世界で同一の品質管理によるデータ登録を実施する必要があり、国際連携による教育を進める。具体的には、TV 会議による講習会と、米国 RCSB-PDB あるいは欧州 EBI-PDBe での合同講習会へ参加する。

(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

本研究課題の下で、PDBj および PDBj-BMRB が厳しい品質管理を行いつつ、wwPDB の欧米のメンバーと協力して、増加する一方の立体構造情報と NMR 実験情報に対応した。具体的には、平成 29 年度中に PDB データ 2976 件 (内、X 線 2621 件、NMR117 件、電子顕微鏡 120 件 [参考:平成 28 年度は 3 手法合わせて 2387 件])、BMRB データ 107 件のデータセットを PDBj から新規公開した。wwPDB の欧米メンバーと協力して開発したデータ登録システム (OneDep システム) の高機



図 1. 2017 年 wwPDB 運営諮問会議

能化を進めた結果、約 25%増のデータ登録件数に対応して、アノテーターの数を増やすことなく世界標準のデータベースを構築し公開した¹⁾。平成 29 年度中に wwPDB 運営諮問会議を米国 Rutgers 大学において開催し、引き続き OneDep システムの高度化を進め登録システムの更なる効率化を進めていくこととした(図1)。

ここ数年、電子顕微鏡による構造解析例が急増しており、NMR による構造解析例を凌駕するに至っている。本年度期間中に、電子顕微鏡マップのデータベースである EMDB との連携が議論され、平成 30 年度中に wwPDB のメンバーの一員に正式に招聘されることを決定した。これにより、wwPDB の枠組みの下で、電子顕微鏡構造についても検証レポートを実効的に作成できる体制が整ったと言える。また、合わせて wwPDB に新しいメンバーを加える際のルールを明文化し、運用を開始することとした。

PDB 全データの品質管理のための検証レポートの拡充とセマンティック化を進めた。新たなオントロジー (wwPDB/OWL)を加え、RDF 版 wwPDB Validation Report (wwPDB/RDF-validation)の作成のためのスタイルシートを作成した。特に、検証レポートの構築法がほぼ確立している X 線結晶構造解析のデータ⁴⁾を先行して行い、プロトタイプでの確認を行った(図2)。

```

wwPDB/RDF-validation (仮称)の検索:例1

リガンド(非ポリマー)を含む全ての酵素の中で、リガンドのRSR (Real space R-factor)が
0.1より小さい酵素、リガンドの組み合わせを検索 (SPARQLで約30行)

PREFIX PDBov: <https://rdf.wwpdb.org/schema/pdb-validation-v1.owl#>
SELECT ?PDB_ID ?enzyme ?ligand ?comp_id MIN(?RSR AS ?minRSR)
FROM <http://rdf.wwpdb.org/pdb-validation>
WHERE {
  ?entity PDBov:link_to_enzyme ?link_to_enzyme ;
    PDBov:entity_pdbx_description ?enzyme ;
    PDBov:of_datablock ?datablock .
    酵素を選択

  BIND (SUBSTR(STR(?datablock),38,4) AS ?PDB_ID)
    中略

  FILTER (?ligand!="water" && !ISTRENDS(?ligand, "ION"))
    リガンドを選択
    中略

  ?dcc_map PDBov:pdbx_dcc_map_auth_asym_id ?asym_id ;
    PDBov:pdbx_dcc_map_auth_comp_id ?comp_id ;
    PDBov:pdbx_dcc_map_RSR ?RSR .
    中略

  FILTER (xsd:float(?RSR) < 0.1)
    RSR < 0.1でふるい分け

} GROUP BY ?PDB_ID ?enzyme ?ligand ?comp_id
  
```

図2. 検証レポートの SPARQL 検索の例

2) 他のデータベースとの統合化および高度化

2-1) 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「非公開部分(完成するまで公開しない)」

アラインメントに基づく相同なタンパク質の配列、構造の比較解析は、データの大量化のために困難になってきている。また、配列や構造情報に他のデータベースからの様々な情報をマッピングすることはデータの解釈やデータマイニングに重要な意味を持つが、多様なデータベースから必要な情報を抽出し配列と対応づける作業もまた困難になっている。本計画では、アラインメントと分子系統樹を粗視化して表示し、そこに RDF 化された種々のデータベースから様々な情報を抽出し、それを上記の粗視化されたアラインメントや系統樹の上にマッピングすることでタンパク質の機能解析を支援するためのビューアを開発した。2017 年度は、(1)入力機能の実装、(2)クラスタ同定機能の作成、(3)表示部分の作成、(4)SPARQL 検索機能の作

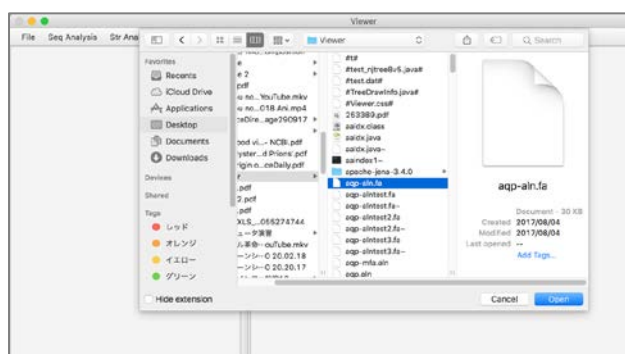


図3. ビューアの構成

上部にメニューバーがある。メニューバーは、ファイル選択メニュー、配列解析メニュー、構造解析メニュー、Web メニューの4つのメニューから構成される。

成の4つを計画していたが、当初計画からの変更点を中心に以下に進捗を報告する。

まず、ASH ビューアのベースとなる骨格部分を Java で開発した。図3に ASH ビューアの起動画面を示す。本年度実施計画(1) 入力機能の実装について記す。2017 年のキックオフミーティングにおいて系統樹を構築できた方が良いとのご意見を岩崎渉委員からいただいたので、計画を変更し neighbor-joining 法でアラインメントから系統樹を構築できるようにした。そのため、本年度は Import Tree File の機能は実装していない。本年度実施計画(2) クラスタ同定機能の作成および(3) 表示部分の作成について記す。いずれも系統樹の作成に伴うので合わせて記述する。自動同定によるクラスタは必ずしもユーザの目的と合致するものではないので、自動同定の方法の改良とともに、File メニューの Import Cluster File から読み込まれるユーザ設定のクラスタ情報を利用できる方向での開発を行っていく予定である。最後に、(4) SPARQL 検索機能の開発結果について記す。Java で SPARQL を使うためのパッケージ Jena を使って、SPARQL 検索を行えるようにした。Web メニューは SPARQL と Scraping よりなるが、Scraping は今回実装していないので、SPARQL についてのみ記述する。Web のプルダウンメニューから SPARQL を選択すると、endpoint のテキストフィールドに endpoint を入力する。Select Input File をクリックするとファイルチューザのウィンドウが開くのでそこから SPARQL クエリが記述されたファイルを選択する。下段パネルに SPARQL クエリを直接入力することもできる。Select Output File は結果出力のファイルをファイルチューザから選択する機能を持たせる予定であったが、現在実装されておらず、結果は標準出力に出される。ビューアから SPARQL 検索ができることを確認したが、RDF 化されたデータの利用に関しては NBDC の山口敦子特任准教授から、NBDC で開発されているアプリケーションを組み込むことを提案いただいております、現在その方向で検討を開始している。そのため出力部分についてもそれに合わせて開発する予定である。

本年度の実実施計画は neighbor joining 法の実装や NBDC の RDF 化されたデータの利用などの変更はあったが、ほぼ計画通り実施できた。

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

wwPDB が整理・公開している(1)Chemical Component Dictionary (CC)、(2)Chemical Component Model (CC model)、(3)Biologically Interesting Molecule Reference Dictionary (BIRD)を PDBj の基本データベースシステムである PDBj Mine (<https://pdbj.org/mine>)³⁾に統合した。これにより(1) InChI key や SMILES などの化合物情報に基づいて PDB エントリーを検索できるようになり、(2) Cambridge Structural Database (CSD)の ID と PDB の化合物の対応がつけられ、(3)抗生物質など生物学的に重要な化合物の情報と PDB エントリーの対応が容易に検索できるようになった。

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 実験データのパラメータは極めて豊富かつ複雑であり、それらを整理して効率よく WEB ページで公開する事はユーザーにとって大きな利益となる。PDBj-BMRB グループは既に開発した NMR-STAR フォーマットをそのデータ構造を既述するオントロジに相当する NMR-STAR dictionary に完全準拠させて XML 化を行いメタデータを含めた厳密な整合性の管理を自動化することを実現している。これにより実験 NMR データ公開サイトページでは様々なフォーマットに変換したダウンロードサービス²⁾、JavaScript により視認性に優れた各登録エントリーに対する WEB ページの洗練化を行った。これら NMR 実験データベースの登録、アノテーション、管理、公開に関するツール群の開発は、データ処理に掛かる時間を大

幅に削減する事に役立つと期待される。米国 BMRB (ウィスコンシンマジンソン大学) をはじめとする wwPDB による国際協力関係において新ツール群の利用が推進され、特に NMR 実験データと登録された構造座標との整合性を評価するツールと解析ツールとデータベース間での相互交換を可能にする新しいフォーマット NEF コンバータツールの開発が公開フェーズに入り、平成29年度中に初期バージョンが各 wwPDB 拠点において実装された。

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

PDBj 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」のメンバーに平成29年度から帝人ファーマ(株)の上村みどり氏に加わって頂いた。平成30年2月28日に開催した専門部会において、企業研究者の立場からコメントを頂き、検証レポートの充実と更なる国際連携の重要性について助言を頂いた。また wwPDB Foundation (米国内の NPO 法人) の枠組みによる企業と wwPDB との連携を継続し、今年度は X 線装置メーカーである(株)リガクに企業サポーターとして参画して頂くことになった。代表の栗栖が、学振169委員会に PDBj を代表するメンバーとして加わり、定例の委員会に出席して企業ユーザからの声を集めた。特に169委員会において、中性子線構造解析のデータについて検証レポートの不備が指摘された。該当する解析例は非常に少ないが、wwPDB の枠組みの下で中性子線構造解析の検証レポートの今後の取り扱いについて議論を開始した。

利用者・研究者向けのセミナーや講習会については、DDBJ と協力し All-in-one 講習会を開催した。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科学会の年会中に、ランチョンセミナーを開催し、データ登録への継続的な協力と、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ランチョンセミナーを開催し、利用者の声をアンケートの形で集めた。



図4.サイエンスアゴラ2017でのVRによるPDBデータの可視化体験コーナー

大阪大学いちょう祭(4月30日)とサイエンス・アゴラ2017(11月24-26日)に参加し(図4)、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のため、積極的な啓蒙活動を行った。

3-2) アノテータの育成・国際協力

新たなアノテータ候補を非常勤として雇用し育成したが、産休・育休のため新アノテータによる実際のデータキュレーションへの貢献は平成30年度以降となった。効率的なデータ登録のため頻繁に更新される OneDep 登録システムを完全に使いこなすため、アノテータの能力維持は重要な課題である。国際協力



図5. OneDep のリーフレット (日本語版)

による世界で同一の品質管理によるデータ登録を担保するため、Skype を用いた OneDep アノテータ会議を定期的 to 実施し、国際連携によるアノテータ教育を進めた。Face-to-Face 会議も実施しており、2017 年 5 月に英国 EBI で、同年 11 月に米国 Rutgers 大学で OneDep 開発者会議を開催して、PDBj から 1 名のアノテータを派遣し今後の方向性と問題点を議論した。

OneDep 登録用サイトがより正しく利用されるように、日本語、韓国語、中国語(簡体字および繁体字)によるリーフレット(図5)を作成し、関連する国際会議(19th IUPAB Congress, 24th IUCr congress, 5th A PPA conference)や国内学会(日本結晶学会)で配布して宣伝に務めた。

§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)	5 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

- Young JY, Westbrook JD, Feng Z, Peisach E, Persikova I, Sala R, Sen S, Berrisford JM, Swami nathan GJ, Oldfield TJ, Gutmanas A, Igarashi R, Armstrong DR, Baskaran K, Chen L, Chen M, Clark AR, Di Castanzo L, Dimitropoulos D, Gao G, Ghosh S, Gore S, Guranovic V, Hendrickx PMS, Hudson BP, Ikegawa Y, Kengaku Y, Lawson CL, Liang Y, Mak L, Mukhopadhyay A, Narayanan B, Nishiyama K, Patwardhan A, Sahni G, Sanz-García E, Sato J, Sekharan MR, Shao C, Smart OS, Tan L, van Ginkel G, Yang H, Zhuravleva MA, Markley JL, Nakamura H, Kurisu G, Kleywegt GJ, Velankar S, Berman HM, Burley SK. “Wolrdwide Protein Data Bank biocuration supporting open access to high-quality 3D structural biology data”, Database (Oxford), Jan 1, 2018 (DOI:10.1093/database/bay002.)
- Schober D, Jacob D, Wilson M, Cruz JA, Marcu A, Grant JR, Moing A, Deborde C, de Figueire do LF, Haug K, Rocca-Serra P, Easton J, Ebbels TMD, Hao J, Ludwig C, Gunther UL, Rosato A, Klein MS, Lewis IA, Luchinat C, Jones AR, Grauslys A, Larralde M, Yokochi M, Kobayashi N, Porzel A, Griffin JL, Viant MR, Wishart DS, Steinbeck C, Salek RM, Neumann S. “nmrML: A Community Supported Open Data Standard for the Description, Storage, and Exchange of NMR Data”, Anal Chem. Vol.90, No.1, pp.649-656, 2017 (DOI: 10.1021/acs.analchem.7b02795. Epub 2017 Dec 14.
- Kinjo AR, Bekker GJ, Wako H, Endo S, Tsuchiya Y, Sato H, Nishi H, Kinoshita K, Suzuki H, Kawabata T, Yokochi M, Iwata T, Kobayashi N, Fujiwara T, Kurisu G, Nakamura H. “New tools and functions in data-out activities at Protein Data Bank Japan (PDBj)”. Protein Science. Vol. 27, No.1, pp.95-102, 2018 (DOI:10.1002/pro.3273)
- Gore S, García ES, Hendrickx PMS, Gutmanas A, Westbrook JD, Yang H, Feng Z, Baskaran K,

Berrisford JM, Conroy M, Hudson BP, Ikegawa Y, Kobayashi N, Lawson CL, Mading S, Mak L, Mukhopadhyay A, Oldfield TJ, Patwardhan A, Peisach E, Sahni GS, Sekharan MR, Sen S, Shao C, Smart OS, Ulrich EL, Yamashita R, Quesada M, Young JY, Nakamura H, Markley JL, Berman HM, Burley SK, Velankar S, Kleywegt GJ, "Validation of the Structures in the Protein Data Bank", Structure, Vol.25, pp.1916-27. 2017 (DOI: 10.1016/j.str.2017.10.009.)

- Burley SK, Kurisu G, Markley JL, Nakamura H, Velankar S, Berman HM, Sali A, Schwede T, Trewhella J. PDB-Dev: a Prototype System for Depositing Integrative/Hybrid Structural Models. Structure, 2017, 25, 1317-1318, doi: 10.1016/j.str.2017.08.001.

(2) その他の著作物(総説、書籍など)

- 小林直宏、生体系 NMR の解析ツール(機械学習と自動化)、日本核磁気共鳴学会誌、Vol.8、2017

(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	0件
	国際	2件
口頭発表	国内	1件
	国際	1件
ポスター発表	国内	4件
	国際	2件

② 招待講演

〈国際〉

- Kurisu G, "Ligand representation and validation in the Protein Data Bank", International Life Science Integration Workshop, Tokyo, 2018/3/6
- Kurisu G, "Small molecule ligand/drug representation and validation in the Protein Data Bank", 24th International Union of Crystallography Congress, Hyderabad, 2017/8/22

③ 口頭講演

〈国内〉

- 栗栖源嗣, 蛋白質構造データバンクのデータ検証高度化と統合化, トーゴーの日シンポジウム 2017, 2017/10/4

〈国際〉

- Kurisu G., "The Protein Data Bank Japan(PDBj): A Partner of the wwPDB Accepting Structure Depositions through One Dep System", International Symposium on Establishment of Structural Biology Network in Asia and Oceania, 新竹・台湾, 2017/12/6-7,

④ ポスター発表

〈国内〉

1. 栗栖源嗣, 蛋白質構造データバンクのデータ検証高度化と統合化, トーゴーの日シンポジウム 2017, 2017/10/4-5
2. 小林直宏, PDBj-BMRB における統合化データベースの取り組み: 高度な WEB 検索表示機能への応用, トーゴーの日シンポジウム 2017, 2017/10/4-5
3. 藤 博幸、工藤高祐、山下鈴子 ASHViewer の開発、トーゴーの日シンポジウム 2017、東京大学弥生講堂、2017/10/4-5
4. 鈴木博文, 川端猛, 栗栖源嗣, 中村春木, クライオ EM マップ及び多階層構造を対象とした状態構造検索サービス「Omokage 検索」の改良, 第 55 回日本生物物理学会, 2017/9/19-21

〈国際〉

1. Kobayashi N, Nagata T, Kojima C, Fujiwara T, "Highly automated NMR signal assignments using peak-noise recognition assisted by Deep Neural Networks", Gordon Research Conference, Sunday River USA, 2017/6
2. Kinjo AR, Bekker GJ, Suzuki H, Tsuchiya Y, Kawabata T, Ikegawa Y, Kurisu G, Nakamura H. "Protein Data Bank Japan (PDBj): updated semantic web services and tools for large structures", 19th IUPAB congress, Edinburgh, 2017/7/16,

(4) 知的財産権の出願

該当なし

(5) 受賞・報道等

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
2017年4月1日～2018年3月31日 (毎週開催)	PDBj開発者会議 (非公開)	大阪大学蛋白質研究所構造解析研究棟4階セミナー室	10人	研究進捗報告のためのミーティング
2017年4月1日～2018年3月31日 (隔週開催)	PDBj Primary Annotator's meeting (非公開)	大阪大学蛋白質研究所構造解析研究棟4階セミナー室	14人	同上
2017年4月1日～2018年3月31日 (隔月開催)	wwPDB PI ミーティング	Skype	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

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
2017年 4月30日	大阪大学いちょう祭	大阪大学蛋白質研究所	60人	一般向け蛋白質立体構造の展示および解説
2017年 5月27日	All-in-one 合同講習会2017	三島市文化会館	45人	学生及び研究者を対象としたPDBjサービスの紹介
2017年 6月22日	第17回日本蛋白質科学会年会 PDBjランチョンセミナー	仙台国際センター	100人	学会参加者に向けた PDBjとサービスの紹介
2017年 9月21日	第55回日本生物物理学会年会 PDBjランチョンセミナー	熊本大学黒髪地区	100人	学会参加者に向けた PDBjとサービスの紹介
2017年 9月27日	第6回生命医薬情報学連合大会 PDBjランチョンセミナー	北海道大学	80人	学会参加者に向けた PDBjとサービスの紹介
2017年 11月24-26日	サイエンスアゴラ 2017	テレコムセンター (東京都)	750人	子供、中高生を含む一般参加者に向けた蛋白質立体構造の展示、解説等
2017年 11月24日	日本結晶学会 H29 年度年会 PDBjランチョンセミナー	JMS アステールプラザ (広島市)	80人	学会参加者に向けた PDBjとサービスの紹介
2017年 12月6-9日	ConBio2017 データベース展示企画 ブース出展及びフォーラム講演	神戸国際展示場	100人	学会参加者に向けた PDBjとサービスの紹介
2018年 2月20日	PDBj&BINDS 合同講習会	大阪大学銀杏会館	40人	大学院生及び研究者を対象に PDBj及び BINDS の事業・サービス紹介と、ツールの活用方法の紹介
2018年 3月27日	日本薬学会 PDBjランチョンセミナー	金沢県立音楽堂	150人	学会参加者に向けた PDBjとサービスの紹介

以上

別紙 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	https://pdbj.org	2002/4/1	維持・発展	データベース等	本紙論文リストの文献番号§4-②-1
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	http://bmrbd.pdbj.org	2011/4/1	維持・発展	データベース等	本紙論文リストの文献番号§4-②-2
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	https://pdbj.org/eF-site/	2002/3/1	維持・発展	データベース等	本紙論文リストの文献番号§4-②-3
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.	https://pdbj.org/promode-elastic/	2003/4/1	維持・発展	データベース等	本紙論文リストの文献番号§4-②-3
5	Molecule of the Month	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.	https://pdbj.org/mom/	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	https://pdbj.org/emnavi/	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	https://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/ash_service/		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	https://pdbj.org/help/molmil	2014/9/1	維持・発展	ツール等	本紙論文リストの文献番号§4-②-3