

平成 23 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」
平成 23 年度採択 研究代表者

中村 春木
大阪大学蛋白質研究所・教授

蛋白質構造データバンクの国際的な構築と統合化

§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、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、松田 真、
Gert-Jan Bekker、西川 建、晴氣 菜穂子(大阪大学蛋白質研究所)
Daron M. Standley(大阪大学免疫学フロンティア研究センター、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

- ・PDB 構造データ登録・編纂の国際連携による実施とデータ検証法の開発
- ・統合化にむけたデータ管理・配布システム、構造データのオントロジー、データ記載のフォーマット、ユーザインターフェースの開発
- ・蛋白質機能情報および高次生命機能情報と蛋白質構造情報との統合化システムの開発
- ・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、原野 陽子、岩田武史、高橋あみ
(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

【研究の目的】

国際協力のもと、蛋白質構造データバンク(PDB)の構築・運営を実施するとともに、NMR 実験情報のデータバンク(BMRB)、電子顕微鏡や X 線小角散乱による構造情報データベース(DB)を構築し公開する。オントロジー、データ管理システム、新たなデータ書式、利用者インターフェースや二次的 DB および種々のサービスも開発して公開し、PDB の高度化・統合化を図り、人材育成も実施して、他の生命 DB との統合化による高次生命機能の理解に資する研究開発を行う。

【概要】

大阪大学蛋白質研究所内に、日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) なる組織を組織し、米国 (RCSB-PDB)、欧州(EBI-PDBe)および NMR のスペクトル情報 DB である BMRB(BioMagResBank)と協力して国際蛋白質構造データバンク (wwPDB) を運営し、国際協力に基づき、蛋白質・核酸等の生体高分子立体構造の主にアジア・オセアニア地区からの構造データと NMR 情報を受け付け登録作業を行っている。構造データについては、2011年4月1日～2012年3月末までの間に1,804件の処理を行い(世界全体の同時期の全登録数9,441件)、NMR 情報については同期間に62件の登録を行った(米国の BMRB と合わせた同時期の全登録数856件)。さらに、登録業務の標準化・自動化システム開発を、国際協力により実施するとともに、wwPDB 活動を推進した。

一方、統合のためのセマンティック・ウェブ技術として PDB データの RDF 化を世界に先駆けて実施・公開し、wwPDB においてもその採用が始まった。PDBj-BMRB では、NMR 実験データの登録・アノテーション支援プログラム MagRO を開発し、複雑なデータ構造をオントロジー工学で容易に命名法やフォーマットの変換を行うことを可能にした。

機能情報と構造情報との統合化システムの開発として、蛋白質相互作用部位データベースの PDB データとの統合化を行い、高次生命機能情報へ原子レベルの情報を統合化できる環境を整えた。また、配列情報を入力とした、構造情報に基づく機能の解析・推定パイプラインを SFAS (Sequence to Function Annotation Server)として構築した。

人材養成として、データ寄託・登録者、データベース利用者に対する講習会を、学会のランチョンセミナーおよび公開の講習会等を開催して実施した。さらに、5名のアノテータを育成した。

【進捗状況と研究成果】

- (1) PDB データおよび NMR 実験情報の登録・編纂の国際連携による実施とデータ検証法の開発
- ・Primary Annotators による欧米との協力によるデータ登録の継続的实施を行い、平成 23 年度は、1804 件の構造情報と 62 件の NMR 実験情報の登録処理を行った^{A-8)}。
 - ・登録業務の標準化・自動化システム開発を、国際協力によりデータ検証部分を担当・実施した。
 - ・wwPDB 活動を推進し、EBI での国際諮問委員会とマドリードでの IUCr2011 での発表に加え、米国 Cold Spring Harbor 研究所での PDB40 周年記念シンポジウムを主催した^{A-10)}。
 - ・電子顕微鏡および X 線小角散乱データの PDB データとの統合化を 2012 年 3 月に開始した。
 - ・ProMode-Elastic を高度化し、受託計算機能と大量データへの対応を行った^{A-1,2)}。

・グラフィックビューアjVを改良し、pyMolとの互換性を上げ、pyMolで使用されていた分子表面のフォーマットである(CGO形式)への対応と、JOGL2.0への移行を行った。

・NBDCにおける統合的データベース運営として、GIRAFの相互作用部位の structural motif dataの統合化を ROIS-DBCLS と共同で構築し^{A-6)}、<http://pdj.org/giraf/cmotif/> から配布した。また、NBDCのデータセンター設置するポータルの開発を始めた。

(2) 統合化に向けたデータベースの高度化

・mmCIF記述に基づき OWL 準拠の世界標準の RDF 化 PDB データを開発・公開した^{A-8)}。

・NMR データ構造の管理配布システムを、仮想化技術を用いて高度化した。

・生体系 NMR データの登録者用ポータルサイトをリニューアルし、これまでに開発してきた単純な HTML 形式を一新し、PHP/MODx による高度に効率化されたリソースとして再開発を行った^{B-1, 2, 3)}。また、オントロジーを考慮した NMR データ構造を mmCIF の記述法により作成し、生体高分子化学構造データや NMR スペクトル測定データおよび種々の実験データに対し、主要な解析プログラムが扱えるフォーマットへの相互変換が可能な機能を MagRO に実装した^{B-4,5,6,7)}。

(3) 機能情報と構造情報との統合化システムの開発

・原子レベルでの蛋白質相互作用を記述するオントロジーを定義し相互作用 RDF で記述した。蛋白質相互作用部位データベースの PDB データとの統合化を行い、複数のモチーフ構造の固有の組み合わせ(composite motif)によって、蛋白質の固有の高次生命機能をより厳密に整理し、高次生命機能情報へ原子レベルの情報を統合化できる環境を整えた^{A-9)}。

・配列情報を入力とした、構造情報に基づく機能の解析・推定パイプラインを、Disorder 領域の推定や精度の高いメタ・スレッディングサーバの導入により、SFAS (<http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/sfas2/>)として構築・公開した^{A-3,4,5,7)}。

(4) 人材養成の実施

・データ寄託者・登録者に対する教育を日本結晶学会年会のランチョンセミナーにて行った。

・データ利用者に対する初歩的および高度な利用法についての教育・実習を、学会のランチョンセミナー、サテライト講習会等で実施した。

・国際的な on-the-job training を実施し、米国 RCSB-PDB、英国 EBI-PDBe や米国 Wisconsin 大学との交流により、国際感覚を身に付けた 5 名のアノテータを育成した^{A-8)}。

【今後の見通し】

(1) PDB データおよび NMR 実験情報の登録・編纂の国際連携による実施とデータ検証法の開発
データ登録の継続的に実施と、wwPDB活動を継続して推進。(2012年10月12日にwwPDB 諮問委員会を大阪で開催(アウトリーチ活動を10月13日に実施)。クラウドコンピューティング技術を用いた NMR 実験データの統合的管理システムを構築。NBDC との統合的データベース運営の仕組みを構築し実施。

(2) 統合化に向けたデータベースの高度化

RDF 化した PDB データをさらに高度化し DB との統合化環境を整備。wwPDB としての新たなフォーマット開発とその記述検証法の開発。ユーザインターフェースの改良と GUI の高度化。NMR 実験データについて、オントロジー工学に基づく標準的な XML 記述法を開発。

(3) 機能情報と構造情報との統合化システムの開発

蛋白質相互作用部位 DB の高度化。配列情報からの機能解析・推定パイプラインを稼働。



(4) 人材養成の継続的实施

データ寄託者・登録者およびデータ利用者に対する教育・講習会を継続的に実施。wwPDBメンバーとの交流や海外派遣により、国際感覚を身に付けたキュレータ、アナレータを継続的に育成。

§3. 成果発表等

(3-1) データベースおよびウェブツールの構築と公開

① 公開中のデータベース・ウェブツール等

作成データベース : PDB

URL : <http://pdj.org/>

データベースの概要 : 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バンク

情報公開日 : 2002年4月

アクセス数 : (下記にページ毎に示す)

【内訳】

- xPSSS (Native XML-DB による DB と検索システム) <http://www.pdbj.org/xpsss/>
情報公開日: 2004年2月 (2009年11月以後は PDBj Mine に切替え。)
検索回数: 2006年度 330,141, 2007年度 1,098,531, 2008年度 1,214,789, 2009年度 (4-11月) 1,739,154
- PDBj-Mine (xPSSS に代わる RDB と検索システム) <http://service.pdbj.org/mine/>
情報公開日: 2009年10月
検索回数: 2009年度 1,063,336, 2010年度 3,293,478, 2011年度 9,897,022
- PDBj FTP と rsync サイト (pdb.protein.osaka-u.ac.jp) からのデータファイルのダウンロード
ダウンロード回数: 2006年度 6,142,469, 2007年度 8,660,074, 2008年度 18,913,247, 2009年度 16,495,882, 2010年度 26,093,912, 2011年度 33,861,275
- PDBj トップページ: <http://pdj.org/>
英語版: 公開日: 2002年4月, 2003年11月(改変), 2007年1月(改変)
アクセス数: 2006年度 58,069, 2007年度 52,429, 2008年度 57,988, 2009年度 92,108, 2010年度 94,990 2011年度 102,943
日本語版: 公開日: 2002年4月, 2003年11月(改変), 2007年1月(改変)
アクセス数: 2006年度 83,130, 2007年度 90,143, 2008年度 67,796, 2009年度 79,381, 2010年度 90,633 2011年度 93,791
簡体中国語版: 公開日 2008年3月
アクセス数: 2007年度(2008年3月のみ) 285, 2008年度 2,806, 2009年度 2,791 2010年度 2,667, 2011年度 3,157
繁体中国語版: 公開日 2009年10月
アクセス数: 2009年度 1,053, 2010年度 2,458, 2011年度 2,987
韓国語版: 公開日 2008年3月
アクセス数: 2007年度 (2008年3月のみ) 70, 2008年度 2,388, 2009年度 2,299, 2010年度 2,478 2011年度 2,913

・PDBj 登録サーバページ(構造データ登録用)

URL : <http://pdbdep.protein.osaka-u.ac.jp/>
公開日 : 2000 年 6 月
アクセス数 : 2007 年度 79,314, 2008 年度 118,807, 2009 年度 248,161
2010 年度 226,876 2011 年度 229,813

作成データベース : eF-site

URL : <http://ef-site.hgc.jp/eF-site>
データベースの概要 : 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。
情報公開日 : 公開日:2000 年 5 月(試作版), 2002 年 3 月(修正版)
アクセス数 : 2006 年度 31,281, 2007 年度 51,823, 2008 年度 42,851, 2009 年度 15,755, 2010 年度 14,763, 2011 年度 89,030

ウェブツール名 : eF-surf

URL : <http://ef-site.hgc.jp/eF-surf>
サービスの概要 : 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
情報公開日 : 公開日:2006 年 3 月
アクセス数 : 計算のリクエスト処理, 2006 年度 67, 2007 年度 213, 2008 年度 320, 2009 年度 422, 2010 年度 403, 2011 年度 667

ウェブツール名 : eF-seek

URL : <http://ef-site.hgc.jp/eF-seek>
サービスの概要 : 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。
情報公開日 : 公開日:2006 年 3 月
アクセス数 : 計算のリクエスト処理, 2006 年度 221, 2007 年度 243, 2008 年度 334, 2009 年度 308, 2010 年度 127, 2011 年度 397

ウェブツール名 : jV (PDBj Viewer) プログラム・ダウンロード・サイト

URL : <http://www.pdbj.org/jV/>
サービスの概要 : 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。
情報公開日 : ソースコード公開:2004 年 1 月
プログラムのダウンロード数 : (2011 年 3 月末時点まで)9,343 件

作成データベース : ProMode
URL : <http://promode.socs.waseda.ac.jp/>
データベースの概要 : 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
情報公開日 : 2003 年 4 月
アクセス数 : 2006 年度 16,167, 2007 年度 19,584, 2008 年度 23,979,
2009 年度 37,219, 2010 年度 37,130, 2011 年度 43,719

作成データベース : eProtS(蛋白質構造百科事典) (355 項目)
URL : http://www.pdbj.org/eptoms/index_en.cgi (英語版)
http://www.pdbj.org/eptoms/index_ja.cgi (日本語版)
データベースの概要 : 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
情報公開日 : 2003 年 9 月
アクセス数 : 2006 年度 150,378, 2007 年度 450,255, 2008 年度 730,720,
2009 年度 1,073,589, 2010 年度 484,153, 2011 年度 388,215

作成データベース : MoM(Molecule of the Month:今月の分子) (148 項目)
URL : <http://www.pdbj.org/mom/index.php?l=ja>
データベースの概要 : 高校生以上の学生および一般社会人に、日本語と英語で蛋白質
の構造と機能を平易に説明した百科事典
情報公開日 : 2008 年 4 月
アクセス数 : 2008 年度 29,325, 2009 年度 86,323, 2010 年度 160,857,
2011 年度 260,352

ウェブツール名 : Sequence Navigator
URL : <http://service.pdbj.org/seqnavix/>
データベースの概要 : 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
情報公開日 : 2004 年 9 月
アクセス数 : 検索回数 2006 年度 34,999, 2007 年度 306,731,
2008 年度 606,384, 2009 年度 426,483 2010 年度 78,957,
2011 年度 25,979

ウェブツール名 : Structure Navigator
URL : <http://service.pdbj.org/stnavix/>
データベースの概要 : 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
情報公開日 : 2004 年 12 月
アクセス数 : 検索回数 2006 年度 2,109, 2007 年度 584, 2008 年度 3,108, 2009 年度 4,938, 2010 年度 4,152, 2011 年度 2,910

ウェブツール名 : EM Navigator
URL : <http://www.pdbj.org/emnavi/>
データベースの概要 : 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 等の閲覧
情報公開日 : 2007 年 5 月
アクセス数 : 2007 年度 454,979, 2008 年度 1,835,216, 2009 年度 4,282,779, 2010 年度 7,310,918, 2011 年度 4,925,433

ウェブツール名 : GIRAF
URL : <http://giraf.pdbj.org/>
データベースの概要 : 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。
情報公開日 : 2008 年 12 月
アクセス数 : 2009 年度 4,429, 2010 年度 5,916 2011 年度 4,946

ウェブツール名 : CRNPRED
URL : <http://crnpred.pdbj.org/>
サービスサイトの概要 : 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。
情報公開日 : 2009 年 6 月
アクセス数 : 2009 年度 4,499, 2010 年度 4,647, 2011 年度 6,060

ウェブツール名 : Protein Globe
URL : <http://www.pdbj.org/globe/>
サービスサイトの概要 : 各蛋白質の構造を地球儀のような球の表面にドットで表示し、類似フォールドの検索を行うサービス
情報公開日 : 2007 年 12 月
アクセス数 : 2008 年度 7,956, 2009 年度 67,359, 2010 年度 145,803, 2011 年度 72,278

ウェブツール名 : SeSaw
URL : <http://www.pdbj.org/SeSAW/>
サービスサイトの概要 : 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、局所の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
情報公開日 : 2008 年 9 月
アクセス数 : 2009 年度 4,899, 2010 年度 3,183, 2011 年度 4,283

ウェブツール名 : MAFFTAsh
URL : <http://www.pdbj.org/MAFFTAsh/>
サービスサイトの概要 : 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。
情報公開日 : 2008 年 12 月
アクセス数 : 2009 年度 3,318, 2010 年度 4,029, 2011 年度 3,292

ウェブツール名 : Spanner
URL : <http://www.pdbj.org/spanner>
サービスサイトの概要 : 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
情報公開日 : 2009 年 8 月
アクセス数 : 2009 年度 2,147, 2010 年度 3,185, 2011 年度 4,339

ウェブツール名 : SFAS
URL : <http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/sfas/>
サービスサイトの概要 : 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
情報公開日 : 2009 年 8 月 (2010 年度まではプロトタイプ)
アクセス数 : 2009 年度 1,357, 2010 年度 2,101, 2011 年度 2,474

データベース名 : BMRB
URL : <http://bmrblib.protein.osaka-u.ac.jp/>
データベースの概要 : 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る。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される。
情報公開日 : 2011 年 4 月 1 日
アクセス数 : 2011 年度 6,441,688 件

ウェブツール名 : ADIT-NMR
URL : <http://nmradit.protein.osaka-u.ac.jp/bmr-b-adit/>
作成者 : ldon Urich
サービスサイトの概要 : 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ある。
情報公開日 : 2011年4月1日

ウェブツール名 : SMSDep
URL : <http://smsdep.protein.osaka-u.ac.jp/bmr-b-adit/>
サービスサイトの概要 : 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ある。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る。
情報公開日 : 2011年4月1日

(3-2) 原著論文発表

①発行済論文数(国内(和文)0件、国際(欧文)15件)

②未発行論文数(国内(和文)0件、国際(欧文)2件)

③論文詳細情報

〈国際〉

- A-1. Hiroshi Wako and Shigeru Endo, "Ligand-induced conformational change of a protein reproduced by a linear combination of displacement vectors obtained from normal mode analysis." *Biophys. Chem.* vol. 159, pp.257-266, 2011 [DOI:10.1016/j.bpc.2011.07.004]
- A-2. Hiroshi Wako and Shigeru Endo, "ProMode-Oligomer: Database of normal mode analysis in dihedral angle space for a full-atom system of oligomeric proteins." *The Open Bioinformatics Journal*, vol. 6, pp.9-19, 2012 [DOI:10.2174/1875036201206010009]
- A-3. Daron M. Standley and Mark van der Giezen, "Modeling the alternative oxidase from the human pathogen *Blastocystis* using automated hybrid structural template assembly." *Research and Reports in Biochemistry*, vol. 2, pp.1-8, 2011 [DOI: 10.2147/RRBC.S26820]
- A-4. Ashwini Patil, Shunsuke Teraguchi, Huy Dinh, Kenta Nakai, and Daron M. Standley, "Functional Annotation of Intrinsically Disordered Domains by Their Amino Acid Content Using Idd Navigator." *Pac. Symp. Biocomput.*, vol. 17, pp.164-175, 2011 [DOI: 10.1142/9789814366496_0016]

- A-5. Sarel J. Fleishman, Timothy A. Whitehead, Eva-Maria Strauch, Jacob E. Corn, Sanbo Qin, Huan-Xiang Zhou, Julie C. Mitchell, Omar N.A. Demerdash, Mayuko Takeda-Shitaka, Genki Terashi, Iain H. Moal, Xiaofan Li, Paul A. Bates, Martin Zacharias, Hahnbeom Park, Jun-su Ko, Hasup Lee, Chaok Seok, Thomas Bourquard, Julie Bernauer, Anne Poupon, Jérôme Azé, Seren Soner, Şefik Kerem Ovalı, Pemra Ozbek, Nir Ben Tal, Türkan Haliloglu, Howook Hwang, Thom Vreven, Brian G. Pierce, Zhiping Weng, Laura Pérez-Cano, Carles Pons, Juan Fernández-Recio, Fan Jiang, Feng Yang, Xinqi Gong, Libin Cao, Xianjin Xu, Bin Liu, Panwen Wang, Chunhua Li, Cunxin Wang, Charles H. Robert, Mainak Guharoy, Shiyong Liu, Yangyu Huang, Lin Li, Dachuan Guo, Ying Chen, Yi Xiao, Nir London, Zohar Itzhaki, Ora Schueler-Furman, Yuval Inbar, Vladimir Potapov, Mati Cohen, Gideon Schreiber, Yuko Tsuchiya, Eiji Kanamori, Daron M. Standley, Haruki Nakamura, Kengo Kinoshita, Camden M. Driggers, Robert G. Hall, Jessica L. Morgan, Victor L. Hsu, Jian Zhan, Yuedong Yang, Yaoqi Zhou, Panagiotis L. Kastritis, Alexandre M.J.J. Bonvin, Weiyi Zhang, Carlos J. Camacho, Krishna P. Kilambi, Aroop Sircar, Jeffrey J. Gray, Masahito Ohue, Nobuyuki Uchikoga, Yuri Matsuzaki, Takashi Ishida, Yutaka Akiyama, Raed Khashan, Stephen Bush, Denis Fouches, Alexander Tropsha, Juan Esquivel-Rodríguez, Daisuke Kihara, P. Benjamin Stranges, Ron Jacak, Brian Kuhlman, Sheng-You Huang, Xiaoqin Zou, Shoshana J. Wodak, Joel Janin, and David Baker, “Community-wide assessment of protein-interface modeling suggests improvements to design methodology.” *Journal of Molecular Biology*, vol. 414, pp.289-302, 2011 [DOI : 10.1016/j.jmb.2011.09.031]
- A-6. Toshiaki Katayama, Mark D. Wilkinson, Rutger Vos, Takeshi, Kawashima, Shuichi Kawashima, Mitsuteru Nakao, Yasunori Yamamoto, Hong-Woo Chun, Atsuko Yamaguchi, Shin Kawano, Jan Aerts, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Kazuharu Arakawa, Bruno Aranda, Raoul JP Bonnal, José M Fernández, Takatomo Fujisawa, Paul M.K. Gordon, Naohisa Goto, Syed Haider, Todd Harris, Takashi Hatakeyama, Isaac Ho, Masumi Itoh, Arek Kasprzyk, Nobuhiro Kido, Young-Joo Kim, Akira R. Kinjo, Fumikazu, Konishi, Yulia Kovarskaya, Greg von Kuster, Alberto Labarga, Vachirane Limviphuvadh, Luke McCarthy, Yasukazu Nakamura, Yunsun Nam, Kozo Nishida, Kunihiro Nishimura, Tatsuya Nishizawa, Soichi Ogishima, Tom Oinn, Shinobu Okamoto, Shujiro Okuda, Keiichiro Ono, Kazuki Oshita, Keun-Joon Park, Nicholas Putnam, Martin Senger, Jessica Severin, Yasumasa Shigemoto, Hideaki Sugawara, James Taylor, Oswaldo Trelles, Chisato Yamasaki, Riu Yamashita, Noriyuki Satoh and Toshihisa Takagi, The 2nd DBCLS BioHackathon: interoperable bioinformatics Web services for integrated applications. *Journal of Biomedical Semantics*, vol. 2, ID: 4, 2011 [DOI:10.1186/2041-1480-2-4]

- A-7. Akira R. Kinjo, Yutaro Kumagai, Huy Dinh, Osamu Takeuchi and Daron M. Standley, Functional characterization of protein domains common to animal viruses and mouse. *BMC Genomics*, vol. 12, ID: S21, 2011 [DOI:10.1186/1471-2164-12-S3-S21]
- A-8. Akira R. Kinjo, Hirofumi Suzuki, Reiko Yamashita, Yasuyo Ikegawa, Takahiro Kudo, Reiko Igarashi, Yumiko Kengaku, Hasumi Cho, Daron M. Standley, Atsushi Nakagawa, and Haruki Nakamura, Protein Data Bank Japan (PDBj): Maintaining a structural data archive and Resource Description Framework format. *Nucleic Acids Research*, vol. 40, pp.D453-D460, 2012 [DOI:10.1093/nar/gkr811]
- A-9. Akira R. Kinjo, and Haruki Nakamura, Composite structural motifs of binding sites for delineating biological functions of proteins. *PLoS One*, vol. 7, ID:e31437, 2012 [DOI:10.1371/journal.pone.0031437]
- A-10. Helen M. Berman, Gerard J. Kleywegt, Haruki Nakamura, and John L. Markley, “The Protein Data Bank at 40: Reflecting on the past to prepare for the future.” *Structure*, vol. 20, pp.391-396, 2012 [DOI: 10.1016/j.str.2012.01.010]
- B-1. Keisuke Ikeda, Tomoshi Kameda, Erisa Harada, Hideo Akutsu, and Toshimichi Fujiwara, “Combined use of replica-exchange molecular dynamics and magic-angle-spinning solid-state NMR spectral simulations for determining the structure and orientation of membrane-bound peptide” *Journal of Physical Chemistry B*, vol.115, pp.9327-9336, 2011 [DOI: 10.1021/jp205290]
- B-2. FaHu He, Makoto Inoue, Takanori Kigawa, Mari Takahashi, Kanako Kuwasako, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Takako Terada, Mikako Shirouzu, Peter Güntert, Shigeyuki Yokoyama, and Yutaka Muto, “Solution structure of the splicing factor motif of the human Prp18 protein” *Proteins*, vol. 80, pp. 968-974, 2012 [DOI: 10.1002/prot.24003]
- B-3. Kengo Tsuda, Tatsuhiko Someya, Kanako Kuwasako, Mari Takahashi, FaHu He, Satoru Unzai, Makoto Inoue, Takushi Harada, Satoru Watanabe, Takako Terada, Naohiro Kobayashi, Mikako Shirouzu, Takanori Kigawa, Akiko Tanaka, Sumio Sugano, Peter Güntert, Shigeyuki Yokoyama, and Yutaka Muto, “Structural basis for the dual RNA-recognition modes of human Tra2-beta RRM” *Nucleic Acids Research*, vol. 39, pp.1538-1553, 2011 [DOI: 10.1093/nar/gkq854]
- B-4. Shino Mizuno, Hirokazu Amida, Naohiro Kobayashi, Shin-Ichi Aizawa, and Shin-Ichi Tate, “The NMR Structure of FliK, the Trigger for the Switch of Substrate Specificity in the Flagellar Type III Secretion Apparatus” *Journal of Molecular Biology*, vol.409, pp.558-573, 2011 [DOI: 10.1016/j.jmb.2011.04.008]
- B-5. Takako Ohyama, Takashi Nagata, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Takako Imai, Hideyuki Okano, Toshio Yamazaki, and Masato Katahira, “Structure of Musashi1

in a complex with target RNA: the role of aromatic stacking interactions” *Nucleic Acids Research*, vol. 40, pp.3218-3231, 2012 [DOI: 10.1093/nar/gkr1139]

- B-6. Takashi Nagata, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Mikako Shirouzu, Takanori Kigawa, Peter Güntert, Shigeyuki Yokoyama, and Yutaka Muto. “Solution structures of the double-stranded RNA-binding domains from rna helicase A.” *Proteins*, 2012, in press [DOI: 10.1002/prot.24059]
- B-7. Takashi Nagata T, Kengo Tsuda, Naohiro Kobayashi, Peter Güntert, Shigeyuki Yokoyama, and Yutaka Muto, “¹H, ¹³C, and ¹⁵N resonance assignments of the dsRBDs of mouse RNA helicase A.” *Biomolecular NMR Assignment*, 2012, in press. [DOI: 10.1007/s12104-012-9380-3]