

独立行政法人科学技術振興機構
バイオインフォマティクス推進センター事業
追跡評価用資料
(追跡調査報告書)

生命情報データベースの高度化・標準化
(第Ⅰ期)

「蛋白質立体構造データベースの高度化」
(平成13年6月～平成18年3月)

代表研究者 中村 春木
(大阪大学 蛋白質研究所 教授)

目次

目次	1
はじめに	2
1. 課題の研究成果	3
1.1. 研究開発終了時の成果概要	3
1.2. 研究開発開始時の課題を取り巻く研究・技術水準および分野における課題の位置づけ	5
1.3. 研究開発課題の目標及び新規性・独創性	5
1.4. 研究開発の達成度	5
2. その後の研究の発展状況	6
2.1. BIRD 終了から現在まで、BIRD で取り組まれた課題に関連した研究の継続状況や発展状況（国内外の研究者との共同研究へ発展した等）	6
2.2. BIRD 終了後に出た新たな研究成果	6
2.3. 研究開発成果の現在の国際的な評価・位置づけ	6
3. 研究開発成果の波及効果	7
3.1. ライフサイエンス分野へ及ぼした影響（インパクト）	7
3.2. 後のバイオインフォマティクス研究への影響や効果	7
3.3. 想定していなかった分野の発展に与えた影響や貢献	8
3.4. 大学や公的研究機関等で応用に向けて継承あるいは発展した例	8
3.5. 企業等において応用・実用化に取り組んでいる事例、あるいは研究の成果に興味を持っている企業の有無	8
3.6. その他、社会的、経済的な効果・効用につながる兆し、可能性	9
4. データベース・ソフトウェア等の利用状況	9
4.1. 構築されたデータベースや開発された技術等の活用状況	9
4.2. データベース・ソフトウェア等へのアクセス数/ダウンロード数、visitor 数	9
4.3. データベースや公開サイトへの被リンクサイト数あるいは相互リンクサイト	11
4.4. 第三者による研究成果（データベース等を含む）の活用事例	11
5. 人材育成	11
5.1. 研究人材の養成における貢献（人材のキャリアアップ、活動状況等）	11
5.2. 研究開発に参加した研究者のバイオインフォマティクス分野の学会、国際会議等での座長、オーガナイザー経験	12
6. その他	13
6.1. 代表研究者からのコメント	13
6.1.1. 研究開発段階で苦労したこと、その困難をどう克服したか	13
6.1.2. BIRD があつたおかげで可能であつたこと	14
6.2. 有識者コメント	14

はじめに

科学技術振興機構では平成13年度にバイオインフォマティクス推進センター（JST-BIRD）を設置し、統括（勝木元也 自然科学研究機構 基礎生物学研究所 名誉教授）の指導のもと、バイオインフォマティクスの研究開発を支援し、またこれに携わる人材の育成活動を推進することで、バイオインフォマティクスの発展及びそれを基盤とした21世紀の新しい生物科学の創造を目指している。

JST-BIRD では生命情報科学に不可欠で生命情報科学の高度化に資するデータベースの高度化・標準化（データ整備を含む）を対象とした研究開発を行うため、「生命情報データベースの高度化・標準化課題（第I期）」として4課題を採択した。これら研究開発課題は平成18年3月に終了したが、構築されたデータベースの機能、開発された技術等、活用状況、波及効果を検証するため追跡調査を実施した。

1. 課題の研究成果

1.1. 研究開発終了時の成果概要

【PDB データベース業務の日本の分担作業の実施】

PDBj : <http://www.pdbj.org/>では、専門のキュレータを育成し日本、アジア・オセアニア地区からの登録を wwPDB の一員として担当している。PDBj における登録処理件数は、2001 年 356 件、2002 年 648 件、2003 年 935 件、2004 年 1,586 件、2005 年 2,101 件と急増しているが、2005 年の世界全体 6,043 件に対し日本の寄与は 34.8%にのぼった。PDBj において生体高分子の立体構造を登録する際に利用するインターネット上の登録サーバ ADIT の日本語による案内ページを作成・公開し電子メールによる PDB データ登録に関する便宜を図る一方で、生体分子に対する核磁気共鳴(NMR)実験データベースである BMRB (BioMagResBank : 米国 Wisconsin 大学が開発) のミラーサイト (<http://www.bmrbl.protein.osaka-u.ac.jp>)を共同して立ち上げて、日本での登録作業を 2005 年から開始し、これまでに 31 件の登録がなされている。

【蛋白質立体構造データベースの標準化記述】

PDB では、Brookhaven National Laboratory によるフラットファイル・フォーマットが現在でも標準的に用いられているが、記述法が必ずしも統一的でなく、特に古いエントリーに関してはフォーマットどおりに正しく記述されているかどうかの検証(validation)も十分でなかったため、利用者は多様な記述法と例外処理に悩まされてきた。PDB データの品質管理だけでなく、他のゲノム配列やプロテオームデータベースとのデータグリッドなどによる統合化のために、validation ツール及び、最近利用が始まった eXtensible Markup Language (XML) を用いた国際標準としての正規 XML 記述 PDBML を米国の RCSB-PDB と共同して 2004 年に確立した。同時に、XML におけるファイルサイズ増大の問題に対処するため提案した、データの 9 割以上を占める原子情報を別ファイル化する ext-atom 方式が採用されたことにより、検索が高速となりファイルサイズも 2~3 倍程度に納めることが可能となっている。

さらに、拡張が容易な XML 書式の特長を活かして、オリジナルの PDB データに多く欠損している分子機能や実験条件等の情報を文献から抽出して追加し、平成 18 年 2 月 20 日時点で 16,221 件に達している。同時に関連する 13,997 件の文献をスキャンし、PDF および WORD の書式により電子化、XML 化して PDBML データに追加され、native XML-DB による蛋白質構造データ検索システムとして一般に公開している。この検索システムは、native XML-DB の特徴を生かして、XPath による検索が行える Web サービスも実現しており、SOAP (Simple Object Access Protocol)サービスも運用している。これらテキスト・ベースでの情報検索に加えて、2006 年 3 月には、蛋白質の類似構造(フォールド)の検索 (Structure Navigator)と、eF-site : <http://ef-site.hgc.jp/eF-site/>を拡張した蛋白質類似分

子表面の検索サービスを開始し、蛋白質構造・形状というアナログデータが直接アナログ情報のままで検索できるようにした一方、PDBにこれまで蓄積されてきた実験データである構造因子から電子密度マップ(2Fo-Fc)を作成してDB化し、その interactive 画像表示を行うサービスを、jV3 を利用して運用を開始した。

【蛋白質構造を基にした解析システムの開発と二次データベースの構築】

スタンドアロンとしてもアプレットとしても利用できる Java ベースの新しい 3D ビューア(PDBjViewer (jV) : <http://pdbj.protein.osaka-u.ac.jp/PDBjViewer/>)に JOGL を採用して実行速度を確保できるものを開発し、パブリックドメインとしてソースおよびバイナリプログラムの公開を行った。また、このアプレットを用いて、xPSSS、eProtS、eF-site などの PDBj が開発した様々のサービスのビューアに応用している。一方、蛋白質表面形状と物性に関するデータベース(eF-site)、蛋白質ダイナミクス・データベース(ProMode : <http://promode.socs.waseda.ac.jp/>)、マルチプル・アラインメントによる蛋白質立体構造の比較サービス(ASH : <http://timpani.genome.ad.jp/~ash/> GASH)の開発を行い、いずれも Web ページ上で公開している。高度化された PDB データベースを基にして、立体構造解析を専門としない一般の生物学・生化学の研究者や大学生および高校生を対象とした、教育用の蛋白質構造データベース(eProtS: encyclopedia of Protein Structures)の英語版と日本語版の公開を継続的に進め、これまでに 236 件の蛋白質についての解説を実施している。

教育用蛋白質構造百科事典 eProtS :

http://eprotS.protein.osaka-u.ac.jp/eProtS/Top_e.jsp(英語版)

[http:// eprotS.protein.osaka-u.ac.jp/eProtS/Top.jsp](http://eprotS.protein.osaka-u.ac.jp/eProtS/Top.jsp) (日本語版)

【wwPDB の活動と諮問委員会の開催、その他の広報・学会活動】

国際蛋白質構造データバンク(wwPDB) の第 1 回諮問委員会 (wwPDBAC: world wide Protein Data Bank Advisory Committee) を 2004 年 11 月 21 日に、wwPDB の第 2 回発言者委員会を 2005 年 8 月 30 日に開催し、PDB データ記述の誤記述の修正と統合化、wwPDB と BMRB との関係の強化、電子顕微鏡データベースとの協力、理論モデルの取り扱い、登録数の急増への対応、wwPDB 諮問委員会メンバーによる運営開発基金の配分機関への働きかけの必要性等が議論され、wwPDB のメンバーに具体的な課題が課された。PDB データ記述の誤記述の修正と統合化における日本の分担は、Primary Citation に対しての誤記述や記述の欠落を修正・追加することであり、2005 年 2 月から開始し、人手によって、多くの誤記述の修正と欠落している文献情報を追加した。その他の広報・教育関連の活動として、ニューズレターを年間 2 回発行する他、国際学会(2004 年 4 月第 1 回環太平洋蛋白質科学国際会議(横浜)、2005 年 8 月第 20 回国際結晶学会(フィレンツェ))・国内学会(2004 年 12 月日本生物物理学会第 42 回年会(京都))へのブース出展やシンポジウムの共催による開催を行った。また、国立遺伝学研究所の DDBJ と協力し、DDBJing & PDBjing - 講習

会 in 大阪一を、2004年3月2日、2006年2月2-3日の2回にわたって大阪大学中之島センター・キャンパス・イノベーションセンターで開催し、一般社会人や関西、中国地方の大学生・大学院生を対象として、データベース利用法についての講習会を無料で行った。2回とも約25名程度の参加者があり、講演と、自らのPCを持ち込んで行う実習が実施され、好評であった。

1.2. 研究開発開始時の課題を取り巻く研究・技術水準および分野における課題の位置づけ

欧米・日本を中心とする国際的な構造ゲノム／構造プロテオミクス・プロジェクトの進展によって、多くの蛋白質立体構造が従来に比べて迅速に決定される時代を迎えつつある。蛋白質立体構造データベース (PDB: Protein Data Bank) に登録されている立体構造データは1990年代から急増し、毎年世界で5,000件以上の実験によって決定された構造が登録される。PDBは地球規模で利用されてきたものの、構造生物学研究の成果をまとめあげただけのデータベースに留まってきた。本研究開発では蛋白質の立体構造とゲノム情報の結びつきの強化を行う一方で、データベースに付加価値を付け加えることにより、様々なバックグラウンドを持つユーザーに広く役立つデータベースに高度化する。

1.3. 研究開発課題の目標及び新規性・独創性

本研究開発では、PDBへのデータ登録作業に積極的に協力して蛋白質の立体構造とゲノム情報との結びつきを強める一方、XMLなどの最新情報技術を利用し、国際的な連携のもとに世界標準としての新しいデータ記述 (PDBML) と解析ツールや二次データベースを開発して付加価値を付け加え、構造生物学者だけを対象とする専門的なデータベースから、広く生命科学の研究者、産業界、さらには一般の人にも役立つデータベースに高度化することを目的とした。

1.4. 研究開発の達成度

本研究開発を通して、国内では、「日本蛋白質構造データバンク (PDBj:Protein Data Bank Japan)」を設立し、複数の国内の大学の研究室をサテライト・サイトとする研究開発体制を構築する一方、国際的には、米国RCSBや欧州EBIと共同で「国際蛋白質構造データバンク (worldwide Protein DataBank:wwPDB)」を設立して国際的な連携を強化させ、研究開発を推進した。具体的な当初計画として、以下の5つの項目の研究開発をミッションとした。

1. 新規蛋白質立体構造データベース構築

2. 蛋白質構造を基にした解析システムの開発と二次データベースの構築
3. PDB データベース業務の日本の分担作業の実施
4. BioMagResBank (BMRB) の日本の分担作業の実施
5. 日本国内での教育用データベースの作成と公開

どの項目もほとんど全ての実施がなされ、その成果がWeb を通して公開されており、全体としては90%程の達成度と考えられる。

2. その後の研究の発展状況

2.1. BIRD 終了から現在まで、BIRD で取り組まれた課題に関連した研究の継続状況や発展状況（国内外の研究者との共同研究へ発展した等）

2006 年度からの JST-BIRD による生命情報データベースの高度化・標準化（第 II 期）課題「蛋白質構造データバンクの国際的な構築と高度化（PDBj）」として、継続的に PDBj におけるデータベース構築とその運営を実施しており、さらに国際化と高度化を進められている。一方、蛋白質機能のアノテーション作業は、その後、蛋白質間相互作用を情報科学的に解析する *In-silico* Structural Interactome Study Based on Structural Genomics なる課題の提案を日英共同研究として JST の戦略的国際科学技術協力推進事業に採択され、3 年間のプログラムを実施中である。

2.2. BIRD 終了後に出た新たな研究成果

現状調査票データ（論文リスト）参照

2.3. 研究開発成果の現在の国際的な評価・位置づけ

継続的なPDBjの活動により、現在においてもwwPDBのメンバーの一員として、米国RCSB-PDBと欧州のMSD-EBI（現在はPDBeと名称を変更）と連携し、生体高分子の立体構造データベースを国際的に維持している組織として国際的に認知されている。これらの活動は、wwPDBのwebサイト（<http://www.wwpdb.org/>）に統計値として表示（2000年～2008年10月末までの累計ではPDBjでの登録処理数は11,781件、RCSB-PDBは29,253件、MSD(PDBe)-EBIは6,995件）されているだけでなく、Nucleic Acids Researchのデータベース特集での論文や、Methods in Molecular Biology (vol 426, Chap 5)のレビュー論文に発表されてい

る。一方、独自に開発してきた、分子表面のデータベース (eF-site) や分子ダイナミクスのデータベース (ProMode) についても、他にはないユニークさをもっており、原著論文として発表している他、Briefings in Bioinformatics (vol 9, pp.286-298, 2008)の英文レビュー誌からも招待されてレビュー論文を発刊した。

3. 研究開発成果の波及効果

3.1. ライフサイエンス分野へ及ぼした影響 (インパクト)

native XML-DB のデータベース xPSSS では、単なる蛋白質の原子座標だけが入った従来の PDB データベースを、ゲノムやネットワーク等の他の様々なバイオインフォマティクス関連データベースと統合して理解できる仕組みへと高度化させた。また、利用者への便を図るためにビューアや各種ツールを開発し、講習会や学会発表を通じて、蛋白質立体構造に対する理解を浸透させた。XML-DB や SOAP の利用は、実施当初は情報科学分野で研究的に行われていたものを先取りする形で運用を始めており、ライフサイエンスだけでなく、国内の情報科学全体へも実施例としての波及効果を及ぼした。また、PDBML の開発は、ライフサイエンスにおけるデータグリッドの意味付けを高め、推進する意義を与えた。PDBML 開発等のデータ記述での標準化については、米国 RCSB-PDB との密な協力関係によって達成され、30 年以上に渡る懸案であった PDB 記述法における誤記の問題点をクリアーし、全くエラーのないデータベースが構築された。本研究開発の高度化・標準化は非常に意義があり、成果は多方面に大きな影響を与えている。

3.2. 後のバイオインフォマティクス研究への影響や効果

構造バイオインフォマティクス研究の基幹データベースとして、国内および海外の種々のバイオインフォマティクス研究者が利用できるデータを品質管理しながら数多く登録・編集作業を行い、世界で唯一のアーカイブを国際協力によって構築した。さらに、これらデータを、ID やキーワードによって高速に検索する仕組みを XML-DB を用いて開発し SOAP を利用した Web サービスも開設したため、他の配列やネットワーク等のデータベースを連携させた融合的なバイオインフォマティクスの利用法が可能となった。また、分子表面データベースと機能部位の検索サービス (eF-site/eF-surf/eF-seek) や、ダイナミクスのデータベース (ProMode) 等、他の wwPDB メンバーのサイトだけでなく世界中にも他に類のないユニークなデータベースやサービスを実施しており、多くのバイオインフォマティクス研究者の利用に供している。

3.3. 想定していなかった分野の発展に与えた影響や貢献

生物学分野以外の分野として、情報科学における XML 記述とグリッド利用の応用例として注目され（中村春木「バックボーンデータベースの標準化:PDBj」情報処理 Vol. 47, 222-226, 2006）た。また、材料分野の教科書（高山光男「タンパク質入門」内田老鶴圃, 東京 2006）や雑誌（ニュートン「タンパク質のふしぎ」Vol. 28, No. 2, pp.12-41, ニュートンプレス 2007）、飛行機の機内誌（JAL 国際線機内誌 Skyward「Of Proteins and Prions」Vol. 5, No. 11, pp.30, 2008）、子供向けの保健のニュース（健康ふしぎ発見ニュース「かぜのウィルスはどのようにからだの中に入ってくるの？」健学社 2005）などにも、疾病の原因となる種々の蛋白質について、PDBj から引用するかたちで、それらの形の画像や説明が紹介され、社会一般の方々に、蛋白質の「かたち」に対する見識を深める役にたった。

3.4. 大学や公的研究機関等で応用に向けて継承あるいは発展した例

1) PDB の蛋白質構造データ自体は、産業技術総合研究所・生命情報工学研究所（CBRC）や同研究所バイオメディシナル情報研究センター（BIRC）等を初め、多くの国内外の薬学系の大学や公的研究機関において、蛋白質への薬物ドッキング・シミュレーションの基本となるデータとして多数利用されている。

2) グラフィックス・ブラウザ（jV）は、ソースコードフリーとして、アプレットとしても利用できるプログラムのため、リバースプロテオミクス研究所において蛋白質-医薬品の相互作用に関する DB のビューワのひとつとして利用された。また、産総研バイオメディシナル情報研究センター（BIRC）で開発している低分子化合物データベース（LigandBox）のビューアにも利用されている。

3.5. 企業等において応用・実用化に取り組んでいる事例、あるいは研究の成果に興味を持っている企業の有無

PDB の蛋白質構造データ自体は、国内外の多くの製薬メーカーにて、蛋白質への薬物ドッキング・シミュレーションの基本となるデータとして多数ダウンロードされ、利用されている。

3.6. その他、社会的、経済的な効果・効用につながる兆し、可能性

構築した蛋白質立体構造データベースは、医・薬学を含む生物系研究者に蛋白質の立体構造データをフリーで使いやすい形で一元的に提供することで、産学を問わず、社会に大きく寄与しており、今後はますます意義が高まると予想される。さらに、BMRBのデータベースは、PDBに加えて、NMR実験からさらに多くの情報を生命情報科学者へ与え、構造・機能についてのより詳細な情報抽出に寄与し、基礎研究に役立つだけでなく、医療や薬物開発に関連する標的蛋白質の知見が迅速に得られることが期待される。分子グラフィックス・ビューア(jV)の開発や教育用データベースである蛋白質構造百科(eProtS)の開発と普及は、生体高分子の立体構造に関する高校生や一般の人々の啓蒙を目指しており、社会への直接的な貢献が期待できる。

4. データベース・ソフトウェア等の利用状況

4.1. 構築されたデータベースや開発された技術等の活用状況

2006年度からのJST-BIRDによる生命情報データベースの高度化・標準化（第II期）課題「蛋白質構造データバンクの国際的な構築と高度化（PDBj）」として、継続的にPDBjにおけるデータベース構築とその運営を実施しており、さらに国際化と高度化を進められている。

4.2. データベース・ソフトウェア等へのアクセス数／ダウンロード数、visitor数

- a) PDBj 検索結果ページ (xPSSS Summary page) (他のデータベースから個々の蛋白質の情報として直接ここへjumpされる) <http://www.pdbj.org/xpsss/>, 公開日：2004年2月
検索回数状況：2006年度 330,141, 2007年度 1,098,531, 2008年度(4-9月) 443,277
- b) PDBj FTP サイトからのデータファイルのダウンロード数
ダウンロード回数：2006年度 6,142,469, 2007年度 8,660,074, 2008年度(4-9月) 5,198,786
- c) PDBj トップページ: <http://www.pdbj.org/>
・英語版：公開日：2002年4月, 2003年11月(改変), 2007年1月(改変)
アクセス状況：2006年度 58,069, 2007年度 52,429, 2008年度(4-9月) 30,138
・日本語版：公開日：2002年4月, 2003年11月(改変), 2007年1月(改変)
アクセス状況：2006年度 83,130, 2007年度 90,143, 2008年度(4-9月) 39,898

- ・中国語版：公開日 2008 年 3 月
アクセス状況：2007 年度(2008 年 3 月のみ) 285, 2008 年度 (4-9 月) 1,380
- ・韓国語版：公開日 2008 年 3 月
アクセス状況：2007 年度 (2008 年 3 月のみ) 70, 2008 年度 (4-9 月) 1,258
- d) PDBj 登録サーバ：<http://www.pdbj.org/deposit.html>, 公開日：2000 年 6 月 21 日
アクセス状況：2006 年度 108,821, 2007 年度 75,592, 2008 年度(4-9 月) 58,563
- e) PDBj-BMRB ウェブサイト
 - ・日本語版：<http://bmrdep.protein.osaka-u.ac.jp> 公開日：2003 年 8 月
アクセス状況：2006 年度 3,215, 2007 年度 4,801, 2008 年度 (4-9 月) 1,151
 - ・英語版：http://bmrdep.protein.osaka-u.ac.jp/index_en.html
公開日：2007 年 3 月 アクセス状況：2,062 (公開日より 2008 年 10 月 1 日現在)
 - ・韓国語版：http://bmrdep.protein.osaka-u.ac.jp/index_kr.html
公開日：2008 年 2 月 アクセス状況：165 (公開日より 2008 年 10 月 1 日現在)
 - ・中国語簡体字版：http://bmrdep.protein.osaka-u.ac.jp/index_cn.html
公開日：2008 年 3 月 アクセス状況：101 (公開日より 2008 年 10 月 1 日現在)
 - ・中国語繁体字版：http://bmrdep.protein.osaka-u.ac.jp/index_tw.html
公開日：2008 年 4 月 アクセス状況：69 (公開日より 2008 年 10 月 1 日現在)
- f) eF-site: <http://ef-site.hgc.jp/eF-site>, 公開日：2000 年 5 月 (試作版)、2002 年 3 月 (修正版)
アクセス状況：2006 年度 31,281, 2007 年度 51,823, 2008 年度(4-9 月) 24,727
- g) jV 公開サイト(PDBj Viewer): <http://www.pdbj.org/jV/TOP.html>,
ソースコード公開：2004 年 1 月 7 日, 現在までのソースコード、ダウンロード数：1,831
- h) ProMode (蛋白質ダイナミクス・データベース)：<http://promode.socs.waseda.ac.jp/>,
公開日：2003 年 4 月
アクセス状況：2006 年度 16,167, 2007 年度 19,584, 2008 年度(4-9 月) 9,730
- i) ASH(Alignment of Structural Homologues): <http://timpani.genome.ad.jp/~ash/>
公開日：2003 年 9 月 11 日
アクセス状況：公開日から 2006 年 2 月末までのサービス実施の総計：4,258
- j) eProtS: http://eprots.protein.osaka-u.ac.jp/eProtS/Top_e.jsp(英語版),
<http://eprots.protein.osaka-u.ac.jp/eProtS/Top.jsp> (日本語版),
公開日：2003 年 9 月, 登録数：236 項目
アクセス状況：2006 年度 150,378, 2007 年度 450,255, 2008 年度(4-9 月) 436,281
- k) Sequence Navigator: <http://pdbjs3.protein.osaka-u.ac.jp/seqnavix/index.jsp>,
公開日：2004 年 9 月 1 日
検索回数状況：2006 年度 34,999, 2007 年度 306,731 2008 年度(4-9 月) 315,133
- l) Structure Navigator: <http://pdbjs3.protein.osaka-u.ac.jp/stnavix/index.jsp>,
公開日：2004 年 12 月 1 日
検索回数状況：2006 年度 2,109, 2007 年度 584 2008 年度(4-9 月) 1,473

4.3. データベースや公開サイトへの被リンクサイト数あるいは相互リンクサイト

現状調査票データ（データベース・公開サイトへの被リンクサイト）参照

なお、ライフサイエンス統合データベース (<http://lifesciencedb.jp/>), EzCatDB (<http://mbs.cbrc.jp/EzCatDB/>), 3Dinsight/ProTherm (<http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/jouhou/3dinsight/3DinSight.html>), Glycoconjugate Data Bank (<http://www.glycostructures.jp/>) では、54000件あまりの各蛋白質のPDBID毎にリンクが張られている。

4.4. 第三者による研究成果（データベース等を含む）の活用事例

1) PDB の蛋白質構造データ自体は、産業技術総合研究所・生命情報工学研究所（CBRC）や同研究所バイオメディシナル情報研究センター（BIRC）では、蛋白質への薬物ドッキング・シミュレーションの基本となるデータとして利用され、既に活用されている。

2) ライフサイエンス統合データベースでは、基幹 DB の一つとして、串刺し検索の対象として既に利用が始まっている。

3) ドイツ・ベルリンの Institut für Biochemie で開発されている STRAP と称する蛋白質の構造に基づくアラインメント (<http://www.charite.de/bioinf/strap/>) では、Drag-and-Drop によって PDBj のデータを利用している。

4) 蛋白質の構造を表示するために世界中で良く利用されている Jmol (<http://jmol.org>) が、分子表面の表示をするために開発した表面記述用の XML ファイルを読むオプションを、次期の version から開始するという知らせが入っており、我々の開発した XML 記述法が、事実上の de facto 標準となる可能性が出てきている。

5. 人材育成

5.1. 研究人材の養成における貢献（人材のキャリアアップ、活動状況等）

主な参画研究者のうちで、他の大学等で新たなポジションを得た研究者を下記に記す。

- ・研究員 A : BIRD 研究員→東京医科歯科大学大学院生命情報科学教育部／疾患生命科学研究所構造情報研究室・教授（2003年4月）
- ・研究員 B : BIRD 研究員→大阪大学免疫学フロンティア研究センター・准教授（2008年10月）

- ・助手 A：横浜市立大学大学院総合理学研究科・助手→東京大学医科学研究所・助教授（2004年10月）
 - ・助教授 A：大阪大学大学院工学研究科・助教授→神戸大学大学院工学研究科・教授（2005年4月）
 - ・客員教授 A：京都大学化学研究所・客員教授→九州大学生体防御医学研究所・教授（2005年4月）
 - ・助手 B：大阪大学蛋白質研究所・助手→東京大学大学院総合研究科・准教授（2004年4月）
 - ・准教授 A：大阪大学蛋白質研究所・准教授→山梨大学生体環境医工学系・教授（2008年4月）
 - ・准教授 B：大阪大学蛋白質研究所・准教授→大阪大学蛋白質研究所・教授（2008年4月）
- 現状調査票データ（参加研究者の活動状況）参照
（現状調査票データ（参加研究者の活動状況）は個人情報が含まれるため非公開）

5.2. 研究開発に参加した研究者のバイオインフォマティクス分野の学会、国際会議等での座長、オーガナイザー経験

○中村 春木：

- (1) 国際会議オーガナイザーと座長：「Japan-UK Symposium on Protein Informatics Toward Interactome Analysis」, 2008年9月1-2日, 千里ライフサイエンスセンター（大阪・吹田）
- (2) 国際会議オーガナイザーと座長：蛋白研セミナー「Computational and experimental approaches to protein interactions and complexes」2008年2月29日-3月1日, 大阪大学蛋白質研究所（大阪・吹田）
- (3) 国際会議オーガナイザーと座長：「Japan-UK Symposium on conformational changes in proteins and nucleic acids which constitute biological macro-molecules」, 2007年12月20日, パシフィコ横浜（横浜）
- (4) 国内学会オーガナイザーと座長：蛋白研セミナー「生命・医科学データベースとその高度化」2007年3月12日, 大阪大学蛋白質研究所（大阪・吹田）
- (5) 国際会議オーガナイザーと座長：「Japan-UK symposium on Protein Informatics toward the [Understanding](#) of Molecular Interactions: From small ligand to large protein complexes」, 2006年10月17日, 品川イーストワン・タワー（東京・品川）
- (6) 国際会議オーガナイザーと座長：5th East Asian Biophysics Symposium & 44th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan シンポジウム「Structural Bioinformatics: Molecular structures as the basis of understanding protein network systems」, 2006年11月15日, 沖縄コンベンションセンター（沖縄・宜野湾）

○木下 賢吾：

- (1) 国際会議座長：Japan-UK Symposium on Protein Informatics Toward Interactome Analysis 2008年9月1～2日，千里ライフサイエンスセンター（大阪・吹田）
- (2) 国内学会オーガナイズと座長：第8回日本蛋白質科学会ワークショップ「ヒト・マウスのゲノムから蛋白質までをバイオインフォマティクスで徹底解析する」2008年6月10日，タワーホール船堀（東京・船堀）
- (3) 国内学会座長：第8回日本蛋白質科学会ヒストリーレビュー3「蛋白質研究における各論的事実発見と一般的法則追求」2008年6月12日，タワーホール船堀（東京・船堀）
- (4) 国内学会座長：第45回日本生物物理学会 2007年12月21-23日，パシフィコ横浜（横浜）
国際会議オーガナイザと座長：「Japan-UK Symposium on conformational changes in proteins and nucleic acids which constitute biological macro-molecules」，2007年12月20日，パシフィコ横浜（横浜）

○藤 博幸：

- (1) 国内学会オーガナイズと座長：第10回日本進化学会大会「進化医学：分子進化の立場から見た疾病」2008年
- (2) 国内学会オーガナイズと座長：第45回日本生物物理学会シンポジウム「構造プロテオミクスを推進するバイオインフォマティクス」2007年12月22日，パシフィコ横浜（横浜）
- (3) 国内学会オーガナイズと座長：第30回日本分子生物学会年会、第80回日本生化学会 合同大会ワークショップ「タンパク質（プロテインインフォマティクス/構造・機能予測・薬物設計/その他）」2007年12月14日，パシフィコ横浜（横浜）
- (4) 国内学会オーガナイズと座長：第6回日本蛋白質科学会シンポジウム「プロテオーム研究の最前線」2006年4月24日，国立京都国際会館（京都）

6. その他

6.1. 代表研究者からのコメント

6.1.1. 研究開発段階で苦労したこと、その困難をどう克服したか

1) 蛋白質構造データベースの高度化にあたり、蛋白質構造の専門家だけでなく、プログラマーや計算機システム構築を良く理解する人材を集める必要があった。幸いなことに、本研究開発を実施した大阪大学蛋白質研究所が、蛋白質の立体構造解析においては日本国内のメッカ的な役割を果たしてきたこともあり、構造生物学の専門家の協力を得たり、新たな人材を研究員として雇用することが比較的容易だった。また、当事業を開始した当時は、国内の大手電気・情報メーカーがバイオIT分野に投資をしようとしていた時期であり、プログラム開発については、大きな便宜をはかってもらえたことも幸いした。

2) 既にデータベース構築と運営を実施している米国 RCSB-PDB と欧州 MSD-EBI のグループとの連携協力関係において、単なるデータベース構築を下請け的に実施するのではなく、独自のデータベース構築における理念と新たな方法によって、対等の立場に早く立つ必要があった。一つの切り口として、当時、やっと普及が始まったばかりではあったが、将来性が明らかであった XML に着目し、従来の古いフォーマットを XML による記述にするというミッションを立て、開始後わずか半年の間にプロトタイプを作成した。このプロトタイプを米国 RCSB-PDB へ持ち込んだところ、RCSB-PDB でも多少は XML 記述法を開発しており、両者の間の調整によって、我々の主張も取り込んだ形で canonical な XML 記述 (PDBML) を開発することができた。この PDBML の開発効果の意味は大きく、それまで多くの誤記を抱えていた PDB データが、この PDBML 記述のデータによる validation から何万件という誤記を探し出し、修正することができた。このことによってデータベース高度化における PDBj のソフトウェア技術に対する信頼関係が築かれた。その一方、地道なデータ登録量の増加をはかることにより、2004 年からは、欧州の MSD-EBI の 2 倍ほどのデータ登録量を常に維持するほどになった。これらの活動により、米国の RCSB-PDB、欧州の MSD-EBI と PDBj の 3 者が、対等の形で連携をすることが可能となった。

6.1.2. BIRD があつたおかげで可能であつたこと

PDBj の活動は BIRD の支援によって開始されたものであり、PDBj 活動に関わる大学教員の給与を除くと、ほとんど全ての PDBj 活動は BIRD によるグラントで運営された。特に、大学では高い評価を与えられないコンピュータ技術のスキルを持つプログラマーやシステム構築の優秀な技術員を、BIRD にて雇用していただけたことは PDBj の立ち上げと運営に、たいへん役立った。その後、新たな技術員を雇用する場合、JST が直接雇用せず、大学雇用とするように方針を変更したのは大変残念であると、今でも思っている。

6.2. 有識者コメント

(国内有識者)

本プロジェクトは、国際蛋白質構造データバンク (wwPDB) と協力しながら日本蛋白質立体構造データバンク (PDBj : Protein Data Bank japan) の維持・管理・改良および関連するソフトウェアの開発を行う内容である。蛋白質の立体構造情報は、塩基・アミノ酸の一次配列情報のように爆発的に増えているという状況にはないが、毎年着実に増加している。また、以前と比較すると基礎・応用の両面において蛋白質の立体構造を扱う必要性も確実に高まっており、蛋白質構造データバンクを充実させ、一般利用者への便宜を計ることは今後も大変重要である。本プロジェクトでは、PDB の立体構造データのフォーマットの改良 (PDBML) なども行い、日本のみならず世界のデータベースの維持・管理に大きく

貢献している。また、各種二次データベースの作成・検索ツールの開発・講習会等による普及活動を着実にを行い、専門家のみならず一般利用者への便宜も計っている。今後、このデータベースの利用価値は特に応用研究の方面で高まると期待されるので、維持・管理・改良を継続的に進め、より一層価値のあるデータベースに発展させることが重要と思われる。なお、塩基・アミノ酸の一次配列データと比較すると、立体構造データには「非専門家にとって扱い難さを感じる側面」があるので、現在の普及活動を「より一般研究者向けに改良」しながら継続して行い、平行して「実験系と有意義な共同研究ができる情報系の人材育成」にも今まで以上に貢献して頂きたい。

(海外有識者)

PDBj Evaluation

PDBj is a founding partner of the Worldwide Protein Data Bank. The other partners are the Research Collaboratory of Structural Bioinformatics (RCSB) in the US, PDB e at the European Bioinformatics Institute in Hinxton UK, and BioMagResBank in Wisconsin. The wwPDB is responsible for the collection, curation, archiving, and distribution of structural data of biological macromolecules. The partners collaborate to ensure that the data is of the highest quality and available in a timely manner to the global community of scientists and educators. PDBj is responsible for all the structural data produced by scientists in Asia, Australia, and New Zealand. The curators in PDBj process data according to strict agreed upon standards. PDBj also plays a key role in reviewing all the data in the PDB archive in order to produce new version of the PDB. PDBj was also responsible for developing PDBML-an XML version of the PDB.

In addition to leading data curation and archiving activities in Japan, Haruki Nakamura has been a full participant in establishing policies for the PDB. This is done at regular meetings of the wwPDB including the yearly meeting with the Advisory Committee. These policies are critical to maintaining the highest possible standards for the PDB.

The PDBj site offers many unique and valuable services for the research community. These include PDB search capabilities, sequence and structure navigators, a functional annotation server (SeSAW), normal mode analysis (ProMode), binding site analyses, and a variety of visualization tools. PDBj under the leadership of Haruki Nakamura plays a key role in

ensuring that biological structural data are of the highest quality and available to the entire community. It has also made extremely valuable contributions to our understanding of structure through the development of a wide variety of tools and services.

(和訳)

PDBj の評価

PDBj は wwPDB の共同設立者である。他の共同者はアメリカの Research Collaboratory of Structural Bioinformatics (RCSB) やイギリスの Hinxton にある European Bioinformatics Institute の PDBe、ウィスコンシンの BioMagResBank である。wwPDB は生体高分子の構造データの収集やキュレーション（自動生成データ等に対する人手による検証と修正）、アーカイブ、配布を担っている。wwPDB の共同者は協力して、データが最高品質でかつ時宜を得た方法で利用可能であることを科学者や教育者の国際社会へ保証している。PDBj はアジアやオーストラリア、ニュージーランドの科学者によって出された全ての構造データに対して責任を有している。PDBj のキュレータは厳密な合意した基準に沿ってデータを処理している。PDBj は PDB の新バージョンを作るために、PDB アーカイブの全てのデータをレビューする重要な役割も担っている。PDBj は PDB の XML バージョンである PDBML の開発の責任も担っていた。

日本でのデータのキュレーションやアーカイブ活動の指揮に加えて、中村春木氏は PDB の方針制定にすべて参加している。この会議は国際諮問委員会を伴う年会を含む wwPDB の定例会議時に行われている。これら方針は PDB の最高水準を維持するのに重要である。

PDBj サイトは研究コミュニティに多くの独自で価値のあるサービスを提供している。それらサービスには PDB 検索や配列・構造ナビゲーター、機能アノテーションサーバ (SeSAW)、タンパク質の基準振動解析データベース (ProMode)、結合サイト解析、多様な可視化ツールがある。中村春木氏がリーダーシップの下で PDBj は生体高分子データが最高品質であり、利用可能であることを社会全体へ保証する重要な役割を担っている。また、PDBj はツールやサービスの幅広い種類の開発を通して構造を理解するのに多大な価値のある貢献もしている。

論文リスト

<表注記>

- 「代表研究者」欄…著者に代表研究者が含まれている論文に「○」を表記。
 ■「報告書への記載」欄…実施報告書に、BIRD期間中の成果として記載のある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
 ■「BIRD credit」欄…論文中にBIRDでの取り組みであることを示すクレジットのある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
 ■Document type、被引用件数の「-」は、データなしを表す。

No	Title	Author	Journal	Volume	ISSUE	Start Page	End Page	Published Year	代表研究者	報告書への記載	BIRD credit	Document Type (Scopus)	Document Type (WOS)	被引用件数 (Scopus)	被引用件数 (WOS)	備考
1	Physicochemical evaluation of protein folds predicted by threading	Kinjo A.R., Kidera A., Nakamura H., Nishikawa K.	European Biophysics Journal	30	1	1	10	2001	○			Article	Article	8	8	
2	Collective motions of myosin head derived from backbone molecular dynamics and combination with X-ray solution scattering data	Higo J., Sugimoto Y., Wakabayashi K., Nakamura H.	Journal of Computational Chemistry	22	16	1983	1994	2001	○			Article	Article	4	3	
3	A Role of the Third Complementarity-determining Region in the Affinity Maturation of an Antibody	Furukawa K., Shirai H., Azuma T., Nakamura H.	Journal of Biological Chemistry	276	29	27622	27628	2001	○			Article	Article	15	14	
4	Energy landscape of a peptide consisting of alpha-helix, 3(10)-helix, beta-turn, beta-hairpin, and other disordered conformations	Higo J., Ito N., Kuroda M., Ono S., Nakajima N., Nakamura H.	Protein Science	10	6	1160	1171	2001	○			Article	Article	34	34	
5	Large vortex-like structure of dipole field in computer models of liquid water and dipole-bridge between biomolecules	Higo J., Sasai M., Shirai H., Nakamura H., Kugimiya T.	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	98	11	5961	5964	2001	○			Article	Article	22	20	
6	Entropic stabilization of the tryptophan synthase alpha-subunit from a hyperthermophile, Pyrococcus furiosus - X-ray analysis and calorimetry	Yamagata Y., Ogasahara K., Hioki Y., Lee S.J., Nakagawa A., Nakamura H., Ishida M., Kuramitsu S., Yutani K.	Journal of Biological Chemistry	276	14	11062	11071	2001	○			Article	Article	21	21	
7	Role of Two Histidines in the (6-4) Photolyase Reaction	Hitomi K., Nakamura H., Kim S.-T., Mizukoshi T., Ishikawa T., Iwai S., Todo T.	Journal of Biological Chemistry	276	13	10103	10109	2001	○			Article	Article	31	34	
8	Energy landscape of a beta-hairpin peptide in explicit water studied by multicanonical molecular dynamics	Higo J., Galzitskaya O.V., Ono S., Nakamura H.	Chemical Physics Letters	337	1-3	169	175	2001	○			Article	Article	23	24	
9	Site-directed removal of N-glycosylation sites in BST-1/CD157: effects on molecular and functional heterogeneity	Yamamoto-Katayama, S; Sato, A; Ariyoshi, M; Suyama, M; Ishihara, K; Hirano, T; Nakamura, H; Morikawa, K; Jingami, H	BIOCHEMICAL JOURNAL	357		385	392	2001	○			-	Article	4	4	
10	Structure of the electron transfer complex between ferredoxin and ferredoxin-NADP(+) reductase	Kurusu G., Kusunoki M., Katoh E., Yamazaki T., Teshima K., Onda Y., Kimata-Arigo Y., Hase T.	Nature Structural Biology	8	2	117	121	2001		あり		Article	Article	107	106	Authorに代表研究者なし 実施報告書より転記
11	A filtering method for high-speed retrieval of similar active sites	Nakagawa T., Tanaka T., Ohkawa T., Nakamura H.	Proceedings of the Joint Conference on Information Sciences	6		1207	1212	2002	○			Conference Paper	-	0	-	
12	A Method of Comparing Protein Molecular Surface Based on Normal Vectors with Attributes and Its Application to Function Identification	Kaneta Y., Shoji N., Ohkawa T., Nakamura H.	Proceedings of the Joint Conference on Information Sciences	6		1213	1218	2002	○			Conference Paper	-	1	-	
13	Conformational transition states of a beta-hairpin peptide between the ordered and disordered conformations in explicit water	Kamiya N., Higo J., Nakamura H.	Protein Science	11	10	2297	2307	2002	○			Article	Article	34	32	
14	A Method of Comparing Protein Molecular Surface Based on Normal Vectors with Attributes and Its Application to Function Identification	Kaneta Y., Shoji N., Ohkawa T., Nakamura H.	Information Sciences	146	1-4	41	54	2002	○	あり		Article	Article	3	2	
15	A filtering method for high-speed retrieval of similar active sites	Nakagawa T., Tanaka T., Ohkawa T., Nakamura H.	Information Sciences	146	1-4	55	65	2002	○	あり		Article	Article	0	0	
16	Characterization of six mutations in five spanish patients with mitochondrial acetoacetyl-CoA thiolase deficiency: Effects of amino acid substitutions on tertiary structure	Fukao T., Nakamura H., Nakamura K., Perez-Gerda C., Baldellou A., Barrionuevo C.R., Castello F.G., Kohno Y., Ugarte M., Kondo N.	Molecular Genetics and Metabolism	75	3	235	243	2002	○			Article	Article	9	8	
17	Identification of protein functions from a molecular surface database, eF-site	Kinoshita K., Furui J., Nakamura H.	Journal of Structural and Functional Genomics	2	1	9	22	2002	○	あり		Article	-	47	-	
18	Intramolecular interaction of SUR2 subtypes for intracellular ADP-induced differential control of K-ATP channels	Matsushita K., Kinoshita K., Matsuoka T., Fujita A., Fujikado T., Tano Y., Nakamura H., Kurachi Y.	Circulation Research	90	5	554	561	2002	○			Article	Article	27	25	
19	Calibration of force-field dependency in free energy landscapes of peptide conformations by quantum chemical calculations	Ono S., Kuroda M., Higo J., Nakajima N., Nakamura H.	Journal of Computational Chemistry	23	4	470	476	2002	○			Article	Article	9	8	

論文リスト

<表注記>

- 「代表研究者」欄…著者に代表研究者が含まれている論文に「○」を表記。
- 「報告書への記載」欄…実施報告書に、BIRD期間中の成果として記載のある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
- 「BIRD credit」欄…論文中にBIRDでの取り組みであることを示すクレジットのある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
- Document type、被引用件数の「-」は、データなしを表す。

No	Title	Author	Journal	Volume	ISSUE	Start Page	End Page	Published Year	代表研究者	報告書への記載	BIRD credit	Document Type (Scopus)	Document Type (WOS)	被引用件数 (Scopus)	被引用件数 (WOS)	備考
20	Tsallis dynamics using the Nose-Hoover approach	Fukuda I., Nakamura H.	Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics	E65	2	26105		2002	○			Article	Article	1	11	
21	Nucleotide sequence database policies	Brunak, S; Danchin, A; Hattori, M; Nakamura, H; Shinozaki, K; Matise, T; Preuss, D	SCIENCE	298	5597	1333	1333	2002	○			Letter	Letter	7	7	
22	Peptide free energy landscapes calibrated by molecular orbital calculations	Ono, S; Kuroda, M; Higo, J; Kamiya, N; Nakajima, N; Nakamura, H	Journal of Biological Physics	28	3	427	437	2002	○			Article	Article	0	0	
23	Crystal and molecular structure of a new diterpenyl glycoside from <i>Pteris cretica</i> L.	Katakawa J., Tetsumi T., Terai T., Katai M., Sakaguchi K.-I., Kusunoki M., Sato M.	JOURNAL OF CHEMICAL CRYSTALLOGRAPHY	32	1-2	39	42	2002		あり		Article	Article	0	0	Authorに代表研究者なし 実施報告書より転記
24	Deterministic generation of the Boltzmann-Gibbs distribution and the free energy calculation from the Tsallis distribution	Fukada, I; Nakamura, H	Chemical Physics Letters	382	3-4	367	373	2003	○			Article	Article	3	0	
25	Announcing the worldwide Protein Data Bank	Berman H., Henrick K., Nakamura H.	Nature Structural Biology	10	12	980		2003	○			Letter	Letter	93	92	
26	The Filling Potential Method: A Method for Estimating the Free Energy Surface for Protein-Ligand Docking	Fukunishi Y., Mikami Y., Nakamura H.	Journal of Physical Chemistry B	107	47	13201	13210	2003	○			Article	Article	20	19	
27	Structural basis of the KcsA K ⁺ channel and agitoxin2 pore-blocking toxin interaction by using the transferred cross-saturation method	Takeuchi K., Yokogawa M., Matsuda T., Sugai M., Kawano S., Kohno T., Nakamura H., Takahashi H., Shimada I.	STRUCTURE	11	11	1381	1392	2003	○			Article	Article	17	17	
28	Functional and structural analyses of cryptochrome – Vertebrate cry regions responsible for interaction with the CLOCK : BMAL1 heterodimer and its nuclear localization	Hirayama J., Nakamura H., Ishikawa T., Kobayashi Y., Todo T.	Journal of Biological Chemistry	278	37	35620	35628	2003	○			Article	Article	14	12	
29	Crystal structure of the conserved protein TT1542 from <i>Thermus thermophilus</i> HB8	Handa N., Terada T., Kamewari Y., Hamana H., Tame J.R.H., Park S.-Y., Kinoshita K., Ota M., Nakamura H., Kuramitsu S., Shirouzu M., Yokoyama S.	Protein Science	12	8	1621	1632	2003	○			Article	Article	12	12	
30	Determination of multicanonical weight based on a stochastic model of sampling dynamics	Kim J.G., Fukunishi Y., Kidera A., Nakamura H.	Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics	68	2 pt 1	21110		2003	○			Article	Article	3	14	
31	Identification of protein biochemical functions by similarity search using the molecular surface database eF-site	Kinoshita K., Nakamura H.	Protein Science	12	8	1589	1595	2003	○	あり		Article	Article	42	40	
32	Mucopolysaccharidosis IVA: Characterization of a common mutation found in Finnish patients with attenuated phenotype	Montano A.M., Kaitila I., Sukegawa K., Tomatsu S., Kato Z., Nakamura H., Fukuda S., Orii T., Kondo N.	Human Genetics	113	2	162	169	2003	○			Article	Article	10	10	
33	Protein informatics towards function identification	Kinoshita K., Nakamura H.	Current Opinion in Structural Biology	13	3	396	400	2003	○	あり		Review	Review	23	23	
34	Structural genomics of membrane proteins	Kyogoku Y., Fujiyoshi Y., Shimada I., Nakamura H., Tsukihara T., Akutsu H., Odahara T., Okada T., Nomura N.	Accounts of Chemical Research	36	3	199	206	2003	○			Article	Review	14	14	
35	beta-hairpins, alpha-helices, and the intermediates among the secondary structures in the energy landscape of a peptide from a distal beta-hairpin of SH3 domain	Ikeda K., Galzitskaya O.V., Nakamura H., Higo J.	Journal of Computational Chemistry	24	3	310	318	2003	○			Article	Article	15	15	
36	Dynamical origin of uniform sampling in multicanonical ensemble	Kim J.G., Fukunishi Y., Nakamura H.	Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics	67	1 pt 1	11105		2003	○			Article	Article	12	11	
37	Free energy landscapes of small peptides in an implicit solvent model determined by force-biased multicanonical molecular dynamics simulation	Watanabe Y.S., Kim J.G., Fukunishi Y., Nakamura H.	Chemical Physics Letters	400	1-3	258	263	2004	○			Article	Article	2	1	
38	A hybrid method of molecular dynamics and harmonic dynamics for docking of flexible ligand to flexible receptor	Tatsumi R., Fukunishi Y., Nakamura H.	Journal of Computational Chemistry	25	16	1995	2005	2004	○			Article	Article	19	19	
39	Multicanonical molecular dynamics algorithm employing an adaptive force-biased iteration scheme	Kim J.G., Fukunishi Y., Nakamura H.	Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics	70	5 pt 2	57103		2004	○			Article	Article	1	3	
40	Detecting local structural similarity in proteins by maximizing number of equivalent residues	Standley D.M., Toh H., Nakamura H.	Proteins: Structure, Function and Genetics	57	2	381	391	2004	○	あり	あり	Article	Article	5	5	

論文リスト

<表注記>

- 「代表研究者」欄…著者に代表研究者が含まれている論文に「○」を表記。
- 「報告書への記載」欄…実施報告書に、BIRD期間中の成果として記載のある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
- 「BIRD credit」欄…論文中にBIRDでの取り組みであることを示すクレジットのある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
- Document type、被引用件数の「-」は、データなしを表す。

No	Title	Author	Journal	Volume	ISSUE	Start Page	End Page	Published Year	代表研究者	報告書への記載	BIRD credit	Document Type (Scopus)	Document Type (WOS)	被引用件数 (Scopus)	被引用件数 (WOS)	備考
41	Generalized simulated tempering realized on expanded ensembles of non-Boltzmann weights	Kim J.G., Fukunishi Y., Kidera A., Nakamura H.	Journal of Chemical Physics	121	12	5590	5601	2004	○			Article	Article	7	6	
42	Modelling of third cytoplasmic loop of bovine rhodopsin by multicanonical molecular dynamics	Watanabe Y.S., Fukunishi Y., Nakamura H.	Journal of Molecular Graphics and Modelling	23	1	59	68	2004	○			Article	Article	4	3	
43	Dynamical origin of enhanced conformational searches of Tsallis statistics sampling	Kim J.G., Fukunishi Y., Nakamura H.	Journal of Chemical Physics	121	3	1626	1635	2004	○			Article	Article	4	3	
44	Average energy guided simulated tempering implemented into molecular dynamics algorithm for protein folding simulation	Kim J.G., Fukunishi Y., Nakamura H.	Chemical Physics Letters	392	1-3	34	39	2004	○			Article	Article	3	3	
45	Model building of a protein-protein complexed structure using saturation transfer and residual dipolar coupling without paired intermolecular NOE	Matsuda T., Ikegami T., Nakajima N., Yamazaki T., Nakamura H.	Journal of Biomolecular NMR	29	3	325	338	2004	○			Article	Article	6	5	
46	eF-site and PDBjViewer: Database and viewer for protein functional sites	Kinoshita K., Nakamura H.	Bioinformatics	20	8	1329	1330	2004	○	あり		Article	Article	20	20	
47	A challenge towards next-generation research infrastructure for advanced life science	Nakamura H., Date S., Matsuda H., Shimojo S.	New Generation Computing	22	2	157	166	2004	○			Article	Article	4	1	
48	Structure-based prediction of DNA-binding sites on proteins using the empirical preference of electrostatic potential and the shape of molecular surfaces	Tsuchiya Y., Kinoshita K., Nakamura H.	Proteins: Structure, Function and Genetics	55	4	885	894	2004	○	あり		Article	Article	22	24	
49	Efficiency in the generation of the Boltzmann-Gibbs distribution by the tsallis dynamics reweighting method	Fukuda I., Nakamura H.	Journal of Physical Chemistry B	108	13	4162	4170	2004	○			Article	Article	3	3	
50	Stochastic formulation of sampling dynamics in generalized ensemble methods	Kim J.G., Fukunishi Y., Kidera A., Nakamura H.	Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics	69	1 pt 2	21101		2004	○			Article	Article	0	6	
51	CAD-ICAD complex structure derived from saturation transfer experiment and simulated annealing without using pairwise NOE information	Matsuda T., Nakajima N., Yamazaki T., Nakamura H.	Journal of Molecular Recognition	17	1	41	50	2004	○			Article	Article	1	1	
52	Solution structure of the RWD domain of the mouse GCN2 protein	Nameki N., Saito K., Kobayashi N., Yabuki T., Aoki M., Nunokawa E., Matsuda N., Sakagami N., Terada T., Shirouzu M., Yoshida M., Yoneyama M., Hirota H., Osanai T., Tanaka A., Arakawa T., Carninci P., Kawai J., Hayashizaki Y., Kinoshita K., Guntert P., Kigawa T., Yokoyama S.	Protein Science	13	8	2089	2100	2004		あり		Article	Article	8	8	Authorに代表研究者なし 実施報告書より転記
53	ProMode: a database of normal mode analyses on protein molecules with a full-atom model	Wako H., Kato M., Endo S.	Bioinformatics	20	13	2035	2043	2004		あり		Article	Article	11	11	Authorに代表研究者なし 実施報告書より転記
54	Precision H-1-H-1 distance measurement via C-13 NMR signals: utilization of H-1-H-1 double-quantum dipolar interactions recoupled under magic angle spinning conditions	Matsuki Y., Akutsu H., Fujiwara T.	MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY	42	2	291	300	2004		あり		Conference Paper	Article	8	9	Authorに代表研究者なし 実施報告書より転記
55	GASH: An improved algorithm for maximizing the number of equivalent residues between two protein structures	Standley D.M., Toh H., Nakamura H.	BMC Bioinformatics	6		221		2005	○	あり	あり	Article	Article	4	4	
56	Similarities among receptor pockets and among compounds: Analysis and application to in silico ligand screening	Fukunishi Y., Mikami Y., Nakamura H.	Journal of Molecular Graphics and Modelling	24	1	34	45	2005	○			Article	Article	12	11	
57	Filtering high-throughput protein-protein interaction data using a combination of genomic features	Patil A., Nakamura H.	BMC Bioinformatics	6		100		2005	○	あり		Article	Article	17	16	
58	PreDs: A server for predicting dsDNA-binding site on protein molecular surfaces	Tsuchiya Y., Kinoshita K., Nakamura H.	Bioinformatics	21	8	1721	1723	2005	○	あり		Article	Article	8	9	
59	Deterministic design for Tsallis distribution sampling	Fukuda I., Horie M., Nakamura H.	Chemical Physics Letters	405	4-6	364	370	2005	○			Article	Article	0	0	

論文リスト

<表注記>

- 「代表研究者」欄…著者に代表研究者が含まれている論文に「○」を表記。
- 「報告書への記載」欄…実施報告書に、BIRD期間中の成果として記載のある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
- 「BIRD credit」欄…論文中にBIRDでの取り組みであることを示すクレジットのある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
- Document type、被引用件数の「-」は、データなしを表す。

No	Title	Author	Journal	Volume	ISSUE	Start Page	End Page	Published Year	代表研究者	報告書への記載	BIRD credit	Document Type (Scopus)	Document Type (WOS)	被引用件数 (Scopus)	被引用件数 (WOS)	備考
60	Molecular dynamics sampling scheme realizing multiple distributions	Fukuda I., Nakamura H.	Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics	71	4	46708		2005	○			Article	Article	0	1	
61	PDBML: The representation of archival macromolecular structure data in XML	Westbrook J., Ito N., Nakamura H., Henrick K., Berman H.M.	Bioinformatics	21	7	988	992	2005	○	あり		Article	Article	21	16	
62	Identification of the ligand binding sites on the molecular surface of proteins	Kinoshita K., Nakamura H.	Protein Science	14	3	711	718	2005	○	あり		Article	Article	13	12	
63	P-cats: prediction of catalytic residues in proteins from their tertiary structures	Kinoshita K., Ota M.	Bioinformatics	21	17	3570	3571	2005		あり		Article	Article	1	1	Authorに代表研究者なし 実施報告書より転記
64	Higher order structure contributes to specific differences in redox potential and electron transfer efficiency of root and leaf ferredoxins	Gou P., Hanke G.T., Kimata-Arigo Y., Standley D.M., Kubo A., Taniguchi I., Nakamura H., Hase T.	Biochemistry	45	48	14389	14396	2006	○			Article	Article	1	1	
65	Deploying scientific applications to the PRAGMA grid testbed: Strategies and lessons	Abramson D., Lynch A., Takemiya H., Tanimura Y., Date S., Nakamura H., Jeong K., Hwang S., Zhu J., Lu Z.-H., Amoreira C., Baldrige K., Lee H.-C., Wang C.-W., Shih H.-L., Molina T., Li W.W., Arzberger P.W.	Sixth IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid, 2006. CCGRID 06			241	248	2006	○			Conference Paper	-	0	-	
66	Flexible docking of an amyloid-forming peptide from beta(2)-microglobulin	Standley D.M., Yonezawa Y., Goto Y., Nakamura H.	FEBS Letters	580	26	6199	6205	2006	○		あり	Article	Article	0	0	
67	An efficient in silico screening method based on the protein-compound affinity matrix and its application to the design of a focused library for cytochrome P450 (CYP) ligands	Fukunishi Y., Hojo S., Nakamura H.	Journal of Chemical Information and Modeling	46	6	2610	2622	2006	○			Article	Article	2	2	
68	Quantum mechanical study of the proton transfer via a peptide bond in the novel proton translocation pathway of cytochrome c oxidase	Takano Y., Nakamura H.	Chemical Physics Letters	430	1-3	149	155	2006	○			Article	Article	3	2	
69	Molecular dynamics simulation study on water associated with pi-electrons of benzene by using QM/MM potential	Yonezawa Y., Nakata K., Takada T., Nakamura H.	Chemical Physics Letters	428	1-3	73	77	2006	○			Article	Article	3	3	
70	Analyses of homo-oligomer interfaces of proteins from the complementarity of molecular surface, electrostatic potential and hydrophobicity	Tsuchiya Y., Kinoshita K., Nakamura H.	Protein Engineering, Design and Selection	19	9	421	429	2006	○			Article	Article	4	3	
71	Noise reduction method for molecular interaction energy: Application to in silico drug screening and in silico target protein screening	Fukunishi Y., Kubota S., Nakamura H.	Journal of Chemical Information and Modeling	46	5	2071	2084	2006	○			Article	Article	4	5	
72	Multiple target screening method for robust and accurate in silico ligand screening	Fukunishi Y., Mikami Y., Kubota S., Nakamura H.	Journal of Molecular Graphics and Modelling	25	1	61	70	2006	○			Article	Article	8	1	
73	PreBI: Prediction of biological interfaces of proteins in crystals	Tsuchiya Y., Kinoshita K., Ito N., Nakamura H.	Nucleic Acids Research	34	WEB. SERV. ISS.	W320	W324	2006	○			Article	Article	0	0	
74	Silencing the constitutive active transcription factor CREB by the LKB1-S1K signaling cascade	Kato Y., Takemori H., Lin X.-Z., Tamura M., Muraoka M., Satoh T., Tsuchiya Y., Min L., Doi J., Miyauchi A., Witters L.A., Nakamura H., Okamoto M.	FEBS Journal	273	12	2730	2748	2006	○			Article	Article	9	11	
75	Disordered domains and high surface charge confer hubs with the ability to interact with multiple proteins in interaction networks	Patil A., Nakamura H.	FEBS Letters	580	8	2041	2045	2006	○	あり		Article	Article	23	23	
76	A virtual active compound produced from the negative image of a ligand-binding pocket, and its application to in-silico drug screening	Fukunishi Y., Kubota S., Kanai C., Nakamura H.	Journal of Computer-Aided Molecular Design	20	4	237	248	2006	○			Article	Article	0	0	

論文リスト

<表注記>

- 「代表研究者」欄…著者に代表研究者が含まれている論文に「○」を表記。
- 「報告書への記載」欄…実施報告書に、BIRD期間中の成果として記載のある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
- 「BIRD credit」欄…論文中にBIRDでの取り組みであることを示すクレジットのある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
- Document type、被引用件数の「-」は、データなしを表す。

No	Title	Author	Journal	Volume	ISSUE	Start Page	End Page	Published Year	代表研究者	報告書への記載	BIRD credit	Document Type (Scopus)	Document Type (WOS)	被引用件数 (Scopus)	被引用件数 (WOS)	備考
77	Construction of an extended invariant for an arbitrary ordinary differential equation with its development in a numerical integration algorithm	Fukuda I., Nakamura H.	Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics	73	2	26703		2006	○			Article	Article	0	1	
78	Berman, Henrick, Nakamura & Arnold respond	Berman H.M., Henrick K., Nakamura H., Arnold E.	Nature Structural and Molecular Biology	13	3	185		2006	○			Letter	-	0	-	
79	Utilization of methyl proton resonances in cross-saturation measurement for determining the interfaces of large protein-protein complexes	Takahashi H., Miyazawa M., Ina Y., Fukunishi Y., Mizukoshi Y., Nakamura H., Shimada I.	Journal of Biomolecular NMR	34	3	167	177	2006	○			Article	Article	3	4	
80	Classification of chemical compounds by protein-compound docking for use in designing a focused library	Fukunishi Y., Mikami Y., Takedomi K., Yamimouehi M., Shima H., Nakamura H.	Journal of Medicinal Chemistry	49	2	523	533	2006	○			Article	Article	10	10	
81	Effect of Hunter disease (mucopolysaccharidosis type II) mutations on molecular phenotypes of iduronate-2-sulfatase: Enzymatic activity, protein processing and structural analysis	Sukegawa-Hayasaka, K; Kato, Z; Nakamura, H; Tomatsu, S; Fukao, T; Kuwata, K; Orii, T; Kondo, N	JOURNAL OF INHERITED METABOLIC DISEASE	29	6	755	761	2006	○			Article	Article	3	2	
82	Is one solution good enough? - Response	Berman, HM; Henrick, K; Nakamura, H; Arnold, E	NATURE STRUCTURAL & MOLECULAR BIOLOGY	13	3	185	185	2006	○			-	Article	-	0	
83	Analysis of the three dimensional structure of the CXGXC motif in the CMGCC and CAGYC regions of alpha- and beta-subunits of human chorionic gonadotropin: Importance of glycine residue (G) in the motif	Kinoshita K., Kusunoki M., Miyai K.	ENDOCRINE JOURNAL	53	1	51	58	2006		あり		Article	Article	1	1	Authorに代表研究者なし 実施報告書より転記
84	Docking of protein molecular surfaces with evolutionary trace analysis	Kanamori E., Murakami Y., Tsuchiya Y., Standley D.M., Nakamura H., Kinoshita K.	Proteins: Structure, Function and Genetics	69	4	832	838	2007	○			Conference Paper	Article	0	0	
85	Similarity search for local protein structures at atomic resolution by exploiting a database management system	Kinjo A.R., Nakamura H.	Biophysics	3		75	84	2007	○			Article	-	0	-	
86	Theoretical analysis of the electronic asymmetry of the special pair in the photosynthetic reaction center: Effect of structural asymmetry and protein environment	Yamasaki H., Nakamura H., Takano Y.	Chemical Physics Letters	447	4-6	324	329	2007	○			Article	Article	0	0	
87	A grid-ready clinical database for Parkinson's disease research and diagnosis	Date S., Tashiro T., Nozaki K., Nakamura H., Sakoda S., Shimojo S.	Proceedings - IEEE Symposium on Computer-Based Medical Systems			483	488	2007	○			Conference Paper	-	0	-	
88	Conformational sampling of a 40-residue protein consisting of alpha and beta secondary-structure elements in explicit solvent	Ikebe J., Kamiya N., Shindo H., Nakamura H., Higo J.	Chemical Physics Letters	443	4-6	364	368	2007	○			Article	Article	0	0	
89	Realism about PDB	Berman H.M., Henrick K., Nakamura H., Markley J., Bourne P.E., Westbrook J.	Nature Biotechnology	25	8	845	846	2007	○			Letter	Letter	0	0	
90	The role of charged surface residues in the binding ability of small hubs in protein-protein interaction networks	Patil A., Nakamura H.	Biophysics	3		27	35	2007	○			Article	-	0	-	
91	eF-seek: prediction of the functional sites of proteins by searching for similar electrostatic potential and molecular surface shape	Kinoshita K., Murakami Y., Nakamura H.	Nucleic Acids Research	35		Web Server issue W398	W402	2007	○			Article	Article	1	1	
92	In-silico drug screening method based on the protein-compound affinity matrix using the factor selection technique	Murali S., Hojo S., Tsujishita H., Nakamura H., Fukunishi Y.	European Journal of Medicinal Chemistry	42	7	966	976	2007	○			Article	Article	0	0	
93	Drug development value chain constructed by collaboration between the SOSHO project and the NPO BIOGRID	Inoue T., Kado Y., Tokuoka K., Matsumura H., Kai Y., Mori Y., Adachi H., Takano K., Murakami S., Fukunishi Y., Nakamura H., Kinoshita T., Nakanishi I., Okuno Y., Minakata S., Sakata T.	AIP Conference Proceedings	902		85	88	2007	○			Conference Paper	-	0	-	
94	Reply to: Building meaningful models of glycoproteins	Berman H.M., Henrick K., Nakamura H., Markley J.	Nature Structural and Molecular Biology	14	5	354	355	2007	○			Letter	Letter	1	2	

論文リスト

<表注記>

- 「代表研究者」欄…著者に代表研究者が含まれている論文に「○」を表記。
- 「報告書への記載」欄…実施報告書に、BIRD期間中の成果として記載のある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
- 「BIRD credit」欄…論文中にBIRDでの取り組みであることを示すクレジットのある論文に「あり」を表記。ない場合は空欄。
- Document type、被引用件数の「-」は、データなしを表す。

No	Title	Author	Journal	Volume	ISSUE	Start Page	End Page	Published Year	代表研究者	報告書への記載	BIRD credit	Document Type (Scopus)	Document Type (WOS)	被引用件数 (Scopus)	被引用件数 (WOS)	備考
95	ASH structure alignment package: Sensitivity and selectivity in domain classification	Standley D.M., Toh H., Nakamura H.	BMC Bioinformatics	8				2007	○		あり	Article	Article	1	3	
96	The worldwide Protein Data Bank (wwPDB): Ensuring a single, uniform archive of PDB data	Berman H., Henrick K., Nakamura H., Markley J.L.	Nucleic Acids Research	35	SUPPL. 1	D301	D303	2007	○			Article	Article	41	39	
97	Finding ligands for G protein-coupled receptors based on the protein-compound affinity matrix	Fukunishi Y., Kubota S., Nakamura H.	Journal of Molecular Graphics and Modelling	25	5	633	643	2007	○			Article	Article	0	0	
98	Nature of protein family signatures: insights from singular value analysis of position-specific scoring matrices.	Kinjo A.R., Nakamura H.	PLoS ONE	3	4			2008	○			Article	-	0	-	
99	New progressing crystallization technology of membrane protein and introduction of pharmaceutical innovation value chain	Inoue T., Adachi H., Murakami S., Takano K., Matsumura H., Mori Y., Fukunishi Y., Nakamura H., Kinoshita T., Nakanishi I., Okuno Y., Minakata S., Shimojo S., Sakata T.	YAKUGAKU ZASSHI-JOURNAL OF THE PHARMACEUTICAL SOCIETY OF JAPAN	128	4	497	505	2008	○			Review	Review	0	0	
100	A simple efficient molecular dynamics scheme for evaluating electrostatic interaction of particle systems	Fukuda I., Yonezawa Y., Nakamura H.	AIP Conference Proceedings	982		792	795	2008	○			Conference Paper	-	0	-	
101	BioMagResBank (BMRB) as a partner in the Worldwide Protein Data Bank (wwPDB): New policies affecting biomolecular NMR depositions	Markley J.L., Ulrich E.L., Berman H.M., Henrick K., Nakamura H., Akutsu H.	Journal of Biomolecular NMR	40	3	153	155	2008	○			Article	Article	0	0	
102	Prediction of protein-ligand complex structure by docking software guided by other complex structures	Fukunishi Y., Nakamura H.	Journal of Molecular Graphics and Modelling	26	6	1030	1033	2008	○			Article	Article	0	0	
103	Improvement of protein-compound docking scores by using amino-acid sequence similarities of proteins	Fukunishi Y., Nakamura H.	Journal of Chemical Information and Modeling	48	1	148	156	2008	○			Article	Article	0	0	
104	Protein-inhibitor flexible docking by a multicanonical sampling: Native complex structure with the lowest free energy and a free-energy barrier distinguishing the native complex from the others	Kamiya N., Yonezawa Y., Nakamura H., Higo J.	Proteins: Structure, Function and Genetics	70	1	41	53	2008	○			Article	Article	0	0	
105	Remediation of the protein data bank archive	Henrick K, Feng Z, Bluhm WF, Dimitropoulos D, Doreleijers JF, Dutta S, Flippen-Anderson JL, Ionides J, Kamada C, Krissinel E, Lawson CL, Markley JL, Nakamura H, Newman R, Shimizu Y, Swaminathan J, Velankar S, Ory J, Ulrich EL, Vranken W, Westbrook J, Yamashita R, Yang H, Young J, Yousufuddin M, Berman HM.	Nucleic Acids Research	36		D426	D433	2008	○			Article	Article	1	1	
106	A database of normal mode analysis of proteins	Wako, H., Endo, S.	Genome Informatics	13		519	520	2002		あり		-	-	-	-	Authorに代表研究者なし 実施報告書より転記
107	New Features of PDBj-ML, an XML format for Protein Data Bank	Ito, N., Sakamoto, H., Kobayashi, K., Kaneta, Y., Kawaguchi, Y., Ohkawa, T., Nakamura, H.	Genome Informatics	13		488	489	2002	○	あり		-	-	-	-	実施報告書より転記
108	Using sequence homology to filter high-throughput protein-protein interaction data	Patil A, Nakamura H	Genome Informatics	15	1	121		2004	○	あり		-	-	-	-	実施報告書より転記
109	HINT: a database of annotated protein-protein interactions and their homologs	Patil A, Nakamura H	Biophysics	1	1	21		2005	○	あり		-	-	-	-	実施報告書より転記
110	New Features of PDBj-ML, an XML format for Protein Data Bank	Ito, N., Sakamoto, H., Kobayashi, K., Kaneta, Y., Kawaguchi, Y., Ohkawa, T., Nakamura, H.	Genome Informatics	13		488	489	2002	○	あり		-	-	-	-	実施報告書より転記
111	A database of normal mode analysis of proteins	大川剛直, Wako, H., Endo, S.	Genome Informatics	13		519	520	2002		あり		-	-	-	-	Authorに代表研究者なし 実施報告書より転記
112	A database of annotated protein-protein interactions and their homologs	Ashwini A. Patil, 中村春木	Biophysics	1	1	21		2005	○	あり		-	-	-	-	実施報告書より転記

<蛋白質立体構造データベース(Protein Data Bank Japan:PDBj)>

Googleリンクサイト検索結果(2008年7月時点)

公開URL	被リンク対象URL	内部リンク件数	外部リンク件数	リンク件数合計	Googleリンクサイト検索結果
http://www.pdbj.org/	http://www.pdbj.org/	133	20	153	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2Fwww.pdbj.org%2F&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2
http://PDB.protein.osaka-u.ac.jp/pdb (ミラーサイト:2005年12月28日公開終了)	http://PDB.protein.osaka-u.ac.jp/pdb	133	20	153	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2FPDB.protein.osaka-u.ac.jp%2Fpdb&hl=ja&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2

内部リンクはwww.pdbj.orgまたはprotein.osaka-u.ac.jpを含むページからのリンク件数、外部リンクはそれ以外からのリンクを表す。

<生体高分子核磁気共鳴実験データベースBiological Magnetic Resonance Bank(BioMagResBank:BMRB)>

Googleリンクサイト検索結果(2008年7月時点)

公開URL	被リンク対象URL	内部リンク件数	外部リンク件数	リンク件数合計	Googleリンクサイト検索結果
http://bmrdep.protein.osaka-u.ac.jp/index.html (ポータルサイト)	http://bmrdep.protein.osaka-u.ac.jp/index.html	0	1	1	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2Fbmrdep.protein.osaka-u.ac.jp%2F&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2
http://bmrdb.protein.osaka-u.ac.jp/ (データベース)	http://bmrdb.protein.osaka-u.ac.jp/	28	2	30	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2Fbmrdb.protein.osaka-u.ac.jp%2F&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2

内部リンクはwww.pdbj.orgまたはprotein.osaka-u.ac.jpを含むページからのリンク件数、外部リンクはそれ以外からのリンクを表す。

<蛋白質分子表面形状と物性・機能データベース:eF-site (electrostatic surface of functional site)>

Googleリンクサイト検索結果(2008年7月時点)

公開URL	被リンク対象URL	内部リンク件数	外部リンク件数	リンク件数合計	Googleリンクサイト検索結果
http://ef-site.hgc.jp/ef-site/	http://ef-site.hgc.jp/ef-site/	30	17	47	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2Fef-site.hgc.jp%2Fef-site%2F&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2

内部リンクはwww.pdbj.orgまたはprotein.osaka-u.ac.jpを含むページからのリンク件数、外部リンクはそれ以外からのリンクを表す。

<蛋白質分子表面計算サーバ:eF-surf>

Googleリンクサイト検索結果(2008年7月時点)

公開URL	被リンク対象URL	内部リンク件数	外部リンク件数	リンク件数合計	Googleリンクサイト検索結果
http://ef-site.hgc.jp/ef-surf/	http://ef-site.hgc.jp/ef-surf/	2	0	2	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2Fef-site.hgc.jp%2Fef-surf%2F&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2

内部リンクはwww.pdbj.orgまたはprotein.osaka-u.ac.jpを含むページからのリンク件数、外部リンクはそれ以外からのリンクを表す。

<蛋白質類似分子表面検索サーバ:eF-seek>

Googleリンクサイト検索結果(2008年7月時点)

公開URL	被リンク対象URL	内部リンク件数	外部リンク件数	リンク件数合計	Googleリンクサイト検索結果
http://ef-site.hgc.jp/ef-seek	http://ef-site.hgc.jp/ef-seek	2	0	2	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2Fef-site.hgc.jp%2Fef-seek&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2

内部リンクはwww.pdbj.orgまたはprotein.osaka-u.ac.jpを含むページからのリンク件数、外部リンクはそれ以外からのリンクを表す。

<分子グラフィックス・プログラム:jV (PDBjViewer)>

Googleリンクサイト検索結果(2008年7月時点)					
公開URL	被リンク対象URL	内部リンク件数	外部リンク件数	リンク件数合計	Googleリンクサイト検索結果
http://pdbj.protein.osaka-u.ac.jp/PDBjViewer/	http://pdbj.protein.osaka-u.ac.jp/PDBjViewer/	1	1	2	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2Fpdbj.protein.osaka-u.ac.jp%2Fiv%2FTOP.html&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2
内部リンクはwww.pdbj.orgまたはprotein.osaka-u.ac.jpを含むページからのリンク件数、外部リンクはそれ以外からのリンクを表す。					

<蛋白質ダイナミクス・データベース:ProMode>

Googleリンクサイト検索結果(2008年7月時点)					
公開URL	被リンク対象URL	内部リンク件数	外部リンク件数	リンク件数合計	Googleリンクサイト検索結果
http://promode.socs.waseda.ac.jp/	http://promode.socs.waseda.ac.jp/	2	0	2	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2Fpromode.socs.waseda.ac.jp%2F&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2
内部リンクはwaseda.ac.jpを含むページからのリンク件数、外部リンクはそれ以外からのリンクを表す。					

<蛋白質立体構造比較ツール:ASH(Alignment of Structural Homologs)>

Googleリンクサイト検索結果(2008年7月時点)					
公開URL	被リンク対象URL	内部リンク件数	外部リンク件数	リンク件数合計	Googleリンクサイト検索結果
http://pdbj.protein.osaka-u.ac.jp/ASH/index.html	http://pdbj.protein.osaka-u.ac.jp/ASH/index.html	2	1	3	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2Fpdbj.protein.osaka-u.ac.jp%2FASH%2Findex.html&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2
http://timpani.genome.ad.jp/~ash/ (停止して現在は上記に移行)	http://timpani.genome.ad.jp/~ash/	0	0	0	http://www.google.com/search?as_lq=http%3A%2F%2Ftimpani.genome.ad.jp%2F%7Eash&hl=ja&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2
内部リンクはwww.pdbj.orgまたはprotein.osaka-u.ac.jpを含むページからのリンク件数、外部リンクはそれ以外からのリンクを表す。					

<教育用蛋白質構造百科事典:eProtS>

Googleリンクサイト検索結果(2008年7月時点)					
公開URL	被リンク対象URL	内部リンク件数	外部リンク件数	リンク件数合計	Googleリンクサイト検索結果
http://eprots.pdbj.org/	http://eprots.pdbj.org/	7	1	8	http://www.google.co.jp/search?as_lq=http%3A%2F%2Feprots.pdbj.org%2F&btnG=%E6%A4%9C%E7%B4%A2
内部リンクはwww.pdbj.orgまたはprotein.osaka-u.ac.jpを含むページからのリンク件数、外部リンクはそれ以外からのリンクを表す。					

<蛋白質機能情報抽出支援システム:PROFESS (PROtein Function information Extraction Support System)>

未公開のため検索結果なし

(1) www.pdbj.org で検索した結果

No	ページ名	被リンクサイトURL	Top page URL
1	Seekda! (Austria)	http://seekda.com/search;jsessionid=4610D3023D7E81299AB42B7718F01A80?q=PDBj	http://seekda.com/
2	Programmable Web (USA)	http://www.programmableweb.com/api/pdbj	http://www.programmableweb.com/
3	Biological Web Service (UK)	http://www.mygrid.org.uk/wiki/Mygrid/BiologicalWebServices	http://www.mygrid.org.uk/
4	Pathema-Clostridium, (USA)	http://pathema.icvi.org/cgi-bin/Clostridium/shared/HtmlPage.cgi?page=bont_structures	http://pathema.icvi.org/cgi-bin/Clostridium/PathemaHomePage.cgi
5	Chem. De (Germany)	http://tib.chem.de/en/fachinfo.pl?id=1247&cat=2&area=54&det=1	http://www.chem.de/en/
6	Oxford University Press (UK)	http://www.oup.com/uk/orc/bin/9780199296958/01student/guidedtour/05databases/	http://www.oup.com/uk/orc/
7	Bioinformaticsweb.tk (Austria)	http://www.geocities.com/bioinformaticsweb/datalink.html	http://www.geocities.com/bioinformaticsweb/index.html
8	Nucleic Acid Research Database summary, Oxford Journals (UK)	http://www.oxfordjournals.org/nar/database/a/#E	
9	ライフサイエンス統合データベースプロジェクト	http://lifesciencedb.jp/lbdb.cgi?pg=1	http://lifesciencedb.jp/
10	PDB-REPRDB (独) 産業技術総合研究所	http://mbs.cbrc.jp/pdbreprdb-cgi/reprdb_menuJ.pl	http://www.aist.go.jp/
11	PDB-REPRDB (独) 産業技術総合研究所	http://mbs.cbrc.jp/EzCatDB/	http://www.aist.go.jp/
12	BioInfo Bank, 九州工業大学 ProTherm (他29DBs)	http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/iouhou/Protherm/protherm.html	
13	BioInfo Bank, 九州工業大学 3Dinsight	http://gibk26.bse.kyutech.ac.jp/iouhou/3dinsight/3DinSight.html	
14	BioInfo Bank, 九州工業大学 PDBnet	http://gibk21.bse.kyutech.ac.jp/pdbnet/	
15	Glycoconjugate Databank, 北海道大学	http://www.glycostructures.jp/	
16	新潟薬科大学応用生命科学部	http://www.ecosci.jp/NBI/index2.html	
17	東京理科大学薬学部装薬情報科学センター	http://atgc002.ps.noda.tus.ac.jp/contents/link.shtml#link1	
18	東京大学農学生命科学研究科 (JST-BIRDゲノムリテラシー講座) 清水謙多郎	http://www.bi.a.u-tokyo.ac.jp/~shimizu/genome/prediction.html	
19	共立出版株式会社	http://www.kyoritsu-pub.co.jp/pne/appendix/47-10.table.html	
20	コスモ・バイオ株式会社、酪農食品科学特論 -機能性ミルクタンパク質実験講座-	http://www.cosmobio.co.jp/support/science/tech Milk 20030916/tech Milk16 20030916.asp	http://www.cosmobio.co.jp/index.asp
21	北海道大学、iBio (特論講座)	http://ibio.jp/index.php?%B9%D6%B5%C1%2F%B9%BD%C2%A4%A5%D0%A5%A4%A5%AA%A5%A4%A5F3%A5D5%A5%A9%A5DE%A5C6%A5A3%A5AF%A5B9%C6%C3%CF%C0%2F%B4%D8%CF%A2%A5EA%A5F3%A5AF	http://ibio.jp/
22	BIO CONCIERGE	http://www.bio-concierge.com/link/db.php	http://www.bio-concierge.com/
23	XMLマスター	http://www.xmlmaster.org/application/mc004.html	http://www.xmlmaster.org/
24	学習院大学大学院自然科学研究科 物理学専攻課程 生物物理学1	http://www.gakushuin.ac.jp/univ/sci/phys/nishizaka/lecture/lecturebio.html	http://www.gakushuin.ac.jp/univ/sci/phys/
25	NTS.inc、ゲノミクス・プロテオミクスの新展開 関連Web-site集-第3編	http://www.nts-book.co.jp/item/detail/summary/bio/gp link/gp3.html	http://www.nts-book.co.jp/index.html
26	金沢大学バイオインフォマティクス研究室、研究関連サイト	http://bioinfo.ec.t.kanazawa-u.ac.jp/index.php?%B8%A6%B5%E6%B4%D8%CF%A2%A5%B5%A5%A4%A5C8	http://bioinfo.ec.t.kanazawa-u.ac.jp/
27	東洋大学附属図書館生命科学系リンク集	http://www.toyo.ac.jp/libra/1050portal/linkadress_seimeikagaku.html	http://www.toyo.ac.jp/libra/
28	長崎大学薬学部、薬品生物工学特論 I (講義)	http://www.ph.nagasaki-u.ac.jp/lab/biotech/lecture/graduate/tokuron1.html	http://www.ph.nagasaki-u.ac.jp/lab/biotech/index.html
29	静岡県立大学大学院 生活健康科学研究科 食品蛋白質工学研究室	http://sfns.u-shizuoka-ken.ac.jp/proeng/link.html	
30	BIOUPDATE バイオブックマーク	http://bioupdate.jp/pligg/search.php?search=%E3%82%BF%E3%83%B3%E3%83%91%E3%82%AF%E8%B3%AA&tag=true	http://bioupdate.jp:8080/pages/viewpage.action?pageId=393219

31	県立新潟女子短期大学・生活科学 科生活科学専攻 本間善夫	http://www.ecosci.jp/report2005/rika0506.html	http://www.ecosci.jp/
32	蛋白質科学会アーカイブ	http://www.pssi.jp/archives/Protocol/Structure/MR_01/MR_01_02.html	
33	NBCR: National Biomedical Computation Resource	https://www.nbcr.net/forum/viewtopic.php?t=167	National Biomedical Computation Resource
34	WingPro, データベース一覧(構築型 分類 完全版)	http://wingpro.lifesciencedb.org/dbpwiki/index.php/%E3%83%87%E3%83%BC%E3%82%BF%E3%83%99%E3%83%B3%E3%82%B9%E4%B8%80%E8%A6%A7(%E6%A7%8B%E7%AF%89%E5%9E%8B%E5%88%86%E9%A1%9E_%E5%AE%8C%E5%85%A8%E7%89%88	http://wingpro.lifesciencedb.org/dbpwiki/index.php/%E3%83%A1%E3%82%A4%E3%83%B3%E3%83%9A%E3%83%BC%E3%82%B8
35	J-tokkyo (国立大学法人名古屋大学 による特許申請掲載ページ)	http://www.j-tokkyo.com/2007/C12N/JP2007-074995.shtml	
36	PORTAL JAPAN NATIONAL UNIVERSITY CONSORTIUM	http://portal.acm.org/citation.cfm?id=1089847	http://portal.acm.org/portal.cfm?coll=GUIDE&dl=GUIDE&CFID=10839054&CFTOKEN=25998873
37	Workflow based framework for life science informatics by Abhishek Tiwaria, , and Arvind K.T. Sekhar(Science Direct)	http://www.sciencedirect.com/science?ob=ArticleURL&udi=B73G2-4PG115Y-3&user=143915&rdoc=1&fmt=&orig=search&sort=d&view=c&version=1&urlVersion=0&userid=143915&md5=990fae549aaa71cf40db305d5600b501	http://biodb.jp/
38	Hyperlink management system	http://biodb.jp/help/index_en.html	http://biodb.jp/
39	gennio	http://www.gennio.com/tags/PDB/ultimos	http://www.gennio.com/
40		http://nidhan.sitesled.com/	http://www.bohne-lang.de/
41	PovRay Triplex-DNA	http://genomebiology.com/2005/6/12/R98	http://genomebiology.com/
42	Protein-protein interactions of the hyperthermophilic archaeon Pyrococcus horikoshii OT3 by Kengo Usui et al. (Genome Biology)	http://genomebiology.com/2005/6/12/R98	http://www.plospathogens.org/home.action
43	Prevention of Cytotoxic T Cell Escape Using a Heteroclitic Subdominant Viral T Cell Determinant	http://www.plospathogens.org/article/info:doi%2F10.1371%2Fjournal.ppat.1000186	http://www.shouxi.net/
44	by Noah S. Butler et al. (SHOUXi (Nucleic Acids Resへの掲載論文の中国サイトへの紹介)	http://journal.shouxi.net/html/qikan/jcyxyswyxgc/hsyjyxqk/200773514/wzjh/20080831041154625_356681.html	
45	BioMedcentral	http://databases.biomedcentral.com/	

(2) pdbjs3.protein.osaka-u.ac.jp /
pdbjs2.pdbj.org で検索した結果

No	ページ名	被リンクサイトURL	Top page URL
1	seekda!	http://seekda.com/providers/osaka-u.ac.jp/PDBiSOAPX	http://seekda.com/

(3) PDBdeposition:
pdbdep.protein.osaka-u.ac.jpで検索
した結果

No	ページ名	被リンクサイトURL	Top page URL
1	CBI 情報計算科学生物学会	http://www.cbi.or.jp/cbi/DigitalTL/Bioinfo_RelatedSite/Bioinfo_Related_Site.html	http://www.cbi.or.jp/
2	JBB Journal of Bioscience and Bioengineering	http://www.jbb.sfbj.org/authors/index.html	http://www.jbb.sfbj.org/index.html
3	BioPlanet	http://www.bioplanet.com/planetforums/viewthread.php?tid=2229	http://www.bioplanet.com/planetforums/index.php
4	EUKARYOTIC CELL	http://ec.asm.org/cgi/content/full/5/1/1?maxtoshow=&HITS=10&hits=10&RESULTFORMAT=&fulltext=asm	http://ec.asm.org/
5	MCB Molecular and Cellular Biology	http://mcb.asm.org/cgi/content/full/28/1/1	http://mcb.asm.org/
6	CVI Clinical and Vaccine	http://cvi.asm.org/cgi/content/full/14/1/1	http://cvi.asm.org/
7	JVI Journal of Virology	http://jvi.asm.org/cgi/content/full/81/1/1?maxtoshow=&HITS=10&hits=10&RESULTFORMAT=&fulltext=asm	http://jvi.asm.org/
8	AEM Applied and Environmental Microbiology	http://aem.asm.org/cgi/content/full/74/1/1	http://aem.asm.org/

(4)eF-siteで検索した結果

No	ページ名	被リンクサイトURL	Top page URL
1	Nucleic Acid Research Database summarry, Oxford Journals (UK)	http://www.oxfordjournals.org/nar/database/a/#E	

2	東京理科大学基礎工学部生物工学科山登研究室	http://www.rs.noda.tus.ac.jp/~biost/OPFU/yama/public.html/study/folding/insilico/insilico.htm	
3	Nutrigenomics (Netherlands)	http://www.nugo.org/nip/12398	http://www.nugo.org/everyone
4	CHBD Web Textbook ,Genome Canada (Canada)	http://gchelpdesk.ualberta.ca/WebTextBook/CBHD Web Textbook.htm	http://gchelpdesk.ualberta.ca/
5	Yeshiva University (USA)	http://stanxterm.aecom.yu.edu/main/show.php?category=d.txt	http://www.aecom.yu.edu/cellbiology/
6	DATABASES ON MEDICINE AND MOLECULAR BIOLOGY (Germany)	http://www.meddb.info/index.php.en?cat=12&subcat=199	
7	Sequences Database, L'Atelier BioInformatique de Marseille	http://sites.univ-provence.fr/~wabim/english/seq.html	
8	BioMedcentral	http://databases.biomedcentral.com/	

(5) ef-site.hgc.jp/eF-site/で検索した結果

No	ページ名	被リンクサイトURL	Top page URL
1	WING PRO	http://wingpro.lifesciencedb.jp/dbpwiki/index.php/EF-site	http://wingpro.lifesciencedb.jp/dbpwiki/index.php/%E3%83%A1%E3%82%A4%E3%83%B3%E3%83%9A%E3%83%BC%E3%82%B8
2	情報数理研究所ライフサイエンスグループ	http://www.imslab.co.jp/bio/eF-site.html	http://www.imslab.co.jp/bio/index.html
3	BIO バイオテクノロジー ジャーナル	http://www.yodosha.co.jp/btjournal/link/20060708url.html	http://www.yodosha.co.jp/btjournal/index.htm
4	BioCourse	http://biocourse.biocommunity.kr/wiki/eF-site+and+PDBjViewer	http://biocourse.biocommunity.kr/wiki
5	KOBIC Korean BioInformation Center	http://bitdream.kobic.re.kr:8080/matrix/view_each_category_form.jsp?field=3&type=5	http://bitdream.kobic.re.kr:8080/matrix/index.jsp
6	WikiBooks	http://en.wikibooks.org/wiki/Proteomics/Protein_-_Protein_Interactions/Jena_Links	http://en.wikibooks.org/wiki/Main_Page

(6) ef-site.hgc.jp/eF-seek/で検索した結果

No	ページ名	被リンクサイトURL	Top page URL
1	PubMed Central	http://www.pubmedcentral.nih.gov/articlerender.fcgi?artid=1933152	http://www.pubmedcentral.nih.gov/
2	BioInfoBank Library	http://lib.bioinfo.pl/threads/view/339	http://lib.bioinfo.pl/
3	HSLs Health Sciences Library System	http://www.hsls.pitt.edu/guides/genetics/obrc/structure/proteins/URL1212596238/info	http://www.hsls.pitt.edu/
4	Bioinformatics, Databases and Software for Medicine	http://www.bio-computing.org/showcitationlist.php?keyword=seeking&redirect=yes&terms=ef-site.hgc.jp/eF	http://www.bio-computing.org/

(7) ProModeで検索した結果

No	ページ名	被リンクサイトURL	Top page URL
1	Sequences Database, L'Atelier BioInformatique de Marseille	http://sites.univ-provence.fr/~wabim/english/seq.html	
2	BioMedcentral	http://databases.biomedcentral.com/	

(8) ProMode: cube.socs.waseda.ac.jp/pages/jsp/index.jspで検索した結果

No	ページ名	被リンクサイトURL	Top page URL
1	WIKIPEDIA	http://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_network_model	http://en.wikipedia.org/wiki/Main_Page

(9) eprots.protein.osaka-u.ac.jp / eprots.pdbj.orgで検索した結果

No	ページ名	被リンクサイトURL	Top page URL
1	WING PRO	http://kabu.tokyojst.go.jp/dbpwiki/index.php/EProtS	http://kabu.tokyojst.go.jp/dbpwiki/index.php/%E3%83%A1%E3%82%A4%E3%83%B3%E3%83%9A%E3%83%BC%E3%82%B8
2	中国漢方会社	http://www.kanpoucom.com/jike/s01/509.html	http://www.kanpoucom.com/
3	漢方薬屋	http://www.hellokanpo.com/s/s01/371.html	http://www.hellokanpo.com/