

平成28年度医療研究開発推進事業費補助金
(創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業) 補助事業成果報告書

I. 基本情報

事業名：創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業（創薬等支援技術基盤プラットフォーム事業）
Platform Project for Supporting Drug Discovery and Life Science Research
(Platform for Drug discovery, Informatics, and Structural life science)

補助事業課題名：（日本語）「構造生命科学データクラウドの構築運用と高度化」（構造生命科学データクラウドにおける蛋白質構造データ解析関連技術の開発と支援）
（英語）Development and application of structural life science data cloud
(Development and support of technologies related to protein structural data analysis in structural life science data cloud)

補助事業担当者（日本語）大阪大学 蛋白質研究所 准教授 金城玲
所属 役職 氏名：（英語）Akira Kinjo, Associate Professor,
Institute for Protein Research, Osaka University

実施期間：平成 28 年 4 月 1 日 ～ 平成 29 年 3 月 31 日

II. 成果の概要（総括研究報告）

創薬・医療技術シーズを着実かつ迅速に医薬品等に結びつける革新的プロセスを実現するため、情報拠点が結束し全体として我が国の創薬プロセス等に活用可能な情報基盤を研究開発などの高度化を通して整備し、積極的に共同研究の支援や外部利用の促進によって、創薬等支援技術基盤の確立を行うことが目的であった。この目的を達成するため、情報拠点の分担機関として、以下の事業を行った。

高度化（構造生命科学データクラウドの構築）：タンパク質の立体構造情報を、各種モデル生物のゲノム情報を縦軸に、分子間相互作用ネットワーク情報を横軸にして生命科学の幅広い領域を融合し、「構造生命科学データクラウド」中に高度化したデータベースを構築した。膨大な数に上る生命科学関連データベースを無差別に統合するのではなく、比較的少数のデータベースを精選し、一

度分解した上で、ゲノム、ネットワークおよび立体構造の観点から1つのデータベースとして再構成することで高度化を図り、その成果を29報の論文として発表した。

支援（構造生命科学データクラウドを利用した支援）：上記高度化の成果物を利用する事によって、ゲノムとネットワークを両軸としてみた生命科学領域（ゲノム-ネットワーク空間）の中で、興味あるタンパク質について、構造既知のホモログがどの種に存在するのか、どのネットワークで他の生体分子や薬物とどのように相互作用しうるのかを俯瞰し、モデリングとシミュレーションを含めた立体構造・機能解析の戦略立案に役立てるための情報基盤を提供した。さらに利用者講習会や学会等のランチョンセミナーにて構造生命科学におけるデータベース活用法に関する講義・実習を行った（計37回）

The goal of this project was to establish a platform for supporting fast drug discovery. To that aim, the following projects had been carried out.

Research and Development: Construction of the structural life science data cloud. This database tried to unify a wide range of biological data resources by mapping structural data into an abstract data space spanned by genome data of various model organisms and molecular interaction data. This “data cloud” tries to integrate not all the available data resources, but several select data resources that are essential to drug development. Supporting other researchers: Based on the results of the above “data cloud”, we tried to identify some proteins and molecules of interest, and characterize them in terms of molecular interactions as well as structural context thereby helping establish strategic plans for further structural determination experiments.

III. 成果の外部への発表

(1) 学会誌・雑誌等における論文一覧（国内誌 0件、国際誌 29件）

1. Kinjo AR, Nakamura H. **Composite structural motifs of binding sites for delineating biological functions of proteins.** *PLoS One.* 2012, **7**, e31437 [[arXiv:1107.3278](https://arxiv.org/abs/1107.3278)][[DOI:10.1371/journal.pone.0031437](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0031437)]
2. Kinjo AR, Nakamura H. **GIRAF: a method for fast search and flexible alignment of ligand binding interfaces in proteins at atomic resolution.** *BIOPHYSICS.* 2012, **8**, 79-94. [[DOI:10.2142/biophysics.8.79](https://doi.org/10.2142/biophysics.8.79)]
3. Kuroda D, Shirai H, Jacobson MP, Nakamura H. **Computer-aided antibody design.** *Protein Engineering, Design, and Selection.* 2012, **25**, 507-521. doi: 10.1093/protein/gzs024
4. Thumarat U, Nakamura R, Kawabata T, Suzuki H, Kawai F. **Biochemical and genetic analysis of a cutinase-type polyesterase from a thermophilic *Thermobifida alba* AHK119.** *Appl Microbiol Biotechnol.* 2012, **95**, 419-430. doi: 10.1007/s00253-011-3781-6.

5. Liu X, Ohta T, [Kawabata T](#), Kawai F. **Catalytic mechanism of short ethoxy chain nonylphenol dehydrogenase belonging to a polyethylene glycol dehydrogenase group in the GMC oxidoreductase family.** *Int J Mol Sci.* 2013, **14**, 1218-1231. doi: 10.3390/ijms14011218.
6. Murakami Y, Kinoshita K, [Kinjo AR](#), [Nakamura H](#). **Exhaustive comparison and classification of ligand-binding surfaces in proteins.** *Protein Science.* 2013, **22**,1379-1391 [[DOI:10.1002/pro.2329](#)]
7. Katayama T, Wilkinson MD, Micklem G, Kawashima S, Yamaguchi A, Nakao M, Yamamoto Y, Okamoto S, Oouchida K, Chun HW, Aerts J, Afzal H, Antezana E, Arakawa K, Aranda B, Belleau F, Bolleman J, Bonnal RJ, Chapman B, Cock P, Eriksson T, Gordon P, Goto N, Hayashi K, Horn H, Ishiwata R, Kaminuma E, Kasprzyk A, Kawaji H, Kido N, Kim YJ, [Kinjo AR](#), Konishi F, Kwon KH, Labarga A, Lamprecht AL, Lin Y, Lindenbaum P, McCarthy L, Morita H, Murakami K, Nagao K, Nishida K, Nishimura K, Nishizawa T, Ogishima S, Ono K, Oshita K, Park KJ, Prins P, Saito TL, Samwald M, Satagopam VP, Shigemoto Y, Smith R, Splendiani A, Sugawara H, Taylor J, Vos R, Withers D, Yamasaki C, Zmasek CM, Kawamoto S, Okubo K, Asai K, Takagi T. **The 3rd DBCLS BioHackathon: improving life science data integration with semantic Web technologies** *Journal of Biomedical Semantics.* 2013, **4**, 6. [[DOI:10.1186/2041-1480-4-6](#)]
8. Dasgupta B, [Nakamura H](#), [Kinjo AR](#). **Counterbalance of ligand- and self-coupled motions characterizes multi-specificity of Ubiquitin.** *Protein Science.* 2013, **22**, 168-178 [[DOI:10.1002/pro.2195](#)]
9. [Kinjo AR](#), [Nakamura H](#). **Functional structural motifs for protein-ligand, protein-protein and protein-nucleic acid interactions and their connection to supersecondary structures.** *Methods in Molecular Biology.* 2013, **932**, 295-315. [[DOI:10.1007/978-1-62703-065-6_18](#)]
10. Dasgupta B, [Nakamura H](#), [Kinjo AR](#). **Rigid-body motions of interacting proteins dominate multi-specific binding of Ubiquitin in a shape-dependent manner.** *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics.* 2014, **82**, 77-89. [[DOI:10.1002/prot.24371](#)]
11. [Kawabata T](#), [Nakamura H](#). **3D flexible alignment using 2D maximum common substructure: dependence of prediction accuracy on target-reference chemical similarity.** *J. Chem. Info. Model.* 2014, **54**, 1850-1863.
12. Nishikawa Y, Oyama T, [Kamiya N](#), Kon T, Toyoshima YY, [Nakamura H](#), Kurisu G. **Structure of the entire stalk region of the Dynein motor domain.** *J Mol Biol.* 2014, **426**, 3232-3245. doi: 10.1016/j.jmb.2014.06.023
13. Nishikawa K, [Kinjo AR](#). **Cooperation between phenotypic plasticity and genetic mutations can account for the cumulative selection in evolution.** *BIOPHYSICS.* 2014, **10**, 99-108. [[DOI:10.2142/biophysics.10.99](#)]
14. Dasgupta B, Kasahara K, Kamiya N, [Nakamura H](#), [Kinjo AR](#). **Specific non-local interactions are not necessary for recovering native protein dynamics.** *PLoS One.* 2014, **9**, e91347. [[DOI:10.1371/journal.pone.0091347](#)]

15. Kinjo AR. **Liquid-theory analogy of direct-coupling analysis of multiple-sequence alignment and its implications for protein structure prediction.** *Biophysics and Physicobiology*. 2015,**12**,117-119. [[arXiv:1510.06794](https://arxiv.org/abs/1510.06794)] [[DOI:10.2142/biophysico.12.0_117](https://doi.org/10.2142/biophysico.12.0_117)]
16. Aoki-Kinoshita KF, Kinjo AR, Morita M, Igarashi Y, Chen Y, Shigemoto Y, Fujisawa T, Akune Y, Katoda T, Kokubu A, Mori T, Nakao M, Kawashima S, Okamoto S, Katayama T, Ogishima S. **Implementation of Linked Data in the Life Sciences at BioHackathon 2011.** *Journal of Biomedical Semantics*. 2015, **6**, 3. [[DOI:10.1186/2041-1480-6-3](https://doi.org/10.1186/2041-1480-6-3)]
17. Kukita Y, Okami J, Yoneda-Kato N, Nakamae I, Kawabata T, Higashiyama M, Kato J, Kodama K, Kato K. **Homozygous inactivation of CHEK2 is linked to a familial case of multiple primary lung cancer with accompanying cancers in other organs.** *Molecular Case Studies*. 2016, **2**, a001032.
18. N. Kamiya, T. Mashimo, Y. Takano, T. Kon, G. Kurisu, H. Nakamura **Elastic properties of dynein motor domain obtained from all-atom molecular dynamics simulations** *Protein Eng. Des. Sel.* 29, 317-326 (2016). DOI: <https://doi.org/10.1093/protein/gzw022>
19. Tanabe S, Kawabata T, Aoyagi K, Yokozaki H, Sasaki H. **Gene expression and pathway analysis of CTNNB1 in cancer and stem cells.** *World J Stem Cells*. 2016, **8**, 384-395.
20. Gojobori T, Ikeo K, Katayama Y, Kawabata T, Kinjo AR, Kinoshita K, Kwon Y, Migita O, Mizutani H, Muraoka M, Nagata K, Omori S, Sugawara H, Yamada D, Yura K. **VaProS: a database-integration approach for protein/genome information retrieval.** *J Struct Funct Genomics*. 2016, **17**, 69-81. [[DOI:10.1007/s10969-016-9211-3](https://doi.org/10.1007/s10969-016-9211-3)]
21. Kawabata, T. **HOMCOS: an updated server to search and model complex 3D structures.** *J Struct Funct Genomics*. 2016, **17**, 83-99.
22. Nagata K, Katayama Y, Sato T, Kwon Y, Kawabata T. **Toward the next step in G protein-coupled receptor research: a knowledge-driven analysis for the next potential targets in drug discovery.** *J Struct Funct Genomics*. 2016, **17**, 111-133.
23. Bekker G-J, Nakamura H, Kinjo AR. **Molmil: a molecular viewer for the PDB and beyond.** *Journal of Cheminformatics*. 2016, **8**, 42. [[DOI:10.1186/s13321-016-0155-1](https://doi.org/10.1186/s13321-016-0155-1)]
24. Yokochi M, Kobayashi N, Ulrich EL, Kinjo AR, Iwata T, Ioannidis YE, Livny M, Markley JL, Nakamura H, Kojima C, Fujiwara T. **Publication of nuclear magnetic resonance experimental data with semantic web technology and the application thereof to biomedical research of proteins.** *Journal of Biomedical Semantics*. 2016, **7**,16. [[DOI:10.1186/s13326-016-0057-1](https://doi.org/10.1186/s13326-016-0057-1)]
25. Kinjo AR. **A unified statistical model of protein multiple sequence alignment integrating direct coupling and insertions.** *Biophysics and Physicobiology*. 2016, **13**, 45-62. [[arXiv:1506.02076](https://arxiv.org/abs/1506.02076)][[DOI:10.2142/biophysico.13.0_45](https://doi.org/10.2142/biophysico.13.0_45)]
26. Suzuki H, Kawabata T, Nakamura H. **Omokage search: shape similarity search service for biomolecular structures in both the PDB and EMDB.** *Bioinformatics*. 2016, **32**, 619-20.

27. Kinjo AR, Bekker G-J, Suzuki H, Tsuchiya Y, Kawabata T, Ikegawa Y, Nakamura H. **Protein Data Bank Japan (PDBj): Updated user interfaces, Resource Description Framework, analysis tools for large structures.** *Nucleic Acids Research*. 2017, **45**, D282-D288. [DOI:10.1093/nar/gkw962]
28. Kawabata T, Oda M, Kawai F. **Mutational analysis of cutinase-like enzyme, Cut190, based on the 3D docking structure with model compounds of polyethylene terephthalate.** *J Biosci Bioeng*. 2017, in press, <https://doi.org/10.1016/j.jbiosc.2017.02.007>.
29. Alshahrani M, Khan MA, Maddouri O, Kinjo AR, Queralt-Rosinach N, Hoehndorf R. **Neuro-symbolic representation learning on biological knowledge graphs.** *Bioinformatics*. 2017, **In press**: [\[arXiv:1612.04256\]](https://arxiv.org/abs/1612.04256) [DOI:10.1093/bioinformatics/btx275]

(2) 学会・シンポジウム等における口頭・ポスター発表

1. 「大量の配列データから立体構造を探る」, 口頭, 金城玲、日本蛋白質科学会年会 福岡国際会議場 2016/06/08、国内
2. 「Unified statistical model of protein multiple-sequence alignment」, ポスター発表, 金城玲、日本生物物理学会 金沢大学 2015/9/13-15、国内.
3. *Unified statistical model of protein multiple-sequence alignment integrating direct coupling and insertions* , ポスター発表, 金城玲、The 13th conference of the Asian Crystallographic Association Science City, Kolkata, India, 2015/12/05-08, 国外.
4. 「Similarity search for local protein structures at atomic resolution by exploiting a database management system」, 口頭, 金城玲、BIOPHYSICS 論文賞受賞講演 日本生物物理学会年会札幌コンベンションセンター, 2014/9/26, 国内.
5. 「蛋白質の結合部位の構造パターンと生物学的機能を結ぶ」, 口頭, 金城玲、第6回定量生物学の会年会, 2013/11/24、国内.
6. 電子顕微鏡による三次元密度マップを用いた生体高分子複合体の比較モデリングー混合正規分布モデルによる近似形状表現の適用ー, 口頭, 川端 猛、統数研共同利用「物理計測とベイズ統計的方法」 統計数理研究所, 2013/1/16, 国内.
7. Omokage search and gmfit : shape similarity search and superposition among models and maps, 口頭, 川端 猛、The wwPDB Foundation 主催国際シンポジウム “Integrative Structural Biology with Hybrid Methods” , 2015/10/3, 国内.
8. HOMCOS: a server to search and model complex 3D structures, 口頭, 川端 猛、International Symposium on Structure and Folding of Disease Related Proteins - Bilateral Symposium between SNU and IPR. Seoul National University, 2015/12/4, 国外.
9. HOMCOS : 複合体立体構造の検索・モデリングサーバ, 口頭, 川端 猛、中村春木、金城玲、日本農芸化学会 2014 年度大会、明治大学生田キャンパス, 2014/3/30, 国内.
10. 電顕 3 次元密度マップから α ヘリックスを認識する混合正規分布モデルの開発, ポスター発表, 川端 猛、中村春木、第 54 回日本生物物理学会年会、つくば国際会議場, 2016/11/27, 国内.

11. HOMCOS サーバを用いた複合体立体構造の進化的保存性の解析, ポスター発表, 川端 猛、中村春木、金城玲, 第 16 回日本蛋白質科学会年会, 福岡国際会議場, 2016/6/9, 国内.
12. Omokage search and gmfit : shape similarity search and superposition among models and maps, ポスター発表, Kawabata T, Suzuki H, Nakamura H, Biophysical Society 60-th Annual Meeting, Los Angeles, 2016/2/28, 国外.
13. 低解像度密度マップへの複数のサブユニットのあてはめ計算 - 実験情報による拘束の利用 -, ポスター発表, 川端 猛、中村春木, 第 53 回日本生物物理学会年会, 金沢, 2015/9/15, 国内.
14. HOMCOS: 複合体立体構造の検索・モデリングサーバ, ポスター発表, 川端 猛、中村春木、金城玲、日本薬学会第 135 年会, 神戸, 2015/3/27, 国内.
15. Omokage search : A rapid shape similarity search and superposition of biological assemblies, ポスター発表, Kawabata T, Suzuki H, Nakamura H, Biophysical Society 59-th Annual Meeting, Baltimore, 2015/2/19, 国外.
16. セグメンテーション&フィッティング - 低解像度密度マップへの複数のサブユニットのあてはめ計算法 -, ポスター発表, 川端 猛、鈴木博文、中村春木, 第 52 回日本生物物理学会年会, 札幌, 2014/9/27, 国内.
17. Similarity-based 3D Modeling of Compound-Protein Complexes, ポスター発表, Kawabata T, Kinjo A, Nakamura H, Biophysical society thematic meeting - Modeling of Biomolecular Systems Interactions, Dynamics, and Allostery: Bridging Experiments and Computations, Istanbul, 2014/9/13, 国外.
18. fkcombu : 2D-MCS を用いた鋳型ベースの低分子化合物ドッキング法の開発, ポスター発表, 川端 猛、中村春木, 第 14 回日本蛋白質科学会年会、横浜, 2014/6/27, 国内.
19. HOMCOS: A server to search and model 3D structures of protein-protein and compound-protein complexes, ポスター発表, Kawabata T, Nakamura H, Kinjo A, Biophysical Society 58-th Annual Meeting, San Francisco, 2014/2/16, 国外.
20. HOMCOS: 複合体立体構造の検索・モデリングサーバ, ポスター発表, 川端 猛、中村春木、金城玲、第 36 回日本分子生物学会年会, 神戸, 2013/12/5, 国内.
21. 高分子複合体の密度マップ・原子モデルの 混合正規分布モデルを用いた重ね合わせ計算, ポスター発表, 川端 猛、鈴木博文、金城玲、中村春木、第 51 回日本生物物理学会年会、京都, 2013/10/28, 国内.
22. Similarity-based docking using atomic correspondence of maximum common substructure: dependence of prediction accuracy on target-template similarity, ポスター発表、Kawabata T, Nakamura H, 21st Annual International Conference on Intelligent System for Molecular Biology, Berlin, 2013/7/23, 国外.
23. HOMCOS2: 複合体立体構造の検索・モデリングサーバ, ポスター発表, 川端 猛、中村春木、金城玲, 第 13 回日本蛋白質科学会年会, 鳥取, 2013/6/13, 国内.
24. Multiple subunit fitting into a low-resolution density map of a macromolecular complex using Gaussian mixture model, ポスター発表, Kawabata T, Biophysical Society 57-th Annual Meeting, Philadelphia, 2013/2/4, 国外.

25. LigandBox : a database for 3D structures of chemical compounds, ポスター発表, 川端 猛、杉原裕介、福西快文、中村春木、生命医薬情報学連合大会 2012、東京、2012/10/15, 国内.
26. 進化的に保存された蛋白質間相互作用の複合体立体構造の予測, ポスター発表, 川端 猛、中村春木、金城玲、日本生物物理学会第 50 回年会、名古屋、2012/9/23, 国内.
27. リガンド結合構造の比較モデリング – リガンド類似性・蛋白質相同性の予測精度への影響, ポスター発表, 川端 猛、中村春木、第 12 回日本蛋白質科学会年会、名古屋、2012/6/21, 国内.
28. N. Kamiya, T. Mashimo, Y. Takano, T. Kon, G. Kurisu, H. Nakamura. “Molecular dynamics simulations of dynein motor domain in explicit water” The 58th annual meeting of Biophysical Society, Moscone center, San Francisco, USA, 2014 年 2 月 16 日. ポスター発表, 国外
29. N. Kamiya, N. Shimba, H. Nakamura. “Molecular dynamics study on evaluation of a decoy set generated by docking between antibody and antigen” The 4th Asia Pacific Protein Association, ICCC Jeju, Jeju, Korea, 2014 年 5 月 18 日. ポスター発表、国外
30. N. Kamiya, T. Mashimo, Y. Takano, T. Kon, G. Kurisu, H. Nakamura. “Elastic property of dynein motor domain obtained from all-atom molecular dynamics simulations in explicit water” The 59th annual meeting of Biophysical Society, Baltimore convention center, Baltimore, USA, 2015 年 2 月 8 日. ポスター発表、国外

(3) 「国民との科学・技術対話社会」に対する取り組み

1. Comparison and classification of protein structures, 金城玲, Korea-China-Japan Bioinformatics training course, Jeju, Korea 2014/6/19, 国外
2. On the optimal contact potential and sequence conservation modes of proteins, 金城玲, China-Korea-Japan Bioinformatics training course, Suzhou, China, 2013/6/18, 国外
3. タンパク質立体構造データベースと分子構造表示ソフトの使い方, 川端猛, 化学及血清療法研究所 菊池研究所, 2014/1/22 国内
4. 蛋白質立体構造からの検索, 川端猛、東京大学農学部、2014/7/11, 国内
5. 「PDB データの検索・見方」工藤 高裕、東北大学、2014/10/1, 国内
6. 「新しい PDB データの読み解き方」金城 玲、東北大学、2014/10/1, 国内
7. 「HOMCOS サーバを用いた複合体立体構造の検索とモデリング」川端 猛、東北大学、2014/10/1, 国内
8. 「PDBj と wwPDB の活動」中村 春木、2014/10/3, 仙台国際センター、国内
9. 「HOMCOS サーバを用いた複合体立体構造の検索とモデリング」、川端 猛、2014/10/3, 仙台国際センター、国内
10. 蛋白質構造による解析 川端 猛、東京大学農学部、2015/2/3, 国内
11. 「PDB データの検索・見方」工藤 高裕、大阪大学、2015/2/20, 国内

12. 「ブラウザと構造ビューアで3次元構造を眺める」鈴木 博文、大阪大学、2015/2/20, 国内
13. 「ホモロジー・モデリングの基礎と複合体立体構造の検索・モデリング」川端 猛、大阪大学、2015/2/20, 国内
14. 「PDBj と wwPDB の活動について」中村 春木、科学技術振興機構 東京本部別館 2階セミナー室、2015/6/13, 国内
15. 「PDBj からの構造情報の取得 - PDBj Mine の使い方」工藤 高裕、科学技術振興機構 東京本部別館 2階セミナー室、2015/6/13, 国内
16. 「PDBj からの構造情報の取得 2-ブラウザと構造ビューアで3次元構造を眺める」鈴木 博文、科学技術振興機構 東京本部別館 2階セミナー室、2015/6/13, 国内
17. 「UCSF Chimera と Modeller を用いたホモロジー・モデリングと HOMCOS サーバによる複合体立体構造の検索・モデリング」川端 猛、科学技術振興機構 東京本部別館 2階セミナー室、2015/6/13, 国内
18. 「日本と世界の蛋白質構造データバンク : PDBj と wwPDB」中村 春木、あわ銀ホール、2015/6/24, 国内
19. 「BMRB と他の生命科学系データベースとの統合的検索」、小林 直宏、あわ銀ホール、2015/6/24, 国内
20. 「HOMCOS: 複合体立体構造の検索・モデリングサーバ」川端 猛、あわ銀ホール、2015/6/24, 国内
21. 蛋白質立体構造データの使い方 金城 玲、徳島大学、2014/8/20, 国内
22. "Introduction to Structural Life Science Data Cloud" 金城玲、金沢大学、2015/9/13, 国内
23. 「PDB データの検索・見方」工藤 高裕、大阪大学中之島センター、2015/7/18, 国内
24. 「ゲノム配列と蛋白質立体構造の統合的検索とモデリング」川端 猛、大阪大学中之島センター、2015/7/18, 国内
25. 蛋白質構造による解析、川端猛、東大農学部、2015/10/14, 国内
26. PDB データの検索・見方、工藤 高裕、大阪大学蛋白質研究所、2016/3/15, 国内
27. タンパク質の立体構造を見る、鈴木 博文、大阪大学蛋白質研究所、2016/3/15, 国内
28. UCSF Chimera と MODELLER を用いたホモロジー・モデリング、川端 猛、大阪大学蛋白質研究所、2016/3/15, 国内
29. HOMCOS サーバを用いた複合体立体構造の検索とモデリング、川端 猛、大阪大学蛋白質研究所、2016/3/15, 国内
30. PDBj Mine 関係データベースを利用したデータ解析、金城玲、東京国際交流館、2016/10/1, 国内
31. 複合体立体構造の検索とホモロジー・モデリング 川端 猛、九州大学、2016/6/10, 国内
32. ホモロジー・モデリングによるタンパク質の立体構造予測、川端猛、グランフロント大阪、2016/7/23, 国内

33. 分子ビューア UCSF Chimera の使い方とホモロジー・モデリング、川端猛、愛媛大学、2016/9/1, 国内
34. HOMCOS を用いた複合体立体構造の検索とモデリング、川端猛、愛媛大学、2016/9/1, 国内
35. New issues in the wwPDB and the PDBj (wwPDB と PDB における新しい話題について)、中村春木、つくば国際会議場、2016/11/25, 国内
36. Electron microscopy data in PDB and EMDB - deposition and browsing (EMDB と PDB における電子顕微鏡データ登録と閲覧)、鈴木博文、つくば国際会議場、2016/11/25, 国内
37. New generation of NMR analysis assisted by Deep Learning and highly sophisticated Web-tools developed by PDBj-BMRB (PDBj-BMRB により開発された深層学習により支援された次世代 NMR 解析と高度化された Web ツール)、小林直宏、つくば国際会議場、2016/11/25, 国内

(4) 特許出願