

wwPDB データ不整合報告: _struct_asym エントリの欠損

報告日: 2026-01-18 アーカイブスキャン日: 2026-01-17 報告者: [氏名/組織] 連絡先: [メールアドレス]

概要

PDBアーカイブの体系的なスキャンにより、_atom_site.label_asym_id の値に対応する _struct_asym カテゴリのエントリが欠損している 3件 のエントリを特定しました（調査対象: 243,083件）。該当する全てのケースは水分子 (HOH) の asym_id に関するものです。

該当エントリ: 1TS6, 2G10, 2K9Y 影響率: 調査対象の0.001%

用語について: 本報告における “asym_id” は _atom_site.label_asym_id および _struct_asym.id の値を指します (auth_asym_id ではありません)。

問題の説明

概要

mmCIF辞書によれば、_struct_asym カテゴリは非対称単位の内容を定義し、_atom_site で参照される全ての label_asym_id に対応するエントリを含む必要があります。該当エントリには、対応する _struct_asym.id 定義のない label_asym_id 値を持つ原子レコードが含まれています。

技術的詳細

項目	説明
期待される動作	全ての一意な _atom_site.label_asym_id 値に対応する _struct_asym.id エントリが存在する
観測された動作	特定の水の asym_id が _atom_site で参照されているが _struct_asym に存在しない
影響力テゴリ	_struct_asym
パターン	欠損エントリは全て水分子 (HOH) の asym_id に対応

該当エントリ

PDB ID	欠損 _struct_asym.id	成分	原子数	備考
1TS6	C	HOH	7	asym_id 1件欠損
2G10	F	HOH	147	asym_id 1件欠損
2K9Y	C, D	HOH	9, 3	asym_id 2件欠損

詳細

1TS6 asym_id C には7個の水酸素原子が _atom_site で参照されているが、対応する _struct_asym エントリが欠損している。

2G10 asym_id F には147個の水酸素原子が _atom_site で参照されているが、対応する _struct_asym エントリが欠損している。

2K9Y asym_id C および D にはそれぞれ9個および3個の水酸素原子が含まれ、いずれも _atom_site で参照されているが対応する _struct_asym エントリが欠損している。

例: 2G10

_struct_asym カテゴリ (全体) :

```
_struct_asym.id  
_struct_asym.pdbx_blank_PDB_chainid_flag  
_struct_asym.pdbx_modified  
_struct_asym.entity_id  
_struct_asym.details  
A N N 1 ?  
B N N 2 ?  
C N N 3 ?  
D N N 4 ?  
E N N 5 ?
```

注: asym_id F は _struct_asym に定義されていないが、entity 5 (水) は存在しており参照されるべきである。

asym_id F を参照する _atom_site レコード (147件中最初の5件) :

```
_atom_site.group_PDB  
_atom_site.id  
_atom_site.label_atom_id  
_atom_site.label_comp_id  
_atom_site.label_asym_id      # <-- _struct_asym に欠損  
_atom_site.label_entity_id    # <-- entity 5 (水) を参照  
_atom_site.label_seq_id  
...  
HETATM 2706 0 HOH F 5 . ...  
HETATM 2707 0 HOH F 5 . ...  
HETATM 2708 0 HOH F 5 . ...  
HETATM 2709 0 HOH F 5 . ...  
HETATM 2710 0 HOH F 5 . ...
```

_atom_site.label_asym_id の値 “F” は entity 5 (水) を参照しているが、対応する _struct_asym.id エントリが存在しない。

検出方法

検出プロセス

- 各エントリから全ての一意な _atom_site.label_asym_id 値を抽出
- 各エントリから全ての _struct_asym.id 値を抽出
- atom_site集合にあって struct_asym集合にない値を持つエントリを特定

スキャンパラメータ

パラメータ	値
スキャン総数	243,083
ミラー同期日	2025-10-10
スキャン日	2026-01-17
検証日	2026-01-18
アーカイブソース	PDB mmCIFアーカイブ（ミラー）/RCSB（検証）

注: 初回スキャンは約3ヶ月前に同期されたローカルミラーを使用しました。検出結果の有効性を確認するため、2026-01-18にRCSBから該当エントリを直接再ダウンロードし、不整合が現在も継続していることを確認しました。

検証

- 初回検出:** ローカルPDBミラーの体系的スキャン (2026-01-17)
- 確認:** RCSBから該当エントリを再ダウンロードし、不整合が現在のアーカイブでも継続していることを確認 (2026-01-18)
- 修正検証:** 修正ファイルを生成し、再スキャンにより不整合がゼロであることを確認

提言

- 是正:** 該当エントリを更新し、欠損している _struct_asym 定義を追加する

2. **予防:** デポジション/処理パイプラインに、全ての
`_atom_site.label_asym_id` 値に対応する `_struct_asym.id` エントリが存在
することをリリース前に検証するバリデーションステップの追加を検討する
-

補足資料

修正済みmmCIFファイルおよびスキャン結果はGitHubリポジトリで公開しています:

- `fixed/1ts6.cif.gz`
- `fixed/2g10.cif.gz`
- `fixed/2k9y.cif.gz`
- `reports/data/results.json`

リポジトリ: <https://github.com/N283T/fix-struct-asym>

再現性

本報告は自動検出ツールを使用して生成されました。検出方法、スキャン結果、および修正ファイルは上記リポジトリで公開されており、検証可能です。