

糖鎖統合データベースおよび 国際糖鎖構造リポジトリの開発

*National Institute of
Advanced Industrial Science
and Technology*

成松 久

(独)産業技術総合研究所 糖鎖創薬技術研究センター



©2014成松 久(産業技術総合研究所) licensed under CC表示2.1日本

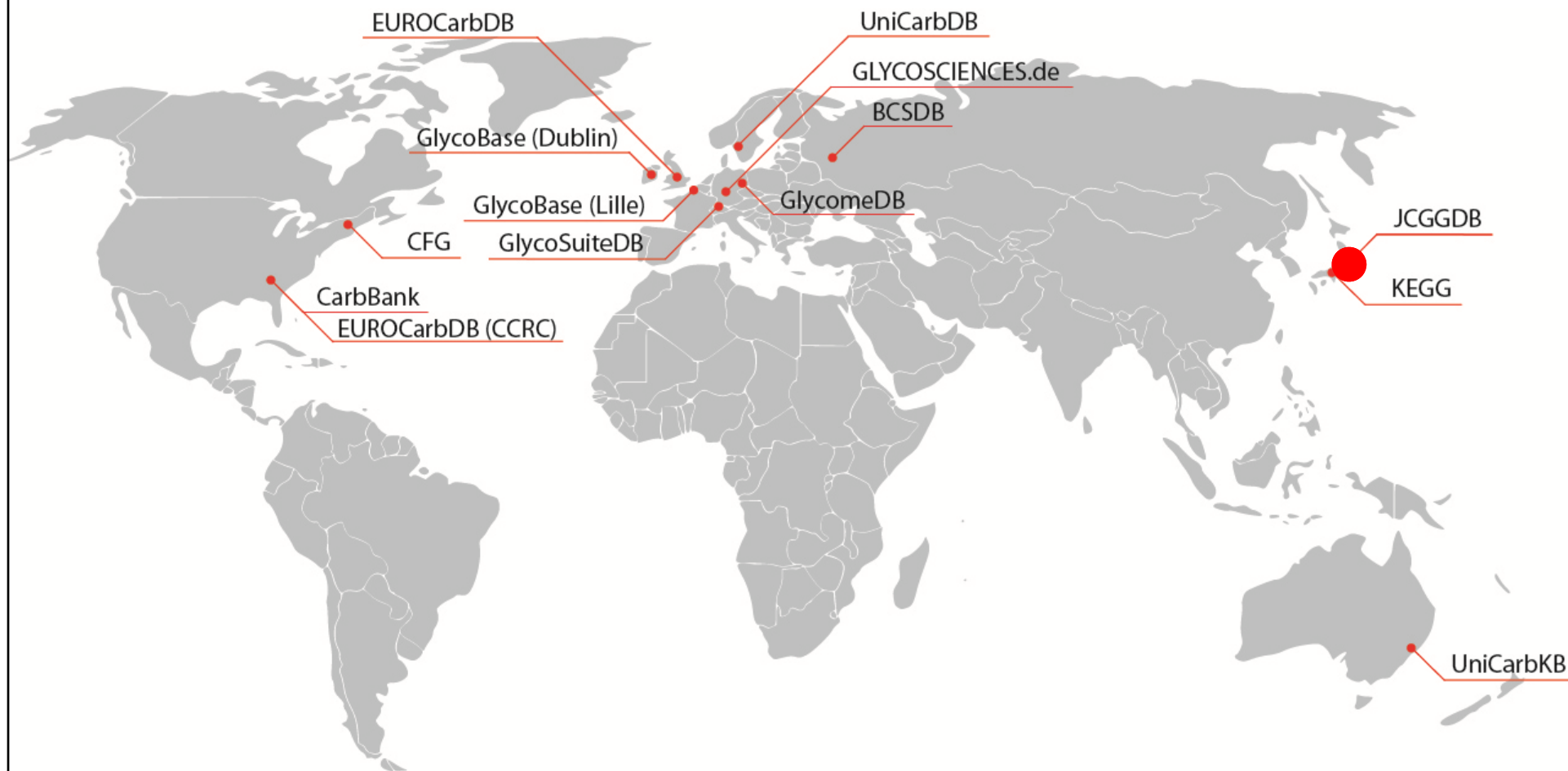
本プロジェクトの目標

1. 国際糖鎖構造データリポジトリシステムを開発する
2. 全糖鎖構造データの標準化を行う
3. 糖鎖関連データベースの標準化ならびにセマンティックウェブ対応によって、ライフサイエンスデータベース全般との統合を目指す
 - 新しい実験解析技術によって生産されるデータに対応するために新規開発するデータベースも含める(糖ペプチド、レクチンマイクロアレイなど)

糖鎖関連データベース1989



糖鎖関連データベース 2014



JCGGDB Alliance

産総研・糖鎖センターのDB

GlycoGene Inhibitors database

Pathway database

GlycoGene DNA
microarray database

Glycosidase database

- データの拡充
- 検索機能強化
- 統合化推進

Glycotechnology
Patents database

JCGGDB Report

野口研究所

GlycoNAVI Database

立命館大学

名古屋大学・産総研

Knockout Mouse DB

創価大学

FlyGlyco DB

名古屋市立大学

KEGG

Glycan Synthesis DB

京都大学

生化学工業

野口研・産総研

LipidBank構築委員会

理研・システム糖鎖

N-glycan
Conformation DB

CGGDB(線虫)

九州大学

国際糖鎖構造リポジトリシステム の構築と運用

*National Institute of
Advanced Industrial Science
and Technology*

GlyTouCan.org

AIST

WURCS

WURCS: Web 3.0 Unique Representation of Carbohydrate Structures

- 曖昧な糖鎖構造を含め、論文に記述される全糖鎖構造を任意に表すことのできる線形表記法
 - 未確定の糖結合情報
 - 多糖類
 - 繰り返し構造
 - 単糖組成のみの構造情報
 - 環状の糖鎖構造
 - 稀な単糖
- WURCS ワーキンググループを結成
 - <http://wurcs-wg.org/>

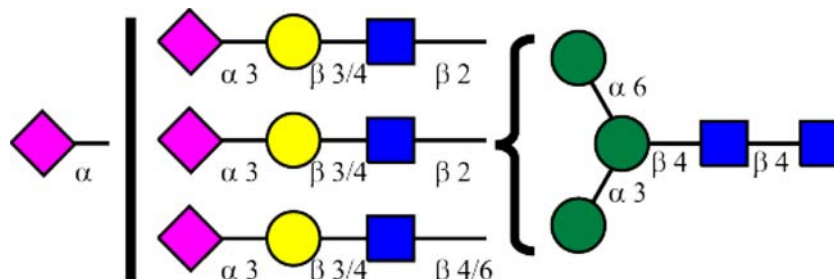
WURCS の例



単糖名 (複数可):
 β -D-Galp
 β -D-GlcNAc
 β -D-GlcNAc
 α -L-Fucp or α -L-6-deoxy-Galp
 α -D-Manp
 β -D-Manp



WURCS: 単糖
 12112h-1:5
 12122h-1:5||2:2*NC(C)=O
 x2122h-1:5||2:2*NC(C)=O
 11221m-1:5
 21122h-1:5
 11122h-1:5



WURCS=1.0/15,14/[a1d21122h|2,6|5*NCC/3=O][a1d21122h|2,6|5*NCC/3=O][12112h|1,5][12122h|1,5|2*NCC/3=O][a1d21122h|2,6|5*NCC/3=O][12112h|1,5][12122h|1,5|2*NCC/3=O][a1d21122h|2,6|5*NCC/3=O][12112h|1,5][12122h|1,5|2*NCC/3=O][21122h|1,5][21122h|1,5][11122h|1,5][12122h|1,5|2*NCC/3=O][X2122h|1,5|2*NCC/3=O]1+2,(2+?)/(3+?)/(4+?)/(5+?)/(6+?)/(7+?)/(8+?)/(9+?)/(10+?)|2+1,3+3|3+1,(4+3)/(4+4)|4+1,(11+2)/(12+2)|5+1,6+3|6+1,(7+3)/(7+4)|7+1,(11+2)/(12+2)|8+1,9+3|9+1,(10+3)/(10+4)|10+1,(11+4)/(11+6)/(12+4)/(12+6)|11+1,13+6|12+1,13+3|13+1,14+4|14+1,15+4

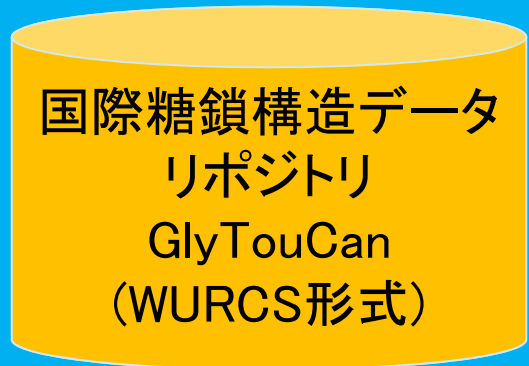
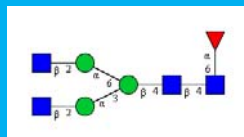
WURCSの利用

- 論文に記述された全糖鎖構造を一意的に表記
することができ、文字列の比較だけで糖鎖構造
の検索が可能になる
- URLに直接利用可能
- WURCS とその他の糖鎖形式の変換ツールも
開発する
- 4月末日に論文がアクセプトされた
 - WURCS: The Web3 Unique Representation of
Carbohydrate Structures

糖鎖関連データベース



糖鎖ID
+
構造データ



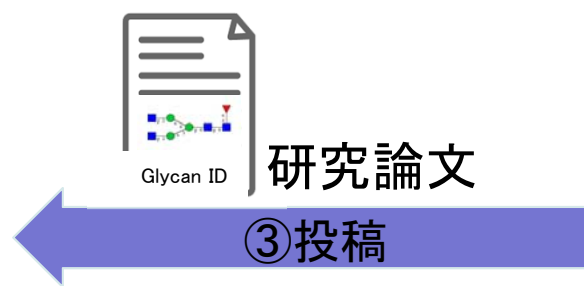
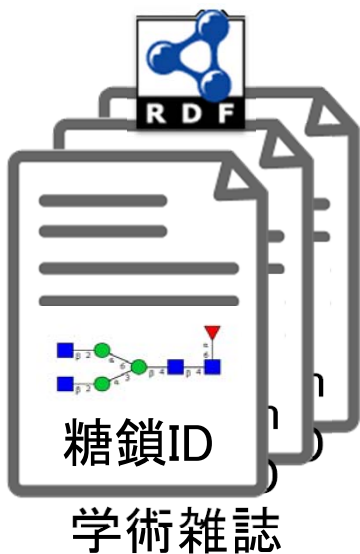
← データ共有

④ アノテーション情報のキュレーション

糖鎖研究の知識共有

② 糖鎖ID発行

① 登録



データベースの内容

- ・ 国際糖鎖構造リポジトリ (GlyTouCan) の内容
 - 糖鎖構造、登録者、登録日時のみ
 - GlySpace プロジェクトとの連携 (米国)
 - 数万件の糖鎖構造情報が保有される予定
- ・ JCGGDB:
 - 産総研独自の新しいデータを公開:
糖タンパク質、糖ペプチド、レクチンアレイ
 - セマンティックウェブ化し、リポジトリとの連携
 - 数十万～何百万件の関連情報がリンクされる予定

国際協働による標準化作業

*National Institute of
Advanced Industrial Science
and Technology*

AIST

国際コミュニティ形成と協働開発



我々が国内外の糖鎖科学研究者に呼びかけて、糖鎖科学データの標準化へ向けたキックオフミーティングを主催した。日米欧だけでなく東アジア諸国も含めての国際合意を形成し、グローバルな連携協力体制での糖鎖科学分野のSemantic Web技術対応の基盤開発を始めることができた。本会議のレポートはGlycobiology誌に掲載された。

BioHackathon 2012 富山(9月)
 主要な糖鎖DB (GlycomeDB, BCSDDB, MonosaccharideDB, UniCarbKB) 開発者を招聘し、RDF化を試みた。GlycoProtDBとUniProtの連携



第5回ACGG-DB 会議 決議事項

大連 2013年6月22日

参加国：日本、米国、豪州、ドイツ、ロシア、中国、韓国、台湾

- 国際糖鎖リポジトリの基本合意

論文投稿前のアクセッション番号の発行システム

- データの範囲

糖鎖構造情報のみ

(メタデータ：登録者と登録日)



- システムのフレームワーク

プロトタイプは日本の現在のグループで開発

- 支援と普及促進

糖鎖関連の学会：IGO, ICO, Society for Glycobiology, JSCR, JCGG, HUPO 等

課題と対策

- ・ 曖昧な糖鎖構造を任意に表す課題
 - WURCSの開発
 - 既存の糖鎖構造データのWURCSへの変換
- ・ 国際連携・リポジトリ及びWURCSを標準としての普及
 - 糖鎖関連の学会 (IGO, ICO, Society for Glycobiology, JSCR, JCGG, HUPO) との連携

糖鎖データベースの将来像

- ・ 医療応用への拡大展開
 - 疾患グライコプロテオミックス
- ・ 糖鎖構造データの標準化
 - 国際糖鎖構造リポジトリの実現
- ・ 糖鎖セマンティックウェブの実現