

## 研究開発課題別事後評価結果

### 1. 研究開発課題名

糖鎖統合データベースと研究支援ツールの開発

### 2. 代表研究者名

産業技術総合研究所 糖鎖医工学研究センター センター長 成松 久

### 3. 研究実施概要

本課題では、糖鎖研究領域の研究者のみならず、糖鎖と係わりの深い感染・癌・生殖・発生などの分野の研究者を対象とし、データベースやリソース共有を通して共同研究が活発に行われるように情報基盤の整備を行い、統合を図ることを目的とした。平成19年度後半から22年度の統合データベースプロジェクト・補完課題として構築した、日本糖鎖科学統合データベース「JCGGDB」を基盤とし、データベースの更新を継続し、さらにアジアや欧米のデータベースと連携を図り、国際的な糖鎖統合データベースの構築を実施した。

#### 1) 糖鎖統合データベースの運営と統合化支援、データベース更新作業

糖鎖統合データベース及び関連データベースについてインターフェースの改良作業やデータベース間の連携を強化した。検索機能の拡大、高速化等への対応や、データ収集のための支援、その他、データベースを利用するユーザーの利便性を意識したデータベースの運営を行った。さらに、データベースの Resource Description Framework (RDF)化を目指し、オントロジーの整備や、各国のバイオインフォマティクスの代表機関・協力機関と一緒に糖鎖構造の基本的な情報を共通の RDF 化を行った。

#### 2) 「GlycoEpitope」の新システムの開発と「GlycoPOD」の新規拡大

「GlycoEpitope」についてこれまで構築した API など新システムに合わせ改良し、データベースの運用を開始した。また、実験プロトコル集「Glycoscience Protocol Online Database」(GlycoPOD) について、プロトコルタイトル選定・執筆依頼・原稿のフォーム統一・ウェブ登録を行った。さらに、登録されている200にも及ぶ全てのプロトコルに記載されている単位・数字・メーカー名・試薬名・引用文献など表記の統一を行った。

#### 3) 糖鎖修飾データベース、糖鎖 NMR データベース、理研糖鎖コンフォメーションデータベースの開発

糖鎖修飾データベース修飾部位およびその糖鎖構造に関する情報を文献情報から抽出し、データベースを構築した。また、NMRデータベースの開発では、NMR測定条件や採用するデータについて検討を重ね、単糖、オリゴ糖、糖鎖などNMRスペクトルの収集およびNMR

シグナルの完全帰属を行った。さらに、理研糖鎖コンフォメーションデータベースの開発として、PDBに登録されている糖タンパク質・糖鎖関連タンパク質について、タンパク質の情報に加えて糖鎖に関しての付加価値情報（糖鎖の構造、2面角等）を付け加えたものをウェブデータベースとして公開するために検討を行い、NMR構造の動画表示やGene Ontologyの対応についても実施した。

#### 4) グライコナビデータベースの開発

複雑な糖鎖標準品の合成や同定のため、糖鎖標準品の合成を支援するデータベースとして、化学合成反応データベース「Syns」、分離精製法データベース「TLC」、精製法データベース「PurifM」の各データベースの開発を実施した。更に、セマンティックウェブのための新しい国際糖鎖標準表記法 Web3.0 Unique Representation Carbohydrate Structure (WURC) を開発し、曖昧な構造を含む様々な糖鎖構造について線形文字列として表記することを可能にした。

### 4. 事後評価結果

#### 4-1. 当初計画の達成度

本課題は、1) 糖鎖統合データベースの運営と統合化支援、データベース更新作業、2) 「GlycoEpitope」の新システムの開発と「GlycoPOD」の新規拡大、3) 糖鎖修飾データベース、糖鎖 NMR データベース、理研糖鎖コンフォメーションデータベースの開発、4) グライコナビデータベースの開発という、当初の計画を達成した。加えて、WURCS (Web3 Unique Representation of Carbohydrate Structures) の開発を新たに追加、実施し、糖鎖関連情報のデータの統合化が進んだ。

#### 4-2. 研究開発成果の公開および利用の状況等

開発された各種データベースは、「JCGGDB」のポータルサイトの形でまとめられ、開発されたすべてのデータベースが公開されている。「JCGGDB」サイトへは、月間ユニーク IP アクセス数は平均 4 千件程度と多く、利用者に活用されている。

#### 4-3. 研究開発成果によるライフサイエンス分野のデータ活用への波及効果

糖鎖の構造情報、様々な生物に由来する糖蛋白質、糖鎖抗体データ等の種類の糖鎖関連データベースが構築され、統一されたポータルサイトより提供されている。また、新規に糖鎖データの国際標準表記法も開発され、今後の糖鎖データの統合のための基盤が構築された。関連データベースとの統合により更に利便性が向上し、ライフサイエンス研究への貢献は大きいと考える。さらに、今後、糖鎖データベースの活用による糖鎖の機能解明や、バイオマーカーとしての応用等も期待できる。

#### 4-4. 広報・アウトリーチ活動等

論文発表、学会講演・発表などで研究成果を積極的に周知するとともに、展示会においても、成果の紹介を行っており評価できる。

#### 5. 総合評価

本課題は従来ある糖鎖統合化データベース「JCGGDB」の基盤の上に様々な糖鎖関連データの統合を進め、さらに、オントロジーの整備や国際連携をも積極的に進めている。糖鎖研究は日本が先行している分野であり、今後は日本主導でデータベースの整備・統合を引き続き進め、統合化データベースを長期的、安定した運営環境を整えるとともに、連携のためのデータ RDF 化や、データのリポジトリ機関化への試みを図り、糖鎖分野の国際的な統合データベースへ成長することが期待できる。さらに、「PDBj」や等々他分野データベースとの連携を実施していただきたい。