



平成25年10月5日 トーゴーの日シンポジウム2013

糖鎖科学を整理し発信するための標準化と統合化 ーその利用の実例を含めて

成松久

(独)産業技術総合研究所 糖鎖医工学研究センター



©2013 成松 久(産業技術総合研究所)licensed under CC表示2.1日本

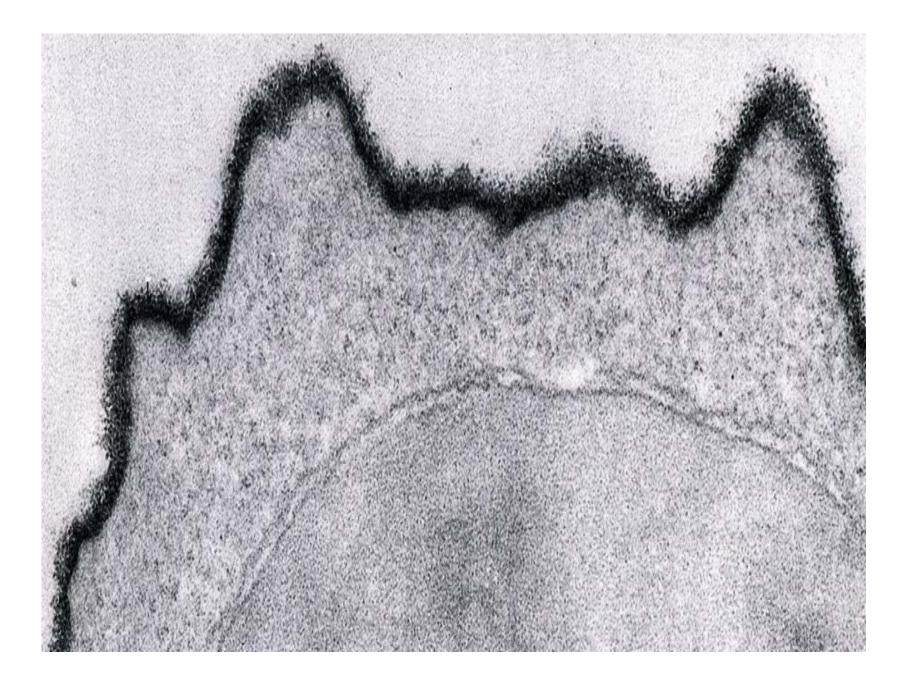
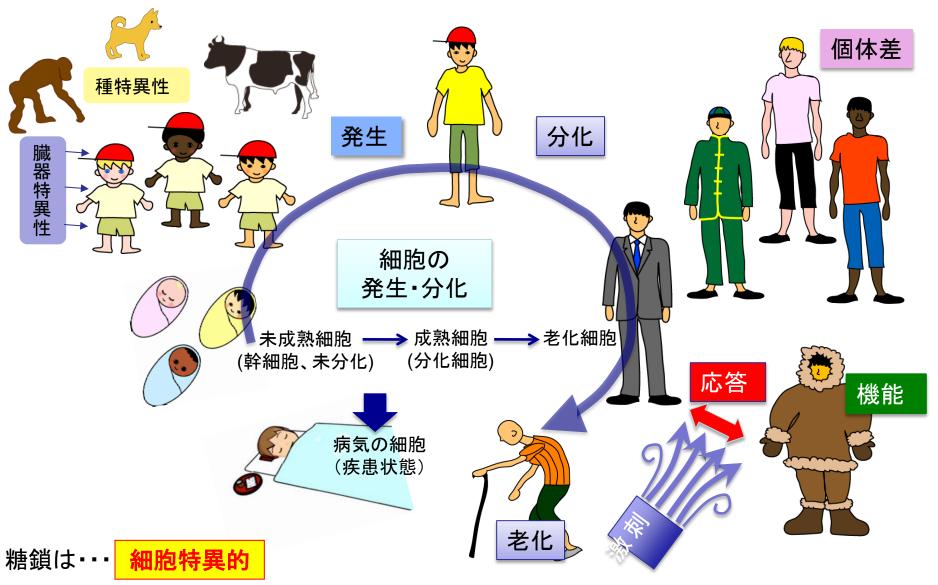




Image courtesy of Carolyn Bertozzi, Scott Laughlin, and Jeremy Baskin

糖鎖は細胞(タンパク質)の洋服のようなもの

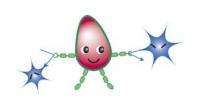


細胞の状態(発生分化や疾患状態)を反映している (細胞の状況に合わせて)様々な機能を有する

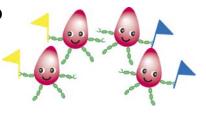
バイオマーカーとしての資質を有する (疾患マーカー、分化マーカー、機能マーカー)



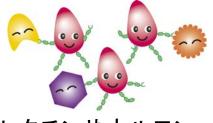
水に溶けやすくなる



タンパク質分解酵素から守る

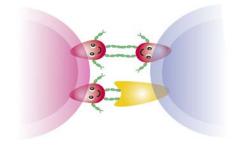


行き先を明確にする



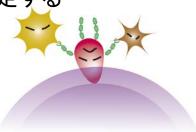
レクチンやホルモン、 増殖因子と結合する

糖鎖の機能

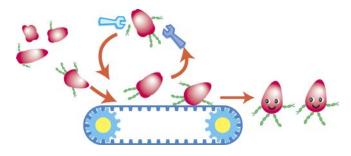


細胞と細胞を接着させる

糖タンパク質の代謝を決定する

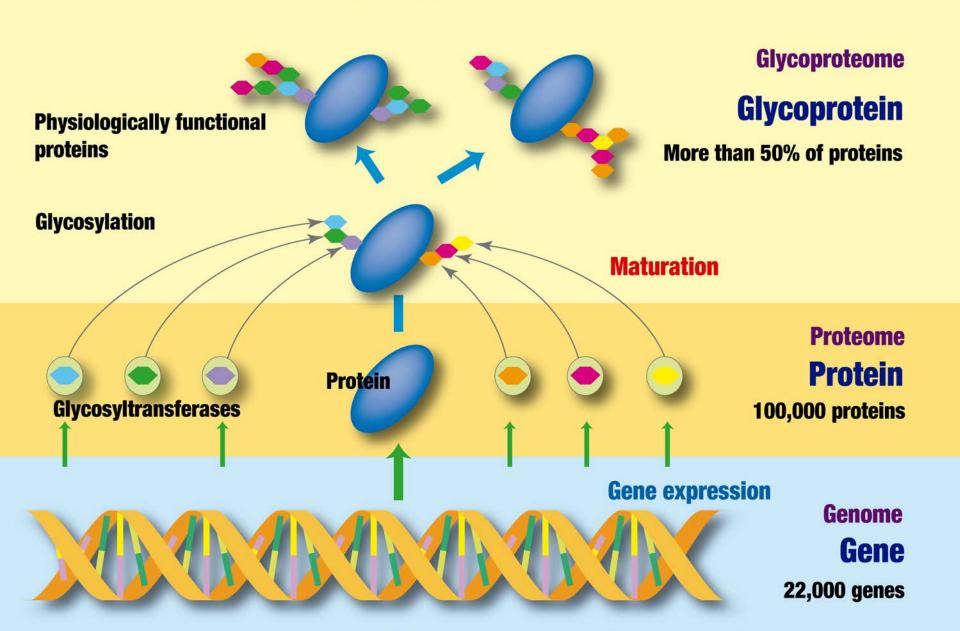


病原菌やウィルスの受容体となってしまう

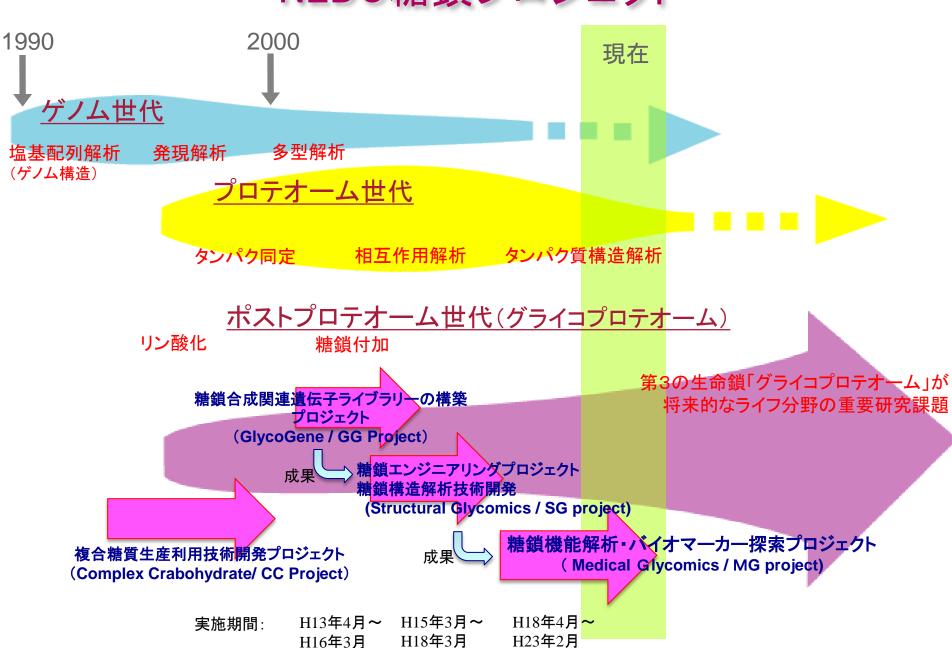


タンパク質の品質管理

Glycoproteomics



NEDO糖鎖プロジェクト







産総研糖鎖研究とNEDOプロジェクト

2001 2010 2000 2002 2003 2004 2005 2006 2007 2008 2009 2011 **GlycoGene** April 2001 ~ March 2004 / GG Project April 2003 ~ March 2006 **Structural Glycomics** / SG project **Medical Glycomics** / MG project April 2006 ~ March 2011 2011 2002 2008 2009 2010 2000 2001 2003 2004 2005 2006 2007 工業技術院 糖鎖工学研究センター 糖鎖医工学研究センター

April 2002 AIST founded

June 2002 RCG founded

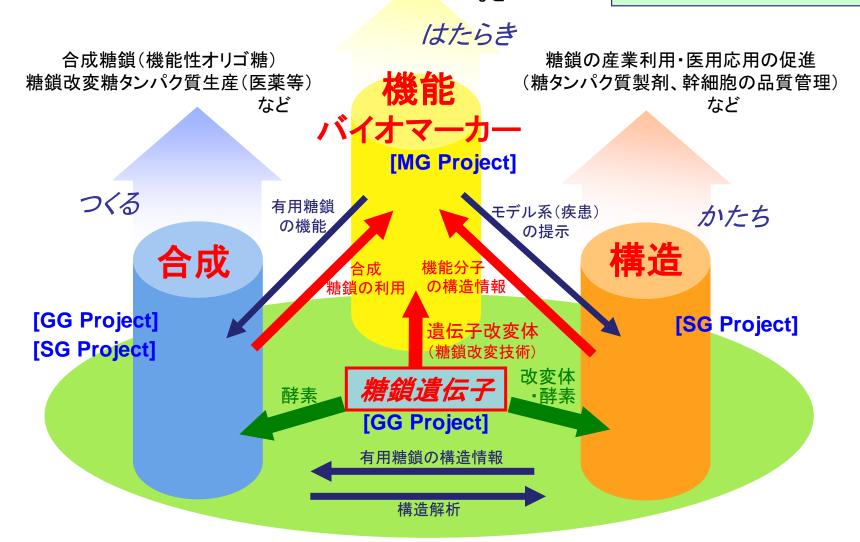
Dec 2006 RCMG founded

糖鎖研究の三本柱



糖鎖の産業利用 医用応用(新たな診断技術、バイオマーカー) など

糖鎖の基礎科学への貢献 糖鎖技術の実用化の促進



糖鎖遺伝子ライブラリー構築プロジェクト: GG project、糖鎖エンジニアリングプロジェクト(構造解析技術): SG project 糖鎖機能活用技術開発プロジェクト (糖鎖機能解析、糖鎖バイオマーカー開発): MG project



糖鎖医工学研究センターは世界屈指の 糖鎖解析技術開発ファクトリー



糖鎖遺伝子ライブラリー

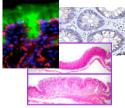
成松ら(2004) Glycoconj J. 岩井、成松ら (2005) PNAS. 佐藤、成松ら (2006) Glycobiology. 他 J. Biol. Chem 15報、FEBS lett. 5報など



糖鎖遺伝子改変技術

糖鎖改変細胞/マウス個体 (KO, Tgマウス)

栂谷内、成松ら(2007) PNAS. 栂谷内、成松ら(2010) PNAS. 佐藤、成松ら(2011) J. Biol. Chem.



糖鎖病理学・技術 ドラッグデリバリー(DDS)技術

糖鎖被覆リポソーム技術

池原、成松ら(2006) Cancer Res. 66, 8740 池原、成松ら (2008) Cancer Lett. 260, 137



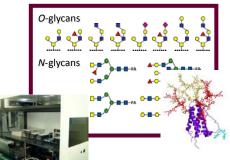
グライコキャッチ法/IGOT法 グライコプロテオミクス技術

平林、梶ら(2002) J. Biochem. 梶ら (2003) Nature Biotechnol. 梶ら (2006) Nature Protocol.



jCGGDB バイオインフォマティクス技術 データベース (JCGGDB)

菊池、成松ら(2006) Biochim Biophys Acta.



糖鎖合成 (糖鎖, 糖ペプチド, 糖タンパク質)

糖鎖(糖ペプチド)ライブラリー

伊藤、成松ら(2005) Angew Chem Int Ed Engl. 伊藤、成松ら(2007) Nat Methods. 天野、成松ら(2008) PNAS.





久野ら (2005) Nature Methods. 加藤、成松ら (2006) BBRC.

松田、久野ら (2008) BBRC.

久野、成松ら (2009) Mol Cell Proteomics.

松田、久野、成松ら (2010) Hepatology.

久野、成松ら (2011) Clinical Chemistry.



糖鎖遺伝子 qPCRアレイ 遺伝子発現解析システム

2 4 6 8 10 12 14 16 18 20 22 24 26 28 30 32 34 36 38 40 42 44 48 48 50 50

伊藤、久野、成松ら(2009) J Proteome Res.

糖鎖構造解析システム



質量分析 SMME法 SE法

亀山、成松ら(2005) Anal Chem.

亀山、成松ら (2006) J Proteome Res.

豊田、成松ら (2008) Anal Chem.

松野、成松ら (2009) Anal Chem.

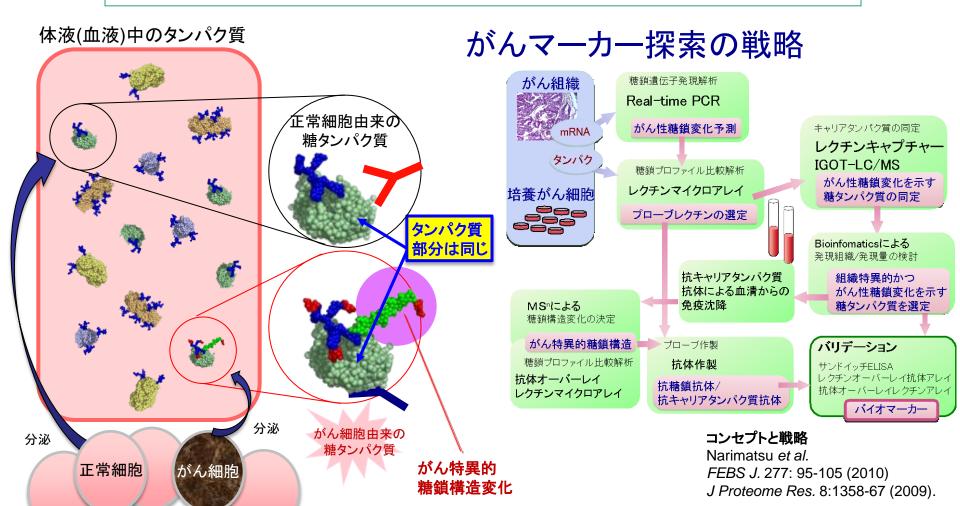
豊田、成松ら (2009) Anal Chem.

松野、成松ら (2011) Electrophoresis.

糖タンパク質バイオマーカー開発の基本理念

"がん化・病態の変化により糖鎖構造は変化する": MGコンセプト

タンパク質部分が同じであっても、疾患(細胞)状態の変化に伴って、 その上の糖鎖構造が異なっている



世界初血中線維化糖タンパク質マーカーの直接迅速自動測定系開発に成功

1. 採血





2. On-site assay (<30 min)

PLT counting Biochemical assay



3. 同日診断

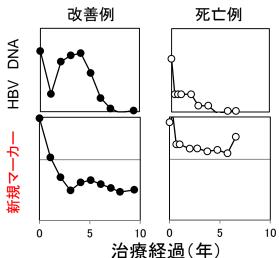


RCMG発





抗ウイルス薬の迅速 治療効果判定も可能に!



FibroScan



•安価

比較

- •全自動
- ·全行程17分 (180検体/時間)
- ・前処理なし
- •炎症などの影響なし
- 既存マーカーを超える (FIB-4, APRI, ヒアルロン酸, コラーゲン)



JCGGDB データベース開発



現在公開中のデータベース

糖鎖関連遺伝子

- 糖転移酵素·糖分解酵素
- 糖ヌクレオチド輸送体
- · 硫酸転移酵素
- ・レクチン
- ・合成と分解パスウェイ
- ライブラリー化

糖鎖欠損動物·糖鎖改変動物

- フェノタイプ解析
- ライブラリー化。

糖鎖関連疾患

- · 先天代謝異常
- 癌転移
- ・感染
- ・アレルギー

感染と糖鎖の 関連情報をDB化

糖鎖プロセシングの 阻害剤DB

糖鎖生合成・分解パスウェイ

日本糖鎖科学 総合データベース (糖鎖のポータルサイト)

JCGGDB

糖鎖機能に関するオンラインリポート

- ・タンパク質の機能調節
- 細胞間コミュニケーション

糖鎖関連特許の整備と DBとの連携

研究プロトコル公開

糖鎖大量合成

- ・ケミカル
- ライブラリー化

糖鎖構造

糖鎖構造の分析・検出

- 質量分析計
- · 2-D / 3-D 糖鎖マッピング法
- 糖鎖抗体
- ・レクチン

糖タンパク質

生物種別、組織別のタンパク質 およびその糖鎖構造

糖鎖関連分化マーカー

· 癌、免疫、再生医療、受精

リソース(サンプル・技術・情報)共有/

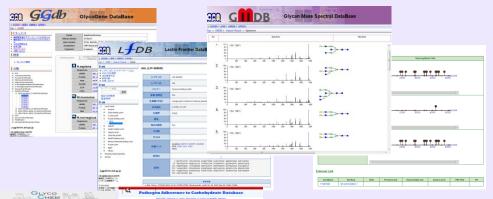
技術支援(底上げ)

異分野との共同研究 への発展



JCGGDB Alliance

産総研・糖鎖センターのDB

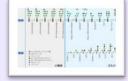


BORY A STATEMENT BY MARKET BY THE PROPERTY OF THE PROPERTY OF



GlycoGene Inhibitors database

Pathway database







Glycosidase database

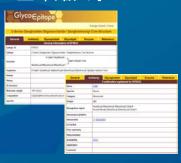
- データの拡充
- 検索機能強化
- 統合化推進



Glycotechnology Patents database

JCGGDB Report

立命館大学



野口研究所



名古屋大学•産総研

Knockout Mouse DB

創価大学

FlyGlyco DB

名古屋市立大学

2

KEGG

京都大学

生化学工業

Glycan Synthesis DB

野口研·産総研 LipidBank構築委員会



理研・システム糖鎖

N-glycan Conformation DB



Worm database

九州大学



5つの検索インターフェースを開発



キーワード

横断検索



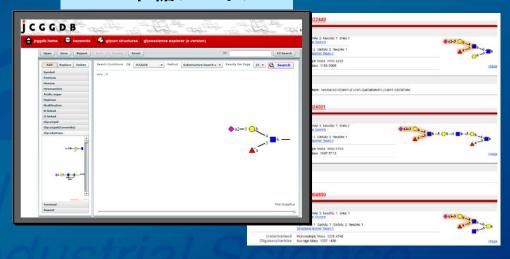
共起を利用した統合検索

Glycoscience Explorer (α version) All Method Glycan Function Disease Others All Method Glycan Function Disease Others Max Count 20 ▼ Numan, servin glycagesterius prosence pegide pegide prosence pegide pegide schema servin pegides F schema servin pegides F schema protein prosence pegides protein protein schema protein protein pegides F schema protein protein protein protein pegides F schema protein protein

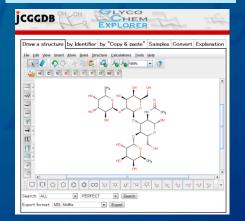


構造検索

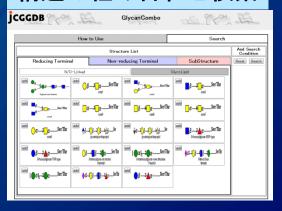
CFG 単糖シンボル



化学構造から検索



構造の組み合わせ検索





糖鎖構造検索システム



糖鎖生物学者用と化学者が使い慣れた検索インターフェースを公開している。 同じデータを検索することができる。

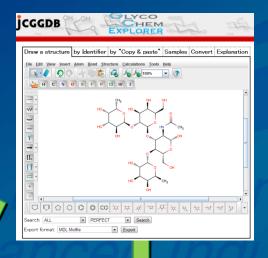
GlycosideDB



70000 entries



GG Inhibitior DB 286 entries



Organic Chemical Synthesis database

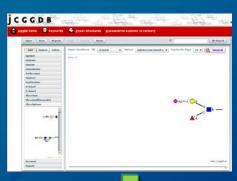
CompndDB:3975構造 反応経路DB:反応数:887

Noguchi Institute
Gifu Univ. others
(supported by AIST)

Searching Mode

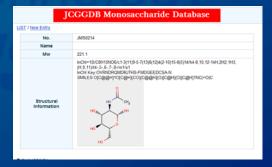
Full structure
Substructure

Super Structure





JMSDB 950 entries









キーワード検索や統合化のために 糖鎖構造の名称や構造表記のシノニム整備

Gb3

Sialyl Lewis x	
Slalyi Lewis A	
AB002019	Abbreviation "sLex" stands for sialyl Lewis X.
AB002020	Abbreviation "SLex" stands for Sialyl Lewisx.
AB002021	Abbreviation "SLex" stands for sialyl Lex.
AB002022	Abbreviation "sLex" stands for sialyl-Lex.
AB002023	Abbreviation "SLex" stands for sLex.
GPH00002573	Sialyl Lewisx
GPH00002575	Sialyl-Lewis x
GPH00011187	sialyl Lewis X
GPH00011189	sialyl Lewis X tetrasaccharide
GPH00011191	sialyl Lewis x
GPH00011194	sialyl LewisX
GPH00011195	sialyl Lewisx
GPH00011197	sialyl Lex
GPH00011201	sialyl-Lewis X
GPH00011202	sialyl-Lewis x
GPH00011203	sialyl-Lewisx motif
GPH00017775	sialyl Lewis x structures
GPH00018102	sialyl Lewis x (SLex) tetrasaccharide
GPH00023449	sialyl LeX
GPH00024609	sLex structures
GW00002868	• SLex
GW00010085	• sLex
GW00010310	sialyl-Lewisx
GW00011620	• sLeX
GW00015548	; Sia[alpha2]-3Gal[beta1]-4(Fuc[alpha1]-3)GlcNAc[beta]OR
GW00017014	• Slex
GW00017150	sialyl-LewisX
GW00017152	sialyl-Lex
GW00018375	; Neu5Ac[alpha2],3Gal[beta1],4(Fuc[alpha1],3)GlcNAc[beta]OR
GW00018385	; NeuAc[alpha2],3Gal[beta4][Fuc[alpha3]]GlcNAc-R
GW00018387	; NeuAc[alpha]1-3Gal[beta]1-4[Fuc[alpha]1-3]GlcNAc-
GW00020716	sialyl-LeX
	ST0157:sialyl Lewis x ; Neu5Ac[alpha2-3]Gal[beta1-4](Fuc[alpha1-3])GlcNAc

AB000889	Abbreviation "Gb3" stands for CD77. Abbreviation "Gb3" stands for Gal[alpha1-4]Gal[beta1-4]Glc-Cer. Abbreviation "Gb3" stands for globotriaosylceramide. Abbreviation "Gb3" stands for globotriosylceramide. Abbreviation "Gb3" stands for pk blood group antigen. Abbreviation "Gb3Cer" stands for globotriaosylceramide.
AB001698	Abbreviation "Pk antigen" stands for Gal[alpha1-4]Gal[beta1-4]Glc.
GPH00002304	Pk antigen
GPH00010157	pk blood group antigen
GPH00030327	Gb3Cer (d18:1, C16:0)
GPH00041505	globo-series GSLs Gb3Cer
GPH00049024	pk blood group antigens
GW00000556	• CD77
GW00001286	• Gb3
GW00001288	Gb3Cer
GW00006561	globotriaosylceramide
GW00017071	• globotriaose
GW00017072	globotriosylceramide
GW00017886	• ; Gal[alpha4]Gal[beta4]Glc
α β	ST0135:Pk antigen ; Gal[alpha1-4]Gal[beta1-4]Glc

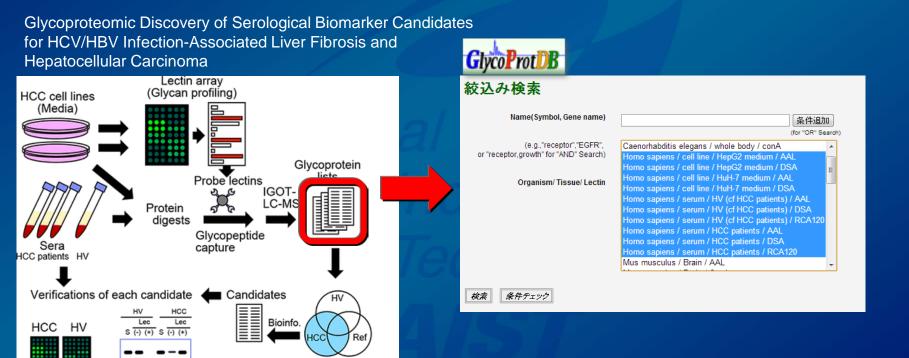
DBや論文で利用されている名称には 著者の書き方の違いでシノニムが増えている。 シノニムを整備しDBに格納している 糖鎖構造IDに結びつける







トの培養細胞(HepG2, Huh-7)の培地由来、健常者と肝細胞癌(HCC)患者の血清由来の糖タンパク質446種類の糖鎖付加位置の情報を公開した。



Kaji et al., J Proteome Res. 2013 Jun 7;12(6):2630-40

Lectin fractionation

& western blotting

IP & ALP

Glycoprotein profile

comparison

(Selection of candidates)



実験プロトコルデータベース~GlycoPOD~



| Topic | Topi

GlycoPODとは、経験に依存する部分が多い 糖質科学の実験において、糖鎖研究の初心者 にもわかりやすい実験手法を掲載したDBであ る。

約195名の糖鎖科学研究者に執筆依頼し、平成25年度末までに15分野の約220プロトコルの公開を予定している。また、米国のグループも参加している。

各操作のノウハウや注意書きも追記できる。 現在は、ユーザが執筆者とQ&Aについてシス テム上でやり取りできるようになっている。

Epitope Search | Home

Reference



GlycoEpitope Database

http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/

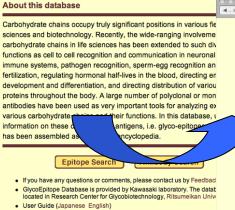
EP0009

3'-Sulfo Lewis a

Page 1 of 14 | Next

Epitope ID

Epitope



+ http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope-bin/epitope_list.cgi Q+ Google GlycoEpitope Epitope Search | Home Sort by Epitope \$ Show: 10 /page HSO3(-3)Gal(b1-3)[Fuc(a1-4)]GlcNAc(b1-)-R 3'-Sulfo Lewis x 6'-Sulfo Sialyl Lewis Neu5Ac(a2-3)[HSO3(-6)]Gal(b1-4)[Fuc(a1-3)]GlcNAc(b1-)-R 6,6'- Disulfo Sialyl

HSO3(-6)Gal(b1-4)[HSO3(-6)]GlcNAc(b1-)-F

Gal(b1-4)(Fuc(a1-3))(HSO3(-6))(GlcNAc(b1-)-R

Neu5Ac9Ac(a2-8)Neu5Ac(a2-3)Gal(b1-4)Glc(b1-1)Ce

Gal(b1-4)(HSO3(-6))GlcNAc(b1-)-R

HSO3(-6)Gal(b1-4)fHSO3(-6))GlcNAc(b1-3)fHSO3(-6))Gal(b1

平成25年度 新規抗体30件を 収載予定

糖鎖抗原・抗体の 機能データベース

Acknowledgements

HSO3(-3)Gal(b1-3)(Fuc(a1-4))GlcNAc(b1-)-R 〈背景〉平成17年 立命館大学糖鎖工学研究センタ―に創設

研究者がインターネット経由でデータベースの作成に参加

<内容> 174 Epitopes, 613 Antibodies (2013.09.28)

糖鎖エピトープを発現する糖タンパク質、糖脂質、プロテオグリカン、植物多糖

Lewisx 6.6'-Sulfo LacNAc

6 6 6'-Sulfo LacNAc

6-Sulfo LacNAc

6-Sulfo Lewis x

9-O-Acetyl GD3

9-O-Acetyl Sialic

FP0145

EP0141

糖鎖エピトープの合成や分解に関与する生合成酵素および分解酵素

糖鎖エピトープの発現する時期・場所、糖鎖エピトープの関連する疾病

糖鎖認識抗体の入手先

引用文献:PubMedへのリンク、PDFファイルに直接リンク

データの管理・JCGGDBとの連 携できるように新システム導入

Glycoprotein Glycolipid

GIcNAcβ1-R



糖鎖合成支援ツールの開発

有機化学による糖鎖合成のプロトコル・合成反応をDB化

糖質合成データベースワーキ ンググループ(CSDWG)によ るデータ収集。野口研&産総 研によるデータ入力。

WG参加:東北大学・東 海大学・東京工業大学・ 新潟薬科大学・岐阜大

学・大阪大学

Noguchi R

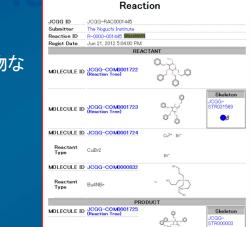
RIKEN

AIST

構造確認のための情報提供

JCGGDBの構造検索や詳細画面からアクセスできる

合成支援



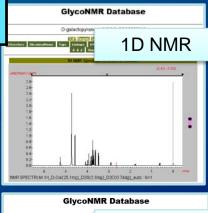
Structure ChemicalName Type Linkage Other Spectra Spectrum ChemicalShift CouplingConstant 8 & J Condition Comment All

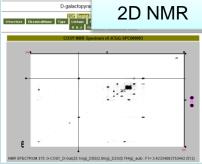
H37 Chemical Name D-galactopyranose D-galactose D-gala

D-galactopyranose [JCGG-SPC000001]

構造のチェック

- •NMRのスペクトル比較ツール
- ・実験条件の統一化されたデータ





- ・反応物・生成物な どの構造検索
- •合成経路検索
- ・ツールの開発

Noguchi

AIST



糖鎖関連データベースの利用例

Query=Sialyl Lewis x



JCGG-STR013232



EP0012



Gene

MUC₁

















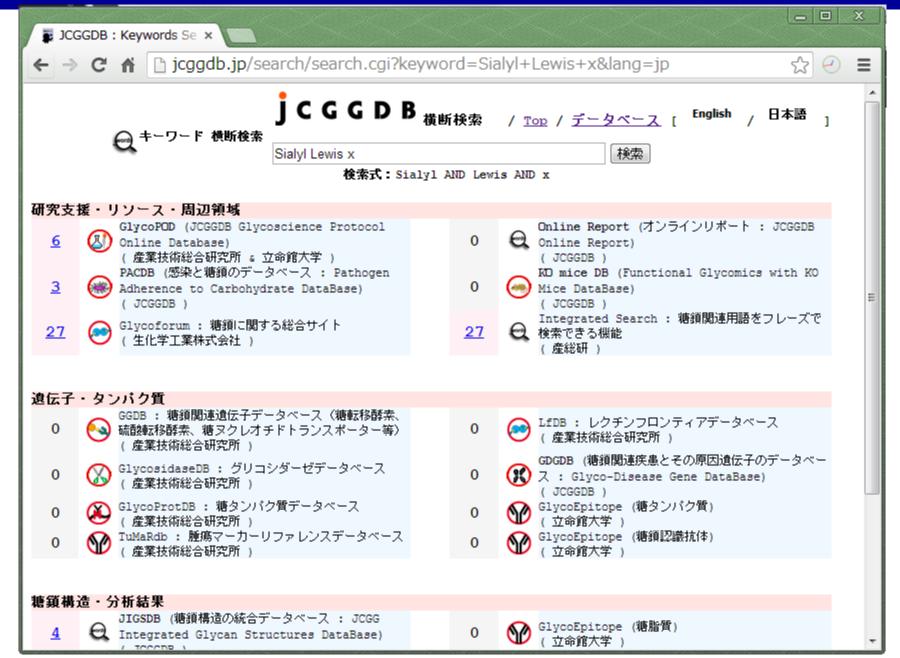




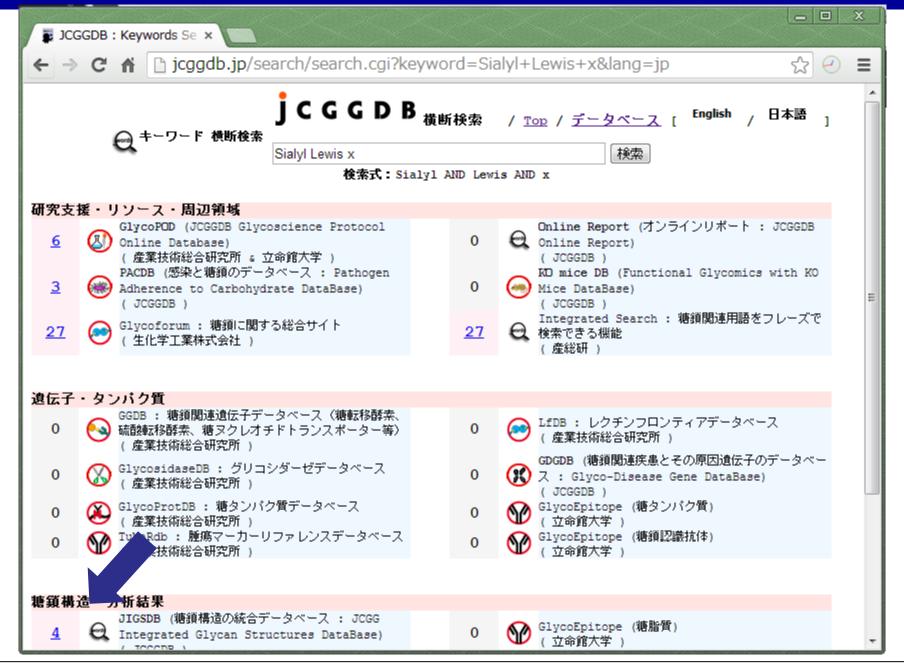




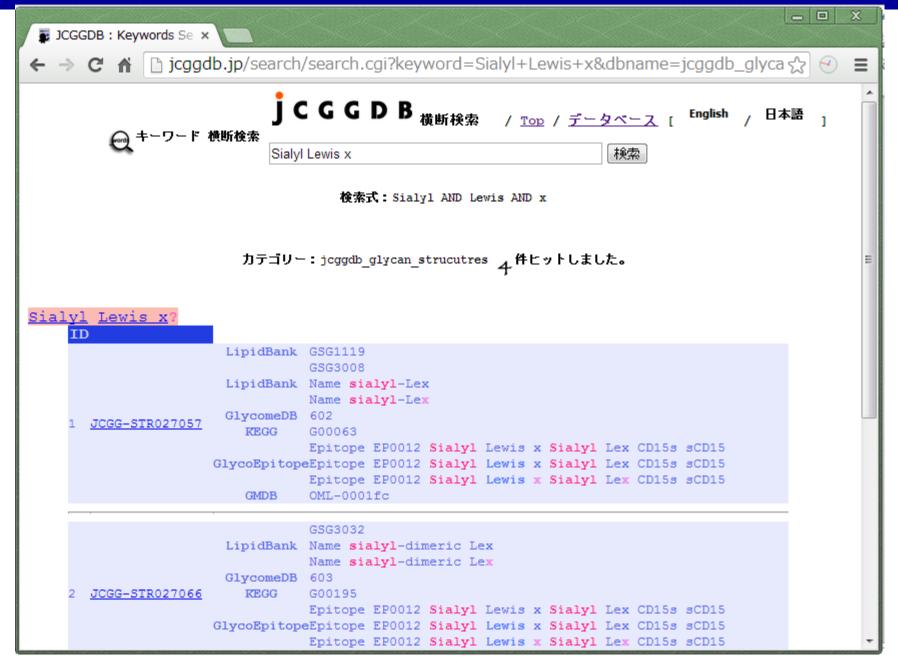




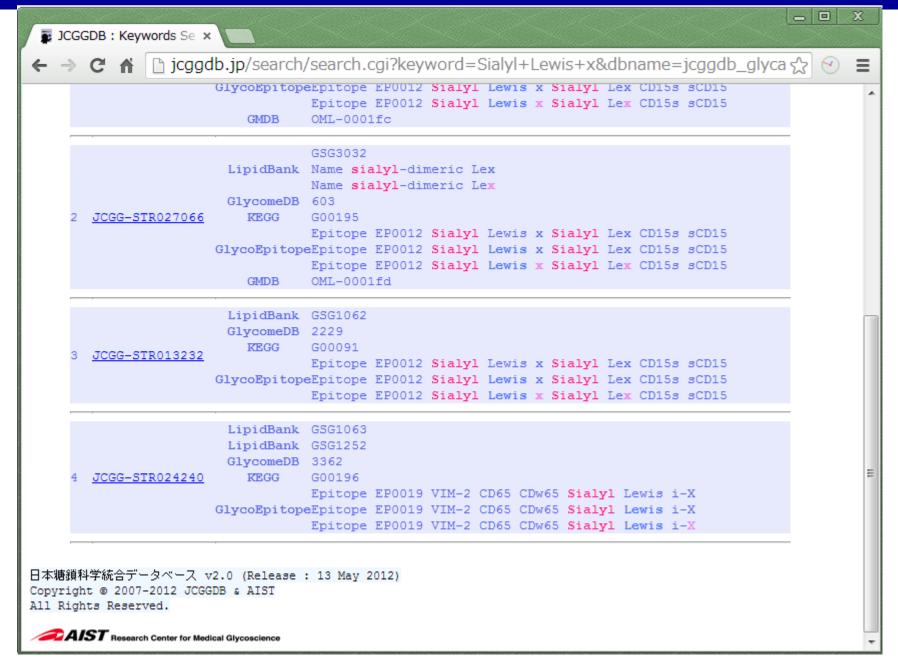




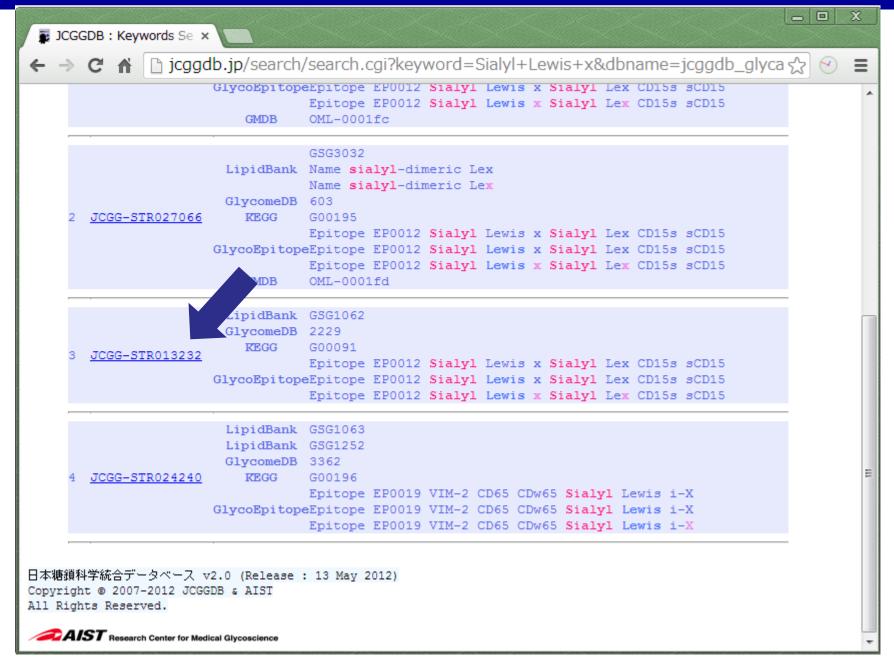




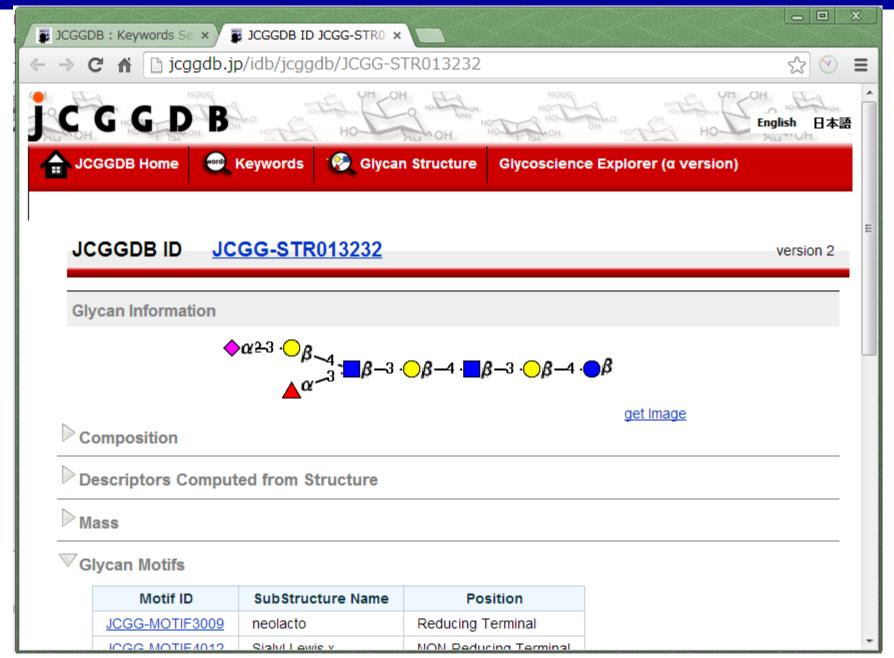




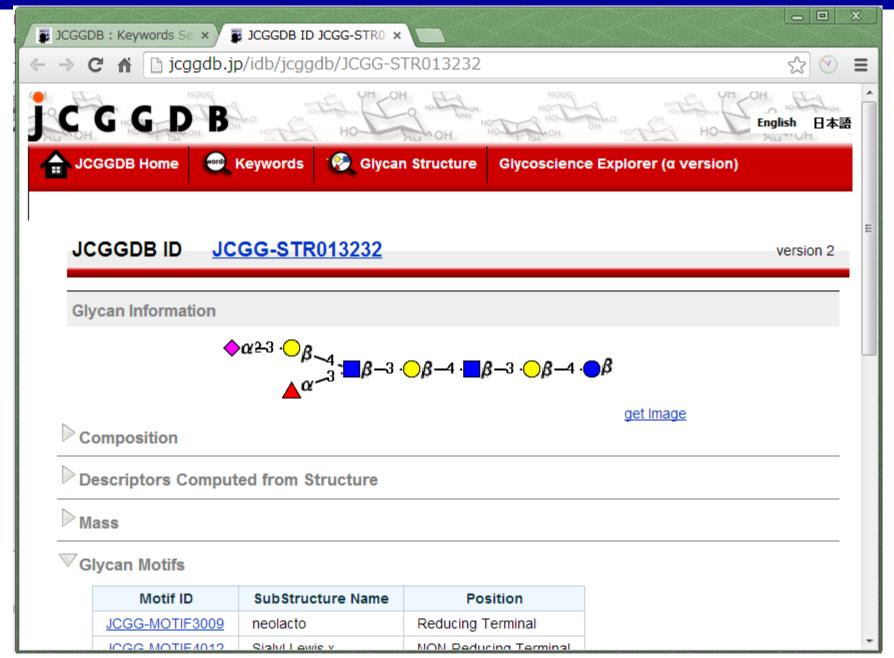




















JCGG JGD-000565

Reducing terminal: (b1-1)Cer

LipidBank (Spectral Data) GSG1062

Description: NeuAc2-3Galβ1-4(Fucα1-3)GlcNAcβ1-3Galβ1-4GlcNAcβ1-3Galβ1-4GlcCer

Reducing terminal: (b1-)Cer

GlycomeDB (Structure)

2229

KEGG (Structure) G00091

Name: sY2

Description: VI3Neu5AcV3FucnLc6Cer

Reducing terminal: (b1-1)Cer

(Antiglycan Antibody)

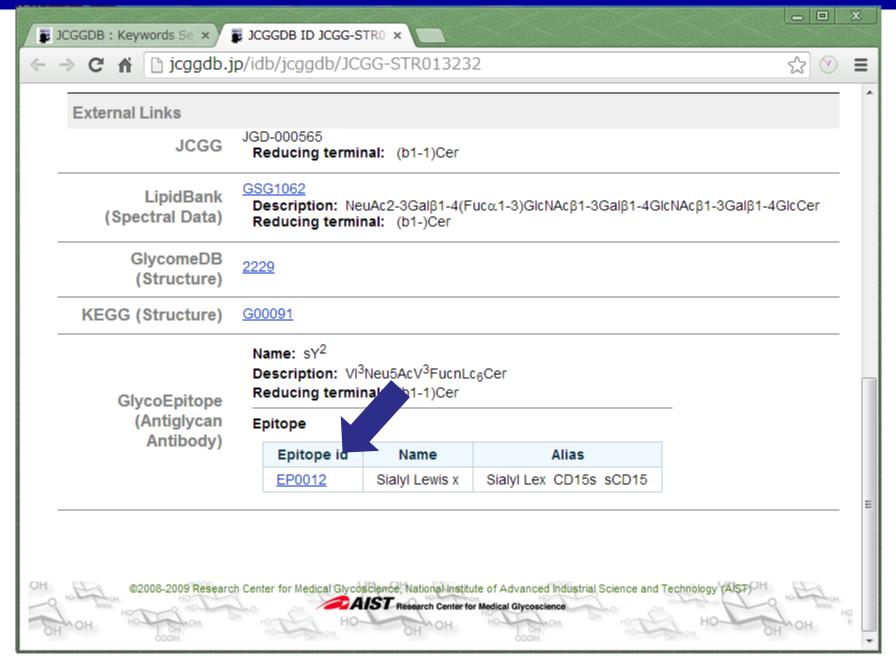
Epitope

Epitope id	Name	Alias
EP0012	Sialyl Lewis x	Sialyl Lex CD15s sCD15

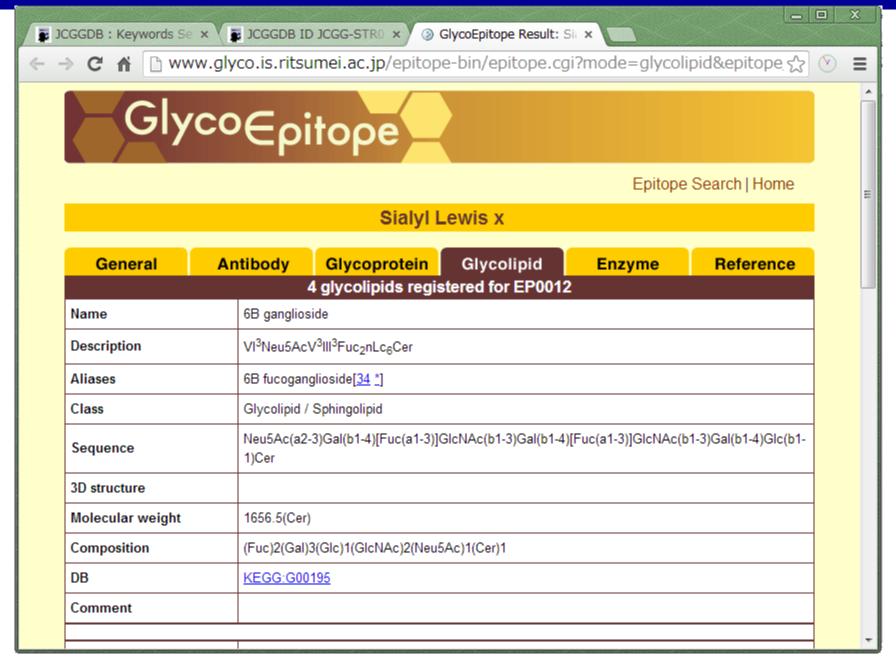
©2008-2009 Research Center for Medical Glycoscience, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

AIST Research Center for Medical Glycoscience

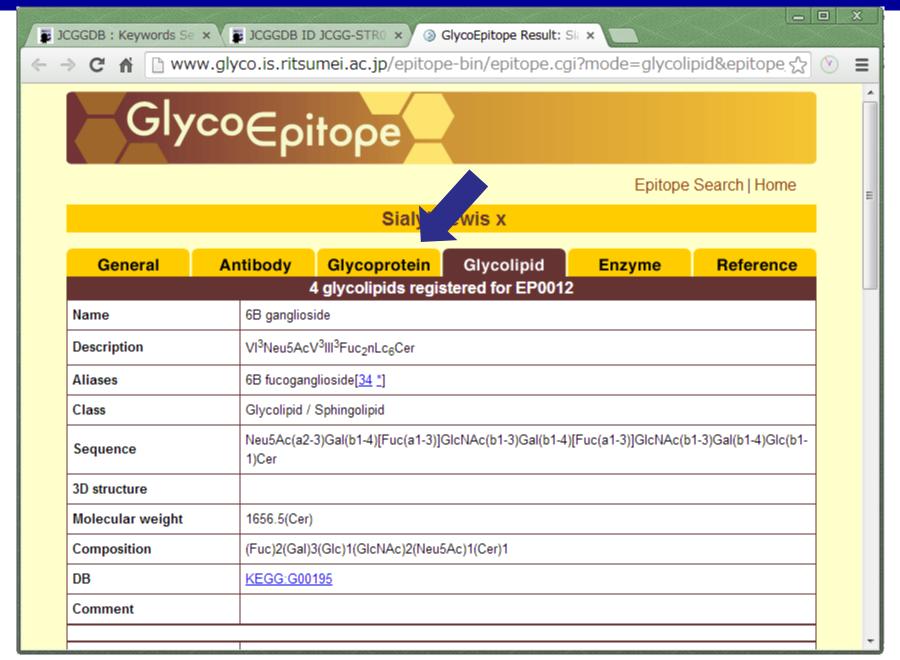




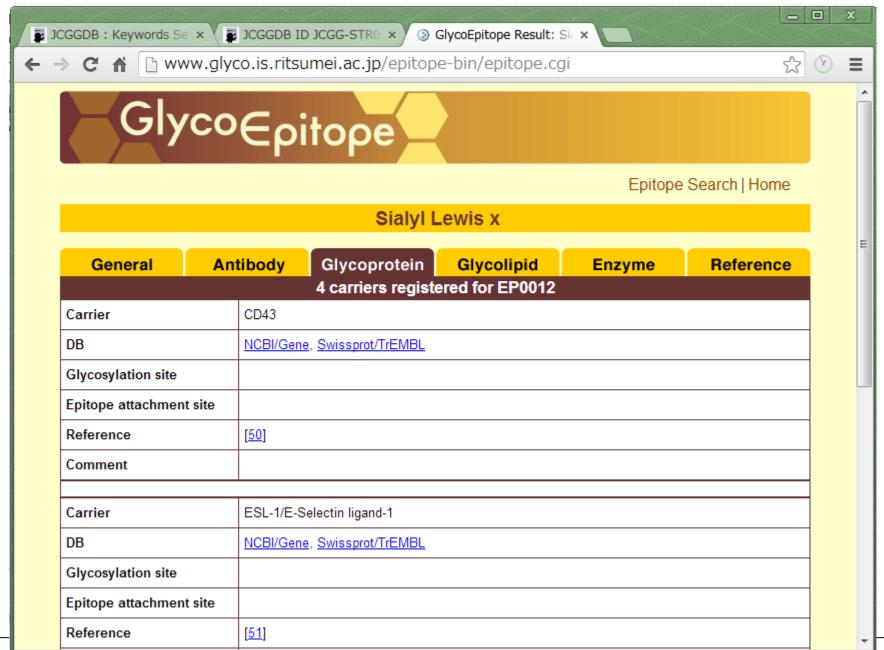








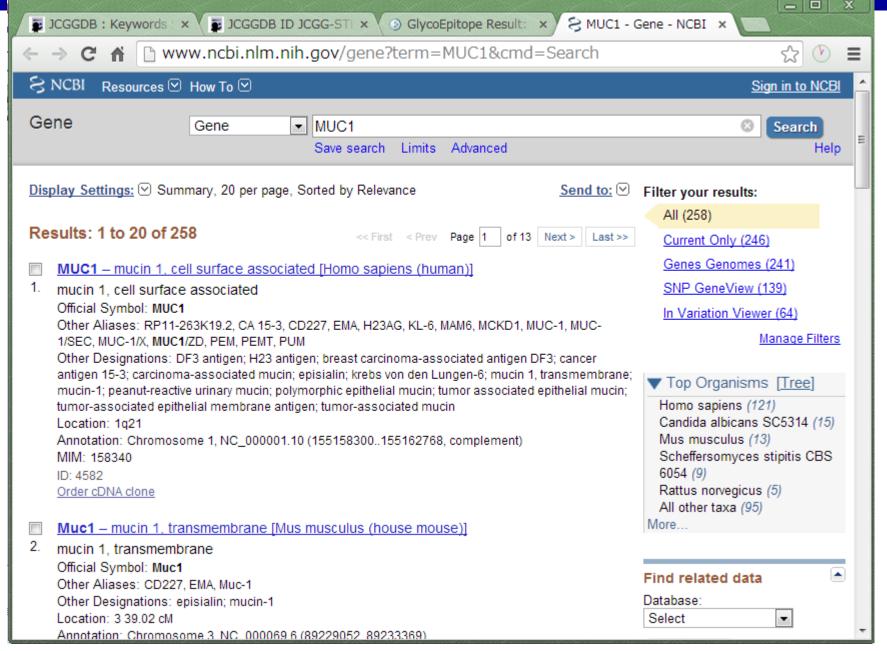






	vco.is.ritsumei.ac.jp/epitope-bin/epitope.cgi ☆	
Glycosylation site		
Epitope attachment site		
Reference	[<u>51</u>]	
Comment		
Carrier	MUC1	
DB NCBI/Gene, Swissprot/TrEMBL		
Glycosylation site		
Epitope attachment site		
Reference [50]		
Comment		
Carrier	PSGL-1/P-Selectin glycoprotein ligand-1	
DB	NCBI/Gene, Swissprot/TrEMBL, PDB	
Glycosylation site		
Epitope attachment site		
Reference	[<u>52</u> <u>*</u>]	
Comment		







Semantic Web

- リンクしている情報を自動的に取得するため、 データベースを統合する必要がある
- JCGGDBのデータベースおよび海外の糖鎖データベースを統合するために、Semantic Web技術が不可欠 → 標準化+海外連携で達成する
- ・ 糖鎖構造の標準化
 - WURCS: 糖鎖配列の表記法を考案した
 - ・曖昧な構造も立体異性も含む
- 糖鎖関連の情報の標準化
 - 糖タンパク質、糖脂質情報
 - 実験情報(環境、試料、プロトコルなど)
 - 文献情報
 - 格納されているデータベース



海外連携

- Hackathon
 - 2012年富山
 - ・ GlycomeDB, UniCarbKB, CSDB, MonosaccharideDB, JCGGDBの 共同参加
 - · 糖鎖データベースのRDF化
 - SPARQLクエリー
 - ・ WURCSの開発
 - 2013年つくば糖鎖ハッカソン
 - · WURCSの開発(つづき)
 - ・ 日本版糖鎖オントロジーの開発
 - 2013年大連糖鎖ハッカソン(東京バイオハッカソンと同時 開催)
 - ・ GlycomeDB, UniCarbKB, CSDB, GlycoNAVI, JCGGDBの共同参加
 - 糖鎖オントロジーの開発



富山BioHackathonの成果

- 既存のデータベースのRDF化(プロトタイプ)が完成
- SPARQLクエリーの使用実例の作成及び 成功

• WURCSの基盤開発



富山BioHackathonの成果

- RDF 化されたデータ:
 - GlycomeDB,
 - Bacterial Carbohydrate Structure Database (BCSDB),
 - MonosaccharideDB,
 - GlycoEpitope,
 - UniCarbKB and
 - LfDB and GlycoProtDB (JCGGDBの一部)
- トリプルストアに全RDFデータを格納した
- SPARQLの実行に成功した



SPARQL Queries

- JCGGDBに格納されている糖鎖構造に関連するタンパク質のUniProt IDは何か?
- あるレクチンに関連する糖鎖構造全てを取得したい
- 糖鎖のエピトープを持つ糖タンパク質は何か?

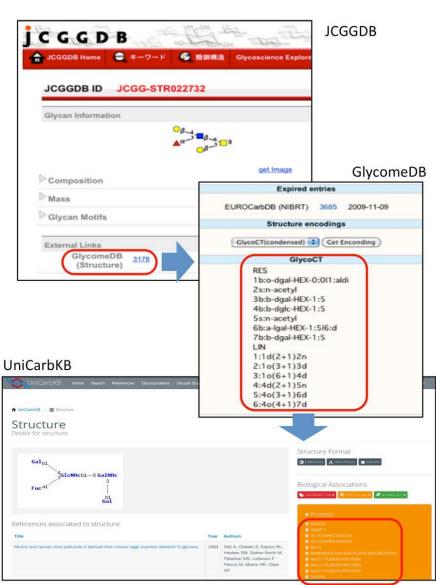


PREFIX glyco: http://purl.jp/bio/12/>

JCGGDBに格納されている糖鎖構造に関連するタンパク質

のUniProt IDは何か?

res	protein	
http://jcggdb.jp/idb/jcggdb/JCGG-STR022732	http://www.unicarbkb.org/protein/Q8TAX7	
http://jcggdb.jp/idb/jcggdb/JCGG-STR017727	http://www.unicarbkb.org/protein/Q8TAX7	
http://jcggdb.jp/idb/jcggdb/JCGG-STR027414	http://www.unicarbkb.org/protein/Q8TAX7	
http://jcggdb.jp/idb/jcggdb/JCGG-STR002960	http://www.unicarbkb.org/protein/Q8TAX7	
http://jcggdb.jp/idb/jcggdb/JCGG-STR002949	http://www.unicarbkb.org/protein/Q8TAX7	
http://jcggdb.jp/idb/jcggdb/JCGG-STR026204	http://www.unicarbkb.org/protein/Q8TAX7	
http://jcggdb.jp/idb/jcggdb/JCGG-STR022721	http://www.unicarbkb.org/protein/Q8TAX7	
http://jcggdb.jp/idb/jcggdb/JCGG-STR029072	http://www.unicarbkb.org/protein/Q8TAX7	



Protein list (UniProt IDs)



あるレクチンに関連する糖鎖構造全てを取得したい

PREFIX glyco: <http://purl.jp/bio/12/glyco#> PREFIX glycoSequence: <http://purl.jp/bio/12/glycanSequence/0.1/>

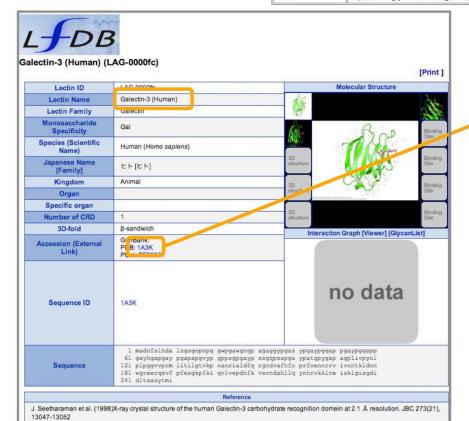
select ?Iname ?glycomedb ?seq where {

?glycomedb ?p5 ?pdbid . ?lectin glyco:has_PDBID ?pdbid . ?lectin glyco:has_name ?lname .

?glycomedb ripycomedbseq">ripycomedbseq ripybio/12/glycanSequence/0.1/in_glycott <a href="mailto:ripybio/12/glycanSequence/0.1/in_glycanSequence/0.1/

filter(regex(?glycomedb, "glycome-db.org"))

Iname	glycomedb	seq
EcorL	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/3601	RES 1b:a-dgal-HEX-1:5
LCA	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/394	RES 1b:b-dara-HEX-2:5 2:keto 2b:a-dglc-HEX-1:5 LIN 1:1o(2+1)2d
LcH	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/394	RES 1b:b-dara-HEX-2:5 2:keto 2b:a-dglc-HEX-1:5 LIN 1:1o(2+1)2d
Galectin-3 (Human)	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/1338	RES 1b:x-dglc-HEX-1:5 2s:n-acetyl 3b:b-dgal-HEX-1:5 LIN 1:1d(2+1)2n 2:1o(4+1)3d
ACA	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/475	RES 1b:a-dgal-HEX-1:5 2s:n-acetyl 3b:b-dgal-HEX-1:5 LIN 1:1d(2+1)2n 2:1o(3+1)3d
ACA	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/475	RES 1b:a-dgal-HEX-1:5 2s:n-acetyl 3b:b-dgal-HEX-1:5 LIN 1:1d(2+1)2n 2:1o(3+1)3d
ACA	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/475	RES 1b:a-dgal-HEX-1:5 2s:n-acetyl 3b:b-dgal-HEX-1:5 LIN 1:1d(2+1)2n 2:1o(3+1)3d
ACA	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/475	RES 1b:a-dgal-HEX-1:5 2s:n-acetyl 3b:b-dgal-HEX-1:5 LIN 1:1d(2+1)2n 2:1o(3+1)3d
MPA	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/475	RES 1b:a-dgal-HEX-1:5 2s:n-acetyl 3b:b-dgal-HEX-1:5 LIN 1:1d(2+1)2n 2:1o(3+1)3d
MPA	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/475	RES 1b:a-dgal-HEX-1:5 2s:n-acetyl 3b:b-dgal-HEX-1:5 LIN 1:1d(2+1)2n 2:1o(3+1)3c
MPA	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/475	RES 1b:a-dgal-HEX-1:5 2s:n-acetyl 3b:b-dgal-HEX-1:5 LIN 1:1d(2+1)2n 2:1o(3+1)3c
MPA	http://www.glycome-db.org/rdf/glycan/475	RES 1b:a-dgal-HEX-1:5 2s:n-acetyl 3b:b-dgal-HEX-1:5 LIN 1:1d(2+1)2n 2:1o(3+1)3d



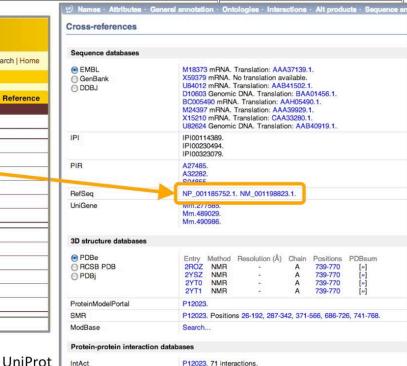




糖鎖のエピトープを持つ糖タンパク質は何か?

antibody_id	refseq
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0008	http://identifiers.org/refseq/NP_035005
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0008	http://identifiers.org/refseq/NP_001074914
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0008	http://identifiers.org/refseq/NP_001106675
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0011	http://identifiers.org/refseq/NP_035005
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0011	http://identifiers.org/refseq/NP_001074914
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0011	http://identifiers.org/refseq/NP_001106675
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0025	http://identifiers.org/refseq/NP_035005
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0025	http://identifiers.org/refseq/NP_001074914
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0025	http://identifiers.org/refseq/NP_001106675
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0112	http://identifiers.org/refseq/NP_035005
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0112	http://identifiers.org/refseq/NP_001074914
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0112	http://identifiers.org/refseq/NP_001106675
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0113	http://identifiers.org/refseq/NP_035005
http://www.glyco.is.ritsumei.ac.jp/epitope2/epitopes/AN0113	http://identifiers.org/refseq/NP_001074914







富山BioHackathonの成果

- 既存のデータベースのRDF化(プロトタイプ)が完成
- SPARQLクエリーの使用実例の作成及び 成功

• WURCSの基盤開発



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

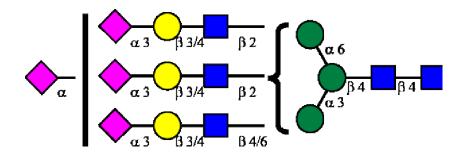


Man

単糖名(複数可):
β-D-Galp
β-D-GlcpNAc
?-D-GlcpNAc
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



 $\begin{aligned} &\text{WURCS=1.0/15,14/[a1d21122h|2,6|5*NCC/3=O][a1d21122h|2,6|5*NCC/3=O][12112h|1,5][12122h|1,5|2*NCC/3=O][12112h|1,5][12122h|1,5|2*NCC/3=O][12112h|1,5][12122h|1,5|2*NCC/3=O][12112h|1,5][12122h|1,5|2*NCC/3=O][12112h|1,5][12122h|1,5][12122h|1,5][12122h|1,5][2*NCC/3=O][X2122h|1,5|2*NCC/3=O][12112h|1,5][12122h|1,5][12122h|1,5][12122h|1,5][12122h|1,5|2*NCC/3=O][X2122h|1,5|2*NCC/3=O]1+2\\ &,(2+?)/(3+?)/(4+?)/(5+?)/(6+?)/(7+?)/(8+?)/(9+?)/(10+?)|2+1,3+3|3+1,(4+3)/(4+4)|4+1,(11+2)/(12+2)|5+1,6+3|6+1,(7+3)/(7+4)|7+1,(11+2)/(12+2)|8+1,9+3|9+1,(10+3)/(10+4)|10+1,(11+4)/(11+6)/(12+4)/(12+6)|11+1,13+6|12+1,13+3|13+1,14+4|14+1,15+4 \end{aligned}$



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
- 現在論文投稿中



大連BioHackathonの成果

- ・ オントロジー開発
- 糖鎖データベースのRDFデータを統一する ため、オントロジーの整理が必要になった
- 糖鎖オントロジー(GlycoOntology)を開発した
- ・論文の執筆中



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



糖鎖関連データベース















糖鎖ID

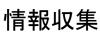


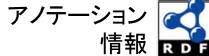


構造データ

データ共有

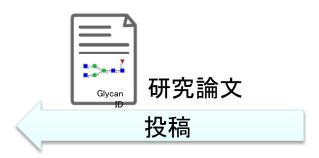
国際糖鎖構造データリポジトリ

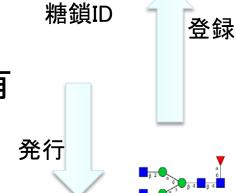






糖鎖研究の知識共有







糖鎖研究



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Semantic Webの実現