

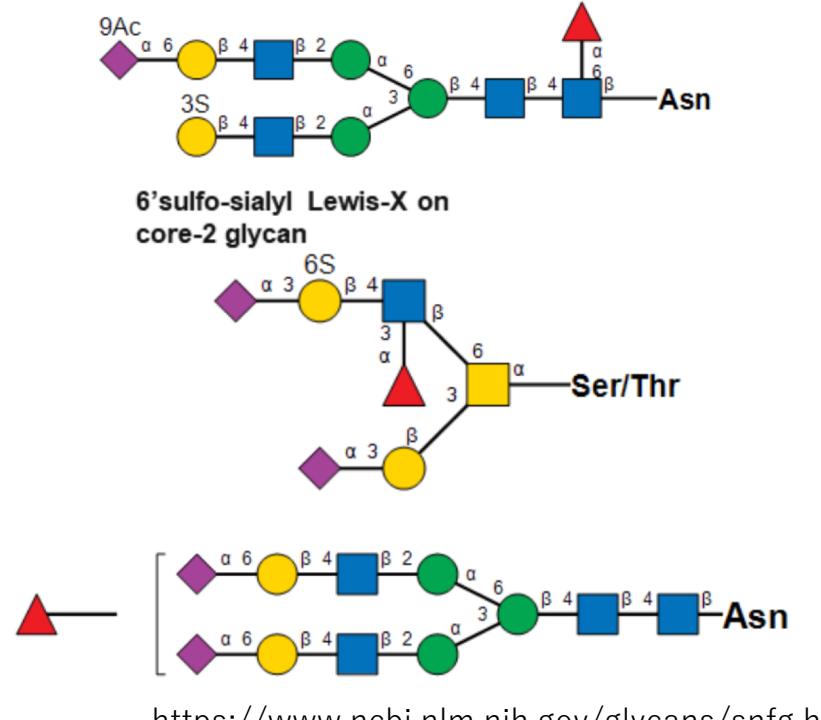
糖鎖構造の編集やデータベース検索が可能な ウェブインターフェイスGlycanBuilder2Webの開発

○土屋 伸一郎¹、木村 直貴¹、松原 正陽¹、木下 聖子²、山田 一作¹

1. 公益財団法人 野口研究所 糖鎖情報科学研究室、2. 創価大学 糖鎖生命システム融合研究所

シンボルを利用した糖鎖構造の表示方法

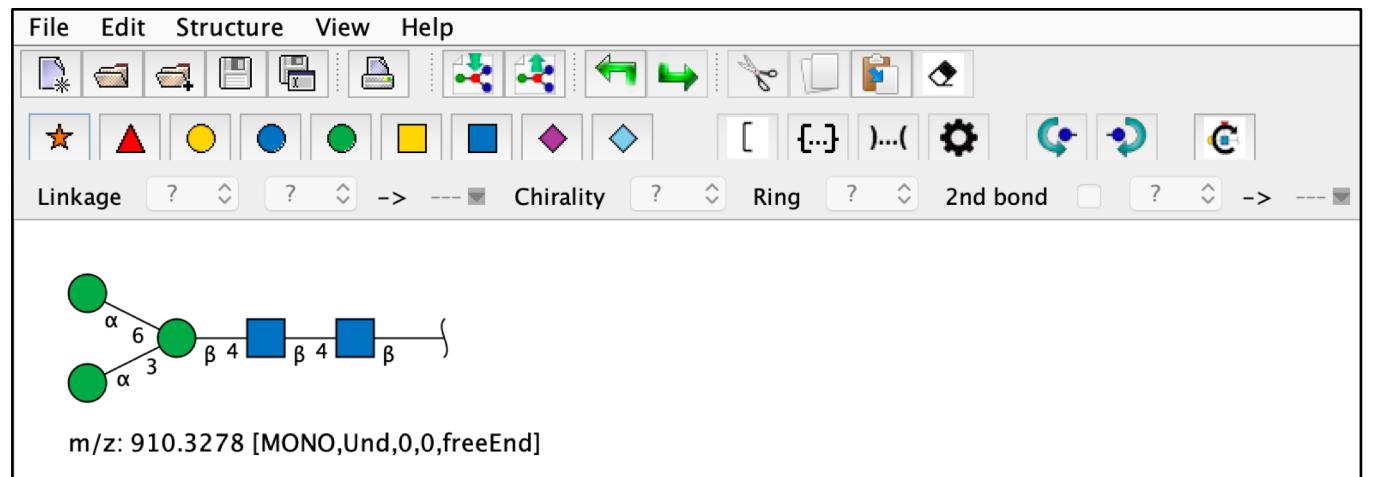
- Symbol Nomenclature for Glycans (SNFG) は糖鎖構造の表示方法
 - 単糖ごとに異なる色・図形のシンボルで表示
 - 単糖間の結合を黒線で繋ぎ、結合位置を表記



SHAPE	White (Generic)	Blue	Green	Yellow	Orange	Pink	Purple	Light Blue	Brown	Red
Filled Circle	○ Hexose	● Glc	● Man	● Gal	● Gul	● Alt	● All	● Tal	● Ido	
Filled Square	□ HexNAc	■ GlcNAc	■ ManNAc	■ GalNAc	■ GulNAc	■ AltNAc	■ AllNAc	■ TalNAc	■ IdoNAc	
Crossed Square	■ Hexosamine	■ GlcN	■ ManN	■ GalN	■ GulN	■ AltN	■ AllN	■ TalN	■ IdoN	
Divided Diamond	◇ Hexuronate	◇ GlcA	◇ Mana	◇ GalA	◇ GulA	◇ AltA	◇ AllA	◇ TalA	◇ IdoA	
Filled Triangle	▲ Deoxyhexose	▲ Qui	▲ Rha		▲ 6dGul	▲ 6dAlt		▲ 6dTal		▲ Fuc
Divided Triangle	△ DeoxyhexNAc	△ QuiNAc	△ RhaNAc			△ 6dAltNAc		△ 6dTalNAc		△ FucNAc
Flat Rectangle	□ Di-deoxyhexose	■ Oli	■ Tyv		■ Abe	■ Par	■ Dig	■ Col		
Filled Star	★ Pentose		★ Ara	★ Lyx	★ Xyl	★ Rib				
Filled Diamond	◇ 3-deoxy-nonulosonic acids		◆ Kdn				◆ Neu5Ac	◆ Neu5Gc	◆ Neu	◆ Sia
Flat Diamond	◇ 3,9-dideoxy-nonulosonic acids		◆ Pse	◆ Leg		◆ Aci		◆ 4eLeg		
Flat Hexagon	○ Unknown	● Bac	● LDmanHep	● Kdo	● Dha	● DDmanHep	● MurNac	● MurNGc	● Mur	
Pentagon	◇ Assigned	● Api	● Fru	● Tag	● Sor	● Psi				

SNFGに対応した糖鎖構造編集ソフト GlycanBuilder2

- Java言語で開発されたスタンドアロンで動作する糖鎖構造編集ソフト
 - SwingでGUIを実装
 - Abstract Window Toolkit (AWT) で糖鎖構造を描画
- 以下の機能を提供
 - 編集した糖鎖構造をSVGなどの画像データや、WURCSなどのテキスト形式へ変換
 - WURCSなどのテキスト形式から糖鎖構造を描画



GlycanBuilder2の課題

- ・ソフトを実行するための環境設定が難しい
 - ・Javaのインストールや環境変数の設定に関する知識が必要
- ・データベース（API）との連携機能が未実装
 - ・編集した糖鎖構造はデータベース検索に利用不能

本研究の目的

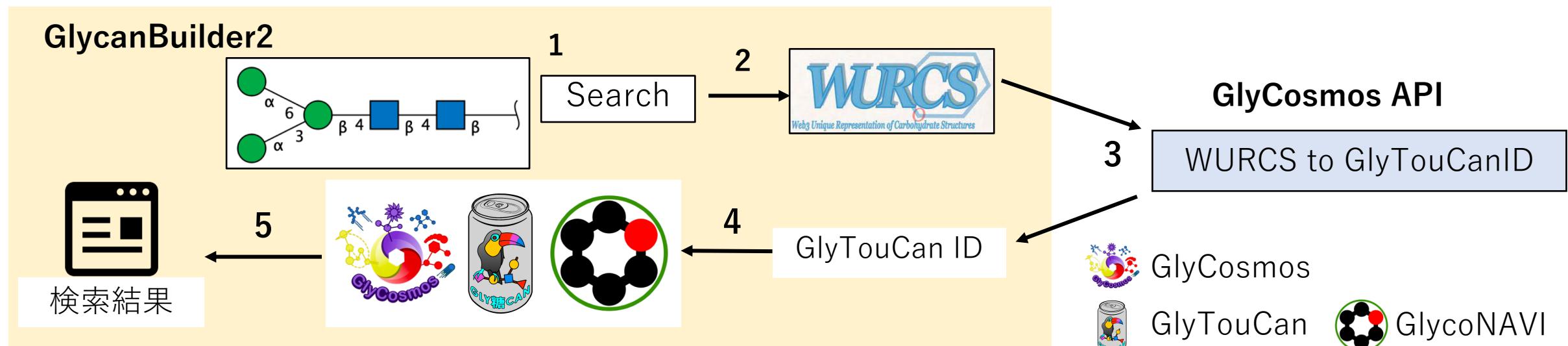
1. ウェブサイトでGlycanBuilder2を利用可能な環境構築
 2. GlycanBuilder2で編集した糖鎖のデータベース検索機能を開発
- →糖鎖構造の編集やデータベース検索が可能な
ウェブインターフェイス GlycanBuilder2Webとして公開

ウェブサイトでGlycanBuilder2を利用可能な環境構築

- Java言語で開発されたソフトをウェブアプリ化する環境を構築
 - Vaadin (21.0.7) を利用して糖鎖構造編集用のインターフェイスを開発
 - Jetty (9.4.36.v20210114) を利用してソフトをWebサーブレット化
- Vaadin
 - Java言語で開発されたオープンソースのウェブフレームワーク
 - JavaScriptやHTMLを使わずにウェブアプリ用のインターフェイス開発が可能
 - Swingからの移行の手引きといった開発者に向けたサポートが充実

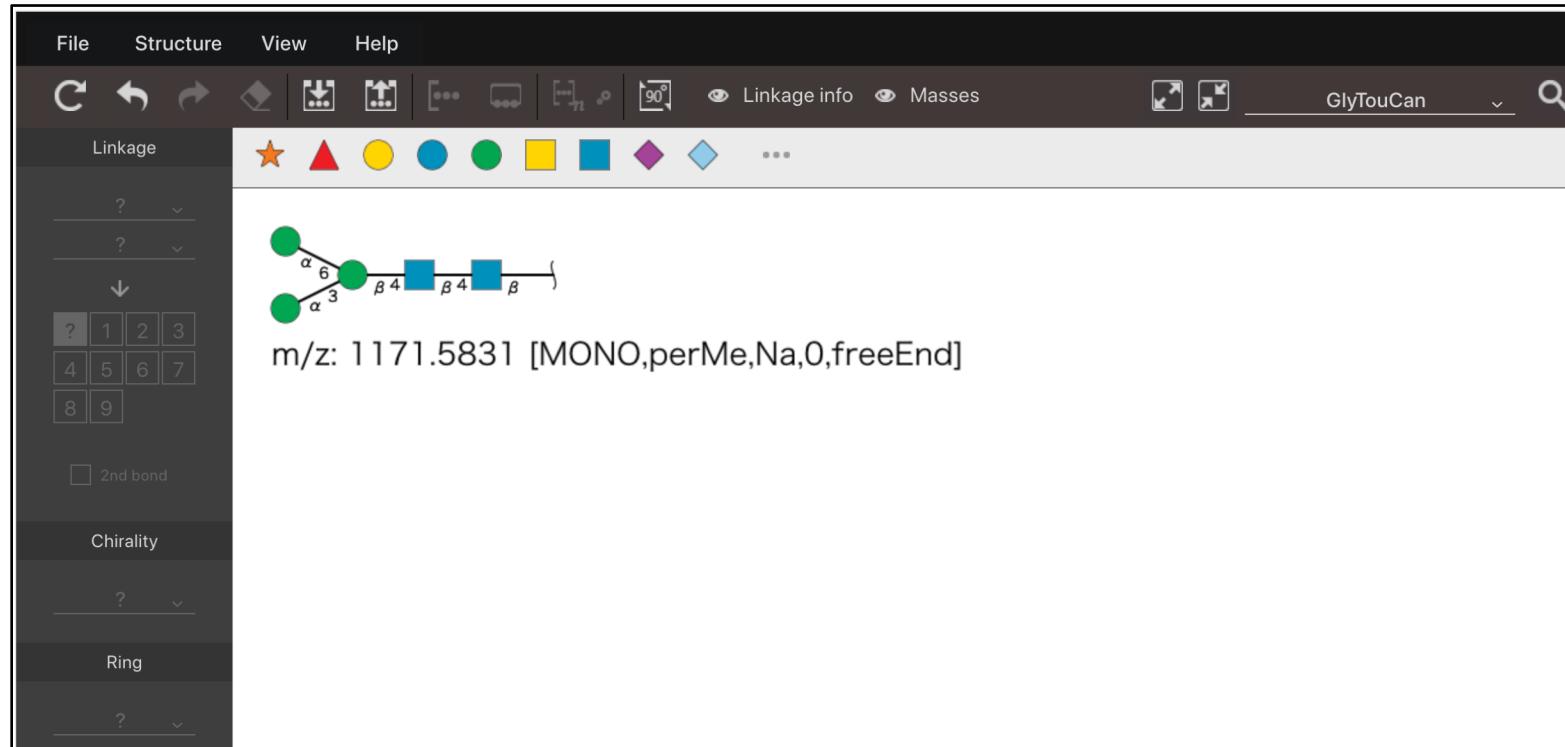
編集した糖鎖構造を検索する機能の開発

- GlycanBuilder2とGlyCosmos APIを連携した検索機能を実装
 1. 糖鎖構造を編集して検索対象のデータベースを選択
 2. 編集した糖鎖構造をWURCSへ変換
 3. GlyCosmosAPIでWURCSからGlyTouCan IDを取得
 4. GlyTouCan IDでデータベースを検索
 5. データベース検索結果のページに遷移



ウェブインターフェイス GlycanBuilder2Web

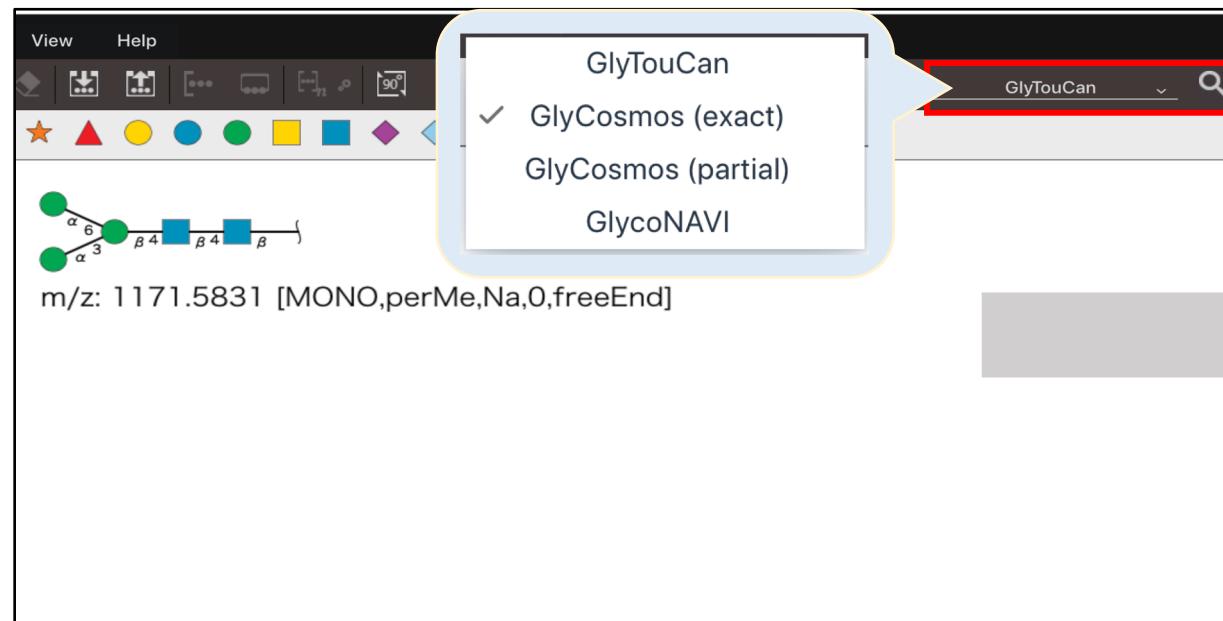
- 糖鎖構造ポータル GlyCosmosにGlycanBuilder2Webを公開
 - GlyCosmosの**Search by Graphic**機能で、SNFGシンボルの糖鎖構造の編集が可能



<https://glycosmos.org/glycans/graphic>

GlycanBuilder2Webのデータベース検索機能

- GlycanBuilder2Webで糖鎖構造を編集し、検索対象のデータベースを選択
 - GlyTouCan、GlycoNAVI、GlyCosmosの検索結果画面へ遷移
 - GlyCosmosの完全一致(Exact)、部分一致(Partial)検索にも対応



The screenshot shows the GlycoNAVI search results page. The search query is WURCS=2.0/3,5,4/[a2122h-1b_1-5_2*NCC3=O][a1122h-1b_1-5]. The results are presented in a grid format. The first result is TCarp-12H5, shown with its PDB ID (12H5) and GlycoNAVI ID (G22768VO). The second result is TCarp-2VCO, also with its PDB ID (2VCO) and GlycoNAVI ID (G22768VO). At the bottom, there are input fields for WURCS and GlycoNAVI IDs, along with their respective search results.

The screenshot shows the Glycosmos entry page for G22768VO. It displays the glycan structure and some basic details: Glycosmos Entry (G22768VO), Created Date (2021-10-07), and a Cite this record button.

The screenshot shows the detailed view of the Glycosmos entry G22768VO. It includes sections for Summary, GlycoNAVI ID (G22768VO), IUPAC name (Man(a1-3)[Man(a1-6)]Man(b1-4)GlcNAc(b1-4)GlcNAc(b1-6)), Species (Bos taurus, Homo sapiens, Mus musculus, Phaseolus, Rana, Sus scrofa), Monoisotopic Mass (910.328), Motif Name (N-Glycan core basic), Substructure (Glycosidic linkage), and a Linkage defined saccharide section. There are also buttons for Open LiteMol Viewer and GNOme Structure Browser.

まとめ

GlycanBuilder2をウェブアプリ化し、データベース（API）との連携機能を実装した。

結果として、ウェブブラウザでSNFGシンボルの糖鎖構造を編集し、GlyTouCan、GlyCosmos、GlycoNAVIでの検索が可能となった。

GlycanBuilder2Webは、糖鎖の編集機能を利用したデータベース検索用のウェブインターフェイスとして、GlyCosmosのSearch by Graphic機能で公開されている。