創価大学

Discover your potential
自分力の発見

平成29年度統合化推進プログラム

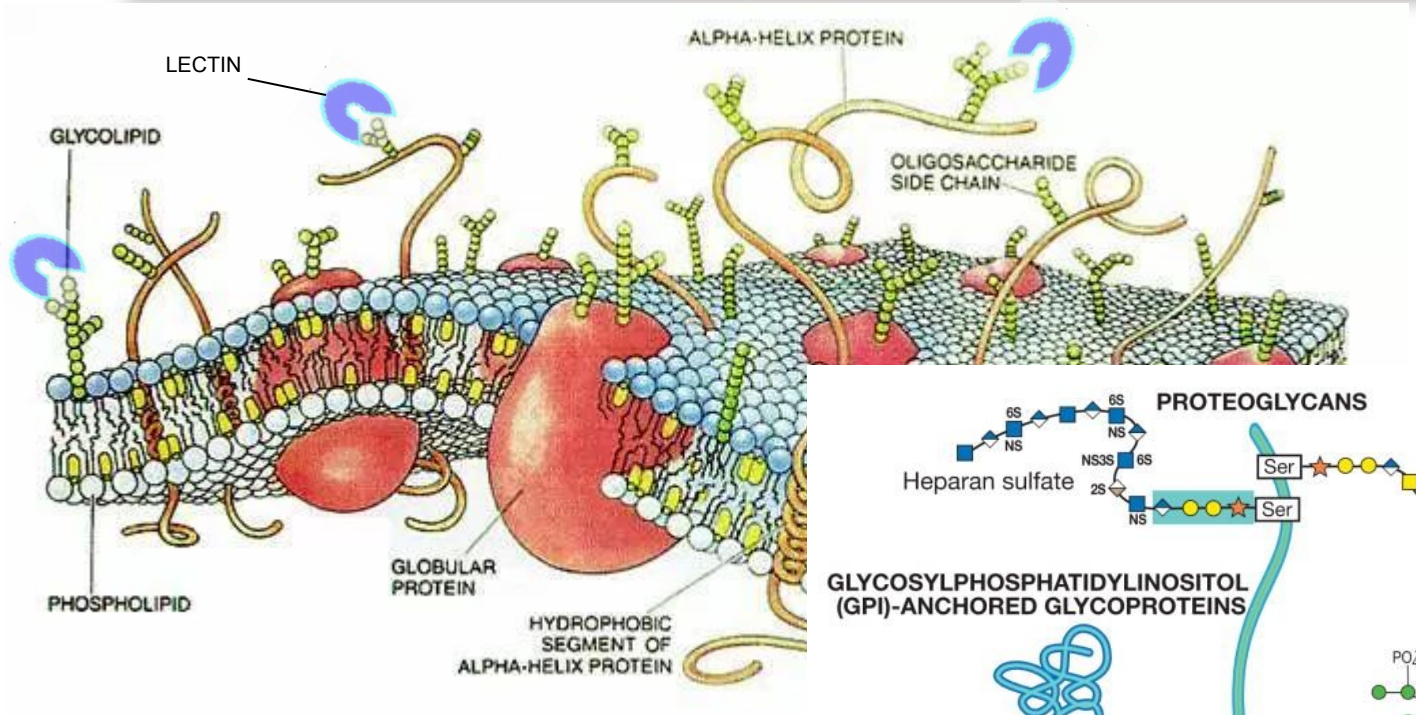
「糖鎖科学ポータルの構築」

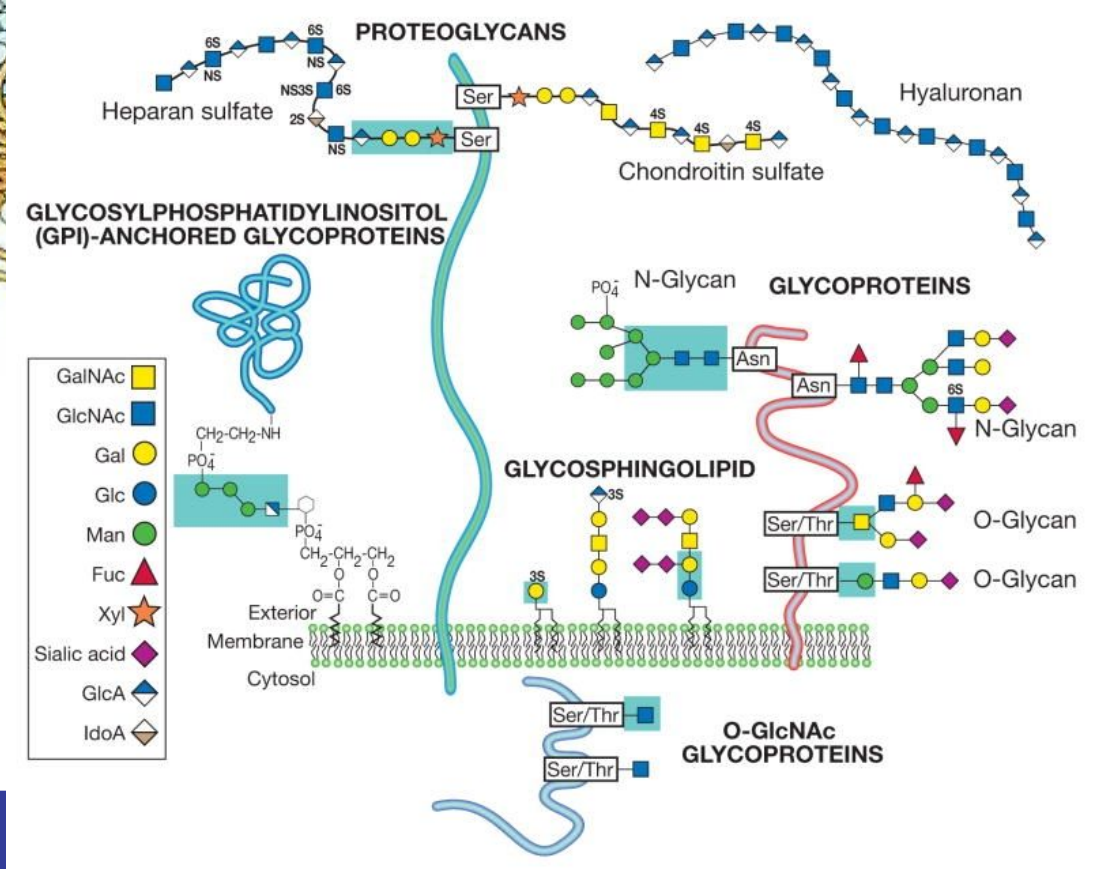
代表　創価大学　木下聖子

NBDC

国立研究開発法人
科学技術振興機構

糖鎖が関わる生体内の環境





複合糖質の多様性

糖鎖研究の位置づけ

米国では 2012 年に米国学術研究会議(the National Research Council of the National Academies)が報告書 Transforming Glycoscience: A Roadmap for the Future (2012) を発表:

糖鎖研究の対象は**医学(Medicine)**にとどまらず、**エネルギー(Energy)**や**材料科学(Materials)**にまで及ぶとしており、これまでこのような大局的な視点で糖鎖研究の将来が位置づけられたことはなかった。

米国ではNIHにおいて、糖鎖に関連する研究が強力に進められている。

一方、世界で使用されている標準的な糖鎖解析法は日本発であり、また重要な糖鎖構造の解析および6割以上の糖鎖遺伝子のクローニングやその機能解析が我が国の研究者によってなされている。したがって、糖鎖科学は我が国が世界をリードしてきた分野である。

しかし、これらの様々な糖鎖遺伝子などについての情報が未だに網羅的に整理されておらず、文献調査以外には糖鎖が関与するパスウェイ情報などが手に入れられない状況である。このような問題を解決するためにGlyCosmos Portalを開発し、**これまで糖鎖研究をリードしてきた我が国が中核となって糖鎖科学ポータルを提供する。**

第5回ACGG-DB 会議　決議事項

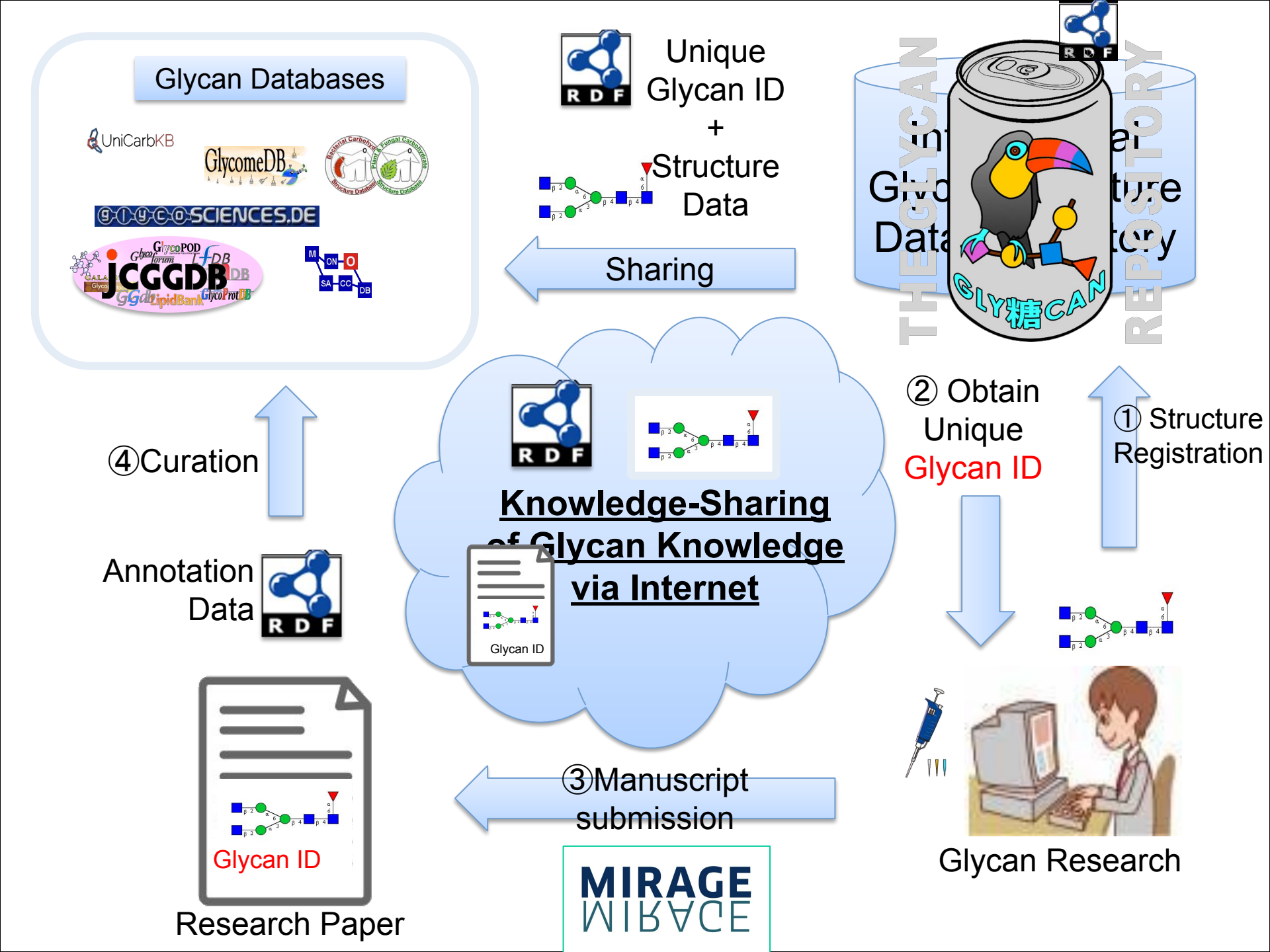
創価大学

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


Glycan Databases
UniCarbKB
GlycomeDB
GLYCOSCIENCES.DE
jCGGDB
Unique
Glycan ID
+
Structure
Data
Sharing
THE GLYCAN DATA REPOSITORY
GLY糖CAN
① Structure
Registration
② Obtain
Unique
Glycan ID
Knowledge-Sharing
of Glycan Knowledge
via Internet
Glycan ID
④Curation
Annotation
Data
③Manuscript
submission
Glycan ID
Research Paper
Glycan Research
MIRAGE

GlyTouCan開発にあたって

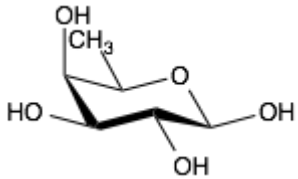
創価大学

- 糖鎖構造の表現
  - 曖昧性に対応する
  - 任意な文字列で表す
- リポジトリのシステム開発
  - アクセッション番号のシステム
  - ユーザー登録システム
  - 上記糖鎖構造表記システムの導入
- リポジトリの普及

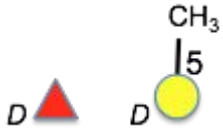
糖鎖情報の標準化の必要性

- 単糖表現の曖昧性

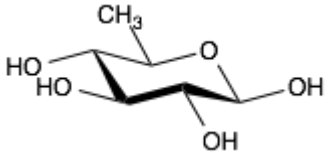
D-Fucose
6-Deoxy-D-galactose



β-D-Fuc*p*

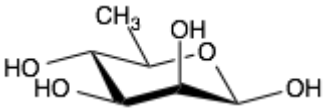


D-Quinovose
6-Deoxy-D-glucose



β-D-Qui*p*

D-Rhamnose
6-Deoxy-D-mannose



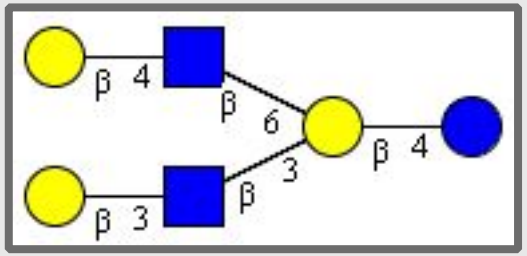
β-D-Rha*p*

- 微生物や植物の糖類
- 他の曖昧性の表現様々

Text formats for glycans

創価大学

```
ENTRY   Structure  Glycan
NODE  6
    1  glcnac   -16   2
    2  glcnac   -16   -2
    3  gal   -24   2
    4  gal   -8   0
    5  gal   -24   -2
    6  D-glc   0   0
EDGE  5
    1  4:b1     6:4
    2  2:b1     4:3
    3  5:b1     2:3
    4  1:b1     4:6
    5  3:b1     1:4
///
```




```
ENTRY   Structure  Glycan
NODE  6
    1  GlcNAc   -16   -2
    2  Gal   -8   0
    3  GlcNAc   -16   2
    4  Gal   -24   -2
    5  D-Glc   0   0
    6  Gal   -24   2
EDGE  5
    1  2:b1     5:4
    2  1:b1     2:3
    3  4:b1     1:3
    4  3:b1     6:6
    5  3:b1     2:4
///
```

Uniquely represent all glycan structures as a text string

Web3 Unique Representation of Carbohydrate Structures*

*Matsubara M, Aoki-Kinoshita KF, Aoki NP, Yamada I, Narimatsu H. WURCS 2.0 update to encapuslate ambiguous carbohydrate structures. *J. Chem. Inf. Model*, 57(4):632-637, 2017.

糖鎖構造表記法 WURCS

創価大学

WURCS: Web3 Unique Representation of Carbohydrate Structures

- セマンティックウェブを指向した新しい糖鎖構造表記法
- JST・NBDC統合化推進プログラムで開発
- GlyTouCanの基盤として利用
  - 糖鎖構造の同一性
  - 糖鎖構造検索
  - 分子量計算

WURCS

- Version 1.0 published in 2014

  J. Chem. Inf. Model. 2014, 54, 1558−1566.

- New version 2.0 published in 2017

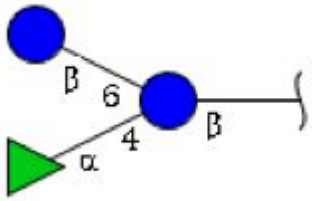
  J. Chem. Inf. Model, 57(4):632-637, 2017.

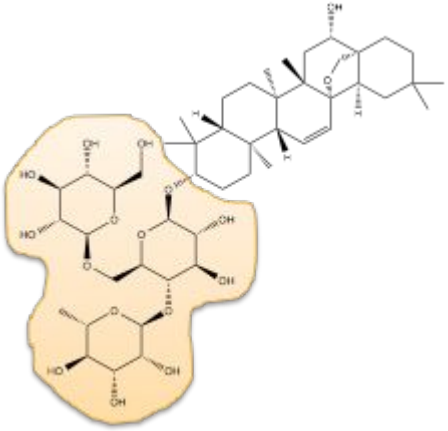
WURCS=1.0/3,2/[12122h|1,5][12211m|1,5][12122h|1,5]1+1,3+6|2+1,3+4

Version 1.0

URI

G08841ZJ





URI

RDF&SPARQL

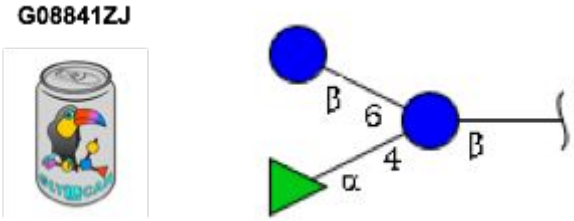
Version 2.0

WURCS=2.0/2,3,2/[a2122h-1b_1-5][a2211m-1a_1-5]/1-2-1/a4-b1_a6-c1

WURCS=<Version>/<Counts>/<UniqueRES>/<RES Seq>/<LIN>

WURCS-RDF

- WURCSで表記した糖鎖構造から、糖鎖のRDFグラフ構造を生成することが可能
- SPARQL検索だけで部分構造検索に利用することができる

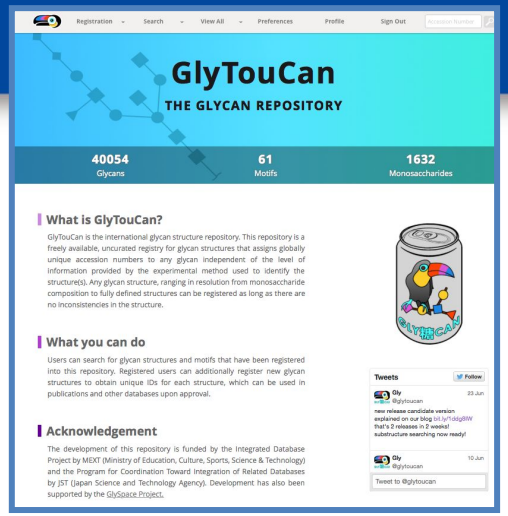


WURCS=2.0/2,3,2/[a2122h-1b_1-5][a2211m-1a_1-5]/1-2-1/a4-b1_a6-c1

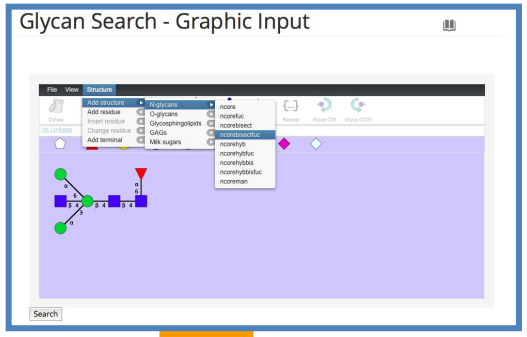
GlyTouCan

創価大学

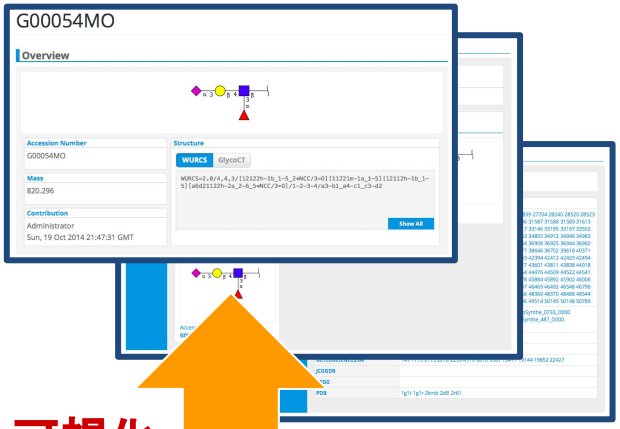
現在103,037件の構造が登録済み！



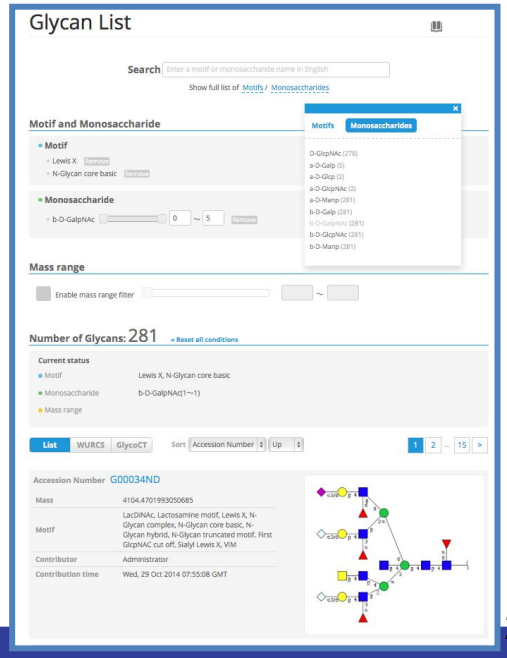
糖鎖構造の登録



糖鎖構造のエントリー



糖鎖構造のリスト



ロード

可視化

SPARQL

可視化

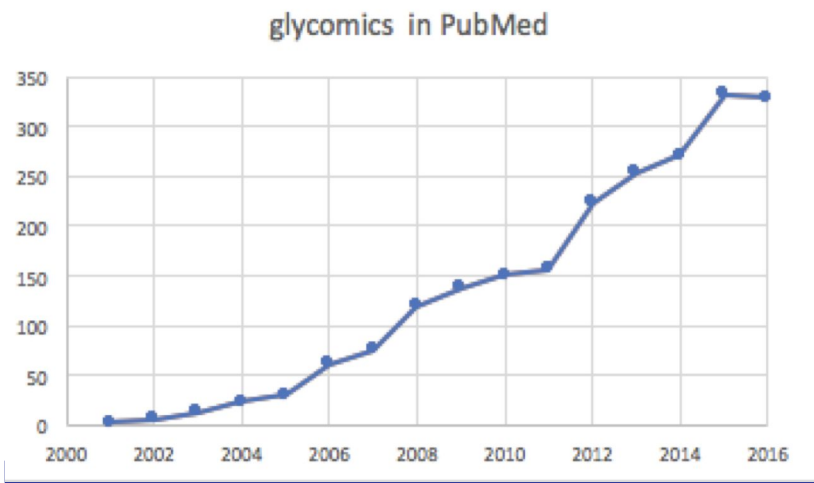
TripleStore
(Virtuoso)

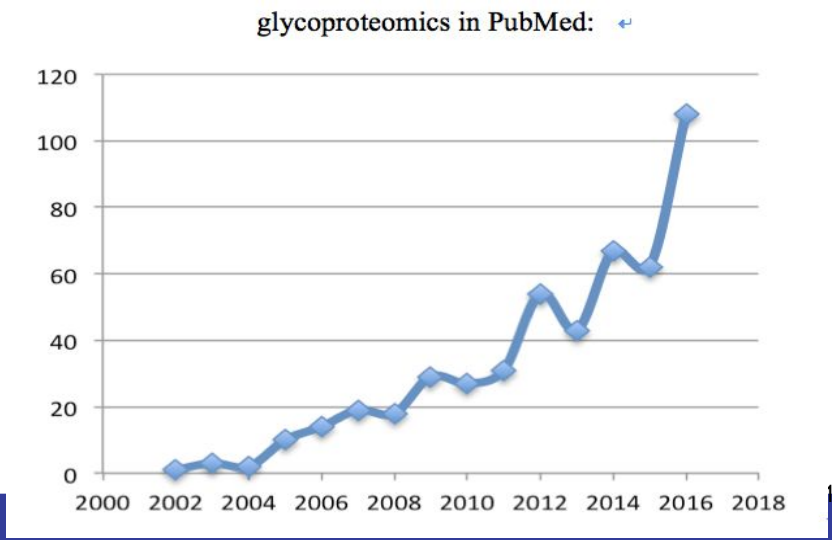
TOGO STANZA

糖鎖に関する文献の傾向

創価大学

- 糖鎖の機能は複合糖質として考慮して初めて糖鎖の機能解明につながることが明らかになってきた。
  - PubMedにおいて「glycomics」は2015年にピークを達し、「glycoproteomics」はこの2年間で倍増している。
  - 従って、糖鎖科学研究は糖鎖から糖タンパク質を含んだ複合糖質の研究にシフトしており、今後は複合糖質のデータがより重要かつ大量に生産されることが予測される。
- 問題点：
  - 糖鎖研究が未熟な学生や研究者は糖鎖について調べる場合、最新の情報を取得する方法は文献調査以外にない。
  - 現状のゲノム、プロテオーム、メタボローム、リピドーム、インタラクトームなどのオミックスデータベースは複合糖質をほとんど考慮しておらず、糖鎖科学に対する教育にも十分になされているとは言い難い。
- 従って、国内外の糖鎖研究を網羅的に整理し、既知な情報、未知な情報の実際の状況を把握するために、文献や関連データベースを統合し、ポータルサイトとして情報を提供することは急務である。





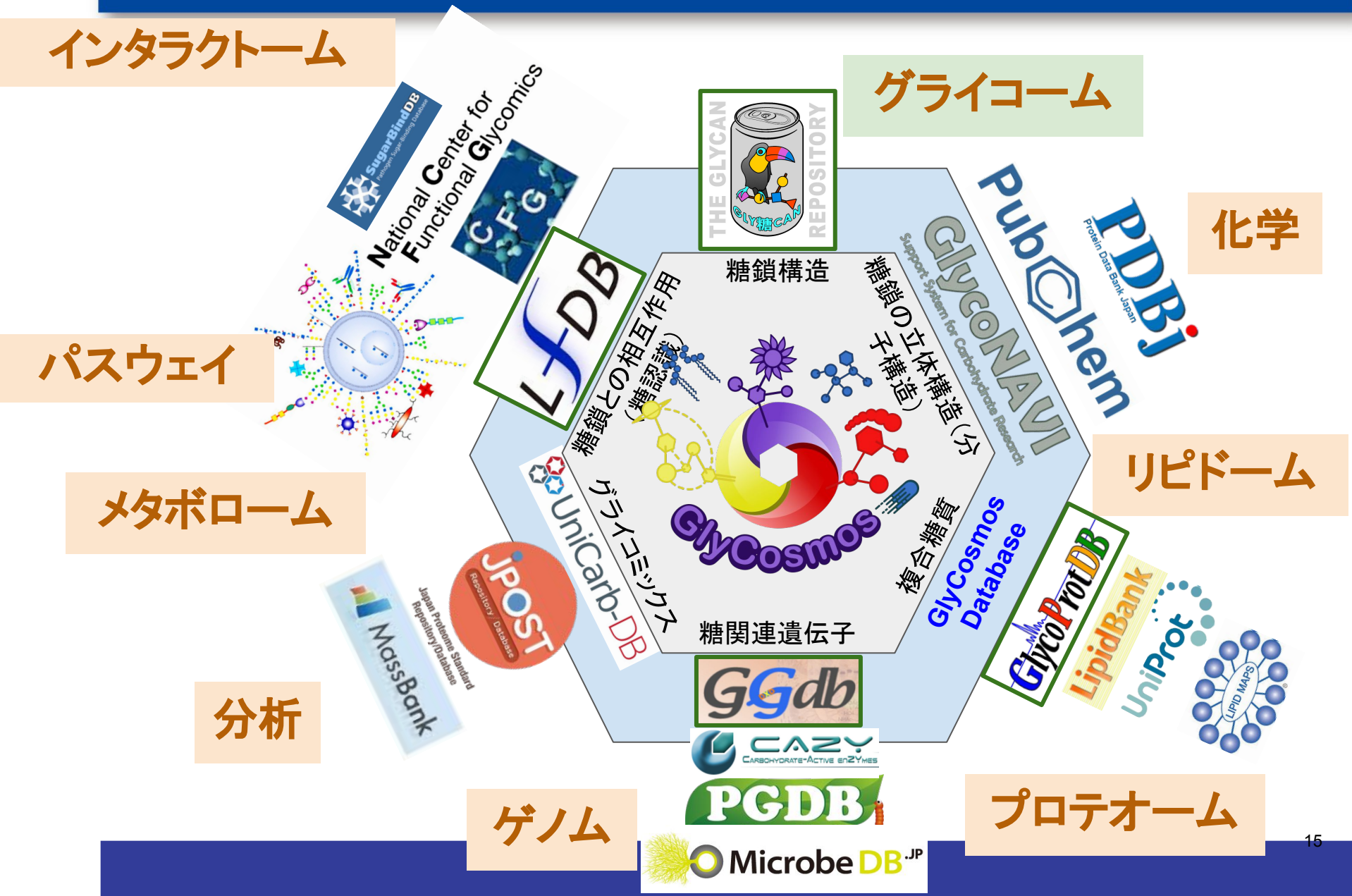
糖鎖関連データベースの国際的な動き

創価大学

- MIRAGE
  - 糖鎖関連実験情報を学術雑誌に掲載する場合の掲載項目のガイドライン
  - 糖鎖の質量分析データに関してのファイル形式などが決定済み
- **SIB GlyConnect Project**（先月公開）:
  - GlycoSuiteの糖タンパク質データを統合し、ヒトのタンパク質データベースNextProtと連携
- **NIH GlyGen Project**（8月公開予定）:
  - ヒトとマウスの糖タンパク質データの統合
  - UniProt、UniCarbKBとGlyTouCanと連携
- **UniCarb-DR** (近日中公開予定)
  - 糖鎖の質量分析データのリポジトリ

本課題が目指す最終目標・理想的な概要

創価大学



糖鎖研究コミュニティの要望

創価大学

1. 糖鎖が特定の糖タンパク質やそのglycoformの立体構造と機能にどのように影響するかについての情報を取得したい
2. 酵素合成において、酵素の活性やその種類、入手先の情報を取得したい
3. ある糖鎖構造を持つと報告されたタンパク質・脂質を取得し、組織や細胞の種類別に整理した情報を取得したい
4. 特定の代謝やシグナル伝達経路に関連する糖鎖のリストを取得したい
5. 疾患で変化することが知られているグリコシル化経路中のタンパク質のリストを取得したい
6. 他生物種における糖鎖遺伝子のヒト・オルソログ（相同分子種）を検索して表現型付きのSNP情報を取得したい

Glycoinformatics Consortium (GLIC)による調査結果, 2015年

ねらい

創価大学

- 日本の糖鎖研究コミュニティの強みである糖鎖遺伝子と糖鎖構造研究について、国内の糖鎖関係の学会と連携し、多くの国内外における関連知識を集約するデータベースとしてGlyCosmosを開発する。

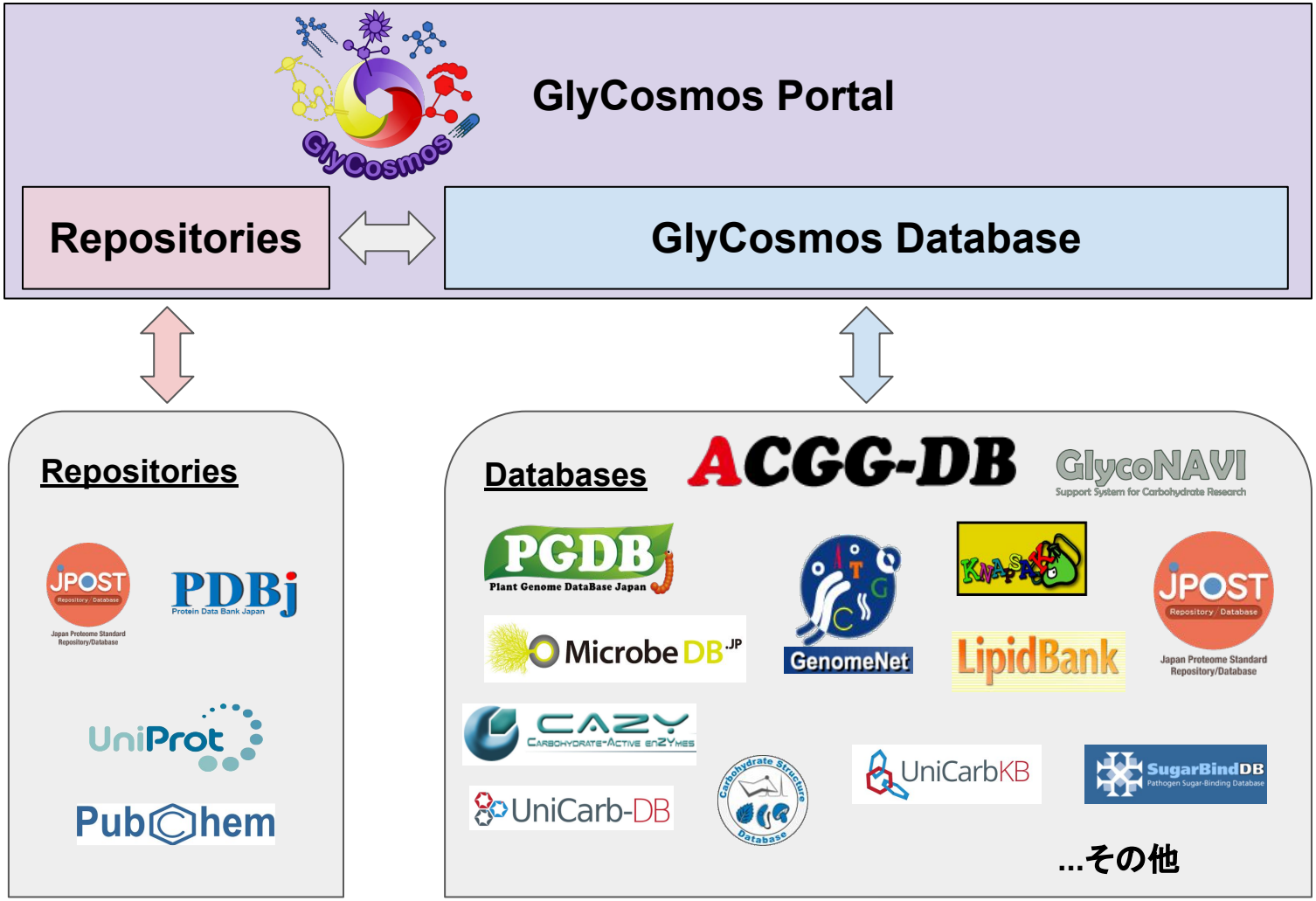
- さらに、複合糖質データベース(GlyCosmosDB)を開発することで、プロテオーム、メタボローム、リピドームなどのオミックスの研究コミュニティと協働して研究開発を推進することで、より広範囲の連携を実現することが可能となる。

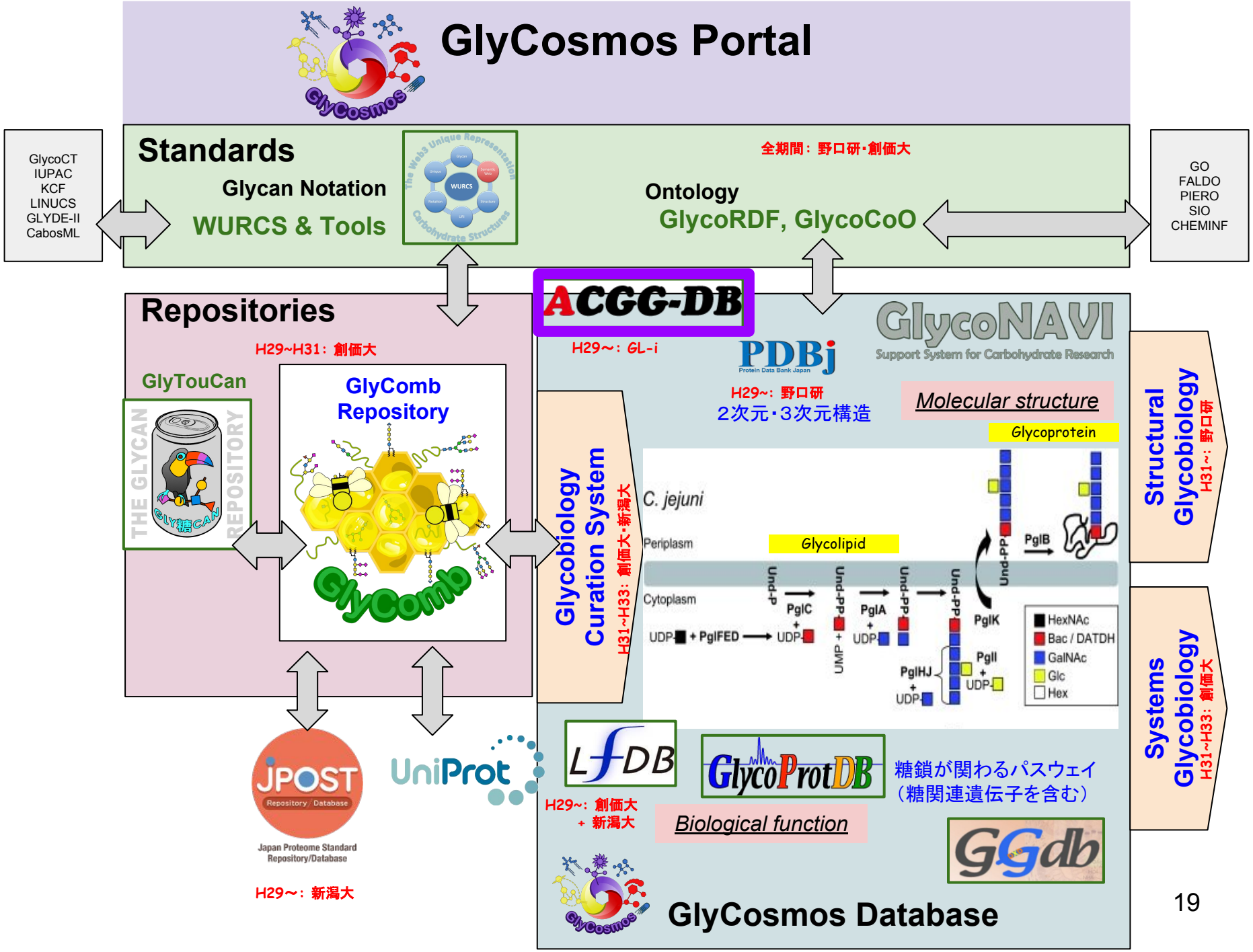
- 最終的には糖鎖研究に興味を持った研究者が本ポータルに訪れ、糖鎖に関する知見を容易に理解できるようになる。
  - 糖鎖遺伝子→関わっているパスウェイ、疾患、糖鎖構造、立体構造情報、複合糖質→糖鎖機能
  - 実験で確認された情報と、計算で予測された情報が格納されるため、仮説構築や事実確認に利用可能

本課題における統合の概要

創価大学

Integration of life science information

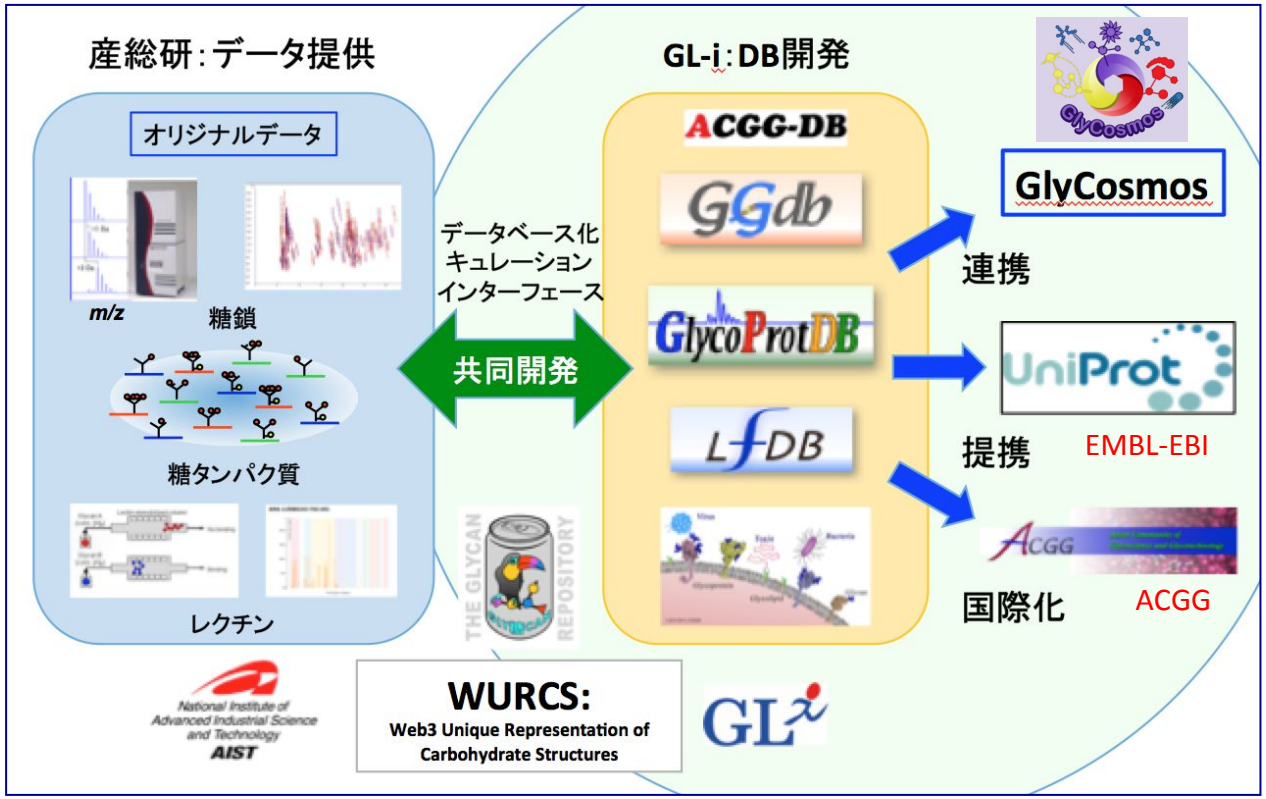



GlyCosmos Portal
GlycoCT
IUPAC
KCF
LINUCS
GLYDE-II
CabosML
Standards
Glycan Notation
WURCS & Tools
全期間：野口研・創価大
Ontology
GlycoRDF, GlycoCoO
GO
FALDO
PIERO
SIO
CHEMINF
Repositories
H29~H31：創価大
GlyTouCan
THE GLYCAN REPOSITORY
GlyComb Repository
ACGG-DB
H29～：GL-i
PDBj
Protein Data Bank Japan
H29~：野口研
2次元・3次元構造
GlycoNAVI
Support System for Carbohydrate Research
Molecular structure
Glycoprotein
Glycobiology Curation System
H31~H33：創価大・新潟大
C. jejuni
Periplasm
Glycolipid
Cytoplasm
UDP + PglFED
PglC
PglA
PglIK
PglIHJ
PglI
PglB
HexNAc
Bac / DATDH
GalNAc
Glc
Hex
Structural Glycobiology
H31~：野口研
Systems Glycobiology
H31~H33：創価大
JPOST
Repository / Database
Japan Proteome Standard Repository/Database
H29～：新潟大
UniProt
LfDB
H29~：創価大 + 新潟大
GlycoProtDB
糖鎖が関わるパスウェイ
（糖関連遺伝子を含む）
Biological function
GGdb
GlyCosmos Database

ACGG-DBの機能拡張とGlyCosmos portal との連携およびアジア地域との連携

創価大学

- 糖鎖研究における日本発のオリジナルデータの収集
- Semantic Webに対応したデータやOntologyを日本及びアジアの糖質研究者に向けて、有用な情報の提供(https://acgg.asia/db/にて公開)
- マウスやヒトの糖鎖データとGlyCosmos との連携による他生物糖鎖DBとの統合



ACGG-DBの特色

200以上の糖鎖遺伝子の機能や活性を糖鎖生物学研究者がキュレーション

組織別の糖タンパク質上の糖鎖の位置と糖鎖構造を検索

糖鎖研究に有用なレクチンの糖鎖結合性プロファイルを収載

糖鎖の構造と機能を直感的にリンクさせるViewerによる表示

ACGG-DBの機能拡張とGlyCosmos portal との連携およびアジア地域との連携

創価大学

GlyCosmos Portal

ヒト・マウスのデータの提供
検索などツールの拡充

Repositories

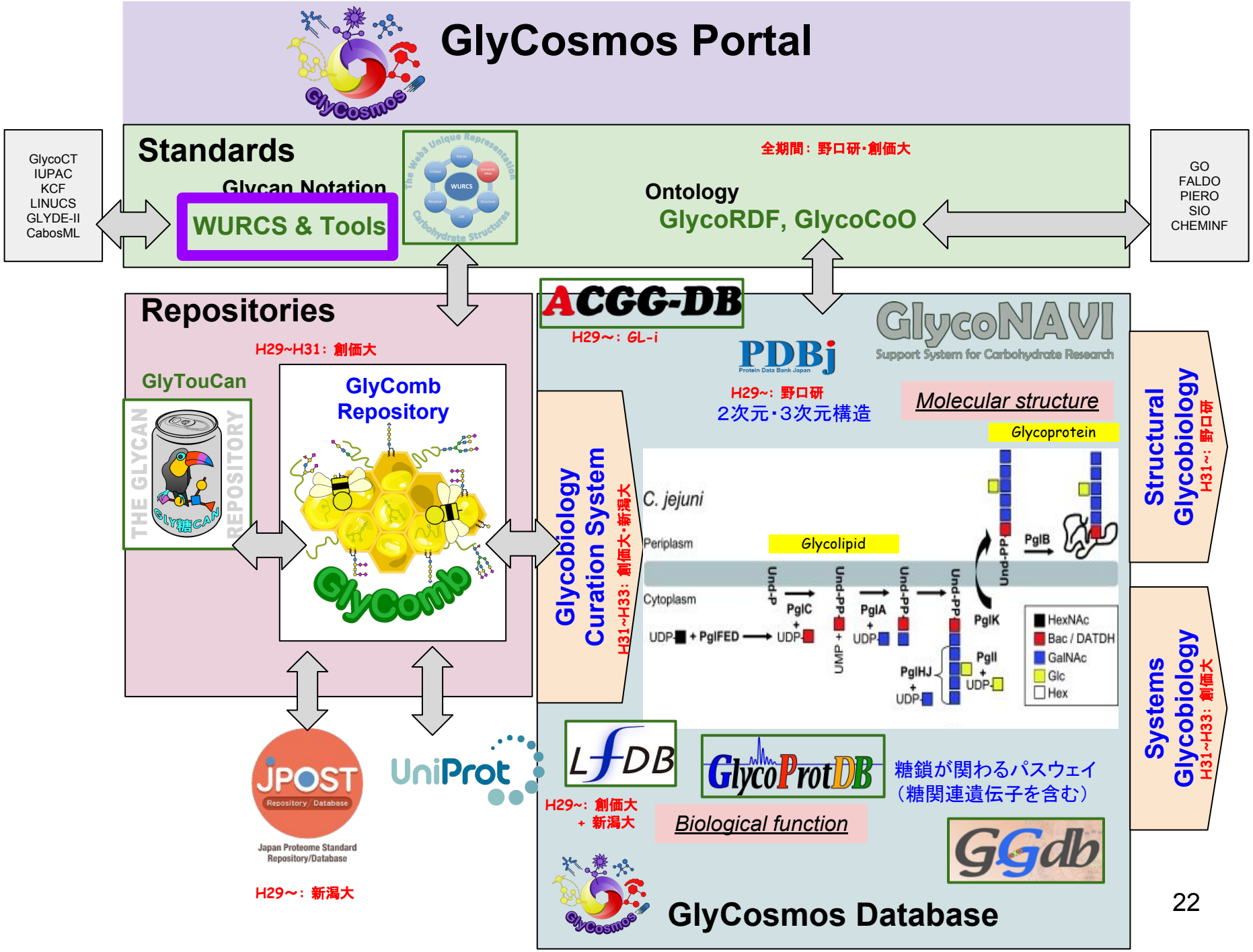
GlyComb

GlyTouCan

サンプル提供

ACGG-DB

DB	Data の収集	インターフェースの改良（ツールの開発）
GGdb	データアップデート（21）/ キュレーターへの論文紹介	構造からGGDBとの相互リンク Pathway - GGDB
GlycoProtDB	論文発表済みのデータ有り（3）/ GlycoRIDGEのデータ有り	Glycoform Viewer の改良 LfDBとの相互リンク
LfDB	新しいデータ有り/ レクチンのソース違いも追加収載	トップページと検索ページの変更 糖鎖構造の絞り込み
PACDB GDGDB	GGDontoの論文発表	GDGDBからGGDBへのリンク PACDBからLfDB, GlycoProtDBへのリンク


GlyCosmos Portal
GlycoCT
IUPAC
KCF
LINUCS
GLYDE-II
CabosML
Standards
Glycan Notation
WURCS & Tools
全期間：野口研・創価大
Ontology
GlycoRDF, GlycoCoO
GO
FALDO
PIERO
SIO
CHEMINF
Repositories
H29~H31：創価大
GlyTouCan
THE GLYCAN REPOSITORY
GlyComb Repository
ACGG-DB
H29～：GL-i
PDBj
Protein Data Bank Japan
H29~：野口研
2次元・3次元構造
GlycoNAVI
Support System for Carbohydrate Research
Molecular structure
Glycoprotein
Glycobiology Curation System
H31~H33：創価大・新潟大
C. jejuni
Periplasm
Glycolipid
Cytoplasm
UDP + PglFED
PglC
PglA
PglIK
PglIHJ
PglI
PglB
HexNAc
Bac / DATDH
GalNAc
Glc
Hex
Structural Glycobiology
H31~：野口研
Systems Glycobiology
H31~H33：創価大
JPOST
Repository / Database
Japan Proteome Standard Repository/Database
H29～：新潟大
UniProt
LfDB
H29~：創価大
＋ 新潟大
GlycoProtDB
糖鎖が関わるパスウェイ
（糖関連遺伝子を含む）
Biological function
GGdb
GlyCosmos Database

WURCSの開発

創価大学

バクテリアなど複雑な単糖を含む場合、単糖の置換基の曖昧さ表現が必要となる

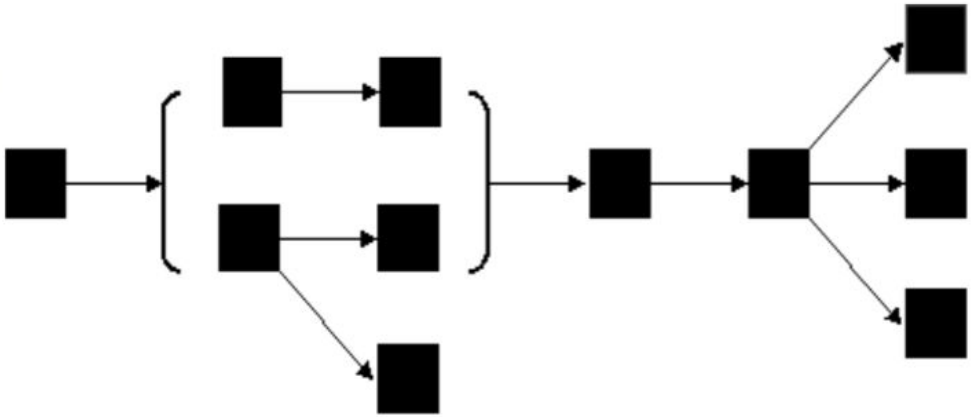
– 曖昧な置換基表現への対応

必要な曖昧表現

- OR表現
- 結合位置の候補が複数
- 位置不定の二重結合
- 繰り返し

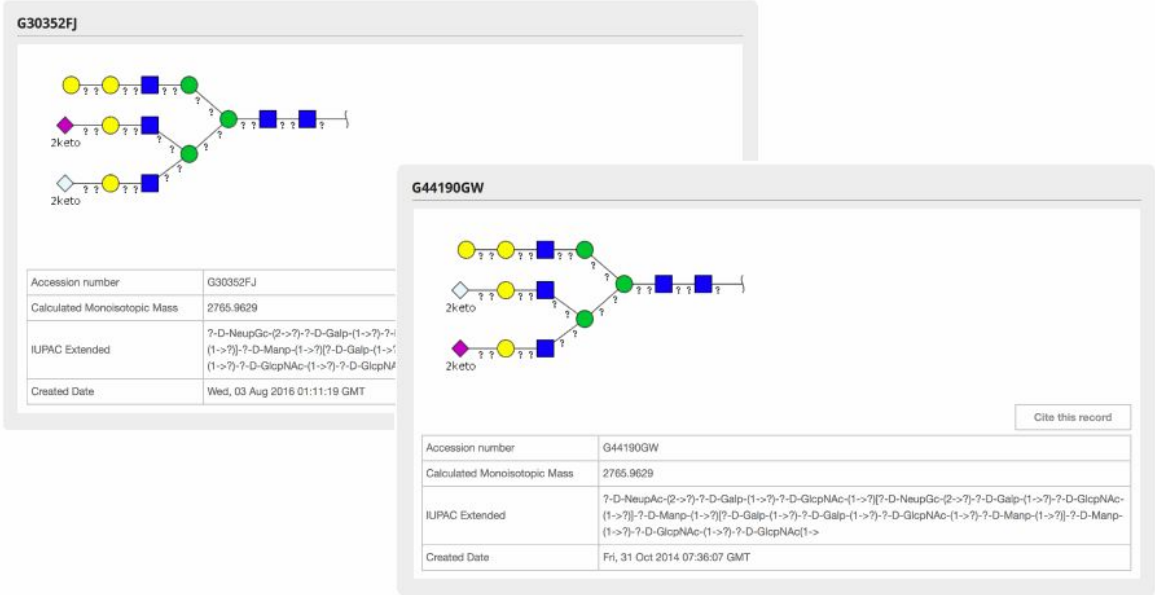
2.1.4 Subgraphs: Alternative Units (a)

Alternative units are marked in the residue list with the type identifier 'a' and a canonical number. They are further broken down in the alternative unit section (ALT).



WURCSの開発1

- 単糖残基の順番が決まらず本質的に同じ構造の糖鎖に別なアクセション番号(WURCS)を発行する不具合の修正
- 検証作業終了後、GlyTouCanシステムへ組み込む予定



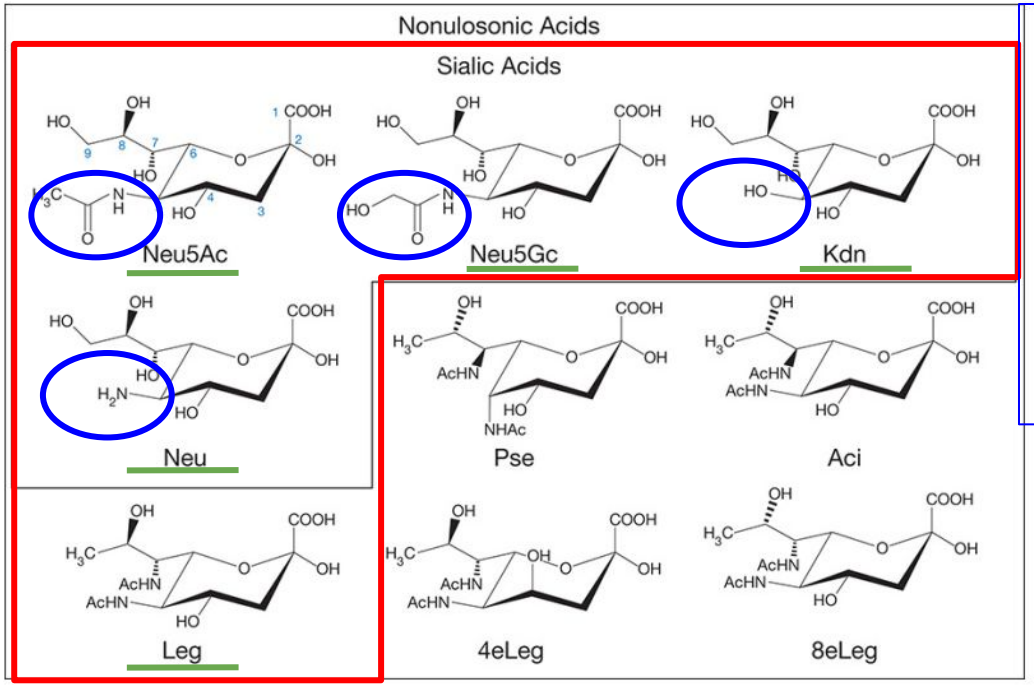
G30352FJ,G44190GW

WURCS=2.0/5,14,13/[a2122h-1x_1-5_2*NCC/3=O][a1122h-1x_1-5][a2112h-1x_1-5][Aad21122h-2x_2-6_5*NCCO/3=O][Aad21122h-2x_2-6_5*NCC/3=O]/1-1-2-2-1-3-4-1-3-5-2-1-3-3/a?-b1_b?-c1_c?-d1_c?-k1_d?-e1_d?-h1_e?-f1_f?-g2_h?-i1_i?-j2_k?-l1_l?-m1_m?-n1

WURCSの開発2

創価大学

OR表現について: 単糖として一大ファミリーを形成するシアル酸の一般形を表記するという視点で曖昧表記の研究開発中.



考えるべき曖昧さ

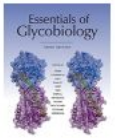
・官能基のOR

-A or -B at 5th position

・骨格の違い

[Neu|Leg]

From: Chapter 15, Sialic Acids and Other Nonulosonic Acids



Essentials of Glycobiology [Internet]. 3rd edition.
Varki A, Cummings RD, Esko JD, et al., editors.
Cold Spring Harbor (NY): Cold Spring Harbor Laboratory Press; 2015-2017.

Copyright 2015-2017 by The Consortium of Glycobiology Editors, La Jolla, California. All rights reserved.

PDF files are not available for download.

NCBI Bookshelf. A service of the National Library of Medicine, National Institutes of Health.

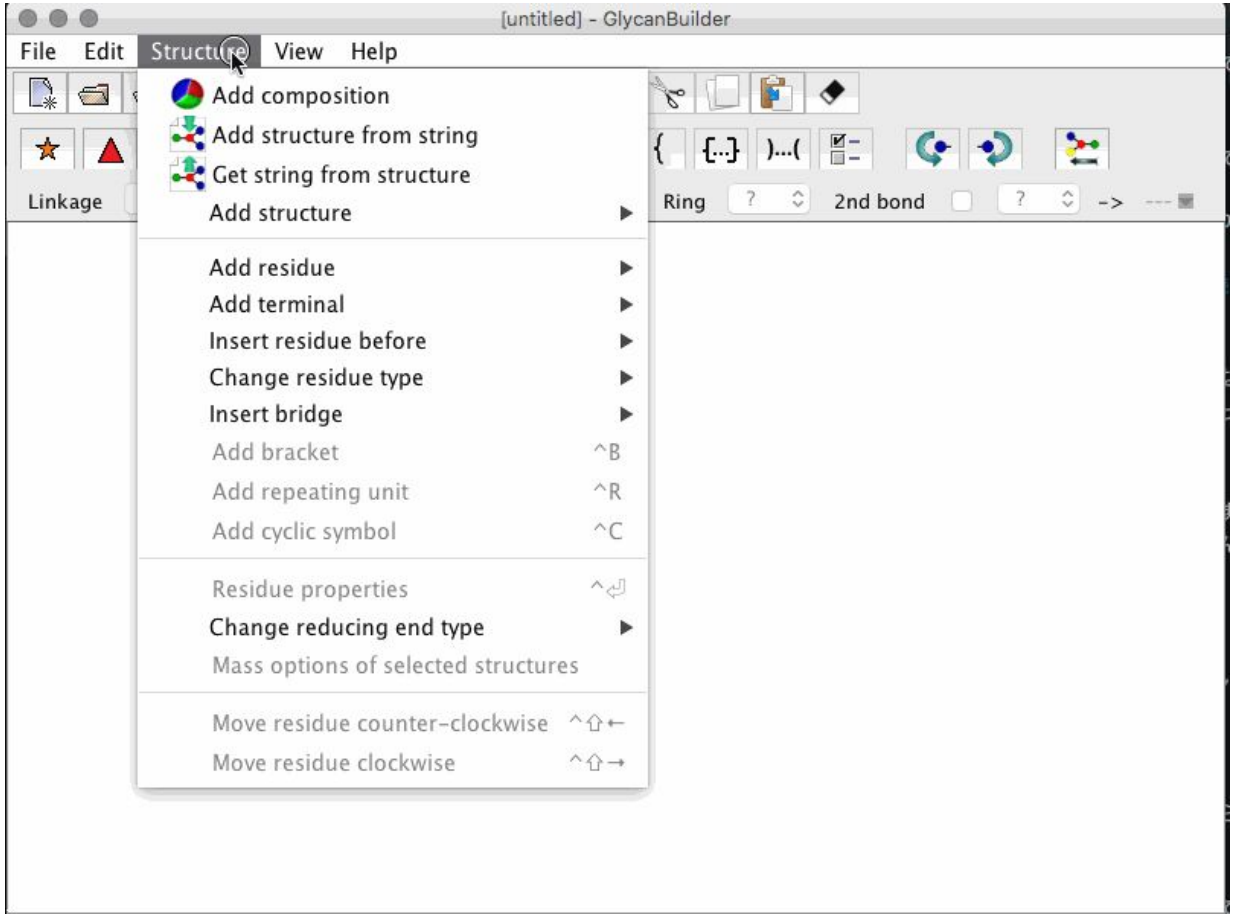
糖鎖構造描画ツール

創価大学

GlycanBuilderをもとに機能を追加

- SNFGシンボルへの対応
- 対応できる構造の追加
- WURCS入出力

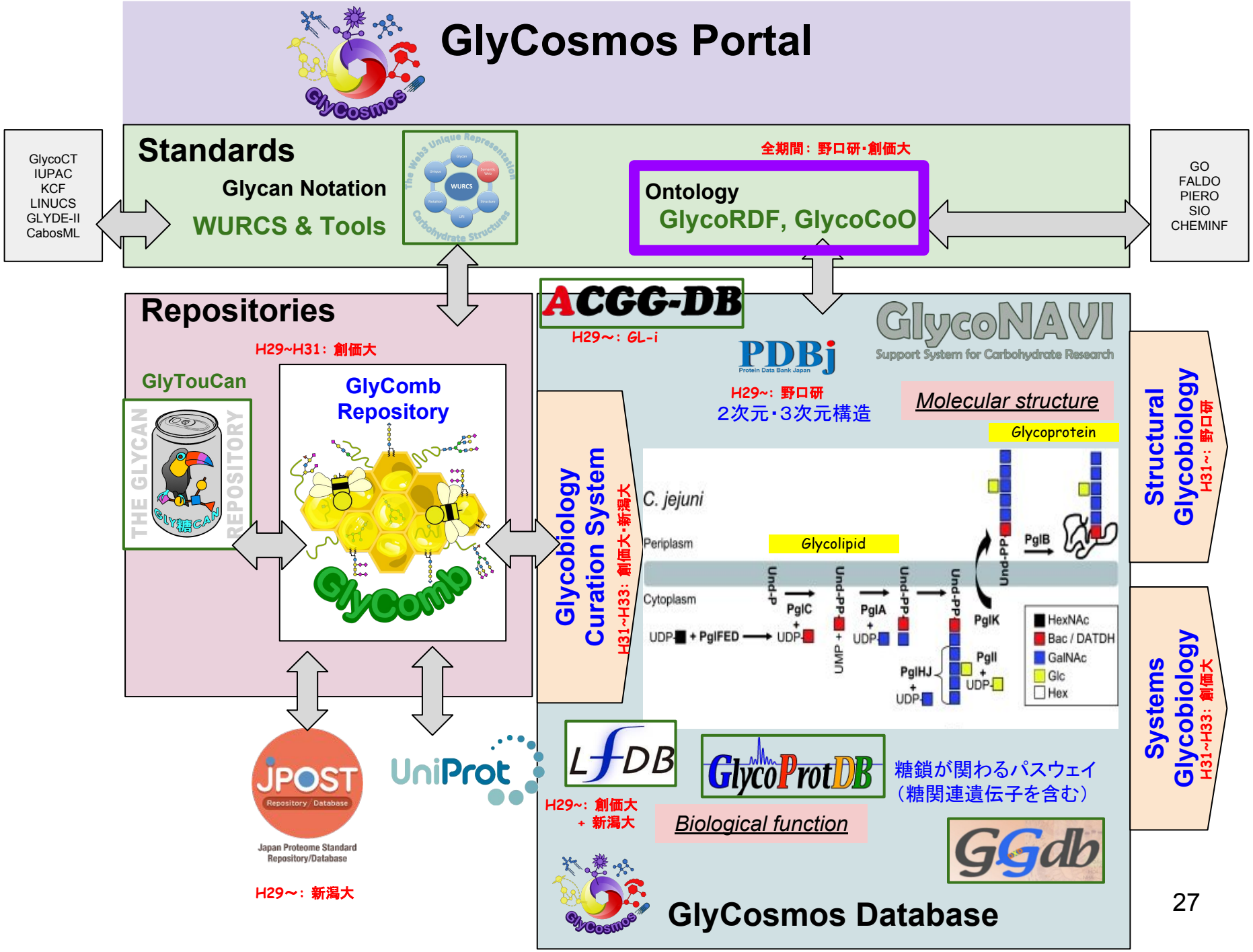
Tsuchiya, S., Aoki, N. P., Shinmachi, D., Matsubara, M., Yamada, I., Aoki-Kinoshita, K. F., & Narimatsu, H. (2017). Implementation of GlycanBuilder to draw a wide variety of ambiguous glycans. *Carbohydrate research*, *445*, 104-116.



THE GLYCAN REPOSITORY

GLY糖CAN

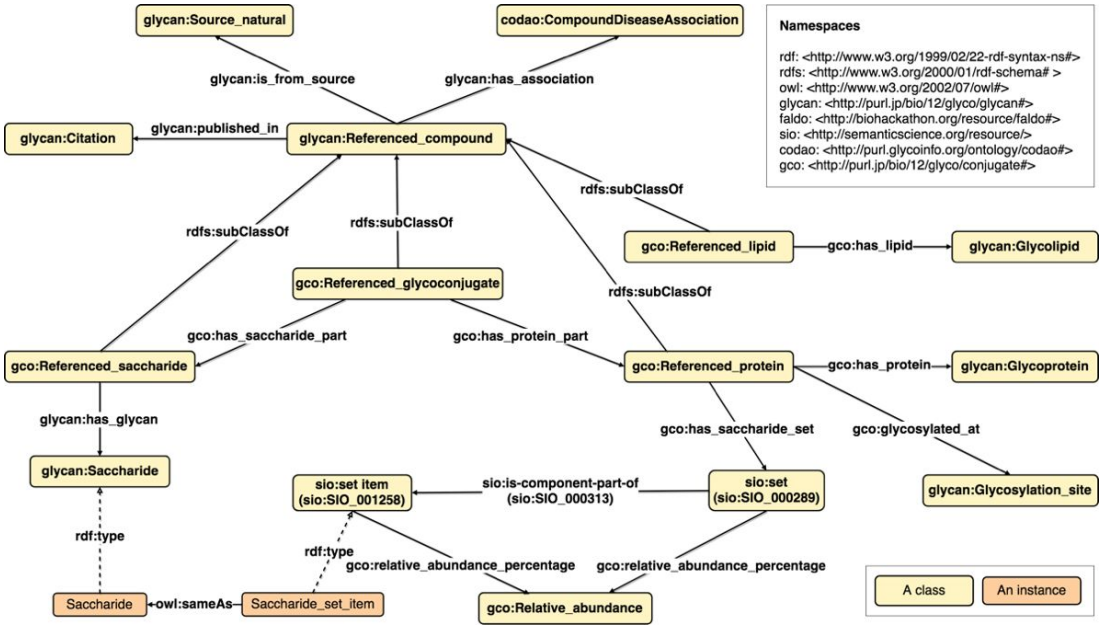
GUI


GlyCosmos Portal
GlycoCT
IUPAC
KCF
LINUCS
GLYDE-II
CabosML
Standards
Glycan Notation
WURCS & Tools
全期間：野口研・創価大
Ontology
GlycoRDF, GlycoCoO
GO
FALDO
PIERO
SIO
CHEMINF
Repositories
H29~H31：創価大
GlyTouCan
THE GLYCAN REPOSITORY
GlyComb Repository
ACGG-DB
H29～：GL-i
PDBj
Protein Data Bank Japan
H29~：野口研
2次元・3次元構造
GlycoNAVI
Support System for Carbohydrate Research
Molecular structure
Glycoprotein
Glycobiology Curation System
H31~H33：創価大・新潟大
C. jejuni
Periplasm
Glycolipid
Cytoplasm
PglC
PglA
PglK
PglB
PglIHJ
PglI
HexNAc
Bac / DATDH
GalNAc
Glc
Hex
Structural Glycobiology
H31~：野口研
Systems Glycobiology
H31~H33：創価大
JPOST
Repository / Database
Japan Proteome Standard Repository/Database
H29～：新潟大
UniProt
LfDB
H29~：創価大
＋ 新潟大
GlycoProtDB
糖鎖が関わるパスウェイ
（糖関連遺伝子を含む）
Biological function
GGdb
GlyCosmos Database

複合糖質オントロジー

創価大学

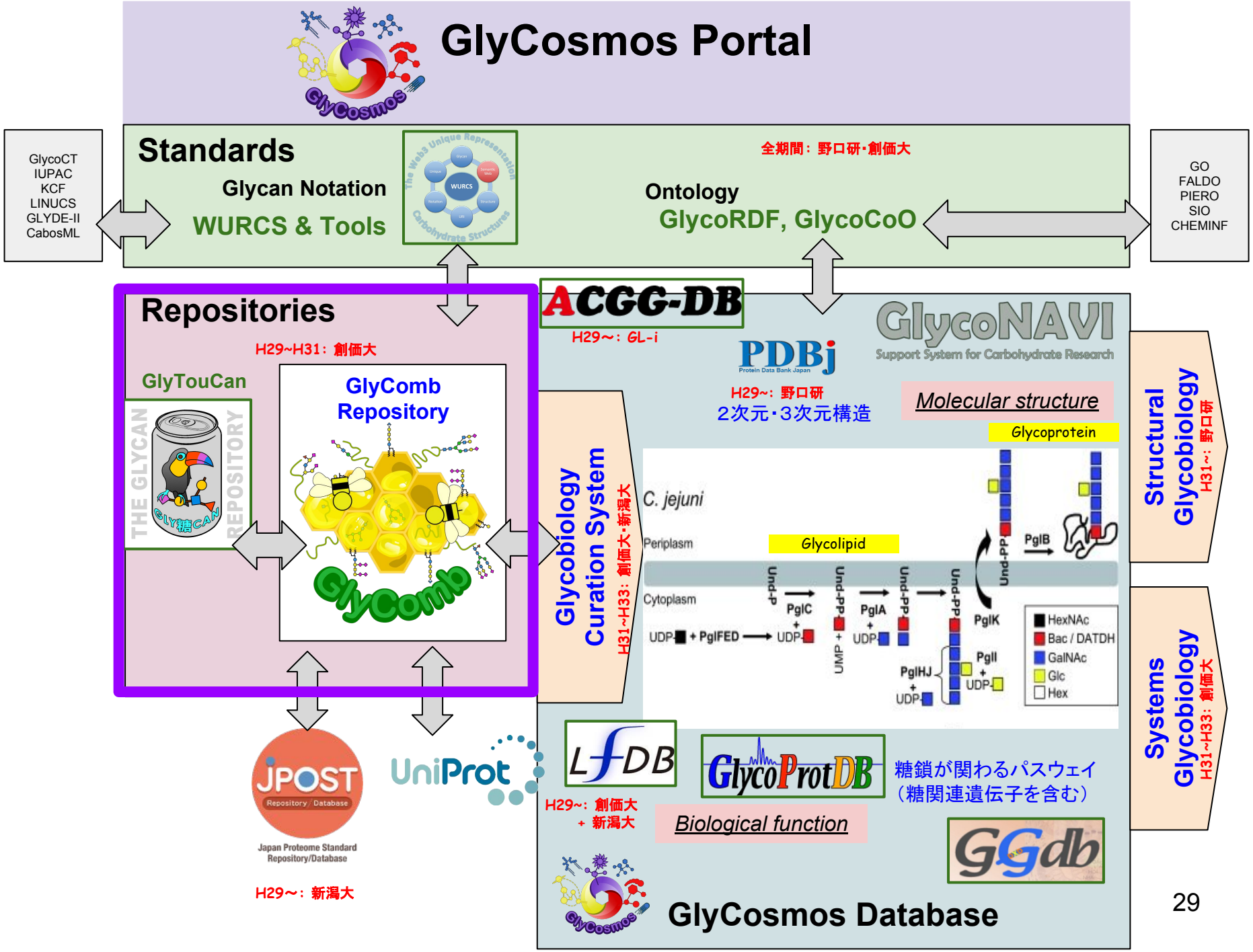
複合糖質オントロジー（GlycoCoO）を開発した。GlyCoCoOは複合糖質データ（糖タンパク質・糖脂質構造、糖鎖存在比、サンプル情報（生物種、細胞株、組織）、書誌情報、疾患情報（疾患名、DOID）をRDF化するための標準オントロジです。



- GlycoRDF
- FALDO
- SIO
- UO
- UniProt core
- CODAO

国際版バイオハッカソン、International Life Science Integration Workshopなどで共同開発

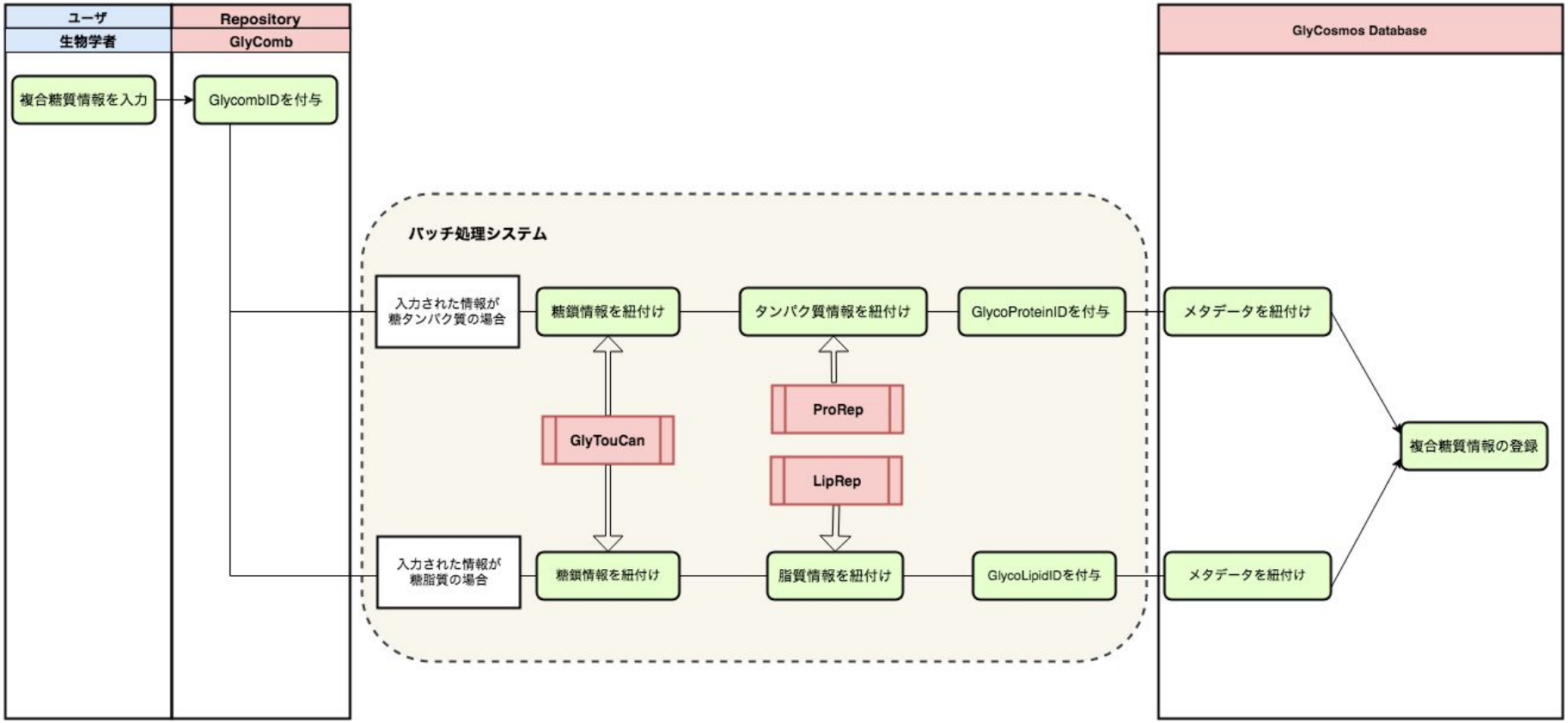
GlyCosmos
GlyGen
GlycoNAVI Support System for Carbohydrate Research
UniCarbKB
GlyConnect
UniProt


GlyCosmos Portal
GlycoCT
IUPAC
KCF
LINUCS
GLYDE-II
CabosML
Standards
Glycan Notation
WURCS & Tools
全期間：野口研・創価大
Ontology
GlycoRDF, GlycoCoO
GO
FALDO
PIERO
SIO
CHEMINF
Repositories
H29~H31：創価大
GlyTouCan
THE GLYCAN REPOSITORY
GlyComb Repository
ACGG-DB
H29～：GL-i
PDBj
Protein Data Bank Japan
H29~：野口研
2次元・3次元構造
GlycoNAVI
Support System for Carbohydrate Research
Molecular structure
Glycoprotein
Glycobiology Curation System
H31~H33：創価大・新潟大
C. jejuni
Periplasm
Glycolipid
Cytoplasm
Und-P
PglC
Und-PP
PglA
PglK
PglB
PglIHJ
PglI
HexNAc
Bac / DATDH
GalNAc
Glc
Hex
Structural Glycobiology
H31~：野口研
Systems Glycobiology
H31~H33：創価大
JPOST
Repository / Database
Japan Proteome Standard Repository/Database
H29～：新潟大
UniProt
LfDB
H29~：創価大
＋ 新潟大
GlycoProtDB
糖鎖が関わるパスウェイ
（糖関連遺伝子を含む）
Biological function
GGdb
GlyCosmos Database

リポジトリ→データベース連携方針

創価大学

複合糖質構造の登録



複合糖質リポジトリ: GlyComb

創価大学

糖タンパク質、糖脂質といった複合糖質構造に対してアクセッション番号を割り当てるリポジトリ

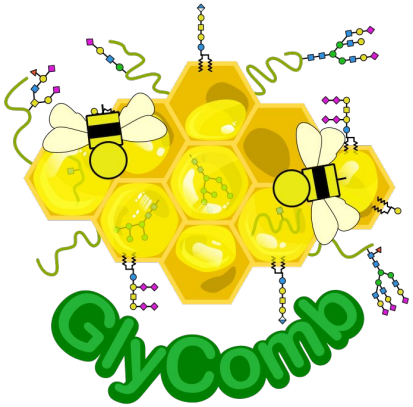
UniProt ID/LipidMAPS ＋ 糖鎖修飾位置 ＋ GlyTouCan アクセッション#

糖タンパク質の例:

P00738+184+G22340YC

P00738+184+G74508NJ

P00738+207+G73006TR



GlyComb登録システム

創価大学

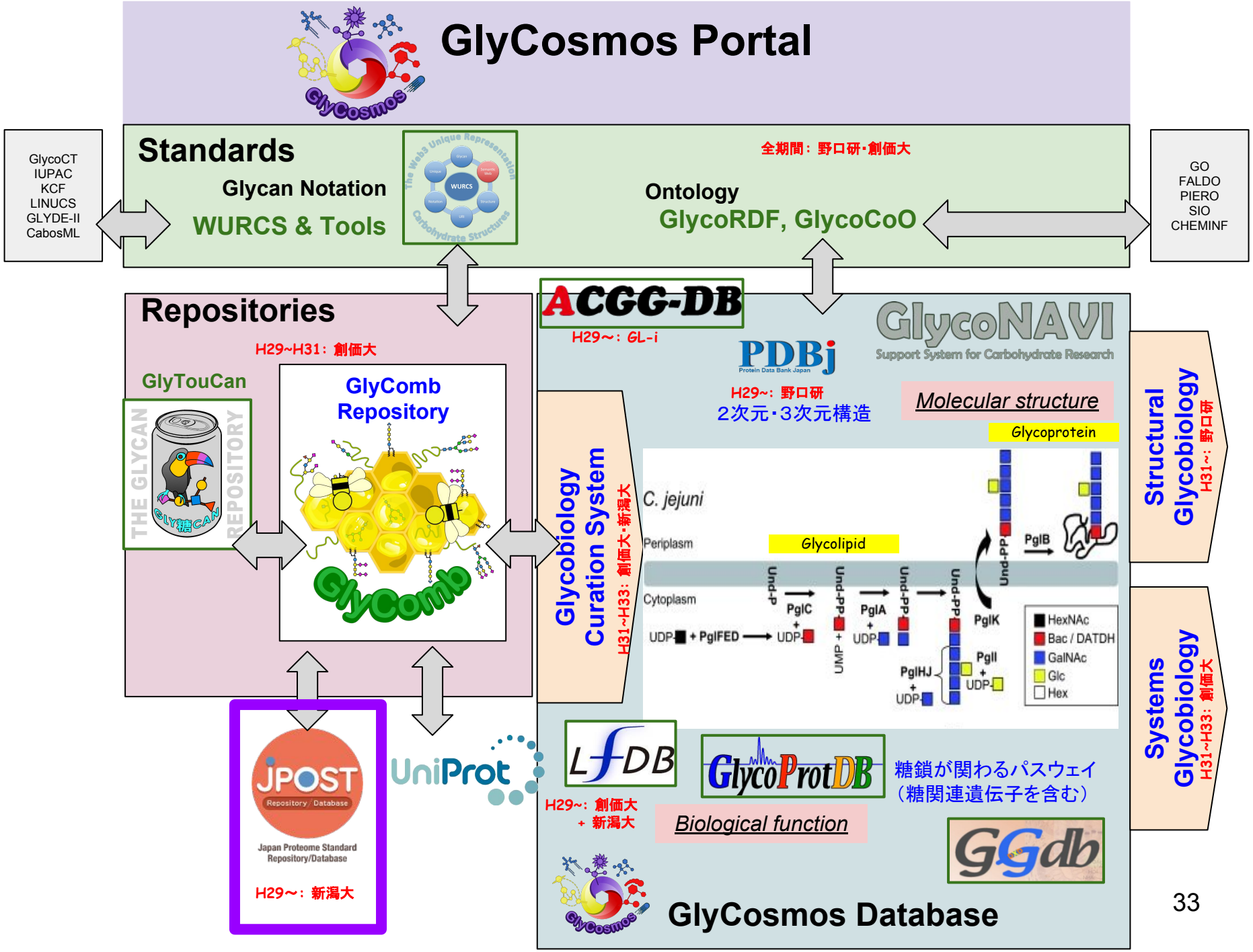
入力から登録完了までの処理を開発中

入力：
P00738+184+G22340YC

内部レポジトリ
- *ProRep：アミノ酸配列リポジトリ
- *LipRep：脂質リポジトリ

＊登録された時点の配列を保持するため、内部でリポジトリを設置

登録（SHA256ハッシュ値）：
95723b585bfd79ac6cb50473c1d4492c0ce9f29f4a9a485beed3a58c63835a2d


GlyCosmos Portal
GlycoCT
IUPAC
KCF
LINUCS
GLYDE-II
CabosML
Standards
Glycan Notation
WURCS & Tools
全期間：野口研・創価大
Ontology
GlycoRDF, GlycoCoO
GO
FALDO
PIERO
SIO
CHEMINF
Repositories
H29~H31：創価大
GlyTouCan
THE GLYCAN REPOSITORY
GlyComb Repository
ACGG-DB
H29～：GL-i
PDBj
Protein Data Bank Japan
H29~：野口研
2次元・3次元構造
GlycoNAVI
Support System for Carbohydrate Research
Molecular structure
Glycoprotein
Glycobiology Curation System
H31~H33：創価大・新潟大
C. jejuni
Periplasm
Glycolipid
Cytoplasm
UDP + PglFED
PglC
PglA
PglIK
PglIHJ
PglI
PglB
HexNAc
Bac / DATDH
GalNAc
Glc
Hex
Structural Glycobiology
H31~：野口研
Systems Glycobiology
H31~H33：創価大
JPOST
Repository / Database
Japan Proteome Standard Repository/Database
H29～：新潟大
UniProt
LfDB
H29~：創価大 + 新潟大
GlycoProtDB
糖鎖が関わるパスウェイ
（糖関連遺伝子を含む）
Biological function
GGdb
GlyCosmos Database

GlycoPOST

創価大学

グライコプロテオミクス関連実験から得られた質量分析データのためのリポジトリ

実験から得られた生データ（ファイル）と、実験条件などのメタデータを収載する。

MIRAGE

ガイドラインに準拠

Glyco POST

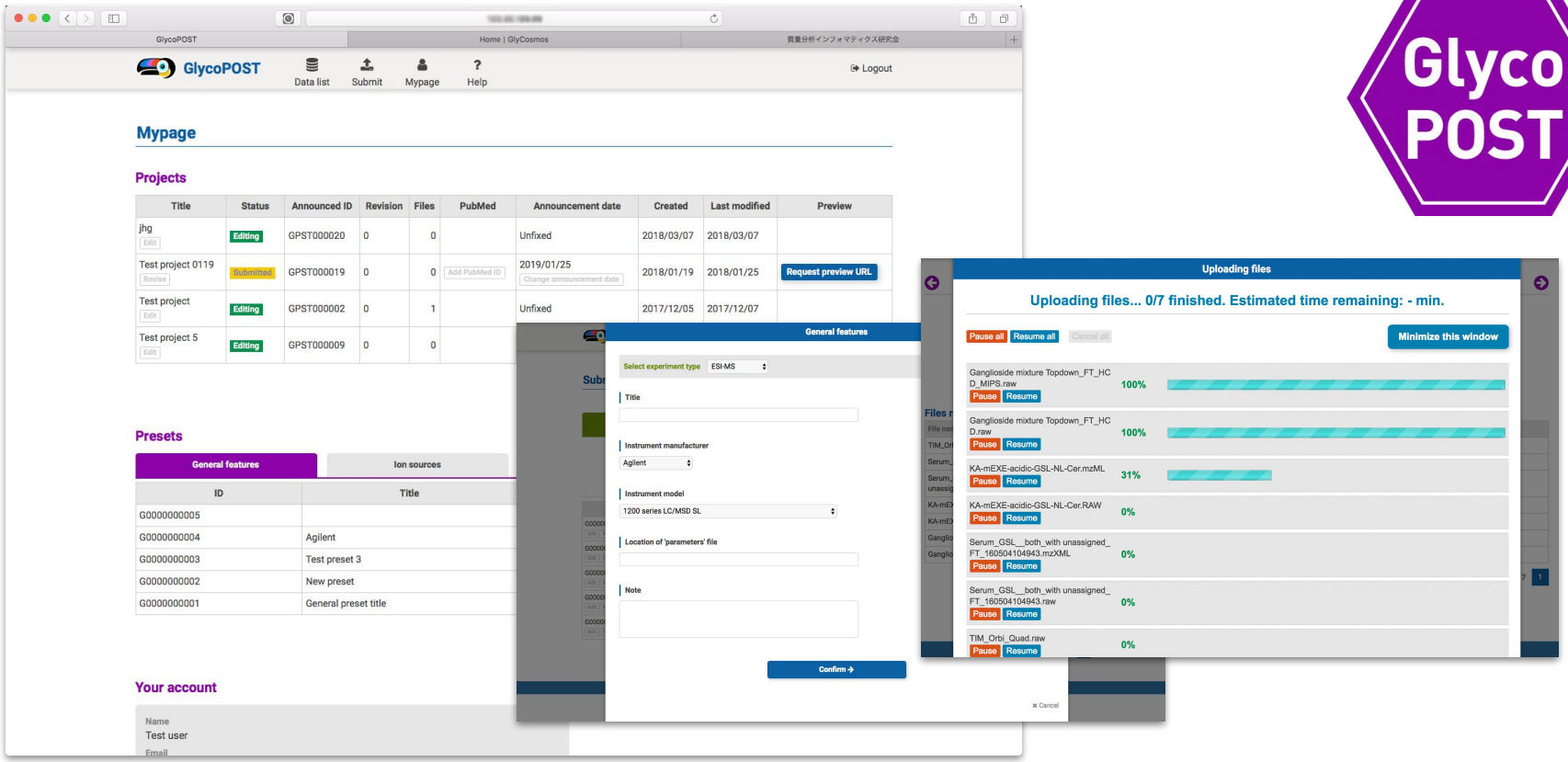
継承・連携

jPOST Repository/Database

Japan Proteome Standard Repository/Database

メタデータの入力方法や関連するデータの相互参照方法について、MIRAGE、jPOSTの両プロジェクトと連携しながら開発を進めている。

Webアプリケーション概要

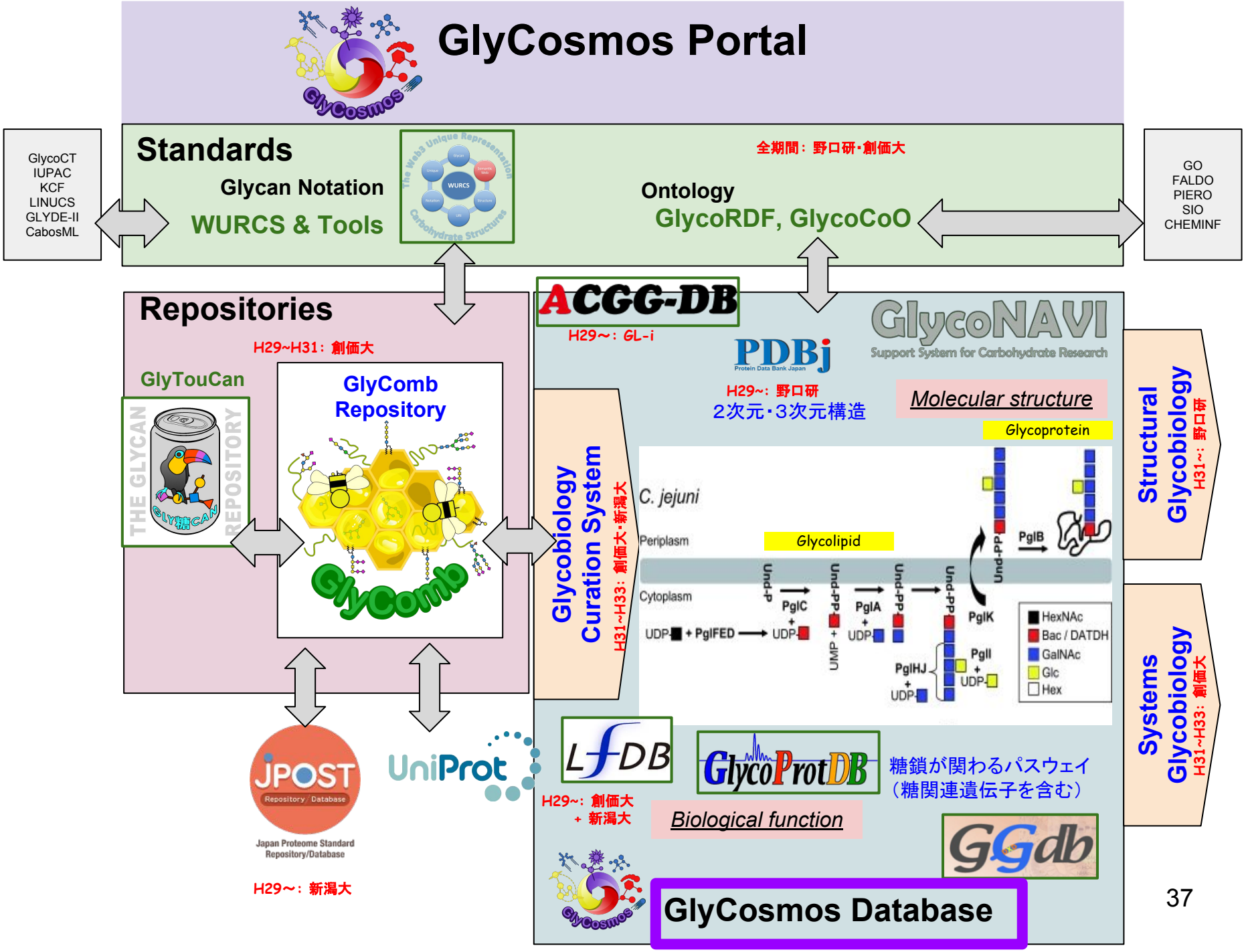


入力内容の再利用やファイルの高速転送などの機能を備えており、ユーザーの手間を軽減しながら有用なデータを収集することを目指している。

実験条件の入力を効率化

- MIRAGEガイドラインに準拠しており、UniCarb-DRと相互に入力データのインポート・エクスポートが可能である。
- 衆知のオントロジーやボキャブラリーから選択・予測入力させることにより、研究者による表現のばらつきをなくし、検索・再利用を容易にする。
- 実験機器に付属のソフトウェアが出力するファイルから実験プロトコルを読み取り、一部のメタデータを自動的に入力する機能を開発中。

研究者、MIRAGE・UniCarb-DR関係者と意見交換しながら開発を進めている。


GlyCosmos Portal
GlycoCT
IUPAC
KCF
LINUCS
GLYDE-II
CabosML
Standards
Glycan Notation
WURCS & Tools
全期間：野口研・創価大
Ontology
GlycoRDF, GlycoCoO
GO
FALDO
PIERO
SIO
CHEMINF
Repositories
H29~H31：創価大
GlyTouCan
THE GLYCAN REPOSITORY
GlyComb Repository
ACGG-DB
H29～：GL-i
PDBj
Protein Data Bank Japan
H29~：野口研
2次元・3次元構造
GlycoNAVI
Support System for Carbohydrate Research
Molecular structure
Glycoprotein
Glycobiology Curation System
H31~H33：創価大・新潟大
C. jejuni
Periplasm
Glycolipid
Cytoplasm
PglC
PglA
PglK
PglB
PglIHJ
PglI
HexNAc
Bac / DATDH
GalNAc
Glc
Hex
Structural Glycobiology
H31~：野口研
Systems Glycobiology
H31~H33：創価大
JPOST
Repository / Database
Japan Proteome Standard Repository/Database
H29～：新潟大
UniProt
LfDB
H29~：創価大
＋ 新潟大
GlycoProtDB
糖鎖が関わるパスウェイ
（糖関連遺伝子を含む）
Biological function
GGdb
GlyCosmos Database

GlyCosmos Portal (テスト環境)

創価大学

GlyCosmos Portal Submissions Resources Feedback Help Sign up Login

Home Overview

SUBMISSIONS
- GlyTouCan
- GlyComb
- GlycoPOST

RESOURCES
- Genes/Proteins/Lipids
  - GGDB
  - GDGDB
  - GPDB
  - LfDB
  - GlycoAbun
  - GlyCosmos Proteins
  - GlyCosmos Lipids
- Glycans/Glycoconjugate
  - GlyCosmos Glycans
  - GPDB
  - GlycoAbun
  - GlyCosmos Glycoconjugat
- Glycomes
  - Total Glycome Database
  - GlycomeAtlas
- Pathways/Diseases
  - GlyCosmos Pathways
  - GDGDB
  - PACDB

Welcome to GlyCosmos!

As a foundation for integrating glycoscience research, we have started developing the Glycoscience Portal called GlyCosmos.

Learn more

Submissions

Glycans

GlyTouCan

is the international glycan structure repository.

Glycoconjugates

GlyComb

is the international glycoconjugate repository.

Glycoproteomics Data

GlycoPOST

GlycoPOST is a data repository of sharing glycoproteomics data.

https://glycopost.glycosmos.org

Resources

Databasaes

Genes/Proteins/Lipids

Databases

Glycans/Glycoconjugates

Databases

Glycomes

Databases

Pathways/Diseases

News

Tweets by @GlyCosmos

Hmm, an empty timeline. That's weird.

Check for Tweets

Embed View on Twitter

Follow @GlyCosmos

Other Related Resources

GlyConnect
is a platform integrating sources of information to help characterise the molecular components of protein glycosylation.

jPOST
is a proteomic database to integrate proteome datasets generated from multiple projects and institutions.

PDBj
is part of the Japanese National Project on Protein Structural and Functional Analyses.

PubChem
is an open chemistry database at the National Institutes of Health (NIH).

UniCarbKB
is a knowledge base for curated

GlyCosmos Portal (テスト環境)

創価大学

GlyCosmos Portal Submissions Resources Feedback Help Sign up Login

Home Overview

SUBMISSIONS
GlyTouCan
GlyComb
GlycoPOST

RESOURCES
Genes/Proteins/Lipids
- GGDB
- GDGDB
- GPDB
- LfDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Proteins
- GlyCosmos Lipids

Glycans/Glycoconjugate
- GlyCosmos Glycans
- GPDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Glycoconjugat

Glycomes
- Total Glycome Database
- GlycomeAtlas

Pathways/Diseases
- GlyCosmos Pathways
- GDGDB
- PACDB

Welcome to GlyCosmos!

As a foundation for integrating glycoscience research, we have started developing the Glycoscience Portal called GlyCosmos.

Learn more

Submissions

Glycans

GlyTouCan

is the international glycan structure repository.

Glycoconjugates

GlyComb

is the international glycoconjugate repository.

Glycoproteomics Data

GlycoPOST

GlycoPOST is a data repository of sharing glycoproteomics data.

https://glycopost.glycosmos.org

Resources

Databasaes

Genes/Proteins/Lipids

Databases

Glycans/Glycoconjugates

Databases

Glycomes

Databases

Pathways/Diseases

News

Tweets by @GlyCosmos

Hmm, an empty timeline. That's weird.

Check for Tweets

Embed View on Twitter

Follow @GlyCosmos

Other Related Resources

GlyConnect
is a platform integrating sources of information to help characterise the molecular components of protein glycosylation.

jPOST
is a proteomic database to integrate proteome datasets generated from multiple projects and institutions.

PDBj
is part of the Japanese National Project on Protein Structural and Functional Analyses.

PubChem
is an open chemistry database at the National Institutes of Health (NIH).

UniCarbKB
is a knowledge base for curated glycoconjugate information and their annotations.

UniProt
is a freely available, comprehensive resource of high quality protein sequences and functional

GlyCosmos Portal Submissions Resources Feedback Help Sign up Login

Home
Overview

SUBMISSIONS
GlyTouCan
GlyComb
GlycoPOST

RESOURCES
Genes/Proteins/Lipids
- GGDB
- GDGDB
- GPDB
- LfDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Proteins
- GlyCosmos Lipids

Glycans/Glycoconjuga
- GlyCosmos Glycans
- GPDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Glycoconju

Glycomes
- Total Glycome Database
- GlycomeAtlas

Pathways/Diseases
- GlyCosmos Pathways
- GDGDB
- PACDB

Genes

ACGG Database

GlycoGene Database (GGDB)

GGDB is a database which includes genes associated with glycan synthesis such as glycosyltransferase, sugar nucleotide synthases, sugar-nucleotide transporters, and sulfotransferases.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/ggdb

ACGG Database

Glyco-Disease Genes Database (GDGDB)

GDGDB is a database of glycan-related diseases and their responsible genes.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/diseases/gdgdb

Proteins

ACGG Database

GlycoProtDB (GPDB)

GPDB is a glycoprotein database providing information of Asn (N)-glycosylated proteins and their glycosylated site(s), which were constructed by employing a bottom-up strategy using actual glycopeptide sequences identified by LC/MS-based glycoproteomic technologies.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/gpdb

ACGG Database

Lectin Frontier DataBase (LfDB)

LfDB provides quantitative interaction data in terms of the affinity constants (Ka) of a series of lectins toward a panel of pyridylaminated (PA) glycans obtained by an automated frontal affinity chromatography with fluorescence detection (FAC-FD) system.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/lfcb

GlycoNAVI Database

GlycoAbun

GlycoAbun is dataset of abundance ratio for glycans. This is a content of GlycoNAVI.

— GlycoBio Databases in *GlycoNAVI*

link

GlyCosmos Protein Database

GlyCosmos Proteins

from ProRep.

link

Lipids

GlyCosmos Lipid Database

GlyCosmos Lipids

from LipRep.

link

Twitter GitHub API Back to top

GlyCosmos Portal (テスト環境)

創価大学

GlyCosmos Portal Submissions Resources Feedback Help Sign up Login

Home
Overview

SUBMISSIONS
GlyTouCan
GlyComb
GlycoPOST

RESOURCES
Genes/Proteins/Lipids
- GGDB
- GDGDB
- GPDB
- LfDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Proteins
- GlyCosmos Lipids

Glycans/Glycoconjuga
- GlyCosmos Glycans
- GPDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Glycoconju

Glycomes
- Total Glycome Database
- GlycomeAtlas

Pathways/Diseases
- GlyCosmos Pathways
- GDGDB
- PACDB

Genes

ACGG Database

GlycoGene Database (GGDB)

GGDB is a database which includes genes associated with glycan synthesis such as glycosyltransferase, sugar nucleotide synthases, sugar-nucleotide transporters, and sulfotransferases.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/ggdb

ACGG Database

Glyco-Disease Genes Database (GDGDB)

GDGDB is a database of glycan-related diseases and their responsible genes.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/diseases/gdgdb

Proteins

ACGG Database

GlycoProtDB (GPDB)

GPDB is a glycoprotein database providing information of Asn (N)-glycosylated proteins and their glycosylated site(s), which were constructed by employing a bottom-up strategy using actual glycopeptide sequences identified by LC/MS-based glycoproteomic technologies.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/gpdb

ACGG Database

Lectin Frontier DataBase (LfDB)

LfDB provides quantitative interaction data in terms of the affinity constants (Ka) of a series of lectins toward a panel of pyridylaminated (PA) glycans obtained by an automated frontal affinity chromatography with fluorescence detection (FAC-FD) system.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/lfcb

GlycoNAVI Database

GlycoAbun

GlycoAbun is dataset of abundance ratio for glycans. This is a content of GlycoNAVI.

— GlycoBio Databases in *GlycoNAVI*

link

GlyCosmos Protein Database

GlyCosmos Proteins

from ProRep.

link

Lipids

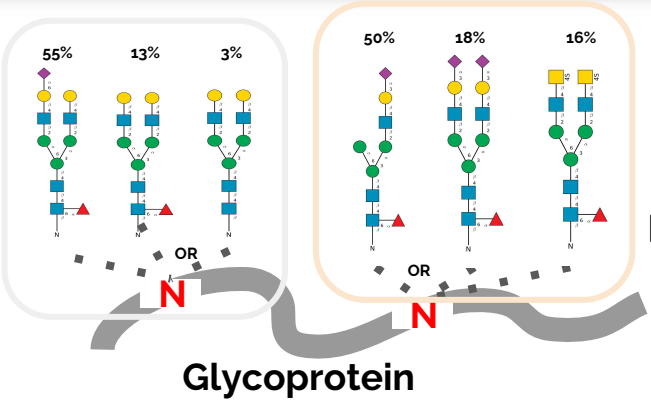
GlyCosmos Lipid Database

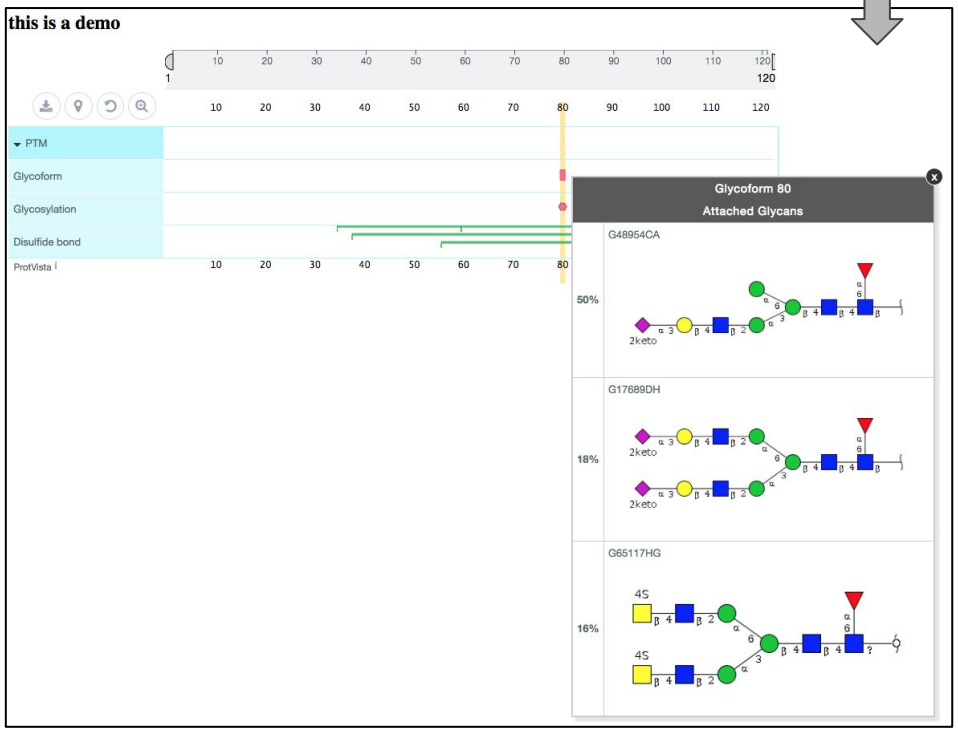
GlyCosmos Lipids

from LipRep.

link

Twitter GitHub API Back to top





GlyCosmos Portal (テスト環境)

創価大学

GlyCosmos Portal Submissions Resources Feedback Help

Home Overview

SUBMISSIONS
GlyTouCan
GlyComb
GlycoPOST

RESOURCES
Genes/Proteins/Lipids
- GGDB
- GDGDB
- GPDB
- LfDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Proteins
- GlyCosmos Lipids

Glycans/Glycoconjugate
- GlyCosmos Glycans
- GPDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Glycoconjugat

Glycomes
- Total Glycome Database
- GlycomeAtlas

Pathways/Diseases
- GlyCosmos Pathways
- GDGDB
- PACDB

Welcome to GlyCosmos!

As a foundation for integrating glycoscience research, we have started developing the Glycoscience Portal called GlyCosmos.

Learn more

Submissions

Glycans

GlyTouCan

is the international glycan structure repository.

Glycoconjugates

GlyComb

is the international glycoconjugate repository.

Glycoproteomics Data

GlycoPOST

GlycoPOST is a data repository of sharing glycoproteomics data.

https://glycopost.glycosmos.org

Resources

Databasaes

Genes/Proteins/Lipids

Databases

Glycans/Glycoconjugates

Databases

Glycomes

Databases

Pathways/Diseases

Tweets

Hmm, a

Embed

GlyConn
is a platfor
informatior
molecular
glycosylati

jPOST
is a proteo
integrate p
generated
and institu

PDBj
is part of tl
Project on
Functional

PubChe
is an open
the Nation
(NIH).

UniCarb
is a knowle
glycoconju
their annot

UniProt
is a freely
resource of high quality protein
sequences and functional

GlyCosmos Portal Submissions Resources Feedback Help Sign up Login

Home
Overview

SUBMISSIONS
GlyTouCan
GlyComb
GlycoPOST

RESOURCES
Genes/Proteins/Lipids
- GGDB
- GDGDB
- GPDB
- LfDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Proteins
- GlyCosmos Lipids

Glycans/Glycoconjuga
- GlyCosmos Glycans
- GPDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Glycoconju

Glycomes
- Total Glycome Database
- GlycomeAtlas

Pathways/Diseases
- GlyCosmos Pathways
- GDGDB
- PACDB

Glycans

Glycan Database

GlyCosmos Glycans

GlyCosmos Glycan Database.

link

Glycoconjugates

ACGG Database

GlycoProtDB (GPDB)

GPDB is a glycoprotein database providing information of Asn (N)-glycosylated proteins and their glycosylated site(s), which were constructed by employing a bottom-up strategy using actual glycopeptide sequences identified by LC/MS-based glycoproteomic technologies.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/gpdb

GlycoNAVI Database

GlycoAbun

GlycoAbun is dataset of abundance ratio for glycans. This is a content of GlycoNAVI.

— GlycoBio Databases in *GlycoNAVI*

link

Glycoconjugate Database

GlyCosmos Glycoconjugates

GlyCosmos Glycoconjugate Database.

link

Twitter GitHub API Back to top

Powered by Ruby on Rails.
Based on Bootstrap. Icons from Font Awesome. Web fonts from Google.

GlyCosmos Portal (テスト環境)

創価大学

GlyCosmos Portal Submissions Resources Feedback Help Sign up Login

Home Overview

SUBMISSIONS
GlyTouCan
GlyComb
GlycoPOST

RESOURCES
Genes/Proteins/Lipids
- GGDB
- GDGDB
- GPDB
- LfDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Proteins
- GlyCosmos Lipids

Glycans/Glycoconjugate
- GlyCosmos Glycans
- GPDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Glycoconjugat

Glycomes
- Total Glycome Database
- GlycomeAtlas

Pathways/Diseases
- GlyCosmos Pathways
- GDGDB
- PACDB

Welcome to GlyCosmos!

As a foundation for integrating glycoscience research, we have started developing the Glycoscience Portal called GlyCosmos.

Learn more

Submissions

Glycans

GlyTouCan

is the international glycan structure repository.

Glycoconjugates

GlyComb

is the international glycoconjugate repository.

Glycoproteomics Data

GlycoPOST

GlycoPOST is a data repository of sharing glycoproteomics data.

https://glycopost.glycosmos.org

Resources

Databasaes

Genes/Proteins/Lipids

Databases

Glycans/Glycoconjugates

Databases

Glycomes

Databases

Pathways/Diseases

Tweets by @

Hmm, an emp

Checl

Embed

Follow

Othe
Res

GlyConnect
is a platform int
information to h
molecular comp
glycosylation.

jPOST
is a proteomic d
integrate protec
generated from
and institutions.

PDBj
is part of the Ja
Project on Prote
Functional Analy

PubChem
is an open chem
the National Ins
(NIH).

UniCarbKB
is a knowledge
glycoconjugate
their annotation

UniProt
is a freely availa
resource of high
sequences and functional

GlyCosmos Portal Submissions Resources Feedback Help Sign up Login

Home Overview

SUBMISSIONS
GlyTouCan
GlyComb
GlycoPOST

RESOURCES
Genes/Proteins/Lipids
- GGDB
- GDGDB
- GlyCosmos Proteins
- LfDB
- GlyCosmos Lipids

Glycans/Glycoconjugate
- GlyCosmos Glycans
- GlyCosmos Glycoconjuga
- GPDB

Glycomes
- Total Glycome Database
- GlycomeAtlas

Pathways/Diseases
- GlyCosmos Pathways
- GDGDB
- PACDB

Glycomes

Glycome Database

Total Glycome Database

Total Glycome Database.

link

Glycome Database

GlycomeAtlas

Visualization of glycome profiling data on human, mouse and zebrafish tissue samples.

— RINGS Tools in *RINGS*

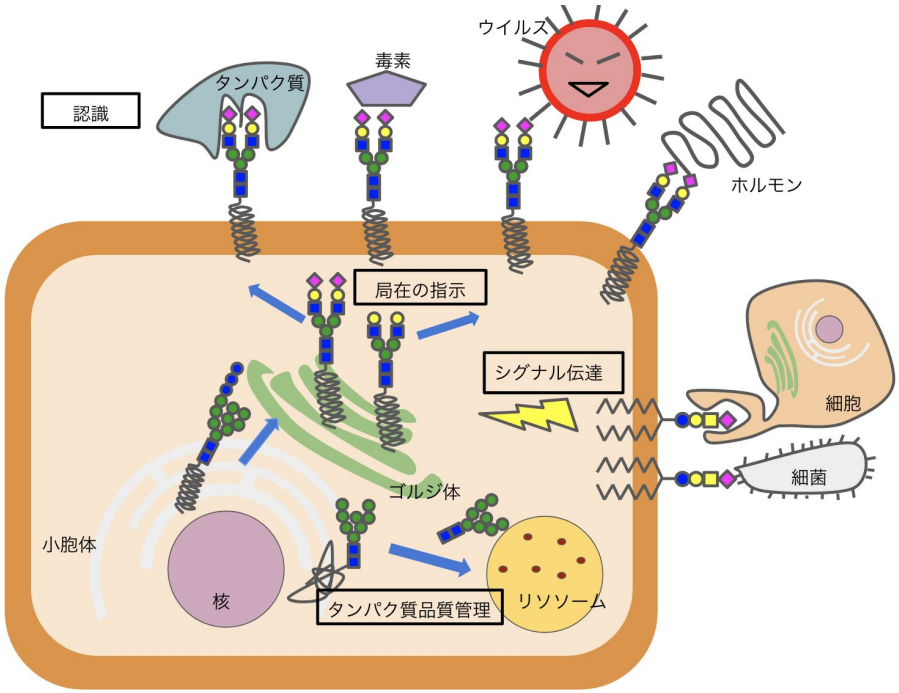
link

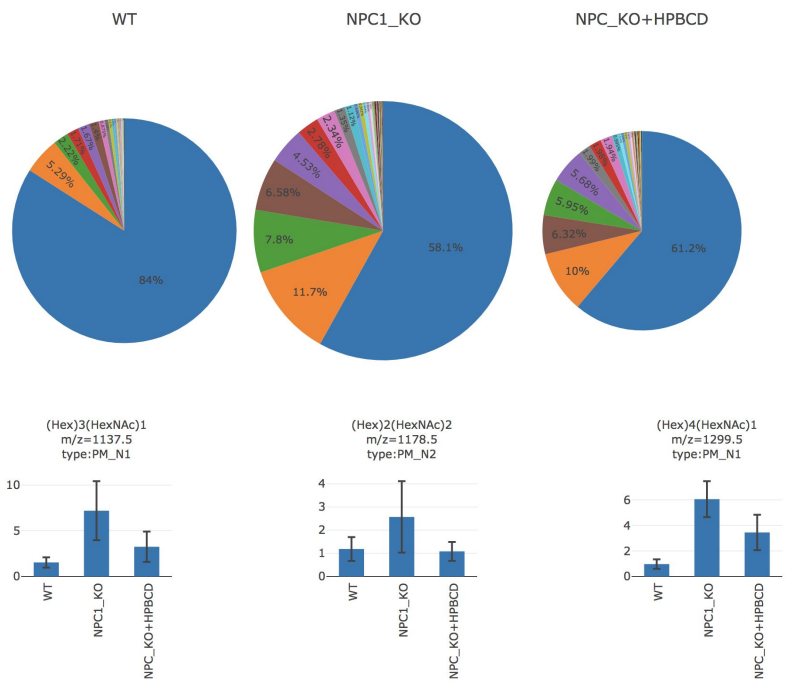
Twitter GitHub API Back to top

Powered by Ruby on Rails.
Based on Bootstrap. Icons from Font Awesome. Web fonts from Google.

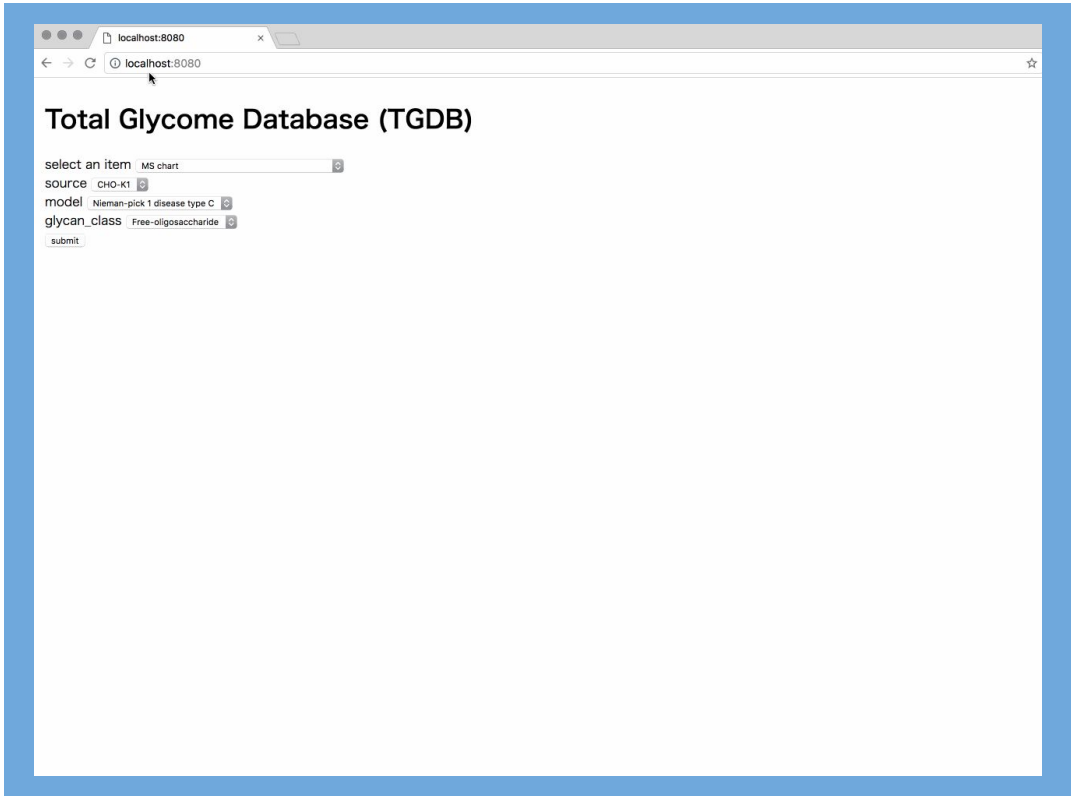
Total Glycome Database

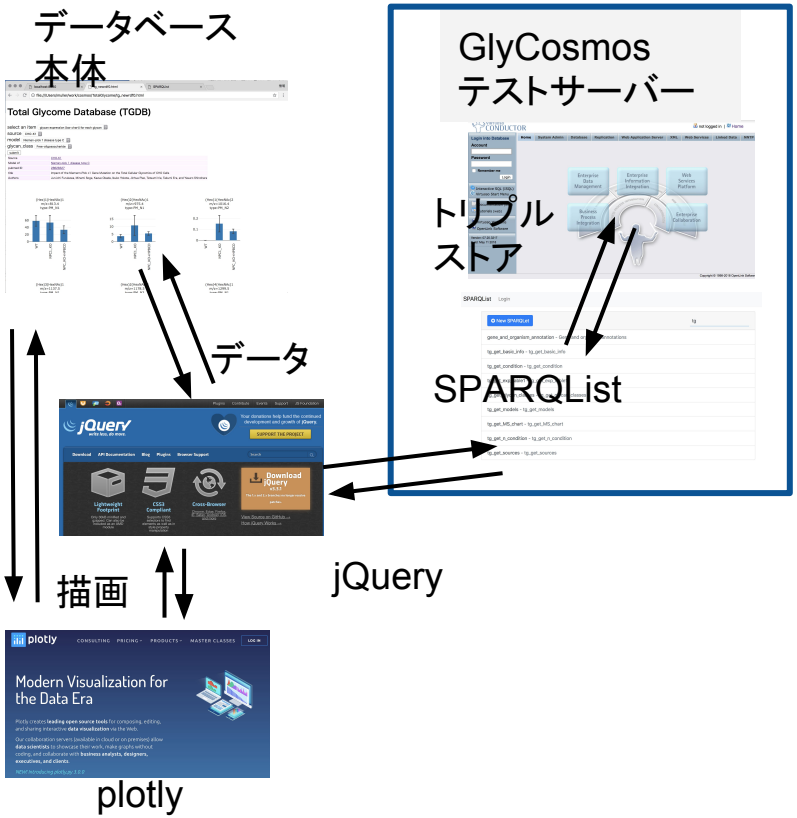
Total Glycome (総合グライコーム):
N結合型糖鎖, O結合型糖鎖, スフィンゴ糖脂質糖鎖, グリコサミノグリカン, 遊離糖鎖といったほぼ全てのクラスの糖鎖を網羅的に解析する手法.（Kagaku to Seibutsu 53(9): 586-592 (2015)）





Total Glycome Database



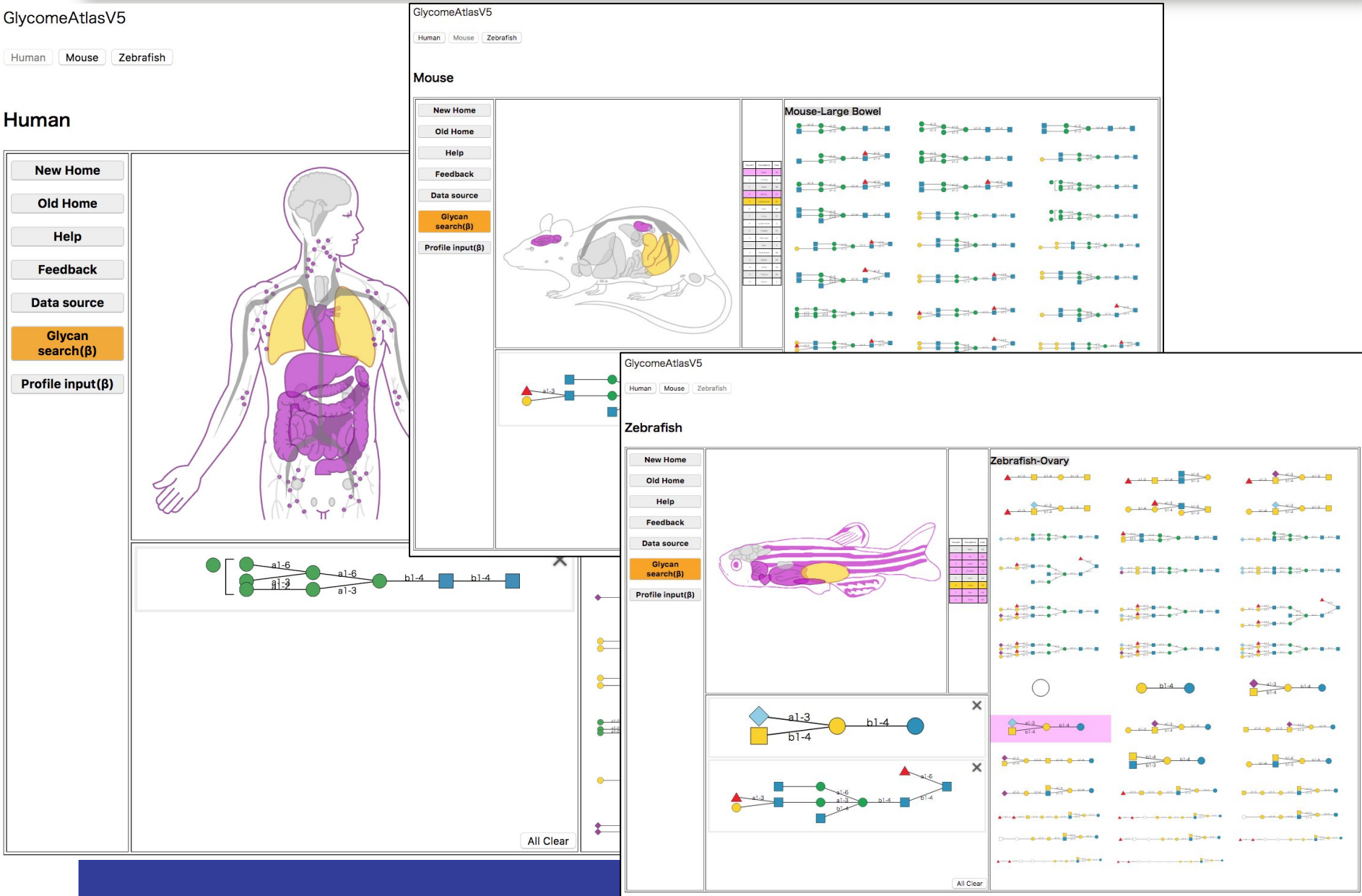


出版されている実験結果をデータベース化（試験公開中），近い将来パスウェイとの連携をはかる.

データ: Furukawa et al, J. Proteome Res. 16: 2802-2810 (2017)

GlycomeAtlas

創価大学



GlyCosmos Portal (テスト環境)

創価大学

GlyCosmos Portal Submissions Resources Feedback Help Sign up Login

Home Overview

SUBMISSIONS
GlyTouCan
GlyComb
GlycoPOST

RESOURCES
Genes/Proteins/Lipids
- GGDB
- GDGDB
- GPDB
- LfDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Proteins
- GlyCosmos Lipids

Glycans/Glycoconjugate
- GlyCosmos Glycans
- GPDB
- GlycoAbun
- GlyCosmos Glycoconjugat

Glycomes
- Total Glycome Database
- GlycomeAtlas

Pathways/Diseases
- GlyCosmos Pathways
- GDGDB
- PACDB

Welcome to GlyCosmos!

As a foundation for integrating glycoscience research, we have started developing the Glycoscience Portal called GlyCosmos.

Learn more

Submissions

Glycans

GlyTouCan

is the international glycan structure repository.

Glycoconjugates

GlyComb

is the international glycoconjugate repository.

Glycoproteomics Data

GlycoPOST

GlycoPOST is a data repository of sharing glycoproteomics data.

https://glycopost.glycosmos.org

Resources

Databasaes

Genes/Proteins/Lipids

Databases

Glycans/Glycoconjugates

Databases

Glycomes

Databases

Pathways/Diseases

News

Tweets by @GlyCosmos

Hmm, an empty timelin weird.

Check for Tweets

Embed Vie

Follow @GlyCosm

Other Rel Resource

GlyConnect

is a platform integrating information to help chara molecular components glycosylation.

jPOST

is a proteomic database integrate proteome data generated from multiple and institutions.

PDBj

is part of the Japanese Project on Protein Struct Functional Analyses.

PubChem

is an open chemistry dat the National Institutes of (NIH).

UniCarbKB

is a knowledge base for glycoconjugate informati their annotations.

UniProt

is a freely available, com resource of high quality sequences and function

GlyCosmos Portal Submissions Resources Feedback Help Sign up Login

Home Overview

SUBMISSIONS
GlyTouCan
GlyComb
GlycoPOST

RESOURCES
Genes/Proteins/Lipids
- GGDB
- GDGDB
- GlyCosmos Proteins
- LfDB
- GlyCosmos Lipids

Glycans/Glycoconjugat
- GlyCosmos Glycans
- GlyCosmos Glycoconjuga
- GPDB

Glycomes
- Total Glycome Database
- GlycomeAtlas

Pathways/Diseases
- GlyCosmos Pathways
- GDGDB
- PACDB

Pathways

Pathway Database

GlyCosmos Pathways

GlyCosmos Pathway Database.

link

Diseases

ACGG Database

Glyco-Disease Genes Database (GDGDB)

GDGDB is a database of glycan-related diseases and their responsible genes.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/diseases/gdgdb

ACGG Database

Pathogen Adherence to Carbohydrate Database (PACDB)

PACDB provides the information on pathogens (e.g. bacteria, fungus, toxin and virus) adhering to carbohydrates expressed on the cell surface of host animals or plants.

— ACGG-Database in *ACGG*

https://acgg.asia/db/diseases/pacdb

Twitter GitHub API Back to top

Powered by Ruby on Rails.
Based on Bootstrap. Icons from Font Awesome. Web fonts from Google.

GlyCosmos Pathway

創価大学

糖タンパク質が関与するPathwayを表示する機能の開発

・Reactome (Ver. 63) のデータ収集

Uniprotから抽出した33,134個の糖タンパクのリストをもとに、糖タンパク質が関与する7,151個のPathwayの情報をRDF形式で取得

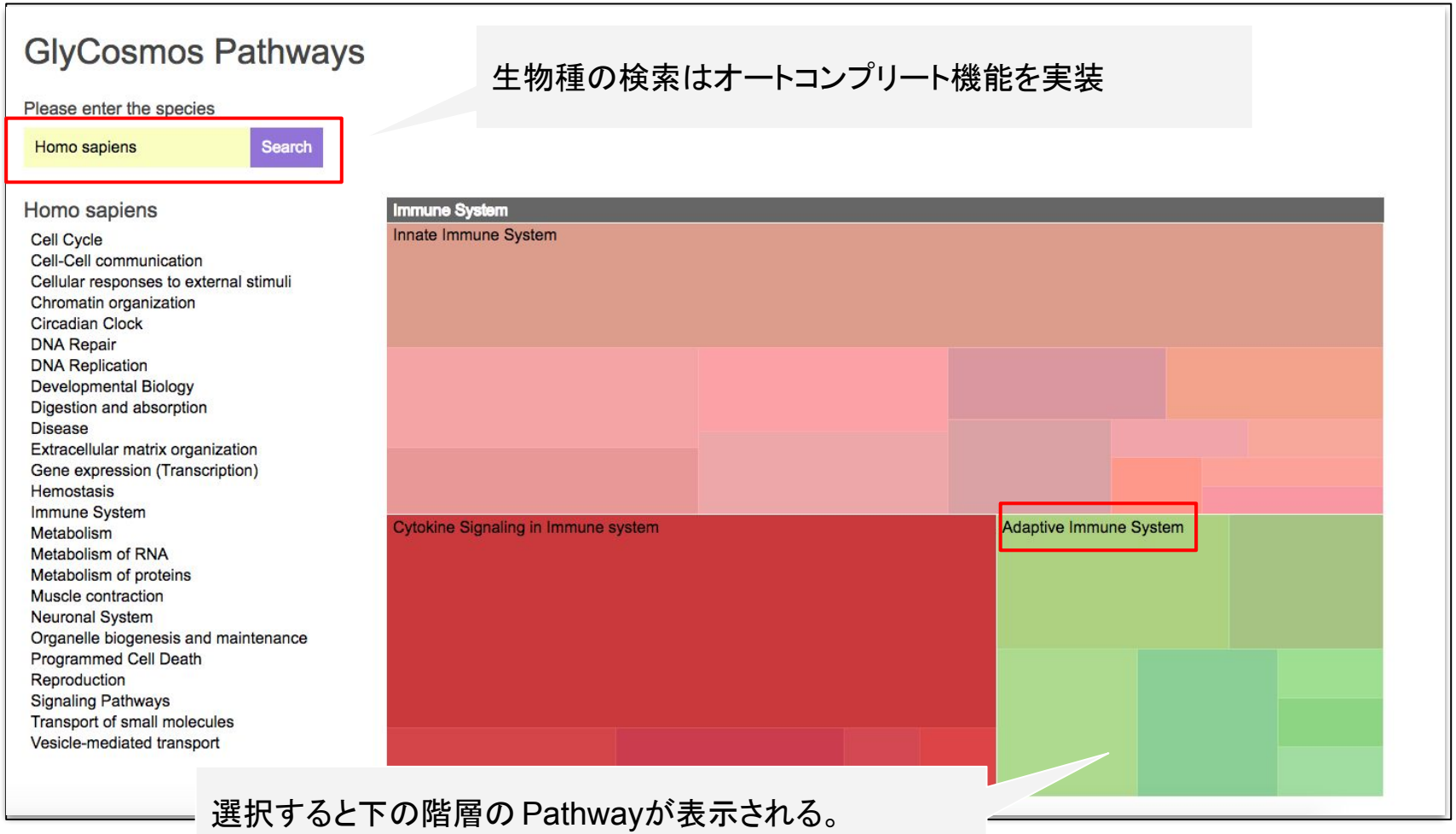
・Pathwayの一覧表示

SPARQListおよびd3sparqlを用いて、生物種ごとのPathwayリストを表示させる機能を作成

GlyCosmos Pathway

創価大学

Pathwayの表示 (テスト環境)



生物種の検索はオートコンプリート機能を実装

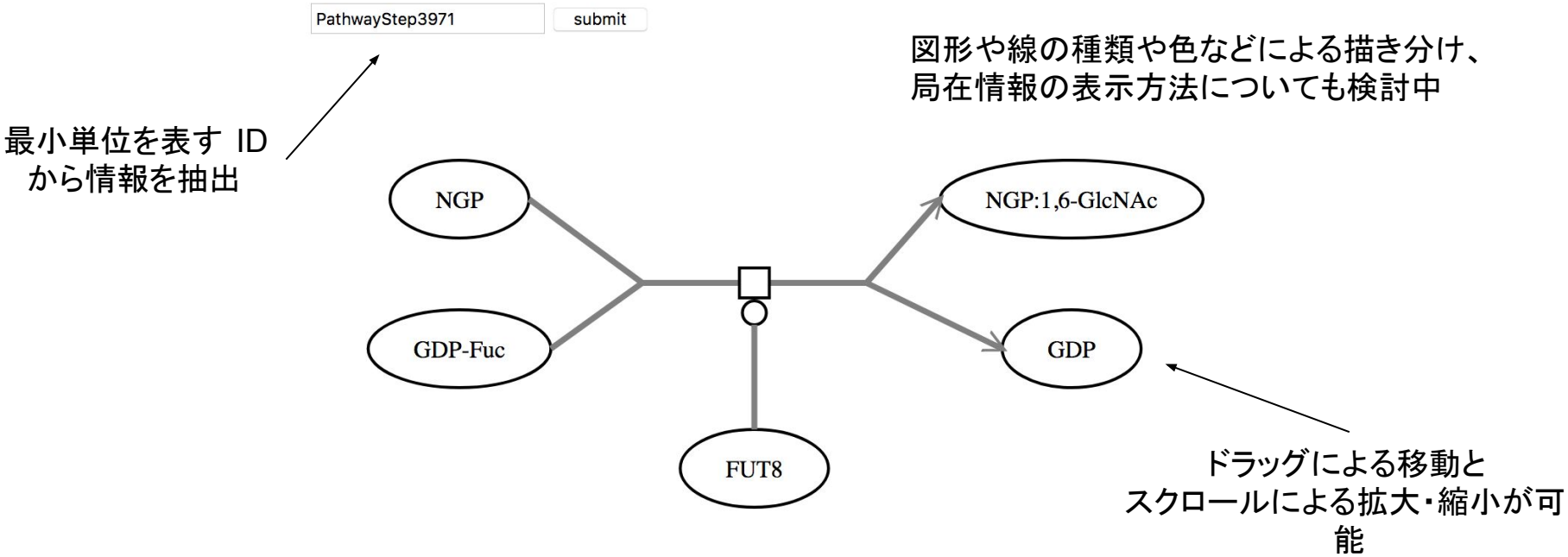
選択すると下の階層の Pathwayが表示される。
表示方法については検討中

GlyCosmos Pathway

創価大学

PathwayViewer（開発中）

- 最小単位の反応を（RDF から情報を抽出して）描画



- Pathway 単位で描画できるようにし、Pathway リストから一つを選ぶと、その図が表示されるように拡張中

計画時の達成目標

創価大学

～第3年次末

- **GlyCosmos Portal**:
  - **GlyComb**が稼働、糖タンパク質を登録し、アクセッション番号を取得可能
- **GlyCosmos Database**:
  - 微生物のゲノム情報より糖鎖関連遺伝子を抽出し、糖転移酵素を糖鎖構造とリンクし 、**GlyTouCan**やパスウェイ情報と統合したユーザーインターフェースが開発済
  - BCSDBに格納されている半分以上の糖鎖構造に対する合成しうる遺伝子を GlyCosmosから公開
  - GlycoProtDBおよび全PDBデータ中の糖鎖構造とのリンクとStanzaによる可視化が完成

～第5年次末

- **GlyCosmos Portal**:
  - **GlyTouCan**および**GlyComb**リポジトリの利用が普及し、各国からユーザーが利用
  - 複合糖質の情報から糖鎖の合成パスウェイおよび糖転移酵素とリンクし、ゲノムとの関係がわかるユーザーインターフェースが完成
  - GlyCosmosは日本糖質学会の公式データベース
- **GlyCosmos Database**:
  - 植物のゲノム情報より糖鎖関連遺伝子を抽出し、糖転移酵素を糖鎖構造とリンクし、 糖鎖に関連するパスウェイを検索しやすいユーザーインターフェースが開発済
- **キュレーションシステム**:
  - *N*型糖鎖と*O*型糖鎖のパスウェイが網羅していて、一般ユーザーがコメントを投稿でき、キュレーターが編集を記録できるシステムが完成

研究開発進捗（1/3）

GlyCosmos Portal設計：完了

- アクセッション番号発行システム設計：完了
- GlyComb、LipRep、ProRep設計：完了
- GlyCosmosDB設計：完了
- 認証システム設計：完了

GlyCosmos Portal開発：

- GlyComb開発：途中（50%）
- GlyTouCanの改良・拡張：保留
- 認証システム開発：途中（80%）
- バッチ処理システム：未着手
- メインUI・完了

GlyTouCanの改良：

- GlyGenやその他のユーザーによるフィードバックに対応する必要がある

研究開発進捗（2/3）

GlyCosmos Database開発：

・糖鎖関連パスウェイ：
　— 収集・整理：完了
　— ウェブコンポーネント開発：途中（10%）

・糖タンパク質：
　— 収集・整理：途中（10%）
　— ウェブコンポーネント開発：途中
　　EBI-ProtVista改良（EBIと連携中）：50%
　　新規ウェブコンポーネント：未着手

・糖脂質
　— 収集・整理・ウェブコンポーネント開発：未着手

・糖鎖関連遺伝子：
　— 収集・整理・ウェブコンポーネント開発：未着手
　※今年の国際バイオハッカソンにCAZyのバイオインフォマティクス専門家を招聘し、一緒に着手する予定

研究開発進捗（3/3）

創価大学

今年度の主な予定：

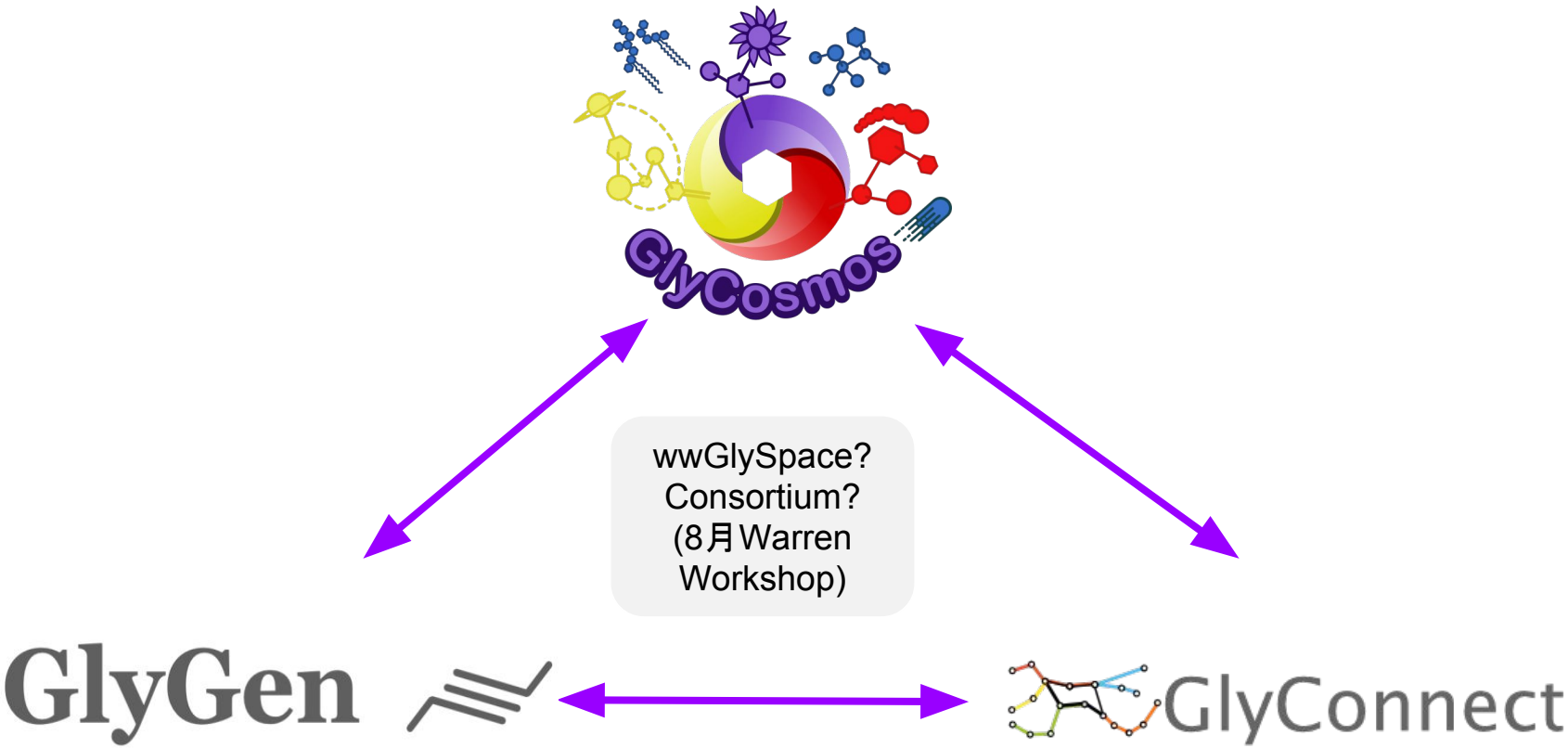
・ACGG-DBとの具体的な連携
　　— SPARQL endpointの公開
　　— UIの仕様
・10月公開予定
　・Scientific Advisory Boardのフィードバック
・12月国際バイオハッカソン
　　— 糖鎖遺伝子の整理（with CAZy）

次年度の予定：

・キュレーションシステムの開発
・ユーザーフィードバックによるさらなるUIの改善
・GlyGen、GlyConnect、UniCarb-DRとの確実な連携

GlyCosmosで期待する効果

創価大学

- 糖鎖科学研究から生成される情報を格納する基盤を構築し、研究を促進
- 糖鎖研究の初心者でも糖鎖について容易に調べられるポータルを作成し、幅広い分野の研究者が利用
- 技術的には、興味・ターゲットのデータを調べるための使いやすいユーザーインターフェースを構築
- データは全て RDFで連携することで、海外のEndpointとの同時検索が可能となる。また海外のGlyGenやGlyConnectともGlyCosmosのデータを相互に共有可能

GlyCosmosの国際連携