

H19

H20

H21

H22

# これまでの成果物と 平成21年度計画

産業技術総合研究所  
糖鎖医工学研究センター

2009年1月21日

H19

H20

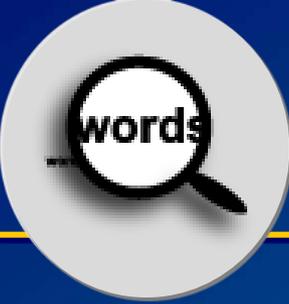
H21

H22

# 平成20年度までの成果物

*National Institute of  
Advanced Industrial Science  
and Technology*

**AIST**



# キーワードによる横断検索 ～ HyperEstrailer ～

- Webのページを取り込み横断検索を可能した

キーワード検索 / 糖鎖構造から検索 // Language Preference: English 日本語

## JCGGDB

日本糖鎖科学統合データベース Version 1.1 (27 June 2008)

words  
 横断検索  検索  
 例えば、"fuc lectin"と入力してみてください。

**糖鎖関連遺伝子 (糖転移酵素、グリコシダーゼ、硫酸転移酵素、糖ヌクレオチド輸送体、PAPS輸送体)、レクチン、糖タンパク質**

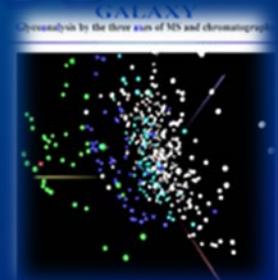
GGDB: 糖鎖関連遺伝子データベース (糖転移酵素、硫酸転移酵素、糖ヌクレオチド輸送体等) (産業技術総合研究所)	LfDB: レクチンデータベース (産業技術総合研究所)
GlycoProtDB: 糖タンパク質データベース (産業技術総合研究所)	

**糖鎖構造解析 (全体構造)**

GALAXY: 多次元HPLCデータベース (名古屋市立大学)	LipidBank (日本脂質学会)
GMDB: 質量分析データベース (産業技術総合研究所)	

**糖鎖構造解析 (部分構造)**

GlycoEpitope: 抗糖鎖抗体・エピトープ情報 (立命館大学)	LfDB: レクチンデータベース (産業技術総合研究所)
-------------------------------------	------------------------------



# 糖鎖構造情報による横断検索

3月完成予定

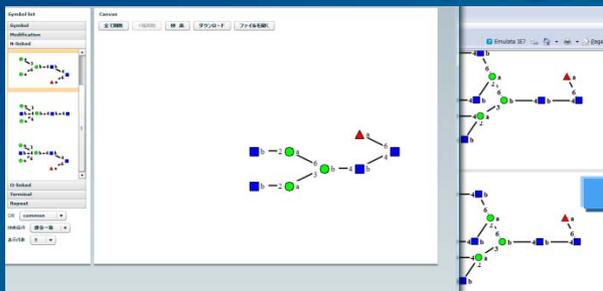


～分析結果と検出感度とモノの量を考慮して糖鎖構造解析を行う～

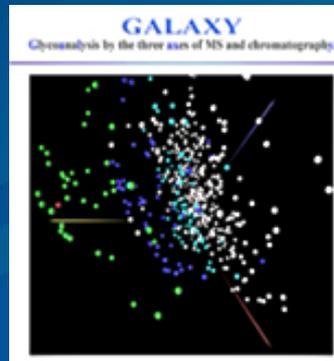
ターゲットにしているタンパク質に糖鎖がついていることが分った時 (MSなどで分子量・組成まで把握している時) に、より詳しい情報を得る方法をナビする

組成 Hex  HexNAc  Fuc  Neu5Ac

分子量  m/z



検索



名古屋市立大学GALAXY  
ODSカラムやアミドカラムやHPLCの溶出位置による構造同定  
・2-D/3-D 糖鎖マッピング法  
溶出位置



産総研CabosDB

スペクトルパターン

レクチン



抗体

立命館大学GlycoEpitope  
糖鎖抗体のデータベース

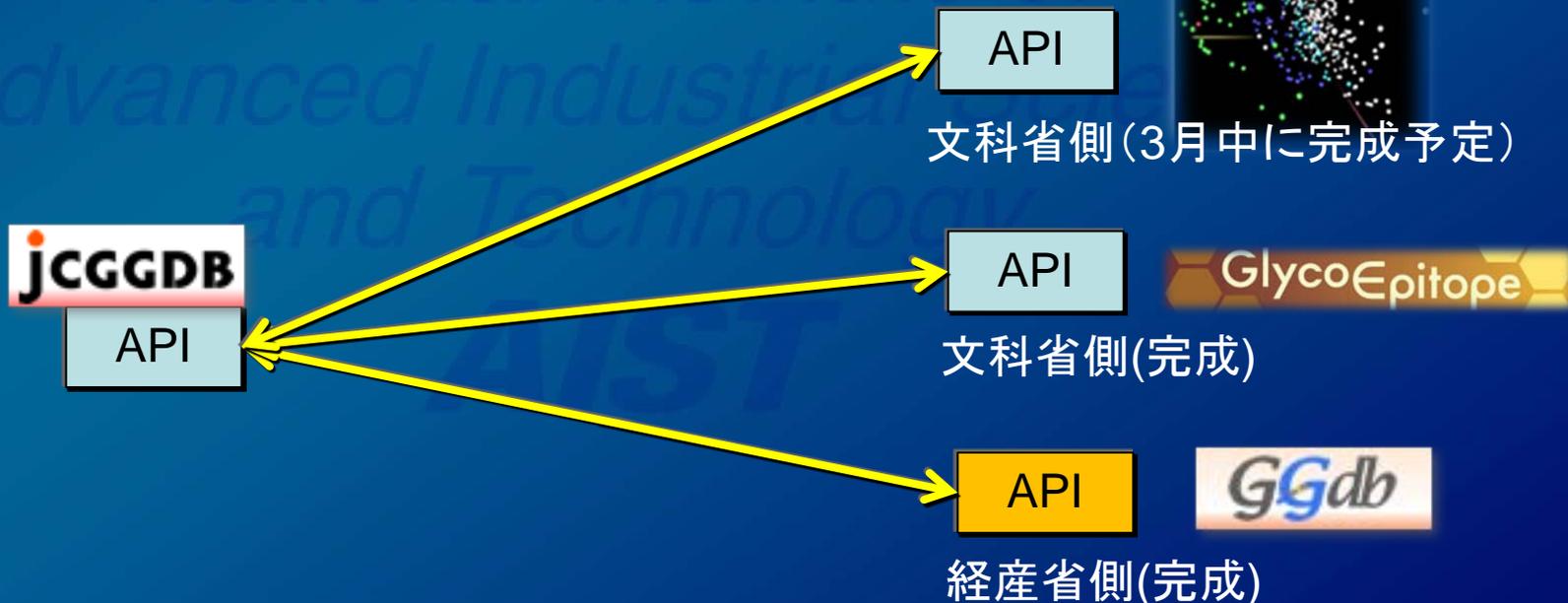
# 統合検索のためのインフラ整備

HTMLをTextで出力するAPI→横断検索用

- ・HyperEstraiierのindex用のdraft形式での出力
- ・Namazuなどの全文検索用のテキスト

キーとなるIDの全出力→indexの更新システムとの連携

検索&結果出力(XMLとText)→統合検索用



H19

H20

H21

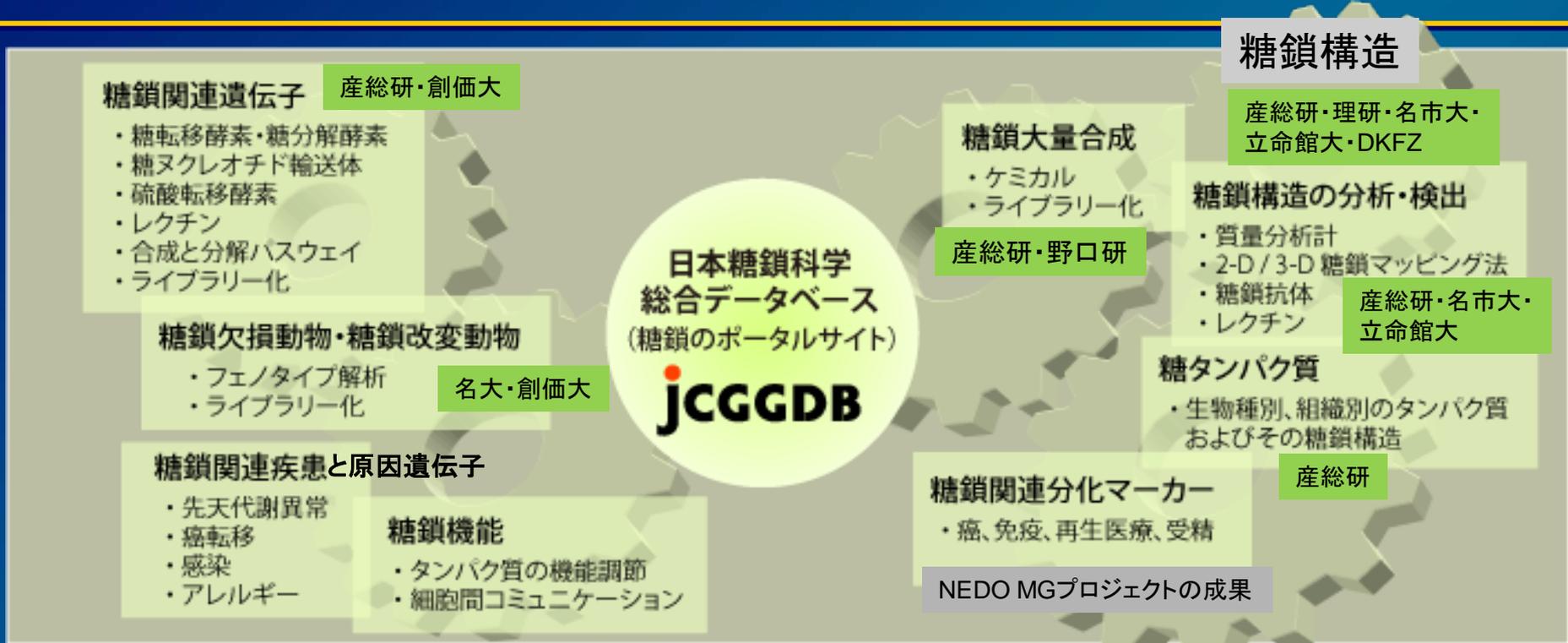
H22

# 平成21年度の計画

やることが沢山ある。残り2年間ペースを速めて  
より多くの機関との統合を図る

コンセプト:平成21年度は“糖鎖は複雑だから無視”や“糖鎖は重要ではなさそうだから無視”の考えを少しでも変えられるような情報基盤作りを行う

# 構想 (協力体制)



オンラインプロトコル

J-oil、生化学工業(交渉中)

一般 & 糖鎖領域  
以外の研究者向けのドキュメント

糖脂質・GAG・  
ポリシアル酸・  
多糖

外部リンク程度

糖鎖プロセッシングの阻害剤DB

産総研

特許

産総研

健康食品の安全性・有効性

国立健康・栄養研究所

# 統合のためのインフラ整備を強化

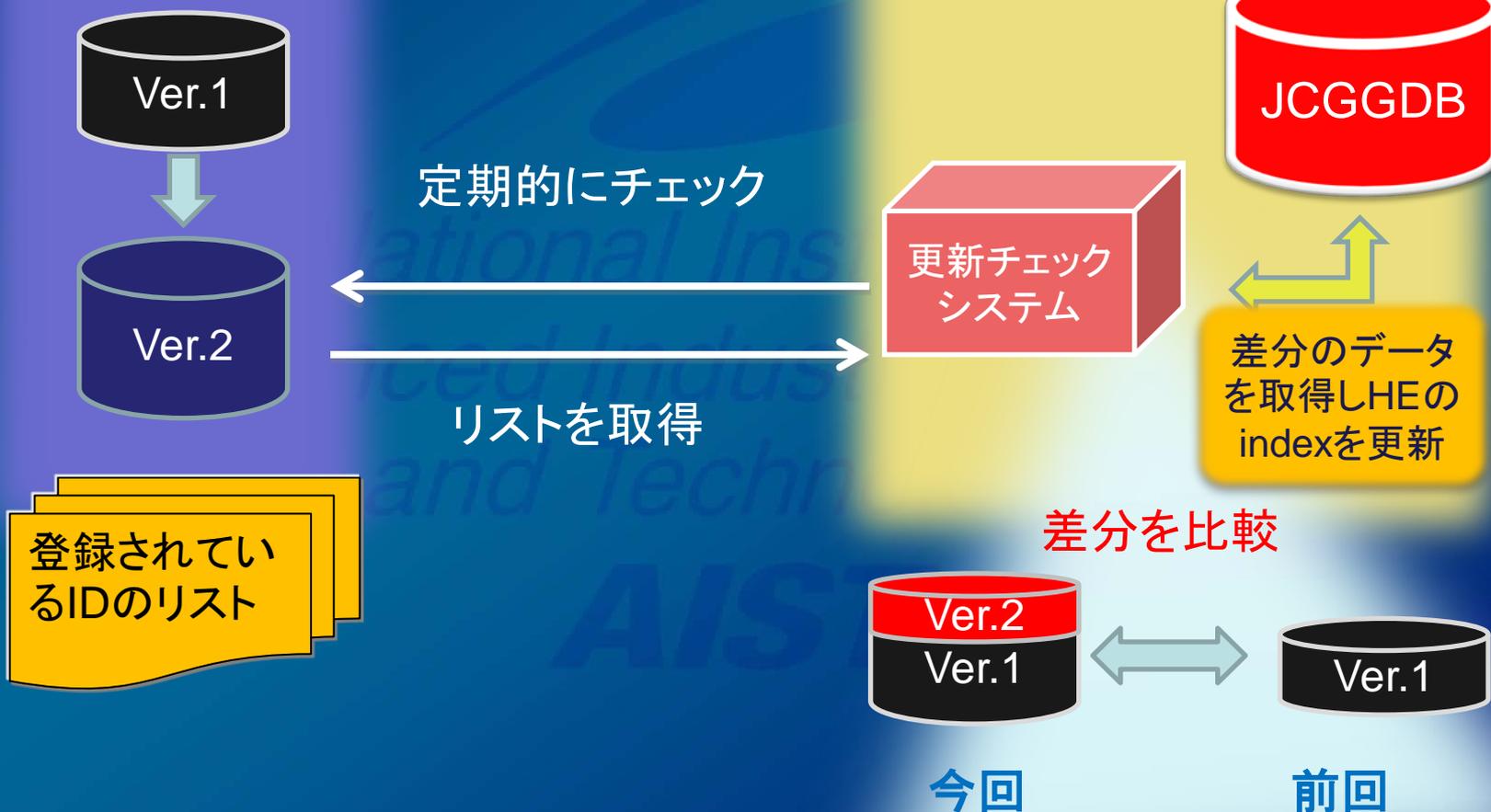
- APIの増設
- 未公開DBを公開する活動
- 公開しているDBにはAPIを設置 & 非公開版DBを公開版に作りかえAPIを設置
  - 平成21年度から参加
    - 理化学研究所のシステム糖鎖生物学研究所の糖鎖コンフォメーションDB
    - 野口研究所の有機化学による糖鎖合成DB+化合物DB
    - 創価大学のショウジョウバエのGlycoGeneDBとフェノタイプ情報
  - 参加打診中
    - オンラインプロトコル: J-Oil、生化学工業
    - グリコシダーゼ: 九州大学(伊東先生)
    - 多糖: 名古屋大学(小林先生)
    - その他
- 産総研のGlycoGeneDB以外のDBにもAPIを設置(経産省側のプロジェクトにお願いしている)
  - Lectin DB
  - GlycoProtDB
  - GlycoMass DB

# APIを利用したIndex更新システムを構築 ～複数の研究機関との連携～

研究機関

JCGGDB 運営事務局

HyperEstraiерのindex更新

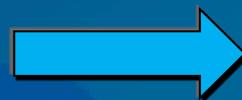


# 糖鎖合成支援 (有機化学と酵素による合成)

有機化学合成  
大量合成



酵素合成  
構造のバラエティ



糖鎖研究

- 市販糖鎖構造や提供元の登録のある糖鎖構造から最終構造までの経路を表示する
- 合成のノウハウや提供できるサンプルかどうかのリソース情報も提供

合成経路一覧 表示形式: CFG 詳細

---

Starting Material

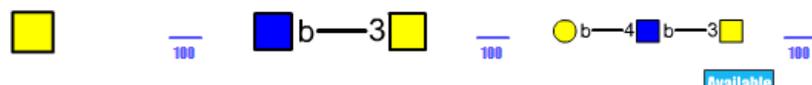
Display of a suitable synthetic pathway

出発物質として経験済みの糖鎖構造  
 市販されている糖鎖

Method I: To obtain a desired glycan at maximum yield  
 Method II: To obtain information related to a desired glycan as well as all possible structures involved in the reaction (Default: One-pot method)

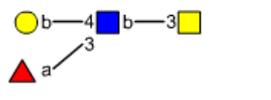
● OOA-00012e -> [CAZ-000aa6, DNR-00003d] -> OOA-000127 -> [CAZ-000aa7, DNR-00003e] -> OOA-000128 -> [CAZ-000a9f, DNR-000040] -> OOA-00014a

Enzyme	GGDB	b3GalT6	GGDB	b4GalT1	GGDB	FUT6
Donor	PubChem	UDP-GlcNAc	PubChem	UDP-Gal	PubChem	GDP-Fuc



**開発**

Products



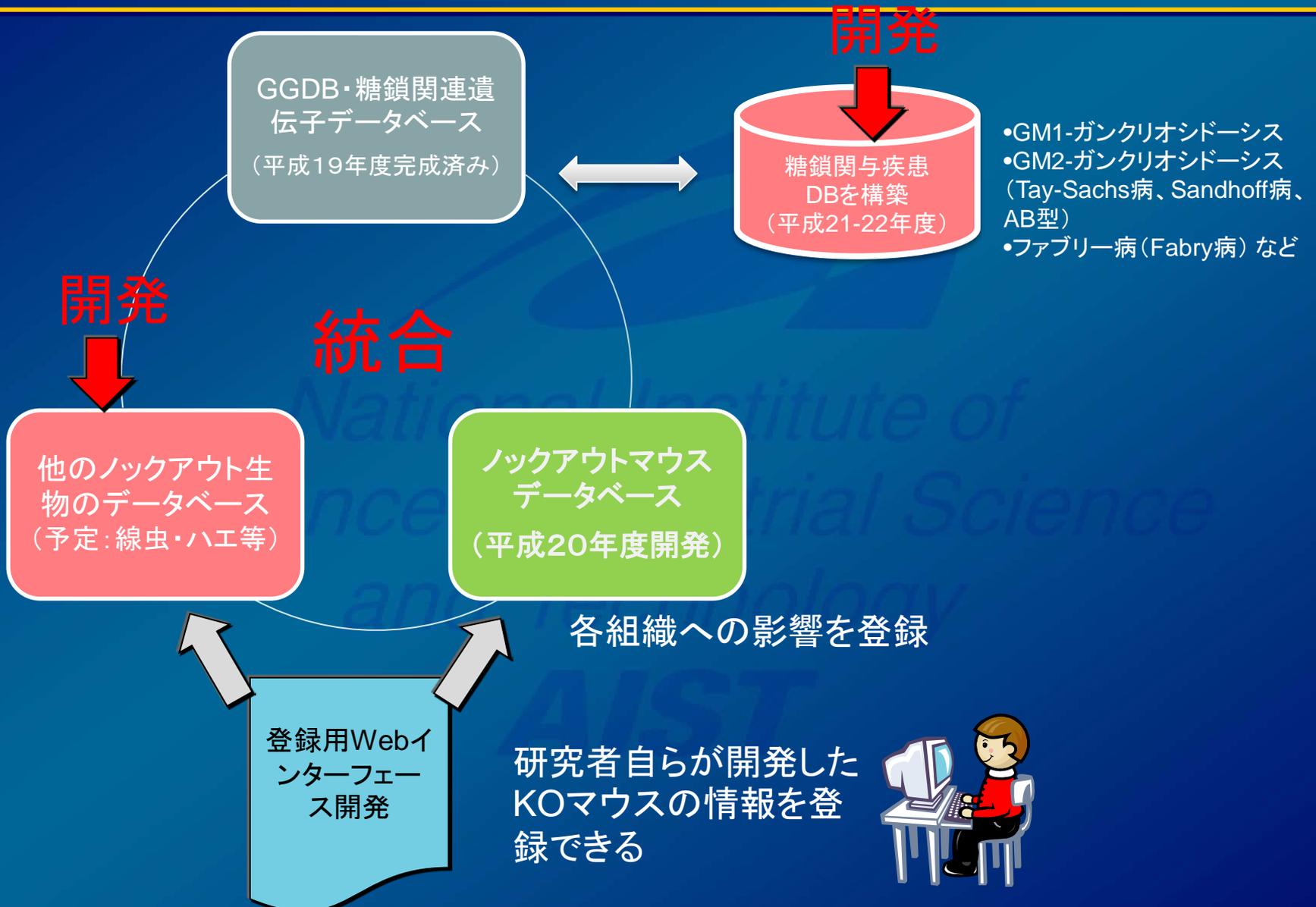
**開発**

平成21年度は有機化学合成と酵素的に合成する反応の融合を目指し、登録したデータを検索できるプロトタイプ版を作成。

平成22年度は外部の研究者が登録できるインターフェースを開発し改良を重ねる。

10

# 「糖鎖と病気」に関するデータベース



# オンラインプロトコルDB 開発

- 糖鎖研究以外の分野の研究者が糖鎖を解析したいと思った時に直ぐにプロトコルの情報が出てくるようにする。
  - 糖鎖研究に入りやすくし、糖鎖に関連する研究データを増やすことができればいい。最終的にはデータの蓄積につながる。
- 糖鎖の切り出し
- 糖鎖の精製方法
- 糖鎖構造解析

他

- 糖鎖の重要性が分からないので糖鎖研究が無視される



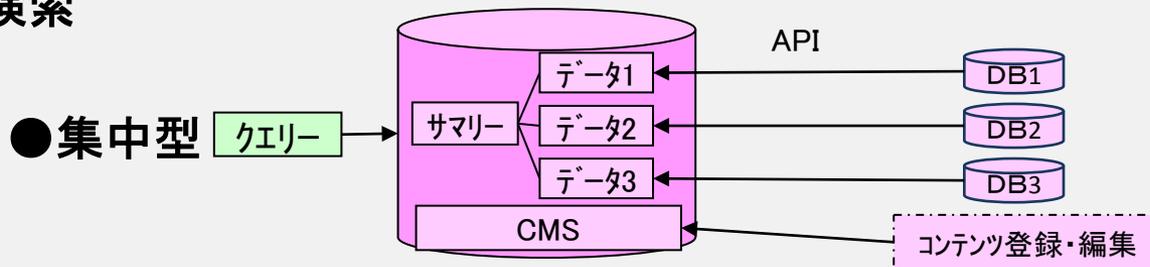
- 糖鎖がタンパク質に付いている役割
- 糖鎖が変化することで生命現象に与える影響

他、多数



# 総合検索結果表示や リンクするための基盤作り

## ●統合検索



- 各研究機関のDBも共に栄えるようにとのご要望に配慮して、統合検索を実現させる

- APIのインフラを整備

- 自由自在に参加機関のDBのある項目を抽出できるようにAPIの整備

- DB間の連携をとれるキーを整備する

- 専門用語を整備し、キーとなる単語を抽出し整備する
  - 平成22年度末までに実現可能ならばセマンティックwebまで・・・

- 同一センテンス内に含まれる2語以上の専門用語・遺伝子名などの頻度を考慮して関連性の強弱をつける

- 単語(同意語、類義語等)のゆらぎの処理

# 例えば、セマンティックwebを 横断検索/統合検索に取り入れる

予め準備

キーワード  
名詞A

日本語/英語の文章にある1文章中の

名詞A 動詞 名詞B.

名詞B 動詞 名詞A.

動詞と形容詞の区別など  
ノウハウが必要?

素人が手を出すところではない?

※東大の辻井ラボと一緒にやるか未定

専門用語や遺伝子名

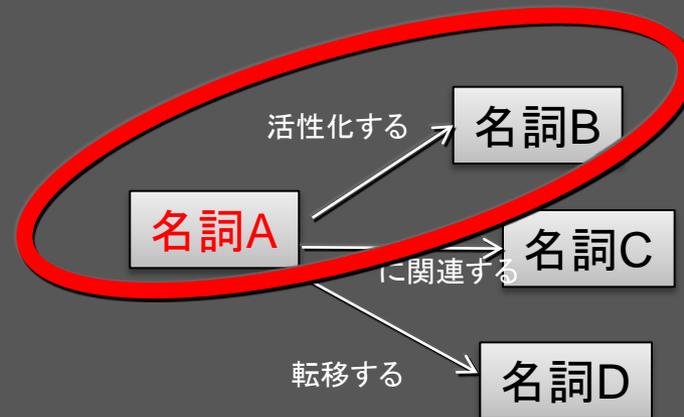
↓

予め様々なドキュメントから  
名詞Aに関連する動詞と名詞を抜き出して  
関連性と重みを付けてDB化しておく。

検索時

キーワード  
名詞Aを検索

Viewerで関連性を表示



→

選択した名詞Aと動詞”活性化する”と名詞Bが含まれる文章のリストを表示