

平成 26 年度 研究開発実施報告書

ライフサイエンスデータベース統合推進事業「統合化推進プログラム」研究代表者

[成松 久]

[産業技術総合研究所 糖鎖創薬技術研究センター・招聘研究員]

[糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発]

§1. 研究実施体制

(1)「糖鎖関連データベースの統合化推進と研究者コミュニティとの連携ならびに国際連携」グループ(研究機関別)

① 研究代表者:成松 久 (独立行政法人産業技術総合研究所・糖鎖創薬技術研究センター・招聘研究員)

② 研究項目

- ・糖鎖関連データベースの RDF 化と統合 Stanza への応用
- ・糖タンパク質・グリコフォーム DB などの構築
- ・研究者コミュニティとの連携ならびに国際連携

(2)「国際糖鎖構造リポジトリの開発、WURCS の普及標準化活動、RDF データの収集」グループ

① 主たる共同研究者:木下 聖子 (学校法人創価大学・理工学部・教授)

② 研究項目

- ・国際糖鎖構造リポジトリの開発と運営
- ・WURCS の普及標準化活動
- ・RDF データの収集

(2)「糖鎖構造の表記法の標準化」グループ(研究機関別)

① 主たる共同研究者:山田 一作 (野口研究所・糖鎖有機化学研究室・研究員)

② 研究項目

- ・糖鎖構造の表記法(WURCS)の標準化

(2)「GlycoEpitope データベースのセマンティックウェブ化」グループ(研究機関別)

① 主たる共同研究者:奥田 修二郎 (国立大学法人新潟大学・医歯学系・准教授)

② 研究項目

- ・GlycoEpitope データベースのセマンティックウェブ化

(2)「GlycoEpitope と GlycoPOD の運営および開発ならびに糖鎖生物学オントロジーの開発」グループ(研究機関別)

① 主たる共同研究者:川寄 敏祐 (立命館大学・総合科学技術研究機構・上席研究員)

② 研究項目

- ・GlycoEpitope と GlycoPOD の運営および開発
- ・糖鎖生物学オントロジーの開発

§ 2. 研究実施内容

① 国際糖鎖構造リポジトリシステムの開発

平成26年度において、GlyTouCan と名付けた国際糖鎖構造リポジトリを立ち上げた。http://www.glytoucan.org に設置し、これまで様々な糖鎖構造情報を統合してきた GlycomeDB の全データを取り入れ、現在 36,000 以上の構造が登録されている。基本的なシステム構成は米国の糖鎖科学者との協議を通して決定し、アクセッション番号の形式や RDF を利用することを決定した。そして米国で作りはじめた RDB のシステムを共有していただき、創価大学に設置した。RDF への変換に取り組むために、米国のシステムで使われていた糖鎖構造の表記法である GlycoCT 形式を②で述べる WURCS 形式への変換が必要となったため、②でその変換するプログラムの開発を進めた。同時に、我々が考案した糖鎖構造の標準オントロジーである GlycoRDF を利用するため、RDB のデータを RDF に変換するプログラムを開発した。そしてユーザーインターフェースにおいては、RDF データをスタンザで表示できるようにした。この中で、BCSDB (Bacterial Carbohydrate Structure Database) のデータとの連携が成功し、RDF を通して GlyTouCan からアクセスできるようになった。また、多言語化も行い、英語に加え日本語、中国語、ロシア語、フランス語、そしてドイツ語への翻訳を行えるシステムも開発し、GlyTouCan の利用者がこれらの言語から画面を切り替えるように開発を行った。

今後の研究開発は、国内外の糖鎖に関連する情報を GlyTouCan からアクセスできるようにし、糖鎖構造を中心とした総合的なポータルを提供できるように開発を進める。具体的には海外としては GlycomeDB、UniCarbKB、MonosaccharideDB、SugarBindDB、CAZy などの糖鎖関連データベースが挙げられる。国内としては JCGGDB、KEGG、PDB と GlycoEpitopeDB との統合を計画している。また、糖鎖科学実験の執筆基準を提案する MIRAGE ワーキンググループにも連携を取り、糖鎖構造に関する論文を執筆する際に GlyTouCan のアクセッション番号も記述するように標準に含めるように協議を行い、採用された。今後は Glycobiology や Carbohydrate Research などの糖鎖研究を多く掲載するジャーナルに論文投稿の際に GlyTouCan のアクセッション番号の登録を義務付けるように提案する。そして他言語化も進めて、スペイン語や韓国語などの言語も導入していく予定である。

② 糖鎖構造データの標準化

本研究チームは糖鎖構造データを記述する形式である WURCS を開発してきた。平成26年度は本形式のバージョン2を提案し、現在もっとも利用されている GlycoCT 形式を WURCS に変換しやすいように改良した。そしてすべての GlycoCT 形式を WURCS に変換できるようにし、また糖鎖構造の描画ツールである GlycanBuilder からも WURCS を出力できるようにした。さらに、WURCS から糖鎖構造自体を表す新たなオントロジーを開発し、糖鎖構造を RDF で表現できるように開発を進めた。その結果、RDF の問い合わせ言語である SPARQL を用いて糖鎖構造の検索が可能となった。

今後の研究開発計画としては、WURCS のバージョン2の論文執筆に加え、WURCS から糖鎖構造画像を出力するプログラムの開発、WURCS の変換ツールの普及と WURCS の IRI としての利用を検討する。糖鎖構造の画像出力における難点は、WURCS は単糖を原子レベルで表すため、糖鎖科学者が見慣れている記号への変換を正しく行う必要がある。また、GlycoCT からの変換プログラムが完成したが、他によく利用されている形式である IUPAC や LinearCode も存在するため、こ

これらの形式からの変換プログラムも開発する必要がある。そして最終的に WURCS を IRI として利用するために、文字数の制限や圧縮の必要性を検討する必要がある、これらについて協議し、開発を進める予定である。

③ 糖鎖関連データベースの開発および統合化

本研究チームは、これまで開発してきた糖鎖関連データベースの全 RDF 化を目指して開発を進めてきた。次の研究開発を実施した：(ア)糖タンパク質データベースの RDF 化および更新システムの開発、(イ)糖鎖関連疾患や病原体データのオントロジー開発、(ウ)レクチンデータの RDF 化、そして(エ)GlycoEpitope の情報整理、データの改善をした。まずは(ア)GlycoProtDB の RDF 化が完了し、新たなデータをアップロードし更新できるように、オンライン更新システムを開発した。バージョン管理、最新の NCBI RefSeq データの自動更新、アミノ酸配列上の糖鎖付加部位の可視化などがウェブ上で行えるようにし、そのデータを RDF 化し、公開した。(イ)の糖鎖関連疾患データベースである GDGDB (Glyco-Disease Genes Database)と糖鎖関連病原体データベースである PACDB (Pathogen Adherence to Carbohydrate Database) のオントロジー開発に関しては、これらのオントロジーの RDF データをスタンザで閲覧できるようにした。そして(ウ)のレクチンの糖鎖との結合親和性を計ったデータの Lectin frontier DataBase (LfDB)のオントロジー開発が完了し、RDF 化も行い、スタンザで閲覧できるようにした。(エ)に関しては、糖鎖を認識する抗体情報を格納している GlycoEpitope のデータベースに含まれる糖鎖構造情報を整理し、②の WURCS 形式で表記できるようにし、①の GlyToucan に登録した。その際に、GlycoEpitope に手動で入力されたデータの確認が行われたため、データを改善することもできた。運用システムを version 2 にアップグレードし、操作性を大幅に改善した。現在、エピトープ 173 項目、抗体 613 項目を収載し公開している。糖鎖科学実験プロトコル (GlycoPOD) は、公開中プロトコルの書式統一を行うために、再校正を進め、ほぼ完了した。本年度新たに 6 項目の実験手法を追加収載し、合計で 213 項目の実験方法を公開している。

今後の計画としては、LfDB のデータを更新するシステムの開発、タンパク質を付加する糖鎖情報のオントロジー開発、RDF 化および公開、そして糖鎖遺伝子データのオントロジー開発、RDF 化並びに公開を計画している。また、GlycoEpitope データベースの糖鎖関連抗体情報を RDF 化し、国内外の関連するデータベースとの連携も図る。その他にも、抗体作成方法の記述など、内容の更なる充実の準備を進めている。

また、今年度の国際連携における計画としては、毎年開催している ACGG (Asian Community of Glycoscience and Glycotechnology) の国際会議も継続して開催する。そして本研究開発課題でセマンティックウェブ化した糖鎖関連データベースを ACGG-DB として公開していく。

§3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

- ① 発行済論文数 (国内 (和文) 0 件、国際 (欧文) 9 件) :
- ② 未発行論文数 (“accepted”、“in press”等) (国内 (和文) 0 件、国際 (欧文) 0 件)
- ③ 論文詳細情報

1. Kenichi Tanaka, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Masaaki Kotera, Hiromichi Sawaki, Shinichiro Tsuchiya, Noriaki Fujita, Toshihide Shikanai, Masaki Kato, Shin Kawano,

- Issaku Yamada, and Hisashi Narimatsu, "WURCS: The Web3 Unique Representation of Carbohydrate Structures", *Journal of Chemical Information and Modeling*, vol. 54, No. 6, pp1558-1566, 2014 (DOI:10.1021/ci400571e)
2. Ranzinger R, Aoki-Kinoshita KF, Campbell MP, Kawano S, Lütteke T, Okuda S, Shinmachi D, Shikanai T, Sawaki H, Toukach P, Matsubara M, Yamada I, Narimatsu H. "GlycoRDF: an ontology to standardize glycomics data in RDF." *Bioinformatics*. 31(6):919-925, 2015. (doi: 10.1093/bioinformatics/btu732.) (PMID: 25388145)
 3. Hirabayashi J, Tateno H, Shikanai T, Aoki-Kinoshita KF, Narimatsu H. The Lectin Frontier Database (LfDB), and Data Generation Based on Frontal Affinity Chromatography. *Molecules*. 8:20(1):951-973, 2015. (DOI:10.3390/molecules20010951) (PMID: 25580689)
 4. J. O. Makanga, M. Kobayashi, H. Ikeda, A. Christianto, H. Toyoda, M. Yamada, T. Kawasaki, and T. Inazu, "Generation of Rat Induced Pluripotent Stem Cells Using a Plasmid Vector and Possible Application of a Keratan Sulfate Glycan Recognizing Antibody in Discriminating Teratoma Formation Phenotypes", *Biol. Pharm. Bull*, vol. 38, pp.127-133, 2015 (DOI: 10.1248/bpb.b14-00697)
 5. M. Nonaka, and T. Kawasaki, "Functional assay using lectin gene targeting technologies (over-expression)", *Methods Mol Biol*, vol. 1200, pp.389-399, 2014 (DOI: 10.1007/978-1-4939-1292-6_34)
 6. M. Nonaka, H. Imaeda, S. Matsumoto, B. Y. Ma, N. Kawasaki, E. Mekata, A. Andoh, Y. Saito, T. Tani, Fujiyama, and T. Kawasaki, "Mannan-binding protein, a C-type serum lectin, recognizes primary colorectal carcinomas through tumor-associated Lewis glycans.", *J Immunol*, vol. 192, No.3, pp.1294-1301, 2015 (DOI: 10.4049/jimmunol.1203023))
 7. Akiyoshi S, Nomura KH, Dejima K, Murata D, Matsuda A, Kanaki N, Takaki T, Mihara H, Nagaishi T, Furukawa S, Ando KG, Yoshina S, Mitani S, Togayachi A, Suzuki Y, Shikanai T, Narimatsu H, Nomura K. RNAi screening of human glycogene orthologs in the nematode *Caenorhabditis elegans* and the construction of the *C. elegans* glycogene database. *Glycobiology*. 2015 Jan;25(1):8-20. doi: 10.1093/glycob/cwu080.
 8. Narimatsu H. Strategy for development of clinically useful glyco-biomarkers. *Glycoconj J*. 2014 Oct;31(6-7):403-7. doi: 10.1007/s10719-014-9544-8.

9. Maeda M, Fujita N, Suzuki Y, Sawaki H, Shikanai T, Narimatsu H. JCGGDB: Japan Consortium for Glycobiology and Glycotechnology Database. *Methods Mol Biol.* 2015;1273:161-79. doi: 10.1007/978-1-4939-2343-4_12.

(3-2) データベースおよびウェブツール等の構築と公開

- ① 公開中のデータベース・ウェブツール等
別紙1参照。

(3-3) データベース・ウェブツール等の活用事例

特になし。

(3-4) その他の著作物(総説、書籍など)

● 詳細情報

1. Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. Glycoinformatics: Overview. *Glycoscience: Biology and Medicine* pp 185-192 ,2014, Springer Japan, N. Taniguchi et al., (eds).
(DOI: 10.1007/978-4-431-54836-2_17-1)
2. Toshihide Shikanai and Hisashi Narimatsu. JCGGDB. *Glycoscience: Biology and Medicine* pp 209-213 ,2014, Springer Japan, N. Taniguchi et al., (eds). (DOI: 10.1007/978-4-431-54841-6_20)
3. Shujiro Okuda, Hiromi Nakao and Toshisuke Kawasaki GlycoEpitope: A Database for Carbohydrate Antigen and Antibody. *Glycoscience: Biology and Medicine* pp 267-273, 2014, Springer Japan, N. Taniguchi et al., (eds).
(DOI: 10.1007/978-4-431-54836-2_27-1)
4. T. Kawasaki, M. Nonaka, N. Kawasak, Mannan-Binding Protein (MBP)-Ligand Glycans: Novel Tissue Marker. *Glycoscience: Biology and Medicine*, pp 1021-1028, 2014, Springer Japan, N. Taniguchi et al., (eds).
(DOI:10.1007/978-4-431-54841-6_60)
5. T. Kawasaki, N. Kawasaki, H. Nakao, H. Toyoda, Novel Antibody for Keratan Sulfate Expressed on Human iPS/ES Cell. *Glycoscience: Biology and Medicine*, pp 1457-1464, 2014, Springer Japan, N. Taniguchi et al., (eds).
(DOI:10.1007/978-4-431-54841-6_94)

(3-5) 国際学会および国内学会発表

① 招待講演 (国内 8 件、国際 3 件)

〈国内〉

1. 山田一作、糖鎖情報のセマンティックウェブ化、2014 年度 CAC フォーラムー泊研修会、神奈川県・湯河原、10月7日
川寄敏祐・中尾広美・川端健二・川寄伸子・豊田英尚、ヒト iPS 細胞を特異的に検出する抗糖鎖抗体の開発と性状、第33回日本糖質学会年会、名古屋大学(愛知県)、2014年8月10日
2. 木下聖子、新町大輔、藤田晶大、土屋伸一郎、藤田典昭、鈴木芳典、ソロビヨワイエレナ、松原正陽、山田一作、鹿内俊秀、奥田修二郎、川寄敏祐、成松久。JCGGDB および国際糖鎖構造リポジトリの開発。日本プロテオーム学会 2014 年会。つくば国際会議場。2014 年 7 月 17 日～18 日。
3. 梶裕之、富岡あづさ、鹿内俊秀、成松久。糖鎖付加位置選択的グリコーム解析技術の開発と応用。日本プロテオーム学会 2014 年会。つくば国際会議場。2014 年 7 月 17 日～18 日。
4. 川寄敏祐・中尾広美・川端健二・川寄伸子・豊田英尚、ヒト iPS 細胞を特異的に検出する抗糖鎖抗体の開発と性状、第33回日本糖質学会年会、名古屋大学(愛知県)、2014年8月10日
5. 成松久。分析ターゲットとしての糖鎖の可能性。第 64 回日本電気泳動学会シンポジウム。文京学院大学本郷キャンパス。2014 年 6 月 28 日 (招待講演)。
6. 成松久、梶 裕之、久野 敦。グリコプロテオミクス。日本プロテオーム学会 2014 年会 (JHUPO 第 12 回大会)。2014 年 7 月 18 日 (招待講演)。
7. 成松久。糖鎖科学の進捗と疾患診断への応用。第 66 回日本皮膚科学会西部支部学術大会。アルファあなぶきホール。2014 年 11 月 28 日。(招待講演)
8. 成松久。糖鎖解析による疾患バイオマーカー探索の最前線。第 146 回日本医学会シンポジウム。日本医師会館大講堂。2014 年 12 月 18 日(依頼講演)。

〈国際〉

1. Kiyoko Aoki-Kinoshita, Nobuyuki P. Aoki, Daisuke Shinmachi, Akihiro Fujita, Shinichiro Tsuchiya, Noriaki Fujita, Masaaki Matsubara, Shujiro Okuda, Sena Arpinar, René Ranzinger, Toshihide Shikanai, Elena Solovieva, Yoshinori Suzuki, Toshisuke Kawasaki, Issaku Yamada, Hisashi Narimatsu. The GlyTouCan

International Glycan Structure Repository. The 6th ACGG Conference, University of Hyderabad, India, December 9-12, 2014.

2. *Aoki-Kinoshita KF. "Development of an International Glycan Structure Repository" Joint Meeting of the Society for Glycobiology and the Japanese Society of Carbohydrate Research. Honolulu, Hawaii, November 16-19, 2014.
3. *Aoki-Kinoshita KF. "Collaborative Development of an International Glycan Structure Repository", 5th Charles Warren Workshop, National University of Ireland, Galway, Ireland, August 6-9, 2014.

② 口頭講演 (国内 4 件、国際 2 件)

〈国内〉

1. 山田一作・田中健一・木下聖子・小寺正明・澤木弘道・土屋伸一郎・松原 正陽・藤田典昭・鹿内俊秀・加藤雅樹・河野信・成松久、糖鎖構造表記法の国際標準化、第33回日本糖質学会年会、愛知県・名古屋市、8月10~12日
2. 木下聖子・山田一作・藤田晶大・土屋伸一郎・新町大輔・青木ポール信行・松原正陽・藤田典昭・鈴木芳典・イエレナソロビヨワ・鹿内俊秀・奥田修二郎・川寄敏祐・成松久、国際糖鎖構造リポジトリの開発、第33回日本糖質学会年会、名古屋大学(愛知県)、2014年8月12日
3. 松原正陽・山田一作・木下聖子・土屋伸一郎・新町大輔・藤田晶大・青木信幸・鹿内俊秀・鈴木芳典・ソロビヨワイエレナ・藤田典昭・奥田修二郎・川寄敏祐・成松久、国際標準化糖鎖線形表記法 WURCS の開発、第37回情報化学討論会 豊橋2014、愛知県・豊橋市、11月27・28日
4. 木下聖子、新町大輔、藤田晶大、土屋伸一郎、藤田典昭、鈴木芳典、ソロビヨワイエレナ、松原正陽、山田一作、鹿内俊秀、奥田修二郎、川寄敏祐、成松久、「JCGGDB および国際糖鎖構造リポジトリの開発」、日本プロテオーム学会 2014 年会、つくば(2014/7/17)

〈国際〉

1. T. Kawasaki, H. Nakao, S. Matsumoto, H. Toyoda, K. Kawabata, T. Taki, and N. Kawasaki, "Novel Carbohydrate-Recognizing Antibodies for Human iPS/ES Cells", Joint Meeting of the Society for Glycobiology and the Japanese Society of Carbohydrate Research, Hawaii, USA, Nov. 18, 2014
2. Hisashi Narimatsu. The strategy required for successful translational research in development of clinical diagnostic system. International Symposium on Clinical and

- Translational Medicine (2014 ISCTM). Shanghai, China. May.28.2014.
3. Hisashi Narimatsu. Indispensable requirements in development of clinically useful biomarkers: Through the successful development of a glycomarker for liver fibrosis. International Symposium on Clinical and Translational Medicine (2014 ISCTM). Shanghai, China. May.29.2014.
 4. Hisashi Narimatsu. Successful cases of translational research based on the glycoanalysis technologies. Gyico-T 2014. Port, Portugal. Jun.21.2014.
 5. Hisashi Narimatsu. Combination of glycoproteomics technologies utilized in successful development of diagnostic systems. HUPO 13th Annual World Congress (Madrid 2014). Madrid, Spain.Oct.7.2014.
 6. Hisashi Narimatsu. A heterozygous mutation of glycosyltransferase-like gene causes asthenozoospermia. SFG & JSCR 2014 Joint Annual Meeting. Honolulu, Hawaii Nov.19.2014.
 7. Hisashi Narimatsu. From discovery of the first mammalian glycotransferase gene to the future task. Acgg2014. Hyderabad,India. Dec.10.2014.
 8. Toshihide Shikanai and Hisashi Narimatsu, "New JCGGDB Plan for Semantic Web", 6th ACGG conference, University of Hyderabad, December 9 - 12, 2014

③ ポスター発表 (国内 10 件、国際 2 件)

〈国内〉

1. Kiyoko Aoki-Kinoshita, Nobuyuki Aoki, Daisuke Shinmachi, Akihiro Fujita, Shinichiro Tsuchiya, Masaaki Matsubara, Issaku Yamada, Shujiro Okuda, Toshihide Shikanai, Noriaki Fujita, Elena Solovieva, Yoshinori Suzuki, Toshisuke Kawasaki and Hisashi Narimatsu. #98. Collaborative Development of GlyTouCan: an International Glycan Structure Repository. A-13, 第3回生命医療情報学連合大会、仙台国際センター、2014年10月2日～4日.
2. 田中健一・木下聖子・小寺正明・澤木弘道・土屋伸一郎・藤田典昭・鹿内俊秀・加藤雅樹・河野信・山田一作・成松久、セマンティックウェブを指向した国際標準化糖鎖線形表記法、第3回生命医療情報学連合大会、宮城県・仙台市、10月2～10月4日
3. 櫛田達矢・山田一作、日本化学物質辞書を用いたライフサイエンス系DBの化合物情報統合の取り組み、トーゴの日シンポジウム2014、東京都・中央区、10月5日
4. 山田一作・木下聖子・松原正陽・土屋伸一郎・新町大輔・藤田晶大・青木信幸・鹿内俊秀・鈴木芳典・ソロビヨワイエレナ・藤田典昭・奥田修二郎・川寄敏祐・成松久、国際標準化糖鎖線形表記法～国際糖鎖構造データリポジトリへ向けて～、トーゴの日シンポジウム2014、東京都・中央区、10月5日

5. ソロビヨワイエレナ, 藤田典昭, 鹿内俊秀, 木下聖子, 成松久 「糖鎖統合データベースのオントロジー化に対応したシステムの開発」トーゴの日シンポジウム 2014、2014/10/05
6. 鈴木芳典、藤田典昭、新町大輔、木下聖子、鹿内俊秀、梶裕之、成松久 「 GlycoProtDB の RDF 化」 トーゴの日シンポジウム 2014、2014/10/05
7. 新町大輔 1)、木下聖子 1)、2)、山田一作 3)、藤田晶大 1)、土屋伸一郎 1)、青木ポール信幸 1)、松原正陽 3)、藤田典昭 2)、鈴木芳典 2)、ソロビヨワイエレナ 2)、鹿内俊秀 2)、奥田修二郎 4)、川寄敏祐 5)、成松久 2) 国際糖鎖構造リポジトリの開発、 トーゴの日シンポジウム 2014、2014/10/05
8. 木下聖子、青木 ポール信行、新町大輔、藤田晶大、土屋伸一郎、松原正陽、山田一作、藤田典昭、鈴木芳典、ソロビヨワイエレナ、鹿内俊秀、奥田修二郎、川寄敏祐、成松久、「国際糖鎖構造リポジトリ GlyTouCan の協同開発」、JSBi2014、(2014/10/3)
9. ソロビヨワイエレナ, 鹿内俊秀, 藤田典昭, 成松久. 糖鎖関連の遺伝性疾患と感染症に関するオントロジーの開発.第 33 回日本糖質学会年会、(2014/8/10)
10. Rene Ranzinger、木下聖子、Matthew P. Campbell、河野信、Thomas Lütteke、奥田修二郎、新町大輔、鹿内俊秀、澤木弘道、Philip Toukach、松原正陽、山田 一作、成松久、「GlycoRDF：糖鎖オントロジーを用いた糖鎖関連データの RDF 化」、第 33 回日本糖質学会年会、(2014/8/10)

〈国際〉

1. Issaku YAMADA, Kiyoko F. AOKI-KINOSHITA, Masaaki MATSUBARA, Shinichiro TSUCHIYA, Masaaki KOTERA, Kenichi TANAKA, Noriaki FUJITA, Toshihide SHIKANAI, Masaki KATO, Shin KAWANO, Hiromichi SAWAKI, Hisashi NARIMATSU. “WURCS: Web3 Unique Representation of Carbohydrate Structures for Semantic Web”, SFG & JSCR 2014 Joint Annual Meeting, Hawaii, November 16, 2014.
2. Toshihide Shikanai, Noriaki Fujita, Yoshinori Suzuki, Elena Solovieva, Kiyoko Aoki-Kinoshita, Madoka Soyama, Atsushi Kuno, Hiroyuki Kaji, Hisashi Narimatsu. “Next JCGGDB Plan for Semantic Web”, SFG & JSCR 2014 Joint Annual Meeting, Hawaii, November 16, 2014.

(3-6) 知的財産権の出願

特になし。

(3-7) 受賞・報道等

特になし。

(3-8) その他(技術移転など)

特になし。

§4. 研究開発期間中に主催した活動(主催したワークショップ等)

年月日	名称	場所	参加人数	概要
14年8月10日 ~12日	日本糖質学会・JCGGDBブ ース展示	名古屋 大学 豊 田講堂	2人	学会参加者 へのDBの 使い方の説 明等
15年3月10日~ 13日	糖鎖インフォマティクス若手の会 Glyco-Hackathon	産総研 つくば	約17人	統合DBに 関する技術 開発・セマン ティック化な ど
14年4月10日	チーム内ミーティング(非公開)	産総研 つくば		研究進捗報 告のためのミ ーティング
14年4月24日	チーム内ミーティング(非公開)	産総研 つくば		研究進捗報 告のためのミ ーティング
14年5月8日	チーム内ミーティング(非公開)	産総研 つくば		研究進捗報 告のためのミ ーティング
14年5月22日	チーム内ミーティング(非公開)	野口研 究所	15人	研究進捗報 告のためのミ ーティング
14年6月5日	チーム内ミーティング(非公開)	産総研 つくば		研究進捗報 告のためのミ ーティング
14年6月19日	チーム内ミーティング(非公開)	DBCLS (柏の 葉)		研究進捗報 告のためのミ ーティング
14年7月10日	チーム内ミーティング(非公開)	産総研 つくば		研究進捗報 告のためのミ ーティング
14年7月30日	チーム内ミーティング(非公開)	創価大 学・工学 部		研究進捗報 告のためのミ ーティング
14年9月4日	チーム内ミーティング(非公開)	産総研 つくば		研究進捗報 告のためのミ ーティング
14年9月18日	チーム内ミーティング(非公開)	野口研 究所		研究進捗報 告のためのミ ーティング

14年10月2日	チーム内ミーティング(非公開)	慶応大学		研究進捗報告のためのミーティング
14年10月30日	チーム内ミーティング(非公開)	AP 品川		研究進捗報告のためのミーティング
14年11月13日	チーム内ミーティング(非公開)	産総研 つくば		研究進捗報告のためのミーティング
14年12月4日	チーム内ミーティング(非公開)	野口研究所		研究進捗報告のためのミーティング
14年12月25日	チーム内ミーティング(非公開)	池袋	15人	研究進捗報告のためのミーティング
15年1月15日	チーム内ミーティング(非公開)	DBCLS (柏の葉)		研究進捗報告のためのミーティング
15年1月29日	チーム内ミーティング(非公開)	Skype 会議		研究進捗報告のためのミーティング
15年2月12日	チーム内ミーティング(非公開)	DBCLS (柏の葉)		研究進捗報告のためのミーティング
15年2月26日	チーム内ミーティング(非公開)	Skype 会議		研究進捗報告のためのミーティング
15年3月12日	チーム内ミーティング(非公開)	産総研 つくば		研究進捗報告のためのミーティング
15年3月30日	チーム内ミーティング(非公開)	Skype 会議		研究進捗報告のためのミーティング

以上

別紙1 既公開のデータベース・ウェブツール等

No.	研究開発課題名	データベース、ウェブツール等の名称	概要 (150字程度)	URL	公開開始日	関連論文 (論文リストに記載があれば、その番号でも可)	備考
01	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoProtDB(線虫版)	本DBは、主に線虫の糖タンパク質のデータベースです。実験で証明された修飾位置と修飾位置に付加している糖鎖の部分糖鎖構造の情報をデータベース化しました。	http://jcgddb.jp/rcmg/gpdb/index.action			
02	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoNAVI Database	本DBは、糖鎖研究において重要である糖鎖標準品や糖鎖修飾体などに関連した情報を収録しています。糖鎖の化学合成法における反応の基質・生成物・反応条件・収率などを収録した化学反応データベース、および糖質の化学構造や精製方法、スペクトルデータなどを収録した分子情報データベースを含んでいます。	http://ws.glyconavi.org			
03	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoGene Database (GGDB)	本DBは、主に糖鎖関連遺伝子のデータベースです。糖転移酵素の塩基配列・アミノ酸配列情報や基質特異性に関する情報が格納されています。	http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/ggdb/			
04	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GMDB	本DBは、主に糖鎖標準品のMSのスペクトルをデータベース化したものです。	http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Ms_ResultSearch			
05	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GDGDB	本DBは、糖鎖関連遺伝子が原因で引き起こされる病気を遺伝子と結び付けてデータベース化しました。病態の情報も著者の許可を得て掲載しています。	http://jcgddb.jp/doc/ProjectTop.action?langType=1&projectId=2			
06	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	CGGDB	線虫の糖鎖関連遺伝子のデータベース。各遺伝子をRNAiした時のフェノタイプの情報・写真を多数掲載している。	http://jcgddb.jp/cggdb/			
07	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	配糖体データベース	糖や糖鎖を含む天然物や化合物のデータベース。	http://jcgddb.jp/GlycoChemExplorer/			
08	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	JCGGDB Report	本DBは、主に糖鎖のパスウェイの情報や糖鎖科学に関する最新の情報をミニレビュー方式で収集しました。	http://jcgddb.jp/doc/ProjectTop.action?langType=2&projectId=3			
09	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	JMSDB	本DBは、単糖の構造を定義したデータベース。構造名と構造情報(SMILES、InChIなど)の情報を取得できる。	http://jcgddb.jp/search/ChemGlycan.cgi			
10	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	KOmouseDB	本DBは、主に糖鎖関連遺伝子や糖タンパク質に関連する遺伝子のノックアウトマウスのフェノタイプ情報を、名古屋大学・古川グループと共同で収集構築しました。	http://jcgddb.jp/doc/Project.action?projectId=1&langType=1			
11	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	Lectin Frontier Database (LfDB)	本DBは、主にレクチンの配列と立体構造のデータベースです。産総研が独自に開発した方法により、レクチンと糖鎖の相互作用を計測し、その結果をデータベース化したものです。	http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/LectinSearch			
12	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	PACDB	本DBは、病原体が宿主(ヒトやマウスなど)由来の糖鎖と結合する実験情報を論文から集めデータベース化しました。ウイルスやバクテリアなどが結合する構造だけではなく結合しない情報もDBに格納されている。	http://jcgddb.jp/search/PACDB.cgi			
13	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	TuMaRDB	本DBは、病原体が宿主(ヒトやマウスなど)由来の糖鎖と結合する実験情報を論文から集めデータベース化しました。ウイルスやバクテリアなどが結合する構造だけではなく結合しない情報もDBに格納されている。	http://jcgddb.jp/search/TuMaRdb.cgi			
14	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	糖鎖構造検索インターフェース (CFG単糖シンボルによる検索)	本DBは、糖鎖構造をXMLで表記したデータセットから成るデータベースです。米国コンソーシアム(CFG)の単糖シンボルを利用して構造検索できます。	http://jcgddb.jp/idb/flash/GlycoEditor.jsp			
15	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoPOD	本DBは、平成21年度に立命館大学糖鎖工学研究センターと産総研糖鎖医工学研究センターとの共同事業としてスタートした糖鎖科学実験マニュアルです。“書いてあるように進めて行けば必ず上手く行く”実験書を目指しています。	http://jcgddb.jp/GlycoPOD/			
16	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoChemExplorer	本DBは、糖鎖関連構造の化学構造式を利用して検索できる検索インターフェースです。糖鎖構造・配糖体・合成化合物などを検索できます。	http://jcgddb.jp/GlycoChemExplorer/			
17	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoEpitope	本DBは、糖鎖構造データベースや糖鎖遺伝子データベースと異なり、抗体とその糖鎖エピトープに関する情報を総合的にまとめたデータベースです。糖鎖機能研究の支援データベースとして世界的にユニークな存在です。	http://glycoepitope.jp/	2005年2月	GlycoEpitope: A Database for Carbohydrate Antigen and Antibody. S. Okuda, H. Nakao, and T. Kawasaki Glycoscience: Biology and Medicine, pp 267-273 (2014). Springer Japan, N. Taniguchi et al., (eds) DOI:10.1007/978-4-431-54841-6_27	
18	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	Glycan Structure 詳細ページ	本DBは、糖鎖構造の詳細情報を閲覧するためのページです。個々の糖鎖構造に関する単糖組成や質量数や構造名をまとめたページ。各DBにデータがある場合にExternal LinksにIDと名称とリンクがついている。	http://jcgddb.jp/idb/jcgddb/JCGG-STR006947 (一例)			
19	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoProtDB(マウス版)	本DBは、マウスの糖タンパク質の糖鎖修飾位置(付加位置)を実験的に同定し、データベース化したものです。	http://jcgddb.jp/rcmg/gpdb/			
20	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	横断検索	本検索インターフェースは、糖鎖関連データベースを一括して検索できます。	http://jcgddb.jp/search/search.cgi?keyword=&lang=jp			
21	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycosideDB	本DBは、配糖体の糖鎖部分とアグリコン部分で分類し、構造と名称を整理しています。生理活性情報が付いているものがあります。	http://jcgddb.jp/search/GlycosideDB.cgi			
22	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoNMR	糖鎖のNMRスペクトルは、糖鎖構造に於ける重要な情報源である。本データベースは、糖質のNMRスペクトルを解析し、化学構造、化学シフト、カップリング定数、スペクトル、測定条件等を収録したデータベースである。	http://glycoinfolab.jp/GlycoNMR/			

別紙1 既公開のデータベース・ウェブツール等

No.	研究開発課題名	データベース、ウェブツール等の名称	概要	URL	公開開始日	関連論文 (論文リストに記載があれば、その番号でも可)	備考
01	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	糖タンパク質データベース (GlycoProtDB)	この糖タンパク質データベース(GlycoProtDB)は、線虫 (Strain N2) およびマウス (C52BL/6J系のオス)の組織を材料として、実験的に同定されたN結合型糖タンパク質の情報を一般に提供するためのデータベースです。現在、線虫試料より同定されたN結合型糖タンパク質全てと、マウス肝臓からコンカナバリンA (ConA) で捕集された糖タンパク質の情報を公開しています。これらのデータには、タンパク質(遺伝子ID、タンパク質名、糖鎖修飾部位、および、糖ペプチドを捕集するために使用したレクチンの情報が含まれています。	http://jcgdb.jp/rcmg/gpdb/index.action			
02	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoNAVI	本DBは、糖鎖研究において重要である糖鎖標準品や糖鎖修飾体などに関連した情報を収録しています。糖鎖の化学合成法における反応の基質・生成物・反応条件・収率などを収録した化学反応データベース、および糖質の化学構造や精製方法、スペクトルデータなどを収録した分子情報データベースを含んでいます。	http://ws.glyconavi.org			
03	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	糖鎖関連遺伝子データベース (GGDB; GlycoGene Database)	本DBは、主に糖鎖関連遺伝子のデータベースです。糖転移酵素の塩基配列・アミノ酸配列情報や基質特異性に関する情報が格納されています。	http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/ggdb/			
04	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	糖鎖のタンデム質量分析スペクトルデータベース (GMDB; Glycan Mass Spectral DataBase)	本DBは、主に糖鎖標準品のMSのスペクトルをデータベース化したものです。	http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Ms_ResultSearch			
05	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GDGDB	線虫の糖鎖関連遺伝子のデータベース。各遺伝子をRNAiした時のフェノタイプの情報・写真を多数掲載している。	http://jcgdb.jp/cggdb/			
06	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	糖鎖関連疾患遺伝子とその原因遺伝子のデータベース (GDGDB; Glyco-Disease Genes Database)	本DBは、糖鎖関連遺伝子が原因で引き起こされる病気を遺伝子と結び付けてデータベース化しました。病態の情報も著者の許可を得て掲載しています。	http://jcgdb.jp/doc/ProjectTop.action?langType=1&projectId=2			
07	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	配糖体データベース (GlycosideDB)	糖や糖鎖を含む天然物や化合物のデータベース。	http://jcgdb.jp/search/GlycosideDB.cgi			
08	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	JCGGDB Report	本DBは、主に糖鎖のパスウェイの情報や糖鎖科学に関する最新の情報をミニレビュー方式で収集しました。	http://jcgdb.jp/doc/ProjectTop.action?langType=2&projectId=3			
09	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	単糖データベース (JMSDB)	本DBは、単糖の構造を定義したデータベース。構造名と構造情報 (SMILES, InChIなど) の情報を取得できる。	http://jcgdb.jp/search/ChemGlycan.cgi			
10	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	ノックアウトマウスを用いた糖鎖糖科学データベース (KOMouseDB)	本DBは、主に糖鎖関連遺伝子や糖タンパク質に関連する遺伝子のノックアウトマウスのフェノタイプ情報を、名古屋大学・古川グループと共同で収集構築しました。	http://jcgdb.jp/doc/Project.action?projectId=1&langType=1			
11	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	レクチンフロンティアデータベース (LfDB; Lectin Frontier Database)	本DBは、主にレクチンの配列と立体構造のデータベースです。産総研が独自に開発した方法により、レクチンと糖鎖の相互作用を計測し、その結果をデータベース化したものです。	http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/LectinSearch			
12	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	感染と糖鎖のデータベース (PACDB; Pathogen Adherence to Carbohydrate Database)	本DBは、病原菌が宿主の細胞表面に結合する実験情報を論文から集めたデータベース化しました。ウイルスやバクテリアなどが結合する構造だけでなく結合しない情報もDBに格納されている。	http://jcgdb.jp/search/PACDB.cgi			
13	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	腫瘍マーカーリファレンスデータベース (TuMaRDB)	本DBは、腫瘍マーカー分子と呼ばれている糖鎖・糖タンパク質・タンパク質の情報や適応度を論文から収集しデータベース化しました。	http://jcgdb.jp/search/TuMaRdb.cgi			
14	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	糖鎖構造検索インターフェース (CFG単糖シンボルによる検索)	本DBは、糖鎖構造をXMLで表記したデータセットから成るデータベースです。米国コンソーシアム (CFG) の単糖シンボルを利用して構造検索できます。	http://jcgdb.jp/ldb/flash/GlycoEditor.jsp			
15	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoPOD (JCGGDB Glycoscience Protocol Online Database)	本DBは、平成21年度に立命館大学糖鎖工学研究センターと産総研糖鎖工学研究センターとの共同事業としてスタートした糖鎖科学実験マニュアルです。“書いてあるように進めて行けば必ず上手く行く”実験書を目指しています。	http://jcgdb.jp/GlycoPOD/			
16	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoChemExplorer	本DBは、糖鎖関連構造の化学構造式を利用して検索できる検索インターフェースです。糖鎖構造・配糖体・合成化合物などを検索できます。	http://jcgdb.jp/GlycoChemExplorer/			
17	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoEpitope	本DBは、糖鎖構造データベースや糖鎖遺伝子データベースと異なり、抗体とその糖鎖エпитープに関する情報を総合的にまとめたデータベースです。糖鎖機能研究の支援データベースとして世界的にユニークな存在です。	http://glycoepitope.jp/	2005年2月	GlycoEpitope: A Database for Carbohydrate Antigen and Antibody. S. Okuda, H. Nakao, and T. Kawasaki Glycoscience: Biology and Medicine, pp 267-273 (2014). Springer Japan, N. Taniguchi et al., (eds) DOI:10.1007/978-4-431-54841-6_27	
18	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	Glycan Structure 詳細ページ	本DBは、糖鎖構造の詳細情報と関連する他のデータベースの糖鎖構造に関する単糖組成や質量数や構造名をまとめたページ。各DBにデータがある場合にExternal LinksにIDと名称とリンクがついている。	http://jcgdb.jp/ldb/jcgdb/JCGG-STR006947 (一例)			
19	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	横断検索	本検索インターフェースは、糖鎖関連データベースを一括して検索できます。	http://jcgdb.jp/search/search.cgi?keyword=&lang=jp			
20	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycosideDB	本DBは、配糖体の糖鎖部分とアグリコン部分で分類し、構造と名称を整理しています。生理活性情報が付いているものがあります。	http://jcgdb.jp/search/GlycosideDB.cgi			
21	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlycoNMR Database	糖鎖のNMRスペクトルは、糖鎖構造に於ける重要な情報源である。本データベースは、糖質のNMRスペクトルを解析し、化学構造、化学シフト、カップリング定数、スペクトル、測定条件等を収録したデータベースである。	http://glycoinfolab.jp/GlycoNMR/			
22	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	GlyTouCan	糖鎖構造データを収録した国際糖鎖構造リポジトリ。	http://www.glytoucan.org	2015年3月		
23	糖鎖統合データベースおよび国際糖鎖構造リポジトリの開発	Glycan Builder	糖鎖構造を直感的に描画可能なツール。	http://unicarbk.org/builder			-WUR