

「統合データベースプロジェクト」補完課題

「糖鎖修飾情報とその構造解析データの統合」

(糖鎖科学統合データベースの構築)

20年度 研究成果報告書

平成21年3月

独立行政法人産業技術総合研究所 成松 久

本報告書は、文部科学省の平成20年度科学技術試験研究委託事業による委託業務として、独立行政法人産業技術総合研究所が実施した平成20年度「糖鎖修飾情報とその構造解析データの統合（糖鎖科学統合データベースの構築）」の成果を取りまとめたものです。

## 1. 委託業務の目的

糖鎖業界に散在するデータベースを産業技術総合研究所・糖鎖医工学研究センター（以下、糖鎖医工学研究センター）に設置予定のデータベースサーバに集約し糖鎖科学統合データベースを構築する。まずは、糖鎖医工学研究センターが構築した5種類のデータベース（糖鎖関連データベース、糖転移酵素特異性に関するデータベース、レクチンデータベース、糖タンパク質データベース、および質量分析データベース）について、統合を行う。

また、我が国に存在する糖鎖関連データベースを統合するために、糖鎖医工学研究センターは糖鎖関連データベースを保有している研究機関と交渉し、了解を得た上でデータの提供元となるよう促す役割を行う。そのために、各データ提供機関が糖鎖医工学研究センターに円滑にデータを提供できるように糖鎖医工学研究センターは必要な支援を行う。複数の機関から得られたデータを標準化した上でデータベースに格納する。

糖鎖医工学研究センターはデータベースに格納した専門的な情報を直感的に理解できるインターフェースを開発し、糖鎖研究分野以外の研究者等にも理解可能な情報として公開する。

各種様々なデータをいくつかのカテゴリに分類した上で、統合に必要な情報を中核機関である情報・システム研究機構に受け渡し、情報・システム研究機構の「DB ポータル」等の検索方法と連携できるように開発を行う。

最終的には情報・システム研究機構等とのデータの統合を目指し、統合検索を共同で開発する業務を行う。

## 2. 平成20年度（報告年度）の実施内容

### 2.1 実施計画

糖鎖医工学研究センターが平成19年度に整備・構築したデータベース（糖鎖関連データベース、糖転移酵素特異性に関するデータベース、レクチンデータベース、糖タンパク質データベース、および質量分析データベース）を基盤にし、国内に散在する糖鎖関連データベースを集約し糖鎖科学のポータルサイトを構築する。

また、我が国に存在する糖鎖関連データベースを統合するために、糖鎖関連データベースを保有している各研究機関と交渉し、統合データベースへのデータ提供を行えるよう支援および手続きを開始する。そして平成21年度（次年度）から参画する研究機関との打ち合わせも行っていく。

#### ①運営と開発体制の準備

糖鎖医工学研究センターに運営チームを設置し、データベース構築の開発体制を整え、平成19年度購入のサーバ上でポータルサイトを公開できるように環境を整える。

データを保有している研究機関に統合データベースの活動を説明し、次年度の協力機関としての参画を促す。そして理解が得られた機関を含めた次年度の業務計画を立てる。

### ②データ提供機関との交渉

データ統合の活動をしやすくする為に、国内の数多くの主要な研究機関・大学・企業が集結している最大の糖鎖の団体である「日本糖鎖科学コンソーシアム（JCGG）」に協力を要請し、統合データベースの活動を JCGG の枠組みの中の活動として公認を得た。

既に糖鎖関連データベースを保有している機関に協力機関として参画するように促す。データベース化していないデータを保有している機関には糖鎖科学統合データベースの枠組みの中で構築し統合するように促す。

データの提供時に発生する作業に関して、個々の研究機関・企業・大学と交渉し、より良い手段で解決し、円滑にデータを統合できるように実務レベルの話し合いを進め、業務を遂行する。

また、糖鎖医工学研究センターのデータベースに遺伝子多型やタンパク質ドメイン構造等の H-InvDB の情報を表示できるように、平成 20 年度から産業技術総合研究所・生物情報解析研究センターの代表者と協議を開始し、次年度以降の連携を目指す。

### ③統合データベース構築

糖鎖医工学研究センターが平成 19 年度改良したデータベース（糖鎖関連データベース、糖転移酵素特異性に関するデータベース、レクチンデータベース、糖タンパク質データベース、および質量分析データベース）を基盤とし、糖鎖科学統合データベースのコンテンツと検索機能を拡充する。

まずは、「構造解析と検出に関するカテゴリー」と題して産総研の「質量分析によるスペクトルデータベース」と名古屋市立大学の「多次元 HPLC データベース」を新規開発し、日本脂質生化学会脂質データベース構築委員会の「LipidBank（糖脂質のデータのみ）」と立命館大学の「GlycoEpitope」と産総研の「レクチンデータベース」を組み合わせ、質量分析の  $m/z$  値や単糖組成などから想定される糖鎖構造を抽出し、各種様々な方法論で解析されたデータに辿りつけるように統合する。現在、実験データの有無により構造を同定または推定可能な方法論を検索できるようになり、糖鎖の解析や構造検出が分からない研究者にも、より最適な構造解析の方法論を提供するサイトを目指す。

また、「糖鎖関連遺伝子」のデータベースのカテゴリーの中で、名古屋大学の協力を得てノックアウトマウスのデータベースを新規に構築する。国内の研究者が保有しているノックアウトマウスの情報を研究者が自ら登録できる仕組みを構築し、モデルマウスのリソースを管理できるシステムを構築する。それからノックアウトのフェノタイプの情報も詳細に管理し、リソースを提供できる環境を整える。最終的にはノックアウトマウスデータベースと産総研の糖鎖関連遺伝子データベースと連携を図り統合を目指す。

異なる機関のデータもマージできるようにデータの標準化を考慮しながら糖鎖科学統合データベースの構築を開始する。完成したデータベースから順次公開していく。また、「DBポータル」等の検索機能との連携がとれるように情報・システム研究機構と話し合いを行い、必要な情報やデータ等の提供を行う。

## 2.2 実施内容(成果)

糖鎖医工学研究センターのデータベースを公開した。それらを基盤にして、国内に散在する糖鎖関連データベースを集約し糖鎖科学のポータルサイトを運用し始めた。

また、我が国に存在する糖鎖関連データベースを統合するために、糖鎖関連データベースを保有している研究機関と交渉し、統合データベースへのデータ提供を行えるよう公開用DB構築支援および統合用APIの設置の支援を行った。具体的な作業とその結果の報告を下に記す。

### ①運営と開発体制の準備

引き続き糖鎖医工学研究センターに運営チームを置き、データベース構築の開発体制を整えた。そして、キーワードによる横断検索のポータルサイトを平成20年8月にリニューアルして公開した。日本糖質学会で統合データベースの発表を行いその後アクセスが急増した(図1)。ポータルサイトのみでの国別アクセス数を図2に、国別の独自IPの数を図3に示した。

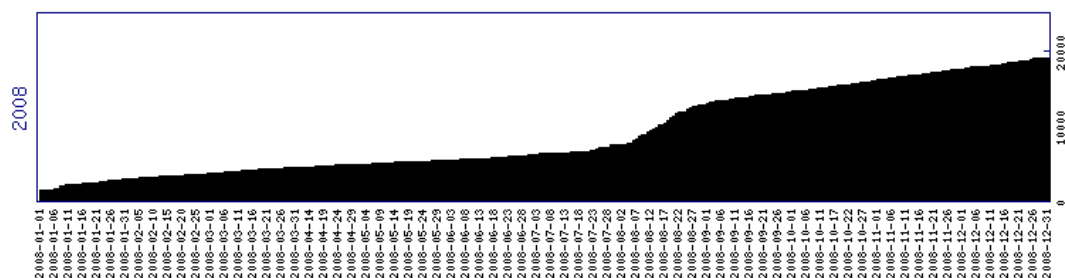


図1 JCGGDB 横断検索

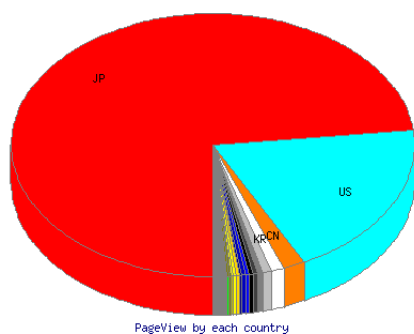
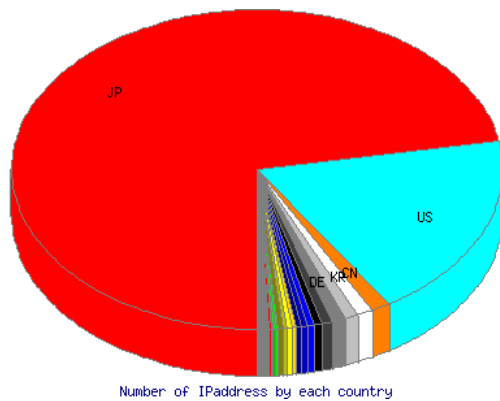


図2 国別アクセス数(ページ参照数)

| 国名                 | ページ参照数 |
|--------------------|--------|
| JAPAN              | 85790  |
| UNITED STATES      | 14973  |
| GERMANY            | 2910   |
| CHINA              | 2464   |
| KOREA, REPUBLIC OF | 1677   |
| UNITED KINGDOM     | 551    |
| EU                 | 365    |



| 国名                 | 国別ユーザ数 |
|--------------------|--------|
| JAPAN              | 1554   |
| UNITED STATES      | 435    |
| CHINA              | 30     |
| KOREA, REPUBLIC OF | 24     |
| GERMANY            | 23     |
| ROMANIA            | 16     |

図 3 国別ユーザ数

また、その他の学会や日本糖鎖科学コンソーシアム（J C G G）年会など糖鎖の研究者が集結する場所で発表を行い統合データベースの活動報告を行った。その際に研究機関の代表者と話し合い、平成 21 年度（次年度）から統合プロジェクトに参加する研究機関を増やすことに成功した。

平成 21 年度から協力する機関へはこれまでの統合データベースの活動を説明し、今後のプランを説明し、その上で個々の機関のデータの意義やプロジェクト内での役割を理解して頂いた上で、統合プロジェクトで、どのように統合を進めていくか平成 21 年度の業務計画を立てながら具体的に話し合った。

## ②データ提供機関との交渉

データ統合の活動をしやすくする為に、国内の数多くの主要な研究機関・大学・企業が集結している最大の糖鎖の団体である J C G G の協力を頂いたことで比較的円滑に統合プロジェクトへの参加を促すことができた。平成 20 年度は、立命館大学（代表：糖鎖工学研究センター・センター長川寄敏祐氏）の GlycoEpitope の横断検索のインデックス化するためのテキスト出力の API の開発と、REST 方式を使用したキーワードによる検索とその検索結果並びに個々のエントリーの詳細情報を XML で出力できる API（以後、統合検索用 API と略す。）を開発して設置した。現在稼働しているキーワードによる横断検索のインデックスにテキスト出力の結果を利用している。REST を利用した API は統合検索に利用することになっている。今のところまだ統合検索の基盤作りのための整備を行っているところである。名古屋市立大学（代表：名古屋市立大学大学院薬学研究科生命分子構造学分野・加藤晃一氏）の多次元 H P L C データベース（図 4, 5 <http://hplc.glycoanalysis.info/>）

を構築して公開した。

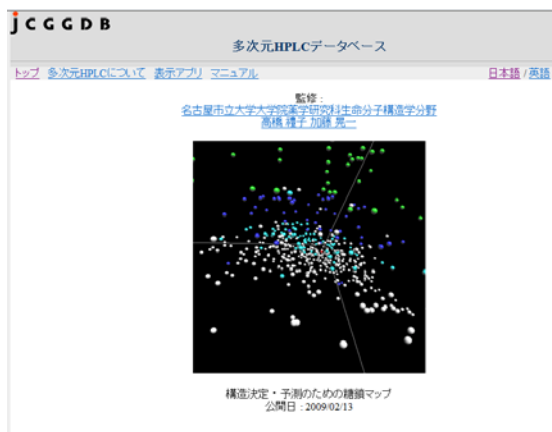


図 4 多次元 HPLC データベース (MDHPLCDB)

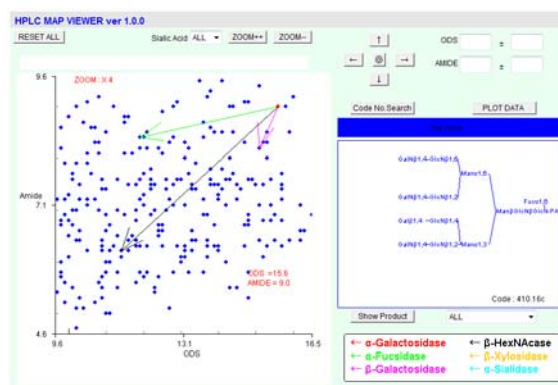


図 5 MDHPLCDB の詳細画面

その他の交渉として、データベース化していないデータを保有している3機関と話し合いを持つことができた。まずは、財団法人野口研究所（代表：常務理事・白井孝氏）では有機化学合成を用いて糖鎖を合成していることから化合物の未公開のデータベースを持っている。更には合成経路や合成のノウハウの情報も持っている。野口研究所と産業技術総合研究所が文科省の統合データベースプロジェクト内で平成21年度から2年をかけて糖鎖合成の統合データベースを構築することで合意した。入手し難い糖鎖標準品を研究者が自ら糖鎖合成できるように有機化学合成とリコンビナント糖転移酵素による糖鎖合成を融合させたデータベースを構築する計画を立てた。

次に、創価大学（代表：工学部 専攻長・西原祥子氏）のショウジョウバエの糖転移酵素の遺伝子をノックダウンしてフェノタイプ情報を格納している FlyGlycoDB（未公開）の公開版への作りかえと統合検索用のAPIの設置を平成21年度行うことになった。

3 つ目として、平成 21 年度に理化学研究所（代表：システム糖鎖生物学研究グループ グループディレクター・谷口直之氏）の糖鎖コンフォメーションデータベース（未公開）の公開支援と構造による横断検索の検索対象にすること、並びに、統合検索用 API の設置を行うことになった。

また、糖鎖医工学研究センターが保有しているデータベースのデータ自体は経産省・NEDO プロジェクトの成果物であるため、経産省側のプロジェクトにも協力する義務がある。平成 20 年度から産業技術総合研究所・バイオメディシナル情報研究センター（旧生物情報解析研究センター）の代表者今西氏と協議を開始し、経産省の統合 DB プロジェクト側での GGDB の API の設置に協力（セキュリティーチェックや設置のためのやり取り等の労務）した（GGDB は平成 19 年度の本委託費で構築した。GGDB の API に関しては経産省統合 DB プロジェクトの平成 20 年度の予算で構築した。）。

GGDB Web サービス

[http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/ggdb/jsp/doc/api/GGDB\\_Manual\\_jp.htm](http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/ggdb/jsp/doc/api/GGDB_Manual_jp.htm)

平成 21 年度には経産省統合 DB プロジェクトの H-InvDB の API を利用して産総研・糖鎖医工学研究センターの GGDB や LfDB にある遺伝子の詳細画面に補完してメリットがある組織発現や遺伝子多型（SNP やマイクロサテライトなど）のデータを表示することになった。

### ③統合データベース構築

平成 19 年度に糖鎖医工学研究センターが改良したデータベース（糖鎖関連データベース、糖転移酵素特異性に関するデータベース、レクチンデータベース、糖タンパク質データベース、および質量分析データベース）を平成 20 年 8 月に公開した。それらの DB を基盤とし、糖鎖科学統合データベースのコンテンツと検索機能を拡充した。

1) GlycoGeneDataBase (糖鎖関連データベース、糖転移酵素特異性に関するデータベース)

<http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/ggdb/>

2) Lectin frontier DataBase (レクチンデータベース)

<http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/ggdb/>

3) Glycan Mass Database (質量分析データベース)

[http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Ms\\_ResultSearch](http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Ms_ResultSearch)

4) GlycoProtDatabase (糖タンパク質データベース)

[http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Glc\\_ResultSearch](http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Glc_ResultSearch)

まずは、「構造解析と検出に関するカテゴリ」と題して産総研の「質量分析によるスペクトルデータベース」と新規開発した名古屋市立大学の「多次元 HPLC データベース」、日本脂質生化学会脂質データベース構築委員会の「LipidBank (糖脂質のデータのみ)」と立



命館大学の「GlycoEpitope」と産総研の「レクチンデータベース」を組み合わせ、質量分析の m/z 値や単糖組成などから想定される糖鎖構造を抽出し、各種様々な方法論で解析されたデータに辿りつけるように統合した。構造による横断検索もできるようになった。m/z や単糖組成による検索も可能にした。平成 21 年 3 月現在セキュリティチェック中のため公開は控えている。平成 21 年度初めには公開する予定となっている。

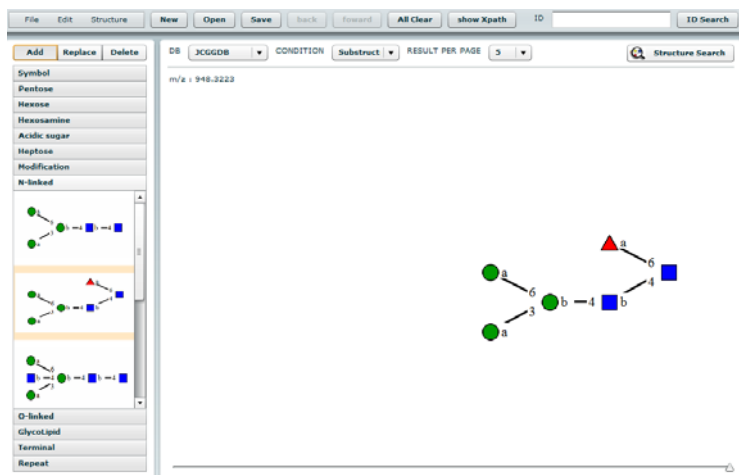


図 6 糖鎖構造検索用エディター

ブラウザを利用して糖鎖構造およびそれらの修飾を含めドラッグ&ドロップで作成できる(図6)。検索の方法として入力した構造そのものを検索する完全一致検索(Exact Match)と入力した構造が部分的に含まれる部分構造検索(Substructure Match)の2つを用意した。図7は「完全一致検索」結果である。同じ構造のように見えるが実際には還元末端の状態が違いやD体L体の違いがあり、それらの違いが見て分かるように次年度改良を重ねる。

3 hits

Results 1 - 3 of 3

**1**

|               |      |                      |
|---------------|------|----------------------|
| JCGGDB ID     |      | JCGG-STR006329       |
| GlycomeDB     |      | <a href="#">1643</a> |
| underivatised | mono | 1056.3856201171875   |
|               | ave  | 1056.975341796875    |
| permethylated | mono | 1322.68310546875     |
|               | ave  | 1323.4859619140625   |
| peracetylated | mono | 1770.5650634765625   |
|               | ave  | 1771.6090087890625   |

|               |      |                       |
|---------------|------|-----------------------|
| JCGGDB ID     |      | JCGG-STR007016        |
| GlycomeDB     |      | <a href="#">17428</a> |
| underivatised | mono | 1056.3856201171875    |
|               | ave  | 1056.975341796875     |
| permethylated | mono | 1322.68310546875      |
|               | ave  | 1323.4859619140625    |
| peracetylated | mono | 1770.5650634765625    |
|               | ave  | 1771.6090087890625    |

|               |      |                       |
|---------------|------|-----------------------|
| JCGGDB ID     |      | JCGG-STR021868        |
| AIST-MS       |      | ONA-00008f            |
| 多次元HPLC       |      | <a href="#">010_1</a> |
| GlycomeDB     |      | <a href="#">33047</a> |
| underivatised | mono | 1056.3856201171875    |
|               | ave  | 1056.975341796875     |
| permethylated | mono | 1322.68310546875      |
|               | ave  | 1323.4859619140625    |
| peracetylated | mono | 1770.5650634765625    |
|               | ave  | 1771.6090087890625    |

図 7 完全一致検索結果

図 8 は部分構造検索の結果である。図 6 で入力した構造が含まれる構造を抽出した結果である。

718 hits  
Results 1 - 5 of 718

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 Next >

| JCGGDB ID     |      | JCGG-STR001554        |
|---------------|------|-----------------------|
| GlycomeDB     |      | <a href="#">11494</a> |
| underivatised | mono | 1259.4649658203125    |
|               | ave  | 1260.17041015625      |
| permethylated | mono | 1567.8094482421875    |
|               | ave  | 1568.7615966796875    |
| peracetylated | mono | 2057.665771484375     |
|               | ave  | 2058.87841796875      |

| JCGGDB ID     |      | JCGG-STR002578       |
|---------------|------|----------------------|
| GlycomeDB     |      | <a href="#">1249</a> |
| underivatised | mono | 1380.4912109375      |
|               | ave  | 1381.26025390625     |
| permethylated | mono | 1730.8826904296875   |
|               | ave  | 1731.9320068359375   |
| peracetylated | mono | 2346.734130859375    |
|               | ave  | 2348.117431640625    |

| JCGGDB ID     |      | JCGG-STR003699        |
|---------------|------|-----------------------|
| GlycomeDB     |      | <a href="#">13562</a> |
| underivatised | mono | 1259.4649658203125    |
|               | ave  | 1260.17041015625      |
| permethylated | mono | 1567.8094482421875    |
|               | ave  | 1568.7615966796875    |
| peracetylated | mono | 2057.665771484375     |
|               | ave  | 2058.87841796875      |

図 8 部分構造検索の結果

また、「糖鎖関連遺伝子」のデータベースのカテゴリの中で、名古屋大学（代表：古川鋼一氏）の協力を得てノックアウトマウスのデータベースを新規に構築した（図9）。データが整い次第公開する予定である。

**ノックアウトマウス** 説明

> ノックアウトマウス

レイアウト

- basic

タイトル: Koichi Furukawa: GM2/GD2 synthase KO 日本語 | 英語

|                                  |  |  |  |   |   |
|----------------------------------|--|--|--|---|---|
| 1. Knockout establishment method | 2. Sugar chain mutation by gene knockout | 3. Analytical result of abnormal expression type | 4. Analysis of mechanism of abnormal expression type | 5. Analysis or bibliographical consideration concerning influence of genetic background on abnormal expression type | 6. Announcement thesis concerning analysis of this knockout mouse |
|----------------------------------|--|--|--|---|---|

**Sugar chain mutation by gene knockout**

**Expected sugar chain mutation**

Loss of complex gangliosides including asialo-series

**Biochemical analysis of mutation of sugar chain synthesis enzyme in knockout mouse (result of a measurement of organization or cell and enzymic activity)**

Complete loss of GM2/GD2 synthase activity in the brain extracts

**Biochemical analysis of mutation of sugar chain in knockout mouse (result such as TLC - [immunostaining] and HPLC/MS .. [rekuchinburotto] and [immunoburotto].)**

Complete loss of complex gangliosides and accumulation of precursors (GM3 and GD3) were shown in TLC.

**Others**

9-O-acetyl GD3 markedly increased in the brain extracts prepared without alkaline treatment (unpublished)

registered by: Administrator

Copyright © 2007-2009 産総研 糖鎖工学研究センター All Rights Reserved

図 9 ノックアウトマウス DB 詳細画面

国内の研究者が保有している糖鎖関連遺伝子のノックアウトマウスの情報を研究者が自ら登録できる仕組みを構築した。現在、名古屋大学のグループにマウスの情報の整備を依頼しており、その整備終了後にはプロトタイプ版となっている現在のシステムにデータを登録する予定である。平成21年度には使い勝手などの意見を聞きながら公開版としてブラッシュアップしていく予定である。

### 2.3 成果の外部への発表

プレス発表、取材対応 (該当なし)

#### 学会等への口頭発表

| 業務コード    | 実施年度 | 国内国際 | 講演タイトル                         | 発表者名 | 講演会名          | 発表年月日          |
|----------|------|------|--------------------------------|------|---------------|----------------|
| 07156016 | 20   | 国内   | 「糖鎖の質量分析スペクトルデータベース：何ができるか、何が必 | 亀山昭彦 | 第56回質量分析総合討論会 | 2008年5月14日～16日 |

|          |    |    |  |                 |  |                       |
|----------|----|----|--|-----------------|--|-----------------------|
|          |    |    | 要か？」   |                 |  |                       |
| 07156016 | 20 | 国内 | 「糖鎖 MSn スペクトルデータベースの現状と展望」                                   | 亀山昭彦            | 第 56 回質量分析総合討論会  | 2008 年 5 月 14 日～16 日  |
| 07156016 | 20 | 国際 | Publication and integration of glycodatabase.                | 新聞陽一            | 全国糖生物学会（中国・蘇州）   | 2008 年 6 月 6 日～9 日    |
| 07156016 | 20 | 国内 | 日本糖鎖科学コンソーシアムデータベース（シンポジウム）                                  | 鹿内俊秀            | 日本糖質学会年会   | 2008/8/19             |
| 07156016 | 20 | 国内 | 糖鎖統合データベース講習・体験会(1)「GLYCOGENE DATABASE 入門」                   | 鹿内俊秀、新聞陽一       | 第 1 回 GLIT 勉強会（JBA）  | 2008/8/27             |
| 07156016 | 20 | 国内 | 糖鎖統合データベース講習・体験会(2)「LfDB とレクチンマイクロアレイ入門」                     | 平林淳、館野浩章        | 第 3 回 GLIT 勉強会（JBA）  | 2008/12/16            |
| 07156016 | 20 | 国内 | 糖鎖データベースの構築と統合   | 新聞陽一            | BMB2008(第 31 回日本分子生物学会年会・第 81 回日本生化学会大会合同大会)                                       | 2008/12/9             |
| 07156016 | 20 | 国内 | Integration of Glycoscience-related Database in Japan        | 鹿内俊秀            | Clinical and Translational Research on Cancer: Glycomics Applications (HGPI, HUP0) | 2009 年 3 月 24 日～27 日  |
| 07156016 | 20 | 国際 | Japan Consortium for Glycobiology & Glycotechnology Database | 木下聖子(依頼出張)、鹿内俊秀 | EuroCarbDB meeting(ユトレヒト大学)  | 2008 年 11 月 27 日～29 日 |

|          |    |    |                                  |      |                 |                 |
|----------|----|----|----------------------------------|------|-----------------|-----------------|
| 07156016 | 20 | 国内 | 「糖鎖データベース」と「糖鎖産業技術フォーラムの具体的取り組み」 | 新聞陽一 | GLIT(産業技術総合研究所) | 2008/1/23       |
| 07156016 | 20 | 国内 | 糖鎖データベースの構築と統合                   | 鹿内俊秀 | BioJapan2008    | 2008年10月15日～17日 |

雑誌等への論文投稿（該当なし）

特許の申請（該当なし）

#### 2.4 活動（運営委員会等の活動等）

完成した成果物をより多くの糖鎖分野の研究者へ広く知って頂くためにできるだけ多くの学会に参加し発表した。そして、完成した成果物の使い方を知って頂くため糖鎖産業フォーラムの勉強会で使い方とDBから得られる有益な情報の取得の仕方などについて説明した。国内だけではなく、中国やヨーロッパの研究者との交流を行い、日本の糖鎖統合データベースの普及に努めた。

#### 2.5 実施体制

別表1を参照のこと。

#### 2.6 整備実績一覧

別表2を参照のこと。

別表1 平成20年度に於ける実施体制

| 研究項目              | 担当機関等                    | 研究担当者  |
|-------------------|--------------------------|--------|
| 1. 運営と開発体制の準備     | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | ◎○成松 久 |
|                   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 新聞 陽一  |
|                   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 鹿内 俊秀  |
| 2. データ提供機関との交渉    | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | ○新聞 陽一 |
|                   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 成松 久   |
|                   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 鹿内 俊秀  |
| 3. 統合に向けたデータベース構築 | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | ○梶 裕之  |
|                   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | ○亀山 昭彦 |
|                   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 成松 久   |
|                   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 平林 淳   |
|                   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 新聞 陽一  |

|   |                          |       |
|---|--------------------------|-------|
|   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 舘野 浩章 |
|   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 梶谷内 晶 |
|   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 佐藤 隆  |
|   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 鹿内 俊秀 |
|   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 鈴木 芳典 |
|   | 産業技術総合研究所<br>糖鎖医工学研究センター | 藤田 典昭 |
| 平成19年度以降、業務推進のためにデータの統合に関するご意見とご協力頂いた方々 | 立命館大学<br>糖鎖工学研究センター      | 川崎 敏祐 |
|   | 名古屋市立大学<br>大学院薬学研究科      | 加藤 晃一 |
|   | 名古屋市立大学<br>大学院薬学研究科      | 山口 芳樹 |
|   | 国立医薬品食品衛生研究所             | 西島 正弘 |
|   | 東京大学大学院<br>医学系研究科        | 八杉 悦子 |
| 研究項目                                    | 担当機関等                    | 研究担当者 |



|   |                                |       |
|---|--------------------------------|-------|
| 平成20年度から、業務推進のためにデータの統合に関するご意見とご協力頂いた方々 | 名古屋大学<br>大学院医学系研究科             | 古川 鋼一 |
|   | 理化学研究所<br>フロンティア研究システム（オブザーバー） | 加藤 雅樹 |

注1. ◎：課題代表者、○：サブテーマ代表者

注2. 本業務に携わっている方は、全て記入。

別表2 整備実績一覧

DB名：GGDB

(1) 保有データ情報

(1-1) データの種類

|                  |  |
|------------------|--|
| ① 生物種            | ヒトの糖鎖関連遺伝子。ヒトの遺伝子に類似した他の生物種の遺伝子情報（ホモログ）。           |
| ②試料・ライブラリー等の種類、数 | ヒト試料、ヒト cDNA                                       |
| ③測定方法            | リコンビナント酵素の酵素活性測定                                   |
| ④データの内容          | リコンビナント糖転移酵素を用いて糖鎖構造を合成した時の結果。ドナー基質・アクセプター・プロダクト情報 |
| ⑤その他、特記事項        | 経産省・NEDO プロジェクト通称「GG project」と「SG Project」の成果物。    |

(1-2) データソース

|            |   |
|------------|---|
| ①現在のデータ量   | H. sapiens : 190 件 (実験データと論文のデータ)、M. musculus : 183 件 R. norvegicus : 172 件 C. elegans : 63 件 A. thaliana : 13 件 S. cerevisiae : 18 件 D. melanogaster : 74 件                                  |
| ②データ区分     | <input checked="" type="checkbox"/> 自前 <input type="checkbox"/> 第三者 <input checked="" type="checkbox"/> 文献データ <input type="checkbox"/> 計算結果等の二次データ<br><input type="checkbox"/> その他 (下欄に詳細を記述) |
| ③将来の増加の見込み | 新規の遺伝子が発見されるたびに追加   |
| ④権利関係      | 所有者 (産業技術総合研究所)<br>公開 ( <input checked="" type="checkbox"/> 可 <input type="checkbox"/> 否 <input type="checkbox"/> その他 [ ] )   |
| ⑤その他、特記事項  | <a href="http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/ggdb/">http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/ggdb/</a>   |

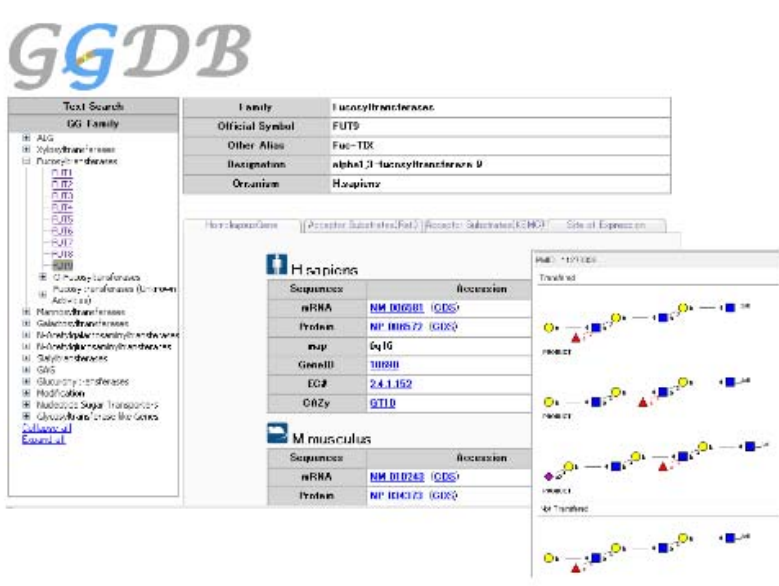
(1-3) データの管理状況

|                |                   |
|----------------|-------------------|
| ①更新頻度等の管理状況、体制 | 新規の遺伝子が発見されるたびに追加 |
| ②その他、特記事項      |                   |

※ 既にデータベースを保有している場合は、以下についても記述して下さい。

(1-4) データベース関係

|               |     |
|---------------|-----|
| ①DB 管理者数      | 4 名 |
| ②キュレータ・アナレータ数 | 5 名 |

|             |  |
|-------------|--|
| ③データ構造      | XML ファイル、RDB   |
| ④DB 管理ソフト   | Oracle 10g(10.2.0) 、XML データベース eXist   |
| ⑤サーバの OS    | Linux  |
| ⑥サーバ規模      | 不明   |
| ⑦DB へのアクセス数 | 月平均 11000 アクセス   |
| ⑧独立 IP 数    |  |
| ⑨その他、特記事項   |  <p>ヒトの遺伝子を中心に活性をまとめた。<br/>個々の遺伝子の活性が簡単に分かるように Viewer を開発し整備した。</p> |

(2) データ (又はDB) の連結、統合化整備 (※試験的、限定的公開済みのものも含む。)

|    |                               |          |  |
|----|-------------------------------|----------|--|
| 通番 | データ (又はDB) の名称<br>※URL があれば記述 | 公開 / 未公開 | 概要 (データの種類 (生物種) ・数量 (kB 等)、本プロジェクトで実施した特徴点、進捗状況、今後の計画・課題などを簡潔にわかりやすく記述)<br>※ 公開している場合は、開始年月、利用状況 (平均利用者数、アクセス数、ダウンロード数等の数値的指標で記述)<br>※ 必要に応じて画面コピー等の図表添付可 |
| 1  | http://riodb.ibase.ai         | 公開       | 平成 19 年度に作成し、セキュリティーチェ   |

|   |  |    |                                      |
|---|--|----|--------------------------------------|
|   | st. go. jp/rcmg/ggdb/  |    | ックなどを行い平成20年に公開した。月平均 11000 アクセスがある。 |
| 2 | キーワードによる横断検索<br>http://jcgddb.jp/search/search.cgi?method=3&keyword=&lang=jp | 公開 | 公開日：平成20年8月20日<br>8月～3月末日：約1万5千アクセス  |

(3) DB基盤システム、ツール等開発成果物の整備（※試験的、限定的公開済みのものも含む。）（該当なし）

(4) その他の成果物（(2)、(3)に該当しないもの）（該当なし）

DB名：LfDB

(1) 保有データ情報

※ 貴機関グループ内で保有するデータに関して、以下の内容を記述して下さい。

(1-1) データの種類

|                  |  |
|------------------|--|
| ①生物種             | ヒト～植物まで  |
| ②試料・ライブラリー等の種類、数 | 糖鎖とレクチンの相互作用情報：主に結合活性が安定した植物レクチン   |
| ③測定方法            | レクチンフロンティアデータベース(LfDB)は、蛍光検出を用いた自動化フロンタルアフィニティークロマトグラフィーシステム(FAC-FD)を用いて取得した各種レクチンとピリジルアミノ化糖鎖間の結合定数を含む定量的相互作用データを格納しています。本方法で取得した相互作用データの精度、信頼性は非常に高いことから、LfDBは今後、広く生物学研究において貴重な情報源になると考えられます。 |
| ④データの内容          | レクチンの詳細情報（遺伝子・配列・ファミリー分類・立体構造）、糖鎖とレクチンの相互作用情報  |
| ⑤その他、特記事項        |  |

(1-2) データソース

|           |   |
|-----------|---|
| R- 在のデータ量 | R-type Lectin 18件、Annexin 12件、RicinB 1件、Siglec 11件、Legume 17件、Jacalin-related Lectin16件、Legume Lectin 19件、Chitin-binding 4件、Monocot 1件、Man6Pi-binding Lectin 3件、Fucose-binding Lectin 3件、Galectin 26件、Chitin-binding Lectin 5件、Monocot Mannose-binding Lectin 14件、C-type Lectin 38件、Jacaline-related Lectin 1件、Others 28件 |
|-----------|---|

|            |  |
|------------|--|
|            | 相互作用の件数 86 件   |
| ②データ区分     | <input checked="" type="checkbox"/> 自前 <input checked="" type="checkbox"/> 第三者 <input checked="" type="checkbox"/> 文献データ <input type="checkbox"/> 計算結果等の二次データ<br><input type="checkbox"/> その他（下欄に詳細を記述） ※複数選択可。二次データのみの保有は不可。        |
| ③将来の増加の見込み | 論文リリース後に公開する。  |
| ④権利関係      | 所有者（産業技術総合研究所・レクチン提供機関）<br>公開（ <input checked="" type="checkbox"/> 可 <input type="checkbox"/> 否 <input type="checkbox"/> その他 [ ]）<br>※既に公開している場合は URL を「⑤その他、特記事項」に記述<br>※権利関係が未解決で、プロジェクト期間内に解決の見込みがある場合は、解決のための手立て等を「⑤その他、特記事項」に詳述 |
| ⑤その他、特記事項  | http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/LectinSearch  |

(1-3) データの管理状況

|                |          |
|----------------|----------|
| ①更新頻度等の管理状況、体制 | 3ヶ月に1度更新 |
| ②その他、特記事項      |          |

※ 既にデータベースを保有している場合は、以下についても記述して下さい。

(1-4) データベース関係

|               |  |
|---------------|--|
| ①DB 管理者数      | 4名   |
| ②キュレータ・アナレータ数 | 3名   |
| ③データ構造        | XML ファイル、RDB                                   |
| ④DB 管理ソフト     | Oracle 10g(10.2.0) 、XML データベース eXist           |
| ⑤サーバの OS      | Linux  |
| ⑥サーバ規模        | 1台   |
| ⑦DB へのアクセス数   | 月平均 1694 アクセス                                  |
| ⑧独立 IP 数      | 1つ   |
| ⑨その他、特記事項     | ※DB への検索メニュー（画面コピーの別紙添付でも可）、使用しているオントロジーがあれば記述 |

(2) データ（又はDB）の連結、統合化整備（※試験的、限定的公開済みのものも含む。）

|    |                             |          |   |
|----|-----------------------------|----------|---|
| 通番 | データ（又はDB）の名称<br>※URL があれば記述 | 公開 / 未公開 | 概要（データの種類（生物種）・数量（kB 等）、本プロジェクトで実施した特徴点、進捗状況、今後の計画・課題などを簡潔にわかりやすく記述）<br>※ 公開している場合は、開始年月、利用状況 |
|----|-----------------------------|----------|---|

|  |   |    |  |
|--|---|----|--|
|  |   |    | (平均利用者数、アクセス数、ダウンロード数等の数値的指標で記述)<br>※ 必要に応じて画面コピー等の図表添付可 |
|  | キーワードによる横断検索<br>http://jcgddb.jp/search/search.cgi?method=3&keyword=&lang=jp        | 公開 | 公開日：平成20年8月20日<br>8月～3月末日：約1万5千アクセス                      |
|  | Lectin Frontier Database<br>http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/LectinSearch | 公開 | 公開日：平成20年8月20日<br>月平均1694アクセス                            |
|  |   |    |  |

(3) DB基盤システム、ツール等開発成果物の整備 (※試験的、限定的公開済みのものも含む。) (該当なし)

(4) その他の成果物 ((2)、(3)に該当しないもの) (該当なし)

DB名：GMDB

(1) 保有データ情報

※ 貴機関グループ内で保有するデータに関して、以下の内容を記述して下さい。

(1-1) データの種類

|                  |  |
|------------------|--|
| ①生物種             | ヒト (ヒトと共通する糖鎖構造を持った生物種)  |
| ②試料・ライブラリー等の種類、数 | ヒト型標準糖鎖  |
| ③測定方法            | MS <sup>n</sup> スペクトル測定の手順<br>この説明は、MALDI-QIT-TOF 型質量分析計 (AXIMA-QIT; 島津製作所) の使用を前提としています。GMDB 内のスペクトルイメージを利用して糖鎖構造を推定する場合には、下記にある CID スペクトル取得手順に沿って MS <sup>n</sup> スペクトルを測定してください。<br><br>装置：MALDI-QIT-TOF MS (マトリクス支援レーザー脱離イオン化) |

|           |   |
|-----------|---|
|           | <p>四重極イオントラップ飛行時間型質量分析計)<br/>CID スペクトル測定手順:</p> <p>1. ターゲットプレートにサンプル水溶液の 0.5L<math>\mu</math>を乗せ、乾固します。乾いたサンプルにマトリクス水溶液 0.5L (10<math>\mu</math> mg/mL of 2,5-dihydroxybenzoic acid in 30% ethanol)を乗せ、再度、乾固してください。最後に、99.5%エタノールの 0.15L<math>\mu</math>を、ターゲットプレートのマトリクス検体混晶に添加して再結晶化させます。</p> <p>2. MS スペクトルを正イオンモードで測定します。</p> <p>3. 次に、糖鎖の[M + Na]<sup>+</sup>イオンを前駆イオンとして MS<sup>2</sup>スペクトルを測定します。この際、前駆イオンのシグナルがほとんど消失する程度に CID エネルギーを調整してください。前駆イオンが完全に無くなるか、もしくは最大ピークの 15%以上の強度で前駆イオンが残る場合には、そのスペクトルを廃棄し、再度、測定してください。また、測定にあたっては、レーザショットパターンに従って自動的にレーザ照射位置を変える自動取得機能を使用してください。</p> <p>4. MS<sup>3</sup>スペクトルの測定についても、上の説明と同様に CID エネルギーを調整してスペクトルを取得します。</p> |
| ④データの内容   | ※記録しているデータ項目（例えば、試料番号、遺伝子名、発現データ（画像）等）  |
| ⑤その他、特記事項 | 経産省・NEDO プロジェクトの成果物   |

(1-2) データソース

|            |   |
|------------|---|
| ① 在のデータ量   | 構造数 176 件 スペクトルの枚数 1013   |
| ②データ区分     | <input checked="" type="checkbox"/> 自前 <input type="checkbox"/> 第三者 <input type="checkbox"/> 文献データ <input type="checkbox"/> 計算結果等の二次データ<br><input type="checkbox"/> その他（下欄に詳細を記述） ※複数選択可。二次データのみの保有は不可。 |
| ③将来の増加の見込み | 増える可能性はあるが、具体的な数は言えない。  |
| ④権利関係      | 所有者（産業技術総合研究所）<br>公開（ <input checked="" type="checkbox"/> 可 <input type="checkbox"/> 否 <input type="checkbox"/> その他 [                    ] )  |
| ⑤その他、特記事項  | <a href="http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Ms_ResultSearch">http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Ms_ResultSearch</a>   |

(1-3) データの管理状況

|                |                 |
|----------------|-----------------|
| ①更新頻度等の管理状況、体制 | 論文がリリースされた後で公表。 |
| ②その他、特記事項      |                 |

※ 既にデータベースを保有している場合は、以下についても記述して下さい。

(1-4) データベース関係

|               |  |
|---------------|--|
| ①DB 管理者数      | 4 名  |
| ②キュレータ・アナテータ数 | 3 名  |
| ③データ構造        |  |
| ④DB 管理ソフト     | XMLDB, Oracle                                  |
| ⑤サーバの OS      | Linux  |
| ⑥サーバ規模        | 1 台  |
| ⑦DB へのアクセス数   | 月平均 931 アクセス                                   |
| ⑧独立 IP 数      |  |
| ⑨その他、特記事項     | ※DB への検索メニュー（画面コピーの別紙添付でも可）、使用しているオントロジーがあれば記述 |

(2) データ（又はDB）の連結、統合化整備（※試験的、限定的公開済みのものも含む。）

| 通番 | データ（又はDB）の名称<br>※URL があれば記述  | 公開 / 未公開 | 概要（データの種類（生物種）・数量（kB 等）、本プロジェクトで実施した特徴点、進捗状況、今後の計画・課題などを簡潔にわかりやすく記述）<br>※ 公開している場合は、開始年月、利用状況（平均利用者数、アクセス数、ダウンロード数等の数値的指標で記述）<br>※ 必要に応じて画面コピー等の図表添付可 |
|----|--|----------|---|
|    | G M D B (Glycan Mass Spectral Database)<br><a href="http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Ms_ResultSearch">http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Ms_ResultSearch</a> | 公開       | 公開日：平成20年12月2日<br>月平均 931 アクセス  |
|    | 構造による横断検索<br><a href="http://jcgdb.jp/idb">http://jcgdb.jp/idb</a>   | 未公開      | 糖鎖構造による横断検索から検索できるようにした。<br>平成21年5月に公開予定。   |

(3) DB 基盤システム、ツール等開発成果物の整備（※試験的、限定的公開済みのものも含む。）（該当なし）

(4) その他の成果物（(2)、(3)に該当しないもの）（該当なし）



DB名 : GlycoProtDB

(1) 保有データ情報

※ 貴機関グループ内で保有するデータに関して、以下の内容を記述して下さい。

(1-1) データの種類

|                  |   |
|------------------|---|
| ①生物種             | 線虫  |
| ②試料・ライブラリー等の種類、数 | 線虫 (Strain N2)  |
| ③測定方法            | <p>N 結合型糖タンパク質の同定とその糖鎖修飾位置の決定は、液体クロマトグラフィー (LC) と質量分析法 (MS) を連結した LC/MS 法を基礎としたプロテオーム解析技術を用いて行った。簡潔には、</p> <p>(1) 生体材料を 6M の塩酸グアニジンを含む緩衝液中で均質化 (溶解) する。</p> <p>(2) タンパク質のジスルフィド結合を還元し、アルキル化した後に、トリプシンなどのプロテアーゼで分解し、ペプチド混合物を調製する。</p> <p>(3) 得られたペプチド混合物を固定化レクチンカラムに通し、レクチンの特異性によって共通の糖鎖モチーフ (例えばハイマンノース型糖鎖) をもつ一群の糖ペプチドを捕集する。</p> <p>(4) 精製した糖ペプチドを安定同位体標識された水 (<math>H_2^{18}O</math>) の中で、N-グリコナーゼ処理し、糖鎖を切除すると同時に、その糖鎖修飾位置を <math>^{18}O</math> で標識する (この酵素で糖鎖を切除すると、糖鎖が結合していたアスパラギン残基はアスパラギン酸に変換され、このとき溶媒より <math>^{18}O</math> が取り込まれる)。</p> <p>(5) 標識された (酵素処理前は糖鎖修飾されていた) ペプチドを LC/MS ショットガン法で分析する。</p> <p>(6) MS/MS スペクトル情報を基に、検索エンジンソフトウェアを用いて公共の配列データベースを検索し (MS/MS-イオンサーチ法)、ペプチドがどのタンパク質に由来したかを同定する。</p> <p>我々はこの手法を糖鎖付加位置特異的安定同位体標識法 (Isotope-coded Glycosylation site-specific Tagging: IGOT 法) と名付けた。この一連の分析法では、一度の実験で数百のペプチドが同定できる。</p> |
| ④データの内容          | N 結合型糖鎖の修飾位置のデータベース   |
| ⑤その他、特記事項        |   |

(1-2) データソース

|          |   |
|----------|---|
| ① 在のデータ量 | 付加位置の数 1031 件 遺伝子シンボル数 761 件  |
| ②データ区分   | <p>■自前 ■第三者 □文献データ □計算結果等の二次データ</p> <p>□その他 (下欄に詳細を記述) ※複数選択可。二次データのみ<br/>の保有は不可。</p> |

|            |   |
|------------|---|
| ③将来の増加の見込み | マウスやヒトの組織・患者の組織毎のデータを公開する予定   |
| ④権利関係      | 所有者（産業技術総合研究所・首都大学）<br>公開（ <input checked="" type="checkbox"/> 可 <input type="checkbox"/> 否 <input type="checkbox"/> その他 [ ] )        |
| ⑤その他、特記事項  | <a href="http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Glc_ResultSearch">http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Glc_ResultSearch</a> |

(1-3) データの管理状況

|                |                |
|----------------|----------------|
| ①更新頻度等の管理状況、体制 | 論文発表後新しい情報を公開。 |
| ②その他、特記事項      |                |

※ 既にデータベースを保有している場合は、以下についても記述して下さい。

(1-4) データベース関係

|               |  |
|---------------|--|
| ①DB 管理者数      | 4 名  |
| ②キュレータ・アナレータ数 | 2 名  |
| ③データ構造        |  |
| ④DB 管理ソフト     | Oracle   |
| ⑤サーバの OS      | Sun  |
| ⑥サーバ規模        | 1 台  |
| ⑦DB へのアクセス数   |  |
| ⑧独立 IP 数      |  |
| ⑨その他、特記事項     | ※DB への検索メニュー（画面コピーの別紙添付でも可）、<br>使用しているオントロジーがあれば記述 |

(2) データ（又はDB）の連結、統合化整備（※試験的、限定的公開済みのものも含む。）

| 通番 | データ（又はDB）の名称<br>※URL があれば記述   | 公開 / 未公開 | 概要（データの種類（生物種）・数量（kB 等）、本プロジェクトで実施した特徴点、進捗状況、今後の計画・課題などを簡潔にわかりやすく記述）<br>※ 公開している場合は、開始年月、利用状況（平均利用者数、アクセス数、ダウンロード数等の数値的指標で記述）<br>※ 必要に応じて画面コピー等の図表添付可 |
|----|---|----------|---|
| 1  | キーワードによる横断検索<br><a href="http://jcgddb.jp/search/search.cgi?met">http://jcgddb.jp/search/search.cgi?met</a> | 公開       | 公開日：平成20年8月20日<br>8月～3月末日：約1万5千アクセス   |

|   |  |    |                              |
|---|--|----|------------------------------|
|   | hod=3&keyword=&lang=jp   |    |                              |
| 2 | GlycoProtDB(糖タンパク質データベース)<br>http://riodb.ibase.aist.go.jp/rcmg/glycodb/Glc_ResultSearch | 公開 | 公開日：平成20年8月20日<br>月平均812アクセス |

(3) DB基盤システム、ツール等開発成果物の整備（※試験的、限定的公開済みのものも含む。）（該当なし）

(4) その他の成果物（(2)、(3)に該当しないもの）（該当なし）

DB名：GlycoEpitope

(1) 保有データ情報

※ 貴機関グループ内で保有するデータに関して、以下の内容を記述して下さい。

(1-1) データの種類

|                  |  |
|------------------|--|
| ①生物種             | 糖鎖に関するエピトープ構造を持っている生物種（ヒト・ヒツジ・ウシ・ネズミ～ハエ～酵母～植物など）   |
| ②試料・ライブラリー等の種類、数 | 抗糖鎖抗体に関する論文  |
| ③測定方法            | 論文から抽出   |
| ④データの内容          | 抗体が反応する糖鎖構造（GlycoEpitope）、抗体名、抗体の由来生物種、キャリア情報（タンパク質・脂質など）、エピトープのレセプター情報、生物種、発現器官・組織、糖鎖の機能についての情報 |
| ⑤その他、特記事項        |  |

(1-2) データソース

|          |   |
|----------|---|
| ①現在のデータ量 | エピトープ数：141構造<br>上記エピトープに反応する抗体数：380個  |
| ②データ区分   | <input type="checkbox"/> 自前 <input checked="" type="checkbox"/> 第三者 <input checked="" type="checkbox"/> 文献データ <input type="checkbox"/> 計算結果等の二次データ<br><input type="checkbox"/> その他（下欄に詳細を記述） ※複数選択可。二次データのみ |

|            |  |
|------------|--|
|            | の保有は不可。  |
| ③将来の増加の見込み | 新規抗体 100-150 件程度、エピトープ 20-30 件程度   |
| ④権利関係      | 所有者（立命館大学・川崎敏祐）<br>公開（ <input checked="" type="checkbox"/> 可 <input type="checkbox"/> 否 <input type="checkbox"/> その他 [ ]）<br>※既に公開している場合は URL を「⑤その他、特記事項」に記述<br>※権利関係が未解決で、プロジェクト期間内に解決の見込みがある場合は、解決のための手立て等を「⑤その他、特記事項」に詳述 |
| ⑤その他、特記事項  |  |

(1-3) データの管理状況

|                |               |
|----------------|---------------|
| ①更新頻度等の管理状況、体制 | 半年に 1 回程度情報更新 |
| ②その他、特記事項      |               |

※ 既にデータベースを保有している場合は、以下についても記述して下さい。

(1-4) データベース関係

|               |  |
|---------------|--|
| ①DB 管理者数      | 4 人  |
| ②キュレータ・アナレータ数 | 8 人  |
| ③データ構造        | RDBMS  |
| ④DB 管理ソフト     | PostgreSQL-8.2.3                               |
| ⑤サーバの OS      | Linux (Red Hat Enterprise Linux AS release 3)  |
| ⑥サーバ規模        | NEC Express 5800 (1 台)、SGI Altix 450 (1 台)     |
| ⑦DB へのアクセス数   | 47775 (H19) 39063(H20)                         |
| ⑧独立 IP 数      | 不明   |
| ⑨その他、特記事項     | ※DB への検索メニュー（画面コピーの別紙添付でも可）、使用しているオントロジーがあれば記述 |

(2) データ（又は DB）の連結、統合化整備（※試験的、限定的公開済みのものも含む。）

|    |                              |          |   |
|----|------------------------------|----------|---|
| 通番 | データ（又は DB）の名称<br>※URL があれば記述 | 公開 / 未公開 | 概要（データの種類（生物種）・数量（kB 等）、本プロジェクトで実施した特徴点、進捗状況、今後の計画・課題などを簡潔にわかりやすく記述）<br>※ 公開している場合は、開始年月、利用状況（平均利用者数、アクセス数、ダウンロード |
|----|------------------------------|----------|---|

|   |   |    |                                       |
|---|---|----|---------------------------------------|
|   |   |    | ド数等の数値的指標で記述)<br>※ 必要に応じて画面コピー等の図表添付可 |
| 1 | キーワードによる横断検索<br><a href="http://jcgddb.jp/search/search.cgi?method=3&amp;keyword=&amp;lang=jp">http://jcgddb.jp/search/search.cgi?method=3&amp;keyword=&amp;lang=jp</a> | 公開 | 公開日：平成20年8月20日<br>8月～3月末日：約1万5千アクセス   |

(3) DB基盤システム、ツール等開発成果物の整備（※試験的、限定的公開済みのものも含む。）（該当なし）

(4) その他の成果物（(2)、(3)に該当しないもの）（該当なし）

DB名：LipidBank

(1) 保有データ情報

(1-1) データの種類

|                  |   |
|------------------|---|
| ①生物種             | 生物種問わず論文報告のある脂質構造をデータベース化   |
| ②試料・ライブラリー等の種類、数 | 中でも、糖脂質に関するデータが Glycolipid (696)。内訳として Glycosphingolipid (581)、Glycoglycerolipid and others (115) の構造情報とそれらが記載された論文を明記している。 |
| ③測定方法            | 文献  |
| ④データの内容          | lipid 名 (common name, IUPAC), spectral information (mass, UV, IR, NMR, その他)、literature information                          |
| ⑤その他、特記事項        |   |

(1-2) データソース

|            |  |
|------------|--|
| ① 現在のデータ量  | 構造数 461 件  |
| ②データ区分     | <input type="checkbox"/> 自前 <input checked="" type="checkbox"/> 第三者 <input checked="" type="checkbox"/> 文献データ <input type="checkbox"/> 計算結果等の二次データ<br><input type="checkbox"/> その他（下欄に詳細を記述） ※複数選択可。二次データのみ<br>の保有は不可。 |
| ③将来の増加の見込み | なし   |
| ④権利関係      | 所有者 (Japanese Conference on the Biochemistry of Lipids (JCBL))<br>公開 ( <input checked="" type="checkbox"/> 可 <input type="checkbox"/> 否 <input type="checkbox"/> その他 [                      ] )                        |
| ⑤その他、特記事項  | クロスリンクレベルで統合することを条件にプロジェクトへの協力が得られた。<br><a href="http://lipidbank.jp/">http://lipidbank.jp/</a>  |

(1-3) データの管理状況

|             |    |
|-------------|----|
| ①更新頻度等の管理状況 | なし |
|-------------|----|

|           |                     |
|-----------|---------------------|
| 況、体制      |                     |
| ②その他、特記事項 | Version2 ができる可能性あり。 |

※ 既にデータベースを保有している場合は、以下についても記述して下さい。

(1-4) データベース関係

|               |  |
|---------------|--|
| ①DB 管理者数      | 1 名  |
| ②キュレータ・アナテータ数 | 1 名  |
| ③データ構造        | RDBMS  |
| ④DB 管理ソフト     | Oracle Ver. 8. 0. 3                            |
| ⑤サーバの OS      | Solaris Ver. 2. 6                              |
| ⑥サーバ規模        | Sun Enterprise 450                             |
| ⑦DB へのアクセス数   | 不明   |
| ⑧独立 IP 数      |  |
| ⑨その他、特記事項     | ※DB への検索メニュー（画面コピーの別紙添付でも可）、使用しているオントロジーがあれば記述 |

(2) データ（又はDB）の連結、統合化整備（※試験的、限定的公開済みのものも含む。）

| 通番 | データ（又はDB）の名称<br>※URL があれば記述  | 公開 / 未公開 | 概要（データの種類（生物種）・数量（kB 等）、本プロジェクトで実施した特徴点、進捗状況、今後の計画・課題などを簡潔にわかりやすく記述）<br>※ 公開している場合は、開始年月、利用状況（平均利用者数、アクセス数、ダウンロード数等の数値的指標で記述）<br>※ 必要に応じて画面コピー等の図表添付可 |
|----|--|----------|---|
| 1  | 構造による横断検索<br><a href="http://jcgddb.jp/idb">http://jcgddb.jp/idb</a> | 未公開      | 糖鎖構造による横断検索から検索できるようにした。<br>平成 21 年 5 月に公開予定。   |

(3) DB 基盤システム、ツール等開発成果物の整備（※試験的、限定的公開済みのものも含む。）（該当なし）

(4) その他の成果物（(2)、(3)に該当しないもの）（該当なし）

DB 名 : MDHPLCDB

(1) 保有データ情報

(1-1) データの種類

|                  |   |
|------------------|---|
| ①生物種             |   |
| ②試料・ライブラリー等の種類、数 | 様々な生物種由来のサンプルから抽出されたN結合型糖鎖  |
| ③測定方法            | 糖鎖を酵素的に蛋白質から切り離し、糖鎖の還元末端を 2-アミノピリジンで蛍光ラベルする。この PA 糖鎖を、3 種類の分離モードの HPLC カラムを用いて連続的に分離すると同時に、その溶出位置から構造を推定するという仕組み。 |
| ④データの内容          | グリコシダーゼ消化後の ODS カラムとアミドカラムの溶出位置をデータベース化   |
| ⑤その他、特記事項        |   |

(1-2) データソース

|            |   |
|------------|---|
| ① 現在のデータ量  | 構造数 564 件   |
| ②データ区分     | <input type="checkbox"/> 自前 <input checked="" type="checkbox"/> 第三者 <input type="checkbox"/> 文献データ <input type="checkbox"/> 計算結果等の二次データ<br><input type="checkbox"/> その他（下欄に詳細を記述） |
| ③将来の増加の見込み | なし  |
| ④権利関係      | 所有者（名古屋市立大学・加藤晃一・高橋禮子）<br>公開（ <input checked="" type="checkbox"/> 可 <input type="checkbox"/> 否 <input type="checkbox"/> その他 [ ]）  |
| ⑤その他、特記事項  | <a href="http://www.glycoanalysis.info/galaxy2/index.jsp">http://www.glycoanalysis.info/galaxy2/index.jsp</a>   |

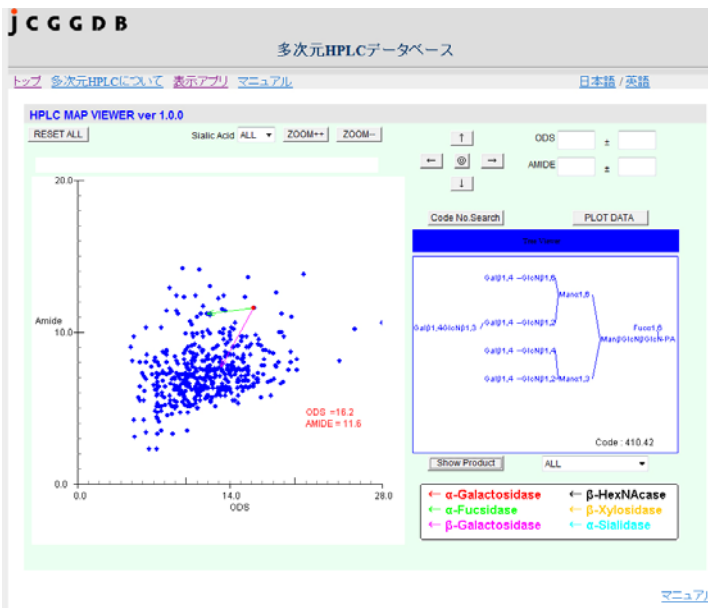
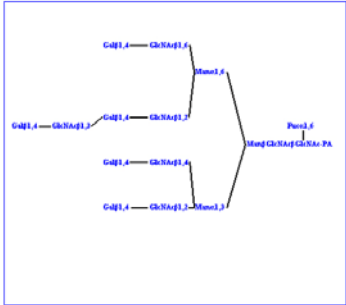
(1-3) データの管理状況

|                |          |
|----------------|----------|
| ①更新頻度等の管理状況、体制 | 毎月メンテナンス |
| ②その他、特記事項      |          |

※ 既にデータベースを保有している場合は、以下についても記述して下さい。

(1-4) データベース関係

|               |              |
|---------------|--------------|
| ①DB 管理者数      | 1 名          |
| ②キュレータ・アナレータ数 | 2 名          |
| ③データ構造        | RDBMS, XMLDB |
| ④DB 管理ソフト     | MySQL        |

| ⑤サーバのOS          | Linux サーバ   |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |
|------------------|---|----|--|----------|--------|-------------|--|----------|--------------------------------------|------------------|---|-----|------|-------|------|
| ⑥サーバ規模           | 1 台   |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |
| ⑦DB へのアクセス数      | 不明  |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |
| ⑧独立 IP 数         |   |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |
| ⑨その他、特記事項        | <p data-bbox="639 423 863 454">下記、画面コピー</p>  <p data-bbox="639 1115 1361 1294">をクリックし赤点になったら構造の情報が表示される。構造の下にあるプルダウンメニューから「All」を選択し「show product」ボタンを押すと消化酵素反応後の構造を2種類のカラムで溶出した場合の実験値への移動を矢印で表示される。</p> <table border="1" data-bbox="655 1330 1193 1861"> <thead> <tr> <th colspan="2">詳細</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Code No.</td> <td>410.42</td> </tr> <tr> <td>Data access</td> <td><a href="#">to Viewer</a> <a href="#">to XML</a> <a href="#">to TEXT</a></td> </tr> <tr> <td>Unit No.</td> <td>1-2-4-7-9-12-13-14-17-21-24-28-39-53</td> </tr> <tr> <td>Structure Linear</td> <td>-</td> </tr> </tbody> </table>  <table border="1" data-bbox="655 1809 1193 1861"> <tbody> <tr> <td>ods</td> <td>16.2</td> </tr> <tr> <td>amide</td> <td>11.6</td> </tr> </tbody> </table> <p data-bbox="1225 1339 1361 1630">点をダブルクリックすると次のページにある画像・詳細画面が開く。</p> <p data-bbox="1225 1675 1361 1888">詳細画面とそれらのデータをダウンロードできる。</p> | 詳細 |  | Code No. | 410.42 | Data access | <a href="#">to Viewer</a> <a href="#">to XML</a> <a href="#">to TEXT</a> | Unit No. | 1-2-4-7-9-12-13-14-17-21-24-28-39-53 | Structure Linear | - | ods | 16.2 | amide | 11.6 |
| 詳細               |   |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |
| Code No.         | 410.42  |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |
| Data access      | <a href="#">to Viewer</a> <a href="#">to XML</a> <a href="#">to TEXT</a>  |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |
| Unit No.         | 1-2-4-7-9-12-13-14-17-21-24-28-39-53  |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |
| Structure Linear | -   |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |
| ods              | 16.2  |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |
| amide            | 11.6  |    |  |          |        |             |  |          |                                      |                  |   |     |      |       |      |



(2) データ (又はDB) の連結、統合化整備 (※試験的、限定的公開済みのものも含む。)

| 通番 | データ (又はDB) の名称<br>※URL があれば記述   | 公開/非公開 | 概要 (データの種類 (生物種) ・数量 (kB 等)、本プロジェクトで実施した特徴点、進捗状況、今後の計画・課題などを簡潔にわかりやすく記述)<br>※ 公開している場合は、開始年月、利用状況 (平均利用者数、アクセス数、ダウンロード数等の数値的指標で記述)<br>※ 必要に応じて画面コピー等の図表添付可 |
|----|---|--------|--|
| 1  | <a href="http://jcgddb.jp/idb">http://jcgddb.jp/idb</a>                       |        | 構造による横断検索から複数のDBを検索できるようになった。そのDBの中に下記のDBを検索できるようにした。  |
| 2  | <a href="http://hplc.glycoanalysis.info/">http://hplc.glycoanalysis.info/</a> | 公開     | 統合DB用にカスタマイズ   |

(3) DB基盤システム、ツール等開発成果物の整備 (※試験的、限定的公開済みのものも含む。) (該当なし)

(4) その他の成果物 ((2)、(3)に該当しないもの) (該当なし)