

# BH16.12 グライコーム

[課題出し](#)

[2016/12/13](#)

## 課題出し

- グライコーム (tokyo: 青木、新野、木下) 山田12/13より会場入り
  - GlyTouCan
    - キュレーションシステムの開発
    - Partnersスタンザ→Portal開発
  - WURCS
    - マニュアル
    - 論文
    - Validator
  - プロテオームとのリンク:
    - 糖タンパク質の質量分析リポジトリ(jPOSTと相談)
    - GlycoProtDB: 糖タンパク質・糖鎖修飾部位
    - GlycoEpitope
  - ゲノムとのリンク:
    - GGDB: ヒトと線虫の糖鎖遺伝子データのゲノム情報
    - FlyGlycoDB: ショウジョウバエの糖鎖関連遺伝子のゲノム情報
    - その他生物の糖鎖関連遺伝子のオーソログ情報の収集
  - システム解析(ソフトウェアツール開発):
    - 糖鎖関連遺伝子から予測できる理論的糖鎖構造
    - 糖鎖関連遺伝子のシミュレーション解析(発現情報とのリンク)
  - 複合糖質のデータベース
    - GlyTouCan <-> PDB
    - 糖脂質のRDF化

## 2016/12/13

- オミックス連携のためのRDFデータ提供依頼メール(鹿内さん、木下さん、鈴木さん宛)
  - 産総研: GlycoProtDB、GGDB、LfDB
  - 創価大: FlyGlycoDB
- 情報収集
  - Uniprot-PDB
    - SIFTSのRDFは残基毎のデータではなくRange?で表しているため、アミノ酸残基の場合少し計算する必要がある。(金城さんより)
    - UniProtからPDBへのリンクに間違いがある(川島さんより)
- jPOSTとの打合せ調整
  - 12/15 14:00~(吉沢さん、守屋さん、河野さん、奥田さん、木下さん、山田)
- プロテオーム連携のための準備
  - GlycoProtDB ~線虫、マウス、ヒト

- <http://acgg.asia/gpdb2/info>
- LC/MSショットガン分析を基礎としたプロテオーム解析
  - 糖鎖修飾されたタンパク質とその修飾位置情報、遺伝子名、遺伝子番号(記号ID)、タンパク質名、部分アミノ酸配列など
- [sample entry](#)
- GlycoEpitope
  - <http://www.glycoepitope.jp/>
  -
- ゲノム連携のための準備
  - Flyglycodb ショウジョウバエの糖鎖関連遺伝子
    - 135遺伝子のリンクデータがある。
    - エンドポイント(木下さんより) <http://ts.fly.glycoinfo.org/sparql>
      - [sample sparql query](#)
  - <http://www.flyglycodb.org/CG10000/gene> <-> <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/gene/?term=43394>
    - <http://fly.glycoinfo.org> or <http://flyglycodb.t.soka.ac.jp/index.html>
    - Ontology
      - <https://bioportal.bioontology.org/ontologies/FLYGLYCODB>
  - GGDB 糖鎖関連遺伝子データベース
    - Site <http://acgg.asia/ggdb2/>
    - 遺伝子名(遺伝子記号)、酵素名、DNA配列、組織分布(遺伝子発現)、基質特異性、相同遺伝子、EC番号、および様々なデータベースへの外部のリンク
  - マイクロビオームとプラントゲノムと、、、

2016/12/14

- メタボロームとの連携(櫻井さん)
  - 代謝物の分子の中に含まれている糖をWURCSを用いて調べる
    - mol to WURCS ソフトを利用
    - WURCS to m/z ソフト つくる。公開→利用して頂く
- いろんなWURCSのデータを利用してもらうため(櫻井さんと)
  - WURCS-RDF(version2.0?)も作って、DB化 NBDC RDF portalに入れてもらう
    - WURCS-RDFにグリコシド結合のタイプも入れられるように！
- 金さんと奥田さん、鹿内さんが作っている自動アノテーションシステム
  - GlyTouCanのキュレーションシステムに導入できるかも
  - pubannotation, PubDictionaries, LODQAについて教えて頂いた(金さん)
    - 実際に登録して利用してみることにした！
- RDF Validator
  - shx (山口さんより)
  -

2016/12/15

- ページングとクリックでリンク先を変えるStanzaを教えてくださいました(榎屋さん)
  - [./git/stanza/example201612011830/index.html](http://.git/stanza/example201612011830/index.html)
  - Safariで動作確認
- 櫻井さんにCDKでの分子構造の正規化について聞いてみる
- jPOST 14:00~(吉沢さん、守屋さん、河野さん、奥田さん、木下さん、山田)
  - 糖タンパク質のMSデータのリポジトリとして利用できるか？

- mzTab sample for glyco: 糖鎖だけの情報について  
[https://docs.google.com/spreadsheets/d/14Mo1kHwKnxY-vRnCcqMTVDwTxhA\\_M3h6cl4Htrln014/edit#gid=1593967835](https://docs.google.com/spreadsheets/d/14Mo1kHwKnxY-vRnCcqMTVDwTxhA_M3h6cl4Htrln014/edit#gid=1593967835)
- 糖が入ってる場合GLH, GLYを考慮するように改良
  - GLH identifier encoding
  - GLY glytoucan id wucrs
- GlycoProtDB <-> Uniprot (予定)
- GlycoProtDB <-> jPOST-DB(計画)
- GlyTouCan <-> jPOST-DB(計画)
- jPOST-DBのRDFをに糖鎖のトリプルも入れることはできそう
- 糖タンパク質のmzTabを確定(MIRAGEで)させれば、具体的に動けるようになる。
- Complete Submissionできるば、jPOSTとGlyTouCan両方にメリットが有る。
- Glycoprometome用のチェックボックスをチェックすると糖タンパク質用にも可能(奥田さん)
- Glycoprometome用のメタデータリストを作成する。
  - [MIRAGE MS guidelines PDF](#)
  - 糖鎖情報のデータはすでにあるので、後は位置情報を追加すれば良さそう
- PRIDE Archive
  - <https://www.ebi.ac.uk/pride/archive/projects/PXD003196>
  - <http://www.ebi.ac.uk/pride/archive/projects/PXD004289>
  -
- <http://www.proteomexchange.org>
  - <http://proteomecentral.proteomexchange.org/cgi/GetDataset?ID=PXD004289>
- MassIVE
  - [https://massive.ucsd.edu/ProteoSAFe/datasets.jsp#%7B%22modification\\_input%22%3A%22glycosylation%22%7D](https://massive.ucsd.edu/ProteoSAFe/datasets.jsp#%7B%22modification_input%22%3A%22glycosylation%22%7D)
- ゲノム 15:30~ (藤澤さん、森さん、千葉さん、木下さん、山田)
  - GGDB: <http://acgg.asia/db/ggdb/>
    - NCBI GeneID: <http://acgg.asia/db/ggdb/info/gg200>
    - <http://acgg.asia/db/ggdb/data/lists.json>
    - 
    - UniProt IDをkeyとしてGGDBとMBGD, CAZy間のリンクができると、微生物ゲノム情報と糖鎖の情報がオーソログを核にしてつながる
    -
  - FlyGlycoDB: <http://fly.glycoinfo.org>
    - NCBI Gene ID
    - UniProt Entry
    - 糖タンパク質、糖鎖関連酵素
    - 腸内細菌のメタゲノムを介した糖鎖との関係
  - Ortholog groups
    - 糖タンパク質: <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2011/cc/c0cc01557a>
    - 翻訳後修飾によって糖鎖がつく 修飾認識部位は数アミノ酸
    - 糖鎖関連酵素
  - Bacteria: [BCSDB](#) 糖鎖構造DB
    - [CSDb glycosyltransferase](#)
    - <http://www.uniprot.org/uniprot/Q9M9U0>

- どういう糖転移酵素(glycosyl transferase)でその糖鎖構造ができるのかがわかるので、MBGD使って比較ゲノム解析すれば、候補酵素遺伝子のリストを出せる
- 糖関連遺伝子は、合成も分解も両方が対象
  - CAZy Entry
    - [CBM](#): carbohydrate binding module
    - どのCAZy CBM Familyが微生物が所持しているのか
- 
- 微生物と糖
  - glycosyl transferase
  - glycosyl hydase の2種類は微生物も多数所持
  - 上記二つで合成されうる糖鎖構造の予測
- 次回: SPARQLthon52で打ち合わせ
  - 木下: bacteria関係の糖鎖の質量分析データを調査