



リッチなSNFG表現を実現する直感的糖鎖入力プラットフォーム

トーゴーの日シンポジウム2025, 2025-10-20(月)
於 東京都港区 品川ザ・グランドホール

○松原正陽¹、木村直貴¹、下山紘充¹、木下聖子²、山田一作¹
¹(公財)野口研、²創価大

概要

糖鎖構造入力方法の重要性と課題

- 複雑で多様な糖鎖構造の記述は、研究者にとって労力がかかる作業
- 糖鎖科学の進展に伴い、多様な糖鎖構造を簡単に入力でき、目的に応じた画像化や、データベース検索につなげる手段が重要に

糖鎖入力プラットフォームの開発

- 直感的な糖鎖構造入力、描画
- 既知構造テンプレートによる、単糖や糖鎖の追加・削除や修飾の挿入
- SNFGシンボルによるリッチな糖鎖構造表現
- テキスト形式(WURCS、GlycoCT)での読み書きが可能

ユーザビリティと利便性の向上のために

- 入力した糖鎖構造は、論文や発表スライド、ポスターなどに貼り付け可能
- デスクトップアプリだけでなく、ブラウザから利用可能なウェブアプリも提供

データベースとの連携にも対応

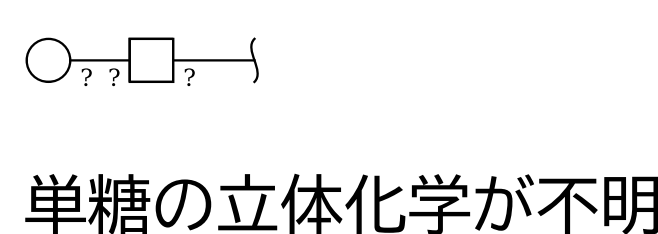
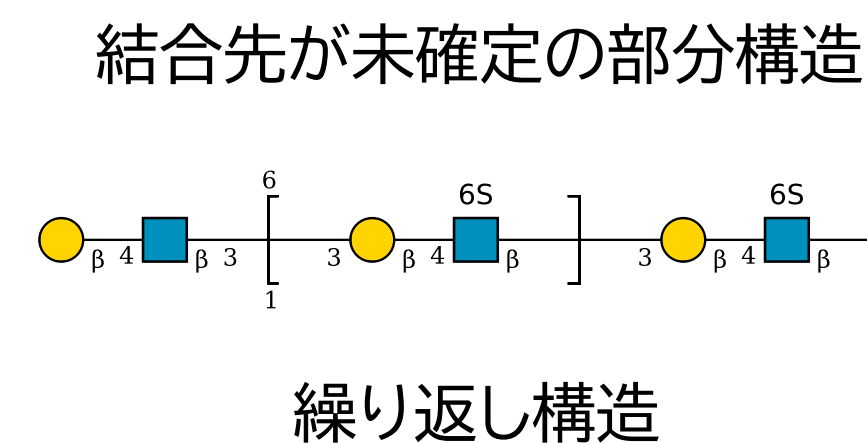
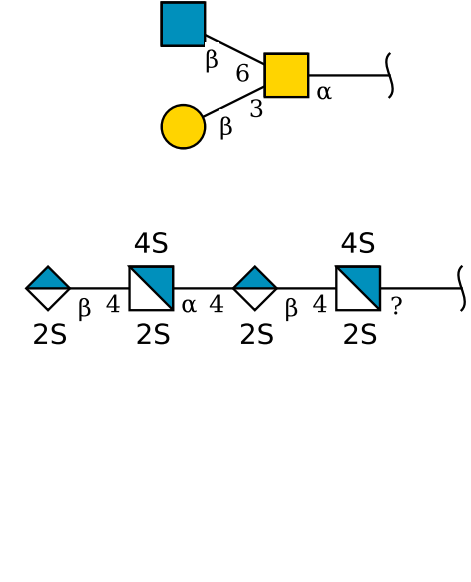
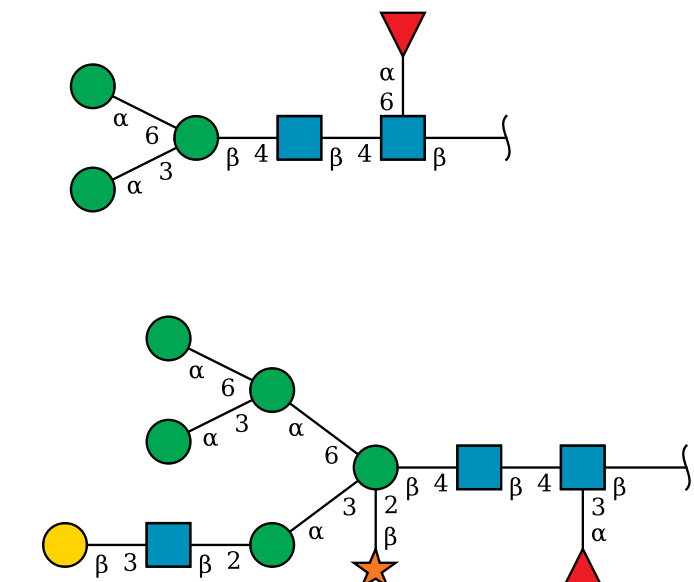
- GlyTouCan、GlyCosmos、GlycoNAVIなどのデータベースと連携し、構造の入力から登録・検索までをシームレスに

多様なニーズに応える糖鎖構造入力プラットフォームの開発

リッチなSNFG表現への対応

一般的な糖鎖構造表現
・単糖の種類
・グリコシド結合の種類

特殊な糖鎖構造表現

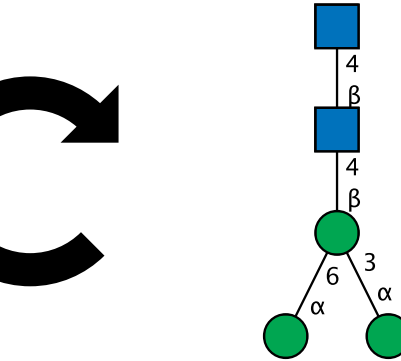
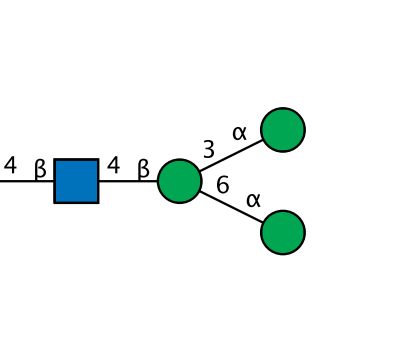
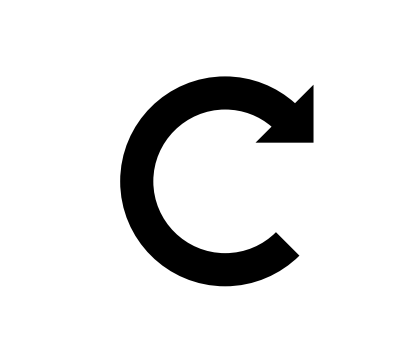
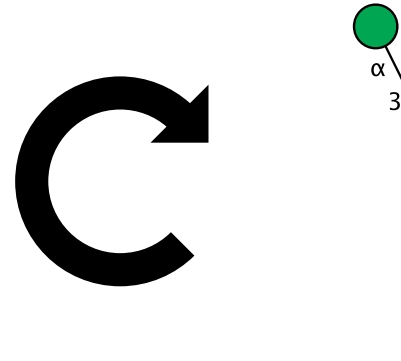
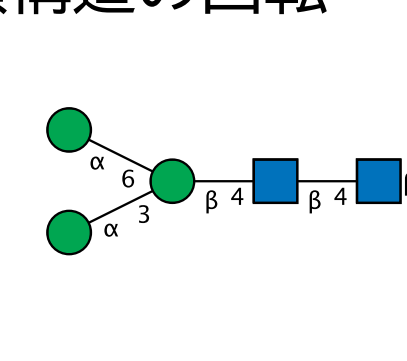


結合先が未確定の部分構造

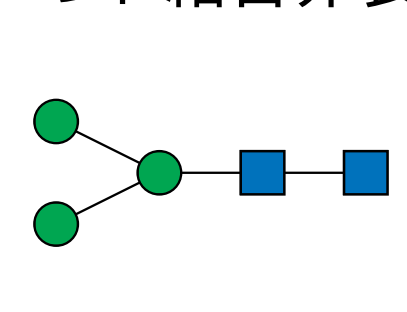
繰り返し構造

利用場面に応じた表現の切替

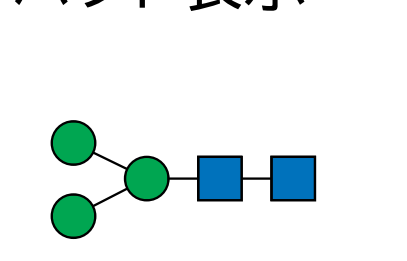
糖鎖構造の回転



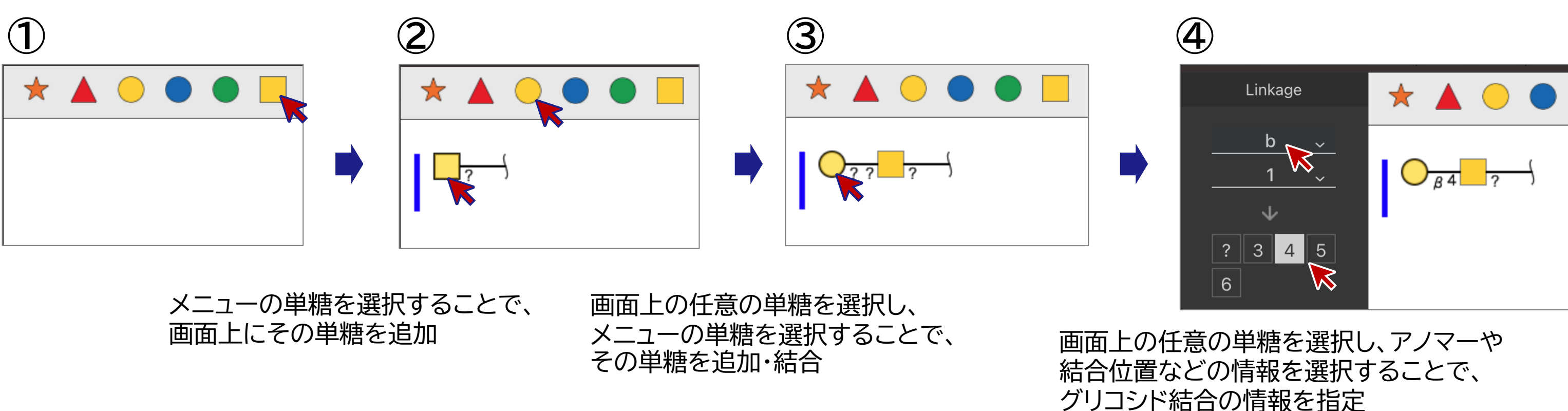
グリコシド結合非表示



コンパクト表示



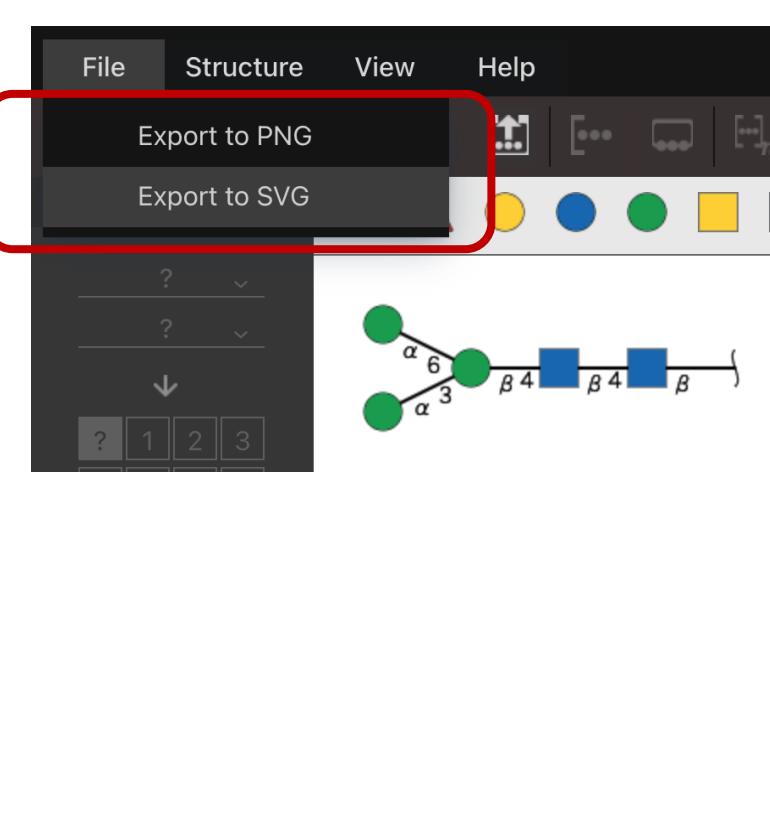
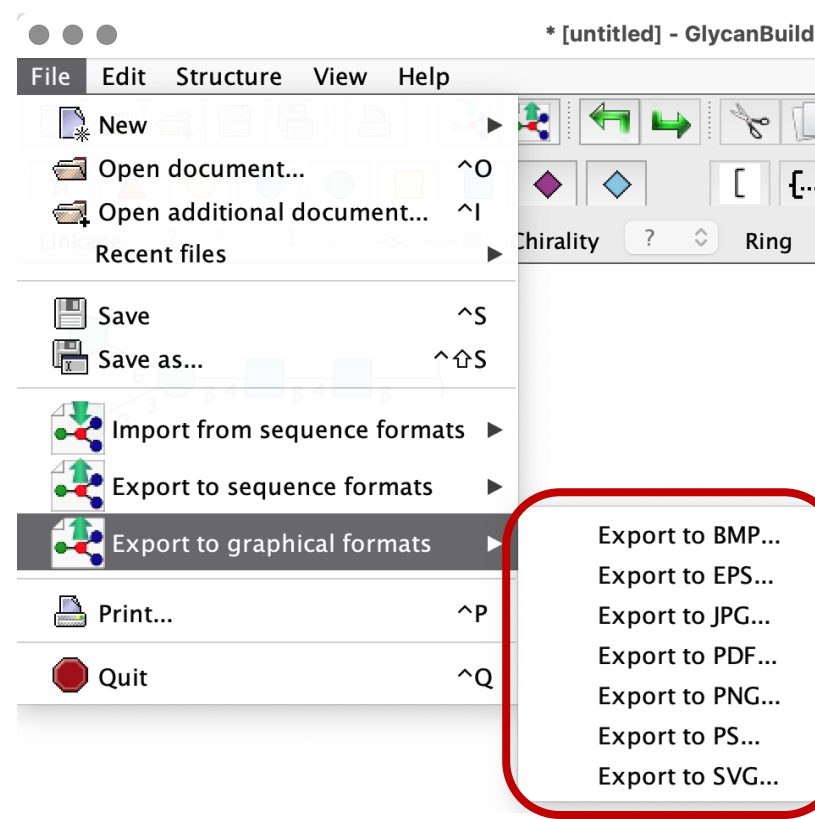
直感的な糖鎖構造入力システム



- 線返しやフラグメントを持つ構造も専用のボタンを利用して入力
- メニューの糖鎖テンプレートから主要な糖鎖構造を簡単に入力可能
- 入力した糖鎖構造は容易に変更することが可能

入力構造の画像ファイル化

入力した糖鎖構造は、画像ファイルとして保存可能（画像の読込には非対応）

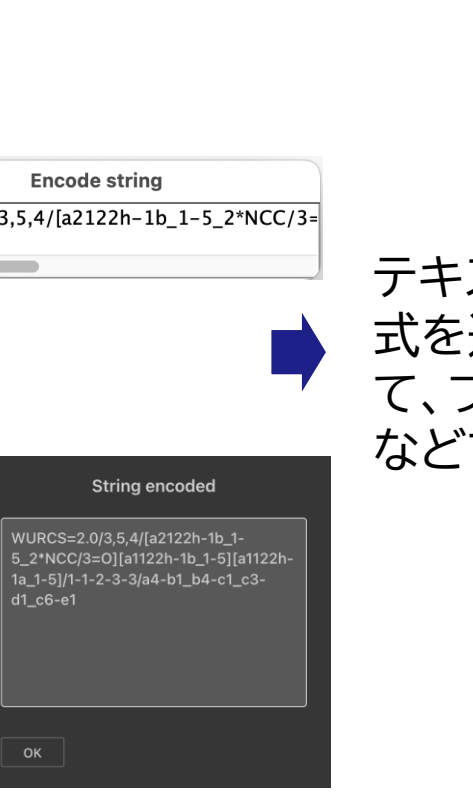
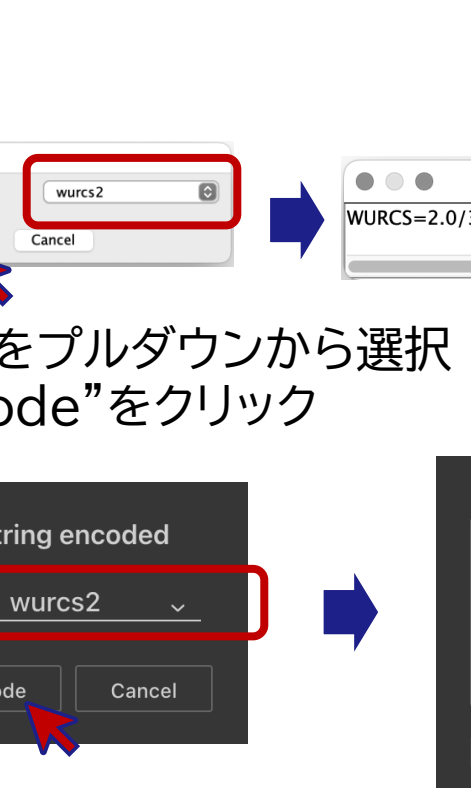
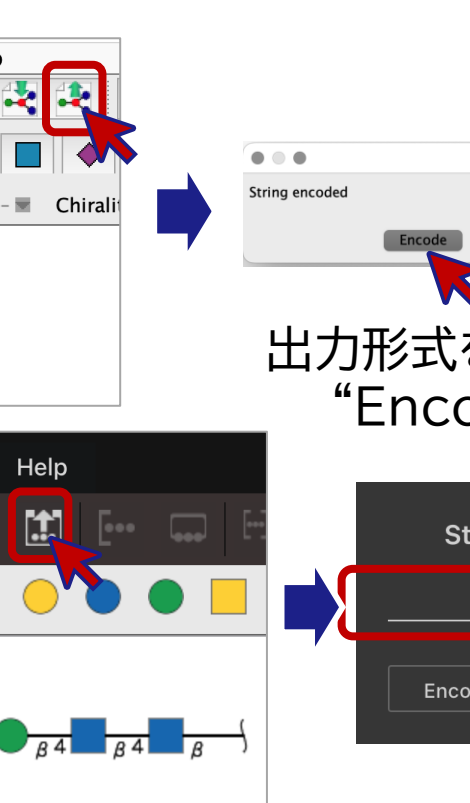
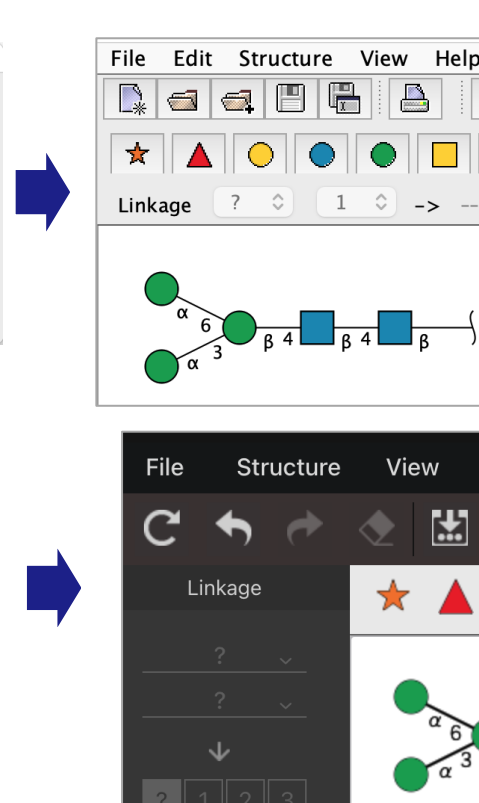
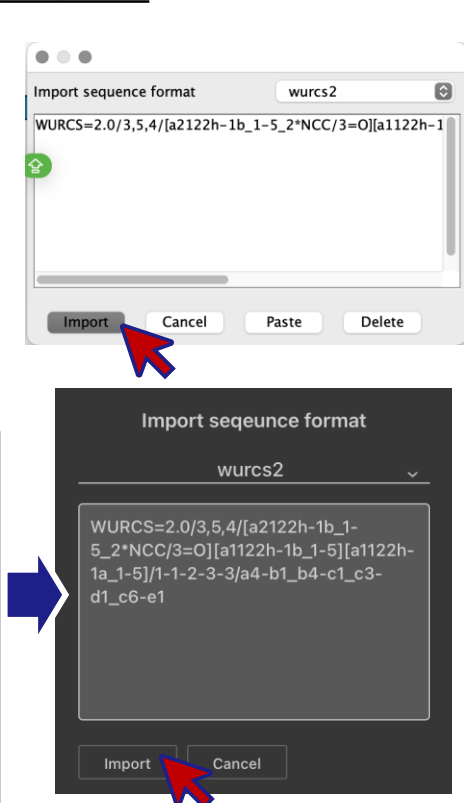
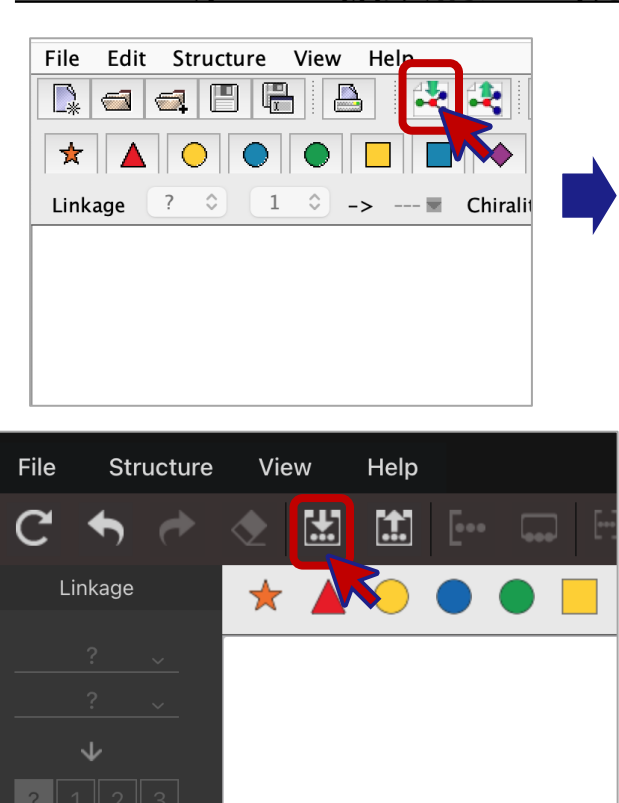


入力した糖鎖構造は、ファイルメニューから左図の形式で保存することができます。デスクトップとウェブアプリでは保存できる形式が異なる。SVG形式で保存することで高精細な画像を保存することができます。

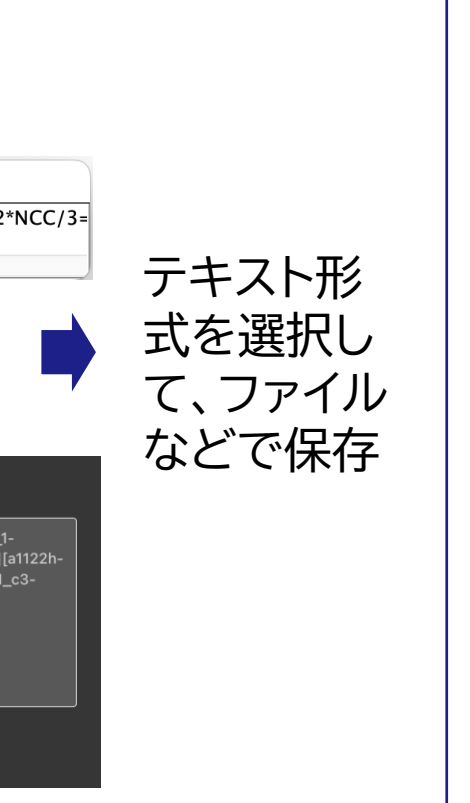
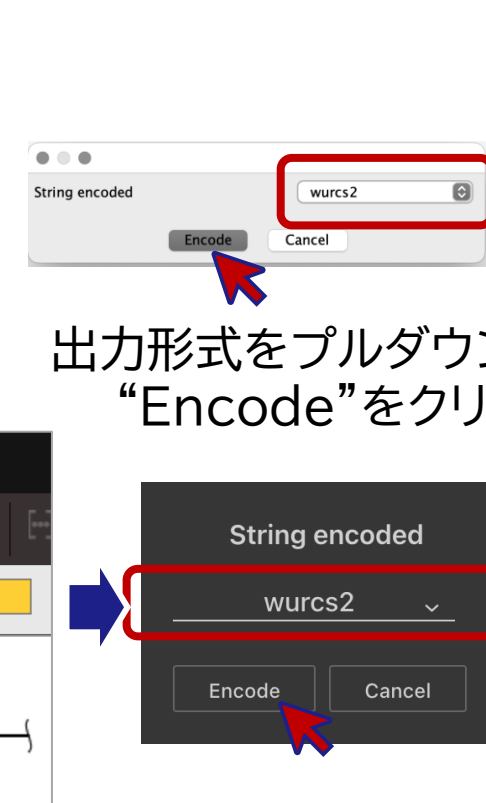
テキスト形式での構造読込/保存

入力した糖鎖構造は、WURCSやGlycoCTなどの糖鎖構造を表す文字列(テキスト)として出力・保存できる。保存したテキストは再度読み込むこともできる。

テキスト形式の糖鎖構造の読み込み



糖鎖構造をテキスト形式で出力



テキスト形式を選択して、ファイルなどで保存

コピペで他のソフトと連携

入力した糖鎖構造は画像として保存でき、コピー＆ペーストで他のソフトと連携可能

コピーの方法

- 1) キーボードショートカット
・ macOS: ⌘+C
・ Windows: Ctrl+C

マウス操作(デスクトップアプリ)

1. 糖鎖構造を選択
2. 右クリック
3. プルダウンメニューから"Copy"を選択

ペーストの方法

任意のアプリを起動、画像を入れたい箇所を指定

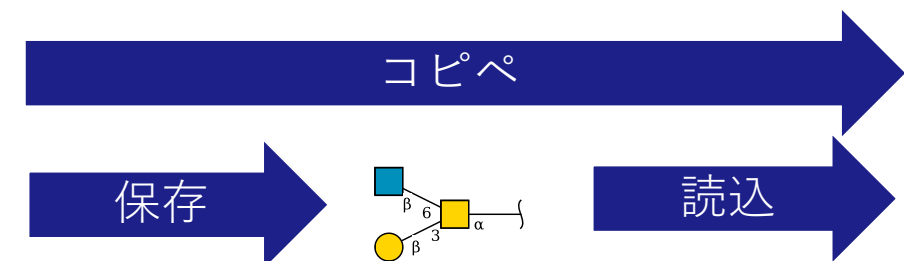
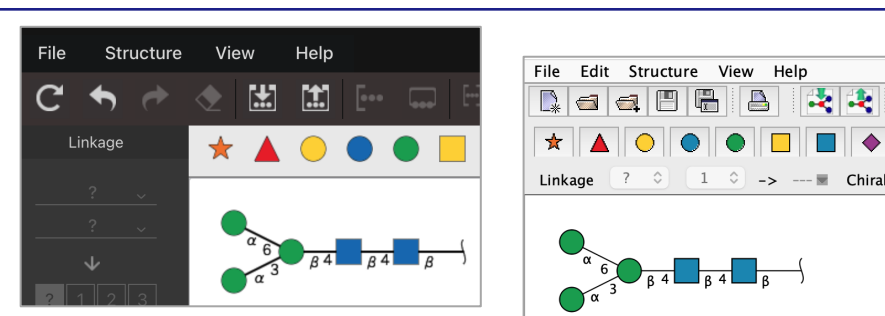
- 1) キーボードショートカット(OS標準)
・ macOS: ⌘+V
・ Windows: Ctrl+V

マウス操作(デスクトップアプリ)

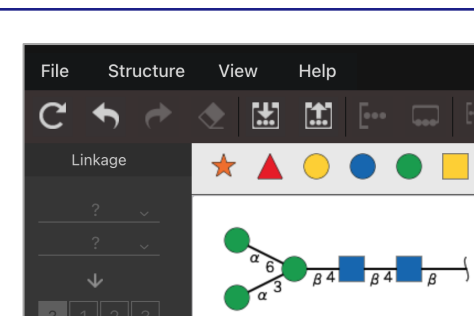
1. 右クリック
2. プルダウンメニューから"ペースト"を選択

糖鎖構造入力プラットフォームの利用例

プレゼン資料などに貼付け



糖鎖構造のデータベース検索



描画した構造の登録や検索



アプリケーションへのアクセス方法

デスクトップアプリケーション

ダウンロード(Windows, macOS)

URL: <https://public.glyconavi.org/>

ウェブアプリケーション

URLにアクセス

- ・ <https://gb.glyconavi.org/>
- ・ <https://glycosmos.org/glycans/graphic/GlycanBuilder>
- ・ <https://gb.glytoucan.org/>
- ・ <https://gb-regi.glytoucan.org/>

糖鎖構造入力に関する課題

- SNFGが定義する糖鎖構造表記ルールに一部準拠していない
- 一部の特殊な表現の糖鎖構造を入力できない
 - ・ シンボル未定義の単糖など
- 入力したい既知構造テンプレートを探しづらいなど、一部の機能の操作性が悪い

これらの課題解決のため、デスクトップおよびウェブアプリケーションの再開発を実施中

謝辞

- 本研究は科学技術振興機構 (JST)・NBDCにより実施されているライフサイエンスデータベース統合推進事業における「統合化推進プログラム」(JPMJND2204)の助成により実施しました。
- 共同研究者および貴重なコメントを頂きましたすべての方に感謝します。

参考文献

Shinichiro Tsuchiya, et al., *Carbohydrate Research*, 445, 2017, Pages 104-116



Licensed under a Creative Commons表示4.0国際ライセンス©2025 松原正陽(公益財団法人野口研究所)