



多様な糖鎖データをつなぐ標準化とデータベース統合への取り組み

○松原正陽、山田一作(野口研究所)

トーゴの日シンポジウム2026
品川ザ・グランドホール 2026年10月5日(月)

糖鎖データの標準化と支援ツール開発

多様な表現をつなぐハブ

- 異なる表記法・データ形式の変換
- データベース間の連携
- 解析・可視化の共通基盤
- 共通言語としてあらゆるデータを連結



糖鎖構造の標準表現

Matsubara M. et al., J Chem Inf Model. 2017 Apr 24;57(4):632-637.

多様な糖鎖構造情報に対応

- 単糖とグリコシド結合による基本構造
- 原子・分子レベルの多様な修飾
- 曖昧な部分構造・繰り返し構造
- 文献・DB上のあらゆる糖鎖構造に対応

開発中の
支援ツール
(モジュール群)
 構造変換
(表記形式変換)

 検証
(構造チェック)

 描画
(構造の画像化)

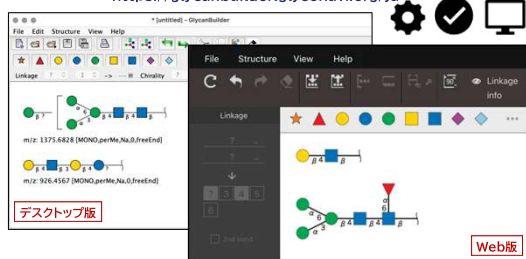
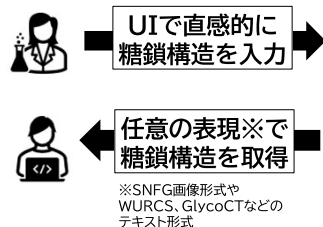
 データ解析
(質量計算など)

 フィルタ
(条件による絞り込み)

 検索
(部分構造検索)

ユーザーによる支援ツール・データベース利用

糖鎖構造入力支援ツールGlycanBuilder

<https://glycanbuilder.glyconavi.org/ja>

入力から出力まで、使いやすいインターフェースで糖鎖構造データを活用

データの登録・検索



各種支援ツールを活用し多くのデータベースと連携

連携データベースにおけるWURCSと支援ツールの利用

糖鎖科学ポータルGlyCosmos

- GlyTouCanのWURCSを解析
- WURCSから質量を計算
- RDFグラフ化したWURCSによる部分構造検索

国際糖鎖リポジトリGlyTouCan

- 登録されたWURCSを検証
- WURCSをSNFG画像化
- WURCSの包摂関係に基づく構造分類

低分子化合物データベースPubChem

- 化学構造式からWURCSを解析・抽出
- 既知の糖鎖構造によるフィルター
- WURCSから化学構造式に変換

糖鎖科学情報リソースGlyGen

- WURCSをSNFG画像化
- GlyTouCanデータの利用

糖鎖研究支援システムGlycoNAVI

- PDBから取得・解析したデータを公開
- 開発した支援ツールのAPIを公開

タンパク質立体構造データベースPDB

- 化学構造式から糖鎖構造を解析・抽出
- 構造登録システムOneDepへの導入
- WURCSをSNFG画像化

その他のWURCS利用データベース



今後の開発

- 糖鎖構造編集支援ツールの刷新
 - 編集可能な構造情報の追加
 - UI/UXの大幅アップデート
- 表記変換システムの更新
 - 誤変換などの不具合の修正
 - 変換可能な表記形式の追加

- 化学構造解析機能の更新
 - 糖鎖抽出アルゴリズムの改善
 - 曖昧な化学構造表現への対応
- 構造検索機能の刷新
 - グラフ化WURCSに基づく曖昧一致
 - 絞り込み条件の検討

謝辞

本研究は、国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)のバイオサイエンスデータベースセンター(NBDC)「統合化推進プログラム(DICP)」(Grant 番号:JPMJND2204)の支援を受けたものです。

