

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 2017年採択課題)

研究開発終了報告書

「糖鎖科学ポータル」の構築

木下 聖子 | 創価大学 糖鎖生命システム融合研究所
副所長・教授

研究開発期間： 2017年4月～2022年3月



©2022 木下 聖子 (創価大学) Licensed under CC BY 4.0

§1. 研究開発実施の概要

本研究開発では、GlyCosmos Portal の開発によって、多様なオミックスデータの統合が可能となり、システム糖鎖生物学の基盤を構築することを目指してきた。GlyCosmos Portal を通して、ゲノム、プロテオーム、リポドームなどのデータベースとリンクする基盤が整備され、セマンティック・ウェブ上においては相互にリンクされ、検索、閲覧ができるようになっている。統合された情報が基盤となり、データを一元的に解析するツールや生物学的な意味の推論や発見を支援するシステムの開発が可能となった。また、開発したオントロジーおよび Resource Description Framework (RDF) データの統合によって、糖鎖の構造、関連遺伝子、認識タンパク質、および抗原・抗糖鎖抗体の情報が統合され、オミックスデータの統合の基盤ができた。これらの基盤が構築され、利用しやすいユーザーインターフェースを提供することにより、糖鎖研究の初心者にとっても糖鎖科学への参入障壁が下げられ、糖鎖研究への参加が容易になり、ライフサイエンス研究に大きく貢献できると期待する。

本ポータルはリポジトリ、データベースおよび標準と3つカテゴリーに別れており、リポジトリはデータを登録する仕組みを提供する。リポジトリには、国際糖鎖構造リポジトリ GlyTouCan、糖鎖の質量分析生データリポジトリ GlycoPOST、質量分析において同定された糖鎖構造情報を格納するリポジトリ UniCarb-DR、そして複合糖質リポジトリ GlyComb がまとまっている。データベースが GlyCosmos の中核であり、統合化した糖鎖関連オミックス情報をまとめている。遺伝子やタンパク質など、データの種類別に閲覧できるようになっており、横断検索も可能になっている。標準は GlyCosmos で用いている標準形式やオントロジーなどを説明する。

GlyCosmos は日本糖質学会のオフィシャルポータルとして、日本を代表する糖鎖科学ポータルである。アジアにおける糖鎖情報をこれまで統合してきた ACGG-DB、また糖鎖化学の観点から糖鎖情報をまとめている GlycoNAVI とも密に連携しており、アジアを代表して GlySpace Alliance の国際共同体の一員である。GlySpace は米国の GlyGen と欧州の Glyco@ExPASy の3拠点で構成されており、国際連携をスムーズに実施できるような体制を構築している。これにより、データの品質保証や相互利用を自由にできるようになっている。また、糖鎖科学実験の報告ガイドラインを提唱している MIRAGE においても推奨リポジトリとして GlyTouCan が掲載されており、糖鎖構造の情報基盤となっていると言える。

ツール開発においても尽力してきた。糖鎖構造の検索機能については糖鎖構造描画ツールの開発で糖鎖構造情報を探しやすくした。また、糖鎖遺伝子の発現情報をパスウェイ上に可視化し、合成される糖鎖構造の予測を可能にする GlycoMaple も公開した。さらに、糖鎖遺伝子のキュレーションシステムとして、DBCLS の PubAnnotation を通して、最新の文献から糖鎖遺伝子の機能情報などのアノテーションを自動的に取得し、可視化するシステムを近々公開できる計画となっている。一方、DisGeNet や Alliance of Genome Resources からは糖鎖遺伝子に関連する疾患情報、PubChem からは糖鎖に関連する化学構造や遺伝子、タンパク質、パスウェイ情報を統合化でき、PubChem のエントリーからも GlyCosmos の糖鎖関連情報が掲載されている。また、パスウェイデータベースの Reactome や BioCyc/MetaCyc にも呼びかけおり、連携に興味を示している。これらにより、糖鎖の重要性を明確にし、分野外の研究者に注目できる機会を増やすことができた。

§2. 研究開発実施体制

1. 研究グループ

(1) 「創価大学」グループ(研究代表者グループ)

- 担当項目

糖鎖構造リポジトリ GlyTouCan、複合糖質リポジトリ GlyComb および GlyCosmos ポータルの設計・開発。

糖鎖科学における多様なデータのオントロジー開発、セマンティック・ウェブ化、データベース化、そしてユーザーインターフェース開発。

国内外の糖鎖関係者との連携を通して糖鎖データの連携を図り、そしてユーザーからのフィードバックに基づいたユーザーインターフェースの開発。

日本糖質学会の運営委員会を通して、研究者との交流促進。

最新の糖鎖データを文献から抽出し、データベース化するキュレーションシステムを DBCLS の金准教授と共同で開発。

(2) 「野口研究所」グループ(主たる共同研究者グループ(1))

- 担当項目

複合糖質リポジトリ GlyComb および GlyCosmos Database の設計・開発。

糖鎖構造表記法 WURCS の拡張および WURCS の普及促進のため WURCS 関連ツールなどの糖鎖構造解析ツールの開発。

WURCS を活用し糖鎖を含むデータベースとの統合・連携促進のために複合糖質構造関連データを整理し、データベースの開発。

他のオミックスデータベースとの連携。

(3) 「新潟大学」グループ(主たる共同研究者グループ(2))

- 担当項目

PubAnnotation および PubDictionaries を利用し、GlycoEpitope データベース内のデータを元にした糖鎖関連の情報を自動的にキュレーションするためのシステムの開発。

グライコミクスおよびグライコプロテオミクスの質量分析データの受け入れを担うシステムとして GlycoPOST の開発。

環境中の多様な微生物が保持している糖鎖関連遺伝子を同定するためのアルゴリズムの開発とその得られた環境中での糖鎖関連遺伝子の分布についてのデータベース開発。

(4) 「産総研」グループ(主たる共同研究者グループ(3))

- 担当項目

ACGG-DB のデータの充実、ユーザーインターフェースの改良、GlyCosmos との連携。

2. 有識者会議等

(1) 会議概要

名称	GlyCosmos 運営委員会
目的	日本糖質学会のオフィシャルポータルとして、運営委員会を設けており、糖鎖研究の専門家との意見交換や運営方針を決定する。
委員数	11 人

(2) 開催歴

年月日	場所	参加人数	主な議題
2020 年 9 月 29 日	オンライン	9 人	GlyCosmos の概要、委員会の紹介、Nature Journals の推奨リポジトリの申請について、利用したフィードバック収集
2021 年 8 月 18 日	オンライン	10 人	GlyCosmos の進捗状況、TogoDX の紹介、フィードバックに対する対応、課題の列挙や要望

§3. 研究開発の目的、実施内容及び成果

1. 研究開発の背景

糖鎖の機能は糖鎖構造単独ではなく、複合糖質として考慮して初めて糖鎖の機能解明につながる事が明らかになってきた。しかし、現状当初存在していたゲノム、プロテオーム、メタボローム、リポドーム、インタラクトームなどのオミックスデータベースは糖鎖をほとんど考慮しておらず、糖鎖科学に対する教育にも十分になされているとは言い難い状況であった。2016年末時点で糖鎖科学研究分野について PubMed を用いて傾向を調べたところ、glycoproteomics というキーワードは論文の絶対数としてはまだ少なかったものの、それまでの2年間で倍増していた。従って、糖鎖科学研究は糖鎖研究から糖タンパク質などの複合糖質の研究にシフトしていて、複合糖質のデータがより重要かつ大量に生産されることが予測されていた。

そのために本研究開発課題においても複合糖質に着目した研究を実施する必要があった。国内外の研究動向を踏まえると、糖鎖が様々な疾患に関わっており、医療応用が注目されていることがわかる。現状世界で使用されている標準的な糖鎖解析法は日本発であり、また6割以上の糖鎖遺伝子のクローニングやその機能解析が我が国の研究者によってなされており、糖鎖科学は我が国が世界をリードしてきた分野である。従って、国内外の糖鎖研究を網羅的に整理し、既知の情報、未知な情報の実際の状況を把握するために、文献や関連データベースを統合し、糖鎖研究の現状を把握することが急務であった。

前研究課題においては糖鎖科学と周辺分野の融合を目指してセマンティック・ウェブ技術を活用し開発を進めていた。そして国際糖鎖構造リポジトリ GlyTouCan および ACGG-DB を開発し公開することができた。しかし、糖鎖科学の進展に伴い糖鎖を理解するためには複合糖質として考慮することの重要性、ならびに糖鎖遺伝子が関与するパスウェイ情報の重要性が高まり、それらのデータに対応するためには複合糖質のリポジトリおよび複合糖質とパスウェイのデータベースが不可欠であった。前研究課題では糖鎖を核として研究開発を進めてきたため、これらの対象領域の拡大が前研究課題では解決できなかった。

類似するポータルとして、GlySpace Alliance を組んでいる GlyGen と Glyco@Expasy が挙げられる。これらの詳細は次の通りである：

- GlyGen (<https://glygen.org>)は米国 NIH の Common Fund により開発され、糖タンパク質をベースにデータを収集している。GlyTouCan との連携を通して糖鎖構造情報を提供した。レクチンやパスウェイ情報は少なく、変異情報や関連する疾患情報の方に注力されている。
- Glyco@Expasy (<https://www.expasy.org/resources/glyco-expasy>)は Swiss Institute for Bioinformatics (SIB)で開発されており、糖鎖関連ポータルとして様々なデータベースやツールを一箇所から調べられるようにされている。

2. 研究開発対象のデータベース・ツール

(1) データベース

- 主要なもの

正式名称	略称	概要
GlyCosmos Portal	GlyCosmos	https://glycosmos.org

- ・ 上記以外のもの

正式名称	略称	概要
GlyTouCan		糖鎖科学リポジトリ
UniCarb-DR		糖鎖構造アノテーションリポジトリ
GlyComb		複合糖質リポジトリ
GlycoNAVI		複合糖質構造データベース
GlycoPOST		糖鎖関連質量分析データのリポジトリデータベース
ACGG-DB		https://acgg.asia/db/
LM- GlycomeAtlas		https://glycosmos.org/lm_glycomeatlas/index

(2) ツール等

正式名称	略称	概要
GlycoMaple	GlycoMaple	糖鎖関連パスウェイ解析ツール
GlycanBuilder2	GlycanBuilder2	糖鎖構造の描画ツール
GlycanFormatConverter	GlycanFormatConverter	WURCS を IUPAC、GlycoCT などの形式に相互変換するツール
WURCSFramework	WURCSFramework	糖鎖構造データをコンピュータで取り扱うためのソフトウェアライブラリー
PDB2Glycan	PDB2Glycan	PDB に含まれる糖鎖構造を解析し、WURCS に変換し、GlyTouCan と連携させるツール
TCarpRDF	TCarpRDF	PDB2Glycan を利用し、PDB データを一括で解析するツール
SugarDrawer	SugarDrawer	糖鎖構造を描画し、その構造を検索するインターフェイス
MolWURCS	MolWURCS	化学構造データから糖鎖構造を抽出し WURCS に変換するツール
GlycanBuilder2Web	GlycanBuilder2Web	糖鎖構造を描画し検索するためのウェブアプリケーション
GlycoWorkbench	GlycoWorkbench	質量分析データを解析し糖鎖構造を同定するツール
Glycobiology Curation System		PubAnnotation よりアノテーションされたデータの可視化するツール

※データベース、ツールの詳細は別紙参照。

3. 達成目標及び実施計画

(1) 当初の実実施計画・達成目標

複合糖質リポジトリ GlyComb を開発する。また ACGG-DB、UniProt、jPOST、GlyTouCan の間の連携体制を構築する。そしてアクセッション番号の振り方について、研究者コミュニティの代表と連携し決定する。GlyTouCan の場合は欧米の研究者ら 10 名ほどが関与したが、GlyComb の場合は国内外の複合糖質の専門家と協議する。また、外部データベースとのデータ共有方法など、ユーザーとしてわかりやすいシステムを目指してシステム設計を行う。その後はキュレーション

システムを開発し、糖鎖遺伝子の辞書から文献のアノテーションを取得できるシステムを設計する。最終的には普及活動を国際会議等で実施し、ユーザーとの交流を通して改良していく。

複合糖質構造の情報については、生物種や組織を特定しないデータであり PDBj (<http://pd bj.org/>) に登録されている約 12 万件のデータから糖質構造等を解析・抽出するツールを開発する。また、抽出した糖質構造を糖鎖構造表記法である WURCS に変換するツールを開発する。これらのツールの開発には、これまで開発してきた WURCSFramework などの基盤ツールが活用できる。

糖鎖構造表記法である WURCS は、既に国際糖鎖構造リポジトリ(GlyTouCan)にも利用しているが、今後より広範囲の曖昧性を含む糖質構造を扱う必要がある。特にバクテリアや植物に含まれる糖質構造のデータベースには複雑な糖鎖構造が含まれており、これらの糖鎖構造を表現するための仕様追加などの整理を実施するとともに、WURCS を扱う基盤である WURCSFramework の仕様変更による他のツールへの影響の調査などを実施する。また、WURCS の普及促進のために創価大学と協働で糖鎖構造形式コンバーターである WURCSstoIUPAC の開発を実施する。

ACGG-DB については、産総研からキュレーションやデータの提供を受け、定期的な DB の更新と安定的な公開を行う。ACGG-DB 間の横断検索ツールを開発し効率的な利用を可能にさせる。ヒトやマウスのデータを基に GlyCosmos Portal と連携する。セマンティック・ウェブ化が実施された国際的 DB との連携を進める。

タスクとしては：

- ACGG ポータルから安定的な ACGG-DB の更新と公開
- GlycoProtDB、LfDB のデータと GGDB のキュレーション収集と DB 化
- ユーザーミーティングの定期的開催と UI 改良
- GlycoProtDB、GGDB、LfDB の横断検索ツール開発
- GlyCosmos と ACGG-DB とのクロスリンク
- GGDB や LfDB も他国の DB との連携

(2) 期間中に追加・削除・変更した実施計画・達成目標

【2017 年度追加実施】

糖鎖領域および関連するライフサイエンス分野の国内外のデータベースの統合・連携を促進するために、追加実施として、2018 年3月5日から9日の日程で連携促進のため国際ワークショップ (<https://glic.glycoinfo.org/meetings/LSworkshop2018/>) を開催した。

また、TotalGlycome のデータベース化も実施し、総合グライコフォームの情報を GlyCosmos に加えることができた。

【2021 年度追加実施】

GlycoWorkbench の GlyCosmos 連携：糖鎖構造を解析同定するツールである GlycoWorkbench の改良を行うことにより、同定された糖鎖構造の GlyTouCan への登録などの機能を追加し、GlycoWorkbench を用いた実験と GlyCosmos との連携を強化する。

オンラインシンポジウムの開催：GlySpace Alliance を通して、GlyCosmos ポータルの利用方法を紹介し、ユーザーとのハンズオンセッションを計画している。最終年度の 3 月に開催する予定である。

また、分子生物学会セッションなど複数の学会において研究者から要望のあった疾患と糖鎖構造に関するデータの整理について文献情報をもとにデータベース化を実施した。

4. 実施内容

(1) 実施内容

【創価大グループ】

GlyCosmos Portal の開発は基盤設計から始まり、無事に進み、セマンティック・ウェブ技術を大いに活用した。Ruby on Rails 上でシステムを構築し、SPARQLList を用いて RDF 化したデータを自由に取得できるようにした。GlyTouCan に加え、GlycoPOST と UniCarb-DR もスウェーデンから移動され、リポジトリ部が充実できた。一方、GlyTouCan のいくつかの問題があり、その修正に時間が必要になったため、GlyComb の開発が遅れた。そのため、GlyComb のアクセス番号の振り方についても開発開始時期が遅くなったため、協議する機会はなかったが、国内のクライコプロテオミクス専門家に伺ったところ、特に問題視されなかったため、GCxxxxxxx と連番で作成する方針と決定した。なお、GlyCosmos Database において多くのデータとの統合を計画していたが、2021 年 8 月リリースの時点で、表1に示すデータが統合できた。

表 1 : GlyCosmos Database に統合化したデータの一覧。

Category	Subcategory	Database	Last Update	Source
Gene	GlyCosmos Glycogenes	GlycoGene Database (GGDB)	January 26, 2018	https://acgg.asia/db/ggdb/
		FlyGlycoDB	September 1, 2018	http://fly.glycoinfo.org/
		KEGG BRITE	July 2, 2021	https://www.genome.jp/kegg/brite.html
		UniProt	July 2, 2021	https://www.uniprot.org/
		Plant GARDEN	May 28, 2020	https://plantgarden.jp/ja/index
		LIPID MAPS Gene/Proteome Database	June 24, 2019	https://www.lipidmaps.org/resources/databases/index.php?tab=1mpd
	GlycoGene Database (GGDB)	GlycoGene Database (GGDB)	January 26, 2018	https://acgg.asia/db/ggdb/
	Plant GARDEN	Plant GARDEN	May 28, 2020	https://plantgarden.jp/ja/index
	Glyco-Disease Genes Database (GDGDB)	Glyco-Disease Genes Database (GDGDB)	January 25, 2017	https://acgg.asia/db/diseases/gdgdb
	Alliance of Genome Resources	Alliance of Genome Resources	February 1, 2021	https://www.alliancegenome.org/
	DisGeNET	DisGeNET	June 29, 2021	https://www.disgenet.org/
	GlycoNAVI-Genes	GlycoNAVI-Genes	-	-

Category	Subcategory	Database	Last Update	Source
	FlyGlycoDB	FlyGlycoDB	September 1, 2018	http://fly.glycoinfo.org/
	LIPID MAPS Gene/Proteome Database	LIPID MAPS Gene/Proteome Database	June 24, 2019	https://www.lipidmaps.org/resources/databases/index.php?tab=lmpd
Protein	GlyCosmos Glycoproteins	UniProt	December 9, 2020	https://www.uniprot.org/
		MCAW-DB	July 10, 2019	https://mcafdb.glycoinfo.org/
		GlycoProtDB (GPDB)	December 5, 2016	https://acgg.asia/db/gpdb/
		PDBj	-	-
		Reactome	June 7, 2021 (Version 76)	https://reactome.org/
		Human Protein Atlas	September 5, 2019 (Protein Atlas version 19)	https://www.proteinatlas.org/
	GlyCosmos Lectins	UniProt	November 6, 2020	https://www.uniprot.org/
		MCAW-DB	July 10, 2019	https://mcafdb.glycoinfo.org/
		UniLectin	November 20, 2020	https://www.unilectin.eu/
		GlycoProtDB (GPDB)	December 5, 2016	https://acgg.asia/db/gpdb/
		Lectin Frontier DataBase (LfDB)	July 12, 2019	https://acgg.asia/db/lfdb/
		GlycoNAVI-Proteins	September 09, 2021	https://glyconavi.org/Proteins/
		GlycoNAVI-Lectins	September 09, 2021	https://glyconavi.org/Proteins/
	Lipids	GlyCosmos Glycolipids	LIPID MAPS Structure Database	March 5, 2021
LipidBank			March 5, 2021	http://lipidbank.jp/
KEGG			March 5, 2021	https://www.genome.jp/kegg/compound/
PubChem			March 5, 2021	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/

Category	Subcategory	Database	Last Update	Source
		ChEBI	March 5, 2021	https://www.ebi.ac.uk/chebi/
Glycans	GlyCosmos Glycans	GlyTouCan	September 27, 2021	https://glytoucan.org/
	GlycoNAVI-Glycans	GlycoNAVI-Glycans	September 09, 2021	https://glyconavi.org/Glycans/
Glycoconjugates	GlyCosmos Glycoproteins	UniProt	July 29, 2020	https://www.uniprot.org/
	GlycoProtDB (GPDB)	GlycoProtDB (GPDB)	December 5, 2016	https://acgg.asia/db/gpdb/
	GlycoEpitope	GlycoEpitope	November 18, 2015	https://glycoepitope.jp/
	GlycoNAVI-Proteins	GlycoNAVI-Proteins	September 09, 2021	https://glyconavi.org/Proteins/
	GlyCosmos Glycolipids	LIPID MAPS Structure Database	June 6, 2019	https://www.lipidmaps.org/resources/databases/index.php?tab=lipidmsd
Glycomes	Total Glycome Database	Total Glycome Database	-	-
	GlycomeAtlas	GlycomeAtlas	November 7, 2018	https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/30405127
	LM-Glycome Atlas	Ver. 1.0	August 15, 2019	https://doi.org/10.3390/molecules24162962
		Ver. 2.0	December 7, 2020	https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jproteome.0c00907
Pathways	GlyCosmos Pathways	Reactome	June 7, 2021 (Version 76)	https://reactome.org/
		UniProt	June 7, 2021	https://www.uniprot.org/
	GlycoMaple	GlycoMaple	April 1, 2020	manuscript in preparation
Diseases	Glyco-Disease Genes Database (GDGDB)	Glyco-Disease Genes Database (GDGDB)	January 25, 2017	https://acgg.asia/db/diseases/gdgdb
	Pathogen Adherence to Carbohydrate Database (PACDB)	Pathogen Adherence to Carbohydrate Database (PACDB)	June 1, 2016	https://acgg.asia/db/diseases/pacdb
	GlycoNAVI-Diseases	GlycoNAVI-Diseases	-	-

Category	Subcategory	Database	Last Update	Source
	Alliance of Genome Resources	Alliance of Genome Resources	February 1, 2021	https://www.alliancegenome.org/
	DisGeNET	DisGeNET	June 29, 2021	https://www.disgenet.org/

特に当初の予定にはなかったが、Diseases のデータを充実させることができたことを記載したい。疾患関連データベースが多く公開されており、これらの情報を導入することができた。また、PubChem との連携も密に行うことができ、PubChem の多くの遺伝子、タンパク質、パスウェイなどのエントリーページから GlyCosmos からの情報も掲載されており、GlyCosmos への相互リンクを載せることができた。

【野口研究所グループ】

複合糖質リポジトリ GlyComb および GlyCosmos Database の設計・開発を木下 G と協働して実施した。また、糖鎖構造表記法 WURCS の拡張および WURCS の普及促進のため WURCS 関連ツールなどの糖鎖構造解析ツールの開発を木下 G と協働して実施した。具体的には、次の項目を実施した。

- 1) 糖鎖構造の表記法である WURCS 表記法の仕様を拡張しシアル酸(Sia)へ対応し WURCSFramework の改良・拡張、
- 2) WURCS と他の表記法の相互変換ツールである GlycanFormatConverter の改良、
- 3) ユーザーが糖鎖構造を描画し GlyYouCan などのデータから糖鎖構造を検索できる SugarDrawer、GlycanBuilder2、GlycanBuilder2Web の開発、
- 4) 化合物データベースとの連携を志向した化学構造と WURCS の相互変換ツール MolWURCS の開発、
- 5) Protein Data Bank(PDB)と連携するための PDB のデータ形式(mmCIF および mmJSON)から WURCS を生成し、関連データを RDF 化するツール PDB2Glycan および PDB のデータ更新に応じてデータを解析・更新するツール TCarpRDF の開発

また、WURCS を活用し糖鎖を含むデータベースとの統合・連携促進のために複合糖質構造関連データを整理し、上記の開発したツールを活用し PubChem や PDB との連携を実施した。PDB との連携においては PDBj グループと協働し wwPDB のデータ登録システム OneDep に、開発した PDB2Glycan を提供し利用することで PDB に含まれるすべての糖鎖構造に WURCS を付与すること、および PDBj、PDBe、RCSB PDB の3極から提供される糖鎖を含む PDB データ全てに WURCS を追加することが実現できた。これにより糖鎖構造リポジトリ GlyYouCan と PDB の連携を加速することができた。また、他のオミックスデータベースとの連携も実施した。

【新潟大学グループ】

糖鎖関連の情報を自動的にキュレーションするためのシステムの開発を実施した。本課題は DBCLS・金特任准教授との共同研究であり、PubAnnotation および PubDictionaries を利用して、効率的に糖鎖関連の情報を取得できるようなシステムについて設計した。新潟グループでは、これを GlycoEpitope という糖鎖抗原及びそれを認識する抗体情報について収集されているデータ

ベースを基本にシステム設計し実装した。本成果については金特任准教授らとともに *Bioinformatics* 誌に論文が掲載された (Kim, J. D., Wang, Y., Fujiwara, T., Okuda, S., Callahan, T. J., and Cohen, K. B. Open Agile text mining for bioinformatics: the PubAnnotation ecosystem. *Bioinformatics* 35(21):4372-4380 (2019). doi:10.1093/bioinformatics/btz227.)。さらに、GlycoEpitope で利用されているタームについて、関連する論文、疾患名、臓器名を取得するための仕組みを開発し、公開に向け準備中である。

糖鎖遺伝子の環境分布をデータベース化するため、糖鎖関連遺伝子の配列情報を dbCAN や CAZy より収集・分類したデータを参照にし、各種メタゲノムデータのリード配列をマッピングすることで糖鎖関連遺伝子を同定するためのアルゴリズムを開発した。これを様々な約 200 のメタゲノムデータに適用し、糖転移酵素、グリコシダーゼ、糖ヌクレオチドトランスポーターなどの基本的な糖鎖関連遺伝子について、それぞれの環境での特徴を考察できるデータの生成を行った。現在、これらの糖鎖関連遺伝子と環境との情報をデータベース化している。

グライコムクス・グライコプロテオミクスの質量分析データの受け入れを担うリポジトリ GlycoPOST の開発を実施した。この GlycoPOST は、プロテオーム統合データベースプロジェクト (代表: 石濱泰) で、すでに開発されている質量分析データのリポジトリである jPOST リポジトリの機能を継承し、新規にグライコムクス・グライコプロテオミクスのデータに特化する形で開発し、相互にデータの参照が可能となる他、高速なアップロードシステム Presto の採用、メタ情報の入力作業の簡便性といった特徴を引き継いだ状態で運用できるよう開発した。GlycoPOST 独自の仕様としては、MIRAGE ガイドラインとの互換性があげられ、MIRAGE Project の提唱する糖鎖関連実験を報告する際のガイドラインに準拠したメタデータの登録、インポートおよびエクスポートについての機能が実装されている。さらに、MIRAGE におけるメタデータの一部についてオントロジーを利用した検索を補助するための機能が実装されており、さらにメタ情報入力のサポートが強化されている。GlycoPOST は、*Nucleic Acids Research* 誌に論文 (Watanabe, Y., Kinoshita-Aoki, K. F., Ishihama, Y., Okuda, S. GlycoPOST realizes FAIR principles for glycomics mass spectrometry data. *Nucleic Acids Res.* 49(D1):D1523-D1528(2021). doi:10.1093/nar/gkaa1012.) を発表した。

【産総研グループ】

ACGG-DB (GGDB、GlycoProtDB、LfDB など) では、産総研の連携研究者の協力を得て、収載データの拡充、UI の改良を行い随時公開するとともに、ACGG-DB に収載されているデータを GlyCosmos へ共同利用するための開発を実施した。

安定的なデータの更新を行うために、データ提供者と協力し、取得情報の正確な公開に努めた。GlycoProtDB (<https://acgg.asia/db/gpdb/>) では新規データの公開に伴い検索用の分類を見直した結果、公開データの分類を実際の試料(がん細胞名やがん種など)で表示することとした。検索メニューで細胞を選択することにより表示されるタンパク質の違いが視覚的に判別できる様に改良した。GlycoProtDB 関連の論文の発表が進んでいることから、公開可能なデータも増加しており、最終年度内に大幅なデータの追加公開を予定している。

LfDB (<https://acgg.asia/db/lfdb/>) では、これまでに FAC による糖結合データを7件追加したが、最終年度も追加データの公開を予定している。

GGDB (<https://acgg.asia/db/ggdb/>) のアップデートに必要な論文情報の収集には、PubAnnotation (DBCLS 金氏) を利用するための Dictionary 開発を進めた。PubAnnotation において、Dictionary に基づいた論文の概要表示では該当する糖鎖遺伝子上に GGDB へのリンクが搭載

されている。すなわち Dictionary を充実化させることにより糖鎖遺伝子 (GGDB) との紐付けが可能になることから、糖鎖遺伝子毎に論文収集が可能となる。Dictionary 開発をさらに進め PubAn notation から糖鎖遺伝子関連論文を抽出するシステムを最終年度内に作製する。

ユーザーミーティングでのコメントから、GGDB の糖鎖遺伝子詳細ページでの表示方法 (タブ化や糖鎖構造と説明文の表示位置) や GlycoProtDB の捕集レクチンの正確な表示や GlycoRIDGE 結果のビューワー表示の改良を進めた。GlycoRIDGE では糖組成から連続した糖鎖構造の違いを明らかにできるが、糖鎖構造は推測になる場合があり、不正確な情報を示さない様に糖鎖合成経路に基づく表示方法に変更した。GlycoRIDGE 解析の論文も増えていることから、今後の公開に向けたデータ入力フォーマットを開発中である。

GGDB では、過去の論文に基づく遺伝子発現情報が表示されるが、発表されていない遺伝子も多数ある。最近の RNA-seq 解析などのデータが Human ProteinAtlas などのデータベースに格納されていることから、GGDB 内での表示やリンクなどを開発中である。

ACGG-DB の特徴として、全てのデータベース内に糖鎖構造という共通のアイテムが存在していることがある。データベース間の横断検索や GlyCosmos との連携の一環として、糖鎖構造表示の見直しを進めた。これまで JCGG-STR 表示されているものについて GlyYouCan に加え GlyCosmos Glycans との対応リストを作成し、存在しないものには新たな ID を付与した。LfDB の JCGG-STR では不正確な表示の修正も行うなど全面的な見直しを行なった。これにより、GlyCosmos Glycans を用いた糖鎖構造によるデータベース検索が可能となった。

また、ACGG-DB 内のクロスリンクを充実させる試みも進めた。GGDB から疾患に関わる糖鎖遺伝子 (GGDB) へのリンクに加え、GGDB 内で疾患情報と GGDB へのリンクを追加表示する様に修正した。現在レクチン名を用いた LfDB から GlycoProtDB データへのアクセスを開発中である。

最近の糖鎖研究においてグライコム解析が重要であり、特にレクチンマイクロアレイ解析は比較解析において有効である。計画当初に予定していなかった開発項目として、産総研の連携研究者の解析結果を基に創価大グループと共に LM-GlycomeAtlas (https://glycosmos.org/lm_glycomeatlas/index) を開発した。既に Ver. 2 も公開しており、正常マウスの臓器解析結果に加えて、モデルマウスの解析結果や組織のレクチン染色画像を追加した (Nagai-Okatani ら, Molecules (2019), J Proteome Res (2021))。解析結果のダウンロードや利用者のために Instruction movie を表示するなど、利便性の工夫をした。

以上の様に、これまでに開発された ACGG-DB のデータの追加と安定的な公開を進めたが、GlycoProtDB の大幅なデータ追加に向けたインターフェイスの改良とそれに合わせたデータ入力フォーマットの開発が進行中で今年度中に公開する予定である。GlyCosmos Glycans を用いたデータベース間の2次元的な繋がりが構築されており、ACGG-DB 内のクロスリンクも順調に進みつつある。各データベースのデータの提供や共通 ID の利用や LM-GlycomeAtlas の共同開発など GlyCosmos との連携も成功した。

(2) 実施内容のうちの特定項目の詳細

① 研究コミュニティを含むデータ提供者との連携・協業

民間発行の web サイト「グライコフォーラム」(生化学工業) において「糖とデータベース」シリーズを刊行し、糖鎖データベースの紹介を行なった。また、海外では MIRAGE との連携を通して、MIRAGE のオントロジーを開発し、GlycoPOST や UniCarb-DR で利用できるようにした。さらに、MIRAGE の Recommendations に GlyCosmos のリポジトリ GlyYouCan, GlycoPOST と UniCarb-DR が掲載されており、またレクチンアレイのデータベースとして LM-GlycomeAtlas が推奨されている。

日本糖質学会において GlyCosmos 運営委員会が設置され、日本糖質学会の会員に有用なポータルを運営できるように協議を行ってきた。

② データベース利用者への周知、利用者との連携・協業

GlyYouCan および GlyCosmos の Twitter を通して定期的につぶやいてコミュニティへの通知を行ってきた。また、GlyYouCan のバージョン3を論文として発表した (Fujita, A., Aoki, N. P., Shinmachi, D., Matsubara, M., Tsuchiya, S., Shiota, M., Ono, T., Yamada, I., & Aoki-Kinoshita, K. F. (2021). The international glycan repository GlyYouCan version 3.0. *Nucleic Acids Res.* 49(D1), D1529-D1533. doi: 10.1093/nar/gkaa947)。Society for Glycobiology や日本糖質学会の年会で展示ブースを通して利用方法について通知している。

糖鎖関連の質量分析データのリポジトリとして開発した GlycoPOST は、*Nucleic Acids Research* 誌に論文 (Watanabe, Y., Aoki-Kinoshita, K. F., Ishihama, Y., Okuda, S. GlycoPOST realizes FAIR principles for glycomics mass spectrometry data. *Nucleic Acids Res.* 49(D1):D1523-D1528(2021). doi:10.1093/nar/gkaa1012.) を発表すると共に糖鎖関連学会での広報にも努め、広く糖鎖研究者にデータベースの内容および利用方法について周知している。

ACGG では 2017 年 (香港) や 2019 年 (釜山) の学会中にデータベースの発表や紹介するリーフレットの配布などを通じてアジアの研究コミュニティへの周知に努めた。また、ACGG-DB は産総研の糖鎖研究グループの解析結果の公開を兼ねるとともに利用者との意見交換を定期的に行い、UI やビューワーへのコメントを基に改良を行なった。

③ 利用者にとって有用なデータ基盤の構築

GlyCosmos はセマンティック・ウェブ技術を用いてデータを SPARQL endpoint に格納しており、多くのアクセス方法を提供している。SPARQLList による API の提供、REST の API の提供、GlyCosmos のアップデートする度のダウンロードファイルの更新、そして SPARQL endpoint 自体の公開もしている。また、糖鎖遺伝子の発現情報をパスイヤ上に可視化し、合成される糖鎖構造の予測を可能にする GlycoMaple も公開した。

GlycoPOST は、jPOST プロジェクトで開発されたリポジトリシステムを応用し開発されており、質量分析データのようなファイルサイズが大きい場合でもデータデポジットがブラウザのみで効率よく実施できるファイルアップロード Presto システムが採用されている。また、メタ情報の入力もプリセットとして登録できることから、再度別プロジェクトで同じ実験条件を登録する際には、入力の手間が省けるというユーザーの登録作業を効率化できるシステムで運用されている。また、GlycoPOST は、米国 UC San Diego、Pieter C. Dorrestein 教授らが開発している GNPS (Global Natural Products Social Molecular Networking) という質量分析データの可視化を自動的に実施するシステムとの連携を進めており、より多くのユーザーが視覚的にもデポジットされた生データを確認できる環境を構築しつつある。

④ 持続的なデータベース運用体制の構築に向けた取り組み

JCGGDB として公開してきた DBの中から継続して公開が必要と考えられた DBについて GlyCosmos へ移管することについて、関係者に連絡し了承を得たものから移管準備を進めている。そして GlyCosmos 自体は日本糖質学会の公式ポータルとして承認されており、毎年運営委員会を開催している。さらに、MIRAGE の推奨リポジトリとして GlyCosmos のリソースが掲載されている。

⑤ 人材の育成

GlyCosmos の開発に多くの学部生および大学院生のアルバイト雇用をしてきた。これらの学生にウェブサーバーの構築やウェブフレームワークの利用・開発、ウェブアプリの開発を経験し、本プロジェクトに貢献した。またセマンティック・ウェブ技術についても学ぶことができ、多くのスキルアップになっている。

⑥ 国際連携・国際貢献

ACGG-DB を通して、上述の様にアジアの研究コミュニティへ周知し、利用者の拡大を図っている。また、GlySpace Alliance は数ヶ月おきに協議しており、国際連携を実施している。さらに MIRAGE を通して多くの利用者に通知している。さらに、糖鎖に関連する遺伝子、タンパク質、パスウェイの情報に関し、PubChem との間で相互リンクを行った。また、PDBj グループと協働し、wwPDB のデータ登録システム OneDep に PDB2Glycan を提供することで、wwPDB の糖鎖構造を含む全てのエントリーに、WURCS の追加を実現した。

⑦ その他

特になし。

§4. 主要なデータベースの利活用状況

1. アクセス数

(1) 実績

表 2 研究開発対象の主要なデータベースの利用状況(月間平均)

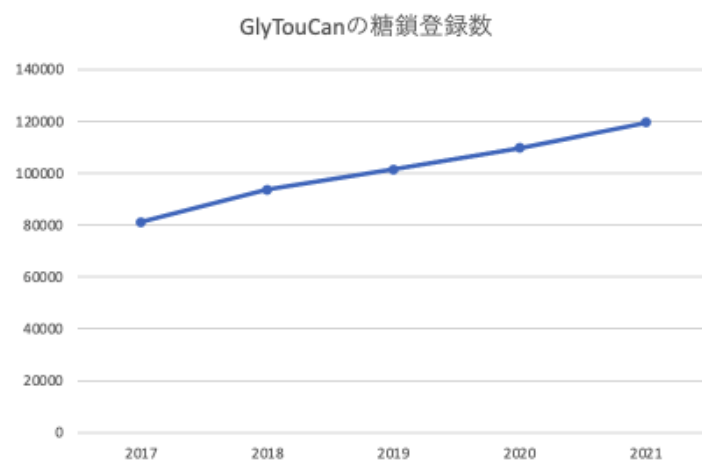
名称	種別	2017年度	2018年度	2019年度	2020年度	2021年度 (10月時点)
GlyTouCan	訪問者数	6,128	4,338	1,875	1,034	578
	訪問数	7,098	5,660	3,591	2,289	984
	ページ数	212,286	303,952	205,409	32,120	28,256
GlyCosmos	訪問者数	(公開前)	(公開前)	665	1,198	797
	訪問数	(公開前)	(公開前)	1,986	2,698	1,783
	ページ数	(公開前)	(公開前)	27,145	229,561	366,562

(2) 分析

- ・ GlyTouCan は公開当初、多くの訪問者がアクセスし、多くのデータが登録された。それから減少してきた理由としては、GlyGen や GlyCosmos など GlySpace Alliance のメンバーが GlyTouCan ID を利用しているが、それらのサイトで糖鎖構造と関連情報が提供されているため、本体の GlyTouCan にアクセスする必要がなくなったからである。また、GlyTouCan が API システムも提供しており、HP にアクセスせずに API を通して登録ができるようにしていることもページ数減少の原因の一つであると考えられる。一方、後に示すように、GlyTouCan への登録数は年々増加しており、必要性は確実である。
- ・ GlyCosmos ポータルは 2019 年度に公開した以来、徐々にアクセス数が増加してきた。2021 年度の途中であるが、すでに GlyTouCan のページ数を超えており、今後増加すると期待できる。

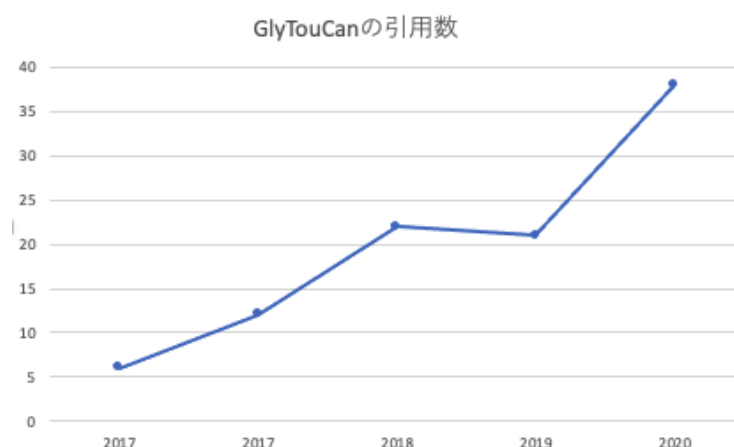
2. データベースの利用状況を示すアクセス数以外の指標

GlyTouCan における糖鎖構造の登録件数の推移を以下の図に示す。



継続的に登録件数が増加しており、MIRAGEの Recommended repositories (<https://www.beilstein-institut.de/en/projects/mirage/recommendations/>)の中にも掲載されているため、今後も継続すると予想できる。

なお、GlyTouCan の主な論文の引用数も年々増加していることも以下の図で示す。GlyTouCan への直接のアクセス数が減少している理由としては、GlyCosmos や GlyGen など他のサイトから糖鎖構造情報が調べられているからであると考えられる。また、データベース開発者は GlyTouCan Partner システムで API を通して糖鎖構造を登録されている。しかし糖鎖構造を登録するためには必ず GlyTouCan を利用する必要があるため、今後の維持管理が必要である。



3. データベースの利活用によりもたらされた産業への波及効果や科学技術のイノベーション（産業や科学技術への波及効果）
特にない。

§5. 今後の展開

今回、GlyComb の基盤構築はできたが、プロトタイプの公開までしかできず、糖ペプチド配列に対するリポジトリに限られている。しかし、糖タンパク質は複雑であり、糖ペプチドを糖タンパク質にマッピングし、それらについてもアクセッション番号が必要である。さらに、糖脂質やグリコシドのような化合物などについて糖鎖情報も存在する。これらに対するリポジトリシステムは現在開発中の GlycoPOST を始め、jPOST、MetaboBank などにも厳密に作成する必要がある。海外でも Protein Ontology (PRO) の利用が普及しており、PRO との連携も不可欠になると考える。

また、タンパク質に付加される糖鎖以外に、糖鎖を認識するタンパク質やウイルスに関する情報も少ない。このような情報は現在文献にしか保管されていない。GlyGen プロジェクトにおいて糖鎖アレイリポジトリが開発されたが、レクチンアレイのリポジトリは存在しない。今回、産総研との連携を通して LM-GlycomeAtlas がバージョン2まで構築できたが、レクチンアレイ実験者が持っている実験結果をさらに集めて可視化するシステムに発展させたい。すでに MIRAGE にはレクチンアレイのガイドラインが作成中であり、近日中に公開される予定である。このガイドラインに携わった産総研のメンバーと一緒に開発できると良いと考えている。

さらに、ヒューマングライコムプロジェクトが文科省のロードマップ 2020 に掲載され、そこにも GlyCosmos との連携が計画されている。糖鎖のカタログを作成し、未病状態や認知症状態との相関性を解析する計画を含む。また、糖鎖アトラスを用いて糖鎖の生合成アトラスを構築し、糖鎖の合成予測・シミュレーションシステムも計画中である。GlyCosmos で提供している GlycoMaple をはじめ、このように糖鎖の合成に関わる糖鎖遺伝子の反応速度パラメータやゴルジ体における局在を調べてデータベース化する。このような情報が整理されてシミュレーションによる検証ができると、特定の糖鎖構造の合成条件なども可能になり、創薬のみならずバイオプロセッシング分野にも貢献でき、農業やエネルギー分野への貢献が考えられる。

§6. 自己評価

- ・ 目標達成状況については概ね達成できて、計画していた内容以上に、GlySpace Alliance や PubChem との連携が劇的に進み、GlyCosmos の普及が促進された。DBCLS が開発されている TogoDX とも連携ができて、セマンティック・ウェブ技術を用いて開発できて良かった。当初は GlyTouCan の問題が様々あり、いまだに完璧には修復されていないが、最低限の運営はできており、GlyComb の開発に着手できて公開の目処は立てることができた。また、GlyComb の慎重な開発により、GlyTouCan や UniCarb-DR の古いシステムへの移行もできるようになっているため、今後はこれらの作業に入りたいと考えている。また、産総研からの要望があり、レクチンマイクロアレイのリポジトリ開発も検討したいと考えている。
- ・ 本プログラムの趣旨に対して、最終的に TogoDX との連携ができたことで、本研究課題が大きく貢献できたと考えられる。これまで隔離されていた糖鎖構造が糖鎖遺伝子や糖タンパク質との関係を始め、疾患や化合物、生物種の情報も通して連携できるようになった。また、GlySpace Alliance を構築し参加することで、より広い範囲で糖鎖関連情報の品質保証、標準化、公開、共有ができて、本プログラムの推進項目と合致する。GlyCosmos の利用をさらに普及し、医療関係者以外に環境分野やエネルギー分野、農学関係の研究者とも連携し、糖鎖情報を容易に閲覧・取得・解析できるシステムを提供したい。

§7. 外部発表等

1. 原著論文発表

(1) 論文数概要

種別	国内外	件数
発行済論文	国内(和文)	2件
	国際(欧文)	9件
未発行論文	国内(和文)	0件
	国際(欧文)	0件

(2) 論文詳細情報

1. 細田正恵, 小野多美子, 木下聖子. クローズアップ実験法 331 「GlyCosmos」利用ガイド~糖鎖の何がわかる?何ができる? 実験医学. Vol.39 (3), 2021.
2. 木下聖子. Human Glycome がもたらす未来: 糖鎖インフォマティクスの世界統合. Journal of Japanese Biochemical Society 92(3): 398-402 (2020). doi:10.14952/S-EIKAGAKU.2020.920398
3. Feng Z, Westbrook JD, Sala R, Smart OS, Bricogne G, Matsubara M, Yamada I, Tsuchiya S, Aoki-Kinoshita KF, Hoch JC, Kurisu G, Velankar S, Burley SK, Young J Y. Enhanced validation of small-molecule ligands and carbohydrates in the Protein Data Bank. Structure. 2021 Apr 1;29(4):393-400.e1. doi: 10.1016/j.str.2021.02.004. Epub 2021 Mar 2. PMID: 33657417; PMCID: PMC8026741.
4. Yamada I, Campbell MP, Edwards N, Castro LJ, Lisacek F, Mariethoz J, Ono T, Ranzinger R, Shinmachi D, Aoki-Kinoshita KF. The Glycoconjugate Ontology GlycoCoO for standardizing the annotation of glycoconjugate data and its application. Glycobiology. 2021 Feb 23:cwab013. doi: 10.1093/glycob/cwab013. Epub ahead of print. PMID: 33677548.
5. Fujita A, Aoki NP, Shinmachi D, Matsubara M, Tsuchiya S, Shiota M, Ono T, Yamada I, Aoki-Kinoshita KF. The international glycan repository GlyTouCan version 3.0. Nucleic Acids Res. 2021 Jan 8;49(D1):D1529-D1533. doi: 10.1093/nar/gkaa947. PMID: 33125071; PMCID: PMC7779025.
6. Watanabe, Y., Kinoshita-Aoki, K. F., Ishihama, Y., Okuda, S. GlycoPOST realizes F AIR principles for glycomics mass spectrometry data. Nucleic Acids Res. 49(D1): D1523-D1528(2021). doi:10.1093/nar/gkaa1012.【PMID33174597】
7. Yamada I, Shiota M, Shinmachi D, Ono T, Tsuchiya S, Hosoda M, Fujita A, Aoki NP, Watanabe Y, Fujita N, Angata K, Kaji H, Narimatsu H, Okuda S, Aoki-Kinoshita KF. "The GlyCosmos Portal: a unified and comprehensive web resource for the glycosciences", Nat Methods. 17(7):649-650, 2020. (doi: 10.1038/s41592-020-0879-8).
8. Angata K, Sawaki H, Tsujikawa S, Ocho M, Togayachi A, Narimatsu H. "Glycogen Expression Profiling of Hepatic Cells by RNA-Seq Analysis for Glyco-Biomarker Identification", Front Oncol. 10:1224, 2020. (doi: 10.3389/fonc.2020.01224).
9. Nagai-Okatani C, Zou X, Fujita N, Sogabe I, Arakawa K, Nagai M, Angata K, Zhang Y, Aoki-Kinoshita KF, Kuno A. "LM-GlycomeAtlas Ver. 2.0: An Integrated Visualization for Lectin Microarray-based Mouse Tissue Glycome Mapping Data with Lectin Histochemistry", J Proteome Res. 20(4):2069-207, 2021. (doi: 10.1021/acs.jproteome.0c00907).
10. Y. F. Huang, K. Aoki, S. Akase, M. Ishihara, Y. S. Liu, G. Yang, Y. Kizuka, S. Mizumoto, M. Tiemeyer, X. D. Gao, K. F. Aoki-Kinoshita, M. Fujita. Global mapping of glycosylation pathways in human-derived cells. *Developmental cell*, 2021, in pre

ss. (doi: 10.1016/j.devcel.2021.02.023).

11. Kim, J. D., Wang, Y., Fujiwara, T., Okuda, S., Callahan, T. J., and Cohen, K. B. Open Agile text mining for bioinformatics: the PubAnnotation ecosystem. *Bioinformatics* 35(21):4372-4380 (2019). (doi: 10.1093/bioinformatics/btz227).

2. その他の著作物(総説、書籍など)

1. 木下聖子. Human Glycome がもたらす未来：糖鎖インフォマティクスの世界統合. *Journal of Japanese Biochemical Society* 92(3): 398-402 (2020). doi:10.14952/SEIKAGAKU.2020.920398

3. 国際学会発表及び主要な国内学会発表

(1) 概要

種別	国内外	件数
招待講演	国内	1 件
	国際	2 件
口頭発表	国内	1 件
	国際	0 件
ポスター発表	国内	5 件
	国際	3 件

(2) 招待講演

〈国内〉

1. 木下聖子. 糖鎖とプロテオミクスの融合を目指す GlyCosmos Portal. 第 43 回日本分子生物学会年会、12 月 2 日～4 日、招待講演、オンライン.

〈国際〉

1. K. F. Aoki-Kinoshita, The GlyCosmos Portal. 11th MIRAGE Meeting 2020, 8 月 25 日、招待講演、オンライン.
2. K. F. Aoki-Kinoshita. The GlyCosmos Glycoscience Portal: integrating glycan-related omics data. 中国糖生物学会. 招待講演. 9 月 20 日～21 日、無錫 (オンライン参加) 中国.

(3) 口頭講演

〈国内〉

1. 木下聖子. 糖鎖科学ポータル GlyCosmos の最新情報. 第 43 回日本分子生物学会年会、2020 年 12 月 2 日～4 日、口頭発表、オンライン.

(4) ポスター発表

〈国内〉

1. 土屋伸一郎、山田一作、木下聖子、データベース検索が可能な糖鎖構造可視化インターフェイス SugarDrawer の開発、第 39 回日本糖質学会年会(誌上開催)、2020 年 11 月 21 日
2. 松原正陽、山田一作、木下聖子、PDB 糖鎖構造情報抽出ソフトウェア PDB2Glycan の開

- 発、第39回日本糖質学会年会(誌上開催)、2020年11月21日
- 岡谷千晶、木下聖子、藤田典昭、佐藤隆、安形清彦、久野敦、組織グライコームマップデータベース LM-GlycomeAtlas の開発、第39回日本糖質学会年会(誌上開催)、2020年11月21日
 - 新町大輔、藤田典昭、富岡あづさ、永井美杉、荒川康一、曾我部勇、岡谷千晶、久野敦、安形清彦、成松久、木下聖子、梶裕之、糖鎖関連データベース連携の構築(ACGG-DB)、トーゴの日シンポジウム 2021、2021年10月5日
 - 細田正恵、山田一作、塩田正明、高橋悠志、新町大輔、小野多美子、土屋伸一郎、松原正陽、木村直貴、瀬野瑛、藤田昌大、金進東、岡谷千晶、久野敦、藤田典昭、安形清彦、梶裕之、成松久、奥田修二郎、木下聖子、糖鎖科学ポータル GlyCosmos の利便性向上、トーゴの日シンポジウム 2021、2021年10月5日

〈国際〉

- Chiaki Nagai-Okatani, Kiyoko F Aoki-Kinoshita, Xia Zou, Noriaki Fujita, Misugi Nagai, Kiyohiko Angata, Yan Zhang, and Atsushi Kuno, Update on LM-GlycomeAtlas: An integrated visualization for mouse tissue glycome mapping data with lectin histochemistry, HUPCO Connect 2020(オンライン開催)、2020年10月19日
- K. F. Aoki-Kinoshita, Poster 31: Introducing GlycoSim for online simulations of glycan biosynthesis processes. GlycoT 2020, 6月22日、ポスター発表(オーラルポスターとして選抜)、オンライン。
- K. F. Aoki-Kinoshita. The GlyCosmos portal as a partner in the GlySpace Alliance to provide access to integrated glycan-related data resources. Society for Glycobiology Annual Meeting, 11月9日~12日、ポスター発表、オンライン。

4. 知財出願

(1) 出願件数

種別	件数	
特許出願	国内	0件
	国外	0件
その他の知的財産出願		0件

(2) 一覧

① 国内出願

該当なし。

② 海外出願

該当なし。

③ その他の知的財産権

該当なし。

5. 受賞・報道等

(1) 受賞

該当なし。

(2) メディア報道

該当なし。

(3) その他

該当なし。

§8. 研究開発期間中の活動

1. 進捗ミーティング

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2017年 10月10日	チーム内ミーティング(非公開)	創価大学	14人	研究進捗報告のためのミーティング
2018年 1月25日	チーム内ミーティング(非公開)	創価大学	10人	同上
2018年 2月9日	チーム内ミーティング(非公開)	産業技術総合研究所	16人	PubAnnotation 利用のためのミーティング
2018年 5月22日	DB 全体会議	野口研究所	13人	進捗報告、検討事項の確認
2018年 9月25日	DB 全体会議	野口研究所	18人	同上
2019年 1月25日	DB 全体会議	野口研究所	19人	同上
2019年 2月19日 ~22日	GlycoHackathon	産業技術総合研究所	16人	GLIC&糖鎖インフォマティクス若手の会、PJの共同開発を促進するため
2020年 10月2日	チーム内ミーティング(非公開)	Zoom	18人	研究進捗報告のための全体ミーティング
2020年 4月3日	チーム内ミーティング(非公開)	Skype	13人	同上
2020年 4月17日 7月17日 8月21日 9月18日 10月16日 11月13日 12月11日 2021年 1月15日 2月26日 3月26日	チーム内ミーティング(非公開)	Skype Microsoft Teams	5人	ACGG-DBの進捗報告会
2020年 4月23日 5月15日 6月19日	チーム内ミーティング(非公開)	Skype	5人	キュレーションシステム(ACGG-DBとの連携)およびGlycoPOSTの進捗報告会
2020年 4月30日 6月4日 6月25日 7月31日 8月27日 10月22日 11月10日 11月24日	チーム内ミーティング(非公開)	Skype	4人	GlyCosmosとGlycoNAVIとの連携会議

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
12月15日 2021年 1月12日 2月9日 3月2日 3月30日				
2020年 5月21日 6月18日 7月9日 8月6日 9月10日 10月30日 11月20日 12月18日 2021年 2月19日 3月19日	チーム内ミーティング(非公開)	Pragli	5人	GlycoPOSTの進捗報告会

2. 主催したワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ活動等

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2018年 3月5日 ～9日	International Life Science Integration Workshop	中野サンプラザ	38人	ライフサイエンス分野のデータベース連携促進のため

以上

別紙 研究開発対象のデータベース等

No.	正式名称	別称	概要	URL	公開日	状態	分類	生命科学系データベースアーカイブ	NBDCヒトデータベース	NBDC RDFポータル	関連文献 (論文リストに記載があれば、その番号でも可)
1	GlyCosmos Portal	GlyCosmos	糖鎖科学ポータル	https://glycosmos.org/	2019年4月1日	新規	データベース等	提供前	提供前	提供前	7
2	GlycoPOST		グライコミクス・グライコプロテオミクス質量分析データのリポジトリ	https://glycopost.glycosmos.org	2019年4月1日	継続・発展	データベース等	提供前	提供前	提供前	6
3	GlyTouCan		糖鎖構造リポジトリ	https://glytoucan.org	2015年7月15日	継続・発展	データベース等	提供前	提供前	公開済	Fujita, A., Aoki, N. P., Shinmachi, D., Matsubara, M., Tsuchiya, S., Shiota, M., Ono, T., Yamada, I., & Aoki-Kinoshita, K. F. (2021). The international glycan repository GlyTouCan version 3.0. Nucleic Acids Res. 49(D1), D1529-D1533.
4	UniCarb-DR		グライコミクス・リポジトリ	https://unicarb-dr.glycosmos.org/	2020年8月10日	新規	データベース等	提供前	提供前	提供前	
5	Asian Community of Glycoscience and Glycotechnology Database	ACGG-DB	アジアにおける糖鎖関連実験に基づくデータベースポータル	https://acgg.asia/db/		継続・発展	データベース等	提供前	提供前	提供前	
6	GlycoNAVI		複合糖質構造に関連したデータを収載したデータベース	https://glyconavi.org	2011年4月1日	継続・発展	データベース等	提供前	提供前	提供前	