

2023年度 研究開発実施報告

概要

研究開発課題名	異分野融合を志向した糖鎖科学ポータルへのデータ拡充と品質向上
開発対象データベースの名称(URL)	GlyCosmos Glycoscience Portal (https://glycosmos.org)
研究代表者氏名	木下 聖子 (50440235)
所属・役職	学校法人創価大学 教授 (2024年3月時点)



©2024 木下 聖子(創価大学) licensed under CC表示4.0国際

目次

概要	1
目次	2
§1. 研究実施体制	3
§2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等	3
(1) データベース一覧	3
【主なデータベース】	3
【その他のデータベース】	3
(2) ツール等一覧	3
§3. 実施内容	5
(1) 本年度の研究開発計画と達成目標	5
【創価大学】	5
【野口研究所】	8
【新潟大学】	9
【産総研】	10
(2) 進捗状況	11
【創価大学】	11
【野口研究所】	13
【新潟大学】	15
【産総研】	15
§4. 成果発表等	17
(1) 原著論文発表	17
① 論文数概要	17
② 論文詳細情報	17
(2) その他の著作物(総説、書籍など)	17
(3) 国際学会および国内学会発表	17
① 概要	17
② 招待講演	18
③ 口頭講演	18
④ ポスター発表	19
(4) 知的財産権の出願(国内の出願件数のみ公開)	21
出願件数	21
(5) 受賞・報道等	21
① 受賞	21
② メディア報道	21
③ その他の成果発表	21
§5. 主要なデータベースの利活用状況	22
(1) アクセス数	22
① 実績	22
② 分析	22
(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	22
(3) データベースの利活用により得られた研究成果(生命科学研究への波及効果)	22
(4) 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)	23
§6. 研究開発期間中に主催した活動(ワークショップ等)	24
(1) 進捗ミーティング	24
(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	24

§1. 研究実施体制

グループ名	研究代表者または主たる共同研究者氏名	所属機関・役職名	研究題目
創価大学グループ	木下 聖子	学校法人創価大学・教授	GlyCosmos Portal開発の総括、国際連携
野口研究所グループ	山田 一作	公益財団法人野口研究所・研究室長	糖鎖科学研究支援ツールおよびGlyCosmosの開発
新潟大学グループ	奥田 修二郎	新潟大学・教授	糖鎖に関連する質量分析データリポジトリの開発およびグライコプロテオミクスデータの連携
産総研グループ	久野 敦	産業技術総合研究所・研究グループ長	LM-GlycomeAtlas、LM-GlycoRepoおよびGlyCombリポジトリの開発と拡充

§2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等

(1) データベース一覧

【主なデータベース】

No.	名称	別称・略称	URL
1	GlyCosmos Glycoscience Portal	GlyCosmos	https://glycosmos.org

【その他のデータベース】

No.	名称	別称・略称	URL
1	LM-GlycoRepo		未定
2	LM-GlycomeAtlas		https://glycosmos.org/lmglycomeatlas
3	GlycomeAtlas		https://glycosmos.org/glycomeatlas
4	GlycoPOST		https://glycopost.glycosmos.org/
5	GlyComb		https://glycomb.glycosmos.org/ (予定)
6	GlyTouCan		https://glytoucan.org
7	UniCarb-DR		https://unicarb-dr.glycosmos.org
8	GlycoPathwayRepo		未定

(2) ツール等一覧

No.	名称	別称・略称	URL
1	GRable		https://glycosmos.org/grable
2	GlycoMaple		https://glycomaple.glycosmos.org
3	WURCSFramework		https://gitlab.com/glycoinfo/wurcsframework
4	MolWURCS		https://gitlab.com/glycoinfo/molwurcs

No.	名称	別称・略称	URL
5	GlycanBuilder4Web		https://gitlab.com/glyconavi/glycanbuilder2web
6	GlycanBuilder2		https://github.com/glycoinfo/GlycanBuilder2
7	Glycoworkbench		
	https://gitlab.com/glycoinfo/glycoworkbench		
8	WURCSRDF		https://gitlab.com/glycoinfo/wurcsrdf
9	GlycanFormatConverter		https://gitlab.com/glycosmos/gfc
10	MicroGlycoCurator		未定

§3. 実施内容

(1) 本年度の研究開発計画と達成目標

【創価大学】

1. RDF データの整理・改良(創価大・DBCLS)

1.1. 糖タンパク質およびレクチンの RDF データの品質確認・整理

2年度目は糖タンパク質およびレクチンデータの shape expression による解析を実施し、品質確認および改良を行う。

1.2. RDF データの拡充

初年度同様、トリプル生成を行い、データの拡充を実施する。特に、レクチンデータについて、創価大メンバーに加わっていただいた平林淳教授のフィードバックを受けて、対処するとともに、GlyCosmos 運営委員会にも参加していただく。

2. リポジトリの設計・開発・公開

2.1. GlyTouCan の改良(創価大・野口研)

GlyTouCan を改良するために GlyComb の仕組みを利用し、バージョン4として公開する。初年度に GlyComb を安定化させ、そのシステムを GlyTouCanV4 として利用する。この際に十分にユーザーとの連携を取り、変更点などを通知し、事前に連絡を徹底する。特にパートナーとなるデータベース開発者との連携を図り、安定した移行を目指す。

2.2. LM-GlycoRepo の開発・公開(創価大・産総研)

初年度に設計した LM-GlycoRepo の開発に取り組む。レクチン chip の選択、レクチンの選択、実験のコンディション、動物種、疾患、組織名などのメタ情報の入力、画像の取り込み、自動比較ツール(サンプル取得部位の自動特定ツール)と確認修正用ツールなどの開発を行う。設計段階で考えられた問題点として、LM-GlycoRepo の開発に合わせてデータ公開用の LM-GlycomeAtlas 側も修正を行う。2年目内のプロトタイプ completion のために、産総研グループおよび共同研究者の方にプロトタイプの試験を行ってもらい、リポジトリの操作性の向上を図り、ユーザーの意見を取り入れる。リポジトリデータの確認やユーザー管理、データへの ID の付与など、データ公開までの運用側の作業を整理するとともに問題点を明らかにし、運用方法を確定させ、年度内の公開を目指す。

2.3. GlyComb の糖ペプチド・糖タンパク質データ登録システムの運営(創価大・産総研・野口研)

初年度に進めた GlyComb の登録システムの運営を行うために、GlycoProtDB 内の糖ペプチド情報を GlyComb へ登録し ID の発行を進める。糖ペプチドのビューワー表示や GlyCosmos とのリンクなどの動作検証や公開した糖ペプチド・糖タンパク質の登録システムを運用し、ユーザーからのトラブルやフィードバックを積極的に取り入れて、使いやすいシステムにする。

2.4. GlyComb の糖脂質・配糖体データ登録システムの開発(創価大・野口研・PubChem)

初年度に設計した糖脂質・配糖体データの登録システムの開発に取り組む。この際、PubChem の関連データを用いてテストし、安定なシステムにする。

2.5. MicroGlycoRepo の開発(創価大)

初年度に設計した微生物糖鎖データリポジトリの開発に取り組む。当初はテキストデータの登録を確

実にし、その後、画像データとの連携と外部データベースとのリンクを取り入れるように開発を進める。

2.6. GlycoPathwayRepo の運営(創価大)

初年度にプロトタイプとして公開した糖鎖パスウェイリポジトリを運用し、ユーザーからのトラブルやフィードバックを積極的に取り入れて、使いやすいシステムにする。

2.7. 【追加実施】GlycoPOST サーバーの移設(創価大、新潟大)

GlycoPOST を創価大へ移設作業を継続して実施する。移設後のデータバックアップ体制の構築と管理体制を再構築する。

3. 関連データベースとの連携

3.1. GlyCosmos と微生物関連データベースとの連携(創価大学・新潟大学)

GlyCosmos(特に MicroGlycoDB や MicroGlycoRepo)と Microbiome Datahub や MGDB との連携について検討する(創価大・新潟大)

3.2. ACGG-DB および GlycoNAVI との連携(創価大・産総研・野口研)

初年度に引き続き、ACGG-DB および GlycoNAVI との連携を維持・改良していく。糖タンパク質の新規糖ペプチドデータ(ACGG-DB, GlycoProtDB)や複合糖質の新規糖鎖データ(GlycoNAVI)は GlyCosmos へのデータの提供で連携している。これまでの連携を促進させるために、新規データの追加をリポジトリと連動させて GlyCosmos のデータベースに追加と ACGG-DB と GlycoNAVI への追加を連動させるシステムを開発する。さらにキュレーションシステムの開発が進めば、登録データにキュレーションした情報を自動的に付加してデータベースで共有させる。

3.3. GlycoPOST と UniCarb-DR の連携(創価大・新潟大)

UniCarb-DR のスペクトル可視化機能を GlycoPOST から参照できるように機能拡張し、統一性を高めユーザビリティの向上を図る。また、それぞれに登録されているデータを参照するための API を設計し、双方からのデータの参照が可能なシステムの設計と開発を進める。

3.4. MIRAGE との連携強化(創価大)

MIRAGE Working Group に積極的に GlyCosmos リポジトリ(本年はは特に GlyComb)を紹介し、推奨リポジトリとして認められるようにする。本年度はまた GlycoPOST に LC ガイドラインを導入し、UniCarb-DR との連携についても議題としてあげる。

3.5. 他のメジャーなデータベースとの連携(創価大)

糖タンパク質や糖脂質のデータベースを含む UniProt や LIPID MAPS などとの連携を継続する。昨年度、UniProt との相互リンクの準備が進み、今年度は LIPID MAPS と連携し、相互リンクをつけられるようにする。なお、ヒューマングライコムアトラスプロジェクト(HGA)の始動により、TOHSA ナレッジベースとの連携体制を構築する。

4. キュレーションシステムの拡張開発(全員)

4.1. アノテーション自動更新システムの完成

PubAnnotation を通した自動アノテーションシステムを完成させる。この時点で PubDictionary の辞書データが完成しており、更新されたら PubAnnotation にも自動的に反映され、適切な文献抽出が

できるようにする。

4.2. 糖鎖構造の画像認識システム導入

糖鎖構造の情報を文献などの画像から糖鎖構造を認識し、WURCS を生成し、GlyTouCan ID を得るシステムを開発してきたが、まだ未完成であるため、このシステムを完成させて、キューレーションシステムのモジュールとして導入する。

4.3. データリソースへのパイプラインの設計

上記の機能を利用し、GlyCosmos のデータリソースに情報を追加できるパイプラインを設計する。基本的には現在運営している GlyTouCan の糖鎖構造のバッチ処理システムを応用する計画である。

5. ツール開発

本プロジェクトの基盤で利用される以下の必要なツールを開発する。

5.1. HELM 形式およびツールの WURCS 対応(創価大)

前年度に HELM のルールおよびエディターを調査した結果を踏まえ、WURCS を導入し、GlyComb で利用できるか検討する。

5.2. 【追加実施】糖鎖解析ソフトウェア(GRable)の GlyCosmos での公開(産総研・創価大)

質量分析装置を用いて取得される糖ペプチド上の糖鎖組成を網羅的かつ詳細に解析するソフトウェア(GRable)を産総研にて開発した。本ソフトウェアを多分野の研究者に使用してもらうため、使用方法を含めたドキュメントを整備し、R4 年度末に GlyCosmos 上にて一般に公開・運用を開始した。本年度は、ソフトウェアのユーザビリティ向上を目的として、データの登録から解析完了までを一通で処理するための改良を行う。また、ユーザーの管理方法を検討し、秘匿性の高いデータの解析にも対応できるよう改良を行う。

5.3. 【追加実施】GlycoMaple の改良

現在、ヒトの糖鎖遺伝子発現情報を可視化するシステムとして大好評であるが、マウス版が欲しいとの要望が寄せられているため、マウス版の GlycoMaple を開発する。また、遺伝子発現だけではなく、糖鎖の検出量も可視化できるようにする。既存のソフトウェアは現在 GitLab 上においてあり、オープンソースとして公開している。マウスの糖鎖遺伝子情報はすでに GlyCosmos に入っており、現在可視化している糖鎖構造を個別に囲んで検出量を表示できるようにする必要がある。そのためには、画像から文字列で表す形式に変換し、GlyTouCan ID と結びつけて、数値情報を反映できるようにする。さらに、GlycoMaple のヒトとマウス版両方に対して、パスウェイ情報の RDF 化も行う。現在 GlyCosmos には Reactome のパスウェイ情報が格納されているが、これは Reactome のデータが RDF 化されているからであり、統合しやすかったからである。GlycoMaple は単独したツールとして現在提供しており、GlyCosmos の他のデータとのつながりがない状況である。したがって、最終的に糖鎖遺伝子情報や糖鎖構造情報も RDF 化し、既存の Data Resources とつなげる。

6. ユーザーワークショップなどの開催・ユーザー・アクセス数の増加(全員)

初年度に引き続き、定期的にユーザーとの交流を行い、フィードバックを収集する。また、関連学会での発表も継続的に行う。今年度は台湾で開催される GLYCO26 で代表者が Glycoinformatics Workshop を

オーガナイズすることになったため、国内外の糖鎖インフォマティクス研究者に呼び掛けて開催する予定である。

【野口研究所】

昨年度に引き続き、リポジトリの開発・運営・改良、関連データベースとの連携、キュレーションシステムの改良、ツールの開発とユーザーとの連携を行う計画である。

2. リポジトリの設計・開発・公開

2.1 GlyTouCan の改良(創価大・野口研)

GlyTouCan を改良するために GlyComb の仕組みを利用し、バージョン4として公開する。初年度に GlyComb を安定化させ、そのシステムを GlyTouCanV4 として利用する。この際に十分にユーザーとの連携を取り、変更点などを通知し、事前に連絡を徹底する。特にパートナーとなるデータベース開発者との連携を図り、安定した移行を目指す。

2.2 GlyComb の糖脂質・配糖体データ登録システムの開発(創価大・野口研・PubChem)

初年度に設計した糖脂質・配糖体データの登録システムの開発に取り組む。この際、PubChem の関連データを用いてテストし、安定なシステムにする。

3. 関連データベースとの連携

3.1 GlyCosmos と GlycoNAVI の連携(創価大・野口研)

引き続き、GlycoNAVI との連携を維持・改良していく。複合糖質の新規糖鎖データは GlyCosmos へのデータの提供で連携している。これまでの連携を促進させるために、新規データの追加をリポジトリと連動させて GlyCosmos のデータベースに追加と GlycoNAVI への追加を連動させるシステムを開発する。さらにキュレーションシステムの開発が進めば、登録データにキュレーションした情報を自動的に付加してデータベースで共有させる。

4. キュレーションシステムの拡張開発(全員)

4.1 アノテーション自動更新システムの完成

PubAnnotation を通した自動アノテーションシステムを完成させる。この時点で PubDictionary の辞書データが完成しており、更新されたら PubAnnotation にも自動的に反映され、適切な文献抽出ができるようにする。

4.2 データリソースへのパイプラインの設計

上記の機能を利用し、GlyCosmos のデータリソースに情報を追加できるパイプラインを設計する。

5. ツール開発

本プロジェクトの基盤で利用される以下の必要なツールを開発する。

5.1 糖鎖構造変換ツールの機能分割(野口研)

GlycanFormatConverter の変換機能について、形式毎に機能を分割し、保守性を高める。

5.2 糖鎖描画ツールの機能分割(野口研)

機能分割について検討する。主に、SNFG シンボルの生成機能、画像入出力機能、GWS 形式変換機能、各種テキスト形式の入出力機能、糖鎖フラグメンテーション機能を分割し、モジュール化する。

5.3 質量分析データ解析ツールの機能分割(野口研)

機能分割について検討する。主に、MS データの入出力、MSピークピック、MSアノテーション、MSアノテーション結果比較、MSピークリストの可視化、MSアノテーションの可視化、MS/MS データの差分アノテーション機能を分割し、モジュール化する。

5.4 【追加実施】タンパク質の特徴量を計算するツールの開発

追加実施課題として、タンパク質の特徴量を計算するツールの開発を実施する。

6. ユーザーワークショップなどの開催・ユーザー・アクセス数の増加(全員)

初年度に引き続き、定期的にユーザーとの交流を行い、フィードバックを収集する。また、関連学会での発表も継続的に行う。

【新潟大学】

2. リポジトリの設計・開発・公開

2.1. 【追加実施】GlycoPOST の創価大への移設(創価大・新潟大)

GlycoPOST を創価大へ移設作業を継続して実施する。移設後のデータバックアップ体制の構築と管理体制を再構築する。

3. 関連データベースとの連携

3.1. UniCarb-DR と GlycoPOST との連携(創価大・新潟大)

UniCarb-DR のスペクトル可視化機能を GlycoPOST から参照できるように機能拡張し、統一性を高めユーザビリティの向上を図る。また、それぞれに登録されているデータを参照するための API を設計し、双方からのデータの参照が可能なシステムの設計と開発を進める。

3.2 GlyCosmos と jPOST との連携

GlycoPOST および jPOST に登録されてきた糖鎖や糖タンパク質データを GlyCosmos と連携するための基盤の設計を進める。生データ内に含まれる対象データを抽出するための仕組みの設計からはじめ、効率的にデータ連携できる環境を構築する。jPOST プロジェクトで計画されている UniPOST への連携のための基本的な設計を開始する。リポジトリに登録されたデータについてさらに情報を増やすことで、どういうデータが登録されているかを迅速に参照できる体制を構築するための最初として、これまでに開発してきた PubAnnotation および PubDictionaries を応用したキュレーションシステムとの連携を進める。そのため、登録データ内に含まれるキュレーションの入力対象となるデータの整理とそれをキュレーションするためのシステムの設計を実施する。

3.3 GlyCosmos と微生物関連データベースとの連携(創価大学・新潟大学)

GlyCosmos (特に MicroGlycoDB や MicroGlycoRepo) と Microbiome Datahub や MGDB との連携について検討する。

【産総研】

2. リポジトリの設計・開発・公開

2.1. LM-GlycoRepo の開発

初年度に設計した LM-GlycoRepo の開発に取り組む。レクチン chip の選択、レクチンの選択、実験のコンディション、動物種、疾患、組織名などのメタ情報の入力、画像の取り込み、自動比較ツール (サンプル取得部位の自動特定ツール) と確認修正用ツールなどの開発を行う。設計段階で考えられた問題点として、LM-GlycoRepo の開発に合わせてデータ公開用の LM-GlycomeAtlas 側も修正を行う。

3. 関連データベースとの連携

3.1. GlyComb や GlyCosmos との連携

GlycoProtDB のデータを用い GlyComb を使いやすいシステムにするために、糖ペプチド・糖タンパク質の登録システムに入力し、検証・改善に協力する。

3.2. ACGG-DB および GlycoNAVI との連携

ACGG-DB および GlycoNAVI との連携を維持・改良していく。糖タンパク質の新規糖ペプチドデータ (ACGG-DB, GlycoProtDB) や複合糖質の新規糖鎖データは GlyCosmos へのデータの提供で連携している。これまでの連携を促進させるために、新規データの追加をリポジトリと連動させて GlyCosmos のデータベースに追加と ACGG-DB と GlycoNAVI への追加を連動させるシステムを開発する。さらにキュレーションシステムの開発が進めば、登録データにキュレーションした情報を自動的に付加してデータベースで共有させる。

5. ツール開発

5.1. 【追加実施】糖鎖解析ソフトウェア (GRable) の GlyCosmos での公開

質量分析装置を用いて取得される糖ペプチド上の糖鎖組成を網羅的かつ詳細に解析するソフトウェア (GRable) を産総研にて開発した。本ソフトウェアを多分野の研究者に使用してもらうため、使用方法を含めたドキュメントを整備し、R4 年度末に GlyCosmos 上にて一般に公開・運用を開始した。本年度は、ソフトウェアのユーザビリティ向上を目的として、データの登録から解析完了までを一通で処理するための改良を行う。また、ユーザーの管理方法を検討し、秘匿性の高いデータの解析にも対応できるよう改良を行う。

(2) 進捗状況

【創価大学】

1. RDF データの整理・改良(創価大・DBCLS)

1.1 糖タンパク質およびレクチンの RDF データの品質確認・整理

GlyCosmos における RDF データに関して、すべてについて品質確認が完了し、データの整理が完了した。そこで、さらに DBCLS と連携し、VOID や rdf-config を用いてデータの整理を実施した。2024 年度に計画している大幅なアップデートに反映できるように開発を行なった。

1.2 RDF データの拡充

初年度同様、トリプル生成を行い、データの拡充を実施した。特に、糖鎖関連遺伝子情報に関して、UniProtよりタンパク質を抽出する際に利用するキーワードを増やし、多くの遺伝子情報を追加した。糖鎖に関しては、GlyGen より生物種情報を追加した。レクチン情報も CarboGrove から追加し、多くのレクチン・糖鎖構造の相互作用情報を増やした。また、Human Phenotype Ontology から糖鎖遺伝子や疾患の情報を増やし、GlycoBase のデータも(公式 HP が現在アクセス不能のため)データリソースとして、糖鎖構造とカラムの溶出時間などの情報を追加した。

2. リポジトリの開発・運営・改良

2.1 GlyTouCan の改良(創価大・野口研)

GlyTouCan を改良するために GlyComb の仕組みを利用し、バージョン4として公開に向けて開発を進めた。

2.2 LM-GlycoRepo の開発・公開(創価大・産総研)

初年度に設計した LM-GlycoRepo の開発に取り組み、少々遅れているが、GlyCosmos v4 リリースに向けて開発を進めている。MIRAGE のレクチンマイクロアレイガイドラインが確定しているため、ガイドラインに従ってデータを登録できるように開発を進めている。

2.3 GlyComb の糖ペプチド・糖タンパク質データ登録システムの運営(創価大・産総研・野口研)

初年度に進めた GlyComb の登録システムの運営を行うために、PRIDE および MS-Viewer に格納されている糖ペプチド情報および糖タンパク質のデータを GlyComb へ登録し ID の発行を進めた。Byonic 形式に限るが、多くのデータを登録ができて、興味深い解析結果も得られたため、本内容を論文化した。

2.4 GlyComb の糖脂質・配糖体データ登録システムの開発(創価大・野口研・PubChem)

初年度に糖ペプチド・糖タンパクの開発にリソースを当てたため、糖脂質および配糖体データの登録システムの設計にまで至らなかった。一方、PubChem との定期ミーティングを通して、PubChem における糖脂質および配糖体のデータ解析には着手した。また、LIPID MAPS の表記方法も確認したところ、糖脂質の表記方法が十分に標準化されていないことがわかった。そこで、GlyComb に登録できる糖脂質に関しては、まずは glycosphingolipid 種に限って設計を行うことが決まった。次年度に設計および開発を進める。

2.5 MicroGlycoCurator の開発(創価大)

当初は MicroGlycoRepo と名付けたが、リポジトリよりキュレーションを行うシステムとして利用可能になったことから、名前を MicroGlycoCurator とした。初年度に設計した微生物糖鎖データリポジトリの開発に取り組んだ。エクセルのテンプレートファイルから、糖鎖遺伝子や糖鎖構造を自動的に取り込み、パスウェイ画像や細胞内局在を表示できるようになった。

2.6. GlycoPathwayRepo の開発(創価大)

初年度にプロトタイプとして公開を目指したが、まだテストが不十分であったため、テストを厳密に行なって改良を進めた。パスウェイ情報はかなり複雑であるため、ユーザーからのトラブルやフィードバックを積極的に取り入れて、使いやすいシステムにするために慎重に開発を進めている。

2.7. 【追加実施】GlycoPOST サーバーの移設(創価大、新潟大)

GlycoPOST を創価大へ移設作業を継続して実施した。移設後のデータバックアップ体制の構築と管理体制を再構築した。完全に移行は完了していないが、新システムの設置は完了し、新潟大学からのアクセス許可を設定し、2024 年度の早い段階に完成できる見込みである。

3. 関連データベースとの連携

3.1. GlyCosmos と微生物関連データベースとの連携(創価大・新潟大)

GlyCosmos (特に MicroGlycoDB や MicroGlycoCurator) と Microbiome Datahub や MGDB との連携について検討した。Microbiome Datahub はまだ未熟であるため、MGDB に関して統合できるデータを検討した。統合化の実装は次年度に持ち越すことにした。

3.2. ACGG-DB および GlycoNAVI との連携(創価大・産総研・野口研)

初年度に引き続き、ACGG-DB および GlycoNAVI との連携を維持した。GlycoNAVI に関しては、先方の RDF データを調査し、GlyCosmos との連携可能性を調査した。ACGG-DB に関しては、主に LM-GlycoRepo の開発を進めた。

3.3. GlycoPOST と UniCarb-DR の連携

UniCarb-DR のスペクトル可視化機能を GlycoPOST から参照できるように機能拡張し、統一性を高めユーザビリティの向上を図った。また、それぞれに登録されているデータを参照するための API を設計し、双方からのデータの参照が可能なシステムの開発を行なった。さらに、GlyTouCan との連携も進めて、UniCarb-DR のそれぞれのエントリーページから GlyTouCan ID も取得できるようにした。

3.4. MIRAGE との連携強化(創価大)

MIRAGE Working Group に積極的に GlyCosmos リポジトリ(本年はは特に GlyComb)を紹介し、推奨リポジトリとして認められるようにする予定である。本年度は GlycoPOST に LC ガイドラインを導入し、UniCarb-DR と GlycoPOST が密に連携できるようになったことを報告した。また、glycoproteomics のガイドライン執筆に従い、GlycoPOST と UniCarb-DR の連携についても執筆を始めた。

3.5. 他のメジャーなデータベースとの連携(創価大)

糖タンパク質や糖脂質のデータベースを含む UniProt や LIPID MAPS などとの連携を継続する。昨年度、UniProt との相互リンクの準備が進み、今年度は LIPID MAPS と連携し、相互リンクをつけられるようにする予定であったが、GlyComb の開発の遅れにより、次年度に計画を延長した。なお、ヒューマングリコームアトラスプロジェクト(HGA)の始動により、TOHSA ナレッジベースとの連携体制を

構築し始めた。本年度は、GlyCosmos におけるヒト関連データを抽出し、TOHSA の基盤とした。

4. キュレーションシステムの改良(全員)

4.1 アノテーション自動更新システムの完成

PubAnnotation を通した自動アノテーションシステムを完成させたため、論文の執筆を開始した。

4.2 糖鎖構造の画像認識システム導入

糖鎖構造の情報を文献などの画像から糖鎖構造を認識し、WURCS を生成し、GlyTouCan ID を得るシステムを開発してきたが、リソース不足のため、まだ未完成である。WURCS ではなく、単純化形式の KCF を出力できるように目指し、完成は次年度になると見込んでいる。

4.3 データリソースへのパイプラインの設計

上記の機能を利用し、GlyCosmos のデータリソースに情報を追加できるパイプラインを設計し始めた。基本的には現在運営している GlyTouCan の糖鎖構造のバッチ処理システムを応用する予定である。

5. ツール開発

本プロジェクトの基盤で利用される以下の必要なツールを開発する。

5.1. HELM 形式およびツールの WURCS 対応(創価大)

HELM のルールおよびエディターを前年度調査した結果、WURCS を導入し、GlyComb で利用できるか検討したが、IUPAC における HELM ワーキンググループの活動が停止していたため、次年度に再検討する。

5.2. 【追加実施】糖鎖解析ソフトウェア(GRable)の GlyCosmos での公開(産総研・創価大)

産総研の「GRable の GlyCosmos での公開」を参照。

5.3. 【追加実施】GlycoMaple の改良

マウス版の GlycoMaple を開発した。また、遺伝子発現だけではなく、糖鎖の検出量も可視化できるようにした。GlyCosmos v4 に論文とともに公開する予定である。

6. ユーザーワークショップなどの開催・ユーザー・アクセス数の増加(全員)

初年度に引き続き、定期的にユーザーとの交流を行い、フィードバックを収集してきた。台湾で開催された GLYCO26 で Glycoinformatics Workshop をオーガナイズし、2 月には Jamboree を開催し、少人数でウェットとドライの先生方と GlyCosmos の改善方法について議論した。

【野口研究所】

2. リポジトリの設計・開発・公開

本年度は GlyTouCan、GlyComb のリポジトリの開発を創価大と共同で実施した。

2.1 GlyTouCan の改良(創価大・野口研)

国際糖鎖構造リポジトリ GlyTouCan の開発については、バックエンドで利用している WURCS 関連ツールの更新を行うとともに、システムを GlyComb で開発してきたリポジトリシステムへ移行するための設計と改良を実施した。

2.2 GlyComb の糖脂質・配糖体データ登録システムの開発(創価大・野口研・PubChem)

複合糖質構造のリポジトリである GlyComb の開発は、糖タンパク質データ登録システムを開発・公開した。また、糖脂質・配糖体については創価大と共同で脂質、RNA や低分子(化合物)に糖鎖が結合した複合糖質の入力方法について検討した。創価大と共同開発している GlyComb のパートナーシステムについては、GlyComb システムの公開後に実施することとした。

3. 関連データベースとの連携

3.1 GlyCosmos と GlycoNAVI の連携(創価大・野口研)

GlycoNAVI の連携については、創価大と共同でし、GlycoNAVI と GlyCosmos のデータを連携するための仕様について検討した。

4. キュレーションシステムの拡張開発(全員)

4.1 アノテーション自動更新システムの完成

キュレーションシステムの機能拡張のため、PubAnnotation で利用する辞書(PubDictionary)を整備し、単語の検出、可視化、また RDF 化されたシステムを利用した GlyCosmos への組み込みを実施した。

5. ツール開発

ツール開発については、本プロジェクトの基盤で利用するツールとして、糖鎖描画ツール、糖鎖構造形式変換ツールおよび質量分析データ解析ツールの開発を実施した。

5.1 糖鎖構造変換ツールの機能分割(野口研)

糖鎖構造形式変換ツールは内部構造の解析・整理を行った結果、新しい仕組みで再開発することとし、設計方針の決定と内部オブジェクトの設計などを実施した。

5.2 糖鎖描画ツールの機能分割(野口研)

糖鎖描画ツールについては機能分割した可視化機能について GWS 形式から画像を出力できるようにし、内部オブジェクトを拡張しこれまで描画できなかった幾つかの糖鎖構造を描画可能とした。

5.3 質量分析データ解析ツールの機能分割(野口研)

MSデータ解析ツールである GlycoWorkbench の機能分割について GUI 機能の分割を実施した。

5.4 【追加実施】タンパク質の特徴量を計算するツールの開発

追加実施課題として、タンパク質の特徴量を計算するツールの開発を実施した。入力データとして PDB および AlphaFold DB のデータを用い、各種特徴量を計算し csv や RDF 形式で出力するツールを開発した。

6. ユーザーワークショップなどの開催・ユーザー・アクセス数の増加(全員)

また、すべてのグループと共同でユーザーへの周知、広報活動として日本糖質学会年会において、GlyCosmos ブースを出展した。

【新潟大学】

2. リポジトリの設計・開発・公開

2.1. GlycoPOST の創価大への移設

創価大学内に GlycoPOST を運用するためのサーバを新設し、そこで同リポジトリシステムを問題なく稼働させられるようにシステム構築を実施した。しかしながら、現サーバを運用している国立遺伝学研究所から移設するために必要な機関承認やサーバ設定の問題で移行そのものは来年度にずれ込むことになった。

3. 関連データベースとの連携

3.1. UniCarb-DR と GlycoPOST との連携(創価大・新潟大)

UniCarb-DR のスペクトル可視化機能を GlycoPOST でも活用できるようにシステムを改良した。バグ修正などの作業をしつつ、API についても設計が概ね完了したことから、データ登録システムの改修を実施した。現時点では、ローカル環境において稼働が確認できている。

3.2 GlyCosmos と jPOST との連携

MIRAGE ガイドラインが糖鎖プロテオミクスに対応しつつあることから、それらのメタデータを GlycoPOST でも利用できるように改良を施した。そのため、jPOST との連携等はこれらの新しいメタデータも含む形で実施する必要があり、次年度以降の課題となった。

3.3 GlyCosmos と微生物関連データベースとの連携(創価大学・新潟大学)

環境中の糖鎖関連遺伝子について検索した結果をデータベース化し MetaglynomeDB として GlyCosmos 内で稼働させるよう実装中である。概ね正しく動くようになっており、次年度中に公開できるものと考えている。

【産総研】

2. リポジトリの設計・開発・公開

2.1. LM-GlycoRepo の開発:

リポジトリシステム LM-GlycoRepo 及び表示ツール LM-GlycomeAtlas のユーザーインターフェース、LM-GlycomeAtlas から GlyCosmos Lectins への連携等の仕様詳細を決定した。LM-GlycoRepo に格納するため LM-GlycomeAtlas の既存データのメタデータを整備し、LM-GlycoRepo / LM-GlycomeAtlas 間の API データ連携の運用を開始した。これらの前準備を経て、LM-GlycoRepo の実装と LM-GlycomeAtlas の改修に着手し、目標とする中間審査までの公開への目途を付けた。

3. 関連データベースとの連携

3.1. GlyComb や GlyCosmos との連携

野口研・創価大で開発が進められている GlyComb の使用方法や登録方法を検証し開発にフィードバックするために、GlycoProtDB 内にある Glyco-RIDGE の Glycoform データを用いて GlyComb API を試験した。40 件程度のデータを用い、Accession Number が発行され、Glycoform 内で表示される様にし、GlyComb へのリンクを開始した。新たな糖ペプチドの Glyco-RIDGE データを GlycoProtDB および GlyComb へのリポジトリの連動方法の開発に着手した。

3.2. ACGG-DB および GlycoNAVI との連携

ACGG-DB のサーバーを創価大内に移行し、公開を継続している。GGDB では糖鎖遺伝子の発現情報として、Human Protein Atlas の RNA-seq データを組織ごとのグラフとして表示できる様にして公開した。ジャンボリーを開催し、GGDB に追加すべき遺伝子リストのアップデートを進めた。

5. ツール開発

5.1. 【追加実施】糖鎖解析ソフトウェア(GRable)の GlyCosmos での公開

外部のグライコプロテオミクス専門家より得られたフィードバックより、課題の抽出・整理が必要と考えられたため、本年度の計画を変更し、Ver.2.0 実装に向けた課題の抽出に注力した。R6 年度も継続して課題抽出し、R7 年度以降に優先順位を付けて改良を行う予定である。GRable Ver.1.0 については、ユーザビリティ向上のため、昨年度公開済のマニュアルを一新した。また GRable Ver.1.0 に関する学会発表や論文投稿、所属機関 HP での広報活動を行った。

§4. 成果発表等

(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)	0件
	国際(欧文)	5件
未発行論文 (accepted, in press 等)	国内(和文)	0件
	国際(欧文)	0件

② 論文詳細情報

1. Yushi Takahashi, Masaaki Shiota, Akihiro Fujita, Issaku Yamada, Kiyoko F Aoki-Kinoshita. GlyComb: a novel glycoconjugate data repository that bridges glycomics and proteomics., *The Journal of biological chemistry*, 105624-105624, 2024 (DOI: 10.1016/j.jbc.2023.105624).
2. Koichi Arakawa, Tamiko Ono, Kiyoko F Aoki-Kinoshita, Yasunori Yamamoto. Development of an integrated and inferenceable RDF database of glycan, pathogen and disease resources., *Scientific data*, vol. 10, No. 1, 582-582, 2023 (DOI: 10.1038/s41597-023-02442-2).
3. Tiejun Cheng, Tamiko Ono, Masaaki Shiota, Issaku Yamada, Kiyoko F Aoki-Kinoshita, Evan E Bolton. Bridging glycoinformatics and cheminformatics: integration efforts between GlyCosmos and PubChem., *Glycobiology*, vol. 33, No. 6, 454-463, 2023 (DOI: 10.1093/glycob/cwad028).
4. Chiaki Nagai-Okatani*#, Daisuke Tominaga*, Azusa Tomioka*, Hiroaki Sakaue, Norio Goda, Shigeru Ko, Atsushi Kuno, Hiroyuki Kaji#. GRable version 1.0: A software tool for site-specific glycoform analysis using the improved Glyco-RIDGE method with parallel clustering and MS2 information, *bioRxiv*, 2023 (DOI: 10.1101/2023.10.30.564073).
5. Kiyoko Flora Aoki-Kinoshita, Evan Bolton, Issaku Yamada, Akihiro Fujita, Masaaki Matsubara, Jerven Bolleman, Yasunori Yamamoto. BioHackJP 2023 Report R4: integration of glyco data with chemo-, geno-, lipid-omics and pathway data. 2023 (DOI: 10.37044/osf.io/mq54k).

(2) その他の著作物(総説、書籍など)

該当なし

(3) 国際学会および国内学会発表

① 概要

種別	国内外	件数
招待講演	国内	4件
	国際	5件
口頭発表	国内	1件

種別	国内外	件数
	国際	5 件
ポスター発表	国内	13 件
	国際	15 件

② 招待講演

〈国内〉

1. 松原正陽、糖鎖 MS データ解析ソフトウェアの現状と課題、質量分析インフォマティクス研究会ワークショップ、神奈川、2023 年 5 月 12 日
2. 木下聖子、多様な糖鎖とオミクス情報の統合化に向けた試み、第 12 回生命医薬情報学連合大会(IIB MP2023)、(招待講演) 2023 年 9 月 8 日、柏(オンライン)。
3. 木下聖子、ライフサイエンスデータへの糖鎖情報の統合化:生命理解の深化、第 36 回 自然科学研究機構シンポジウム「データ蒐集家と散策する」- ビッグデータと人はどのように寄り添って生きていくか - (招待講演)2023 年 9 月 24 日、東京。
4. 木下聖子、糖鎖科学情報の統合化によるブレークスルーの可能性、第 20 回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム(招待講演)2023 年 12 月 1 日、東京。

〈国際〉

1. Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. Semantic Web technologies for integrating heterogeneous data. 6th International Postgraduate Conference on Biotechnology (IPCB 2023) (招待講演) 2023 年 8 月 23 日、シンガポール。
2. Aoki-Kinoshita, K.F. Modeling glycosylation biosynthesis to understand glycogene and glycan structure relationships. 7th Latin American Glycobiology Congress. (招待講演)2023 年 10 月 5 日、メキシコシティ(オンライン)。
3. Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. Understanding the Extended Central Dogma through the Human Glycome Atlas Project. The 7th International Symposium on Bioinformatics (InSyB) (招待講演) 2023 年 12 月 14 日、オンライン。
4. Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. The Human Glycome Atlas Project for cataloging the human glycoproteome. Society for Glycobiology Annual Meeting (招待講演)2023 年 11 月 8 日、ハワイ。
5. Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. The Human Glycome Atlas Project to catalogue a Reference Human Glycome. 17th Annual International Biocuration Conference India Pre-meeting Workshop (招待講演)2024 年 3 月 5 日、ニューデリー(インド)。

③ 口頭講演

〈国内〉

1. 木下聖子、Glycoinformatics as an opening to understanding life. 第 96 回日本生化学会大会(口頭発表)2023 年 11 月 1 日、福岡。

〈国際〉

1. Issaku Yamada、How to use glycan structure drawing software、26th International Symposium on Glycoconjugates (Glyco26), Glycoinformatics Workshop, Taipei, Taiwan, 2023 年 8 月 28 日
2. Issaku Yamada、Database integration and software development using glycan structural notation, American Chemical Society Fall 2023, San Francisco, USA, 2023 年 8 月 17 日

3. 久野敦、岡谷千晶、Boottanun Patcharaporn、永井美杉、藤田典昭、新町大輔、安形清彦、藤田晶大、木下聖子、Glycoinformatics Workshop: LM-GlycomeAtlas ver 2.1、Glyco26、Taiwan、2023年8月28日。
4. Boottanun Patcharaporn、岡谷千晶、藤田典昭、川西邦夫、中務智文、石津智子、新町大輔、安形清彦、木下聖子、久野敦、Improvements of LM-GlycomeAtlas as a Visualization Tool of Lectin-based Multimodality Data、12th Asian Community of Glycoscience and Glycotechnology (ACGG)、インド、2023年11月8日。
5. Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. Semantic Web technologies enabling integration of glycoscience data in the GlyCosmos Portal. 17th Annual International Biocuration Conference India (口頭発表)2024年3月7日、ニューデリー(インド)。

④ ポスター発表

〈国内〉

1. 山田一作、糖鎖データの RDF 化と関連ツールの開発・活用によるデータ拡充、トーゴーの日 DICP 交流会、日本科学未来館、2023年10月5日
2. 松原正陽、木下聖子、山田一作、糖鎖化学構造抽出ソフトウェアによる複合糖質データ連携、第42回日本糖質学会年会、鳥取県 とりぎん文化会館、2023年9月8日
3. 李 宣明、小野 多美子、高橋 悠志、塩田 正明、藤田 晶大、木下 聖子、糖鎖関連パスウェイリポジトリの開発: GlycoPathwayRepo、第42回日本糖質学会年会、鳥取県 とりぎん文化会館、2023年9月8日
4. 今紅音、木下聖子、マウス ES 細胞 N 型糖鎖合成シミュレーション解析、第42回日本糖質学会年会、鳥取県 とりぎん文化会館、2023年9月8日
5. 田中美雪、矢木宏和、加藤晃一、木下聖子、GALAXY データのセマンティックウェブ化、第42回日本糖質学会年会、鳥取県 とりぎん文化会館、2023年9月8日
6. 藤田 晶大、松原 正陽、山田 一作、木下 聖子、GlyTouCan における包括関係を用いた効果的な糖鎖構造の検索、第42回日本糖質学会年会、鳥取県 とりぎん文化会館、2023年9月8日
7. 山田英一、サラマー・エスカンダル、エトウイ・バリマ・アピア、藤田晶大、木下聖子、SNFG 形式の糖鎖画像から糖鎖情報を自動的に抽出するシステム gl-idea の開発、第42回日本糖質学会年会、鳥取県 とりぎん文化会館、2023年9月8日
8. 内野 敦斗、高橋 悠志、李 宣明、木下 聖子、微生物糖鎖関連情報キュレーションシステム「MicroGlycoCurator」の開発、第42回日本糖質学会年会、鳥取県 とりぎん文化会館、2023年9月8日
9. 岡谷千晶、富永大介、富岡あづさ、坂上弘明、合田徳夫、洪繁、久野敦、梶裕之、GRable Version 1.0: Glyco-RIDGE 法による部位特異的グライコフォーム解析自動化ソフトウェアの開発、日本プロテオーム学会 2023年大会 (JProS2023)、新潟、2023年7月25日。
10. 岡谷千晶、坂上弘明、藤田晶大、富岡あづさ、富永大介、木下聖子、久野敦、梶裕之、GlyCosmos Portal ツールとしての Glyco-RIDGE 解析自動化ソフトウェア「GRable」の開発、DICP 研究交流会、東京、2023年10月5日。
11. Boottanun Patcharaporn、岡谷千晶、藤田典昭、川西邦夫、中務智文、石津智子、新町大輔、安形清彦、木下聖子、久野敦、Improvements of LM-GlycomeAtlas as a visualization tool of Lectin-based Multimodality data、DICP 研究交流会、東京、2023年10月5日。
12. 小野多美子、塩田正明、高橋悠志、新町大輔、細田正恵、北風春湖、山田一作、土屋伸一郎、松原正陽、藤田晶大、山本泰智、金進東、岡谷千晶、久野敦、藤田典昭、安形清彦、奥田修二、木下聖子、GlyCosmos データリソースの拡大、DICP 研究交流会、東京 日本科学未来館、2023年10月5日
13. 塩田正明、高橋悠志、藤田晶大、山田一作、木下聖子、複合糖質リポジトリ GlyComb 、DICP 研究交

〈国際〉

1. 戸塚 健人, 篠宮 紀彦, 木下 聖子, 細田 正恵. Improved Glycan Recognition Patterns Learned Using Tree-Structured Data Mining. IEEE BioCAS 2023, October 19-21, 2023, Toronto, Canada.
2. Masaaki Matsubara, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, and Issaku Yamada, Glycoconjugate data integration using glycan chemical structure extraction software, Society for Glycobiology (SfG) Annual Meeting, Big Island, Hawaii, USA, 2023年11月7日
3. Sunmyoung Lee, Yushi Takahashi, Tamiko Ono, Masaaki Shiota, Akihiro Fujita, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Glycan-related Pathway Data Repository for Data Sharing and Integration, Society for Glycobiology (SfG) Annual Meeting, Big Island, Hawaii, USA, 2023年11月7日
4. Akihiro Fujita, Thomas Masding, Masaaki Shiota, Masaaki Matsubara, Issaku Yamada, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, GlyTouCan update version 3.2: new functionality and plans for major release 4.0, Society for Glycobiology (SfG) Annual Meeting, Big Island, Hawaii, USA, 2023年11月7日
5. Naoki Kimura, Shinichiro Tsuchiya, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, and Issaku Yamada, GlycanBuilder4Web: Development of a Web application for drawing and database searching of glycan structures, Society for Glycobiology (SfG) Annual Meeting, Big Island, Hawaii, USA, 2023年11月7日
6. Issaku Yamada, How to use glycan structure drawing software, 26th International Symposium on Glycoconjugates (Glyco26) , Taipei, Taiwan, 2023年8月31日
7. Thomas Masding, Kiyoko Aoki-Kinoshita, Akihiro Fujita, Archetype Glycans: a New Representation to Improve Organization and Analysis of Glycan Data, 26th International Symposium on Glycoconjugates (Glyco26) , Taipei, Taiwan, 2023年8月31日
8. Sunmyoung Lee, Yushi Takahashi, Akihiro Fujita, Tamiko Ono, Masaaki Shiota, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Development of a New Glycan-related Pathway Repository: GlycoPathwayRepo, 26th International Symposium on Glycoconjugates (Glyco26) , Taipei, Taiwan, 2023年8月31日
9. Akane Kon, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Simulation Analysis of N-linked Glycan Biosynthesis and Estimation of Reaction Parameters, 26th International Symposium on Glycoconjugates (Glyco26) , Taipei, Taiwan, 2023年8月31日
10. Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Akane Kon, GlycoSim tool for simulation of glycan biosynthesis and signaling pathways, 26th International Symposium on Glycoconjugates (Glyco26) , Taipei, Taiwan, 2023年8月31日
11. Akihiro Fujita, Masaaki Matsubara, Issaku Yamada, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Organizing the glycans in GlyTouCan using subsumption to better analyze glycan structure data, 26th International Symposium on Glycoconjugates (Glyco26) , Taipei, Taiwan, 2023年8月31日
12. Masae Hosoda, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Improvement of the MCAW-DB Glycan Profile Database for Understanding Glycan Recognition Patterns of Glycan-Binding Proteins, 26th International Symposium on Glycoconjugates (Glyco26) , Taipei, Taiwan, 2023年8月31日
13. Yushi Takahashi, Masaaki Shiota, Akihiro Fujita, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, GlyComb: a Novel Glycoconjugate Data Repository towards an Infrastructure of Multi-Omics Data

a Analysis, 26th International Symposium on Glycoconjugates (Glyco26) 、Taipei, Taiwan、2023年8月31日

14. Atsuto Uchino, Yushi Takahashi, Sunmyoung Lee, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Development of a curation system “MicroGlycoCurator” for microbial glycan-related information, 26th International Symposium on Glycoconjugates (Glyco26) 、Taipei, Taiwan、2023年8月31日

15. Issaku Yamada, Data Standard for Glycoscience Field, 49th IUPAC World Chemistry Congress, Hague, Netherlands、2023年8月24日

(4) 知的財産権の出願（国内の出願件数のみ公開）

出願件数

種別		件数
特許出願	国内	0件

(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 その他の成果発表

1. 質量分析によるグライコプロテオーム解析を加速するソフトウェア「GRable」の公開、産総研 HP (<https://unit.aist.go.jp/cmb5/ja/topics/topics09.html>)

§5. 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 1 研究開発対象の主要なデータベースの利用状況（月平均）

名称	種別	2023 年度
GlyCosmos Portal	訪問者数	37,986
	訪問数	117,955
	ページ数	5,691,720
GlyTouCan	訪問者数	22,475
	訪問数	51,341
	ページ数	2,292,901

② 分析

GlyCosmos および GlyTouCan に関して定期的に学会で発表したり、SNS でつぶやいたりしており、アクセス数が徐々に増加している。また、PubChem や UniProt などにおけるリンクも効果的になっていると思われる。

(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

GlycoPOST に多くの質量分析データが登録されて、文献で参照されている。2023 年度の間、50 件のプロジェクトが公開されており、まだ多くの非公開データも格納されている。GlyCosmos の文献引用数も意外な分野の論文からも参照されている。

例えば、食品と栄養科学の雑誌の次の論文は、食品に関する構造を多く格納しているデータベースとして引用された。

1. Anna Iwaniak, Piotr Minkiewicz, Małgorzata Darewicz, Chapter Two - Bioinformatics and bioactive peptides from foods: Do they work together?, in *Advances in Food and Nutrition Research* (Editor: Fidel Toldrá), Academic Press, Volume 108, 2024, Pages 35-111.

この文献を含め、本研究プロジェクト関係者以外によって GlycoPOST のアクセッション番号ではなく、GlyCosmos 本体を参照した論文が 6 件見つかった(次の 3.で説明する)。

(3) データベースの利活用により得られた研究成果(生命科学研究への波及効果)

1. Anna Iwaniak, Piotr Minkiewicz, Małgorzata Darewicz, Chapter Two - Bioinformatics and bioactive peptides from foods: Do they work together?, in *Advances in Food and Nutrition Research* (Editor: Fidel Toldrá), Academic Press, Volume 108, 2024, Pages 35-111.

食品と栄養科学の雑誌の次の論文は、食品に関する構造を多く格納しているデータベースとして引

用された。

2. Qun Yang, Kristof De Schutter, Insights into protein fucosylation in insects, *Entomologia Generalis*, Volume 43, Issue 5, 2023, Pages 911-925.

昆虫におけるフコシル化された糖鎖構造を調べるために、GlyCosmos が利用された。

3. Schwarz, M., Meyer, C.E., Löser, A. et al. Excessive copper impairs intrahepatocyte trafficking and secretion of selenoprotein. *P. Nat Commun* 14, 3479 (2023). <https://doi.org/10.1038/s41467-023-39245-3>

GlyCosmos Glycoproteins に含まれる糖タンパク質の分類を用いて、タンパク質のエンリッチメント解析が行われた。その結果、発現量が下がったタンパク質の53%が糖タンパク質であることがわかり、発現量が上がったタンパク質の40%が糖タンパク質であったことがわかった。

4. Lundstrom, J., Urban, J., Bojar, D. Decoding glycomics with a suite of methods for differential expression analysis. *Cell Reports Methods*, Volume 3, Issue 12, 100652, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.crmeth.2023.100652>

GlyCosmos の GlycanFormatConverter を用いて糖鎖構造の比較解析を行うソフトウェアツールが開発された。

5. Nakahashi H., Oda T., et al. Aberrant Glycosylation in Pancreatic Ductal Adenocarcinoma 3D Organoids Is Mediated by KRAS Mutations, *Journal of Oncology*, Volume 2024, Issue 1, 1529449, 2023. <https://doi.org/10.1155/2024/1529449>

糖鎖関連遺伝子、特に糖転移酵素およびグリコシルヒドロラーゼ 212 件が抽出され、遺伝子発現情報が解析された。PCA 解析により、KRAS 野生型オルガノイドは同様の発現プロファイルを持つ傾向があったが、いくつかの糖鎖関連遺伝子は KRAS 変異型オルガノイドと野生型オルガノイドの間で有意に変化していた ($p < 0.05$)。中でもフコシルトランスフェラーゼ遺伝子 FUT6 と FUT3 は KRAS 変異体群で有意に上昇した結果が得られた。

6. Jin C, Lundstrom J, et al. Breast Milk Oligosaccharides Contain Immunomodulatory Glucuronic Acid and LacdiNAc, *Molecular and Cellular Proteomics*, Volume 22, Issue 9, 100635, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.mcpro.2023.100635>

網羅的なミルクオリゴ糖のリソースを構築するために、文献などのデータをキュレーションし、GlyCosmos や他の GlySpace Alliance のデータベースと比較された。

- (4) 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)

該当なし。

§6. 研究開発期間中に主催した活動(ワークショップ等)

(1) 進捗ミーティング

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2023年 12月15日	GlyCosmos プロジェクト 進捗報告会議	JST 東京 本部	23人	研究進捗報告のためのミーティング

(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

以上

別紙1 既公開のデータベース・ウェブツール等

No.	正式名称	別称・略称	概要	URL	公開日	状態	分類	関連論文
1	GlycoNAVI	GlycoNAVI	糖鎖研究において重要である糖鎖標準品や糖鎖修飾体などに関連した情報のデータベースです。CAN（糖鎖の名称、シノニムなど）、TCarp（糖鎖やタンパク質の3次元構造）、GRG（糖鎖に関連する遺伝子）をリソースとした検索や一覧からのブラウズが可能です。	https://glyconavi.org	2011/4/1	維持・発展	データベース等	
2	WURCSFramework	WFW	糖鎖構造に関連したリポジトリ及びデータベースにおける基盤ツール	https://gitlab.com/glyconfo/wurcsframework	2017/5/17	維持・発展	ツール等	
3	MolWURCS	MolWURCS	糖鎖構造と糖脂質や糖タンパク質などの複合糖質に関連したリポジトリやデータベースにおける基盤ツール	https://gitlab.com/glyconfo/molwurcs		維持・発展	ツール等	
4	GlycanBuilder4Web	GB4W	糖鎖構造を描画し検索するためのツールであり、リポジトリやデータベースで利用	https://gitlab.com/glyconfo/glycanbuilder2web	2022/2/2	維持・発展	ツール等	
5	GlycanBuilder2	GB2	糖鎖構造エディタであり糖鎖構造の可視化、画像生成のライブラリとしても利用	https://github.com/glyconfo/GlycanBuilder2	2017/4/14	維持・発展	ツール等	Tsuchiya S, Aoki NP, Shinmachi D, Matsubara M, Yamada I, Aoki-Kinoshita KF, Narimatsu H. Implementation of GlycanBuilder to draw a wide variety of ambiguous glycans. Carbohydr Res. 445:104-116, 2017. (doi: 10.1016/j.carres.2017.04.015.)
6	Glycoworkbench	GWB	質量分析データから糖鎖構造を同定するツールであり、同定した糖鎖構造をGlyYouCanへ登録可能なツール	https://gitlab.com/glyconfo/glycoworkbench		維持・発展	ツール等	
7	WURCSRDF	WURCSRDF	糖鎖構造をSPARQL検索するためのRDFデータおよびSPARQLをWURCSから生成するツール	https://gitlab.com/glyconfo/wurcsrdf	2015/12/14	維持・発展	ツール等	
8	GlycanFormatConverter	GFC	各種糖鎖構造の表記法を相互変換するツールであり、GlyYouCanにおける糖鎖構造の登録やデータベースにより利用するツール	https://gitlab.com/glyconfo/glycanformatconverter	2018/12/7	維持・発展	ツール等	Tsuchiya S, Yamada I, Aoki-Kinoshita KF. GlycanFormatConverter: A conversion tool for translating the complexities of glycans. Bioinformatics. 2018. in press. (doi: 10.1093/bioinformatics/bty990)
9	PDB2Glycan	PDB2Glycan	糖鎖の含まれるProtein Data Bank (PDB)エントリを解析し、RDFとして出力するツール	https://gitlab.com/glyconfo/pdb2glycan	2021/3/2	維持・発展	ツール等	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 JY. 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)
10	SugarDrawer	SugarDrawer	GUIにより糖鎖構造を描画し、糖鎖構造形式データを出力するツール	https://gitlab.com/glycosmos/sugardrawer	2020/11/21	維持・発展	ツール等	Tsuchiya S, Matsubara M, Aoki-Kinoshita KF, Yamada I. SugarDrawer: A Web-Based Database Search Tool with Editing Glycan Structures. Molecules. 2021 Nov 25;26(23):7149. (doi: 10.3390/molecules26237149)

No.	正式名称	別称・略称	概要	URL	公開日	状態	分類	関連論文
11	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	2019/4/1	維持・発展	データベース等	Watanabe, Y., Kinoshita-Aoki, K. F., Ishihama, Y., Okuda, S. GlycoPOST realizes FAIR principles for glycomics mass spectrometry data. <i>Nucleic Acids Res.</i> 49(D1):D1523-D1528(2021). doi:10.1093/nar/gkaa1012. 【PMID33174597】
12	GlyCosmos Glycoscience Portal	GlyCosmos	糖鎖に関連するデータの統合化したウェブポータル	https://glycosmos.org	2019/4/1	維持・発展	データベース等	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. <i>Nat Methods.</i> 2020 Jul;17(7):649-650. doi: 10.1038/s41592-020-0879-8. PMID: 32572234.
13	GlycomeAtlas	GlycomeAtlas	ヒト、マウス、ゼブラフィッシュの生体内における糖鎖の局在を閲覧できる	https://glycosmos.org/glycomeatlas	2019/4/1	維持・発展	データベース等	Konishi Y, Aoki-Kinoshita KF. The GlycomeAtlas tool for visualizing and querying glycome data. <i>Bioinformatics.</i> 2012 November;28(21) 2849-2850. DOI: 10.1093/bioinformatics/bts516.
14	LM-GlycomeAtlas	LM-GlycomeAtlas	レクチンアレイ解析データを可視化したウェブツール	https://glycosmos.org/lm-glycomeatlas	2019/8/5	維持・発展	データベース等	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. <i>J Proteome Res.</i> 2021 Apr 2;20(4):2069-2075. doi: 10.1021/acs.jproteome.0c00907. Epub 2021 Mar 4. PMID: 33657805.
15	GlyTouCan	GlyTouCan	糖鎖構造に固有のアクセッション番号を付与することができる国際糖鎖構造リポジトリ。登録された糖鎖構造は、GlyCosmos Portalからも閲覧することができる	https://glytoucan.org/	2016/1/1	維持・発展	データベース等	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. <i>Nucleic Acids Res.</i> 2021 Jan 8;49(D1):D1529-D1533. doi: 10.1093/nar/gkaa947. PMID: 33125071; PMCID: PMC7779025.
16	UniCarb-DR	UniCarb-DR	質量分析から同定された糖鎖構造データのためのリポジトリ MIRAGEのガイドラインに従い、グライコミクス MS/MS スペクトルを登録することができる	https://unicarb-dr.glycosmos.org/	2020/8/10	維持・発展	ツール等	Rojas-Macias MA, Mariethoz J, Andersson P, Jin C, Venkatakrisnan V, Aoki NP, Shinmachi D, Ashwood C, Madunic K, Zhang T, Miller RL, Horlacher O, Struwe WB, Watanabe Y, Okuda S, Levander F, Kolarich D, Rudd PM, Wuhner M, Kettner C, Packer NH, Aoki-Kinoshita KF, Lisacek F, Karlsson NG. Towards a standardized bioinformatics infrastructure for N- and O-glycomics. <i>Nat Commun.</i> 2019 Jul 22;10(1):3275. doi: 10.1038/s41467-019-11131-x. PMID: 31332201; PMCID: PMC6796180.

No.	正式名称	別称・略称	概要	URL	公開日	状態	分類	関連論文
17	Grable	Grable	MS1ベースの糖鎖プロテオミクス手法 "Glyco-RIDGE" (Glycan heterogeneity-based Relational Identification of Glycopeptide signals on Elution profile) を用いて、糖ペプチドの部位特異的糖鎖組成を推定するソフトウェア	https://glycosmos.org/grable	2023/3/31	新規	データベース等	Narimatsu H, Kaji H, Vakhrushev SY, Clausen H, Zhang H, Noro E, Togayachi A, Nagai-Okatani C, Kuno A, Zou X, Cheng L, Tao SC, Sun Y. Current Technologies for Complex Glycoproteomics and Their Applications to Biology/Disease-Driven Glycoproteomics. J Proteome Res. 2018 Dec 7;17(12):4097-4112. doi: 10.1021/acs.jproteome.8b00515. Epub 2018 Oct 25. PMID: 30359034.
18	GlycoMaple	GlycoMaple	糖鎖関連遺伝子の発現情報を糖鎖代謝パスウェイに反映させ、細胞内で合成される糖鎖構造を推定できるツール	https://glycosmos.org/glycomaple	2020/4/1	維持・発展	ツール等	Huang, Y.F., Aoki, K., Akase, S., Ishihara, M., Liu, Y.S., Yang, G., Kizuka, Y., Mizumoto, S., Tiemeyer, M., Gao, X.D., Aoki-Kinoshita, K.F., Fujita, M. Global mapping of glycosylation pathways in human-derived cells. Dev Cell. 2021 April;56(8):1195-1209.e7. doi: 10.1016/j.devcel.2021.02.023