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) 研究開発実施報告書 様式

# 2024 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(2025年3月時点)



# □目次

概要	1
§1. 研究実施体制	
<b>§2.</b> 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	
(2) ツール等一覧	
§3. 実施内容	
(1) 本年度に計画されていた研究開発項目・タスク	
(2) 進捗状況	
§4. 成果発表等	
(1) 原著論文発表	
① 論文数概要	
② 論文詳細情報	
(2) その他の著作物(総説、書籍など)	
(3) 国際学会および国内学会発表	10
① 概要	10
② 招待講演	10
③ 口頭講演	10
④ ポスター発表	11
(4) 知的財産権の出願 (国内の出願件数のみ公開)	13
① 出願件数	13
② 一覧	13
(5) 受賞·報道等	
① 受賞	
<ul><li>② メディア報道</li></ul>	
③ その他の成果発表	
§5. 主要なデータベースの利活用状況	
<ol> <li>エタなケーケートラペンキョロバルベル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・</li></ol>	
① 実績	
② 分析	
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	
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)	
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	
学技術への波及効果)	
<ul><li>(1) 進捗ミーティング</li></ul>	
(1) 連抄ペーティング	
14/ 土津レルソニクショッチ、ススかスソみ、ナリアニナ伯野寺	

# §1. 研究実施体制

グループ名	研究代表者·研 究分担者氏名	所属機関•役職名	研究題目
創価大学グ	木下 聖子	学校法人創価大	GlyCosmos Portal開発の総括、国際連携
ループ		学•教授	
野口研究所	山田 一作	公益財団法人野口	糖鎖科学研究支援ツールおよびGlyCosmos
グループ		研究所•研究室長	の開発
新潟大学グ	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
ループ			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	久野 敦	産業技術総合研究	LM-GlycomeAtlas、LM-GlycoRepoおよび
ープ		所・研究グループ長	GlyCombリポジトリーの開発と拡充

# §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	GlyCosmos	https://glycosmos.org
	Portal		

## 【その他のデータベース】

No.	名称	別称•略称	URL
1	LM-GlycoRepo		https://lm-glycorepo.glycosmos.org/lm_glycor
			epo/
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/
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
5	GlycanBuilder4Web		https://gitlab.com/glyconavi/glycanbuilder2w
			eb
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) 本年度に計画されていた研究開発項目・タスク
  - 1) RDF データの整理・改良、糖鎖構造 RDF データの品質確認・整理・拡充
    - ・ 疾患やパスウェイ情報に着目し、ShEX などのツールを用いて解析する
    - 推論などを用いるデータの追加
  - 2) GlyCosmos リポジトリの設計・開発・公開
    - ・ GlyTouCanV4 の運用および GlyComb システムの導入を考慮した V5 の設計
    - レクチンマイクロアレイリポジトリ(LM-GlycoRepo)の開発・公開
    - ・ GlyComb のパートナーシステムの開発
    - ・ GlyComb の糖ペプチド・糖タンパク質の登録システム開発・公開
    - ・ GlyComb の糖脂質・配糖体データ登録システムの設計
    - ・ MicroGlycoCurator(旧 MicroGlycoRepo)の公開・運営
    - ・ GlycoPOST と UniCarb-DR の連携
    - ・ GlyCosmos と GlycoPOST/jPOST との連携
    - ・ 糖鎖関連パスウェイデータリポジトリ GlycoPathwayRepo のプロトタイプ運営
    - · GlycoPOST の移設(創価大、新潟大)
  - 3) 関連データベースとの連携
    - ・ GlyCosmos の MicroGlycoDB や MicroGlycoCurator (旧 MicroGlycoRepo)と MicrobeDB.jp や MGDB との連携の検討
    - ・ MIRAGE との連携強化
    - ・ LIPID MAPS との連携強化
    - ・ Human Glycome Atlas プロジェクトの TOHSA ナレッジベースとの連携体制の構築
    - ・ ACGG-DB との連携
    - ・ GlycoNAVI との連携と GlycoNAVI のサーバ更新
  - 4) キュレーションシステムの開発
    - ・ 既存のシステムの改良のための設計
    - ・ 自動更新システムの完成
    - ・ 糖鎖構造の画像認識システムの開発・導入
    - ・ データリソースへのパイプライン(バッチ処理システム)の設計
  - 5) 糖鎖科学研究支援ツールの開発・公開
    - ・ HELM 形式およびツールの WURCS 対応:GlyComb への導入の検討
    - ・ 糖鎖描画ツールの機能分割
    - ・ 質量分析データ解析ツールの機能分割
    - 糖鎖解析ソフトウェア(GRable)の検証・改良
  - 6) ユーザー・アクセス数の増加
    - ・ 糖鎖関連学会へブースを出展
    - 日本糖質学会のGlyCosmos 運営委員会における議事録公開
    - ・ 糖鎖解析ソフトウェア(GRable)の改良・公開
    - ・ 共同利用共同研究ネットワーク型拠点 jGlycoNet との連携

#### (2) 進捗状況

- 1) RDF データの整理・改良、糖鎖構造 RDF データの品質確認・整理・拡充
  - ・ 全ての RDF データを整理し、VOID という標準形式として管理・整理できた。これで全ての RDF データ の検証まで終了した。
  - ・ Gene Ontology の階層を subClassOf に設定し、推論できるように設定した。その結果、これまで異なる GO タームとしてアノテーションされていたタンパク質や遺伝子が、同じ階層に属することがわかるようになる、検索しやすくなった。
  - ・ Taxonomy(生物種情報)の階層を subClassOf に設定し、生物種のアノテーション情報を拡充することができた。
  - ・ GlyTouCan IDとWURCSをsameAsで推論できるように設定した。

#### 2) GlyCosmos リポジトリの設計・開発・公開

- ・ GlyTouCan の設計・開発・公開を推進した。まず、既存の GlyTouCan における問題点を抽出し、課題を設定した上で、既存システムの改良に向けた設計を行い、システムを開発・公開した。次に、根本的な問題を解決するため、GlyComb で開発した RDB を活用した新しいシステム設計を行い、GlyTouCan V4として開発を進めている。
- ・ GlyComb の設計・開発・公開を推進した。初期の計画に従い、糖ペプチドおよび糖タンパク質を対象としたシステム設計を実施した。糖鎖構造には GlyTouCan を、ペプチドおよびタンパク質の構造にはアミノ酸配列を用いた。また、糖鎖結合部位を登録データに追加することで、糖ペプチドおよび糖タンパク質の構造を登録可能にした。この登録システムは RDB を利用し、登録されたデータから RDF を生成するシステムを構築した。
- ・ GlyComb の糖脂質データの登録システムを設計するために、糖脂質の既存の形式やアノテーションソフトの調査などを行った。また、既存の LIPID MAPS に登録されているスフィンゴ糖脂質情報を整理し、GlyTouCan に登録を行った。
- ・ MicroGlycoCurator の開発は、MicroGlycoDB の完成や他の遅れている課題に取り組むために一時的に停止した。
- ・ GlycoPathwayRepo のプロトタイプ開発を開始した。
- ・ GlycoPOST と UniCarb-DR の連携については、UniCarb-DR のスペクトル可視化機能を GlycoPOS T 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ーの向上について継続して開発してきた。 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設計、開発を実施してきた。
- ・ GlyCosmos と GlycoPOST/jPOST との連携については、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た。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しつつある。 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した。

- ・ GlycoPOST の移設については、創価大へ移設作業を完了した。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。
- ・ レクチンマイクロアレイリポジトリ(LM-GlycoRepo)の開発・公開については、既存の組織糖鎖データベースである LM-GlycomeAtlas (Ver.2.1)に含まれる実験データ・メタデータを登録できるリポジトリ設計 (昨年度に作成)に基づき開発を行い、LM-GlycoRepo Ver.1.0を実装し、ウェブ公開した。併せて、L M-GlycoRepo 登録データの表示ツールとして LM-GlycomeAtlas を活用するため、API 連携構築およびプログラム改修を行い、LM-GlycomeAtlas Ver.2.2を公開した。Ver.2.2ではレクチンデータベース(GlyCosmos Lectins)へのリンク等、LM-GlycomeAtlas のユーザーインターフェースの改良を実施した。さらに本ツールの普及活動およびユーザビリティ向上のためのフィードバック取得を目的として、論文発表(公開済 1 件、改訂中 1 件)および学会発表(6 件)を行った。

#### 3) 関連データベースとの連携

- ・ GlyCosmos と GlycoNAVI の連携を推進した。 GlycoNAVI の糖鎖モチーフデータを GlyCosmos で利用可能にした。 また、 GlyCosmos における糖鎖の立体構造表示に GlycoNAVI の立体構造データを利用し、両システムの連携を強化した。
- ・ 微生物データベースとの連携については、GlyCosmos と Microbiome Datahub や MGDBとの連携 について検討してきた。メタゲノムデータから糖鎖関連遺伝子の予測をするアルゴリズムを利用した腸内 細菌叢データのデータベース化を進めて、公開した。MGDBとの連携も完了した。
- ・ 産総研野口研・創価大で開発が進められた GlyComb では、データの登録を進めるために検索や使用 方法について、登録者側のコメントをフィードバックし開発に協力した。 GlycoProtDB にて追加登録する データについても、 GlycoRIDGE データを GlyComb に登録するための準備を進めた。 GlyComb の Accession Number は GlycoProtDB の Glycoform 内で表示される様に連携を進める。
- ・ また、GlycoProtDB の新規データはレクチンを用いて回収し、細胞や糖鎖付加部位特異的な糖鎖情報であり、有用なデータを GlyCosmos でも公開するために RDF 化して共有する。追加登録方法を変更し、RDF 化の改良を進めた。GGDB における RNA 発現量の表示はインターフェースを改良し公開を開始した。追加する糖鎖遺伝子の活性に合わせて、糖鎖構造の表記方法についても GlyCosmos (糖鎖描画ツール)と協力して進めており、キュレーションが完成後に公開する予定である。
- ・ MIRAGE との連携強化として、GlycoPOST に更新される glycoproteomics guidelines を導入する計画を立てた。
- ・ Human Glycome Atlas Project の TOHSA ナレッジベースとの連携については、先方がまだ準備 段階であるため、保留となっている。
- ・ LIPID MAPS との連携も、GlyComb の糖脂質データ登録システムが完了するまでは保留する。

#### 4) キュレーションシステムの開発

・ キュレーションシステム開発のため糖鎖名称辞書、糖鎖モチーフ辞書、糖鎖イメージ辞書を作成した。自動更新システムは半自動の体制を取ることにしたため、GlyCosmos のリリース毎に最新情報を取得できるようにした。

- ・ 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てきた。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につい て他のグループの研究者との連携してきた。
- ・ 糖鎖構造の画像認識システムの開発が遅れているが、新年度からは新しい体制で速やかに進められる ようになる。
- ・ データリソースのパイプライン(バッチ処理システム)は、GlyComb に関して設計を検討した。

### 5) 糖鎖科学研究支援ツールの開発

- ・ HELM 形式については、IUPAC Glyco-HELM working group が立ち上がったが、海外のメンバーを揃えるのに時間がかかったため、新年度から本格的に検討が開始する予定である。
- ・ 糖鎖科学研究支援ツールの開発・公開を推進した。糖鎖構造変換において機能拡張が必要であったため、既存の糖鎖構造変換ツールである GlycanFormatConverter (GFC) の解析を行った。しかし、機能拡張が困難であることが明らかになったため、GFC の機能を分割し、必要な機能を活用した新しい糖鎖構造変換ツールを設計・開発した。この新しいツールでは、基本的な糖鎖構造の WURCS から GWS への変換が可能になった。
- ・ また、糖鎖描画ツール GlycanBuilder2(GB2)には、イメージ生成ができない糖鎖構造や、データとして扱えない糖鎖構造が存在するという問題があったため、GB2 の改良に向けて機能分割を実施し、これまでイメージ生成が困難であった糖鎖構造への対応を進めた。
- ・ さらに、質量分析データ解析ツールである GlycoWorkbench (GWB) は GB2 の機能を利用しているため、ソフトウェアの内部構造が複雑であり、機能追加が困難であった。そこで、GWB の GUI および GB 2 の機能を分割し、システムの改善を図った。
- ・ 糖鎖解析ソフトウェア(GRable)の検証・改良については、公開済のGRable Ver.1.0の周知および利用の普及活動として、論文発表(1件)および学会発表(4件)を行った。ソフトウェアのユーザビリティ向上を目的とした改良点の課題抽出を完了した。さらに、MS2ベースの解析法と比較可能とするための機能改良を実施し、プログラム改修を完了した。

## 6) ユーザー・アクセス数の増加

- ・ 糖質学会のブースを展示し、GlySpace Alliance として HGA との MOU を結んだ。
- ・ 日本糖質学会の GlyCosmos 運営委員会における議事録を公開した。
- ・ GRable に続き、オーストラリアで開発された GlyCombo というグライコミクスの質量分析データのアノテーションツールを GlyCosmos に導入することになった。
- ・ J-GlycoNet の支援をいただくことになり、DOI 発行のための資金を支援していただくことになったため、 J-GlycoNet 関係者を GlyCosmos 運営委員会に新たに入ることになった。

# §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
光门仍빼人	国際(欧文)	7件
未発行論文	国内(和文)	0 件
(accepted, in press 等)	国際(欧文)	0件

#### ② 論文詳細情報

- 1. Shuya Ikeda, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Hirokazu Chiba, Susumu Goto, Masae Hosoda, Shuichi Kawashima, Jin-Dong Kim, Yuki Moriya, Tazro Ohta, Hiromasa Ono, Terue Takatsuki, Yasunori Yamamoto, Toshiaki Katayama. Expanding the concept of ID conversion in TogoID by introducing multi-semantic and label features. Journal of Biomedical Semantics (2025) 16: 1 1-1 (10.1186/s13326-024-00322-1)
- 2. Sunmyoung Lee, Tamiko Ono, Shiota Masaaki, Akihiro Fujita, Masaaki Matsubara, Achille Zappa, Issaku Yamada, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. Updates implemented in version 4 of the GlyCosmos Glycoscience Portal. Analytical and Bioanalytical Chemistry (2025) 417: 5 907-919 (10.1007/s00216-024-05692-0)
- 3. Yushi Takahashi, Niclas G Karlsson, Shujiro Okuda, Kiyoko F Aoki-Kinoshita. Cooperation of GlycoPOST and UniCarb-DR towards a comprehensive glycomics data repository workflow. Analytical and bioanalytical chemistry (2025) 417: 5 1015-1023 (10.1007/s00216-024-05673-3)
- 4. Masaaki Matsubara, Evan E Bolton, Kiyoko F Aoki-Kinoshita, Issaku Yamada. Toward integration of glycan chemical databases: an algorithm and software tool for extracting sugars from chemical structures.. Analytical and bioanalytical chemistry (2025) 417: 5 945-956 (10.1007/s00216-024-05508-1)
- 5. Kiyoko F Aoki-Kinoshita, Frederique Lisacek, Raja Mazumder, Rene Ranzinger, Michael Tiemeyer, Issaku Yamada, Nicolle H Packer. Meeting report of the GlySpace Alliance and GaLSIC symposium.. Glycobiology (2025) 35: 5 (10.1093/glycob/cwaf019)
- Sunmyoung Lee, Tamiko Ono, Shiota Masaaki, Akihiro Fujita, Masaaki Matsubara, Achille Zappa, Issaku Yamada, Kiyoko F Aoki-Kinoshita. Updates implemented in version 4 of the GlyCosmos Glycoscience Portal.. Analytical and bioanalytical chemistry (2025) 417: 5 907-919 (10.1007/s00216-024-05692-0)
- 7. Sunmyoung Lee, Louis David Leclercq, Yann Guerardel, Christine M. Szymanski, Thomas Hurtaux, Tamara L. Doering, Takane Katayama, Kiyotaka Fujita, Kazuhiro Aoki, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. MicroGlycoDB: A database of microbial glycans using Semantic Web technologies. BBA Advances (2024) 6 100126-100126 (10.1016/j.bbadva.2024.100126)
- 8. Elizabeth N Wallace, Connor A West, Colin T McDowell, Xiaowei Lu, Evelyn Bruner, Anand S Mehta, Kiyoko F Aoki-Kinoshita, Peggi M Angel, Richard R Drake. An N-glycome tissue atlas of 15 human normal and cancer tissue types determined by MALDI-imaging mass spectrometry. Scientific reports (2024) 14: 1 489-489 (10.1038/s41598-023-50957-w)

#### (2) その他の著作物(総説、書籍など)

1. 木下聖子. (2024). 糖鎖インフォマティクス. ファルマシア, 60(9), 866-870.

#### (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	2 件
7日1寸冊1典	国際	1件
口頭発表	国内	5 件
口與先衣	国際	1件
ポスター発表	国内	27 件
	国際	9件

#### ② 招待講演

〈国内〉

- 1. 木下聖子、Using inference on Semantic Web data to enrich the data in GlyCosmos、Ope n Life Science Platform Symposium、理化学研究所(東京)、2025年1月27日
- 2. 岡谷千晶、"【糖鎖科学ポータルサイト GlyCosmos Portal を活用してみよう】LM-GlycoRepo/LM-GlycomeAtlas"、J-GlycoNet 糖鎖研究技術スクール、池袋 FRIENDS 会議室サンライズ、2025 年 2 月 26 日

#### 〈国際〉

1. Kiyoko F. Aoki-Kinoshita、New data repositories to enrich the data in GlyCosmos、7th Canadian Glycomics Symposium & the 10th Warren Workshop、エドモントン、カナダ、2025 年 5 月 27 日発表者、タイトル、学会名、場所、月日

#### ③ 口頭講演

〈国内〉

- 山田一作、糖鎖から見た GlyCosmos と PDBj との課題間連携、トーゴーの日 DICP 交流会、東京都、 JST 東京本部(サイエンスプラザ)、2024 年 10 月 4 日
- 2. 奥田修二郎、「プロテオーム・グライコーム・メタボロームでの課題間連携と技術の横展開」、DICP 研究 交流会、JST 東京本館、10月4日
- 3. 奥田修二郎、高橋悠志、「jPOST/GlycoPOST」、糖鎖研究技術スクール、東京、2月26日
- 4. 岡谷 千晶、藤田 典昭、Boottanun Patcharaporn、田中美雪、塩田正明、新町 大輔、安形 清彦、木下聖子、久野 敦、"LM-GlycoRepo Ver.1.0:マウス組織糖鎖マッピングデータのリポジトリシステムの開発"、第43回日本糖質学会年会、慶應義塾大学日吉キャンパス、2024年9月13日
- 5. 岡谷 千晶、藤田 典昭、Boottanun Patcharaporn、田中美雪、塩田正明、新町 大輔、安形 清彦、木下聖子、久野 敦、"国際的な糖鎖の「見える化」ツールを目指した新たな取り組み"、第 8 回 FCCA シンポジウム グライコサイエンス若手フォーラム 2024、慶應義塾大学 矢上キャンパス、2024 年 9 月 1 5 日

〈国際〉

1. Boottanun Patcharaporn、 岡谷 千晶、藤田 典昭、田中美雪、塩田正明、新町 大輔、安形 清彦、木下聖子、川西 邦夫、馬場正樹、中務 智文、石津 智子、久野 敦、"LM-GlycoRepo: A New Repository System for Lectin-based Multimodality Data"、13th Asian Community of Glycos cience and Glycotechnology Conference (ACGG2024)、インドネシア、2024 年 11 月 15 日

#### ④ ポスター発表

〈国内〉

- 1. 小出美香,田中美雪,塚田伸樹,木下聖子、糖鎖合成シミュレーションにおけるパラメータ推定 アプリケーションの開発、第 43 回日本糖質学会年会、神奈川県 慶應義塾大学 日吉キャンパス、 2024年9月13日
- 2. 山田 英一, エスカンダル・サラマー, エトゥイ・バリマ・アピア,エトゥイ・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「G1-idea」の開発、第43回日本糖質学会年会、神奈川県 慶應義塾大学 日吉キャンパス、2024年9月13日
- 3. 田中美雪、木下聖子、GlycoSim のパラメータ推定機能拡張、第 43 回日本糖質学会年会、神奈川県 慶應義塾大学 日吉キャンパス、2024 年 9 月 13 日
- 4. 服部四葉, 李宣明, 木下聖子、微生物糖鎖関連データベース MicroGlycoDB の改良、第 43 回日本糖質学会年会、神奈川県 慶應義塾大学 日吉キャンパス、2024 年 9 月 13 日
- 5. 服部四葉、李宣明、木下聖子、微生物糖鎖関連データベース MicroGlycoDB とキュレーションシステム MicroGlycoCurator、GlycoTOKYO 2024 シンポジウム、東京都、創価大学、2024年11月16日
- 6. 田中美雪、木下聖子、糖鎖生合成シミュレーションツール GlycoSim のパラメータ推定機能強化、GlycoTOKYO 2024 シンポジウム、東京都、創価大学、2024 年 11 月 16 日
- 7. 山田英一、エスカンダル・サラマー、エトゥイ・バリマ・アピア、ディエゴ・ヘレラ、ビスマルク・クウェック・アシエデュ・アサンテ、ルイス・ヘンリ・バルボサ・モルミレ、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、GlycoTOKYO 2024 シンポジウム、東京都、創価大学、2024 年 11 月 16 日
- 8. 小出美香、田中美雪、塚田伸樹、木下聖子、鎖生合成シミュレーションのためのパラメータ推定ツールの開発、GlycoTOKYO 2024 シンポジウム、東京都、創価大学、2024年 11月 16日
- 9. 李宣明、小野多美子、塩田正明、高橋悠志、木下聖子"パスウェーイデーターの共有と統合を目指す糖鎖関連リポジトリの開発"、DICP 研究交流会、JST 東京本部(サイエンスプラザ)、2024 年10月4日
- 10. 塩田正明、"GlyCosmos Repositories, GlyTouCan v4・GlyComb の開発"、DICP 研究交流会、JST 東京本部 (サイエンスプラザ)、2024年10月4日
- 11. 塩田正明、小野多美子、藤田晶大、松原正陽、山田一作、木下聖子、"糖鎖科学ポータル GlyCosmos Portal v4 の改良"、トーゴーの日シンポジウム、品川ザ・グランドホール、2024年10月5日
- 12. 小野多美子、塩田正明、李 宣明、北風春湖、山田一作、松原正陽、高橋悠志、藤田晶大、細田 正恵、山本泰智、金進東、新町大輔、岡谷千晶、久野敦、藤田典昭、安形清彦、奥田修二郎、 木下聖子、"GlyCosmos データリソースの更新(V4)"、DICP 研究交流会、JST 東京本部(サイ エンスプラザ)、2024年10月4日
- 13. 小野多美子、塩田正明、山田一作、山本泰智、木下聖子、"GlyCosmos RDF のアップデートとデータの拡充"、トーゴーの日シンポジウム、品川ザ・グランドホール、2024年10月5日
- 14. 山田一作、糖鎖研究の羅針盤:糖鎖構造の複雑な世界を解きほぐすデータベース、第 43 回日本糖質

- 学会年会、神奈川県 慶應義塾大学 日吉キャンパス、2024年9月13日
- 15. 下山 紘充、松原正陽、山田一作、多様なデータベースの統合と検索利便性向上を目指すテキスト表 記変換システムの開発、第43回日本糖質学会年会、神奈川県 慶應義塾大学 日吉キャンパス、2024 年9月13日
- 16. 山田一作、糖鎖および複合糖質の化学構造によるデータ統合化の取り組み、トーゴーの日 DICP 交流会、東京都、JST 東京本部(サイエンスプラザ)、2024年10月4日
- 17. 下山紘充、松原正陽、山田一作、糖鎖データベース連携のためのテキスト表記自動変換システムの開発研究、トーゴーの日シンポジウム2024、東京都、品川ザ・グランドホール、2024年10月5日
- 18. 山田一作、木村直貴、松原正陽、糖鎖構造を直感的に描く: 糖鎖描画ツールの紹介と応用、GlycoTOKYO 2024 シンポジウム、東京都、創価大学、2024年11月16日
- 19. Hiromitsu Shimoyama, Masaaki Matsubara, Issaku Yamada、Exchange System for Glycan Textual Notations Development to Integrate Various Glycan Databases and Improve Search Accuracy、Chem-Bio Informatics Society (CBI) Annual Meeting 2024、東京都、江戸川区、タワーホール船堀、2024年10月30日
- 20. 高橋悠志、吉沢明康、松田史生、木下聖子、石濱泰、奥田修二郎、「マルチオミクス質量分析データの 蓄積と再解析を支えるデータリポジトリ基盤」、トーゴーの日シンポジウム、品川ザグランドホール、10 月 5 日
- 21. 高橋悠志、吉沢明康、木内貴仁、松田史生、奥田修二郎、「MB-POST: A novel data repository for storing high-quality spectral data in metabolomics mass spectrometry」、第 97 回日本生化学会大会、横浜、11 月 6 日
- 22. 岡谷 千晶、富岡 あづさ、富永大介、坂上 弘明、久野 敦、梶 裕之、"糖タンパク質の部位特異的グライコフォーム解析に資するソフトウェア開発と応用"、第 72 回質量分析総合討論会(MSSJ2024)、つくば国際会議場、2024 年 6 月 12 日
- 23. 岡谷 千晶、坂上 弘明、富岡 あづさ、久野 敦、梶 裕之、"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」の改良"、DICP 研究交流会、JST 東京本部(サイエンスプラザ)、2024年10月4日
- 24. 新町 大輔、藤田 典昭、安形 清彦、岡谷 千晶、成松 久、木下聖子、久野 敦、"糖鎖関連データベースの連携促進と機能更新(ACGG-DB)"、トーゴーの日シンポジウム 2024、品川 ザ・グランドホール、2025 年 10 月 5 日
- 25. Boottanun Patcharaporn、岡谷 千晶、藤田 典昭、田中美雪、塩田正明、新町 大輔、安形 清彦、木 下 聖 子 、久 野 敦、"LM-GlycoRepo: a new repository system for lectin-assisted multimodality data"、トーゴーの日シンポジウム 2024、品川 ザ・グランドホール、2025 年 10 月 5 日
- 26. 岡谷 千晶、坂上 弘明、藤田晶大、富岡 あづさ、塩田正明、富永大介、木下聖子、久野 敦、梶 裕之、 "GRable Version 1.0: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"、トーゴーの 日シンポジウム 2024、品川 ザ・グランドホール、2025 年 10 月 5 日
- 27. Alrumaidhi Noor、岡谷 千晶、藤田 典昭、Boottanun Patcharaporn、田中美雪、塩田正明、新町大輔、安形 清彦、木下聖子、久野 敦、"LM-GlycoRepo: a new repository system for lectin-based multimodality data including lectin microarray data of mouse and human tissue sections"、第 97 回日本生化学会大会、パシフィコ横浜ノース、2024 年 11 月 7 日

#### 〈国際〉

1. Yotsuba Hattori, Sunmyoung Lee, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita、Optimization of the back-end of MicroGlycoDB, a microbial glycan-related database、1st Asia & Pacific Bioinformatics Joint Conference (APBJC)、沖縄県、那覇、NAHA CULTURAL ARTS THEATER NAHArt、2024 年

10月24日

- 2. Mika Koide, Miyuki Tanaka, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita、Glycan Biosynthesis Simulation: Development of a Parameter Estimation Analysis Tool、1st Asia & Pacific Bioinformatics Joint Conference (APBJC)、沖縄県、那覇、NAHA CULTURAL ARTS THEATER NAHArt、2024年10月24日
- 3. Sunmyoung Lee, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita、Development of a new glycan-related pathway repository: GlycoPathwayRepo、1st Asia & Pacific Bioinformatics Joint Conference (APBJC)、沖縄県、那覇、NAHA CULTURAL ARTS THEATER NAHArt、2024年10月24日
- 4. Masaaki Matsubara, Naoki Kimura, Hiromitsu Shimoyama, Issaku Yamada、Developing Research Infrastructures Using Glycoinformatics: Comprehensive Handling of Glycan Structures、Glyco-core Symposium 2024、Nagoya, Aichi, Japan、2024 年 7 月 16 日
- 5. Issaku Yamada、Development and Application of Glycan Structure Data Representation Conversion Technologies、1st Asia & Pacific Bioinformatics Joint Conference (APBJC)、沖縄県、那覇、NAHA CULTURAL ARTS THEATER NAHArt、2024年10月24日
- 6. Hiromitsu Shimoyama、Masaaki Matsubara、Issaku Yamada、Development of a Textual Notation Interconversion System to Integrate Diverse Glycan Databases and Improve Search Accuracy、1st Asia & Pacific Bioinformatics Joint Conference (APBJC)、沖縄県、那覇、NAHA CULTURAL ARTS THEATER NAHArt、2024年10月24日
- 7. Hiromitsu Shimoyama、Masaaki Matsubara、Issaku Yamada、Development of Exchange System for Glycan Textual Notations to Integrate Various Glycan Databases and Improve Search Accuracy、2024 SfG ANNUAL MEETING、Omni Amelia Island Resort, Amelia Island, FL, USA、2024年11月11日
- 8. Yushi Takahashi, Akiyasu C. Yoshizawa, Fumio Matsuda, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Yasushi Ishihama, Shujiro Okuda, Mass spectrometry data repositories facilitate the multi-omics experimental data accumulation and reanalysis. APBJC2024, Okinawa, Oct 24 2024
- 9. 坂上 弘明、岡谷 千晶、富岡 あづさ、梶 裕之、久野 敦、"Comparison of glycopeptides identified by different glyco-proteomics software"、HUPO World Congress 2024、ドイツ、2024 年 10 月 22 日

### (4) 知的財産権の出願(国内の出願件数のみ公開)

### ① 出願件数

種別	件数	
特許出願	国内	0 件

#### ② 一覧

#### 1) 国内出願

1. なし

#### (5) 受賞・報道等

#### ① 受賞

1. なし

- ② メディア報道
  - 1. なし
- ③ その他の成果発表
  - 1. なし

# §5. 主要なデータベースの利活用状況

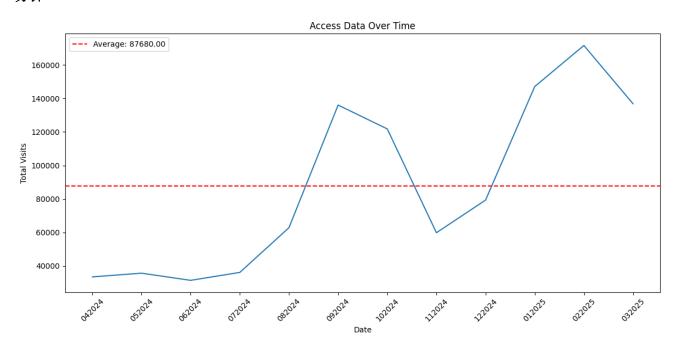
### 1. アクセス数

### 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

名称	種別	2024 年度(月間平均値)
GlyCosmos ポータル	訪問者数	13,134
	訪問数	87,680
	ページ数	723,309
GlyTouCan	訪問者数	4,120
	訪問数	9,919
	ページ数	404,539

## ② 分析



8 月と 12 月のリリースした度につぶやきをした結果、アクセス数が増えている。また、2 月にユーザーワークショップを実施したため、急増している。

### 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

特になし

#### 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. Georgetown 大学の Nathan Edwards 教授らが、GlyTouCan の糖鎖構造をオントロジーとして整理 し、GNOME というオントロジーを構築した。

関連:Zhang, W., Vesser, M., & Edwards, N. (2025). GNOme, an ontology for glycan naming and subsumption. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 1-13.

2. GlycoMotif は、GlyCosmos によって提供され、GlyGen に含まれている、糖鎖構造で観察される特徴的な部分構造のコレクションである。TogoID システムに糖鎖とタンパク質の複数の関係を整理できるようにし、糖鎖付加タンパク質と糖鎖認識タンパク質を区別できるようになった。これにより、モチーフを含む糖鎖の GlyTouCan ID がたとえば"is product of enzymatic reaction by "の関係で UniProt ID にリンクされる。

関連:Ikeda, S., Aoki-Kinoshita, K. F., Chiba, H., Goto, S., Hosoda, M., Kawashima, S., ... & Katayama, T. (2025). Expanding the concept of ID conversion in TogoID by introducing multisemantic and label features. *Journal of Biomedical Semantics*, *16*(1), 1.

- 3. イメージング質量分析技術(Imaging mass spectrometry; IMS)のレビューにおいて、GlySpace Alliance が紹介され、GlyCosmos が特に GlyTouCan の保管場所として紹介された。IMS データを格納する際に GlyTouCan ID が有用であることが説明された。
  - 関連: Palomino, T. V., & Muddiman, D. C. (2024). Mass spectrometry imaging of N-linked glycans: Fundamentals and recent advances. *Mass Spectrometry Reviews*.
- 4. タンパク質の立体構造上に糖鎖構造を付加して立体構造を予測するツール Re:Glyco が GlycoShape というデータベースと連携して提供されている。GlyTouCan ID をベースに糖鎖構造を参照している。 関連:Ives, C. M., Singh, O., D'Andrea, S., Fogarty, C. A., Harbison, A. M., Satheesan, A., ... & Fadda, E. (2024). Restoring protein glycosylation with GlycoShape. *Nature Methods*, *21*(11), 2117-2127.
- 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)

特にない

# §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
2024年	GlyCosmos プロジェクト	JST 東京	23 人	研究進捗報告のためのミーテ
7月26日	全体会議(非公開)	本館		イング
2025年	GlyCosmos プロジェクト	野口研究所	19 人	研究進捗報告のためのミーテ
1月24日	全体会議(非公開)			イング

## (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
2024年12	第1回 GlyCosmos シン	産業技術総	50 人	糖鎖認識分子データベース
月 4、5 日	ポジウム&Jamboree~	合研究所つ		(GlyCosmos Lectins)を拡
	糖鎖に結合する分子(G	くばセンタ		充・整理する上でのデータ表
	BM)の糖鎖認識パター	_		現(糖鎖認識分子のファミリー
	ンについて考える~			分類や糖鎖認識モチーフの
				表現方法)について議論を行
				った。
2025 年 2	J GlycoNet 共催 2024	池袋 FRIEN	25 人	GlyCosmos ポータルの説明
月 26,27 日	年度糖鎖技術スクール	DS 会議室		と使い方の紹介。連携ツール
		サンライズ		を使用しながら糖鎖に関する
				検索や解析を実践してもらう。

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	WURCSFramewor k	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/gl ycoinfo/wurcsframew ork	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/gl ycoinfo/molwurcs		維持·発展	ツール等	
4	GlycanBuilder4We b	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/gl yconavi/glycanbuilder 2web	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/g lycoinfo/GlycanBuilde r2	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GlyTouCanへ登録可能なツール	https://gitlab.com/gl ycoinfo/glycoworkbe nch		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でーたおよび SPARQLをWURCSから生成するツール	https://gitlab.com/gl ycoinfo/wurcsrdf	2015/12/14	維持·発展	ツール等	
8	GlycanFormatCon verter	GFC	各種糖鎖構造の表記法を相互変換するツールであり、 GlyTouCan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/gl ycoinfo/glycanformat converter	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)エントリー を解析し、RDFとして出力するツール	https://gitlab.com/gl yconavi/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	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.gly cosmos.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. Nucleic Acids Res. 49(D1):D1523-D1528(2021). doi:10.1093/nar/gkaa1012. [PMID33174597]
11	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.or g	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. Nat Methods. 2020 Jul;17(7):649-650. doi: 10.1038/s41592-020-0879-8. PMID: 32572234.
12	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.or g/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. Bioinformatics. 2012 November;28(21) 2849–2850. DOI: 10.1093/bioinformatics/bts516.
13	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.or g/lmglycomeatlas	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. J Proteome Res. 2021 Apr 2;20(4):2069-2075. doi: 10.1021/acs.jproteome.0c00907. Epub 2021 Mar 4. PMID: 33657805.
14	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. Nucleic Acids Res. 2021 Jan 8;49(D1):D1529-D1533. doi: 10.1093/nar/gkaa947. PMID: 33125071; PMCID: PMC7779025.

15	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, Venkatakrishnan 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, Wuhrer M, Kettner C, Packer NH, Aoki-Kinoshita KF, Lisacek F, Karlsson NG. Towards a standardized bioinformatics infrastructure for N- and O-glycomics. Nat Commun. 2019 Jul 22;10(1):3275. doi: 10.1038/s41467-019-11131-x. PMID: 31332201; PMCID: PMC6796180.
16	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.or g/grable	2023/3/31	新規	データ ベース等	Nagai-Okatani C, Tominaga D, Tomioka A, Sakaue H, Goda N, Ko S, Kuno A, Kaji H. GRable Version 1.0: A Software Tool for Site-Specific Glycoform Analysis With Improved MS1-Based Glycopeptide Detection With Parallel Clustering and Confidence Evaluation With MS2 Information. Mol Cell Proteomics. 2024; 23(9):100833. DOI:10.1016/j.mcpro.2024.100833
17	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、細胞内で合成されうる糖鎖構造を推定できる ツール	https://glycosmos.or g/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
18	GlyComb	GlyComb	複合糖質を登録するシステム	https://glycomb.glycos mos.org/	2023/10/2	維持·発展	その他	
19	LM-GlycoRepo	LM-GlycoRepo	レクチンを用いて取得した糖鎖解析データのリポジトリシス テム。登録データはLM-GlycomeAtlasで表示される。 Ver.1.0ではマウスのレクチンアレイデータを登録できる。	https://lm- glycorepo.glycosmos.org /lm glycorepo/	2025/3/31	新規	その他	Nagai-Okatani C, Fujita N, Boottanun P, Tanaka M, Shiota M, Shinmachi D, Angata K, Aoki-Kinoshita K, Kuno A. LM-GlycoRepo Version 1.0: A novel repository system for mouse tissue glycome mapping data. bioRxiv (preprint) doi: 10.1101/2025.03.18.644044