

2025 年度年次報告書

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

【研究課題名】「異分野融合を志向した糖鎖科学ポータルデータの拡充と品質向上」

研究代表者：

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）

研究分担者：

山田 一作（公益財団法人 野口研究所 研究部 研究室長）

奥田 修二郎（新潟大学 医学部メディカル AI センター 教授）

久野 敦（産業技術総合研究所 細胞分子工学研究部門 研究グループ長）



©2025 木下 聖子(創価大学) licensed under CC表示4.0国際

1. 研究進捗状況と成果

大規模言語モデル（LLM）を用いた GlyCosmos データ問い合わせシステムの開発を進め、MCP サーバーを立ち上げ、一部 API で問い合わせ可能とした（最終年度に完成予定）。

GlyComb の糖脂質データ登録システムは人手不足で遅れたが登録基盤を完成させ、配糖体データ登録システムの設計調査も開始した（最終年度に公開予定）。GlyTouCan v4 は開発が遅れているものの、最終年度 6 月の公開を予定している。Repositories の入口統合化は上記の遅れを踏まえ見送った。

キュレーションシステムでは、GlycoPOST に登録された GlyTouCan 構造情報を自動抽出し、Glycan 詳細ページから GlycoPOST の実験データへリンクを付与した。PubAnnotation との連携も完成し、論文として発表した（成果論文等 4）。

糖鎖科学研究支援ツールでは、SPARQL 検索の課題（曖昧構造対応・速度）を解消するため、糖鎖をグラフ構造として解析する部分構造検索システムを開発した。WURCS と IUPAC・GLYCAM 等の相互変換機能、および GlycanBuilder の再開発（WURCS 入出力、特殊修飾・未定義単糖入力、画像出力等）も進めた。

GlyTouCan v4 関連では、v3 RDF から v4 RDB への移行、WURCSFramework 1.3.2 による再バリデーション、アクセス管理機構の改良、API 基盤更新を進めた。同フレームワークでは置換基のソート処理を改善し、同一構造から異なる WURCS が生成される問題に対応した。

追加実施として、WURCS からの糖鎖立体構造生成ワークフローの更新・自動化を行い、GlycoNAVI・GlyCosmos 関連サーバ環境の運用基盤も改善した。

産総研グループでは、糖鎖関連データの登録・可視化・解析基盤の整備を進めた。LM-GlycoRepo/LM-GlycomeAtlas（成果論文等 1）について、ヒト組織由来データへの対応に向け、メタデータ項目・サンプル属性・画像データ登録表示の要件を整理した。ACGG-DB では独自グライコプロテオミクスデータを公開し GlyComb の ID 取得・GlyCosmos との共有を進めたほか、LfDB・GGDB のデータ拡充とキュレーション協力体制を構築した。糖鎖解析ソフト GRable (Ver. 1.0) は MS2 ベース手法との比較に向けた改良機能を検証し、公開質量分析データの再解析による糖ペプチドデータ拡充のワークフロー設計も進めた。

2. 代表的な成果事例

1. Takahashi, Y., Karlsson, N.G., Okuda, S., Aoki-Kinoshita, K.F. Cooperation of GlycoPOST and UniCarb-DR towards a comprehensive glycomics data repository workflow. *Anal. Bioanal. Chem.* 417(5):1015-1023 (2025).

概要：GlycoPOST と UniCarb-DR を連携させ、糖鎖解析データの登録から解析・公開までを一貫処理するワークフローを構築した。

2. 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. *J. Proteome Res.*, 24, 3569-3577 (2025).

概要：LM データを登録可能とする新規リポジトリ LM-GlycoRepo Version 1.0 を開発・公開した。

3. Kim JD, Shiota M, Yamada I, Aoki-Kinoshita KF. Resources for screening the literature for glycan-related terms using PubAnnotation in GlyCosmos. *Glycobiology*. 2026 Mar 24;36(5):cwag015.

概要：PubAnnotation により文献情報を糖鎖構造・疾患・臓器等で自動アノテーションし、糖鎖構造の詳細画面等に自動表示できるようにした。