

## 2022 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データの拡充と品質向上
開発対象データベースの名称(URL)	GlyCosmos Glycoscience Portal ( <a href="https://glycosmos.org">https://glycosmos.org</a> )
研究代表者氏名	木下 聖子
所属・役職	学校法人創価大学・教授 (2023年3月時点)



## □ 目次

§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 .....	4
(1) データベース一覧 .....	4
(2) ツール等一覧 .....	4
§3. 実施内容 .....	5
(1) 本年度の研究開発計画と達成目標 .....	5
(2) 進捗状況 .....	6
§4. 成果発表等 .....	9
(1) 原著論文発表 .....	9
① 論文数概要 .....	9
② 論文詳細情報 .....	9
(2) その他の著作物(総説、書籍など) .....	9
(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 .....	10
(4) 知的財産権の出願 (国内の出願件数のみ公開) .....	12
① 出願件数 .....	12
(5) 受賞・報道等 .....	12
① 受賞 .....	12
② メディア報道 .....	12
③ その他の成果発表 .....	12
§5. 研究開発期間中に主催した活動(ワークショップ等) .....	12
(1) 進捗ミーティング .....	12
(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 .....	12

## §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	<a href="https://glycosmos.org">https://glycosmos.org</a>

#### 【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		<a href="https://glycosmos.org/lmglycomeatlas">https://glycosmos.org/lmglycomeatlas</a>
3	GlycomeAtlas		<a href="https://glycosmos.org/glycomeatlas">https://glycosmos.org/glycomeatlas</a>
4	GlycoPOST		<a href="https://glycopost.glycosmos.org/">https://glycopost.glycosmos.org/</a>
5	GlyComb		<a href="https://glycomb.glycosmos.org/">https://glycomb.glycosmos.org/</a> (予定)
6	GlyTouCan		<a href="https://glytoucan.org">https://glytoucan.org</a>
7	UniCarb-DR		<a href="https://unicarb-dr.glycosmos.org">https://unicarb-dr.glycosmos.org</a>
8	GlycoPathwayRepo		未定

### (2) ツール等一覧

No.	名称	別称・略称	URL
1	GRable		<a href="https://glycosmos.org/grable">https://glycosmos.org/grable</a>
2	GlycoMaple		<a href="https://glycomaple.glycosmos.org">https://glycomaple.glycosmos.org</a>
3	WURCSFramework		<a href="https://gitlab.com/glycoinfo/wurcsframework">https://gitlab.com/glycoinfo/wurcsframework</a>
4	MolWURCS		<a href="https://gitlab.com/glycoinfo/molwurcs">https://gitlab.com/glycoinfo/molwurcs</a>
5	GlycanBuilder4Web		<a href="https://gitlab.com/glyconavi/glycanbuilder2web">https://gitlab.com/glyconavi/glycanbuilder2web</a>
6	GlycanBuilder2		<a href="https://github.com/glycoinfo/GlycanBuilder2">https://github.com/glycoinfo/GlycanBuilder2</a>
7	Glycoworkbench		<a href="https://gitlab.com/glycoinfo/glycoworkbench">https://gitlab.com/glycoinfo/glycoworkbench</a>
8	WURCSRDF		<a href="https://gitlab.com/glycoinfo/wurcsrdf">https://gitlab.com/glycoinfo/wurcsrdf</a>
9	GlycanFormatConverter		<a href="https://gitlab.com/glycosmos/gfc">https://gitlab.com/glycosmos/gfc</a>

### §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】

本年度は、RDF データの整理・改良を DBCLS と共同で行い、複合糖質リポジトリ GlyComb における糖ペプチド・糖タンパク質の登録システムを開発・公開する。さらに、MicroGlycoRepo の設計および GlycoPathwayRepo の開発・公開、GlycoPOST と UniCarb-DR 間の連携と GlyYouCan のバージョンアップの設計を行なう。キュレーションシステムの拡張開発も実施する。ツール開発においては、HELM 形式のルールおよびエディターの調査および WURCS の導入を検討する。

##### 【野口研究所】

本年度は、糖鎖科学研究支援ツールの開発において、糖鎖描画ツール、質量分析データ解析ツールの機能分割を実施する。また、GlyCosmos と GlycoNAVI との連携を実施する。さらに、追加実施として PDB 解析ツールである PDB2Glycan の SNFG 表記法への対応を実施する。達成目標としては、機能分割については各ツールの機能解析を終了する。また、GlyCosmos との連携については、連携方法を協議する。PDB 解析ツールに関しては、解析結果の SNFG 表記法の導入を行う。

##### 【新潟大学】

GlycoPOST と UniCarb-DR の連携としては、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改良する。さらに、統一性を高めユーザビリティの向上を図る。また、互いに API を用意し、片方に登録したら相手にも登録されるシステムを開発する。この設計について検討し、開発に着手する。また、GlycoPOST は、GlyCosmos に加え jPOST とも連携を強化する。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。本年度はこれらのデータをキュレーションシステムに導入するための設計を行う。これらをより効率的に実現するために、創価大学内に GlycoPOST サーバーを新設し、現在サーバを運用している国立遺伝学研究所から移設することにより、運用管理の効率化と GlyCosmos との高度な連携を実現する。

##### 【産総研】

LM-GlycoRepo の設計:創価大と協力し開発公開している LM-GlycomeAtlas に、登録数を増加し利用者を増やすためにリポジトリシステムを設置する予定である。本 DB では各組織におけるレクチンマイクロアレイ結果とレクチン染色像とを視覚的に表示しており、初年度は、レクチンマイクロアレイ結果や組織画像、レクチン染色画像の規格の標準化や画像処理システムの設計および開発など登録者にとって使いやすい入力方法を検討し、その基礎的開発を実施する。

GlyComb や GlyCosmos との連携:ACGG-DB (GGDB、GlycoProtDB、LfDB、GDGDB、PACDB) のデータを用いた GlyComb 開発や GlyCosmos へのデータ共有の迅速化を目指し速やかな公開を実施する。GlycoProtDB 内

にある Glyco-RIDGE (ペプチドと糖鎖組成) のデータを用いて、GlyComb への登録、発行された ID の GlycoProtDB 内のビューワー表示、GlyCosmos とのリンクなどの動作検証を行う。GGDB ではユーザーからのリクエストから発現情報の表示やデータの更新を進める。LfDB や GlycoProtDB についても同様にデータの拡充やキューレーションの効率化を進める。

GlyCosmos からの GRable 公開: 産総研で開発してきた質量分析装置で解析されたタンパク質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) のソフトウェアマニュアルを作成し、GlyCosmos から GRable を公開することで、多分野の研究者が利用できるようにする。

## (2) 進捗状況

### 【創価大学】

計画通りに概ね順調に進んだが、GlycoPathwayRepo の開発担当学生が本年度学位申請をすることになり、公開が 1 年延期することになった。なお、PubAnnotation の文献表示画面は GlyCosmos に導入し、機能拡張として糖鎖構造の画像が文献上に表示できるようにした。ツール開発においては、HELM に関して IUPAC のワーキンググループとして議論する会が定期的に開催されており、その会議に参加してきたが、特に開発は進んでいない。これまで HELM の開発を担当していた Pistoria Alliance はリソースがなく、IUPAC に引き継いでもらうための議論に加え、今後 HELM に糖鎖情報を入れるための検討ワーキンググループを設置する議題も上がっている。しかし数ヶ月に1回程度の頻度で集まっているため、次年度引き続き参加して検討していくことになった。他のメジャーなデータベースとの連携については、PubChem との打ち合わせを月 2 回行っており、GlyCosmos の糖鎖構造、糖タンパク質、疾患、パスウェイ情報を提供し、PubChem との相互リンクが定期的に自動的に更新できるようにした。追加実施として、GlycoPOST サーバー移設が完了し、創価大にテスト環境が設置された。LC の MIRAGE ガイドラインの導入などアップデート版が完成後に公式に公開する予定である。

### 【野口研究所】

本年度は GlyTouCan、GlyComb、MicroGlycoRepo の3つのリポジトリの開発を実施した。複合糖質構造のリポジトリである GlyComb の開発は、創価大・産総研と共同で実施し、糖ペプチドデータ登録システム開発・公開した。また、糖タンパク質の登録システムのプロトタイプを構築し、システムの検証を実施した。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。また、創価大と共同で MicroGlycoRepo の設計とプロトタイプ開発を実施し、ユーザーの入力システムとデータの表示画面のプロトタイプを開発した。国際糖鎖構造リポジトリの開発については、創価大と共同で、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。

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。また、配糖体や糖脂質などの複合糖質データやモチーフなどの糖鎖構造関連データの連

携を進めた。

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、糖鎖描画ツールおよび質量分析データ解析ツールの開発を実施した。糖鎖描画ツールについては機能分割を実施し、糖鎖描画ツールを含有する MS データ解析ツールである GlycoWorkbench の機能分割について検討した。主に、SNFG シンボルの生成機能、画像出力機能、GWS 形式変換機能について機能分割を実施した。また、質量分析データ解析ツールの機能分割について検討し、MS データの機能分割を実施した。さらに、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。

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。また、GlyTouCan について、国際 Scientific Advisory Board を設置し、国際コミュニティとの連携を強化した。

追加実施課題として、SNFG 表記法への対応を実施した。具体的には、PDB データを解析するツールである PDB2Glycan を改良し糖鎖科学における立体構造表記の標準となってきた Symbol Nomenclature for Glycans (SNFG)表記法に対応させた。また、糖鎖構造表記法 WURCS から立体構造を生成するツールを開発した。

#### 【新潟大学】

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ている。主な設計は終了し、実装しつつバグ修正などの作業に集中している。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中である。また、糖鎖や糖タンパク質データを GlyCosmos と連携するために、GlycoPOST および jPOST の互いのメタデータの整理を実施してきた。jPOST プロジェクトで進行している UniPOST 構想とも連携する形で、データの統合化が進められるようにシステムの設計を検討している。創価大学内に GlycoPOST を運用するためのサーバを新設した。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、まず、新サーバにおいて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ている。概ねシステム全体が問題なく稼働しつつあるため、次年度中に移行できるように最終調整中である。

#### 【産総研】

##### LM-GlycoRepo の設計:

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システムの設計を行なった。この設計には、インターフェースの統一のため、質量分析による糖鎖解析データの既存リポジリーである GlycoPOST を参考とし、登録者にとって使いやすい入力方法を検討した。また、ユーザー管理についても検討し、別途開発中の GlyComb と同様の仕様を採用することとした。またレクチンマイクロアレイの MIRAGE ガイドライン案を参考に、メタデータの入力および保管方法についても検討した。以上より、次年度の実装に向けたシステム設計の原案を作成し、当初の計画を達成した。

### **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。10 件程度のデータを用い、検索エラーなどを確認し、Accession Number が発行されることを確認した。

GlyCosmos への迅速なデータ供給と安定的な公開を目指す上で、ACGG-DB のサーバーを創価大内に移行し、公開の動作確認を行なった。GGDB では糖鎖遺伝子の機能の情報を提供する上でユーザーに発現情報として、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た。データ(222 遺伝子)のアップデートを図る上で、産総研外部の専門家をキュレーターとして招聘することとし、専門家への依頼の準備を進めた。

### **GlyCosmos からの GRable 公開:**

GRable を創価大学のサーバー装置にインストールし、GlyCosmos 上で GRable による解析が行えるように整備を行った。また、Glyco-RIDGE に基づく解析の原理を説明した GRable のアクセスページを作成した。このアクセスページ内において手持ちのデータが無くても GRable を試用できるようなデモデータをダウンロードできるような形で配布した。

## §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)	1件
	国際(欧文)	7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. Frederique Lisacek, Michael Tiemeyer, Raja Mazumder, Kiyoko F Aoki-Kinoshita. Worldwide Glycoscience Informatics Infrastructure: The GlySpace Alliance.. JACS Au 2023. 3(1):4-12. doi: 10.1021/jacsau.2c00477.
2. Ieva Bagdonaite, Stacy A. Malaker, Daniel A. Polasky, Nicholas M. Riley, Katrine Schjoldager, Sergey Y. Vakhrushev, Adnan Halim, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Alexey I. Nesvizhskii, Carolyn R. Bertozzi, Hans H. Wandall, Benjamin L. Parker, Morten Thaysen-Andersen, Nichollas E. Scott. Glycoproteomics. Nature Reviews Methods Primers 2022. 2(1). doi: 10.1038/s43586-022-00128-4.
3. Masae Hosoda, Kazuhiro Aoki, Yann Guerardel, Issaku Yamada, Kiyoko F Aoki-Kinoshita. Meeting report on the international symposium on microbial Glycoconjugates and the GlySpace alliance: from micro- to macroglycoscience (MiGGA symposium).. Glycobiology 2022. 32(12):1066-1067. doi: 10.1093/glycob/cwac062.
4. Hirokazu Yagi, Eijiro Amagasa, Masaaki Shiota, Issaku Yamada, Kiyoko F Aoki-Kinoshita, Koichi Kato. GALAXY ver3: updated web application for glycosylation profiling based on 3D HPLC map. Glycobiology 2022. 32(8):646-650. doi: 10.1093/glycob/cwac025.
5. Kiyoko F Aoki-Kinoshita. Functions of Glycosylation and Related Web Resources for Its Prediction.. Methods in molecular biology (Clifton, N.J.) 2022. 2499:135-144. doi: 10.1007/978-1-0716-2317-6\_6.
6. Thukaa Kouka, Sachiko Akase, Isami Sogabe, Chunsheng Jin, Niclas G. Karlsson, Kiyoko Aoki-Kinoshita. Computational Modeling of O-Linked Glycan Biosynthesis in CHO Cells. Molecules 2022. 27(6). doi: 10.3390/molecules27061766.
7. Akihiro Fujita, Kiyoko F Aoki-Kinoshita. Development of a novel monosaccharide substitution matrix for improved comparison of glycan structures.. Carbohydrate research 2022. 511:108496-108496. doi: 10.1016/j.carres.2021.108496.

#### (2) その他の著作物(総説、書籍など)

1. 細田正恵, 木下聖子, 藤田盛久、「糖鎖遺伝子発現情報からの糖鎖構造推定ツール GlycoMaple の開発」日本生化学会誌 2022. 94(4):623-628、doi: 10.14952/SEIKAGAKU.2022.940623.

### (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	3 件
	国際	3 件
口頭発表	国内	1 件
	国際	0 件
ポスター発表	国内	11 件
	国際	8 件

#### ② 招待講演

〈国内〉

1. K. F. Aoki-Kinoshita. Integration of data surrounding sialic acids through the GlyCosmos Portal. Sialoglyco2022, Sept. 7, 2022, Nagoya.
2. 山田一作. 糖鎖科学ポータル GlyCosmos. 第 45 回日本分子生物学会年会フォーラム「生命科学のデータベース活用法」. 2022 年 11 月 30 日、千葉
3. 山田一作. 糖鎖科学研究における DOI の利用. ジャパン・オープンサイエンス・サミット 2022. 2022 年 6 月 7 日

〈国際〉

1. K. F. Aoki-Kinoshita. Informatic infrastructure for the glycosciences to enhance computational life sciences. HUPO 2022, Dec. 7, 2022, Cancun, Mexico.
2. K. F. Aoki-Kinoshita. Using inference on Semantic Web data to enrich the data in GlyCosmos. 4<sup>th</sup> AGS Meeting & 9<sup>th</sup> Warren Workshop, Nov. 25, 2022, Gold Coast, Australia.
3. K. F. Aoki-Kinoshita. Expansion of the GlyCosmos Portal with disease and microbial data. Society for Glycobiology Annual Meeting, Nov. 17, 2022, online.

#### ③ 口頭講演

〈国内〉

木下聖子. ライフサイエンスに貢献するための糖鎖関連オミクスデータの統合. 第 11 回生命医薬情報学連合大会(IIBMP2022)、2022 年 9 月 14 日、大阪.

〈国際〉

なし

#### ④ ポスター発表

〈国内〉

1. 高橋悠志, 奥田修二郎, 塩田正明, & 木下聖子. UniCarb-DR: MIRAGE ベースのグライコムクス MS/MS スペクトルデータリポジトリ. トーゴーの日シンポジウム. 2022 年 10 月 5 日 (オンライン)
2. 松原正陽, 木下聖子, 山田一作. 糖鎖構造抽出ソフトウェアを用いた化合物データベースとの連携. トーゴーの日シンポジウム. 2022 年 10 月 5 日 (オンライン)
3. 土屋伸一郎, 木村直貴, 松原正陽, 木下聖子, 山田一作. 糖鎖構造の編集やデータベース検索が可

能なウェブインターフェイス GlycanBuilder2-web の開発. トーゴの日シンポジウム. 2022 年 10 月 5 日 (オンライン)

4. 山田一作, 松原正陽, 土屋伸一郎, 木下聖子. GlycoNAVI: やさしい糖鎖データ検索のための統合化. トーゴの日シンポジウム. 2022 年 10 月 5 日 (オンライン)
5. 松原正陽, 木下聖子, 山田一作. 構造式から糖鎖構造を判別・抽出するソフトウェアの開発. 第 41 回日本糖質学会年会. 2022 年 10 月 1 日. 大阪.
6. 土屋伸一郎, 木村直貴, 松原正陽, 木下聖子, 山田一作. GlycanBuilder2-web: 糖鎖構造編集とデータベース検索が可能なウェブインターフェイス. 第 41 回日本糖質学会年会. 2022 年 9 月 29 日. 大阪.
7. 細田正恵, 木下聖子. 糖鎖アラインメントツールを用いた CFG と LfDB におけるレクチン認識糖鎖部位の比較. 第41回日本糖質学会年会. 2022 年 9 月 29 日~10 月 1 日. 大阪.
8. 藤田晶大, 木下聖子. 単糖置換行列を用いた糖鎖比較法. 第41回日本糖質学会年会. 2022 年 9 月 29 日~10 月 1 日. 大阪.
9. 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登録のためのレポジトリ開発. 第41回日本糖質学会年会. 2022 年 9 月 29 日~10 月 1 日. 大阪.
10. Yushi Takahashi, Shujiro Okuda and Kiyoko Aoki-Kinoshita. Integration of UniCarb-DR and GlycoPOST towards a comprehensive glycomics data repository workflow. 第11回生命医薬情報学連合大会 (IIBMP2022). 2022 年 9 月 13 日. 大阪.
11. Akihiro Fujita and Kiyoko Aoki-Kinoshita. Development of monosaccharide substitutions for glycan comparison. 第11回生命医薬情報学連合大会 (IIBMP2022). 2022 年 9 月 14 日. 大阪.

〈国際〉

1. Atsuto Uchino, Yann Guérardel, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. MicroGlycoDB: a prototype database of microbial glycan-related information. 4<sup>th</sup> Australasian Glycoscience Symposium and 9<sup>th</sup> Warren Workshop. Gold Coast, Australia. 2022 年 11 月 22 日~25 日.
2. Yushi Takahashi, Shujiro Okuda and Kiyoko Aoki-Kinoshita. A comprehensive glycomics data repository workflow by strengthening collaboration between UniCarb-DR and GlycoPOST. 4<sup>th</sup> Australasian Glycoscience Symposium and 9<sup>th</sup> Warren Workshop. Gold Coast, Australia. 2022 年 11 月 22 日~25 日.
3. Koichi Arakawa and Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. GSS: a web tool to simulate signaling pathways involving glycosylation. 4<sup>th</sup> Australasian Glycoscience Symposium and 9<sup>th</sup> Warren Workshop. Gold Coast, Australia. 2022 年 11 月 22 日~25 日.
4. Akane Kon, Koichi Arakawa and Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. Development of a database of glycosylation reaction parameters, GlycoParaDB. 4<sup>th</sup> Australasian Glycoscience Symposium and 9<sup>th</sup> Warren Workshop. Gold Coast, Australia. 2022 年 11 月 22 日~25 日.
5. Sunmyoung Lee, Yushi Takahashi, Tamiko Ono, Shiota Masaaki, Akihiro Fujita, Kiyoko Aoki-Kinoshita. Development of a new glycan-related pathway repository: GlycoPathwayRepo. 4<sup>th</sup> Australasian Glycoscience Symposium and 9<sup>th</sup> Warren Workshop. Gold Coast, Australia. 2022 年 11 月 22 日~25 日.
6. Masae Hosoda and Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. Analysis of glycans recognized by lectins using

the MCAW multiple glycan alignment tool and experimental data of lectin-glycan interactions. 4<sup>th</sup> Australasian Glycoscience Symposium and 9<sup>th</sup> Warren Workshop. Gold Coast, Australia. 2022年11月22日～25日.

7. Akihiro Fujita and Kiyoko Aoki-Kinoshita. Development of an efficient glycan structure search tool using a new score matrix based on monosaccharide structures. 4<sup>th</sup> Australasian Glycoscience Symposium and 9<sup>th</sup> Warren Workshop. Gold Coast, Australia. 2022年11月22日～25日.
8. Akane Kon, Koichi Arakawa and Kiyoko F. Aoki-Kinoshita. Using GlycoSim to simulate O-glycosylation of mouse ES cells. Society for Glycobiology Annual Meeting. 2022年11月14日～18日. オンライン.

**(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

**(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

該当なし

**§5. 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
2022年 6月24日	GlyCosmosプロジェクト キックオフミーティング	JST 東京本部	25人	プロジェクト キックオフ&研究進捗報告のためのミーティング
2023年 1月6日	GlyCosmosプロジェクト 進捗報告会議	創価大学	20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**

該当なし

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。	<a href="https://glyconavi.org">https://glyconavi.org</a>	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	<a href="https://gitlab.com/glycoinfo/wurcsframework">https://gitlab.com/glycoinfo/wurcsframework</a>	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	<a href="https://gitlab.com/glycoinfo/molwurcs">https://gitlab.com/glycoinfo/molwurcs</a>		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	<a href="https://gitlab.com/glyconavi/glycanbuilder2web">https://gitlab.com/glyconavi/glycanbuilder2web</a>	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	<a href="https://github.com/glycoinfo/GlycanBuilder2">https://github.com/glycoinfo/GlycanBuilder2</a>	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	<a href="https://gitlab.com/glycoinfo/glycoworkbench">https://gitlab.com/glycoinfo/glycoworkbench</a>		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	<a href="https://gitlab.com/glycoinfo/wurcsrdf">https://gitlab.com/glycoinfo/wurcsrdf</a>	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	<a href="https://gitlab.com/glycoinfo/glycanformatconverter">https://gitlab.com/glycoinfo/glycanformatconverter</a>	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	<a href="https://gitlab.com/glyconavi/pdb2glycan">https://gitlab.com/glyconavi/pdb2glycan</a>	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	<a href="https://gitlab.com/glycosmos/sugardrawer">https://gitlab.com/glycosmos/sugardrawer</a>	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)
11	GlycoPOST		グライコムクス・グライコプロテオミクス質量分析データのリポジトリ	<a href="https://glycopost.glycosmos.org">https://glycopost.glycosmos.org</a>	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]
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	<a href="https://glycosmos.org">https://glycosmos.org</a>	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.
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	<a href="https://glycosmos.org/glycomeatlas">https://glycosmos.org/glycomeatlas</a>	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.

No.	正式名称	別称・略称	概要	URL	公開日	状態	分類	関連論文
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	<a href="https://glycosmos.org/lmglycomeatlas">https://glycosmos.org/lmglycomeatlas</a>	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.
15	GlyYouCan	GlyYouCan	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	<a href="https://glytoucan.org/">https://glytoucan.org/</a>	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 GlyYouCan version 3.0. Nucleic Acids Res. 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、グライコムクス MS/MS スペクトルを登録することができる	<a href="https://unicarb-dr.glycosmos.org/">https://unicarb-dr.glycosmos.org/</a>	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.
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	<a href="https://glycosmos.org/grable">https://glycosmos.org/grable</a>	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	<a href="https://glycosmos.org/glycomaple">https://glycosmos.org/glycomaple</a>	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