

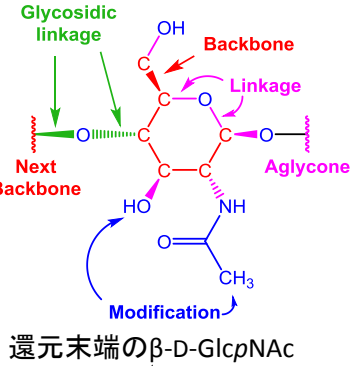
# WURCSFramework - Glycoinformatics Library for Glycan Structure Analysis and Representation Using WURCS

\*松原 正陽<sup>1</sup>, 山田 一作<sup>1</sup>, 木下 聖子<sup>2,3</sup>, 青木 伸行<sup>2</sup>, 土屋 伸一郎<sup>2</sup>, 成松 久<sup>3</sup>

<sup>1</sup>野口研究所, <sup>2</sup>創価大学, <sup>3</sup>産業総合研究所、糖鎖グループ

## はじめに

**WURCS** (Web3 Unique Representation of Carbohydrate Structures) は、データベース上の複雑な糖鎖構造データを、単糖とその間の結合に関する原子レベルの情報に基づいて一意な線形文字列に変換するための表記法およびアルゴリズムである。WURCSは糖鎖構造を一意的に表す記述子としてだけでなく、様々な糖鎖構造を解釈するための枠組み (Framework) としても利用可能である。



## 単糖残基のWURCS

**SkeletonCode**

1	X-C-H	a
2	H-C-X	2
3	X-C-H	1
4	H-C-X	2
5	H-C-X	2
6	H-C-H	h

**MOD**

- 1-5 → 1-5
- 2 → 2\*NCC/3=O

**Anomeric Information**

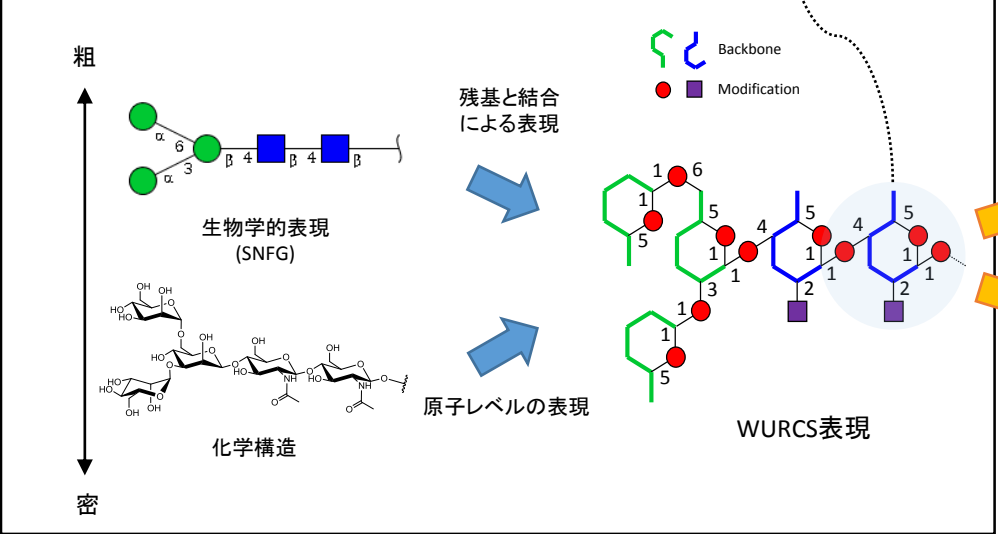
- 1b (βアノマー、C-1位)

**ResidueCode**

a2122h-1b\_1-5\_2\*NCC/3=O

SkeletonCode: 炭素骨格 (Backbone) の文字列表記  
MOD: 置換基 (LinkageとModification) の文字列表記

## コアN型糖鎖の表現方法の比較



## 糖鎖全体のWURCS

**ユニークな単糖残基**

- 1: β-D-GlcNAc [a2122h-1b\_1-5\_2\*NCC/3=O]
- 2: β-D-Manp [a1122h-1b\_1-5]
- 3: α-D-Manp [a1122h-1a\_1-5]

**UniqueRES List**

[a2122h-1b\_1-5\_2\*NCC/3=O][a1122h-1b\_1-5][a1122h-1a\_1-5]

**RES Sequence**

1-1-2-3-3

**LIN List**

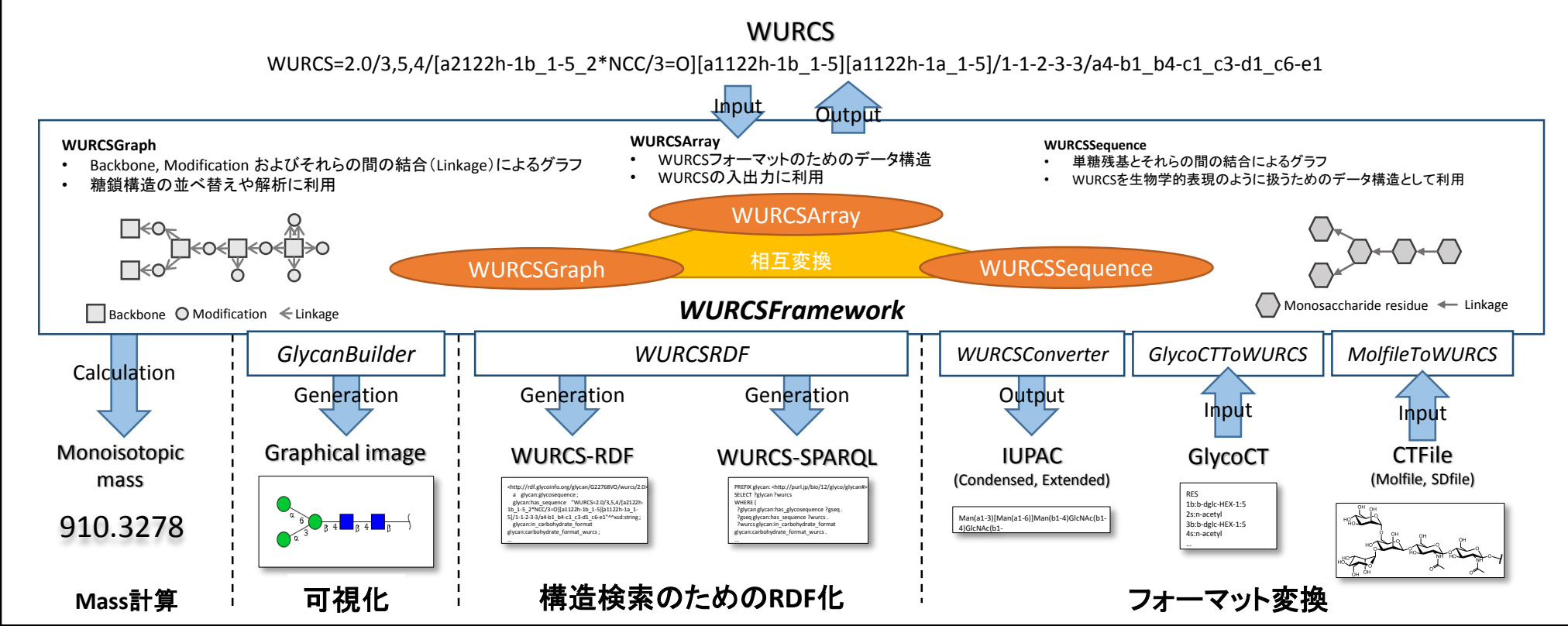
a4-b1\_b4-c1\_c3-d1\_c6-e1

**WURCS**

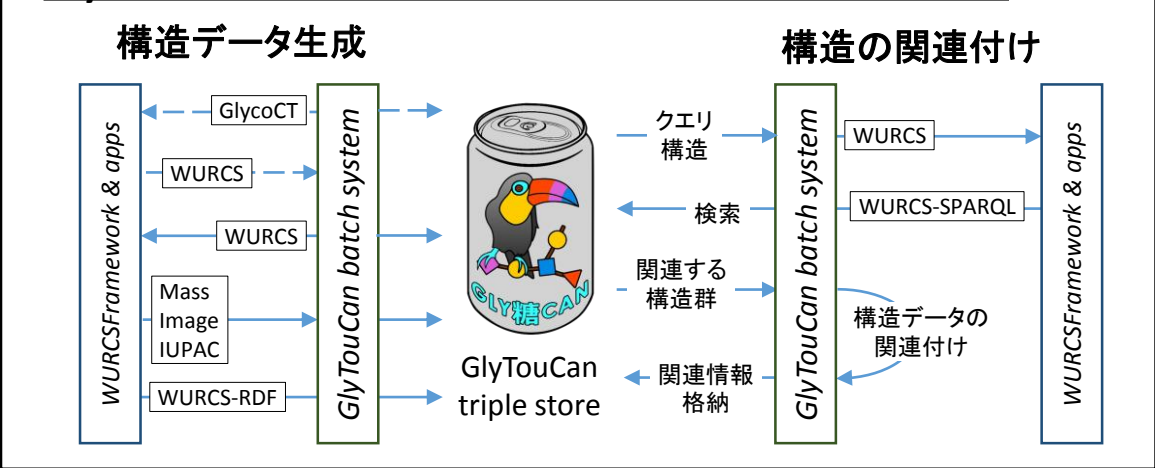
WURCS=2.0/3,5,4/[a2122h-1b\_1-5\_2\*NCC/3=O][a1122h-1b\_1-5][a1122h-1a\_1-5]/1-1-2-3-3/a4-b1\_b4-c1\_c3-d1\_c6-e1

RES: 単糖残基  
UniqueRES: ユニークなRES  
LIN: 残基を繋ぐ結合の文字列表記

## WURCSFrameworkと関連アプリケーションの機能と利用



## GlyYouCanシステムにおけるWURCSFrameworkの利用



## まとめ

**WURCSFramework**は炭水化物構造を表現および解析するためのJavaライブラリである。WURCSの入出力を中心に、WURCSの考え方に基づいて糖鎖データ構造をグラフのように操作するための様々な機能が利用できる。このライブラリを中心として、フォーマット変換や可視化、Semantic Web技術を用いた構造検索のためのRDF化等、様々な用途に応じた関連アプリケーションの開発も行っている。これらの機能はGlyYouCanシステムにおいて、構造データ生成および構造の関連付けを行うために利用されている。

