

「ライフサイエンス知識の階層化・統合化事業」

研究代表者 京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター
金久 實

(1) 共通基盤技術開発

知識処理技術開発

金久 實、山西 芳裕

ウェブ技術開発

馬見塚 拓、瀧川 一学

(2) 統合データベース開発・運用

統合データベース開発

五斗 進、伊藤 真純

医薬品・化合物データバンク開発

金子 周司、服部 正泰

目的

- 1 . すでに国際的なバイオ情報サービスとなっているゲノムネットを京都大学の事業とし、化学研究所バイオインフォマティクスセンターに分子情報を中心とした統合データベースを構築する。
- 2 . 既存の DBGET システムを拡張して、半年間後（2007年10月）に日本語キーワードでの統合データベース検索システムを提供。
- 3 . 3年間後（2010年4月）に Google-like なランキングを取り入れた革新的なキーワード検索システムを提供。
- 4 . 大量データの統合処理と生物学的意味づけ、とくに創薬・医療への応用を可能にする解析システムを提供。
- 5 . 2010年までにライフサイエンス分野における世界最高水準の知的情報基盤を確立。

共通基盤技術開発

1 . 知識処理技術開発 (金久、山西)

- 化合物知識情報処理技術開発
- 医薬品知識情報処理技術開発

化合物部分構造・類似構造検索
SUBCOMP, SIMCOMP, KCaM
化学反応予測
PathComp, RPAIR
生物学的意味付け

2 . ウェブ技術開発 (馬見塚、瀧川)

- 日本語化支援技術開発
- キーワード検索技術開発
- ランキング技術開発

ライフサイエンス辞書
日本語で入力したキーワードの翻訳
検索結果の翻訳支援

ゲノムネット統合データベース キーワード検索の例

GenomeNet 統合DB 配列解析 立体構造解析 糖鎖解析 化合物解析 more >>

検索オプション
カスタマイズ
ヘルプ

糖尿病 薬

統合DB検索 エントリー取得

薬効分類
3 代謝性医薬品
39 その他の代謝性医薬品
396 糖尿病用剤
3961 スルフォニル尿素系製剤
dr:D00219 アセトヘキサミド; ジメリン(塩野義)
dr:D00271 クロルプロバミド; アベマイド(小林化工)
... >> すべてを表示
>> ターゲット
ko:K05032 ABCC8, SUR1; ATP-binding cassette, subfamily C (CFTR/MRP), member 8
>> 開発の歴史
path:map07018 Sulfonamide derivatives - hypoglycemic agents

3962 ビグアナイド系製剤
dr:D00944 メトホルミン塩酸塩; グリコラン(日本新薬); ネルビス(三和化学); メデット(トーアエイヨー);
メトリオン(シオノ); メルビン(大日本)
dr:D02206 塩酸ブホルミン; 塩酸ブホルミン(東洋ファルマー); ジベトスB(日医工); ジベトンス(寿)
... >> すべてを表示

バスウェイマップ
5. ヒトの病気
5.3 代謝疾患
path:hsa04940 I型糖尿病
path:hsa04930 II型糖尿病
path:hsa04950 若年発症成人型糖尿病 (MODY)

内分泌・代謝疾患
炭水化物代謝の障害
糖尿病
I型糖尿病
mim:222100 DIABETES MELLITUS, INSULIN-DEPENDENT; IDDM
II型糖尿病
mim:125853 DIABETES MELLITUS, NONINSULIN-DEPENDENT; NIDDM
若年発症成人型糖尿病 (MODY)
mim:125850 MATURITY-ONSET DIABETES OF THE YOUNG, TYPE I; MODY1
mim:125851 MATURITY-ONSET DIABETES OF THE YOUNG, TYPE II; MODY2
... >> すべてを表示

GenomeNet 統合DB 配列解析 立体構造解析 糖鎖解析 化合物解析 more >>

検索オプション
カスタマイズ
ヘルプ

糖尿病 遺伝子

統合DB検索 エントリー取得

内分泌・代謝疾患
炭水化物代謝の障害
糖尿病
I型糖尿病
mim:222100 DIABETES MELLITUS, INSULIN-DEPENDENT; IDDM
>> 遺伝子 geneid:3117 HLA-DQA1; major histocompatibility complex, class II, DQ alpha 1
geneid:3118 HLA-DQA2; major histocompatibility complex, class II, DQ alpha 2
... >> すべてを表示
>> バスウェイ path:hsa04940 I型糖尿病

II型糖尿病
mim:125853 DIABETES MELLITUS, NONINSULIN-DEPENDENT; NIDDM
>> 遺伝子 geneid:3767 KCNJ11; potassium inwardly-rectifying channel, subfamily J, member 11
geneid:6833 ABCC8, SUR1; ATP-binding cassette, sub-family C (CFTR/MRP), member 8
... >> すべてを表示
>> バスウェイ path:hsa04930 II型糖尿病

タンパク質ファミリー
G-タンパク質共役受容体
ロドプシンファミリー: ペプチドホルモン
バソプレシン受容体
ko:K04228 AVPR2; arginine vasopressin receptor 2
>> リガンド ko:K05242 AVP; arginine vasopressin
geneid:554 AVPR2; arginine vasopressin receptor 2 (nephrogenic diabetes insipidus)
>> リガンド geneid:551 AVP; arginine vasopressin (neurophysin II, antidiuretic hormone, diabetes insipidus, neurohypophyseal)

ロドプシンファミリー: その他
脂肪酸受容体
pmid:15619630 Free fatty acids regulate gut incretin glucagon-like peptide-1 secretion through GPR120
geneid:338557 GPR120, GPR129; G protein-coupled receptor 120
>> リガンド cpd:C00162 Fatty acid

タンパク質ファミリー
GTP結合タンパク質
低分子量Gタンパク質
ko:K07845 RRAD, RAD1; Ras-related associated with diabetes
geneid:6236 RRAD; Ras-related associated with diabetes

- 全データベース一括検索
- 日本語キーワードの自動翻訳

- 検索結果を知識の階層に重ねて表示
- ヒットしたデータ、関連データをランキング表示

- db:entry をクリックして実際のデータを取得

統合データベース開発・運用

1 . 統合データベース開発（五斗、伊藤）

- LinkDB開発

外部データベースの取り込み
データベース更新プログラムの
高速化・高機能化
データの階層化

2 . 医薬品・化合物データバンク開発（金子、服部）

- 副作用情報を含んだ医薬品の分子情報

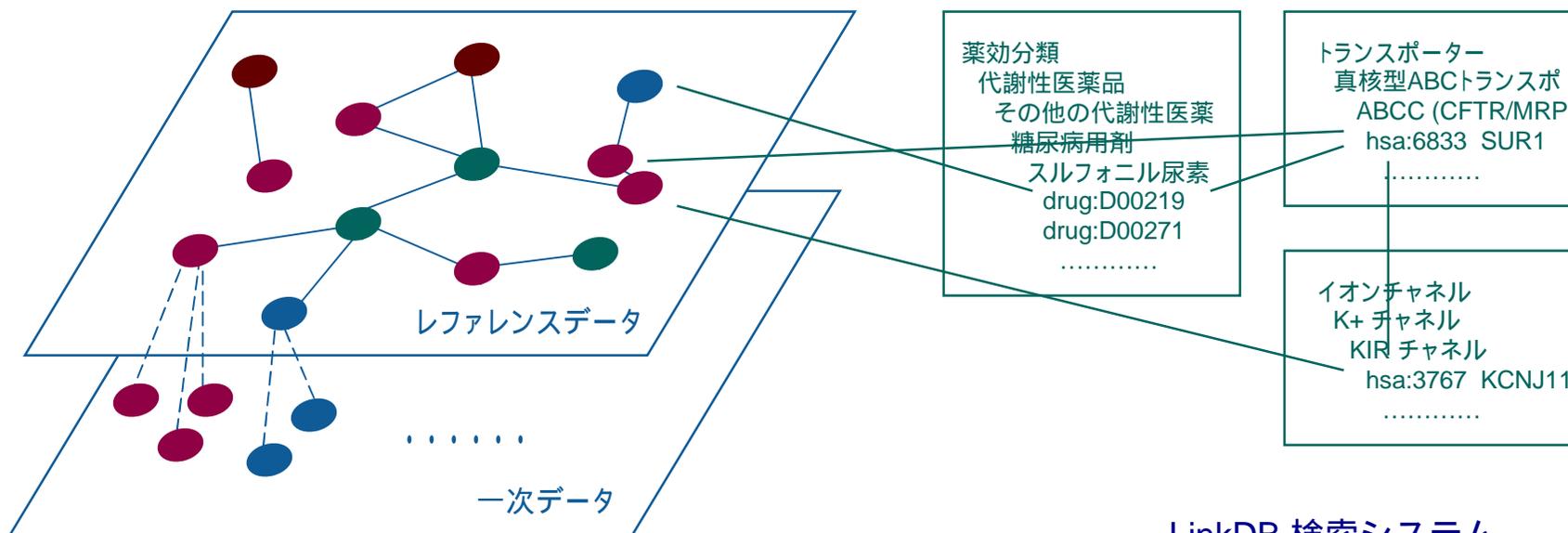
医薬品添付情報
KEGG DRUG 構造

ゲノムネット統合データベース データの階層化と知識の階層化

LinkDB

世界中のデータベースの各データエントリーを db:entry という名前で管理、リンクづけ
レファレンスデータと一次データの階層化

KEGG BRITE データを用いて様々な
分野の知識の階層と対応づけ



LinkDB 検索システム

実際のデータは利用者が db:entry に対応した url
(ウェブアドレス)で各データベースサイトから取得

配列データ 立体構造データ パスウェイデータ 化合物データ

● ● ● ●

- Google のページランキング技術を取り入れたキーワード (日本語・英語) 検索
- 主要 DB のデータを優先
- その中でも KEGG BRITE の知識階層と対応づけられたデータを優先
- 計算プログラムを用いた大量データ解析

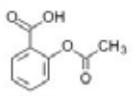
医薬品・化合物データベース

日本医薬品情報センター
医療用医薬品集

KEGG DRUG

QuickTime[®] C²
TIFFファイルの表示には、AppleのQuickTime[®]が必要です。
C:\Program Files\Apple Computer\QuickTime\Components\QTTime.dll

KEGG DRUG: D00109 Help

Entry	D00109 Drug
Name	Aspirin (JP15/USP); Easprin (TN)
Formula	C ₉ H ₈ O ₄
Mass	180.0423
Structure	 D00109 Mol file KCF file DB search
Target	cyclooxygenase-1 (COX-1) inhibitor [HSA:5742] [EC:1.14.99.1]; cyclooxygenase-2 (COX-2) inhibitor [HSA:5743] [EC:1.14.99.1]
Activity	Analgesic; Antipyretic; Antirheumatic
Remark	Same as: C01405 Therapeutic category: 1143 3399
Comment	Component of Bufferin (TN), Percodan (TN), Darvon compound-65 (TN), E.A.C (TN)
Pathway	PATH: map07110 Benzoic acid family
Other DBs	CAS: 50-78-2 PubChem: 7847177
LinkDB	All DBs
KCF data	Show

医薬品添付文書
副作用情報

分子構造
薬効
ターゲット

ゲノムネット統合データベース 大量データ解析の例

