



2007年度成果

	ゲノムネット統合DB	医薬品・化合物DB(追加事項)
2007年7月1日	全データベース一括検索機能公開 外部DBを含むLinkDB新バージョン公開	
9月1日		ゲノムネット医薬品DB第1版 (JAPIC医療用医薬品)公開
10月1日	ライフサイエンス辞書(LSD)を用いた 日本語支援(和英・英和)ツール公開	
2008年1月1日	LinkDBの新インターフェース公開	
1月下旬	講習会開催(30, 31日)	ゲノムネット医薬品DB第2版 (JAPIC一般用医薬品)公開(28日)
4月1日	化合物・糖鎖解析システム公開	

2008年度計画

ゲノムネット統合DB	医薬品・化合物DB
医薬品・化合物に限定して継続 新規検索エンジンの開発	糖鎖・脂質を含む化合物DB 感染症など疾患との関連



ゲノムネット統合データベース

カテゴリー	bget	bfind	blink	brite	DB数	内訳
1. KEGG					18	BRITE, PATHWAY, MODULE, DISEASE, DRUG, ORTHOLOGY, GENOME, VGENOME, GENES, DGENES, EGENES, VGENES, OGENES, COMPOUND, GLYCAN, ENZYME, REACTION, RPAIR
2. ミラーしているDB				×	>16	RefSeq, UniProt, PRF, PDB, EPD, Transfac, PROSITE, BLOCKS, ProDom, PRINTS, Pfam, OMIM, PMD, AAindex, CarbBank, LitDB, ...
3. 検索・リンクのみのDB	×			×	2	INSDC (DDBJ/GenBank/EMBL の non-redundant database) InterPro
4. リンクだけのDB	×	×		×	>500	DB一覧は http://www.genome.jp/dbget/linkdb.html 参照
5. PubMed		×		×	1	PubMed はリンクのみのDBであるが、bget で日本語訳が可能

(注1) bget, エントリー取得
bfind, キーワード検索
blink, LinkDB検索
brite, 機能階層(オントロジー)検索

(注2) bget, bfind のページには日本語支援ツールが組み込まれている

(注3) カテゴリー4のDBのうち主要なものはbfind検索結果画面に表示され
実質的にキーワード検索が可能になっている

2007年度事業計画のうち、公開を予定していた計画はすべて達成済み
現在は bfind にかわる新規検索エンジンの開発に着手

2008年度以降の事業計画

(当初) カテゴリー3と4のDBを多数追加 (変更) 医薬品・化合物に関するカテゴリー3と4のDBを追加
(変更なし) インデクシングを用いた新規検索エンジンを段階的に公開
(当初) ランキングシステムの開発 (変更) 医薬品・化合物に限定するのでランキングはデータの階層で対応



ライフサイエンス知識の階層化・統合化事業(京都大学)

全データベース一括検索機能

GenomeNet

KEGG KEGG2 PATHWAY BRITE DRUG DBGET

検索設定 ヘルプ [English | Japanese]

Search for

カテゴリ 1 ~ 3 のデータベース

- 総合データベース
- オントロジー
 - KEGG BRITE
 - パスウェイ
 - KEGG PATHWAY
 - KEGG MODULE
 - 病気
 - KEGG DISEASE
 - OMM
 - 医薬品
 - KEGG DRUG
- ゲノム
 - KEGG GENOME
 - KEGG VGENOME
 - 遺伝子
 - KEGG ORTHOLOGY
 - KEGG GENES
 - KEGG OGENES
 - KEGG EGENES
 - KEGG VGENES
 - KEGG OGENES
 - アミノ酸配列
- データベースリソース
 - KEGG 生物種一覧
 - KEGG パスウェイ一覧
 - KEGG DISEASE 日本語版
 - KEGG DRUG 日本語版
 - KEGG Atlas Metabolism map
 - KEGG Atlas Cancer map
- マップ
 - ゲノム情報: パスウェイ
 - 音報: オントロジー
 - 情報
 - ソース
 - ソース
 - ソース
- ベース
 - KEGG 総合データベース
 - 1. KEGGを中心に世界中のライフサイエンスデータベースを統合
 - 2. 全データベース一括検索
 - 3. 他の主要サイトへの直接リンク
 - 4. Java Web Start でのプログラム起動
 - 5. LSD辞書ツールでの英和・和英変換
 - 6. LinkDBにより500以上のDBへリンク
- ア
- ベース
 - 英語
 - 国語
- ア
- 縦プロフィール
- ール
- ジー検索
- RRN - 複数アライメント
- ーションサーバー
- ティグ作成
- ーク予測
- 化合物構造検索

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

DBGET Search Result: 統合データベース aspirin

Search for

Database: 統合データベース - Search term: aspirin

オントロジー

KEGG BRITE

- br08101 Enzyme ligands
- br08301 Drug: Therapeutic category of drugs
- br08303 ATC; Anatomical Therapeutic Chemical Classification

病気

OMM

- 208550 [NCBI] #208550 ASTHMA, NASAL POLYPS, AND ASPIRIN INTOLERANCE ;ASA TRIAD ASTHMA, ASPIRIN-INDUCED, SUSCEPTIBILITY TO, INCLUDED;; ASTHMA AND NASAL POLYPS, INCLUDED
- 601399 [NCBI] #601399 PLATELET DISORDER, FAMILIAL, WITH ASSOCIATED MYELOID MALIGNANCY ;FPDMM:: PLATELET DISORDER, ASPIRIN-LIKE;; THROMBOCYTOPENIA, FAMILIAL, WITH PROPENSITY TO ACUTE MYELOGENOUS LEUKEMIA; FPD/AML
- 608223 [NCBI] 608223 ASPIRIN RESISTANCE

医薬品

KEGG DRUG

- D00109 [KegDraw] [Jmol] Aspirin (JP15/JSP; Acetylsalicylic acid; Easprin (TN); [PubChem:7847177] [ChEBI:15365] [DrugBank:DB00945] [CCD:AIN])
- D02079 [KegDraw] [Jmol] Codein - aspirin mixt; Empirin compound (TN); [PubChem:7849141]
- D02154 [KegDraw] [Jmol] Aspirin - oxycodone hydrochloride - oxycodone terephthalate mixt; Percodan (TN); [PubChem:7849215]
- D02155 [KegDraw] [Jmol] Aspirin - caffeine - propoxyphene hydrochloride mixt; Darvon compound-65 (TN); [PubChem:7849216]
- D03385 [KegDraw] [Jmol] Carbaspirin calcium (USAN); Carbasalate calcium (INN); [PubChem:17397531]

*** > display all

アミノ酸配列

UNIPROT

- CLAP1_STYCL [ExPASy] [Q97395] Clavaspirin precursor.

PRF



リンク情報を用いた外部データベースのキーワード検索

DBGET Search Result: DRUG aspirin

http://www.genome.jp/dbget-bin/www_bfind_sub?mode=

GenomeNet

Search Drug for aspirin

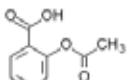
Database: DRUG - Search term: aspirin (Total 8 hits)

D00109 [KegDraw](#) [Jmol](#)
Aspirin (JP15/USP); Acetylsalicylic acid; Easprin (TN); [PubChem:7847177] [ChEBI:15365] [DrugBank:DB00945] [CCD:AIN]

D00079 [KegDraw](#) [Jmol](#)
Codein - aspirin mixt; Empirin compound (TN); [PubChem:7849141]

D00154 [KegDraw](#) [Jmol](#)

DrugBank

Entry	D00109	Drug
Name	Aspirin (JP15/USP); Acetylsalicylic acid; Easprin (TN)	
Formula	C9H8O4	
Mass	180.0423	
Structure		
Target	cyclooxygenase-1 (COX); cyclooxygenase-2 (COX-2)	
Activity	Analgesic; Antipyretic; Antirheumatic	
Remark	Same as: C01405 Therapeutic category: A01AD05 B01AC06 BRITE hierarchy	
Comment	Name previously used: Component of Bufferin E.A.C (TN)	
Pathway	PATH: map07110 Benzodiazepines PATH: map07219 Cyclo-oxygenase	
Other DBs	CAS: 50-78-2 PubChem: 7847177 ChEBI: 15365 DrugBank: DB00945 CCD: AIN DailyMed: aspirin	
LinkDB	All DBs	
KCP data	Show	

MSDchem : Molecule

Distinct chemical molecule that is composed by atoms and bonds

Code	AIN
3 letter code	AIN
Extended Code	not assigned
1 letter code	not assigned
Molecule name	2-(ACETYOXY)BENZOIC ACID
All atoms	21
All atoms except hydrogen	13
Formal charge	0
Stereo smile	CC(=O)Oc1ccccc1C(O)=O
Non stereo smile	CC(=O)Oc1ccccc1C(O)=O
Systematic name	2-(acetyloxy)benzoic acid
IUPAC Inchi	1/C9H8O4/c1-6(10)13-8-5-3-2-4-7(8)9(11)12/h2-5H,1H3,(H,11,12)
Molecule details	not assigned
Formula	C9 H8 O4
Defined at	2004-04-08
Last modified at	2007-08-16
EBI name	not assigned
EBI Id	108114
Additional name	not assigned
Classification	not assigned
Cas reg number	not assigned
Therapeutic category	not assigned
Merck Id	not assigned
Polymer topology	not assigned
Polymer code	not assigned
Polymer sub type	not assigned
Hetgroup type	not assigned
Obsoleted	NON-POLYMER
Parent	not assigned
Topological variant	not assigned

PubChem Substance

Substance Summary:

Compound Displayed [PubChem](#)

SID: 7847177
CID: 2244

Related Substances: 103 Links
Same, Connectivity: 102 Links
Similar Substances: 3065 Links
Structure Search

Source: KEGG (D00109)

ChEBI acetylsalicylic acid (CHEBI:15365)

Search CHEBI

ChEBI Name: acetylsalicylic acid
ChEBI ID: CHEBI:15365
Last Modified: 19 March 2008

Formula: C9H8O4
Mol Weight: 180.15747

ChEBI Ontology: 2-acetyloxybenzoic acid

Parents: acetylsalicylic acid (CHEBI:15365) is a non-steroidal anti-inflammatory drug (CHEBI:29475)
acetylsalicylic acid (CHEBI:15365) is a non-narcotic analgesic (CHEBI:29491)
acetylsalicylic acid (CHEBI:15365) has functional parent salicylic acid (CHEBI:15361)
acetylsalicylic acid (CHEBI:15365) is conjugate acid of acetylsalicylate (CHEBI:32718)

Children: acetylsalicylate (CHEBI:15713) is conjugate base of acetylsalicylic acid (CHEBI:15365)

IUPAC Name: 2-acetyloxybenzoic acid

カテゴリ-4のデータベース

ライフサイエンス辞書(LSD)を用いた日本語支援ツール

The screenshot shows the GenomeNet website interface. At the top, there are navigation links for KEGG, KEGG2, PATHWAY, BRITE, and DBGET. A search bar is present with the text 'Search 統合データベース for Alzheimer'. A red box highlights the '辞書ツール' (Dictionary Tool) link in the top navigation. Below the search bar, there are several sections: 'Ontology', 'KEGG BRITE', 'KEGG PATHWAY', 'Disease', and 'Gene and protein'. The 'Disease' section is expanded, showing a list of diseases related to Alzheimer's, including '104300 [NCBI] #104300 ALZHEIMER DISEASE; AD ;; PRESENILE AND SENILE DEMENTIA; ALZHEIMER DISEASE, FAMILIAL, 1, INCLUDED; AD1, INCLUDED;; ALZHEIMER DISEASE, EARLY-ONSET, WITH CEREBRAL AMYLOID ANGIOPATHY, INCLUDED'. A red arrow points from the 'senile dementia' link in the LSD dictionary tool to the '104300 [NCBI]' link in the GenomeNet search results.

LSD 和英辞書

LSD 和英辞書ツール
アルツハイマー

Alzheimer アルツハイマー

- 前方一致検索
- 後方一致検索
- 部分一致検索

ゲノムネット

ゲノムネットは、ゲノム情報を基盤とした新しい生命科学研究と創薬・医療・環境保全への応用を推進するために、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が提供するインターネットサービスです。

ゲノムネットは1991年9月に当時の文部省ヒトゲノムプログラムの一環として開発を開始し、1995年から構築を始めた KEGG の発展とともに、世界有数のバイオ情報サービスへと発展を遂げてきました。

2007年4月からは文部科学省ライフサイエンス分野の統合データベース整備事業に参加しています。その最初の成果として、日本語による医薬品データベースを9月1日に公開しました。また、日本語支援機能をもった DBGET統合データベース検索システムを10月1日に公開します。

ゲノムネット

Database: All databases - Search term: Alzheimer

Search All databases for Alzheimer

Ontology

KEGG BRITE

- ko00001 KO; KEGG Orthology (KO)
- ko00535 Proteoglycan; Proteoglycans
- br08901 Pathway; KEGG pathway maps

Pathway

KEGG PATHWAY

- bta05010 Alzheimer's disease - Bos taurus (cow)
- cfa05010 Alzheimer's disease - Canis familiaris (dog)
- hsa05010 Alzheimer's disease - Homo sapiens (human)
- ko05010 Alzheimer's disease - Reference pathway (KO)
- map05010 Alzheimer's disease - Reference pathway
- ... display all

Disease

OMIM

- 104300 [NCBI] #104300 ALZHEIMER DISEASE; AD ;; PRESENILE AND SENILE DEMENTIA; ALZHEIMER DISEASE, FAMILIAL, 1, INCLUDED; AD1, INCLUDED;; ALZHEIMER DISEASE, EARLY-ONSET, WITH CEREBRAL AMYLOID ANGIOPATHY, INCLUDED
- 104310 [NCBI] #104310 ALZHEIMER DISEASE 2 ;AD2;; ALZHEIMER DISEASE 2, LATE-ONSET; ALZHEIMER DISEASE ASSOCIATED WITH APOE4
- 104760 [NCBI] #104760 AMYLOID BETA A4 PRECURSOR PROTEIN; APP ;; AMYLOID OF AGING AND ALZHEIMER DISEASE; AAA;; CEREBRAL VASCULAR AMYLOID PEPTIDE; CVAP;; PROTEASE NEXIN II; PN2
- 125320 [NCBI] 125320 DEMENTIA/PARKINSONISM WITH NON-ALZHEIMER AMYLOID PLAQUES
- 127750 [NCBI] #127750 DEMENTIA, LEWY BODY; DLB ;; LEWY BODY DEMENTIA;; DIFFUSE LEWY BODY DISEASE DIFFUSE LEWY BODY DISEASE WITH GAZE PALSY, INCLUDED;; LEWY BODY VARIANT OF ALZHEIMER DISEASE, INCLUDED
- ... display all

Gene and protein

KEGG GENES

LSD和英辞書ツールの使い方

「辞書ツール」をクリックして起動する。日本語キーワードを入力し、提示された英語のキーワードをクリックして、統合DB検索ボックスへ移す。

LSD英和辞書ツールの使い方

単語または熟語をマウスで選択(ハイライト)表示させ、shift-D を押すと、ポップアップウィンドウに和訳が表示される。あとは選択箇所を変更するだけで和訳が表示される。



ライフサイエンス知識の階層化・統合化事業(京都大学)

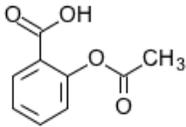
ゲノムネット医薬品データベース

KEGG DRUG と JAPIC の統合
研究成果・医療現場・一般社会の統合

KEGG DRUG

化学構造

D00109



D00109

一般名

Aspirin (JP15/USP)

商品名

Aspirin Bayer (TN)

薬効
標的・パスウェイ
階層分類
.....

CAS: 50-78-2
PubChem: 4594
ChEBI: 15365

研究者

JAPIC

添付文書番号

00051357
.....

使用上の注意
副作用・相互作用ほか
薬物動態、薬効薬理ほか

医療用医薬品: 13,215
一般用医薬品: 12,392

Approval number

21700AMY00243
.....

監督機関

JAN code (barcode)

4987222735865
.....

企業

YJ code

1143001X1228
.....

医師 薬価
薬剤師 後発品フラグ

患者
消費者

エントリー数: 6,836
日本・米国で承認されたすべての医療用医薬品を含む

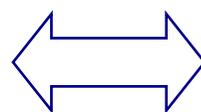


ライフサイエンス知識の階層化・統合化事業(京都大学)

ゲノムネット医薬品データベース

The screenshot shows a search result for Aspirin in the JAPIC database. It lists various entries with their JAPIC and KEGG IDs, names, and manufacturers. A detailed view of one entry (JAPIC ID 00011357) is shown below, including its chemical name (Aspirin), generic name (Aspirin), and detailed usage instructions. The instructions are in Japanese and describe the drug's effects on blood flow and its use for various conditions like pain relief and fever reduction.

使用上の注意
副作用、相互作用、ほか薬物動態、臨床成績、薬効薬理、文献情報



KEGG DRUG データベース (日本語版)

The screenshot shows the KEGG Drug entry for Aspirin (D00109). It includes the chemical structure, molecular formula (C9H8O4), and various identifiers. The entry is in Japanese and provides detailed information about the drug's mechanism of action, effects, and safety.

エントリ	D00109 Drug
一般名	アスピリン (JP15); Aspirin (JP15/USP)
商品名	アスピリン (エビス製薬), アスピリン (エビス製薬), アスピリン (オリエンタル薬品工業), アスピリン (シオエ製薬), アスピリン (ニプロファーマ), アスピリン (バイエル薬品), アスピリン (マイラン製薬), アスピリン (メルク製薬), アスピリン (丸石製薬), アスピリン (吉田製薬), アスピリン (協和医療開発), アスピリン (健栄製薬), アスピリン (山首製薬), アスピリン (純生薬品工業), アスピリン (小塚製薬), アスピリン (小林化工), アスピリン (中北薬品), アスピリン (東海製薬), サリチゾン (昭和薬品化工), ゼンアスピリン (全星薬品工業), ゼンアスピリン (全星薬品工業), ニチアスピリン (日医工), バイアスピリン (バイエル薬品)
構造式	<chem>CC(=O)Oc1ccc(O)cc1</chem> D00109 Mol file KCF file DB search Jmol KeggDraw
組成式	C9H8O4
質量	180.0423
標的	cyclooxygenase-1 (COX-1) inhibitor [HSA:5742] [EC:1.14.99.1] cyclooxygenase-2 (COX-2) inhibitor [HSA:5743] [EC:1.14.99.1]
効能	リウマチ熱, 関節周囲炎, 関節痛, 急性気管支炎・急性上気道炎の解熱・鎮痛, 強直性脊椎炎, 筋肉痛, 結合膜炎, 月経痛, 腰痛症, 歯痛, 術後疼痛, 症候性神経痛, 川崎病, 川崎病による心血管後遺症, 打撲痛, 高風の痛み, 頭痛, 捻挫痛, 変形性関節症, 慢性関節リウマチ
注釈1	同一化合物: C01405 薬効分類: 1143 3399 ATCコード: A01AD05 B01AC06 N02BA01
注釈2	Name previously used: Acetylsalicylic acid Component of Bufferin (TN), Percodan (TN), Darvon compound-65 (TN), E.A.C (TN)
構造マップ	PATH: map07110 Benzoic acid family; PATH: map07219 Cyclooxygenase inhibitors
リンク	CAS: 50-78-2 PubChem: 7847177 ChEBI: 15365 DrugBank: DB00945 CCD: AIN DailyMed: aspirin

化学構造 (D番号、解析ツールへのリンク)
 薬局方 (JP, USP)
 一般名 (JAN, USAN, INN)
 商品名 (日本, 米国)
 添付文書へのリンク (JAPIC, DailyMed)
 薬効分類 (日本, 米国, WHO, KEGG BRITE の一部)
 ターゲット情報 (KEGG PATHWAY との対応)
 薬開発の歴史 (KEGG DRUG 構造マップ)



LinkDB



LinkDB Search

DBGET
LinkDB
KEGG2

Search links from to All

(Note) Specify a single entry or multiple entries in the form of db:entry, such as hsa:126

LinkDB is a database containing link information among hundreds of molecular biology databases. The LinkDB search examines all equivalent, forward and reverse links, where equivalent links are special forward links used in KEGG to signify equivalent contents. The current statistics of LinkDB is shown below:

Database: LinkDB

Database of Link Information
Release 08-03-31, Mar 08
Kyoto University Bioinformatics Center
392,759,641 entries

Link information for the DBGET databases (categories 1-3)

The list of linked databases as well as the numbers of links can be displayed below, given a source database or a target database,

Source database:

Target database:

Link information for the link-only databases (category 4)

The list of linked databases as well as the numbers of links can be displayed below.

Link-only databases

Last updated: April 1, 2008

[Feedback](#)
[KEGG](#)
[GenomeNet](#)
Kyoto University Bioinformatics Center



LinkDB Search

DBGET
LinkDB
KEGG2

Link-only Databases on the Web

The databases in this category can be found in LinkDB

[Show all](#) | [Hide all](#)

cog (2 DBs)

go (3 DBs)

tax (7 DBs)

tc (3 DBs)

pubmed (23 DBs)

ncbi-geneid (6 DBs)

ncbi-gi (6 DBs)

3dmet (1 DB)

ccd (2 DBs)

chebi (2 DBs)

pubchem (2 DBs)

drugbank (1 DB)

brenda (1 DB)

ergo (1 DB)

expasy-enzyme (1 DB)

explorenz (1 DB)

iubmb (1 DB)

um-bbd (1 DB)

ensembl (10 DBs)

gdb (2 DBs)

mgd (1 DB)

flybase (14 DBs)

smart (2 DBs)

scop (3 DBs)

hgnc (1 DB)

hprd (1 DB)

apidb_cryptodb (1 DB)

bordeaux (4 DBs)

brazilian_genome (1 DB)

british_columbia (1 DB)

broad (1 DB)

bsorf (1 DB)

cambridge (1 DB)

cazy (1 DB)

cnrs_marseille (2 DBs)

colibri (1 DB)

cyorf (19 DBs)

dcnb (1 DB)

dictybase (1 DB)

dogan (1 DB)

genedb (22 DBs)

genoscope (2 DBs)

genre (1 DB)

georgia (1 DB)

ghent (1 DB)

imgt (1 DB)

inra (1 DB)

jamstec (3 DBs)

jgi (163 DBs)

kazusa (13 DBs)

kitasato (1 DB)

lanl (1 DB)

lbrme (1 DB)

leproma (1 DB)

listlist (2 DBs)

Linked DB	Number of Links
drug	1782



2007年度成果

ゲノムネット医薬品DB利用統計

2007年7月1日	全データベース一括検索機能公開 外部DBを含むLinkDB新バージョン公開	アクセス数	ユニークIP数
9月1日	ゲノムネット医薬品DB第1版 (JAPIC医療用医薬品)公開	2007年10月 41,622	699
10月1日	ライフサイエンス辞書(LSD)を用いた 日本語支援(和英・英和)ツール公開	2007年11月 55,943	1,126
2008年1月1日	LinkDBの新インターフェース公開	2007年12月 57,035	2,221
1月28日	ゲノムネット医薬品DB第2版 (JAPIC一般用医薬品)公開	2008年1月 95,870	3,614
1月30, 31日	ゲノムネット統合DB講習会開催	2008年2月 393,331	9,764
4月1日	化合物・糖鎖解析システム公開	アクセスが多いドメイン(2008.2)	
		bbtec.net xxx.co.jp	
		plala.or.jp kyoto-u.ac.jp	
		xxx.ne.jp toyaku.ac.jp	

ユニークIP数:ここでは1ヶ月間にアクセスのあったIPアドレスをユニークにした数、実際の利用者数はこの倍程度と推定

2008年度計画

ゲノムネット統合DB

医薬品・化合物に限定して継続
新規検索エンジンの開発

医薬品・化合物DB

糖鎖・脂質を含む化合物DB
感染症など疾患との関連

補完課題との連携
LipidBank, LIPIDMAPS
生薬データベース
varDB

LinkDB を用いた統合化
日本語DB ↔ 英語DB