

2008年度計画進捗状況

共通基盤技術開発

統合DB開発・運用

2008年7月1日 高速版SIMCOMP公開

9月1日

10月1日

12月1日 改良版SUBCOMP公開

2008年1月1日 改良版e-zyme公開

1月下旬

2月下旬 オプションを含めた構造検索ページ公開

KEGG以外の7データベースを
キーワード検索対象DBとして追加
ゲノムネット医薬品DBとPubMed、
J-STAGEへのリンクページを公開
LipidBank, DailyMed, LigandBox を
LinkDB検索対象DBとして追加

ゲノムネット講習会開催

ゲノムネット医薬品DBとLinkDBは定期的に更新

2009年度計画

共通基盤技術開発

統合DB開発・運用

構造検索プログラムの高機能化
酵素番号割り当てシステムの高機能化
反応経路検索システムの整備

ゲノムネット医薬品DBの高機能化
化合物と反応情報を解析するための
化学情報DBの整備
LinkDBを用いた化学情報DBの高機能化

ゲノムネット医薬品データベースの高機能化

JAPIC 医療用 医薬品: 一覧

http://www.genome.jp/kusuri/japic/list

JAPIC 医療用 医薬品データベース

名称検索 薬効検索 全文検索

JAPIC ▲ ▼	KEGG ▲ ▼	名称 ▲ ▼	薬効 ▲ ▼
00056040	D01479	コンズール; アンブロキシソール塩酸塩; アンブロキシソール塩酸塩錠	2239 気道潤滑去痰剤
00056039	D01551	ペラドルリン; ペラプロストナトリウム; ペラプロストナトリウム錠	3399 経口プロスタサイクリン (PGI2) 誘導体制剤
00056038	D00673	プラウリベラ; ラニチジン塩酸塩; ラニチジン塩酸塩錠	2325 H2受容体拮抗剤
00056037	D05286	単シロップ	
00056036	D05237	親水軟膏	
00056035	D06716	ゲンチアナ	
00056034	D04809	グリセリンカリ	
00056033	D01167	酸化マグネシウム; 酸化マグネシウム錠	
00056032	D06875	ロートエキス	
00056031		ウェールナラ; エストラジオールゲストレル錠	
00056030	D04667	ホスレノール; 炭酸ランタン水	
00056029	D01583	ピレスパ; ビルフェニドン; ビルフェニドン錠	
00056028	D00701	ノーベルパール; フェノバルビタール凍結乾燥製剤	
00056027	D06274	タブロス; タフルプロスト; タフルプロスト錠	
00056026	D00354	ラミクタール; ラモトリギン; ラモトリギン錠	
00056025		メノエイド; エストラジオールノルエチステロン経皮吸収型製剤	
00056024	D01658	セレガスロン; イルソグラジングラジンマレイン酸塩細粒・錠	
00056023	D01713	ヘルボッツ; エピナスチン塩酸塩; エピナスチン塩酸塩錠	4497 アレルギ抑制薬
00056022	D00673	プラウリベラ; ラニチジン塩酸塩; ラニチジン塩酸塩錠	2325 H2受容体拮抗剤
00056021	D01500	サキオン; トリメブチンマレイン酸塩; トリメブチンマレイン酸塩錠	2399 消化管運動調律剤

13605 件中 1 - 20 件目
検索結果ページ: 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 ... 681 次へ

[GenomeNet 医薬品DB | JAPIC 医療用 医薬品DB | JAPIC 一般用 医薬品DB | J-STAGE文献リスト]

2008/12/24版

医薬品データベース
 新規データのDRUG, J-STAGE, PubMed へのリンク付け。
 シノニム情報、階層分類情報を用いたキーワード検索を開発中。

↓

キーワード検索の改良と公開。
 新規データへの継続的な対応。

ゲノムネット医薬品データベース利用統計

ゲノムネット - 医薬品データベース

http://www.genome.jp/kusuri/

GenomeNet KEGG KEGG2 PATHWAY BRITE DRUG DBGET

環境設定 ヘルプ

Search 統合データベース for Go Clear

ゲノムネット
ゲノムネットとは
お知らせ
謝辞

KEGG
KEGGの概要
リリース情報

統合データベース
統合DBの概要
DBGETの概要
リリース情報
データベース増加図

医薬品データベース
利用法

研究支援データベース

計算ツール
その他のツール

フィードバック

ゲノムネット医薬品データベース

ゲノムネットでは、文部科学省統合データベースプロジェクトの一環として、研究の最先端と医療の現場さらには一般社会とをつなぐ日本語の医薬品統合データベースを開発しました。具体的には JAPIC 医薬品添付文書情報を KEGG DRUG と統合したデータベースです。以下のリンクから検索システムをご利用ください。

[JAPIC 医療用医薬品データベース](#)
[JAPIC 一般用医薬品データベース](#)

ゲノムネット医薬品データベースは薬に対する科学的理解を深めることを目的とした情報提供サービスです。実際の薬の使用は医師・薬剤師の指示で行ってください。

本サービスは日本医療情報センターとの契約に基づき提供しています。大量データの一括取得は禁止されています。短時間に大量のアクセスがあった IP アドレスは予告なしに使用停止になる場合があります。

関連サイト

- JAPIC IyakuSearch
- PMDA 情報提供サービス
- FDA Drug Information
- DailyMed
- KEGG DRUG 日本語版

参考資料

- ATC分類
- 薬効分類
- 生薬と漢方方剤
- 日本薬局方収載医薬品
- 医薬品の識別コード
- 天然物（植物）由来の医薬品

各国の医薬品情報

- PMDA: 医薬品医療機器総合機構
- FDA: U.S. Food and Drug Administration
- EMEA: European Medicines Agency

Last updated: January 1, 2009

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

	アクセス数	ユニークIP数
2007年10月	41,622	699
2007年11月	55,943	1,126
2007年12月	57,035	2,221
2008年1月	95,943	3,614
2008年2月	393,400	9,758
2008年3月	267,902	10,458
2008年4月	297,048	11,129
2008年5月	306,584	13,225
2008年6月	372,726	13,650
2008年7月	565,126	16,481
2008年8月	528,769	15,656
2008年9月	607,950	16,593
2008年10月	775,339	19,494
2008年11月	759,223	20,161
2008年12月	862,632	21,206

ゲノムネット化合物データベース

ゲノムネット - DBGET の概要

http://www.genome.jp/ja/about_dbget_ja.html

2. データベースの分類

DBGET/LinkDB システムでは多数のデータベースを統合するために、データベース利用条件の違い（ミラリング可、キーワードインデクシング可、リンクのみ）を考慮して、各データベースを以下の5つのカテゴリーに分類しています。

カテゴリー	検索コマンド			備考
	bget	bfind	blink	
1. KEGGデータベース	yes	yes	yes	ゲノムネットでミラリング
2. その他のDBGETデータベース	yes	yes	yes	
3. Web上の検索可能データベース	no	yes	yes	各サイ
4. Web上のリンクのみのデータベース	no	no	yes	
5. PubMedデータベース	yes	no	yes	

5. Web上の検索可能データベース (カテゴリー3)

ゲノムネットでキーワード検索のみできるデータベースは以下

データベース	内容	元サイ
genbank		NCBI
insdc	ddbj 核酸塩基配列	国立遺伝学
embl		EBI
ncbi-gene	Entrez 遺伝子データベース	NCBI
unigene	UniGene 遺伝子データベース	NCBI
ensembl	真核ゲノムアノテーション	Ensembl
hgnc	ヒト遺伝子名	HGNC
go	遺伝子オントロジー	GO
ipi	タンパク質リファレンス配列	EBI
interpro	タンパク質ファミリー・ドメイン	EBI
omim	遺伝病	NCBI
pubchem	PubChem 化合物データベース	NCBI
chebi	ChEBI 化合物データベース	EBI
pdb-ccd	PDB リガンド辞書	PDB
lipidmaps	脂質代謝	LIPIDMAPS
knapsack	植物二次代謝産物	KNAPsAcK
3dmet	天然化合物の立体構造	3DMET
drugbank	医薬品とターゲット	DrugBank

参考文献

1. Kanehisa, M.; Linking databases and organisms: GenomeNet resources in Japan. Trends Biochem Sci. 22, 442-444 (1997). [pubmed]
2. Fujibuchi, W., Goto, S., Mioimatsu, H., Uchiyama, I., Ooiwara, A., Akiyama, Y., and Kanehisa, M.:

医薬品・化合物データベースのキーワード検索機能
KEGG 以外の DB をカテゴリー3として登録
DrugBank, PubChem, ChEBI, PDB-CCD,
LIPIDMAPS, KNAPsAcK, 3DMET
(7月に公開環境でサービス開始)

医薬品・化合物データベースのLinkDB検索機能
DailyMed, LipidBank, LigandBox



新規データベースの追加対応
LipidBank のキーワード検索。
MassBank, JECDB を検討中。
生理活性物質。

LinkDB を利用したキーワード検索の高機能化

ゲノムネット - DBGET の概要

http://www.genome.jp/ja/about_dbget_ja.html

2. データベースの分類

DBGET/LinkDB システムでは多数のデータベースを統合するために、データベース利用条件の違い（ラリンク可、キーワードインデクシング可、リンクのみ）を考慮して、各データベースを以下の5つカテゴリーに分類しています。

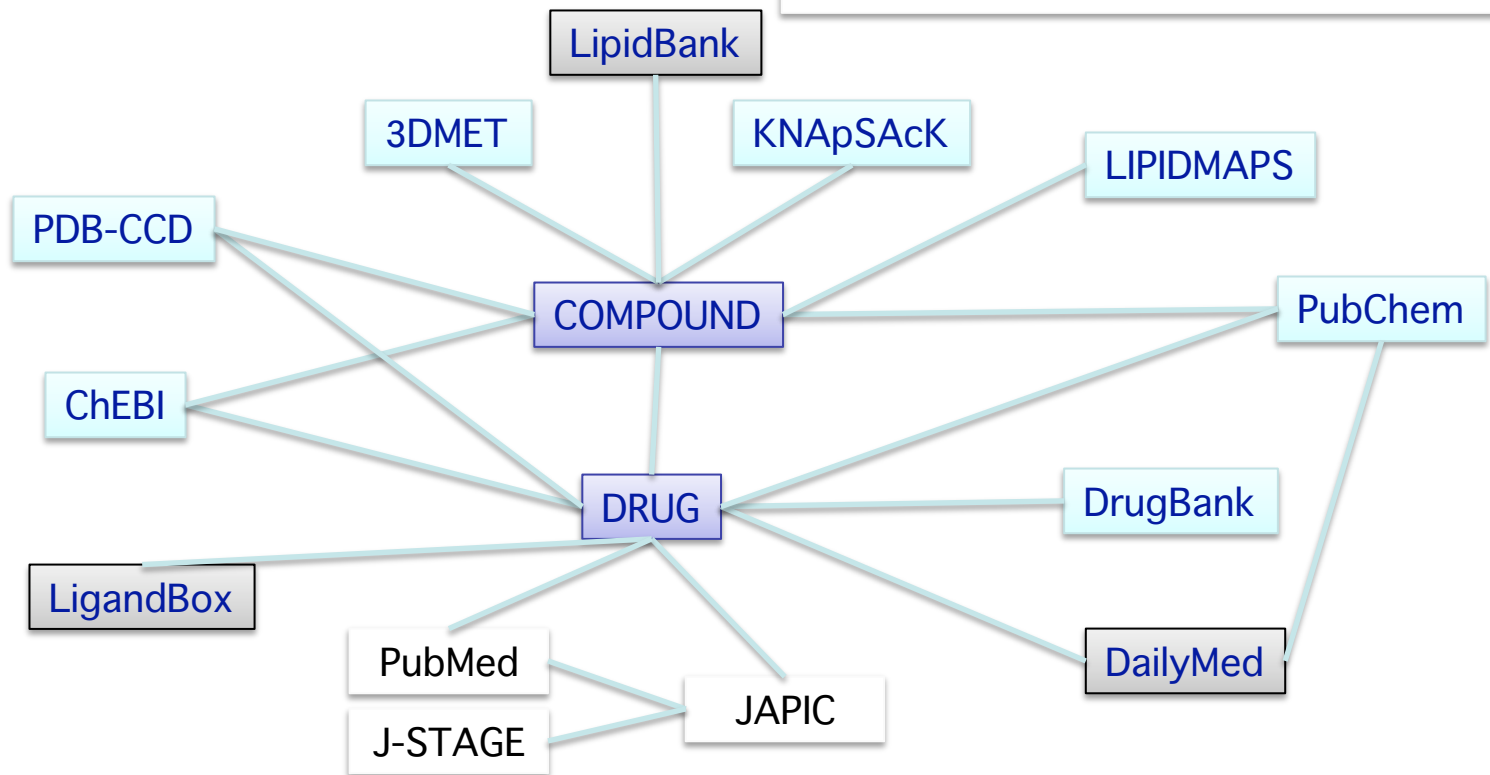
カテゴリー	検索コマンド			備考
	bget	bfind	blink	
1. KEGGデータベース	yes	yes	yes	ゲノムネットでミラリング
2. その他のDBGETデータベース	yes	yes	yes	
3. Web上の検索可能データベース	no	yes	yes	
4. Web上のリンクのみのデータベース	no	no	yes	各サイトのサービスを利用
5. PubMedデータベース	yes	no	yes	

エントリーからのリンク。
 キーワードによる検索方式の検討
 (カテゴリー3のDB)。

↓

キーワード検索の実装と公開。
 同じ構造を持つエントリーを考慮。
 同義語や階層分類情報を考慮。

- カテゴリー1
- カテゴリー3
- カテゴリー4



共通基盤技術開発 (1)

The screenshot shows the SIMCOMP website interface. At the top, there is a logo for SIMCOMP and the text 'SIMCOMP for chemical structure search'. Below this is a 'Home' button. The main content area is titled 'About SIMCOMP' and contains several paragraphs of text describing the algorithm and its capabilities. A table titled 'Compound Data Search Result' is partially visible on the right side of the page. The browser's address bar shows the URL 'http://www.genome.jp/tools/simcomp/simcomp_help.html'.

類似構造検索プログラム SIMCOMP の高速化
ドッキンググラフの作成方法を改良し、
従来より約10倍の高速化を実現した。
(7月に公開サイトに反映済み)

部分構造検索プログラム SUBCOMP の整備
クエリに含まれる構造の検索機能。
(2月下旬に公開予定)

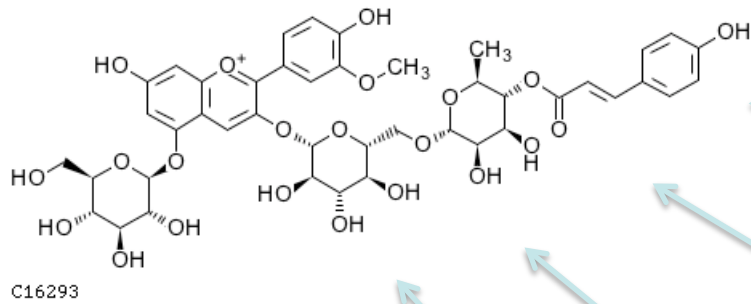


光学異性を考慮した検索を改良し公開。

構造情報を考慮したキーワード検索。

共通基盤技術開発 (2)

SUBCOMP の整備
クエリに含まれる構造の検索機能。



2	C16292	<p>Similarity-Score : 0.98</p>	Cyanidin-3-(p-coumaroyl)-rutinoside-5-glucoside	C ₄₂ H ₄₇ O ₂₂
3	C12646	<p>Similarity-Score : 0.82</p>	Cyanidin 3-O-rutinoside 5-O-beta-D-glucoside	C ₃₃ H ₄₁ O ₂₀
4	C12645	<p>Similarity-Score : 0.80</p>	Pelargonidin 3-O-rutinoside 5-O-beta-D-glucoside Pelargonidin 3-rutinoside-5-glucopyranoside	C ₃₃ H ₄₁ O ₁₉
5	C08639	<p>Similarity-Score : 0.66</p>	Cyanin Cyanidin 3,5-di-O-glucoside Cyanidin 3,5-O-diglucoside	C ₂₇ H ₃₁ O ₁₆
6	C08620	<p>Similarity-Score : 0.66</p>	Cyanidin 3-O-rutinoside Cyanidin 3-O-rhamnosylglucoside	C ₂₇ H ₃₁ O ₁₅

共通基盤技術開発 (3)

The screenshot shows a web browser window with the URL <http://www.genome.jp/ligand-bin/e-zyme2/result.cgi>. The page title is "e-zyme result". It displays a comparison of two chemical structures, C00077 and C00327, with atom labels (O6a, C6a, C1c, C1b, N1a, C5a) and a reaction pattern: N1a-N1b:*-C5a:C1b-C1b. Below the structures is a table of EC number assignments.

EC number	Weighted score	Observed freq.	Reaction IDs
3.5.1	164.8	38	R00059 R00458 R00545 R00665 R009 R01916 R01918 R01987 R02041 R022 R03977 R04056 R04174 R04486 R044 R08228 R08350 R08351
2.3.1	49.6	23	R00395 R00454 R01154 R01617 R016 R03552 R03718 R03720 R03760 R039 R06978
6.3.2	36.9	7	R00497 R02153 R02154 R02473 R027
6.3.1	23.5	11	R01917 R02929 R03822 R06529 R073
2.3.2	19.0	4	R01687 R03956 R05029 R05055
6.3.4	16.9	8	R04562 R04563 R04582 R04604 R051
3.4.13	10.3	2	R00899 R04951
3.4.11	6.0	6	R00899 R04951

酵素番号自動割り当てプログラム e-zyme の改良
データベース中の反応パターン分布に基づく
スコアリング。
検索結果表示インターフェースの改良。
(1月に公開サイトに反映済)
IUBMB での EC 割り当てでも試験運用。

化学反応ネットワーク予測
反応パターンを利用した新規化合物の反応経路
予測システムを構築中。
解候補の爆発への対処法を検討中。
(ゲノム、パスウェイ情報を利用するなど)



ゲノム情報との関連検索を実現して公開。
基質-生成物ペアの自動抽出を改良して公開。

パス計算システムを整備して、ネットワーク予測を
取り込めるようにする。

ゲノムネット化学情報データベース

ゲノムネット化合物データベース

反応情報データベース

LinkDB を応用した統合と高度なキーワード検索

共通基盤技術開発に基づく解析ツールの提供



ゲノムネット化学情報データベース