

2008年度実施内容

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	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
9月1日	
10月1日	
12月1日 改良版SUBCOMP公開	
2009年1月1日 改良版e-zyme公開	
1月29、30日	ゲノムネット講習会開催
4月1日 オプションを含めた構造検索ページ公開	

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	医薬品DB開発・運用 JAPICの更新。副作用情報の検討 化学情報DB開発・運用 化合物と反応情報を統合化 LinkDB開発・運用 統合DBプロジェクト内のDB間リンク

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; アンブロキシール塩酸塩; アンブロキシール塩酸塩錠	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	ブラウリベラ; 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	
00056022	D00673	ブラウリベラ; ラニチジン塩酸	
00056021	D01500	サキオン; トリメブチンマレイ	

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。
シノニム情報を用いたキーワード検索 (テスト版)。



キーワード検索の改良と公開。
シノニム情報を用いたキーワード検索 (公開済)
階層分類、副作用など付随情報の検索機能。
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 にある様々な情報と統合したデータベースです。我が国で販売されているすべての医療用医薬品（処方薬）と一般用医薬品（大衆薬、OTC薬）の添付文書と関連情報は、以下のゲノムネット医薬品データベースに蓄積され、毎月更新されています。

[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薬情報センター（JAPIC）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。

医療用医薬品および一般用医薬品は KEGG DRUG の医薬品分類から検索することもできます。

[医療用医薬品の薬効分類 + 添付文書](#)
[医療用医薬品の ATC 分類 + 添付文書](#)
[一般用医薬品の分類 + 添付文書](#)

KEGG は科学技術振興機構バイオインフォマティクス推進センターの支援を受けています。

関連サイト

- JAPIC IyakuSearch
- PMDA 情報提供サービス
- FDA Drug Information
- DailyMed

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
- 一般用医薬品のリスク区分
- 医薬品の識別コード

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: April 10, 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
2009年1月	952,436	22,346
2009年2月	862,742	22,745
2009年3月	1,006,818	22,639

ゲノムネット化合物データベース

ゲノムネット - 統合データベース検索システム

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

GenomeNet KEGG KEGG2 PATHWAY BRITE DRUG DBGET

環境設定 ヘルプ [English | Japanese]

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

DBGET/LinkDB: ゲノムネット統合データベース検索システム

DBGETは世界中に存在する分子生物学データベースのウェブを対象とした。上のサーチボックスを含め、ゲノムネットやKEGGのバックボーンシ... 分子生物学データのウェブは、各データベースのエントリー（ページ）間の参照情報をエッジ（リンク）とした膨大なグラフです。各データベース名とエントリー名（またはアクセッション番号）のペアで指定され、これはURLに変換することができます。このような名前空間を考え、名前同士のLinkDBデータベースです。

DBGET サーチ
LinkDB サーチ
英文ドキュメント
How to use DBGET
URLs for making DBGET queries

リリース情報
データベースリリース情報（日々更新）
主要データベースの増加図（1982年より）

2007年4月より文部科学省統合データベースプロジェクトの支援を受け、日... LinkDBの拡張と新たな検索システムの開発を行っています。また、グ... スとして、化合物に関する様々なデータベースの統合化を進めています。こ... スがDBGET/LinkDBシステムに組み込まれています。

ゲノムネット化合物データベース

区分	データベース	内容
化学構造	PubChem	化合物全般
	ChEBI	化合物オントロジー
	KEGG COMPOUND	代謝化合物、生体外化合物
	LIPIDMAPS	脂質
	LipidBank	脂質
	KNAPSAcK	植物二次代謝化合物
	KEGG DRUG	医薬品
立体構造	DrugBank	医薬品
	KEGG GLYCAN	糖鎖
	PDBChem	低分子立体構造
化学反応	3DMET	代謝化合物立体構造モデル
	LigandBox	医薬品立体構造モデル
化学反応	KEGG REACTION	生体内化学反応
	KEGG RPAIR	反応ペア

Last updated: April 27, 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

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

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（完了）
MassBank, 日化辞を検討中（LinkDB）。
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（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。

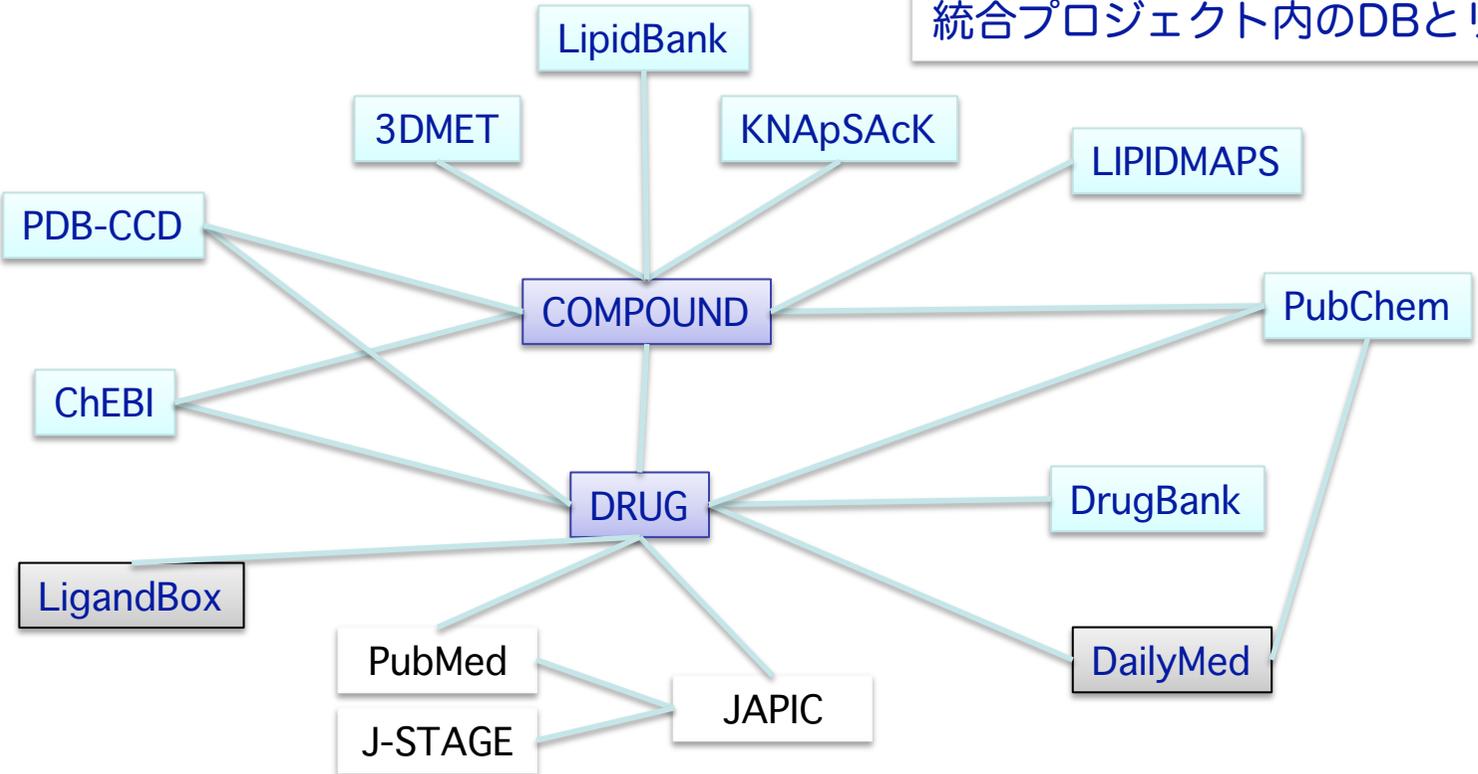
カテゴリー	検索コマンド			備考
	bget	bfind	blink	
1. KEGGデータベース	yes	yes	yes	ゲノムネットでミラリング
2. その他のDBGETデータベース	yes	yes	yes	
3. Web上の検索可能データベース	no	yes	yes	各サイトのサービスを利用
4. Web上のリンクのみのデータベース	no	no	yes	
5. PubMedデータベース	yes	no	yes	

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。
 統合プロジェクト内のDBとリンク。

- 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)

類似構造検索プログラム SIMCOMP の整備
高速化 (2008年7月公開)



光学異性を考慮した検索を改良し公開 (完了)。
KNApSack を検索対象に追加 (完了)。

構造情報を考慮したキーワード検索。

新規に追加したオプション

構造比較用のグラフ作成方法

光学異性体区別の有無

共通基盤技術開発 (2)

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。



光学異性を考慮した検索を改良し公開 (完了)。
KNApSAcK を検索対象に追加 (完了)。

Enter query compound: (in one of the four forms)

Compound ID (Example) C00022 [View structure](#)

MOL File Name [ファイルを選択](#) ファイルが選択されていません

MOL File Text

SMILES

Select target database:

COMPOUND DRUG KNApSAcK REACTION

Advanced options

Search mode All SUBstructure SUPERstructure

Matching conditions Charge (e.g. distinguish "OH" from "O-")

Valence (e.g. distinguish "S<" from "=S=")

Coordinate bond (consider "[X+]-[Y-]" as "X=Y")

Chiral

[SUBCOMP help](#)

[Download KegDraw](#)
KegDraw is a Java application for drawing compound structure.

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

新規に追加したオプション

クエリに含まれる構造の検索機能

光学異性体区別の有無

共通基盤技術開発 (3)

The screenshot displays the 'e-zyme result' web page. At the top, the browser address bar shows 'http://www.genome.jp/ligand-bin/e-zyme2/result.cgi'. The main content area is titled 'e-zyme result' and shows 'Pair 1 [KCF]' with two chemical structures, C00077 and C00327, side-by-side. Below the structures is the label 'N1a-N1b:*-C5a:C1b-C1b'. Underneath, the 'EC number assignments' section contains a table with columns for EC number, Weighted score, Observed freq., and a list of reaction IDs.

EC number	Weighted score	Observed freq.	
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。

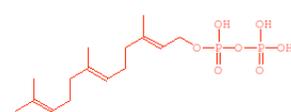
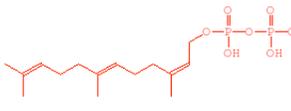
共通基盤技術開発 (4)

構造検索結果から機能の手がかりを探すためのリンク

SIMCOMP Search Result

Database: KEGG COMPOUND
 Number of entries in a page: 50 | Hide structure

Items: 1 - 43 of 43
 Top 50 | Clear | Map to Pathway | Exec

No	Entry	Structure	Similarity-Score
1	C00448		1.00
2	C16826		0.99
3	C16689		
4	C03115		

類似構造から機能の検索

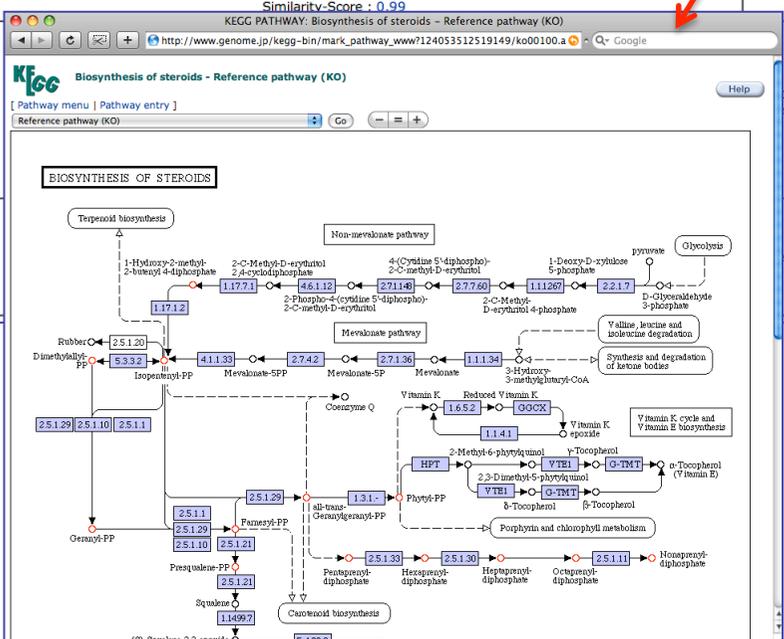
Search PATHWAY

Pathway Search Result

Following object(s) was/were not found: cpd:C01048 cpd:C01126 cpd:C02569 cpd:C03115 cpd:C03220 cpd:C03427 cpd:C03461 cpd:C04093 cpd:C04500 cpd:C04590 cpd:C05308 cpd:C05847 cpd:C09094 cpd:C09665 cpd:C09666 cpd:C09730 cpd:C13297 cpd:C16689 cpd:C16826

- ko00100 Biosynthesis of steroids**
 - cpd:C00129 Isopentenyl diphosphate; delta3-Isopentenyl diphosphate; delta3-cpd:C00235 Dimethylallyl diphosphate; Prenyl diphosphate; 2-Isopentenyl diphosphate
 - cpd:C00341 Geranyl diphosphate
 - cpd:C00353 Geranylgeranyl diphosphate; Geranylgeranyl pyrophosphate; all-trans-cpd:C00448 trans,trans-Farnesyl diphosphate; Farnesyl diphosphate; Farnesyl cpd:C01230 all-trans-Hexaprenyl diphosphate
 - cpd:C03428 Presqualene diphosphate
 - cpd:C04145 all-trans-Nonaprenyl diphosphate; Solaneryl pyrophosphate; Solar cpd:C04146 all-trans-Octaprenyl diphosphate; Farnesylfarnesylgeraniol cpd:C04216 all-trans-Heptaprenyl diphosphate
 - cpd:C04217 all-trans-Pentaprenyl diphosphate
 - cpd:C05427 Phtyl diphosphate
 - cpd:C11811 1-Hydroxy-2-methyl-2-butenyl 4-diphosphate; (E)-4-Hydroxy-3-methyl-2-butenyl 4-diphosphate
- ko01062 Biosynthesis of terpenoids and steroids**
 - cpd:C00129 Isopentenyl diphosphate; delta3-Isopentenyl diphosphate; delta3-cpd:C00235 Dimethylallyl diphosphate; Prenyl diphosphate; 2-Isopentenyl diphosphate
 - cpd:C00341 Geranyl diphosphate
 - cpd:C00353 Geranylgeranyl diphosphate; Geranylgeranyl pyrophosphate; all-trans-cpd:C00448 trans,trans-Farnesyl diphosphate; Farnesyl diphosphate; Farnesyl cpd:C05859 Dehydrodolichol diphosphate; Dehydrodolichyl diphosphate
 - cpd:C06081 Polyprenol
 - cpd:C11356 trans,trans,cis-Geranylgeranyl diphosphate; trans,trans,cis-Geranyl cpd:C11811 1-Hydroxy-2-methyl-2-butenyl 4-diphosphate; (E)-4-Hydroxy-3-methyl-2-butenyl 4-diphosphate
- ko00900 Terpenoid biosynthesis**
 - cpd:C00129 Isopentenyl diphosphate; delta3-Isopentenyl diphosphate; delta3-cpd:C00235 Dimethylallyl diphosphate; Prenyl diphosphate; 2-Isopentenyl diphosphate
 - cpd:C00341 Geranyl diphosphate
 - cpd:C00353 Geranylgeranyl diphosphate; Geranylgeranyl pyrophosphate; all-trans-cpd:C00448 trans,trans-Farnesyl diphosphate; Farnesyl diphosphate; Farnesyl cpd:C06081 Polyprenol
 - cpd:C06111 Nerolidyl diphosphate; NPP
 - cpd:C11356 trans,trans,cis-Geranylgeranyl diphosphate; trans,trans,cis-Geranyl cpd:C11356 trans,trans,cis-Geranylgeranyl diphosphate; trans,trans,cis-Geranyl
- ko00981 Insect hormone biosynthesis**
 - cpd:C00448 trans,trans-Farnesyl diphosphate; Farnesyl diphosphate; Farnesyl cpd:C01493 Farnesol
 - cpd:C16501 Farnesal
 - cpd:C16502 Farnesoic acid
 - cpd:C16503 Methyl farnesoate

Biosynthesis of steroids - Reference pathway (KO)



The diagram illustrates the biosynthesis of steroids, starting from Mevalonate. Key intermediates include:

- Mevalonate → Mevalonate-5-P → Mevalonate-5-P-PP → Isopentenyl-PP
- Isopentenyl-PP → Dimethylallyl-PP → Geranyl-PP → Farnesyl-PP → all-trans-Geranylgeranyl-PP
- all-trans-Geranylgeranyl-PP → Presqualene-PP → Squalene → Squalene-2,3-epoxide
- Other branches include the synthesis of Vitamin K, Tocopherol, and various other terpenoids.

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