

実施目的

- ・分子情報を中心とした統合データベースの構築
- ・分子情報を KEGG による人手で構築された知識の体系と融合

2009年度実施内容

共通基盤技術開発

統合DB開発・運用

2009年7月1日 改良版 SIMCOMP/SUBCOMP 公開

9月1日

JCGGDB、日化辞 を LinkDB 検索対象 DB として追加

12月1日 KEGG の各エントリー中に LinkDB への
リンクを見やすく表示する機能の追加

HMDB、SIDER を LinkDB 検索対象 DB として追加
ユーザー定義のリンクを使った LinkDB 検索機能の追加

2010年1月12日 反応経路予測ツール PathPred 公開

MassBank、ProNIT、ProTherm、長浜大の遺伝子 DB を
LinkDB 対象 DB として追加

2月4、5日

ゲノムネットデータベース講習会開催

ゲノムネット医薬品 DB と LinkDB は定期的に更新

ゲノムネット統合データベース検索システム

- ・化合物をはじめとする分子データを扱う統合データベース
- ・LinkDB による統合化
- ・化合物の分子情報を解析するためのツール

ゲノムネット統合データベース検索システム

ゲノムネット - 統合データベース検索システム

GenomeNet KEGG KEGG2 PATHWAY BRITE DISEASE DRUG DBGET

Search 医薬品 for アスピリン

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統合データベースシステムです。上のサーチボックスを含め、ゲノムネットや KEGG のバックボーンシステムとして利用されています。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）をノードとし、エントリー間の参照情報をエッジ（リンク）とした膨大なグラフです。各データベースエントリーはデータベース名とエントリー名（またはアクセス番号）のペアで指定され、これは一般には対応するページの 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、名前同士のつながりを蓄積したのが 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、日本語支援環境の整備を行い、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、ゲノムネット化合物データベースとして、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。これまでに以下のデータベースが 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
	DrugBank	医薬品
	KEGG GLYCAN	糖鎖
	PDBeChem	低分子立体構造
立体構造	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

ゲノムネット 医薬品データベース		
区分	データベース	内容
添付文書	JAPIC 医療用医薬品	処方薬添付文書
	JAPIC 一般用医薬品	大衆薬添付文書

Last updated: February 22, 2010

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

- KEGG DRUG 日本語版と JAPIC 添付文書の統合検索
- 化合物・医薬品データベース
 - キーワード検索対象 DB : 11
 - LinkDB 登録 DB : 16

計算ツール / ケミカル情報解析

- SIMCOMP : 化合物類似構造検索
- SUBCOMP : 化合物部分構造検索
- KCaM : 糖鎖類似構造検索
- PathPred : 合成・分解経路予測
- E-zyme : 化合物間の酵素反応予測

2010年度実施計画

- 遺伝子・タンパク質・パスウェイ情報も含めた統合的な利用
- 食品・環境物質なども視野に入れた医薬品・化合物の解析への応用に向けた枠組みの構築

共通基盤技術開発

統合 DB 開発・運用

知識処理技術開発

構造検索プログラムの高機能化

反応経路検索システムの整備

ウェブ技術開発

化合物、遺伝子、タンパク質、パスウェイ間の情報を検索する仕組み

医薬品 DB 開発・運用

化学情報 DB 開発・運用

化学構造、相互作用、ターゲット、関連パスウェイを検索する仕組み

リンク情報の継続的な更新

LinkDB 開発・運用

自動更新、ユーザーデータとの組み合わせ

共通基盤技術開発（1）

知識処理技術開発：構造検索プログラムの高機能化

平成21年度

類似構造検索プログラム SIMCOMP の整備

- ・ 光学異性体の類似スコア見直し
- ・ cis, trans 判定の精度向上
- ・ 構造アライメントの精度向上

平成22年度

SIMCOMP/SUBCOMP プログラムのパッケージ化

- ・ FTP にてダウンロード可能にする予定

複数化合物入力の実装

→ 機能に関する情報検索の高度化

共通基盤技術開発 (1)

知識処理技術開発：構造検索プログラムの高機能化

類似構造から機能の検索

構造検索結果から機能の手がかりを探するためのリンク

メタボロームなどで KEGG がない複数の化合物データから

共通基盤技術開発（2）

知識処理技術開発：反応経路検索システムの整備

PathPred: Pathway Prediction server

http://www.genome.jp/tools/pathpred/

PathPred: Pathway Prediction server

About PathPred

PathPred is a web-based server to predict plausible enzymatic pathways from a query compound using the information of chemical structure alignments of substrate-product pairs, plausible reactions and transformed compounds, and displays pathways in tree-shaped graph.

- PathPred help

Reference pathway:

- Xenobiotics Biodegradation (Biodegradation of initial compound)
- Biosynthesis of Secondary Metabolites (Biosynthesis of initial compound)

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

MOL File Name ファイルが選択されていません

MOL File Text

SMILES (Ex) Clc1c(Cl)c(Cl)ccc1Cl

KEGG Compound ID (Ex) C06594

Compute Clear

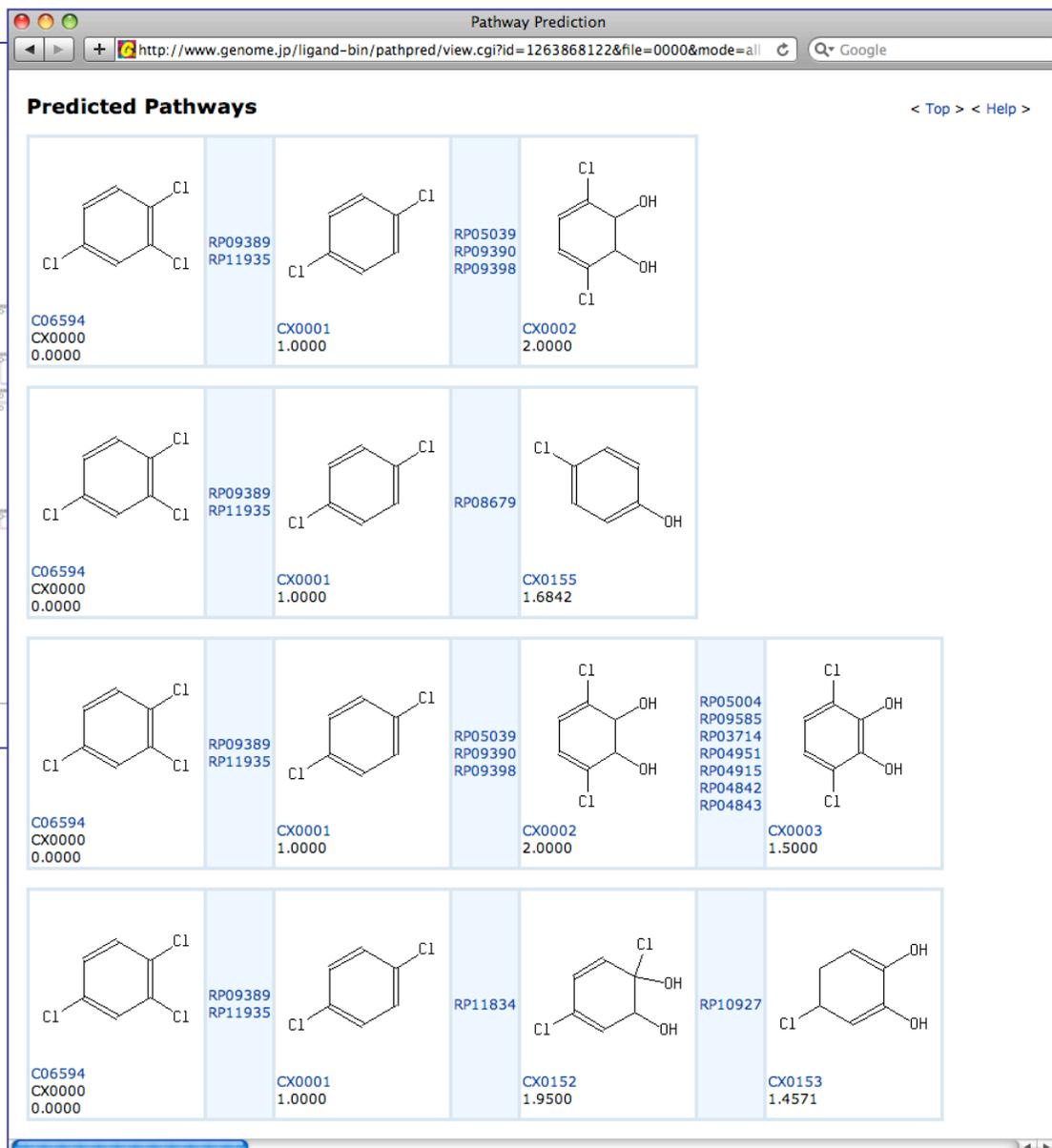
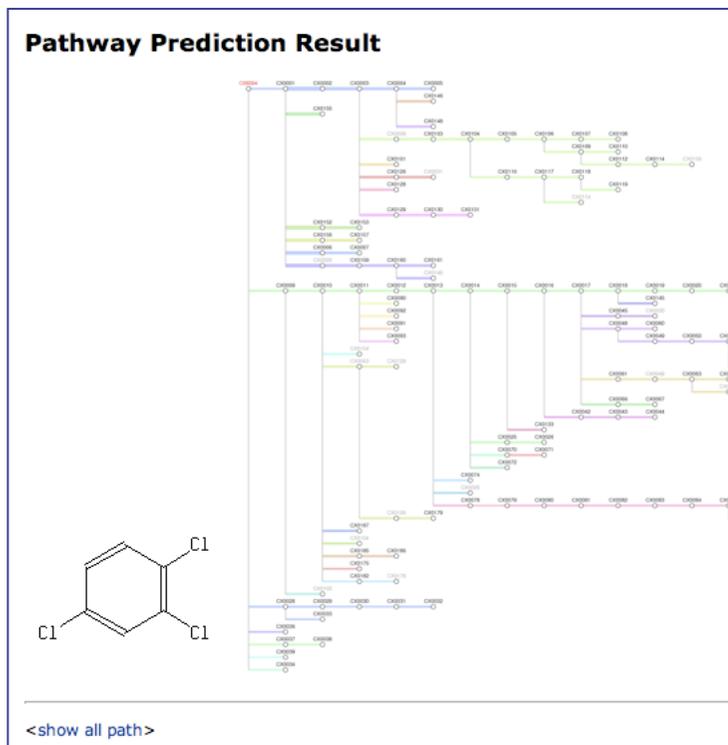
平成21年度

反応パターンを利用した新規化合物の化学反応ネットワーク予測システムを公開。

- ・ バクテリア分解経路の知識
- ・ 植物二次代謝生合成経路の知識
- ・ SIMCOMP と RPAIR/RDM パターンを利用

共通基盤技術開発（2）

知識処理技術開発：反応経路検索システムの整備



平成22年度

予測結果のパスウェイ、ゲノムとの
関連付け

共通基盤技術開発 (3)

ウェブ技術開発

GenomeNet

Search for

Database: Chemical substance - Search term: GDP L-fucose

KEGG COMPOUND

C00325 [KegDraw](#) [Jmol](#)
GDP-L-fucose; GDP-beta-L-fucose

KEGG GLYCAN

G10615 [KegDraw](#)
GDP-L-fucose; (GDP-LFuc)1

PUBCHEM

24895171 [\[PubChem\]](#)
6-Deoxy-beta-L-galactopyranosylguanosine 5'-diphosphate; G4401_SIGMA; GDP-Fuc; GDP-fucose; Guanosine 5'-diphospho-beta-L-fucose sodium salt

26758842 [\[PubChem\]](#)
GDP-beta-L-Fucose, Disodium Salt; Guanosine-5′-diphosphate-beta-L-fucose, 2Na

2782 [\[PubChem\]](#)
2-amino-9-[3,4-dihydroxy-5-[[hydroxy-[hydroxy-(3,4,5-trihydroxy-6-methyl-tetrahydropyran-2-yl)oxy-phosphinoyl]oxy-phosphinoyl]oxymethyl]tetrahydrofuran-2-yl]-1,9-dihydropurin-6-one; GDP-L-fucose; GUANOSINE 5'-DIPHOSPHATE, FUCOSE; guanosine 5'-(trihydr...

3619 [\[PubChem\]](#) [\[KEGG-link\]](#)
GDP-L-fucose; GDP-beta-L-fucose; [CPD:C00325]

CHEBI

17009 [\[ChEBI\]](#) [\[KEGG-link\]](#)
GDP-L-fucose; [CPD:C00325]

28530 [\[ChEBI\]](#) [\[KEGG-link\]](#)
GDP-4-dehydro-L-fucose; [CPD:C05389]

13332 [\[ChEBI\]](#)
GDP-beta-L-fucose

3DMET

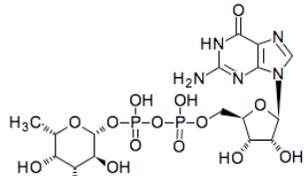
B04668 [\[3DMET\]](#) [\[KEGG-link\]](#)
GDP-L-fucose; GDP-beta-L-fucose; [CPD:C00325]

KNAPSACK

C00007245 [\[KNAPSAcK\]](#) [\[KEGG-link\]](#)
GDP-L-fucose; [CPD:C00325]

PubChem, ChEBI, 3DMET, KNApSAcK 等の検索結果から対応する KEGG へのリンク

KEGG COMPOUND: C00325

Entry	C00325	Compound
Name	GDP-L-fucose; GDP-beta-L-fucose	
Formula	C16H25N5O15P2	
Mass	589.0822	
Structure	 <p>C00325</p> <p>Mol file KCF file DB search Jmol KegDraw</p>	
Remark	Same as: G10615 BRITE hierarchy	
Reaction	R01951 R03519 R04081 R04553 R04646 R05106 R05692 R07060	
Pathway	PATH: ko00051 Fructose and mannose metabolism PATH: ko00520 Amino sugar and nucleotide sugar metabolism PATH: ko01100 Metabolic pathways	
Enzyme	1.1.1.271 2.4.1.65 2.4.1.69 2.4.1.152 2.7.7.30	
Other DBs	PubChem: 3619 ChEBI: 17009 KNApSAcK: C00007245 3DMET: B04668	
KCF data	<input type="button" value="Show"/>	

All links

- Pathway (3562)
- KEGG PATHWAY (3561)
- KEGG MODULE (1)
- Chemical substance (6)
- KEGG GLYCAN (1)
- PubChem (1)
- ChEBI (1)
- 3DMET (1)
- KNAPSAcK (1)
- MASSBANK (1)
- Chemical reaction (24)
- KEGG ENZYME (7)
- KEGG REACTION (8)
- KEGG RPAIR (9)
- All databases (3592)

平成21年度

キーワード検索の結果に KEGG へのリンク
LinkDB のリンク情報を各エントリーに直接表示

- ・現在は KEGG データベースのみ
- ・他のデータベースも順次対応予定

共通基盤技術開発 (3) ウェブ技術開発

平成22年度

データベース間の関連検索を強化

GenomeNet KEGG KEGG2 PATHWAY BRITe DRUG DBGET

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統合データベースシステムです。上のサーチボックスを含め、ゲノムネットやKEGGのバックボーンシステムとして利用されています。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）をノードとし、エントリー間の参照情報をエッジ（リンク）とした膨大なグラフです。各データベースのエントリーは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、これは一般には対応するページの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、名前同士のつながりを蓄積したのがLinkDBデータベースです。

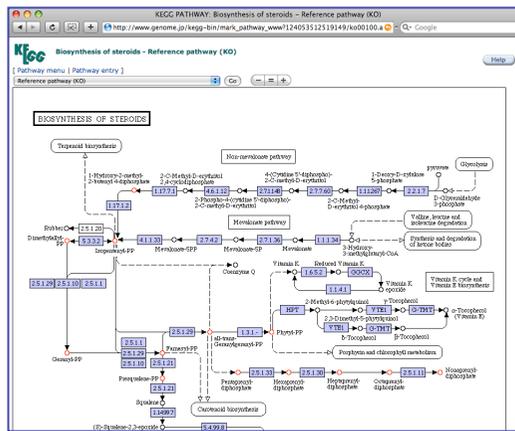
DBGET サーチ
LinkDB サーチ
英文ドキュメント
How to use DBGET
URLs for making DBGET queries

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 (1982年より)

2007年4月より文部科学省総合データベースプロジェクトの支援を受け、日本語支援環境の整備を行い、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、ゲノムネット化合物データベースとして、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。これまでに以下のデータベースがDBGET/LinkDBシステムに組み込まれています。

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	LIPIDMAPS	脂質
	KNAPSACK	植物二次代謝化合物
	KEGG DRUG	医薬品
DrugBank	DrugBank	医薬品
	KEGG GLYCAN	糖鎖
立体構造	PDBeChem	低分子立体構造
	3DMET	代謝化合物立体構造モデル
LigandBox	LigandBox	医薬品立体構造モデル
	KEGG REACTION	生体内化学反応
化学反応	KEGG REPAIR	反応ペア

Last updated: April 27, 2009
京都大学化学情報学バイオインフォマティクスセンター



パスウェイ
階層分類情報

計算ツール

Escherichia coli K-12 MG1655: b4349

varDB: a database of gene families involved in antigenic variation

ProNIT: Thermodynamic Database for Protein-Nucleic Acid Interactions

ProNIT provides experimentally determined thermodynamic interaction data between proteins and nucleic acids. It contains the properties of the interacting protein and nucleic acid, biological information and several thermodynamic parameters such as the binding constant, changes in free energy, enthalpy and heat capacity. For more details, please see About ProNIT. ProNIT current release, ProNIT 2.0, contains 1970 entries. Since we have gathered some data and have carried out major modifications the entries of database are renumbered. We have provided a Mapping table, which relates the old and new entry numbers to help the users. Please see the Release Note to get more details about the current release.

Quick Search: Please enter the search keyword and select the "Search" button or "Enter" on your keyboard. Search strings are case insensitive. Please note that this search form does not search the entire database. It restricts only the text fields. For more help on search, please see the help page for search.

Advanced Search: Please go to the Advanced search page for a more detailed, customized search.

ゲノム・遺伝子・タンパク質

統合 DB 開発・運用 (1)

医薬品 DB 開発・運用

平成 21 年度

KEGG DRUG の化学構造と副作用

- ・ 副作用データベース SIDER へのリンク
- ・ JAPIC, DailyMed へのリンク

KEGG DRUG: D00109

Entry	D00109 Drug
Name	Aspirin (JP15/USP); Acetylsalicylic acid; Easprin (TN)
Formula	C9H8O4
Mass	180.0423
Structure	 D00109 Mol file KCF file DB search Jmol KegDraw
Target	cyclooxygenase-1 (COX-1) inhibitor [HSA:5742] [PATH:hsa00590]; cyclooxygenase-2 (COX-2) inhibitor [HSA:5743] [PATH:hsa00590] [PATH:hsa04370] [PATH:hsa05200] [PATH:hsa05222]
Activity	Analgesic; Antipyretic; Antirheumatic
Remark	Same as: C01405 Therapeutic category: 1143 3399 ATC code: A01AD05 B01AC06 N02BA01 BRITE hierarchy
Comment	Name previously used: Acetylsalicylic acid Component of Bufferin (TN), Darvon compound-65 (TN), E.A.C (TN) nonsteroidal antiinflammatory drug (NSAIDs)
Pathway	PATH: map07048 Antimigraines PATH: map07110 Benzoic acid family PATH: map07219 Cyclooxygenase inhibitors
Other DBs	CAS: 50-78-2 PubChem: 7847177 CHEBI: 15365 DrugBank: DB00945 PDB-CCD: AIN LigandBox: D00109 NIKKAJI: J2.300K
KCF data	Show

All links

- Ontology (6)
- KEGG BRITE (6)
- Pathway (7)
- KEGG PATHWAY (7)
- Drug (190)
- KEGG DRUG (6)
- JAPIC (178)
- DrugBank (1)
- DailyMed (4)
- SIDER (1)
- Chemical substances (112)
- KEGG COMPOUND (1)
- PubChem (1)
- CHEBI (1)
- HMDB (1)
- LigandBox (1)
- MASSBANK (5)
- NIKKAJI (1)
- PDB-CCD (1)
- Gene (2)
- KEGG GENES (2)
- Literature (22)
- PubMed (22)
- All databases (239)

SIDER Side Effect Resource

Acetylsalicylic acid

Side effects and indications

Whenever possible, frequency information about the side effects was extracted from the labels. Aggregated frequency information for the drug and, if available, placebo is shown. To the right, you can click on shaded boxes to be taken to mentions of the side effect on the label. (In some cases, the side effect cannot be highlighted due to conversion problems.) [Information about indications](#) was extracted from the indications and usage sections of the labels.

Sort by: [related terms](#) - frequency

Side effect	Data for drug	Placebo	Labels
hearing impairment <small>def</small>			1 2 3 4 5
Hematemesis <small>def</small>			
Heartburn <small>def</small>			
anaphylaxis <small>def</small>			
Asthma <small>def</small>			
Ulcer <small>def</small>			
Melena <small>def</small>			
Purpura <small>def</small>			
Tinnitus <small>def</small>			
Vertigo <small>def</small>			
Dyspepsia <small>def</small>			
Sweating <small>def</small>			
Anemia <small>def</small>			
Leukopenia <small>def</small>			
Thrombocytopenia <small>def</small>			
Confusion <small>def</small>			

Information

More information: [STITCH](#), [PubChem](#) and possibly [Wikipedia](#) or [Medpedia](#)

ATC Codes: A01AD05, B01AC06, N02BA01

Legend

Color scheme: [standard](#) - [alternative](#)

100%
75%
50%
10%
frequent (1% to 100%)
infrequent (0.1% to 1%)
rare (<0.1%)
postmarketing
0%
no frequency information
not found on label

統合 DB 開発・運用 (1)

医薬品 DB 開発・運用

JAPIC 一般用 医薬品: 一覧

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

JAPIC 一般用 医薬品データベース

名称検索 (成分も検索) 効能検索 全文検索

JAPIC ▲ ▼	名称 ▲ ▼	効能・効果 ▲ ▼
K0912000008	カイキョー100	解熱, 鎮けい, 強心
K0912000005	蘇生錠	胃腸虚弱症, 慢性腸カタル, 浮腫
K0912000004	ホノミヨクゲン錠	体力中等度をめやすとして, やや消化器が弱く, 神経がたかぶり. 怒りやすい. イライラなどがあるものの次の諸症: 神経症, 不眠症, 小児夜なき, 小児疳症 (神經過敏), 更年期障害, 血
K0912000003	ホノミキネツ錠	体力充実して, かぜのひきはじめて, 寒気がして発熱, 頭症: 感冒, 鼻かぜ, 気管支炎, 鼻づまり
K0912000002	コリクリアーFBテープ70	肩こりに伴う肩の痛み, 腰痛, 関節痛, 筋肉痛, 腱鞘炎 (
K0912000001	コリクリアーFBテープ35	肩こりに伴う肩の痛み, 腰痛, 関節痛, 筋肉痛, 腱鞘炎 (
K0911000019	ナイトール L	体力充実して, 腹部に皮下脂肪が多く, 便秘がちなものの蓄膿症 (副鼻腔炎), 湿疹・皮膚炎, 吹出物 (にきび),
K0911000018	イントウェル	咽喉痛・頭痛・耳痛・神経痛・歯痛・抜歯後の疼痛・関節痛)・外傷痛の鎮痛, 悪寒・発熱時の解熱
K0911000017	プロビン「顆粒」	かぜの諸症状 (鼻水, 鼻づまり, くしゃみ, のどの痛み,
K0911000016	のどぬーるスプレークリアミントa	のどの炎症によるのどの痛み・のどのはれ・のどのあれ
K0911000014	ピスティールM顆粒	かぜの諸症状 (鼻水, 鼻づまり, くしゃみ, のどの痛み, せき, たん, 悪寒, 発熱, 頭痛, 関節の痛み, 筋肉の痛み) の緩和
K0911000013	ベルゲンカプセルIII	かぜの諸症状 (鼻水, 鼻づまり, くしゃみ, のどの痛み, せき, たん, 悪寒, 発熱, 頭痛, 関節の痛み, 筋肉の痛み) の緩和
K0911000012	ラミシールプラススプレー	水虫, いんきんたむし, ぜにたむし
K0911000011	ウチダの麻黄湯エキス散	風邪のひきはじめて, 寒気がして発熱, 頭痛があり, 身体のふしふしが痛い場合の次の諸症: 感冒, 鼻かぜ
K0911000005	ポディーV1500	滋養強壮, 虚弱体質, 肉体疲労・病中病後・食欲不振・栄養障害・発熱性消耗性疾患・産前産後などの場合の栄養補給
K0911000004	ゼノールテープ35温	肩こりに伴う肩の痛み, 腰痛, 関節痛, 筋肉痛, 腱鞘炎 (手・手首・足首の痛みとはれ), 肘の痛み (テニス肘など), 打撲, 捻挫
K0911000003	ロイヒフェルビ温	肩こりに伴う肩の痛み, 腰痛, 関節痛, 筋肉痛, 腱鞘炎 (手・手首・足首の痛みとはれ), 肘の痛み (テニス肘など), 打撲, 捻挫
K0911000002	イブアウターゲル	肩こりに伴う肩の痛み, 腰痛, 筋肉痛, 関節痛, 腱鞘炎 (手・手首の痛み), 肘の痛み (テニス肘など), 打撲, 捻挫
K0911000001	イブアウターテープ	肩こりに伴う肩の痛み, 腰痛, 筋肉痛, 関節痛, 腱鞘炎 (手・手首の痛み), 肘の痛み (テニス肘など), 打撲, 捻挫
K0910000028	ラクバステープFB35	肩こりに伴う肩の痛み, 腰痛, 関節痛, 筋肉痛, 腱鞘炎 (手・手首・足首の痛みとはれ), 肘の痛み (テニス肘等), 打撲, 捻挫

12264 件中 1 - 20 件目
検索結果ページ: 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 ... 614 次へ

[GenomeNet 医薬品DB | JAPIC 医療用 医薬品DB | JAPIC 一般用 医薬品DB]

2009/12/16版

平成21年度

ゲノムネット医薬品データベース

- ・シノニム情報を用いたキーワード検索
- ・成分、効能など付随情報の検索機能
- ・新規データへの継続的な対応

統合 DB 開発・運用 (1)

医薬品 DB 開発・運用

JAPIC 医療用 医薬品データベース

商品名	アスピリン
一般名	アスピリン
欧文一般名	
製剤名	
薬効分類名	解熱鎮痛消炎剤
薬効分類番号	1143
KEGG DRUG	D00109 →類似商品一覧
JAPIC ID	00006562 →PDF文書

LinkDB →

販売和名	アスピリン
欧文商標名	ASPIRIN
製造会社	エビス製薬
承認番号	(60AM)1811
YJコード	1143001X1031
日本標準商品分類番号	871143
薬価	1.98円/g
後発品フラグ	
JAPIC ID	00006562-001 →個別表示

本文情報

▼すべて閉じる

▼禁忌: 次の患者には投与しないこと

本剤又はサリチル酸系製剤に対し過敏症の既往歴のある患者
 消化性潰瘍のある患者（ただし、「1.慎重投与」の項参照）（プロスタグ
 し、消化性潰瘍を悪化させることがある。）
 重篤な血液の異常のある患者〔血小板機能障害を起こし、血液の異常を更
 重篤な肝障害のある患者〔肝障害をさらに悪化させるおそれがある。〕
 重篤な腎障害のある患者〔腎障害をさらに悪化させるおそれがある。〕
 重篤な心機能不全のある患者〔心機能をさらに悪化させるおそれがある。〕
 アスピリン喘息（非ステロイド性消炎鎮痛剤による喘息発作の誘発）又はその既往歴のある患者〔重篤な喘息発作を誘発さ
 せるおそれがある。〕
 出産予定日12週以内の妊婦（「6.妊婦、産婦、授乳婦等への投与」の項参照）

▼使用上の注意:

▼慎重投与: 次の患者には慎重に投与すること
 消化性潰瘍の既往歴のある患者〔消化性潰瘍を再発させることがある。〕

平成22年度

LinkDBを用いた関連情報の検索

- ・ 他の医薬品データベース：DrugBank
- ・ 副作用データベース：SIDER
- ・ ターゲット、代謝：
KEGG GENES/PATHWAY
- ・ 化合物データベース：KNAPSAcK など
- ・ 薬物相互作用情報：JAPIC文書から抽出したもの

医薬品のリストから薬物相互作用を調べたり、パスウェイを検索したりできるインタフェース

新規データへの継続的な対応

統合 DB 開発・運用 (2)

化学情報 DB 開発・運用

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統合データベースシステムです。上のサーチボックスを含め、ゲノムネットや KEGG のバックボーンシステムとして利用されています。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）をノードとし、エントリー間の参照情報をエッジ（リンク）とした膨大なグラフです。各データベースエントリーは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、これは一般には対応するページの 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、名前同士のつながりを蓄積したのが 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、日本語支援環境の整備を行い、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、ゲノムネット化合物データベースとして、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。これまでに以下のデータベースが 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

平成 21 年度

医薬品・化合物データベース LinkDB検索機能

- MassBank, 日化辞, HMDB <-> COMPOUND/DRUG
- JCGGDB <-> GLYCAN
- SIDER <-> DRUG

化学反応

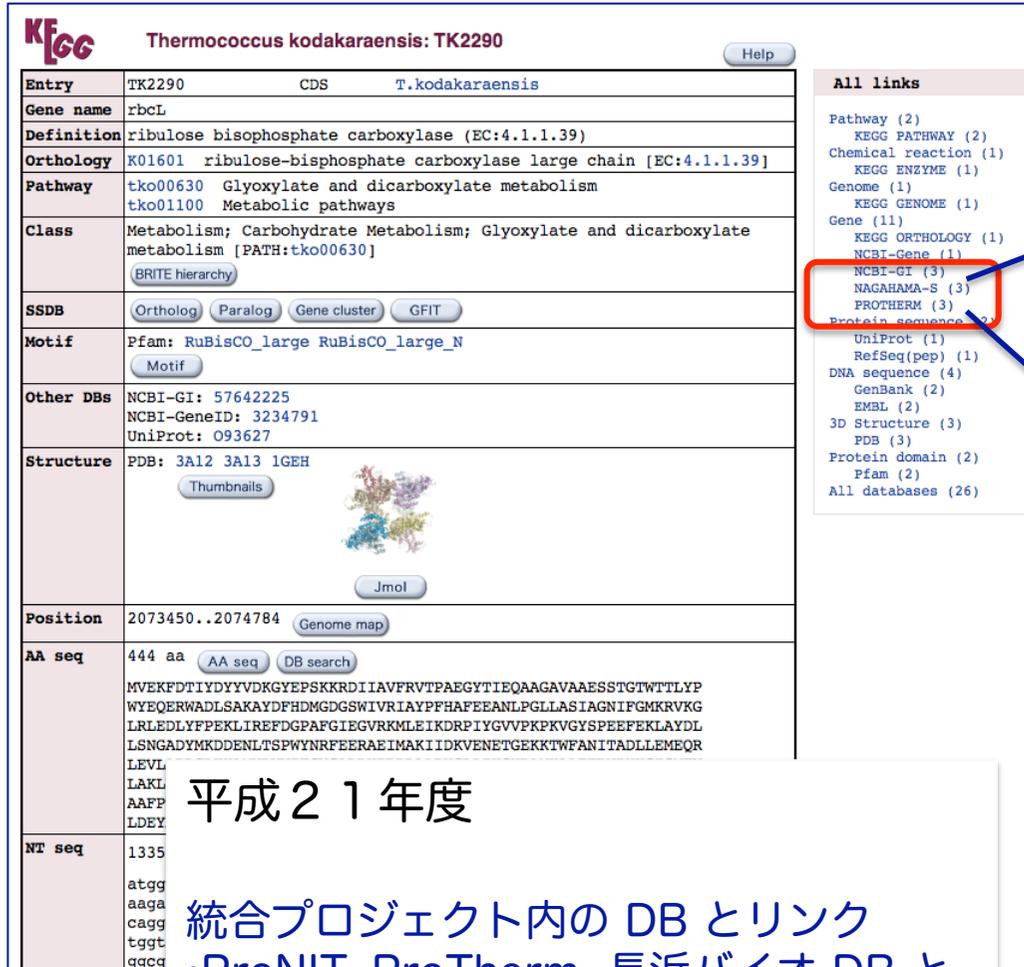
- KEGG REACTION/RPAIR の情報を知識処理技術開発における化学反応ネットワーク予測に応用

平成 22 年度

リンク情報の継続的な更新

統合 DB 開発・運用 (3)

LinkDB 開発・運用

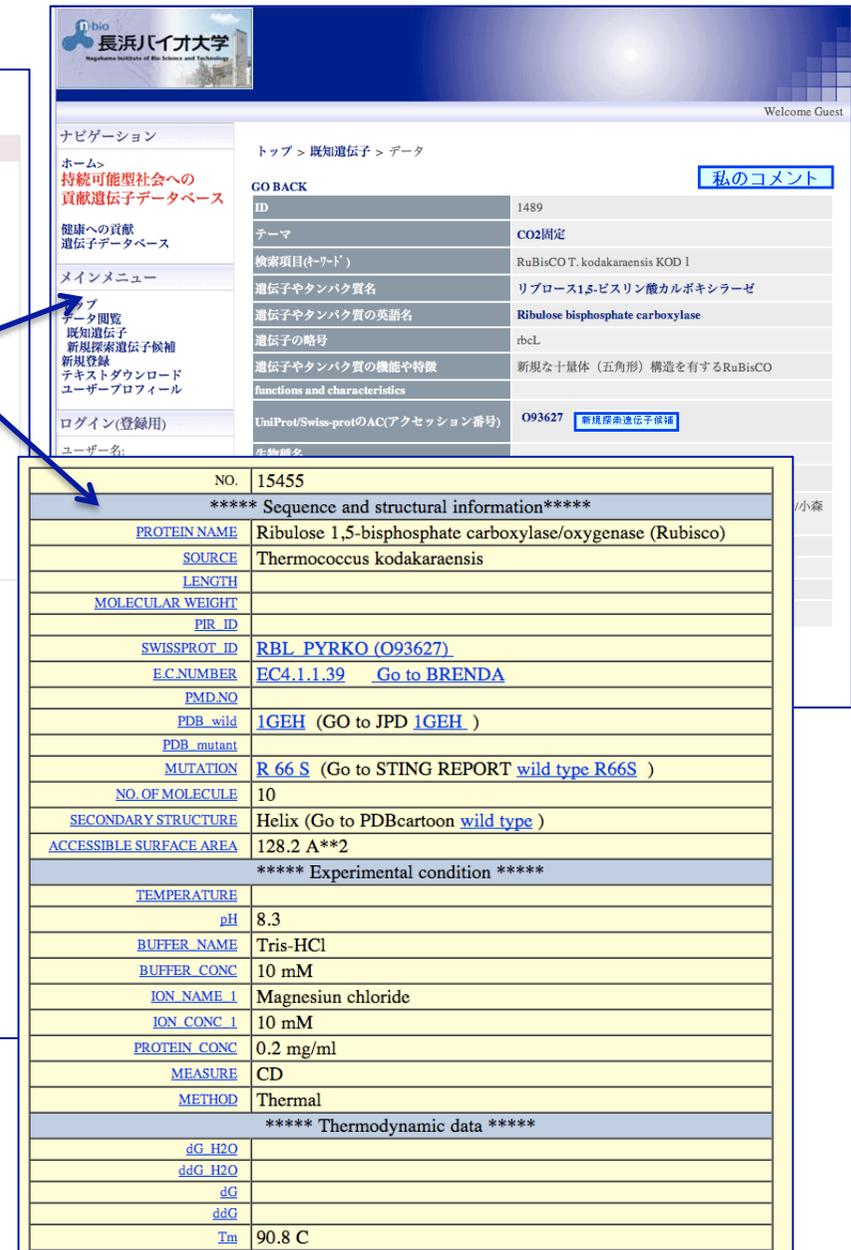


KEGG Thermococcus kodakaraensis: TK2290

Entry	TK2290	CDS	T.kodakaraensis
Gene name	rbcL		
Definition	ribulose biphosphate carboxylase (EC:4.1.1.39)		
Orthology	K01601 ribulose-bisphosphate carboxylase large chain [EC:4.1.1.39]		
Pathway	tko00630 Glyoxylate and dicarboxylate metabolism tko01100 Metabolic pathways		
Class	Metabolism; Carbohydrate Metabolism; Glyoxylate and dicarboxylate metabolism [PATH:tko00630] (BRITE hierarchy)		
SSDB	Ortholog Paralog Gene cluster GFIT		
Motif	Pfam: RuBisCO_large RuBisCO_large_N Motif		
Other DBs	NCBI-GI: 57642225 NCBI-GeneID: 3234791 UniProt: O93627		
Structure	PDB: 3A12 3A13 1GEH Thumbnails  Jmol		
Position	2073450..2074784 Genome map		
AA seq	444 aa AA seq DB search MVEKPDITLYDYVDKGYEPSKRRDI IAVFRVTPAEGYTI EQAAGAVAAESSTGTWTTLYP WYQERWADLSAKAYDFHDMGDGSWIVRIAYPFHAFEEANLPLGLAS IAGNIFGMKRVKG LRLEDLYFPEKLIREFDGFAGIEGVRKMLEIKDRPIYGVVPPKRVGYSPEEFKLAYDL LSNGADYMKDDENLTSPWYNRFEEARAEIMAKIIDRVENETGEKKTWFANITADLLEMEQR LEVL LAKL AAFP LDEY		
NT seq	1335 atgg aaga cagg tggt ggcg		

All links

- Pathway (2)
KEGG PATHWAY (2)
- Chemical reaction (1)
KEGG ENZYME (1)
- Genome (1)
KEGG GENOME (1)
- Gene (11)
KEGG ORTHOLOGY (1)
NCBI-Gene (1)
NCBI-GI (3)
NAGAHAMA-S (3)
PROTHERM (3)
- Protein sequence (2)
UniProt (1)
RefSeq(pep) (1)
- DNA sequence (4)
GenBank (2)
EMBL (2)
- 3D Structure (3)
PDB (3)
- Protein domain (2)
Pfam (2)
- All databases (26)



ナビゲーション

- ホーム>
- 持続可能性社会への貢献遺伝子データベース
- 健康への貢献遺伝子データベース
- メインメニュー
- トップ
- データ閲覧
- 既知遺伝子
- 新規探索遺伝子候補
- 新規登録
- テキストダウンロード
- ユーザープロフィール
- ログイン(登録用)
- ユーザー名:

トップ > 既知遺伝子 > データ

[私のコメント](#)

GO BACK	ID	1489
テーマ	CO2固定	
検索項目(←ワード)	RuBisCO T.kodakaraensis KOD 1	
遺伝子やタンパク質名	リブローズ1,5-ビスリン酸カルボキシラーゼ	
遺伝子やタンパク質の英語名	Ribulose biphosphate carboxylase	
遺伝子の略号	rbcL	
遺伝子やタンパク質の機能や特徴	新規な十量体(五角形)構造を有するRuBisCO	
functions and characteristics		
UniProt/Swiss-protのAC(アクセッション番号)	O93627	新規探索遺伝子候補

NO.	15455
**** Sequence and structural information****	
PROTEIN NAME	Ribulose 1,5-bisphosphate carboxylase/oxygenase (Rubisco)
SOURCE	Thermococcus kodakaraensis
LENGTH	
MOLECULAR WEIGHT	
PIR_ID	
SWISSPROT_ID	RBL_PYRKO (O93627)
E.C NUMBER	EC4.1.1.39 Go to BRENDA
PMD NO	
PDB_wild	1GEH (GO to JPD 1GEH)
PDB_mutant	
MUTATION	R 66 S (Go to STING REPORT wild type R66S)
NO. OF MOLECULE	10
SECONDARY STRUCTURE	Helix (Go to PDBcartoon wild type)
ACCESSIBLE SURFACE AREA	128.2 A**2
**** Experimental condition ****	
TEMPERATURE	
pH	8.3
BUFFER_NAME	Tris-HCl
BUFFER_CONC	10 mM
ION_NAME_1	Magnesium chloride
ION_CONC_1	10 mM
PROTEIN_CONC	0.2 mg/ml
MEASURE	CD
METHOD	Thermal
**** Thermodynamic data ****	
dG_H2O	
ddG_H2O	
dG	
ddG	
Tm	90.8 C

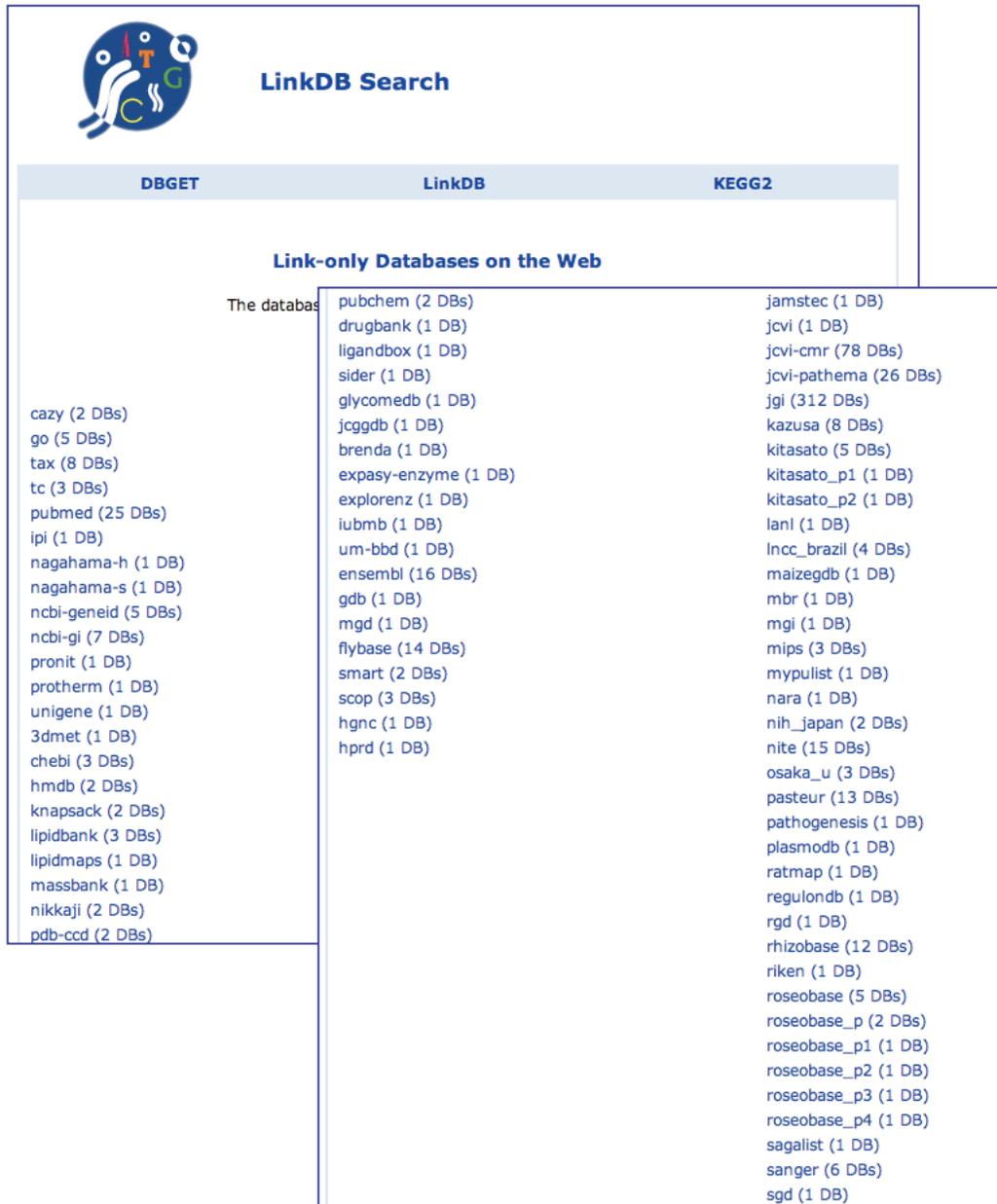
平成21年度

統合プロジェクト内のDBとリンク
 ・ProNIT, ProTherm, 長浜バイオDBとKEGG GENES

ユーザー定義のリンクを使った検索。

統合 DB 開発・運用 (3)

LinkDB 開発・運用



The screenshot shows the LinkDB Search interface. At the top, there is a logo and the text "LinkDB Search". Below this, there are three tabs: "DBGET", "LinkDB", and "KEGG2". The "LinkDB" tab is selected, and the page title is "Link-only Databases on the Web". The main content area is a list of databases, organized into three columns. The first column lists databases under the heading "The databas". The second and third columns list databases under the heading "Link-only Databases on the Web".

DBGET	LinkDB	KEGG2
cazy (2 DBs)	pubchem (2 DBs)	jamstec (1 DB)
go (5 DBs)	drugbank (1 DB)	jcvi (1 DB)
tax (8 DBs)	ligandbox (1 DB)	jcvi-cmr (78 DBs)
tc (3 DBs)	sider (1 DB)	jcvi-pathema (26 DBs)
pubmed (25 DBs)	glycomedb (1 DB)	jgi (312 DBs)
ipi (1 DB)	jcggdb (1 DB)	kazusa (8 DBs)
nagahama-h (1 DB)	brenda (1 DB)	kitasato (5 DBs)
nagahama-s (1 DB)	expasy-enzyme (1 DB)	kitasato_p1 (1 DB)
ncbi-geneid (5 DBs)	explorenz (1 DB)	kitasato_p2 (1 DB)
ncbi-gi (7 DBs)	iubmb (1 DB)	lanl (1 DB)
pronit (1 DB)	um-bbd (1 DB)	lnc_brazil (4 DBs)
protherm (1 DB)	ensembl (16 DBs)	maizegdb (1 DB)
unigene (1 DB)	gdb (1 DB)	mbr (1 DB)
3dmet (1 DB)	mgd (1 DB)	mgj (1 DB)
chebi (3 DBs)	flybase (14 DBs)	mips (3 DBs)
hmdb (2 DBs)	smart (2 DBs)	mypulist (1 DB)
knapsack (2 DBs)	scop (3 DBs)	nara (1 DB)
lipidbank (3 DBs)	hgnc (1 DB)	nih_japan (2 DBs)
lipidmaps (1 DB)	hprd (1 DB)	nite (15 DBs)
massbank (1 DB)		osaka_u (3 DBs)
nikkaji (2 DBs)		pasteur (13 DBs)
pdb-ccd (2 DBs)		pathogenesis (1 DB)
		plasmodb (1 DB)
		ratmap (1 DB)
		regulondb (1 DB)
		rgd (1 DB)
		rhizobase (12 DBs)
		riken (1 DB)
		roseobase (5 DBs)
		roseobase_p (2 DBs)
		roseobase_p1 (1 DB)
		roseobase_p2 (1 DB)
		roseobase_p3 (1 DB)
		roseobase_p4 (1 DB)
		sagalist (1 DB)
		sanger (6 DBs)
		sgd (1 DB)

平成22年度

データベースの自動更新

- ・手作業で更新したリンクを定期的に取り込む

ユーザー定義のリンクを使った検索

- ・ウェブ上でできるようにする

継続的な更新作業

ゲノムネット統合データベース

