

平成24年度  
ライフサイエンスデータベース統合推進事業  
統合化推進プログラム

# ゲノム情報に基づく 疾患・医薬品・環境物質データの統合

京都大学化学研究所

金久 實

2013年1月21日 進捗状況報告会

# 背景と目的

## トランスレーショナル・バイオインフォマティクス

対象	役割	例
研究者	研究成果を医療の現場で活用するためのバイオインフォマティクス技術を提供	個別化医療 ドラッグディスカバリー
一般の人々	医薬品や疾患の科学的理解を深めるためのバイオインフォマティクスリソースを提供	参加型医療 セルフメディケーション

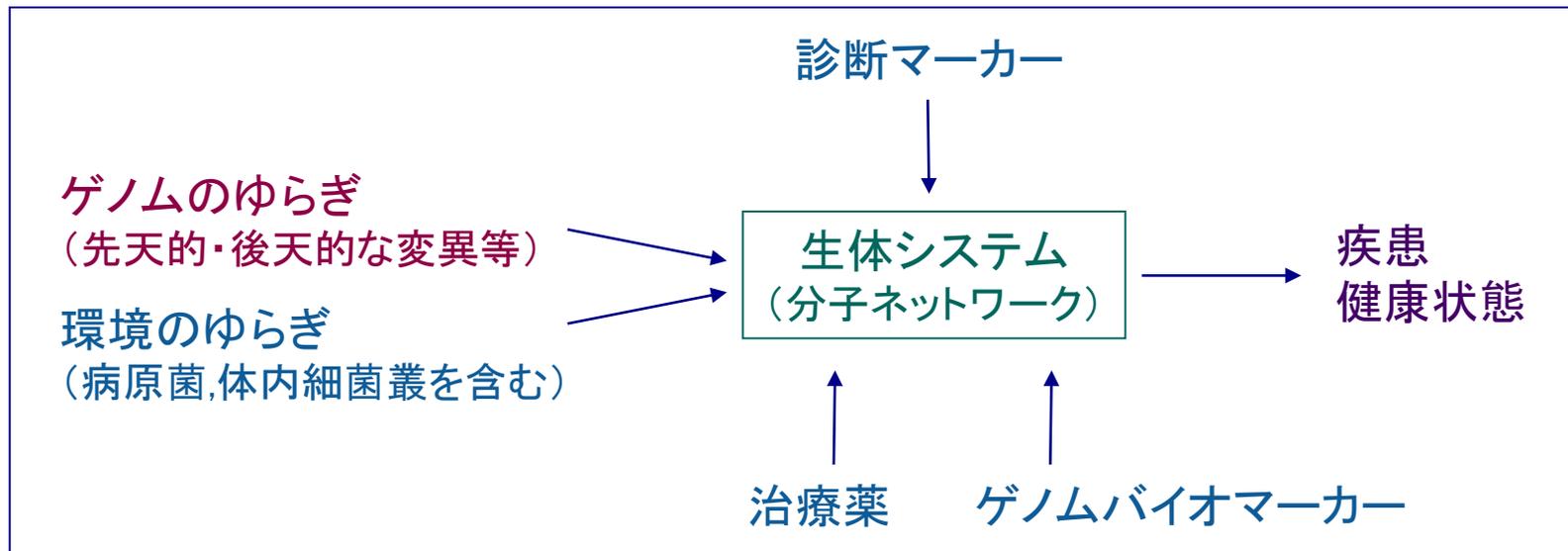
## ゲノム情報に基づく疾患・医薬品・環境物質データの統合

- ゲノム関連研究の成果を社会に還元するための統合データベース
- 研究者コミュニティに対してはゲノム情報の有効利用を促進する基盤データベース
- 医療従事者、一般社会の人々に対しては医薬品と疾患への科学的理解を深めるリソース

# 研究開発構想

疾患・医薬品・環境物質など社会的ニーズの高いデータを、ゲノム情報を基盤とした生体システム情報として統合し、最先端の研究と一般社会との架け橋となる統合データベース構築を行う。

- 生体システムを分子ネットワークで表現
- 疾患は分子ネットワークのゆらぎ状態
- 疾患の遺伝要因、環境要因、病原体などは分子ネットワークへのゆらぎ物質
- 医薬品は分子ネットワークに対する異なるタイプのゆらぎ物質



# 医薬品・疾患・ゲノム・パスウェイの統合リソース

## KEGG MEDICUS



医薬品情報

検索

ヘルプ

» English

### KEGG MEDICUS

医薬品検索利用法  
相互作用検索利用法  
お薬手帳の利用法  
医薬品分類  
医薬品コード

### KEGG DRUG

スイッチOTC薬

### KEGG DISEASE

がん  
感染症

### KEGG

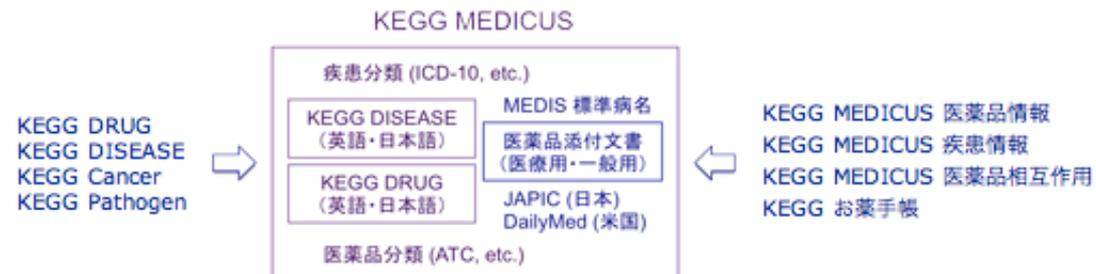
ゲノムネット  
Kanehisa Labs

## 医薬品・疾患・ゲノム・パスウェイの統合リソース KEGG MEDICUS

### お知らせ

2013年2月22日 NPOバイオインフォマティクス・ジャパン医薬品研究会  
2013年3月25~27日 農芸化学会における展示・デモ「KEGG MEDICUS とお薬手帳」

**KEGG MEDICUS** は疾患・医薬品・環境物質など社会的ニーズの高いデータを、ゲノム情報を基盤とした生体システム情報として統合したリソースです。研究者コミュニティだけでなく、医療従事者や一般の人々にも有用な情報を提供しています。紹介ページやリーフレットもご覧ください。



KEGG MEDICUS には研究者向けのインターフェース(左側)と医療従事者や一般の人々向けのインターフェース(右側)があります。

<http://www.kegg.jp/kegg/medicus/>

# 平成24年度当初計画と進捗状況

## 当初計画

1. 疾患に関する遺伝子・分子レベルの知識を集約した KEGG DISEASE を拡充
2. KEGG DRUG の医薬品相互作用データベースを拡充
3. KEGG MEDICUS 医薬品情報に相互作用検索インターフェースを追加
4. KEGG MEDICUS 疾患情報の充実
5. 統合インターフェースの開発
6. (追加の取り組み)お薬手帳の開発

## 進捗状況

KEGG DISEASE 疾患エントリ数は 951 (2012.2.21) から 1301 (2013.1.15) に増加、OMIM にある疾患遺伝子(感受性遺伝子は除く)のほぼすべてに対応。

JAPIC 添付文書より相互作用データを網羅的に抽出する方法を開発し、相互作用データベースの更新体制を確立した。データ数は6万から23万に増加した。有効成分に加えて、添加物の情報をデータベース化した。

相互作用データベースに対して、商品レベルと KEGG DRUG D番号レベルでの検索インターフェースを開発し公開した。お薬手帳にも相互作用チェック機能を追加した。商品レベルでの医薬品分類を提供した。

疾患分類を充実させ、遺伝要因となるヒトの遺伝子、病原性に関わる病原体遺伝子セットの情報を蓄積している。

KEGG DISEASE/DRUG/ENVIRON/COMPOUND(英語版・日本語版)と KEGG PATHWAY(英語版のみ)の統合検索を可能にした。BRITE用 KEGG Mapper を改良した。医薬品用の KEGG MEDICUS API を開発中。

デバイス間でデータを同期させる機能を開発した。健康診断の検査値や、医薬品のマーカーとなる個人ゲノムの情報などを記録し利用する機能を開発中。

# KEGG DISEASE の拡充

KEGG DISEASE 疾患エン트리	951
病因遺伝子	1,974
OMIM 疾患数	2,347
感染症ゲノム (ウイルス以外)	293
疾患パスウェイマップ	58

February 21, 2012



KEGG DISEASE 疾患エン트리	1,301
病因遺伝子	2,265
OMIM 疾患数	2,663
感染症ゲノム (ウイルス以外)	440
感染症ゲノム (ウイルス)	235
疾患パスウェイマップ	66

January 15, 2013

- Alzheimer disease 1, familial, 104300 (3) |APP, AAA, CVAP, AD1|104760|21q21
- Alzheimer disease 6, 104300 (2) |AD6|605526|10q24
- Alzheimer disease 8, 104300 (2) |AD8|607116|20p
- Alzheimer disease, late-onset, susceptibility to}, 104300 (3) |NOS3|163729|7q36
- Alzheimer disease, type 3, 607822 (3) |PSEN1, AD3|104311|14q24.3
- Alzheimer disease, type 3, with spastic paraparesis and apraxia, 607822 (3) |PSEN1, AD3|104311|14q24.3
- Alzheimer disease, type 3, with spastic paraparesis and unusual plaques, 607822 (3) |PSEN1, AD3|104311|14q24.3
- Alzheimer disease-10, 104300 (2) |AD10|609636|7q36
- Alzheimer disease-11 (2) |AD11|609790|9p22.1
- Alzheimer disease-2, 104310 (3) |APOE, AD2, LPG, LDLQC5|107741|19q13.2
- Alzheimer disease-4, 606889 (3) |PSEN2, AD4, STM2, CMD1V|600759|1q31-q42
- Alzheimer disease-5, 104300 (2) |AD5|602096|12p11.23-q13.12
- Alzheimer disease-7 (2) |AD7|606187|10p13

OMIM morbidmap (2011.2.22)	5,662
{感受性遺伝子}	989
[非病因遺伝子]	208

OMIM morbid map 記載数	4,465
ユニークな病因遺伝子数	2,160
ユニークな Phenotype OMIM 番号	2,579

「当初2年間で OMIM にある病因遺伝子  
既知の疾患をすべてエン 트리化」は達成

# KEGG DISEASE 疾患分類

**KEGG** ヒト疾患 + 遺伝子

[ Brite menu | Download htext ]

ヒト疾患 + 遺伝子

One-click mode

- ▼ **がん**
- ▼ **免疫系疾患**
- ▼ **神経系疾患**
  - ▼ **神経変性疾患**
    - ▼ **H00056 アルツハイマー病 [PATH:hsa05010]**
      - (AD1) APP; amyloid beta (A4) protein (mutation) [HSA:351] [KO:K04520]
      - (AD2) APOE; apolipoprotein E (mutation) [HSA:348] [KO:K04524]
      - (AD3) PSEN1; presenilin 1 (mutation) [HSA:5663] [KO:K04505]
      - (AD4) PSEN2; presenilin 2 (mutation) [HSA:5664] [KO:K04522]
    - ▶ **H00066 レビー小体型認知症**
    - ▶ **H00057 パーキンソン病 [PATH:hsa05012]**
    - ▶ **H00058 筋萎縮性側索硬化症 [PATH:hsa05014]**
    - ▶ **H00059 ハンチントン病 [PATH:hsa05016]**
    - ▶ **H00060 歯状核赤核淡蒼球ルイ体萎縮症**
    - ▶ **H00062 球脊髄性筋萎縮症**
    - ▶ **H00063 脊髄小脳失調症 [PATH:hsa04730 hsa03008]**
    - ▶ **H00061 プリオン病 [PATH:hsa05020]**
    - ▶ **H00064 毛細血管拡張性運動失調症**
    - ▶ **H00065 アレキサンダー病**
    - ▶ **H00075 レフサム病 [PATH:hsa04146]**
    - ▶ **H00067 フリードライヒ運動失調症**
    - ▶ **H00068 遺伝性視神経萎縮 [PATH:hsa00190]**

**KEGG** 感染症疾患 + ゲノム

[ Brite menu | Download htext ]

感染症疾患 + ゲノム

One-click mode

- ▼ **細菌感染症**
  - ▼ **エンテロバクテリアによる感染症**
    - ▼ **H00277 腸管出血性大腸菌感染症 [PATH:hsa05130]**
      - Escherichia coli O157:H7 [GN:ece ecs ecf etw elx]
      - Escherichia coli O26:H11 [GN:eoj]
      - Escherichia coli O111:H- [GN:eoj]
      - Escherichia coli O103:H2 [GN:eoh]
    - ▶ **H00278 腸管病原性大腸菌感染症 [PATH:hsa05130]**
    - ▶ **H00280 腸管毒素原性大腸菌感染症**
    - ▶ **H01312 腸管凝集性大腸菌感染症**
    - ▶ **H00279 尿路病原性大腸菌感染症**
    - ▶ **H01313 大腸菌性髄膜炎**
    - ▶ **H00111 腸チフス [PATH:hsa05132]**
    - ▶ **H00112 パラチフス**
    - ▶ **H00113 サルモネラ感染症**
    - ▶ **H00297 ペスト**
    - ▶ **H00298 エルシニア感染症**
    - ▶ **H00299 細菌性赤痢 [PATH:hsa05131]**
    - ▶ **H00300 エンテロバクター感染症**
    - ▶ **H00301 クレブシエラ感染症**
    - ▶ **H00302 シトロバクター感染症**
    - ▶ **H00303 セラチア感染症**
    - ▶ **その他のガンマプロテオバクテリアによる感染症**
    - ▶ **ベータプロテオバクテリアによる感染症**

KEGG 独自の分類、他に ICD-10 国際疾病分類も利用

# KEGG Pathogen Resource

- KEGG DISEASE エントリ (222 種類の感染症疾患、ICD-10疾患分類)
- KEGG PATHWAY マップ (24 種類の感染症疾患)
- **KEGG MODULE エントリ (5 種類の病原性シグネチャー)**
- 医薬品に関する BRITE 機能階層 (抗感染症薬、ターゲットに基づく医薬品分類)
- 医薬品に関する KEGG DRUG 構造マップ (開発の歴史: 抗感染症薬)
- 環境要因に関する BRITE 機能階層 (Bacterial Toxins)
- KEGG GENOME のメタデータアノテーション、病原菌の pan-genomes を含む



[ Brite menu | Organism menu | Download htext ]

Reference hierarchy (KO)

One-click mode

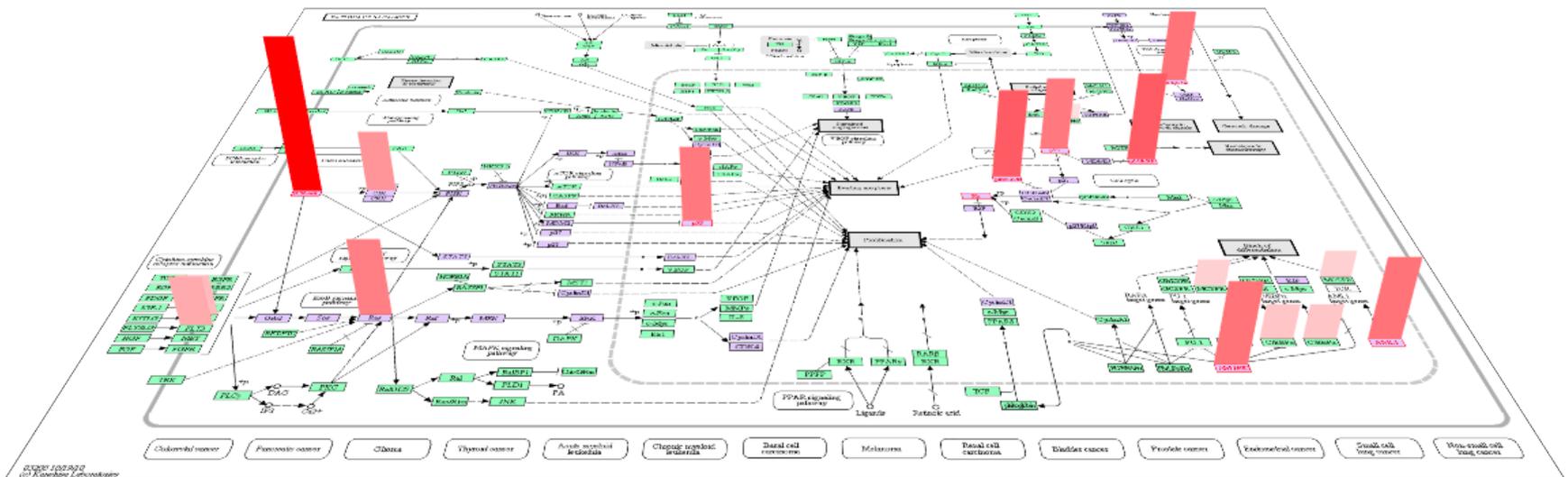
- ▶ Pathway module
- ▶ Structural complex
- ▶ Functional set
- ▼ Signature module
  - ▼ Genotypic signature
    - ▶ Metabolic capacity
    - ▼ Pathogenicity
      - M00363 EHEC pathogenicity signature, Shiga toxin [PATH:map05130 map05131]
      - M00542 EHEC/EPEC pathogenicity signature, T3SS and effectors [PATH:map05130]
      - M00574 Pertussis pathogenicity signature 1, pertussis toxin [PATH:map05133]
      - M00575 Pertussis pathogenicity signature 2, T1SS [PATH:map05133]
      - M00564 Helicobacter pylori pathogenicity signature, cagA pathogenicity island [PATH:map05120]

Organism	K11006 (stxA) [18]	K11007 (stxB) [18]
ece	Z3344 Z1464	Z1465 Z3343
ecs	ECs2974 ECs1205	ECs1206 ECs2973
ecf	ECH74115_2906 ECH74115_3533	ECH74115_3532 ECH74115_2905
etw	ECSP_2723 ECSP_3253	ECSP_3252 ECSP_2722
ej	ECO26_1599	ECO26_1600
eoi	ECO111_3361 ECO111_2430	ECO111_2429 ECO111_3362
eoh	ECO103_5197 ECO103_2845	ECO103_2844 ECO103_5198
eso	O3O_09165	O3O_09170
esl	O3K_16135	O3K_16130
elx	CDCO157_2739 CDCO157_1154	CDCO157_1155 CDCO157_2738
sdv	SDY_1389	SDY_1390

# KEGG Cancer Resource

- KEGG DISEASE エントリ (55 種類のがん)
- KEGG PATHWAY マップ (14 種類のがん)
- シグナル伝達経路に関するがん全体像マップ (がんのパスウェイ)
- 転写ネットワークに関する全体像マップ (転写因子、microRNA、プロテオグリカン)
- 環境要因に関する全体像マップ (化学発がん、ウイルス発がん)
- 医薬品に関する BRITE 機能階層 (抗悪性腫瘍薬、その他の医薬品分類)
- 医薬品に関する KEGG DRUG 構造マップ (開発の歴史: 抗腫瘍薬)
- 環境因子に関する BRITE 機能階層 (発がん物質、内分泌攪乱物質、農薬、ほか)
- 外部リソースの統合: COSMIC, TCGA (予定)

## Somatic mutations in cancer genomes (from COSMIC)



## Chronic myeloid leukemia in the overview map

# KEGG DRUG の拡充

KEGG DRUG 医薬品エントリ	9,821	GPCR	1,963
ターゲットを含むエントリ	4,100	Cytokine receptor	328
ユニークなターゲット (ヒト遺伝子)	672	Nuclear receptor	409
代謝酵素を含むエントリ	635	Ion channel	1,064
ユニークな代謝酵素 (ヒト遺伝子)	30	Transporter	58
ゲノムバイオマーカーを含むエントリ	205	Enzyme	878
ユニークなマーカー (ヒト遺伝子)	45	Protein kinase	86

January 15, 2013

1584	hsa04080	Neuroactive ligand-receptor interaction	328	CYP3A4 [HSA:1576]
972	hsa04020	Calcium signaling pathway	194	CYP2D6 [HSA:1565]
373	hsa04970	Salivary secretion	113	CYP2C9 [HSA:1559]
237	hsa04270	Vascular smooth muscle contraction	107	CYP1A2 [HSA:1544]
196	hsa04060	Cytokine-cytokine receptor interaction	84	CYP2C19 [HSA:1557]
175	hsa04726	Serotonergic synapse	70	CYP3A [KO:K07424]
172	hsa04725	Cholinergic synapse	46	CYP3A5 [HSA:1577]
166	hsa04971	Gastric acid secretion	32	CYP3A7 [HSA:1551]
141	hsa04728	Dopaminergic synapse	27	CYP2C8 [HSA:1558]
138	hsa04540	Gap junction	23	CYP2E1 [HSA:1571]
136	hsa00590	Arachidonic acid metabolism	21	CYP2B6 [HSA:1555]
131	hsa04010	MAPK signaling pathway	10	CYP2A6 [HSA:1548]
101	hsa04727	GABAergic synapse	5	MAOA [HSA:4128]
86	hsa00230	Purine metabolism	4	UGT2B7 [HSA:7364]
85	hsa04144	Endocytosis	4	UGT1A1 [HSA:54658]
81	hsa05200	Pathways in cancer		.....

# ゲノムバイオマーカー

Drug	ATC code	KEGG	Therapeutic area	Biomarker		Comment
オメプラゾール	A02BC01	D00455 D05259 D05261	プロトンポンプ阻害薬	CYP2C19	SNPs	薬物代謝
パントプラゾール	A02BC02	D02593	プロトンポンプ阻害薬	CYP2C19	SNPs	薬物代謝
デクスランソプラゾール	A02BC03 A02BC06	D08903	プロトンポンプ阻害薬	CYP1A2 CYP2C19	SNPs	薬物代謝
ラベソプラゾール	A02BC04	D00724	プロトンポンプ阻害薬	CYP2C19	SNPs	薬物代謝
エソメプラゾール	A02BC05	D01984 D04056	プロトンポンプ阻害薬	CYP2C19	SNPs	薬物代謝
フェニル酪酸ナトリウム	A16AX03	D05868	代謝用製剤	NAGS CPS ASS OTC ASL ARG	陰性	先天性代謝異常
ワルファリン	B01AA03	D00564 D01280	抗血栓薬	VKORC1 CYP2C9	SNPs SNPs	ターゲット 薬物代謝
クロピドグレル	B01AC04	D00769	抗血栓薬	CYP2C19	SNPs	薬物代謝
プラスグレル	B01AC22	D05597	抗血栓薬	CYP2C19	SNPs	薬物代謝
チカグレロル	B01AC24	D09017	抗血栓薬	CYP2C19	SNPs	薬物代謝
エルトロンボパグ	B02BX05	D03978	止血薬	Factor V Leiden 変異 SERPINC1	陰性 陰性	薬物有害反応 先天性代謝異常
キニジン	C01BA01	D00642 D02272	抗不整脈薬	CYP2C19	SNPs	薬物代謝
プロパフェノン	C01BC03	D00640	抗不整脈薬	CYP2D6	SNPs	薬物代謝
プロプラノロール	C07AA05	D00483	ベータ遮断薬	CYP2D6	SNPs	薬物代謝

FDA-approved drugs with pharmacogenomic biomarkers

# KEGG DRUG 相互作用データベース

## Drug Interaction Database

Search :

Working status : ---

Interaction :  Only '併用禁忌'

Option : 20 records per page

Link : JAPIC Document List [Target Drug List](#) [Drug Group List](#)

Items : 1 - 1 of 1

JAPIC CODE	Name	KEGG DRUG	Interaction		
<a href="#">00045997</a>	リビトール	D02258	併用禁忌	テラブレビル	<a href="#">D09012</a>
			併用禁忌	テラピック	<a href="#">D09012</a>
			原則併用禁忌	フィブラート系薬剤	<a href="#">C10AB</a>
			原則併用禁忌	ベザフィブラート	<a href="#">D01366</a>
			併用注意	フィブラート系薬剤	<a href="#">C10AB</a>
			併用注意	ベザフィブラート	<a href="#">D01366</a>
			併用注意	ニコチン酸製剤	<a href="#">D00049</a> <a href="#">D01419</a> <a href="#">D04991</a>
			併用注意	ニセリトロール	<a href="#">D01754</a>
			併用注意	免疫抑制剤	<a href="#">L04</a>
			併用注意	シクロスポリン	<a href="#">D00184</a>
			併用注意	アゾール系抗真菌薬	<a href="#">JN10034</a>
			併用注意	イトラコナゾール	<a href="#">D00350</a>
			併用注意	エリスロマイシン	<a href="#">D00140</a> <a href="#">D00851</a> <a href="#">D01361</a> ...
			併用注意	クラリスロマイシン	<a href="#">D00276</a> <a href="#">D07710</a>
			併用注意	HIVプロテアーゼ阻害剤	<a href="#">JN10020</a>
			併用注意	メシル酸ネルフィナビル	<a href="#">D00899</a>
			併用注意	グレープフルーツジュース	<a href="#">E00839</a>
			併用注意	エファビレンツ	<a href="#">D00896</a>
			併用注意	リファンピシン	<a href="#">D00211</a> <a href="#">D08479</a>
			併用注意	陰イオン交換樹脂	
			併用注意	ジゴキシン	<a href="#">D00298</a> <a href="#">D02587</a> <a href="#">D07555</a> ...
			併用注意	経口避妊薬	<a href="#">G03A</a>
			併用注意	ノルエチンドロン-エチニルエストラジオール	<a href="#">D04483</a>

相互作用記載の添付文書数 7261  
添付文書での相互作用数 107,791

C/D/E番号相互作用データ数 230,413  
6,294

併用禁忌 59,855

昨年度のデータ数 2,834

併用禁忌

- 添付文書から相互作用を抽出
- KEGG エントリ(C/D/E 番号)との対応づけ
- 医薬品グループの定義(ATC コードまたは任意のグループ)
- 毎月の添付文書の更新に対応
- KEGG エントリレベルでの検索インターフェース
- 個々の医薬品(YJ コード)レベルでの検索インターフェース
- お薬手帳からのインターフェース

# 添付文書と KEGG の対応づけ

## JAPIC - KEGG DRUG リンク情報管理

検索 :

KEGG DRUGが未定義の添付文書を表示

医薬品の種類 :

作業状況 :

オプション :  件表示

Page :  of 489 Items : 1 - 50 of 24425

No	添付文書番号	名称	KEGG DRUG	成分	メモ	作業状況
1	<a href="#">00061038</a>	クラドイド	D04799	ヘパリン類似物質 D04799		済み <a href="#">編集</a>
2	<a href="#">00061037</a>	ガンマオリザノール	D01221	ガンマオリザノール D01221		済み <a href="#">編集</a>
3	<a href="#">00061028</a>	ラフチジン	D01131	ラフチジン D01131		済み <a href="#">編集</a>
4	<a href="#">00061022</a>	プロポフォル	D00549	プロポフォル D00549		済み <a href="#">編集</a>
5	<a href="#">00061003</a>	ラフチジン	D01131	ラフチジン D01131		済み <a href="#">編集</a>

## JAPIC 添加物辞書情報

Query :

KEGG DRUGが未定義の成分を表示

Display :  件表示 [D番号グループで表示](#) [登録順でソート](#)

Page :  of 28 Items : 51 - 100 of 1381

No	添加物	KEGG DRUG
51	D-マンニトール	D00062
52	D-ソルビトール	D00096
53	D-ソルビトール液	D00096
54	D-ソルビトール液 (70%)	D00096
55	D-マンニトール	D00062
56	HPC : ヒドロキシプロピルセルロース	D04478
57	HSPC	D04682
58	L-アスコルビン酸Na	D05853
59	L-アスコルビン酸ステアリン酸エステル	C20340

## DailyMed - KEGG DRUG リンク情報管理

Query :

KEGG DRUGが未定義の医薬品を表示

KEGG DRUGが辞書情報と異なる医薬品を表示

医薬品の種類 :

作業状況 :

Display :  件表示

Page :  of 767 Items : 51 - 100 of 38314     [Sort by last update](#)

No	Generic name	KEGG DRUG	Component	メモ	Action
51	<a href="#">SIMETHICONE</a> EQUATE (Walmart Stores, Inc.) 9763e50d-b9a8-4918-919b-c06e0e4ad5fd	D01540	DIMETHICONE	D01540	<a href="#">編集</a>
52	<a href="#">Amlodipine Besylate</a> PD-Rx Pharmaceuticals, Inc. d5859daf-d6e1-4f8f-a246-5282b81be78d	D00615	AMLODIPINE BESYLATE	D00615	<a href="#">編集</a>
53	<a href="#">Atenolol</a> Mutual Pharmaceutical Company, Inc. 99721d00-0a3e-4966-8bce-766b03163	D00235	ATENOLOL	D00235	<a href="#">編集</a>

## DailyMed Component - KEGG DRUG リンク情報管理

Query :

KEGG DRUGが未定義の成分を表示

Display :  件表示 [Group by KEGG DRUG](#) [Sort by Add date](#)

Page :  of 79 Items : 1 - 50 of 3934

No	Component	KEGG DRUG
1	<a href="#">2,3-DIMERCAPTOSUCCINIC ACID</a>	D00572
2	<a href="#">ACETOHYDROXAMIC ACID</a>	D00220
3	<a href="#">CABOZANTINIB S-MALATE</a>	D10095
4	<a href="#">CYSTEAMINE HYDROCHLORIDE</a>	D03635
5	<a href="#">DEXTRAN 75</a>	D06541
6	<a href="#">EXAMETAZIME</a>	D01109
7	<a href="#">GELATIN</a>	D00115
8	<a href="#">IODIDE ION 1-123</a>	N/A
9	<a href="#">MITOXANTRONE</a>	D02166
10	<a href="#">PASIREOTIDE</a>	D10147

# 健康促進と健康悪化に関する物質のリソース



## KEGG ENVIRON

生薬、健康促進と健康悪化に関する物質のリソース

» English

**KEGG2**   **PATHWAY**   **BRITE**   **MODULE**   **DISEASE**   **DRUG**   **ENVIRON**   **MEDICUS**

E番号、名称、カテゴリ、ソースを検索  成分も検索 / C番号、名称を検索

検索

### KEGG ENVIRON データベース

**KEGG ENVIRON** は生薬、精油など健康促進の効果を示す物質を、主に植物由来の天然物として集めたデータベースです。KEGG ENVIRON のエントリーは E 番号で識別され、成分、効能、由来生物種などの情報が蓄積されています。現時点での ENVIRON の主なカテゴリは以下の3つです。

- 生薬
- 精油
- メディカルハーブ

また関連したリソースとして、KEGG COMPOUND データベースには環境汚染物質をはじめ健康悪化を引き起こす物質の情報が蓄積されています。

- 内分泌攪乱物質
- 農薬
- 発がん物質
- 自然毒

C/D/E 番号について

[http://www.kegg.jp/kegg/drug/environ\\_ja.html](http://www.kegg.jp/kegg/drug/environ_ja.html)

# KEGG MEDICUS 医薬品分類

## 日本の薬効分類

### 3 代謝性医薬品

31 ビタミン剤

32 滋養強壯薬

33 血液・体液用薬

331 血液代用剤

332 止血剤

333 血液凝固阻止剤

3331 輸血用クエン酸ナトリウム製剤

3332 ジクマロール系製剤

D01280 ワルファリンカリウム (JP16)

00050032 ワーファリン (エーザイ)

3332001F3035 ワーファリン錠0.5mg

3332001F1024 ワーファリン錠1mg

3332001F2020 ワーファリン錠5mg

## WHOのATC分類

### B 血液と造血器官

B01 抗血栓薬

B01A 抗血栓薬

B01AA ビタミンK拮抗薬

B01AA01 ジクマロール

B01AA02 フェニンジオン

B01AA03 ワルファリン

D08682 ワルファリン

D00564 ワルファリンナトリウム

D01280 ワルファリンカリウム (JP16)

00050032 ワーファリン (エーザイ)

3332001F3035 ワーファリン錠0.5mg

3332001F1024 ワーファリン錠1mg

3332001F2020 ワーファリン錠5mg

### 分類体系

KEGG DRUG

添付文書

商品

- 医療用医薬品の商品すべての薬効分類とATC分類
- 一般用医薬品の商品すべての分類
- 米国の医療用医薬品の商品すべてのATC分類

# KEGG お薬手帳

## KEGG お薬手帳

利用法

東郷 毛貝

設定

薬を追加  使用中の薬のみ表示 [相互作用をチェック](#)

2012/09/27 皮膚科

編集 削除

1日 1回 夕食後

使用中 イトリゾールカプセル50 1回 2錠 6290 経口抗真菌剤 D00350 イトラコナゾール

適宜

使用中 アスタット軟膏1% 2655 抗真菌剤 D01092 ラノコナゾール

2012/09/06 内科

編集 削除

1日 1回 夕食後

使用中 クレストール錠5mg 1回 1錠 2189 HMG-CoA還元酵素阻害剤 D01915 ロスバスタチンカルシウム

1日 1回 朝食後

使用中 カルブロック錠16mg 1回 1錠 2149 持続性Ca拮抗剤 D01145 アゼルニジピン

ウェブブラウザのローカルストレージを用いており、サーバーに情報は保存されません

現状

- 自分が使用している処方薬、OTC 薬を自分で管理（セルフメディケーション）
- 併用禁忌や併用注意を伴う医薬品相互作用のチェック機能

開発中

- タブレット端末を含めたデバイス間の同期機能
- 健康診断の検査値、副作用歴、アレルギー等を記録（広い意味の個別化医療）
- 医薬品のバイオマーカーとなる個人ゲノムの変異パターンを記録（個別化医療）

予定

- 医療機関と情報を共有（参加型医療）

# KEGG MEDICUS 医薬品相互作用情報

## KEGG MEDICUS 医薬品相互作用

医薬品を検索    医薬品リストをアップロード

イトリゾールカプセル50 (6290004M1029)    経口抗真菌剤    D00350    [削除](#)  
[相互作用情報](#)

アスタット軟膏1% (2655710M1034)    抗真菌剤    D01092    [削除](#)  
[相互作用情報](#)

クレステール錠5mg (2189017F2029)    HMG-CoA還元酵素阻害剤    D01915    [削除](#)  
[相互作用情報](#)

カルブロック錠16mg (2149043F2026)    持続性Ca拮抗剤    D01145    [削除](#)  
[相互作用情報](#)

[医薬品の組合せを確認](#)

[医薬品リストをダウンロード](#)

## KEGG MEDICUS 医薬品相互作用

併用禁忌のみ表示

イトリゾールカプセル50 (D00350)	カルブロック錠16mg (D01145) クレステール錠5mg (D01915)	併用禁忌 併用注意	CYP3A4	記載添付文書(10) 記載添付文書(2)
-----------------------	---	--------------	--------	-------------------------

カルブロック錠16mg (D01145)	イトリゾールカプセル50 (D00350)	併用禁忌	CYP3A4	記載添付文書(10)
----------------------	-----------------------	------	--------	------------

クレステール錠5mg (D01915)	イトリゾールカプセル50 (D00350)	併用注意		記載添付文書(2)
---------------------	-----------------------	------	--	-----------

アスタット軟膏1% (D01092)

相互作用のある医薬品の組み合わせは登録されていません。

- 個人が使用している医薬品リストの中に併用禁忌や併用注意となる組合せがあるかチェック
- お薬手帳の医薬品リスト、またはウェブインターフェースから入力した医薬品リストに対応
- 根拠となる情報が記載された添付文書へのリンクを提供

# KEGG MEDICUS API

## KEGG の REST API

```
http://rest.kegg.jp/<operation>/<argument>/<argument2 or option>  
  <operation> = info | list | find | get | conv | link  
  <argument> = <database> | <dbentries>
```

- KEGG の REST API に機能追加
- KEGG の ID に加えて薬効分類番号、ATCコード、YJコード、NDC (National Drug Code) を利用

### 医薬品名のリスト表示

/list/drug\_ja

/list/yj

/list/yj:6290004M1029+yj:2189017F2029+yj:2149043F2026

### リンク情報抽出

/link/drug/jtc:1319

/link/yj/dr:D00222

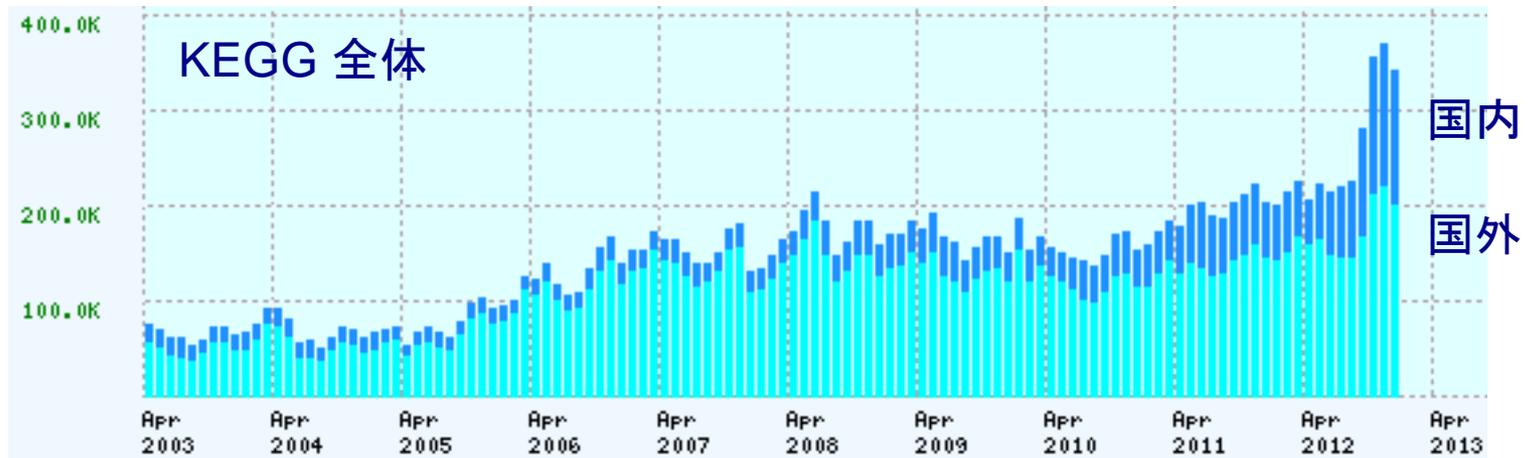
### 相互作用チェック

/ddi/dr:D00222

/ddi/yj:6290004M1029+yj:2189017F2029+yj:2149043F2026

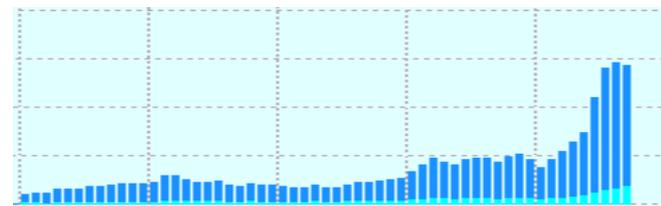
# KEGG MEDICUS アクセス統計 (1)

表示するレポート	2012年 12月				
最初の訪問	2012年 12月 01日 - 00:00				
最後の訪問	2012年 12月 31日 - 23:59				
	一意な訪問者数	訪問回数	ページ	ヒット	バイト
可視トラフィック *	<b>142,215</b>	<b>223,535</b> (1.57 訪問/訪問者)	<b>365,463</b> (1.63 ページ/訪問)	<b>1,013,498</b> (4.53 ヒット/訪問)	<b>10.58 Gb</b> (49.6 Kb/訪問)
不可視トラフィック *			<b>1,234,292</b>	<b>1,280,606</b>	<b>53.92 Gb</b>



月間ユニークビジター数 (IP数)

KEGG MEDICUS 15万  
 KEGG 40万  
 UniProt 20万



ゲノムネット医薬品DB KEGG MEDICUS

# KEGG MEDICUS アクセス統計 (2)

## 検索エンジンからのアクセス

	ページ	割合	ヒット	割合
2012年5月	64,629	41.4 %	64,878	16.9 %
2012年6月	83,750	53.3 %	84,043	19.8 %
2012年7月	101,001	56.5 %	101,342	20.8 %
2012年8月	117,802	42.6 %	118,122	18.5 %
2012年9月	178,121	64.9 %	178,482	23.7 %
2012年10月	236,086	66.3 %	236,561	23.8 %
2012年11月	239,469	64.5 %	239,965	23.3 %
2012年12月	226,063	62.6 %	226,543	22.6 %

Google

メロペン

ウェブ 画像 地図 ショッピング もっと見る

約 15,000 件 (0.19 秒)

他のキーワード: [メロペン抗生剤](#)

[医療用医薬品: メロペン](#)

[www.kegg.jp/medicus-bin/japic\\_med?japic\\_code... - キャッシュ](#)

総称名, **メロペン**. 一般名, メロペナム水和物. 欧文一般名, Meropenem Hydrate. 薬効分類名, カルバペナム系抗生物質製剤. 薬効分類番号, 6139 ... **メロペン**点滴用バイアル 0.25g, Meropen, 大日本住友製薬, 6139400D1033, 923円/瓶, 処方せん医薬品 ...

[メロペン | 大日本住友製薬](#)

[https://ds-pharma.jp/product/meropen/ - キャッシュ](https://ds-pharma.jp/product/meropen/)

大日本住友製薬の「医療情報サイト」です。大日本住友製薬の「医療情報」を掲載しています。

[各種お知らせ一覧](#) - [薬価](#) - [製品コード一覧](#) - [製剤写真](#) - [製品ロゴ](#)

Google

新ルルエース

ウェブ 画像 地図 ショッピング もっと見る 検索ツール

約 2,230 件 (0.14 秒)

他のキーワード: [第一三共](#) [新ルルa](#) [パブロン錠](#) [新ルルエース 50錠](#)

[一般用医薬品: 新ルルエース](#)

[www.kegg.jp/medicus-bin/japic\\_otc?japic\\_code... - キャッシュ](#)

かぜはいろいろな原因が重なり合って発病しますので、その症状も多種多様であり、かつ複雑です。かぜのときには早めに適切な治療をすることが、治りを早める上から大切です。新ルルエースは、鼻水・鼻づまり・熱・せき・痛み等かぜの諸症状の緩和に効果を ...

- 検索エンジン経由のアクセスは全体の 1/4
- 検索エンジン経由で利用されているページ数は全体の 2/3

Google

新ルルエース

ウェブ 画像 地図 ショッピング もっと見る 検索ツール

約 2,230 件 (0.14 秒)

他のキーワード: [第一三共](#) [新ルルa](#) [パブロン錠](#) [新ルルエース 50錠](#)

[一般用医薬品: 新ルルエース](#)

[www.kegg.jp/medicus-bin/japic\\_otc?japic\\_code... - キャッシュ](#)

かぜはいろいろな原因が重なり合って発病しますので、その症状も多種多様であり、かつ複雑です。かぜのときには早めに適切な治療をすることが、治りを早める上から大切です。新ルルエースは、鼻水・鼻づまり・熱・せき・痛み等かぜの諸症状の緩和に効果を ...

[新ルルエース - Yahoo!知恵袋](#)

[chiebukuro.yahoo.co.jp > タグ - キャッシュ](#)

5 件のアイテム - 「新ルルエース」 タグが付いているQ&Aの一覧ページです。かぜ薬について質問します。新ルルエースと新ルル-aは同じものですか ... 昨日から風邪気味で、風邪薬の「新ルルエース」をのんでいます。お昼 ...

# 平成25年度の計画

## 1. KEGG DISEASE

- 最近の論文から単一遺伝子疾患・多因子性疾患の疾患エントリ作成
- 感染症疾患の疾患エントリ作成、病原体の病原性遺伝子も含める
- 疾患分類と疾患グループの充実

## 2. KEGG DRUG

- 副作用情報やゲノムバイオマーカー情報も含めた形で相互作用データベースを拡張
- 適応症の情報をもとに KEGG DISEASE とのリンクづけ

## 3. KEGG MEDICUS 医薬品情報

- 医薬品分類を考慮した薬物間相互作用検索インターフェースの改良
- 検査値・ゲノムバイオマーカー等との関連を調べるインターフェース開発

### 1. KEGG MEDICUS 疾患情報

- 標準病名と KEGG DISEASE の対応づけ

### 1. 統合インターフェース

- 疾患情報と医薬品情報を統合としたインターフェース開発
- 上記医薬品相互作用データベースを利用した KEGG お薬手帳の継続開発
- KEGG MEDICUS API の継続開発

## 参考資料：保有しているデータベース

データベース	内容	データ数		備考	
KEGG DISEASE	疾患情報		1,301	独自開発	公開中
KEGG DRUG	医薬品情報		9,821	独自開発	公開中
JAPIC	日本の医薬品添付文書	医療用	12,667	ライセンス契約	公開中
		一般用	11,758		
DailyMed	米国の医薬品添付文書	医療用	18,409	利用許諾	公開中
		一般用	19,905		
MEDIS	標準病名			利用許諾	公開中
COSMIC	がん細胞の遺伝子変異			公共データ	一部公開中
TCGA	がんゲノムアトラス			公共データ	検討中

### 公開 URL

Web 日本語版 <http://www.kegg.jp/kegg/medicus/>

Web 英語版 <http://www.kegg.jp/kegg/medicus.html>

FTP <ftp://ftp.genome.jp/pub/kegg/medicus/>