

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(統合データ解析トライアル)
研究開発課題
「配合生薬の横断検索のためのソフトウェアツールの開発」

研究開発終了報告書

研究開発期間：平成27年5月15日～平成28年3月31日

研究代表者：桂樹 哲雄
(豊橋技術科学大学 大学院工学研究科 助教)



§ 1 研究開発の概要

世界的に伝統的配合生薬を医療の一部として利用しようという機運が高まってきているが、それらの生薬情報は一部を除き文献ベースである。そこで、今後見込まれるデータベース開発に先立ち、本研究では、配合生薬と効能の情報を横断的に検索するための Android スマートフォン向けアプリケーション “Herbal Medicine Systems” と、そのデータ基盤を開発した。ユーザは、アプリケーション内に格納された配合生薬（現状では日本の漢方およびインドネシアのジャムウ）のデータに基づき、これらの配合生薬の処方と効能を、ネットワークから隔離されたオフライン環境でデータベースを横断して検索することができる。データをプラグインとして導入することで、現存する配合生薬に関するデータベースからの情報のみならず、今後の開発が期待される他の様々な国の配合生薬に関するデータベースからの情報を追加検索できるように設計した。

§ 2 研究開発のねらい

本研究では、様々な伝統的配合生薬の処方と効能を横断的に検索できるアプリケーション、およびそのデータ基盤を開発する。対象とするユーザとしては、健康維持に興味のある一般人、新しい治療に役立てたい医師、新薬の開発の参考として伝統生薬の知見を利用したい製薬会社の開発者など、幅広い層を想定している。本アプリケーション公開時には、NBDC で統合化された漢方 (KNApSACk KAMPO) とジャムウ (KNApSACk JAMU) のデータを検索対象として組み込んで提供する。また、ユーザがデータを自由に追加・削除できるように、プラグイン形式によるデータ追加・削除の仕組みを導入する。これにより、今後デジタルデータ化が見込まれる様々な種類の配合生薬データについて、プラグイン形式で提供することで追加することができる。以上により、ユーザは様々な伝統的配合生薬による治療の知見を横断的に検索し、それらに基づいた健康維持や疾病治療に役立つ情報を得ることができるようになる。具体的には、一般ユーザは、本アプリケーションを用いて、医療機関で提供される情報を補強することが期待できる。医師ユーザは、他の国で使われている配合生薬による治療方法を検索することで、普段慣れ親しんだ医療以外の治療方法を発見する機会を得られる。創薬会社の開発者のユーザは、新薬開発のヒントとして、様々な伝統生薬の知見を検索することができる。以上から、NBDC にこれまでに蓄積されてきた配合生薬に関するデータベースの利用を促進すること、また、未だ文献ベースのものが多く配合生薬の情報のデジタル化を進める動機付けとなることを期待する。

§ 3 研究開発計画

(1) 当初の研究開発計画

2014 年度の奈良先端科学技術大学院大学の学内研究プロジェクトにおいて、ジャムウおよび漢方の処方データを統合・追加・整理し、さらに生薬の効能データベースと相互参照することで、これらの処方と効能を横断的に検索できるスマートフォン向けのアプリケーションおよび Web アプリケーションである HerbsMed を開発した。これによりジャムウと漢方の処方および効能を横断的に検索できるプラットフォームが整っていた。

一方、現在の HerbsMed の検索では、プログラム開発者の用意したサーバにあらかじめデータを登録しておき、それらを横断的に検索する方法をとるため、サーバに登録されていないデータについては横断検索に含めることができない。ジャムウと漢方以外の伝統的配合生薬の処方については、未だにほとんどが文献ベースであり、今後のさらなるデータベースの開発が見込まれている。また、製薬会社などでは、配合生薬について独自のデータベースを構築していることが考えられる。これらのデータベースを横断検索の対象に含めることは有用であると考えられるが、データベースが開発されるたびにそれらを開発者がサーバに登録して検索の対象とするという HerbsMed で採用した方法は、開発者にとっての負担が大きく、また、特に製薬会社のデータは、その会社の生命線であるために、外部のサーバに登録することに抵抗があると考えられる。そのため、これらの新たなデータベースをユーザが独自に横断検索に含められるような柔軟な検索システムを開発することは、大変重要であると考えられる。そこで、本研究では、ユーザが検索対象データを自由に追加・削除できるような、配合生薬の処方・効能を横断検索するためのスマートフォン向けアプリ

ーションの開発を行う。

アプリケーションの開発ベースとして、HerbsMed を用いる。ただし、設計を全面的に見直し、HerbsMed で用いたクライアント・サーバモデルは採用せず、アプリケーション本体とデータを分離し、ユーザがプラグイン形式で自由にデータを追加・削除できるプラグインモデルによる仕組みを実装する(図1)。開発環境として、Android Studio, SQLiteStudio を用い、開発言語は Java 言語とする。

まず、今後様々な配合生薬のデータベースを追加することを想定し、データの形式の設計を慎重に検討する必要がある。たとえば、ジャムウの処方箋は1種の配合薬に対して1種あるのが通常であるが、漢方薬の処方箋については、1種の配合薬に対して複数種存在する。このような問題に対処するため、データの性質について文献等を調査する。次に、データ追加・削除プラグインの仕組みとユーザインターフェースについて検討し、実装する。特に、複数のデータベースから参照されているデータを追加・削除する場合の方法について、慎重に検討する必要がある。また、スマートフォン上で使えるメモリやストレージ等のハードウェアリソースは限られているため、プラグインモデルでデータ追加を行うことに伴い、データを複数追加した際のデバイス上のデータサイズが問題となると予測される。そこで、必要に応じてメモリの効率的な扱いやデータサイズの圧縮などの仕組みを検討する。

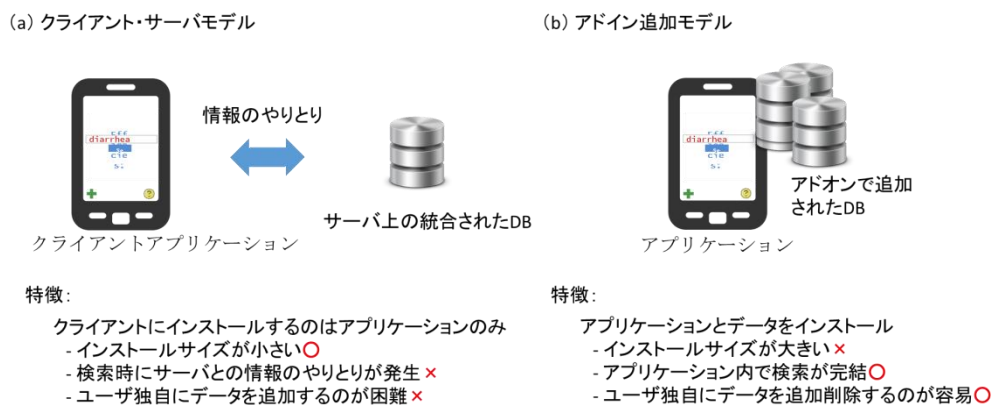


図1 (a)サーバ・クライアントモデルと、(b)プラグイン追加モデルの特徴

(2) 新たに追加・修正など変更した研究開発計画

研究期間中に、別プロジェクトにおいて、ジャムウの効能に関する予測[1]の結果が得られた。これと、分類の結果[2]を組み合わせ、ジャムウの効能に関する分類・予測結果を表示する機能を、本研究で開発したアプリケーションに追加した。

[1] Tanaka et al., Prediction of JAMU efficacy based on its ingredients using Naive Bayes and Randomforest. The Third International Symposium on Temulawak and Potential Plants for Jamu, Indonesia, Bogor, Sep. 2nd, 2015.

[2] Wijaya, S. H.; Husnawati, H.; Afendi, F. M.; Batubara, I.; Darusman, L. K.; Altaf-Ul-Amin, M.; Sato, T.; Ono, N.; Sugiura, T.; Kanaya, S. Supervised Clustering Based on DPCLUS0: Prediction of Plant-Disease Relations Using Jamu Formulas of KNApSack Database. *Biomed Res. Int.* **2014**, 2014, 831751.

§ 4 研究開発成果

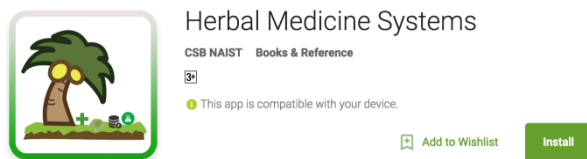


図2 本研究で開発した Android スマートフォン向け配合生薬検索アプリケーション “Herbal Medicine Systems” の Google Play Store 上の公開ページ (<https://play.google.com/store/apps/details?id=net.sonyhartono.crudedrugsystems>)

配合生薬の処方・効能について横断検索が可能な Android スマートフォン向けアプリケーション “Herbal Medicine Systems”を開発し、Google Play Store 上に無償公開した(図2)。ユーザは、アプリケーション内に組み込んだ複数の配合生薬情報データベースに基づいて、配合生薬に関する横断検索を行うことができる(図3)。本アプリケーションの主な機能として、配合生薬の処方をその名前、効能から検索する、配合生薬をその名前と効能から検索する、処方を比較する、データベースを管理するという機能が実装されている。検索対象として NBDC により統合化され公開されている漢方とジャムウのデータがあらかじめ組み込まれているため、ユーザはすぐにこれらの機能を試すことができる。検索対象データはプラグイン形式で追加・編集が可能なように設計されているため、ユーザは決められたフォーマットに沿ったデータを用意することで、独自のデータの追加や修正等を行うことができる。本アプリケーションの最大の特徴は、この点にある。企業内のデータ、あるいは現在デジタル化されていないようなデータについても、決められたフォーマットにデータを成形し、追加することで、本アプリケーションの横断検索の対象に含めることができる。これによって、製薬会社での創薬開発時の新規化合物発見等への利用が期待できる他、将来配合生薬のデジタルデータが充実した際には、一般の人がこのアプリケーションを用いて横断検索を行うことで、世界各地で発達してきた配合生薬による別の治療法を知るきっかけとなることも期待できる。

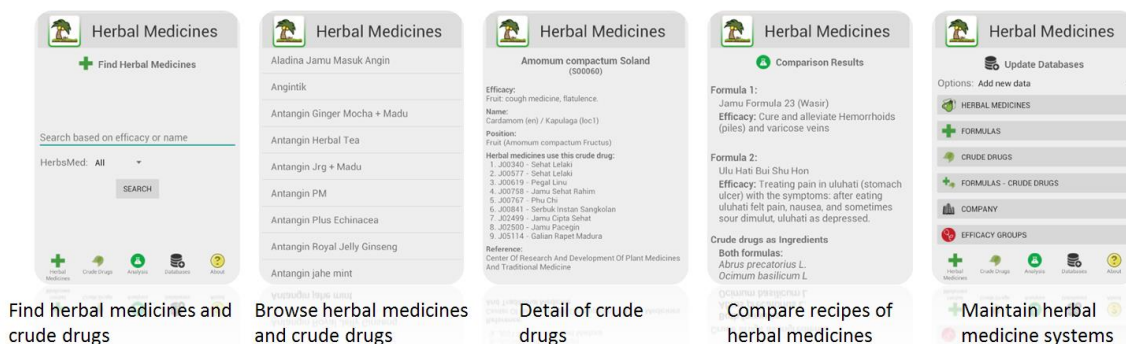


図3 “Herbal Medicine Systems” の画面

§ 5 研究開発計画に対する達成状況と将来展望

(1) 達成状況

本研究で開発を予定していた機能は全て実装が完了した。ただし、データの追加・修正に関する機能については、まだ一括処理に関連した部分で容易に操作できるまでには手順が洗練されておらず、改善の余地が残った。当初の研究計画になかったものとして、新たにジャムウの効能に関する分類・予測結果を表示する機能を追加した。

(2) ツール等の将来展望

本研究で開発したアプリケーションは、対応する配合生薬データが充実してこそ、真価を発揮する。そのためには、世界各地に紙媒体の文献ベースで存在する信頼に値する配合生薬情報を早

期にデジタル化することが必要であると考え。また、それに先駆けて、本アプリケーションに使用するためのデータベースを共有できるような仕組みを構築すれば、データベースのデジタル化を促進する良い刺激となるだろう。

本研究では、一般の人が使いやすいアプリケーションを開発することを目的とし、スマートフォン向けのアプリケーションを開発した。しかしながら、データ解析については、スマートフォンの性能、リソース、UI 等の制限により、依然としてコンピュータを用いるのが主流である。本アプリケーションで得られるような横断検索の結果をコンピュータに取り込むことができれば、配合生薬に関して横断的に比較検討するような大規模な解析が可能となる。そこで、本アプリケーションに、ファイル出力等の外部連携機能を追加することが有用であると考え。あるいは、本研究で開発したデータベース構造と共通の構造を持つデータベースに対して検索を行えるコンピュータ向けのデスクトップツールを開発する方法も有用であると考え。

§ 6 研究参加者

氏名	所属	役職	研究開発項目	参加時期
○桂樹 哲雄	豊橋技術科学大学大学院	助教	開発全般、統括	H27.5-H28.3
Sony Hartono Wijaya	奈良先端科学技術大学院	博士後期課程学生	プログラム開発	H27.5-H28.3

§ 7 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 0 件、国際(欧文)誌 0 件)

該当なし

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

該当なし

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 0 件、国際会議 0 件)

② 口頭発表 (国内会議 0 件、国際会議 1 件)

1. Tetsuo Katsuragi (Toyohashi University of Technology)、A mobile application for cross-search of various herbal medicines、The Third International Symposium on Temulawak and Potential Plants for Jamu、Bogor, Indonesia, Sep. 3rd. 2015

③ ポスター発表 (国内会議 0 件、国際会議 0 件)

(4)知財出願

該当なし

(5)受賞・報道等

該当なし

§ 8 自己評価

研究開発の狙い通りにデータの追加・修正が行えるようなデータベース構造、スマートフォン向けアプリケーションを構築できたことは高い評価に値すると考える。しかしながら、データベース構造の設計に時間がかかりすぎたため、データの追加を行うインターフェースと手順について、当初予定していたようなわかりやすいものを実装することができなかった点が残念である。

以上