

平成27年度
統合化推進プログラム(統合データ解析トライアル)
キックオフミーティング

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

桂樹哲雄

豊橋技術科学大学大学院

工学研究科 情報・智能工学系 助教



配合生薬とは

- 未精製の薬物を複数組み合わせさせた薬
- 世界各国で独自に処方体系が発達
- 通常、個人の体質や病態を重視して処方される
- 創薬の際のリード化合物としても参照される



図： 漢薬に使われる生薬(Wikimediaより)

世界各地の伝統的配合生薬体系

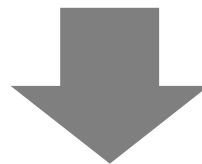
- 薬用植物は40,000から70,000種存在する
(Verpoorte *et al.* 2006)
- 薬用植物から得た生薬を配合する配合生薬システムが世界各地に独自に発達してきた
- これらを医療・健康維持に役立てようという機運が高まっている(Heinrich, 2010)



図: 世界各地の配合生薬
地図データはwikimediaより

配合生薬の情報をどう役立てる？

- 創薬に生かす
 - 創薬にはスクリーニング、テストに膨大な時間とコストがかかる。伝統的配合生薬は、長年にわたり、その効能や副作用がテストされてきた
 - 伝統的配合生薬の効能に関するマルチオミックス解析を行なう
- ポストゲノム時代の治療に生かす
 - 伝統的配合生薬の個人の体質や病態に合わせた治療と、個人遺伝子の発現パターンに基づく現代医療は相性がいい



配合生薬の情報を検索できるシステムの開発が望まれてきた

配合生薬情報のデジタル化の現状

- 配合生薬の処方体系のデジタル化は進んでいない
 - 口伝や世襲によるものが多い
 - または文献ベース
 - デジタル化された配合生薬体系の例
 - KNApSack Jamu DB (奈良先端大, Afendi et al. 2012)
 - インドネシア・ジャムウ(5310種のジャムウの配合処方)
 - KNApSack Kampo DB (奈良先端大, Afendi et al. 2012)
 - 日本・漢方(1,581種の漢方の配合処方)
 - ETHMEDmmm (富山大, 小松 2007)
 - 和漢薬(4800点)
 - ユナニ生薬(575点)
 - タイ生薬(668点)
 - インドネシア生薬、アーユルヴェーダ生薬(非公開)
- データベース開発はまだこれから。
今後さらなるデータベース開発が見込まれる



先行研究

- 横断検索アプリケーションHerbsMedを開発した
 - Android スマートフォン向けアプリケーション
 - データベースを外部に持ち、軽量
 - 検索対象
 - インドネシアのジャムウ (KNApSAcK Jamu DB)
 - 日本の漢方 (KNApSAcK Kampo DB)
 - Google Playで公開中



図 : HerbsMedの検索画面

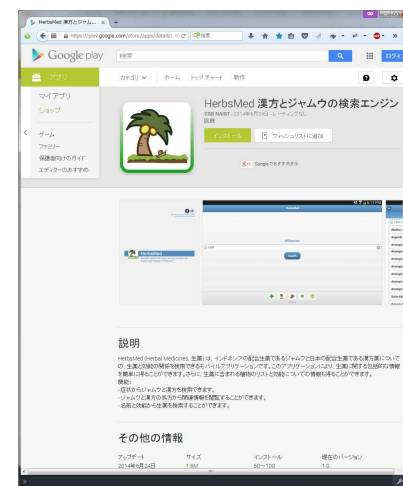


図 : HerbsMedのページ(Google Play)

HerbsMedの利点・欠点

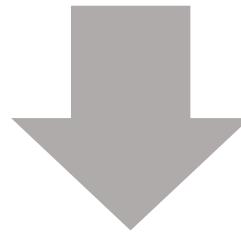
- 利点：
 - データがアプリケーションから分離されているので、インストールサイズが小さい
- 欠点：
 - ユーザによるデータの追加・削除が困難
 - 今後開発されるデータベースに対応するためには、サーバ側のデータを追加する必要がある
 - ユーザが独自のデータセットを追加できない
 - (製薬会社などが独自のデータを持っている場合など)
 - オフラインで使用できない
 - ネットワーク環境がよくない地域では使えない

目的

- 複数の配合生薬を横断検索できるモバイルアプリケーションを開発し、配合生薬データベースの利用促進を目指す
- 配合生薬を使った治療と開発を盛り上げる

開発するアプリケーションの特徴

- スマートフォン向けモバイルアプリケーション
- 様々な配合生薬体系について横断検索ができる
- データセットを追加・削除できる
- オフラインで使うことができる



創薬、あるいは治療に役立つスマートフォン向けアプリケーション

開発方法

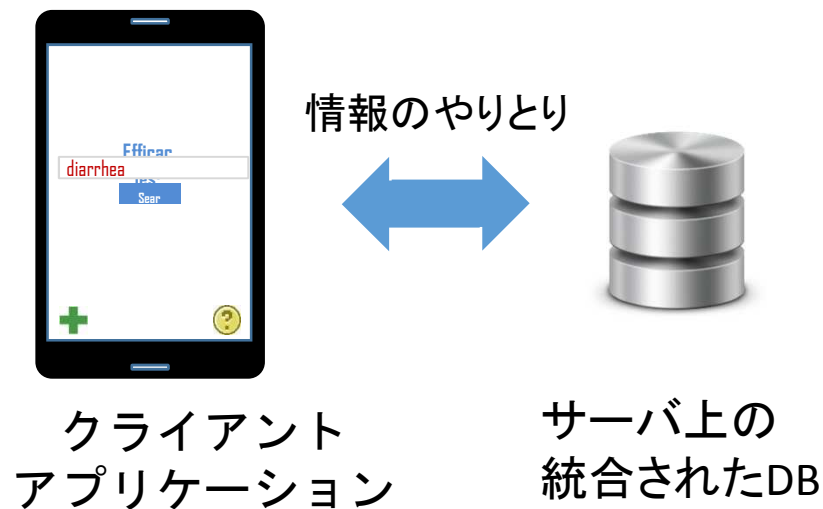
- HerbsMedをベースとして開発
 - これまでの開発資産を活用
- ベースライブラリとしてphonegap (phonegap.com)を採用
- 開発言語はJava言語
- アンドロイド・スマートフォンアプリケーション
- ドキュメントを整備した上でGoogle Playストアに無償公開

対象データベース

- 現在NBDCで公開済みのデータベース
 - ジャムウ配合データ
 - KNApSAcK JAMU (IndonesianHerb)
 - 5310種のジャムウの配合処方
 - 漢方処方データ
 - KNApSAcK KAMPO
 - 1,581種の漢方の配合処方
- 今後開発されると期待される配合生薬のデータベース
 - アーユルベータ、ユナニ、伝統中国医薬の配合データ

プラグインモデルによるデータの追加

(a) クライアント・サーバモデル
(HerbsMedで採用)



特徴:

- インストールするのはアプリケーションのみ
- インストールサイズが小さい○
- 検索時にサーバとの情報のやりとりが発生×
- ユーザ独自にデータを追加削除できない×

(b) プラグイン追加モデル
本研究で採用



特徴:

- アプリケーションとデータをインストール
- インストールサイズが大きい×
- アプリケーション内で検索が完結○
- ユーザ独自にデータを追加削除できる○

データ構造の検討

- 様々な配合生薬に対応できるように工夫
 - たとえば以下の課題がある
 - ジャムウは生薬と処方への対応は1:1だが、漢方は1:多
 - 漢方にはJIS, UNICODE規格外の文字が多数含まれる
 - アーユルベーダの生薬には複数言語の名前が付いている
 - 英語名を併記する
- データの削除がしやすいように工夫
 - 生薬に付随して追加される植物種の情報など、他のデータセットからも参照されるデータの削除方法の検討が必要

成果物の概要

- 配合生薬の横断検索できるモバイルアプリケーション
 - ユーザがプラグインによって自由にデータの追加・削除ができる
 - 検索に使用するデータセットを選択できる
 - 横断検索ができる
 - 効能名→効能を持つ配合生薬のリスト
 - 生薬名→データベース内にその生薬が含まれるデータベース名
 - 生薬名→含まれる配合生薬の処方→それに含まれる化学物質→どの生物種に含まれているか
- 対応するデータベースプラグイン
 - NBDCで公開されている漢方とジャムウのデータベース (KNApSAcK KAMPOおよびKNApSAcK JAMU)のデータをプラグイン形式で提供する

期待される成果

- 既存の生薬データベースの利用促進
- 新規生薬データベースの開発促進
- 配合生薬を用いた治療が盛り上がる

まとめ

- 世界各国で発達してきた伝統的配合生薬の横断検索をできるモバイルアプリケーションを開発
- 今後のデータベース開発に先立ってアプリケーションを公開
- 初期にはジャムウと漢方のデータベースを提供
- アプリケーションにより、登録されたデータベースに含まれる生薬と、効能を横断的に検索できるようになる
- データベース利用が促進されると期待される