

21 薬物動態データベースDruMAPのRDF化

トーゴーの日シンポジウム2020

○樋口千洋1)、長尾知生子2,4)、川島和1)、渡邊怜子1)、江崎剛史1,5)、深川明子1)、櫛田達矢3)、畠中秀樹3)、水口賢司1,2,4)

1) 国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所AI 健康・医薬研究センターバイオインフォマティクスプロジェクト

2) 国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所創薬デザイン研究センターインシリコ創薬支援プロジェクト

3) 国立研究開発法人 科学技術振興機構 バイオサイエンスデータベースセンター

4) 国立大学法人 大阪大学 蛋白質研究所

5) 国立大学法人 滋賀大学 データサイエンス学部



緒言

我々はAMEDの創薬支援推進事業「創薬支援インフォマティクスシステム構築」の一環として「薬物動態基礎データベースと薬物動態予測モデルの構築」を行った。創薬の成功確率向上を図り正確な薬物動態予測システムの構築を目指し公共データベースから薬物動態に関わる情報を抽出し、いくつかの化合物については統一された条件の下で実験によって薬物動態データを再取得し、これらデータを用いて様々な薬物動態パラメータの予測モデルを構築した。本年4月薬物動態予測システムDruMAPを正式公開した。

我々はさらに、NBDC RDF portalで公開されている様々な生命情報データとの統合により、より高度な解析を期待し本データベースのRDF化とNBDC RDF portalへの収載を進めている。

DruMAP (https://drumap.nibiohn.go.jp)

The screenshot shows the DruMAP homepage on the left and an activity search results page on the right. The homepage includes a search bar, a description of DruMAP ver.1.1, and a table of chemical records. The activity search results page shows a table with columns: DruMAP ID, Compound name, Japanese name, Assay type, Organism, Tissue, Molecule, and Result. The table lists various compounds and their predicted parameters.

DruMAP ID	Compound name	Japanese name	Assay type	Organism	Tissue	Molecule	Result
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	whole body		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	plasma		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	kidney		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	Caco-2 cell		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	kidney		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	LLC-GAS-COL150 cell	P-gp	
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	none	CYP2D6	
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	none	CYP3A4	
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	kidney		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	none	none		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	liver microsome		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	none	CYP1A2	
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	rat	plasma		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	none	CYP2C9	
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	plasma		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	human	LLC-GAS-COL150 cell		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	rat	plasma		
03000000100-00	Cyanamide	シアナミド	prediction	mammal	brain		
03000000200-00	Hydroxyurea	ヒドロキシカルバミド	prediction	rat	plasma		
03000000200-00	Hydroxyurea	ヒドロキシカルバミド	prediction	mammal	brain		
03000000200-00	Hydroxyurea	ヒドロキシカルバミド	prediction	human	none	CYP1A2	
03000000200-00	Hydroxyurea	ヒドロキシカルバミド	prediction	human	none	CYP2C9	
03000000200-00	Hydroxyurea	ヒドロキシカルバミド	in vivo	human	kidney		
03000000200-00	Hydroxyurea	ヒドロキシカルバミド	in vivo	human	whole body		
03000000200-00	Hydroxyurea	ヒドロキシカルバミド	in vivo	human	kidney		

RDF化の進捗

DruMAP正式公開データからのRDF作成

適切なURIの策定

Apache Fusekiへの登録と検証

現在11,063,643トリプル

今後の作業

より適切なURIの決定

RDF config (ポスター4)対応

公開ライセンスの策定

NBDC RDF portalへの収載

統合解析による応用研究

Licensed under a Creative Commons 表示4.0国際ライセンス

©2020 国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所

