

## 研究開発課題別事後評価結果

### 1. 研究開発課題名

ゲノム情報に基づく疾患・医薬品・環境物質データの統合

### 2. 代表研究者名

京都大学化学研究所 特任教授 金久 實

### 3. 研究実施概要

本課題では、ゲノム関連研究の成果を社会に還元する形態として、研究者コミュニティには医療・創薬・環境保全等で研究成果の実用化を支援するためのリソースとして、一般の人々には病気や薬に対する科学的理解を深めるために、「KEGG MEDICUS」統合データベースを開発した。

#### 1) 「KEGG DISEASE」の開発

病因遺伝子が既知の単一遺伝子疾患と多因子性疾患、および病原体の全ゲノム配列が既知の感染症疾患を蓄積しているデータベース「KEGG DISEASE」に対し、「Online Mendelian Inheritance in Man (OMIM)」にある単一遺伝子疾患及び多因子性疾患についての情報登録および、文献調査をもとに情報登録を行っている。感染症疾患については全配列が決定された病原体ゲノムとの対応で情報の登録を行った。

#### 2) 「KEGG DRUG」の開発

日本、米国、欧州で使われている医薬品の有効成分の化学構造をベースに（混合物の場合は成分をベースに）集積・管理、さらに、付加情報としてパスウェイ上の標的分子、薬物代謝酵素やトランスポーター、ゲノムバイオマーカー、薬物間相互作用などの分子ネットワーク情報、薬効その他の医薬品分類情報などユニークな情報を蓄積している「KEGG DRUG」に対し、付加情報を充実させるとともに、とくに相互作用データと添加物データの部分を新規に開発した。また、医療用医薬品添付文書に記載されている併用禁忌・併用注意に該当する医薬品間相互作用、および各商品に含まれる添加物を網羅的に抽出し、用語の表記を統一するための辞書の開発を行った。

#### 3) 「KEGG MEDICUS」医薬品情報の開発

JAPIC 添付文書と「KEGG DRUG」の対応づけ、個々の有効成分及び添加物と「KEGG DRUG」/「COMPOUND/ENVIRON」との対応づけ、「DailyMed」添付文書と「KEGG DRUG」の対応づけ、個々の有効成分と「KEGG DRUG」との対応づけなどのための編集システムを開発し、維持・更新体制を確立した。さらに、その利用目的に応じ、3種類のインター

フェースを開発した。

#### 4) 「KEGG MEDICUS」 疾患情報の開発

診断された病名から現時点で既知の分子メカニズムを調べるといったことができるように、医療情報開発センター (MEDIS) が提供する 国際疾病分類第 10 版の ICD10 対応標準病名マスターを通して「KEGG DISEASE」との対応づけを行った。標準病名と患者の知る病名とは必ずしも一致しないこと等の問題は残ったが、今後の改良を予定している。

#### 5) 統合インターフェースの開発

研究者向けのインターフェースとして、「KEGG MEDICUS」英語版において「KEGG PATHWAY」、「KEGG DISEASE」、「KEGG DRUG」、米国の医療用及び一般用医薬品添付文書を一括検索できるインターフェースを開発した。また、一般社会向けの利用者インターフェースとして、「KEGG MEDICUS」の科学的知識に基づく情報を利用していること、併用禁忌の組合せだけでなく、過去に副作用があった医薬品や注意すべき添加物などのチェック機能をもつ「KEGG お薬手帳」を開発した。さらに、「KEGG MEDICUS」のリソースを他のシステムやプログラム経由で利用できるように API の開発を行った。

### 4. 事後評価結果

#### 4-1. 当初計画の達成度

本課題は、1) 「KEGG DISEASE」の開発、2) 「KEGG DRUG」の開発、3) 「KEGG MEDICUS」医薬品情報の開発、4) 「KEGG MEDICUS」疾患情報の開発、5) 統合インターフェースの開発という当初の研究計画を達成した。さらに、米国の医薬品添付文書、「KEGG お薬手帳」、添加物検索など当初計画にはなかった追加の開発も行った。医療・創薬・環境保全等に関する研究成果の統合化が進み、データの RDF 化も実施した。NBDC の生命科学系アーカイブサービスへの預け入れと公開も実現しており、統合化は進んだといえる。

#### 4-2. 研究開発成果の公開および利用の状況等

開発した「KEGG MEDICUS」統合データベースや「KEGG お薬手帳」が公開されている。「KEGG MEDICUS」への月間ユニーク IP アクセス数は 20 万件程度と大変多く、多数の利用者に活用されている。

#### 4-3. 研究開発成果によるライフサイエンス分野のデータ活用への波及効果

医薬品間の相互作用の検索機能を利用することにより、研究者だけでなく、薬剤師や一般利用者にも利用されやすいツールとなっている。今後、更なる基盤の拡充により、個人の

健康づくりから個別化医療や創薬等バイオメディカルな分野まで広域的な貢献が期待できる。

#### 4-4. 広報・アウトリーチ活動等

論文発表や国内外の学会発表を通じて、積極的に研究成果を周知するとともに、展示会にて成果データベースやツールのデモも実施しており評価できる。

### 5. 総合評価

本課題では、これまでの KEGG の実績を基盤として広範な利用者を意識したデータベース統合が進められた。研究成果データベースを研究者、医療従事者、一般社会人のいずれにも利用可能な環境が整備されており、ライフサイエンス分野に限らず、社会還元性の強いユニークなデータベースとしての存在意義が認められる。今後も、新しい診断法や治療法の開発に利用されるほか、一般市民の貴重な情報源として活用され続けることが想定され、安定としたデータベースの公開と対象データの拡充が期待される。一方、お薬手帳に関しては、対象とする利用者が異なることもあり、他のライフサイエンス系データベースとの連携・統合という観点では、十分とは言えない部分もある。