

平成23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バイオインフォマティクスセンター

金久 實

背景と目的

ヒトゲノム計画を契機としたハイ
スループット実験技術の進歩



多数の生物種ゲノム、個人ゲノム、
メタゲノム等、大量データの生産



様々なデータベースの整備



医療・創薬・環境
保全などの社会的
ニーズ



ゲノム情報に基づく疾患・医薬品・
環境物質データの統合

生命科学の膨大な実験事実



分子ネットワークとして知
識集約、ゲノム情報と統合

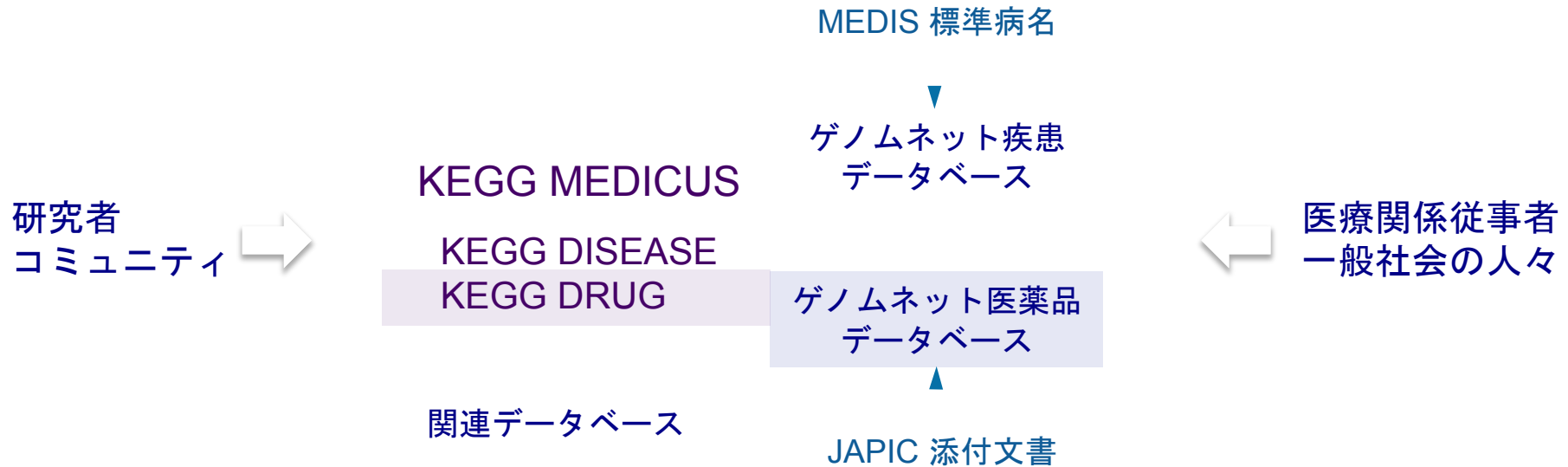


ゲノム機能解読の国際標準
データベース KEGG



- 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
- 医療関係従事者、一般社会の人々に対しては疾患・医薬品などの科学的理解を深めるリソース

研究開発構想



JAPIC 添付文書と KEGG DRUG を統合したゲノムネット医薬品データベースを出発点

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. MEDIS 標準病名と KEGG DISEASE を統合したゲノムネット疾患データベースを新規開発
3. JAPIC 添付文書と KEGG DRUG を統合したゲノムネット医薬品データベースを継続発展
4. KEGG DRUG では薬物間相互作用と副作用のデータを蓄積
5. 大量データの生物学的意味解釈を支援するツール KEGG Mapper を拡充
6. 様々な関連データベースを統合した KEGG MEDICUS インターフェースを開発

KEGG MEDICUS における疾患・医薬品の知識集約

「分子ネットワークのゆらぎ状態」としての疾患
「分子ネットワークへのゆらぎ物質」としての医薬品・環境物質

診断マーカー

ゲノムのゆらぎ

(先天的・後天的な変異等)

環境のゆらぎ

(病原菌,体内細菌叢を含む)

分子ネットワーク
システム

疾患
健康状態

治療薬

ゲノムバイオマーカー

ゲノム情報と疾患との関連

KEGG DISEASE

疾患エントリー (H 番号)	375
病因遺伝子	1,041
感染症ゲノム	236
メタゲノム	
疾患パスウェイマップ	48

医薬品との分子間相互作用

KEGG DRUG

医薬品エントリー (D 番号)	9,387
ターゲット	3,171
薬物代謝酵素	600
ゲノムバイオマーカー	130
薬物間相互作用	57,018

As of June 9, 2011

1. KEGG DISEASE の拡充

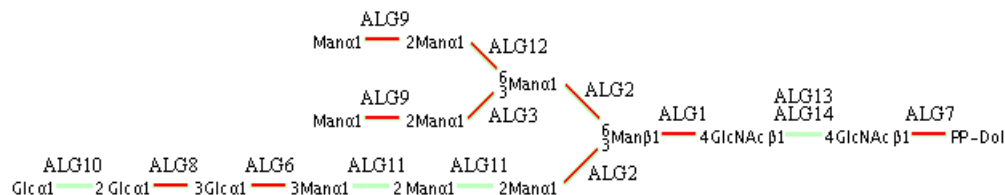
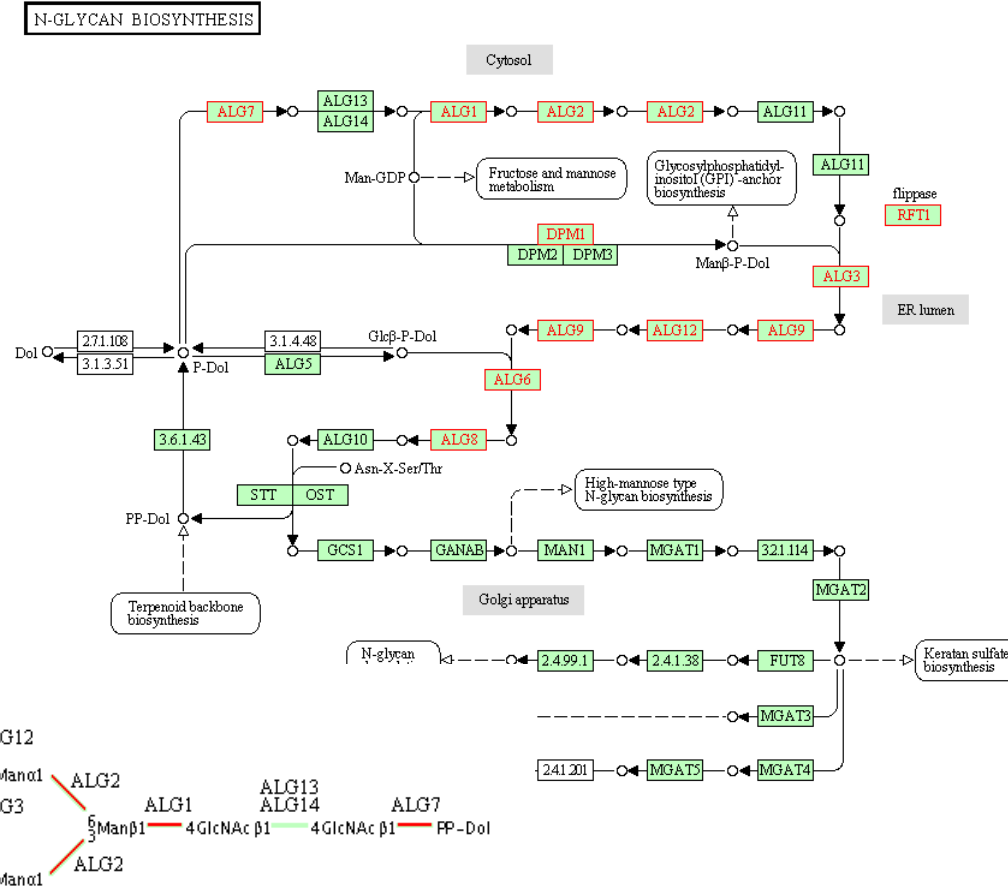
KEGG DISEASE エントリ例

単一遺伝子疾患: 先天性グリコシル化異常症I型

KEGG DISEASE: H00118	
Entry	H00118 Disease
Name	Congenital disorders of glycosylation (CDG) type I
Description	Congenital disorders of glycosylation (CDGs) are a group of autosomal recessive disorders caused by defects in various genes for N-glycan biosynthesis. CDG type I is caused by one of the enzyme genes involved in the synthesis of dolichol bound N-glycan precursor.
Category	Inherited metabolic disease
Pathway	hsa00510 N-Glycan biosynthesis hsa00051 Fructose and mannose metabolism
Gene	(CDG-Ia) PMM2; phosphomannomutase 2 [HSA:5373] (CDG-Ib) MPI; mannose phosphate isomerase [HSA:4351] (CDG-Ic) ALG6; α1-3 glucosyltransferase [HSA:29929] (CDG-Id) ALG3; α1-3 mannosyltransferase [HSA:10195] (CDG-Ie) DPM1; P-dolichol mannosyltransferase [HSA:8813] (CDG-If) MPD1; mannose-P-dolichol utilization defect 1 [HSA:9526] (CDG-Ig) ALG12; α1-6 mannosyltransferase [HSA:79087] (CDG-Ih) ALG8; α1-3 glucosyltransferase [HSA:79053] (CDG-Ii) ALG2; α1-3/6 mannosyltransferase [HSA:85365] (CDG-Ij) DPAGT1, ALG7; P-dolichol N-acetylglucosaminophosphotransferase [HSA:56052] (CDG-Ik) ALG1; β1-4 mannosyltransferase [HSA:79796] (CDG-Il) ALG9; α1-2 mannosyltransferase [HSA:79796] (CDG-Im) DOLK; dolichol kinase [HSA:22845] (CDG-In) RFT1; oligosaccharidyl-lipid flippase [HSA:91869]
Reference	PMID:16511948
Authors	Sparks SE
Title	Inherited disorders of glycosylation.
Journal	Mol Genet Metab 87:1-7 (2006)
Reference	PMID:12756558
Authors	Marquardt T, Denecke J
Title	Congenital disorders of glycosylation: review of their molecular b presentations and specific therapies.
Journal	Eur J Pediatr 162:359-79 (2003)
Reference	PMID:12905014 (CDG type Ia)
Authors	Neumann LM, von Moers A, Kunze J, Blankenstein O, Marquardt T
Title	Congenital disorder of glycosylation type Ia in a macroscopic 16-mo atypical phenotype and homozygosity of the N216I mutation.
Journal	Eur J Pediatr 162:710-3 (2003)

(参考)

OMIM エントリ数 21,395
MorbidMap レコード数 5,662
うちユニークなもの 3,964



2. ゲノムネット疾患データベースの新規開発 KEGG DISEASE と標準病名等の統合 (慢性骨髄性白血病の例)

研究者

医療従事者
一般の人々



KEGG DISEASE

分子ネットワークのゆらぎ状態としての疾患情報リソース

KEGG2 PATHWAY BRITE MODULE MEDICUS 病気 医薬品 天然物 Atlas

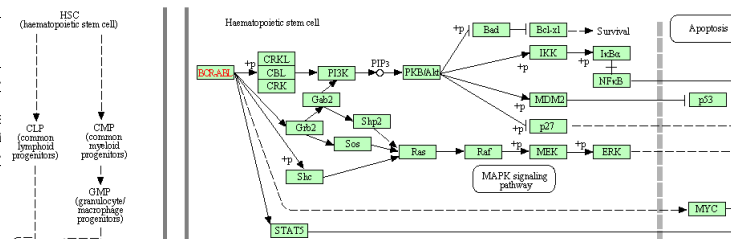
H番号、名称、概要、カテゴリを検索、パスウェイ、 病因遺伝子も検索

検索

慢性骨髄性白血病

エントリー	H00004 Disease
名称	慢性骨髄性白血病 (CML); Chronic myeloid leukemia (CML)
概要	慢性骨髄性白血病(CML)は、骨髄の多能性造血幹細胞に由来し、血液中に順に増加することを特徴としている。骨髄性および他の造血細胞系列が、クロマチンと分化に関わる。細胞レベルでは、CMLは特定の染色体異常、すなわちフィア(Ph)染色体を形成する t(9; 22) 相互転座と結びついている。Ph 染色体は c-ABL proto-oncogene と、22番染色体上のBCR (breakpoint region) の間で分子的再編が起こる結果生じる。BCR/ABL 融合遺伝子は、腫瘍増殖を促進する。210-kDaのBCR/ABLをコードするが、この新規タンパク質は正常c-ABLと異なり、恒常的なチロシンキナーゼ活性を有し、また、主として c-ABL と BCR の融合が CML の慢性期 (chronic phase) の主たると考えられている一方、急性転化(blast crisis)への進展には他の分子的要因が関与する。そのような二次的な異常には、TP53, RB, p16/INK4A の突然変異や遺伝子の過剰発現が含まれる。さらに、t(3;21)(q26;q22)のような染色体異常が、これは AML1-EVI1 を生じる。
カテゴリ	がん (BRITE hierarchy)
パスウェイ	hsa05220 慢性骨髄性白血病
病因遺伝子	BCR-ABL (translocation) [HSA:613 25] [KO:K08878 K06619] EVI1 (overexpression) [HSA:2122] [KO:K04462] AML1 (translocation) [HSA:861] [KO:K08367] p16/INK4A (mutation) [HSA:1029] [KO:K06621] p53 (mutation) [HSA:7157] [KO:K04451] RB1 (mutation) [HSA:5925] [KO:K06618]
環境要因	1,3-Butadiene [CPD:C16450] Rubber industry
診断マーカー	BCR-ABL (translocation) [HSA:613 25] WT1 [HSA:7490]
治療薬	Imatinib mesylate (Gleevec) [DR:D01441] Hydroxyurea [DR:D00341] Interferon- α [DR:]
注釈	ICD-O: 9875/3, Tumor CHRONIC MYELOID LEUKEMIA
リンク	ICD-10: C92.1
文献	PMID: 15719031 (gene), Ren R. Mechanisms of BCR-ABL. Nat Rev Cancer 5:172-182 (2005). PMID: 10403855 (gene), Faderl S, Talpaz M, et al. The biology of chronic myeloid leukemia. N Engl J Med 341:164-172 (1999).

- H 番号エントリー
- 病因遺伝子リスト
- 環境因子、マーカーなどの分子リスト
- 診断で使われる標準病名との対応づけ
- 疾患分類
- 外部データベースへのリンク



KEGG ICD10対応標準病名

[Brite menu | Download htctx]

ICD10対応標準病名 Go

- ▼ ▼ ▼ ▼ ▼ ▼ One-click mode
1. 感染症及び寄生虫症 (A00-B99)
 2. 新生物 (C00-D48)
 - ▶ C00-C14 口唇、口腔及び咽頭の悪性新生物
 - ▶ C15-C26 消化器の悪性新生物
 - ▶ C30-C39 呼吸器及び胸腔内臓器の悪性新生物
 - ▶ C40-C41 骨及び関節軟骨の悪性新生物
 - ▶ C43-C44 皮膚の黒色腫及びその他の皮膚の悪性新生物
 - ▶ C45-C49 中皮及び軟部組織の悪性新生物
 - ▶ C50 乳房の悪性新生物
 - ▶ C51-C58 女性生殖器の悪性新生物
 - ▶ C60-C63 男性生殖器の悪性新生物
 - ▶ C64-C68 腎尿路の悪性新生物
 - ▶ C69-C72 眼、脳及びその他の中枢神経系の部位の悪性新生物
 - ▶ C73-C75 甲状腺及びその他の内分泌腺の悪性新生物
 - ▶ C76-C80 部位不明確、続発部位及び部位不明の悪性新生物
 - ▼ C81-C96 リンパ組織、造血組織及び関連組織の悪性新生物
 - ▶ C81 ホジキン病
 - ▶ C82 ろ<濾>胞性 [結節性] 非ホジキンリンパ腫
 - ▶ C83 びまん性非ホジキンリンパ腫
 - ▶ C84 末梢性及び皮膚T細胞リンパ腫
 - ▶ C85 非ホジキンリンパ腫のその他及び詳細不明の型
 - ▶ C88 悪性免疫増殖性疾患
 - ▶ C90 多発性骨髄腫及び悪性形質細胞性新生物
 - ▶ C91 リンパ性白血病
 - ▼ C92 骨髄性白血病
 - ▶ C920 急性骨髄性白血病
 - ▼ C921 慢性骨髄性白血病
 - ▶ 20087837 非定型慢性骨髄性白血病
 - ▶ 20076446 慢性骨髄性白血病
 - ▶ 20085377 慢性骨髄性白血病移行期
 - ▶ 20085375 慢性骨髄性白血病急性転化
 - ▶ 20085376 慢性骨髄性白血病慢性期
 - ▶ C922 亜急性骨髄性白血病
 - ▶ C923 骨髄性肉腫
 - ▶ C924 急性前骨髄球性白血病

MEDIS標準病名を利用して新規開発

3. ゲノムネット医薬品データベースの継続開発 KEGG DRUG と JAPIC 添付文書の統合 (慢性骨髄性白血病治療薬グリベックの例)

研究者

医療従事者
一般の人々



KEGG DRUG

分子ネットワークへのゆらぎ物質としての医薬品情報リソース



ゲノムネット医薬品データベース

KEGG2 PATHWAY BRITE MODULE MEDICUS 病気 医薬品 天然物 Atlas

D番号、一般名(英名を含む)、商品名を検索、 成分も検索

ホーム 利用法 リンク

JAPIC ID、KEGG DRUG ID、商品名、一般名、欧文一般名、製剤名、YJ CODE

医療用及び 医療用のみ 一般用のみ



DRUG: D01441

グリベック

エントリ	D01441 Drug
一般名	イマチニブメシル酸塩 (JAN); Imatinib mesilate (JAN); Imatinib mesylate
商品名	グリベック (ノバルティスファーマ)
米国の商品	GLEEVEC (Novartis Pharma), GLEEVEC (Physicians Total Care)
組成式	C29H31N7O, CH4S03
質量	589.2471
構造式	 D01441 Mol file KCF file DB search Jmol KegDraw
ターゲット	Bcr-Abl tyrosine kinase inhibitor [HSA:25] [KO:K06619]; PDGFRA tyrosine kinase inhibitor [HSA:5156] [KO:K04363]; PDGFRB tyrosine kinase inhibitor [HSA:5159] [KO:K05089]; c-KIT tyrosine kinase inhibitor [HSA:3815] [KO:K05091]
パスウェイ	hsa04010 MAPK シグナル伝達経路 hsa04020 カルシウムシグナル伝達経路 hsa04060 サイトカインとサイトカインレセプターの相 hsa04640 造血細胞系譜 hsa05200 がんのパスウェイ hsa05220 慢性骨髄性白血病
代謝	Enzyme: CYP3A4 [HSA:1576], CYP3A5 [HSA:1577], CYP2I [HSA:1559] Transporter: ABCG2 [HSA:9429]
相互作用	Genomic Biomarker: c-KIT expression [HSA:3815] CYP inhibition: CYP3A4 [HSA:1576], CYP3A5 [HSA:1577] DDI search
効能	慢性骨髄性白血病治療の抗悪性腫瘍剤 (チロシンキナーゼ阻害剤)
注釈 1	薬効分類: 4291 ATCコード: L01XE01 BRITE hierarchy
構造マップ	map07045 抗腫瘍薬 - プロテインキナーゼ阻害剤
リンク	CAS: 220127-57-1 PubChem: 7848504 ChEBI: 31690 DrugBank: DB00619 LigandBox: D01441 日化辞: J1.337.144J

- 化学構造・成分に基づくD番号エントリ
- 個々の商品との対応づけ
- 標的、薬物代謝酵素などの分子ネットワーク情報
- 医薬品分類
- 外部データベースへのリンク

DB システムの変更
全文検索の改良

JAPIC 医療用医薬品添付文書

商品名	グリベック	効能効果	慢性骨髄性白血病	LinkDB
一般名	イマチニブメシル酸塩		KIT (CD117) 陽性消化管間質腫瘍	Drug (1)
欧文一般名	Imatinib Mesilate		フィラデルフィア染色体陽性急性リンパ性白血病	KEGG DRUG (1)
製剤名	イマチニブメシル酸塩錠			Literature (12)
薬効分類名	抗悪性腫瘍剤 (チロシンキナーゼ阻害剤)			PubMed (12)
薬効分類番号	4291			All databases (13)
KEGG DRUG	D01441 -類似商品一覧			
JAPIC ID	00050712 -PDF文書			

有効成分	KEGG DRUG	KEGG COMPOUND	ターゲットほか (KEGG PATHWAY, KEGG BRITE, KEGG GENES)
			(ターゲット) Bcr-Abl tyrosine kinase inhibitor [HSA:25] [KO:K06619]; PDGFRA tyrosine kinase inhibitor [HSA:5156] [KO:K04363]; PDGFRB tyrosine kinase inhibitor [HSA:5159] [KO:K05089]; c-KIT tyrosine kinase inhibitor [HSA:3815] [KO:K05091] (パスウェイ) hsa04010 MAPK シグナル伝達経路 hsa04020 カルシウムシグナル伝達経路 hsa04060 サイトカインとサイトカインレセプターの相互作用 hsa04640 造血細胞系譜 hsa05200 がんのパスウェイ hsa05220 慢性骨髄性白血病 (反応) Enzyme: CYP3A4 [HSA:1576], CYP3A5 [HSA:1577], CYP2D6 [HSA:1565], CYP2C9 [HSA:1559] Transporter: ABCG2 [HSA:9429] (相互作用) Genomic Biomarker: c-KIT expression [HSA:3815] CYP inhibition: CYP3A4 [HSA:1576], CYP3A5 [HSA:1577], CYP3A7 [HSA:1551] DDI search
イマチニブメシル酸塩 D01441			

販売和名	グリベック錠100mg
欧文商標名	Glivec Tablets 100mg
製造会社	ノバルティスファーマ
承認番号	21700AMY00089000
YJコード	429101F1028
日本標準商品分類番号	874291
薬価	2749円/錠
後発品フラグ	
JAPIC ID	00050712-001 -個別表示

使用上の注意をはじめとした医薬品添付文書情報

本文情報

▼すべて閉じる

▼警告:
本剤の投与は、緊急時に十分対応できる医療施設において、がん化学療法に十分な知識・経験を待つ医師のもとで、本療法が適切と認められた患者に投与すること。また、治療開始に先立ち、患者又はその家族に有効性及び危険性を十分に説明し、同意を得てから投与を開始すること。

▼禁忌: 次の患者には投与しないこと
本剤の成分に対し過敏症の既往歴のある患者
妊婦又は妊娠している可能性のある婦人(「6.妊婦、産婦、授乳婦等への投与」の項参照)

▼使用上の注意:
▼慎重投与: 次の患者には慎重に投与すること

4. 薬物間相互作用と副作用情報の蓄積

薬物間相互作用

JAPIC 添付文書にある
併用禁忌・併用注意

⇒ D番号 - D番号



D番号のATC分類階層 + 薬物代謝酵素

	Type
▼ A 消化管と代謝作用	
▼ A01 口腔科用製剤	
▼ A01A 口腔科用製剤	
▶ A01AA 虫菌予防薬	
▶ A01AB 局所経口治療用の抗感染薬と消毒薬	
▼ A01AC 局所経口治療用の副腎皮質ステロイド	
▶ A01AC01 トリアムシノロン	
▼ A01AC02 デキサメタゾン	
D00292 デキサメタゾン (JP15)	Enzyme: CYP3A4
D00975 デキサメタゾンリン酸エステルナトリウム (JAN); リン酸デキサ	Enzyme: CYP3A4
D01510 デキサメタゾンメタスルホ安息香酸エステルナトリウム (JAN);	unclassified
D01615 デキサメタゾンバルミチン酸エステル (JAN)	Enzyme: CYP3A4
D01632 デキサメタゾンプロピオン酸エステル (JAN)	unclassified
D01948 デキサメタゾン吉草酸エステル (JAN)	unclassified
D02174 デキサメタゾン酢酸エステル (JAN)	
D02591 デキサメタゾンアセフラート	
D02592 デキサメタゾンペロキシル	unclassified
D07073 デキサメタゾンシベシル酸エステル (JAN)	
D07796 酢酸デキサメタゾン	
D07797 デキサメタゾンイソニコチナート	
D07798 デキサメタゾンナトリウムヘミスルファート	
D07799 デキサメタゾン21-テフタート	
D07800 デキサメタゾン21-バレラート	
D07801 デキサメタゾンフェニルプロピオナート	
D07802 デキサメタゾンホスファート	
▶ A01AC03 ヒドロコルチゾン	
A01AC54 プレドニゾロン、配合	
▶ A01AD その他の局所経口治療薬	

- 赤字はグリベックとの併用注意が添付文書に記載されている医薬品
- 記載されていないものも階層分類から推定可能

副作用

重篤副作用疾患別
対応マニュアル

⇒ D番号 - 用語



ICH 国際医薬用語集
日本語版(MedDRA/J)

⇒ BRITE階層

抗がん剤による口内炎

メシル酸イマチニブ 口内炎 2件

基本語：口内炎

下層語：偽膜性口内炎

口蓋刺激感

.....

- 人手による知識集約作業
- 階層分類を利用した補完・推定

5. KEGG Mapper の拡充

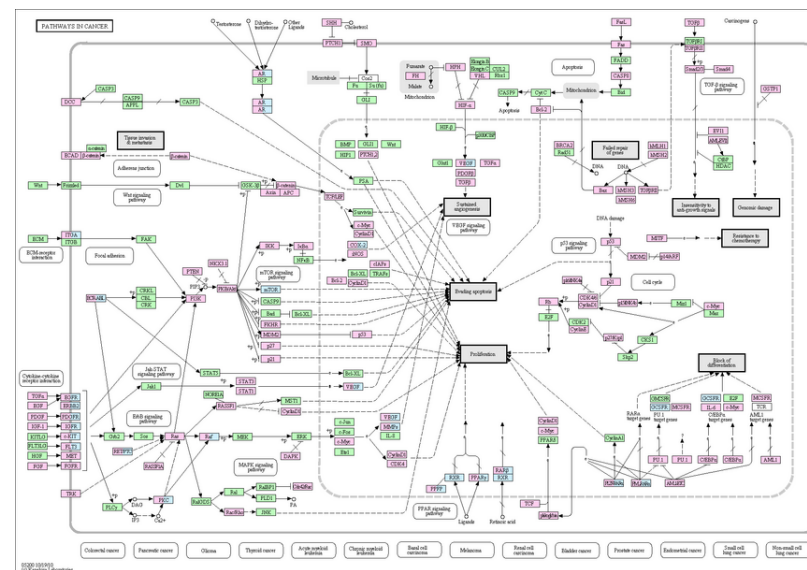
利用者インターフェースとしてだけでなく統合化ツールとして拡充

KEGG DISEASE
KEGG DRUG

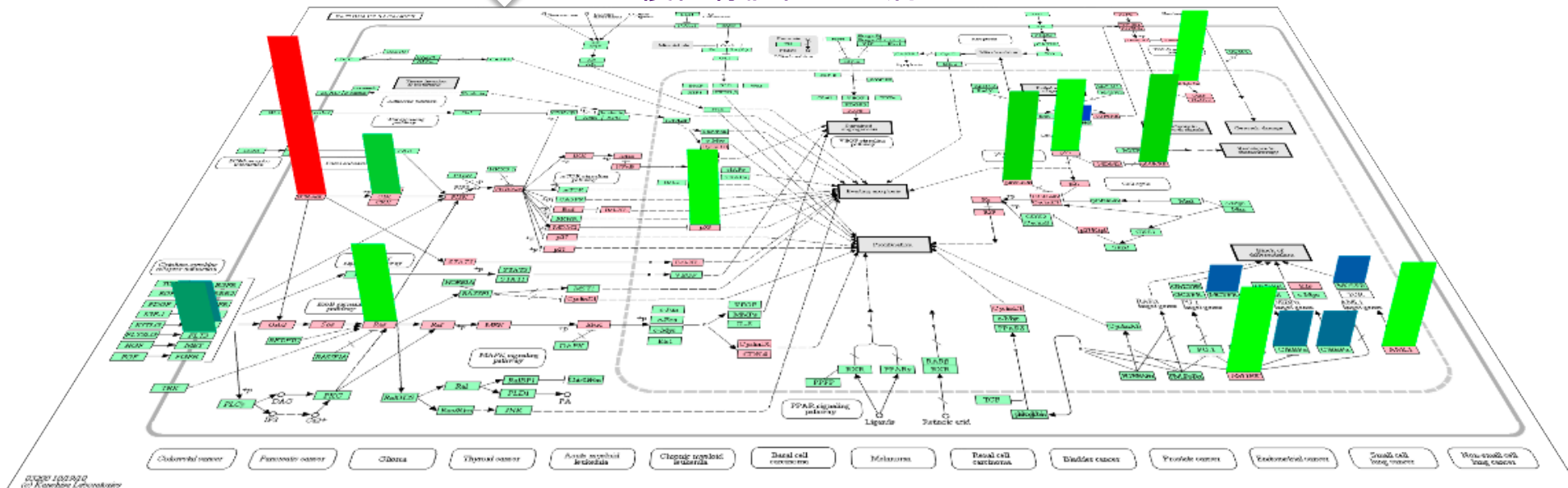
⇒ H番号 - 病因遺伝子
D番号 - 標的遺伝子
(Disease/drug mapping)

がんゲノム

⇒ 変異遺伝子 - 頻度
(COSMIC データ)



慢性骨髄性白血病



6. KEGG MEDICUS インターフェースの開発



KEGG MEDICUS

最先端のゲノム研究と社会との架け橋を目指した統合リソース

» English

KEGG2 PATHWAY BRITE MODULE DISEASE DRUG ENVIRON MEDICUS

KEGG MEDICUS

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や医療関係従事者だけでなく、一般の人々にも有用なリソースとして提供することを目指しています。そのため KEGG だけでなく、他の様々なデータベースとの統合化を進めています。

Disease/drug mapping

KEGG DISEASE に蓄積されているすべての病因遺伝子と、KEGG DRUG に登録されているすべてのターゲット遺伝子は、KEGG PATHWAY マップ上で統合されています。これは disease/drug mapping と呼ばれ、各マップは hsadd という 5文字の特殊な生物種コードで識別されます。例えば hsadd04620 は Toll 様レセプターシグナル伝達経路の disease/drug mapping で、色づけには以下の意味があります。



- 遺伝子が何らかの疾患と関連づけられている場合はピンクで表示
- 遺伝子(産物)が何らかの医薬品のターゲットである場合はライトブルーで表示
- 遺伝子が疾患にも医薬品にも対応する場合は、ピンクとライトブルーを半分ずつ表示

Disease/drug mapping は毎晩の KEGG データベース更新で作成し直されています。各マップは他の生物種バスウェイマップと同様にバスウェイメニューから選択することができます。あるいは、以下の一覧表から選択することもできます。

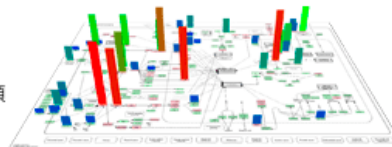
Disease genes and drug targets in KEGG pathways

KEGG CANCER リソース

がんの分子メカニズムに関する知識を集約した KEGG CANCER リソースの内容は現在以下の通りです。

- 55 の KEGG DISEASE エントリ
- 14 種類のがんの KEGG バスウェイマップ
- がん全体像 KEGG バスウェイマップ - Pathways in cancer
- がんのステージ BRITE 機能階層 - Cancer stages

他のデータベースとの統合化を進めることによりユニークなリソースを提供できる例として、Sanger Institute の COSMIC (Catalogue Of Somatic Mutations In Cancer) データベースとの統合を紹介いたします。COSMIC のデータから、がん細胞で観測された体細胞変異の頻度を計算し、これを KEGG のがんバスウェイマップに KEGG Mapper の新しいツールである Color Pathway でマッピングします。ここで KEGG と COSMIC の対応づけは以下のように行いました。



KEGG MEDICUS

COSMIC

MEDIS 標準病名

KEGG DISEASE

ICD10 疾病分類

KEGG DRUG

JAPIC 添付文書

MedDRA 用語集

OMIM

PubMed

PharmGKB J-STAGE

ClinVar

...

KEGG DISEASE, KEGG DRUG だけでなく疾患・医薬品・環境物質に関する様々なデータベースや規制情報等を、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

今年度の計画と進捗状況

1. KEGG DISEASE

- 疾患エントリ作成（遺伝要因既知の疾患、病原体ゲノム既知の感染症疾患）
- 疾患分類の開発

2. ゲノムネット疾患データベース

- MEDIS の利用許諾申請を行い、標準病名を BRITE 階層ファイル化
- 簡単な検索システムは今秋公開予定

3. ゲノムネット医薬品データベース

- MySQL から PostgreSQL への移行と、全文検索機能の改良を行っている
- 新しい検索システムを今年度中に公開予定

4. KEGG DRUG

- 薬物間相互作用データのアノテーション作業中
- 副作用を表現するため、MedDRA の利用許諾を得た

5. KEGG Mapper

- パスウェイマップに対する着色機能の改良（3D表示、アニメーションなど）

6. KEGG MEDICUS

- COSMIC データを統合した日本語版 KEGG MEDICUS を6月6日に公開済み

(課題) 環境物質データをどうするか

KEGG EDRUG → KEGG ENVIRON

- 天然物などで健康促進の効果を示す物質情報
- 環境物質など健康悪化を引き起こす物質情報



[Brite menu | Download htext]

生薬

One-click mode

- ▶ 双子葉植物：キク類
- ▶ 双子葉植物：バラ類
- ▶ 双子葉植物：その他
- ▶ 単子葉植物
- ▶ その他の被子植物
- ▶ 裸子植物
- ▶ シダ植物
- ▶ 藻類
- ▶ 菌類
- ▶ 動物
- ▶ その他



[Brite menu | Download htext]

発がん物質

Go

One-click mode

- ▶ **Group 1:** ヒトに対する発がん性がある
- ▶ **Group 2A:** ヒトに対しておそらく発がん性がある
- ▶ **Group 2B:** ヒトに対して発がん性の可能性がある
- ▶ **Group 3:** ヒトに対する発がん性については分類でき
- ▶ **Group 4:** ヒトに対しておそらく発がん性がない



[Brite menu | Download htext]

内分泌攪乱物質

Go

One-click mode

- ▶ 殺虫剤・除草剤
- ▶ 可塑剤・合成樹脂
- ▶ 難燃剤
- ▶ ダイオキシシン類

できるだけの情報収集は行うが、
達成目標には入れていない

主な研究開発メンバー

Published online 30 October 2009

*Nucleic Acids Research, 2010, Vol. 38, Database issue D355–D360
doi:10.1093/nar/gkp896*

KEGG for representation and analysis of molecular networks involving diseases and drugs

**Minoru Kanehisa^{1,2,*}, Susumu Goto¹, Miho Furumichi^{1,3}, Mao Tanabe^{1,3} and
Mika Hirakawa^{1,3}**

¹Bioinformatics Center, Institute for Chemical Research, Kyoto University, Uji, Kyoto 611-0011,

²Human Genome Center, Institute of Medical Science, University of Tokyo, Minato-ku, Tokyo 108-8639 and

³Institute for Bioinformatics Research and Development, Japan Science and Technology Agency, Chiyoda-ku, Tokyo 102-8666, Japan

Received September 10, 2009; Revised October 4, 2009; Accepted October 6, 2009

期待される成果と将来展望

ゲノム情報に基づく疾患・医薬品・環境物質の統合データベース

利用者層	利用内容と期待される成果
研究者	<ul style="list-style-type: none">・ 次世代シーケンサー等による大量データの生物学的意味解釈・ 疾患の分子メカニズム理解・ 植物・微生物のゲノム情報に基づく天然物・創薬リード探索・ 微生物による環境物質の分解経路予測
技術者	<ul style="list-style-type: none">・ API を用いたソフトウェア開発
医師・薬剤師	<ul style="list-style-type: none">・ 医薬品の相互作用検索・ 個人のゲノム情報に基づく個別化医療への応用
患者・一般の人々	<ul style="list-style-type: none">・ 疾患・医薬品の科学的理解・ 健康管理への応用

統合化の将来展望

- ・ 医療イノベーションなどで、ゲノム情報に基づく疾患・医薬品・環境物質の統合化は今後ますます重要となる。
- ・ 計算処理による統合だけでなく人手の知識集約作業による統合がなければ、我が国の知的財産権と国際競争力にはつながらない。
- ・ これを可能にする人材育成と、ノウハウの継承が重要である。