

H23年度 統合化推進プログラム進捗報告会

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

2012年2月24日 進捗状況報告会



©2012金久 實(京都大学) licensed under CC表示2.1日本

背景と目的

トランスレーショナル・バイオインフォマティクス

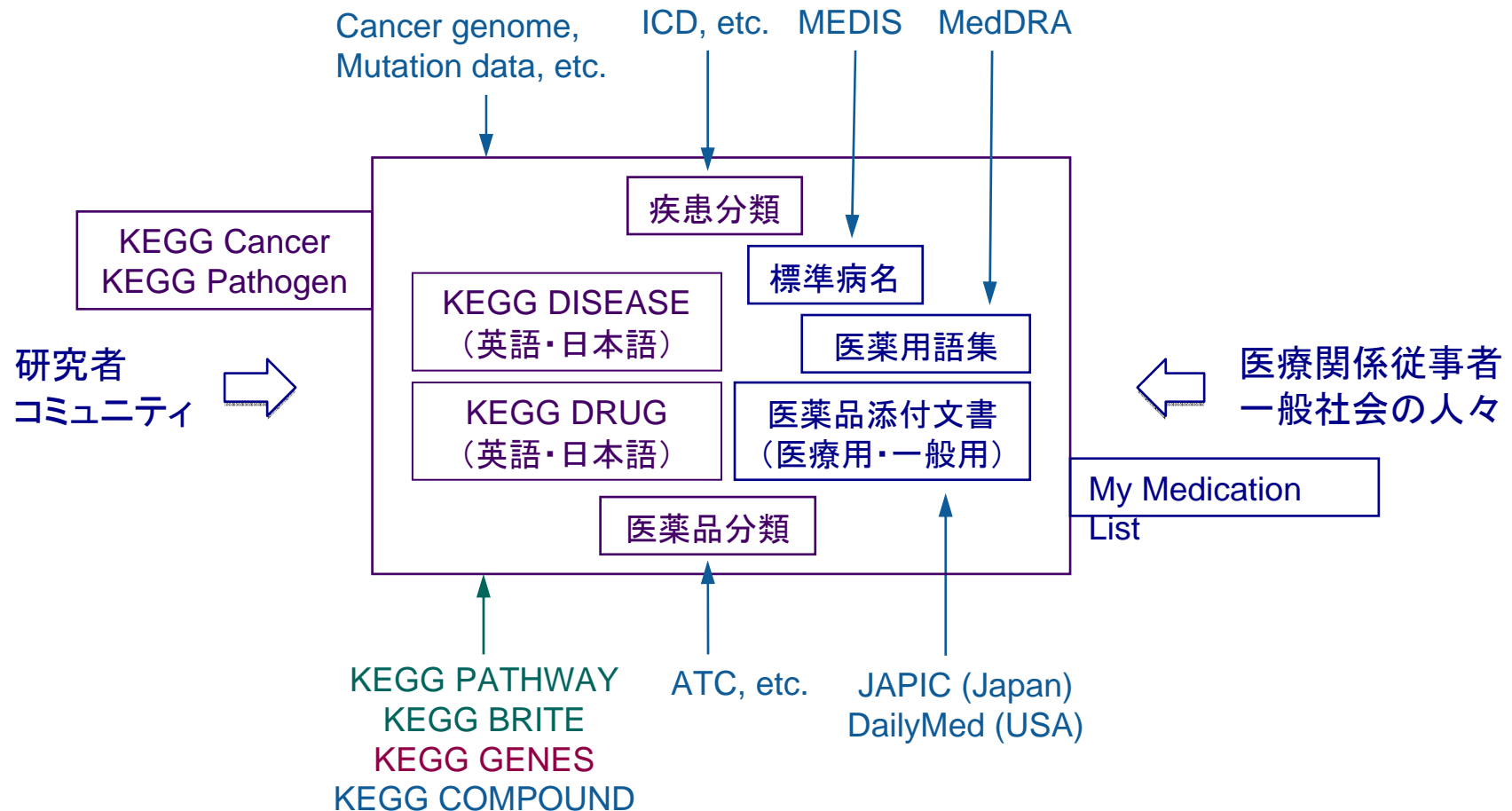
対象	役割	例
研究者	研究成果を医療の現場で活用するためのバイオインフォマティクス技術を提供	個別化医療
一般の人々	医薬品や疾患の科学的理解を深めるためのバイオインフォマティクスリソースを提供	セルフメディケーション

ゲノム情報に基づく疾患・医薬品・環境物質データの統合

- 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

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、最先端の研究と一般社会との架け橋となる統合データベース構築を行う。



当初計画と進捗状況

当初計画

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

進捗状況

KEGG DISEASE 疾患エントリの数は 375 (2012.6.9) から 951 (2012.2.21) に増加、OMIM にある疾患の半分以上は対応済み

KEGG MEDICUS 疾患情報として検索システムを開発・提供済み

JAPIC 添付文書を Oracle/PostgreSQL 化して KEGG DRUG と統合。DailyMed 米国添付文書も含めた KEGG MEDICUS 医薬品情報を開発・提供済み。追加開発としてお薬手帳を3月中に公開

医薬品相互作用データベース管理システムを開発し、添付文書の相互作用情報だけでなく、使用上の注意等に記載された内容を取り込むための辞書を開発中

KEGG Atlas 3D map viewer を開発・提供済み
KEGG Mapper との連動は3月中に公開

KEGG MEDICUS 日本語版と英語版のウェブサイトを整備し提供済み

KEGG MEDICUS

日本語版 <http://www.kegg.jp/kegg/medicus/>

英語版 <http://www.kegg.jp/kegg/medicus.html>



医薬品情報 検索 ヘルプ

» English

KEGG MEDICUS

医薬品検索利用法
医薬品コード
スイッチOTC薬

KEGG DRUG KEGG DISEASE

がん
感染症

KEGG
ゲノムネット
Kanehisa Labs

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 DISEASE/DRUG データベースの開発とともに、他の様々なデータベースとの統合化を進めています。

- KEGG MEDICUS はバイオサイエンスデータベースセンター統合化推進プログラムの支援で開発・運用されています。

KEGG MEDICUS 医薬品情報は KEGG DRUG データベース、我が国の医療用医薬品添付文書と一般用医薬品添付文書、米国の医療用医薬品添付文書と一般用医薬品添付文書を統合したリソースです。

KEGG MEDICUS 医薬品情報検索

- 我が国の医薬品添付文書情報は日本医薬情報センター (JAPIC) との契約に基づき提供しています。大量データの一括取得は禁止されています。短時間に大量のアクセスがあった IP アドレスは予告なしに使用停止になる場合があります。
- 米国の医薬品添付文書情報は DailyMed データベースへのリンクとして提供しています。
- KEGG MEDICUS 医薬品情報サービスは薬に対する科学的理解を深めることを目的としたサービスです。実際の薬の使用は医師・薬剤師の指示で行ってください。

KEGG MEDICUS 疾患情報は KEGG DISEASE データベースと医療現場で使われている標準病名を統合したリソースです。

KEGG MEDICUS 疾患情報検索

- 疾患情報サービスでは医療情報システム開発センター (MEDIS) が提供する ICD10対応標準病名を利用しています。

階層分類

我が国の添付文書や標準病名は KEGG BRITE データベースの階層分類としてもができるようになっています。

医療用医薬品の薬効分類 + 添付文書
医療用医薬品の ATC 分類 + 添付文書
一般用医薬品の分類 + 添付文書

ICD10対応標準病名

Last updated: February 1, 2012



MEDICUS Search Help

» Japanese

KEGG MEDICUS

KEGG DRUG
KEGG DISEASE
Cancer
Infectious disease

KEGG
GenomeNet
Kanehisa Labs

KEGG MEDICUS

KEGG MEDICUS is an integrated information resource of diseases, drugs, and health-related substances, aiming to bring the genomic revolution to society. The KEGG MEDICUS project involves the development of the KEGG DISEASE and DRUG databases, as well as the integration with other KEGG databases and outside databases.

- KEGG MEDICUS is supported by the National Bioscience Database Center in Japan.

KEGG MEDICUS currently integrates the KEGG DRUG and KEGG DISEASE databases, human pathways and drug development pathways in the KEGG PATHWAY database, and FDA drug labels (package inserts) for both prescription and OTC drugs in the USA. Note that the Japanese version of KEGG MEDICUS also includes package inserts of all drugs marketed in Japan.

KEGG MEDICUS search

- FDA drug labels are integrated as links to the DailyMed database.

Hierarchical Classifications

Drug and disease information can be searched as hierarchies of the KEGG BRITE database. See more details in the KEGG DRUG and KEGG DISEASE pages.

ATC Classification
USP drug classification
Therapeutic category of drugs in Japan

ICD-10 disease classification

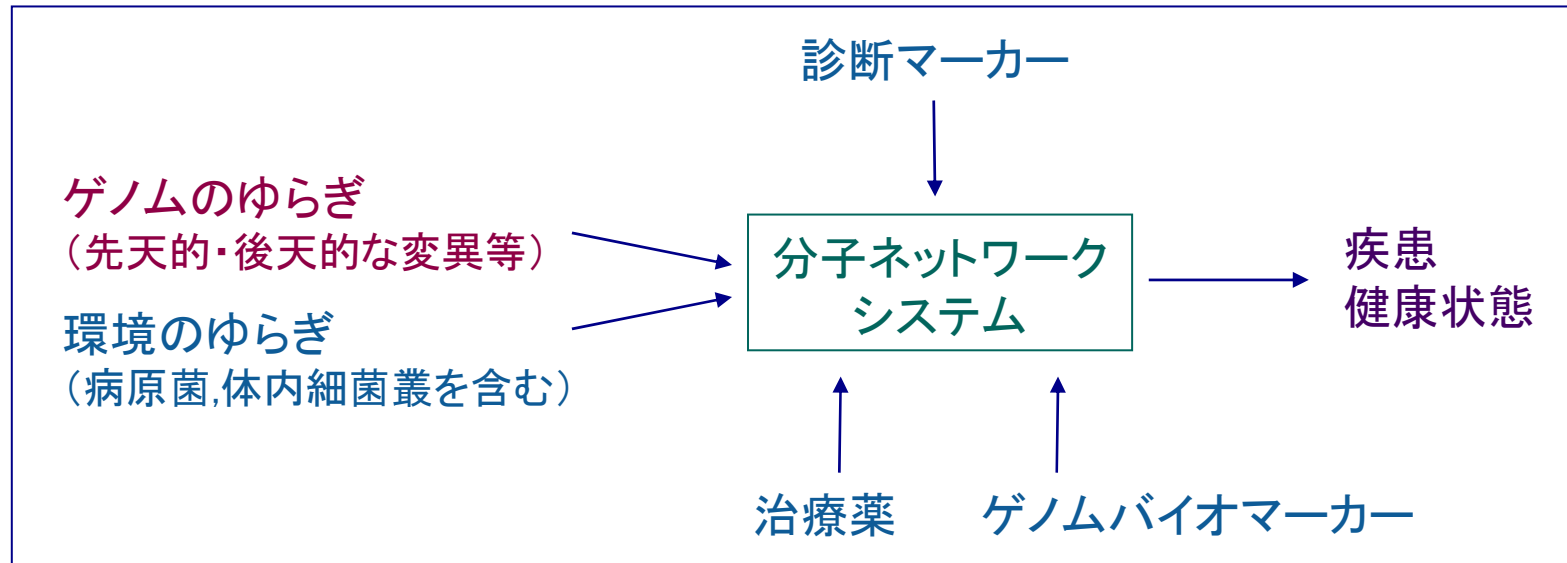
- 日本語版の医薬品情報検索では KEGG DRUG, JAPIC 医療用・一般用添付文書, DailyMed 医療用・一般用添付文書を一括検索
- 日本語版の疾患情報検索では KEGG DISEASE, MEDIS 標準病名を一括検索
- 英語版では KEGG PATHWAY, KEGG DISEASE, KEGG DRUG, DailyMed 医療用・一般用添付文書を一括



©2012金久 實 (京都大学) licensed under CC BY 2.1日本

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



KEGG DISEASE の拡充

KEGG DISEASE 疾患エントリー	375
病因遺伝子	1,041
感染症ゲノム	1
疾患パスウェイマップ	236



KEGG DISEASE 疾患エントリー	951
病因遺伝子	1,971
OMIM 疾患数 (がんを除く)	4
感染症ゲノム (ウイルス除く)	2,341
疾患パスウェイマップ	7

48
As of June 9, 2011

293
As of February 21, 2011

KEGG MEDICUS 疾患情報

KEGG MEDICUS 疾患情報

Top

免疫不全

KEGG DISEASE (30件)

標準病名 (8件)

30件中 1 ~ 30 を表示

エントリ	名称	概要	カテゴリ	パスウェイ	病因遺伝子
H00008	パーキットリンパ腫	パーキットリンパ腫(BL)は、非常に悪性度の高い、成熟したB細胞の非ホジキンリンパ腫で、風土性、散発性、および免疫不全と結びついた型の3つから構成される。風土性BL (eBL) はアフリカおよびいくつかの他の地域の小児や若年者が罹患するもので、患者の95%以上にEpstein-Barrウイルス(EBV)の感染が見られる。それとは対照的に、ヨーロッパや北米の青年に見られる散発性BL (sBL) は ...	がん		MYC-IgH (translocation) [HSA:4609] [KO:K04377] p53 (mutation) [HSA:7157] [KO:K04451] p16/INK4A (promoter methylation) [HSA:1029] [KO:K06621]
H00044	肛門管がん	... 2006年には4,660人が新たに発症したと推定され、660人が死亡している。疫学的、分子生物学的研究により、性的に伝達されるヒトパピローマウイルス(HPV)の感染が最も重要な病因であることが示されてきた。ヒト免疫不全ウイルス(HIV)の感染もまた、肛門管がんに関係している。免疫能のある人の場合はほとんど、HPVの感染は一時的なものであるのに対し、HIVが感染している患者では肛門管にHPVが持続的に感染しているという証拠がある ...	がん		p53 (mutation) [HSA:7157] [KO:K04451] DCC (mutation) [HSA:1630] [KO:K06765] APC (mutation) [HSA:324] [KO:K02085]
H00064	毛細血管拡張性運動失調症		神経変性疾患; 原発性免疫不全症候群		ATM (mutation) [HSA:472] [KO:K04728]
H00085	無ガンマグロブリン血症	抗体不全症には3つの主なカテゴリがある。すなわち、(a)初期のB細胞の発生の障害、(b)高IgM症候群(クラススイッチ組換えの障害とも呼ばれる)、および(c)分類不能型免疫不全症(CVID)である。カテゴリ(a)は無ガンマグロブリン血症から成る。初期のB細胞の発生の障害は、5歳までに反復性の細菌感染が始まること、深刻な低ガンマグロブリン血症、未梢循環におけるB細胞が著明に減少したり存在しなくなったりすること ...	原発性免疫不全症候群	hsa05340 Primary immunodeficiency	Btk [HSA:695] [KO:K07370] CD79a [HSA:973] [KO:K06506] mu (IGHM) lamda 5(CD179B) [HSA:3543] [KO:K06554] BLNK [HSA:29760] [KO:K07371] LRRC8 [HSA:56262] 23507 84230 55144 80131 CD79B [HSA:974] [KO:K06507]

KEGG MEDICUS 疾患情報

Top

免疫不全

KEGG DISEASE (30件)

標準病名 (8件)

8分類中 1 ~ 8 を表示

標準病名	ICD10	KEGG DISEASE
AIDS AIDS関連症候群 HIV感染症 後天性免疫不全症候群 新生児HIV感染症 HIV感染	B24 詳細不明のヒト免疫不全ウイルス[HIV]病	
高IgM症候群 X連鎖高IgM症候群	D805 免疫グロブリンM[IgM]増加を伴う免疫不全症	H00085 H00086 H00087 H00088
カップ鎖欠乏症 免疫グロブリンH鎖欠損症	D808 主として抗体欠乏を伴うその他の免疫不全症	
体液性免疫不全症	D809 主として抗体欠乏を伴う免疫不全症。詳細不明	
ピオチン依存性カルボキシラーゼ欠乏症 ホロカルボキシラーゼ合成酵素欠損症 MHCクラスI・II欠損症 ZAP-70欠損症 オーメン症候群	D818 その他の複合免疫不全症	H00091 H00092 H00093
重症複合免疫不全症	D819 複合免疫不全症。詳細不明	
胸腺無形成性免疫不全症 X連鎖重症複合免疫不全症	D821 ティジョージ<Di George>症候群	H01004
EBウイルス関連免疫不全症 X連鎖リンパ増殖症候群	D823 EB<Epstein-Barr>ウイルスに対する遺伝的反応異常に続発する免疫不全症	
グリセリ症候群 ナイミヘン染色体不安定症候群	D828 その他の明示された大きな欠損に関連する免疫不全症	H00094 H00931
分類不能免疫不全症	D839 分類不能型免疫不全症。詳細不明	
原発性免疫不全症候群 細胞性免疫不全症 先天性免疫不全症候群 続発性免疫不全症候群	D848 その他の明示された免疫不全症	
免疫不全	D849 免疫不全症。詳細不明	
AIDS検査陽性 HIV検査陽性	R75 ヒト免疫不全ウイルス[HIV]の検査陽性	
HIVキャリア	Z21 無症候性ヒト免疫不全ウイルス[HIV]感染状態	

- KEGG DISEASE 日本語版と MEDIS 標準病名を一括検索、結果はタブに分けて表示
- 標準病名は ICD-10 国際疾病分類を通して KEGG DISEASE と統合
- KEGG DISEASE 独自の疾患分類も開発中



KEGG MEDICUS 医薬品情報



医薬品情報 検索 ヘルプ

» English

KEGG MEDICUS

医薬品検索利用法
医薬品コード
スイッチOTC薬

KEGG DRUG

KEGG DISEASE

がん
感染症

KEGG

ゲノムネット
Kanehisa Labs

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 DISEASE/DRUG データベースの開発とともに、他の様々なデータベースとの統合化を進めています。

- KEGG MEDICUS はバイオサイエンスデータベースセンター統合化推進プログラムの支援で開発・運用されています。

KEGG MEDICUS 医薬品情報は KEGG DRUG データベース、我が国の医療用医薬品添付文書と一般用医薬品添付文書、米国の医療用医薬品添付文書と一般用医薬品添付文書を統合したリソースです。

KEGG MEDICUS 医薬品情報検索

- 我が国の医薬品添付文書情報は日本医薬情報センター (JAPIC) との契約に基づき提供しています。大量データの一括取得は禁止されています。短時間に大量のアクセスがあった IP アドレスは予告なしに使用停止になる場合があります。
- 米国の医薬品添付文書情報は DailyMed データベースへの
- KEGG MEDICUS 医薬品情報サービスは薬に対する科学的実際の薬の使用は医師・薬剤師の指示で行ってください。

KEGG MEDICUS 疾患情報は KEGG DISEASE データベースと統合したリソースです。

KEGG MEDICUS 疾患情報検索

- 疾患情報サービスでは医療情報システム開発センター (MEIS) と連携しています。

階層分類

我が国の添付文書や標準病名は KEGG BRITE データベースと統合できるようになっています。

医療用医薬品の薬効分類 + 添付文書
医療用医薬品の ATC 分類 + 添付文書
一般用医薬品の分類 + 添付文書

ICD10対応標準病名

Last updated: February 1, 2012

KEGG MEDICUS is developed by Kanehisa Labor

医薬品情報のデータ数

KEGG DRUG (日米欧)	9,773
JAPIC 医療用 (日本)	12,769
JAPIC 一般用 (日本)	11,850
DailyMed 医療用 (米国)	14,769
DailyMed 一般用 (米国)	13,952

As of February 21, 2011

旧バージョン: ゲノムネット 医薬品データベース

- JAPIC 添付文書を MySQL + Ruby on Rails で提供
- KEGG DRUG とはリンクで統合
- 医療用と一般用の添付文書は別検索

新バージョン: KEGG MEDICUS 医薬品情報

- JAPIC 添付文書を KEGG DRUG と同じ Oracle で統合
- 外部サービスは PostgreSQL + Perl scripts
- DailyMed 米国添付文書をリンクで統合
- KEGG DRUG、日本の医療用・一般用添付文書、米国の医療用・一般用添付文書を一括検索、結果を5つのタブで表示
- 薬剤師や創薬研究者の意見聴取 (後発品、添加物、ほか)



検索例 (famotidine)

<http://www.kegg.jp/kegg/medicus/>

KEGG MEDICUS 医薬品情報 Top

famotidine 成分も検索

68 件中 1 ~ 40 を表示 1 2 次へ

商品名	総称名	一般名	薬効	KEGG DRUG
ガスター-D錠10mg ガスター-D錠20mg	ガスター (アステラス製薬)	ファモチジン Famotidine	H2受容体拮抗剤 (ファモチジン口腔内崩壊錠)	D00318
ガスター注射液10mg ガスター注射液20mg	ガスター (アステラス製薬)	ファモチジン Famotidine	H2受容体拮抗剤	D00318
ガスター錠10mg ガスター錠20mg	ガスター (アステラス製薬)	ファモチジン Famotidine	H2受容体拮抗剤	D00318
ガスター散2% ガスター散10%	ガスター (アステラス製薬)	ファモチジン Famotidine	H2受容体拮抗剤	D00318
ガスイサン錠10 (後発品) ガスイサン錠20 (後発品)	ガスイサン (ニプロジェネファ)	ファモチジン Famotidine	H2受容体拮抗剤	D00318

- 日本語検索では3つの、英語検索では5つの検索結果タブを表示
- 日本の医療用医薬品では先発品の添付文書を先に表示
- オプションとして、有効成分、添加物 (予定) の検索、全文検索
- 4種類の添付文書は有効成分の化学構造 (複数の場合は組合せ) を識別する KEGG DRUG D 番号で統合

医療用医薬品 : ガスター List Top

医療用医薬品 : ガスター List Top

KEGG DRUG 情報

KEGG DRUG	D00318
一般名	ファモチジン (JP16) Famotidine (JP16/USP/INN)
商品名	ガスター (アステラス製薬), ガスター (アステラス製薬), ガスター (アステラス製薬)
後発品	ガスイサン (ニプロジェネファ), ガスセプト (メティサ新薬), ガスドック (キョーリンリメディオ), ガスベラジン (長生堂製薬), ガスポート (大工業), ガスポート (大洋薬品工業), ガスポート (大洋薬品工業), ガスマ (東菱薬品工業), ガスリック (日新製薬-山形), ガスリック (日新製薬-山形), ガスリック (日新製薬-山形), ガスリック (日新製薬-山形), ガモファー (大原薬品工業), ガモファー (大原薬品工業), ガモファー (大原薬品工業), ガモファー (大原薬品工業), ガモファー (大原薬品工業), ガモファー (大原薬品工業), クリマーゲン (マイラン製薬), クリマーゲン (マイラン製薬), ストマルコン (大正薬品工業), ストマルコン (大正薬品工業), ストマルコン (大正薬品工業), チオスター (全星薬品工業), チオスター (全星薬品工業), ファモガスト (シオノケミカ)

医薬品情報

総称名 ガスター
 一般名 ファモチジン
 欧文一般名 Famotidine
 製剤名 ファモチジン口腔内崩壊錠
 薬効分類名 H₂受容体拮抗剤 (ファモチジン口腔内崩壊錠)
 薬効分類番号 2325
 KEGG DRUG D00318
 JAPIC 添付文書(PDF)

商品一覧

総称名	商品名	成分	添加物	価格
ガスター (アステラス製薬)	ガスター-D錠10mg	ファモチジン	D-マンニトール アスバルチーム (L-フェニルアラニン化合物) アメ粉 エチルセルロース シクロデキストリン ステアリン酸カルシウム セタノール トリアセチン ラウリル硫酸ナトリウム 香料	31.1円/錠
	ガスター-D錠20mg	ファモチジン	D-マンニトール トメントール アスバルチーム (L-フェニルアラニン化合物) アメ粉 エチルセルロース シクロデキストリン	53.9円/錠

- KEGG DRUG では基本情報 (名称、化学構造)、相互作用ネットワーク情報 (ターゲット、代謝酵素ほか)、構造変換ネットワーク情報 (構造マップ、類似構造)、薬効分類その他の階層分類情報を集約

- 商品一覧では同一有効成分 (同一 D 番号) の商品における添加物と価格の違いを表示



医薬品相互作用データベース

KfGG 薬物間相互作用

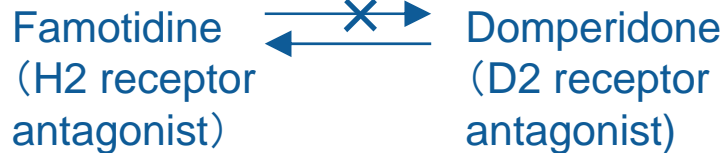
問合せ:
D00318 ファモチジン (JP16)

相互作用: 11 hits [**ATC 分類**] 薬効分類]

D00296	ジダノシン (JAN)	unclassified
D00350	イトラコナゾール (JP16)	unclassified
D00616	ジルチアゼム塩酸塩 (JP16)	unclassified
D00895	デラビルジンメシル酸塩 (JAN)	unclassified
D01160	サキナビルメシル酸塩 (JAN)	unclassified
D01276	アタザナビル硫酸塩 (JAN)	unclassified
D01745	ドンペリドン (JP16)	Family: HRH2 DRD2
D02106	三酸化ヒ素 (JP16)	unclassified
D02372	ペロスピロン塩酸塩水和物 (JAN)	Family: HRH2 DRD2 HTR2A
D03306	ポリカルポフィルカルシウム (JAN)	unclassified
D06414	ダサチニブ水和物 (JAN)	unclassified

ターゲットや代謝酵素の重複等のアノテーションを付与

- 添付文書より併用禁忌・併用注意に関する相互作用の情報を抽出
- 添付文書の「禁忌」「使用上の注意」から高次レベルの相互作用・副作用情報も抽出 (予定)
- これらを医薬品相互作用データベースとして管理



Takarabe, M., Shigemizu, D., Kotera, M., Goto, S., and Kanehisa, M.; Network-based analysis and characterization of adverse drug-drug interactions. *J. Chem. Inf. Model.* 51, 2977-2985 (2011).

KfGG 解剖治療化学分類 (ATC分類)

[[Brite menu](#) | [Download htext](#)]

医療用医薬品のATC分類

One-click mode Show matched only

Type

- ▼ A 消化管と代謝作用
 - ▶ A01 口腔科用製剤
 - ▶ A02 胃酸関連疾患用薬
 - ▼ A03 機能的胃腸疾患用薬
 - ▶ A03A 機能的腸疾患用薬
 - ▶ A03B ベラドンナと誘導体、単味
 - ▶ A03C 鎮痙薬、精神抑制薬配合
 - ▶ A03D 鎮痙薬、鎮痛薬配合
 - ▶ A03E 鎮痙薬と抗コリン薬、その他の薬品配合
 - ▼ A03F 運動改善薬
 - ▼ A03FA 運動改善薬
 - ▶ A03FA01 メトクロプラミド
 - ▶ A03FA02 シサプリド
 - ▼ A03FA03 ドンペリドン
 - D01745 ドンペリドン (JP16)
 - D07868 ドンペリドンマレイン酸塩
 - ▶ A03FA04 プロモプリド
 - ▶ A03FA05 アリザプリド
 - ▶ A03FA06 クレボプリド
 - ▶ A04 鎮吐薬と制嘔吐薬
 - ▶ A05 胆汁と肝治療
 - ▼ A06 下剤
 - ▼ A06A 下剤
 - ▶ A06AA 軟便薬、軟化薬
 - ▶ A06AB 接触刺激性下剤

Family: HRH2 | DRD2

薬効分類の階層で補完・推定

医薬品相互作用：ロキソニンの例

相互作用

併用注意

クマリン系抗凝血剤 ワルファリン	その抗凝血作用を増強するおそれがあるので注意し、必要があれば減量すること。	本剤のプロスタグランジン生合成抑制作用により血小板凝集が抑制され血液凝固能が低下し、その薬剤の抗凝血作用に相加されるためと考えられている。
スルホニル尿素系血糖降下剤 トルブタミド等	その血糖降下作用を増強するおそれがあるので注意し、必要があれば減量すること。	本剤のヒトでの蛋白結合率は、ロキソプロフェンで97.0%、trans-OH体で92.8%と高く、蛋白結合率の高い薬剤と併用する
ニューキノロン系抗菌剤 エノキサシン水和物等	その痙攣誘発作用を増強する。	
メトトレキサート	血中メトトレキサート濃度を上げ、その作用を増強するで、必要があれば減量すること。	
リチウム製剤 炭酸リチウム	血中リチウム濃度を上昇させるおそれがあり、リチウム濃度に注意し、減量すること。	
チアジド系利尿薬 ヒドロフルメチアジド、ヒドロクロロチアジド等	その利尿・降圧作用を減弱させるおそれがある。	

00057032	ロキソニン	併用注意	クマリン系抗凝血剤
00057032	ロキソニン	併用注意	ワルファリン
00057032	ロキソニン	併用注意	スルホニル尿素系血糖降下剤
00057032	ロキソニン	併用注意	トルブタミド
00057032	ロキソニン	併用注意	チアジド系利尿薬
00057032	ロキソニン	併用注意	ヒドロフルメチアジド
00057032	ロキソニン	併用注意	ヒドロクロロチアジド
00057032	ロキソニン	併用注意	ニューキノロン系抗菌剤
00057032	ロキソニン	併用注意	エノキサシン水和物
00057032	ロキソニン	併用注意	メトトレキサート
00057032	ロキソニン	併用注意	リチウム製剤
00057032	ロキソニン	併用注意	炭酸リチウム

KEGG D 番号
ATC 番号
への対応付け

禁忌

次の患者には投与しないこと

消化性潰瘍のある患者 [プロスタグランジン生合成抑制により、胃の血流量が減少し消化性潰瘍が悪化することがある。] (ただし、「慎重投与」の項参照)	00057032	ロキソニン	併用禁忌	消化性潰瘍
重篤な血液の異常のある患者 [血小板機能障害を起こし、悪化するおそれがある。]	00057032	ロキソニン	併用禁忌	血液の異常
重篤な肝障害のある患者 [副作用として肝障害が報告されており、悪化することがある。]	00057032	ロキソニン	併用禁忌	肝障害
重篤な腎障害のある患者 [急性腎不全、ネフローゼ症候群等の副作用]	00057032	ロキソニン	併用禁忌	腎障害
重篤な心機能不全のある患者 [腎のプロスタグランジン生合成抑制にするため症状を悪化させるおそれがある。]	00057032	ロキソニン	併用禁忌	心機能不全
本剤の成分に過敏症の既往歴のある患者	00057032	ロキソニン	併用禁忌	アスピリン喘息
アスピリン喘息 (非ステロイド性消炎鎮痛剤等による喘息発作の誘発することがある。]	00057032	ロキソニン	併用禁忌	妊娠末期
妊娠末期の婦人 (「妊婦、産婦、授乳婦等への投与」の項参照)	00057032	ロキソニン	併用禁忌	

MedDRA 番号
への対応付け



KEGG Cancer - がん

KEGG Mapper の拡充

English

KEGG2 PATHWAY BRITE MODULE DISEASE DRUG ENVIRON MEDICUS

H番号、名称、概要、カテゴリ、パスウェイを検索、 病関連遺伝子も検索

がん 感染症

検索

KEGG Cancer リソース

KEGG Cancer リソースはがんの分子メカニズムを理解するための統合的なインターフェースです。KEGG データベースの以下の内容

- KEGG DISEASE エントリ (55 種類のがん)
- KEGG PATHWAY マップ (14 種類のがん)
- シグナル伝達経路に関するがん全体像マップ (Pathways in cancer)
- 転写ネットワークに関するがん全体像マップ (Transcriptional misregulation in cancer)
- 医薬品に関する BRITE 機能階層 (抗悪性腫瘍薬、その他の医薬品分類)
- 医薬品に関する KEGG DRUG 構造マップ (開発の歴史: 抗腫瘍薬)
- 環境因子に関する BRITE 機能階層 (発がん物質、内分泌攪乱物質、農業、ほか)

およびその他のデータベースが統合されています。

- 体細胞変異に関する Sanger Institute の COSMIC (Catalogue Of Somatic Mutations In Cancer) データベース

発がんステージの KEGG マッピング

KEGG PATHWAY の 14 種類のがん個別マップは、発がんのステージ (進行度) に応じて、どのようなシグナル伝達経路やがん遺伝子が関与するかが表現されています。ステージごとの遺伝子リストは以下の BRITE 機能階層ファイルにまとめられています。

Cancer stages

また、ステージごとのスナップショットを全体像マップおよび個別マップの上で見ることができるリンクがつけられています。

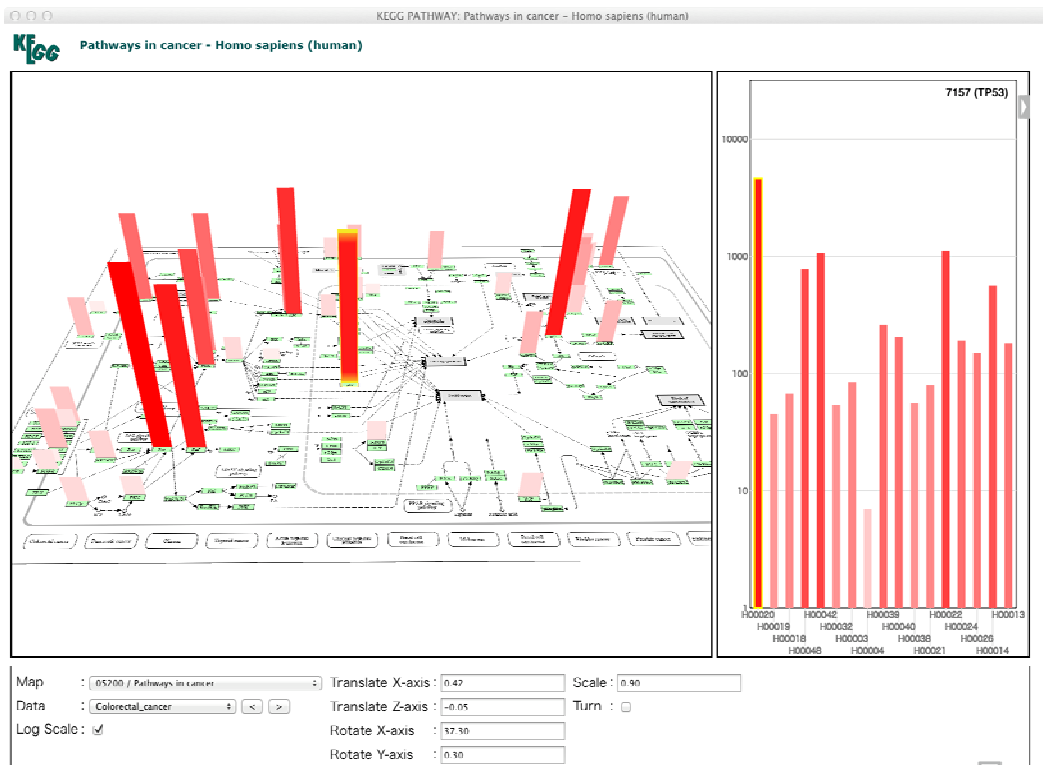
体細胞変異頻度の KEGG マッピング

KEGG PATHWAY の 14 種類のがん個別マップでは、発がん遺伝子とがん抑制遺伝子が灰色のボックス内にまとめられ、またパスウェイ上では赤字で示されています。これらは文献情報をもとに作成されたものです。一方、COSMIC データベースでは実際のがん細胞で観測された遺伝子変異が蓄積されています。ここでは 17 種類のがん (COSMIC との対応付けの詳細はこちら) の遺伝子変異頻度を抽出し、KEGG Mapper のツールである Color Pathway でマッピングしました。結果は以下の cosmic リンクから png 画像として見ることができます。

がん	全体像マップ	個別マップ
H00020 大腸がん	cosmic	hsa05210 cosmic
H00019 膵がん	cosmic	hsa05212 cosmic
H00018 胃がん	cosmic	
H00048 肝細胞がん	cosmic	
H00042 神経膠腫	cosmic	hsa05214 cosmic
H00032 甲状腺がん	cosmic	hsa05216 cosmic
H00003 急性骨髄性白血病	cosmic	hsa05221 cosmic
H00004 慢性骨髄性白血病	cosmic	hsa05220 cosmic
H00039 基底細胞がん	hsa05200 cosmic	hsa05217 cosmic
H00040 有棘細胞がん	cosmic	
H00038 悪性黒色腫	cosmic	hsa05218 cosmic
H00021 腎細胞がん	cosmic	hsa05211 cosmic
H00022 膀胱がん	cosmic	hsa05219 cosmic
H00024 前立腺がん	cosmic	hsa05215 cosmic
H00026 子宮内臓がん	cosmic	hsa05213 cosmic
H00014 非小細胞肺癌	cosmic	hsa05223 cosmic
H00013 小細胞肺癌	cosmic	hsa05222 cosmic

あるいは、まだ暫定版ですが開発中の 3D マップビューアを試してみてください。これは WebGL を用いたツールで Firefox, Google Chrome, Safari (WebGL-enabled) で動かすことができます。

[Pathways in cancer with 3D map viewer](#)



- 数値データを KEGG PATHWAY にマッピングする KEGG Mapper ツールを開発
- 結果を3次元的に表示する KEGG Atlas 3D viewer を開発
- COSMIC データベースにあるがん細胞での遺伝子変異頻度を統合
- KEGG Cancer のページからリンク



©2012金久 實(京都大学) licensed under CC表示2.1日本

今後の展望



KEGG Pathogen - 感染症

KEGG2 PATHWAY BRITE MODULE DISEASE DRUG ENVIRON MEDICUS

H番号、名称、概要、カテゴリ、パスウェイを検索、 病因遺伝子も検索

検索

がん
感染症

KEGG Pathogen リソース

KEGG Pathogen リソースは感染症の分子メカニズムをゲノムレベルおよび適
めの統合的なインターフェースです。KEGG データベースの以下の内容を含んで

- KEGG DISEASE エントリ (感染症疾患)
- KEGG PATHWAY マップ (感染症疾患)
- 医薬品に関する BRITE 機能階層 (抗感染薬、その他の医薬品分類)
- 医薬品に関する KEGG DRUG 構造マップ (開発の歴史: 抗生物質)
- 細菌毒素に関する BRITE 機能階層 (Bacterial Toxins)
- KEGG GENOME のメタデータアノテーション、病原菌の pangenomes

(Note) This page is under development.

Last updated: December 12, 2011

KEGG GenomeNet Bioinformatics

- 次世代シーケンサーを用いたパーソナルゲノム解析 → My Medication List
- 次世代シーケンサーを用いた病原体ゲノム解析 → 国際ネットワーク

Disease Outbreak Detection in the Genomics Era: Global Road Map Meeting #2

Conveners: US Food & Drug Administration/Danish Technical University

When: March 1st and 2nd, 2012 from 8:30 AM to 5:30 PM daily

Where: Hilton Crystal City, 2399 Jefferson Davis Highway, Arlington, Virginia, USA 22202, Tel: 1-703-418-6800, Fax: 1-703-418-3763 (rooms are being held in block at a discounted meeting rate-refer to FDA meeting)

Purpose: (i) To provide an expanded follow-up to the 2011 Brussels meeting and debate the short and long term obstacles and solutions for a global system for identification of microorganisms based on genomic information. (ii) To provide an overview of ongoing initiatives and discuss how global collaboration can be achieved. (iii) To determine a path forward for how to establish a globally distributed system.

Discussions: will focus on solutions to questions and challenges surrounding the deployment of next-generation genomic typing tools for public health and clinical disease cluster detection on a global scale. Specific questions to be answered from this collection of worldwide experts in the field may include: (i) appropriate metadata attached to genome data submissions; (ii) available computer resources/tools required to implement and execute a global genome-based disease detection network; (iii) data types and categories to be included for databasing and analysis; (iv) political and legal impediments for the sharing of genomic data; and (v) data formatting for point-of-care clinical utility and public health.

Expected outcome: A series of draft road map statements focused on establishing a global disease outbreak detection system using a worldwide network of shared genomic information for bacterial, viral, and parasitic microorganisms AND a commitment from various institutions for working together on developing such a database.



平成24年度の計画

1. KEGG DISEASE

- 単一遺伝子疾患・多因子性疾患の疾患エントリ作成
- 感染症疾患の疾患エントリ作成

2. KEGG DRUG

- 医薬品相互作用データベースの開発
- とくに医薬品同士だけでなく、食品や健康状態との関連もコンピュータ化
- 副作用情報のコンピュータ化

3. KEGG MEDICUS 医薬品情報

- 上記医薬品相互作用データベースを利用した検索システムを開発
- 日本・米国の添付文書ともに定期的に更新して最新情報を提供

1. KEGG MEDICUS 疾患情報

- 標準病名と KEGG DISEASE の対応づけ
- 医薬品情報も含めた検索インターフェース開発

2. 統合インターフェース

- 疾患情報と医薬品情報を分子ネットワークと統合としたインターフェース開発
- 上記医薬品相互作用データベースを利用した My Medication List の継続開発
- KEGG Mapper を用いた外部データベースとの統合インターフェース継続開発

参考資料：保有しているデータベース

データベース	内容	データ数		備考	
KEGG DISEASE	疾患情報		951	独自開発	公開中
KEGG DRUG	医薬品情報		9,773	独自開発	公開中
JAPIC	日本の医薬品添付文書	医療用	12,769	ライセンス契約	公開中
		一般用	11,850		
DailyMed	米国の医薬品添付文書	医療用	14,769	利用許諾	公開中
		一般用	13,952		
MEDIS	標準病名			利用許諾	公開中
MedDRA	疾患分類			利用許諾	公開中
COSMIC	がん細胞の遺伝子変異			公共データ	一部公開中

公開 URL

Web 日本語版 <http://www.kegg.jp/kegg/medicus/>

Web 英語版 <http://www.kegg.jp/kegg/medicus.html>

FTP <ftp://ftp.genome.jp/pub/kegg/medicus/>