

ドラッグ関連研究の傾向と現状

研究分野の急速な広がり、境界領域の急激な拡大

ドラッグデザイン

ゲノム分野

遺伝子探索／発現

- ・種々検索手法
- ・多型解析
- ・発現プロフィール

蛋白分野

蛋白探索／発現

- ・分離／結晶化
- ・2／3次元構造
- ・機能解析
- ・発現プロフィール

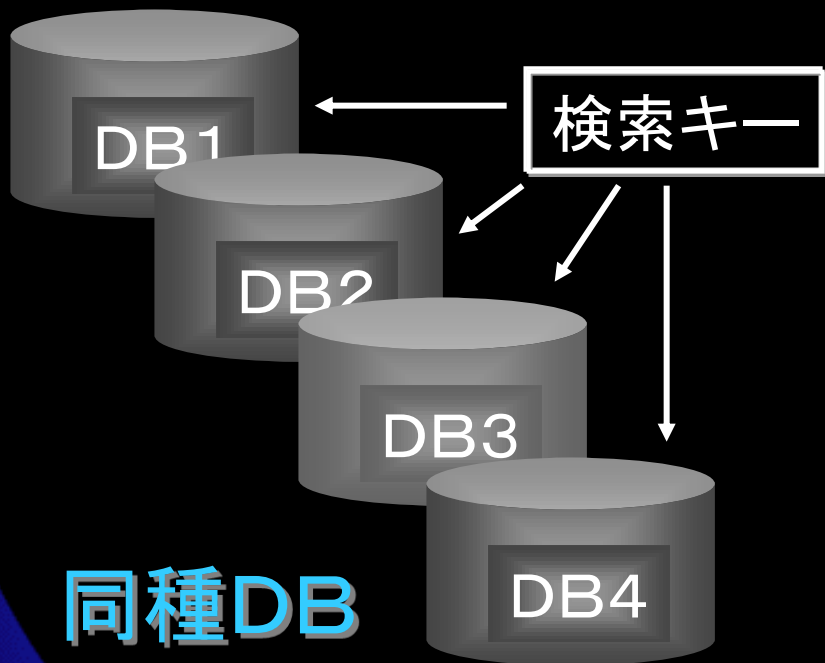
化合物分野

新薬デザイン

- ・コンビケム
- ・HTS
- ・毒性／代謝

互いに独立したデータベースの連携

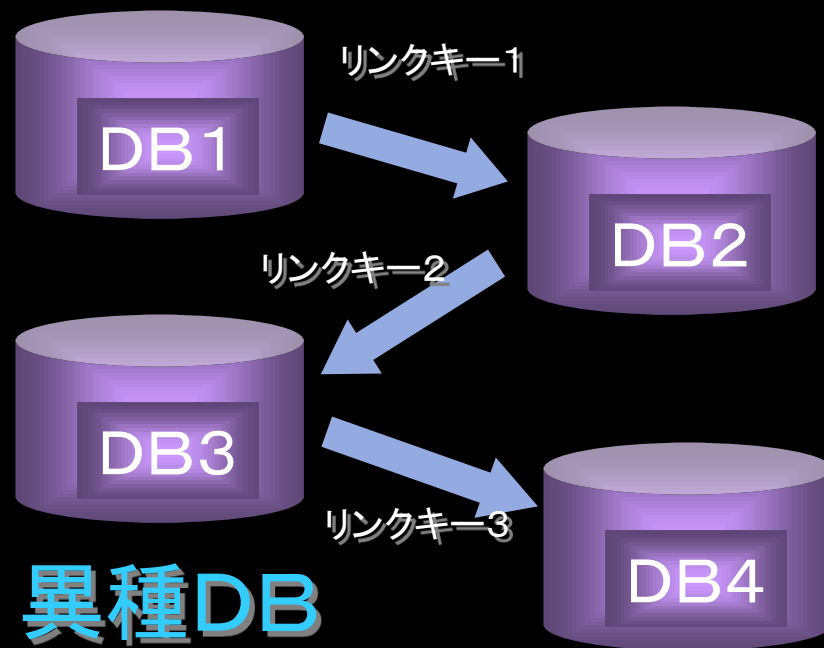
串刺し検索



同種DB

同じ検索キーを用いて
複数DBの同時検索

データベース連携



異種DB

リンクキーを用いた
複数DB連携

“ドラッグインフォマティクス”の提案

ドラッグという観点からの統一された科学情報学

ドラッグインフォマティクス



バイオ

インフォマティクス

バイオ関連情報

プロテオ

インフォマティクス

蛋白関連情報

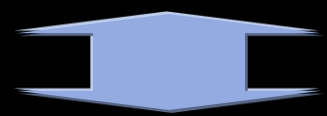
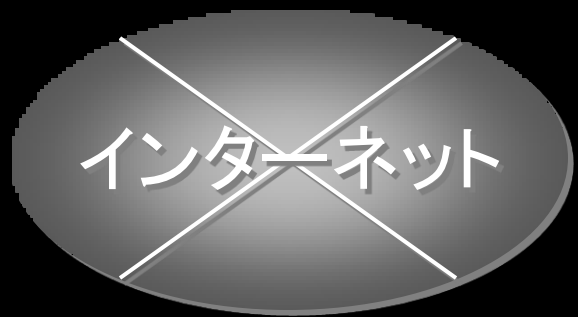
ケミ

インフォマティクス

化合物関連情報

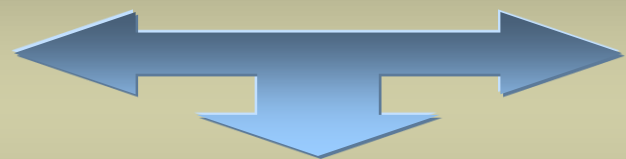
統合データベースのシステム構成

発現プロフィール解析
データマネージメント
データ解析システム



統合データベース

化合物ID / 蛋白ID



化合物

蛋白

薬理活性

統合データベースの情報項目リスト

統合データベース

化合物／蛋白／薬理活性

化合物情報

- 化合物ID, CAS番号, IUPAC名
- 化合物2／3次元構造式
- 種々物性情報(実測／計算値)
 - ・LogP値
 - ・分子屈折率
- 種々算出パラメータ群
- 電子的パラメータ群
 - ・電子密度
 - ・HOMO
- 2次元パラメータ関連
 - ・分子容積
 - ・分子表面積
- 文献情報
- その他

蛋白情報

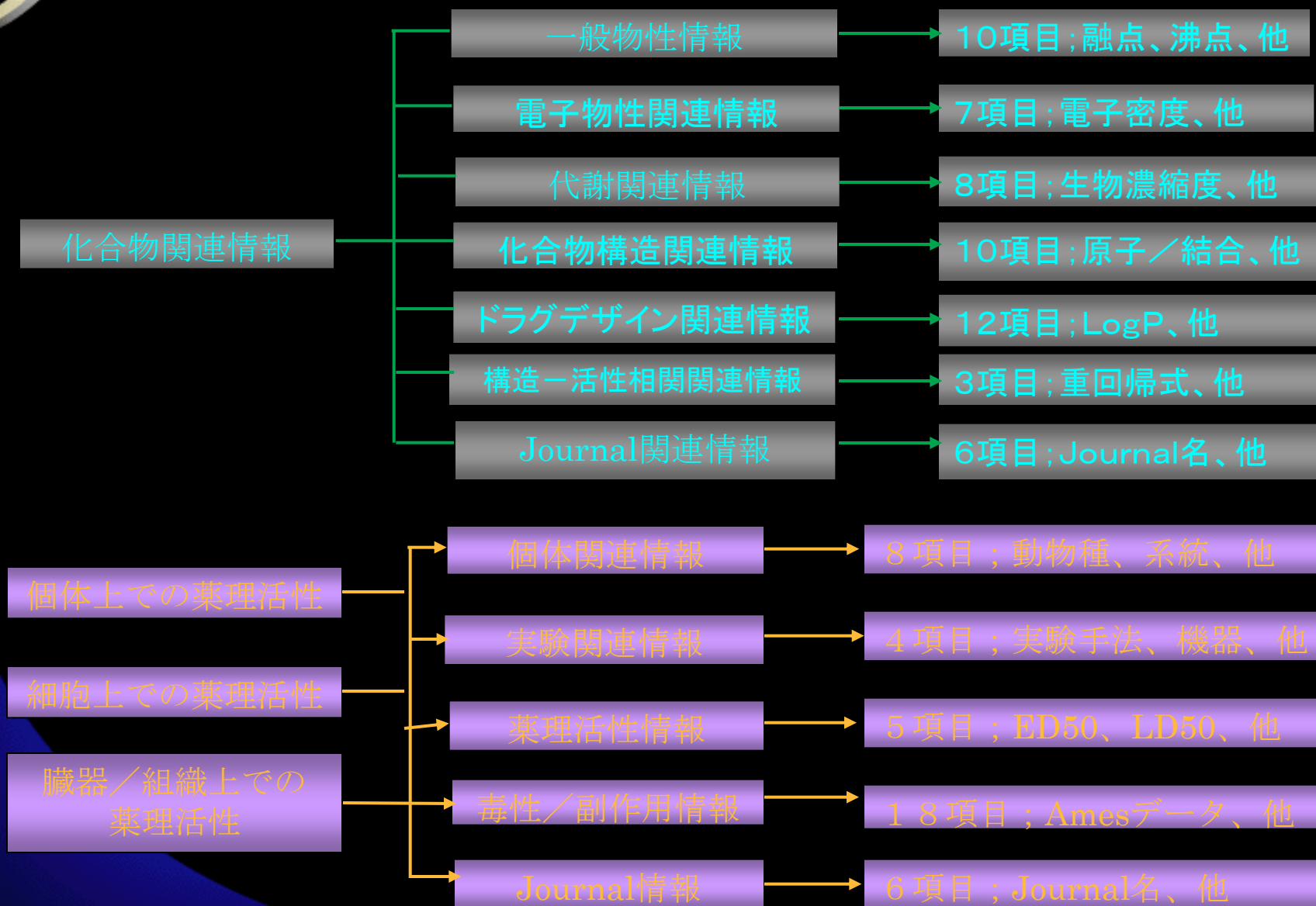
- 蛋白ID番号
- 蛋白名
- 蛋白構造情報
 - ・3次元構造
- リガンド化合物情報
 - ・化合物名
 - ・登録データベース名
 - ・登録ID番号
- ターゲット疾病
 - ・モードオブアクション
 - ・実験動物
- 文献情報
- その他

薬理活性

(毒性／副作用含む)

- 種々薬理活性情報
- 実験条件
 - ・実験プロトコール
 - ・実験動物情報
(age, sex, weight, others)
 - ・投与情報
(投与期間、投与手法、投与量、他)
 - ・他
- 毒性情報
 - ・AMES変異原性テスト
 - ・発癌性テスト
- 副作用情報
- 文献情報
- その他

化合物、薬理活性関連データ構成



統合データベース出力画面

薬理データベース - Microsoft Internet Explorer

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

戻る 進む 検索 印刷

薬理データベース

- ◆ [遺伝子発現プログラム](#)
- ◆ [薬理データベーストップページ](#)

検索

- ◆ [化合物基本情報による検索](#)

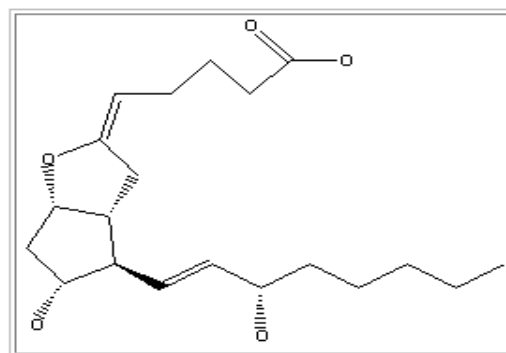
関連情報

- ◆ [化合物関連](#)
- ◆ [蛋白質関連](#)
- ◆ [薬理関連](#)

関連WEBサイト

- ◆ [NEDO](#)
- ◆ [JBIC](#)
- ◆ [その他のサイト](#)

発現プロフィール解析プロジェクト



化合物名1
IUPAC名1
CAS名1

化合物関連情報

一般物性

沸点	-
融点	-
気圧	-
分子屈折率	-
密度	-
粘性	-
分子量	-
パラコール	-
分子表面積	-
分子容	-

ページが表示されました

イントラネット

統合データベース出力画面

薬理データベース - Microsoft Internet Explorer

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

戻る 進む 検索 印刷 複製 貼り付け

薬理データベース

- ◆ [遺伝子発現プログラム](#)
- ◆ [薬理データベーストップページ](#)

検索

- ◆ [化合物基本情報による検索](#)

関連情報

- ◆ [化合物関連](#)
- ◆ [蛋白質関連](#)
- ◆ [薬理関連](#)

関連WEBサイト

- ◆ [NEDO](#)
- ◆ [JBIC](#)
- ◆ [その他のサイト](#)

発現プロフィール解析プロジェクト

化合物基本情報

化合物ID	化合物名	IUPAC名	CAS番号
0001	化合物名1	IUPAC名1	CAS名1

一般物性情報

沸点	融点	気圧	分子屈折率	密度	粘性	分子量	パラコール	分子表面積	分子容	コメント
1000	1000	100	200	300	400	500	600	700	800	

統合データベース出力画面

薬理データベース - Microsoft Internet Explorer

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)



薬理データベース

- ◆ [遺伝子発現プログラム](#)
- ◆ [薬理データベーストップページ](#)

検索

- ◆ [化合物基本情報による検索](#)

関連情報

- ◆ [化合物関連](#)
- ◆ [蛋白質関連](#)
- ◆ [薬理関連](#)

関連WEBサイト

- ◆ [NEDO](#)
- ◆ [JBIC](#)
- ◆ [その他のサイト](#)

発現プロフィール解析プロジェクト

化合物関連情報

化合物ID	<input type="text"/>
化合物名	<input type="text"/>
IUPAC名	<input type="text"/>
CAS番号	<input type="text"/>

統合データベース出力画面

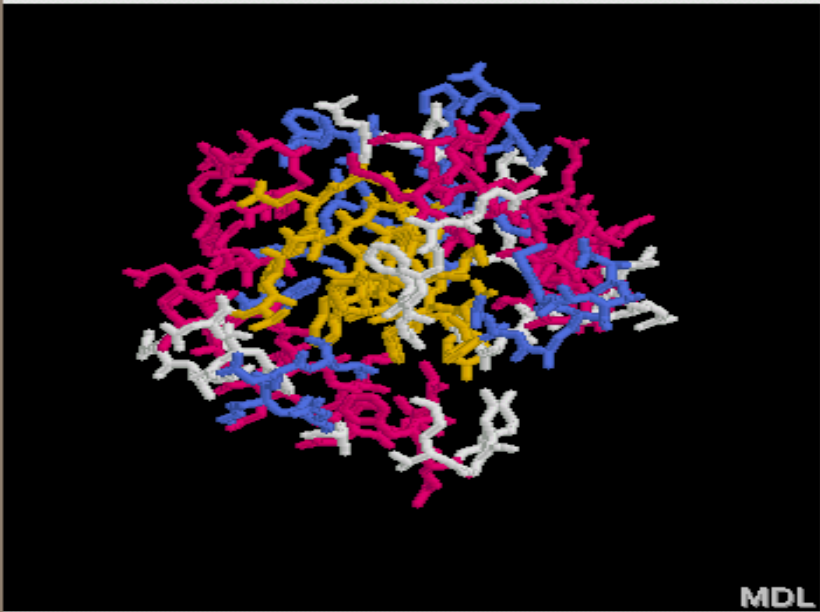
◆発現プロフィールデータベース◆ - Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

アドレス(D) G#作成書類 2000~#プロジェクト#バイオ関連#発現プロフィー 移動

リンク リンク集 Hotmail の無料サービス Internet Explorer ニュース Windows インターネットの開始 チャンネル ガイド

Two Component Signal Transduction



MDL

The images displayed in this frame require the [Chemscape Chime](#) plug-in.

Coordinates from 2che.pdb, and others.

退任子発現解析プログラム

薬理データベース
トップページ

関連情報

- 化合物関連
- 蛋白質関連
- 薬理関連

情報ソース一覧

- データベース
- 文献
- その他

関連WEBサイト

- [NEDO](#)
- [JBIC](#)
- [その他のサイト](#)

本画面は開発前のβ版を利用

file:///G:/作成書類 2000~/プロジェクト/バイオ関連/発現プロフィール解析/Nedo/発現解析/System1/.html 不明なゾーン (混在)

EXCELを用いたデータ登録ツール

Microsoft Excel - datasheet-PH.xls

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 挿入(I) 書式(O) ツール(T) データ(D) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)

MS Pゴシック 11 B I U

H32 = 1

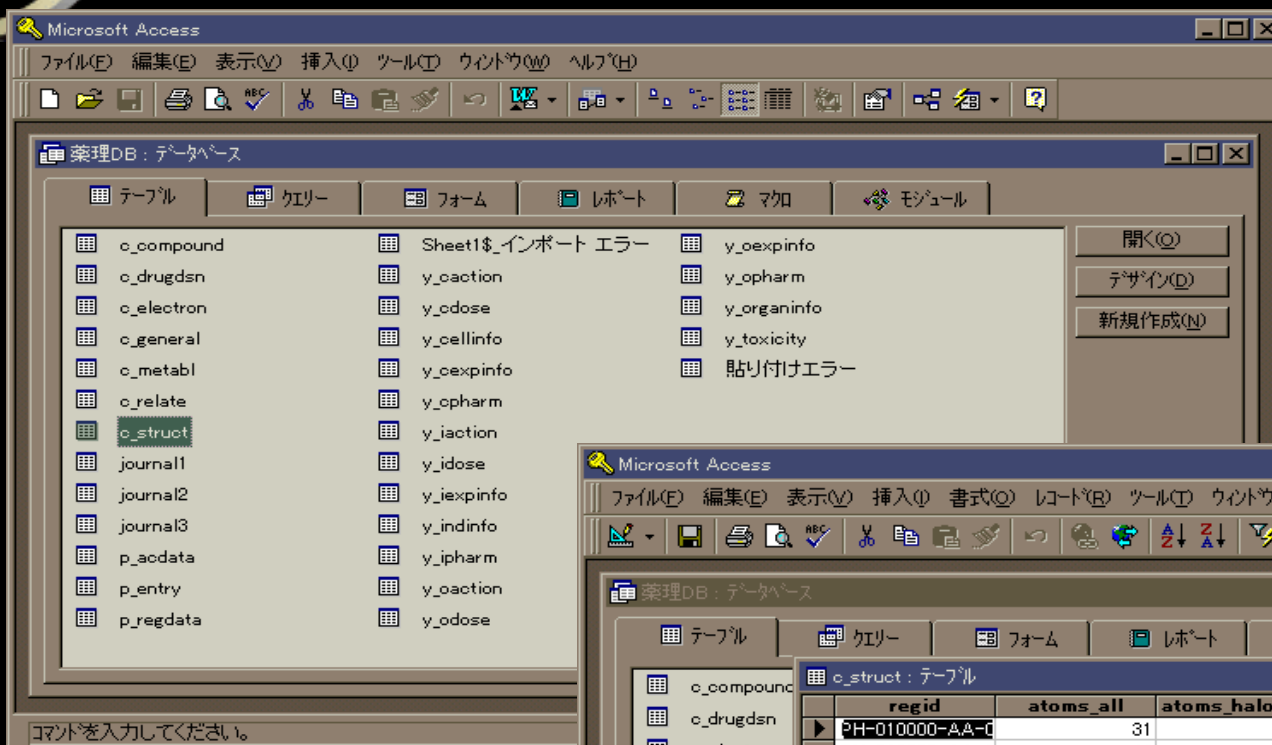
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
	regid	atoms_all	atoms halogen	atoms hetero	atoms hydro	ring_total	ring_aroma	ring_alpha	moment x	moment y	momer
1	PH-010000-AA-0001-00	31	2	6	10	3	2	1	498.448151	330.633606	307.
2	PH-010000-AA-0002-00	46	0	4	23	3	3	0	816.702576	698.766968	141.
3	PH-010000-AA-0003-00	26	0	10	7	3	3	0	396.536255	289.647308	150.
4	PH-010000-AA-0004-00	48	6	14	14	2	2	0	7480.842773	7229.769043	1533.
5	PH-010000-AA-0005-00	22	0	3	13	0	0	0	107.543007	98.226189	30.
6	PH-010000-AA-0006-00	47	0	4	24	6	1	5	479.845764	418.657776	139.
7	PH-010000-AA-0007-00	20	0	6	8	1	0	1	146.8237	122.678642	62.
8	PH-010000-AA-0008-00	21	0	4	8	1	1	0	168.918747	111.699936	73.
9	PH-010000-AA-0009-00	19	0	9	6	1	1	0	284.42572	258.352356	43.
10	PH-010000-AA-0010-00	20	0	3	9	1	1	0	167.8255	149.470261	25.
11	PH-010000-AA-0011-00	42	0	7	20	2	1	1	828.424133	669.135925	229.
12	PH-010000-AA-0012-00	29	3	9	9	1	1	0	1123.355225	620.931152	593.
13	PH-010000-AA-0013-00	23	0	3	11	1	1	0	222.348221	191.139786	32.
14	PH-010000-AA-0014-00	139	0	18	74	2	0	2	9797.461914	9122.446289	1072.
15	PH-010000-AA-0015-00	38	1	5	16	4	2	2	570.658752	351.569366	304.
16	PH-010000-AA-0016-00	44	0	9	19	3	1	2	905.197754	846.05481	231.
17	PH-010000-AA-0017-00	37	0	5	20	1	0	1	332.011261	308.331177	127.
18	PH-010000-AA-0018-00	21	0	10	7	1	0	1	269.316589	192.333405	115.
19	PH-010000-AA-0019-00	59	0	5	34	1	0	1	1412.662598	910.264526	559.
20	PH-010000-AA-0020-00	14	0	5	4	2	2	0	93.53109	57.554424	35.
21	PH-010000-AA-0021-00	15	0	2	6	1	1	0	91.114319	69.613121	21.
22	PH-010000-AA-0022-00	56	0	3	28	5	2	3	1527.741089	1475.146484	112.
23	PH-010000-AA-0023-00	26	0	3	12	2	1	1	215.642105	172.595001	51.
24	PH-010000-AA-0024-00	43	0	8	19	3	1	2	886.944397	809.522949	178.
25	PH-010000-AA-0025-00	29	3	9	9	1	1	0	1138.144531	628.615112	580.
26	PH-010000-AA-0026-00	57	6	17	18	2	2	0	10694.4375	9589.353516	1313.
27	PH-010000-AA-0027-00	29	3	6	12	1	1	0	1094.311279	728.556763	473.
28	PH-010000-AA-0028-00	20	0	4	10	2	0	2	88.107437	66.700638	38.
29	PH-010000-AA-0029-00	17	0	4	7	1	1	0	102.360298	88.558395	32.
30	PH-010000-AA-0030-00	12	0	1	8	0	0	0	17.385767	10.325314	9.

図形の調整(R) オートシェイプ(W)

マント

CAPS NUM

ACCESSを用いたRDBへのデータ登録



Microsoft Access

薬理DB: データベース

c_struct: テーブル

regid	atoms_all	atoms_halogen	atoms_hetero	atoms_hydro	ring_total
PH-010000-AA-C	31	2	6	10	3
PH-010000-AA-C	46	0	4	23	3
PH-010000-AA-C	26	0	10	7	3
PH-010000-AA-C	48	6	14	14	2
PH-010000-AA-C	22	0	3	13	0
PH-010000-AA-C	47	0	4	24	6
PH-010000-AA-C	20	0	6	8	1
PH-010000-AA-C	21	0	4	8	1
PH-010000-AA-C	19	0	9	6	1
PH-010000-AA-C	20	0	3	9	1
PH-010000-AA-C	42	0	7	20	2
PH-010000-AA-C	29	3	9	9	1
PH-010000-AA-C	23	0	3	11	1
PH-010000-AA-C	139	0	18	74	2
PH-010000-AA-C	38	1	5	16	4
PH-010000-AA-C	44	0	9	19	3
PH-010000-AA-C	37	0	5	20	1
PH-010000-AA-C	21	0	10	7	1
PH-010000-AA-C	59	0	5	34	1

データシートビュー

CAPS NUM

データベース登録医薬品数

■ 総計: 584 医薬品

1. 発現プロフィールプロジェクトで利用される医薬品群

→ 17 医薬品

2. 日本薬局方記載の医薬品群

→ 256 医薬品

3. 日本医薬品集(日本医薬情報センター編)

→ 311 医薬品

統合データベースのまとめ

情報の個別管理

情報の独立性が高い

情報収集の遅れ

異種データ間の
連携操作困難



情報の統一管理

情報の連携強化

情報収集のタイムリー性

連携操作の簡便化

統合データベースの今後の展開



データ



RDB



ネットワーク

- ・コンテンツ拡充
- ・データ項目の充実
- ・新規分野の取りこみ
臨床、治療データ等

- ・他DBとの連携
- ・外部ソフトとの連携
- ・XML化の推進

- ・GUIの改良
- ・プラグイン機能