

## 研究開発課題別事後評価結果

### ▶ 課題情報

研究開発課題名	ゲノムとフェノタイプ・疾患・医薬品の統合データベース
研究代表名	金久 實

### ▶ 事後評価結果

1.実施計画の達成度	<p>KEGG MEDICUS を研究開発対象とし、1)疾患情報のデータベースの開発、2)医薬品情報のデータベースの開発、3)統合インターフェースの開発を研究開発項目に掲げて実施された。</p> <p>1)について、疾患情報のデータベースである KEGG DISEASE データベースを拡充した。医薬品との対応づけに必要な疾患エントリー数として、当初 600 件超のエントリーを新規追加することを目標としたが、研究開発終了時までには 400 件超の追加となる見込みである。これは、論文と医薬品添付文書との間で疾患の定義の不整合が明らかになり、既存のエントリーを含めて見直すよう計画変更を行ったためである。また、文献情報をもとに病原体ゲノムから薬剤耐性を推定するため、新たに、特徴的な遺伝子配列パターン(シグネチャーKO)と特徴的な複数遺伝子セット(シグネチャーモジュール)をデータベース化した。</p> <p>2)について、日米欧の医薬品の有効成分を網羅した KEGG DRUG データベースに対し、新薬等のエントリーの追加、既存エントリーの見直し、日米の医薬品添付文書との統合を行った。また、医薬品の作用・副作用を標的分子、薬物代謝酵素、その遺伝子多型などを含むネットワークの中で理解するために、医薬品相互作用ユニットの考え方を導入し、医薬品のオーソログに相当する医薬品グループを定義した KEGG DGROUP データベースを新規に開発した。</p> <p>3)について、1)で収集したシグネチャーのデータを用いた、病原体ゲノムから薬剤耐性を推定する Pathogen Checker の開発を行った。また、医薬品相互作用チェックツールの新しいバージョンを開発し、2)で開発した医薬品グループを用いる形に変更した。さらに KEGG DISEASE の情報をゲノムその他の大量データ解析で有効利用するための Disease mapping ツールの開発を行った。□上記から、実施計画は全て達成された。</p>
2.生命科学研究所への波及効果	<p>月間訪問ユニークIPアドレスは、期間中、約 30 万件と非常に多い数値で推移した。最終年度の平成 28 年度は前年度に比べてわずかに減少しているが、これは KEGG MEDICUS の訪問者の主な流入元である Web 検索サービスのアルゴリズムに変更があったためである。また、医薬品有効成分の有効な組み合わせの探索など、本データベースを利用した興味深い活用事例も出てきている。今後、医薬分野への系統的な代謝・ゲノム情報の提供元として、貢献が期待される。</p>
3.研究開発課題の運営	<p>単一の研究グループで組織され、研究代表者のリーダーシップのもと、当初方針に沿った統一的な運営がなされた。また、外部の医薬品関係者とのミーティングも適宜開催された。</p>
4.その他特記すべ	<p>研究者コミュニティとの連携は、学会発表、NPO 法人とのシンポジウムとの共催を通じ、</p>

き事項	KEGG の他のデータベースと合わせて実施された。また、医薬品業界、薬学研究コミュニティとのミーティングを通し、利用者ニーズを収集した。
5.総合評価	<p>本研究開発課題は、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、最先端の研究と一般社会との架け橋とすることを旨とする KEGG MEDICUS を対象とし、特に研究者コミュニティに対して医療・創薬等で研究成果の実用化を支援するためのリソース提供機能の強化を重視して実施された。実施計画はほぼ達成され、研究コミュニティや医療関係者、一般社会に広く有用なデータベースが構築されたことは評価できる。KEGG を医薬分野へ向けてさらに拡充、進化させる本研究開発課題の意義は大きく、今後、生命科学におけるさらに多くの研究分野での有効利用が期待される。</p> <p>しかし、研究員のアノテーションに基づく手入力を基本にしているデータベース構築は内容の信頼性を高める一方で、今後の継続性を考える際の障壁ともなる。今後 KEGG を維持・発展させていくために、外部有識者との意見交換も踏まえつつ、将来的な方向性について道筋を付けていただきたい。</p>