

⑧ 知識データベースの構築 (LINC 内番号 : PJ30)

AI システムの概要

AI の学習用に必要なデータベース、辞書などを、創薬の上流から下流までの各ステップと関連付けて整頓し、また LINC の各プロジェクトで作成されたデータセット等を LINC 内で共有できる仕組みを整えた。

The image shows two overlapping screenshots of the LINC (Life Intelligence Connective) website. The top screenshot displays the 'Database List' page, which features a search bar, a 'Show 25 entries' dropdown, and a table of databases. The table columns include Name, Domain, Entity, Type of Data, and Related Database. The bottom screenshot shows the 'Database Detail' page for 'ChEMBL', providing information such as its URL, description, domain (biological), entity (ligand, metabolite, etc.), type of data (ontology-based), and related databases like UniChem.

Name	Domain	Entity	Type of Data	Related Database	LINC PJ
BioThesaurus	辞書/オントロジー	タンパク質	オントロジー/用語/命名法	UniProt, NCBI-Gene, PIR-PSD, Refseq, HGNC, SGD, MGI, RGD, FLY, Wormbase, OMIM, EC number	
ChEMBL	化合物	糖類, 脂質, 代謝物, 化学物質, 薬	活性/副作用, オントロジー/用語/命名法	UniChem	
Chemeo	化合物	化学物質	物性		
Chemical reactions from US patents (1978-Sep2016)	文献	化学物質	反応, データ		
ClinicalTrial.gov	臨床試験/電子カルテ	薬	分類, 活性/副作用		
ClinVar	ゲノム	ゲノム/遺伝子, 遺伝的多様性	表現型, 書誌/ブログ/SNS		
COD (Crystallography Open Database)	化合物	化学物質	3D構造, 化学		
Cortellis	化合物	化学物質, 薬	統合データ		

AI システムの社会応用可能性

AI 構築に必要なデータベース、辞書などを、創薬のプロセスに沿って見つけることができる環境を提供し、AI システム構築への貢献が期待できる。

参画メンバー (企業、アカデミア)

アステラス製薬(株)、塩野義製薬(株)、第一三共グループ、大正製薬(株)、中外製薬(株)、帝人ファーマ(株)、東レ(株)、(株)FRONTEO ヘルスケア、三井情報(株)、三菱スペース・ソフトウェア(株) (国研) 医薬基盤・健康・栄養研究所、京都大学大学院、(公財) 神戸医療産業都市推進機構、(国研) 理化学研究所