

## 1. BERTによる PubMedの解釈と毒性、疾患標的への活用

緑川 淳 (株式会社ワールドフュージョン)

[【CBI2022\\_LSKB.pdf】](#)

Life Science Knowledge Bank (LSKB) は 遺伝子, タンパク質, 疾患, 化合物, 組織などの情報を整理し、広範な関係性情報を搭載しています。自然言語解釈を行うAI 手法 BERT を用いて、LSKB搭載のPubMed 解析データの関係性の解釈と、その関係性を分類した クラス情報を追加しました。これにより、疾患⇄ターゲット間の文献記載情報を解釈し、その関係性のクラス分類を加えたことで、疾患評価のみならず、Biomarkerの探索にも有用性が広がりました。これらの更新により、さらなる疾患標的探索、毒性、副作用などとリンクするSafety Targetsの探索への応用が期待できます。

## 2. 次世代ゼブラフィッシュ発生毒性とLSKB毒性機構解析システム

田中 利男 先生 (三重大学院医学系研究科)

[【221026CBIwf.pdf】](#)

ポストゲノムシーケンス時代において、ゲノム創薬が重大な困難性に直面しています。現代医学が治せない難病（アンメットメディカルニーズ）に対する分子標的薬の成功率が低いことがわかりました。First in Classにおいては、創薬ターゲットを基盤としたリバーズ薬理学よりも、むしろフェノタイプスクリーニングにより実現しています。この困難を克服するためのフェノミクス薬理学を可能とする新しい推進エンジンとしてゼブラフィッシュ創薬システムを創生し、真のシステムズ薬理学とフェノミクス個別化医療を実現することをゴールとしております。システムズ薬理学は、薬理学とシステムズ生物学を統合した新しい革新的研究開発領域であり、現在なお不治の難病の治療を初めて可能にする医学最大のゴールに貢献します。

今回、ゼブラフィッシュによる発生毒性試験のメリットと LSKBを用いた解析についてご紹介します。

## 2. タンパク質情報の高次利用とWorkflowによる効率化

緑川 淳 (株式会社ワールドフュージョン)

[【CBI2022\\_LSKB\\_タンパク質情報の高次利用とWorkflowによる効率化.pdf】](#)

医薬品開発において、新しいモダリティが増えたことで、より疾患標的の重要性が増しています。LSKBにおける標的タンパク質の探索や、タンパク質に紐づく情報に新しい情報を加えて連携することで、新たな疾患との関連性や 活性化化合物、Safety Target探索の拡張に応用できます。さらに、統合計算化学ソフトウェアとの連携を強化し、Workflowによる更なる効率化について、本セッションでご紹介します。

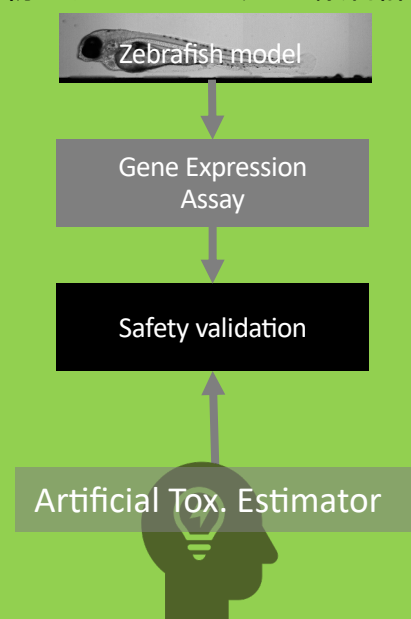
### オントロジーとBERTで新しいインシリコ評価系構築



### 未知のターゲット間の関連性により探索範囲を拡大



### 動物モデルとインシリコの融合評価



## Target Explorer

疾患リストから12のデータベースを参照しながらターゲットを探索

## Disease Explorer

遺伝子やターゲット集団をクエリーに、12のデータベースを参照しながら疾患を探索

## Mechanism Explorer

化合物構造からターゲット予測、類似性によりターゲットを拡張し、生物学的機能とともに発現データと比較、化合物により起こった事象の原因を探索

## GO-MoA

MoAと疾患の関連により構築された生物学的機能に関連する疾患のデータを利用して、疾患から機能的に予測される新しいターゲットや化合物を探索

## Target Prediction

化合物構造からアッセイ情報のある化合物の構造類似性で検索、化合物が活性をもつタンパク質を探す

## Similar Protein

ポケットの形状類似性とアミノ酸配列の類似性を利用して探索範囲を広げ、活性候補化合物の取得や疾患関連標的の探索

## Expression analysis

安全性に関する遺伝子セットなどを準備し、GSEA解析から安全なターゲットを探索。MoAデータベースも利用できることが特徴

## Workflow tool

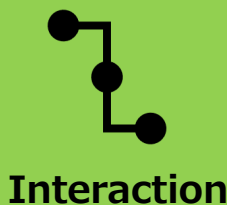
目的とするデータ収集や処理の自動化、独自の探索ルールを作成し、LSKBのデータベースを最大限に活用できる探索ツール

## ElpisMap

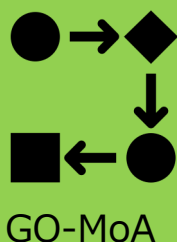
LSKB 搭載データと 自社活性データとの比較が容易な意思決定支援ツール



- Chemical : 101,642,742
- Disease : 220,137
- Function : 65,972
- Gene : 565,726
- Organ : 89,156
- Phenotype : 20,589
- Taxonomy : 2,351,574



- Created by Text mining
- Created by Assay data
- MoA and GO-MoA data
- GO and Pathway
- Created by AI
- MoA, GeneRIF, PubMed



- 12,973 diseases related biological function
- 99,610 combination of GO-MoA
- 12,731 drugs and 2,164 targets are included.
- 2,042 considerable human targets
- 4,019 considerable drugs
- 750k active compounds to the targets

お問い合わせはこちらへ

株式会社ワールドフュージョン  
<https://www.lskb.jp/contact>

