

安全性研究支援機能をLSKBに搭載予定

LSKB: 創薬支援、安全性研究支援、マルチオミックス解析 プラットフォーム

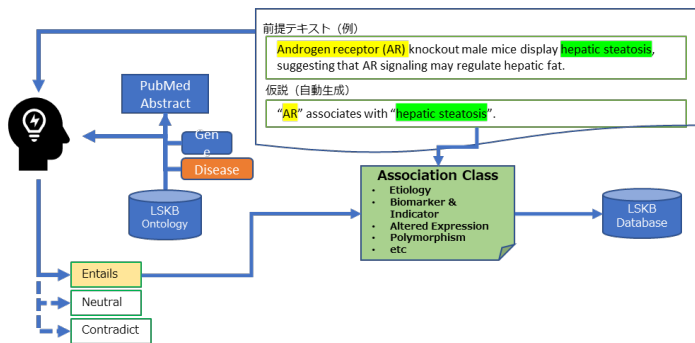
LSKB (Life Science Knowledge Bank)は多くの製薬会社様にターゲット探索用、創薬支援ナレッジソリューションとして利用して頂いています。

LSKBは、創薬研究に適したオントロジーと、相互作用データ、構造を含む化合物情報を搭載、さらにタンパク質のポケット類似性などを利用した解析結果を搭載、独自の探索経路により疾患やターゲットと化合物を探索する機能でドラッグ・リポジショニングなどに応用できます。深層学習で構築した、MoA(作用機序)をもとに、ターゲットや化合物の関係を求めたり、複雑なデータ処理を可能にするワークフロー、意思決定支援ツールなど、さまざまなツールを搭載しています。今後、さらなる進化として安全性領域の情報を搭載する予定です。以下に簡単ですが、搭載予定の機能を抜粋します。

- ✓ 関連情報から疾患のターゲットタンパク質と候補化合物を探す
- ✓ 有意な生物学的機能からターゲット遺伝子と候補化合物の探索
- ✓ 公共発現データやシーケンスアーカイブ(SRA)を探す
- ✓ 疾患に関連付けられたSNPsや遺伝子を探す
- ✓ 疾患や毒性に関連する遺伝子とその関係性から文献を参照する
- ✓ タンパク質のポケット形状類似性を利用した、共通活性化化合物の探索
- ✓ タンパク質のポケット形状類似性を利用した様々な探索

A)による 毒性/副作用 遺伝子関係性の判別

BERTによる遺伝子vs疾患の関係性の判別概要



今回、自然言語解釈を行うAI:BERTを利用し、PubMed やGeneRIFなどの記述から毒性、副作用情報と遺伝子との関係性を判別し、その結果をクラス分けとして搭載、毒性、副作用と関連遺伝子との関係性と各データベースのアノテーションから、多面的な毒性、副作用の標的の調査、探索を可能にしました。

毒性 副作用情報

薬剤の副作用データ、Animal Toxicity および毒性や副作用の関連遺伝子の探索に文献解釈による記述内容の分類、発現変動遺伝子、SNP、データベース搭載情報を取りまとめた遺伝子情報を作成し、毒性に関与する複数のプロセスとそこに寄与する遺伝子をまとめて、原因遺伝子を探る手法を搭載します。

毒性情報表示例

Summary
Annotation
Synonyms [6]
Phenotype [301]
Tissue [205]
SRA [34]
GWAS Catalog [3]
Classification [4]
Drug [4073]
Gene [1311]
SNP [38] [135]
SNP [38] [148]

Toxicity Cardiototoxicity
T037: Injury or Poisoning

Summary (Text)
Toxicity that affects the heart.
[NCI]
Toxicity that impairs or damages the heart. This condition is often caused by the administration of a pharmaceutical agent that initiates a poisonous or toxic response in cardiac tissue.
[NCI]

Toxicity Cardiototoxicity
T037: Injury or Poisoning

Genes

Gene ID	Gene Symbol	Gene Title	Organism	Association Class	# of Literature	# of PubMed Abstract (Association)	# of GeneRIF (Association)	# of GeneRIF (SNP/Indel)	Confidence Score
1	AR	androgen receptor 1	Homo sapiens	Altered Expression (DE) Biomarker & Indicator (BI) Toxicity (TO)	10	22	6	0	0.125
2	AR	androgen receptor 1	Homo sapiens	Altered Expression (DE) Biomarker & Indicator (BI) Toxicity (TO)	10	22	6	0	0.125
3	AR	androgen receptor 1	Homo sapiens	Altered Expression (DE) Biomarker & Indicator (BI) Toxicity (TO)	10	22	6	0	0.125
4	AR	androgen receptor 1	Homo sapiens	Altered Expression (DE) Biomarker & Indicator (BI) Toxicity (TO)	10	22	6	0	0.125
5	AR	androgen receptor 1	Homo sapiens	Altered Expression (DE) Biomarker & Indicator (BI) Toxicity (TO)	10	22	6	0	0.125

遺伝子情報: 文献記載内容の分類

- 毒性・副作用サマリー
- フェノタイプ
- 薬剤、化合物
- GWAS
- 遺伝子
- SNP情報