

LSKB Version 5.2.0 リリースノート

このリリースノートには、「LSKB -Life Science Knowledge Bank」の新機能、問題点の修正などが記載されています。

[トピック]

- 複数の疾患 ID をクエリとして治療ターゲットになる可能性のある遺伝子を優先順位付けしてリスト表示する Target Explorer 機能を追加しました。
- Mechanism of Action や 薬剤のクラスを統合した項目と PathwayやGene Ontologyを統合した項目を作成し、Function として各項目との関連を示す詳細ページを作成しました。
- 化合物の薬剤関連情報を追加しました。
- 臨床試験情報を追加しました。
- Cell-line 情報を Tissue に追加しました。
- 複数（単数）の rsID をクエリとして有意な関係を持つ疾患をリスト表示する機能を追加しました。
- トレンドグラフを辞書ノード詳細ページに追加しました。

[新機能・変更点]

新機能

下記の 18 個の新機能を追加しました。

- Multi Disease ID → Target Explorer

複数の疾患 ID をクエリとして治療ターゲットになる可能性のある遺伝子を優先順位付けしてリスト表示する機能です。

- Multi rsID → Disease

複数の rsID をクエリとして有意な関係を持つ疾患をリスト表示する機能です。

- トレンドグラフ

遺伝子・化合物・疾患・生物種・組織・機能用語詳細ページの右上部にトレンドグラフを追加しました。PubMed 文献 20 年分の内、辞書ノードの語彙が記載されている文献数の推移を視覚的に把握できます。

- Disease 関連 Clinical Trial リスト機能

疾患と関連付けられた Clinical Trial データがリストされます。

当該のリストは Disease Details ページの「Clinical Trial」タブにて参照できます。

- Disease の Classification Tree のグラフィカル表示機能

疾患の Classification Tree をグラフィカルに表示する機能です。

当該のグラフは Disease Details ページの「Classification」タブにて参照できます。

- Chemical 関連 Clinical Trial リスト機能

化合物と関連付けられた Clinical Trial データがリストされます。

当該のリストは Chemical Details ページの「Clinical Trial」タブにて参照できます。

- Chemical 関連 Disease リスト機能

化合物と関連付けられた疾患がリストされます。

当該のリストは Chemical Details ページの「Disease」タブにて参照できます。

- Chemical 関連 ADMET リスト機能

化合物と関連付けられた ADMET データがリストされます。

当該のリストは Chemical Details ページの「ADMET」タブにて参照できます。

- Chemical 関連 Pharmacology 参照機能

化合物に関連付けられた「DailyMed Pharmacological Class」、「ChEMBL Drug Mechanism」、「MeSH Pharmacological Actions」、「CYP 2 Drug」をまとめて参照する機能です。

当該のグラフは Chemical Details の「Pharmacology」タブにて参照できます。

- Gene 関連 Pathway リスト機能

当該の遺伝子が属するパスウェイがリストされます。

当該のリストは Gene Details ページの「Pathway」タブにて参照できます。

- Protein 関連 Drug リスト機能

タンパクと関連付けられた薬剤がリストされます。

当該のリストは Protein Details ページの「Drug」タブにて参照できます。

- Target Keyword/ID (Gene or Protein) → Target Details

キーワードや ID から遺伝子やタンパクを包括的に検索し、詳細情報やリストを表示します。検索対象は、「Gene」、「(UniProt) Protein」、「EC」、「(ChEMBL) Target」となります。

- Function Keyword (Pharmacological Action/MoA/GO/Pathway) → Function Details

キーワードから Function エントリーを検索し、詳細情報を表示します。タブ表示の画面構成になって

いて、「Summary」、「Synonyms」、「Disease」、「Biosystems Gene」、「Biosystems Chemical」、「Biosystems Protein」、「Biosystems References」、「Drug」、「Clinical Trial」のタブがあります。

● Tissue Name → Tissue Details

キーワードから Tissue エントリーを検索し、詳細情報を表示します。タブ表示の画面構成になっていて、「Summary」、「Synonyms」、「ChEMBL Target」、「Disease」、「GEO」のタブがあります。

● テーブルリストフィルター機能のフィルターモード追加

以下ページでのテーブルリストフィルター機能にて複数のフィルター条件を指定した際に、AND/OR の指定が可能となりました。

- Disease Details ページでの SNPs タブ
- Disease Details ページでの Gene タブ
- Disease Details ページでの Drug タブ
- Disease Details ページでの Protein タブ
- Disease Details ページでの Tissue タブ
- Disease Details ページでの Pathway タブ
- Disease Details ページでの GEO タブ
- Chemical Details ページでの GEO タブ
- Tissue Details ページでの Disease タブ
- Tissue Details ページでの GEO タブ

● 疾患リストページでの Send Disease ID 機能

疾患リストページにチェックボックスで選択した Disease ID をメイン画面に send する「Send Disease ID」ボタンと、ヒットした全ての疾患の Disease ID を send する「Send All Disease ID」ボタンを追加しました。

● Tree Browser : EC Tree での Send UniProt EntryName 機能

EC Tree の特定のノード配下に紐づくタンパクの UniProt EntryName をメイン画面に send する機能を追加しました。

● Tree Browser : MeSH Disease Tree での Send Disease ID 機能

MeSH Disease Tree の特定のノード配下に紐づく疾患の Disease ID をメイン画面に send する機能を追加しました。

🌈 変更点

- メインメニューでの遺伝子キーワード・ID をクエリとした以下機能を削除しました。削除した機能は Gene Details ページから利用できます。

- Gene Symbol / Gene Name / Gene ID → Gene (Text Mining)
 - Gene Symbol / Gene Name / Gene ID → Disease (Text Mining)
 - Gene Symbol / Gene Name / Gene ID → Chemical (Text Mining)
 - Gene Symbol / Gene Name / Gene ID → Tissue (Text Mining)
- メインメニューでの化合物キーワード・ID をクエリとした以下機能を削除しました。削除した機能は Chemical Details ページから利用できます。
 - Chemical Name / CAS Number / LSKB CHEM_ID → Gene (Text Mining)
 - Chemical Name / CAS Number / LSKB CHEM_ID → Disease (Text Mining)
 - Chemical Name / CAS Number / LSKB CHEM_ID → Chemical (Text Mining)
 - Chemical Name / CAS Number / LSKB CHEM_ID → Tissue (Text Mining)
 - Chemical Name / CAS Number / LSKB CHEM_ID → Taxonomy (Text Mining)
 - メインメニューでの疾患キーワードをクエリとした以下機能を削除しました。削除した機能は Disease Details ページから利用できます。
 - Disease Name → Gene (Text Mining)
 - Disease Name → Disease (Text Mining)
 - Disease Name → Chemical (Text Mining)
 - Disease Name → Tissue (Text Mining)
 - Disease Name → Taxonomy (Text Mining)
 - メインメニューでの組織キーワードをクエリとした以下機能を削除しました。削除した機能は Tissue Details ページから利用できます。
 - Tissue Name → Gene (Text Mining)
 - Tissue Name → Disease (Text Mining)
 - Tissue Name → Chemical (Text Mining)
 - Tissue Name → Taxonomy (Text Mining)
 - メインメニューでの生物種 ID・キーワードをクエリとした以下機能を削除しました。削除した機能は Taxonomy Details ページから利用できます。
 - Taxonomy Name → Disease (Text Mining)
 - Taxonomy Name → Chemical (Text Mining)
 - Taxonomy Name → Tissue (Text Mining)
 - Taxonomy Name → Taxonomy (Text Mining)

構造検索

- LSKB 外部アプリケーション



[ユーザーインターフェイス]

- メイン画面の「Keyword/ID」タブの検索カテゴリーに「Keyword」が新たに追加されました。
- 全ページの標準ヘッダーの表示を差し替えました。
- Gene・Chemical・Disease・Taxonomy・Tissue・Function Details ページの右上部にトレンドグラフを追加しました。「↑」アイコン押下で非表示となり、「↓」アイコン押下で再表示できます。
- Disease Details ページに「Clinical Trial」タブを追加しました。
- Disease Details ページの「Classification」タブのツリー構造のグラフィカルな表示機能を追加しました。
- Disease Details ページの「Prioritize Target」タブを削除しました。
- Chemical Details ページに「Clinical Trial」、「Disease」、「ADMET」、「Pharmacology」タブを追加しました。
- Gene Details ページに「Pathway」タブを追加しました。
- Protein Details ページに「Drug」タブを追加しました。
- Protein Details ページの「GO」タブの表記を「Function」に変更しました。
- Protein Details ページの「Pfam」タブと、「Interpro」タブを統合して「Domain」タブとしました。
- Tissue Details ページを新設しました。「Summary」、「Synonyms」、「ChEMBL Target」、「Disease」、「GEO」の5つのタブで構成されています。
- Function Details ページを新設しました。「Summary」、「Synonyms」、「Disease」、「Biosystems Gene」、「Biosystems Chemical」、「Biosystems Protein」、「Biosystems References」、「Drug」、「Clinical Trial」の9つのタブで構成されています。

[追加コンテンツ]

- NCBI GeneRIF のサマリデータおよび Description などに対する疾患名をターゲットとしたテキストマイニングデータを追加しました。
- DailyMed の Pharmacological Classification データを追加しました。
- ClinicalTrial.gov のサマリデータを追加しました。また、合わせてサマリと紐づく薬剤や適応症のリレーションデータをキューレーションやテキストマイニングにて追加しました。
- パスウェイから抽出した遺伝子セットを GSEA 遺伝子セットとして追加しました。
- CYP のバリエーションや薬剤へのマッピングデータを追加しました。
- 組織辞書を刷新しました。
- 機能用語辞書を刷新しました。

- 化合物・組織・生物種・機能用語辞書にデスクリプションデータを追加しました。
- 以下の組み合わせの辞書対辞書の文献共起データテーブルを共起の精度と合わせて構築して追加しました。
 - 疾患 – 遺伝子
 - 疾患 – SNPs (rsID)
 - 疾患 – 化合物
- 機能用語辞書刷新に伴い、以下の辞書との組み合わせで共起文献数集計テーブルを構築して追加しました。
 - 機能用語 – 遺伝子
 - 機能用語 – 疾患
 - 機能用語 – 化合物
 - 機能用語 – 組織
 - 機能用語 – 生物種
- 文献や実験などのデータソースによって、以下組み合わせの辞書対辞書のリレーションテーブルを構築して追加しました。
 - 疾患 – タンパク作用機序
 - 疾患 – 機能用語
 - 化合物 – 機能用語