# Elsevier R&D Solutions

# エルゼビア:ライフサイエンスセミナー

Cell、Lancet を初めとして出版社としてのイメージが強いエルゼビアですが、近年は創薬研究をサポートするライフサイエンス製品およびサービスを提供しており、数多くの企業および大学官公庁でご利用いただいております。

本セミナーでは、エルゼビアが提供しているライフサイエンス製品概要/ケーススタディ紹介に加え、大日本住友製薬株式会社インシリコ創薬ラボの吉村慶人様よりご講演いただきます。

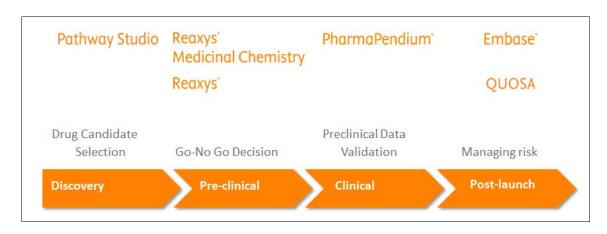
## <<特別講演>>

『Pathway Studio に支えられる診断バイオマーカーの同定』

吉村 慶人 (大日本住友製薬株式会社 インシリコ創薬ラボ)

測定技術の向上により多数の生体分子を同時に定量し得る昨今、診断バイオマーカー探索の鍵は、高次元・小標本の臨床データから真に意味のある因子を如何にして見出すかにあると言える。特に、マルチマーカーに成らざるを得ない複雑な疾患の場合、病理学的知識に基づく因子の組み合わせや因習的な多変量解析が、不十分な精度あるいは汎化性の低いマーカーを往々にして導くことが知られている。この課題に対し、我々は"Factor-Module"という概念を導入し、バイオマーカーの同定に取り組んでいる。ここでいう"Factor-Module"とは、病態進行における変動パターンが共通する複数の生体分子で構成され、それらの分子が発現制御などの生物学的な関係性を有することを意味する。その際、分子間の関係性情報をキュレートした Pathway Studio は、情報の網羅性という観点において他に代替不能なツールに位置づけられる。本発表では、"Factor-Module"法の実例として、非アルコール性脂肪肝炎(NASH)の線維化診断マーカーの同定について紹介する。

#### <<エルゼビア:ライフサイエンスソリューションのご案内>>



## ■Pathway Studio (パスウェイスタジオ)

自然言語処理アルゴリズム(MedScan)を使用し、PubMed アブストラクトおよびライフサイエンス分野 1,600 タイトルの full-text から、分子間相互作用情報を抽出したデータベースを有するパスウェイツールです。対応データは、Mammal、Plant の他に、薬剤情報、疾患情報もオプション追加も可能です。

## ■Reaxys (リアクシス)

化学反応情報と実測物性値を収録した世界最大級の反応・化合物データベースです。有機化学から無機化学、有機金属、錯体化学まで幅広くカバーし、化学者のワークフローに合わせた効率的な検索性を提供します。約 16,000 誌の定期刊行物および特許から情報を収録しています(収録反応数約 4,150 万件、収録化合物数約 2,715 万件、実測物性値 5 億件以上)。また、API や Knime や Pipeline Pilot 上でコンテンツを利用できるノードの提供も行っております。

# ■Reaxys Medicinal Chemistry (リアクシス・メディシナルケミストリー)

約 32 万点の出版物・特許を情報源とした、創薬化学向けデータベースです。化合物とそれに関連したアッセイや生物活性データを中心に約 600 万件の化合物、3,000 万件の生物活性データ、11,000 件以上のターゲットの情報を収録しています。ヒートマップ機能により、異なるソースや分析情報から得られた生物活性データの比較結果を可視化し、新薬候補とターゲット分子の関係性を効率的かつ網羅的に閲覧することも可能です。また、API や Knime や Pipeline Pilot 上でコンテンツを利用できるノードの提供も行っております。

## ■PharmaPendium (ファーマペンディウム)

米国 FDA および欧州 EMA の医薬品承認文書を全文検索可能な形で収録したデータベースです(FDA: 1992 年~、EMA: 1995 年~)。マニュアルインデキシングにより、毒性・副作用の事例がまとめられているため、特定の毒性・副作用の先例を薬剤横断的に閲覧可能です。また、オプションとして FDA 文書は最初の承認薬まで遡って情報検索が可能な Classic Collection、薬物動態データを素早く入手可能な Pharmacokinetics Module、薬剤と代謝酵素・トランスポーターとの相互作用データのための Metabolizing Enzymes and Transporters Module もご提供可能です。

#### ■Embase (エンベース)

薬学・医学を分野向け論文検索ツールです。EMBASE(1974 年以降)と MEDLINE(1951 年以降)を同時に検索し、網羅的かつ信頼性の高い検索結果を提供いたします(重複されたデータは事前削除済)。全てのレコードに付与されたインデックスシステムにより、信頼性の高いハイパフォーマンスな検索を可能にし、学会抄録レコード、被引用情報へのリンク、Triple Linking等の情報も収録しています。

#### ■Elsevier Text Mining (エルゼビア テキストマイニング)

Elsevier Text Mining は、フルテキストを対象にして taxonomy、用語共起、自然言語処理 (Natural Language Processing: NLP) を使い論文情報を検索する製品です。これらの機能を利用することでこれまで非常に困難であった標的分子のシーズとなる情報の検索や新規薬効 (Drug repositioning) および毒性情報の調査の時間を大幅に短縮します。

\_\_\_\_\_

お問い合せ先:

〒106-0044 東京都港区東麻布 1-9-15 東麻布一丁目ビル 4 階

エルゼビア・ジャパン株式会社

E-mail: jp.corporate@elsevier.com

日本語ホームページ: http://www.elsevier.com/jp

\_\_\_\_\_\_

