

KNApSAcK ファミリーデータベースの利用方法：医食同源、食品からのメタボロミクス！

金谷重彦 奈良先端科学技術大学院大学・情報科学研究科

はじめに

「健康をいかに持続し、人生を楽しむか」ということは生活において最も重要な課題である。ヒトは、動植物・微生物から栄養を獲得し恒常性を維持する。すなわち、食物の機能性を考慮し、最適化することによりヒトの健康を維持することができると期待される。

1990 年後半、生物を遺伝子の集合体として理解することを目的に、微生物の全ゲノム配列の決定が進められた。2003 年には、ヒトの全ゲノム配列が決定され、ヒトを遺伝子の集合として記述することが可能となった。その直後に、シドニー・ブレナー博士が日本で講演をしたときに、面白いジョークを言った¹⁾。

「DNA は何の訳だと思う？」

「Don' t (K)Now Anything. 何もわからないってこと。」

DNA だけですべて説明できるほど、

人間は単純じゃない。だからおもしろい。」

つまり、ゲノム配列のみではヒトを理解することはできず、組織・細胞ごとに動的に発現する全ての遺伝子をもとに動的に構築される生体分子を要素に、ヒトをシステムとして理解することを目指した研究が、ゲノミクスを基盤とした研究として展開されている。そこで、登場したのがトランスクリプトーム、プロテオーム、メタボロームである。ここで、オームとは全体と言う意味であり、その学問体系をオミックスと呼ぶ。カレーライスを例に用いてオミックスを整理すると図1のようになる。ヒトの生理活性を右側に、薬用・食用の知識を左側に配置した。ヒトは動物であり、食糧を摂取しないと生きていくことができない。すなわち、自分自身の恒常性を維持するために、有用生物を食物として摂取しなければならない。いま、カレーライスを摂取したとしよう。カレーライスには伝統知識が詰め込まれており、これが薬用・食用知識ベースであり、種々の食材（生物）の配合法が格納される。図1では、クミン、コリアンダー、唐辛子などの情報がこの配合にあたる。それぞれの食材生物には機能性代謝物が含まれる。例えば、クミンについては、クルクミン、クルクモールなどである。食品としての安全性を確保し、これらの機能性代謝物の収量を上げるために、作物のゲノム情報をもとにトランスクリプトーム（細胞全体の遺伝子発現）、プロテオーム（細胞全体のタンパク質）、さらにはメタボローム（細胞全体の代謝物）を最適化することが考えられる。このようにゲノムからメタボロームに至るすべての生体要素により細胞・組織全体を理解する研究分野がマルチ・オミックス(オミックス科学)と呼ばれるアプローチである。

カレーライスに含まれる食材を摂取すると、ヒトへの効能としては、エネルギー代謝促進、抗がん作用などがある(図1右側)。この効能は、おおまかには、食材としての生物から摂取した二次代謝物とヒトのタンパク質の相互作用により、ヒトの代謝が動的に最適化されることにより恒常性が維持される。いま、トウガラシの成分であるカプサイシンはタンパク質 TRPV1 を刺激することが知られており、その結果、ヒトの体内で種々のトランスクリプトーム、プロテオーム、メタボロームが動的に変動し抗がん作用、がん抑制としての機能などを発現することになる。このように、薬用・植物知識、有用生物のオミックス情報、ヒトのオミックス情報を統合的に扱うことにより、食品の機能性を分子レベルで理解することが可能となる。そこで、図1に示した薬用・植物知識ベース(機能性、配合)、有用生物オミックス情報(生物、ゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタボローム)、ヒトオミックス情報(ゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタボローム)さらにヒト生理活性の大量情報を整理するデータベース(DB)が構築されると、ゲノミクス、プロテオミクス、トランスクリプトミクス、メタボロミクスといったオミクス・サイエンスの進展とともに、分子レベルで悉皆的にヒトの健康を理解することが可能になってきた。オミクスと薬用/食用の知識を統合的に扱ったプラットフォーム(図1)に従ってデータベースを構築すれば、社会の最重要課題である「健康」を課題とした食を体系的に検討できる。そこで、メタボローム研究を中心に薬用・植物知識ベース(機能性、配合)、有用生物オミックス情報(生物、ゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタボローム)

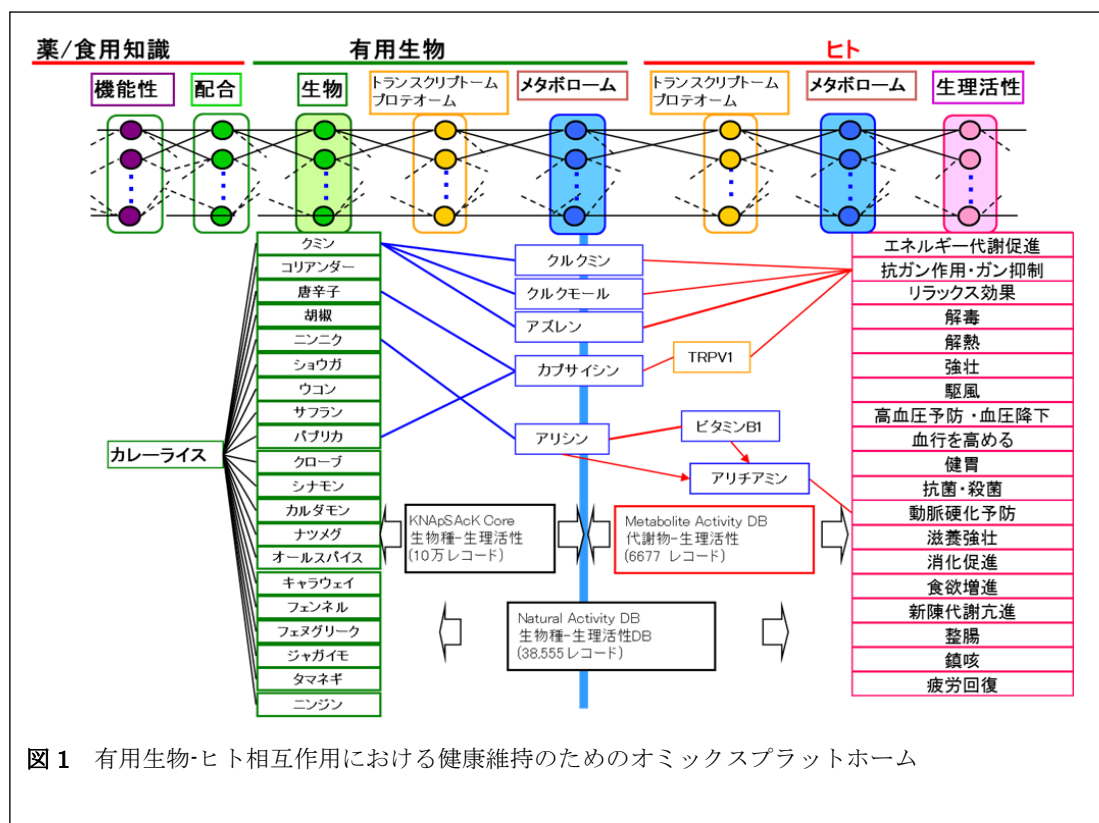


図1 有用生物・ヒト相互作用における健康維持のためのオミックスプラットフォーム

ヒトオミックス情報（ゲノム、トランスクリプトーム、プロテオーム、メタボローム）さらにヒト生理活性を統合的に扱うデータベース KNApSAcK Family DB の構築を進めている²⁻⁹⁾(図 2)。

2013 年 1 月現在、KNApSAcK Family DB には、メタボローム解析支援を目指した KNApSAcK Metabolomics として生物種-代謝物関係データベース KNApSAcK Core、中村建介氏(前橋工科大学)提供による二次代謝物三次元データベース 3D¹⁰⁾、検索エンジンを公開した²⁻¹⁰⁾。また、薬用/植物などの生物の有効利用を目的としたデータベース(主に食用生物に関する DB: Lunch Box、DietNavi、FoodProcessor、DietDish、生薬に関する DB: WorldMap、KAMPO、JAMU、TeaPot、生物活性 DB: Natural Activity, Biological Activity)を構築した²⁻⁹⁾。本稿では食用/薬用植物の多目的使用を目指して開発したデータベースを中心にデータ検索の実習を通して KNApSAcK Family DB を紹介する。

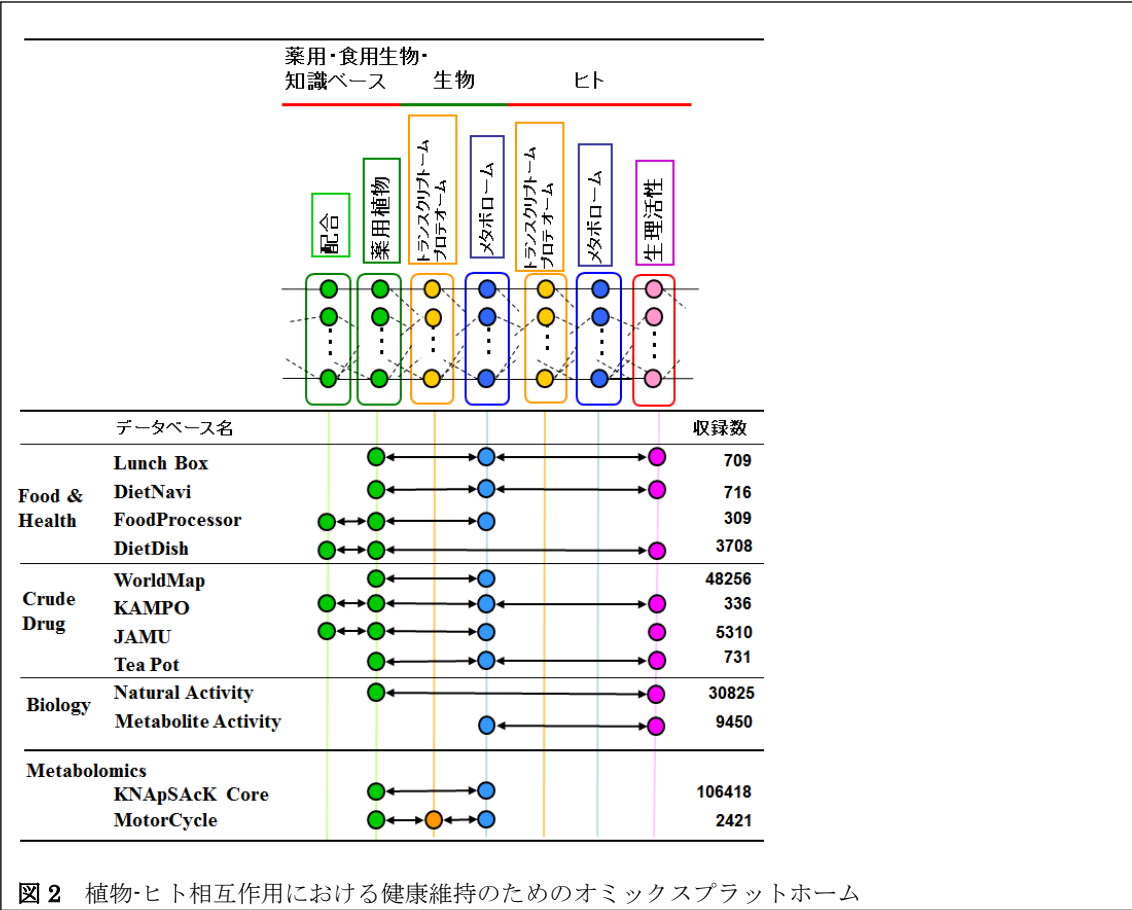


図 2 植物・ヒト相互作用における健康維持のためのオミックスプラットフォーム

1. KNApSAcK Family のメインウィンドウへのアクセス

実習 1: KNApSAcK Family のメインウィンドウにアクセスしよう。

http://kanaya.naist.jp/KNApSAcK_Family/

と入力するか、

検索エンジン、例えば Google において「KNApSAcK Family」と入力する。

すると KNApSAcK Family のメイン・ウィンドウにアクセスできる(図 3)。

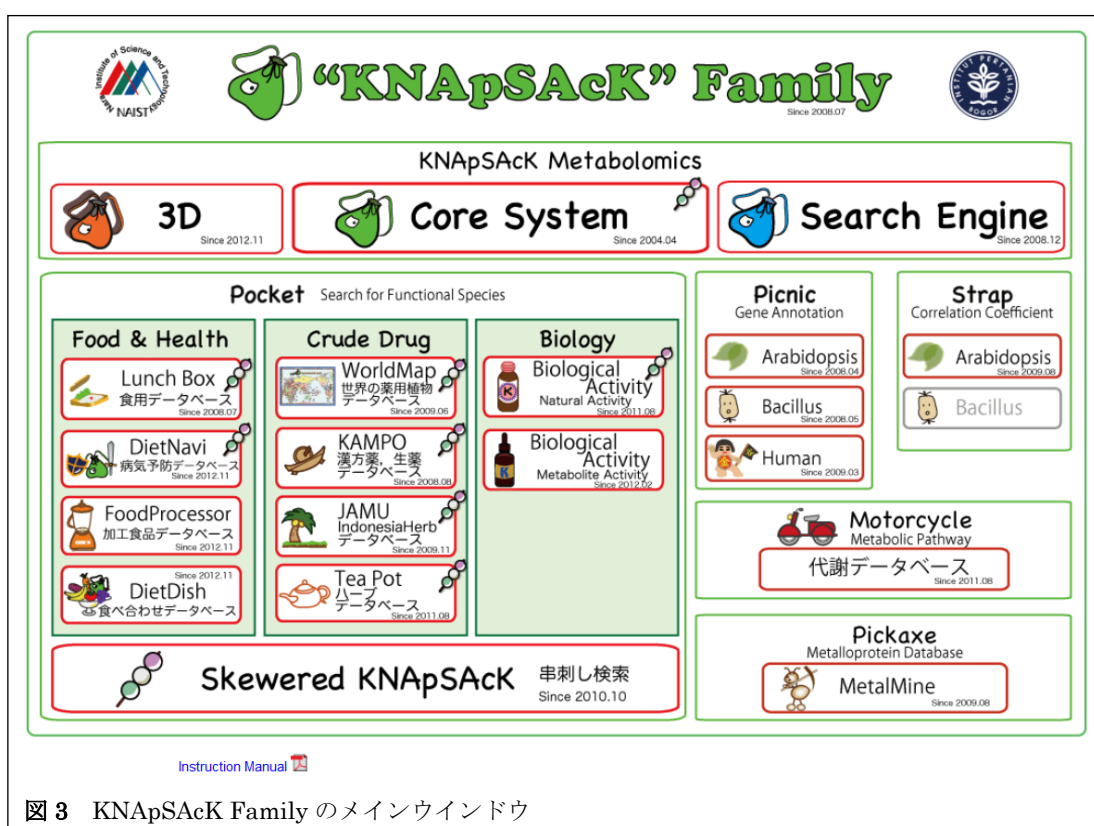


図 3 KNApSAcK Family のメインウィンドウ

2. Pocket Family

メインウインドウにおける Pocket では、機能性食材/薬用植物ならびに植物、代謝物の生物活性のデータベースにアクセスできる。

2.1 Food & Health

Food & Health には、Lunch Box(食用生物 DB)、DietNavi(食材による病気予防 DB)、FoodProcessor(加工食品 DB)、DietDish(食材食べ合わせ DB)の 4 つから構成されている。

2.1.1 Lunch Box

食用植物の情報に関する情報をデータベースにまとめたのが、Lunch Box である。

実習 2: メイン・ウインドウの Lunch Box をクリックする

すると、図 4 のウインドウにアクセスできる。

Take out
"LUNCHBOX"
of KNApSAcK!

Information :

FireFox and Internet Explorer ONLY!
Plural Searches Delimiter is "/" or CR or LF

Lunch Box project has been performed based on Scientific Literatures. So please check details in references notated when you use information on Lunch Box. This web-site is freely available but please cite Lunch Box web site (<http://kanaya.naist.jp/LunchBox/top.jsp>) when you use publications such as scientific paper and so on.

ランチボックスプロジェクトは、基本的に文献情報に基づいて情報を集めています。本ウェブサイトの情報を使用する場合は、引用文献にて情報を確認願います。また、データの研究目的の利用は自由ですが、論文等への引用の際はご連絡をお願いします。

あいまい検索 種名 全件表示 科名 全件表示

Example : ネギ
検索対象は「種名」「学名(一般名)」「科名」
日本語可

Input data :

Search Clear Page Clear

全件表示

List All Page Clear

種名複数検索

Example : Brassica rapa / Diospyros kaki
スラッシュ区切又は改行で入力する
完全一致検索

Input data :

図 4 . Lunch Box

あいまい検索では、日本語でも学名でも食用生物の情報を検索することができる。

全件表示をクリックすると、登録されている全ての食用生物を見ることができる。

実習 3: Lunch Box ウィンドウにおける全件表示をクリックしてみよう。

全件表示を選択すると図 5 に示したリストが得られる(図 6)。

Number of matched data : 709








KNAPSAcK	種名	学名(一般名)	詳細データ
	Abelmoschus esculentus	Abelmoschus esculentus[okra, おくら, オクラ, 秋葵, あめりかねり, アメリカネリ, おかれんこん, オカレンコン, 陸蓮根]	more  9
	Abelmoschus moschatus	Abelmoschus moschatus, Hibiscus abelmoschus[Ambrette, Musk seed, Musk mallow, とろろあおいもどき, トロロアオイモドキ, においとろろあおい, ニオイトロロアオイ, じゃこうあおい, ジャコウアオイ, リゅうぎゅうとろろあおい, リュウキュウトロロアオイ]	more
	Acacia farnesiana	Acacia farnesiana[Prickly Moses, Cassie, ぎんごうかん, キンゴウカン, 金合歡]	more
	Acanthopanax sciadophylloides	Acanthopanax sciadophylloides[こしあぶら, コシアブラ, 濃し油]	more
	Acer nikoense Maxim.	Acer nikoense Maxim., Acer maximowiczianum[ぬぐすりのき, メグスリノキ, 日葉の木, ちょうじゃのき, チョウジャンノキ, 長者の木, せんりかんのき, センリガンノキ, 千里眼の木]	more  6
	Acetobacter ghanensis	Acetobacter ghanensis sp. nov.	more
	Achillea millefolium	Achillea millefolium[Yarrow, milfoil, soldier's woundwort, せいようのこぎりそう, セイヨウノコギリソウ, Yarrow, やらう, ヤロウ]	more  10
	Actinidia chinensis	Actinidia chinensis[kiwifruit, きういふる一つ, キウイフルーツ, おにまたたび, オニマタタビ, ちゅうごくさるなし, チュウゴクサルナシ, しなさるなし, シナサルナシ]	more  3

図 5 全件表示 を選択の結果

左側に KNAPSAcK アイコンがある場合は、二次代謝物の報告例があることを示す。(詳細は KNAPSAcK Core DB で説明する。右側の more を選ぶとより詳細な情報を得ることができる。また右側のカメラのアイコンは詳細情報に画像の情報があることを示す。

実習 4: Lunch Box ウィンドウにおける全件表示の中から「おくら」を選択してみよう。

すると「おくら」の詳細情報が得られる。

Take out
"LUNCHBOX"
of KNAPSAcK! 


大分類	植物	Kingdom	-
種名	 Abelmoschus esculentus	Species	 Abelmoschus esculentus
学名(一般名)	Abelmoschus esculentus[okra, おくら, オクラ, 秋葵, あめりかねり, アメリカネリ, おかれんこん, オカレンコン, 陸蓮根]	Latin Name(Generic Name)	Abelmoschus esculentus[okra]
科名	アオイ科	Family	-
原産	東北アフリカ	Origin	-
日本伝来	幕末から明治初期	Introduction into Japan	-
概説	四訂食品成分表ではβカロテンが600μg/100gに満たず緑黄色野菜には含まれていなかったが、五訂食品成分表では670μg/100gの分析値が示された。季節による変動もほとんどないことから、緑黄色野菜の給源として適する。 [品種]五角種:日本で最も一般的。ミニオクラ:長さ約2から3cm。オクラ幼果。赤オクラ:生だと全体が赤く、ゆでると緑色になる。五角種より粘りが少ない。丸ざやオクラ:さやが丸いもの。五角形のものとは成分は同じ。	Summary	-
食用	ムチン、ペクチン。スタミナ野菜。 刻んでそのまま食べる。和え物、酢の物、サラダ、煮物、炒め物など。 完熟した種子はコーヒー豆の代表品になる。	Edible	-

図 6 「おくら」の詳細情報

さらに、詳細情報の下には画像情報と文部科学省による栄養成分表の情報を得ることができる(図 7)。




Abelmoschus_esculentus(Okra_2).jpg



Abelmoschus_esculentus(Okra_3).jpg




Abelmoschus_esculentus(Okra_5).jpg



Abelmoschus_esculentus(Okra_6).jpg



Abelmoschus_esculentus(Okra_8).jpg



Abelmoschus_esculentus(Okra_9).jpg

文部科学省 五訂増補日本食品標準成分表 可食部100g当たり

食品番号	分類	食品名	エネルギー	エネルギー	水分	タンパク質	脂質	炭水化物	ミネラル(合計)	ミネラル		
			kcal	kJ						ナトリウム	カリウム	カルシウム
			g	g					g	mg	mg	mg
6032	-	オクラ 果実、生	30	126	90.2	2.1	0.2	6.6	0.9	4	260	92
6033	-	オクラ 果実、ゆで	33	138	89.4	2.1	0.1	7.6	0.8	4	280	90

アミノ酸組成表

食品可食部の全窒素1gあたりのアミノ酸組成(mg)

食品番号	分類	食品名	アミノ酸価	イソロイシン(I)	ロイシン(Le)	リジン(L)	含窒アミノ酸(S)	芳香族アミノ酸(A)	スレオニン(Th)	トリプトファン(T)	バリン(V)	ヒスチジン(H)
アミノ酸価評点パターン			100	180	410	360	160	390	210	70	220	120
6032	-	オクラ 果実、生	61Le	150	250	240	150	300	160	81	200	130

図 7 「おくら」の画像情報と文部科学省による栄養成分表の情報

各々の栄養素を多く含む食材は、栄養素の項目を選択することにより得られる。

2.1.2 DietNavi

DietNavi は生活習慣病予防を目標とした食材の情報のデータベースである。

実習 5: メインウインドウの DietNavi を選択してみよう。

すると、主たる生活習慣病の関係の概要を表したウインドウが得られる(図 8)。

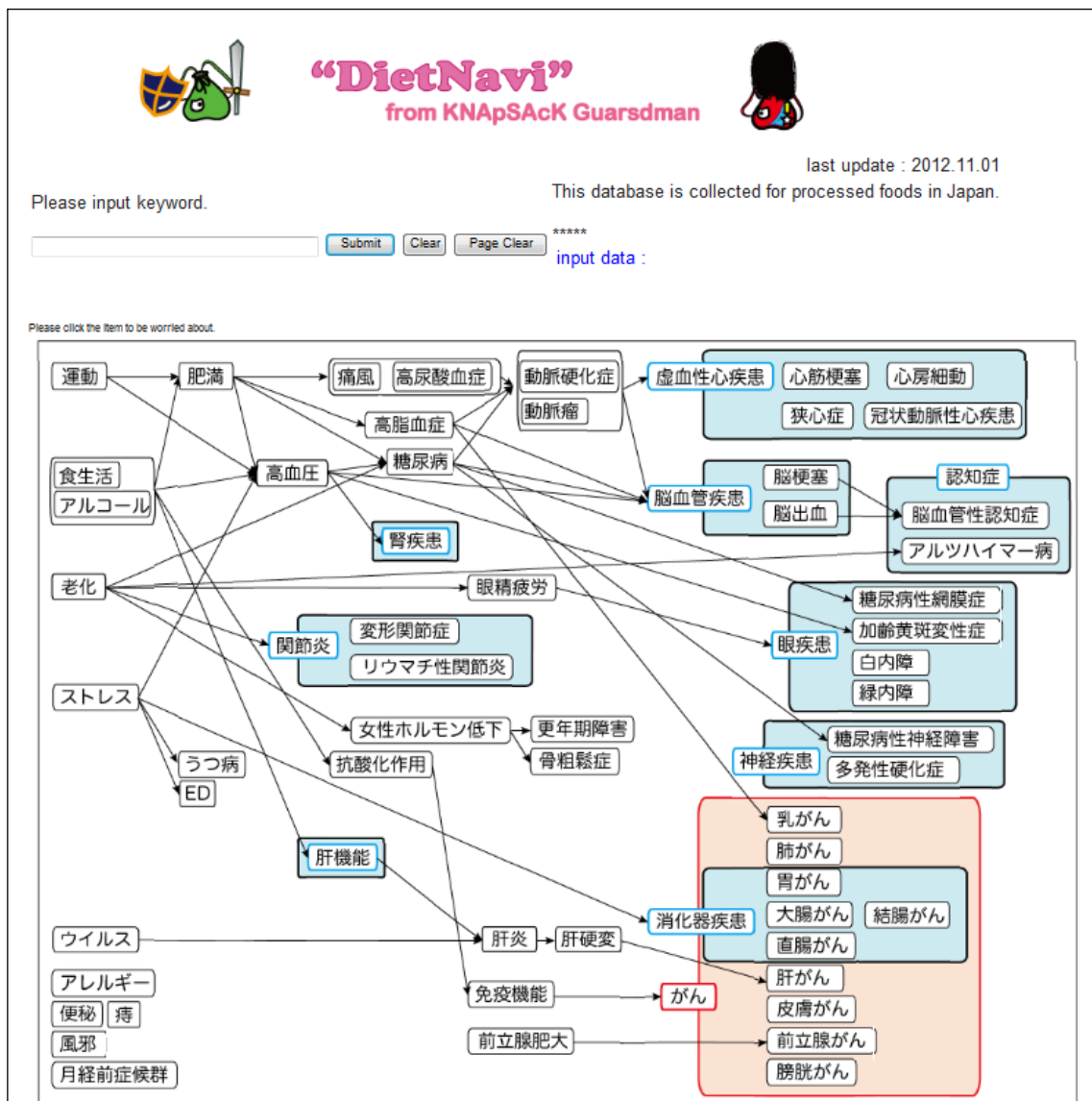


図 8 DietNavi。生活習慣病の関係の概要図(種々の文献をもとに作成)

それぞれの症状をクリックすると、症状を予防するための食材情報と二次代謝物の情報が得られる。

実習 6: 「肝機能」を選択してみよう。

すると、「肝機能」を改善する食材あるいは二次代謝物の情報を得ることができる(図9)。あくまで予防の観点でデータベースを造っているので、病気になったら病院にいきましょう。

図 9 「肝機能」を改善する食材あるいは二次代謝物の情報。

図 9 は「肝機能」を改善する食材あるいは二次代謝物の情報を示しています。図の上部には「DietNavi」のロゴと「from KnapSack Guardsman」の文字があります。図の下部には「Page Topへ」のリンクがあります。

図 9 の内容は、食材の名称、学名、機能、機能性天然物、および文献のリストです。

食品名	学名	機能	機能性天然物	文献
スギナ	<i>Equisetum arvense</i>	心臓病の発症不全のヒトは禁忌。 スギナの長期摂取は控える。 腎臓病の発症や腎臓の失調に使用。 ヨーロッパ伝統療法では、腎臓病の発症や腎臓の失調に使用。 アメリカ先住民の伝統療法では、腎臓病、糖尿病、植物性として使用。 [スギナ茶使用部位]: 葉、採取時期: 4-5 月 効能: 肝臓に付する高い予防効果。 尿の排出を促進する。 尿の量を増やすことで腎臓の改善につながる。糖尿病の改善にも役立つ。 つくかた: 水リットルに茶葉大さじ1-2杯をボットに入れ、火にかけ沸騰し、弱火で7-8分煮ます。	葉緑素 サポニン グイ素	清水俊雄著 糖尿病、がん、肥満など24疾患 食品の効き目辞典 共興文芸(株)医書出版部(2003)
トチュウ	<i>Eucommia ulmoides</i>	降血圧作用に役立つ。 特定保健用食品。 樹皮、葉とも血圧を下げる働き。 高血圧症の配合剤。 肝臓病の発症には肝臓強化作用がある。 長期投与により、肝臓のグリコーゲン含量増加作用を有する。 前駆動物モデルでは肝臓のグリコーゲン含量、および糖代謝能力の改善が認められた。 [トチュウ茶使用部位]: 葉、採取時期: 4-6 月 効能: ガン予防、つくかた: 水リットルに茶葉大さじ1-2杯をボットに入れ、火にかけ沸騰し、弱火で8分煮ます。	グッタベルカ トチュウ配糖体 イリドイド グニボニ酸 タンニン	親田純一郎監修 医者いらずの健康茶 PHF文庫 4-34-1 清水俊雄著 糖尿病、がん、肥満など24疾患 食品の効き目辞典 共興文芸(株)医書出版部(2003)
冬虫夏草	-	サイクロリン(免疫抑制剤)、アミダグロコチン系生物質、サイクロオプスファミド(免疫抑制剤)、プレドニゾロン(ステロイド)などの薬剤との併用を避ける。 肝臓病の発症には肝臓強化作用がある。 長期投与により、肝臓のグリコーゲン含量増加作用を有する。 前駆動物モデルでは肝臓のグリコーゲン含量、および糖代謝能力の改善が認められた。 [冬虫夏草使用部位]: 葉、採取時期: 4-6 月 効能: ガン予防、つくかた: 水リットルに茶葉大さじ1-2杯をボットに入れ、火にかけ沸騰し、弱火で8分煮ます。	コジヒゼン ベータグルタン エルゴステロール オキザリド ガラクトマンナン	清水俊雄著 糖尿病、がん、肥満など24疾患 食品の効き目辞典 共興文芸(株)医書出版部(2003)

図 9 の下部には「Page Topへ」のリンクがあります。

2.1.3 FoodProcessor

スーパーなどに行くと非常に多様な加工食品が陳列されている。レトルト・パウチ食品に代表される加工食品は衛生的であり日持ちもする。これらの食品の情報も考慮して食材を選ぶ時代となってきた。そこで、レトルト・カレーと配合食材の関係をもとに FoodProcessor DB を構築した。

実習 7: メインウインドウの FoodProcessor を選択してみよう。

すると FoodProcessor のページが表示される(図 10)。

図 10 Food Processor

都道府県を選択すると、ご当地カレーの情報が得られる。また、上段のテキストボックスから食材を選択し Submit ボタンをクリックすると、その食材が含まれるカレーを造っている地域にカレー鍋が出現する。

実習 8: 「静岡県」の当地カレーを検索しよう。



静岡県 All data
Number of FoodProcessor data : 9

製品名	市区町村名	製造者	販売者	分類
静岡そだちビーフカレー	浜松市	—	株式会社 鈴代商店 SNI	レトルトカレー
いずみカレー・静岡でダムのかぼちゃカレー	静岡市	—	かんばら口福屋有限会社やましち AKC	レトルトカレー
Hカレー(グリーン)お茶&ココナッツ	浜松市	—	清川孝男(風土屋) BJM	レトルトカレー
Hカレー(オレンジ)みかん&ココナッツ	浜松市	—	清川孝男(風土屋) BJM	レトルトカレー
元気なあさばのお茶カレー・ちよいち	磐田市	—	元気なあさば直売店	レトルトカレー
元気なあさばのお茶カレー・ちよいち	磐田市	—	元気なあさば直売店	レトルトカレー
富士山麓のこカレー	静岡市	—	デリカ・オーバンマリー ABM1	レトルトカレー
伊豆高原ケニーズハウスのカレーソース	伊東市	—	有限会社 ケニーズハウス OTB	レトルトカレー
伊豆高原ケニーズハウスのチキンカレー	伊東市	—	有限会社 ケニーズハウス OTB	レトルトカレー

図 11 「静岡県」のご当地カレー

レトルト・カレーを選択すると、食材の情報を得ることができる。

実習 9: 食材からご当地カレーを検索しよう。

2.1.4 DietDish

いろいろな料理の本を読んでいると、食材間の食べ合わせについて述べられていることが多々ある。そこで、食材の組み合わせから料理を評価することも可能になる。そこで、食材間の食べ合わせ情報をデータベースに整理したのが DietDish である。FoodProcessor におけるレトルトカレーの配合食材データをもとに DietDish の食材組み合わせ検索ができる。

実習 10: 図 11 の「静岡そだちビーフカレー」をクリックしてみよう。

すると、食材の情報を得ることができる (図 12)。

製品名	市区町村名	製造者	販売者	分類
静岡そだちビーフカレー 	浜松市	—	株式会社 鈴代商店 SNI	レトルトカレー
食材	オントロジー	学名	科名	界名
ウスターソース	ウスターソース	—	—	—
カラメル色素	カラメル	—	—	—
カレー粉	カレー粉	—	—	—
甘藷	カンゾウ	Glycyrrhiza uralensis  	Fabaceae	Plantae
小麦粉	コムギ粉	Triticum aestivum  	Poaceae	Plantae
じゃがいも	ジャガイモ	Solanum tuberosum  	Solanaceae	Plantae
オニオンソテー	タマネギ	Allium cepa  	Amaryllidaceae	Plantae
チャツネ	チャツネ	—	—	—
トマトペースト	トマト	Solanum lycopersicum  	Solanaceae	Plantae
バター	バター	—	—	—
酵母エキス	ビール酵母	Saccharomyces cerevisiae 	Saccharomycetaceae	Fungi
加工米粉	加工米粉	—	—	—
食塩	塩	—	—	—
牛エキス	牛肉	Bos taurus 	Bovidae	Animalia
牛肉	牛肉	Bos taurus 	Bovidae	Animalia
砂糖	砂糖	—	—	—
調味料(アミノ酸等)	調味料	—	—	—
豚脂	豚肉	Sus scrofa domesticus 	Suidae	Animalia
香辛料	香辛料	—	—	—
鶏エキス	鶏肉	Gallus gallus domesticus 	Phasianidae	Animalia
鶏ブイヨン	鶏肉	Gallus gallus domesticus 	Phasianidae	Animalia

図 12 静岡そだちビーフカレー

そこで、

実習 11: 図 12 の「静岡そだちビーフカレー」の横の DietNavi のアイコン  をクリックしてみよう。

すると、DietDish の検索ページに「静岡そだちビーフカレー」の食材が入力された状態になる (図 13)。そこで、Search ボタンをクリックすると食べ合わせ情報が得られる (図 14)。



図 13 静岡そだちビーフカレーの食材を入力した状態の DietDish の検索ページ

Serve

“DietDish”

from KNAPsACK

入力データ																	食べ合わせ 得点	効能	文献	
ウスターソース	カラメル	カレー粉	カンゾウ	コムギ粉	ジャガイモ	タマネギ	チャツネ	トマト	バター	ビール酵母	加工濃粉	塩	牛肉	砂糖	調味料	豚肉	香辛料	鶏肉		
								○					○						2 肌荒れ解消	三浦理代, 永山久夫監修, からだよく効く 食材&食べ合わせ手帖, 池田書店(2010)
						○											○		2 疲労回復	三浦理代, 永山久夫監修, からだよく効く 食材&食べ合わせ手帖, 池田書店(2010)
				○													○		2 疲労回復	三浦理代, 永山久夫監修, からだよく効く 食材&食べ合わせ手帖, 池田書店(2010)
												○					○		2 疲労回復	竜崎, 植木もも子監修, 薬膳・漢方 食材&食べ合わせ手帖, 西東社(2012)
								○										○	2 美肌効果	竜崎, 植木もも子監修, 薬膳・漢方 食材&食べ合わせ手帖, 西東社(2012)
				○	○														2 胃の調子を整える	竜崎, 植木もも子監修, 薬膳・漢方 食材&食べ合わせ手帖, 西東社(2012)

図 14 静岡そだちビーフカレーの食材の食べ合わせ。食べ合わせ合計得点は 50 点となった(表示ページの最下段を見る。)

図 14 静岡そだちビーフカレーの食材の食べ合わせ。食べ合わせ合計得点は 50 点となった(表示ページの最下段を見る。)

なお、図 13 の食品リストに DietNavi における食材が記載されている。

2.2 Crude Drug Family

Crude Drug Family は、WorldMap(世界の薬用植物 DB)、KAMPO(漢方処方 DB)、JAMU(インドネシア薬用植物配合 DB)、Tea Pot(ハーブ DB)の四つのデータベースより構成されている。ここでは、WorldMap(世界の薬用植物 DB)、KAMPO(漢方処方 DB)について説明する。

2.2.1 WorldMap

食用/薬用植物を使用している国々を検索するために、KNApSAcK WorldMap データベースを構築した。

実習 12: メインウインドウの WorldMap をクリックしてみよう。

すると WorldMap ウインドウ(図 15)へアクセスできる。

ここで、国旗をクリックすると、その地域で使用している薬用/食用植物の情報が得られる。また、左上のテキストボックスに植物の学名を入力すると、使用国が点灯する。



図 15 KNApSAcK World のメインウインドウ

実習 13: ウコン“*Curcuma longa*”の使用が報告されている国を調べてみよう。

2.2.2 KAMPO

複数の生薬からなる配合生薬を漢方処方という。漢方薬はもともとは中医学の知識をもとにつくられたのだが、江戸時代の鎖国により、中国の生薬が使えなくなり、当時の漢方医の努力で、日本の薬草に置き換えられ、さらに単純なシステムに改良が加えられた。つまり、漢方薬は日本の独自の文化である。漢方処方名から配合生薬、配合生薬から、それが含まれる漢方処方名を検索することを目的に KAMPO データベースを構築した。

実習 14: メインウインドウの KAMPO をクリックしてみよう。

すると KAMPO ウインドウ(図 16)へアクセスできる。

Take out "KAMPO" of KNApSACk

Information :
Firefox or Internet Explorer ONLY!

a.q (適量)とは一日量0.5grから始めて一週間に0.25~0.5grきざみに増量し、3grを極量とする。
cは文献に分量の記載無し。

a.q indicates a quantity of prescription determined as follows; the initial quantity is 0.5 g/day and the quantity gradually increases at the unit of 0.25-0.5 g/day; and the max is 3 g/day.

生薬配合の漢方薬検索 (Group search of medicinal plants)

選択した生薬を含む漢方薬を表示します [You can select medicinal plants in Group List.]

検索対象: [生薬名]: 完全一致検索
複数選択した場合、and検索の結果を表示します
同じグループとして登録された生薬すべての組み合わせで結果を表示します。

[1] Click Group List button.
In Group List,
[2] Check a box for a group of plants.
[3] Click ok button ("OK") (upper side of the window; you can easily move "OK" button by clicking an arrow icon)
Then,
[4] Click search button("Group List")
"AND" search is carried out if selecting multiple groups.

生薬・グループリスト [Group List]

直接入力できません。生薬リストから選択してください。

薬グループ

Search Clear Page Clear

生薬配合の漢方薬検索(学名検索) [Formula search by a medicinal plant]

入力した生薬学名(英語)を含む漢方薬を表示します
同じ学名(英語)で登録されている生薬すべての組み合わせで結果を表示します

検索対象: [生薬学名(英語)]: 語から2単語のみ検索対象
"Foeniculum vulgare Miller" の場合は "Foeniculum vulgare" で検索
複数入力 (and検索) する場合、"/" スラッシュが、改行で区切る
入力例: Foeniculum vulgare Miller/Glycyrrhiza uralensis Fisher

You can select medicinal plants in Herb List.

[1] Click Herb List button
In Herb List,
[2] Check a box for a herb.
[3] Click ok button ("OK") (upper side of the window; you can easily move "OK" button by clicking an arrow icon)
Then,
[4] Click search button. ("Herb List")
"AND" search is carried out if selecting multiple groups.

生薬学名リスト [Herb List]

図 16 KAMPO ウインドウ

漢方処方および生薬名に使用されている漢字には、パソコンで変換するのが難しいものもある。そこで、本検索システムでは、検索対象をリストから選び入力する方式をとっている。

生薬配合から漢方処方を検索するには、生薬・グループリストから生薬を選択し、OK ボタンをクリックする。

例えば、生薬「五味」を含む漢方処方を検索するには、まず、生薬・グループリストの「五味」をチェックし(図 17)、OK ボタンをクリックする。

生薬・グループリスト [Herb Group List]

ok Clear

生薬・グループ名 [Herb Group Name]

<input type="checkbox"/> 五味子グループ	<input checked="" type="checkbox"/> 五味 Schisandra chinensis Billon
	<input type="checkbox"/> 五味子 Schisandra chinensis Billon
<input type="checkbox"/> 土別甲グループ	<input type="checkbox"/> 土別甲 Pelodiscus sinensis
	<input type="checkbox"/> 別甲 Amyda japonica Temmink et Schlegel Pelodiscus sinensis Wiegmann
<input type="checkbox"/> 地黄グループ	<input type="checkbox"/> 乾地黄 Rehmannia glutinosa Liboschitz
	<input type="checkbox"/> 地黄 Rehmannia glutinosa Liboschitz
	<input type="checkbox"/> 熟地黄 Rehmannia glutinosa Liboschitz
	<input type="checkbox"/> 生地黄 Rehmannia glutinosa Liboschitz
<input type="checkbox"/> 大腹皮グループ	<input type="checkbox"/> 大腹皮 Areca catechu Linne
	<input type="checkbox"/> 大腹 Areca catechu Linne
	<input type="checkbox"/> 腹皮 Areca catechu Linne
<input type="checkbox"/> 天門冬グループ	<input type="checkbox"/> 天門冬 Asparagus cochinchinensis
	<input type="checkbox"/> 天門 Asparagus cochinchinensis

図 17 生薬・グループリスト。「五味」にチェックした。

すると、KAMPO ウィンドウに、「五味」が入力される。

そこで、Search ボタンをクリックすると「五味」を含む漢方処方(図 18)が検索される。

Take out "KAMPO" of KNApSACk

INPUT WORD : 五味

生薬名(漢字) [Herb Name (Kanji)]	生薬名(かな) [Herb Name (Kana)]	学名 [Scientific Name]	効能 [Efficacy]
五味	ゴミ	Schisandra chinensis Billon	

Number of matched data : 1

漢方薬一覧 [List of Kampo formulae]

[清肺湯 / セイハイノウ / seihaito](#)

図 18 「五味」を含む漢方処方

「清肺湯」をクリックすると、清肺湯の生薬の配合の詳細情報が検索される(図 19)。

Summary / 清肺湯	烏梅	黄耆	乾姜	乾生姜	甘草	桔梗	杏仁	五味子	山梔子	生姜	桑白皮	大棗	陳皮	天門冬	当帰	貝母	麦門冬	茯苓	桑白	天門	麦門	山梔	梔子	五味	竹茹
漢方処方応用の実際	2	2			1	2	2	1.5		1.5	2			2	3		3	3					2	2	
漢方医学 漢方診療医典		2			1	2	2	0.5		0.5	2	2	2	2	3	2	3	3					2	2	
臨床30年漢方百話		2.5			1	2.5	2.5	1		1	2.5	2.5	2.5	2.5	3	2.5	3	3				2.5		2.5	
臨床35年続漢方百話	2		1		1	2	2						2		3	2		3	2	2	3		2	1	2
臨床40年続続漢方治療百話 経験漢方処方分置集		2	1		1	2	2	1			2	2	2	2	3	2	3						2		2
漢方後世要方解説	2				1	2	2	1		1	2	2	2	2	3	2	3	3					2		2
症候による漢方治療の実際 漢方診療の実際	2				1	2	2	1.5		1.5	2	2	2	2	3	2	3	3					2		2
臨床応用漢方処方解説		2		1	1	2	2	1			2	2	2	2	3	2	3	3				2			2
成人病の漢方療法	2				1	2	2	1		3	2	2	2	2	3	2	3	3					2		2
漢方精撰百八方—その運用とかんどころ	2			1	1	2	2	1				2	2		3	2		3	2	2	3	2			2
一般用漢方処方の手引き 天然医薬資源学[第2版]	2				1_1.5	2	2	0.5_2	2	0.5_2	2	2	2	2	3	2	3	3							2
一般用漢方製剤承認基準 改訂一般用漢方処方の手引き	2_2.5				1	2_2.5	2_2.5	0.5_1	2_2.5	1	2_2.5	2_2.5	2_2.5	2_2.5	3	2_2.5	3	3							2_2.5
漢方方章ノート	2				1	2	2	1	2	1	2	2	2	2	3	2	3	3							2















漢 方 名 [Kampo Name]	清肺湯 (セイハイトウ)										
	漢方処方応用の実際:山田光胤著, 昭和47.3.1, 第3版(南山堂)										
文 献 Reference	生薬名 [Herb Name]	烏梅	ウバイ	慣用名 [Common Name]	Mume Fructus	学名 [Scientific Name]	Prunus mume Siebold et Zuccarini	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	2
配 合 一 覧 [Combination List]	生薬名 [Herb Name]	黄耆	オウゴン	慣用名 [Common Name]	Scutellaria Root	学名 [Scientific Name]	Scutellaria baicalensis Georgi	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	2
	生薬名 [Herb Name]	甘草	カンゾウ	慣用名 [Common Name]	Glycyrrhiza	学名 [Scientific Name]	Glycyrrhiza uralensis Fisher	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	1
	生薬名 [Herb Name]	桔梗	キキョウ	慣用名 [Common Name]	Platycodon Root	学名 [Scientific Name]	Platycodon grandiflorum A. De Candolle	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	2
	生薬名 [Herb Name]	杏仁	キョウニン	慣用名 [Common Name]	Apricot Kernel	学名 [Scientific Name]	Prunus armeniaca Linne Prunus armeniaca Linne var. ansu Maximowicz	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	2
	生薬名 [Herb Name]	五味子	ゴミシ	慣用名 [Common Name]	Schisandra Fruit	学名 [Scientific Name]	Schisandra chinensis Billon	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	1.5
	生薬名 [Herb Name]	生姜	ショウキョウ	慣用名 [Common Name]	Ginger	学名 [Scientific Name]	Zingiber officinale Roscoe	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	1.5
	生薬名 [Herb Name]	桑白皮	ソウハクヒ	慣用名 [Common Name]	Mulberry Bark	学名 [Scientific Name]	Morus alba Linne	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	2
	生薬名 [Herb Name]	天門冬	テンモンドウ	慣用名 [Common Name]	Asparagi Tuber	学名 [Scientific Name]	Asparagus cochinchinensis	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	2
	生薬名 [Herb Name]	当帰	トウキ	慣用名 [Common Name]	Japanese Angelica Root	学名 [Scientific Name]	Angelica acutiloba kitagawa	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	3
	生薬名 [Herb Name]	麦門冬	バクモンドウ	慣用名 [Common Name]	Ophiopogon Tuber	学名 [Scientific Name]	Ophiopogon japonicus Ker-Gawler	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	3
	生薬名 [Herb Name]	茯苓	ブクリョウ	慣用名 [Common Name]	Poria Sclerotium	学名 [Scientific Name]	Poria cocos Wolf	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	3
	生薬名 [Herb Name]	梔子	シシ	慣用名 [Common Name]	Gardeniae Fructus	学名 [Scientific Name]	Gardenia jasminoides Ellis	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	2
	生薬名 [Herb Name]	竹茹	チクジョ	慣用名 [Common Name]	Bambusae Caulis	学名 [Scientific Name]	Bambusa tuldoidea Munro Phyllostachys nigra Munro var. henonis Stapf ex Rendle Phyllostachys bambusoides Siebold et Zuccarini	効能 [Efficacy]		分量 [Ing.]	2

図 19 清肺湯の詳細情報

同様に、漢方薬全件表示から選択された漢方処方に配合されている生薬情報を得ることができる。

実習 15:「葛根湯」に含まれる生薬を調べてみよう。

2.3 Biological Activity

薬/食用植物には健胃薬などヒトの健康に貢献する作用ならび抗菌作用などの多様な生物活性が報告されている。薬/食用植物と活性との関係を Natural Activity データベースに整理した。一方、生物が生産する代謝物に注目し、代謝物と活性との関係を Biological Activity データベースに整理した。

2.3.1 Natural Activity

実習 16: メインウインドウの Natural Activity を選択してみよう。

すると Natural Activity DB 検索画面へアクセスできる(図 20)。

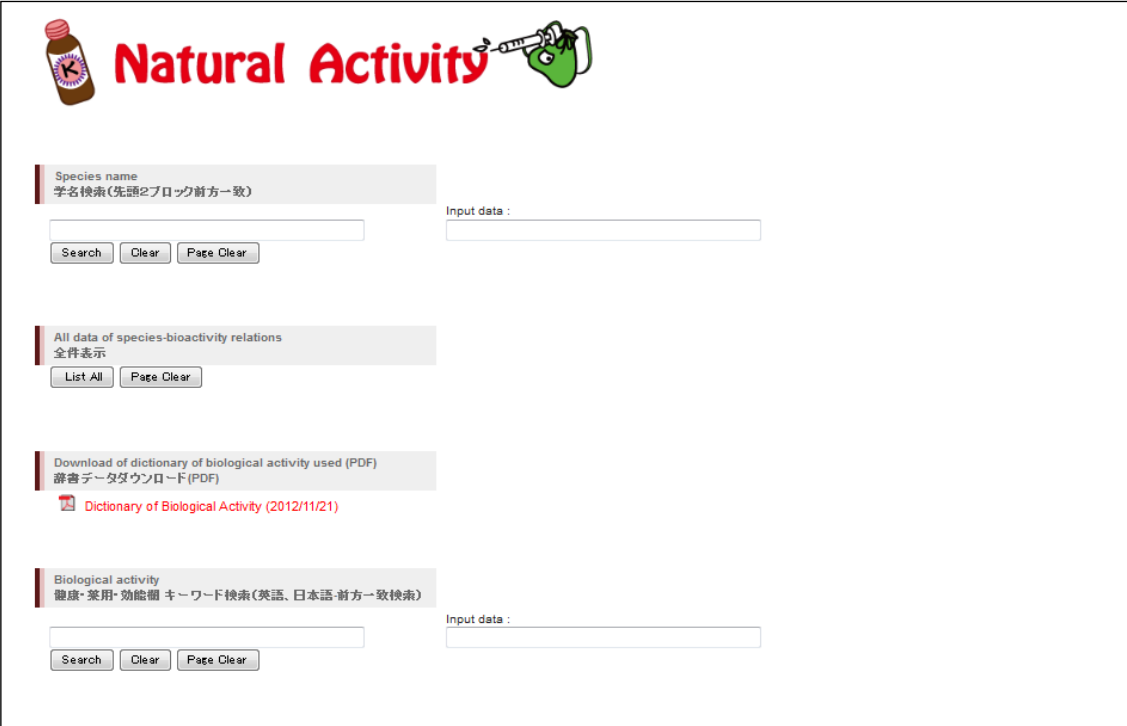


図 20 Natural Activity DB の検索画面

検索画面の学名検索のテキストボックスに生物名を入れるとその生物による活性情報をえることができる。

実習 17: タマネギ *Allium cepa* の生物活性情報を調べてみよう。

トウモロコシ *Zea mays*、お米 *Oryza sativa*

一方、効能から植物を検索することができる。例えば、健康・薬用・効能欄 キーワード検索と書かれたテキストボックスに「二日酔い」と入力すると、二日酔いの効能を有する生物情報を得ることができる。

実習 18: 「二日酔い」の効能を有する生物を探してみよう。

2.3.2 Metabolite Activity

開発進行中であるが代謝物における生物活性情報を得ることを目的としたデータベースの構築を進めている。

実習 19: メインウインドウの Metabolite Activity をクリックしてみよう。

すると、Metabolite Activity の検索画面（図 21）が得られる。



The image shows the 'Metabolite Activity' search interface. At the top, there is a logo with a brown bottle labeled 'K' and a green character with a stethoscope. Below the logo, the text 'Metabolite Activity' is displayed. Underneath, there is a section titled 'Select by ...' with five radio button options: 'Metabolite', 'C_ID', 'CAS_ID', 'Biological Activity (Function)', and 'Targeted Species'. The 'Biological Activity (Function)' option is selected. Below these options is a text input field labeled 'Molecular formula'. At the bottom of this section are two buttons: 'List' and 'Clear'.

図 21 Metabolite Activity の検索画面

そこで、

- (i)代謝物名(Metabolite, C-ID, CAS-ID)から代謝物に対する活性情報、
- (ii)生物活性から代謝物情報、
- (iii)標的生物(Targeted Species)から代謝物、活性情報を検索できる。

実習 20: Antioxidant（抗酸化） anticancer（抗がん）に関わる天然物を検索してみよう。

実習 21: Escherichia coli（大腸菌）に何らかの活性を有する天然物を検索してみよう。

3 Skewered KNApSAcK

第2節では Pocket Family における8種のデータベースを概説してきた。「これらの情報を一括検索したい。」と思う方々も多いであろうと考えて、現在、一括検索するための検索システムの構築を進めている。

実習 22: メインウインドウにおける Skewerd KNApSAcK をクリックしよう。

すると Skewered KNApSAcK の検索画面 (図 22) が得られる。



Species name
学名検索(先頭2ブロック前方一致)

Input data : _____

Search Clear Page Clear

List of all data
全件表示

List All Page Clear

Biological activity
健康・薬用・効能欄 キーワード検索(英語、日本語-前方一致検索)

Input data : _____

Search Clear Page Clear

図 22 Skewered KNApSAcK の検索画面

実習 23: Skewered KNApSAcK を用いて「二日酔い」「ダイエット」に関する情報を検索してみよう。

例えば、Biological activity のテキストボックスに「ダイエット」と入力すると、生物ごとに「ダイエット」に関する情報を有するデータベースがアイコンにより表示される(図 23)。それぞれのアイコンを選択すると詳細情報が得られる。

Search word : ダイエット

種名	一般名	キーワードマッチDB	学名マッチDB
—	モヤシ	(N)	
<i>Arctium lappa</i>	ゴボウ	(N)	  12  12
<i>Armoracia rusticana</i>	タクアン	(N)	 
<i>Brassica rapa</i>	ハクサイ	(N)	  58  40
<i>Camellia sinensis</i>	プーアル茶	(N)	  22  22
<i>Flammulina velutipes</i>	ユキノシタ	(N)	 
<i>Gymnema sylvestre</i>	Gymnema sylvestre R.Br.[ぎむねましるべすた、ギムネマシルベスタ、ぎむねま・しるべすた、ギムネマ・シルベスタ]	(L)	  2  2
<i>Lagerstroemia speciosa</i>	バナバ	(N)	  7  5
<i>Malus pumila</i>	Malus pumila[Apple、りんご、リンゴ、林檎]	(L)	  24  24
<i>Phyllostachys pubescens</i>	タケノコ	(N)	 4  4
<i>Rubus occidentalis</i>	Rubus occidentalis[raspberry、ラズベリー、ラズベリー、まいちご、キイチゴ、木苺]	(L)	  4  1

図 23 Skewered KNApSAcK による「ダイエット」に関する情報検索結果

文献

- 1) 本村有紀子、理系思考 分からないから面白い、毎日新聞社(2007)
- 2) Afendi F.M.et al.: KNApSAcK family databases: integrated metabolite-plant species databases for multifaceted plant research. *Plant Cell Physiol.*, **53**:e1-e12, (2012)
- 3) Okada T. et al.: Metabolomics of medicinal plants: the importance of multivariate analysis of analytical chemistry data. *Curr Comput Aided Drug Des.*, **6**:179-96, (2010)
- 4) Afendi F.M. et al., Systems biology approaches and metabolomics for understanding Japanese traditional Kampo medicine. *Current Pharmacogenomics and Personalized Med.*, (2012), **10**, 111-124
- 5) 金谷重彦 et al.: 我が国のデータベース構築・統合戦略、メタボロームデータベースの開発：メタボロミクスからのゲノミクスの展開、細胞工学、1, pp.101-104, (2012),
- 6) 金谷重彦 et al.:メタボロームデータベース：多様な研究への対応とデータの共有化, 実験医学, **29**, pp. 2460-2470 (2011).
- 7) 中村由紀子 et al.KNApSAcK Family データベース:メタボロミクスから展開する植物の多目的活用、バイオサイエンスとインダストリー、**70**, 267-272 (2012)
- 8) 池田俊、et al. オミックス・プラットフォーム：バイオ・ビッグ・データに挑む、生物工学会誌, **90**, 777-781 (2012)
- 9) 桂樹哲雄 et al. 料理のオミックス：食材からみえてくる雑煮とレトルトカレーの構築原, *Foods & Food Ingredients Journal of Japan* (in press) (2013)
- 10) Nakamura K et al., KNApSAcK-3D: A three-dimensional structure database of plant metabolites. *Plant Cell Physiol* (in press) (2013)

KNApSAcK Family に関するビデオなど

統合TV：KNApSAcK ファミリーデータベース：メタボロミクスから展開する植物の多目的活用

<http://togotv.dbcls.jp/20121123.html>

バイオジャパン 2012: KNApSAcK Family DB：オミックス研究における医食同源の体系化

<http://togotv.dbcls.jp/20121108.html#p01>