DruMAP 1.1 操作マニュアル

国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所 バイオインフォマティクスプロジェクト DruMAPは、医薬品の開発にとって重要な様々な薬物動態パ ラメーターのための解析プラットフォームです。DruMAPは、 キュレーションした公共データや独自に統一した条件で取得 した実験データからなるデータベースとこれらを学習データと し、機械学習の手法を用いて化学構造のみから薬物動態パ ラメーターを予測するプログラムから成っており、ユーザーは 新規化合物について、これらのパラメーターを予測すること ができます。















mpound search			
etcher Keyword/ID			
Field			
Compound name		~	
Compound name			
DruMAP ID			
SMILES			
InChl			
InChIKey			
External ID (Chembl, Kegg Drug, DrugBank)			
keywords			リフトをファノルから詰っ
From text file			リストをノディルから記の
			:人才:アンシ. できせて
デキサメタゾン midazolam <u>propr</u>			込むこともできます。
デキサメタゾン midazolam <u>propr</u> Search		æ	込むこともできます。
デキサメタゾン midazolam propr Search	Go		込むこともできます。
デキサメタゾン midazolam propr Search Jump to: 1 Previous	Go	æ	込むこともできます。
デキサメタゾン midazolam <u>propr</u> Search Jump to: 1 Previous Showing 1 to 25 of 25 entries (GD 1 Next filtered from 30,633 total entries)	æ	込むこともできます。
デキサメタゾン midazolam propr Search Jump to: 1 Previous Showing 1 to 25 of 25 entries (w 25 entries	Go 1 Next filtered from 30,633 total entries)		込むこともできます。
デキサメタゾン midazolam propr Search Jump to: 1 Previous Showing 1 to 25 of 25 entries (v 25 ¢ entries	Go Next Next Filtered from 30,633 total entries)	11 Mol weigt	込むこともできます。
デキサメタゾン midazolam propr Search Jump to: 1 Previous Showing 1 to 25 of 25 entries (v 25 e entries DruMAP ID 11 Name Dij0000210800.00 Proprantoiot	Go 1 Next Filtered from 30,633 total entries) Til Japanese name Jul 3-3-40	11 Mol weigt 259.349	込むこともできます。
デキサメタゾン midazolam propr Search Jump to: 1 Previous Showing 1 to 25 of 25 entries (v 25 • entries DruMAP ID 11 Name Dij0000210800.00 Propranoioi	Go 1 Next filtered from 30,633 total entries) ⊥ Japanese name JuJJJJJUJJJU-JL	*1 Mol weigt 259.349	込むこともできます。 検索結果をクリックする



TargetMine をクリック すると、別途構築してい る統合データウェアハウ スにリンクし、さらに関 連する情報を見ること ができます。

Include related compounds にチェック すると、異なる塩や立体 異性体も含めて表示さ れます。

 Dexprop 	ranolo [Dj000210801-00] ranolol hydrochloride [Di]0000210801-01]	
External	links	
ChEMBL	CHEMB: TargetMine @ D	
DrugBank	DB00571 [TargetMine @]	
KEGG DRUG	D00483 [TargetMine 🖙]	
HBA	3	
1100.0		
HBA HBD	3	
HBA HBD PSA	3 2 41.49	
HBA HBD PSA RTB	3 2 41.49 6	
HBA HBD PSA RTB ARING	3 2 41.49 6 2	
HBA HBD PSA RTB ARING HATOM	3 2 41.49 6 2 19	
HBA HBD PSA RTB ARING HATOM QED	3 2 41.49 6 2 19 0.83751	
HBA HBD PSA RTB ARING HATOM QED HBA lipinski	3 2 41.49 6 2 19 0.83751 3	
HBA HBD PSA RTB ARING HATOM QED HBA lipinski HBD lipinski	3 2 41.49 6 2 19 0.83751 3 2	

`								
	DruMAP ID	Animal	Tissue	Parameter	Value	Unit	STDEV	Commer
	DIJ0000210800-01	none	none	Sol(7.4)	> 100	µg/mL		
	DIJ0000210800-01	none	none	Sol(1.2)	> 100	µg∕mL		
	DIJ0000210800-01	none	none	logD(7.4)	1.1			

Related compounds に は塩の違いや立体異性 体が表示されます。

External links には ChEMBL、DrugBank、 KEGG DRUG 等へのリ ンクが表示されます。

Physicochemical properties には基本的 な物性値が表示されま す。

Activities には physicochemical、in vitro、in vivo に分けて、 DruMAP に登録されて いる活性値が表示され ます。



include related c	ompounds						Activities (prediction)
DruMAP ID	Animal	Tissue	Molecule	Parameter	Value	Unit Co	には、DruMAP で予測さ
DIJ0000210800-00	human	plasma		fu,p	0.140		れた活性値やクラス分け
DIJ0000210800-00	human	plasma		fu,p.class	Medium		の結果が表示されます
DIJ0000210800-00	rat	plasma		fu,p	0,256		小哈木// 我小已1669。
DIJ0000210800-00	rat	plasma		fu,p.class	High		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	mammal	brain		fu,brain	0.034		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	human	liver microsome		CLint.class	Moderate		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	human	none	CYP1A2	CYP.probability	0.535		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	human	none	CYP2C9	CYP.probability	0.187		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	human	none	CYP2D6	CYP.probability	0.932		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	human	none	CYP3A4	CYP.probability	0.091		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	human	kidney		CLr	1.05	L/h/kg	DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	human	kidney		fe.class	Low		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	human	kidney		CR_type.class	Secretion		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	none	none		Sol(7.4).class	Low		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	human	Caco-2 cell		Papp(AtoB).class	High		DruMAP prediction
DIJ0000210800-00	human	whole body		Fa.class	High		DruMAP prediction

Toxicity include related compounds DruMAP ID Parameter Molecule Value Unit Link DIJ0000210800-00 hepatic PROPRANOLOL C hERG DIJ0000210800-00 IC50 9870 HG-0207226 C nM DIJ0000210800-00 IC50 Cav1.2 21000 nM HG-0207226 🗷

Toxicity には、関連する 肝毒性プロジェクトへの リンク、心毒性プロジェク トで収集された活性値や リンクが表示されます。

Activity search



検索項目	選択肢
Assay type	in vitro, in vivo, physicochemical, prediction, toxicity
Organism	human, pig, rat, mammal, rodent, none
Tissue	brain, heart, liver, lung, muscle, plasma, Caco-2 cell, etc.
Molecule	CYP1A2, CYP2C9, CYP2D6, CYP3A4, hERG, P-gp, etc.
Route	iv, po
Dose	[<=>] value
Time	[<=>] value
Parameter	Clint, fu,p, fu,brain, Rb, t1/2, logD (7.4), fu,p.class, etc.
Activity value	[<=>] value
Activity value (class)	High, Midium, Low, Medium-High, Stable, Unstable, etc.
Source	NIBIOHN, RIKEN, public, CTD, DruMAP prediction

Activity search

例: CLint < 5 μg/ml で source が NIBIHN のデータを検索。

Activity search



Activity search

例: CLint < 5 μg/ml で source が NIBIHN のデータを検索。

Activity search



Showing 1 to 25 of 141 entries (filtered from 527,495 total entries)

Show 25 🗢 entries

	anese name	11 Assay type	Organism	↓ Tissue ↑↓ Molecule ↑↓ Route ↑↓ Dose (mg/kg) $\uparrow \downarrow$ Time(h) $\uparrow \downarrow$ Parameter $\uparrow \downarrow$ Value $\uparrow \downarrow$ U	nit 斗 Source 斗
	^し カプトプリン	in vitro	human	liver microsome	CLint 4.61 μ	L/min/mg_NIBIOHN
<	マルファン	in vitro	human	liver microsome	CLint < 2.00 μ	L/min/mg NIBIOHN
	マルファン	in vitro	rat	liver microsome	CLint 2.55 H	L/min/mg_NIBIOHN





DruMAP Home Compound search Activity search New Prediction About

Prediction



ID

No molecules

2. Select prediction parameters.

~	Parameter	Organism/Cell	Туре	Output	Accuracy	Reference	Method	Descriptor	
/	CLr	Human	Regression	Value	In higher range of (more than 0.0612 L/h error	Watanabe et al. ⁷	RF ⁸ PLS	Mordred ¹⁰ PaDEL ¹¹	
/	f _e .class	Human	2 class	Low (< 0.3) Medium-High (> 0.3)	Kappa: 0.49 Balanced accuracy: 0.74	Watanabe et al. ⁷	RF ⁸	Mordred ¹⁰ PaDEL ¹¹	
2	CR_type.class	Human	3 class	Reabsorption Secretion Intermediate	Kappa: 0.32 Balanced accuracy: 0.70, 0.58 and 0.68 in Reabsorption, Intermediate and Secretion, respectively		Watanabe et al. ⁷	RF ⁸	Mordred ¹⁰ PaDEL ¹¹
					Calo	culate をクリックし [・]	て計算	を開	

始します。

予測できるパラメータ

Parameter	Organism/Cell	Туре	Output
Sol(7.4).class		2 class	•Low (< 10 μg/mL) •High (> 10 μg/mL)
f _{u,p} .class	Human	3 class	 Low (0.001-0.05) Medium (0.05-0.2) High (0.2-1.0)
f _{u,p}	Human	Regression	Value
f _{u,p} .class	Rat	3 class	 Low (0.001-0.05) Medium (0.05-0.2) High (0.2-1.0)
f _{u,p}	Rat	Regression	Value
f _{u,brain}	Mammal	Regression	Value
CL _{int} .class	Human	3 class	 Stable (< 20 μl/min/mg) Moderate (20-300 μl/min/mg) Unstable (> 300 μl/min/mg)
CL _{int}	Human	Regression	Value

Parameter	Organism/Cell	Туре	Output
CYP.probability	Human	Probability	Value (1A2, 2C9, 2D6, 3A4)
CYP.site	Human	Site	Site (1A2, 3A4)
P _{app} (AtoB).class	Caco-2	2 class	•Low (< 10 ⁻⁵ cm/s) •High (> 10 ⁻⁵ cm/s)
P _{app} (AtoB)	LLC-PK1	Regression	Value
NER.class	LLC-PK1	3 class	•Low (< 1.4) •Medium (1.4-9.5) •High (> 9.5)
F _a .class	Human	3 class	•Low (0-0.2) •Medium (0.2-0.7) •High (0.7-1.0)
CLr	Human	Regression	Value
f _e .class	Human	2 class	•Low (< 0.3) •Medium-High (> 0.3)
CR_type.class	Human	3 class	ReabsorptionSecretionIntermediate

DruMAP Home Compound search Activity search New Prediction About



ご質問、ご要望等は、<u>drumap@nibiohn.go.jp</u> までご連絡ください。