

Thesis Title	Database for adverse drug reactions
Thesis Credits	12
Candidate	Mr. Parwin Tantayapirak
Thesis Advisors	Dr. Chinae Thammarongtham
Thesis Co-advisor	Asst. Prof. Dr. Treenut Saithong
Program	Master of Science
Field of Study	Bioinformatics and Systems Biology
Faculty	School of Bioresources and Technology and School of Information Technology
Academic Year	2556

Abstract

Adverse drug reactions (ADRs) are undesirable effects which are the results from an interference related to the use of a medicinal product. Although ADRs are the major issues in public health, most of ADRs are not well understood. Systems pharmacology aims to describe and to understand the operation of drug in complex biological systems which causes to both therapeutic and adverse reactions. Similar to other biochemical processes in the cells, a number of proteins involve in these drug related reactions. Nevertheless, no pharmacological database has ever been constructed from ADR-drug-protein relationships. To address the concern, this thesis intends to develop a prototype database for depositing ADR-drug-protein relationships which are the integrations of different data. In this database, ADRs were connected to proteins by using literature mining approach and predictive scores were given to drugs for grading the possibility to cause hepatobiliary disorders by using machine learning technique. The information of this database had been examined for consistency by comparing with information published previously and was visualized on web browser. The results from querying were displayed with favorable entity which can expand to look the accomplished ADR-drug-protein relationship or uncover related pathway. In the application demonstrations, database for ADRs has the ability to propose the possible entities from different objectives of users. In conclusion, database for ADRs is a powerful tool which efficiently facilitates the examinations of ADR and relevant entities.

Keywords: Adverse Drug Reactions / Knowledge Discovery / Prototype Database / Systems Pharmacology

หัวข้อวิทยานิพนธ์	ฐานข้อมูลสำหรับอาการไม่พึงประสงค์จากยา
หน่วยกิต	12
ผู้เขียน	นายภาวิน ตันตยาภิรักษ์
อาจารย์ที่ปรึกษา	ดร.ชินะ ชำมรงค์ธรรม
อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม	ผศ.ดร.ตรีสุข สายทอง
หลักสูตร	วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิต
สาขาวิชา	ชีวสารสนเทศและชีววิทยาระบบ
คณะ	ทรัพยากรชีวภาพและเทคโนโลยี และ เทคโนโลยีสารสนเทศ
ปีการศึกษา	2556

บทคัดย่อ

อาการไม่พึงประสงค์จากยาหรือเอดีอาร์ (Adverse drug reactions or ADRs) เป็นผลที่ไม่ต้องการซึ่งเกิดจากการเข้าแทรกแซงของผลิตภัณฑ์ที่มีคุณสมบัติเป็นยา ถึงแม้เอดีอาร์จะเป็นประเด็นสำคัญในทางสาธารณสุข แต่เอดีอาร์ส่วนใหญ่ก็ยังคงไม่เป็นที่เข้าใจอย่างแท้จริง เกสซ์วิทยาระบบจึงช่วยอธิบายและทำความเข้าใจการทำงานของยาในทางระบบชีววิทยาที่ซับซ้อนซึ่งก่อให้เกิดทั้งการตอบสนองในทางการรักษาโรคและทางซึ่งเป็นอันตราย โดยโปรตีนจำนวนมากมีส่วนร่วมในปฏิกิริยาดังกล่าวเช่นเดียวกับกระบวนการทางชีวเคมีอื่นในเซลล์ อย่างไรก็ตามไม่มีฐานข้อมูลทางเกสซ์วิทยาใดถูกสร้างจากความสัมพันธ์ระหว่างเอดีอาร์, ยาและโปรตีนที่เกี่ยวข้องกับอาการนั้น เพื่อจัดการปัญหา วิทยานิพนธ์นี้จึงมีวัตถุประสงค์เพื่อพัฒนาฐานข้อมูลต้นแบบโดยเก็บความสัมพันธ์ดังกล่าวซึ่งเป็นการผสมผสานกันของข้อมูล ในฐานข้อมูลนี้ เอดีอาร์ถูกเชื่อมกับโปรตีนโดยใช้วิธีการทำเหมืองข้อมูลจากบทคัดย่อทางวิชาการที่อยู่ในฐานข้อมูลออนไลน์ PubMed และมีการทำนายค่าการเกิดความผิดปกติทางตับและระบบทางเดินน้ำดีของยาโดยใช้วิธีการเรียนรู้ความสัมพันธ์ของข้อมูลด้วยคอมพิวเตอร์ (machine learning) ข้อมูลของฐานข้อมูลนี้ถูกตรวจสอบโดยการเปรียบเทียบกับข้อมูลที่ถูกต้องพิมพ์แล้ว และแสดงผลบนเว็บเบราว์เซอร์ ผลการสืบค้นจะแสดงร่วมกับข้อมูลที่เป็นประโยชน์ซึ่งนำไปสู่ความสัมพันธ์ทั้งหมดของเอดีอาร์-ยา-โปรตีน และวิถีทางชีวเคมีที่เกี่ยวข้อง ฐานข้อมูลมีความสามารถที่จะค้นพบองค์ความรู้ใหม่โดยแสดงผลที่เป็นประโยชน์ตามวัตถุประสงค์ของผู้ใช้ที่หลากหลาย โดยสรุปฐานข้อมูลสำหรับเอดีอาร์เป็นเครื่องมือที่มีประสิทธิภาพที่ช่วยอำนวยความสะดวกในการตรวจสอบเอดีอาร์และข้อมูลที่เชื่อมโยงกัน

คำสำคัญ: การค้นพบองค์ความรู้ / ฐานข้อมูลต้นแบบ / เกสซ์วิทยาระบบ / อาการไม่พึงประสงค์จากยา

ACKNOWLEDGEMENTS

I would like to express my sincere gratitude and deep appreciation to my advisor, Dr. Chinae Thammamongtham, for his kindness, insightful suggestions, and great encouragement. He gave me the assistance and mental support throughout the time that the thesis had been done. His valuable feedback also shaped my research skills. I am thankful of the topic originating of Mr. Natapol Pornputtapong. I would like to thank my co-advisor, Asst. Prof. Dr. Treenut Saithong, who gave advice and assistance. I also acknowledge my committees, Dr. Vasunun Chumchua, Dr. Jittisak Senachak, and Dr. Peerada Prommeenate for their invaluable supervision which was very useful in improving this work. I am grateful to Bioinformatics and Systems Biology Program, King Mongkut's University of Technology Thonburi and National Center for Genetic Engineering and Biotechnology (BIOTEC), Thailand for supporting me the scholarships and resources that are magnificent opportunities to complete master degree.

I would like to thank my family, especially my mother, for their encouragement throughout my life. They are always beside me even though I felt defeated several times. My sincere appreciation is specially expressed to Mr. Thitipong Kawichai, Ms. Oratai Rongsirikul, Ms. Montharat Nawae and Ms. Pajaree Leanglum for their help, inspiration, and belief. Lastly, I would like to thank all of my friends who have cheered me up and have given me their friendships.