

## 個別化医療のための情報活用 Information Utilization for Individualized medicine

### 開催趣旨:

個別化医療では患者の遺伝的背景・生理的状态・疾患の状態などを考慮した薬物療法などを通じて治療の最適化を行う。近年、製薬企業はコンパニオン診断薬開発を含め創薬、開発から上市、市販後調査の全てのプロセスにおいて個別化医療を積極的に推進している。本セッションでは情報計算化学生物学の枠にとらわれず、企業、臨床、アカデミアの研究者を交えて、個別化医療の促進を目指すためのディスカッションを行う。

### モデレーター: 中村 光浩 Mitsuhiro Nakamura

岐阜薬科大学 医薬品情報学 Laboratory of Drug Informatics, Gifu Pharmaceutical University

## 1. MID3 (Model-Informed Drug Discovery & Development)

### 鈴木 昭之 Akiyuki Suzuki

ファイザー株式会社 Pfizer Japan Inc.

医薬品開発の様々な過程で定量的意思決定の重要性が強調されている。今年、MID3 (Model-Informed Drug Discovery & Development)のWhite Paper\*が発出された。その中でMID3は、「薬物、メカニズムおよび疾病レベルのデータの統合モデルから得られる情報を中心に、意志決定の質、効率および費用対効果の改善を目的とした予測および外挿のための定量的枠組み」と定義されている。これまで、同様の枠組みにはMBDD (Model-Based Drug Development)という語が用いられてきたが、誤解を招かないという意図で、“based”ではなく“informed”を採用している。ここでは、MID3に関して解説する。

\* CPT Pharmacometrics Syst Pharmacol. 2016 Mar;5(3):93-122.

## 2. 大規模副作用情報に基づく副作用誘発化学構造の解析:アナフィラキシーを例として

### 植沢 芳広 Yoshihiro Uesawa

明治薬科大学 臨床薬剤学 Department of Clinical Pharmaceutics, Meiji Pharmaceutical University

副作用に関連する化学構造の解明は、創薬・臨床の両面において有用である。そこで、アナフィラキシーを例として、PMDAにより構築された大規模副作用データベースを用いた医薬品の化学構造上の特徴に対する網羅的解析例を紹介する。本邦における約1000種類の医薬品と約1万4千件のアナフィラキシー症例を対象とした解析の結果、アナフィラキシー発症と構成原子数、分子表面積、三級アミド結合数等との関連が判明した。また、セファロsporin骨格等の分子フラグメントが関連構造として抽出された。さらに、これらの構造的特徴量に基づき構築したアナフィラキシー予測モデルを紹介する。

## 3. 臨床現場からみた個別化医療の実際

### 中村 光浩 Mitsuhiro Nakamura

岐阜薬科大学 医薬品情報学 Laboratory of Drug Informatics, Gifu Pharmaceutical University

医療現場では個別化医療のために、バイオマーカー発現の有無の診断、病期分類に基づく治療方針の選択、リスク分類に基づく有害事象の予防、投与量の個別化などが行われている。特に、投与量の個別化は、Pharmacokinetics (薬動学的)のアプローチとしてTDM (薬物血中濃度モニタリング)の実施、体表面積、腎機能による投与設計、代謝酵素の遺伝子多型による個別化、Pharmacodynamics (薬力学)のアプローチとして様々な臨床検査値のモニタリングがある。今回は、薬物治療の適正化の実施例と特に薬剤師が臨床で留意しているピットフォールを紹介する。