

1005 薬物動態可視化・解析ソフトウェアの開発

○ 大串巧太郎¹、菅原孝世¹、古山通久¹、久保百司^{1, 2}、西島和三^{3, 4}、寺崎哲也^{4, 5}、宮本明^{1, 4}

¹ 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07)

² 科学技術振興機構さきがけ (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

³ 持田製薬(株) 研開本部 (〒160-0004 東京都新宿区四谷 1-22 東伸 24 四谷ビル)

⁴ 東北大学未来科学技術共同研究センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 04)

⁵ 東北大学大学院薬学研究科 (〒980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉)

【緒言】 近年の薬物医療では、治験薬物モニタリングやテーラーメイド医療等、薬物投与計画を患者一人ひとりの個人差に合わせるよう求められている。薬物動態学は、そのような患者個人の性別や年齢、体重等の基礎データを基に、計算にて最適な投与計画を求めることを可能にした。一方、情報技術の発展、特にグラフィックによる可視化技術の進歩により、数値であるデータの視覚化が可能となった。同様の技術は新薬開発、患者への服薬指導、学生教育用等でも有益である。

そこで本研究は、薬物濃度分布の計算プログラムを作成し、3DモデリングやGUI(Graphical User Interface)により、計算結果の可視化を試みた。またこの応用として携帯電話端末にてアルコール代謝の計算を行うプログラムを開発した。

【方法】 3次元モデリングにはOpenGLのAPI(Application Programming Interface)を使用し、アルコール体内動態予測プログラムの開発にはiアプリ開発ツールiappliTool for DoJa-3.0を使用した。

【結果】 図1に示す生理学的モデルにおける血流概略図に基づき各臓器の血漿中薬物濃度を計算するプログラムを作成した。計算に必要な各種パラメータの入力用にGUIを作成した(図2)。計算結果の表示はOpenGLにより各臓器の3次元モデルを作成し、血漿中及び各臓器・組織内薬物濃度の高低を色相で表現した(図3)。

その他の機能として、肝臓・腎臓の代謝量の推移や薬物動態パラメータの表示、血漿中薬物濃度推移のアニメーション表示が可能である。

更に携帯電話端末による薬物体内動態予測プログラムを開発した。広義の薬物としてエタノールをモデル薬物に選択し、体内濃度の時間変化を計算するプログラムを開発した。飲酒後の血漿中エタノール濃度によって、ディスプレイ上の表情が変化する(図4)。

以上、本研究によって薬物濃度分布の計算結果のOpenGLやGUIによる可視化、及び携帯電話端末による薬物体内動態予測プログラムプロトタイプの開発に成功した。

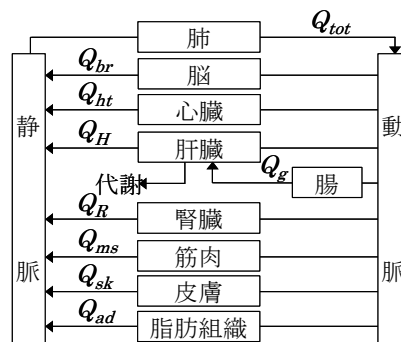


図1 生体内における血流概略図

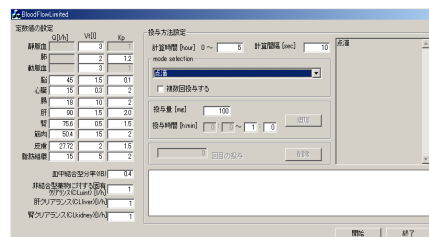


図2 パラメータ入力部のGUI

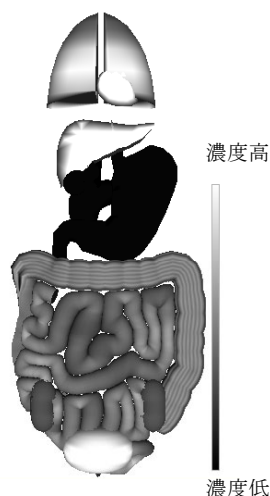


図3 OpenGLによる結果表示

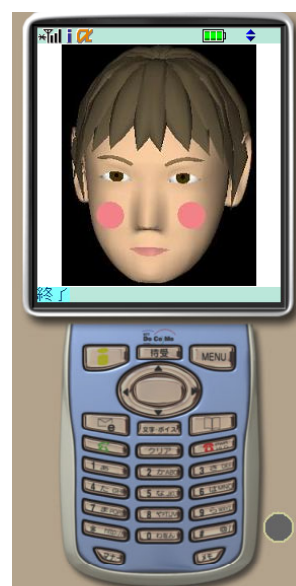


図4 アルコール代謝計算プログラム(iアプリ開発ツールiappliTool forDoJa-3.0を使用)