

# 30L-am06

インフォマティクスとメタボローム分析による漢方処方理論の包括的解析

○岡田 岳人<sup>1</sup>, 山崎 真巳<sup>2</sup>, 金谷 重彦<sup>3</sup>, 並木 隆雄<sup>4</sup>, 齊藤 和季<sup>2,5</sup> (徳島文理大香川薬,<sup>2</sup>千葉大院薬,<sup>3</sup>奈良先端大情報,<sup>4</sup>千葉大院医,<sup>5</sup>理研PSC)

[目的] 漢方は多様なエビデンスに基づいて確立されてきたものであり、漢方薬は患者の症状を全身的に捉えた診断基準「証」に基づいて処方される。従って、漢方処方理論の全体像を理解するためには、一部の処方への局所的なアプローチよりも、処方システムの包括的な解析が有効なものと考えられる。そこで本研究においては、処方システムを①処方構成生薬②含有成分③「証」の3クラスに分け、これらの相関を解析した。

[方法] 上記①と③のデータは文献から得た。そして、②のデータはMS機器を主体とした含有成分の包括的分析、すなわちメタボローム分析によって得た。これら①から③のデータをインフォマティクスによって解析した。

[結果・考察] (1) 処方構成生薬-「証」の多変量解析: 処方のバリエーションを、構成生薬の量・比に基づいて Principal Component Analysis (PCA) により解析した。その結果、虚/実、六病位への適用が構成生薬に基づいて理論的に分類され得ることが示唆された。次に、Partial Least Squares (PLS) 回帰分析を行い、それぞれの構成生薬が虚/実どちらの処方に配合されやすいかを相関係数から分類した。この結果を基に、既存の漢方処方の構成生薬量・比を意図的に加減した仮想処方をデザインし、PLS 回帰モデルに外挿することで虚/実への適用予測を行った。(2) 含有成分-「証」の多変量解析: (1)の結果を化学的に裏付けるために、主に桂枝湯類および柴胡剤類のメタボローム分析データを、PCAおよびPLSモデルによって解析した。その結果、虚/実、六病位への処方の適用が、含有成分に基づいた処方のバリエーションから説明され得ることが示唆された。

本研究は、インフォマティクスとメタボローム分析によって漢方処方理論を解析したものであり、新規加減方・合方の提案や、処方理論の一般化に基づいた漢方薬処方支援システム開発への応用が考えられる。