

令和5年度 厚生労働行政推進調査事業費補助金（食品の安全確保推進研究事業）
「健康食品」の安全性・有効性情報データベースを活用した健康食品の安全性確保に関する研究
(21KA2002)
分担研究報告書

研究3) 医薬品との相互作用検索システムの構築

分担研究者 荒木通啓 (国研) 医薬基盤・健康・栄養研究所 AI健康医薬研究センター

研究要旨

いわゆる「健康食品」の利用において、近年問題となるのが医薬品との併用であり、医薬品との併用による相互作用は健康被害の原因となる。その一方で、いわゆる「健康食品」と医薬品の相互作用については情報が少ないという問題点がある。

そこで KEGG DRUG（日本、米国、欧州の医薬品情報を一元的に集約したデータベース）情報から、医薬品代謝に関する代謝酵素に関するデータを抽出する。同時に HFNet、PubMed の文献情報を利用して、いわゆる「健康食品」素材による薬物代謝酵素（CYP）への影響を網羅的にスクリーニングし、両データを用いた相互作用の検索システムを構築する。

いわゆる「健康食品」と医薬品との相互作用については、網羅的な情報リソースが提供されていないため、当該情報を充実させるとともに、検索システムを構築することにより、AS（アドバイザリースタッフ）・認定薬剤師が消費者（患者）へアドバイスする際の助けとなる。

A. 研究目的

健康維持・増進に向けて、個人のセルフケア・セルフメディケーションの実践が推奨されているなか、食・栄養を補完するようないわゆる「健康食品」に対する関心も高まってきている。「健康食品」の安全性・有効性情報データベース（HFNet）は、消費者がいわゆる「健康食品」に関する情報を得るうえで、重要な情報リソースの一つであり、いわゆる「健康食品」に関する情報が随時アップデートされている。

また、セルフケア・セルフメディケーションの一環として、OTC を含む医薬品の摂取もまた消費者の判断に任せられている状況である。医薬品についても、安全性・有効性に関しては、薬剤師から得られるような情報の他、点在した

情報リソースを頼りに消費者は摂取の判断を行っている状況である。

このように、いわゆる「健康食品」と医薬品はそれぞれ独立した形で安全性・有効性に関する情報リソースが提供されているが、消費者としては、日常生活において、医薬品といわゆる「健康食品」を同時摂取する上で、医薬品といわゆる「健康食品」の相互作用情報など、十分な情報が提供されていない状況である。

こうした背景のもと、いわゆる「健康食品」と医薬品の相互作用情報を提供していくために、いわゆる「健康食品」と医薬品の情報とそれぞれの代謝酵素に関わる情報をデータベース、文献情報から抽出し、データ構造化を行うとともに、得られた情報を提供できるような検

索システムの開発を目的とする。

B. 研究方法

1) 医薬品及びいわゆる「健康食品」の情報の抽出・整理

KEGG DRUG（日本、米国、欧州の医薬品情報を一元的に集約したデータベース）情報から、医薬品とその代謝に関する代謝酵素データを抽出し、リスト化を行った。また、HFNet、PubMed の文献情報を利用して、いわゆる「健康食品」素材と薬物代謝酵素（CYP）に関する情報を網羅的に取得し、いわゆる「健康食品」の日本語、英語、学名でそれぞれリスト化し、いわゆる「健康食品」・代謝酵素と PubMed ID の対応付けを行った。

2) 検索システムの構築

上記で得られたデータについて、医薬品といわゆる「健康食品」の両データを用いた相互作用の検索システム、予測システム、web ツールを仮想環境にて構築した。

C. 研究結果

1) 医薬品及びいわゆる「健康食品」の情報の抽出・整理

KEGG DRUG から、医薬品 1270 件、薬物代謝酵素 59 件の各情報を抽出し、HFNet 並びに NIH データベースより、いわゆる「健康食品」情報として、365 件の情報を抽出し、リスト化した。いわゆる「健康食品」の各名称と代謝酵素をキーワードとして、PubMed 検索を行い、各関係性を抽出した。結果、いわゆる「健康食品」・酵素 4,801 件、薬・酵素 8,257 件、薬・いわゆる「健康食品」38,043 件、いわゆる「健康食品」・酵素・薬 1,105,947 件の関係性が得られた。こうした網羅的な関係性情報を利用して、ネットワーク解析および酵素毎にクラスタリングを実施し、各クラスタ(酵素)で、既知の関係が占める割合を算出することで、未知の関係性の抽出とスコアリングを実施した。また、大

規模言語モデルを活用した手法を用いて、各単語の生物医学的な背景知識を考慮した単語間の関係性の解析モデルを作成し、未知の関係性の予測するための方法を開発した。これらを web ツール上に実装するためのデータ構造化と web ツール開発を行った。

2) 検索システムの構築

上記で得られたデータについて、医薬品といわゆる「健康食品」の両データを統合、リスト化し、相互作用の検索システム、web ツールを構築した（図 1）。

D. 考察

セルフケア・セルフメディケーションの背景のもと、いわゆる「健康食品」と医薬品の併用機会の利用が拡大している。本研究では、医薬品といわゆる「健康食品」の相互作用情報の抽出を実施した。現時点で抽出された情報のうち、予測された未知情報については、一定程度の信頼性はあるものの、確実な情報ではないといった懸念点もある。このため、構築された検索システムを利用して、人手によるデータキュレーションに活用しつつ、確実な情報提供を行う必要があるだろう。

また、今般抽出されたいわゆる「健康食品」と医薬品の情報は、基本的に網羅的な論文情報をベースにしていることから、そもそもいわゆる「健康食品」と医薬品の相互作用の観点で研究されているものも多くはない。このため、新たないわゆる「健康食品」と医薬品の相互作用予測も含めた、より確からしいいわゆる「健康食品」と医薬品の関係性を抽出する情報解析をさらに進めていく必要性がある。

E. 結論

データベースや文献情報から、医薬品、いわゆる「健康食品」、代謝酵素に関連する情報抽出を行い、各情報を統合した。統合された情報を利用して、検索システムを構築した。今後、

検索システムを利用していくことにより、より確からしい情報提供のためのマニュアルキュレーションやAS・認定薬剤師が消費者(患者)へアドバイスする際の助けとなることが期待される。

F. 研究発表

(1) 論文発表

特になし

(2) 学会発表

特になし

(3) その他

特になし

G. 知的所有権の取得状況

なし

H. 健康危機情報

なし

