

## DI トピックス

### 主成分分析を用いた薬剤情報の把握

薬剤師が医薬品の学習をする際、その薬剤の治療薬中の立ち位置や、同効他剤との差異を把握することがより理解を深めることに繋がります。しかし、医薬品に含まれる情報は多岐にわたるため把握が難しい場合が多く、特に同効の薬剤が多い場合は大変です。

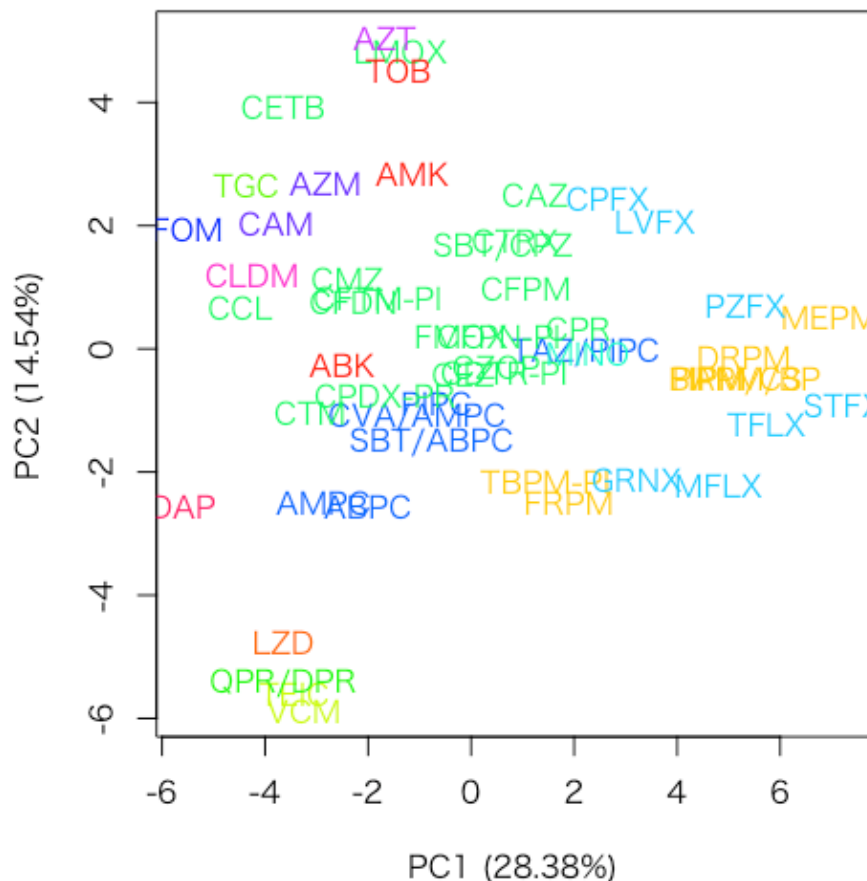
多岐にわたる情報（多変量のデータ）を取り扱うことは統計学の得意とするところであり、今回は、医薬品に関する理解を深めるために統計学的手法が有効かどうか検討してみました。題材としては抗菌薬の抗菌スペクトルを選択し、統計学的手法には主成分分析を用いることとしました。

主成分分析とは、多次元のデータを少ない次元に要約し、人間がデータの特徴を把握しやすく加工するための分析手法です。主成分分析に関してはウェブ上に秀逸な説明が多数ありますので、そちらを御参照下さい ([http://www.statistics.co.jp/reference/software\\_R/statR\\_9\\_principal.pdf](http://www.statistics.co.jp/reference/software_R/statR_9_principal.pdf) など)。

各抗菌薬の抗菌スペクトルの情報は、書籍「抗菌薬サークル図データブック 第3版（じほう社）」から抽出し、主成分分析とその作図には、R (ver. 3.5.1) およびRのパッケージ (scatterplot3d, mapprotools, shiny, rgl 等) を使用しました。

まず、主成分分析の結果を2次元の図で表してみます。

#### 抗菌スペクトル主成分分析（2次元）

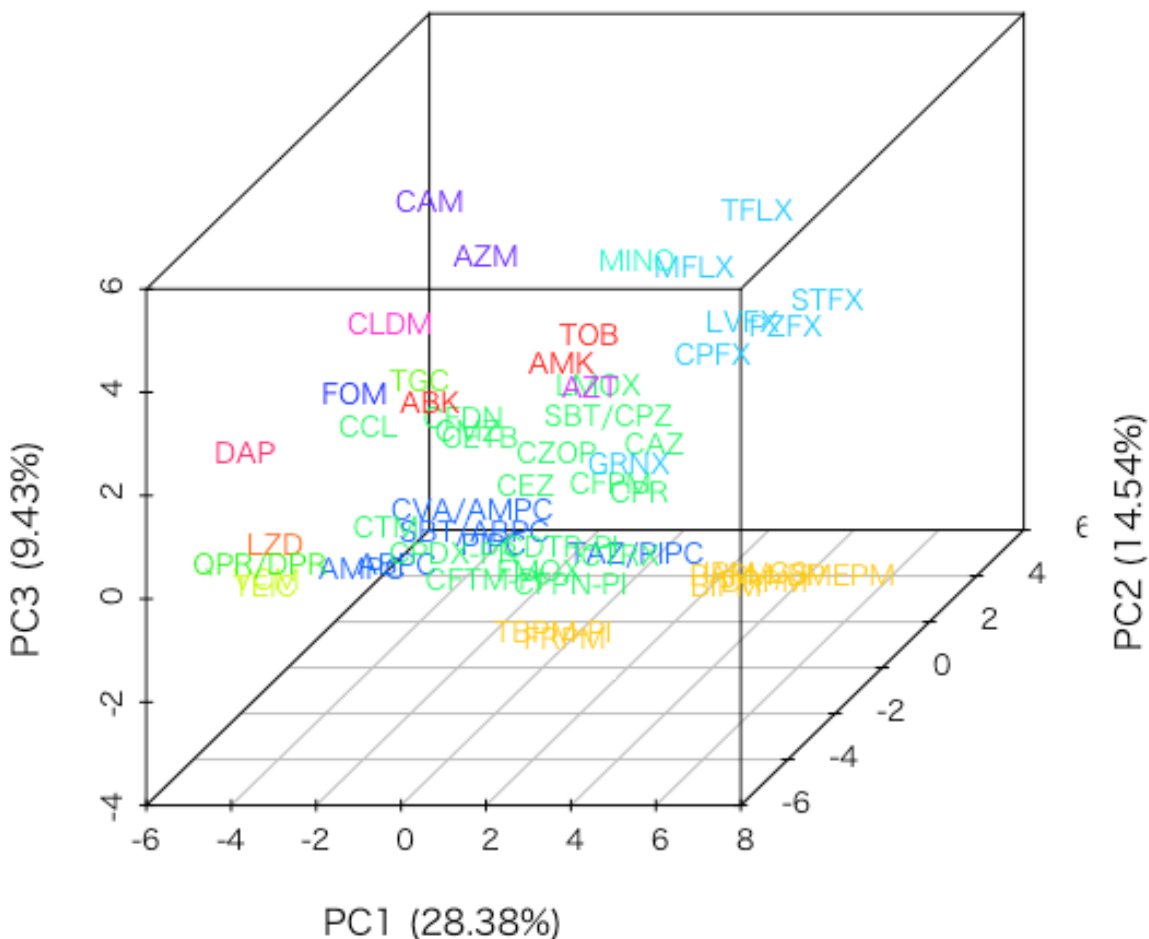


図を見ても、抗菌薬のグループごとにある程度まとまってプロットされており、例えば、ペニシリン系とセフェム系薬剤が隣り合っ

てプロットされていること（これは、薬剤の抗菌スペクトルが似通っていることを意味します）等が見て取れます。しかし、この図では薬剤同士の重なり合いが多く、ごちゃごちゃして分かりづらい印象です。また、累積寄与率（主成分分析によりデータをどれくらい説明できているかを表します）が第一主成分 28.38 % + 第二主成分 14.54% = 42.92% しかありませんので、もう少し累積寄与率を上げたいところです。

そこで、第三主成分まで含めて 3 次元の図を表示してみました。

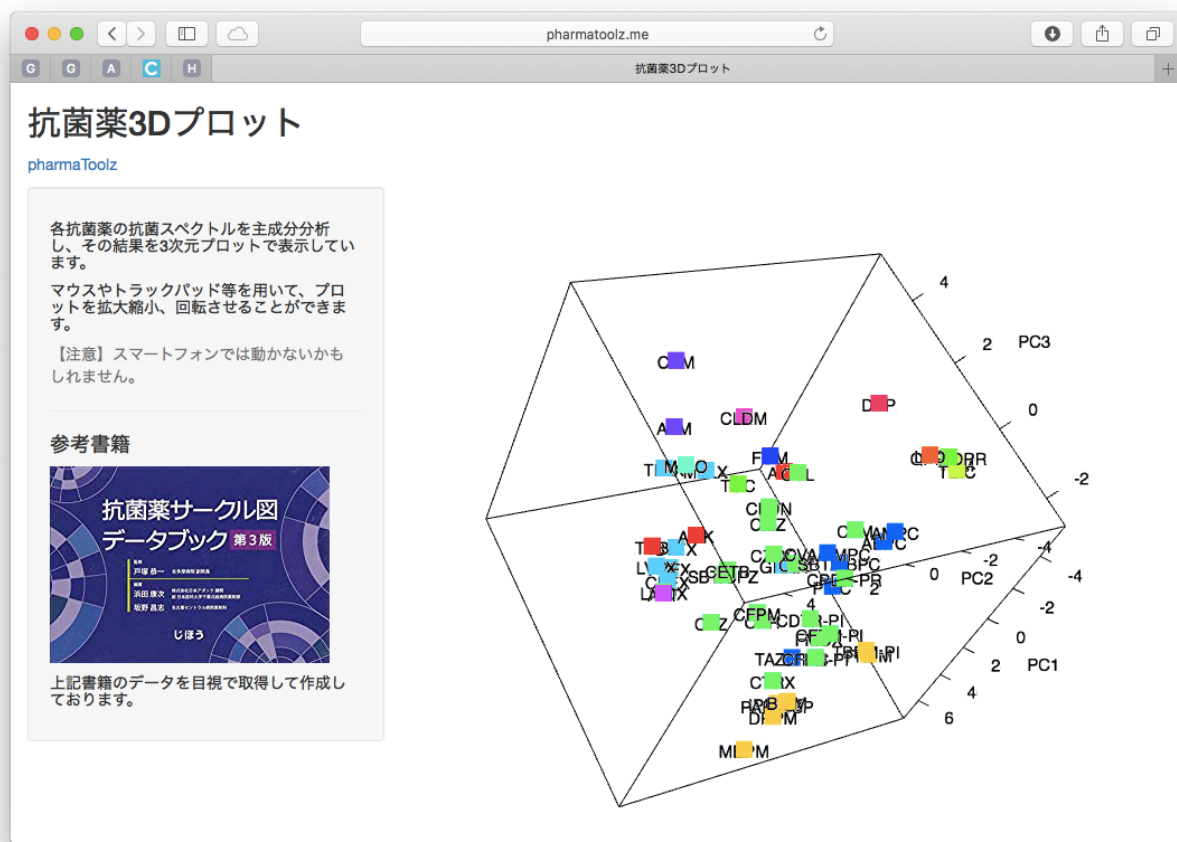
### 抗菌スペクトル主成分分析（3次元）



累積寄与率は 52.35%までアップしましたが、3次元の図を無理やり 2次元の平面上に表しているため、せっかくの 3次元プロットのメリットを活かしていない状態です。

そこで、3次元プロットの特徴を活かすため、プロットを色々な角度からインタラクティブに見られるように加工してみます。

このサイト上では図表の表示が不可能なため、別サイト (<http://pharmatoolz.me/antibact3d>) で確認してみてください (スマートフォンではうまく表示できないようです。PCでご確認下さい)。



プロットを色々な角度から眺めることで、例えば、ペニシリン系の中でも TAZ/PIPC はカルバペネム系に近いな、CLDM とマクロライドは同じような場所にあるな、MINO は独特な立ち位置にあるのかな、といったことが見て取れます。

このように、薬剤の特性をビジュアルで把握することは、薬剤の効率的な理解に繋がるのではないのでしょうか。薬剤の学習に主成分分析等の統計学的手法を用いることは有用であると考えます。

## 参考文献・サイト

抗菌薬サークル図データブック 第3版 (じほう社)

<https://www.jiho.co.jp/Default.aspx?TabId=272&pdid=50004>

The R Project for Statistical Computing

<https://www.r-project.org>

抗菌薬 3D プロット

<http://pharmatoolz.me/antibact3d>