

Computational Oral Absorption Simulation

ランチョンセミナー 28日(水) 11:30-13:00 4F 401

経口吸収予測 のブレークスルー

演題: メディシナルケミストと製剤研究者向け経口吸収予測ツール gCOAS

gCOASは最小限の実験データから経口吸収特性を予測する為に開発された、高度なメカニスティックモデルフレームワークです。このフレームワークは完全な粒子サイズの分布や液相における医薬分子の詳細な挙動を説明する為、輸送、溶解、析出、透過のメカニスティックモデルを搭載しています。本公演ではgCOASがもたらす独自のメリットについてご紹介致します。

- ❖ 臨床データを必要とせず、パーティクルサイズと食餌の影響の関数として経口吸収パフォーマンスを予測することにより、多くの動物実験や臨床試験を削減
- ❖ *in vitro* 実験(USP-II, ASD等)から*in vivo*パフォーマンスを予測する単一の環境を提供することにより、一貫性と短期間の習熟を実現
- ❖ 製剤設計における意思決定空間を迅速に探索することで、リスク要因を特定し被験者のリスクを低減します。臨床試験、究極的には商用生産における投与フォームの最適化を実現
- ❖ オープンなメカニスティックモデルに基づく予測シミュレーションツールで公開された科学研究の情報を柔軟に活用



英Process Systems Enterprise Limited (PSE)は化学業界におけるアドバンスドプロセスモデリングのリーディングベンダーです。PSEではgPROMSプロセスモデリングプラットフォームをベースに各分野に特化したモデリングツールを提供しており、製薬業界においても固体・粉体プロセスや晶析プロセス用モデリングツールで豊富な実績を有しています。

前臨床経口吸収シミュレーション の新スタンダード

探索

非臨床

Phase I

Phase II

初回の臨床試験より前に危険因子を特定します。

gCOASは英国プロセスシステムズエンタープライズ(PSE)社がファイザーなどと共同開発した革新的な経口吸収予測システムです。

従来のシミュレーションツールとは異なり、動物実験のデータを必要とせず、直接計測したり、構造式から推算したりすることが可能な物性値(溶解度、pKa、logP等)から、医薬原体や製剤のヒトにおける腸管吸収予測を高精度に行うことが可能です。

gCOASによってもたらされた予測結果は危険因子を特定し、リスクを軽減する道しるべとなり、被験者の不要なリスクを減らすとともに、コストと時間のかかる試験の削減に寄与します。

gCOASがもたらす効果

- より良い製剤設計と臨床試験の周期の短縮
- 創薬の初期段階で手軽に高精度の経口吸収情報が入手可能に
- 製剤設計の効率化(原薬の投薬用や粒度分布など製剤設計における重要な情報を提供)
- ファーストインマン試験(FIH)における投薬量や製剤設計の改善
- 臨床試験の規模の縮小・短縮
- より迅速に新薬を上市

