

**計算毒性学の基本(多変量解析/パターン認識と人工知能)**  
**Basics of computational toxicology**  
**(Multivariate analysis / Pattern recognition and artificial intelligence)**

**開催趣旨:**

計算毒性学で展開される基本技術や理論は通常の薬理活性と大きく異なり、化学多変量解析/パターン認識(ケモメトリックス)、および人工知能(ルールベース)である。計算毒性学を理解し、討論するためには計算毒性学の両輪となる前記二つの技術を理解することが必要となる。本フォーカストセッションではこれらの基本技術に関する基本と最新の展開についての講演、およびOECDが開発/展開し、計算毒性学の基本ツールとして使えるOECD QSAR Toolboxについて紹介いただく。

**モデレーター: 植沢 芳広 Yoshihiro Uesawa**  
明治薬科大学 Meiji Pharmaceutical University  
**湯田 浩太郎 Kohtarō Yuta**  
(株)インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

**講演1: 計算毒性学の基本(多変量解析/パターン認識と人工知能)**  
**Basics of computational toxicology (Multivariate analysis/Pattern recognition and artificial intelligence)**

**湯田 浩太郎 Kohtarō Yuta**  
(株)インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

インシリコによる安全性評価は当初より化学多変量解析/パターン認識(ケモメトリックス)、および人工知能(ルールベース)を用いて実施されてきた。現在世界中で展開されている様々な安全性評価システムは、手法的にこれら二つのアプローチのどちらかに帰属される。従って、計算毒性学を学び、議論するには前記二つの手法について知ることが重要である。本講演では、毒性研究分野への化学多変量解析/パターン認識および人工知能技術の適用に関する基本について発表する。

**講演2: 毒性予測モデルの構築における化学構造の取り扱い**

**植沢 芳広 Yoshihiro Uesawa**  
明治薬科大学 Meiji Pharmaceutical University

化学構造は情報の塊である。化学構造をひもとくことにより得られる多様な数値情報、すなわち化学構造記述子は、その物質の有する薬効、毒性等の生理活性の予測に有用であることが知られている。本講演では、多変量解析やパターン認識を用いた生理活性予測モデルの構築における記述子の取り扱いに関する留意点とともに、精度の高い予測を達成するために必要なモデル構築過程について概説する。さらに、ランダムフォレスト、ディープラーニングといった機械学習法の毒性予測に対する適用事例を紹介する。

**講演3: OECD QSAR Toolbox の概要とその活用方法**

**池永 裕 Yutaka Ikenaga**  
(独)製品評価技術基盤機構 National Institute of Technology and Evaluation

近年、膨大な数の未試験化学物質の安全性評価が大きな課題となっており、OECDでは各国から提供された種々の有害性試験などのデータベースや化学物質をグループ化する機能を活用して、未試験化学物質の類推をサポートするOECD QSAR Toolboxを開発し、HPから公開している。NITEは、本ソフトウェアの開発の議論に参画すると共に、化審法既存化学物質の試験データを提供するなど貢献を行ってきた。本講演では、本ソフトウェアの概要とその機能の活用方法などについて紹介する。