

計算毒性学とインシリコ創薬 Computational toxicology and *in silico* drug discovery

開催趣旨:

本フォーカストセッションでは、CBI学会2016年大会のメインテーマであるインシリコ創薬と計算毒性学との連携に関する講演を企画する。また、「計算毒性学」研究会には創薬、化合物デザイン、環境、動物実験代替法等の多様な研究分野の方々が集う。このように、研究分野が異なる方々の交流を行う目的でパネル討論会を企画する。「計算毒性学」に興味を持たれる多くの研究者の方々の活発なご討論をお待ち致します。

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 Kohtaro Yuta

(株)インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

曾根 秀子 Hideko Sone

国立環境研究所 National Institute for Environmental Studies

講演1: 化学多変量解析/パターン認識(ケモメトリックス)による計算毒性学手法の インシリコ創薬分野での展開: 薬理活性/毒性/ADME/物性等の総合的展開

曾根 秀子 Hideko Sone

国立環境研究所 National Institute for Environmental Studies

化学多変量解析/パターン認識(ケモメトリックス)手法は、その基本となる適用原理上、薬理活性/毒性/ADME/物性の総ての研究で適用可能であり、且つ高速に解析可能である。この適用多様性と高速性という優れた特徴を活用することで、単一特性を解析目標とした時には実現出来ない、様々な可能性が開ける。

現在、高速仮想スクリーニング、既存薬のドラグリポジショニング等の様々なインシリコ創薬手法がある。これらの様々な創薬手法に計算毒性学手法を適用することで、薬理活性/毒性/ADME/物性の様々な特性を全方位的にカバーする次世代型インシリコ創薬へと展開出来る。これらの新アプローチについて討論する。

講演2: 化学多変量解析/パターン認識の新手法提案: ICT, IoTそしてビッグデータ時代の インシリコ薬理活性/毒性スクリーニングに対応したデータ解析手法の提案

湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta

(株)インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

現在は ICT, IoT さらにはビッグデータという言葉で代表されるように、インシリコ技術が大きく変化している。インシリコ薬理活性/毒性スクリーニングにも、新しい時代環境に適した、従来よりも数段強力な多変量解析/パターン認識手法が望まれる。

本講演では、従来手法とは基本的な考えが全く異なり、高速・高精度・大量データ処理を可能にする「KY法」について、現在までに開発されている6種類すべてを紹介する。

講演3: パネル討論: 計算毒性学に関する一般討論

本討論会では、現在の計算毒性学に関しての様々な問題点に関する討論を行う。計算毒性学に関係する研究分野や適用分野や研究者層は多種多様である。計算毒性学に関心を持つ研究者同士の相互討論や、情報交換の場やチャンスは非常に少ない。今回は、CBI学会に集った計算毒性学に関心の深い方々による意見交換や討論を行い、今後の「計算毒性学」研究会の活動方針や、活動テーマ等を探ってゆきたい。

□ 討論課題

- ① 様々な研究分野での計算毒性学の役割と期待
- ② 今後の「計算毒性学」研究会に対する活動内容に関する要望等