

## 計算 ADMET 研究関連研究発表

## Computational ADMET related research presentation

## 開催趣旨:

毒性と ADME は個別に議論されることが多い。しかし、ADMET として両分野の研究をまとめて議論することがより効果的という考えもあり、実際に両分野の研究内容等にも大きくクロスすることが多い。この現状を鑑み、「計算毒性学」研究会はその名称を「計算 ADMET」研究会として、再スタートいたします。今回のフォーカストセッションからは毒性関連のみならず、計算機による ADME 関連研究も討論対象となります。

毒性も ADME も計算機を用いての研究は多種多様存在します。解析手法も毒性と ADME でそれぞれ独自の技術を用いる研究もあれば、両方に共通する技術もあります。このような計算機解析技術を相互に発表し討論することで、より深く、俯瞰的に討論できればと考えます。

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

## 1. 分子画像を用いた QSAR 解析: DeepSnap 法の開発の現状

植沢芳広 (Yoshihiro Uesawa)

明治薬科大学 (Meiji Pharmaceutical University)

DeepSnap は化合物構造を 360 度方向から撮像し、深層学習モデルを構築する手法である。演者らは本法で ADMET 関連の多様な特徴 (核内受容体活性、クリアランス等) の予測モデルを報告してきた。また、分子画像生成条件等を精査するで軽量化・高精度化を達成するとともに、CAM による特徴領域の強調表現を実装した。さらに、記述子法とのコンビネーションによってさらなる高精度予測に成功した。本講演では DeepSnap 法の開発の進捗を紹介する。

## 2. デジタルトランスフォーメーション時代における「計算毒性学」の現状とこれから

曾根 秀子 (Hideko Sone)

横浜薬科大学 (Yokohama University of Pharmacy)

21 世紀はデジタルトランスフォーメーション (DX) の時代であると言われて久しいが、この DX、すなわちデジタル化技術による毒性評価やリスク評価のレギュラトリーサイエンスを変革していくには、相当な時間を要する。DX による毒性学の変革には、毒性データの充実、毒性データの利活用を行う技術革新、毒性評価の価値共創を行う場 (プラットフォーム) の創造が必要と考えられる。本講演では、演者自身が参画しているプロジェクトの紹介も交え、国内外における「計算毒性学」の DX を提示し、計算毒性学の未来像を考察する。

## 3. 薬物の体内動態予測に資する in silico 予測&amp;シミュレーション技術の進展

前田 和哉 (Kazuya Maeda)

北里大学薬学部 (Kitasato University School of Pharmacy)

医薬品開発において、薬物動態特性の予測は必須項目の一つである。近年、in silico 技術を用いた化合物の代謝・輸送に関わる蛋白と薬物の相互作用予測は多数実施されているが、体内動態はこれら素過程の単純な線形結合で決定されるわけではなく、システムとしての理解が必須である。本発表では、個々の分子機能を、数理モデルを介して in vivo 体内動態の理解に繋げた実例およびその構築を支える技術の進展について概説したいと考えている。