

計算毒性学-基本技術編(ケモメトリックス、QSAR、メタボロミクス)

Computational Toxicology - Basic Techniques (Chemometrics, QSAR, metabolomics)

開催趣旨：

計算毒性学は多種多様な研究分野や技術から構成される典型的な複合研究となる。今回は計算毒性学の基本となる研究分野より以下の3分野を選択し、これら計算毒性学分野の基本について講演いただく。

1. ケモメトリックス
2. QSAR (構造-活性相関)
3. メタボロミクス

以上の3分野の基本を学ぶことで、毒性学との連携や適用に役に立ててほしい。

本大会のフォーカストセッション(FS-08)では、計算毒性学の適用・応用研究に関する最新のご講演をいただく。また、計算毒性学研究会では、今後計算毒性学に関する様々な研究に関する基本を講演いただく予定である。

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.

多田 幸雄 Yukio Tada

情報計算化学生物学会 CBI 学会 The Chem-Bio Informatics Society

根本 直 Tadashi Nemoto

(独)産業技術総合研究所 Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

1. 「ケモメトリックス」の基礎**湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta**

株式会社 インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

計算毒性学の重要な基本技術としてケモメトリックスがある。毒性に関して生じた多種・多様なデータはそのままでは何の役に立たない。かつ、現在はビッグデータ時代となり、データ量も拡大している。これらの多種・多様かつ膨大なデータを処理する多変量解析やパターン認識も新時代の環境に適合する必要がある。また、AI(人工知能)技術も機械学習を橋渡しとして多変量解析やパターン認識と連携する。本講演では、ケモメトリックスの概要と人工知能についてその基本を解説する。

2. 「創薬における毒性を考慮した QSAR の基礎」**多田 幸雄 Yukio Tada**

CBI 学会 The Chem-Bio Informatics Society

医薬品は、患者の観点からはリスクとベネフィット、医薬品という物としては安全性(毒性)と有効性(効果)のバランスが求められる。従って、創薬のプロセスにおいて効果と伴に毒性を考慮したドラッグデザインを実行するに際して、論理的指針を得る目的で QSAR 解析が用いられる。ここでは、Classical QSAR(Hansch-Fujita 法)を中心に、QSAR の基礎について述べたい。

3. 「メタボロミクス」の基礎**根本 直 Tadashi Nemoto**

(独)産業技術総合研究所 バイオメディカル研究部門

ゲノミクス・プロテオミクスの発展に引き続き、不可分な領域としてメタボロミクスが勃興してきた。その低分子物質群の様相は生物種を問わず生体応答のスナップショットして表現型の一つともみなされる。技術的には感度と網羅性をもって質量分析法が、簡便性と再現性をもって核磁気共鳴分光法が利用されている。それぞれのデータには特性と制限があり、その質に注意を払う必要がある。この分野を概観し、技術的概要を紹介する。