

AI 時代の新創薬化学薬物動態・毒性の予測プラットフォームを目指して 創薬支援インフォマティクスシステム構築プロジェクトの紹介

Platforms for ADME/Tox prediction

Introduction to AMED project “Construction of drug discovery informatics system”

開催趣旨:

平成 27 年 10 月より、AMED のプロジェクト「創薬支援インフォマティクスシステム構築」がスタートし、今年度で 5 年目となる。本プロジェクトでは、医薬品開発を行う上で欠かせない薬物動態・毒性の問題点を効率的に解決するための予測プラットフォームを構築することを目標としており、実測データの収集、予測手法の開発、予測モデルの構築を行ってきた。5 年間の成果として体内動態、心毒性、肝毒性についてデータベースや予測システムをネット上で公開しつつある。

当日は、各研究班の若手研究者から最近の進捗やネット上で利用できるサービスのデモをしていただくとともに、富士通九州システムズが本プロジェクトの成果を事業化する計画について紹介する。

モデレーター: 本間 光貴 Teruki Honma
理化学研究所 RIKEN

1. 多階層データの統合モデリングによる薬物動態予測システムの構築

渡邊 怜子 Watanabe Reiko

医薬基盤・健康・栄養研究所 National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition

薬物動態グループでは、キュレーション済みの公共データ及び新規実験データを含む質の高い薬物動態データベースを構築し、各種薬物動態予測モデルを搭載した Web アプリケーション (DruMAP) を公開した。本講演では、薬物動態データベースと各種予測モデルの紹介を中心に、プロジェクトの進捗と成果を報告する。

2. 肝毒性予測のためのインフォマティクスシステム構築に関する研究

五十嵐 芳暢 Yoshinobu Igarashi

医薬基盤・健康・栄養研究所 National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition

薬剤誘発性肝障害は医薬品の開発中止および市場撤退の主因の一つであり、創薬早期において肝毒性を予測する in vitro や in silico システム開発への期待が高まっている。本発表ではヒト初代培養肝細胞の遺伝子発現を用いた肝毒性予測モデル構築で得た知見と結果について報告する。

3. インフォマティクスとシミュレーションを融合した多面的心毒性予測システムの構築

佐藤 朋広 Tomohiro Sato

理化学研究所 RIKEN

現在、心毒性の主な要因である hERG チャンネルの測定データは、文献および公共データベースにおいて約 30 万件が報告されている。心毒性グループにおいてこれら公共データ及び理化学研究所で独自に測定した結果を統合した心毒性データベースおよびそれに基づく hERG 阻害予測モデルを構築して HP 上で公開している。本講演では上記成果および、より既知情報の少ないイオンチャンネル阻害剤の予測に向けた取り組みについて紹介する。

4. 創薬支援インフォマティクスシステム構築事業成果の商用化

古賀 裕美 Hiromi Koga

富士通九州システムズ Fujitsu Kyushu Systems Limited

創薬支援インフォマティクスシステム構築事業の成果として、医薬品創製の研究初期における候補化合物のふるい分けや、構造最適化段階における分子設計を効率的におこなうために、薬物動態と毒性を中心としたインシリコ統合解析プラットフォーム (データベース、モデリング機能、予測機能から成るシステム) を構築し商用化する。

本講演では、商用版独自のモデリング機能や予測機能の紹介について紹介する。