

**経済産業省研究開発事業**  
**毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による**  
**次世代型安全性予測手法開発プロジェクト(AI-SHIPS プロジェクト)**

**“AI-Substance Hazard Integrated Prediction System (AI-SHIPS) Project”**  
**(The Ministry of Economy, Trade and Industry, Research and Development)**

**開催趣旨:**

2017年6月からスタートした経済産業省研究開発事業である本プロジェクト（毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法開発プロジェクト:AI-SHIPS プロジェクト）は本年度で3年目となり具体的な成果が着々と得られつつある。本セッションでは、上記プロジェクトの背景と具体的な進捗状況および今後の展開を中心に概説し、あわせて国内外の計算科学的手法による毒性予測手法の現状、方向性とその課題について紹介する。

**モデレーター: 船津 公人 Kimito Funatsu**  
東京大学 The University of Tokyo

**1. 化学物質管理におけるインシリコ毒性予測システムへの期待**  
**Expectation for *in silico* toxicity prediction system in chemical substance management**

**金地 隆志 Takashi Kanachi**  
経済産業省 Ministry of Economy, Trade and Industry

毎年多くの化学物質が開発され、上市されている。特に、中間物（高分子のモノマーや反応開始剤等）、電気・電子材料、塗料・コーティング剤は種類が多く、製品ライフサイクルが短いものが少なくない状況にあって、より性能の高い製品を短期間に市場に出していくことが要求されている。しかも、環境、人健康への影響がより少ない材料が求められている。

このような状況にあって、化学物質としての管理を適正に行いつつ、開発、上市にかかる期間とコストの合理化に資するため、平成29年度から5年計画でAI-SHIPS（毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測システムの開発）プロジェクトを立ち上げた。

プロジェクト立ち上げの背景と事業の概要を紹介する。

**2. 毒性発現メカニズムに基づく毒性予測システム(AI-SHIPS)開発プロジェクトの現状**  
**Present status of project for development of toxicity prediction system (AI-SHIPS)**

**船津 公人 Kimito Funatsu**  
東京大学 The University of Tokyo

2017年6月から、経済産業省による毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法開発プロジェクト（AI-SHIPS プロジェクト）がスタートした。現在、毒性発現メカニズムに基づく毒性予測システム開発に取り組んでいるが、そのために必要となる各モデル構築のためのデータの整理及び実験によるデータ取得としてインビトロ実験を実施している。AI-SHIPS プロジェクトにおいて開発が進められている、毒性発現メカニズムに基づく毒性予測システムの開発の背景、目的、開発システムの概要および毒性予測システムを構成する予測モデル構築の考え方について紹介する。特に、毒性予測モデルについては、毒性発現に関係すると思われるインビトロ実験データから得られる情報を毒性予測モデル構築時の記述子として導入することで、毒性未知の化学品に対して予測された毒性の発現メカニズムに関する情報提供が可能となることを目指している。これまでの開発成果、今後のシステム開発の方向性などについて、プロジェクトリーダーとしての考え方を述べる。

### 3. 計算科学的手法による毒性予測システム開発の国内外の現状

Current status of toxicity prediction system development by in silico methods

庄野 文章 Fumiaki Shono

東京大学 The University of Tokyo

最近の AI 解析技術、インフォマティクスのめざましい進展、国際的な動物愛護の精神 (3R) 普及に伴う動物実験の禁止、代替化の推進さらにゲノミクス、培養細胞技術等を駆使した分子生物学的毒性発現機構の解明、データの公開に伴って計算科学的手法 (in silico) による化学物質の毒性予測手法開発は OECD をはじめ欧州、米国を中心に積極的に推進されつつある。本講演では、(Q) SAR を中心とした計算科学的手法による毒性予測手法開発の歴史、国内外の開発の現状について概説し、あわせてその課題と今後の目指すべき方向についてふれる。

### 4. 有害性発現経路に基づく化学品肝毒性の QSAR 予測

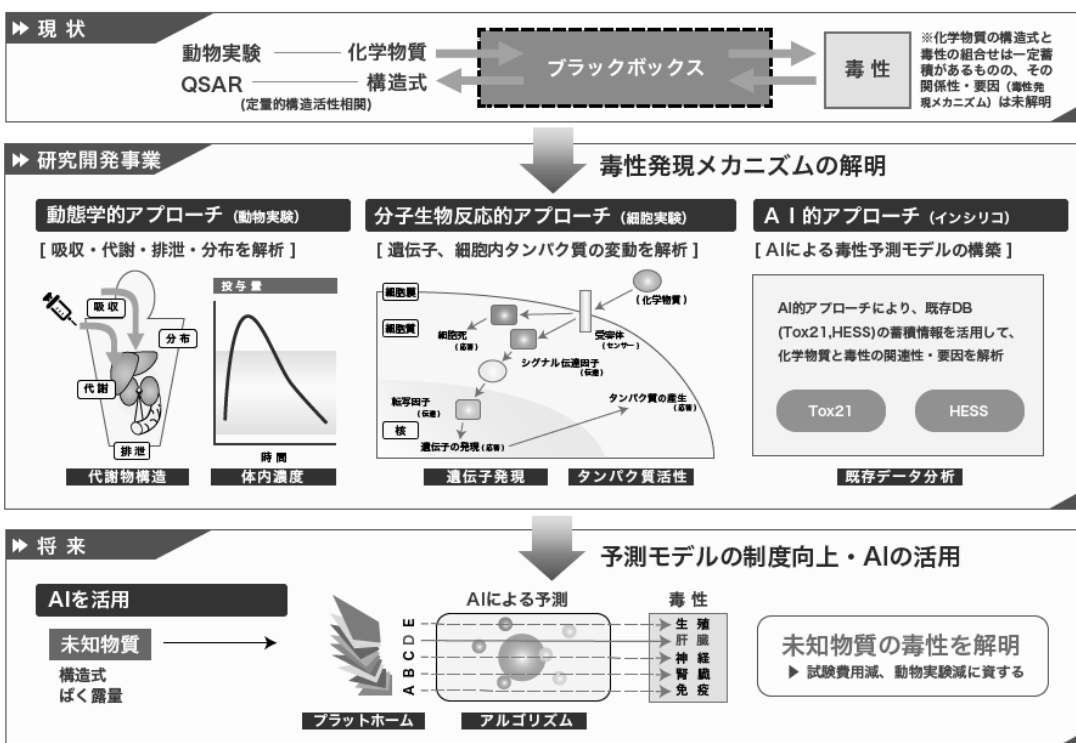
QSAR Prediction of Chemical-induced Hepatotoxicity based on Adverse Outcome Pathway

植沢芳広 Yoshihiro Uesawa

明治薬科大学 Meiji Pharmaceutical University

AI-SHIPS プロジェクトでは、化学品の反復投与毒性を対象とした QSAR 解析に人工知能技術を適用することによって、精度の高い予測モデルの構築を試みている。この際、有害性発現経路 (AOP) の初期イベント (MIE) 等を介した機械学習モデルを構築することによって、核内受容体等を介する毒性発現メカニズムを明示できる予測システムを検討してきた。さらに、三次元分子構造画像をディープラーニングに渡す Deep Snap 等の新規性の高い方法論を用い、従来は困難であった高度な毒性予測に取り組んでいる。本発表では、プロジェクトにおける肝毒性の予測を中心とした in silico 研究の現状と展望について紹介する。

## AI-SHIPSプロジェクトの概要



AI-SHIPS

AI-SHIPS プロジェクトホームページ

<https://ai-ships.net/>