

「計算毒性学(Computational Toxicology)」の基本と、 「計算毒性学」研究会の紹介

Computational Toxicology and Computational Toxicology research workshop

株式会社 インシリコデータ
湯田 浩太郎

1947年5月28日誕生

1979年3月 東北大学薬学部大学院薬学研究科 薬品合成化学教室 博士過程終了
博士論文「抗腫瘍性多環式アルカロイドの合成研究」

1979年7月～1981年8月

米国ペンシルバニア州立大学化学科 P.C.Jurs研究室 リサーチアソシエイト
研究テーマ「パターン認識による発癌性予測」

1981年9月 豊橋技術科学大学 第5工学系 佐々木研究室
研究テーマ：「NMRデータベースの構築」

1983年12月～2009年6月

富士通株式会社 化学・製薬関連企業研究所の研究システム構築とコンサルタント

2009年7月～2010年3月

(独) 国立環境研究所勤務 安全性予測システム関連業務に従事

2010年5月28日

株式会社 インシリコデータ 設立
取締役社長に就任

What is Computational Toxicology?

Brad Reisfeld and Arthur N. Mayeno (2012) What is computational Toxicology? In: Brad Reisfeld and Arthur N. Mayeno (eds) Computational toxicology (vol.1). Humana Press, pp3-7

What is Computational Toxicology

“The application of mathematical and computer models to predict adverse effects and to better understand the single or multiple mechanisms through which a given chemical induces harm”

-Defined by the US EPA-

What are the **major fields** comprising computational toxicology?

Computational toxicology is **highly interdisciplinary research field**:
Researchers in the field have backgrounds and training in

toxicology, biochemistry, chemistry, environmental sciences, mathematics, statistics, medicine, engineering, biology, computer science, and many other disciplines.

and supported by numerous “-omics” technologies, which evolved scientific disciplines, including genomics, proteomics, metabolomics, transcriptomics, glycomics and lipomics.

What are some **current areas of research** in **computational toxicology**?

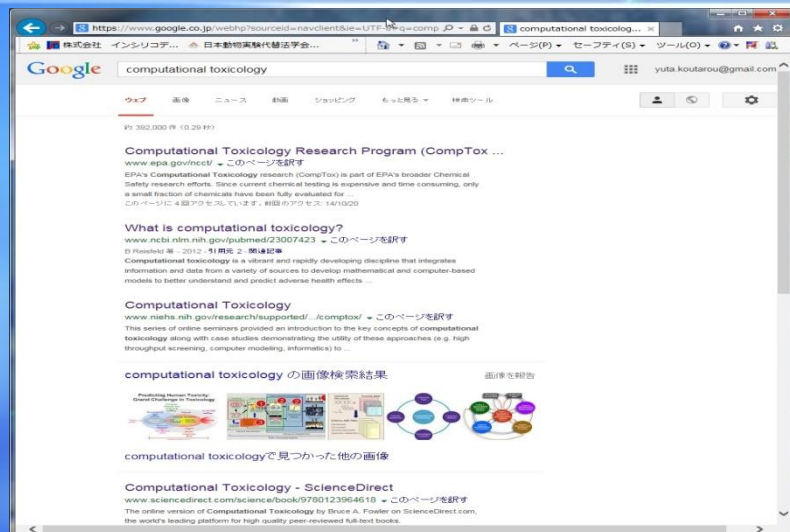
(1)

- Computational methods for evaluating genetic toxicology.
- Structure-based predictive toxicology.
- Informatics and machine learning in computational toxicology.
- Estimating toxicity-related biological pathways.
- Computational approaches to assessing human genetic susceptibility.
- Assessing activity profiles of chemicals evaluated across biochemical targets.
- Pharmacokinetic modeling for nanoparticles.
- Quantitative structure-activity relationships in toxicity prediction.

What are some **current areas of research** in **computational toxicology?** (2)

-
- In silico prediction of carcinogenic potency.
 - Virtual tissues in toxicology.
 - Public databases supporting computational toxicology.
 - Regulatory use of computational toxicology tools and databases.
 - Computational approaches to assess the impact of environmental chemicals on key transcription regulators.
 - Molecular modeling for screening environmental chemicals for estrogenicity.
 - Predicting inhibitors of acetylcholinesterase by machine learning approaches.
 - Predicting activation enthalpies of cytochrome-P450-mediated reactions.

Googleによる検索結果 (2014年10月26日実施)



キーワード: computational toxicology
ヒット件数: 392, 000件

約8.3倍



- * 割合(日本／世界): $87,500 / 479,500 = 18.2\%$
- * 倍率(世界／日本): $392,000 / 87,500 = 4.48$ 倍



キーワード: 計算毒性学
ヒット件数: 87, 500件

約237.1倍

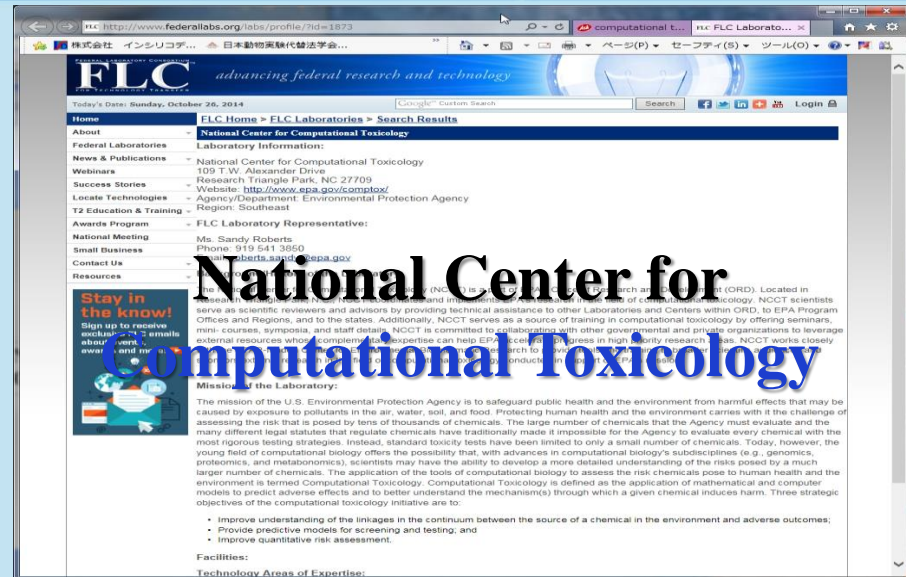


西欧における計算毒性学研究機関、組織、活動等(USA)

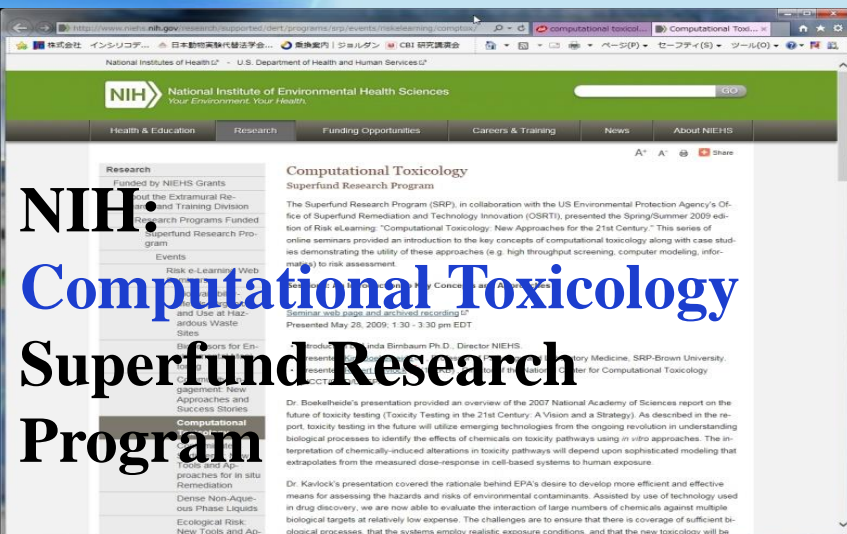
EPA: Computational Toxicology Research (CompTox)



National Center for Computational Toxicology



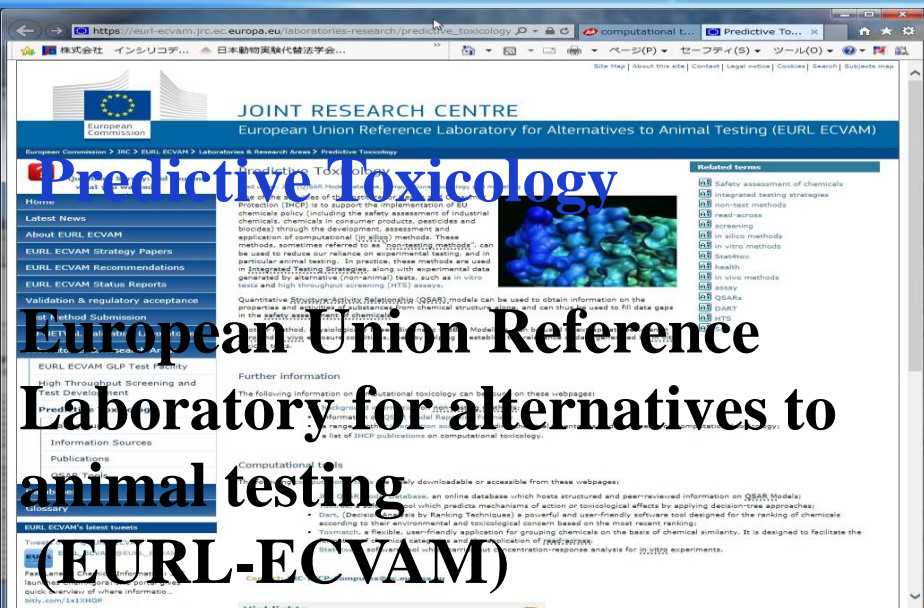
NIH: Computational Toxicology Superfund Research Program



American Society for Cellular and Computational Toxicology



西欧における計算毒性学研究機関、組織、活動等(EU)



The screenshot shows the homepage of the European Union Reference Laboratory for Alternatives to animal testing (EURL-ECVAM). The page features a blue header with the EURL-ECVAM logo and navigation links. The main content area is titled "Predictive Toxicology" and includes sections for "Latest News", "About EURL-ECVAM", "EURL-ECVAM Strategy Papers", "EURL-ECVAM Recommendations", "EURL-ECVAM Status Reports", "Validation & regulatory acceptance", "Method Submission", "EURL-ECVAM GLP Test Facility", "High Throughput Screening and Prediction", "Information Sources", "Publications", "Computational Toxicology", and "EURL-ECVAM's latest tweets". A sidebar on the right lists "Solubility terms" and "Safety assessment of chemicals".

Predictive Toxicology

European Union Reference Laboratory for alternatives to animal testing (EURL-ECVAM)



The screenshot shows the homepage of Computational Toxicology Services LLC. The page features a blue header with the company logo and navigation links. The main content area is titled "Computational Toxicology Services LLC" and includes sections for "Home", "Services", "Publications", and "Contact us". A sidebar on the right lists "Solubility terms" and "Safety assessment of chemicals".

Computational Toxicology Services LLC



The screenshot shows the homepage of the European Chemicals Agency (ECHA). The page features a blue header with the ECHA logo and navigation links. The main content area is titled "The European Chemicals Agency (ECHA)" and includes sections for "About Us", "Regulations", "Addressing Chemicals of Concern", "Information on Chemicals", "Chemicals in our Life", and "Support". A sidebar on the right lists "Solubility terms" and "Safety assessment of chemicals".

The European Chemicals Agency (ECHA)

***REACH関連**

●「計算毒性学」に専門家はいない

「計算毒性学」実施には、研究分野や業務の異なる様々なバックグラウンドを持つ人々の結集が必要。

●「計算毒性学」に対しては素人である

現在の日本では、「計算毒性学」に関しては殆ど全員が素人である

●「計算毒性学」を学ぶ環境

計算毒性学は究極の学際研究である。日本は欧米と異なり、異分野の研究者がチームを作ることが苦手である。この故に、計算毒性学を専門とする研究を行う場や学ぶ場所が日本には無い。

●西欧と日本の「計算毒性学」の現状

「計算毒性学」に関しては西欧の研究環境が急速に進み、研究開発や政府規制等に積極的に取り入れる動きが強く、確固たるものとなりつつある。

上記現状を何とかしたい

第一步:「計算毒性学」をテーマとした研究会の設立

現在までの「計算毒性学」研究会関連の動き

2014年5月

CBI学会にて「**計算毒性学**」研究会の設立が承認された

「計算毒性学」研究会会員の情報交換の場としてWEBを設定
(サイボウズ利用)

松山にてキックオフミーティング開催企画⇒台風にて中止

キックオフミーティングの再開催決定⇒ CBI大会前日実施

2014年10月27日にキックオフミーティングの再開催

* CBI大会のフォーカストセッションにて
第一回「計算毒性学」研究会実施

「計算毒性学」研究会設立の目標

- ◆日本の「計算毒性学」に関する環境は西欧と比較して大幅に遅れている。
日本の環境を変えて、西欧に追いつき、追い越したい。
- ◆日本に「計算毒性学」の流れを作りたい
- ◆日本に「計算毒性学」を行う若い研究者を育てたい
- ◆「計算毒性学」に関する情報交換の場を作りたい
- ◆「計算毒性学」を行う研究者の発表の場を作りたい



計算毒性学に専門家はありません。計算毒性学は一人の研究者で実現できません。様々なバックグラウンドを持つ方々の協力の結果として実現します。研究会に参加し、異分野の方々と一緒に日本の計算毒性学を取り巻く環境を変え、若い研究者を育てて行きましょう。西欧に取り残され、政府規制等は西欧の都合良くデザインされます。待っていただけでは何も変化しません。

2014年10月27日 CBI年会のプレナリーセッションとして
「計算毒性学」研究会キックオフミーティング実施



「計算毒性学(Computational Toxicology)」研究会が
正式に発足



「計算毒性学」研究会に参加し、
様々な研究分野の皆様と一緒に
問題を解決してゆきましょう

計算毒性学(Computational Toxicology)は顔の無い学問
■ 個々の分野の技術の組み合わせの結晶 ■
■ 異分野の研究者による共同研究の成果 ■





計算毒性学 (Computational Toxicology) 研究会

ご清聴ありがとうございました