

計算機毒性学研究のための研究会設立趣意書

計算機毒性学(Computational Toxicology)の基本や応用を学び、技術的な討論が出来るようになることを目指す。また、関連および新規研究分野への展開や融合の可能性検討を行う情報交換会の設立を目指します。

C B I 学会の新たな研究会活動の一つとして

「計算機毒性学(Computational Toxicology)」を提案致します。

- ◆ 「計算機毒性学(Computational Toxicology)」に関心のある方に集まっていただき、単なる情報交換の場だけでなく、基礎や応用等に関する技術を学び、より主体的な議論が出来るような勉強の場を作ります。
- ◆ 参加者はインシリコに詳しい研究者のみならず、インシリコの素人あるいは初心者ターゲットとし、これらの人々が集える場所を目指す。毒性関連の W E T 関連研究者や、環境あるいは機能性化合物関連研究者等の様々な研究レベルの方々や製造や販売現場の方々が集えることも目指します。
- ◆ 現在の計算機毒性学(Computational Toxicology)のみならず、今後の展開も模索するべく、関連研究分野の学習等も行ないます。例えば、hiPSC 技術とそのインシリコス毒性スクリーニングへの展開の可能性や、創薬技術のコンビナトリアルケミストリーとの融合、またトキシコゲノミクス等との連携の可能性等、広範囲に研究の輪を探ります。
- ◆ 計算機毒性学(Computational Toxicology)を取り巻く研究との連携や、俯瞰的に全体を見渡せる力を身に付けられるように、関連技術、特にADMEや創薬関連技術、化合物毒性、政府規制、動物実験環境等も考慮致します。
- ◆ 議論は計算機毒性学(Computational Toxicology)に基づく関連研究分野を含んで検討する。インシリコススクリーニング、データベースやデータ解析技術、人工知能、ネットワーク等との融合や、可能性に関しての議論等も行ないます。
- ◆ 本研究分野の世界の流れを積極的に把握し、相互に情報交換できるような場やチャンス企画、検討致します。

以上

提案へのバックグラウンド：

1. 計算機毒性学(Computational Toxicology)への要求の高まり

様々な分野で計算機毒性学(Computational Toxicology)への要求が高まっている。

- ・創薬／農薬研究分野での副作用や毒性の無い薬の開発
- ・機能性化合物研究分野での化合物規制への対応
- ・環境分野における生体／生態毒性化合物への規制
- ・化粧品分野における動物実験禁止を受けての、in vitro およびインシリコの展開

2. 諸外国と比較した時の日本における計算機毒性学(Computational Toxicology)の現状

国際的に見て、日本における計算機毒性学(Computational Toxicology)への取り組みや、研究現場での認知度や技術レベルは諸外国に比べて劣っている。

- ・米国;Tox21、EU;SEURAT-1

3. 日本の研究現場の状況

・基本技術の違い

計算機毒性学(Computational Toxicology)実施技術は、創薬等の研究分野で展開されてきた様々なインシリコ適用技術とは異なった技術や原理が必要である。即ち、創薬分野で展開されてきた構造-活性相関やドッキング、さらにはシミュレーション等の技術適用が困難か、不可能である。従って、計算機毒性学(Computational Toxicology)を理解し、実施するには従来とは異なる知識や情報が必要です。

・研究者の違いと現状

毒性関連研究者はインシリコ技術の評価せず、積極的にインシリコ技術の採用や展開を行うことは少ない。一方で、インシリコ関連研究者は薬理活性／ADME、バイオ関連が多く、化合物毒性をターゲットとすることが少ない。また、同じインシリコであっても適用技術が大きく異なるため、他分野の研究者が積極的に計算機毒性学(Computational Toxicology)研究に変更することは困難なため、全体として研究者が少ない。

4. 具体的活動

第一段階として、WEBでの共通の討論や情報交換場所の確保を目指します。

暫定:インシリコスクリーニングブログ

仮題:「楽しく、失敗がなく、良く理解できるインシリコ毒性スクリーニング学習塾」

<http://insilicoscreening.blogspot.jp/>

5. 連絡先 (暫定)

(株)インシリコデータ 湯田 浩太郎

E-mail: k-yuta@insilicodata.com

2014. 2. 23