

構造活性フォーラム 2022

「*In silico*アプローチによる毒性予測研究および周辺分野の現状と展望」

主催： 日本薬学会構造活性相関部会

協賛： 日本化学会、計算情報科学生物学会 (CBI 学会)

後援： 日本毒性学会

会期： 2022年6月3日 (金)

会場： オンライン開催

フォーラムホームページ： <http://www.qsarj.org/forum2022> (4月公開予定)

開催趣旨： 化学物質の安全性を確保するために、毒性の評価は必須の課題である。毒性物質を効率的に識別する方法として、*in silico*技術を用いた予測法の確立には大きな期待が寄せられている。しかし、毒性は一般に複雑な発現メカニズムを伴うことから、予測が困難な対象として知られている。毒性発現過程には、組織・臓器への暴露に関連する体内動態の要因、生体内高分子であるタンパク質や核酸との相互作用、そしてそれに続く多様な生化学経路が関与する。そのため、単一のタンパク質を解析対象とすることは困難であることが多い。肝毒性の様に同じ表現型であっても、原因物質ごとに異なる機序で誘発される例もある。一方、予測モデルの説明性に対する要望は極めて強い。本フォーラムでは、このような毒性関連の生理的なイベントを *in silico* 技術でひもとく、解析し、予測する研究について議論を深めたい。様々な形で毒性関連の研究に携わっている方々にとって有意義な意見交換の場となれば幸いである。

プログラム：

基調講演「毒性発現メカニズムに基づく一般化学品の毒性予測—AI-SHIPS プロジェクト—」

船津 公人 (奈良先端科学技術大学院大学)

講演 1. 「Applicable Artificial Intelligence Method to Drug Metabolism and Pharmacokinetics - Comparison of Various Methods for Metabolic Active Sites-」

笹原 克則 (Otsuka Pharmaceutical Development & Commercialization, Inc.)

講演 2. 「大規模変異原性データを用いた第二回 Ames/QSAR 国際チャレンジプロジェクト」

古濱 彩子 (国立医薬品食品衛生研究所)

講演 3. 「AI 創薬の基盤とデータ統合」

水口 賢司 (大阪大蛋白質研究所・医薬基盤健康栄養研究所)

講演 4. 「拡散方程式の ADMET 予測モデルへの適用」

日高 中 (武田薬品工業)

講演 5. 「副作用研究における AI の可能性」

奥野 恭史 (京都大学大学院医学研究科)

参加登録および申込締切日： 5月20日 (金) までに、フォーラムホームページから事前参加登録をお願いいたします。参加人数が上限に達しましたら、参加登録を打ち切らせていただきますのでご了承ください。

参加費： 一般会員・関連学会員 1000円 非会員 2000円 学生 無料

問合せ先： 構造活性フォーラム 2022 実行委員会 植沢 芳広 (実行委員長)

〒204-8588 東京都清瀬市野塩 2-522-1 明治薬科大学

Tel: 042-495-8983 E-mail: uesawa@my-pharm.ac.jp