

OECDの動物実験代替法、化合物ライブラリー、ADMET データキュレーション OECD for alternatives to Animal Experiments, Compound Library, ADMET Data Curation

開催趣旨:

計算毒性学は多種多様な研究分野や技術から構成され、典型的な複合研究となる。従って、計算毒性学では様々な研究分野について最新の情報を認識しておくことが重要となる。

本フォーカストセッションでは以下の研究分野で活躍されている研究者の方々に最新の研究成果や情報についての講演をお願いしました。

1. 動物実験代替法に関する OECD での対応
2. 理研での天然化合物ライブラリー
3. ADMET 関連データのデータキュレーション

以上の3分野の最先端の成果を学ぶことで、計算毒性学との連携や適用に役に立ててほしい。

モデレーター: 湯田 浩太郎 Kohtarō Yuta, 株式会社 インシリコデータ In Silico Data, Ltd.
櫻谷 祐企 Yuki Sakuratani,
独立行政法人 製品評価技術基盤機構, National Institute of Technology and Evaluation
平野 弘之 Hiroyuki Hirano,
国立研究開発法人 理化学研究所, Institute of Physical and Chemical Research
狩野 敦 Atsushi Kanou, 株式会社 モルシス MOLSIS Inc.

1. 「動物実験代替法に関する OECD の動向 ~IATA と AOP~」

櫻谷 祐企 Yuki Sakuratani, 独立行政法人 製品評価技術基盤機構

近年、動物実験代替法の利用推進に関する OECD 活動は、様々なタイプの情報(in vivo, in vitro, in silico 等)を用いて統合的に評価する Integrated Approaches to Testing and Assessment (IATA)、及び、有害性発現のメカニズムに関する情報を整理・共有化する Adverse Outcome Pathway (AOP)の2つのコンセプトを軸に展開されている。本発表では、IATA 及び AOP の基本的な考え方について具体例を基に平易に解説すると共に、動物実験代替法の利用推進に関する OECD 活動の現状と展望について述べる。

2. 「公的研究資源としての理化学研究所 天然化合物ライブラリー (NPdepo)」

平野 弘之 Hiroyuki Hirano 国立研究開発法人理化学研究所

ケミカルバイオロジーとは化合物を起点として、生物学的な研究を行う複合的な研究分野です。多様な構造の化合物と情報を集積した化合物ライブラリーは、ケミカルバイオロジーの研究手法を用いて生物機能研究、医農薬研究を推進する上で重要な技術基盤となっている。理研天然化合物ライブラリー (NPdepo) は、公的な研究資源ライブラリーとして国内外の研究機関と連携した研究支援を行っている。NPdepo 化合物ライブラリーに関する基本的事項およびライブラリー構築の情報技術の取り組みについて紹介する。

3. 「THE IMPORTANCE OF A SOLID KNOWLEDGE MANAGEMENT STRATEGY IN COMPUTATIONAL TOXICOLOGY」

Dr Josep Prous Jr., Executive Director, Bioinfogate, Barcelona.

One of the opportunities for drug R&D productivity optimization comes from the reduction of costs due to unexpected toxicity and safety issues, which still represent one third of unwanted exit scenarios. Following this trend, major pharmaceutical companies have tried to build a consensus and determine which targets should be screened, in-silico and experimentally, to avoid unwanted and costly surprises during the preclinical toxicology and clinical development stages.

However, given the continuous growth of safety and toxicity information it is essential to design an adequate knowledge management plan to identify the most relevant safety hotspots to be analyzed in the context of a given research project.

In this regard, we have developed a translational safety intelligence portal providing integrated preclinical toxicity and clinical adverse event intelligence for drugs and targets in all phases of drug R&D, including first-in-class and emerging targets.

We will present how the availability of a large amount of, high quality, manually curated information has allowed to develop scoring functions to identify safety hotspots which may be readily applicable in computational toxicology programs.