

# 「計算毒性学」研究会設立報告および参加のお願い

## C B I 学会の新たな研究会として

### 「計算毒性学(Computational Toxicology)」研究会が設立されました。

本研究会では、計算毒性学(Computational Toxicology)の基本や応用を学び、参加者相互での技術的な討論や情報交換が出来る共通の場所を提供することを目指します。また、関連および新規研究分野への「計算毒性学」の展開や、融合可能性等の検討、さらには情報交換の場を提供致します。

◆ 「計算毒性学(Computational Toxicology)」に関心のある方々に集まっていただきます。本研究会は、単なる研究発表や講演の場の提供ではなく、基礎や応用、さらには実用、運用等に関する技術を学ぶ場とし、本研究会参加の方々が、より深く、主体的な議論が出来るような勉強の場を目指します。

◆ 参加者はインシリコに詳しい研究者のみならず、インシリコの素人の参加を想定します。また、「毒性」という切り口で、様々な研究分野（医／農薬、機能性化合物、環境、医療、他）の方々が分野を超えて気軽に情報交換でき、相互にスキルアップできる場を目指します。

毒性関連のDRY研究者のみならず、WET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、製造や販売現場の実務関連の方々が集える場となることも目指します。

◆ 現在の計算毒性学(Computational Toxicology)のみならず、将来的な展開も模索します。例えば、hiPSC 技術とそのインシリコ毒性スクリーニングへの展開可能性や、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、さらには様々な医療や地域医療、人健康等の様々な関連分野との連携可能性を探り、広範囲に「計算毒性学」の可能性の輪を探ります。

◆ 本研究会への参加者が、計算毒性学(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。

◆ 議論は計算毒性学(Computational Toxicology)を支える基礎関連研究分野を含んで討論致します。例えば、コンピュータ関連ではインシリコスクリーニング、データベースやデータ解析技術、人工知能、ネットワーク等の基本技術を学ぶ場を探ります。

◆ 本研究分野の実施時に必要となる実務上での様々な問題点の討論、さらには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を企画、検討致します。

□提案へのバックグラウンド：

### 1. 計算毒性学(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ます。

- ・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と比較して極めて貧弱です。

- ・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る技術や原理が必要です。即ち、創薬分野で展開されてきた構造-活性相関(QSAR)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、不可能な分野です。従って、計算毒性学(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となります。

#### ・「計算毒性学(Computational Toxicology)」の日本における現状

日本における毒性関連研究者はWET研究者が殆どです。また、インシリコ関連研究では薬理活性／ADME、バイオ関連が殆どで、化合物毒性をターゲットとする研究者は殆どおりません。また、同じインシリコであっても化合物毒性では適用技術が大きく異なるため、他分野のインシリコ研究者が気軽に計算毒性学(Computational Toxicology)研究に参加することは困難なため、日本では他の研究分野と異なり、全体として研究者が少ないのが現状です。

□「計算毒性学」研究会への参加上の手続き

#### 1. 参加資格および年会費：自由参加および年会費無料

「計算毒性学」研究会はCBI学会傘下に設立され、学会の支援を受けますが、研究会への参加にCBI学会の会員である必要はありません。また、年会費もありません。会員相互の情報交換の場(WEB)を提供致します。その他の詳細活動は、今後参加された皆様と協議致しまして、順次決定／実行いたします。

#### 2. 参加手続き：参加される方は最初に参加の意思を下記メールアドレスに御連絡いただきます。

参加連絡用 e-mail:contact@insilicodata.com

本メールが届きましたならば、参加意思ありと確認され、CBI学会より「計算毒性学」研究会参加への招待メールが届きます。このメールに、連絡用の e-mail と個人用パスワード設定後、返信いただければ参加登録が完了致します。その後は「計算毒性学」研究会WEBへの参加が可能となります。

皆様の積極的な参加をお待ち致します。

2014年5月吉日