

「計算毒性学と人工知能(1)」**ー計算毒性学における人工知能の基本。過去、現在そして今後ー****Computational toxicology and artificial intelligence (1):****Basics of artificial intelligence in computational toxicology. Past, present and future****開催趣旨:**

インシリコ技術による化合物の毒性評価/予測は薬理活性やADME等と異なり論理的なアプローチが極めて取りにくい分野である。このために本研究分野では当初より化学多変量解析/パターン認識(ケモメトリックス)によるアプローチと人工知能によるアプローチが試みられてきた。現在、人工知能関連技術が注目され、経済産業省による化合物毒性評価に関する国のP Jが発足した。最近の人工知能技術はケモメトリックスの基本技術の一つである機械学習が拡張展開されたもので、特に深層学習(ディープラーニング)が注目されている。

本フォーカストセッションでは、最初にインシリコによる化合物毒性評価の基本をまとめる。続いて、現在世界的に展開されている人工知能(ルールベース型)による毒性評価支援システムのDerekシステムをご紹介します。最後に、今後の人工知能技術を適用した化合物毒性予測システムP J(AI-SHIPSプロジェクト)の立ち上げに関するご講演をいただく。なお、このAI-SHIPSプロジェクトに関する具体的な講演はFS-15のフォーカストセッション「計算毒性学と人工知能(2)」(10月5日:13:30-15:00)に企画されていますので、ご参加ください。

モデレーター: 湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta

株式会社 インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

植沢 芳広 Yoshihiro Uesawa

明治薬科大学 Meiji Pharmaceutical University

1. 計算毒性学における人工知能の歴史と現状**湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta**

株式会社 インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

インシリコによる化合物毒性評価の研究分野では、昔から化学多変量解析/パターン認識(ケモメトリックス)と人工知能(ルールベース型)が二大アプローチとして展開されてきた。本講演では、インシリコによる化合物毒性評価の歴史について簡単にまとめる。

2. 人工知能(ルールベース型)による化合物毒性評価システム:Derek**茂木 邦雄 Mogi Kunio**

伊藤忠テクノソリューションズ株式会社 ITOCHU Techno-Solutions Corporation

3. 毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法開発プロジェクト(AI-SHIPSプロジェクト)**福原 和邦 Kazukuni Fukuhara**

経済産業省 Ministry of Economy, Trade and Industry