

29【B】1045

薬物動態予測のための新しい情報科学的アプローチ

Novel informatic approaches for predicting pharmacokinetic properties

○山下 富義¹(¹京大薬)

コンビナトリアルケミストリーやハイスループットスクリーニングの導入により、医薬品の探索研究は「勘と経験」から「自動化による大量処理」へと大きく変貌した。ここでは、ライブラリーの多様性を考慮しながらコンビナトリアル展開し、ハイスループットで合成、評価を行い、フォーカスが絞られていく。さらに、ポストゲノム時代に突入した現在、ゲノム情報の中から創薬標的分子を発見し画期的新薬の開発に繋げるゲノム創薬も積極的に展開されるようになった。こうした新しい創薬研究の流れの中、情報科学が果たすべき役割がますます重要になっている。

探索研究の迅速化も然ることながら、現在解決を求められる大きな課題は、新薬の成功確率（特に開発後期における）の向上である。特に、薬物動態は医薬品の有効性や安全性に深く関わる重要なポイントであり、薬物動態予測に関するデータベースが構築できれば **drug-like** な化合物だけで構成するライブラリー設計も可能となり、効率の良い理想的な創薬研究を展開できるようになる。

こうした観点から、演者らは、遺伝的アルゴリズムやニューラルネットワークを薬物動態予測のパターン認識に導入し、膜透過性や溶解度の予測モデルの開発を行った。さらに、多くのデータセットから潜在的共通因子を抽出するアルゴリズムや、高次元空間の可視化による新しい判別分析法も考案した。本発表では、これらの研究成果を紹介しつつ、創薬研究における薬物動態予測の意義について議論したい。