

変異原性 QSAR ワークショップ

「QSAR を用いた変異原性予測とエキスパート判断の最前線」

開催形式：第 54 回 JEMS 大会サテライトミーティング、対面及び後日のオンデマンド配信

日時：11 月 24 日（月）09:00～15:00

場所：静岡県立大学 草薙キャンパス 看護学部棟 13411 講義室

- サテライトミーティング 1 座長：小山 直己（中外製薬）、橋本 清弘（武田薬品工業）
主要 QSAR ベンダー 3 社（Lhasa、MultiCASE、Leadscope）によるニトロソアミン対応の最新技術動向を紹介いただきます。
 - イントロダクション
小山 直己（中外製薬）
 - Leveraging QSAR for the Safety Assessment of Nitrosamines
Dr. Christopher Barber (Lhasa limited CEO)
 - To clarify the basis for setting AI using Acroscopic, focusing on appropriate similarity calculations to support the standardization of nitrosamine evaluations in Japan
長遠 裕介 氏（富士フイルム富山化学）
 - Nitrosamines: Questions and Answers
Dr. Roustem Saiakhov (MultiCASE Inc. President)
 - QSAR-QM Modeling of Nitrosamines Supporting Accurate Nitrosamine Potency
Dr. Kevin Cross (Leadscope, Instem Director of in silico Science)
- ランcheonセミナー
Computational Toxicology: Problems, Solutions, and Perspectives
Dr. Roustem Saiakhov (MultiCASE Inc. President)
- サテライトミーティング 2 座長：小山 直己（中外製薬）、橋本 清弘（武田薬品工業）
QSAR を用いた変異原性予測の実践的な使い方参考となるセッションです。ケーススタディを通じて、ニトロソアミン事例に加え、Cohort of Concern 以外の変異原性物質について QSAR 予測結果の適切な解釈と科学的根拠に基づく専門家判断のプロセスについて議論します。
 - ニトロソアミン類の許容限度値設定 従来の方法と新しいアプローチ
美濃 洋祐（日本たばこ産業）
 - 不純物の変異原性・がん原性予測の深化とエキスパートの役割
武藤 重治（中外製薬）
 - OECD QSAR アセスメントフレームワークにおける Ames 変異原性評価のケーススタディ
古濱 彩子（国立医薬品食品衛生研究所）
 - Ames 試験予測ソフトウェア xenoBiotic (2025)
澤田 敏彦（岐阜大学、株式会社ゼノバイオティック）
 - DataRobot を活用した Ames 変異原性予測モデルの構築
渡邊 賢治（田辺三菱製薬）
- 閉会あいさつ：橋本 清弘（武田薬品工業）