

報道関係各位

2024年12月24日
ロート製薬株式会社

機械学習を活用した 眼刺激性評価の動物実験代替法への取り組み ～名古屋市立大学とロート製薬の共同研究～

ロート製薬株式会社(本社:大阪市、社長:杉本雅史)は、動物実験を行わない化粧品(薬用化粧品等を含む)の製品開発をすすめています。今回、名古屋市立大学(所在地:名古屋市、学長:浅井清文)薬学部医薬品安全性評価学分野との共同研究にて、難溶性物質の眼刺激性評価における *in silico*^{*1} 予測モデル開発に関する研究を進めた結果、化学物質の化学構造から得られる情報のみから眼刺激性を評価することが可能な予測モデルを開発することに成功し、多くの化学物質の眼に対するハザード評価の可能性を見出しました。本研究内容は日本動物実験代替法学会第37回大会(2024年11月29日～12月1日開催)においてポスター発表いたしました。

研究成果のポイント

- ◆眼刺激性試験(STE試験法^{*2})の *in vitro*^{*3} 試験データを用い、化学物質の眼刺激性を化学構造情報のみから予測する *in silico* モデルの開発に成功した
- ◆難溶性物質だけでなく合成できない化学物質等、多くの化学物質について眼に対する毒性予測やスクリーニング評価の可能性を見出した

研究の背景

経済協力開発機構(OECD)テストガイドラインに記載されている *in vitro* 代替試験法の多くは、難溶性物質が適用できない場合があり、機械学習^{*4} を活用した *in silico* 予測モデルのような新たな代替試験法の開発が求められています。本研究では、Draize試験^{*5} の動物実験代替法としてガイドライン化された STE試験法の *in vitro* 試験データを用い、化学物質情報から眼刺激性の迅速な予測が可能な *in silico* モデルの作成を行いました。

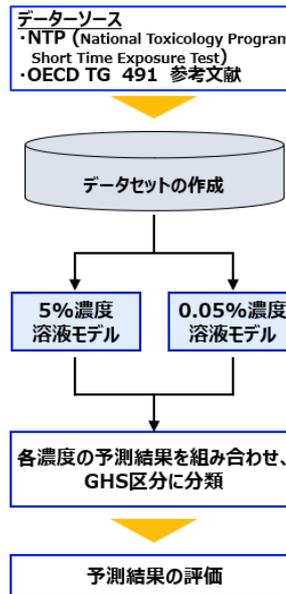
結果

STE試験から得られた毒性分類(GHS分類^{*6})との一致性を基に、勾配ブースティング決定木系のアルゴリズムを用いた機械学習により作成した *in silico* モデルを評価した結果、*in vivo*^{*7}、*in vitro*、*in silico* 各々の間で評価結果がほぼ等しく、良好な *in silico* モデルの開発に成功しました。

本研究成果が社会に与える影響(本研究成果の意義)

本モデルは、化学物質の化学構造情報のみを用いて STE試験を予測することが可能です。

<本研究の流れ>



このシステムの活用により、難溶性物質や合成が困難な化学物質の安全性確認のみならず、眼科用成分の候補選定や誤使用時の化粧品の危険性評価への応用が期待されます。

ロート製薬の動物実験代替法への取り組み

当社は、上記取り組み以外にも、コンピュータや情報技術を利用したシミュレーションやデータ解析を行う *in silico* 毒性予測や培養細胞を用いる *in vitro* 評価法、分析機器等を用いて生体物質と化学物質の反応性を評価する *in chemico*^{※8} 評価法を積極的に活用した研究開発活動を推進しています。

お客様のウェルビーイングに貢献できる製品やサービスの提供を継続していくために、動物実験代替法の研究への取組を推進してまいります。

■用語説明

※1 *in silico*

コンピュータや情報技術を用いたシミュレーションやデータ解析などの研究手法。

※2 STE 試験法(the Short Time Exposure Test : 短時間曝露試験法)

経済協力開発機構(OECD)の試験ガイドラインに記載されている代替法。角膜上皮細胞に被験物質溶液の5%及び0.05%濃度を5分間曝露した後の細胞生存率から被験物質溶液の非刺激性物質と強刺激性物質のGHS分類を可能とする国際的な試験法。

※3 *in vitro*

試験管や培養器などの人工的な環境下で行われる試験。

※4 機械学習

コンピュータ(機械)が大量のデータを分析(学習)し、パターンや規則性を見つけ出すこと。予測や意思決定の精度を向上させる技術の1つ。

※5 Draize 試験

経済協力開発機構(OECD)の試験ガイドラインに記載されている主にウサギを用いた眼刺激性試験。

※6 GHS 分類

「化学品の分類および表示に関する世界調和システム」(The Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals: GHS)は2003年7月に国連勧告として採択された。GHSは化学品の危険有害性を世界的に統一された一定の基準に従って分類し、災害防止及び人の健康や環境の保護に役立てようとするもの。

※7 *in vivo*

動物などを用い生体内の反応を評価する試験。

※8 *in chemico*

生体組織や培養細胞を使用しない、簡便かつ短期間で評価可能な研究手法。主に物質の化学反応のみを評価する試験法。

<お問い合わせ先>

ロート製薬株式会社 広報・CSV推進部

〒530-0011 大阪市北区大深町3-1 グランフロント大阪タワーB29階

大阪オフィス TEL:06-6758-1211 FAX:06-6758-9820

東京オフィス TEL:03-5442-6074 FAX:03-6832-6006

広報・CSV推進部 大阪・東京共通メールアドレス:pr@rohto.co.jp

ロート製薬株式会社は、大阪・関西万博「大阪ヘルスケアパビリオン」のスーパープレミアムパートナーです。

