

報道関係各位

2025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(続報)、さらに精度高い予測モデルへ前進

～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:瀬木英俊)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。名古屋市立大学(所在地:名古屋市、学長:浅井清文)データサイエンス研究科安部研究室、薬学研究科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} 予測モデル開発を進めて参りました。その結果、化学物質の化学構造情報のみから眼刺激性を予測可能とする新たなモデルの構築に成功し、さらに今回眼刺激性の区分判定に対するより詳細な判別を可能とする新規モデルを開発しました。本研究内容は日本動物実験代替法学会第38回大会(2025年11月1日～11月3日開催)においてシンポジウム、ポスターで発表いたしました。

研究成果のポイント

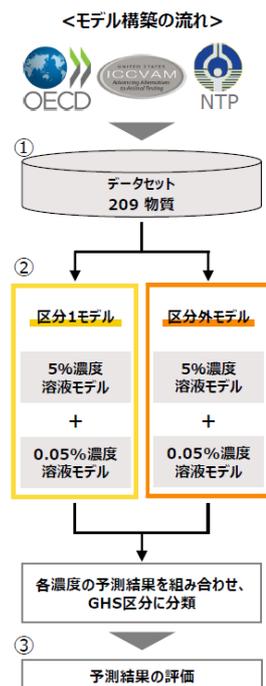
- ◆眼刺激性試験(STE試験法^{※4})の in vitro^{※5} 試験データを用い、化学物質の眼刺激性を化学構造情報のみから予測する in silico モデルの新たなプロセスを開発
- ◆区分1^{※2}の予測モデルと区分外^{※3}の予測モデルを組み合わせた新たな高精度予測モデルの有効性を確認
- ◆難溶性物質だけでなく合成できない化学物質等、多くの化学物質について、事前に眼に対する毒性予測やスクリーニング評価の可能性を見出した

研究の背景

眼刺激性評価において、経済協力開発機構(OECD)テストガイドラインに基づく in vitro 代替法試験法は、一定の有効性を示す一方で、難溶性物質など適用できない化学物質が存在するという課題があります。

その課題に対し、機械学習^{※6}を活用した in silico モデルは、既存データと化学構造情報を活用して毒性を予測できる手法として国際的に期待が高まっている分野です。

これまで我々は、Draize 試験^{※7}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、化学物質の構造情報や物性値等から、眼刺激性を予測するモデルの開発を進めてきましたが、この度、新たに区分1と区分外の双方を高精度に予測できるモデルの構築に取り組みました。



結果

STE 試験から得られた毒性分類(GHS 分類※8)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、区分1モデルの 5%及び 0.05%濃度溶液、並びに、区分外モデルの 5%及び 0.05%濃度溶液のそれぞれの in silico モデルを作成し、性能を評価した結果、in vivo※9、in vitro、in silico 各々の間で評価結果がほぼ等しく、高精度な予測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。

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※10 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 区分 1

重篤な損傷性を引き起こす被験化学物。UN GHS 区分 1。

※3 区分外

重篤な損傷性の分類が不要な被験化学物。UN GHS 区分外。

※4 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。

※5 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。

※6 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。

※7 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。

※8 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。

※9 in vivo

動物などを用い生体内の反応を評価する試験。

※10 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