

# 医薬品候補化合物の副作用発症を 予測する数理モデルの創成

大阪大学大学院 <sup>1</sup>情報科学研究科, <sup>2</sup>薬学研究科、<sup>3</sup>微生物病研究所

氏名：Yushi Tian<sup>1</sup>、川下理日人<sup>2,3</sup>、高木達也<sup>2,3</sup>

## 目的

医薬品の重篤な副作用は医薬品開発現場及び臨床現場で問題となっている。医薬品の化合物構造と重篤な副作用の発症との関連性を見出したら、薬学方面のみならず、社会経済方面にも貢献できるため、副作用を予測できる数理モデルの創成を目的とした。

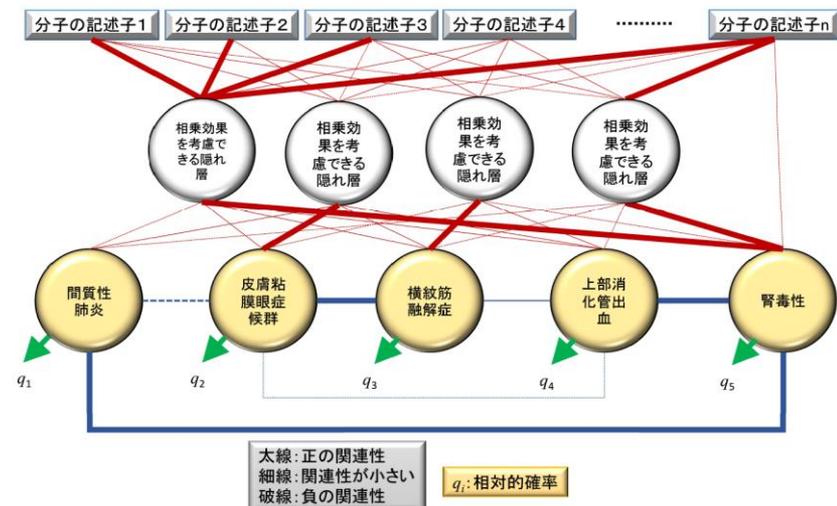
## 内容

医薬品医療機器総合機構 (PMDA) の副作用データベースを使用し、重篤性が高い副作用を対象として選出した。化合物の構造情報 (分子記述子) を計算し、副作用の有無との関連性を検討している。

また、ニューラルネットワーク法をベースとする、記述子情報及び他の副作用の有無の情報を用いて、発症有無を判別できる方法を検討している。

## 進捗

本研究の実施開始は、昨年末であり、現在は大規模の計算の前準備 (PCマシンでの計算方法の検討、構造情報の計算等) を実施している。本格的な計算は次年度より実施する予定である。



(計算結果のイメージ図)