



山崎 浩史 昭和薬科大学 薬物動態学研究室 教授 (分担 同 准教授 清水万紀子 特任助教 安達昂一郎)

目的 経口投与後の一般化学物質の経口利用率を含めたヒト体内ばく露量推定のための簡便なモデル開発を目的

結果および考察

1. 生理学的薬物動態(PBPK*)モデルを用いる化学物質のデータ駆動型ヒト体内ばく露量予測手法の開発

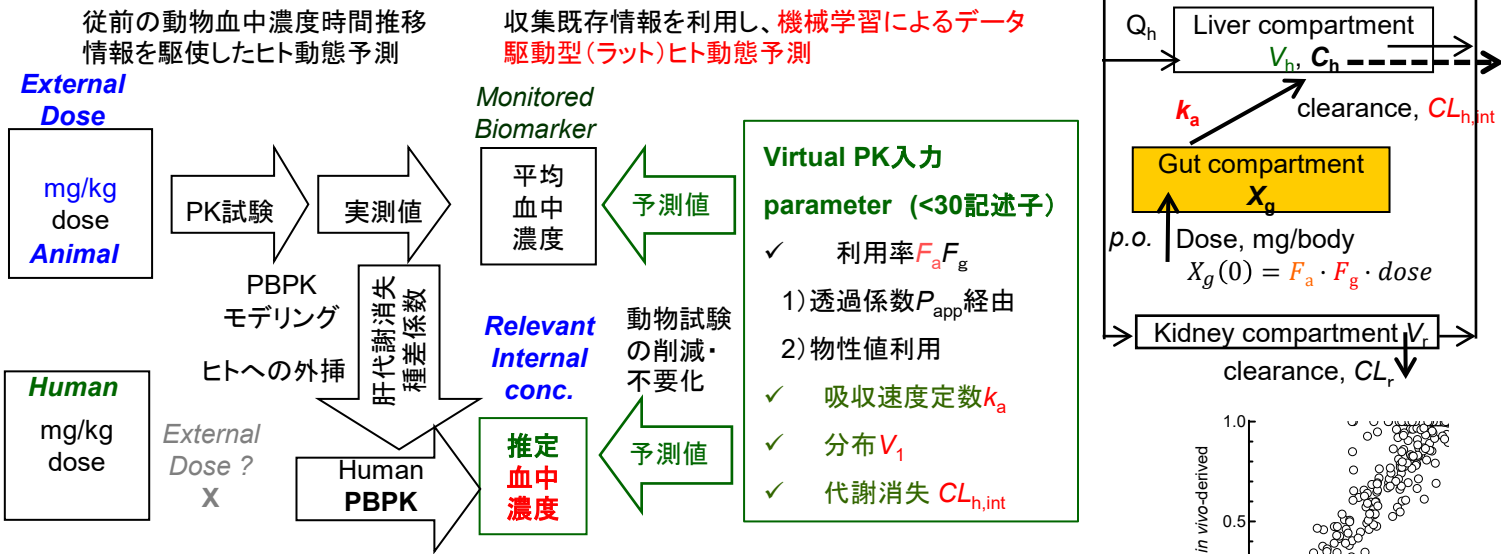
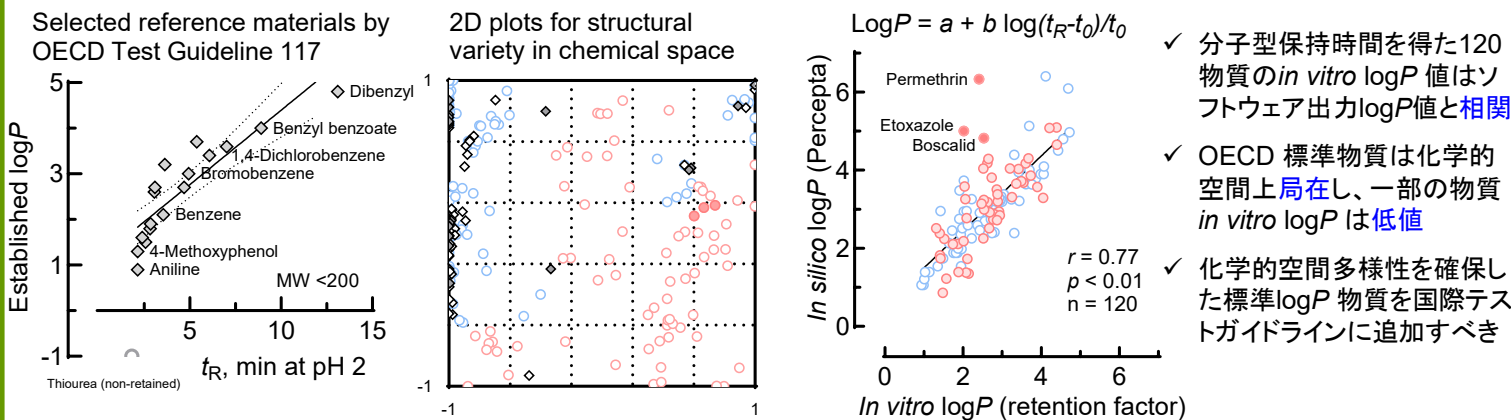


Fig. 1 生理学的薬物動態モデルを介した経口吸収後の血液中物質濃度推移予測
✓ 対象物質構造データから薬物動態入力パラメータを予測する機械学習システムを利用

2. 物質の分配係数P、肝-血漿分配係数 $K_{p,h}$ が規定する肝中ばく露評価と動物最小肝毒性LOEL値



Inverse correlation between values of virtual hepatic AUC of selected lipophilic food chemicals ($\text{log}P > 1$) and their LOEL (≤ 300 mg/kg/day) in rats

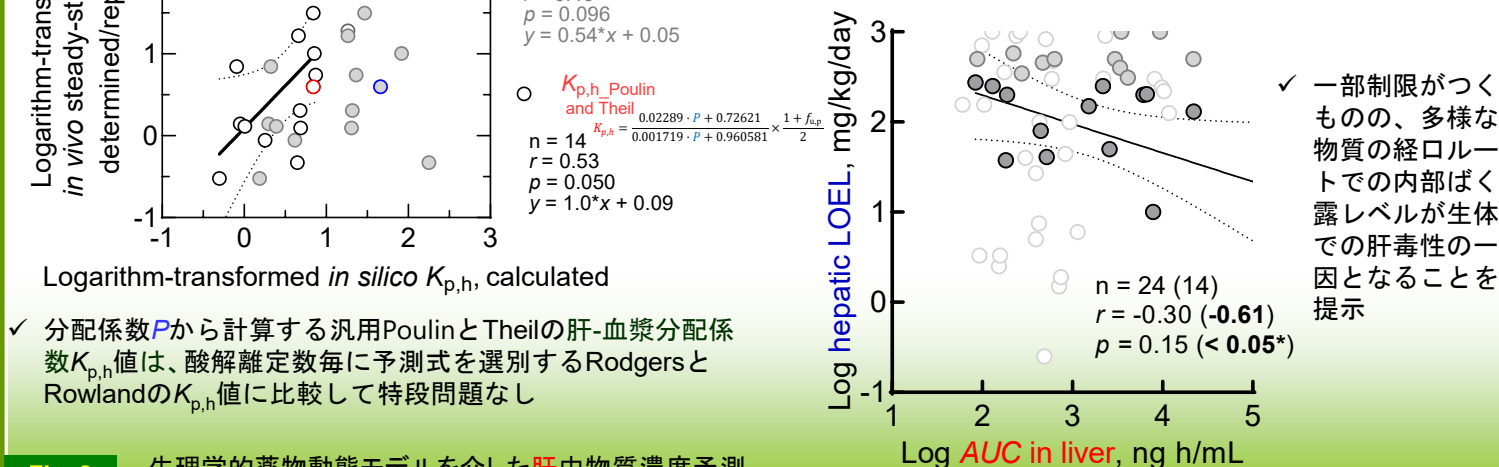


Fig. 2 生理学的薬物動態モデルを介した肝中物質濃度予測
✓ 対象物質構造データから薬物動態入力パラメータを予測する機械学習システムを利用