

# xenoBiotic<sup>®</sup>

化合物毒性予測ソフトウェア

<https://xenobiotic.jp/>

(株)ゼノバイオテック

澤田 敏彦

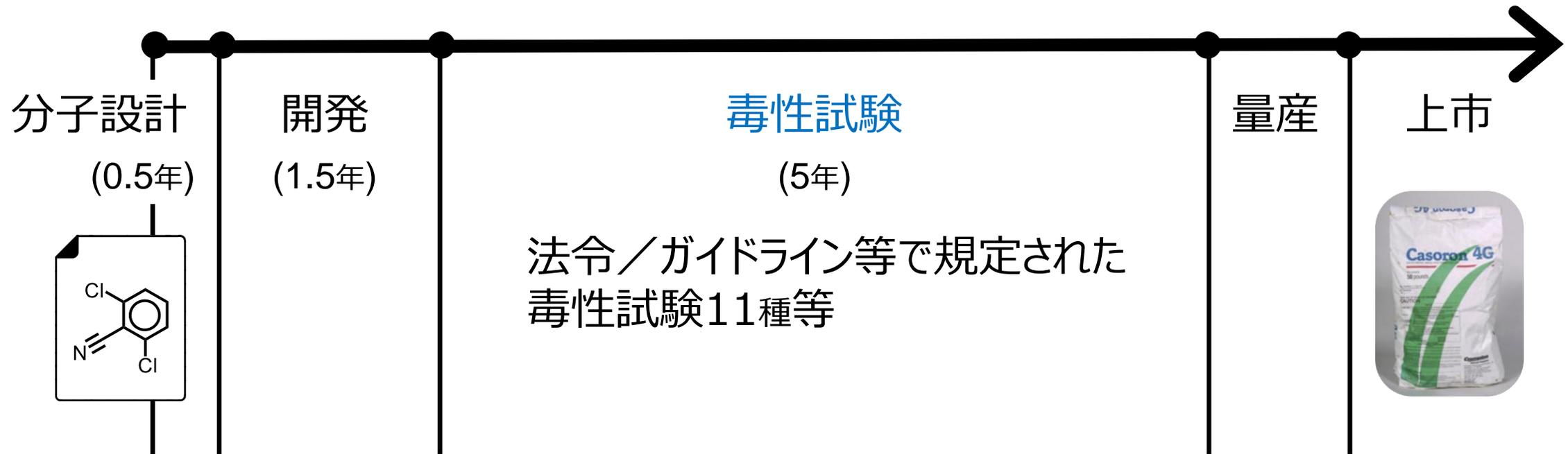
sawada@xenobiotic.jp



BioJapan2021  
2021/10/13-15

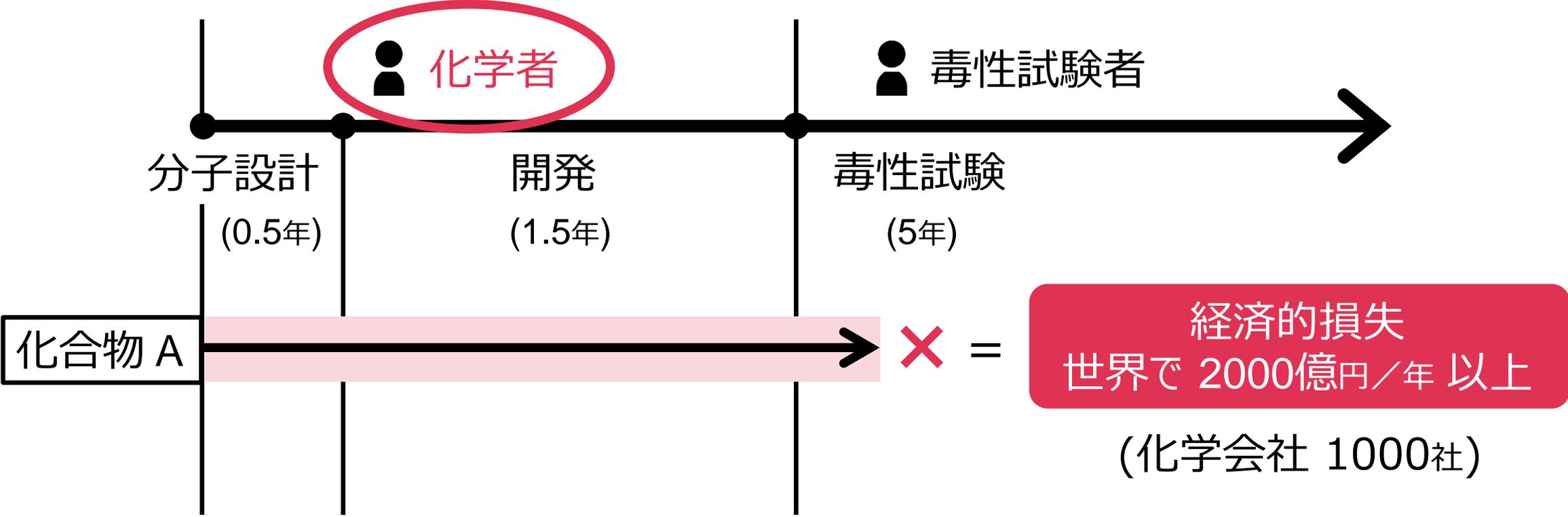
# 毒性試験とは

化学会社が医農薬品、添加剤等の機能性新化合物を開発上市するには  
毒性試験の通過（毒性試験が陰性）が必須



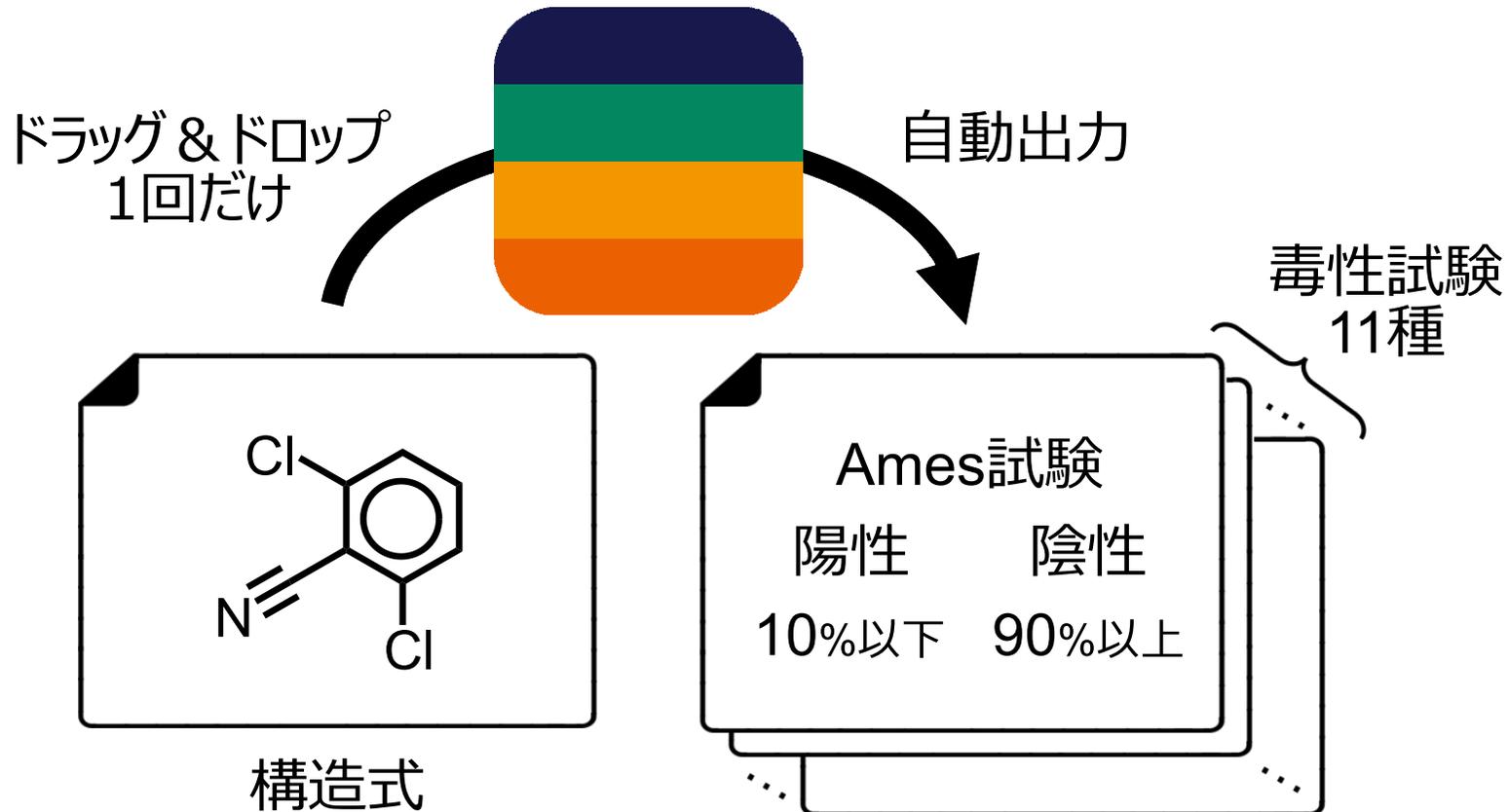
# 化学会社が抱える課題

毒性試験の不通過（毒性試験が陽性）が頻発



# 製品：化学者向けの化合物毒性予測ソフトウェア xenoBiotic

## xenoBiotic

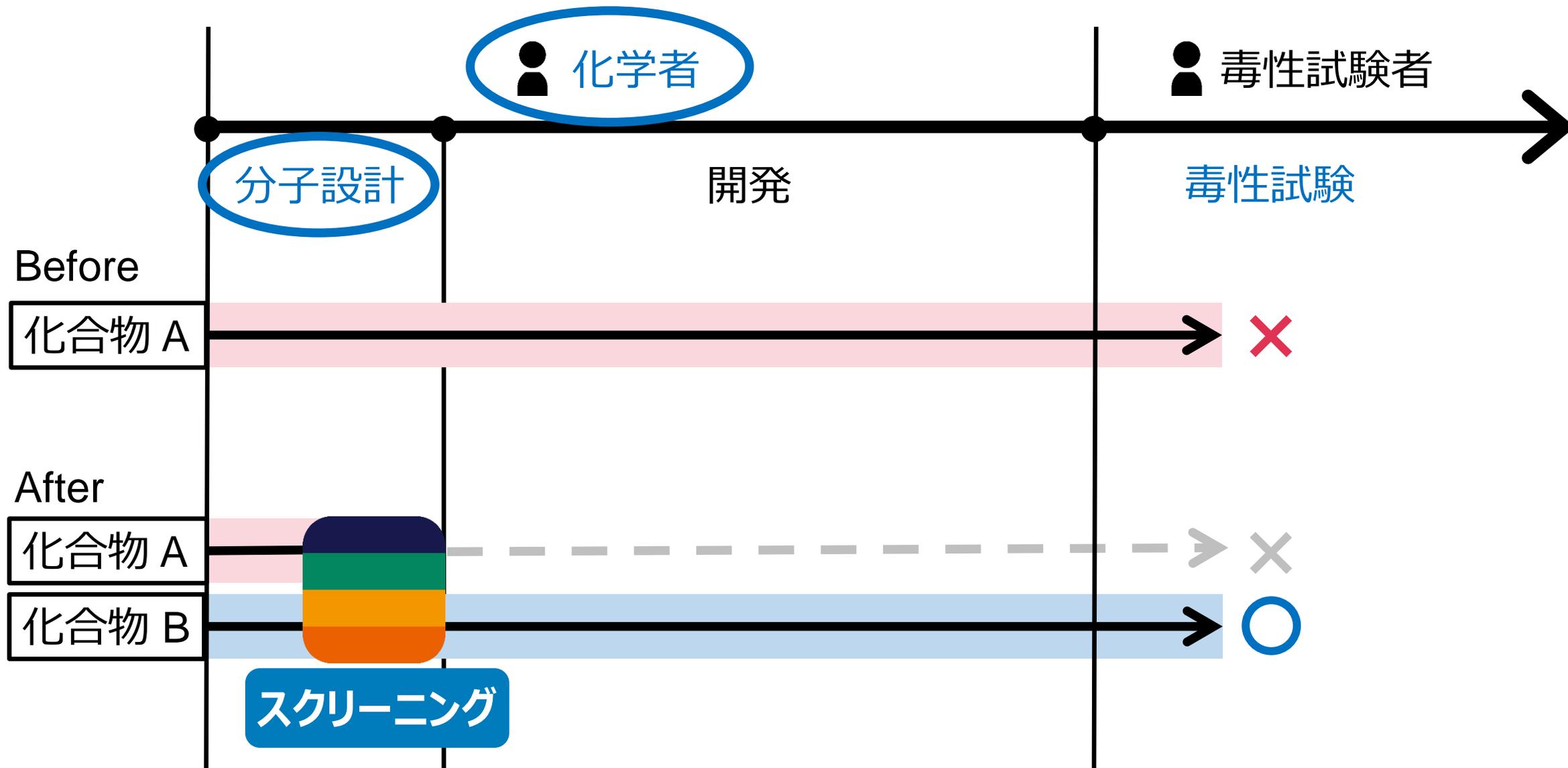


### 特徴

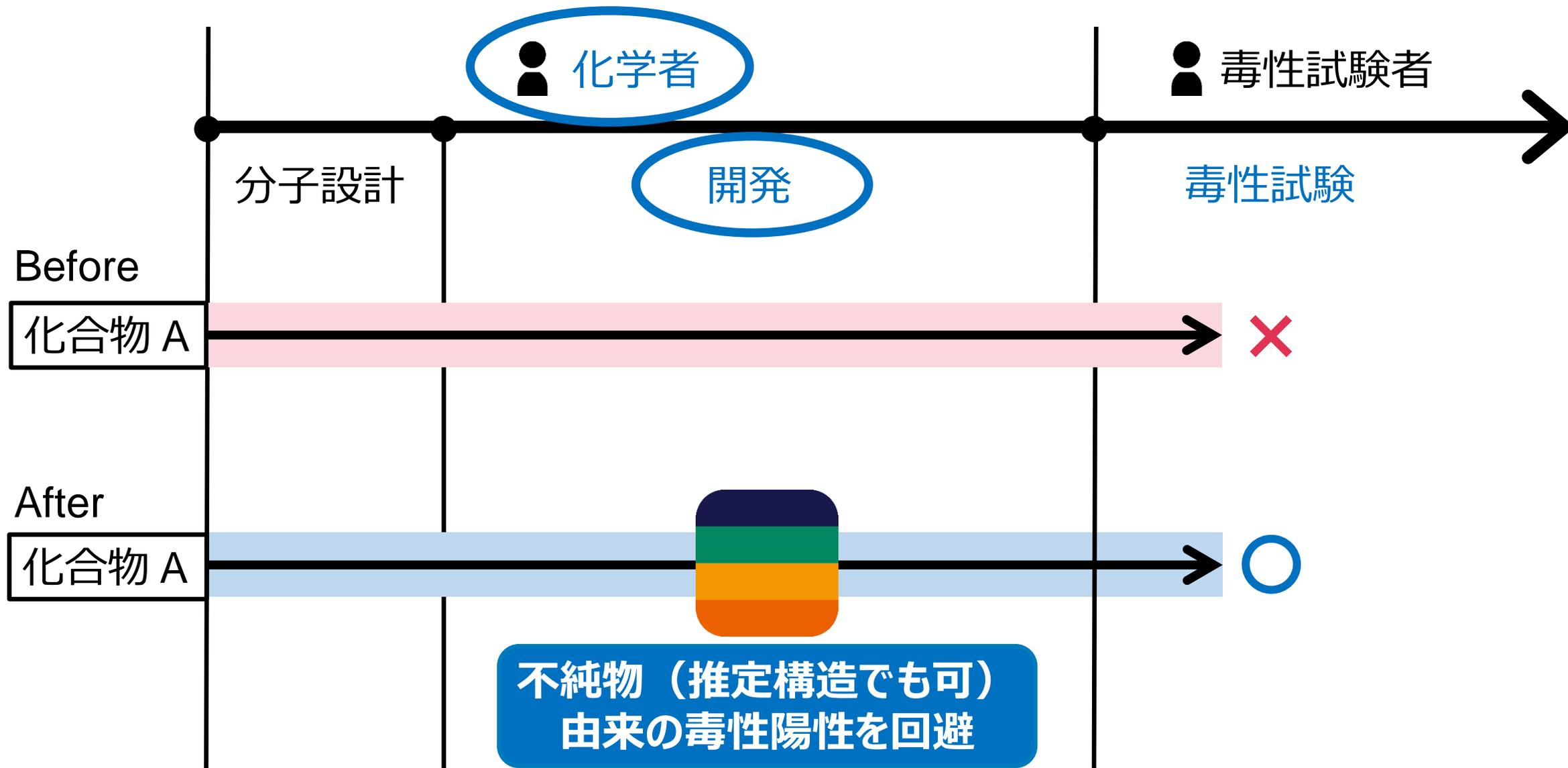
- 簡単
- 定量的
- 機械学習

特開2019-020791  
(岐阜大学)

# xenoBiotic の活用例-1

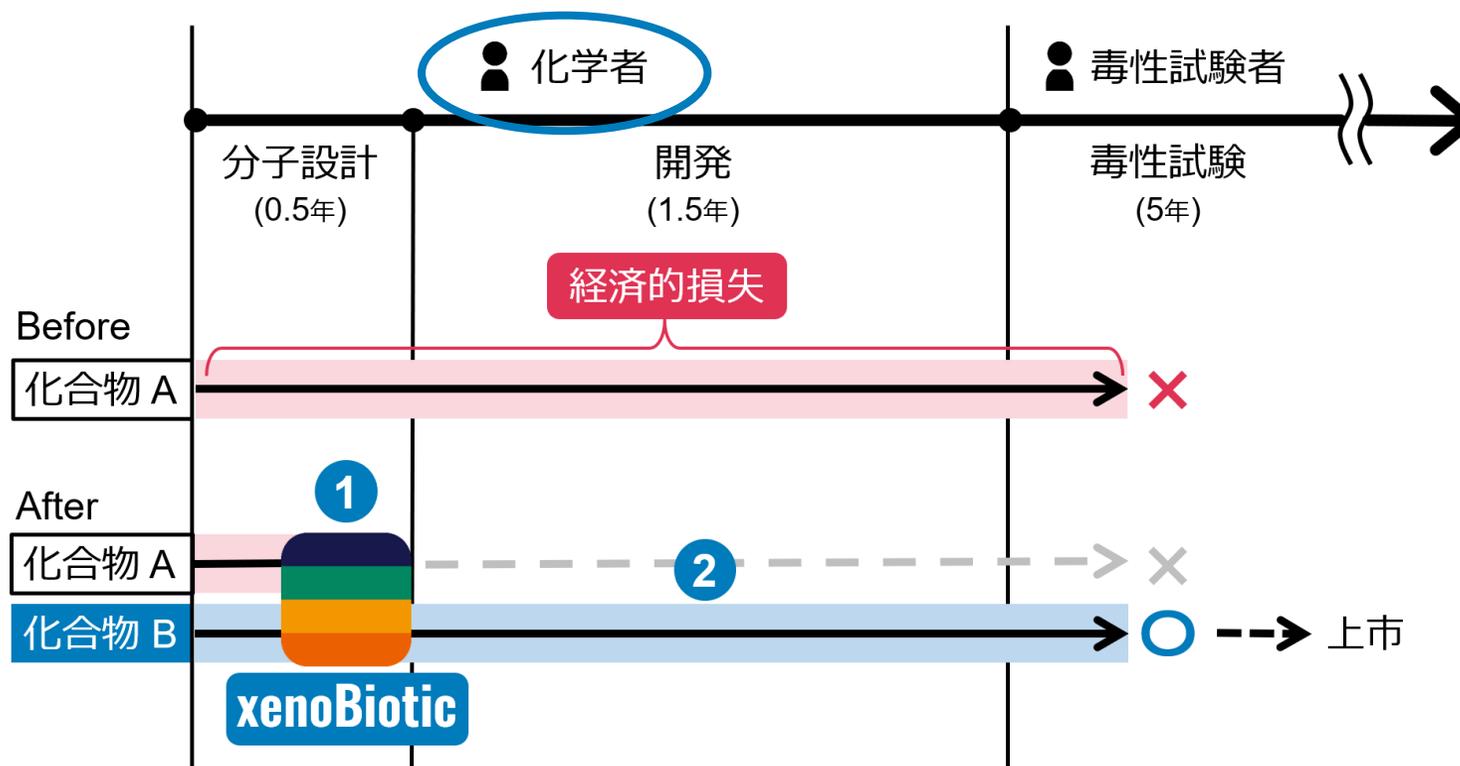


# xenoBiotic の活用例-2



# xenoBiotic の提供価値

- 1 化学者が分子設計する段階で、毒性試験を通過しやすい化合物を選別
- 2 ムダにしてきた開発リソースを、上市できる確率がより高い化合物開発に充当



# 開発：Ames試験予測 $\beta$ テスト 1回目 完了

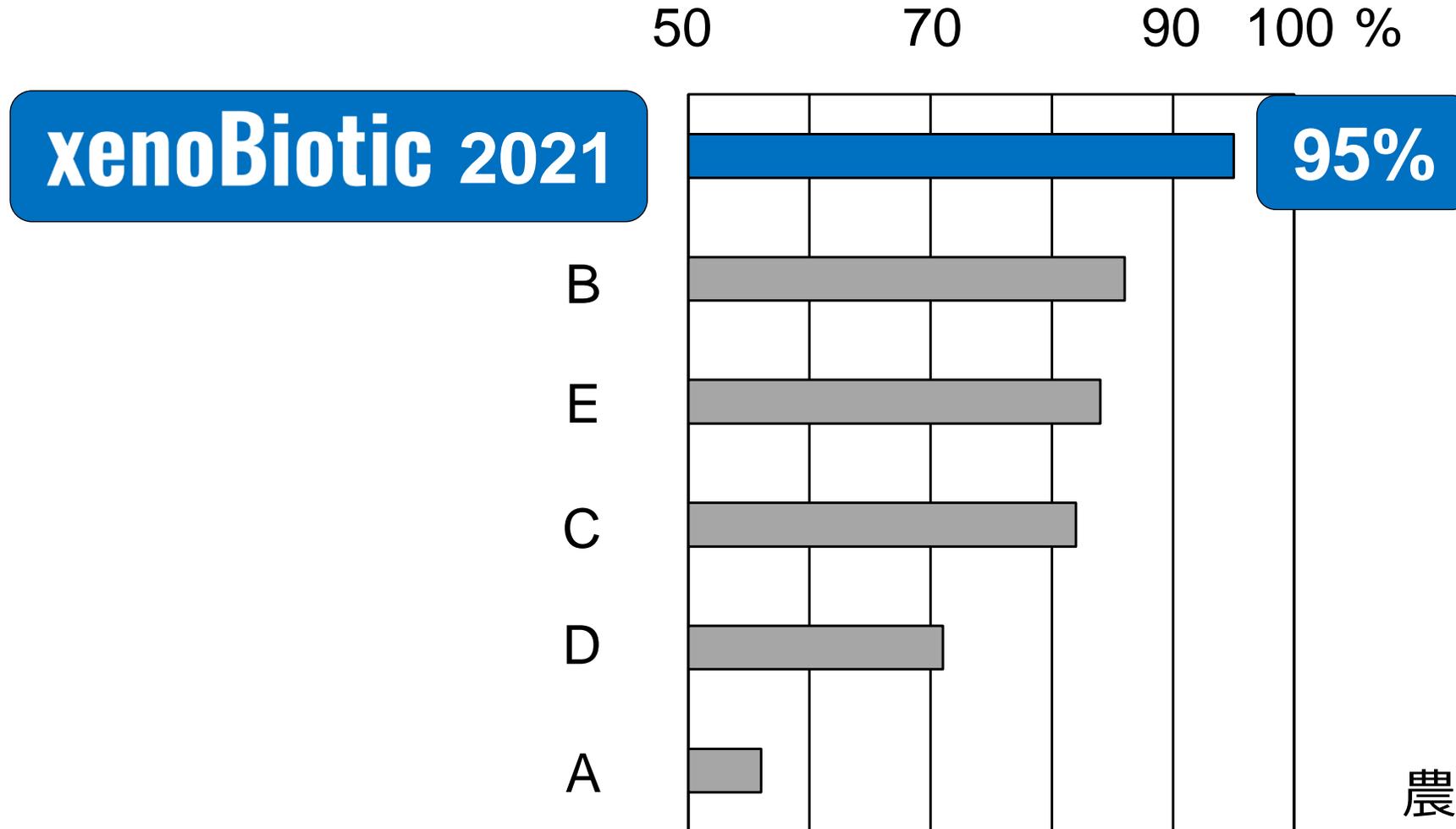
## Ames試験予測モデルの実用化を先行中

実施期間： 2019年12月 – 2020年9月

参加者： - 化学メーカー 6社  
- 公的研究機関 2機関

成果： - Ames試験（実験）新規データ約1万件  
- 予測性能向上の観点  
- ソフトウェアの問題点／バグ

# 開発：Ames試験予測の正答率



農薬724種で評価

# 開発：Ames試験予測 $\beta$ テスト 2回目 実施中

実施期間： ~ 2021年11月30日

- 参加にあたって：
- 4種類の型から1つを選択
  - テスト契約を締結
  - 特典
  - 製品の販売予定
  - 費用対効果

# 謝辞

## 共同研究

橋本智裕、和佐田裕昭（岐阜大学 地域科学部）

佐藤綾人（名古屋大学 トランスフォーマティブ生命分子研究所）

利部伸三（岐阜大学 名誉教授）

## 協力

牧秀樹（岐阜大学 地域科学部）、Michael Sevier、Richard Albert、  
(株)アイティカルナ、ロバスト・ジャパン(株)、(株)セルフプラス

## 活動支援

- 2019年度 ぎふ地域ベンチャー支援ネットワーク NOBUNAGA21
- NEDO 研究開発型スタートアップ支援事業  
Technology Commercialization Program (TCP) 2018、Entrepreneurs Program (NEP) 2019
- 東海広域5大学ベンチャー起業支援：スタートアップ準備資金 2018年度
- 文部科学省「次世代アントレプレナー育成事業 (EDGE – NEXT)」Tokai-EDGE (Tongali) プログラム
- 東海国立大学機構 岐阜大学 地域科学部 特別協力研究員制度