

一般社団法人製剤機械技術学会

第30回講演会プログラム案

テーマ：「製剤開発を促進させるIn silico技術」

日時：2022年8月5日(金) 13:00 ~ 16:50

開催方式：Zoomによるオンライン開催

総合司会：古石 誉之（星薬科大学）

13:00 - 13:10	開会の辞	製剤機械技術学会 会長 (星薬科大学) 米持 悦生
13:10 - 14:10	基調講演	＜座長＞ 大貫 義則（富山大学） 錠剤内応力シミュレーションによる重要品質特性の予測 城西大学 高山幸三  <p>多くの錠剤は粉末や顆粒の圧縮により製造される。そのため錠剤内部には様々なベクトルを有する応力が残留し、このことが錠剤の重要品質特性(CQA)に影響する可能性がある。適切な力学的モデルを利用すると錠剤内に発生する応力を高精度に推算することができる。本講演では、応力シミュレーション、実験計画法、応答曲面法、部分的最小二乗法、さらにスプースモデリング等を活用することによって、錠剤のCQAを高精度に予測した事例を紹介する。</p>
14:10 - 14:50	講演 1	＜座長＞ 岡田 康太郎（富山大学） セルラーオートマートン法による製剤の崩壊及び溶出挙動の予測手法 塩野義製薬株式会社 横山 伶示  <p>経口固形製剤は、生体内で期待される薬効を示すために、その薬物の溶出挙動を高度に制御することが非常に重要である。薬物の溶出挙動は、薬物の溶解度や粒度分布、錠剤空隙率、製造条件など多くの因子によって影響を受けることが知られるが、研究開発段階では、製剤化検討に使用可能な原薬量は限られるため、薬物溶出挙動についての十分な検証を行うことは難しい。以上のような背景から、本研究では一般的な溶解速度式であるNoyes-Whitney式にシミュレーション技術を組み合わせることで、錠剤からの薬物溶出挙動の高精度な予測を試みた。</p>
14:50 - 15:00		－ 休 憩 －
15:00 - 15:40	講演 2	＜座長＞ 高垣 恵介（塩野義製薬株式会社） 製剤設計におけるデータベースの構築と機械学習の活用 日医工株式会社 林 祥弘  <p>複数の原薬や様々な製造方法で調製した種々の原薬物性・顆粒物性・錠剤物性を含む製剤データベースを構築した。そして、統計解析ソフトJMP Proを用いて正規化した回帰分析である弾性ネットや機械学習の1つであるブースティングツリーおよびランダムフォレストと言ったデータ解析を行い、錠剤物性予測モデルの構築や重要物質特性の特定を試みた。（関連文献：Oishi T. et al. Int J Pharm. 577. (2020) 119083, Hayashi Y. et al. Int J Pharm. 609 (2021) 121158など）</p>
15:40 - 16:40	特別講演	＜座長＞ 井上 元基（明治薬科大学） 創薬開発プロセスへのIT技術適用 京都大学 岩田浩明  <p>医薬品開発のプロセスにIT技術を適用する、いわゆる「創薬インフォマティクス」が注目されている。創薬プロセスの効率化に向けて、人工知能(AI)や分子動力学シミュレーションなどのIT技術の実用化が進んでおり、一定の成果が得られている。本講演では、創薬プロセスのさまざまなステージで活用されているAI技術のうち、我々が開発してきた医薬品の候補となる低分子化合物の探索手法や現在開発を進めている製剤分野へのAI適用の可能性を紹介する。</p>
16:40 - 16:50	閉会の辞	第30回講演会 実行委員長 (富山大学) 大貫 義則