

SCI 国際学術誌「PEERJ COMPUTER SCIENCE」 オンライン版に論文が掲載 化粧品化合物の皮膚感作性予測のための機械学習モデルの開発について

ピジョン株式会社（本社：東京、社長：矢野亮）のグループ会社であり、ピジョングループでの赤ちゃんの皮膚研究を推進する PIGEON MANUFACTURING (SHANGHAI) CO.,LTD（中国現地法人：上海市青浦区、董事長：賀来 健）は、同社の「ピジョンスキンケア研究センター（Pigeon Skincare Research Center）」で進めていた『機械学習(AI)による皮膚感作成分の検出・評価についての研究』について、成果をまとめた研究論文が SCI 国際学術誌「PEERJ COMPUTER SCIENCE」 オンライン版にこのたび掲載されましたのでお知らせいたします。

PIGEON MANUFACTURING (SHANGHAI) CO.,LTD による最近の研究では、化粧品化合物に含まれる潜在的なアレルゲンを特定するための新しい方法を模索しています。ある化学物質に皮膚が触れることで、その物質を異物として体が認識し、次に同じ物質に接触した際にアレルギー反応を起こしやすい状態になることを「^{ひふかんさ}皮膚感作」と言います。皮膚感作性テストのための従来の動物実験は規制されており、正確な非動物的手法の必要性が高まっています。当社は、商品開発の段階で皮膚感作が生じないかを確認するのに、従来の動物実験を行わない方針であるため、その代替方法として、2種類の細胞を組み合わせたシステムを開発しました。それが HaCaT ケラチノサイトと THP-1 細胞です。これらの細胞は、機械学習技術を使用するために準備されたものです。動物実験に頼らずに皮膚感作性を検査する、より良い方法を生み出すことに繋がりました。

■研究論文の要約

<背景>

化粧品のアレルゲンを特定する精度を高めるため、HaCaT ケラチノサイトと THP-1 細胞という 2 種類の細胞を組み合わせたシステムを開発しました。これらの細胞は機械学習技術に利用できるよう準備されました。動物実験に頼ることなく皮膚感作性を評価するために、より優れた方法を確認することが目的です。

<方法>

まず、先述の通り「HaCaT ケラチノサイト」と「THP-1 細胞」という 2 種類の細胞を組み合わせた細胞システムを様々な化学物質にばく露させました。細胞の健全性を確認することで、安全なばく露レベルを見つけ出しました。次に、「THP-1 細胞」から遺伝物質（RNA）を取り出し、「RNA-Seq」という遺伝子解析の技術を用いて解析しました。この解析により、化学物質へのばく露後に異なる活性レベルを示した遺伝子を特定しました。その後、このデータを様々な機械学習手法で処理・分析し、物質が皮膚感作を引き起こすかどうかを予測できるモデルを構築しました。8 つの異なる機械学習手法がテストされ、比較されました。

<結果>

この統合的なアプローチは効果的であることが証明されました。いくつかの機械学習モデルが、皮膚感作性の予測において高い精度を示しました。「Random Forest」と「vroom-based diagonal quadratic discriminant analysis(vroomDQDA)」という最も優れたモデルは、テストにおいて 100%の精度を達成しました。また、「Support Vector Machine (SVM)」や「vroom-based nearest shrunken centroids (vroomNSC)」といった他のモデルも、96.7%という非常に高いパフォーマンスを示しました。これらの結果は、この手法が感作性を引き起こす物質とそうでない物質を首尾よく区別できることを示しています。

<考察>

本研究は、細胞培養システム、高度な遺伝子解析 (RNA-Seq)、および機械学習を組み合わせることで、皮膚感作性のより正確で包括的な実験室試験を生み出す可能性を浮き彫りにしています。この知見は、化粧品の安全性を評価する上で一歩前進であり、動物実験の必要性を減らすのに役立つ可能性があります。研究者たちは、データの準備方法や遺伝子特徴の選択方法がモデルの予測精度に影響を与えることを見出しました。サンプルサイズやモデルの解釈といった課題は残りますが、本研究は、この分野における将来の開発にとって貴重な洞察をもたらすものです。

図 1. 15 種類の試験化合物の細胞毒性を、THP-1 細胞を用いて 1000μg/mL から 3.9μg/mL の濃度で評価。細胞生存率は、処理 48 時間後に CCK-8 アッセイを用いて評価した。

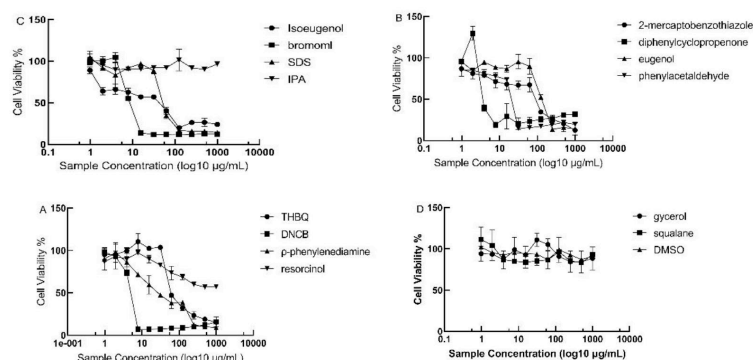


図 2.異なる発現遺伝子の解析。(A) アレルギー (陽性) 群と非アレルギー (陰性) 群の PCA。(C) DEG のボルケーノプロット

図 3.WGCNA 解析。(A) クラスターリング差分によって得られた遺伝子デンドログラム。(B) コンセンサスモジュール特徴遺伝子とアレルギーの関係。

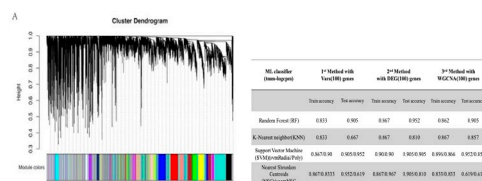
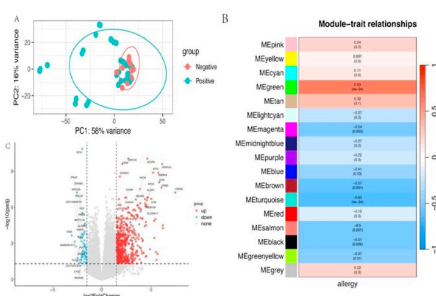


Table Comparison of Training and Test Accuracies for Three Feature Selection Methods Using different Processing

Method	Train accuracy	Test accuracy	Method	Train accuracy	Test accuracy
Random Forest (RF)	0.93	0.95	Support Vector Machine (SVM)	0.93	0.97
Naive Bayes (NB)	0.93	0.97	Naive Bayes (NB)	0.93	0.97
Support Vector Machine (SVM)	0.93	0.97	Support Vector Machine (SVM)	0.93	0.97
Naive Bayes (NB)	0.93	0.97	Naive Bayes (NB)	0.93	0.97
Support Vector Machine (SVM)	0.93	0.97	Support Vector Machine (SVM)	0.93	0.97
Naive Bayes (NB)	0.93	0.97	Naive Bayes (NB)	0.93	0.97
Support Vector Machine (SVM)	0.93	0.97	Support Vector Machine (SVM)	0.93	0.97
Naive Bayes (NB)	0.93	0.97	Naive Bayes (NB)	0.93	0.97
Support Vector Machine (SVM)	0.93	0.97	Support Vector Machine (SVM)	0.93	0.97
Naive Bayes (NB)	0.93	0.97	Naive Bayes (NB)	0.93	0.97

ビジョン株式会社



ビジョンは、育児用品をはじめ、マタニティ用品・介護用品・保育サービスなどを手掛けるブランドです。60年以上に亘る研究に基づき、製品やサービスを提供することによって、この世界をもっと赤ちゃんにやさしい場所にしたいと考えています。そして、赤ちゃんが生まれながらに持つ素晴らしい力を育み、すべての赤ちゃんがのびのびと育つ世界の創造を目指していきます。

赤ちゃんにやさしい未来に向けた世界中に広がる私たちの取り組みを下記でご紹介しています。
<https://www.pigeon.co.jp/vision-of-a-baby-friendly-future/>