



パネルディスカッション②
AIを用いたヘルスケアイノベーションの推進（医薬品・医療機器）

製薬企業の創薬におけるAI活用

池森 恵

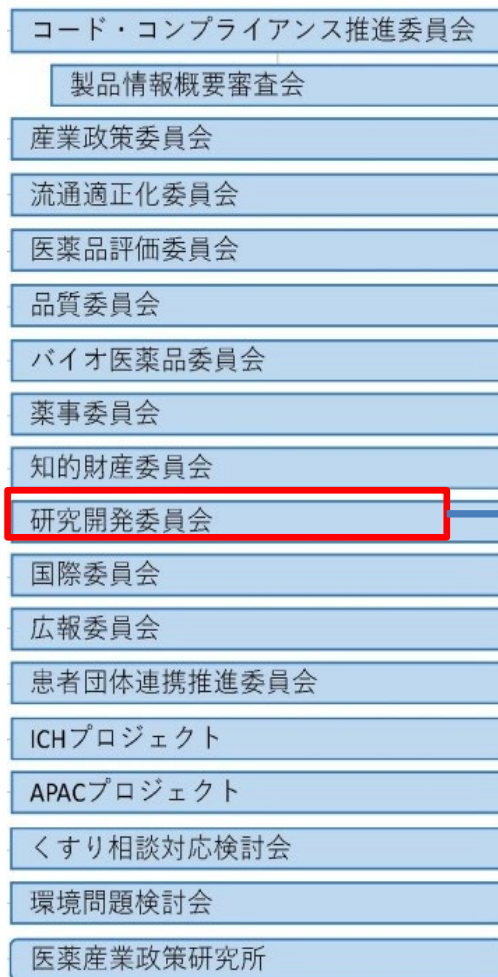
日本製薬工業協会研究開発委員会専門副委員長/産学官連携部会長
イーザイ株式会社

日本製薬工業協会（製薬協）



- 研究開発志向型の製薬企業71社（2023年10月1日現在）が加盟する任意団体。1968年設立。
- 「患者参加型医療の実現」をモットーとして、医療用医薬品を対象とした画期的な新薬の開発を通じて、世界の医療に貢献することを目指し、製薬産業に共通する諸問題の解決や医薬品に対する理解を深めるための活動、国際的な連携など多面的な事業を展開する。

委員会構成図



研究開発委員会
71社中34社が加盟

創薬研究部会
(20社)

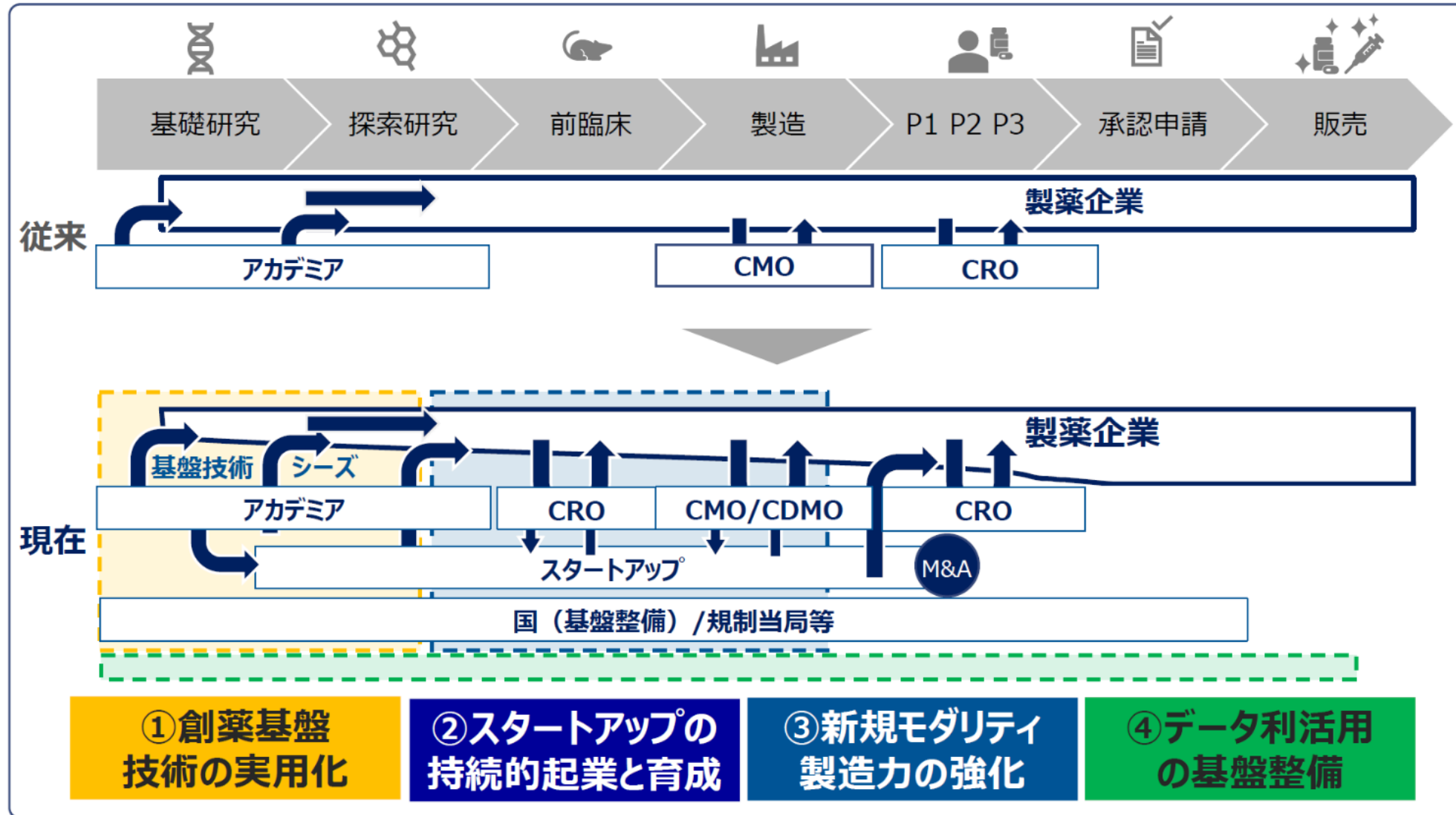
臨床研究部会
(13社)

産学官連携部会
(25社)

2023年10月01日現在 71社

[日本製薬工業協会ウェブサイト \(jpma.or.jp\)](http://jpma.or.jp)

創薬エコシステムに重要な4つのポイント



個社完結から、複数プレイヤーが連携する「創薬エコシステム」へ移行

AIの創薬利用への期待

① 創薬基盤技術の実用化

- 日本はアカデミアの基礎研究力を創薬研究につなげる部分が弱い
- 基礎研究者と企業研究者がともに創薬技術開発をめざす仕組みを構築

政策提言2019/21からの取組み

新規モダリティによる 創薬基盤技術高度化	次世代ライブラリ (DELs) 構築 ●●
	蛋白分解誘導薬 ●
	RNA創薬 ●●
コホート研究 創薬データベース	DDS ●
	ゲノムコホート研究 ●
	疾患別情報統合データベース ●●
	全ゲノム解読統合解析 ●
最先端大型研究設備	認知症の発症過程解析 ●
	クライオ電子顕微鏡 ●
	AI ●●
	次世代創薬AI開発 ●●

● コンソーシアム、協業契約 ●● AMED採択 公：公的整備

政策提言2023での提案



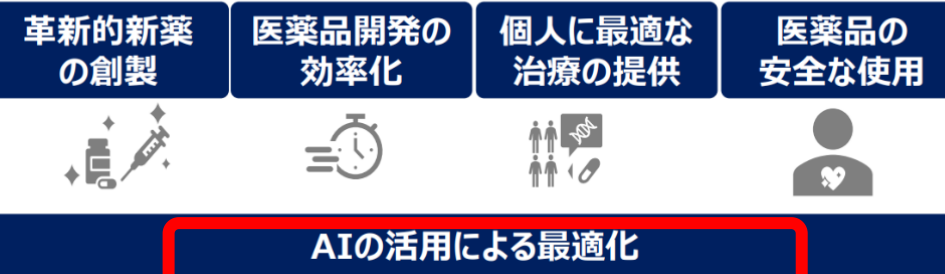
④ 健康医療データ利活用の基盤整備

- 健康医療データの利活用により、創薬・医療の向上が期待
- 民間企業が利用可能なデータは少なく、国としての整備が必要

健康医療データ基盤の整備

- データ基盤整備と法制度整備を両輪とした総合政策
- 全ゲノム解析等実行計画の着実な推進

健康医療データ利活用による創薬・医療の向上



産学連携による次世代創薬 AI 開発 (DAIIA)

Development of a Next-generation Drug Discovery AI through Industry-academia Collaboration



日本の製薬企業、日本の創薬化学の強みと最先端AI技術の融合による
実用的かつ包括的な創薬AIプラットフォームの構築



AMED・創薬事業部 (事務局・研究委託契約・企業連携)



京都大学 奥野 恭史 (研究分担者)

理化学研究所 本間 光貴 (研究代表者)

名古屋大学 山西 芳裕 (研究分担者)



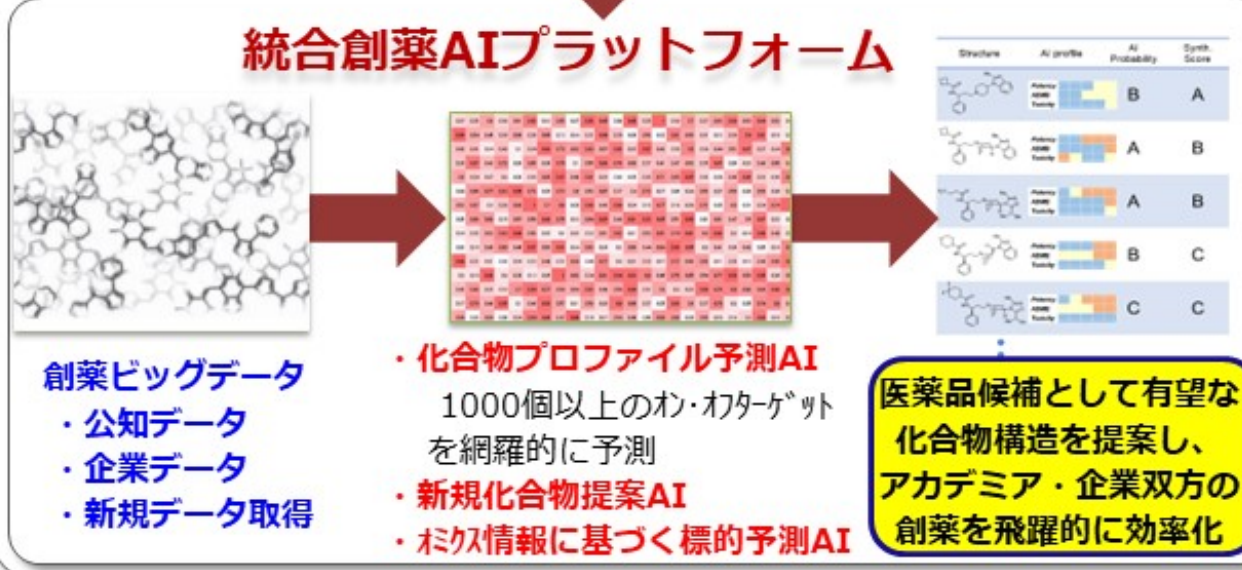
・企業データの提供
・意見交換
・技術交流

製薬協 17社

【参加企業一覧 (五十音順)】

- 1 エーザイ株式会社
- 2 小野薬品工業株式会社
- 3 科研製薬株式会社
- 4 キッセイ薬品工業株式会社
- 5 杏林製薬株式会社
- 6 協和キリン株式会社
- 7 株式会社三和化学研究所
- 8 大鵬薬品工業株式会社
- 9 武田薬品工業株式会社
- 10 田辺三菱製薬株式会社
- 11 帝人ファーマ株式会社
- 12 鳥居薬品株式会社
- 13 東レ株式会社
- 14 日本ケミファ株式会社
- 15 日本新薬株式会社
- 16 Meiji Seikaファルマ株式会社
- その他 1社

統合創薬AIプラットフォーム



創薬ビッグデータ

- ・公知データ
- ・企業データ
- ・新規データ取得

・化合物プロファイル予測AI
1000個以上の化合物ターゲットを網羅的に予測

・新規化合物提案AI

・マクス情報に基づく標的予測AI

医薬品候補として有望な化合物構造を提案し、アカデミア・企業双方の創薬を飛躍的に効率化

Structure	AI profile	AI Probability	Synth Score
		B	A
		A	B
		A	B
		B	C
		C	C

・AI開発
・事業化

IT企業

AI技術を持つ10社程度

DAIIA : 研究開発内容

新規化合物提案AI

理化学研究所
本間 光貴 (研究代表者)



具体的な有望化合物の提案



化合物プロファイル予測AI

京都大学
奥野 恭史 (研究分担者)



創薬に必要な項目の網羅的な予測AI



オミクス情報等の多階層データを用いた創薬AI

名古屋大学
山西 芳裕 (研究分担者)



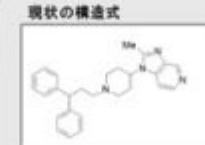
オミクス情報等による多面的な予測AI



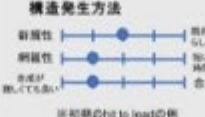
統合創薬AIプラットフォーム

ユーザーインターフェイス

現状の構造式



構造発生方法



現状のプロファイル

Potency	E	L	P	P
ADME	E	L	P	P
Toxicity	E	L	P	P

E: Experiment
P: AI prediction

目標プロファイル優先度

Potency	5	1	1	1	1
ADME	3	3	3	1	1
Toxicity	2	2	2	2	2

有望な構造式の出力

Structure	AI profile	AI Probability	Synth. Score
		B	A
		A	B
		A	B
		B	C
		C	C

シリーズの展開可能性評価

