

令和2年度 創薬支援推進事業 産学連携による次世代創薬AI開発 公募説明会

国立研究開発法人日本医療研究開発機構（AMED）
創薬戦略部 創薬企画・評価課 創薬支援室

令和2年2月3日@日本橋ライフサイエンスハブ

本日の内容

1. 創薬支援推進事業「産学連携による次世代創薬AI開発」の概要
2. 公募・選考について
3. 採択決定後の手続き等
4. おわりに

本日の内容

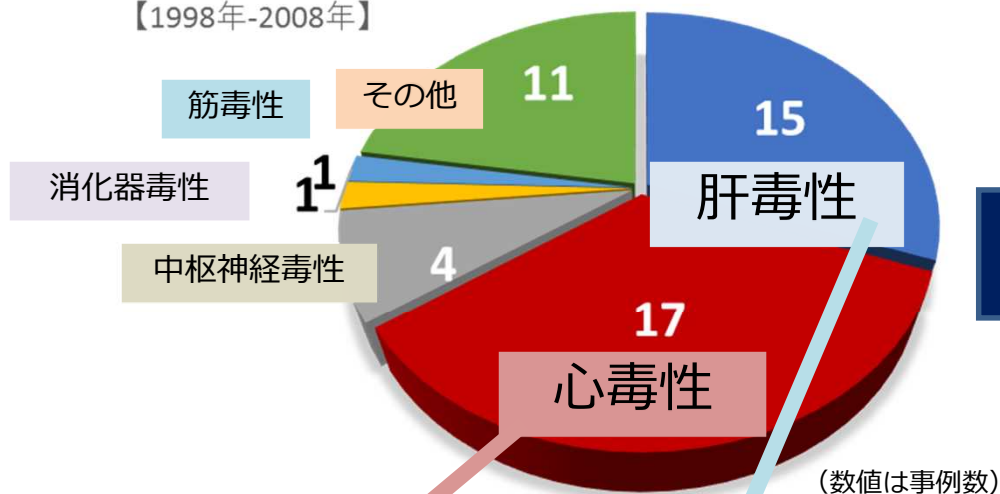
- 1. 創薬支援推進事業「産学連携による次世代創薬AI開発」
の概要**
2. 公募・選考について
3. 採択決定後の手続き等
4. おわりに

先行事業：創薬支援インフォマティクスシステム構築

毒性・体内動態予測システムの開発

米国・欧州・アジア市場からの撤退理由（毒性）

【1998年-2008年】



J.S. MacDonald, R.T. Robertson ³⁾より改変

体内動態の不備が撤退に繋がることに加え、毒性発現や薬効不足の多くが体内動態に起因している

体内動態

機械学習とシミュレーションを用いた以下の予測システム

- ・代謝酵素(CYP)に対する安定性
- ・中枢移行性
- ・薬物動態(血中濃度の推移)

毒性が原因での撤退理由の多くが肝毒性と心毒性である

心毒性

機械学習とシミュレーションを用いた心毒性の原因タンパク質への作用予測システム

肝毒性

化学構造情報及びヒト肝細胞（iPS誘導細胞含む）のバイオマーカーを用いた肝毒性予測システム

- ・代謝、毒性情報の統合データベース
- ・多面的なモデリング、予測システム
- ・製薬企業との連携

先行事業の概要

先行事業：

平成27年度から5か年の計画で実施された「創薬支援推進事業-創薬支援インフォマティクスシステム構築」では令和元年度末までに下記の項目を達成見込みです。

- 薬物動態、心毒性、肝毒性の情報全てについて、全データを検索・閲覧可能なデータベースと、このデータベースを基に新規化合物の薬物動態や毒性リスクの予測モデルを開発し、創薬支援ネットワークをはじめとしたアカデミア創薬に関わる誰でもが使えるシステムの公開。
- アカデミアのみならず、製薬企業での創薬研究の効率向上を目指し、国内製薬企業7社から提供されたデータを追加することによる予測モデルの精度向上と製薬企業への提供。
- 本事業で開発したリソースを事業終了後も自律的に維持管理できる枠組みを確立するため、薬物動態、心毒性、肝毒性モデル及び新規構造提案機能に関するIT企業とで共同開発による研究成果の事業化。

公募情報（概要）

公募研究課題①、②にて開発する2つのシステムを組み合わせることで、自律的に分子設計を行い、創薬研究における化合物の最適化に要するリソース（時間、費用、人手など）を大幅に削減しうる創薬AIの開発

公募課題	研究費の規模 (一般管理費を含まず)	研究実施 予定期間	新規採択課題 予定数
産学連携による 次世代創薬AI開発	年間 3億円～4億円程度	最長5年 令和2年度～令和6年度	0～1課題 程度

①化合物-生体分子親和性予測AI

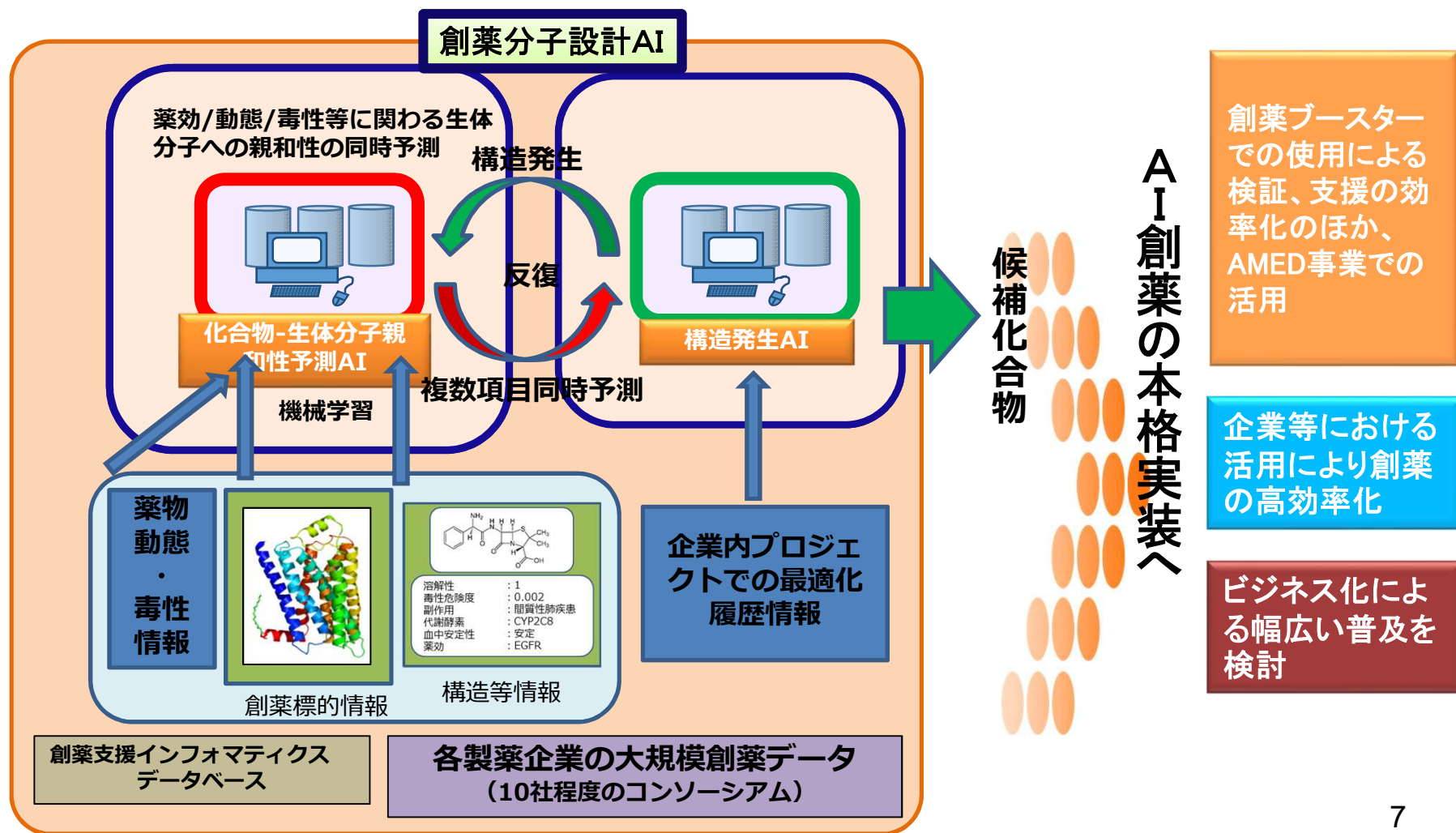
創薬標的分子群（オンターゲット）と薬物動態・毒性関連分子群（オフターゲット）双方に対する化合物親和性の同時予測を行うシステムを開発すること。

②化合物構造発生AI

日本が伝統的に強い分野である企業の化合物創薬研究の経験知を収集・統合し、その学習成果を基に化学構造を発生させる、化合物最適化プロセスにおける効率と精度を大幅に向上できるシステムを開発すること。

「産学連携による次世代創薬 A I の開発」

産学の保有する生体分子群と化合物群の親和性データや企業の化学研究者が持つ構造最適化に関する経験知データ等、創薬研究における多面的で膨大なデータを広く集約することで、産学が利用可能な化合物設計 A I を開発する。



事業の概要（１）

事業の目的：

以下により、創薬支援のための基盤強化を図り、アカデミア創薬支援だけでなく企業における創薬活動に活用することを目的とします。

- 製薬企業が創薬研究の過程で蓄積した多面的な情報を広く集約し利活用する
- 新規化合物の薬効、毒性、薬物動態関連分子への親和性予測に加えて化合物の最適化を自律的に行う最先端のAI（Artificial Intelligence=人工知能）創薬技術を開発する

事業の概要（２）

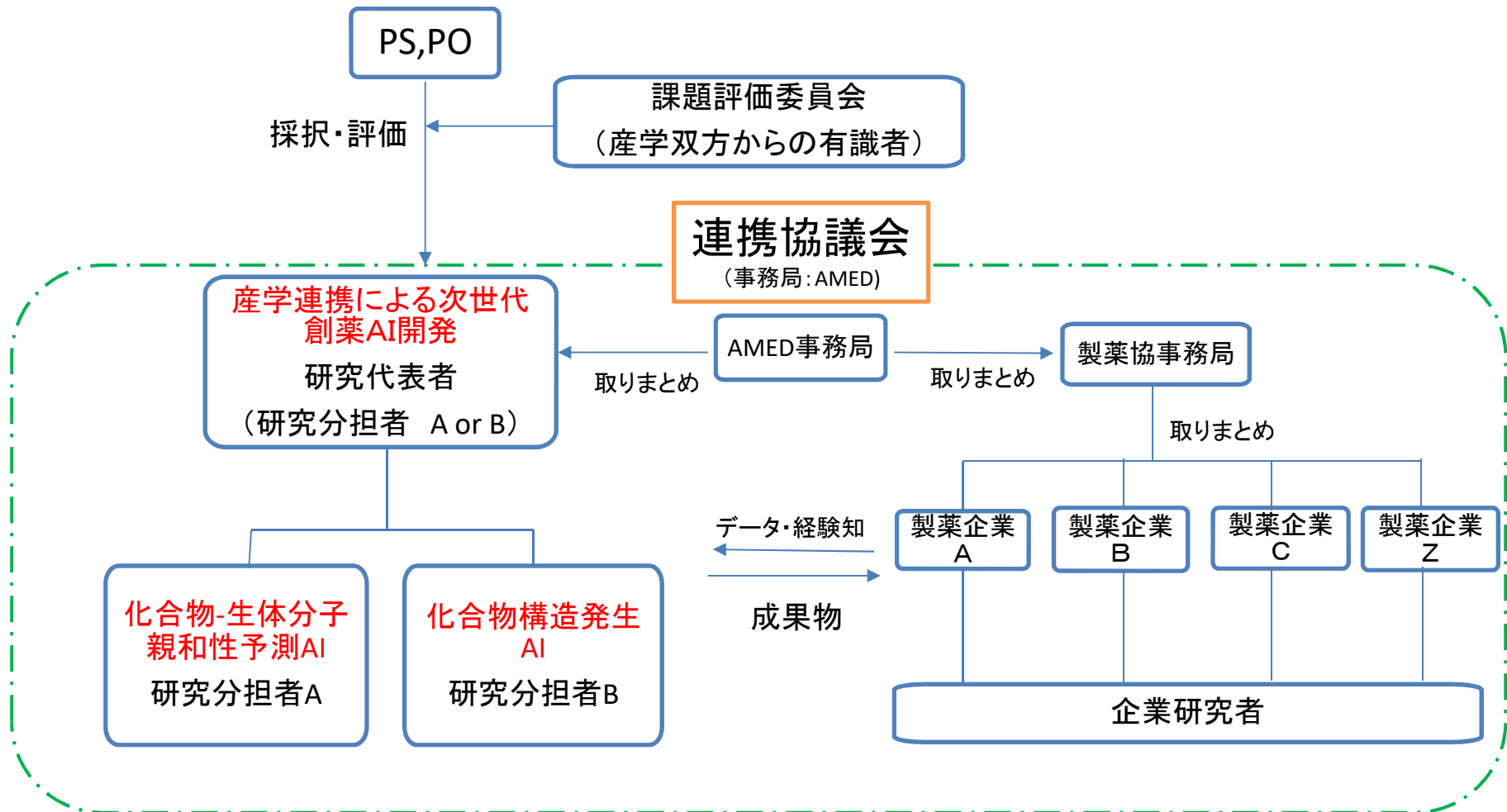
○事業の目的と成果

本事業では、産学間の連携によりAMED 創薬戦略部が中心となり実施する創薬総合支援事業である創薬ブースターの効率化と、企業における創薬研究の効率的な新規化合物創出のために、以下の成果を達成することを目標としています。

- 日本製薬工業協会における化合物情報活用の取り組みと連携し、参加企業で取得された大規模で多面的な化合物情報を用いて、各企業の知的財産権等の保護に配慮しながら緊密な産学連携のもとに研究開発を行うこと。
- 生体分子に対する化合物の親和性予測システムと、並行して開発する構造発生システムを組み合わせることで、自律的に分子設計を行い、創薬研究における化合物の最適化に要するリソース（時間、費用、人手など）を大幅に削減しうるAIであること。
- 予測システムに関しては、創薬標的生体分子群（オンターゲット）と薬物動態・毒性関連生体分子群（オフターゲット）双方併せて50程度の生体分子群に対して化合物の親和性の同時予測が可能であること。
- 日本が伝統的に強い分野である企業の化合物創薬研究の経験知を収集・統合するシステムを開発し、化学構造の発生に活用することで、化合物最適化プロセスにおける効率と精度を大幅に向上できること。
- アカデミア創薬支援への活用・効率化に加え、製薬企業での実際の創薬研究に耐えうるレベルのAIシステムであること。また、公開或いは商用化等を通して社会実装できるユーザーフレンドリーなAIシステムであること。

事業の概要（3）

プロジェクト運営体制イメージ



事業の概要（４）

○実施体制

- プログラムスーパーバイザー（以下「PS」という。）及びプログラムオフィサー（以下「PO」という。）等を本事業内に配置します。
- PS及びPO等は、本事業全体の進捗状況を把握し、事業の円滑な推進のため、必要な指導・助言等を行います。また、研究機関及び研究者は、PS及びPO等に協力する義務を負います。PS及びPO等による指導、助言等を踏まえ、研究開発課題に対し必要に応じて計画の見直しや課題の中止（計画達成による早期終了を含む）等を行うことがあります。
- 創薬AIの開発のために、日本製薬工業協会の協力を得て、参加会員企業で取得された様々な化合物情報や研究者の経験知なども活用します。したがって、開発されたAIはその開発に貢献した参加企業に提供することで企業内での研究開発に活用していただく予定です。
- 製薬企業から化合物情報や研究者の経験知などを提供してもらい、それをもとに研究開発を実施していただき、成果は製薬企業にも提供させていただくため、製薬企業も参加する連携会議に出席していただきます。

公募スケジュール

公募期間

- 令和2年1月27日(月)～令和2年2月28日(金)(必着)

書面審査

- 令和2年3月上旬(予定)

ヒアリング

- 令和2年4月6日(月)

採否通知

- 令和2年4月中旬～下旬(予定)

契約
締結日

- 令和2年6月1日(予定)

本日の内容

1. 創薬支援推進事業「産学連携による次世代創薬AI開発」の概要
2. 公募・選考について
3. 採択決定後の手続き等
4. おわりに

応募資格者

公募要領 p3

以下(a)～(g)の要件を満たす国内の研究機関等に所属し、かつ、主たる研究場所※¹とし、応募に係る研究課題について、研究実施計画の策定や成果の取りまとめなどの責任を担う研究者(研究代表者)とします。

- (a) 国の施設等機関※²(研究代表者が教育職、研究職、医療職※³、福祉職※³、指定職※³又は任期付研究員である場合に限る。)
- (b) 地方公共団体の附属試験研究機関等
- (c) 学校教育法(昭和22年法律第26号)に基づく大学及び同附属試験研究機関等(大学共同利用機関法人も含む。)
- (d) 研究を主な事業目的としている特例民法法人並びに一般社団法人、一般財団法人、公益社団法人及び公益財団法人(以下「特例民法法人等」という。)
- (e) 研究を主な事業目的とする独立行政法人通則法(平成11年法律第103号、平成26年6月13日一部改正)第2条に規定する独立行政法人及び地方独立行政法人法(平成15年法律第118号)第2条に規定する地方独立行政法人
- (f) 非営利共益法人技術研究組合※⁴
- (g) その他AMED理事長が適当と認めるもの

※¹ 所属する研究機関等と主たる研究場所が異なる場合は、別途ご相談ください。

※² 内閣府及び国家行政組織法第3条第2項に規定される行政機関に置かれる試験研究機関、検査検定機関、文教研修施設、医療更生施設、矯正収容施設及び作業施設をいいます。

※³ 病院又は研究を行う機関に所属する者に限ります。

※⁴ 産業活動において利用される技術に関して、組合員が自らのために共同研究を行う相互扶助組織

提案書の提出について

公募要領 p5

○提案書の入手方法

AMED ホームページからダウンロード
(<https://www.amed.go.jp/koubo>)

○提案書類受付期間

令和2年1月27日（月） **～令和2年2月28日（金）必着**

- ・ 期限を過ぎた場合には一切受理できません！
- ・ 受付期間終了後の提案書類の差し替え等には応じられません！

○提出方法

郵送により、**紙媒体20部及び電子媒体（CD-R）1部**を
AMED創薬戦略部 創薬企画・評価課 西日本統括部まで
（〒530-0011 大阪府大阪市北区大深町3-1
グランフロント大阪 タワーB11階）

審査項目と観点

公募要領 p7, 8

審査項目	
①事業趣旨等との整合性	・ 事業趣旨、目標等に合致しているか
②科学的・技術的な意義及び優位性	・ 独創性、新規性を有しているか ・ 社会的ニーズに対応するものであるか ・ 医療分野の研究に関する国の方針に合致するものであるか ・ 医療分野の研究の進展に資するものであるか ・ 新技術の創出に資するものであるか ・ 創薬支援ネットワークに資するものであるか
③計画の妥当性	・ 全体計画の内容と目的は明確であるか ・ 年度ごとの計画は具体的なものでかつ、実現可能であるか ・ 生命倫理、安全対策に対する法令等を遵守した計画となっているか
④実施体制	・ 申請者を中心とした研究体制が適切に組織されているか ・ 現在の技術レベル及びこれまでの実績は十分にあるか ・ 十分な連携体制が構築されているか ・ 申請者等のエフォートは適当であるか ・ 不合理な重複／過度の集中はないか
⑤所要経費	・ 経費の内訳、支出計画等は妥当であるか
⑥事業で定める項目及び総合的に勘案すべき項目	・ 将来的に、創薬支援ネットワークをはじめとしたアカデミア創薬に関わる誰でもが使えるシステムとして公開可能か ・ 製薬企業での創薬研究の効率向上を目指し、製薬協を通じてデータ提供に協力した製薬企業へ、より高精度のシステムを提供できるか
⑦総合評価	①～⑥を勘案して総合評価する

提案書類作成上の注意

公募要領 p10

○省令・倫理指針等の遵守

○課題の提案に対する機関の承認

研究代表者が提案書類を提出するに当たっては、代表機関（研究代表者が所属し、AMEDと直接委託契約を締結する研究機関）の了承を取ってください。また、各課題に複数の研究機関が参加する場合には、参加する全ての研究機関の了承を得てください。

○提案内容の調整

課題の採択、実施に当たっては、予算の制約等の理由から、計画の修正を求めることがあります。

また、今後、採択された課題の実施に当たって、割り当てられる経費・実施期間は、予算状況により変わる場合があります。

○対象外となる提案

- ・単に既製の設備備品の購入を目的とするもの
- ・他の経費で措置されるのがふさわしい設備備品等の調達に必要な経費を、直接経費により賄うことを想定しているもの

対象となる経費

○対象

公募要領 P12

- ※ 契約締結日以前に発生した経費（発注含む）は対象になりません。
- ※ 意思決定から契約・検収・支払いまでの過程が確認できる一連の証憑類（証拠書類）が確認できない場合、経費として認めないことがあります。

	大項目	定義
直接経費	物品費	研究用設備・備品・試作品、ソフトウェア（既製品）、書籍購入費、研究用試薬・材料・消耗品の購入費用
	旅費	研究参加者に係る旅費、外部専門家等の招聘対象者に係る旅費
	人件費・謝金	人件費：当該委託研究のために雇用する研究員等の人件費 謝金：講演依頼、指導・助言、被験者、通訳・翻訳、単純労働等の謝金等の経費
	その他	上記のほか、当該委託研究を遂行するための経費 例）研究成果発表費用（論文投稿料、論文別刷費用、HP作成費用等）、会議費、運搬費、機器リース費用、機器修理費用、印刷費、外注費、ライセンス料、不課税取引等に係る消費税相当額等
一般管理費	直接経費に対して一定比率（10%以内（算出された額に1,000円未満の端数がある場合は、その端数は切り捨てるものとします。））で手当され、当該委託研究の実施に伴う研究機関の管理等に必要な経費として研究機関が使用する経費	

本日の内容

1. 創薬支援推進事業「産学連携による次世代創薬AI開発」
の概要
2. 公募・選考について
3. 採択決定後の手続き等
4. おわりに

採択決定後の手続き等

○契約手続き

公募要領 p11

採択後、速やかに契約の締結を進められるよう、次を開始してください。

- (a) 全体研究計画書、研究計画書及びその他契約に必要な書類※の作成
- (b) 業務計画に必要な経費の見積書の取得
- (c) 会計規程、受託研究規程及び職務発明規程等の整備

※ 全体研究計画書は、採択時の研究提案書を元に研究課題ごとに各一通作成いただきます。全実施期間の研究構想を中心に、基本計画、研究内容、研究体制、予算計画等を記載してください。同計画書は、年度における予算配分の検討及び中間・事後評価や課題進捗管理の基礎資料の一つとなります。

研究計画書は、各年度の委託研究契約締結の際に、契約ごとに各一通作成いただきます。

その他契約に必要な書類(計画書様式等)は、採択後に別途ご連絡します。

採択決定後の手続き等（補足）

- 採択後の手続き、事務手続き全般の詳細は、公募要領のほか、「委託研究契約事務処理説明書－創薬支援推進事業「産学連携による次世代創薬支援AI開発」－」をご覧ください。

採択課題の管理と評価

○管理

- 全ての採択課題について、毎年度、委託研究契約に基づき、委託研究成果報告書の提出を求めます。
- PS、POが進捗管理を行います。その際、研究課題を提案する前提となる重要な研究データ（実験含む）については、委託研究の契約以前に実施されたものであっても、進捗管理の観点で確認をすることがあります。
- 進捗管理に当たっては、報告会の開催や、調査票（研究の進捗状況を記入する書類）、ヒアリング（個別課題ごとの面談）、サイトビジット（研究実施場所における実際の研究状況の確認）等を通じて出口戦略の実現を図っていきます。
- 研究計画書等と照らし合わせて、進捗状況により、計画の見直しや課題の中止（早期終了）等を行うことがあります。

○評価

- 本事業では、研究開始後3年程度を目安として「課題評価委員会」による中間評価を実施し、研究計画の達成度や研究成果等を厳格に評価します。
- そのため、評価結果によっては、PS、PO等の総合的な判断によりAMEDが課題の中止（早期終了）を行うことがあります。
- さらに、全ての採択課題について、課題終了前後の適切な時期に事後評価を実施します。また、必要に応じて、課題終了後一定の時間を経過した後に追跡評価を実施することがあります。

本日の内容

1. 創薬支援推進事業「産学連携による次世代創薬AI開発」の概要
2. 公募・選考について
3. 採択決定後の手続き等
4. おわりに

照会先

公募要領 p26

照会内容	連絡先
公募研究課題、評価、提案書類の記載方法等	AMED創薬戦略部 創薬企画・評価課 Tel: 06-6372-1771 E-mail: id3desk"AT"amed.go.jp
不正行為・不正使用・不正受給	AMED研究公正・法務部 E-mail: kouseisoudan"AT"amed.go.jp
利益相反管理・研究倫理教育プログラム	AMED研究公正・法務部 E-mail: kenkyuukousei"AT"amed.go.jp
RIOネットワーク	AMED研究公正・法務部 E-mail: rionetwork"AT"amed.go.jp
Medical IP Desk（医療分野の知財相談窓口）	AMED知的財産部 E-mail: medicalip"AT"amed.go.jp
創薬支援ネットワーク及び創薬戦略部による支援	AMED創薬戦略部 東日本統括部 〒103-0022 東京都中央区日本橋室町一丁目5番5号 室町ちばぎん三井ビルディング8階 Tel: 03-3516-6181 E-mail: id3desk"AT"amed.go.jp

- 本日はありがとうございました。
- 積極的なご応募をお待ちしております。