

創薬支援推進事業・産学連携による次世代創薬 AI 開発

中間評価結果

1. 基本情報

課題名	最先端の AI 技術を用いたマルチターゲット予測と構造発生を組み合わせた包括的な創薬 AI プラットフォームの開発
事業実施期間	令和 2 年度～令和 6 年度（予定）
代表機関名	国立研究開発法人理化学研究所
研究代表者 部署・役職・氏名	生命機能科学研究センター 制御分子設計研究チーム チームリーダー 本間 光貴

2. 評価結果

優れている（計画した成果をやや上回る成果が得られた）

3. 評価コメント

これまでの基盤技術や実績を生かし、各課題に対して AI での予測や構造生成が順調に進んでおり、企業データの提供、Federated Learning への取組み等、これまでアカデミアと企業の連携が難しいとされた創薬分野において、互いの信頼に基づく真の連携が構築できている点を高く評価できる。

一方、本課題には先進的な研究内容も一部含まれていることから、研究に対する期待度は高いものの、現時点ではその活用法や実用性等に多少の懸念があり、実用化に向けて企業研究者との連携や意見聴取を行い、本課題に参加する機関の間で積極的に AI モデルを連携・融合させるべきである。また、製薬企業 18 社との連携が実現できていることは評価できるものの、参加企業も含めた AI 関連の人材育成等も重要である。

以上