

令和7年度 創薬支援推進事業 産学連携による創薬AIプラットフォーム開発 公募説明会

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

令和6年12月16日 Web開催（Webex）

はじめに

本日の説明内容は、**公募要領**からの抜粋を基本としています。

詳細は、公募要領（令和7年度 創薬支援推進事業・産学連携による創薬AIプラットフォーム開発）を**必ずご確認ください**。

<https://www.amed.go.jp/content/000134565.pdf>

本日の内容

1. 創薬支援推進事業「産学連携による創薬AIプラットフォーム開発」の概要
2. 公募・選考について
3. 質疑応答

本日の内容

- 1. 創薬支援推進事業「産学連携による創薬AIプラットフォーム開発」の概要**
2. 公募・選考について
3. 質疑応答

創薬支援推進事業の方向性

公募要領 p1

近年の課題・期待

AI (Artificial Intelligence: 人工知能) は、深層学習・生成モデル等の手法の発展、計算機の性能の向上、入手できるデータの増大等による実用性の急速な向上によりさまざまな分野で活用されています。特に近年、AIの進化はめざましく、生成AIの登場により、AIの汎用性が飛躍的に向上し、より自律的で創造性のある「汎用生成AI」の実現に期待が寄せられています。**医薬品の研究開発においても、このようなAI技術は創薬プロセスの時間とコストの大幅な削減等、効率化に資する技術として、また全く新規な医薬品開発をもたらす手法として期待**されています。



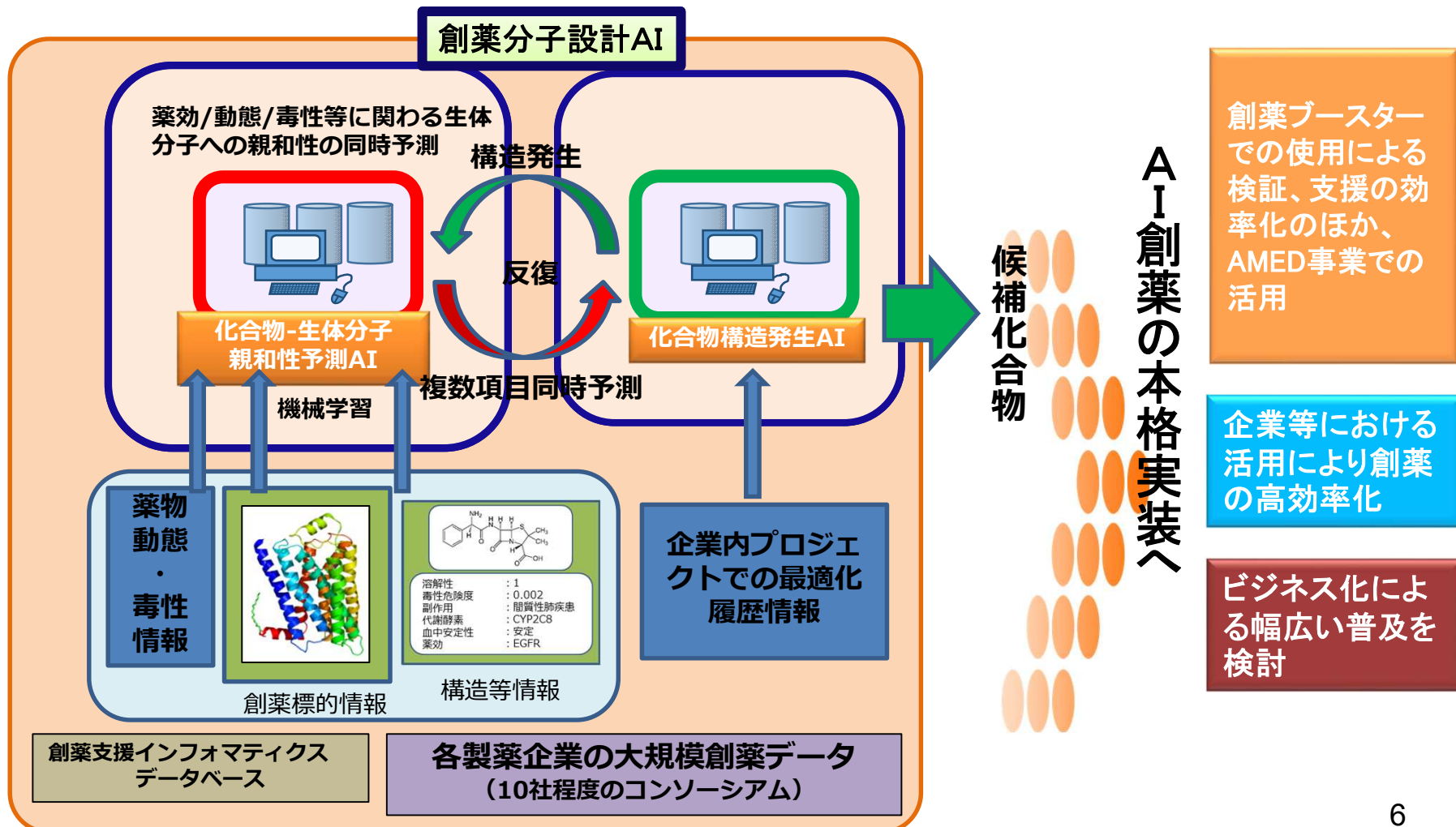
本事業では

- 最新の高度なAI技術に基づく“**創薬ターゲット予測・シース探索AI**”を開発し、
- 産学連携による効率的なデータ収集と予測精度の向上**を図るとともに、
- 創薬プロセスにおける**複数のAIシステムを統合した創薬AIプラットフォーム**を構築

⇒創薬プロセスの効率化と創薬ターゲットの枯渇問題の克服を目指します。

先行事業：「産学連携による次世代創薬 A I 開発(DAIIA)」

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。



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)



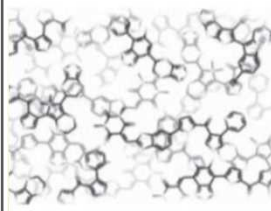
・企業データの提供
・意見交換
・技術交流

製薬協 17社

【参加企業一覧（五十音順）】

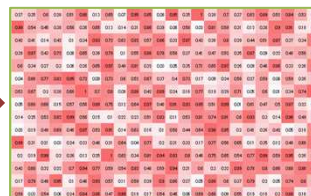
- 1 エーザイ株式会社
- 2 小野薬品工業株式会社
- 3 科研製薬株式会社
- 4 キッセイ薬品工業株式会社
- 5 杏林製薬株式会社
- 6 協和キリン株式会社
- 7 株式会社三和化学研究所
- 8 興和株式会社
- 9 大鵬薬品工業株式会社
- 10 武田薬品工業株式会社
- 11 田辺三菱製薬株式会社
- 12 帝人ファーマ株式会社
- 13 鳥居薬品株式会社
- 14 東レ株式会社
- 15 日本ケミファ株式会社
- 16 日本新薬株式会社
- 17 Meiji Seikaファルマ株式会社

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個以上のタ・ターゲットを網羅的に予測
- ・新規化合物提案AI
- ・タ・情報に基づく標的予測AI

Structure	AI profile	AI Probability	Synth. Score
	Potential AI/ML Toxicity	B	A
	Potential AI/ML Toxicity	A	B
	Potential AI/ML Toxicity	A	B
	Potential AI/ML Toxicity	B	C
	Potential AI/ML Toxicity	C	C

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

・AI開発
・事業化

IT企業

AI技術を持つ10社程度

先行事業:DAIIA 設計アプローチ

本間、奥野グループの設計アプローチ

オンオフターゲット/ADMET統合データベース（公共、製薬企業、新規測定）

学習

オンオフターゲット
予測AI

ADMET
予測AI

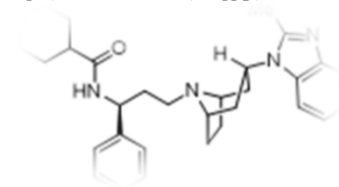
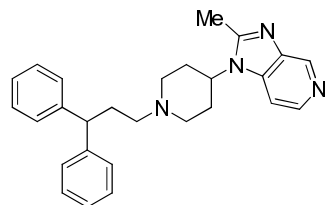
予測実施

新規化学構造
設計AI

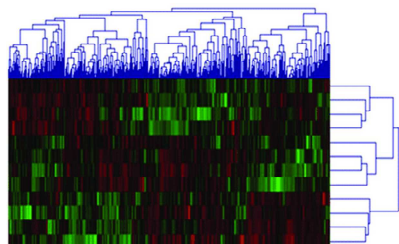
オンオフターゲット、ADMETが
最適化された構造

予測実施

最適化したい出発構造



山西グループの設計アプローチ



最適化したい出発構造
のオミクス実測データ

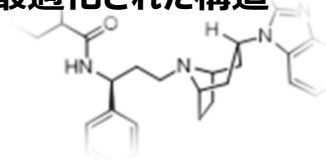
予測実施

オミクス情報
解析AI

予測実施

新規化学構造
設計AI

オミクスプロファイルが
最適化された構造



学習

トランスクリプトームデータベース
（公共、新規測定）

先行事業:DAIIA の結果

公募要領 p1

令和2年度から5か年の計画で実施された「創薬支援推進事業・産学連携による次世代創薬AI開発（DAIIA）」では令和6年度末までに**下記の項目を達成する見込み**です。

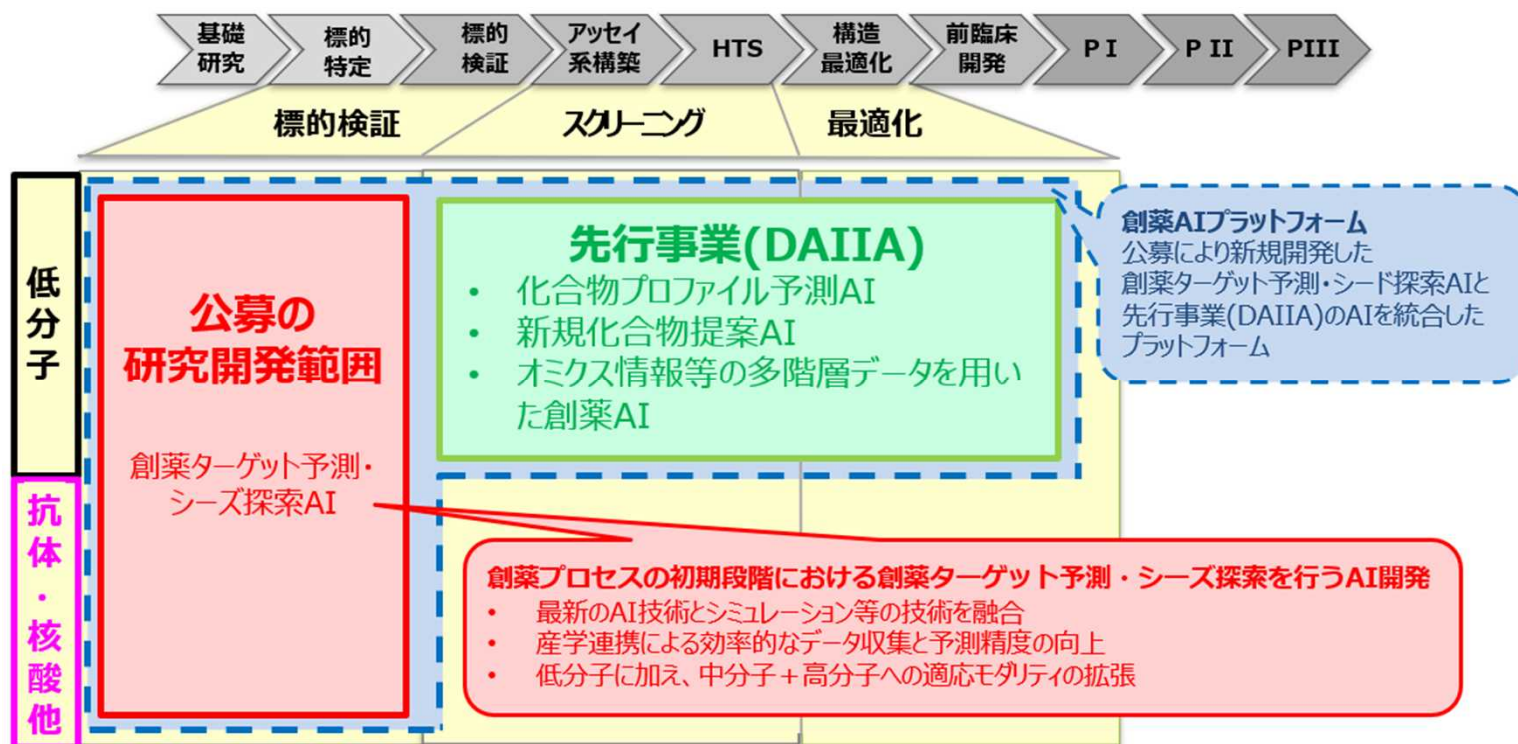
- ① 公共データと企業から提供されたデータを統合して構築したAI用データベース及び連合学習（Federated Learning）にて作成した学習モデルを用いたオン・オフターゲット、薬物動態、毒性予測が可能な「化合物プロファイル予測AI」の開発
- ② 複数の構造生成AIを組み合わせて、複数の標的分子に対する活性・選択性・ADMET（薬物動態・毒性）を同時に最適化して構造発生させる「新規化合物提案AI」の開発
- ③ 細胞に化合物を添加したときの遺伝子発現パターンの変化を基にした標的タンパク質予測や、疾患特異的な遺伝子発現パターンから化合物を構造発生させる「オミクス情報等の多階層データを用いた創薬AI」の開発
- ④ ①～③の3つの予測AIを統合した低分子創薬に資する「DAIIA統合創薬AIプラットフォーム」の構築

公募事業の方向性

公募要領 p1

近年、めざましい発展を遂げているAI技術やIT・デジタル技術を取り込み、**創薬プロセスの初期段階における創薬ターゲット予測・シース探索を行うAI開発**を推進します。

アカデミア研究者と製薬企業等の産業界が連携し、低分子のみならず中分子・高分子等のモダリティに適応するAIを開発するとともに、**先行事業で構築済みのAIシステム**等を含む複数のAIシステムを統合した、初期フェーズの創薬研究（ターゲット探索から新規医薬品候補となる化合物の提案、構造最適化とその合成）に活用できる**創薬AIプラットフォームの構築**を目指します。



公募情報（概要）

公募要領 p2, 3

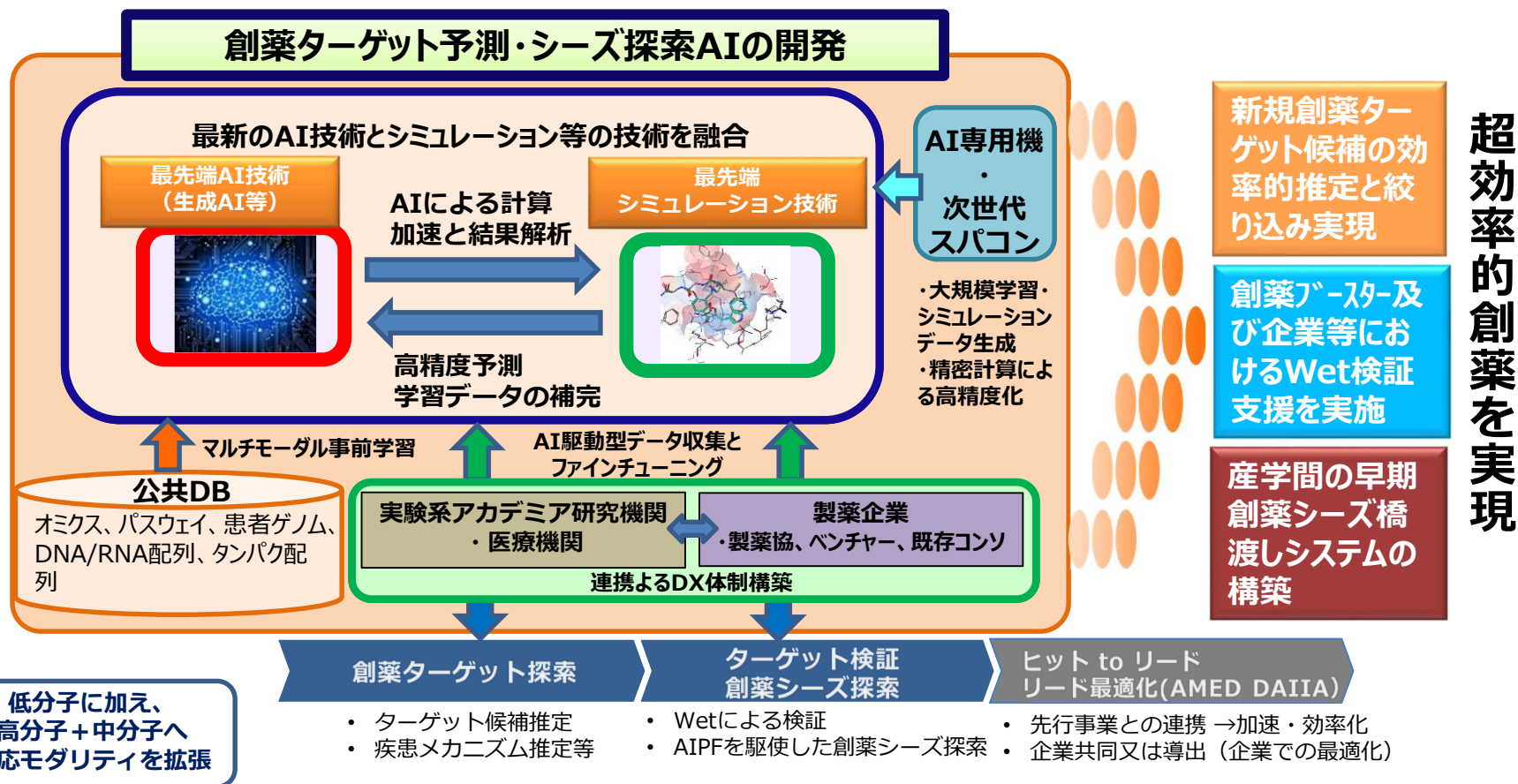
公募課題	研究費の規模 (一般管理費を含まず)	研究開発実施 予定期間	新規採択課題 予定数
産学連携による創薬AI プラットフォーム開発	1課題当たり年間 4.5億円（上限）	令和7年4月(予定) ～ 令和11年度末	0～1課題 程度

アカデミア及び企業における創薬研究の効率化に資することを目的として、以下の9項目を産学連携により達成することを目標とします。

- ① 最先端のAI技術とシミュレーション等の技術を融合した“創薬ターゲット予測・シーズ探索AI”を構築すること
- ② 空間マルチオミクス、パスウェイ、患者ゲノム、DNA/RNA/タンパク質、化合物等の公共データだけでなく、様々なデータをAI学習に利用し、学習データを充実させて予測精度を向上させること
- ③ 産学連携により、学習データの充実やAIシステムの機能を向上させること
- ④ 低分子のみならず、中分子・高分子へのモダリティにも適応させること
- ⑤ AIシステムによって予測された結果をWet実験によって検証し、予測精度を向上させること
- ⑥ 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現場で使えるAIシステムを構築すること
- ⑦ 公開ある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システムを構築すること
- ⑧ DAIIAで構築したAIシステム等を含む複数のAIシステムを統合した初期フェーズの創薬研究（ターゲット探索から新規医薬品候補となる化合物の提案、構造最適化とその合成）に活用できる創薬AIプラットフォームを構築すること
- ⑨ 創薬ブースター等を通じてアカデミア研究者が当該創薬AIプラットフォームを活用できる環境整備及び利用支援を行う体制を構築すること

創薬支援推進事業・産学連携による創薬AIプラットフォーム開発

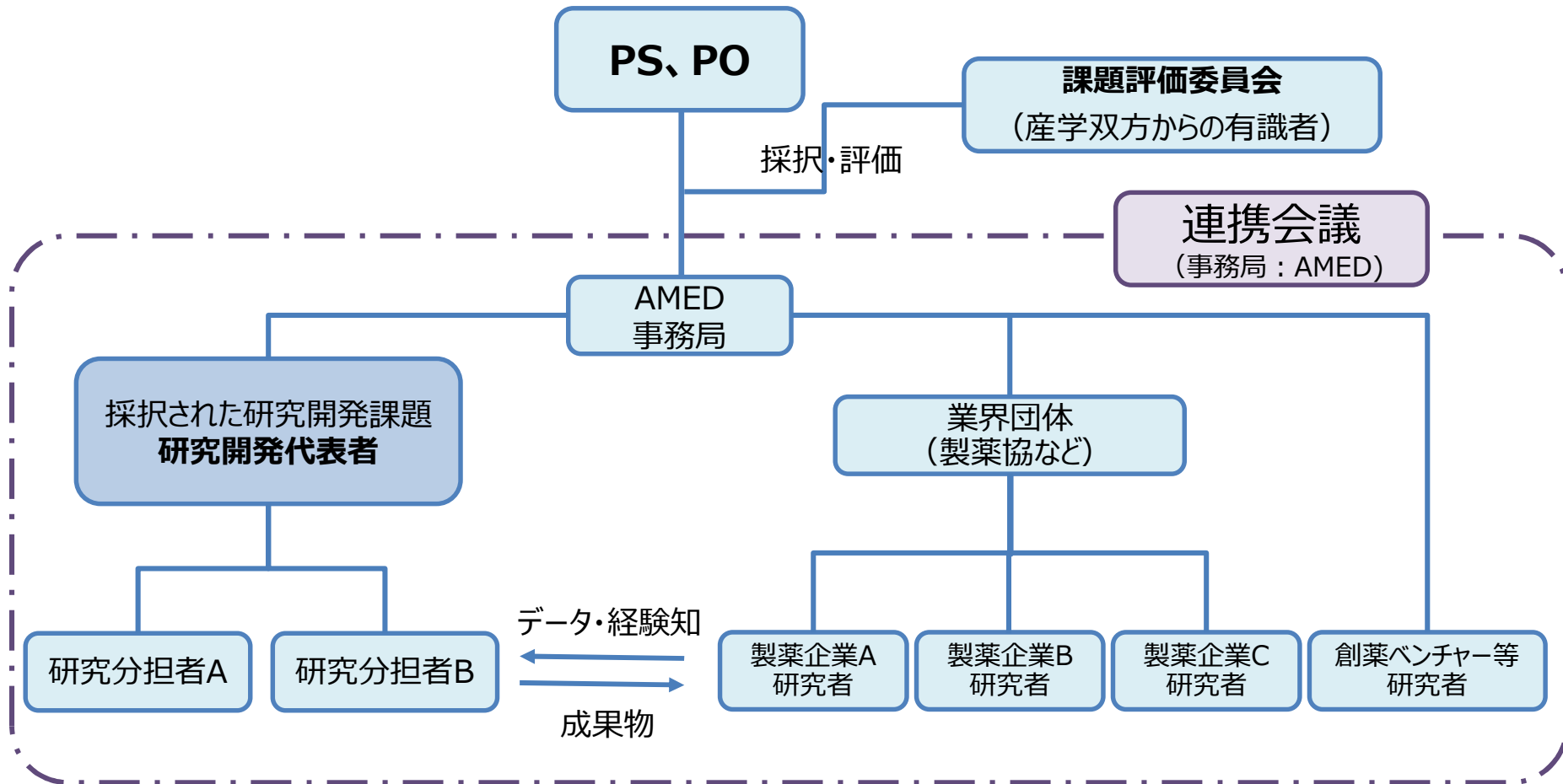
最新の高度なAI技術に基づく“創薬ターゲット予測・シーズ探索AI”を開発し、産学連携による効率的なデータ収集と予測精度の向上を図るとともに、創薬プロセスにおける複数のAIシステムを統合した創薬AIプラットフォームを構築し、創薬プロセスの効率化と創薬ターゲットの枯渇問題の克服を目指す。



創薬プロセスにおける複数のAIシステムを統合した創薬AIプラットフォームの構築を目指す。

事業実施体制（案）

○プロジェクト運営体制イメージ



採択された研究開発課題の研究開発代表者及び研究開発分担者は、本事業の目的達成のため、PS,POの指導・助言の下、AMED及び本事業に協力する製薬企業等と一体となって研究開発を推進する。

本日の内容

1. 創薬支援推進事業「産学連携による創薬AIプラットフォーム開発」の概要
2. 公募・選考について
3. 質疑応答

公募スケジュール

公募要領 p4

公募期間

令和6年12月3日（火）～令和7年1月6日（月）【正午】（厳守）

書面審査

令和7年1月上旬～令和7年1月下旬（予定）

ヒアリング

令和7年2月18日（火）（予定） ※対象課題の研究開発代表者に対して、原則として
オンライン開催の予定 **1週間前までに電子メールにてご連絡いたします。**

採否通知

令和7年3月下旬（予定）

契約締結日

令和7年4月1日（火）（予定）

応募資格者

公募要領 p7

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※¹（研究開発代表者が教育職、研究職、医療職※²、福祉職※²、指定職※²又は任期付研究員である場合に限る。）
- B) 公設試験研究機関※³
- 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
- 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）第2条に規定する独立行政法人、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及びその他特別の法律により設立された法人
- 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 内閣府に置かれる試験研究機関や国家行政組織法第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。

※² 病院又は研究を行う機関に所属する者に限ります。

※³ 地方公共団体の附属試験研究機関等

※⁴ 技術研究組合法（昭和36年法律第81号）に基づく技術研究組合

提案書の提出について

公募要領 p4,18

○提案書の入手方法

AMEDウェブサイトの公募情報からダウンロードしてください。
(<https://www.amed.go.jp/koubo/>)

○提案書類受付期間

令和6年12月3日(火)～**令和7年1月6日(月)【正午】(厳守)**

- ・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。
- ・提出書類に不備がある場合は、不受理となる場合があります。

○提出方法

PDF形式でのメール添付

メール送付先 E-mail: id3daiia@amed.go.jp

(アドレス“AT”の部分を@に変えてください。)

国立研究開発法人日本医療研究開発機構 創薬事業部 創薬企画・評価課
創薬支援推進事業 産学連携による創薬AIプラットフォーム開発 担当宛

審査項目と観点

公募要領 p15

審査項目	観点
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
科学的・技術的な意義及び優位性	・現在の技術レベル及びこれまでの実績は十分にあるか ・独創性、新規性、革新性を有しているか ・医療分野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 ・社会的ニーズに対応するものであるか ・医療分野の研究開発に関する国の方針に合致するものであるか
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
実施体制	・申請者を中心とした研究開発体制が適切に組織されているか ・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切であるか ・不合理な重複／過度の集中はないか
所要経費	・経費の内訳、支出計画等は妥当であるか
データマネジメントプラン(DMP)の妥当性	・「AMED 研究データ利活用に係るガイドライン」に沿っているか
事業で定める項目及び総合的に勘案すべき項目	・創薬総合支援事業(創薬ブースター)等のアカデミア創薬で活用できるか ・製薬企業での創薬研究の効率向上を目指し、データ提供等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

応募及び採択に関する留意事項

公募要領 p3, 5, 6

- 産学連携に関して、企業との連携方法を具体的に記載してください。（応募時点で企業の了解を得ておく必要はありませんが、実現可能性について評価します。）
※採択後、製薬企業や業界団体等へ協力依頼する場合はAMEDと連携して行います。
- 採択された研究開発課題の研究開発代表者及び研究開発分担者は、PS、POの指導・助言の下、AMED 及び本事業に協力する製薬企業等と一体となって研究開発を推進していただきます。（連携会議を設置します。）
- 採択された研究開発課題の実施体制については、PS、PO、課題評価委員の指導・助言に基づき、必要に応じて参加機関の追加等の見直しを要請する場合があります。
- 採択された研究開発課題の研究開発代表者及び研究開発分担者には、アカデミア研究者が本事業により構築した創薬AIプラットフォームを活用できる環境整備及び利用支援も行っていただきます。
（先行事業DAIIAで開発したAIシステムも含まれますので、DAIIAの研究代表者及び研究分担者とも連携を図っていただきます。）

本日の内容

1. 創薬支援推進事業「産学連携による創薬AIプラットフォーム開発」の概要
2. 公募・選考について
3. 質疑応答

- 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。

<公募に関するお問い合わせ先>

国立研究開発法人日本医療研究開発機構 創薬事業部 創薬企画・評価課
「創薬支援推進事業・産学連携による創薬AIプラットフォーム開発」担当

E-mail: id3daiia"AT"amed.go.jp

※E-mailは上記アドレス"AT"の部分を@に変えてください。