創薬支援推進事業・産学連携による次世代創薬 AI 開発
事後評価結果

研究課題名　　　：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

機 関 名　　　：国立研究開発法人理化学研究所

研究代表者　　　：本間 光貴

全事業期間　　　：令和 2 年 8 月 6 日～令和 7 年 3 月 31 日

評価結果　　　　：大変優れている（計画した成果を多少上回る成果が得られた）

【評価コメント】

本プロジェクトでは、低分子の AI 創薬に関して、最先端技術を採用し、さらに特許データベースを活用した医薬品らしさや新規性の判断も加えて、幅広く利用可能なプラットフォームを構築した。特に複数の指標を同時に改善しながら化合物をデザインしていく点は本技術の強みである。また、アカデミアと製薬企業が密に連携し、Federated Learning という新しい手法を用いて AI 創薬で鍵となる信頼性の高い企業の機密データを入手することを可能とした点は大きな意味を持ち、今後の産学連携の見本ともいえる。公共データに加え、大量の企業データや追加評価データを活用して構築された稀有な創薬プラットフォームであり、成果物のみならず実施体制についても研究課題として十分に評価できる。

オミクス情報や異種データ融合を用いた新規構造発生 AI の開発も順調に推進されており、成果の応用範囲は広がるものと考えられる。

本プロジェクトは、創薬研究において高い意義と実現可能性を有しており、将来的にはアカデミア創薬や製薬企業で広く活用されるシステムである。今後の企業の協力が前提となるが、更なる精度向上と適用範囲の拡大も期待できる。

一方、AI 技術が日々進化している中で、DAIIA で構築された統合創薬 AI プラットフォームを今後どのように維持発展させて行くかが大きな課題である。事業終了後、データアップデートや連携企業からのフィードバックをシステムに反映させる取り組みや具体的な解決策が示されていなかったのが残念である。統合創薬 AI プラットフォームは創薬研究に使用されて初めてその真価が問われるものであるが、現時点では研究者による使用満足度を測ることは出来なかった。