

社会資本整備審議会・交通政策審議会技術分科会 第41回技術部会 産学連携による次世代創薬AI開発（DAIIA） における取組状況のご紹介

令和8年10月5日

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

国立研究開発法人日本医療研究開発機構(AMED)の概要

AMED: Japan Agency for Medical Research and Development



1. 目的

医療分野の研究開発における基礎から実用化までの一貫した研究開発の推進・成果の円滑な実用化及び医療分野の研究開発のための環境の整備を総合的かつ効果的に行うため、健康・医療戦略推進本部が作成する医療分野研究開発推進計画に基づき、医療分野の研究開発及びその環境の整備の実施、助成等の業務を行う。

2. 設立日

平成27(2015)年4月1日

3. 組織等

①役員:4名

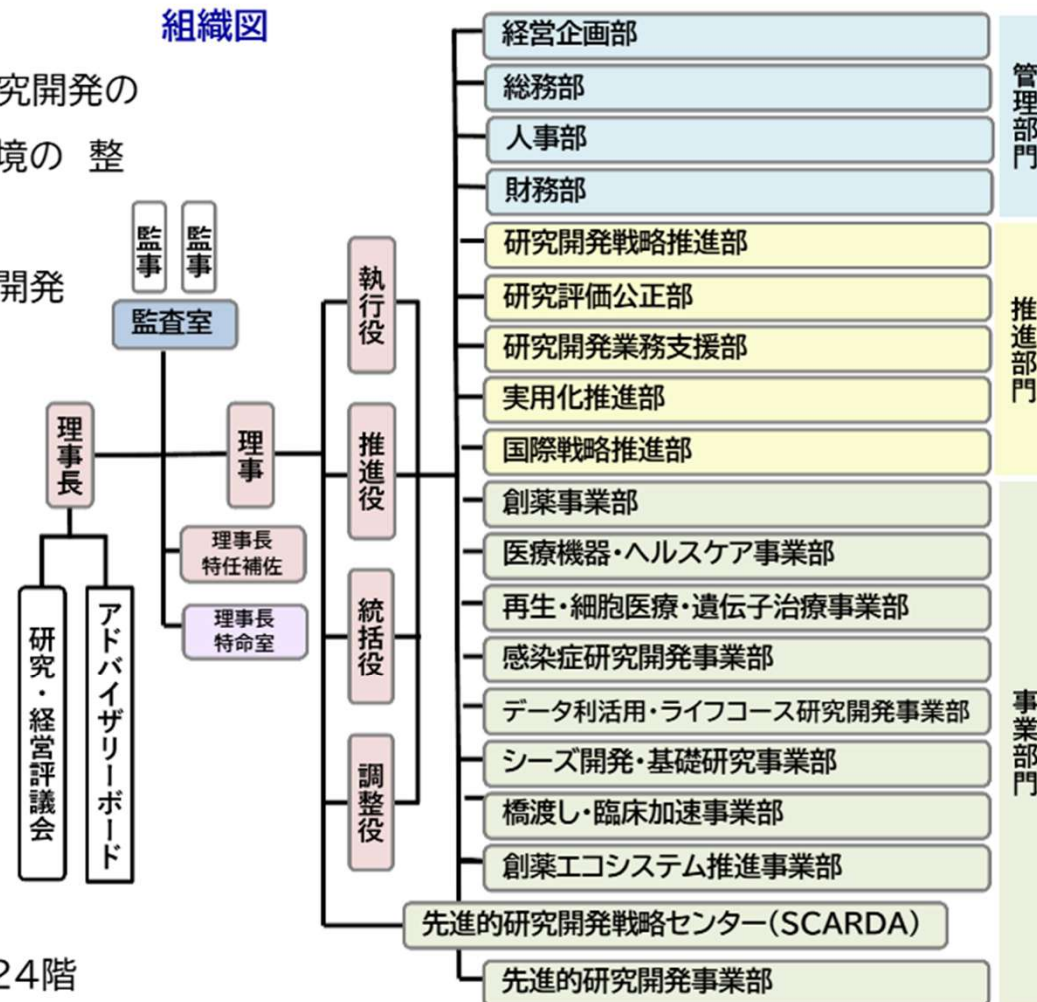
- ・理事長 中釜 斉
- ・理事 鈴木 建一
- ・監事(非常勤) 小宮山 榮、牧 兼充

②職員: 791名 (役員含む。令和8(2026)年4月1日現在)

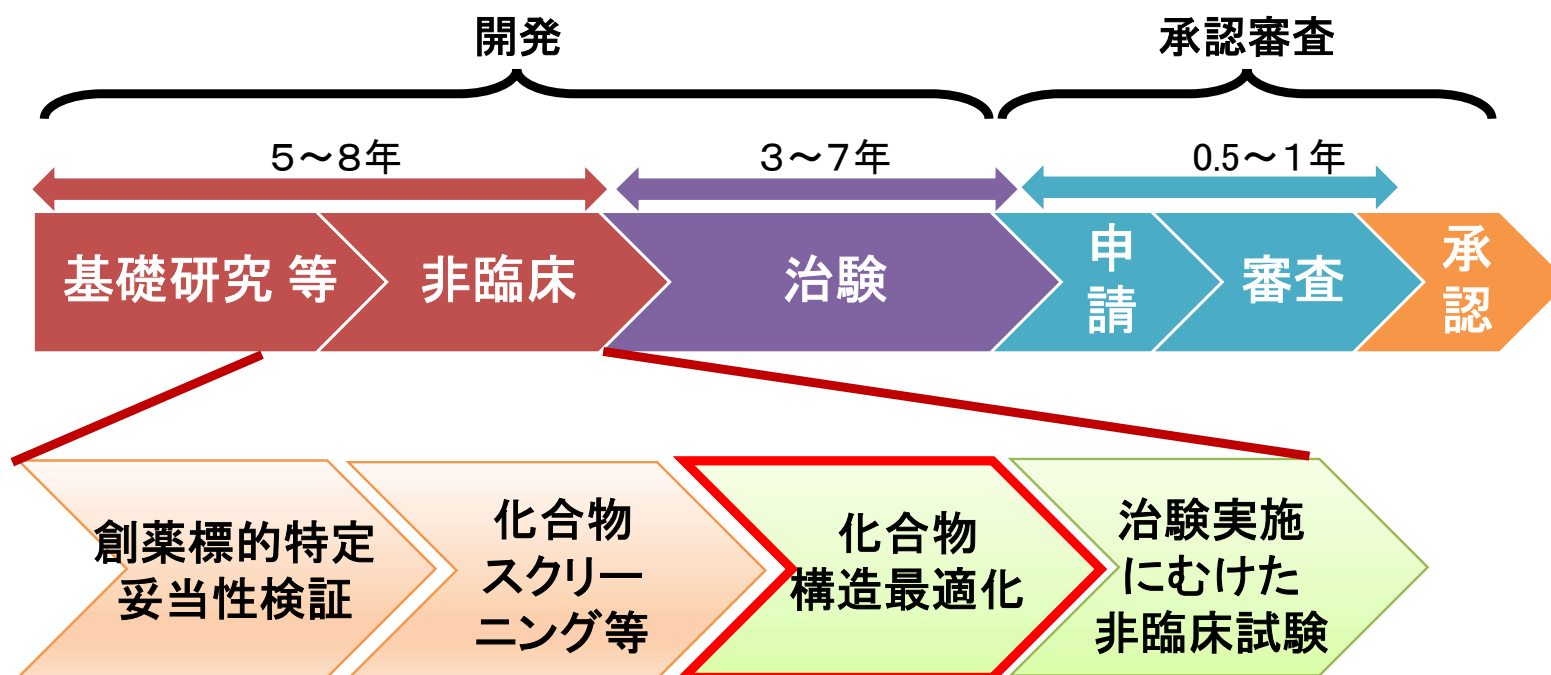
3. 予算 1,238億円

4. 所在地 東京都千代田区大手町1-7-1 読売新聞ビル20~24階

組織図



医薬品の開発にむけた研究開発フロー



この研究ステージで活用可能なAIプラットフォームの構築を目指す

- ▶ 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。
→ 緊密な産学連携のもとに研究開発を行う。
- ▶ 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構造発生システムを組み合わせ、化合物の最適化を自律的に行う最先端のAI(Artificial Intelligence)創薬技術を開発する。
→ 化合物の最適化プロセスにおける効率と精度を大幅に向上。

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)



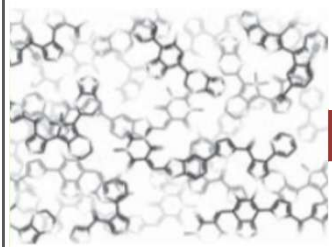
・企業データの提供
・意見交換
・技術交流

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

Structure	AI profile	AI Probability	Synth. Score
	Potency ADME Toxicity	B	A
	Potency ADME Toxicity	A	B
	Potency ADME Toxicity	A	B
	Potency ADME Toxicity	B	C
	Potency ADME 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

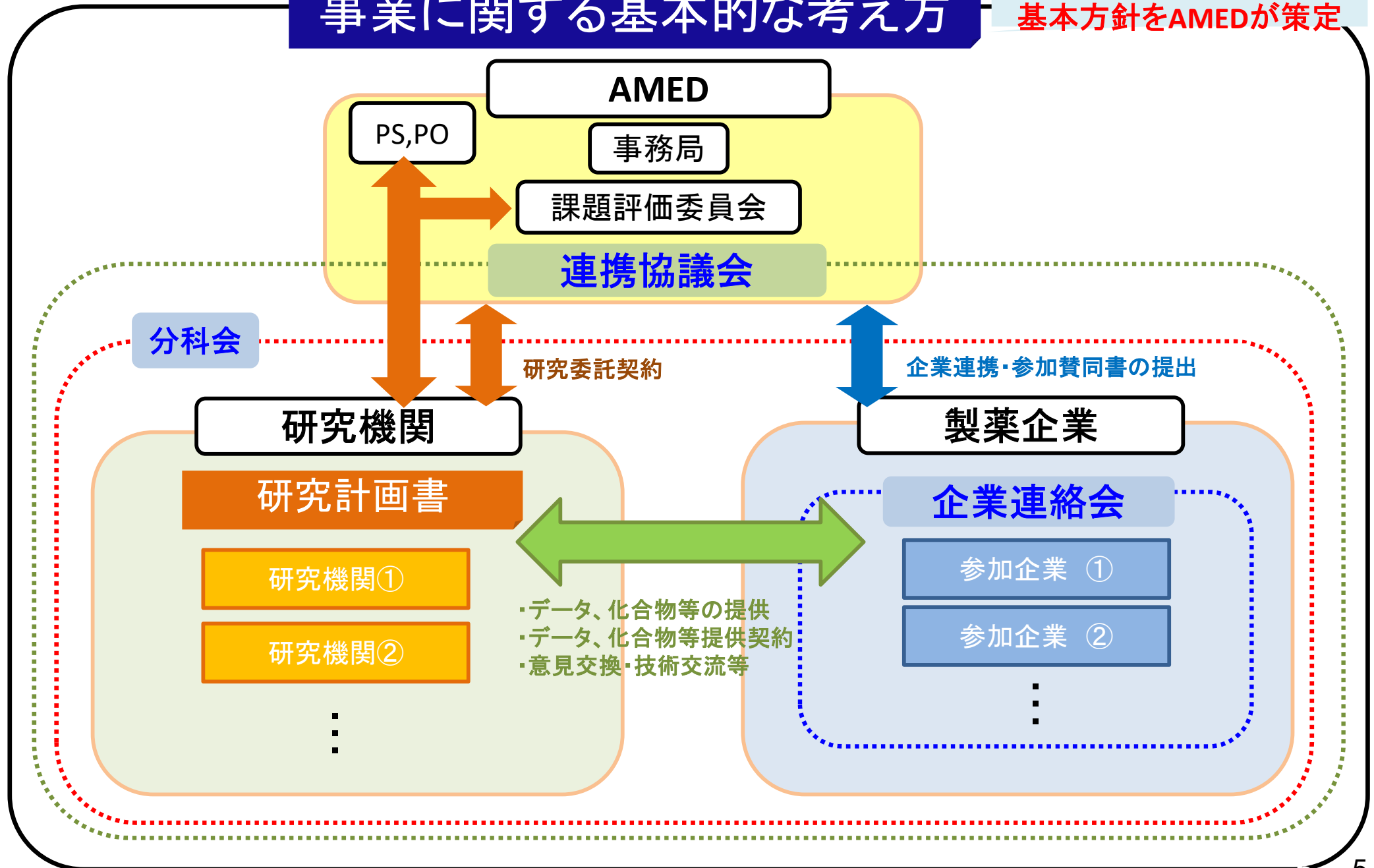
IT企業

AI技術を持つ10社程度

産学連携による次世代創薬AI連携のイメージ

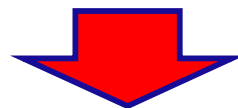
事業に関する基本的な考え方

事業開始時に運営の
基本方針をAMEDが策定



DAIIAでの企業提供データ

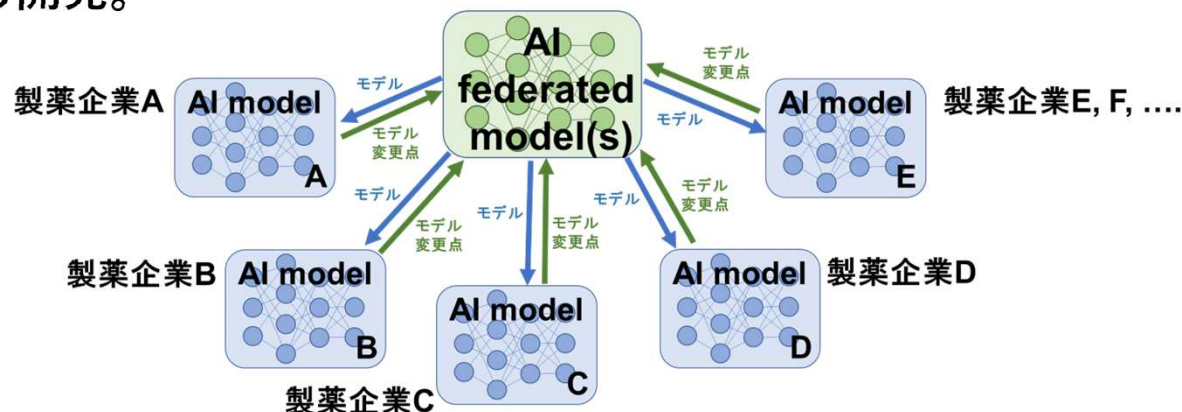
- ✓ オンオフターゲット構造付きデータ
- ✓ ADMET構造付きデータ
- ・ 合計で100万化合物以上、1500万データポイント程度のデータ提供



これだけ大量のデータを構造式付きで提供を受けたのは日本で初めてであり、世界的に見ても価値が高い。

○Federated Learning(連合学習)も以上とは別に実施

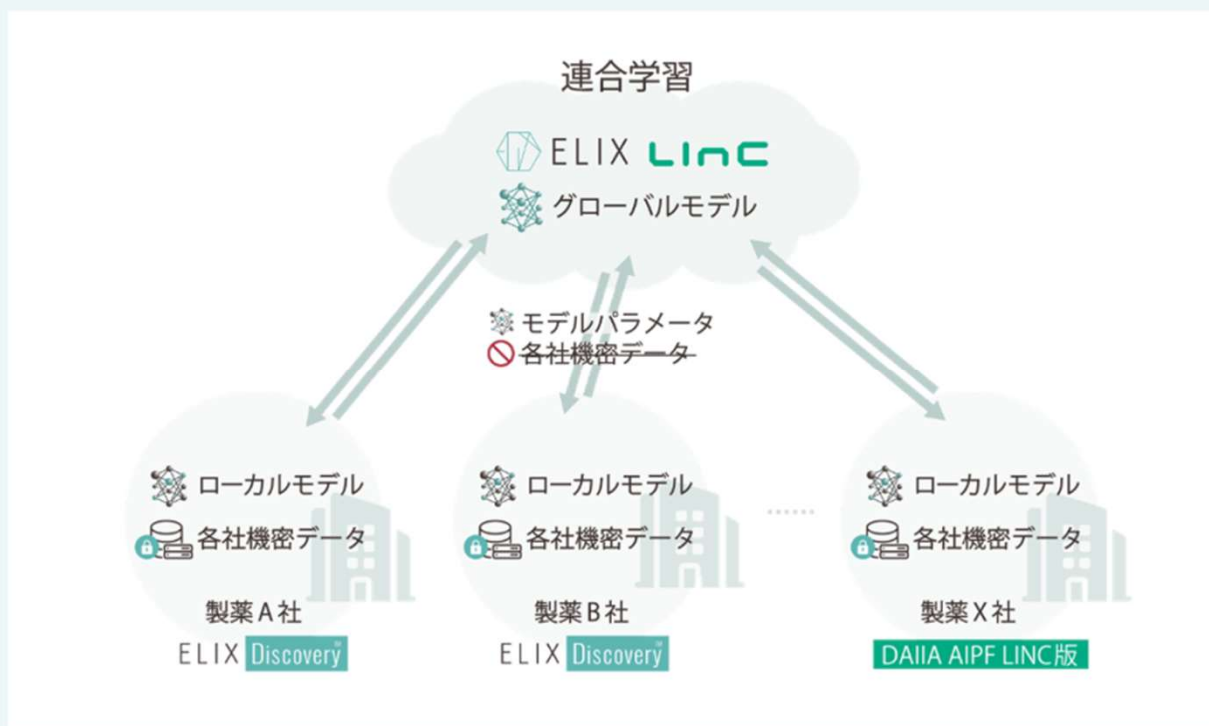
- ・ 学習プログラムを社内で実行して、予測モデルのみを共有する仕組み。
- ・ 社外にデータを出す必要がないことが大きなメリット。
- ・ 多数回の学習の管理を行うシステムも開発。



AI創薬プラットフォームの事業化

ElixとLINC、製薬企業16社のデータを連合学習したAIモデルを搭載するAI創薬プラットフォームを世界で初めて事業化

株式会社Elix（代表取締役CEO：結城 伸哉、本社：東京都千代田区、以下「Elix」）と、一般社団法人ライフ インテリジェンス コンソーシアム（LINC）（代表理事：奥野 恭史、本部：大阪市北区、以下「LINC」）は、製薬企業16社が保有するデータを連合学習した複数のAIモデルを搭載するAI創薬プラットフォームを、世界で初めて事業化しましたのでお知らせいたします。



<https://www.elix-inc.com/jp/news/newsrelease/2208/>