



製薬協

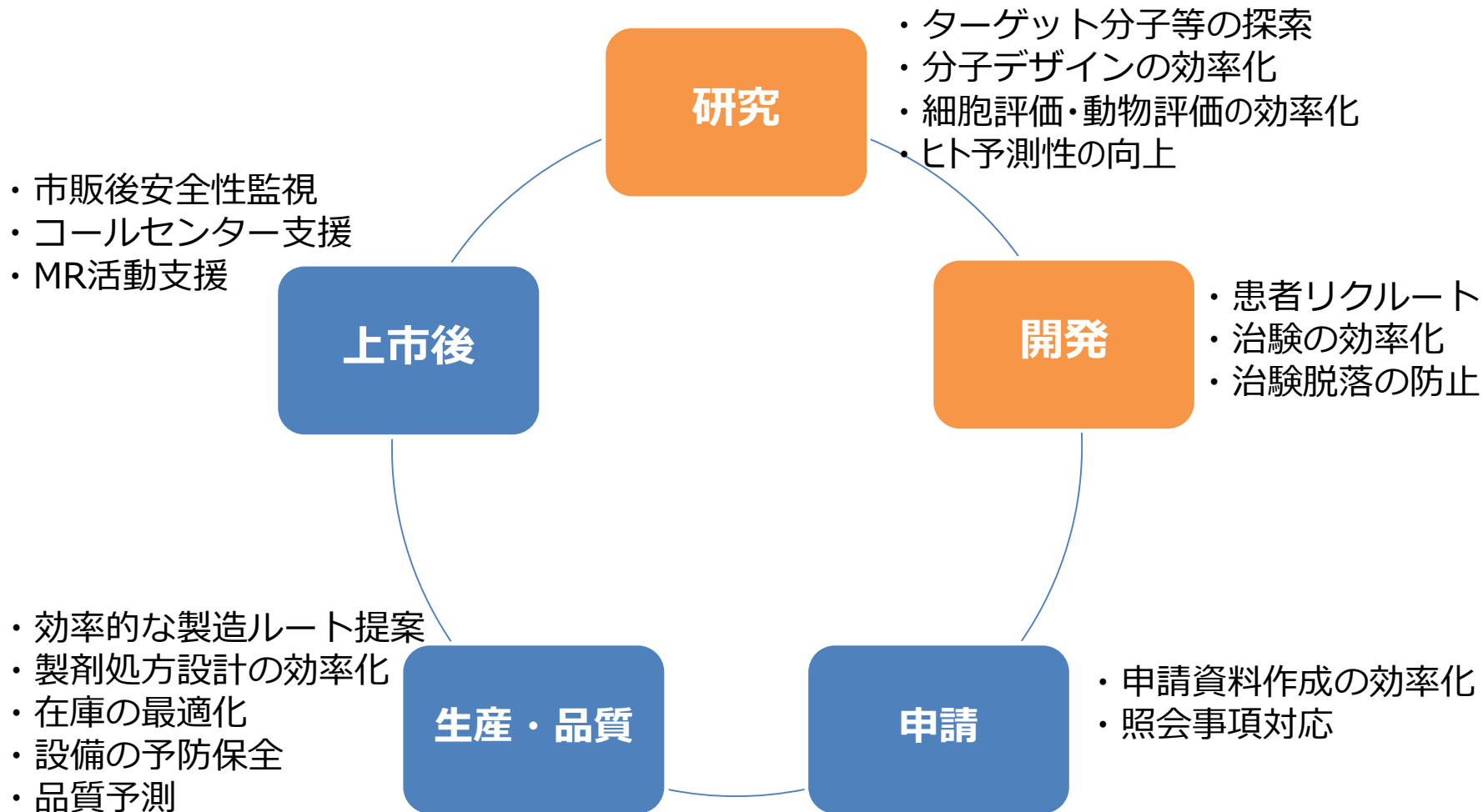
資料2

医薬品開発における取り組み

日本製薬工業協会
研究開発委員会 専門委員長
赤塚 浩之

第6回保険医療分野AI開発加速コンソーシアム
2019年3月20日

医薬品産業におけるAI活用ニーズ（全体像）



医薬品の研究開発におけるAI活用ニーズと検討状況



ニーズの例			
<ul style="list-style-type: none"> ターゲット分子探索 バイオマーカー探索 疾患メカニズム解明 ドラッグリポジショニング 	<ul style="list-style-type: none"> 候補化合物の探索 タンパク質立体構造予測 分子デザインの効率化 合成経路の予測 細胞評価の効率化 	<ul style="list-style-type: none"> ヒトADMET*予測 動物評価の効率化 (安全性) 	<ul style="list-style-type: none"> 治験参加者のリクルート 治験脱落の防止 治験期間の短縮 データ取得・解析効率化

PRISM
 2018~
 肺がん・特発性肺線維症におけるターゲット分子探索

2018~

**創薬支援
インフォマティクス**
 2015~2019
 薬物動態予測
 心毒性、肝毒性予測

2015~2019

TargetMine
 2007年~
 公共DBからのターゲット分子探索

2007年~

LINC (ライフ・インテリジェンスコンソーシアム)			
<ul style="list-style-type: none"> ターゲット分子探索 疾患メカニズム解明 ドラッグリポジショニング 	<ul style="list-style-type: none"> タンパク質立体構造予測 構造最適化 	<ul style="list-style-type: none"> ヒトADMET*予測 ブリッジング予測 	<ul style="list-style-type: none"> 治験効率化 病理画像処理

2017.8~2020.9

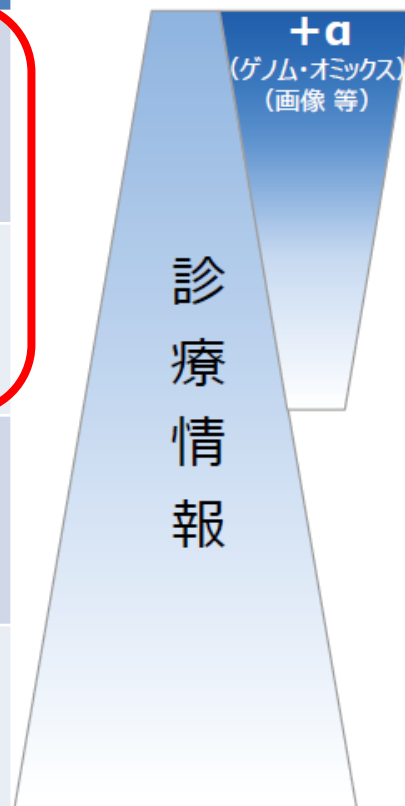
*ADMET:動態 (吸収、分布、代謝、排泄) 、毒性

AIの活用目的と必要なデータ

活用目的によって、必要なデータの**内容**や**量・質**が異なる

	主な活用目的	必要なデータ
研究ステージ	<ul style="list-style-type: none"> ・病態の解明 ・ターゲット分子探索 ・バイオマーカー探索 ・ドラッグリポジショニング 	疾患固有の詳細なデータ <ul style="list-style-type: none"> ・ゲノム・オミックス解析データ ・特殊な検査データ ・画像データ等
開発ステージ	<ul style="list-style-type: none"> ・患者リクルート ・治験デザイン（層別化） ・適応追加の検討 	標準化された質の高い医療データ <ul style="list-style-type: none"> ・診療結果 ・電子カルテ情報等
上市後 市販後調査	<ul style="list-style-type: none"> ・安全性・有効性の検証 ・使用実績の把握 ・副作用シグナルの検出 	アウトカムも含まれた医療データ <ul style="list-style-type: none"> ・レセプトデータ ・DPCデータ ・電子カルテ情報等
上市後 情報提供	<ul style="list-style-type: none"> ・地域に根差した医療への貢献 ・流通管理 	より網羅性の高い医療データ <ul style="list-style-type: none"> ・レセプトデータ ・DPCデータ ・電子カルテ情報等

狭く、深いデータ



広く、浅いデータ

レセプト：診療報酬明細書、DPC：診療群分類包括評価

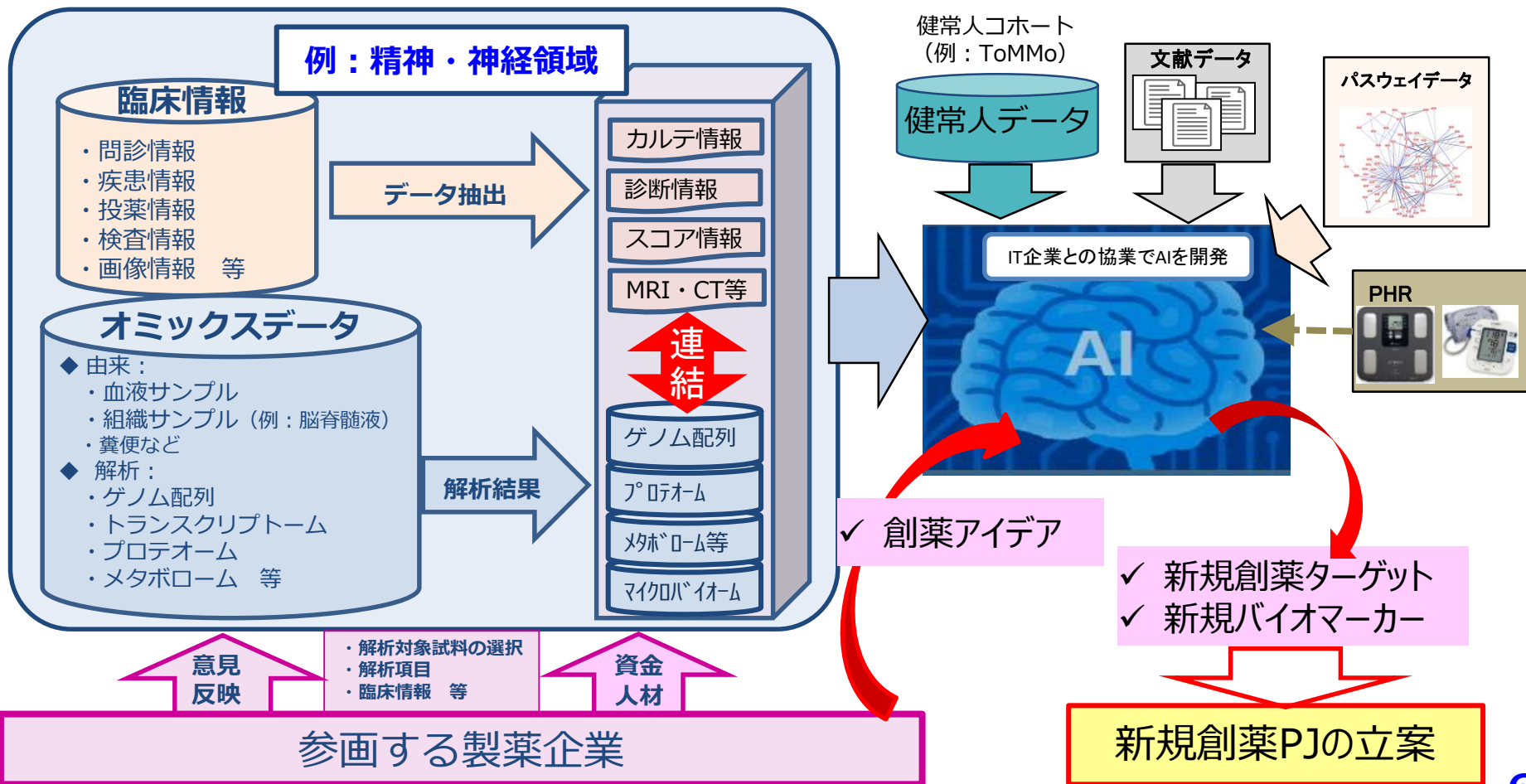
製薬企業によるAI利活用の例

カテゴリ	概要	用いられるデータの例
ターゲット探索	創薬ターゲット分子、バイオマーカーの探索	特許、出版物等の文献データ ゲノム、オミックス、画像、検査値、 臨床データ 等
ターゲット探索	ドラッグリポジショニング	臨床データ 、化合物データ、パスウェイデータ 等
化合物探索	候補化合物の探索	患者・健常者のゲノム、タンパク質、 臨床データ 等
化合物探索	タンパク質立体構造の予測	アミノ酸配列、タンパク質立体構造 等
化合物最適化	細胞の自動動画画像解析	画像・動画データ 等
化合物最適化 前臨床試験	標的タンパク質への親和性や動態、 毒性の予測	タンパク質構造データ、動態データ、 毒性データ 等
前臨床試験	動物試験の自動化、デジタルマーカー抽出	動画データ 等
臨床試験	患者と治験のマッチング	治験情報、 臨床データ 等
臨床試験	治験の効率化	医学論文、治験情報、 臨床データ 等

- ◆ 革新的な医薬品の創出、医療の精密化の実現には、ゲノムやオミックス、画像等のデータが連結された**臨床データ**が必要
- ◆ 早期治療・予防の実現には、上記に加え介護情報、行動情報など多様な項目が経時的に取得・集積された「**ライフコースデータ**」が重要

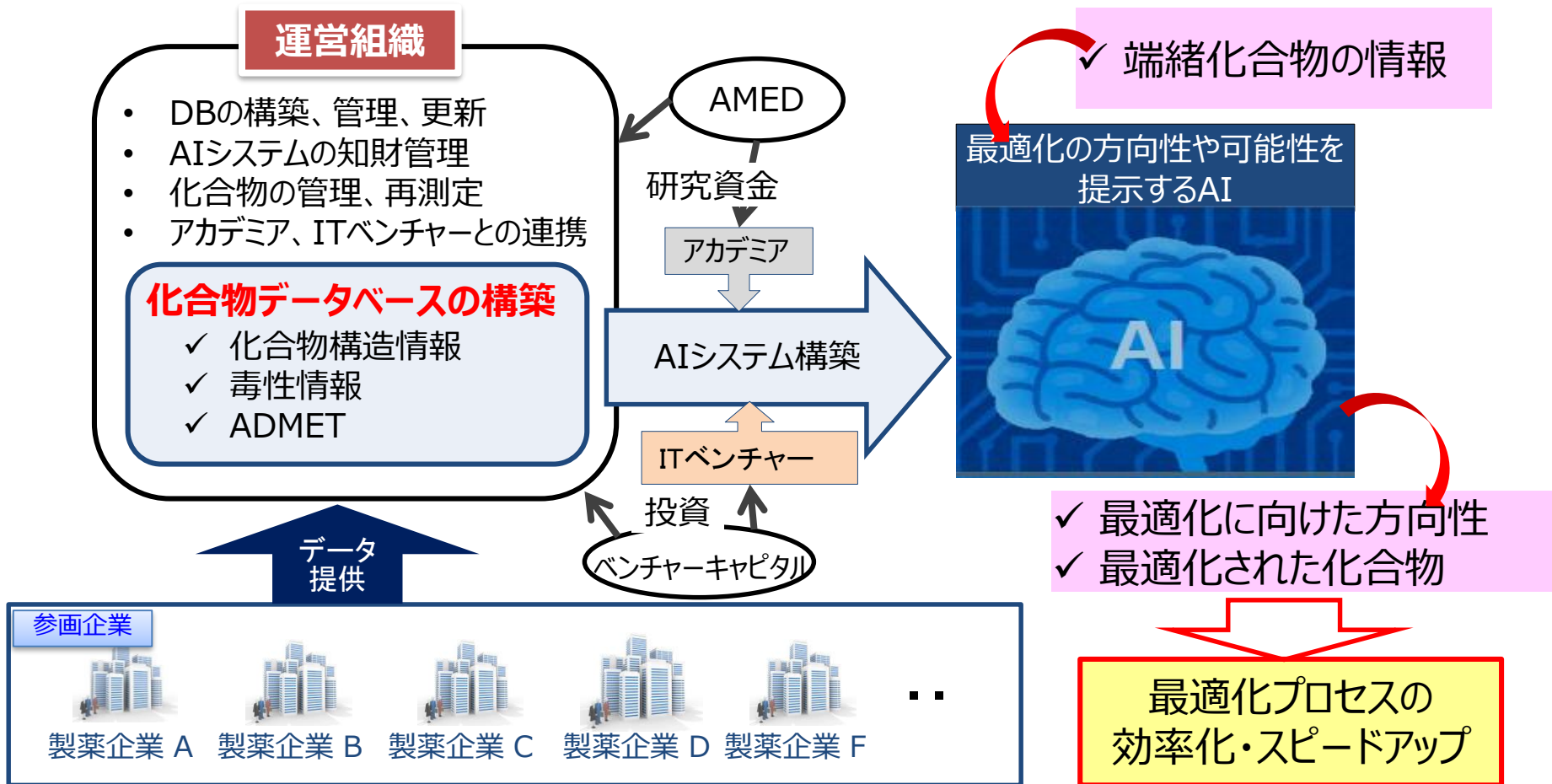
創薬ターゲット・バイオマーカー探索に向けた検討

- ◆ 参画企業の意見を踏まえた**疾患別情報統合DB**を構築
- ◆ 参画企業は構築したDBにアクセスし自社研究に活用するとともに、様々な情報を複合的に解析する**AIの開発を進め**、新たな発想に基づく**新規創薬PJを立案**



創薬プロセスの高度化・効率化に向けた検討

- ◆ 参画企業が化合物構造、物性や毒性などの低分子薬の各種データを提供しデータベースを構築
- ◆ 参画企業は化合物データベースを自社研究に自由に活用
- ◆ また、化合物データベースを利用して共有AIの開発を推進し、低分子創薬の強化・効率化を実現



医薬品開発におけるAI活用に向けた課題

データ

- ◆ 質の高いデータを統合、経時的に収集、解析できる基盤の構築
 - 医療情報の電子化・構造化の推進
 - ゲノム・オミックスと医療データを統合解析可能なデータ基盤の構築
 - 医療等ID等により、健常時を含めたライフコースデータの収集・解析を可能とする基盤の整備
- ◆ データ利活用に向けた環境整備
 - 構築したデータ基盤に産業界もアクセスし活用できる環境整備
 - 政府が進める取組み（C-CAT、PRISM、CIN等）の二次利用推進と他疾患領域への拡大

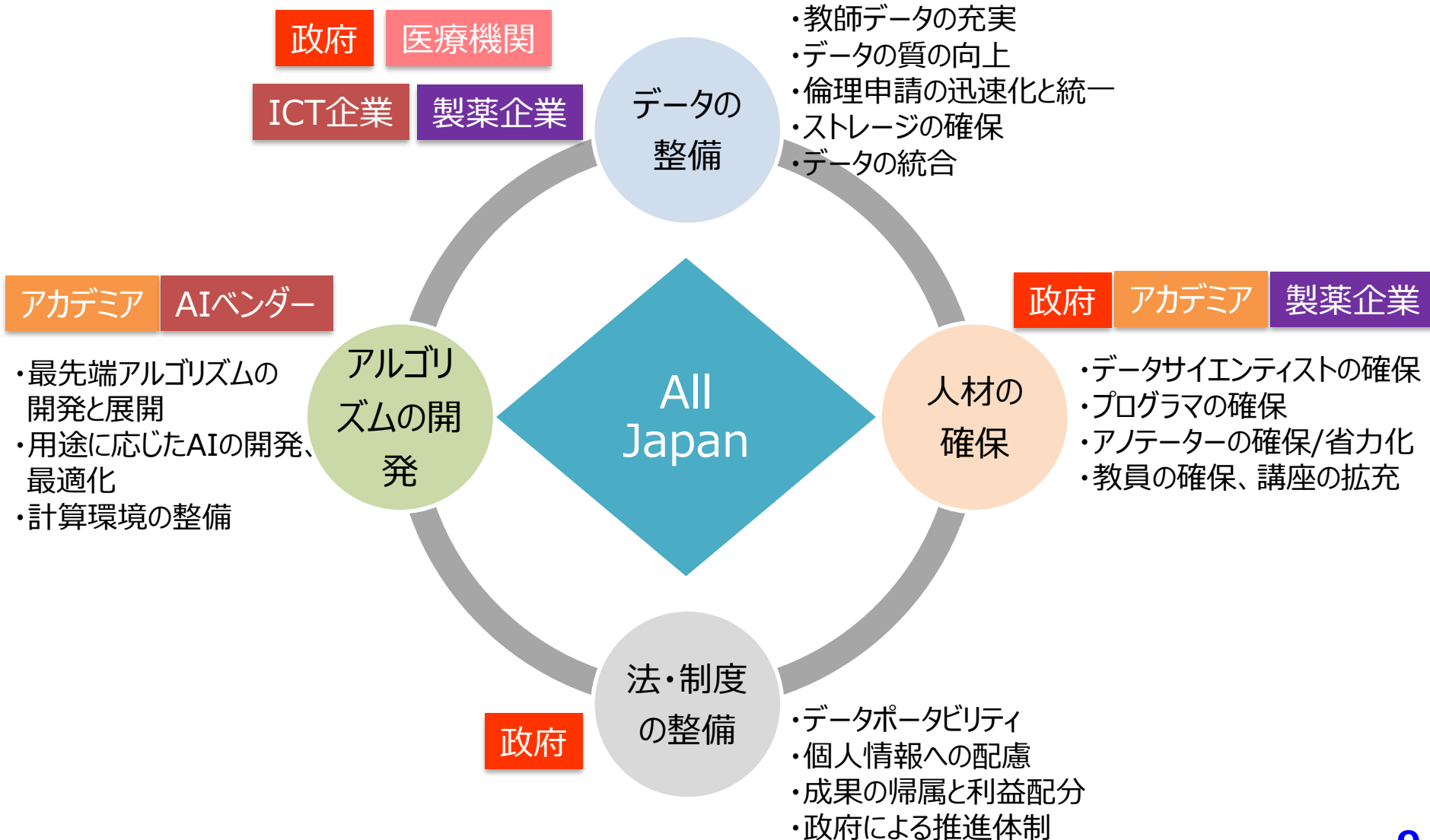
人材

- ◆ 人材不足への対応
 - 大学の教育システムや民間の力を活用した、「AI + 医薬」人材の早急な育成
 - AI開発に向けた実践的な協業、人材交流による人材育成

その他

- ◆ AIの実装に向けた諸課題の解決
 - 成果の帰属と利益配分の明確化
 - 健康医療情報保有者との連携体制構築

医薬品産業においてAI活用を進める要素と ステークホルダーに期待される役割





製藥協