

AI・データ駆動型創薬・医療の研究開発拠点と利活用ネットワーク体制の構築

① 計画の概要

AI、ビッグデータ、IoT は第4次産業革命の中軸とされ、第5期科学技術基本計画においても超スマート社会 Society5.0 を実現するための必須基盤技術とされている。しかしながら、我が国のライフサイエンス分野の研究機関は、いまだ9割以上が実験科学の研究室で占められていると言っても過言ではない。そこで当該計画では、我が国の強みであるライフサイエンス（特に創薬・医療）分野にフォーカスを絞ったAI・データサイエンス研究開発を拠点化することで、ライフサイエンス分野の国際競争力の持続的発展を目指す。欧米では、創薬・医療のAI開発においてITベンチャーが牽引しているが、我々はこれまでに110の企業・団体からなる産学連携コンソーシアム（LINC）で30種類の創薬AIを開発し、世界に抜きん出た取り組みをスタートさせている。当該計画では、この現時点での優位性を確固たるものにすべく、これまでの取り組みを発展させることで、AI・データ駆動型創薬・医療の研究開発を加速する。

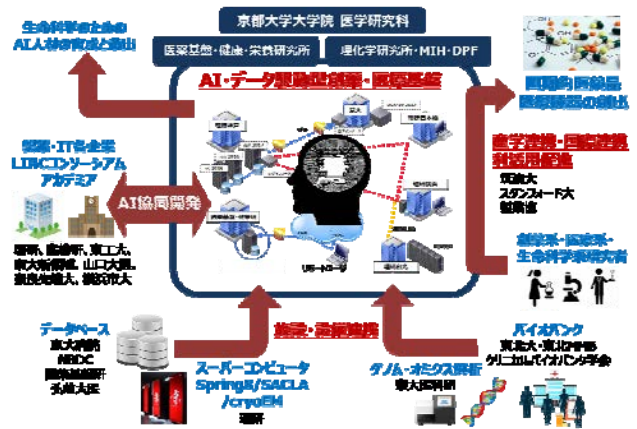


図1 全体概要

具体的には、京都大学大学院医学研究科、理化学研究所、医薬基盤・健康・栄養研究所を中心に、創薬・医療分野における10領域のAI研究開発ユニットと拠点事務局を設置し、「AI・データ駆動型創薬・医療研究開発拠点」を構築する。また、開発した「AI・データ駆動型創薬・医療基盤」を国内外の創薬研究者が共同利用できる環境整備、ネットワーク体制を構築することで、世界をリードする拠点を目指す。開発費の高騰、新薬承認数の低迷が深刻化する医薬品開発において、AI・データ駆動型研究開発にシフトすることで、基礎から臨床への橋渡し、実験を代替する予測、膨大な実験結果の解釈、新規知見の発見が促進され、開発の効率化、低コスト化、新薬創出につながり、最終的にはSDGsに掲げる「人類の健康と福祉」に貢献することが期待できる。

② 学術的な意義

データサイエンスは、実験科学（第一の科学）、理論科学（第二の科学）、シミュレーション科学（第三の科学）に次ぐ第四の科学として、近年急速な発展を遂げている。しかしながら、我が国のライフサイエンス分野の研究機関は、いまだ9割以上が実験科学の研究室で占められていると言っても過言ではない。当該計画では、創薬・医療の観点からライフサイエンス分野におけるデータサイエンス拠点を形成し、既存の実験科学、理論科学、シミュレーション科学の研究機関との連携ネットワークを構築することで、4つの科学の融合を目指すものである。特に、実験科学では、研究者の勘と経験などの暗黙知に依存することが多いことや、解釈困難な未発表実験データが多く潜在していることから、当該計画においてデータサイエンスやシミュレーションを駆使することで、これら実験科学における未踏領域へのアプローチが可能となり、新たな知見の発見や新たな知識体系の創成が期待できる。さらに、近年のライフサイエンス分野の重要な科学的課題として、分子、オミクス、細胞、組織、臓器、モデル動物、ヒト個体の多階層レベル（マルチスケール）での生命現象の理解が挙げられる。特に、創薬では、臨床と基礎の橋渡しが課題となっており、データサイエンスにより臨床データと基礎実験データの相関関係や因果関係を推定することで課題解決の糸口につながる。

また、開発費の高騰、新薬承認数の低迷が深刻化する医薬品開発において、AI・データ駆動型研究開発にシフトすることで、実験を代替する予測、膨大な実験結果の解釈、新規知見の発見が促進され、開発の効率化、低コスト化、新薬創出につながるものと期待される。当該計画で構築するAI・データ駆動型研究開発基盤は、創薬・医療分野以外の領域（化学系、農林水産系、食品系等）にも応用可能であり、ライフサイエンス・ものづくり分野全般の活性化に資するものと考えられる。

③ 国内外の動向と当該研究計画の位置づけ

AI、ビッグデータ、IoT は第4次産業革命の中軸として、我々の生活を一変しようとしている。例えば、医療分野では2018年に米国食品医薬品局（FDA）が糖尿病網膜症の診断を行うAIを承認し、医療AIの現場利用が現実となってきている。我が国では、理研、産総研にAIセンターを設置、大学にデータサイエンス学部を新設するなどの対応を行っているが、欧米・中国の勢いは凄まじく、後塵を拝していることは否めない。当該計画は、我が国の強みであるライフサイエンス（特に創薬・医療）分野にフォーカスを絞ったAI研究開発を拠点化することで、国際競争に勝つことを目指している。欧米・中国では、ITベンチャーが創薬・医療・ヘルスケアのAI開発を牽引しているが、我々は、既述の通り、産官学の110団体から成るコンソーシアムを形成し、創薬過程全域のAI開発という世界に抜きん出た取り組みをスタートさせている。当該計画では、この現時点での優位性を確固たるものにすべく、京大・理研・医薬基盤健康栄研を中核とした拠点化および関連機関とのネットワーク形成により、AI・データ駆動型創薬医療の加速、ならびに人材育成による持続的発展を目指す。

④ 実施機関と実施体制

京都大学大学院医学研究科を中核拠点、理化学研究所・医科学イノベーション推進プログラム（MIH）、医薬基盤・健康・栄養

研究所を協力拠点として、AI・データ駆動型創薬・医療の研究開発拠点を形成する。当該拠点では、医薬品開発プロセスと医療現場利用におけるAI・ビッグデータ解析技術を下記の10領域に分けて開発を行う。(括弧内は各領域の担当機関を表す。)

1. 予防・先制医療・デジタルヘルス(京大)、 2. 臨床・診断・ゲノム医療(京大)、 3. 創薬標的疾患・分子探索(医薬基盤研)、 4. リード探索・分子シミュレーション(理研)、 5. メディシナルケミストリー・ADMET(理研)、 6. トラスレーショナルリサーチ(医薬基盤研)、 7. バイオロジックス・製剤(京大)、 8. 治験・市販後・メディカルアフェアーズ(京大)、 9. 知識ベース(京大・医薬基盤研・理研)、 10. AI基盤・応用(京大・理研)

さらに、上記AI・データ駆動型創薬・医療拠点の機動的な活用を実現するために、以下の研究機関内のグループと連携し、創薬・医療における研究開発ネットワーク体制を構築する。なお、拠点対象の京大医・理研・医薬基盤研は部局レベルで、その他の協力・連携機関は研究グループレベルで正式な合意が得られている。

1. データベース：京大病院、NBDC、医薬基盤研、弘前大医(COIコホート)
2. ゲノム解析・オミクス解析：東大医科研
3. バイオバンク：東北大・東北メディカルメガバンク機構、クリニカルバイオバンク学会
4. スーパーコンピュータ・SPRING8/SACLA/CryoEM：理研
5. AI研究開発協力：理研、産総研、東大新領域、東工大、奈良先端大、山口大、横浜市大
6. 産学連携・国際連携：筑波大、米国スタンフォード大学、ライフインテリジェンスコンソーシアム(LINC)、製薬協

⑤ 所要経費

総経費：189億円(10年間)。具体的な内訳は以下の通りである。

- ・施設・設備費 10億円 初年度のみ
- ・サーバー購入・利用料(計算、ストレージ) 16億円(初年度8億円、5年次8億円)
- ・人件費 3億円×10年
- ・研究開発費 10億円×10年(10領域の研究テーマそれぞれで1億円/年)
- ・運営費 0.8億円×10年
- ・データベース構築・ライセンス費用 2億円×10年
- ・国内外連携・ネットワーク構築 0.5億円×10年

なお、米国では当該計画より狭い範囲(創薬標的探索から前臨床まで)の創薬AIを開発するITベンチャーに100億円の投資が行われており、当該予算計画は妥当であると考えられる。

⑥ 年次計画

【初期整備期(1年次～2年次)】 京都大学・理研・医薬基盤研に拠点事務局と10研究領域のユニットを設置し、施設、組織整備を行う。各研究ユニットには、教授または准教授相当1名、助教相当1名の教員を配置する。また、拠点事務局には、拠点事務業務担当6名、他機関・PJ連携2名、データベース連携(基礎系・医療系・産業系)2名、産業連携2名、アカデミア創薬連携1名、国際連携1名のコーディネーター、事務員を配置する。

【開発第1期(2年次～4年次)】 LINCコンソーシアムで開発済みの30種のAIプロトタイプをチューンナップし、第1期完成版AIにする。さらに、20種の新規AIのプロトタイプ開発を行う。30種のAIプロトタイプの完成版開発をモチーフにして、外部組織との連携を試行するとともに、連携ネットワーク体制を構築する。

【開発第2期(5年次～7年次)】 第1期に開発した20種のAIプロトタイプをチューンナップし、第2期完成版AIにする。さらに、20種の新規AIのプロトタイプ開発を行う。第1期に構築した連携ネットワークの運用方針の策定、運用を開始する。

【開発第3期(8年次～10年次)】 第2期に開発した20種のAIプロトタイプをチューンナップし、第3期完成版AIにする。構築済みのAI創薬基盤の国内外の企業、アカデミアの活用を開始する。拠点の自立化に向けた方針を検討する。

【自立運営(11年次～)】 構築したAI基盤を有償で産業界に提供し、事務局の自立的運営を行う。研究開発については企業とのマッチングファンド、外部資金で予算に応じた規模の研究開発を進める。ユニットの教員は、ライフサイエンスにおけるAI・データサイエンスを牽引するリーダーとして、京都大学内当該拠点のみならず、他大学・研究機関への配置を適宜行う。

⑦ 社会的価値

当該計画で開発するAI・データ駆動型創薬・医療基盤を国内外の研究者が活用することで、医薬品開発のスピードアップや新薬の創出が実現されることにより、結果として新薬を求める患者全体への貢献が期待できる。また、従来法では発見できなかった医薬品候補の発見により、難治性疾患の創薬に繋がることも期待できる。このように、SDGsに掲げる「3. すべての人に健康と福祉を」提供することに貢献する。また、AI・データ駆動型創薬・医療基盤の活用は、医薬品開発の効率化につながることから、開発コストの劇的削減とそれによる医療費削減が期待され、超少子高齢化に直面する我が国の社会保障問題解消の一助につながる。

さらに、AI、ビッグデータ、IoTは第4次産業革命のコア技術と言われ、創薬・医療分野に限らずあらゆる分野に変革をもたらそうとしている。当該計画は創薬・医療分野におけるAI・データサイエンス拠点を構築することで、我が国の生命科学分野の国際競争力の維持とそれによる豊かな国民生活への波及を目指すものである。また、SDGsに掲げる「9. 産業と技術革新の基盤をつくる」ことの実践そのものであり、国際社会全体に貢献する。

⑧ 本計画に関する連絡先

奥野 恭史(京都大学大学院医学研究科人間健康科学系専攻ビッグデータ医科学分野)