

AI健康・医薬研究センターの設立について

ArCHER : Artificial Intelligence Center for Health and Biomedical Research

医薬基盤・健康・栄養研究所
水口賢司

基盤研で取組んでいるAI関連活動の状況

ライフサイエンスに関するAIの国家事業

AIホスピタルシステム事業
(SIP)
管理法人：医薬基盤研究所

AI創薬ターゲット探索事業
(PRISM)
研究代表機関：医薬基盤研究所
事務局：医薬基盤研究所



医薬基盤・健康・栄養研究所

ライフサイエンスに関するAIの戦略会議

人工知能技術推進会議
(内閣府)
構成員：米田理事長

保健医療分野
AI開発加速コンソーシアム
構成員：米田理事長

ライフサイエンスに関する産官学AIコンソーシアム



AI創薬コンソーシアム
(LINC)
副代表者：水口賢司 (基盤研)
事務局：医薬基盤研究所

<課題>

- 基盤研で多くのAI関連活動に取り組んでいるが、それぞれが分散し統合的活動になっていない。
- AI事業の成果を実装化する受け皿がない
- AIに関するナレッジシェア体制が弱い

<課題解決に向けた対応策>

- AI機能統合を目的にAI健康・医薬研究センターを設置

健栄研で新たに取り組むAI栄養研究の概要

疫学データのビッグデータ解析

国民健康・栄養調査の革新
(70年以上続く世界で最も長く続く大規模疫学調査)



地域コホート研究との連携
(国民健康・栄養調査とのデータ統合・集積によるメガデータ解析の実現)



AIヘルスサイエンティストの育成



AI栄養研究の核となる

- AIによる栄養学の革新を通じて、AI技術をもった次世代の栄養研究者の育成を図る
- 国際的なAI研究リーダー育成

健康寿命延伸の新しい指針の提示

疾病予防から老化（フレイル）予防への
パラダイムシフト

- ⇒ 新しい健康長寿マーカーの確立
- ⇒ プレジジョンニュートリション

新しい健康長寿の指針に基づき

- 栄養士ネットワークの活用
(累計100万人)
- ヘルス産業との連携による産業創出
健康長寿指針の国民への啓発

社会実装（健康寿命の延伸）

医薬基盤・健康・栄養研究所のAI機能の統合化

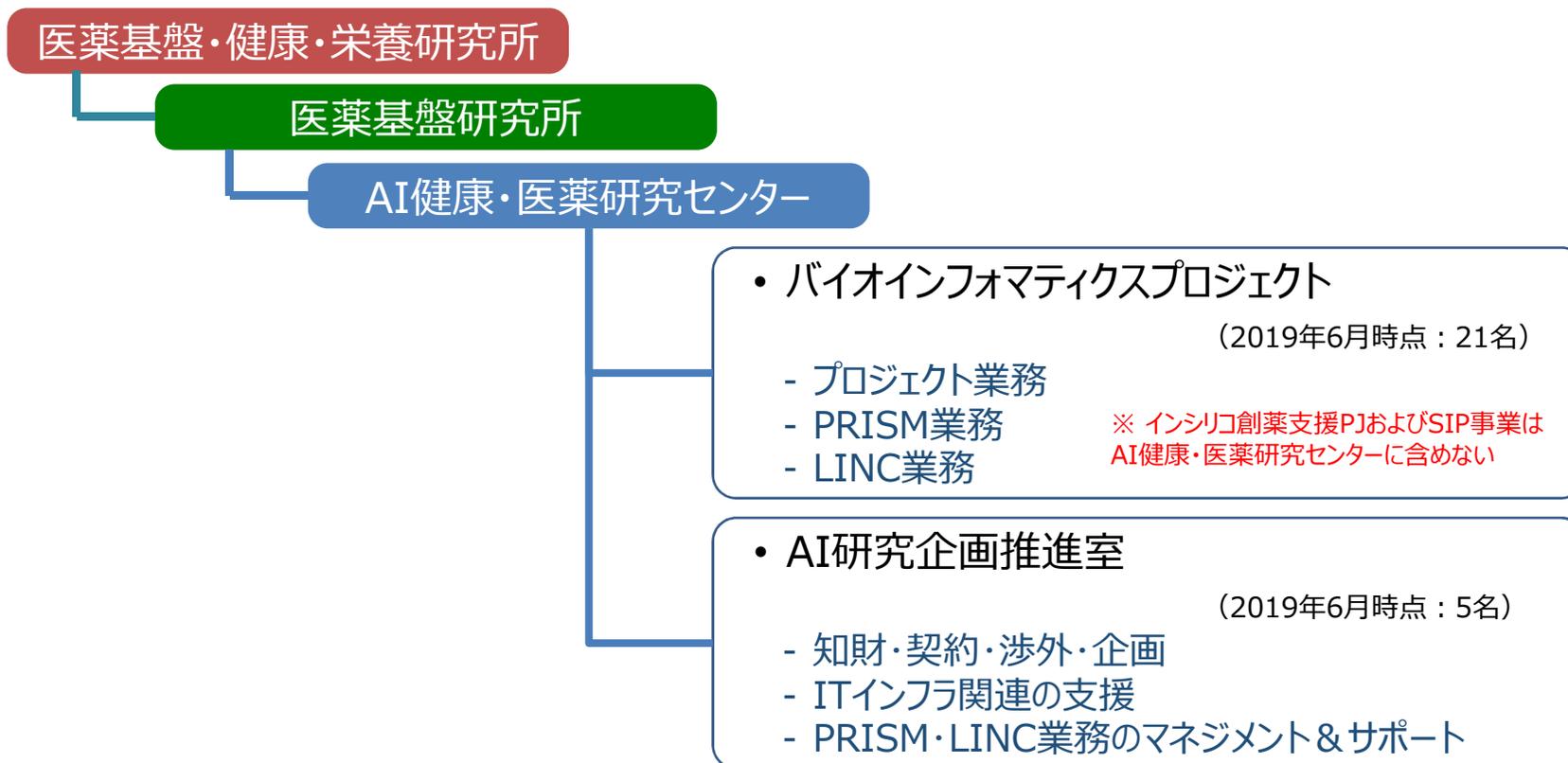


- ① 基盤研のAI関連プロジェクト
- ② AI関連の国家事業 (SIP, PRISM)
- ③ 産官学AIコンソーシアム (LINC)
- ④ 健栄研のAI栄養 (開始予定)
- ⑤ 知財・契約等のインキュベーション機能

AI健康・医薬研究センター

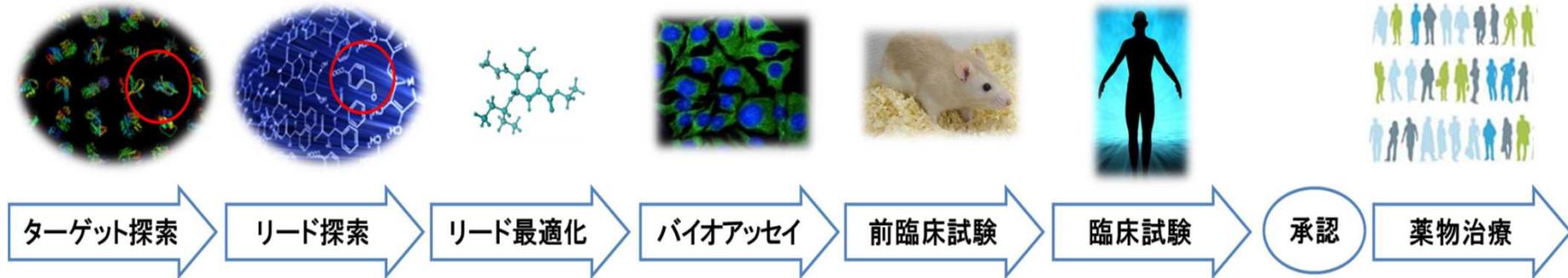
AI健康・医薬研究センターの組織（2019年度）

日本語名称 : AI健康・医薬研究センター
英語名称 : Artificial Intelligence Center for Health and Biomedical Research
略称 : ArCHER (アーチャー)



進行中のプロジェクト

創薬プロセス



創薬ターゲットの枯渇

- 創薬標的探索のためのAI開発
- 創薬ターゲット候補の評価と優先順位付けのためのデータベース TargetMine

臨床試験中の新薬候補化合物のドロップアウト

AMED 創薬支援インフォマティクス構築
薬物動態・毒性予測の統合プラットフォーム

ターゲット特異的な化合物探索

選択性の高い化合物のデザイン法の開発

バイオ医薬品による医療費の高騰

次世代の低分子医薬品創成プラットフォームの構築

予防、その他

腸内細菌叢と生活習慣データ等との関連解析および解析プラットフォームの開発

生活習慣と腸内細菌叢の統合解析プラットフォーム

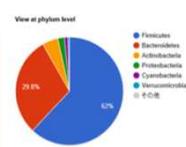
シナジー研究（腸内細菌叢解析）

-身体活動研究部、ワクチンマテリアルプロジェクトと連携

マイクロバイーム

FASTQ file

データ処理
自動化



細菌叢データ



生活習慣など関連データ

免疫指標
生活習慣
生理指標



用語や
概念の統一

可視化



相関解析



統合解析プラットフォーム
MANTAを公開した

 **MANTA**
Microbiota And pheNotype correlaTion Analysis platform

<https://mizuguchilab.org/manta/>

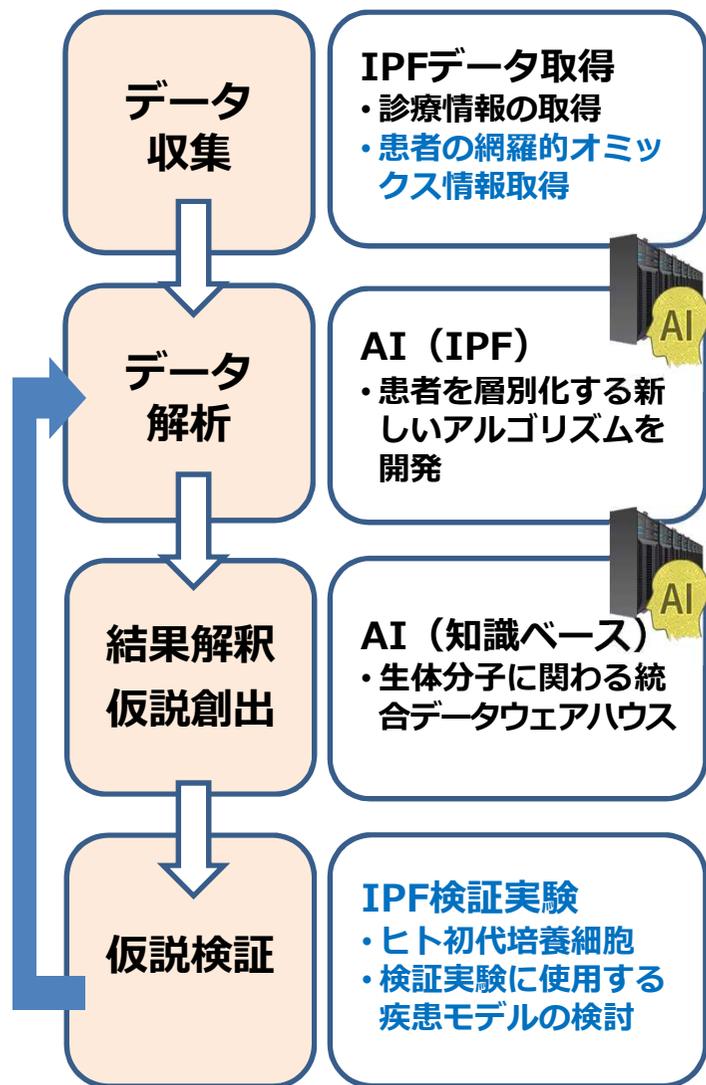
研究コミュニティのために、表現形と細菌叢を紐付けるデータ集積基盤を確立した。

創薬ターゲット探索

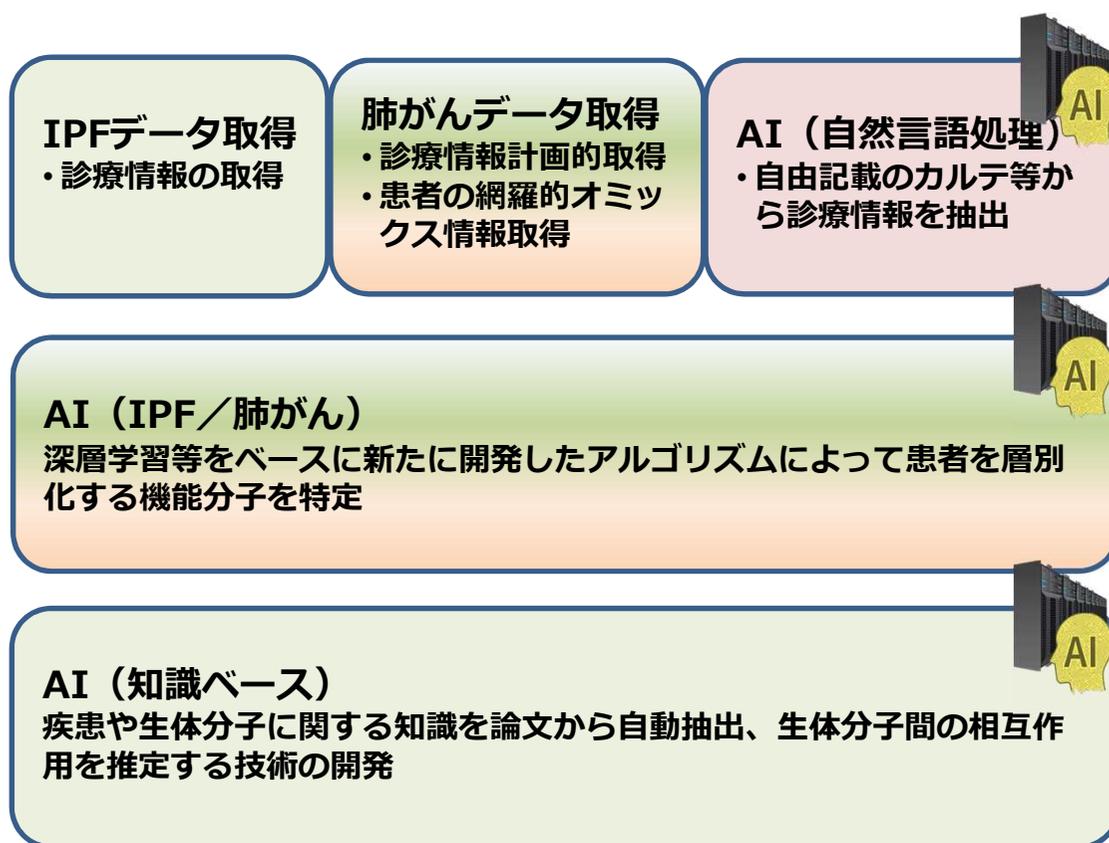
新薬創出を加速する人工知能の開発（PRISM）

元施策（厚労省）

青字：元施策のみで実施



R1年度 PRISM アドオン（厚労省・文科省）



文科省・厚労省・経産省の緊密な連携のもと、医薬健栄研を中心に13機関が一丸となって事業推進

平成30年度の成果

基礎固めに注力

- 日本初となる症例収集システム構築
 - 症例報告自動作成システム（CDCS）を実装して診療情報（カルテ、画像、検査値等）及び生体試料情報を収集
- 新規プロテオーム解析法確立
 - 蛋白質の同定数を高再現性で従来法より16%向上
- 新規AI解析プログラムプロトタイプ作成
 - 新しい解析法により診療情報とマルチオミックスデータを考慮して患者を層別化
- 統合データウェアハウス強化
 - 結果解釈のために、新規データベース統合により医薬健康研の統合データウェアハウス（TargetMine）を拡張

創薬支援インフォーマティクスシステム構築

～企業連携による大規模データベース及び高精度化予測モデル構築～



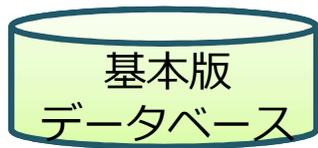
研究統括：医薬基盤健康栄養研究所 水口賢司



研究代表：理化学研究所 本間光貴

基本版： データベース・予測システム

- ◆ 基本版データベース
- ★化学構造式★各種公開データベース (ChEMBL, KEGG Drug, hERG centralなど)からのキュレーションデータ
- ★市販化合物を用いた新規取得データ



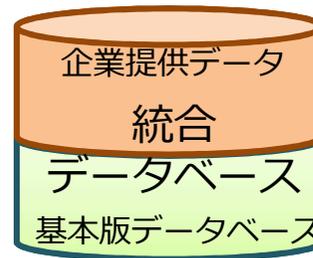
機械学習
深層学習
など

インシリコ予測
モデル

- ・薬物動態
- ・心毒性 (hERG阻害)

企業連携版： データベース・予測システム

- ◆ 企業提供データ (約24,300化合物)
- ★構造記述子★実創薬データ (溶解性・代謝安定性・血漿タンパク結合・hERG阻害など)
- ★企業提供化合物を用いた新規取得データ



機械学習
深層学習
など

高精度化インシリコ予測モデル

- ・薬物動態
- ・心毒性 (hERG阻害)



基本版： 公開用Webアプリ

- ◆ 拡張機能
- ★データベース検索
- ★血漿中濃度推移のグラフ表示機能
- ★ケミカルスペース表示機能
- ★解析ツール
- ★構築した予測モデルの統合

参画 企業

アステラス製薬
大塚製薬
小野薬品工業
第一三共
武田薬品工業
田辺三菱製薬
日本たばこ産業

創薬 ブースター

創薬支援ネットワークでの活用

産学官連携によるアカデミア・製薬企業での創薬基盤強化

公開版データベース

DruMAP

(Drug Metabolism and pharmacokinetics Analysis Platform)

URL: <https://drumap.nibiohn.go.jp/>

一部公開可能なデータについて、2019年3月30日に公開した。

The screenshot shows the DruMAP website homepage. At the top, there is a navigation bar with links for Home, Compound search, PK search, Prediction, and About. Below the navigation bar, the DruMAP logo and full name are displayed. A paragraph describes the platform's data sources and prediction models. A table lists the number of records for different categories of chemical data. At the bottom, there is a funding acknowledgment and a copyright notice.

	Number of records
All registered compounds	16,147
Freebase compounds	13,237
Freebase compounds with different connection	12,556

統合DBと連動した薬物動態予測モデル

統合DB : 薬物動態予測画面

AdmeWebDB Home Compound search PK search Prediction About Contact Help

Prediction

1. Draw a molecule or select a file.

Sketcher File



2. Select prediction parameters.

Absorption

Fraction unbound (F_u)

Distribution

- Fraction unbound in brain homogenate (f_{u,brain})
- Fraction unbound in human plasma (f_{u,p human})
- Fraction unbound in rat plasma (f_{u,p rat})

Metabolism

Hepatic intrinsic clearance (CL_{int}) in human liver microsome

Elimination

Renal excretion in human

Calculate

③予測

②予測モデルを選択

Webアプリ公開モデル

1. 代謝安定性 (CL_{int})

- 分類モデル
- 代謝的に不安定な化合物を予測

Esaki et al, *Mol. Inf.* (2019)

2. 血漿タンパク結合率 (f_{u,p})

- 分類・回帰モデル
- 市販予測ソフトより高い精度
- 血漿タンパク結合率の高い範囲の予測精度向上

Watanabe et al, *Mol. Pharm.* (2018)

3. 脳ホモジネート結合率 (f_{u,brain})

- 回帰モデル
- 様々な動物種のf_{u,brain}を予測

Esaki et al, *J. Chem. Inf. Model.* (2019)

4. 吸収率 (F_a)

- 回帰モデル
- 膜透過性・溶解性の予測値を用いて吸収率を予測

Esaki et al, *J. Chem. Inf. Model.* (2019)

5. 尿中未変化体排泄率 (f_e) 腎排泄 (CL_r)

- 分類 (f_e) ・ 分類+回帰モデル (CL_r)
- 予測f_{u,p}値を用いてCL_rの回帰予測精度を向上

Watanabe et al, *under review*

今後に向けて

➤ データ統合と整備

- 公知データの構造化、知識化
- データ共有、再利用を可能にする仕組み作り

➤ 人材育成

- アカデミア、企業、海外からの人材受入
- マッチングの場の提供

AI/インフォマティクス研究の概要

