

令和7年度運営評議会

AI健康・医薬研究センター

The logo for NIBN (National Institutes of Biomedical Innovation, Health and Nutrition) features the acronym 'NIBN' in a bold, black, sans-serif font. The letter 'I' is uniquely designed as a stylized orange flame. To the left of the text, a thick orange arc curves around the letters, resembling a protective shield or a partial circle.

NIBN

National
Institutes of
Biomedical Innovation, Health and
Nutrition

『AI健康・医薬研究センター』

▶ 背景・社会的意義等

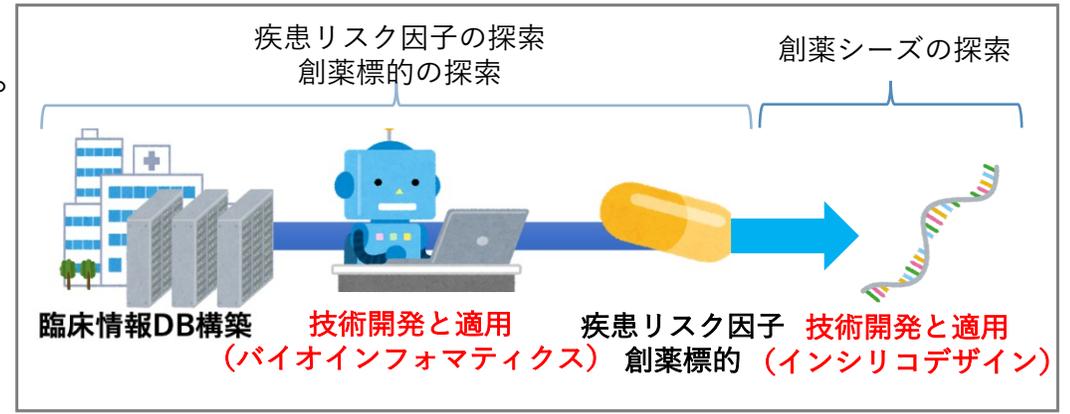
- 超高齢化社会となった日本において、健康維持・増進の実現を支える基盤が必要とされている。
- 医療情報の利活用により、AIの社会実装を介した個別化医療の実現が求められている。
- 研究開発に莫大なコスト（時間、費用、労力）がかかる創薬において、効率化と精度向上に資するインシリコ解析技術のニーズが高い。

▶ 目標・令和7年度実績・成果・課題

- 疾患やそのリスクの早期発見に資する予測モデルの開発
- RWD解析に向けて診療情報、オミックスデータの統合解析に資する解析手法・基盤を複数開発
- 創薬シーズ探索を支援する技術開発やデータ解析を実施
- TargetMineとSCARDA DBを継続的に更新、JMDとアジュバントデータベースを公開、新たにBIKINMINEを開発公開。
- 大規模・高精度化合物スクリーニング基盤を構築。
- 構造ベースのTCRエピトープ予測モデルを開発し精度向上。

▶ ポイント

- 診療情報、オミックスデータの統合解析について、独自解析技術を活用し共同研究を実施
- AI/MLを用いて疾病予防から創薬シーズ探索までデータ駆動的アプローチを拡充



『AI健康・医薬研究センター』のミッション

- 未病から医薬品開発まで統合的なAI解析を実現。
- 疾患関連データベースとAIを用いたデータ駆動的な創薬支援。
- データやAIモデル共有に基づく、産学官連携の推進。
- 情報科学と生物学・化学との異分野融合的な学術研究を推進。



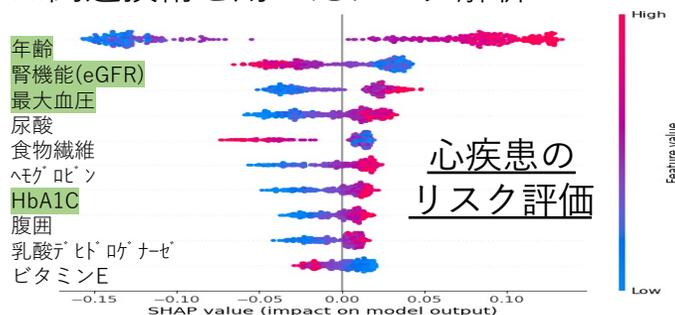
健康・栄養分野と創薬分野の乖離

腸内細菌叢と生活習慣データの統合解析

- ・ マイクロバイオームと表現型の統合データベースの構築

デジタルヘルスケア

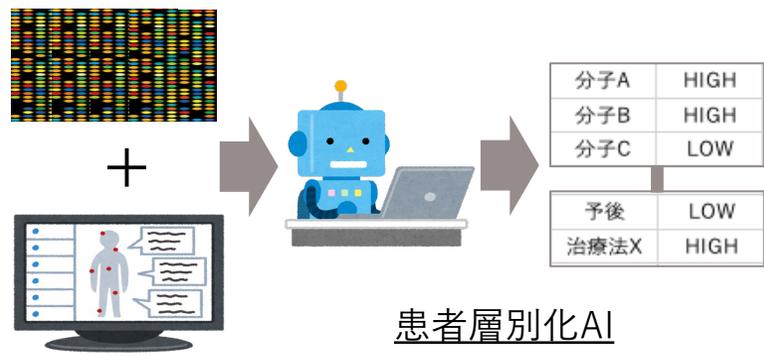
- ・ デジタル創薬/介入等に向けた健康・栄養・代謝分野のエビデンス集積
- ・ AI関連技術を用いたデータ解析



創薬標的の枯渇

創薬標的探索のためのAI開発

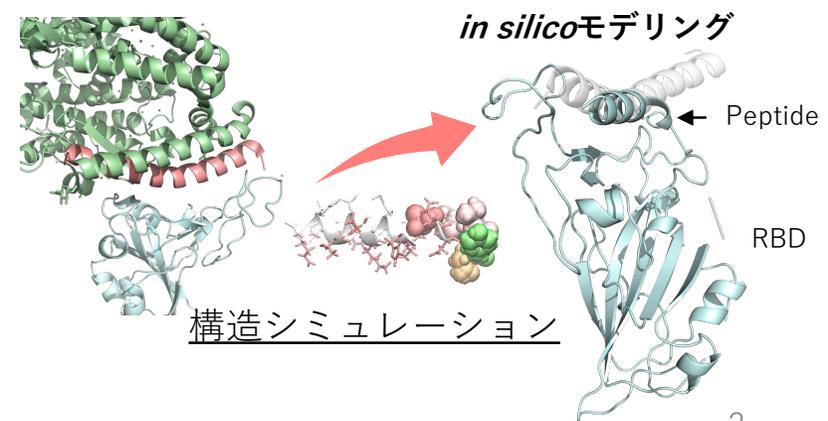
- ・ 疾患統合データベース/知識ベースの構築
- ・ データ駆動的な患者層別化に向けたAI開発
- ・ 生体分子の挙動に基づく発症機構推定
- ・ AI関連技術を用いた臨床情報の解析による創薬標的候補の探索



バイオ医薬品による医療費の高騰

次世代の医薬品創成プラットフォームの構築

- ・ AI技術を活用した構造ベース創薬基盤の開発と応用
- ・ 構造シミュレーションを活用した中・高分子医薬品デザイン



『AI健康・医薬研究センター』の研究プロジェクト（令和7年度）

- バイオインフォマティクスPJ：
 - AI技術活用による健康栄養分野の知識抽出と知識整理
 - 診療情報やオミックスデータなどを対象とした機械学習による知識抽出
- インシリコデザインPJ：
 - インフォマティクスと分子シミュレーション技術を活用した医薬品化合物の論理的設計

夏目 やよい
センター長

李 秀栄
副センター長



バイオインフォマティクスプロジェクト

PJリーダー：夏目やよい（併）

- 疾患・創薬データ統合
- 健康・栄養データ統合
- トランスオミックス解析
- バイオマーカー・創薬標的探索

インシリコデザインプロジェクト

PJリーダー：李秀栄（併）

- AI技術を活用して構造ベース創薬
- 構造シミュレーションの創薬応用
- データ駆動型創薬基盤の開発と応用



夏目やよい



李秀栄

『バイオインフォマティクスPJ』：成果のトピック

検査のための来院ではなく、日常生活に溶け込んだ健康モニタリングへ

共創の場：国立循環器病研究センターをはじめとした産学官連携

従来のアプローチ

目指すべき未来

症状が出てから病院へ来院し
検査を受ける反応型の医療

日常生活の中で自然に、無理なくリスク評価を行い
必要な時だけアラートを出す予防型の医療



健診データの活用

- ・冠動脈性心疾患のリスク予測
JMIR cardio 9.1 (2025): e68066.

鏡などでの日常チェック

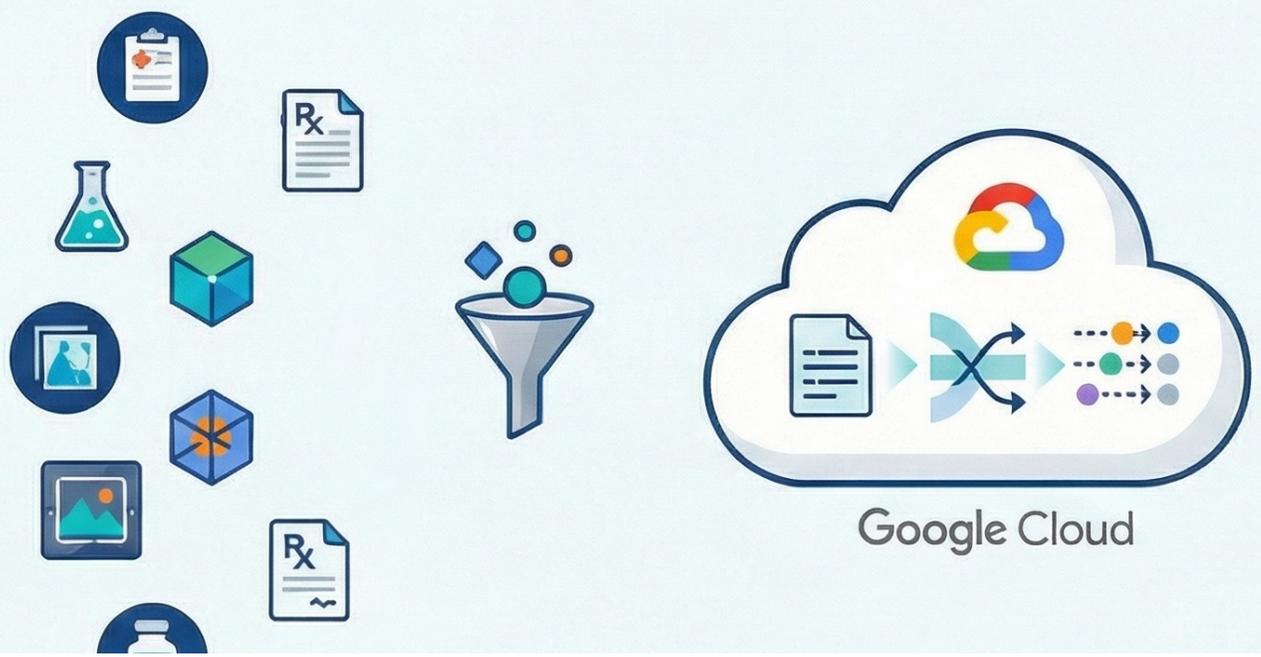
- ・糖尿病性足潰瘍の分類モデル
論文投稿中
- ・顔写真による疾患リスク予測
- ・非接触型バイタルサイン予測

動作の分析

- ・歩行パターンによる疾患リスク予測

『バイオインフォマティクスPJ』：成果のトピック

AI創薬プラットフォーム事業で収集されたRWDの解析に向けて



大規模な医療情報が
FHIR形式で蓄積

仮名加工されて
Google Cloud上で管理



閉鎖環境のPCで
解析を実施

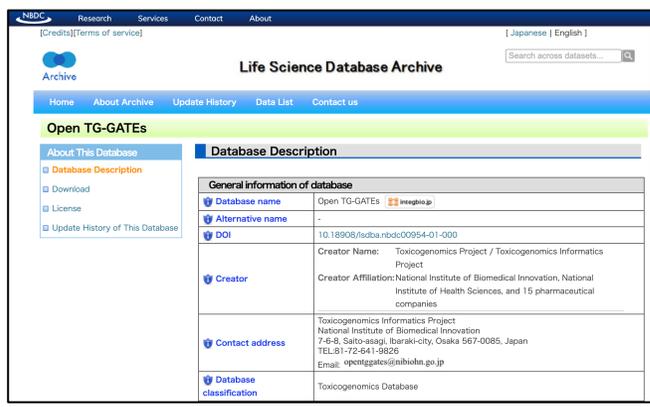
LLMでテキスト情報を
構造化

➡ 構造化データを用いた解析へ

『バイオインフォマティクスPJ』：成果のトピック

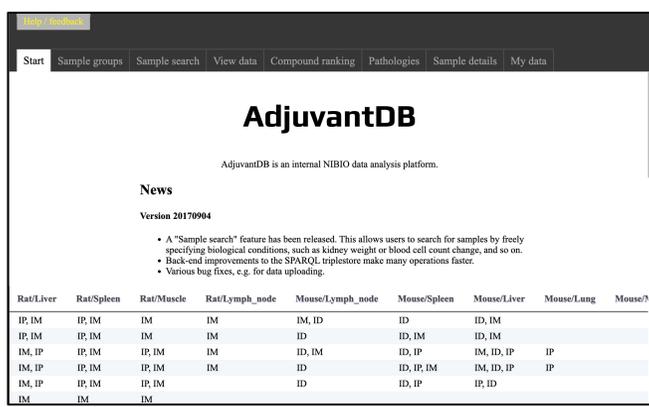
アジュバントの遺伝子発現プロファイルに関するデータベースを公開

トキシコゲノミクス
データベース

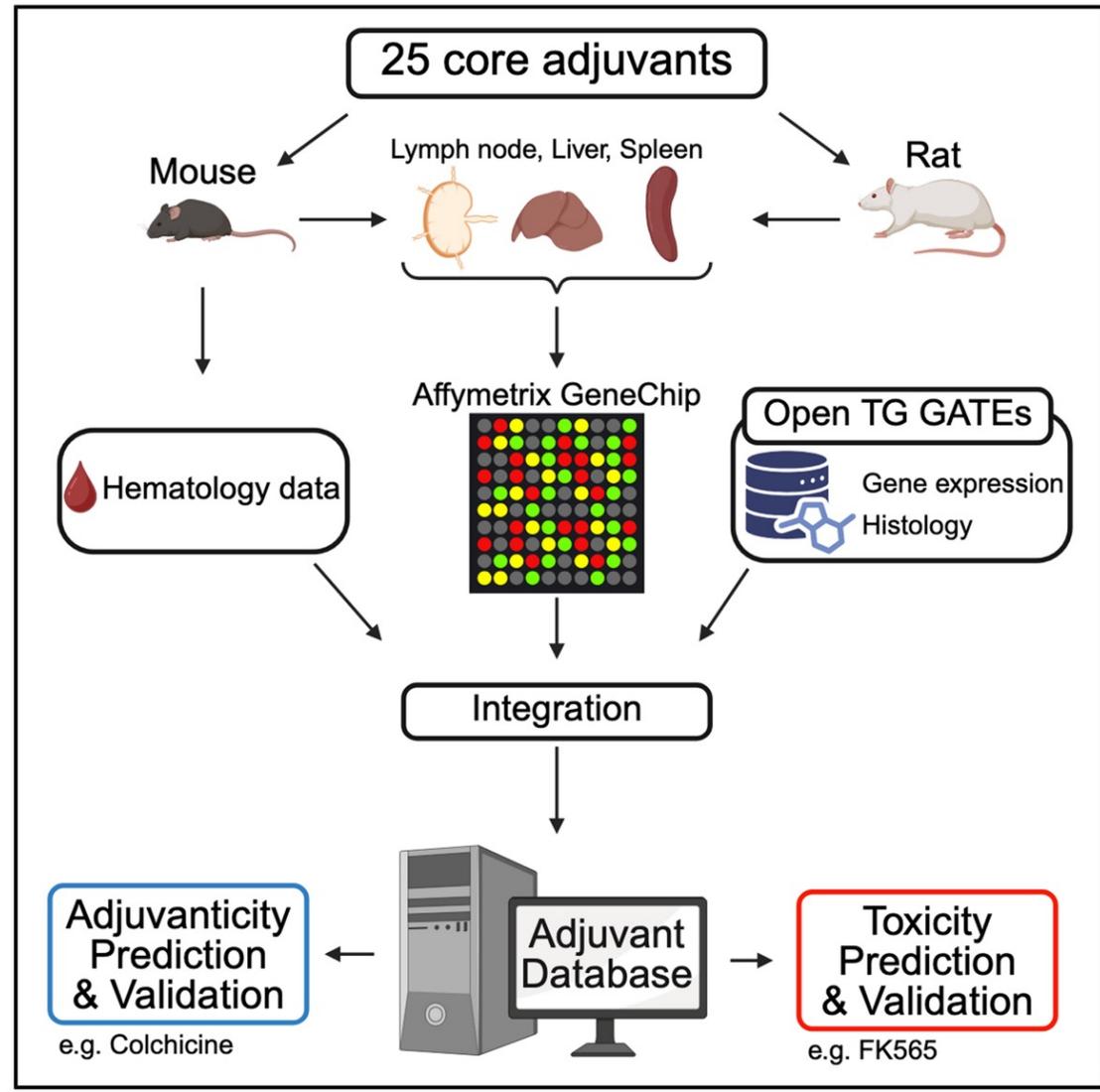


<https://dbarchive.biosciencedbc.jp/en/open-tggates/desc.html>

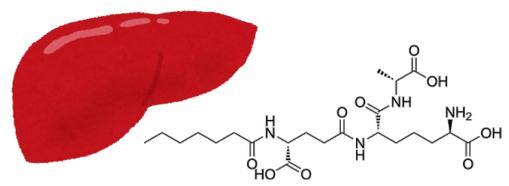
アジュバント
データベース



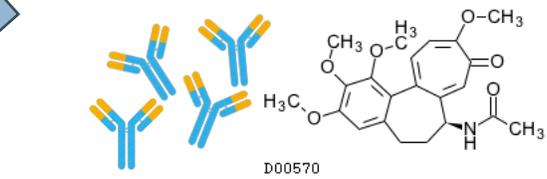
<https://toxygates.nibn.go.jp/adjuvant/>



肝毒性
予測モデル



アジュバント活性
予測モデル

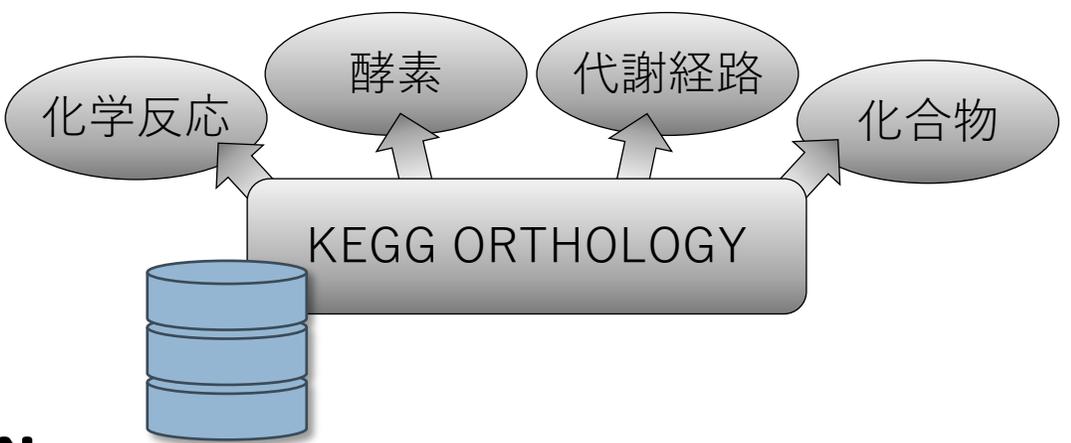
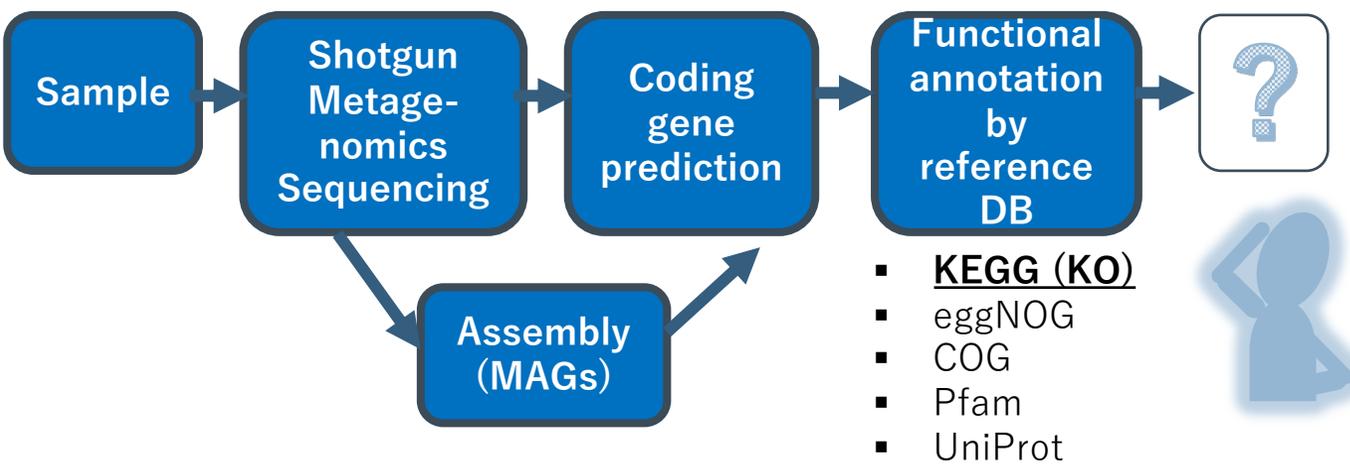


『インシリコデザインPJ』：成果のトピック

ショットガンメタゲノム機能解析支援データウェアハウスの開発

ヘルス・メディカル微生物研究センターとの所内連携を視野に

機能解析の流れ



BAIKINMINE Prototype

BAIKINMINE v.bbka a mine of integrated microbiome knowledge

Home Templates Lists QueryBuilder Data Sources API MyMine Contact Us | Log In

Search: e.g LDH, K00128 GO

Search
Search BAIKINMINE. Enter names, identifiers or keywords for microorganism, pathways, ontology terms, etc. (e.g. *Bifidobacterium pseudolongum*, LDH, K00128, glycolysis).
e.g. X, Y, Z
SEARCH

Analyze
Enter a list of identifiers.
Kegg Orthology
e.g. K00128, K00699, K00799, K01045, K01312, K02833, K03156, K03283, K03781, K04391, K04564, K04687, K05031, K05443, K06751.
advanced
ANALYZE

Welcome Back!
BAIKINMINE integrates many types of data for *Prokaryotes*. You can run flexible queries, export results and analyse lists of data.
TUTORIALS BY TARGETMINE

PATHWAY MODULE KEGG ORTHOLOGY COMPOUND ORGANISM

BAIKINMINE loads KEGG pathways, a collection of manually drawn pathway maps representing our knowledge of the molecular interaction, reaction and relation network.

Query for pathw

More queries

- エンリッチメント解析が可能
- 柔軟なクエリーに対応

<https://microbiome.nibn.go.jp/baikinmine/>

『インシリコデザインPJ』：成果のトピック

構造ベースでエピトープを予測する計算モデルの構築

データ依存の少ない論理的な予測を目指す

活性に関わる構造因子を抽出し指標化

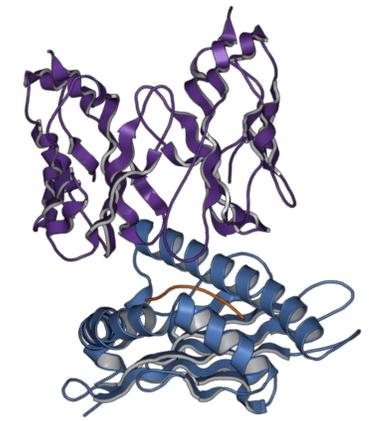
- データセット
NetMHCを用いて抽出した候補ペプチド
4種のHLAに対して合計954ペプチド
- 構造シミュレーションにより評価
結合様式の揺らぎと安定性を指標化
活性エピトープ候補を迅速に提示

CBI2025
Excellent Presentation Award



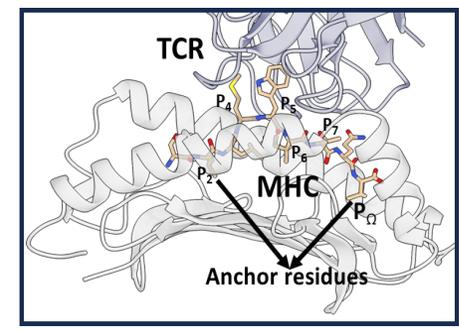
>MHC:A*02:01
GSHSMRYFFTSVSRPGRGE
...
>Epitope
VVPCEPPEV
>TCRa:TRAV3/TRAJ40
AQSVAQPEDQVNVAEGNPL
...
>TCRb:TRBV7-9/TRBJ2-3
DTGVSQNP RHK I T K R G Q N V
...

AIによる
構造予測



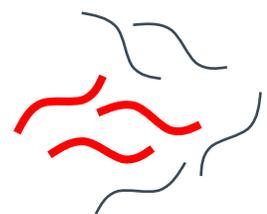
TCR-pMHC複合体

MD計算による
相互作用解析



結合様式と安定性

ELISpotデータ
比較検証



結合に関する構造因子の抽出
活性エピトープの予測

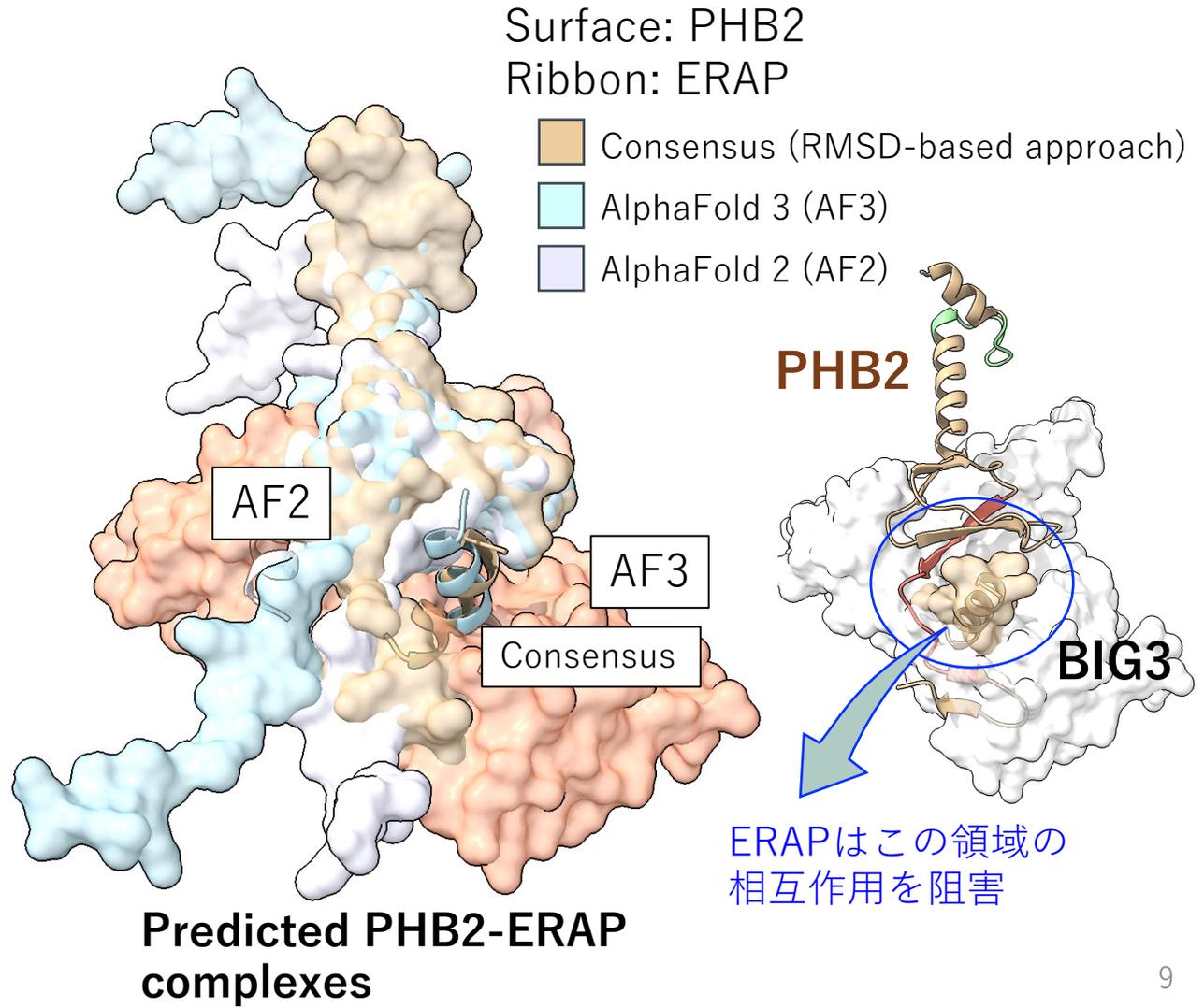
『インシリコデザインPJ』：成果のトピック

AIを用いた複数手法でERAP-PHB2の結合構造を予測

創薬デザイン研究センターとの所内連携

- 手法により予測構造が異なる
 - Consensus構造の抽出法を確立
 - 複数手法の予測構造を比較
 - 最も平均差分が小さいものを自動抽出
- AlphaFold2 vs AlphaFold3
 - Consensus構造に近いのはAF3
- 予測構造はERAPがBIG3との相互作用を阻害するように結合することを示唆

今後シミュレーションにより検証



『AI健康・医薬研究センター』における今後の取組

[難病に対する治療法や医薬品等の開発にかかる研究及び支援]

- 健康状態あるいは病態を反映する各種データを健康増進、医療、創薬に役立てるために有用な解析技術の開発を継続して実施する。
- 上記解析技術をリアルワールドデータに適用し、新たな知見を得る。

- ★AI創薬プラットフォーム事業における診療情報・オミックスデータ解析
- ★JST共創の場事業における健診データ解析

他

[創薬等支援]

- 低分子化合物、核酸、ペプチド、抗体といった幅広いモダリティーを対象に、創薬シーズ候補探索に資する解析技術の開発と実課題への適用を進める。

[デジタルリソースの構築と維持管理]

- 各種データベース、webアプリケーションの構築と維持管理を継続し、健康・医薬研究に重要なデータの更なる有効利用に向けて基盤を整える。