

# 10月26日 (火)

## Zoom Webinar

### <大会長講演>

座長：片倉 晋一（慶應義塾大学）

- C-01** 奥野 恭史（京都大学大学院医学研究科） ..... 1  
「COVID-19から創薬DXを考える」

### <プレナリー講演> 『ポストコロナ時代の医薬品研究開発～創薬力強化に向けて～』

座長：奥野 恭史（京都大学大学院医学研究科）

- P-01** 林 俊宏（厚生労働省 子ども家庭局保育課長（前医政局経済課長） .. 2  
「医薬品産業ビジョン2021～創薬力の強化に向けて～」
- P-02** 新留 徹広（日本製薬工業協会 産業政策委員会  
イノベーション推進部会長/エーザイ株式会社） ..... 3  
「製薬協における創薬イノベーション創出に向けた取組み」
- P-03** 石山 洸（株式会社エクサウィザーズ） ..... 4  
「デジタルネイティブ時代のイノベーション創出」

### <招待講演とパネルディスカッション> 『AIスタートアップからみた製薬業界』

座長：山田 泰永（NVIDIA）

- I-01** 三澤 大太郎（SyntheticGestalt株式会社） ..... 5  
「AI 創薬に立ちはだかる壁とその超え方」
- I-02** 結城 伸哉（株式会社 Elix） ..... 6  
「ElixにおけるAI創薬と最新動向」
- I-03** 羽間 康至（株式会社エクサウィザーズ） ..... 7  
「デジタルテクノロジーの内製化による新たな創薬のあり方の形成」

<シンポジウム>

**SP-01** AMED/BINDSインシリコユニットにおける創薬支援研究..... 8

モデレーター：広川 貴次（筑波大学）

講師：

寺田 透（東京大学）

「タンパク質の複合体構造・分子間相互作用・ダイナミクス・機能の予測と解析」

富井 健太郎（産業技術総合研究所 / 産総研・東工大 実社会ビッグデータ活用オープンイノベーションラボラトリ）

「タンパク質の高次構造情報を利用した創薬等研究加速に向けたバイオインフォマティクス研究」

本間 光貴（理化学研究所）

「構造インフォマティクスとFMO計算を融合したインシリコスクリーニング支援研究」

広川 貴次（筑波大学）

「分子モデリングおよびシミュレーションを活用したインシリコ創薬支援」

## COVID-19 から創薬 DX を考える Thinking about DX in drug development from COVID-19

奥野 恭史  
Yasushi Okuno

京都大学 大学院医学研究科  
Kyoto University

世界における新型コロナウイルス感染拡大は未だ終息せず、我が国においても予断を許さない状況が続いている。特に SARS, MARS が対岸の火事であった日本にとって、初めて経験するパンデミックの脅威に、未だに社会が混沌とし、経済、医療の両面のバランスをとることに苦勞している。

一方、パンデミックにおけるワクチン・医薬品の重要性をこれほどまでに強く思い知らされたのは、我々研究者、医療従事者に限らず国民全体にとって初めてのことであろう。また我々研究者に衝撃を与えたこととして、海外製薬企業、規制当局の対応スピードの速さである。COVID-19 が世界的に問題視されてから半年も経たないうちにレムデシビルが承認され、1 年以内にワクチンが市場にでるという迅速さは、これまでの医薬品開発の常識を圧倒的に逸脱したスピードである。一般に医薬品開発の常識は、開発期間 10 年以上、費用 1000 億円以上と言われているが、COVID-19 のこの事例は、これまでの医薬品開発の常識を見直す機会を与えている。

我が国の製薬業界に目を向けると、新型コロナウイルスにおける上市された薬剤、ワクチンはすべて欧米発であることから決して楽観視する状況にあるとは言えない。実際、内閣官房 健康・医療戦略推進本部では日本のプレゼンスの低さを問題視し、令和 3 年 6 月 1 日にワクチン開発・生産体制強化戦略（案）を発表し、9 つの具体的な課題を挙げ、その強化をうたっている。（参考 URL）

しかしながら、課題がクリアになってもそれを現場で実行できるだけのコストとマンパワーを確保できるかが我が国の現実問題である。海外のメガファーマと比べると日本の製薬企業は規模・資本力も少ない。また、少子高齢化が進む中、人材の確保は今後益々深刻化する。ポストコロナ社会を考える時でもある今、我々に最も強く求められるのは、このような状況下においても、世界と対等できる社会構造、産業構造、仕組みづくりである。

演者は、少人数かつ低コストを大前提として、今の産業生産力を維持する体制づくりを考えることが最も重要であると考え、その目的でデジタルトランスフォーメーション（DX）を推進することに注目している。本講演では、製薬業界を例に、デジタルトランスフォーメーションの必要性や展望についてお話ししたい。

参考 URL :

[https://www.kantei.go.jp/jp/singi/kenkouiryousuisin/suisin\\_dai34/gijisidai.html](https://www.kantei.go.jp/jp/singi/kenkouiryousuisin/suisin_dai34/gijisidai.html)

医薬品産業ビジョン2021～創薬力の強化に向けて～  
Japanese Policy Vision 2021 for the Pharmaceutical Industry  
-in order to promote drug developments in Japan-

林 俊宏

Toshihiro Hayashi

厚生労働省 子ども家庭局 保育課長  
(前 厚生労働省 医政局 経済課長)

Childcare section chief, Child and Family Policy Bureau (Former chief, Health Policy Bureau)  
Ministry of Health, Labour and Welfare

○2021年9月、厚生労働省は「医薬品産業ビジョン2021」(以下「ビジョン」という。)を策定した。2013年以来8年ぶりの改定となった。この間、ゲノム等の遺伝子技術やデータ利活用による創薬、後発医薬品の浸透、医薬品市場・サプライチェーンのグローバル化、薬価制度抜本改革やワクチン・治療薬への関心の高まりなど、創薬環境、供給環境、制度的・社会的背景が大きく変化している。これらを受けて、ビジョンでは、我が国の医薬品産業(製造販売事業者、卸売事業者その他の関係者)の重要性・意義の再確認と、産業と施策の方向性についての厚労省の考え方を示している。

○ビジョンでは、改めて、医薬品が国民の健康寿命の延伸をもたらし、国民を健康危機から守る重要な手段であることと併せ、医薬品産業が、消費活動、労働参加など経済活動も支え、担税力・雇用でも日本経済に貢献していることを確認。特に、知識・技術集約型産業である医薬品産業の発展には、科学技術力の向上とイノベーションの実現が不可欠であることも示している。

○そのうえで、「創薬先進国としての革新的創薬」「医薬品の品質確保・安定供給」の2点を実現すべきビジョンとして掲げ、そのためには、企業における投資に見合った適切な対価の回収の見込みが重要としている。

○ビジョンでは、総花的な産業政策ではなく、以下の3点に「経済安全保障」の視点を加えた産業政策を展開すべきとしている。

①革新的創薬；アカデミア・ベンチャーのシーズを積極的に導入しアンメット・メディカル・ニーズを充足

②後発医薬品；医療上の必要性が向上している実態を踏まえ、品質確保と安定供給を徹底

③医薬品流通；必要な時に必要な医薬品にアクセスできる環境のため、安定供給と健全な市場形成を実現

○講演では、これらのうち、特に、「①革新的創薬」に焦点を当てて、我が国を取り巻く現状を確認したうえで、ビジョンで示した課題と方向性、そしてフェーズごとの具体的な施策の方向性について概説する。

**製薬協における創薬イノベーション創出に向けた取組み**  
**Efforts to create “Drug Discovery Innovation”**  
**in Japan Pharmaceutical Manufacturers Association**

**新留 徹広**

Tetsuhiro Niidome

**日本製薬工業協会 産業政策委員会 イノベーション推進部会長**  
**エーザイ株式会社**

Pharmaceutical Industrial Policy Committee /Eisai Co., Ltd.

日本製薬工業協会（製薬協）は、研究開発志向型の製薬企業（73社）よりなる業界団体であり、革新的で有用性の高い医薬品の開発と製薬産業の健全な発展を通じて、日本および世界の人々の健康と医療の向上への貢献を目指しています。

新薬が患者さんのもとへ届くまでには、病気の発症や進行に関連する新規物質の発見から基礎研究、非臨床試験、臨床試験、承認審査など数多くの段階があり、9-16年を要するといわれています。そして、新薬に至る確率は約2万から3万分の1です。このように成功確率が低く、販売までに長い期間を要する新薬の開発を継続的に実現するためには、絶え間なくイノベーションを創出していく必要があります。

新型コロナウイルス感染症下での日常生活において、スマートフォンやコンピューター、AI（人工知能）などのデジタル化や技術革新に伴うデジタルトランスフォーメーション（DX）は急速に社会に広がり、我々の生活を一変させ、医療の分野でも、DXによりオンライン診療やオンライン服薬指導などが可能になりつつあります。我々製薬業界も、ビッグデータやデジタル技術を活用して、AIを活用した創薬研究の効率化、ゲノム情報等を活用した個別化医療の実現、デジタルセラピューティクスの開発等に取り組んでおります。

製薬協では、2016年に「製薬協 産業ビジョン2025」を策定し、創薬イノベーションを世界中の人々に届けるという将来像を描き、それを実現するための方向性を示してきました。また、本年5月にはCOVID-19のパンデミックなど昨今の急速な環境変化を受けて、「製薬協 産業ビジョン2025 追補版」を策定しました。「製薬協 産業ビジョン2025」の実現に向け、2019年には「製薬協 政策提言2019」を策定し、製薬業界として、これまでの個社ベースでの取組みを超えた積極的な協業を推進し、且つ政府やアカデミアと協力して、創薬イノベーションを継続的に創出するための方策を示しました。また、今年、DX等の環境変化を踏まえて「製薬協 政策提言2021」を策定しました。

当日は、「製薬協 政策提言2021」を中心に、「製薬協における創薬イノベーション創出に向けた取組み」についてご紹介したい。

[https://www.jpma.or.jp/policy/vision/lofurc0000001as7-att/policy\\_recommendations2021.pdf](https://www.jpma.or.jp/policy/vision/lofurc0000001as7-att/policy_recommendations2021.pdf)

## デジタルネイティブ時代のイノベーション創出 Creating Innovation in the Age of Digital Natives

石山 洸  
Ko Ishiyama

株式会社エクサウィザーズ  
ExaWizards Inc.

Big Tech(\*)を始めとする米中のトップテクノロジー企業(以下、デジタルネイティブ企業)は、デジタル技術を核に、従来の産業構造をトランスフォーメーションしてきた。それらの企業は、ユーザー向けサービスを通じて獲得したデータを有償サービスの個別化・価値向上に用いるというデジタルネイティブならではの戦略により、ビジネスモデルを強化し続け、レガシーな業界構造を一変させた。そのような戦略は、リクルート社やコマツ社等の日本企業でも取り入れられている。また、リクルート社の場合は、自社の既存事業領域である人材業界に創造的破壊を起こしうる米国ベンチャーIndeed を買収し、2021 年 8 月中旬時点で時価総額が上場時の 5 倍以上になるまでに成長しており、産業トランスフォーメーションのインパクトを自ら享受している。近年、グローバル IT 企業・スタートアップを中心としたデジタルネイティブ企業に世界中の巨大な資本が流れており、ビジネスがテクノロジーと資金力を掛け合わせた「パワーゲーム化」してきている。

日本企業は、他国と比較した ICT や人材への投資、内製エンジニア等の組織の基盤と能力の構築で周回遅れの状態となっている。また、外部環境変化において重要なファクターであるデジタルや AI を取り込んだ企業変革スピードも十分ではない。今後は、インターネット上のみではなく、モノやアナログの世界におけるデジタルトランスフォーメーションが進展していく中で、日本の強みを活かせる産業領域やドメイン知識が必要な領域にはまだチャンスがある。また、ライフサイエンスには、国ごとの規制と創薬科学等の高い参入障壁がある。一方で、デジタルネイティブ企業や巨大な資本を持つ企業による当該産業への進出が始まっており、今後、大きな産業構造の変化が待ち受けている可能性がある。

デジタルネイティブ企業は、徹底的にユーザーファーストを追求し、経営モデルを合理化している。日本発のグローバル企業も、次世代型企业へ進化していくためのイノベーションを創出していくことが重要である。そのためには、人材開発、組織運営方法、業務・価値創造プロセス、ビジネスモデルを含む経営のあり方自体をアップデートしていく必要がある。これからの時代におけるイノベーション創出の理論を紹介し、企業変革については Society 5.0 の実現に向けた、日本企業によるリーダーシップの発揮に繋げていきたい。

(\*)Google, Apple, Facebook, Amazon, Microsoft を指す

## AI 創薬に立ちはだかる壁とその超え方 How to overcome the barriers to AI drug discovery

三澤 大太郎  
Daitaro Misawa

SyntheticGestalt 株式会社  
SyntheticGestalt

本講演では、Lead Generation に機械学習を活用する際の課題について取り上げ、その対策について述べる。具体的には、評価時と利用時のモデルの振舞いが異なることにより、予測結果通りに実際のアッセイ結果が得られない問題について考察する。

機械学習は本質的に普遍性を持ち得ないゆえに理論的動作保証が難しく、せいぜいモデルの汎化性能を向上させることが実用上のプラクティスである。更に、汎化性能評価は評価設計に依存しており、ナイーブな方法では間違った意思決定を導く危険性がある。例えば、機械学習の標準的プロトコルを単純に用いた結果、実際以上に高いパフォーマンスを観測してしまい、デプロイすべきモデルを誤って選択することなどが挙げられる。

この問題を回避するためには、創薬という事業ドメインを考慮して評価手法をカスタマイズする必要がある。特に、機械学習ベースのスクリーニングにおける推論データは、各種化合物ライブラリなどで構成されることが多く、推論データの分布は学習データの分布とは一般に異なるため、テスト評価はリハーサルとなるように調整しなくてはならない。従って、重要な施策の一つは学習時と推論時のデータセットの素性を似せることである。しかし、実際のリソースの入手状況下では学習データは十分に豊かでないため、現実的には、テストで得られるモデル適用可能領域 **Applicable Area** に合わせて推論データを構成することになる。

モデル適応可能領域を見定め、かつ、リハーサルとして現実の一部環境を模すため、少なくとも下記 2 つの評価手法を導入することが望ましいと考えている。1 点目は、評価データを様々な商集合構成によって細かくセグメント化し、各ブロック上でパフォーマンス評価を行ってモデルがワークする部分集合の条件を見定めていく **Partitioned Evaluation** である。2 点目は、確率モデルが必ず内包している分散の影響を見積もるための簡易的手法であり、現実的状况と同様に過負荷な **Rare Positive** の設定を作り出す **Stressed Evaluation** である。

## Elix における AI 創薬と最新動向 AI Drug Discovery at Elix

結城 伸哉  
Shinya Yuki

株式会社 Elix  
Elix, Inc.

株式会社 Elix は「創薬を、再考する」をミッションとした AI 創薬スタートアップである。創薬における最大の課題は創薬の非効率さであり、10 年以上の期間と 1000 億円以上のコストがかかる。創薬の効率については Eroom's law と呼ばれる (Moore's law のスペルを逆にしたもの) 傾向があり、創薬コストは指数関数的に増大している。2010 年頃からはこの傾向に変化があり、横ばいになってきたとするデータがあるものの、依然として膨大なコストがかかっている。

これを解決する有望な手段の一つとして AI 創薬が注目を集めている。AI 業界全体を見渡しても 2020 年の AI への民間投資額が最も大きかった分野は AI 創薬であり、自動運転などよりも大きくなっている。また、化学分野での AI 関連論文数も急速に伸びており、大きな注目を集めるとともにアルゴリズムも発展してきている。

Elix では最先端技術を盛り込んだ独自の AI 創薬プラットフォームを開発している。プラットフォームの重要なモジュールである Elix Predict、Elix Create、Elix Synthesize を中心に最新の自社研究成果を交えつつ紹介する。

Elix Predict は活性や物性の予測を行うモジュールであり、従来の機械学習から最新のグラフベースのモデルまで揃えている。適用事例として、アンドロゲン受容体に対して活性のある化合物の予測を行った研究を紹介する。Elix Create は構造発生を行うモジュールであり、所望の物性を持つ化合物の生成を可能とする。フラグメントベースのモデルからグラフベースのものまで独自アルゴリズムのモデルを揃えており、こちらも自社研究を交えて紹介する。Elix Synthesize は逆合成解析を行うモジュールであり、独自に実装したモデルを保有している。また、逆合成解析をより快適に行うためのライブラリのオープンソース化を予定している。

AI を扱う上で、データも非常に重要な要素である。より少ないデータでの学習を可能にする self-supervised learning の研究や、複数企業のデータのプライバシーを守った状態で学習を行う federated learning の紹介も行う。Federated learning についてはフレームワークのオープンソース化を予定している。



## デジタルテクノロジーの内製化による新たな創薬のあり方の形成 Shaping a new way of drug discovery through the internalization of digital technology

羽間 康至  
Koji Hazama

株式会社エクサウィザーズ  
ExaWizards Inc.

AI を含むデータ解析技術とそのアプリケーションが急速に普及し、進化し続けている。様々なユースケースにおけるテクノロジー活用による実績の蓄積に伴って、海外では、サイエンティストと AI エンジニアを双方抱え、ドメイン知識を深く理解した上で AI やソフトウェア・プラットフォームを開発・提供でき、更には自社で実験や創薬を行うこともできる次世代型バイオテックベンチャーが台頭している。それらの企業は、数百億円規模の資金調達を経て積極的な大規模投資やメガファーマとのパートナーリングを推進するなど、「AI 創薬業界」はパワーゲームの様相を呈している。他方、グローバルメガファーマを中心とした先端を走る企業は、それらの活動を成果へと結びつけるための業務フローへの組み込みを着実に推進している。

国内においても、単なる試行実験ではなく、テクノロジーを用いた新たな業務フローやビジネスのあり方を形成・刷新していくという本来の「AI 創薬」や「創薬の DX」を実現していくため、製薬業界のトレンドや、DX や AI の企業にとっての戦略的な位置付けに加えて、ExaWizards のこれまでの経験・知見を掛け合わせ、中長期目線で成果を創出するための鍵となる考え方をまとめる。また、US を中心とした巨大な産業エコシステムとは構造が異なる国内におけるハードルとクリアの方向性について、AI ベンチャー等の Supply 側の視点に限らず、製薬企業等の Demand 側における視点も踏まえて整理する。

このような環境の中、ExaWizards は、クライアントチームと一定期間伴走しながら、ビジネスサイドも含めた成果志向の問題解決を進めていくスタイルでサービスを展開している。これまで、幅広い産業における企業と共に、横断的な機能領域における AI や ML Ops、ソフトウェア開発、業務フローのデザインやデジタル戦略の策定、人材育成までワンストップで支援することで、企業変革と中長期目線のケイパビリティ内製化を推進している。ライフサイエンス領域におけるテーマとしては、低分子創薬における活性や ADME 等の予測や要因解析、構造生成などの AI 開発を始めとして、他の実験データ解析による予測モデルの構築や要因分析、細胞・組織画像の解析、動物実験の動画解析等、様々な領域をカバーしている。

**AMED/BINDS インシリコユニットにおける創薬支援研究**  
**Research activities for supporting drug discovery by *in-silico* unit of BINDS (AMED)**

**開催趣旨:**

平成29年4月よりAMEDのプロジェクト「創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業」が開始されました。本プロジェクトでは、医薬品等の実用化に向けて、構造解析、タンパク質生産、ケミカルシークエンス・リード探索、構造展開、ゲノミクス解析、インシリコスクリーニングなどの技術を有する最先端研究者の支援により、外部研究者の研究推進を強力にバックアップしています。本事業は、5つのユニットから構成されており、インシリコユニットは、その一つとして、計算科学や情報科学の最新の技術を駆使して、分子・細胞レベルから創薬・医療・生命科学等の重要課題に取り組む研究の支援と高度化を行っています。

本セッションでは、BINDSプロジェクトの最終年度として、9課題の中から、4課題について、課題代表者より、これまでのインシリコユニットの支援・高度化研究の成果を発表していただきます。

**モデレーター: 広川 貴次 Takatsugu Hirokawa**  
筑波大学医学医療系 生命医科学域

**1. タンパク質の複合体構造・分子間相互作用・ダイナミクス・機能の予測と解析****寺田 透**

Tohru Terada, Yuichi Yokoyama, Yoshitaka Moriwaki and Kentaro Shimizu  
東京大学大学院農学生命科学研究科 Graduate School of Agricultural and Life Sciences, The University of Tokyo

**2. タンパク質の高次構造情報を利用した創薬等研究加速に向けたバイオインフォマティクス研究****富井 健太郎<sup>1,2</sup> Kentaro Tomii**

1. 産業技術総合研究所 人工知能研究センター Artificial Intelligence Research Center, AIST
2. 産総研・東工大 実社会ビッグデータ活用オープンイノベーションラボラトリ RWBC-OIL, AIST-Tokyo Tech

**3. 構造インフォマティクスとFMO計算を融合したインシリコスクリーニング支援研究****本間 光貴 Teruki Honma**

理化学研究所 生命機能科学研究センター RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research

**4. 分子モデリングおよびシミュレーションを活用したインシリコ創薬支援****広川 貴次 Takatsugu Hirokawa**

筑波大学医学医療系 生命医科学域 Division of Biomedical Science, University of Tsukuba

# 「知って、使って、進むあなたの研究」

まずは、相談。👉 binds.jp にアクセス！

The image shows a screenshot of the BINDS website with several callouts and a form overlay. The callouts are:

- 「まずはコンサルティングから！」 (Start with consulting!)
- 「インシリコユニットを選択！」 (Select In Silico Unit!)
- 「様々なインシリコ技術があなたの研究を支援いたします！」 (Various in silico technologies support your research!)

The form overlay is titled 「創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム」 (Basis for Supporting Innovative Drug Discovery and Life Science Research (BINDS)) and 「ワンストップコンサルティング・支援窓口」 (One-stop consulting and support window). It includes a section for 「支援コンサルティング申請」 (Support consulting application) with a text box explaining the process and a list of support items. The form fields include:

- お名前: (Name)
- ご所属: (Affiliation) - Dropdown menu with options like 構造解析領域, タンパク質生産領域, etc.
- 職位・肩書: (Position/Title)
- 電話番号: (Phone number)
- メールアドレス: (Email address) - Includes a confirmation field.
- 支援を希望する主なユニット: (Main support unit) - Dropdown menu with options like インシリコユニット, プラットフォーム機能最適化ユニット, etc.
- 支援項目: (Support items) - Grid of checkboxes for various in silico technologies.
- 希望する担当者: (Desired staff) - Dropdown menu.
- コンサルティング課題名: (Consulting issue name)
- 関連AMED事業: (Related AMED project) - Dropdown menu.
- 過去の支援案件の発展の場合は、以前の課題番号を入力してください: (If the project is an extension of a previous one, enter the number).
- コンサルティング課題内容: (Consulting issue content)

- BINDS は事業に参加する研究者が「外部研究者の皆様の研究が進むようにお手伝いする」事業です。
- 外部研究者は、原則として無償で支援を受けることができます。
- まずは、ワンストップ窓口からコンサルティングの申請を行ってください。申し込みは、non-confidential 情報で行っていただけます。コンサルティング開始以降は、ご相談内容、研究内容はご希望に応じて秘匿されます。
- BINDS の支援を受けられた成果は、原則として公開をお願いします。成果公開の時期についてはご相談ください。