

創農薬AIの基盤構築

研究開発とSociety 5.0との橋渡しプログラム (BRIDGE)

令和6年度研究開発等計画 【応募様式】

令和6年6月
農林水産省

○実施する重点課題に○を記載（複数選択可）

業務プロセス転換・政策転換に向けた取組	SIP/FS等より抽出された取組	SIP成果の社会実装に向けた取組	スタートアップの事業創出に向けた取組	若手人材の育成に向けた取組	研究者や研究活動が不足解消の取組	国際標準戦略の促進に向けた取組
○					◎	

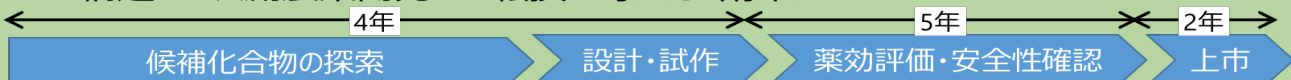
○関連するSIP課題に○を記載（主となるもの）

持続可能なフードチェーン	統合型ヘルスケア	包摂的コミュニティ	学び方・働き方	海洋安全保障	スマートエネルギー	サーキュラーエコノミー	防災ネットワーク	インフラマネジメント	モビリティプラットフォーム	人協調型ロボティクス	バーチャルエコノミー	先進的量子技術基盤	マテリアルの事業化・育成エコ
○													

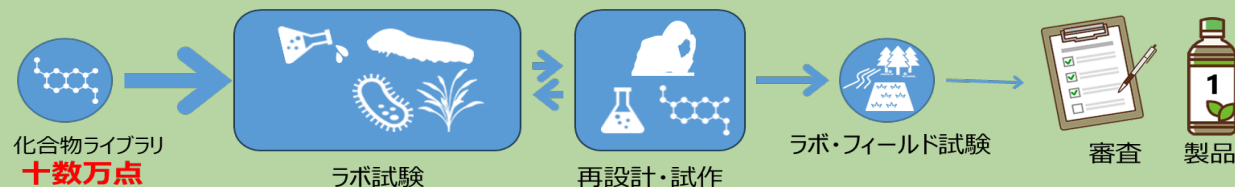
1. 「創農薬AIの基盤構築」の位置付け

- 近年、世界的に病害虫・雑草の薬剤抵抗性の発達等により、新規化学農薬の開発加速化が求められる状況にあるが、従来の「探索型開発」の手法では、新規農薬の開発（創農薬）の成功確率が大きく低下しており、農薬開発が年々困難化する状況。
- 米中では、近年、病害虫・雑草種毎に、殺虫・除草効果を示す生体タンパク質（標的タンパク質）を特定し、当該標的タンパク質と薬剤候補化合物との構造的な類似性から薬物活性等を予測する「構造ベース創農薬」及び「AI創農薬」の研究が加速化。この革新的なアプローチにより、新規農薬開発の加速化・効率化と国内関連産業の国際競争力を強化しようとする試みが進行中。
- 農薬開発のDX化に遅れのある我が国においても、農薬業界の「構造ベース創農薬への転換」を加速化させるため、サイバー空間上で農薬候補化合物の薬効・安全性の予測（≒新規農薬化合物の予測）を可能とする「創農薬AIシステム」が必須。
- 各省庁で別個に行われている農薬審査の登録データ、創薬分野で蓄積されている人への毒性データ、新規取得する安全性データをもとに、AIの教師データを提供する統合農薬データベース(統合農薬DB)を構築。
- 本施策で構築する統合農薬データベースと今後開発する創農薬AIシステムをもとに、農研機構に創農薬支援拠点を創設し、農薬企業と連携して農薬開発に貢献。創農薬AIシステムについては、AI開発企業との連携を模索し、情報を収集（交付金等で実施予定）。

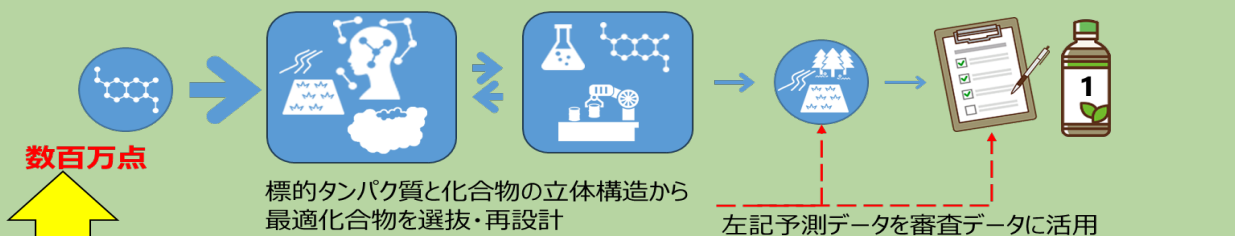
○ 構造ベース創農薬開発への転換の考え方・効果



従来の探索型開発（日本）



構造ベース創農薬開発（米・中国）

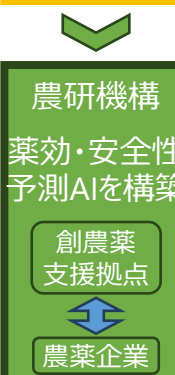


注：なお、構造ベース創農薬による新規農薬の上市は、世界でも未だ上市事例はなく、我が国においても大学等で得た基礎的研究成果（新規標的タンパク質の特定等）を活かしつつ、関連する研究開発を加速化すれば追い付ける可能性あり。

サイバー空間上で候補化合物の予測が可能となり、対象化合物が大幅に拡大

AIの活用

BRIDGE



OUTCOME

農薬分野のAI・ビッグデータの研究開発と社会実装

- 開発加速化、コストを大幅削減
- 選択性の高い農薬を開発して生物多様性・環境配慮
- 国際競争力向上

農薬審査のDX化



データベース

- 薬効・安全性評価・環境影響評価の高度化

2. 解決する社会課題・背景／現状

<社会課題>

- ① 近年、病虫害・雑草の**薬剤抵抗性の発達等**により、**新規化学農薬の開発加速化**が求められる状況。
- ② また、**生物多様性の保全等、環境影響を未然防止する観点から**、**標的とする害虫・雑草のみを対象とした化学農薬（選択的化学農薬）の開発ニーズ**が世界的に高まっている状況。

<背景／現状>

- ① 数十万点の低分子化合物ライブラリを対象として、**薬効や安全性に関する生物試験等を繰り返し、有望な候補化合物を探索する、いわゆる「探索型開発手法」では、新規農薬の創出確率が大きく低下。**
注：1995年には、1剤の開発期間が平均8.3年、200億円。2010年には開発期間が11.3年、開発費は約400億円。
- ② こうした課題に対応するため、**米国や中国では、大学と農薬メーカー等が連携し、ターゲットとなる病虫害・雑草種の標的タンパク質を特定し、当該標的タンパク質と薬剤候補化合物との構造的な類似性から薬効や安全性を予測する「構造ベース創農薬」及び「AI創農薬」の研究開発に力を注ぎつつある。**
- ③ 欧米・中国等の構造ベース創農薬のアプローチは未だ研究開発段階にあるため、**我が国においても大学等で得た基礎的研究成果（新規標的タンパク質等）を活かし、関連する研究開発を加速化できれば追い付くことが可能。**
- ④ しかしながら、現状では、**産学が連携した研究体制が脆弱であるほか、構造ベース創農薬の開発に必要なデータの蓄積・共有が遅れているため、関連する研究開発が国際的に劣後する状況。**
- ⑤ 一方、ヒト医薬品分野では、PRISMにおいて「AI創薬」の取組が進められ、**医薬品候補化合物の毒性データ等の取得が加速しつつあることから、これら医薬品分野におけるデータや知見を活用しつつ、農林水産省が有する農薬の薬効や安全性評価データ等を統合化できれば、国内農薬メーカーによる「構造ベース創農薬」に係る研究開発及び実用化を加速化できる可能性。**また、農水省、環境省、内閣府（食安委）による**農薬規制制度のデジタル化を後押しが可能。**

3. 研究開発等の内容・社会実装の目標

● 提案内容

国内農薬業界における「構造ベース創農薬への転換」を加速化させるため、サイバー空間上で農薬候補化合物の薬効・安全性を予測（≒新規農薬化合物の予測）する「創農薬AI」に用いる統合農薬データベースを構築する。

統合農薬データベースを用いた創農薬AIの開発は、農薬の開発コスト等を大幅に削減するとともに、生物多様性・環境により一層配慮した農薬開発を推進。

注：農水省・FAMIC等に登録された「農薬関係データ」は、個別農薬メーカーが過去に農薬登録をした際の提出データ等である。

BRIDGE施策

INPUT

農薬関係データ注
(メーカーによる登録データ)
既存農薬は安全性が確認されている

農林水産省、FAMIC、
環境省、食品安全委員会

ヒトへの毒性データ
創薬情報データベース

AMEDプロジェクト

海外データベース

環境毒性データ
ヒト以外で毒性をもつ化合物のデータを自動化生物試験により新規取得する



統合
農薬
データ
ベース

フォーマットを創薬情報データベースに揃えてメンテナンス性を確保する

教師データ

支援拠点
創農薬

技術共有

データ・資金

農薬企業

創農薬AI構築

安全性予測

薬効予測



薬剤抵抗性を打破する薬効を持ち、安全な新規農薬候補化合物を予測する新技術

加速化

OUTCOME

新規農薬開発



- 農薬開発の期間やコストを大幅削減
- 標的となる病害虫雑草のみに選択的な効果のある農薬を開発し、生物多様性・環境配慮
- 新規標的にも応用

農薬産業構造の刷新

- 創農薬支援拠点を中心とするオープン・クローズ戦略でAI・ビッグデータのR&Dと社会実装
- スタートアップが開発を担うエコシステムの構築

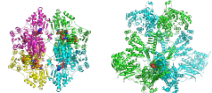
農薬審査 (農水省)



- 薬効・安全性評価の高度化
- 環境影響評価の高度化

構造ベース創農薬

農薬の標的タンパク質の立体構造データ



- 標的タンパク質を特異的に阻害する新規化合物を計算で予測
- 農薬ベンチャーと連携して開発



3. 研究開発等の内容・社会実装の目標

統合農薬データベースの構築

研究開発目標

- ✓ 各種既存データを統合し、さらに**自動化生物試験による新規毒性データ**を追加して創農薬AIの**教師データ**にするデータベースを整備する。統合農薬データベースを用いた新規農薬開発のため、創農薬支援拠点を開設し、農研機構と農薬企業間で連携する。

KPI	1年目：自動化装置の完成	2年目：薬効・安全性データ等のDB完成	3年目：環境毒性データ（2万）の拡充
BRL等	1年目：農薬企業3社参加	2年目：産学連携によるデータ取得開始	3年目：創農薬データベースの公開

研究開発の概要

注：「農薬企業による薬効・安全性データ」は、個別農薬メーカーが過去に農薬登録をした際に農林水産省等に提出したものの。

✓ 農薬の薬効・安全性データ収集

- 農薬企業による登録データ**
- 農林水産省**：有効成分の審査報告書 71件
 - ・ヒトおよび動物の健康への影響・残留・環境動態・標的外生物への影響・薬効及び薬害
- FAMIC**：農薬抄録 308件
 - ・毒性・動植物および土壌等における代謝分解並びに環境動態
- 環境省**：水質汚濁に係る農薬登録基準の設定に関する資料 493件
 - ・水質汚濁予測濃度
- 環境省**：水域の生活環境動植物の被害防止に係る農薬登録基準の設定に関する資料 603件
 - ・水産動植物への毒性・環境中予測濃度
- 内閣府食品安全委員会**：農薬評価書 1327件
 - ・代謝試験・作物残留試験・魚介類における推定残留濃度・許容一日摂取量・急性参照用量

✓ ヒト毒性データ収集

- AMEDプロジェクト**
- 「創薬支援インフォマティクスシステム構築」
- 「産学連携による次世代創薬AI開発」
- 創薬化合物情報データベースに集められた対人毒性データ(百万点)

✓ 海外データベース

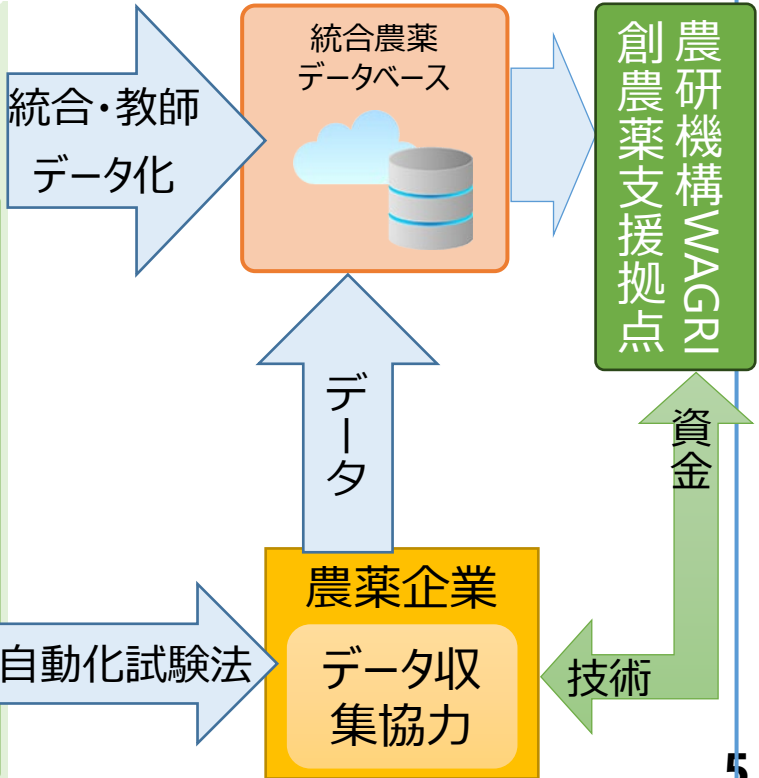
- ・ EPA ECOTOX (米国) 12,934件

✓ 環境毒性データ (新規取得)

自動化生物試験



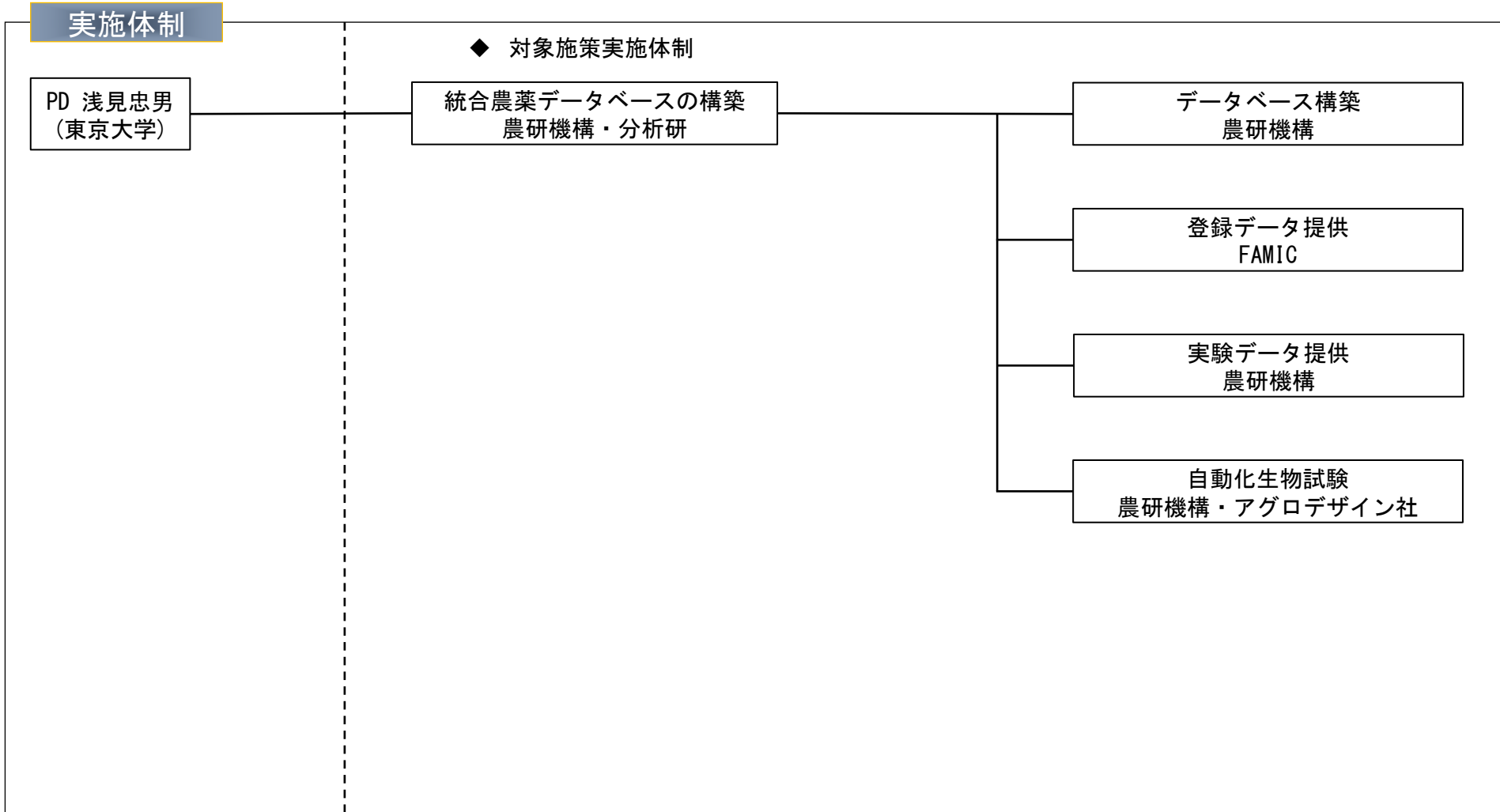
毒性データ	薬効データ
作物(薬害) 藻類	病原菌
ミジンコ ウキクサ	害虫
ハチ エビ 魚類	雑草



3. 研究開発等の内容・社会実装の目標

テーマ名	実施内容概要 到達目標 (KPI)	R6年度実施内容 到達目標 (KPI)	R7年度実施内容 到達目標 (KPI)	R8年度実施内容 到達目標 (KPI)
創農薬AIの基盤構築	<ul style="list-style-type: none"> 統合農薬データベースの構築 (農薬DB: 2800点 毒性DB: 100万点 生物試験DB: 2万点) 	<ul style="list-style-type: none"> 各省庁の農薬データ(2802件)の収集、整理(TRL 5) 医薬の創薬データ(100万化合物)を統合農薬データベースに移植(TRL 5) 自動化生物試験用AI・ロボット開発(TRL 5) 	<ul style="list-style-type: none"> 自動化生物試験を実施し、1万点のデータを取得する(TRL 6) 統合農薬データベース構築(TRL 6) 	<ul style="list-style-type: none"> 自動化生物試験を実施し、1万点のデータを取得する(TRL 7) 統合農薬データベースにデータ追加(TRL 7)
BRL	創農薬支援拠点の立ち上げ FAMIC・農薬審査業務における活用 (BRL 5)	創農薬支援拠点の創設準備 (BRL 3)	同左参画企業の募集・拡大 参画企業との構造ベース創農薬開発の開始 (BRL 4)	参画企業の拡大 (目標: 4社) 左記共同研究の拡大 (BRL 5)

4. 想定する実施体制及び実施者の役割分担



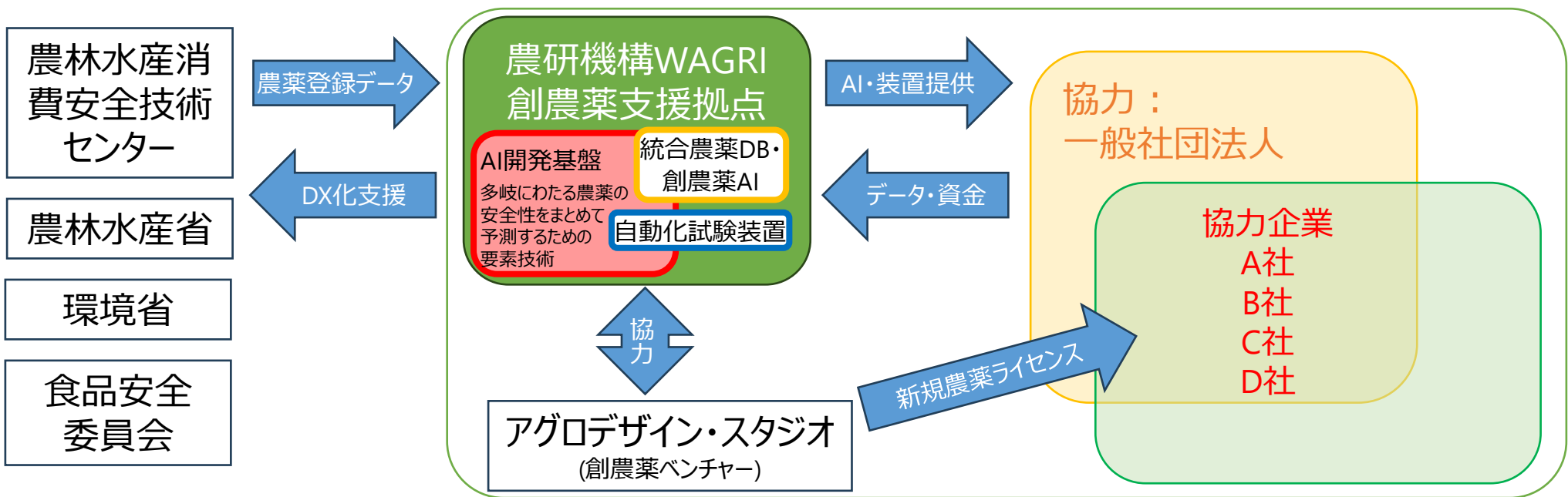
<協力団体・企業>

- 農林水産消費安全技術センター (FAMIC)
- 化学農薬メーカー：A社、B社、C社、D社
- 一般社団法人

5. BRIDGE終了後の出口戦略

●BRIDGE終了後の出口戦略

- これまで農薬メーカーとの共同研究等を通じ、「構造ベース創農薬法」の確立を推進してきた農研機構高度分析研究センターのネットワークを活かし、2026年度までに「創農薬支援拠点」を開設し、農薬メーカーや大学発スタートアップのAI創農薬開発を後押しする。
- 創農薬支援拠点では、農研機構が探索した害虫・雑草種毎の新規標的タンパク質の情報提供や、本プロジェクトで開発された「統合農薬データベース」により、農薬メーカーや関連するスタートアップによる候補化合物の探索を支援し、生物多様性・環境影響に配慮した新規化学農薬の開発・製造を推進する。
- 創農薬に特化したAI開発基盤技術を創農薬支援拠点で確保し、「統合農薬データベース」および「創農薬AI支援システム」ツールを参画企業のみを提供するオープン&クローズ戦略により参画企業の国際競争力を担保する。
- また、農薬の薬効・安全性評価データ等の統合創農薬データベースの共有により、農薬の登録・安全性審査等を担う農林水産省及び（独）農林水産消費技術センター（FAMIC）、環境省、内閣府食品安全委員会の関連業務を支援する。



6. 民間研究開発投資誘発効果及びマッチングファンド

【民間研究開発投資誘発効果、財政支出の効率化】

- ・食料増産ニーズに伴い、世界の農薬市場（2021年：600億ドル弱）は、年率4.7%のペースで拡大しており、国内農薬メーカーによる海外市場拡大が期待できる状況（国内の農薬製造量（原体ベース）のうち56%は海外輸出向け）。
- ・国内では、年間約4,000億円の農薬製剤が製造されており、新規農薬の研究開発投資比率は7～10%とされていることから、2030年には少なくとも半数以上がAI創農薬に置き換わると見通し、140～200億円の民間研究開発投資を見込む。

【民間からの貢献額（マッチングファンド）】

- ・本プロジェクトに参画・協力する農薬メーカー、スタートアップ企業等から約4,000万円/年を見込む。