資料６－１

厚生労働省における「自律型 AI 創薬実証事業」の事前評価について

（説明資料）

１．案件概要

〇事業の名称：自律型 AI 創薬実証事業

〇事業の実施府省：厚生労働省

※実施機関：国立研究開発法人日本医療研究開発機構（以下「AMED」という。）

〇事業の目的・必要性及び背景

【目的】

本事業では、これまでの創薬プロセスの延長線上にはない新たな創薬手法の確立を目指し、創薬プロセスにおける探索、非臨床試験及び治験薬製造といった治験に至るまでの過程を、デジタル（in silico）とフィジカル（ウェットを含めた実験・製造システム）の双方に加えて、ソフトウェア・ツール基盤として実験データ・メタデータの共通規格化、セキュリティが担保された TRE（Trusted Research Environment）等を兼ね備えた創薬自律ラボを用いることで、革新的な創薬ＡＸや創薬プロセス自動化技術の実証・社会実装を目指す。

【必要性】

我が国は基礎研究力が高く、医薬品産業の観点からも世界有数の新薬創出国の地位を維持している一方、近年、化合物探索や非臨床試験、治験薬製造といった創薬プロセスへのＡＩ導入（ＡＸ）の動きが諸外国で加速しており、創薬を取り巻く環境は著しく変化している。「創薬」については、日本成長戦略の中でも戦略 17 分野の一つとして選定されたことを踏まえ、創薬ＡＸを実証・実装するための国内の技術的基盤を構築するとともに、我が国の創薬環境の抜本的な強化を図り、創薬力の強化や国内外からの民間投資の促進が必要である。

【背景】

こうした背景を踏まえ、本予算では、創薬分野における革新的なＡＩ技術及び研究開発モデルの実現を目指し、国内の創薬スタートアップ等による海外最先端の創薬ＡＩベンチャースタジオ（ＡＩ創薬に必要な専門人材、技術、研究設備等を提供し、創薬スタートアップ等の研究開発を伴走支援する事業者）等を活用した創薬・製造プロセスラボでの開発の実施を支援する。これにより、国内の創薬スタートアップ等によるＡＩ創薬の取組を活性化するとともに、ＡＩ創薬におけるベストプラクティスの整理、国内での基盤整備に資する知見の収集等を行う。

【関連する政府方針】

日本成長戦略（令和８年７月 21 日閣議決定）

経済財政運営と改革の基本計画 2026（令和８年７月 21 日閣議決定）

統合イノベーション戦略 2026（令和８年７月 14 日閣議決定）
健康・医療戦略（第３期）（令和７年２月 18 日閣議決定）

〇事業の概要

①実施方法(直接実施か業務委託か等を記載)：補助
②想定している実施主体：創薬事業者（国内スタートアップ等）等
③実施期間：令和 9 年度から令和 13 年度までの５カ年の計画。
④予算額・総事業費等：総事業費　304. 5 億円（令和 9 年度～令和 13 年度）

＜研究開発費＞

物品費	138.5 億円
人件費・謝金	34.6 億円
旅費	4.6 億円
その他	53.1 億円
間接経費	69.2 億円

＜配分機関における諸経費等＞

AMED 管理費	4.5 億円

※研究課題の内容が未確定であるため、物品費、人件費・謝金、旅費及びその他の内訳は、研究費事業における一般的な費目構成を踏まえた概算値として計上している。 また、配分機関における諸経費等として、事業運営に必要な AMED 管理費（研究開発費の 1.5%）を計上している。

〇目標と指標

①成果目標

・国内スタートアップ等による、創薬ターゲット探索から候補化合物計、実験、自動解析までの一連のプロセスの高度自動化・自律化の実現。
・国内での創薬ＡＸ基盤整備に資する知見及び革新的創薬シーズの創出　等

②成果指標及び成果実績（アウトカム）

・複数の異なるモダリティにおける探索又は非臨床試験の自動化研究に係る実証を実施（少なくとも２以上のモダリティ）（令和９年度中）
・予め定めた試験結果等を得るために従来の試験法と比較して所要時間を削減した事例（削減が見込める事例を含む。）を５件以上創出（令和９年度中）
・国内基盤構築に資する知見や課題を５例以上整理（令和９年度中）

③活動指標及び活動実績（アウトプット）

・複数のモダリティにおける探索又は非臨床試験の自動化研究に係る実証課題を２件以上（/モダリティ） 採択（令和９年度前半）
・探索、非臨床又は製造過程に係る実証課題を２件以上（/プロセス） 採択（令和９年度前半）
・国内基盤構築に資する知見・課題に関する検討会を２回以上開催（令和９年度中）

２．評価対象案件の実施府省等における事前評価結果等

２．１．実施府省等における評価の状況

本事業については、令和 9 年度 AMED 研究事業実施方針の一部として、厚生科学審議会科学技術部会において審議を実施した。

事業の検討に当たっては、我が国における創薬研究開発の高度化・効率化の必要性、AI 及びラボオートメーション技術の進展、創薬力強化に向けた政策的必要性等を踏まえ、事業目的、実施体制及び期待される成果等について整理を行った。

なお AMED の創薬支援推進事業のうち、「産学連携による次世代創薬 AI 開発（DAIIA)」事業（令和２年度～令和６年度）を実施し、化合物プロファイル予測 AI、新規化合物提案 AI、オミクス情報に基づく創薬 AI から構成される統合創薬 AI プラットフォームの構築を進めた。この事業は、産学で利用可能な化合物設計を可能とする AI 技術を用いた統合創薬 AI プラットフォームの開発を目的としており、AI による設計からロボティクスによる実験実行・解析までを一体化した自律型 AI 創薬基盤の実現を対象とするものではない。自律型 AI 創薬実証事業は、この DAIIA の成果も参考に、創薬プロセス全体の自律化に向けた基盤構築及び実証を実施するものである。

＜参考とした研究開発の AMED 事後評価＞
産学連携による次世代創薬 AI 開発（DAIIA）
事後評価実施日：令和６年 12 月９日
評価結果：大変優れている(計画した成果を多少上回る成果が得られた)

〈評価対象案件の事前評価〉
2026 年 10 月 9 日～16 日：厚生科学審議会科学技術部会

２．２．実施府省等の行っている評価方法

評価については、「国の研究開発評価に関する大綱的指針（平成 28 年 12 月 21 日内閣総理大臣決定）（以下「大綱的指針」という。）に沿って作成された「厚生労働省の科学研究開発評価に関する指針」（平成 29 年３月 24 日改正）（以下「評価指針」という。）を踏まえて、「評価の実施について」に基づき、研究計画・評価分科会において策定された研究開発計画にのっとった研究開発課題のうちで大規模研究開発の事前評価対象となる課題について、事前評価を実施した。

２．３．評価項目の設定方法及びその設定根拠

本事業の検討に当たっては、「国の研究開発評価に関する大綱的指針」及び「厚生労働省の科学研究開発評価に関する指針」を踏まえ、研究課題の進捗管理及び

評価については、AMED において選任される PS・PO 等による指導・助言の下、評価項目を設定し、研究開発目標の達成状況、研究進捗及び成果創出状況等を踏まえ総合的に実施する予定である。

２．４．評価項目を踏まえた評価の実施状況

①　科学技術・イノベーション基本計画及び統合イノベーション戦略との関係
（基本計画上の達成目標との関係はどのように整理されているか、達成目標の実現に貢献できるものとなっているか等）

本事業は、AI 及びロボティクスを活用した創薬研究プロセスの高度化・効率化を目指す実証研究を実施するものであり、健康・医療分野における研究開発力の強化及び研究成果の創出促進に資するものである。

また、創薬研究開発における新たな手法の実証を通じて、我が国の創薬力強化及びイノベーション創出に貢献するものであり、科学技術・イノベーション基本計画及び統合イノベーション戦略において示されている研究開発力強化、研究成果の創出・社会実装促進等の方向性との関係について整理を行った。

②　国の研究開発評価に関する大綱的指針との関係
（国の研究開発評価に関する大綱的指針との関係はどのように整理されているか等）

本事業については、「国の研究開発評価に関する大綱的指針」で示される考え方を踏まえ、政策的目的との整合性、事業実施の必要性及び期待される成果等の観点から事業内容の整理を行った。

具体的な評価項目及び評価基準については、今後、事業実施体制及び評価体制の具体化と合わせて検討することとしている。

③　評価の実施において上記以外に参考にした内容等

事業の検討に当たっては、以下の内容を参考として整理を行った。

・　国内外における AI 創薬及びラボオートメーションの動向
・　我が国の創薬研究開発を取り巻く課題
・　製薬企業、創薬ベンチャー、研究機関等から得られたニーズ

健康・医療戦略その他の関連政策

２．５．今後の評価計画（スケジュール）

記載例　評価の実施スケジュール

＜中間評価＞ 事業開始後の進捗状況及び成果創出状況については、AMED における PD、PS、PO 等のマネジメント体制の下で確認が行われる予定である。中間評価の具体的な実施時期及び方法については、今後検討する。

＜事後評価＞
事業終了後の成果については、AMED の評価の枠組みに基づき評価が実施されることを想定している。
＜追跡評価＞
現時点において、追跡評価の具体的な実施予定は定まっていない。