

KIRIN



よろこびが  
つなぐ世界へ

Joy brings us together

# 創薬DX基盤を活用したAI機能性シミュレーション

KIRIN R&D DAY 2025

キリンホールディングス株式会社 ヘルスサイエンス研究所

**野木村 大**

# 創薬AI臨床試験シミュレーション(QSP技術)を食分野で応用

As is

効果が確認できなければ  
再検証

不確実

非生理的な局所的な影響しか  
見ることができない

製品開発・社会実装

\* 動物実験ができない世界的時流

ヒト臨床試験・有効性評価  
\* 時間・コストがかかる

③ 確度高く実装へ  
(コストダウン&開発時間短縮)

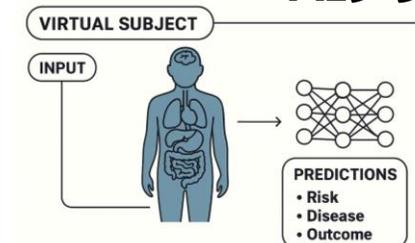
動物実験(in vivo)効果実証

細胞系(in vitro)での  
作用コンセプト立証

① バーチャル臨床で有効性予測

② 有効性予測を裏付け

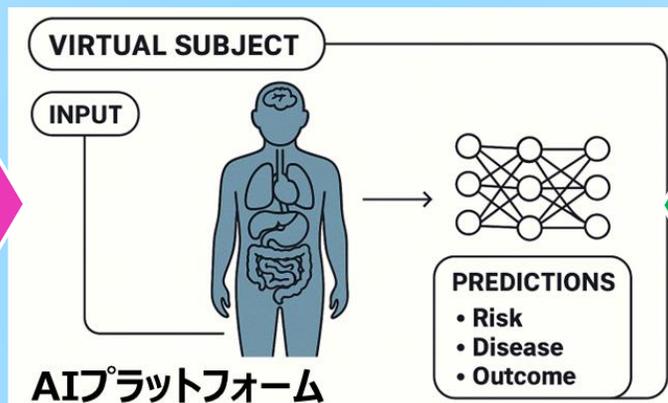
AIプラットフォーム



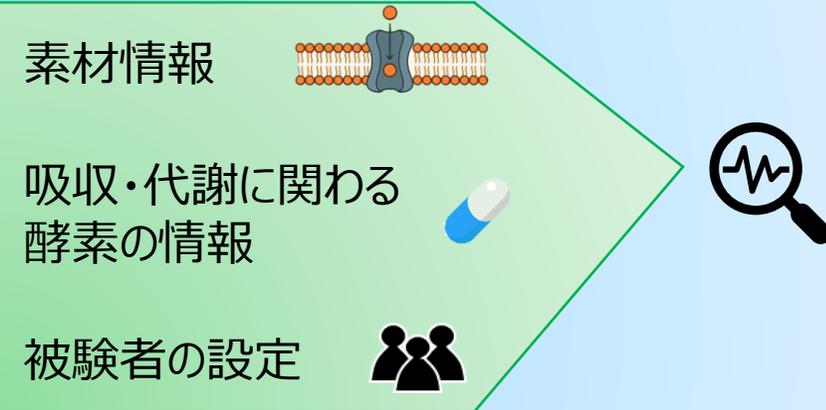
To be

# 食分野におけるAI機能性シミュレーションのモデル構築

キリンで蓄積してきた独自のデータ



共創型共同研究でさらに高い予測精度へ



共同研究：富士通株式会社  
Nova In Silico

バーチャル被験者に対する機能予測シミュレーション



具体的な素材「シチコリン」で運用し、プラットフォームの実用性を検証

**WHY**

## キリングループシチコリン



**Cognizin®**  
For the evolution of your mind®

### 「集中力や記憶力サプリメント」の海外向けBtoB素材として事業展開中 →今後グローバルBtoC(APAC)製品として展開国を拡大する方針

※現時点で日本国内ではシチコリンの使用は医薬用途でのみ認められている

- ・eスポーツサプリメント
- ・スポーツサプリメント(Pre-Workout)
- ・スパークリングウォーター
- ・スポーツドリンク
- ・スポーツサプリメント
- ・エナジードリンク(Smart Energy)
- ・脳機能サプリメント(注意・集中・記憶)
- ・コーヒー
- ・ショットドリンク



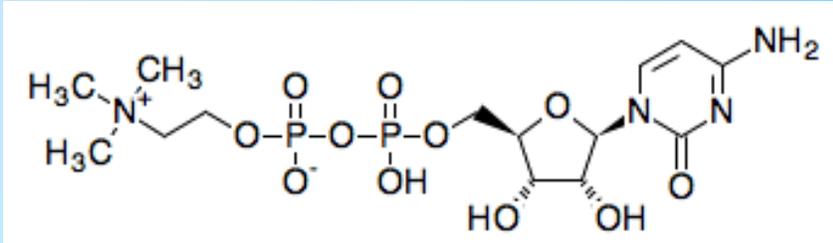
## 新たな機能強化でバックアップ R&Dの力で戦略を実現させる例として好適



# 「シチコリン」の機能と市場規模

**What**

シチコリンは脳機能に必須の成分



## 現状の訴求領域

認知機能向上

気分改善

ストレス低減

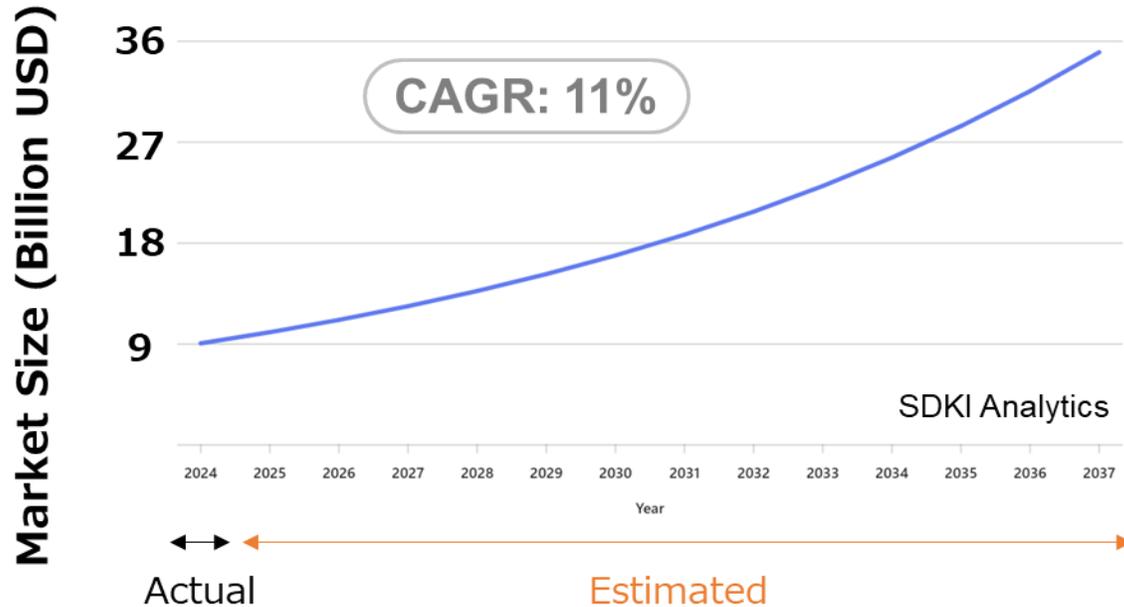
感情ケア

不安・抑うつ軽減

睡眠改善



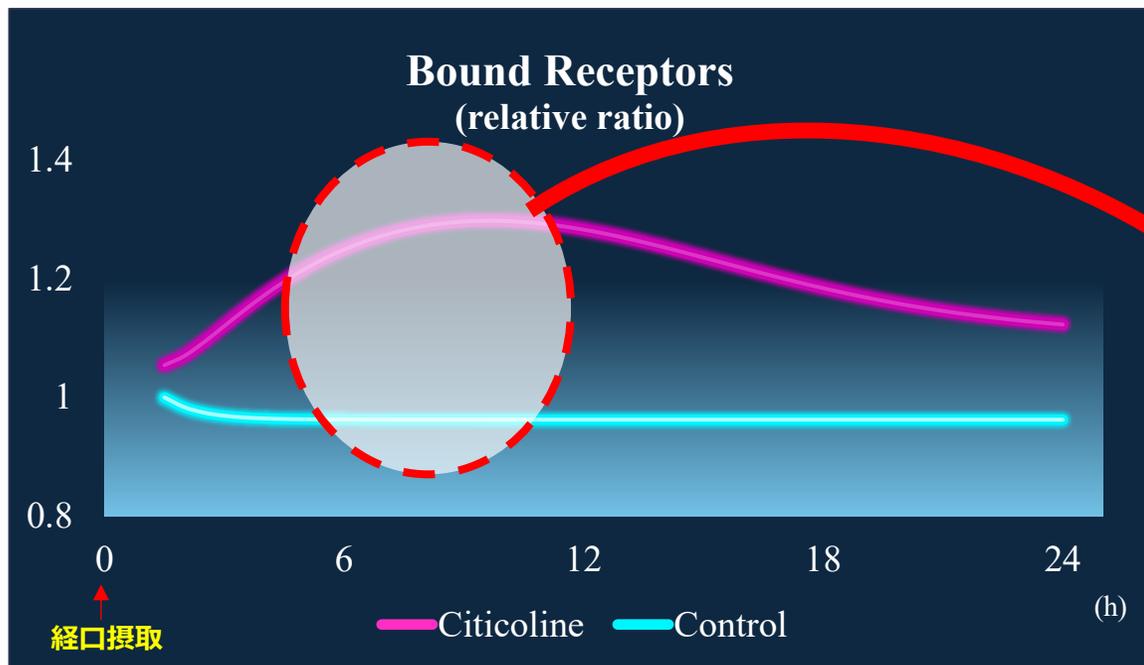
## ■世界の脳機能サプリメント市場規模は非常に大きい(5兆円)



認知機能にとどまらない新たな機能の拡張は  
社会価値と経済的価値の同時創出になる

# ①バーチャル臨床での有効性予測

腸-神経のシグナル受容活性の予測シミュレーション



$$\frac{dAChIE}{dt} = \frac{(-k_{release}) \cdot V_{maxAChRelease} \cdot AChIE}{K_{mAChRelease} + AChIE} \cdot AChIE + \frac{V_{maxAChsyn} \cdot Ch}{K_{mAChsyn} + Ch}$$

$$\frac{dAChs}{dt} = k_{prodAChneuron} + koff \cdot R_{bound} - (kon \cdot R_{free} \cdot AChs) + \frac{k_{release} \cdot V_{maxAChRelease} \cdot AChIE}{K_{mAChRelease} + AChIE} - \left( \frac{V_{maxAChE} \cdot AChs}{K_{mAChE} + AChs} \right)$$

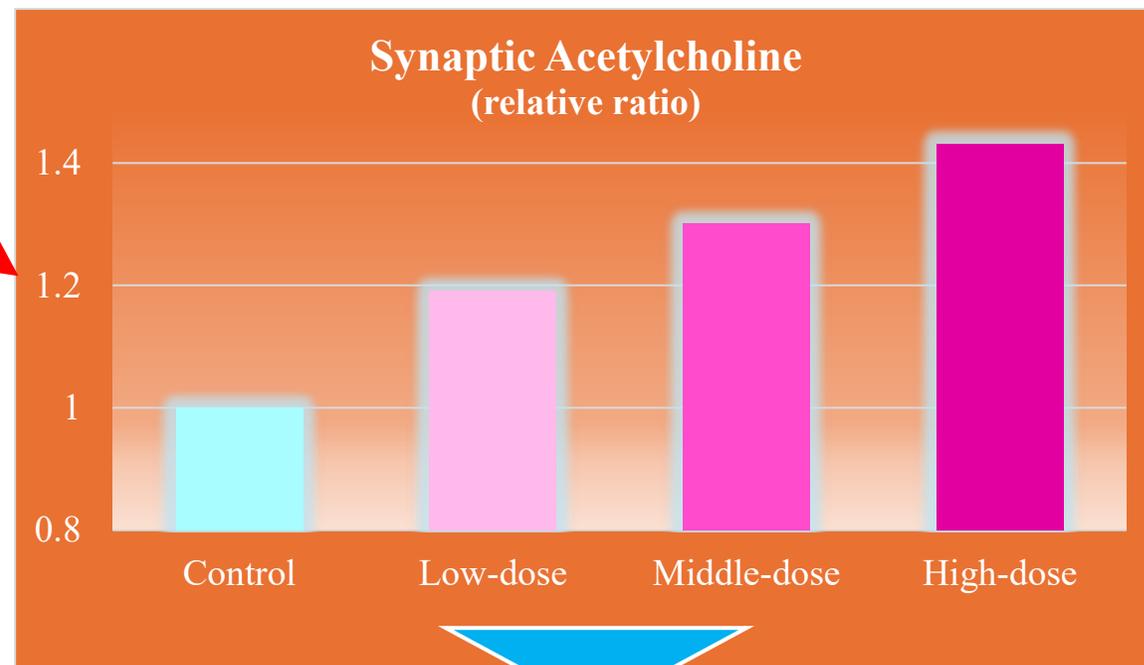
$$\frac{dCh}{dt} = k_{prodbasal} + citicoline^{breakdown} - \left( \frac{V_{maxAChsyn} \cdot Ch}{K_{mAChsyn} + Ch} \right) - (k_{lossCh} \cdot Ch)$$

$$\frac{dR_{bound}}{dt} = kon \cdot AChs \cdot R_{free} - (koff \cdot R_{bound})$$

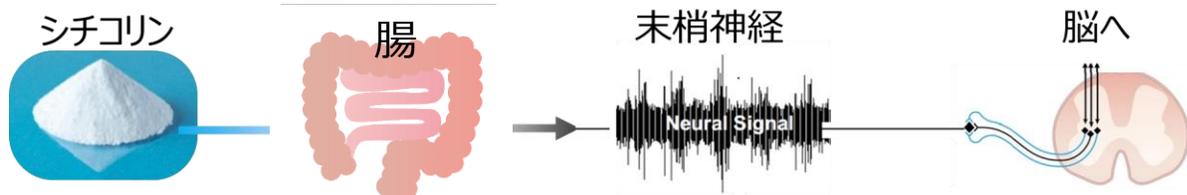
$$\frac{dR_{free}}{dt} = (-kon) \cdot AChs \cdot R_{free} + koff \cdot R_{bound}$$

## Computational Model

最大活性時点におけるシナプス内アセチルコリン量の予測シミュレーション



**腸脳相関**を示唆する腸-神経の活性化作用を新発見  
(従来の方法では発見が困難)



この予測結果をin vitroで確認

## ②有効性予測結果の裏付け

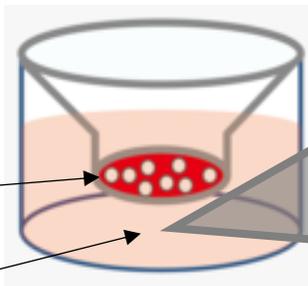
### in vitro評価

#### 微小電極アレイ

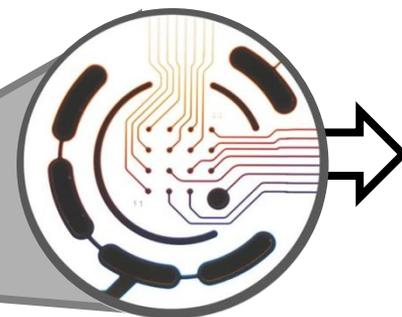
iPS由来 腸管上皮細胞

iPS由来 求心性神経細胞

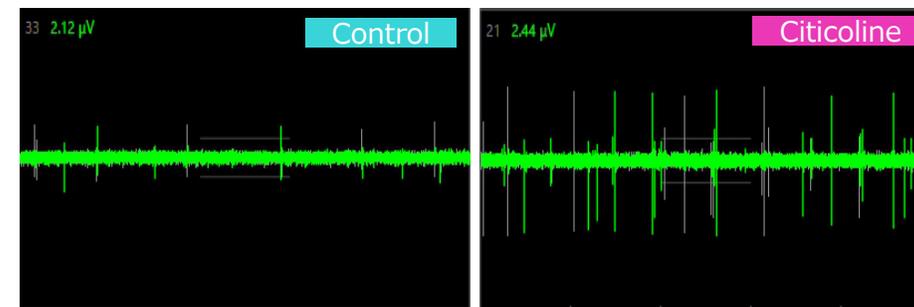
トランスウェル  
共培養



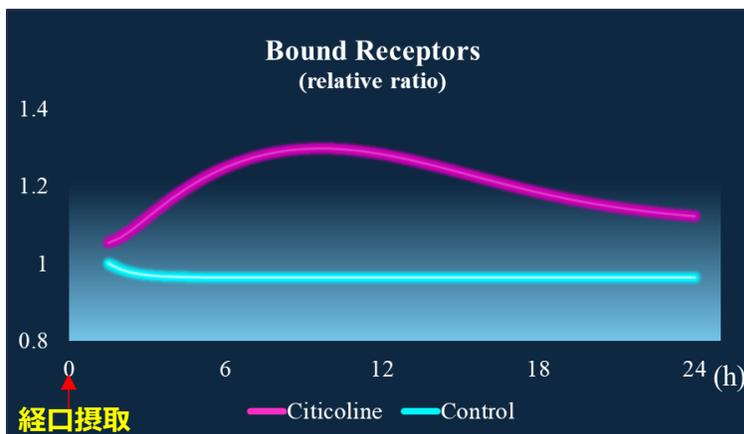
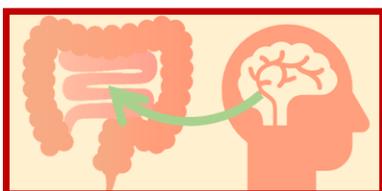
電極の埋め込まれた培養well



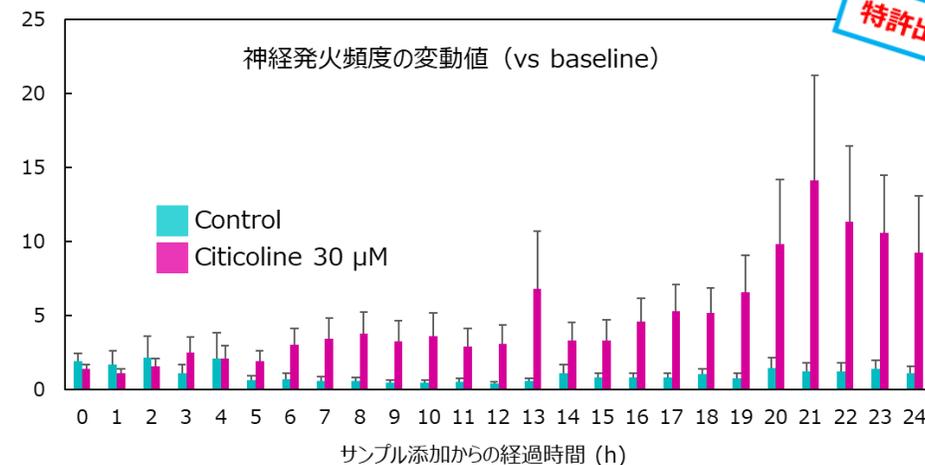
神経活動（神経発火）を評価



#### 腸脳相関

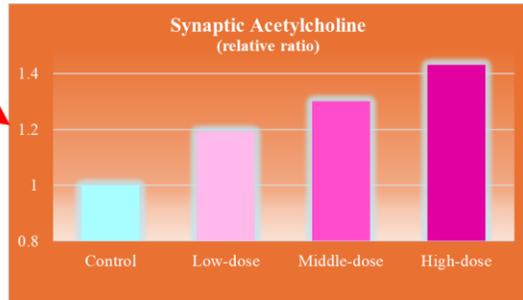
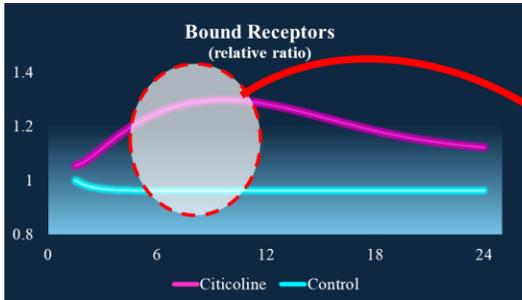
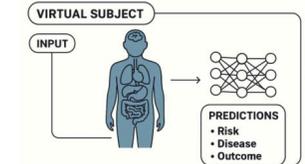
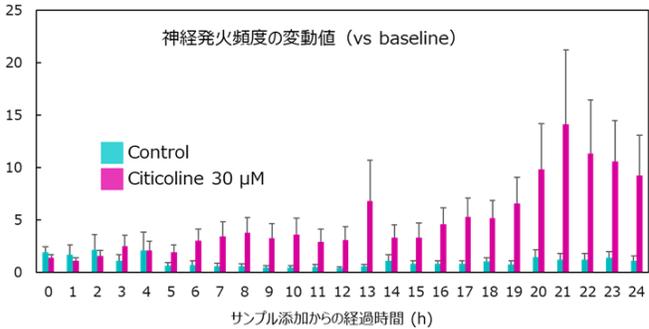
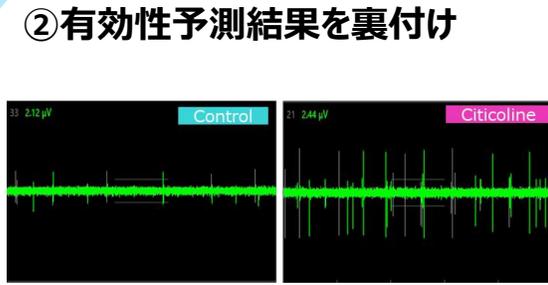
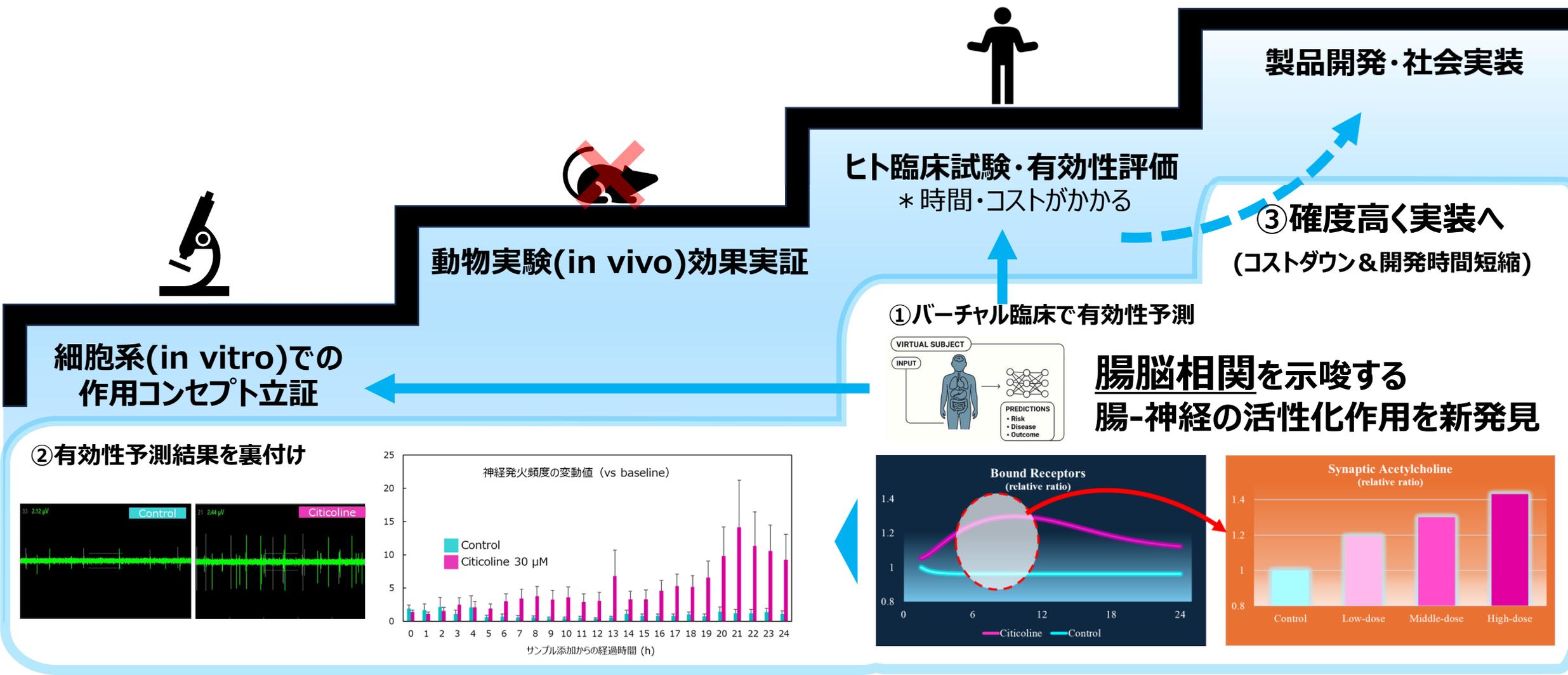


#### 裏付け



有効性予測を裏付ける結果、シチコリンの新たな可能性が拓かれた

# 創薬AI臨床試験シミュレーション(QSP技術)を食分野で応用



### ③ 確度高く製品実装へ：研究のタイムライン

