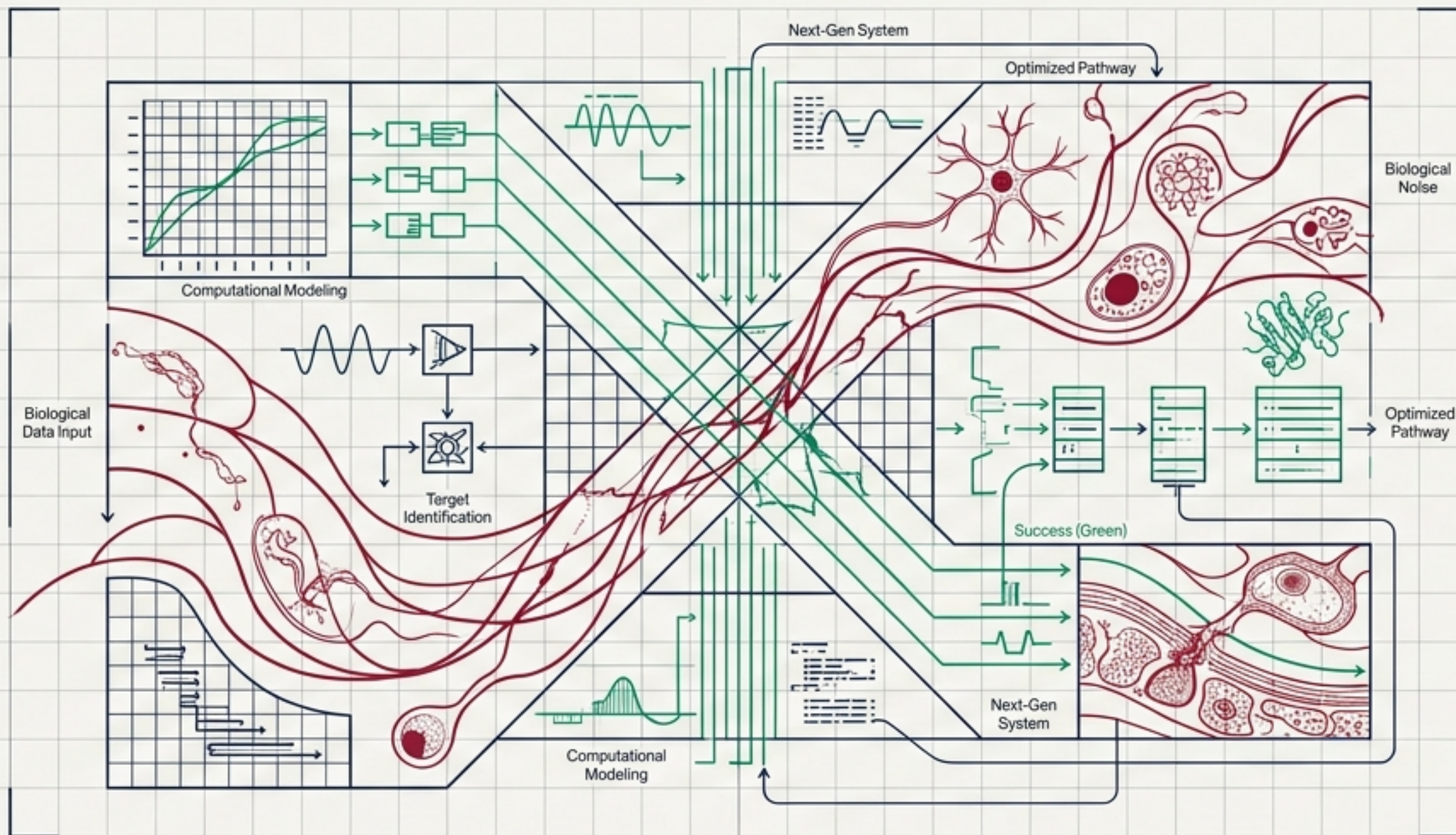
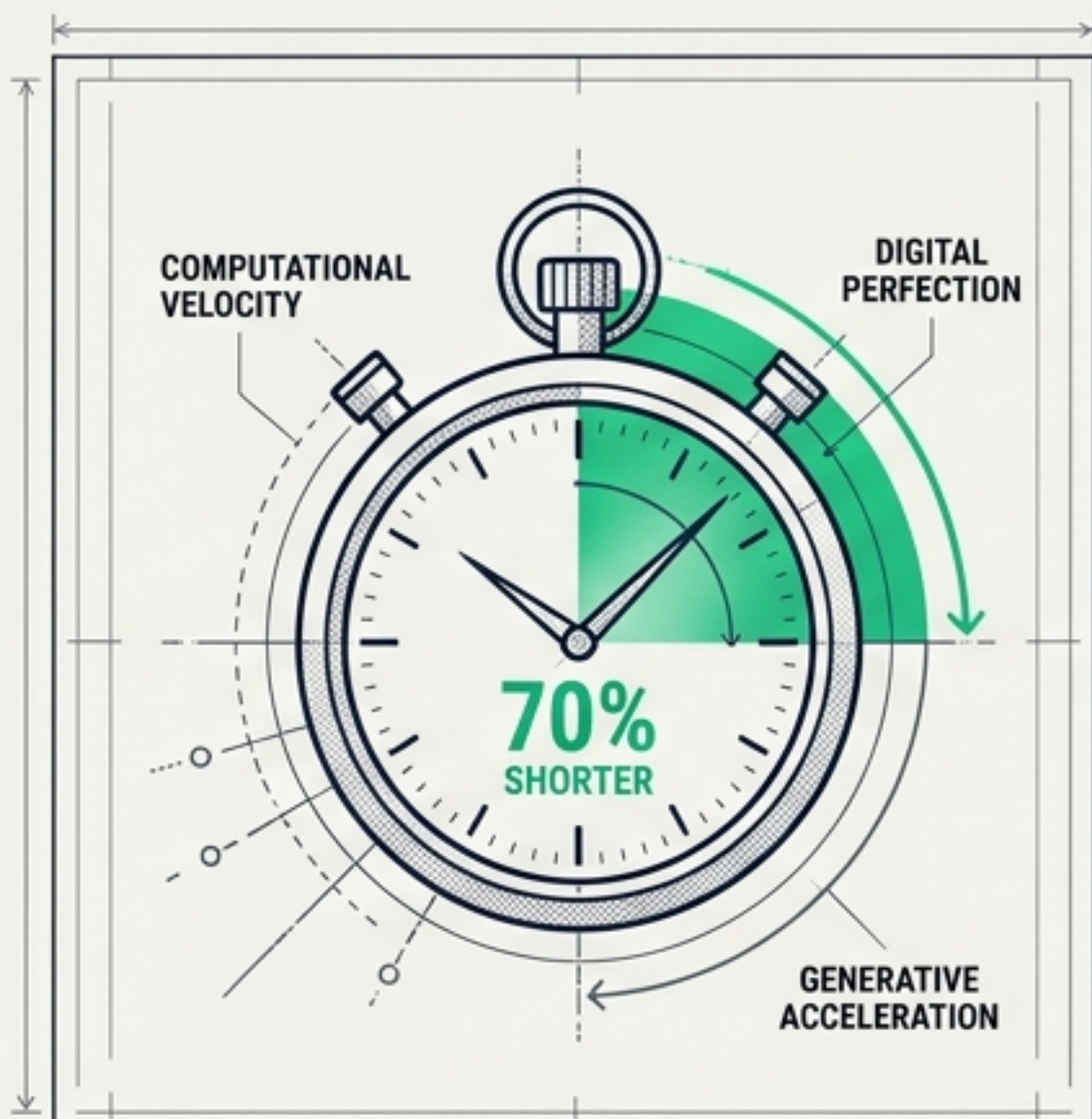


「AI創薬の幻想」の真実：2026年の臨床的現実と パラダイムシフト

The Clinical Blueprint: Reality, Failures, and the Next-Gen Operating System

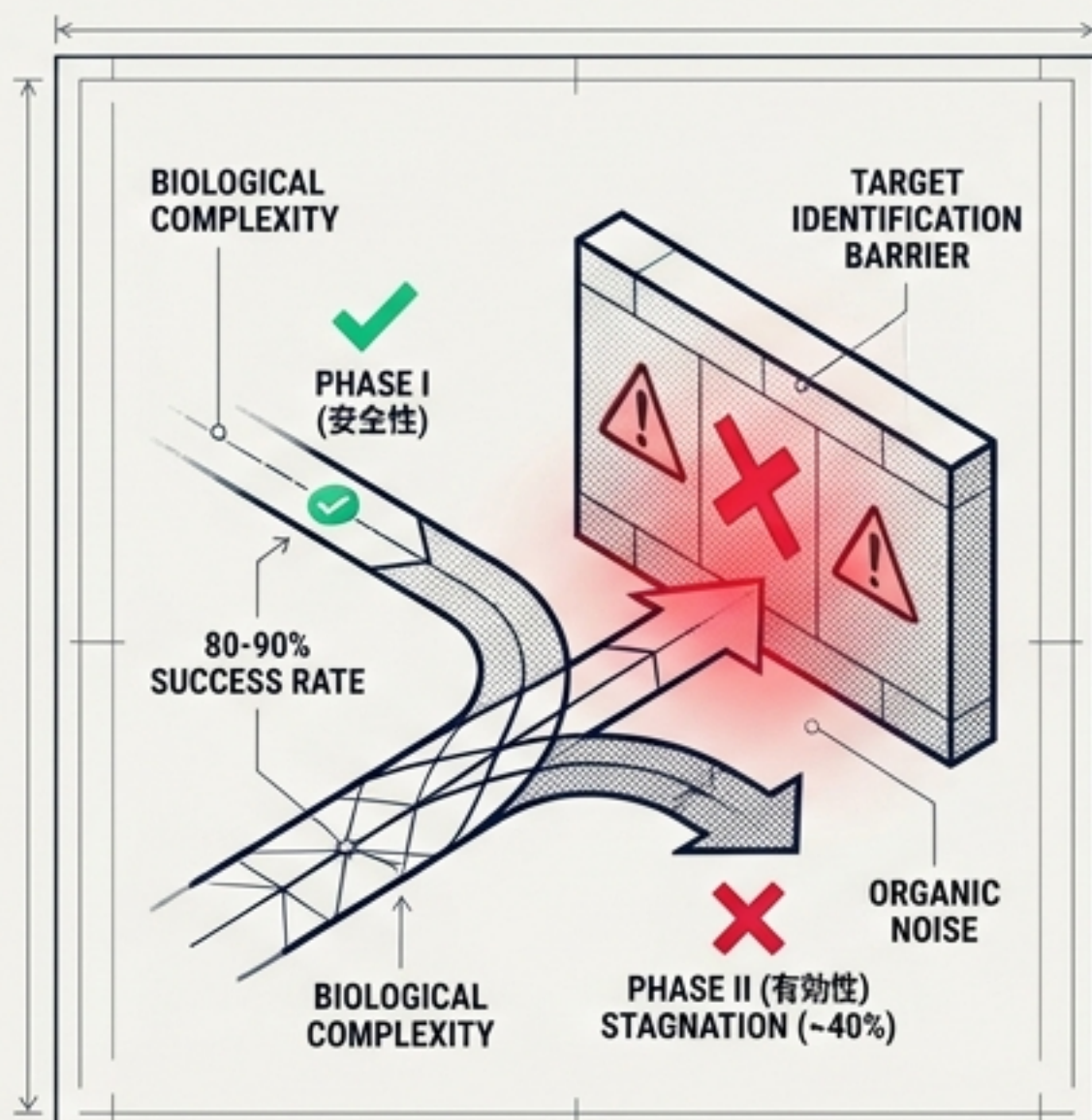


結論：AIは万能薬ではないが、創薬のインフラとして確実に結実している



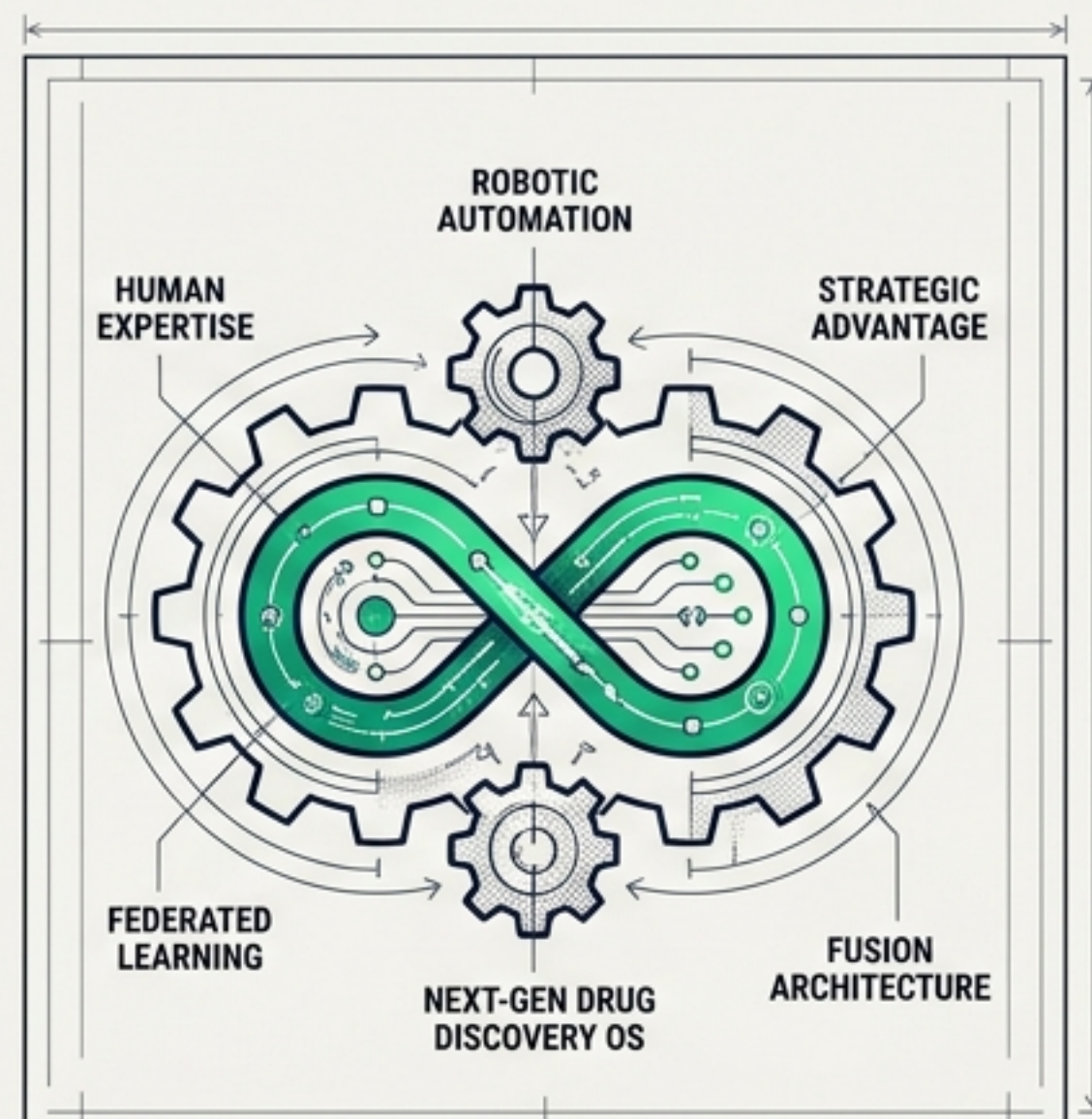
Pillar 1: 圧倒的なスピード

探索研究および候補化合物創出までの期間を約70%短縮。AIは「作る能力」において既に人間を凌駕。



Pillar 2: 生物学の壁

Phase I (安全性) の成功率は80-90%と圧倒的だが、Phase II (有効性) では約40%で停滞。AIは「疾患の真の標的」を当てる魔法ではない。

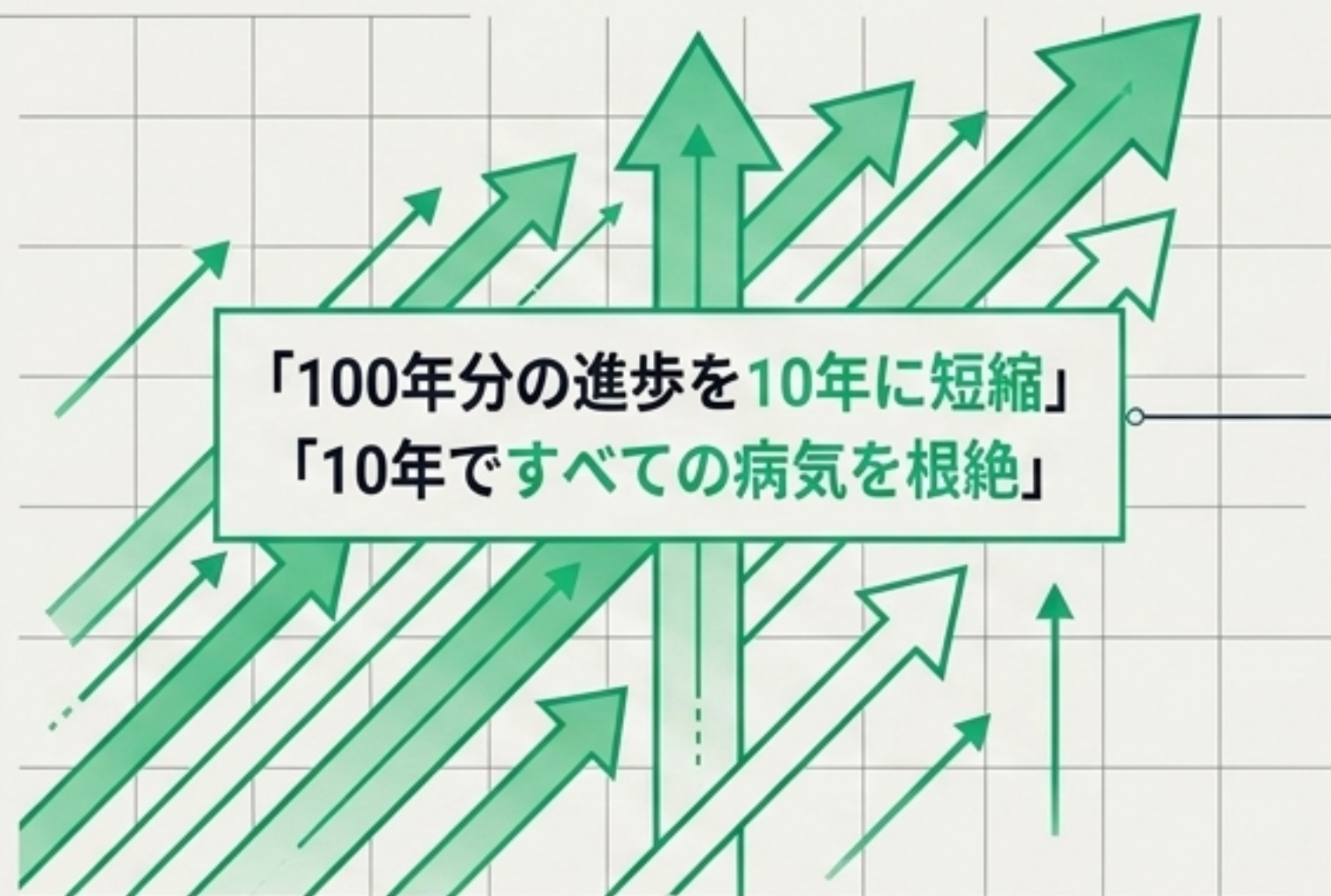


Pillar 3: 新たなOS

「AI単独」の時代は終焉。人・ロボット・AI・連合学習が融合した次世代創薬オペレーティングシステム (OS) への移行が勝敗を分ける。

シリコンバレーの「還元主義」と、泥臭い「生物学」の衝突

The Hype (デジタルな期待)



「100年分の進歩を10年に短縮」
「10年ですべての病気を根絶」

期待と現実の
ギャップ

- 人体をソフトウェアのバグのようにデバッグできる
- 還元主義的アプローチ

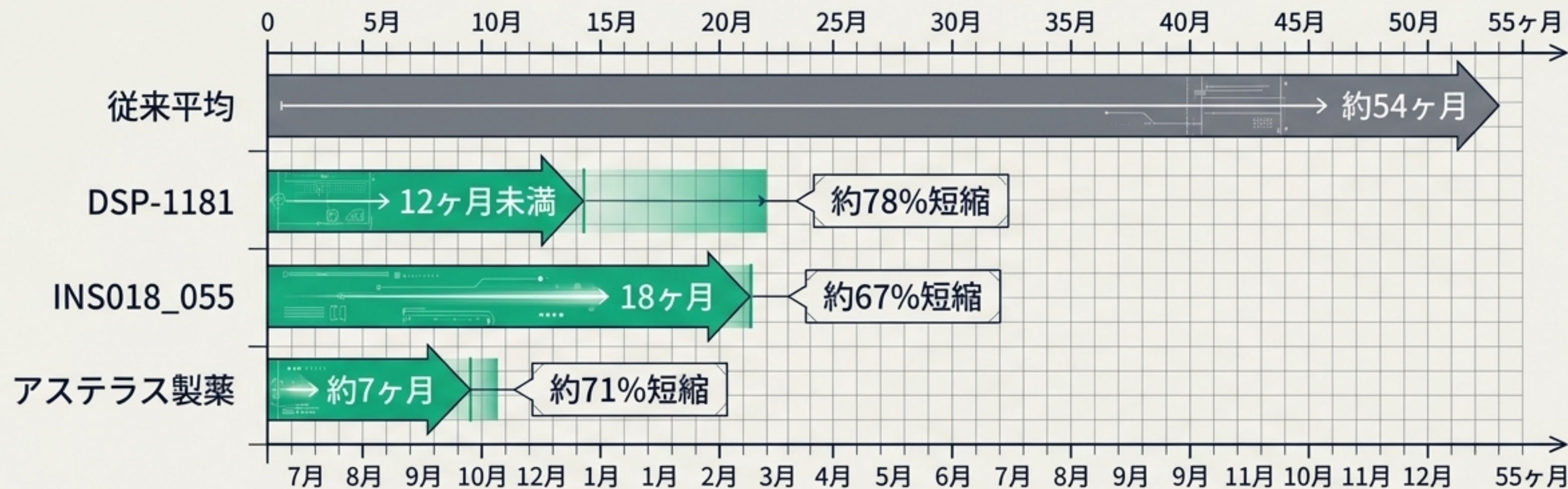
The Reality (ウェットな現実)



- 人間の身体は数百万年の進化による複雑な適応システム
- 予測不可能な生体内毒性
- 免疫システムの混沌とした反応

圧倒的な「時間短縮」：探索研究プロセスの劇的効率化

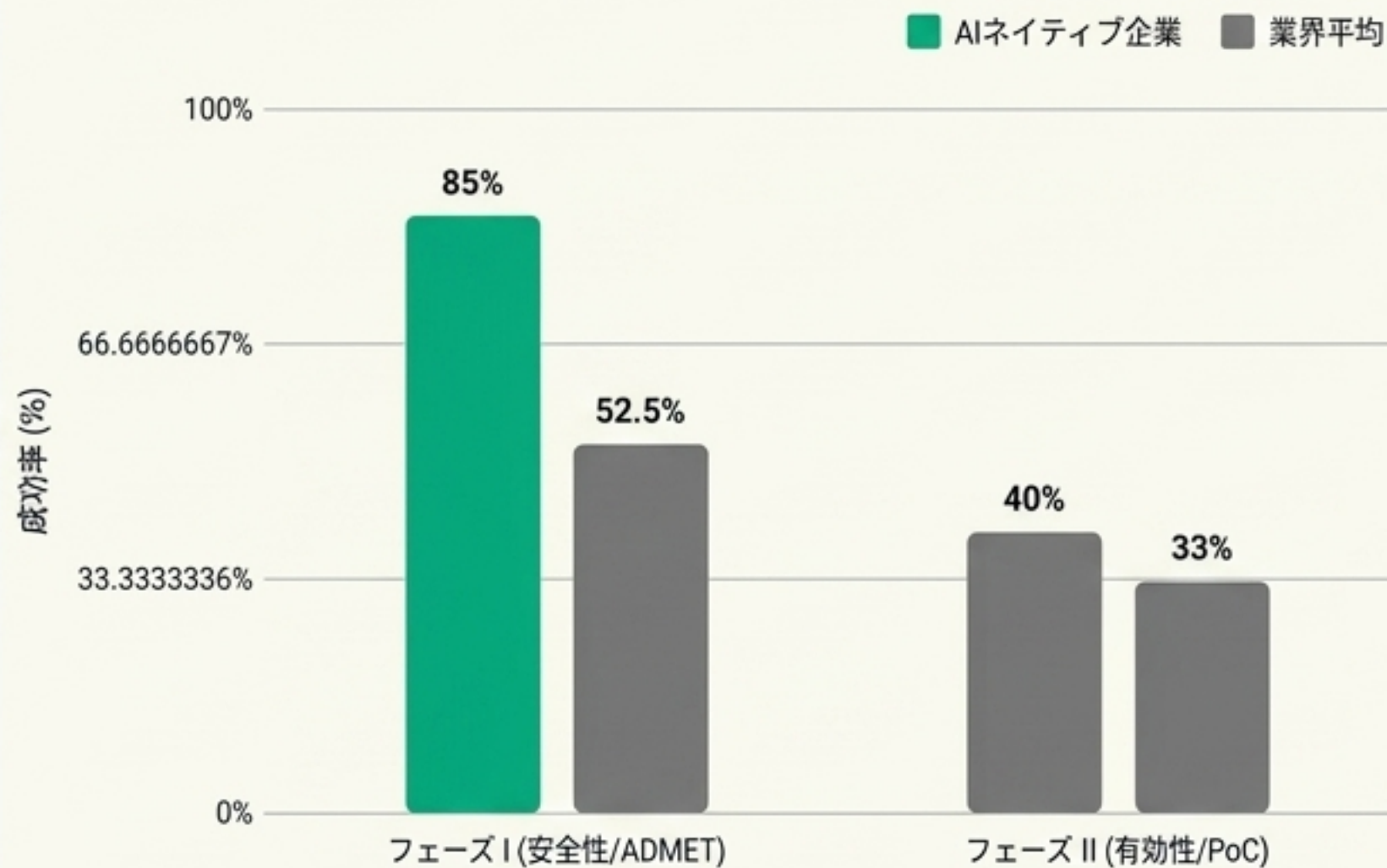
公開事例からみた候補化合物創出期間



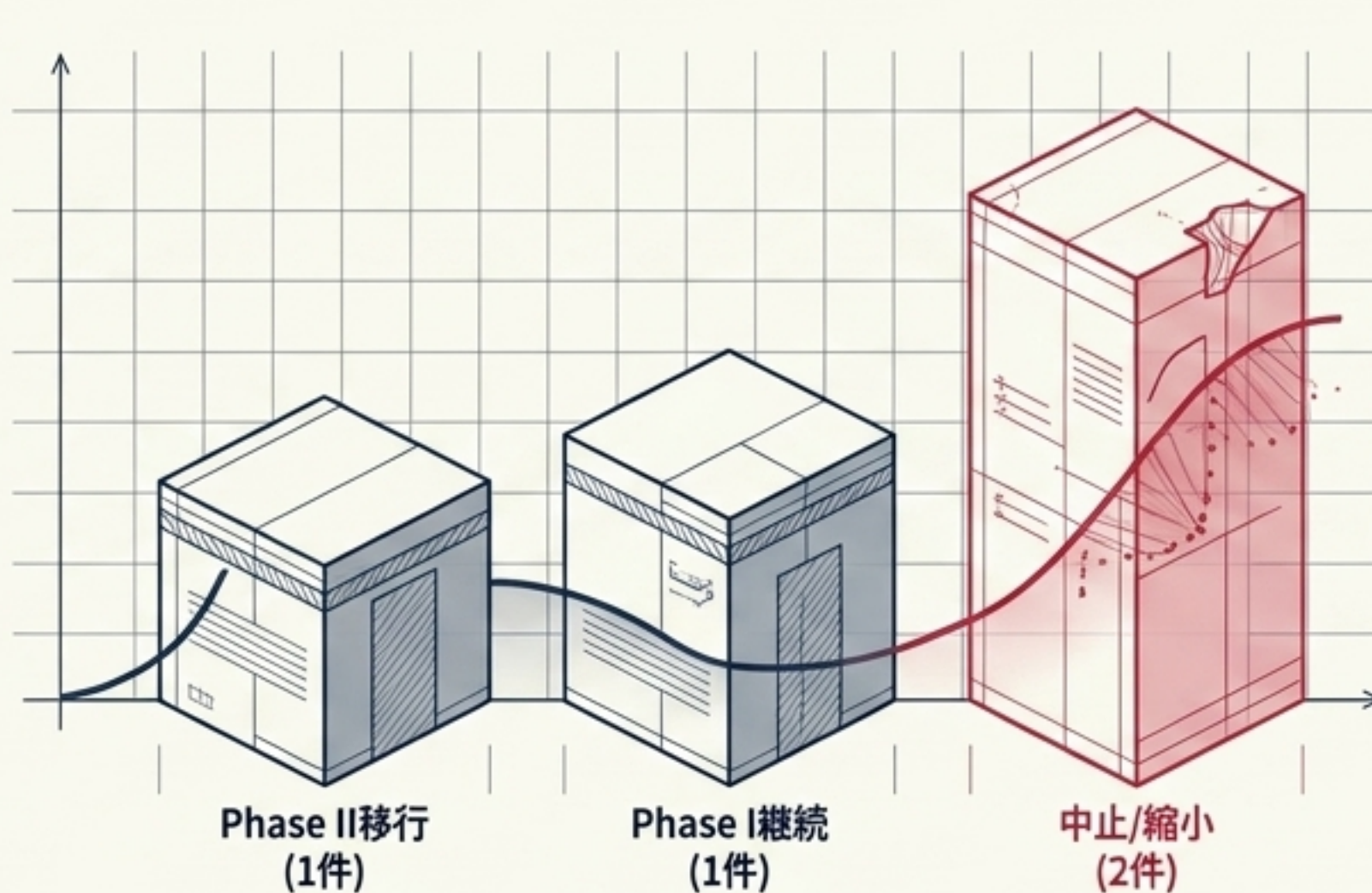
インサイト：単純平均で約72%の期間短縮。AIは広大な化学空間から『作れそうで良さそうな分子』を見つけ出すタスクにおいて、明確な実証成果を上げている。

二極化する成功率：安全性エンジニアリングの勝利と有効性の壁

AI創薬と業界平均の成功率比較（フェーズI vs フェーズII）



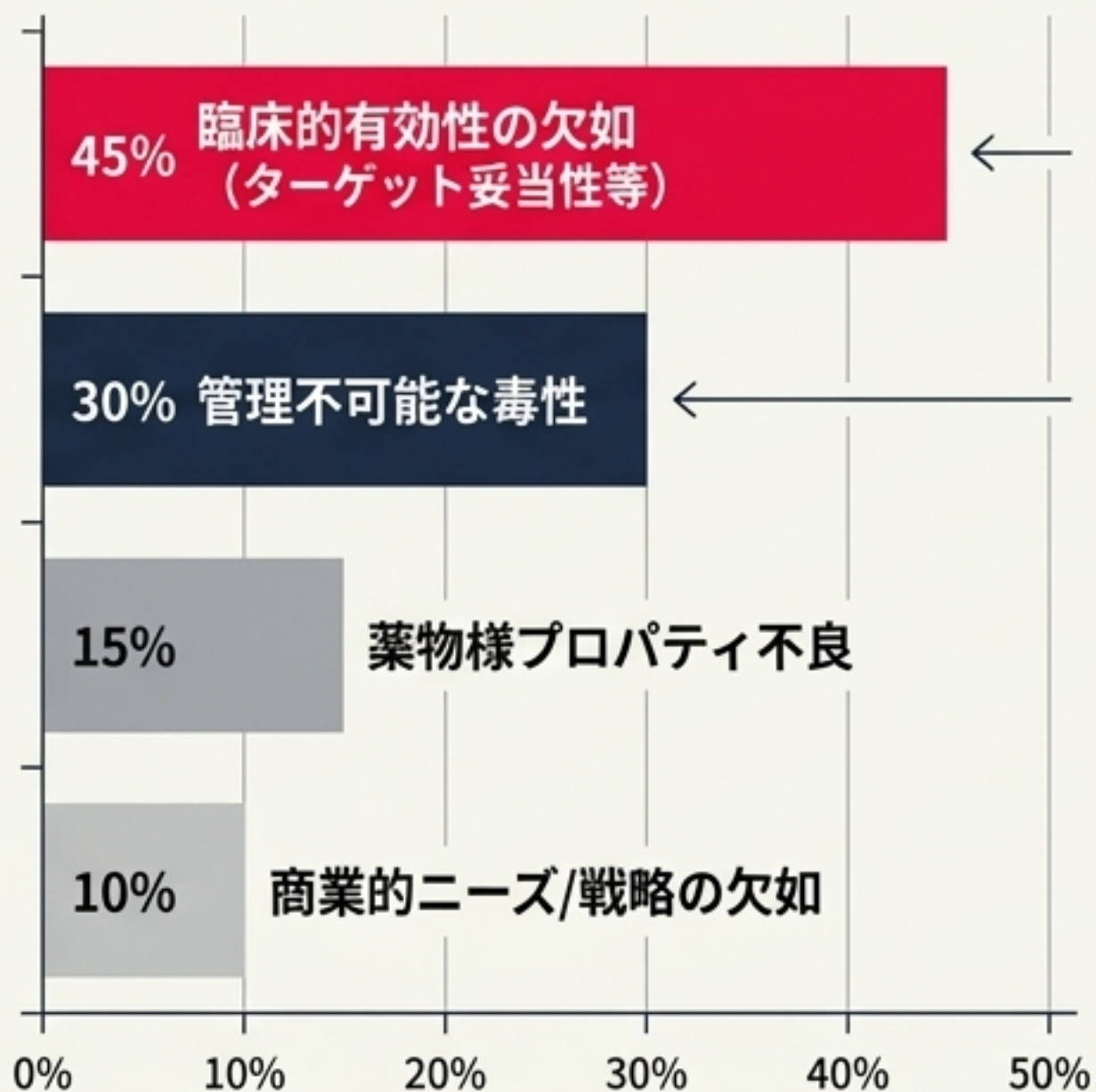
公開追跡可能なde novo AI低分子4案件の2024年末時点ステータス



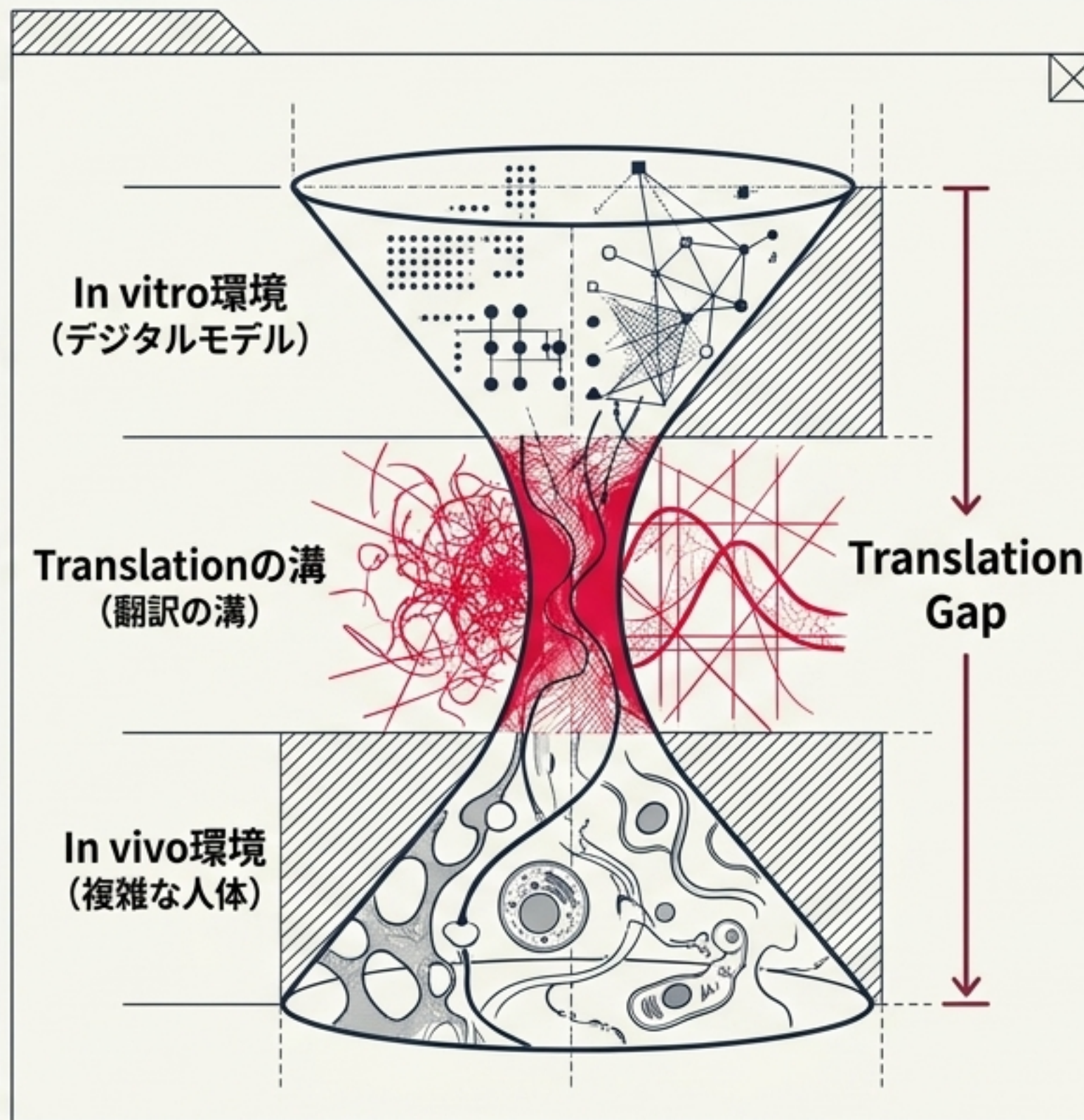
結論：AIは『ヒトに投与できる安全な分子を作る力（安全性/ADMET）』では優位性を示したが、『ヒトで効く生物学（有効性/PoC）』を当てる力ではまだ決定的優位性を示していない。

失敗のメカニズム：なぜ「AIが設計した完璧な分子」は臨床で落ちるのか

臨床試験における開発失敗要因の内訳（割合 %）



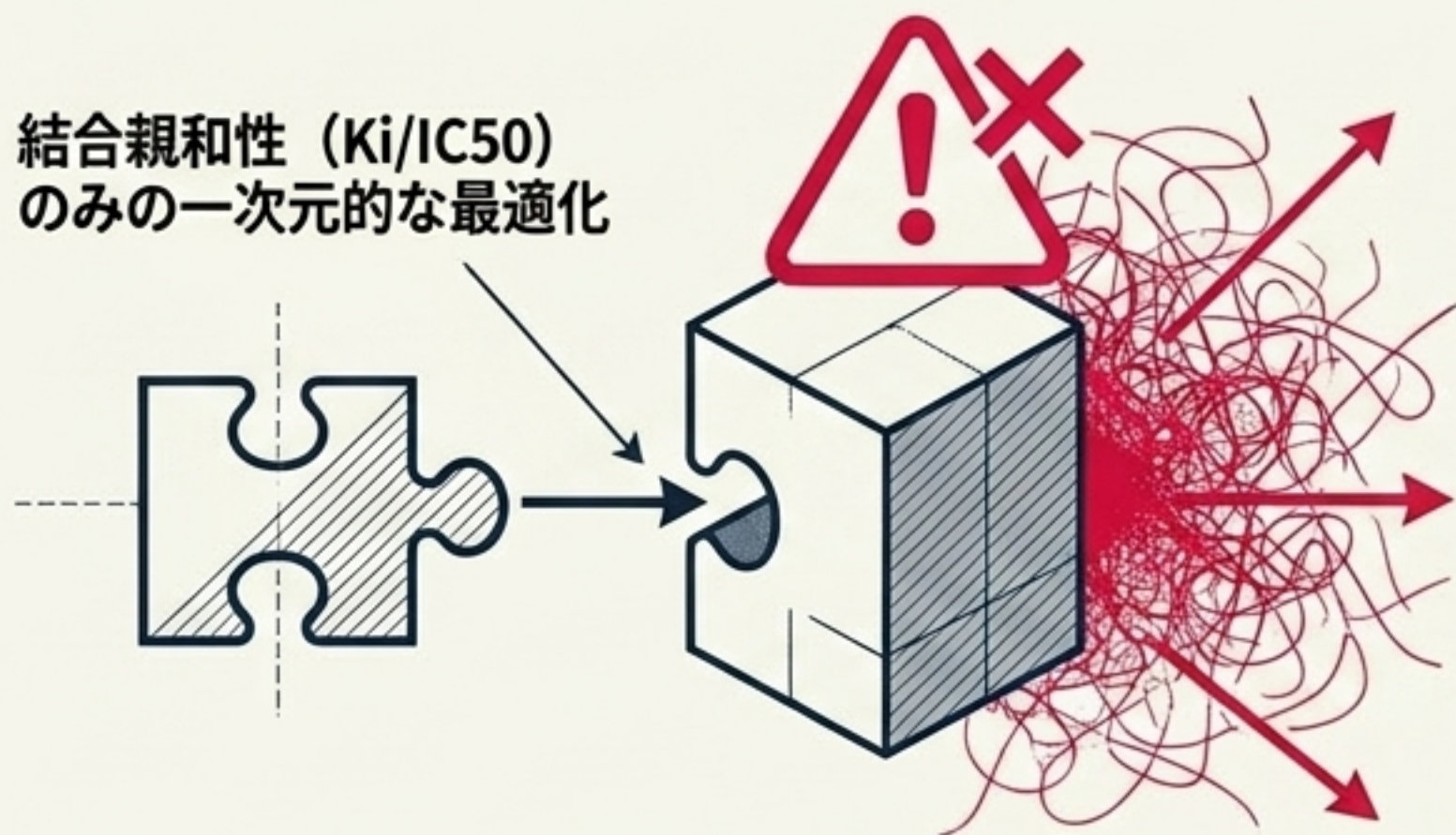
- 有効性の欠如：生物学的前提自体の誤り
- 毒性：生きた免疫系の予測不可能性



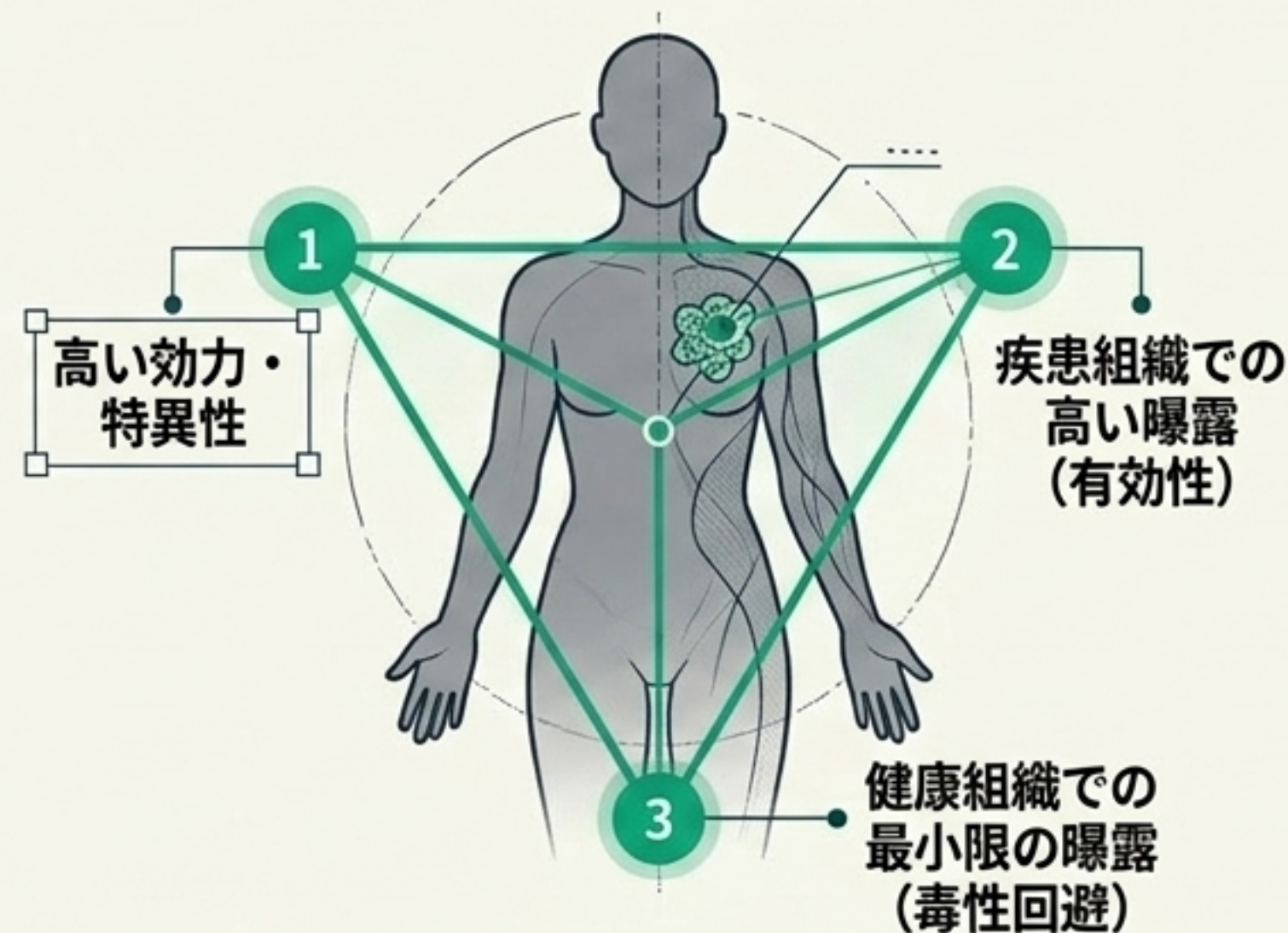
構造活性相関 (SAR) の罠から、生体内曝露 (STR) の最適化へ

Trap: SARへの過剰依存 (AIが陥りやすい罠)

結合親和性 (Ki/IC50)
のみの一次元的な最適化



Solution: STRへの転換 (臨床で求められる要件)



メッセージ：アルゴリズム上で単なる結合力を追求するだけでは、予測不可能な毒性や有効性の欠如を招く。

業界を揺るがした失敗事例：早期臨床の壁を越えられなかったAI分子

Diagnostic Matrix

企業 / プロジェクト	対象疾患 / 段階	失敗結果	インサイト
Recursion (REC-994, REC-2282)	脳海綿状血管腫等 (Phase II)	有効性の欠如。自然経過と区別つかず	巨額のキャッシュバーンとパイプライン刈り込み
Exscientia / 住友ファーマ (DSP-1181)	強迫性障害 (Phase I)	期待基準未達で開発中止	探索12ヶ月という『生成スピード』は臨床的成功を保証しない
BenevolentAI (BEN-2293)	アトピー性皮膚炎 (Phase IIa)	統計学的有意差を示せず	AIの生物学仮説検証の難しさ。戦略的オーバーホールへ

臨床的検証を突破した金字塔：生物学的複雑性に打ち勝つアプローチ

Success Matrix

企業 / プロジェクト	対象疾患 / 標的	段階	成果とインサイト
Insilico Medicine (Rentosertib / ISM001-055)	特発性肺線維症(IPF) / TNIK阻害	Phase IIa成功	新規標的の発見とゼロからの分子 設計を両立。FVCの劇的改善 (+98.4mL)。吸入液版も展開。
Takeda / Nimbus / Schrödinger (TAK-279 / Zasocitinib)	尋常性乾癬等 / TYK2阻害	Phase 3進行中	FEP+技術により、構造が酷似する JAKファミリーの中でTYK2に対し 「170万倍」の究極の選択性を実現。

戦略的転換の主戦場：「How to drug(化学)」から「What to drug(生物学)」へ

過去の主戦場



【How to drug】どうやって
薬の構造を作るか

- AIによる最適化やタイムライン圧縮（すでに達成・コモディティ化しつつある領域）

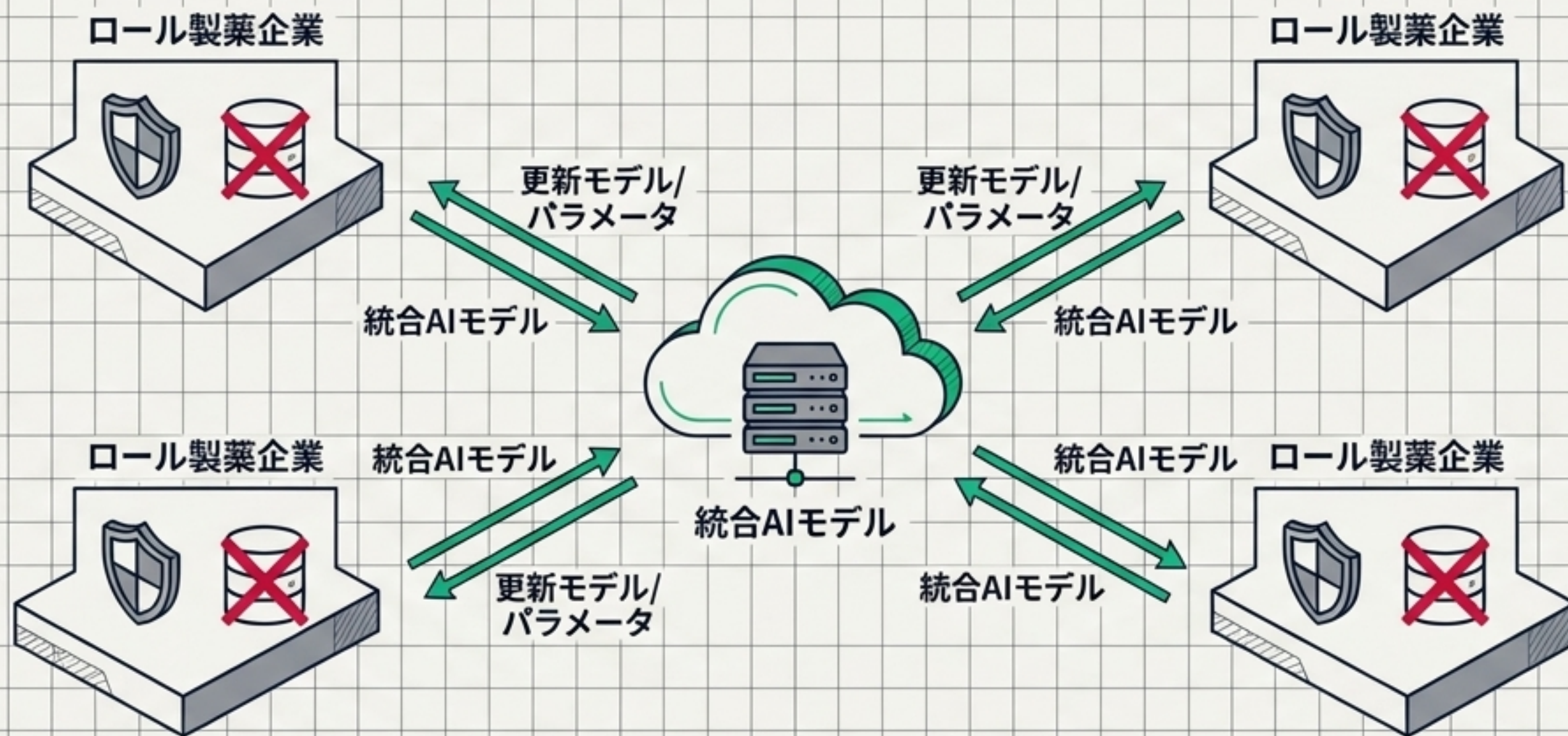
これからの主戦場



【What to drug】どの遺伝子や
タンパク質を標的とすべきか

具体例：NovartisはADPKDのデジタルモデル上で数千の遺伝子を系統的にオン・オフして探索。マルチオミクスデータ統合による因果推論モデルの構築が次なる10年のブレイクスルー。

データの壁を打破する「連合学習」：機密性を担保した集合知の形成



欧州 MELLODDY

巨大製薬10社、26億の実験データポイント。
機密情報の開示ゼロで予測モデルの精度向上を実証。



日本 DAIIA / LINC / Elix

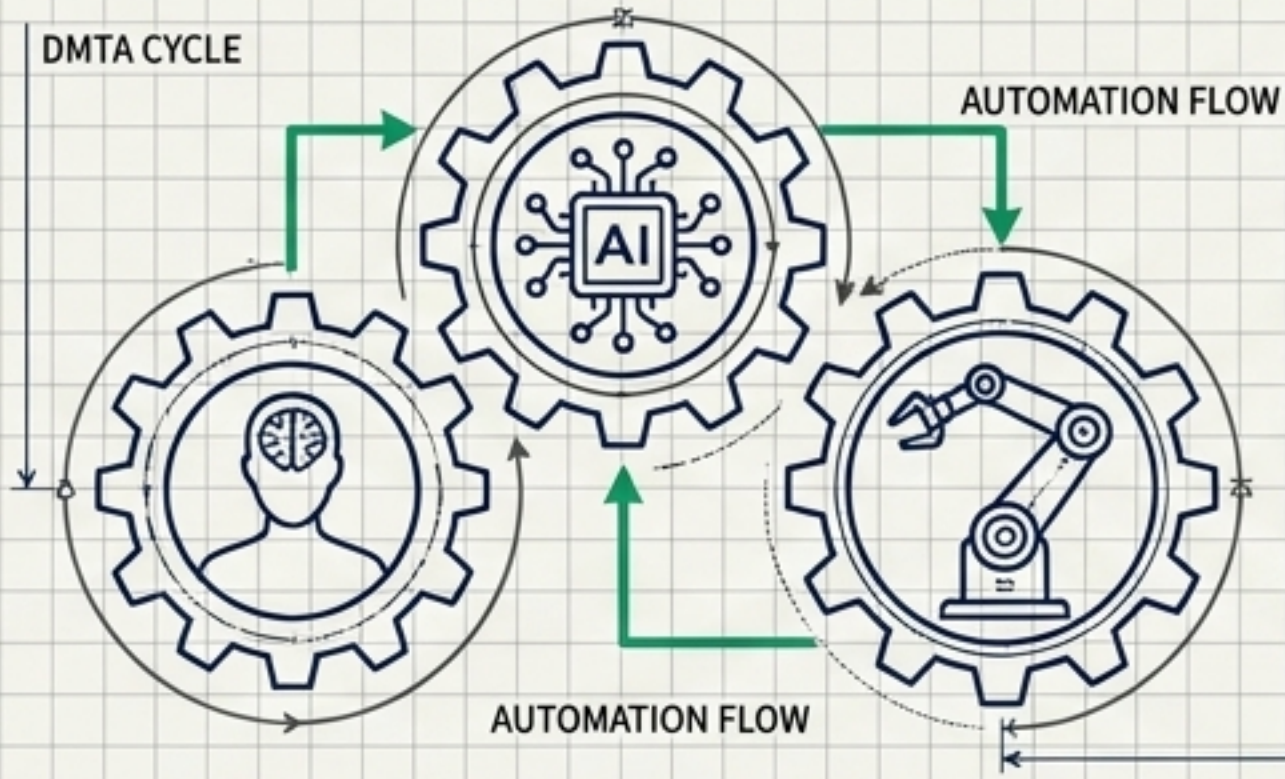
製薬企業16社のデータを連合学習したプラットフォーム
を世界初商用化。ネットワーク効果の起動。

日本メガファーマのリアリズム：AIを「魔法」ではなく「実務インフラ」に

アステラス製薬

人×AI×ロボットのDMTA反復

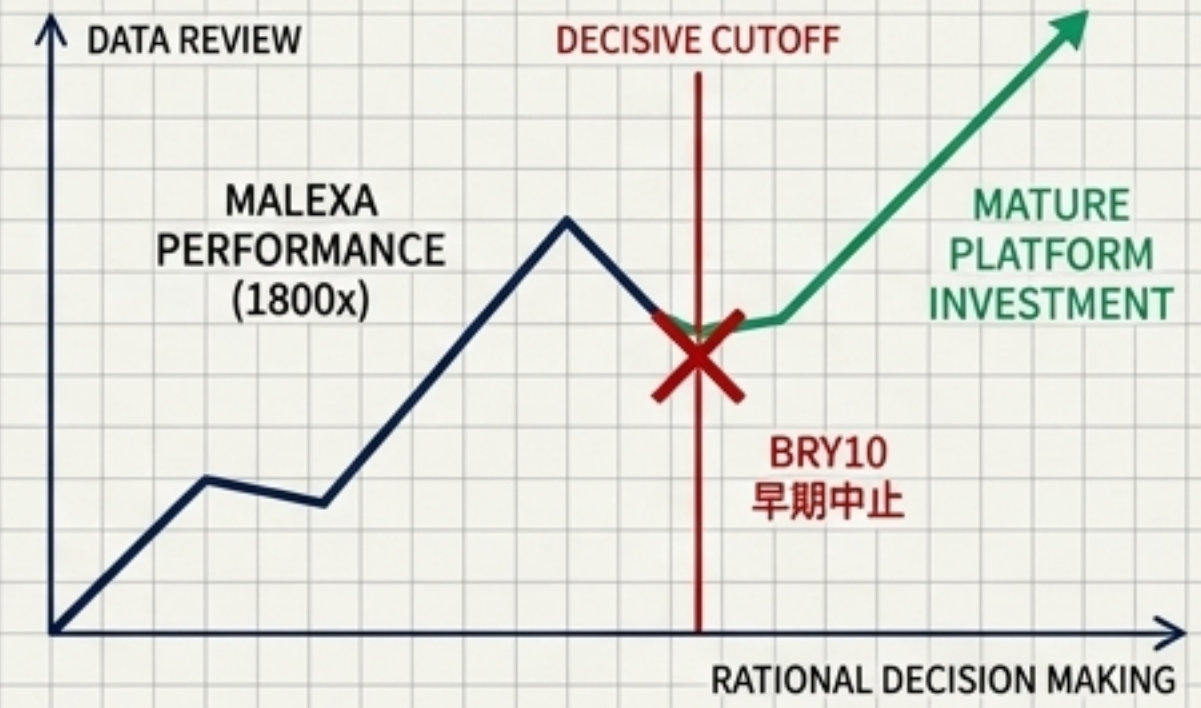
- AIがデザインし、自律型ロボットが自動合成・評価
- 研究者は高度な意思決定に集中
- 到達期間を**70%短縮**。計算創薬ModBind基盤の統合



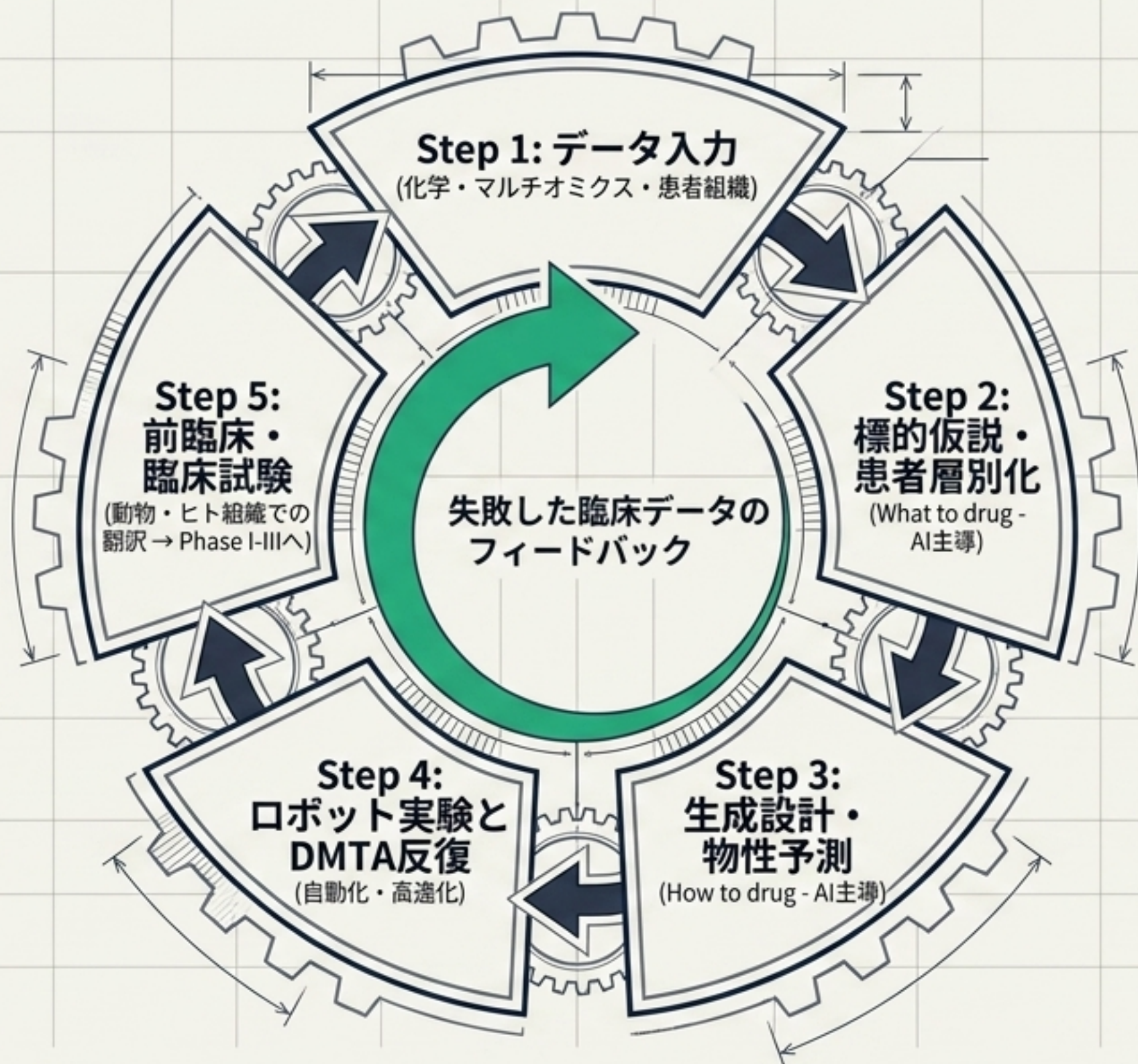
中外製薬

AI Everyday / 損切りの合理性

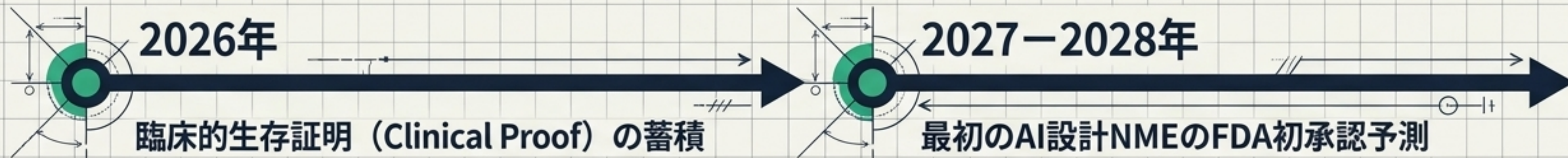
- 独自抗体AI「MALEXA」により1800倍の結合強度
- 臨床入りした「BRY10」を冷徹なデータ見直しで早期中止
- プラットフォームの価値を信じ全社投資を深化させる成熟した姿勢



次世代創薬のエコシステム：直線的プロセスから循環型オペレーティングシステムへ



2026年以降の展望：幻想論の終焉から始まる、真の産業革命



AI創薬は幻想ではない。だが、AI『だけ』で創薬できるという考えは完全に終わった。

AIを人間やロボットと協調する『創薬オペレーティングシステム』として深く組み込み、泥臭い生物学的データを蓄積し続ける者だけが、次のディケイドにおける勝者となる。