

# 「AI創薬」は幻想か、現実か？：2026年の臨床的真実とパラダイムシフト

## 医薬品開発の残酷な現実とAIの現状



1つの新薬承認に15年・  
28億ドルのコスト

初期候補が市場に出る確率はわずか8%、  
臨床試験の失敗率は約90%



「生物学のバグ」という  
幻想の終焉

人体をコードのようにデバッグできるという  
楽観論は、予測不可能な生体内毒性や免疫  
系の複雑な反応という現実の壁に衝突した



26億ドル規模へと  
成長するAI創薬市場

市場規模は2025年の19.4億ドルから  
着実に協大。テクノロジーの採用は  
かつてないほど深まっている

## 臨床データが示す「二極化」するパフォーマンス

✓ フェーズI (安全性) での  
圧倒的勝利：



AIネイティブ企業は、ADMET予測や  
安全性エンジニアリングにおいて業界平均  
(約52%) を大幅に上回る

? フェーズII (有効性) の厚い  
厚1壁：



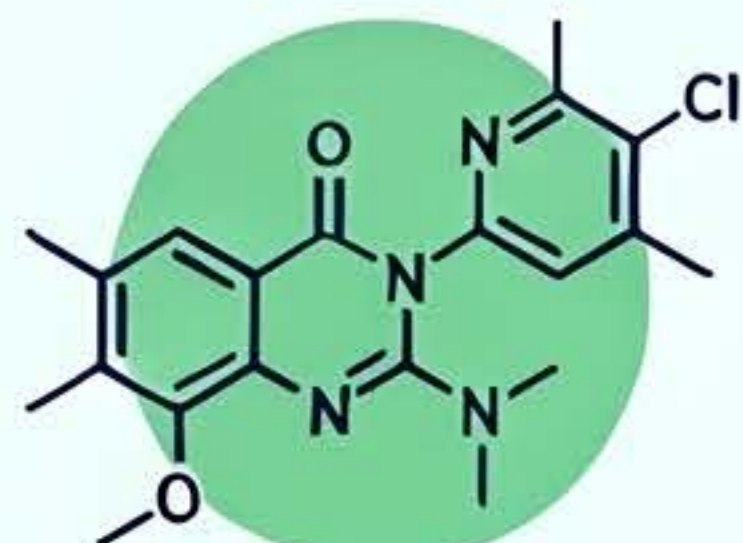
業界平均 (約29%) よりは高いものの、  
AIも「正しい生物学的標的の選択」という  
課題を根本的には解決できていない

臨床試験フェーズ	AIネイティブ企業の 成功率	従来業界平均 成功率
フェーズI (安全性/ADMET)	80% ~ 90%	約 52%
フェーズII (有効性/PoC)	約 40%	約 29%

前臨床タイムラインを**50%以上短縮**



## 2026年の明暗を分けた主要事例



【成功】170万倍の選択性を  
実現した「Zasocitinib」

TakedaとSchrödingerはAIシミュレ  
ーション (FEP+) により、TYK2のみを種  
めて精密に阻害する分子を設計



【成功】AIによる新規標的発見：  
Insilico社の「Rentosertib」

AIが新規標的 (TNIK) の発見から化合物  
設計まで主導。フェーズIIaで顕著な有効  
性を示し、Nature Medicine誌に掲載



【失敗からの教訓】Recursionや  
Exscientiaのパイプライン削減

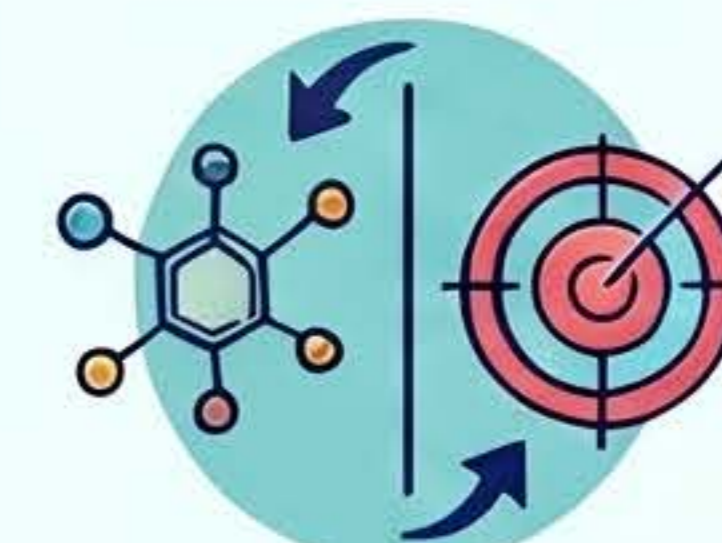
AI設計の化合物であっても臨床での有効  
性証明は困難。各社は耐糖糖痔のために  
腫瘍学などの有望領域へリソースを集中

## 次世代のパラダイム：連合学習と「What to drug」



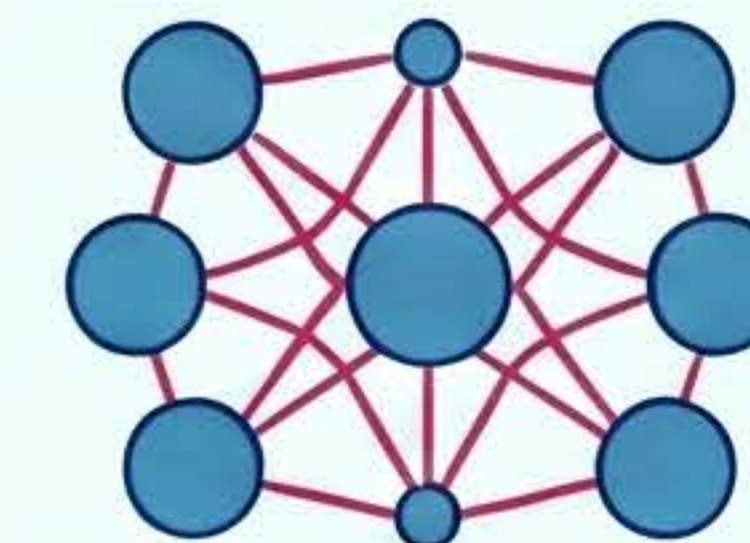
「機密」と「共有」を両立する  
「適合学習 (Federated Learning)」

データを外部に出さず、学習結果 (モデルの  
重み) のみを融合することで、企業間の権限  
置性を保ちながらAHD予測精度を向上



「How」から「What」へ：  
標的探索への回帰

優れた構造を作る技術 (How) は成熟し、現  
在は「どの標的を窺らべきか (What)」という  
生物学的因果推論にAHD主軸が移っている



日本発の商用プラットフォーム：  
DAIIAプロジェクト

欄内製薬16社のデータを連合学習したAIモデ  
ルが2025年に実用化。メガファーマの知見を  
共有するネットワーク効果が期待されている