

AI創薬の真実：2026年、幻想を超えた「変曲点」への到達

過去の「幻想」：人体をソフトウェアのように扱う



2025年頃まで：AIが100年分の進歩を10年に圧縮し、すべての病気をデバッグ（修正）できるという還元主義的な期待

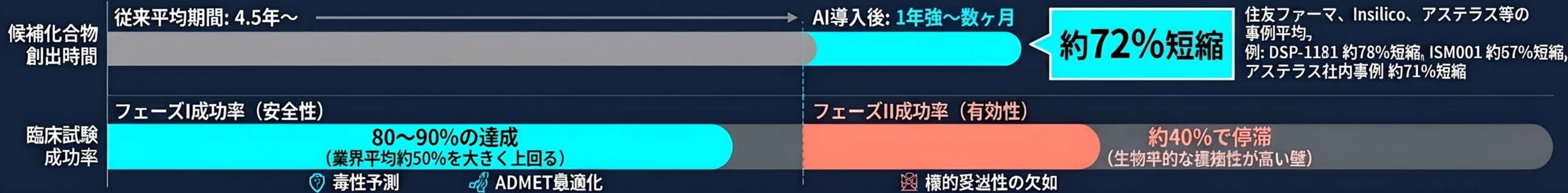
2026年の「現実」：生物学的な複雑性の再認識

現実の生物学はコードのように単純ではなく、AIで設計された化合物も臨床試験の厳しい壁に直面



市場規模は力強く成長：26億ドルへ（2025年19.4億ドルから拡大、技術採用は深化）

AIがもたらした「上流工程」の破壊的革新とフェーズIIの壁



金字塔となる成功事例（2026年時点）



Insilico Medicine: Rentosertib (ISM001-055)
特発性肺嚢腫病(IPF)に対し、フェーズIIaで顕著な肺機能改善 (→98.4 mL) を証明。
ALT「規規的発見」と「分子設計」を両立。
武田薬品 / Schrodinger: Zascitinin (AK-279)
物燃化率シミュレーション (FEP+) を活用し、膨大なタンパク質の中で
標的受容体的のみを170万倍の精度で狙い撃つ「究極の選択性」を実現。



フェーズIIの壁と失敗の教訓

フェーズII

- Recursion: REC-994 (有効性不足による中止)
- 住友ファーマ/Exscientia: DSP-1181 (フェーズIでの基準未達)
「その標的を狙うことが本当に病気の治癒に繋がるか（標的妥当性）」という生物学的離隔が失敗の主因

失敗の主要因（割合）

- 臨床的有効性の欠如 (45%)
- 管理不可能な毒性 (30%)
- 標的受容体の不具合 (15%)
- 標的受容体の欠如 (10%)

次なるパラダイムシフト：標的探索への回帰とデータ共有

「How」から「What」へ：分子の作り方で確話をする

「How」から「What」へ：分子の作り方ではなく、マルチオミクスデータを用いて「どの遺伝子・タンパク質を狙うべきか」という疾患の本質を見極める段階へ移行。



適合学習 (Federated Learning) によるデータの壁の突破
MELLODDYや日本のDARAプロジェクトのように、機密データを自社内に置いたまま、学習結果のみを共有してAIモデルの精度を高める仕組みが実用化。

日本企業のリアリズム：人×AI×ロボットの融合
アステラスの自動合成ロボットや、中外製薬の「AI Everyday」のようにAIを補助的なツールではなく、研究プロセスの一部として深く統合。