

日本の製薬企業におけるAI活用バイオ創薬への投資動向と未来戦略:現状の課題とあるべき姿

Gemini 3.1 pro

1. 序論: 創薬パラダイムの非連続的転換と投資の再定義

現代の医薬品産業は、その歴史においてかつてない規模と速度でのパラダイムシフトの只中にある。20世紀を通じて製薬産業の成長を牽引してきたのは、低分子化合物を中心としたスクリーニング型創薬であった。しかしながら、容易に発見可能な創薬標的(Druggable Target)の枯渇、臨床試験段階での高いドロップアウト率、そして研究開発費の指数関数的な高騰といった要因により、新薬創出の成功率は長期的な低下傾向にある。この現象は、ムーアの法則の逆を行く「エロームの法則(Eroom's Law)」として知られ、業界全体の構造的な課題として重く押しかかっている。

この限界を打破するため、製薬企業は治療手段である「モダリティ」の多様化を推進してきた。抗体医薬品、ペプチド医薬品、核酸医薬品、さらには細胞治療や遺伝子治療といった「バイオ創薬」へのシフトである。バイオ医薬品は、従来の低分子化合物では到達困難であったタンパク質間相互作用(PPI)などの複雑な標的を高精度に制御できる可能性を秘めている。しかし、これらの巨大かつ複雑な分子の構造を最適化し、安全性と有効性を担保した医薬品として設計するためには、人間の直感や従来のトライ・アンド・エラーに基づく実験的手法だけでは限界がある。

ここで最大のブレイクスルーとして台頭しているのが、人工知能(AI)と計算科学を活用した「AI創薬(データドリブン創薬)」である。深層学習をはじめとする高度なアルゴリズムと、スーパーコンピュータやGPUクラスターによる圧倒的な計算能力の融合は、創薬プロセスの上流から下流までを劇的に効率化しつつある。特に、週刊エコノミストの坂巻弘之氏の論考が鋭く指摘するように、日本の製薬企業は長らく依存してきた伝統的な手法から脱却し、「AI活用のバイオ創薬」へ投資の軸足を明確かつ迅速に移す必要がある段階に達している¹。中国などの新興バイオ企業が存在感を高める中、AI創薬への適応遅れはグローバル市場における競争力の致命的な喪失を意味する。

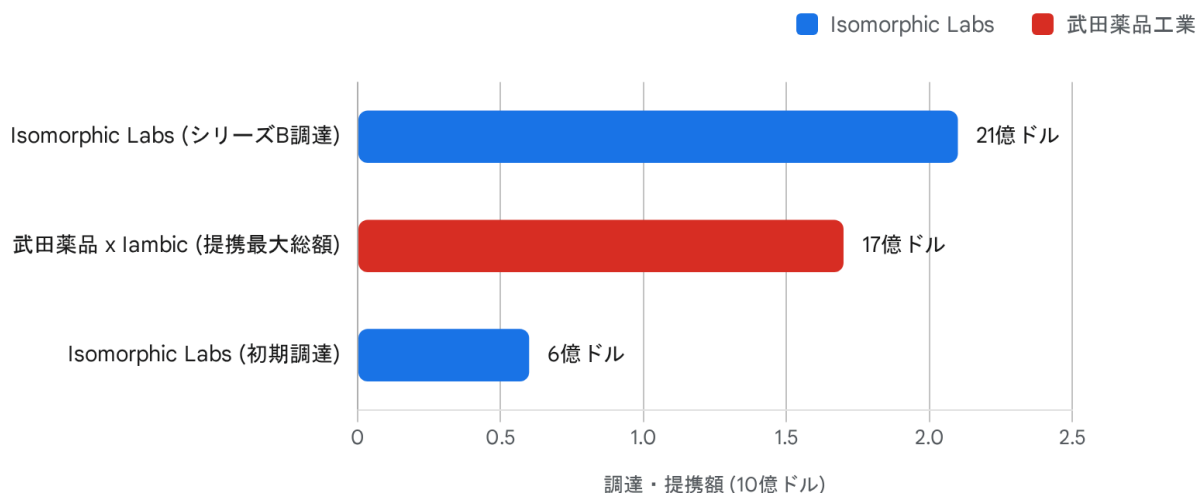
本報告書は、日本の主要製薬企業(武田薬品工業、アステラス製薬、中外製薬、第一三共など)がAI活用バイオ創薬に対してどのような投資を行い、いかなる戦略的提携を結んでいるか、その現状の全貌を体系的に解き明かす。さらに、莫大な資本が投下されているグローバルのメガ投資動向と比較することで日本の立ち位置を相対化し、現状抱える技術的・組織的・法的な課題を抽出した上で、日本の製薬企業が国際競争力を維持・強化するために目指すべき「あるべき姿」を提示する。

2. グローバル市場のコンテキスト: 巨大プラットフォームと圧倒的な資本投下

日本の製薬企業の動向を客観的に評価する前提として、グローバル市場におけるAI創薬へのマクロな投資規模とトレンドを理解することが不可欠である。現在、欧米の巨大IT企業(ビッグテック)やグローバルメガファーマは、AI創薬を次世代のヘルスケア産業の覇権を握る最重要領域と位置づけ、天文学的な規模の資本と人的リソースを投下している。AIはもはや研究開発の一部のプロセスを補助するツールではなく、新薬創出のコア・エンジンそのものになりつつある。

その象徴的な事例であり、AI創薬のポテンシャルを世界に見せつけたのが、Googleの親会社であるAlphabetが設立したAI創薬企業「Isomorphic Labs」の動向である。同社は、ノーベル賞クラスの衝撃を与えたタンパク質立体構造予測AI「AlphaFold」の最新版「AlphaFold 3」などを組み込んだ統合的なAI創薬設計エンジン(IsoDDE)の開発を推進している³。アミノ酸配列からタンパク質の三次元構造を極めて高精度に予測するこの技術は、標的タンパク質の構造解析に要していた膨大な時間とコストを劇的に削減し、インシリコ(計算機上)での化合物設計の精度を飛躍的に高めた。Isomorphic Labsに対する資本市場からの評価は桁外れである。直近のシリーズBラウンド単独で、Thrive Capitalを主導とし、Alphabet、GoogleのGV、さらにはMGX、Temasek、CapitalG、英国政府のAIファンドなどが参画し、21億ドル(日本円換算で約3,000億円超)という巨額の資金調達を実施した³。設立当初の資金調達(6億ドル)も含めると、外部からの調達総額は約27億ドルに達する³。この圧倒的な資金力は、同社がIsoDDEをグローバルにスケールさせ、自社のパイプライン(特にオンコロジーや免疫疾患領域)を臨床試験へと加速させるための強力な推進力となる³。さらに重要なのは、Isomorphic Labsが単なるテクノロジー企業に留まらず、Eli LillyやNovartisといった世界トップクラスのメガファーマと既に提携を結んでいる点である³。これらの巨大製薬企業は、自社の豊富な疾患生物学の知見と未公開の創薬標的をIsomorphic LabsのAlphaFold技術に掛け合わせることで、新規の低分子化合物の探索を急いでいる。

AI創薬領域における主要なグローバル投資および提携の規模



Isomorphic LabsのシリーズB資金調達額と、武田薬品工業によるIambic社との戦略的提携(マイルストーン等を含む最大規模)の比較。グローバルでのAI創薬エコシステムには数千億円単位の資本が流動している。

Data sources: [BioSpace](#), [Isomorphic Labs](#), [FierceBiotech](#), [BioXconomy](#), [Finance Biggo](#), [IT Business Today](#)

このようなグローバルの競争環境において、単一の製薬企業が自前主義のみでAI基盤を構築する

ことはもはや現実的ではない。したがって、日本の製薬企業にとっても、自社の強みである臨床開発力やデータセットを梃子にして、いかに優れたAI技術を持つスタートアップとアライアンスを組むか、あるいは国内の産学官エコシステムを統合して対抗軸を打ち立てるかが、中長期的なサバイバルの鍵となっている。

3. 国内主要メガファーマのAI活用・デジタル投資動向と戦略的特性

日本の大手製薬企業は、それぞれ独自のアプローチでAIおよびデジタル化への投資を加速させている。単なるソフトウェア・ツールの導入という表面的な対応を超え、組織構造、研究開発プロセス、そして人材の能力要件に至るまで、根本的なデジタルトランスフォーメーション(DX)を目指している点が共通している。以下に、主要各社の戦略的特性と具体的な投資動向を詳述する。

3.1 武田薬品工業：メガ提携とドメスティック・インキュベーションの「双眼戦略」

日本最大の製薬企業である武田薬品工業は、グローバルでの競争力を担保するための最先端AIベンチャーとの大型提携と、国内の有望なシーズ(技術の種)を育成するインキュベーションスキームの構築という、グローバルとローカルの「双眼戦略」を展開している。

グローバルな提携の象徴が、2023年に発表された米国のAI創薬ベンチャーであるIambic Therapeutics(以下、Iambic社)との戦略的提携である。この提携は、複数年にわたり、初期費用、開発・商業化に伴うマイルストーン、および売上に応じたロイヤルティを含め、最大17億ドル(約2,500億円)規模にのぼる⁷。対象となるのは主にがんや消化器疾患を標的とする新規の低分子医薬品の開発である⁸。この提携の核心は、Iambic社が保有する最先端のディープラーニングモデル「NeuralPlexer」の活用にある⁸。従来の低分子創薬では、タンパク質とリガンド(結合する分子)の複雑な相互作用パターンを解明し、高活性な化合物を設計するために、長大な時間とコストを要する実験室での作業が不可欠であった。初期の探索研究段階だけで、一つの化合物がヒトでの臨床試験に進むまでに6年以上の歳月を要することも珍しくない⁸。しかし、物理情報に基づくAIと自動化された実験ワークフローを統合することで、計算による予測とハイスループットの実験的試験のサイクル(設計・製造・試験・分析)を高速回転させることが可能となる⁸。武田薬品とIambic社は、この提携を通じて、従来6年以上かかっていたタイムラインを劇的に短縮し、「2年以内」にまで圧縮するという野心的な目標を掲げている⁸。専門家の間でも、今後数年で創薬全体のタイムラインが半減する可能性が予測されており、武田薬品のこの大型投資は、産業構造の変革期において競争優位性を確保するための積極的かつ不可欠な布石であると評価できる⁷。

一方で武田薬品は、国内の創薬エコシステム強化にもリソースを適切に配分している。2024年中頃を目処に、アステラス製薬、および三井住友銀行と共同で、合弁会社「シコニア・バイオベンチャーズ」の設立に関する基本合意を締結した⁹。この新会社の資本金は約6億円(資本準備金含む)であり、武田薬品とアステラス製薬がそれぞれ33.4%、三井住友銀行が33.2%を出資する均等に近いスキームとなっている¹⁰。拠点は、オープンイノベーションの集積地である湘南ヘルスイノベーションパーク(神奈川県藤沢市)に置かれる¹⁰。シコニア・バイオベンチャーズの目的は、日本発の革新的な医薬品創出に向けた、早期段階の創薬シーズのインキュベーションである¹⁰。大学や研究機関に眠る優れた基礎研究の成果を、単独の企業で抱え込むのではなく、ライバル企業同士が手を組み、さらにメガバンクの金融知見を融合させることで、事業化のリスクを分散しながら強固なスタートアップへと育成する。グローバルのメガプラットフォームには巨額の資金を投じて即戦力を獲得しつつ、

国内では次世代の萌芽的な技術を産学金連携で育てるという、極めて合理的でバランスの取れたポートフォリオ戦略が伺える。

3.2 アステラス製薬：計算科学と物理学ベースのシミュレーション技術への傾倒

アステラス製薬もまた、独自の計算プラットフォームを持つ新興企業との提携を通じて、創薬ターゲットの探索と化合物設計の高度化を強力に推進している。同社の戦略は、膨大なデータを学習する機械学習的アプローチに加えて、物理法則に基づく精緻なシミュレーション技術を重視している点に特徴がある。

同社は、自然言語処理やデータ解析に強みを持つFRONTEOと、標的分子探索に関する契約を締結し、自社開発のAIソリューションを活用した新たな疾患ターゲットの特定やメカニズム解明を進めている¹¹。さらに注目すべきは、最先端の計算創薬テクノロジーを有する国内ベンチャー、アリヴェクシス (Alivexis) との共同研究契約の締結である¹²。アリヴェクシスは、GPU (Graphics Processing Unit) の圧倒的な並列計算能力を利用した物理学ベースの分子動力学シミュレーション、大規模バーチャルスクリーニング・アルゴリズム、そして深層学習モデルを高度に統合した計算創薬プラットフォームを有している¹³。

この共同研究において中核となるのが、アリヴェクシスが新規に開発した技術「ModBind™」である¹²。このアルゴリズムの画期的な点は、従来のシミュレーション予測技術とは異なる理論的アプローチに基づき、化合物の薬効を高精度かつ従来法に比べて「100倍以上高速」に予測できる点にある¹³。さらに特筆すべきは、従来の手法では評価のベースラインとして不可欠であった「対照化合物」を必要としないという特性である¹³。これにより、化合物構造の微細な最適化にとどまらず、これまで機能調節の報告が一切ない、完全に未知の新規創薬標的分子に対しても、ランダムな化合物群の中から有望なヒット化合物を発見するという、極めて難易度の高いアプローチが可能となる¹³。アステラス製薬は、自社が独自に選択した新規標的に対してこの統合的な計算創薬アプローチを適用し、インシリコ(計算機上)での評価にとどまらず、複数の実験系の構築や化合物の設計・合成・評価といった統合的な創薬研究をアリヴェクシスと共同で担うことで、革新的な低分子治療薬の創出を狙っている¹²。

3.3 中外製薬：AIによる抗体創薬の先駆化とエンドツーエンドのバリューチェーン強化

ロシュグループの強力なグローバルネットワークを活用する中外製薬は、バイオ医薬品、特に複雑な構造を持つ抗体医薬品の領域で世界トップクラスの技術力を有している。同社は、その確固たる技術基盤をAIとデジタル技術でさらに昇華させる戦略をとっている¹⁴。

同社の先駆的な成果の一つが、自社開発の人工知能を用いた抗体創薬支援技術「MALEXA-LI」の構築である。このAIアルゴリズムによる機械学習の成果は、権威ある科学誌「Scientific Reports」に掲載され、同社の技術力が国際的な科学的裏付けを持つことを証明した¹⁵。抗体医薬品の設計は、低分子化合物に比べて考慮すべきパラメータが圧倒的に多く、AIによる最適化がもたらすインパクトは極めて大きい。

中外製薬のデジタル投資における最大の特長は、創薬研究という「上流」の効率化だけでなく、製造という「下流」に至るまで、バリューチェーン全体を俯瞰したエンドツーエンド (End-to-End) の投資を行っている点にある。創薬プロセスの加速に向けては、機械学習や大規模なデータ分析、アプリケーション開発のための基盤を強化すべく、システム環境を全面的にGoogle Cloudへと移行した¹⁶

。堅牢かつスケーラブルなクラウド基盤の採用は、データドリブン創薬の必須条件である。一方で、上流のプロセスがAIによって高速化され、次々と有望な開発候補物質が生み出されたとしても、それを物理的に製造・スケールアップする体制が整っていなければ、上市へのボトルネックとなる。この構造的課題を見据え、中外製薬はバイオ医薬品製造設備に対して500億円超という大規模な新規投資を決定した¹⁷。これは単なる設備の更新ではなく、「自社品の高速上市を支える生産基盤の強化」を明確な目的としている¹⁷。計算科学によって導き出された複雑なバイオ医薬品を、速やかに臨床試験、そして市場へと投入するためには、デジタル技術と連動した高度な物理的製造インフラの拡充が不可欠であるという、卓越した経営判断である。

3.4 第一三共：徹底したプロセス自動化と「全社DX人材5,000名」への変革

第一三共は、「データドリブン創薬」の実現に向けて、最も体系的かつ全社横断的なアプローチをとっている企業の一つである。同社の戦略は、「最先端ハードウェアの導入(ロボティクス)」「ソフトウェア基盤の統一」、そして何より「人材のトランスフォーメーション」という三位一体の変革である。ロボティクス技術による実験プロセスの完全自動化とデータ創出基盤：AI創薬の精度を決定づけるのは、学習に用いるデータの量と質である。従来の研究者が手作業で行う実験では、データの形式や精度にばらつきが生じやすく、AIの学習データとしては不十分なケースが多い。この課題に対し、第一三共はバイオ医薬品の研究業務をデジタル化・自動化するために「Genedata Biologics」プラットフォームを選択・導入した¹⁸。このプラットフォームの構造化データモデルは、in silicoでの多重特異性分子(複数の標的に同時に作用する次世代の高度なバイオ医薬品)の設計改善や、新薬候補品の開発可能性および製造可能性プロファイルのより良い予測など、AI/ML(機械学習)への統合的アプローチを可能にする¹⁸。

さらにハードウェア面において、同社は合成実験プロセスに最先端のロボティクス技術を導入し、大幅な自動化を図った¹⁹。これにより、24時間無人で、かつ研究者がリモート環境から合成研究を実行することが可能となった¹⁹。この技術は2023年9月から国内の自社研究施設で低分子化合物を対象に開始され、2024年4月には適用範囲を低分子以外のモダリティにも拡大し、多数のプロジェクトの推進に貢献している¹⁹。この自動化の取り組みをさらに進化させるため、2025年1月には米国カリフォルニア州サンディエゴに「スマートリサーチラボ」を設立した¹⁹。このラボでは、高機能なソフトウェアを用いた最先端ロボティクスの統合制御により、多様なモダリティに対する様々な評価・試験を自動かつ効率的に実施する¹⁹。自社開発のソフトウェア技術により、多次元的なデータを「利活用しやすいクリーンな形」で収集できる環境を整えた¹⁹。この自動化プロセスは、単に作業を効率化するだけでなく、AIを用いた次世代創薬プロセスにおいて不可欠となる「膨大かつ均質なデータの収集」を可能にする重要な戦略的基盤である¹⁹。

圧倒的スケールでの全社的DX人材育成：第一三共の戦略において最も注目すべき点は、先進技術を使いこなす「人」への投資の規模と深さである。外部から少数のデータサイエンティストを採用するだけでは真の変革は起きないという認識のもと、2025年度までに「DX人材を5,000名まで増やす」という野心的なロードマップを策定し、実行している¹⁹。

同社はDX人材を、単にIT知識があるだけでなく、ビジネスゴールを実現・変革するための「Businessスキル(コアビジネススキル、DX推進スキル)」と、テクノロジーを活用する「Techスキル(デジタルスキル、データ分析スキル)」の両方を兼ね備え、現場で実践できる人材と定義している¹⁹。その育成ロードマップは極めて実践的かつ段階的である。2022年度(FY22)には「DXマインド醸成・基礎スキル強化」をテーマに、国家試験「ITパスポート」の取得を目指す社員向けにeラーニングと受験費用の

全額補助を提供し、初年度だけで当初枠の約10倍となる2,043名が挑戦した¹⁹。続く2023年度(FY23)は「データ分析スキル強化期間」として、より難易度の高い「データサイエンティスト検定」の取得支援を開始し、約700名が応募した¹⁹。2024年度(FY24)には各組織のDX推進リーダー育成プログラムやオープンバッジ制度を導入し、最終目標である2025年度(FY25)にはすべての組織において、自律的にDXを展開・推進できる要員体制の整備を完了させる計画である¹⁹。

第一三共における全社的DX人材育成ロードマップ（～2025年度）



第一三共は2025年度までにDX人材を5,000名規模へ拡大する目標を掲げ、基礎的なITリテラシー教育から高度なデータサイエンティスト育成まで、段階的なリスキリングプログラムを展開している。

データソース: [第一三共株式会社](#)

さらに、座学だけでなく、メタバース空間での内定式開催や、メタバースを活用したアイディエーションワークショップ、VR英会話トレーニングのPoC(概念実証)など、最新技術を実際に体験させ、自発的に業務応用のアイデアを創出させるマインド醸成策も並行して実施している¹⁹。この徹底した人材投資が評価され、同社は経済産業省などから「デジタルトランスフォーメーション銘柄(DX銘柄)」に3年連続で選定されている¹⁹。ドメイン知識を持つ既存の社員をリスクリングし、「市民データサイエンティスト」としてAIを現場実装するこのアプローチは、日本の製薬業界における一つの最適解を示している。

以下の表は、各社のAI・デジタル領域における主要な投資と戦略的焦点を比較したものである。

企業名	主なAI/デジタル投資・提携事例	戦略的焦点と期待される成果
武田薬品工業	lambic Therapeutics(最大17億ドル)、合弁会社「シコニア・バイオベンチャーズ」設立	物理情報に基づくAI(NeuralPLexer)による創薬プロセスの劇的短縮(6年から2年へ)。グローバルプラットフォームへの巨額投資と、国内初期シーズの育成のハイブリッド戦略。
アステラス製薬	アリヴェクシス(ModBind™)、FRONTEOとの提携、シコニアへの出資	GPUベースの物理学シミュレーションによる新規標的の高速探索。対照化合物を不要とする革新的な計算アプローチによる新薬創出。
中外製薬	AI抗体創薬支援技術(MALEXA-LI)、Google Cloud移行、製造設備への500億円超投資	複雑な抗体創薬におけるAIアルゴリズムの自社開発。AIによる高速化された上流研究を、滞りなく市場に届けるための下流(物理的製造基盤)への大規模投資によるバリューチェーン全体のエンドツーエンド強化。
第一三共	Genedata Biologics導入、スマートリサーチラボ設立(サンディエゴ)、DX人材5000名育成	ロボティクスによる実験プロセスの24時間自動化とクリーンデータの創出。ビジネスとITの双方を理解するハイブリッドなDX人材の全社的かつ圧倒的規模でのリスクリン

		グ。
--	--	----

4. 産学官連携とオープンな創薬エコシステムの構築

AIによる創薬革命は、一企業の内部努力だけで完結するものではない。AIモデルの精度と汎用性は、学習に使用されるデータの「質」と「量」に完全に依存する。したがって、企業やアカデミアの枠を超えたデータの共有、共有された巨大なデータセットを処理するための国家レベルの計算資源の活用、そしてそれらをつなぎ合わせる「エコシステム」の構築が必要不可欠である。日本においては、産学官が連携した独自の枠組みが機能し始めている。

4.1 「富岳」を活用した世界的にも類を見ない創薬DXプラットフォーム

日本の大きな強みの一つは、国家プロジェクトとして整備された世界トップクラスの計算資源の存在である。理化学研究所計算科学研究センター(R-CCS)は、京都大学、医薬基盤・健康・栄養研究所(NIBIOHN)、そして多数の企業が参画するライフインテリジェンスコンソーシアム(LINC)と協働し、スーパーコンピュータ「富岳」に世界初となる創薬DX(デジタルトランスフォーメーション)プラットフォームを実装するプロジェクトに本格的に取り組んでいる²⁰。

この産学連携コンソーシアム「LINC」の活動は多岐にわたる。臨床情報を活用したデータ駆動的な創薬標的探索をはじめ、健康・栄養分野におけるAI・情報解析技術の展開、医療・ヘルスケア領域における疾患発症予測AIの開発など、基礎研究から臨床応用までをカバーしている²⁰。一企業では到底保有し得ないスーパーコンピュータの圧倒的な計算能力をエコシステム全体の共通インフラとして提供することで、AIの学習や複雑な分子動力学シミュレーションの計算時間を劇的に短縮する。「富岳」を機軸とした創薬DXプラットフォームの構築」は、国のSociety 5.0推進利用課題にも採択され、高い評価と期待を集めている²¹。

4.2 企業間データのオープンイノベーション：究極の社外秘の共有

AI創薬における最大のボトルネックの一つが、各製薬企業が過去の研究で蓄積してきた「失敗データを含む膨大な化合物情報」が社外秘としてサイロ化(孤立)していることである。この壁を打破する画期的なブレイクスルーが日本で生まれている。

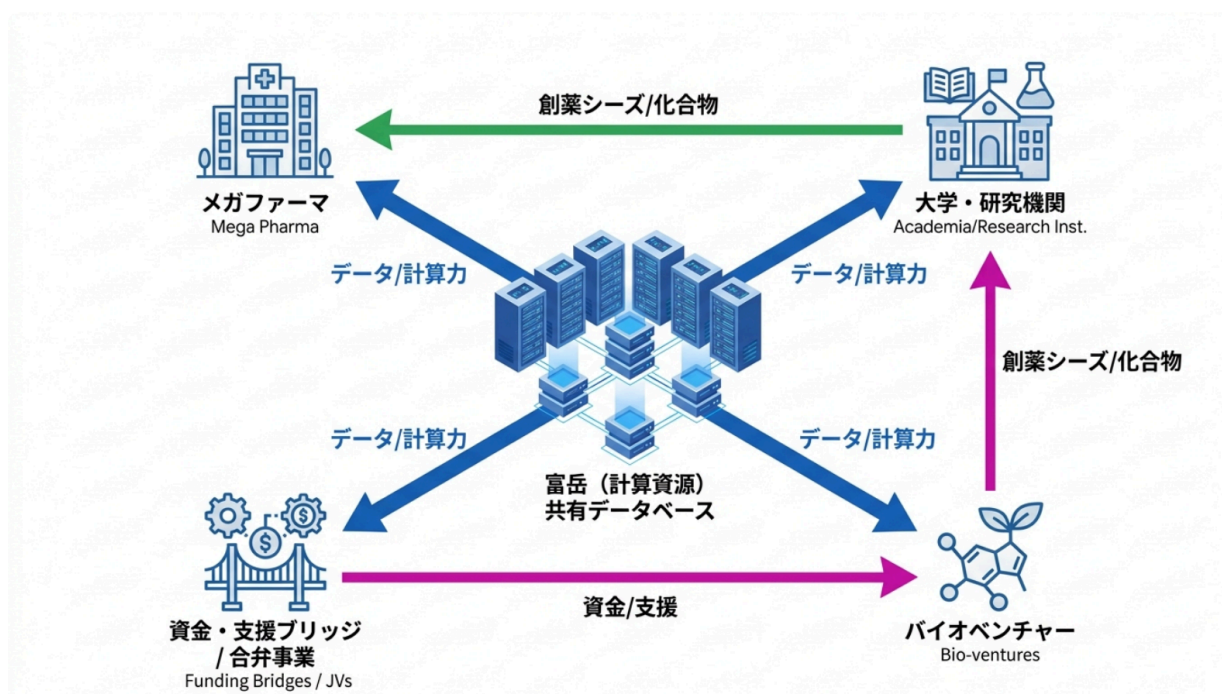
理化学研究所と医薬基盤・健康・栄養研究所を中心とするコンソーシアムは、複数企業の社内データを産学で共有して新薬創出を加速する「革新的な枠組み」の構築に成功した²²。これまで製薬企業にとって、化合物情報やスクリーニングデータは「門外不出の重要な知的財産」であった。しかし、このコンソーシアムでは、各社から提供されたデータを高度なセキュリティ環境下で統合・学習させ、高精度なAI予測モデルを構築した。さらに、その予測モデルを富士通株式会社にライセンス供与することにより、「基本版」創薬支援プラットフォーム(iD3-INST等)として、エコシステムを長期的に維持するためのビジネスモデルまでを確立した²²。この成果は、製薬企業の機密データを産学連携において共有・活用する世界的にも先進的な成功事例であり、クローズドな自前主義から、国内での医薬品創出のためのオープンイノベーションへの移行を強く後押しするものである²²。

4.3 バイオベンチャー支援スキームの多様化と資金の還流

優れた基礎研究の成果(シーズ)を事業化するためには、資金とサイエンスの両面からの継続的な

支援が不可欠である。この領域でも新たなプレイヤーがエコシステム形成に寄与している。AI創薬支援サービスを展開する株式会社FRONTEOは、新たな非連続的收益獲得モデルとして、有望なバイオベンチャーを対象とした共同創薬エコシステム事業「DDAIF Innovation Bridge」を開始した²³。一般的にバイオベンチャーは、継続的な創薬パイプラインの創出と付加価値向上のための「技術的課題」と、研究開発を推進するための「資金調達課題」という2つの大きな死の谷(デス・バレー)に直面する²³。FRONTEOのこの新事業は、大手製薬会社との共創やアカデミアとの協業といった従来のビジネスモデルから一歩踏み込み、有力なスタートアップに対して同社のAI技術によるサイエンス面の支援を提供し、必要に応じて資金面での支援も行うという独自のアプローチである²³。

日本における次世代創薬エコシステムの構造（産学官・ベンチャー連携）



国家の計算資源（富岳）、セキュアな企業間データ共有プラットフォーム、そして資金とサイエンスの支援ループ（DDAIF等）が統合されることで、オープンイノベーション型の創薬基盤が構築されつつある。

メガファーマによるシコニア・バイオベンチャーズの設立や、FRONTEOのような支援事業の拡大は、機動力の高いスタートアップを創薬エコシステムに効果的に組み込み、イノベーションのサイクルを加速させる基盤となりつつある。

5. AI活用バイオ創薬における社会実装への構造的課題

AI創薬がもたらすメリットと将来性は計り知れないが、その社会実装と産業化の過程には、日本の製薬業界全体が直視し、克服すべき複数の重大なハードルが存在する²⁴。技術の導入だけでは解決しない、構造的かつ法的な課題である。

5.1 データの質と量、およびデータプライバシーの確保

AI、特に機械学習アルゴリズムの予測精度は、学習に用いるデータの「量」だけでなく「質」に強く依存する。日本企業は、世界中にネットワークを持つグローバルの巨大プラットフォームやメガファーマと比較して、アクセスできる多様な人種や遺伝的背景を持つグローバルな臨床データセットの総量において劣後するリスクを常に抱えている。また、各研究機関や企業に点在するデータのフォーマットが不統一であり、AIが即座に読み込んで処理できる「機械可読性(Machine Readability)」が担保されたクリーンなデータの整備が急務である²⁴。さらに深刻なのがプライバシーの問題である。バイオ創薬、特にゲノム情報を活用した個別化医療に向けた研究において、患者の臨床情報や遺伝情報は究極の個人情報である。これを保護しつつ、研究目的でいかに利活用するかというバランスを法的にどう担保するかは、データプライバシーの観点から極めて慎重な議論が求められる課題である²⁴。

5.2 AIモデルの透明性と解釈性(ブラックボックス問題)

深層学習(ディープラーニング)に基づくAIモデルが、特定の化合物を「有望である」あるいは「毒性がない」と推論した際、その判断根拠を人間が論理的に追跡・説明できない「ブラックボックス化」の問題が存在する²⁴。自動運転や金融取引におけるエラーも重大だが、直接人間の生命に関わる医薬品の開発においては、このブラックボックス性は決定的な障壁となり得る。規制当局(日本のPMDAや米国のFDAなど)に対して、新薬の安全性と有効性の根拠を科学的に説明する際、AIの出力結果だけでは承認を得ることは不可能である²⁴。したがって、「Explainable AI(説明可能なAI: XAI)」の技術を創薬プロセスに組み込むか、あるいはAIの予測結果をウェットラボ(生物・化学実験)で迅速かつ確実に検証し、物理的なエビデンスとして証明するサイクルの確立が不可欠である。

5.3 法的小および倫理的課題の未整備

AIが自律的に設計した全く新しい化合物や、AIが大規模データ解析から発見した新規疾患ターゲットについて、その「知的財産権(特許)」は誰に帰属するのかという法的な問題は、現在進行形で議論されている最大のグレーゾーンである²⁴。AIというアルゴリズムそのものを発明者と認めることは現行法では困難であり、アルゴリズムの提供者(AIベンチャー)なのか、学習データの提供者(製薬企業や病院)なのか、あるいは計算資源の提供者なのか、権利関係の整理が国際的にも不十分な状態にある。この不確実性が払拭されなければ、企業は安心して大規模な投資や提携に踏み切ることができない。

5.4 専門人材の圧倒的枯渇とハイブリッド人材の要請

AI創薬の現場では、単にPythonが書けるプログラマーや、一般的な統計処理ができるデータサイエンティストでは全く機能しない。対象が生命現象である以上、生物学、化学、薬学、臨床医学といった深い「ドメイン知識」を持ちながら、同時に最先端の機械学習理論や計算科学を自在に操ることができる「ハイブリッドな専門人材」が求められる²⁴。しかし、このような高度な専門性を併せ持つ人材は世界中で争奪戦となっており、極めて枯渇しているのが現状である。第一三共が行っているような、自社のビジネスドメインに精通した社員をデータサイエンティストにリスキリングする大規模な取り組みは、この深刻な課題に対する最も現実的かつ有効な対抗策と言える¹⁹。

5.5 国家レベルでの持続的な資金拠出と制度的バックアップ

日本製薬工業協会(製薬協)が過去の政策提言において「テクノロジー新時代のイノベーション創出に向けた環境整備」を掲げている通り、一企業の努力を超えた領域には政府の強力な支援が不可欠である²⁵。例えば、がんゲノム医療推進コンソーシアムにおける臨床情報やゲノム情報の集約・利活用の推進は、国家レベルのインフラ構築事業である²⁵。製薬協は、AMED(日本医療研究開発機構)に基金を創設し、政府予算を投入することで、数年に渡って機動的に使用できる予算の手当てや拡充、運営費交付金の増額などを提言している²⁵。モダリティの進化や創薬効率化AIの共同開発、最先端設備の共同活用といったエコシステム基盤は公共財としての性質を持つため、政府のコミットメントなしには成立し得ない。

6. 日本の製薬企業が目指すべき「あるべき姿(Future State)」と未来戦略

上述した現状の投資動向と山積する課題を統合的に分析した結果、日本の製薬企業が国際競争力を維持・強化するために中長期的に目指すべき「あるべき姿」は、以下の3つの戦略的柱に集約される。

6.1 「クローズドな自前主義」からの完全脱却とデータ共有のデファクト化

かつての製薬産業の成功モデルは、自社の巨大な研究所内にすべてのリソースとデータを抱え込む「クローズド・イノベーション」であった。しかし、データドリブンなAI時代においては、一企業が保有する限られたデータのみを学習させたAIモデルでは、広大な化学空間・生物空間の探索において早期に限界(オーバーフィッティングや汎用性の欠如)を迎える。理化学研究所のコンソーシアムが実証したような「企業間データのセキュアな共有と利活用」の枠組み²²を、一部の実験的なプロジェクトに留めるのではなく、日本の製薬業界全体の「デファクトスタンダード(事実上の標準)」へと昇華させるべきである。競合他社であっても、基礎的なスクリーニングデータや毒性データなどの非競争領域については基盤を共有し、無駄な重複投資を徹底的に排除する。各社は、「共有基盤から得られたAIの出力結果を、自社の強み(特定のモダリティ技術や臨床開発ノウハウ)といかに掛け合わせ、独自の治療薬として完成させるか」という本来の競争領域にリソースを集中させるべきである。

6.2 「インシリコ(計算機)」と「ウェット(実験)」の高度な自律的融合(DMTAサイクルの極限化)

計算科学とAIの予測精度がどれほど向上しようとも、最終的には物理空間での化合物の合成と、生体を用いた生物学的評価(ウェット実験)による科学的な実証が不可欠である。「あるべき姿」とは、AIが単独で存在するのではなく、AIによる仮説生成と、ロボティクスによる自動検証がシームレスに連携・循環するシステムである。第一三共が推進している「最先端ロボティクス技術による合成実験プロセスの自動化」や、米国サンディエゴの「スマートリサーチラボ」の取り組みは、まさにこの未来像を具現化するものである¹⁹。AIが最適と判断して設計した化合物を、自動化ラボが人間の介入なしに即座に合成・評価し、その成否(ポジティブ・ネガティブ双方のデータ)を再びAIの学習データとしてリアルタイムにフィードバックする。この「Design(設計)- Make(合成)- Test(評価)- Analyze(分析)」のDMTAサイクルから、ヒューマンエラーや時間的ロスを極限まで排除し、超高速で回転させる「自律的駆動型ラボ」の構築こそが重要である。中外製薬が行ったバイオ医薬品製造設備への500億円超の投資¹⁷も、この高速化された上流のサイクルが生み出す成果を、下流の製造段階で滞留させないための必須のアプローチとして位置づけられる。

6.3 長期リスク資本の投下と、国内エコシステムへの「知と資金の還流メカニズム」

武田薬品がIambic社に対して最大17億ドルという巨額の投資を行ったように⁷、グローバルトップの技術を獲得するためには、リスクを恐れず果敢に資本を投下する姿勢が不可欠である。しかし同時に、その果実を日本国内に還流させるメカニズムがなければ、国内産業は空洞化する。日本の大学や公的研究機関には、世界をリードする基礎研究のシード(技術の種)が依然として多数眠っている。メガファーマは単に自社のパイプライン拡充のみを追求するのではなく、シコニア・バイオベンチャーズ(武田、アステラス、三井住友銀行による合弁)¹⁰や、FRONTEOが展開する「DDAIF Innovation Bridge」²³のようなインキュベーションの枠組みをさらに拡大し、エコシステム全体を潤す「触媒」として機能すべきである。金融機関やAIテクノロジー企業と連携しながら、国内のシードを「バイオベンチャー」として独立させ、資金と経営ノウハウを提供して育成し、成功したあかつきにはM&Aやライセンスインによって自社のビジネスに取り込む。このような、シリコンバレーに代表される「知と資金の循環エコシステム」を日本国内の風土に合わせて定着させることが、持続可能な創薬基盤の確立に繋がる。

7. 結論

日本の製薬企業は、パラダイムシフトの荒波の中で、「AI活用のバイオ創薬」への投資戦略において極めて重要な転換点を迎えている。週刊エコノミストのレポートが警鐘を鳴らすように、投資の軸足を従来型の低分子探索から、AI駆動型のバイオモダリティへと移すことは、もはや選択肢の一つではなく、グローバル市場での生存に向けた絶対的な必須条件である¹。

本報告書での分析が示す通り、国内の主要プレイヤーは既に力強い一歩を踏み出している。武田薬品工業はグローバルのAIメガプラットフォーマーとの数千億円規模の提携を通じてプロセスの劇的な短縮を図り⁷、アステラス製薬は対照化合物を不要とする革新的な計算シミュレーション技術の社会実装を進めている¹³。中外製薬はAIを用いた抗体創薬からその大規模な製造インフラに至るまでのバリューチェーン全体を底上げし¹⁵、第一三共はロボティクスによる実験の自動化と、5,000名規模の全社的なDX人材育成という、最も本質的なトランスフォーメーションに取り組んでいる¹⁹。さらに、「富岳」を活用したコンソーシアム²⁰や、企業間で門外不出のデータを共有する画期的なプラットフォームの構築²²など、産学官連携によるインフラ整備も着実に進展している。

しかしながら、未来への道筋は平坦ではない。AIの学習精度を左右するデータの量と質、データプライバシーの確保、規制当局との対話において壁となるAIのブラックボックス問題、特許等の法的・倫理的未整備、そして何より生命科学とデータサイエンスの双方を理解するハイブリッド人材の決定的な不足といった、複雑な構造的課題が山積している²⁴。

これらの課題を克服し、日本が再び世界の創薬イノベーションを牽引するための「あるべき姿」は明確である。すなわち、一企業の枠を超えたデータ共有基盤のデファクト化による非競争領域の効率化、計算科学(インシリコ)とロボティクス実験(ウェット)がシームレスに連動する自律的DMTAサイクルの確立、そして、持続的なリスクマネーの供給を通じて国内の基礎研究シーズを新興企業として育成し、産業全体に還流させる強固なエコシステムの構築である。日本の製薬企業が、伝統的なモノづくりや緻密なプロセス改善のDNAを失うことなく、最先端のデジタル技術とAIをその中核に据え直すことができれば、グローバルのメガファーマとも互角に渡り合える、強靱かつ革新的な次世代の創薬基盤を築き上げることは十分に可能である。

引用文献

1. エコノミストリポート, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://weekly-economist.mainichi.jp/%E3%82%A8%E3%82%B3%E3%83%8E%E3%83%9F%E3%82%B9%E3%83%88%E3%83%AA%E3%83%9D%E3%83%BC%E3%83%88/>
2. エコノミストリポート: 日本の製薬企業はAI活用のバイオ創薬へ投資の軸足を移せ 坂巻弘之, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://weekly-economist.mainichi.jp/articles/20260630/se1/00m/020/028000c>
3. Alphabet's AI biotech Isomorphic Labs bags \$2.1B series B to fuel next-gen drug design model, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://www.fiercebiotech.com/biotech/alphabets-ai-biotech-isomorphic-labs-bags-21b-series-b-fuel-next-gen-drug-design-model>
4. Isomorphic Labs secures \$2.1 Billion funding to scale its AI drug design engine - BioSpace, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://www.biospace.com/press-releases/isomorphic-labs-secures-2-1-billion-funding-to-scale-its-ai-drug-design-engine>
5. Isomorphic Labs announces Series B investment round, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://www.isomorphiclabs.com/articles/isomorphic-labs-announces-series-b-investment-round>
6. Isomorphic Labs lands \$1.2bn fund to advance AI drug design model - BioXconomy, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://www.bioxconomy.com/investment/isomorphic-labs-lands-1-2bn-fund-to-advance-ai-drug-design-model>
7. 武田薬品、AI創薬で米Iambicと最大17億ドル規模の大型提携 がん・消化器疾患の新薬開発加速へ - BigGo ファイナンス, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://finance.biggo.jp/news/GCWyQpwB-7d8eoRmguH1>
8. 武田薬品、AIを活用した創薬に\$17億円超を投資 イアンビック社との大型提携について, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://itbusinesstoday.com/ja/health-tech/biotech/takeda-commits-over-1-7-billion-to-ai-driven-drug-discovery-in-major-partnership-with-iambic/>
9. 日本の創薬エコシステムの革新に挑む。武田薬品×アステラス×三井 ..., 6月 16, 2026にアクセス、
https://www.smfg.co.jp/dx_link/article/0184.html
10. 武田薬品、アステラス製薬、三井住友銀行 創薬シーズのインキュベーションを行う合弁会社設立の基本合意締結に関するお知らせ, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://jp.newsroom.astellas.com/2024-04-22>
11. FRONTEOとアステラス製薬、標的分子探索に関する契約を締結, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://www.fronteo.com/news/pr/20260416>
12. アリヴェクシス、アステラス製薬と新規の創薬標的についての共同研究を開始 - PR TIMES, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://prt看imes.jp/main/html/rd/p/000000021.000035986.html>
13. アリヴェクシス、アステラス製薬と新規の創薬標的についての共同研究を開始 - Alivexis, Inc., 6月 16, 2026にアクセス、
https://alivexis.com/ja/press_release/%E3%82%A2%E3%83%AA%E3%83%B4%E3%82%A7%E3%82%AF%E3%82%B7%E3%82%B9%E3%80%81%E3%82%A2%E3%8

[2%B9%E3%83%86%E3%83%A9%E3%82%B9%E8%A3%BD%E8%96%AC%E3%81%A8%E6%96%B0%E8%A6%8F%E3%81%AE%E5%89%B5%E8%96%AC%E6%A8%99](https://www.chugai-pharm.co.jp/story/detail/20250817000009_58.html)
[/](https://www.chugai-pharm.co.jp/story/detail/20250817000009_58.html)

14. デジタル技術で創薬のフロンティアに挑む。AIと計算化学が拓く医薬品開発の新時代 - 中外製薬, 6月 16, 2026にアクセス、
https://www.chugai-pharm.co.jp/story/detail/20250817000009_58.html
15. 中外製薬の人工知能(AI)を用いた抗体創薬支援技術 MALEXA-LIの成果がScientific Reportsに掲載, 6月 16, 2026にアクセス、
https://www.chugai-pharm.co.jp/news/detail/20210322150001_1087.html
16. 中外製薬: AIなどを活用し、創薬プロセス加速に向けた機械学習やデータ分析 - Google Cloud, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://cloud.google.com/blog/ja/topics/customers/chugai-pharm-shifting-to-the-cloud-leveraging-ai>
17. 2023年05月30日 | バイオ医薬品製造設備に500億円超の新規投資を決定 自社品の高速上市を支える生産基盤を強化 - 中外製薬, 6月 16, 2026にアクセス、
https://www.chugai-pharm.co.jp/news/detail/20230530170001_1301.html
18. Genedata Biologicsを第一三共に提供: 新たなバイオ医薬品の創薬を自動化, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://www.genedata.com/jp/company/news/details/press-release/daiichi-sankyo-automates-biological-therapeutics-discovery>
19. DX - データと先進デジタル技術の活用 - 第一三共について, 6月 16, 2026にアクセス、
https://www.daiichisankyo.co.jp/about_us/dx/
20. 医療・創薬・ヘルスケアにおけるDX - LINCの紹介と兵庫県、神戸市企業との連携に向けて, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://www.r-ccs.riken.jp/outreach/events/20221114-1/>
21. 成果PUBLICATIONS - ライフ インテリジェンス コンソーシアム (Life Intelligence Consortium; LINC), 6月 16, 2026にアクセス、
http://linc-ai.jp/publications/index_2.html
22. 複数企業の社内データを産学で共有して新薬創出を加速する革新的な枠組みの構築に成功, 6月 16, 2026にアクセス、
https://www.riken.jp/press/2021/20210308_2/index.html
23. FRONTEO、AI創薬支援サービス「DDAIF」でサイエンス支援 日本の創薬力強化をはかり、バイオベンチャーと共同創薬エコシステム事業「DDAIF Innovation Bridge」開始 - PR TIMES, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://prt看imes.jp/main/html/rd/p/000000697.0000006776.html>
24. AIの活用による創薬の進歩 | 今後への課題や成功事例を紹介 - JOSAI LAB, 6月 16, 2026にアクセス、
https://www.josai.ac.jp/josai_lab/1375/
25. 革新的医薬品の創出に向けて, 6月 16, 2026にアクセス、
<https://www.mhlw.go.jp/content/10807000/000510898.pdf>