

エンベダ社のAI創薬プロセスと業界動向

1. エンベダ社の創薬プロセスの詳細

- ・**自然由来化合物の探索・特定方法:** エンベダ社 (Enveda Biosciences) は、古来から薬効が知られる膨大な植物を出発点に、新薬シーズを探索しています。同社はまず人類史で薬用に使われてきた約3万8千種の植物リストを収集し、有効性が各地で繰り返し記録された約1万2千種に絞り込みました¹。これら植物サンプルを先端設備で「微小な成分」にまで分解し（代謝産物や化合物単位まで分析）、その化学断片データを独自のAIプログラムに入力します¹²。AIは各植物の有用な薬効をもたらす候補分子がどれかを見極め、最も有望な化合物を絞り込みます。その後、選ばれた分子は従来型の実験（実験室での活性評価や安全性試験）にかけられ、活性の強さ（力価）や安全性（毒性・忍容性）などを改善しつつ創薬候補へと仕上げていきます²。この一連の流れにより、「自然から薬棚へ」至る長い探索過程を劇的に短縮することを目指しています³⁴。実際、コロラド州の自社倉庫には選抜された約1万2千種もの植物サンプルが保管されており、エンベダ社は今後これらから得られるヒット化合物によりパイプラインを数倍規模に拡充できると述べています⁵。「古来の叡智と自然の化学力をAIで組み合わせている。我々は巨人である母なる自然の肩の上に立っているのだ」と同社CEOのヴィスワ・コルル氏は語っています⁶。
- ・**使用されるAIモデルの特徴:** エンベダ社の強みは、自然由来分子を同定・解析するために特化した先進的なAIモデルにあります。同社はMicrosoftと提携して大規模な計算資源を活用し、**PRISM**と呼ぶ独自の**基盤モデル (foundation model)** を構築しました⁷⁸。PRISMは世界最大規模の実験データセットである「10億以上の未分類質量スペクトル (mass spectra)」で事前学習されており、質量分析データを高度に理解・解釈できるのが特徴です⁸。いわば化学の言語を読むモデルであり、与えられた質量スペクトルから未知化合物の構造や性質を**デノボ予測 (翻訳)** する能力を持ちます⁹。この生成AIモデルにより、これまで解析が難しかった天然物混合物から個々の成分構造を推定したり、見出した分子の薬理特性を予測したりすることが可能になりました¹⁰。エンベダ社は他にも生命科学向けに最適化したAIアルゴリズムを開発しており、自然界の「化学言語」を一括して読み解くプラットフォームを構築しています¹¹。これらのAIモデル群は従来は個別にしか拾えなかった生命の化学情報を同時並行的に解析することを可能とし、未知の有望分子を発見するスピードと網羅性で飛躍的な向上を実現しています¹¹¹²。
- ・**独自のデータベースとスクリーニング技術:** エンベダ社は「生命のライブラリ」とも称すべき独自データベースを構築しています¹³。まず、世界中の伝統医療・民間療法に関する**最大規模の薬用植物利用データベース**を編纂し、各文化圏で共通して利用される有用植物とその適応症の知見を統合しました¹⁴。次に、それらの植物について現代の薬理データ（例えば含有成分や既知の作用機序）と照合し、AIが探索すべき**優先度の高い植物-疾患ペア**を特定しています¹⁴。「古来の知恵」と「現代科学データ」の融合により、闇雲な探索ではなく当たりをつけたうえで大量スクリーニングを行う点が特徴です¹⁵。実際、エンベダ社のプラットフォームはこのデータ基盤の上に、大量の質量分析・メタボロミクス解析を高スループットで実施できる実験設備群（自動抽出・分析機器）を備えており、得られたスペクトル情報は前述のAIモデルPRISMで解析されます⁸。この一連のスクリーニング技術により「**セレンディピティ (幸運な偶然) に頼っていた天然物創薬を体系化する**」ことに成功したと同社は述べています¹⁶。かつて天然物薬の探索では「土から薬を見出す試行錯誤」に膨大な時間と失敗が伴いましたが、エンベダ社のCTOであるジャスティン・ホルジンガー氏によれば、現在ではハイテク設備とAIによってそのハードルを機会に変えられるといいます¹⁷。なお、こうした技術力や実績が評価され、同社は2025年にシリーズD調達で1.5億ドルを獲得して企業評価額が10億ドルを超えユニコーン企業となりました¹⁸³。また同時期にファイザー社で15年以上研究開発を

率いた元R&D責任者ミカエル・ドルステン氏が取締役に加わるなど、従来の製薬リーダーからも期待を集めています¹⁷。エンベダ社は2019年の創業からわずか数年で初の開発候補（経口抗炎症薬 ENV-294）を臨床試験に進めており¹⁸、まさに「**自然の薬箱を現代科学で掘り起こす**」先駆的企業と言えます。

2. 他のAI創薬企業との比較

AI創薬分野では多様なアプローチを取る企業が乱立していますが、エンベダ社のように「**自然由来化合物×AI**」を掲げる企業はユニークな存在です。他の代表的なバイオテクノロジー企業（InsitroやRecursion、Valoなど）は、それぞれ異なるデータソースや技術で創薬プロセスの革新に挑んでいます。以下に各社の戦略とエンベダ社との違いを比較します。

- ・**エンベダ社 (Enveda Biosciences):** 上述の通り**天然物化学**に焦点を当て、伝統医学の知見と最先端AIを融合したプラットフォームを構築しています。世界最大級の薬用植物データと質量分析スペクトルから有望分子を発見する戦略で、「**自然界の化学コードを解読する**」ことがミッションです¹⁸。2025年にはシリーズDでユニコーン入りし、初のAI創薬分子を臨床試験開始（例：アトピー性皮膚炎/喘息向け経口抗炎症薬）するなど、プラットフォームの成果が具体化しています¹⁸。大手製薬のサノフィからも出資を受け、共同研究体制を築くなど業界の注目度も高いです¹⁹。
- ・**インシトロ (Insitro):** **患者由来データ×機械学習**に強みを持つ企業です。iPS細胞や組織モデルを用いて大量のゲノム・細胞表現型データを生成し、それらをAIで解析することで疾患の新規治療標的を発見します²⁰。アプローチ領域は中枢神経疾患や代謝疾患などで、創業直後からGilead社とNASH（非アルコール性脂肪肝炎）の創薬提携、BMS社とALS（筋萎縮性側索硬化症）の提携を結びました²¹。特にALSプロジェクトでは2022年末に機械学習で同定した初の新規標的についてマイルストーン達成（金銭支払い受領）を報告しています²²。2023年にはEli Lilly社ともメタボリック疾患で提携し、インシトロのプラットフォームが見出した複数の創薬標的について抗体薬の共同開発に乗り出しています²³。資金面でも2021年にシリーズCで4億ドルを調達するなど潤沢で²⁴、「**疾患のモデル化とビッグデータ解析**」で創薬効率を高める戦略が特徴です。エンベダ社との違いは、インシトロは化合物そのものよりもまず創薬標的（治療ターゲット）の発見に主眼があり、自然物ではなくヒト細胞ベースの実験データをAI学習させる点です。
- ・**リカーション (Recursion Pharmaceuticals):** **フェノタイプ（表現型）創薬×AI**のパイオニアです。自動培養した細胞に数十万種の化合物や遺伝子操作を行い、その**細胞画像をAIで解析**するプラットフォーム「Recursion OS」を構築しています²⁵。これにより、膨大な組み合わせの実験から未知の作用機序や薬効パターンを発掘し、一つの試験系で多数の疾患モデルを探索可能にしました。近年では生成モデルの導入や創薬化学分野への拡大も進め、社内外の化合物データや患者データを含む**世界最大級の生物・化学データセット**を駆使して新薬開発を行っています²⁵。2024年には英国発のAI創薬企業Exscientia（エクスシェンシア）との大型合併を発表し、一社で**臨床段階の開発候補を10件以上**抱える業界最大級のAI創薬企業が誕生しました²⁶。この合併によりRecursionはExscientiaが持つ創薬パイプライン（免疫・腫瘍領域の臨床候補）やAI分子設計技術を取り込み、総額10件以上の臨床試験読み出しを18か月以内に控えるとされています²⁶。提携面でも単独時代からバイエル（Bayer）とはバイオマテリアル領域、ロシュ傘下のGenentechとは中枢神経疾患などで協業し、Exscientia側もサノフィやメルクと契約を持っていたため、合併後は多数の**ビッグファーマとの連携網**を有しています²⁷。特徴としては「**自社で大規模創薬OSを築きつつ、戦略的提携とM&Aで技術とパイプラインを拡充**」している点で、エンベダ社の天然物志向とは対照的に、テクノロジー主導で広範な疾患に挑む姿勢が際立ちます。既に臨床第II相で中枢性血管疾患(CCM)向け経口薬REC-994が安全性主要評価項目を達成するなど一定の成果も報告しており²⁸、AI創薬企業の中でも進捗が早い部類です。

・**Valo Health:** 実世界の患者データ×AIによる統合的な創薬プラットフォームを標榜する企業です。Flagship Pioneeringから生まれ、患者の臨床データや多層オミクス（ゲノム、プロテオーム等）の大量データをOpalと呼ぶコンピューショナル基盤に集約し、人間中心のモデルで創薬ターゲット同定から治療薬設計までをデジタルに行います²⁹。AIで疾患関連遺伝子や経路を抽出・検証し、それに対する創薬（主に低分子薬）を素早くデザイン・評価する「デジタルドラッグ開発エンジン」が特徴です²⁹。Valoは自社開発だけでなく大手との共同研究にも積極的で、2023年にデンマークのノボノルディスク社と**最大11件の心血管・代謝疾患向け新薬を共同開発**する契約を締結、2025年にはこれを拡大し**最大20件の創薬プログラム**に及ぶ大型提携に発展しました³⁰。その契約総額はマイルストーン含め最大46億ドル規模と報じられています³¹。また創薬受託大手のCharles River社とは「Logica」というAI創薬ソリューションを共同提供し、製薬企業に対してプレクラウド上でターゲット発見から前臨床候補最適化まで行うサービスも開始しました（2022年発表）³²³³。Valo自体は2021年にSPAC上場で評価額約28億ドルを目指しましたが市況悪化で延期するなど、単独資金調達には苦戦しました。しかしFlagshipの支援や上述の大型提携を通じて開発資金を確保し、現在も多数の前臨床候補を擁しています。エンベダ社との違いは、Valoが「**人（患者）由来のビッグデータ**」を起点に新薬候補を設計する点で、天然物ライブラリではなく電子カルテやバイオバンク情報から得られる洞察にAIを適用するアプローチです。すなわち、より**臨床現場に近いデータ**で創薬リスクを下げようとする戦略と言えます。

以上の企業比較を表にまとめると次のようになります。

【AI創薬企業の比較表】

企業名	アプローチの特徴	主な成果・提携等
エンベダ (Enveda)	天然物ライブラリ × AI。伝統医療データで植物を選別、高度質量分析AI（PRISM）で有望分子を同定 ¹ ⁸ 。 独自の「生命のライブラリ」データベースを構築。	初のAI発掘薬候補が臨床入り（2025年） ¹⁸ 。得 ¹⁹ 。2025年シリーズDで評価額10億ドル超の
インシトロ (Insitro)	患者細胞モデル × 機械学習。iPS細胞等で大量の疾患データを生成し、MLで創薬標的を発見 ²⁰ 。 疾患領域は中枢神経・代謝など。	Gilead・BMS・Lillyと提携多数。NASHやALSでを共同推進 ²¹ 。2022年ALSプロジェクトで新薬達成 ²² 。シリーズCで約4億ドル調達 ²⁴ 。
リカーション (Recursion)	ハイコンテンツ表現型スクリーニング × AI。自動実験＋画像解析AIで巨大データ構築 ²⁵ 。 生成モデル導入や大規模提携・買収でプラットフォーム強化。	Exscientia社と合併し業界最大手に（'24） ²⁶ と提携し複数の臨床候補を開発 ²⁷ 。REC-994が成 ²⁸ 。
Valo (Valo Health)	実世界患者データ × AI。電子カルテ等の実データからOpalプラットフォームで標的発見 ²⁹ 。 マルチオミクス解析と計算創薬を統合。	Novo Nordiskと最大20創薬プログラム契約（'21、後に延期）。 ドル規模 ³¹ 。Charles Riverと「Logica」創薬上場計画を発表（'21、後に延期）。

(注記: 資料に基づき各社の公表内容を要約。)

3. AI創薬業界全体のトレンドと課題

・**成功率と臨床移行の難しさ:** 製薬業界における基本的課題として、新薬候補の**成功率の低さ**と**開発の長期間**はAI時代になっても依然として大きな壁です。一般に創薬は初期アイデアから承認まで10年前後かかり、「**画期的な新薬候補の大半は道半ばで失敗する**」といわれます³⁵。AI創薬各社も多数の候補を輩出し始めていますが、2025年現在でAIが見出した化合物が最終承認に至った例はまだなく、特

に人での有効性を証明する後期臨床試験（第II相・第III相）のハードルが高い点に変わりありません。また、AIが予測した標的が実際に「創薬可能（druggable）」かどうか、AI設計分子がヒトで期待通り安全かつ有効か、といった点は最終的には臨床試験で検証するしかなく、成功には運や資金も必要です。このため一部ではAI創薬ブームに対する冷静な見方もあり、短期的な過度の期待は禁物とされています。ただし「効率化」の面では顕著な進展が見られます。AIと自動化を駆使することで、前臨床から初期臨床までの所要時間を大幅短縮できる可能性が示されています。例えばRecursion社は従来3.5年（42か月）かかる候補化合物の創出～臨床入りを**18か月**で達成したと報告しており、業界平均と比べて半分以下の期間で候補物質を創出し得ると主張しています³⁶。専門家も「今後3～5年でAI活用と動物実験削減によってコストと期間を少なくとも半減できる」と予測しており³⁷、効率面の成果には一定の手応えがあります。

- ・**資金調達環境と業界再編：** AI創薬企業への投資トレンドは、2021年前後のピークを経て選別が厳しくなりつつあります。バイオテック全体では2023～2024年にかけてベンチャー資金の調達が落ち込み、2025年第2四半期のバイオ企業向け投資額は前期比30%以上減少する苦境も報告されています³⁸。こうした資金難の中で、**AI技術への期待が比較的資金を呼び込みやすい**傾向が見られました。実際、エンベダ社がシリーズDを成功させユニコーン入りしたのも、伝統的バイオが低迷する中でAI創薬プラットフォームへの楽観論が広がったタイミングでした³⁸。一方で市場環境の変化に伴い**業界再編**も進みつつあります。前述のRecursionとExscientiaの合併に象徴されるように、有望スタートアップ同士が統合してパイプラインと資金を束ね、生存確率を上げようとする動きが出ています²⁶。他にもInsilico Medicineが上場準備を進める中で投資戦略を見直したり、BenevolentAIが臨床試験の失敗を受けリストラを行うなど、各社が次の段階に向けた体制整備を迫られています。今後は**大手製薬との提携や資本参加**が益々カギとなり、スタートアップ単独ではなくエコシステム全体で新薬を生み出す流れが加速するとみられます。実際、Sanofiがエンベダ社に戦略出資し臨床入りを支援した例¹⁹や、ノボノルディスクがValoと数十億ドル規模の提携を結んだ例³¹は、AI創薬スタートアップが大資本と組むことで開発資金と実証機会を得る典型と言えます。InsitroやRecursionも大手との共同研究で収益を得つつ自社プログラムを進めるモデルで²¹²⁷、AI創薬企業は今後も「**提携による延命と成長**」が重要な戦略となるでしょう。

- ・**規制当局の動向：** 規制面では、米国FDA（食品医薬品局）が2022年成立の動物実験代替に関する法律に基づき、**動物実験の削減と新アプローチ手法（NAM）の活用**を強力に推進し始めました³⁹。FDAは今後3～5年で前臨床毒性試験における動物使用を例外的ケースとし、**AI駆動型技術やヒト細胞モデル、計算機シミュレーションを新標準にするロードマップ**を公表しています³⁹。これによりAI創薬で得られた予測結果や、高度なイン・ビトロ（試験管内）実験のデータが、従来以上に薬事申請で受け入れられやすくなる可能性があります。実際、「**動物試験を必ずしも行わないでも良いところまで来ている**」といった声も専門家から上がっており⁴⁰、長年ボトルネックだった安全性試験の部分でAI活用が加速しつつあります。もっとも、すぐに全てをAIや臓器チップで代替できるわけではなく、当面は**ハイブリッド戦略**でリスク低減を図る段階です⁴¹⁴²。規制当局も新旧手法のバランスを見極めつつ指針策定を進めると考えられ、業界側としてはエビデンスを積み上げて信頼を得ていくことが重要です。

- ・**総括：** AI創薬は依然黎明期にあり、「魔法の弾丸」のように即座に新薬が生まれる状況ではありません。しかし、創薬プロセス各所にAIを組み込む動きは確実に広がっており、その成果として前臨床段階までの効率劇的向上や、新規モダリティ（抗体、タンパク質など）創薬への展開などポジティブな指標が増えてきました。業界全体の空気感としては、「依然リスクは高いが**慎重な楽観**が芽生えている」と言えるでしょう³⁵⁴³。特に2025年前後は、多くのAI創薬スタートアップが初の人体試験データを得る時期に差し掛かっており、これらの結果が今後の評価を大きく左右します。成功例が出れば投資と研究開発がさらに加速し、失敗が続けば技術の見直しや淘汰が進む転換点です。エンベダ社CTOの言葉を借りれば、彼らは「**幸運の偶然性をシステム化**」しようとしています¹⁶。この試みが真に実を結ぶかはまだ道半ばですが、少なくとも自然やデータの中に埋もれていた宝を掘り起こす道具として、AIは創薬の未来を切り拓く重要なツールになりつつあると言えるでしょう。

参考資料: エンベータ社関連記事 1 2 5 8 14 21 27 34 36 など。

1 2 3 4 5 6 16 17 18 35 38 Biotech's Latest Unicorn Uses AI to Mine Nature's Medicine Chest | Mint

<https://www.livemint.com/science/news/biotechs-latest-unicorn-uses-ai-to-mine-nature-s-medicine-chest-11756981398494.html>

7 8 9 10 13 19 Enveda Biosciences Announces Microsoft Collaboration and Reveals Foundation Model to “Read and Translate” Chemistry

<https://www.businesswire.com/news/home/20240529298878/en/Enveda-Biosciences-Announces-Microsoft-Collaboration-and-Reveals-Foundation-Model-to-Read-and-Translate-Chemistry>

11 12 14 15 Enveda translates life's chemistry into medicines

<https://www.reuters.com/plus/acumen/global-health/enveda-lifes-chemistry-biodiversity>

20 21 22 23 24 25 26 27 28 12 AI drug discovery companies you should know about in 2025

<https://www.labiotech.eu/best-biotech/ai-drug-discovery-companies/>

29 Valo | Valo Health and nference Announce Long-term Partnership to...

<https://www.valohealth.com/press/valo-health-and-nference-announce-long-term-partnership-to-accelerate-human-centric-drug-discovery-and-development>

30 31 34 Novo Nordisk expands AI partnership with Valo Health for development of obesity drugs | Reuters

<https://www.reuters.com/business/healthcare-pharmaceuticals/novo-nordisk-expands-ai-partnership-with-valo-health-development-obesity-drugs-2025-01-08/>

32 Pfizer's sixth Flagship deal will use AI to discover autoimmune ...

<https://firstwordpharma.com/story/5946592>

33 Charles River, Related Sciences partner for AI drug platform

<https://www.pharmaceutical-technology.com/news/charles-river-related-sciences-ai-drug/>

36 37 39 40 41 42 43 AI-driven drug discovery picks up as FDA pushes to reduce animal testing | Reuters

<https://www.reuters.com/business/healthcare-pharmaceuticals/ai-driven-drug-discovery-picks-up-fda-pushes-reduce-animal-testing-2025-09-02/>