



# AI創薬が"国家戦略"となった背景：米中テック大手の参戦と日本の「勝ち筋」

本レポートは、AI創薬が米中両国で「国家戦略」として位置づけられ、「次の主戦場」となっている状況を分析し、その中で日本が取るべき戦略的方向性を提示するものである。2024年から2025年にかけて、この分野は技術的成熟と商業化の転換点を迎えており、グローバルな競争構造が急速に変化している。

## エグゼクティブサマリー

AI創薬市場は2024年に36億ドル規模に達し、2025年から2034年にかけて年平均成長率30.1%で拡大すると予測されている。この急成長の背景には、従来10年以上・10億ドル以上を要していた創薬プロセスを、AIが50%以上短縮し、コストを数十分の一から百分の一に削減できる可能性がある。2025年は「概念実証」から「価値創出」への移行期であり、Insilico Medicineの特発性肺線維症治療薬ISM001-055がPhase IIa試験で良好な結果を示すなど、実用化の成果が相次いで報告されている。<sup>[1] [2] [3] [4]</sup>

米国ではNVIDIA、Google、Microsoftといったテック大手が製薬企業との大型提携を拡大し、中国ではHuawei、Baidu、Alibaba、Tencent、ByteDanceが独自のAI創薬プラットフォームを開発し、政府の強力な支援を受けている。一方、日本はTakedaやAstellasなどの製薬大手がAI活用を進めているものの、テック企業の参入は限定的であり、国家戦略としての包括性で米中に後れを取っている。本レポートでは、日本が取るべき「勝ち筋」として、アジア人口特化型精密医療、再生医療とAIの融合、地政学的中立性を活かした国際連携ハブ戦略を提案する。<sup>[5] [6] [7] [8] [9] [10] [11] [12] [13] [14]</sup>

## 第1部：AI創薬が「国家戦略」となった背景

### 1.1 製薬産業の構造的課題とAIソリューション

製薬産業は長年、「バリー・オブ・デス（死の谷）」と呼ばれる問題に直面してきた。新薬開発には平均10～18年の期間と20～30億ドルのコストを要し、成功率はわずか10%程度である。この非効率性は、製薬企業の研究開発生産性の低下を招き、特許切れによる収益減少と相まって、業界全体の持続可能性を脅かしている。<sup>[15] [16]</sup>

AIはこの構造的課題に対する解決策として注目されている。McKinseyの試算によれば、AI活用により製薬企業は創薬コストを30～50%削減し、パイプラインのスピードを20%以上向上できる可能性がある。具体的には、以下の領域でAIが革新をもたらしている：<sup>[17]</sup>

**標的同定と検証：**AIは膨大なゲノムデータや医療文献を解析し、従来発見が困難だった治療標的を特定する。Google DeepMindのAlphaFold3は、タンパク質、DNA、RNA、小分子の相互作用を予測することで、標的同定の精度を大幅に向上させた。<sup>[17] [18]</sup>

**分子設計と最適化：**生成AIは、望ましい生物活性と薬物動態特性を持つ新規化合物を数週間で設計できる。Insilico Medicineは、標的同定から候補化合物の生成まで18ヶ月で完了させ、従来の3～5年から大幅に短縮した。同社のISM5411プログラムでは、わずか12ヶ月で115分子を合成・スクリーニングし、前臨床候補を特定した。<sup>[3] [4] [19]</sup>

**臨床試験の最適化：**AIは患者のリクルートメント、試験デザイン、データ解析を効率化する。Syneosは、Azure AIを活用することで、サイト選定サイクルを約10%短縮し、24～48時間以内に最適なサイトリストを生成できるようになった。<sup>[20]</sup>

これらの技術進歩により、AI創薬は「もしかしたら実用化するかもしれない技術」から「投資すれば新薬が誕生し、収益化できる段階」へと移行した。この転換点が、各国政府と民間企業の大規模投資を引き寄せている。<sup>[1]</sup>

## 1.2 2024-2025年：転換点の年

2025年はAI創薬にとって「ブレイクアウトの年」となった。中国では、XtalPiがDoveTreeと59.9億ドル規模の提携を発表し、前払い金だけで5100万ドルに達した。Algen BiotechnologiesはAstraZenecaと免疫学領域でのAI創薬協力を発表し、総額5.55億ドルの契約を締結した。ByteDanceのPXDesignシステムは、6つのタンパク質標的のうち5つで、ナノモルレベルの結合ヒット率20～73%を達成し、従来の0.1%から劇的に向上させた。<sup>[21]</sup>

米国では、生物製剤開発企業が2024年に16億ドルを調達し、2023年の2倍以上となった。この成長はXaira Therapeuticsの10億ドル調達が牽引した。IsomorphicLabsは2025年3月に初の外部資金として6億ドルを調達し、Thrive CapitalがリードしてGoogle VenturesとAlphabetが参加した。同社は2025年末までにAI設計薬候補を臨床試験に進める計画である。<sup>[18] [22] [23] [15]</sup>

M&A活動も急増しており、AI創薬分野の大型取引10件のうち8件が2023年以降に発生した。特筆すべきは、Recursion PharmaceuticalsによるExscientiaの買収で、これまでのライフサイエンス分野における最大のAI M&A案件となった。グローバル製薬大手トップ10社すべてが2023年以降にAI創薬スタートアップと提携しており、そのうち9社が同時に社内AI能力を開発している。<sup>[24] [15]</sup>

臨床面でも進展が見られる。IQVIAの調査によると、2024年までに臨床試験（Phase I～III）が開始された111の医薬品プロダクトにAI/MLが何らかの形で使用されている。Insilico Medicineは2024年12月31日時点で22の前臨床候補を指名し、10プログラムが臨床段階に進み、4つのPhase I試験を完了、1つのPhase IIa試験を完了した。同社の開発候補は、最長でも18ヶ月、最短で9ヶ月（QPCTLプログラム）で候補指名に至っており、従来の数年と比較して大幅な短縮を実現している。<sup>[19] [17] [3]</sup>

## 1.3 「国家戦略」としてのAI創薬

AI創薬が国家戦略となった背景には、製薬産業が単なる産業ではなく、国家安全保障と直結する戦略的資産であるという認識がある。新型コロナウイルスのパンデミックは、ワクチンや治療薬の開発・供給能力が国民の健康と経済に直接影響することを明示した。中国は感染拡大時にファイザーやモデルナを導入せず、自国のSinovacやSinopharmのワクチンを使用し続けた。この自主性は、医薬品開発力が国家主権と安全保障の根幹をなすことを示している。<sup>[1]</sup>

中国の創薬関連記事では、「国の創薬力は、緊急対応から国際援助、そして商業競争力まで、あらゆる分野に影響を及ぼし、創薬力の向上は国家の威信を高め、海外とのパートナーシップの促進にもつながる。医薬品の研究と生産能力の欠如は深刻な公衆衛生危機につながり、疾病負担を増大させ、国

家安全保障に直接的な脅威を与える可能性がある」と、日本の創薬関連記事よりも強い表現でその重要性が説かれている。<sup>[1]</sup>

この国家戦略としての位置づけは、各国の政策に反映されている。米国ではトランプ政権が2025年に「America's AI Action Plan」を発表し、AI駆動科学への投資と世界クラスの科学データセットの構築を重点項目とした。中国は2025年の全国人民代表大会でAI法案を提出し、600億元の国家AIファンドと1380億元の地方ベンチャーファンドを設立した。日本は2024年に「バイオエコノミー戦略」を更新し、2030年までに100兆円規模のバイオエコノミー市場を創出する目標を掲げた。<sup>[25]</sup>  
<sup>[26]</sup> <sup>[27]</sup> <sup>[28]</sup> <sup>[29]</sup> <sup>[30]</sup> <sup>[31]</sup> <sup>[32]</sup>

## 第2部：米国テック大手の戦略的展開

### 2.1 NVIDIA：GPU帝国のライフサイエンス進出

NVIDIAはAI創薬市場で約14.2%のシェアを持ち、GPU加速コンピューティングインフラを提供することで、強力な競争優位性を確立している。同社のアプローチは、ハードウェア提供にとどまらず、BioNeMo、NIM、NeMoマイクロサービスといった創薬特化型AIツールを包括的に提供することにある。<sup>[2]</sup>

2025年6月、NVIDIAはNovo NordiskおよびDCAIと提携し、デンマークのGefion AIスーパーコンピュータを活用した創薬研究を開始した。Novo NordiskはBioNeMoを使用して生成AI駆動の創薬を行い、NIMとNeMoマイクロサービスでカスタマイズされたエージェントワークフローを構築する。研究者は単一細胞モデルを用いて薬候補に対する細胞応答を予測し、薬物様特性を持つ分子を設計するモデルを開発する。さらに、Novo Nordiskの膨大な科学文献を活用して生物医学的大規模言語モデルを構築し、遺伝子、タンパク質、疾患間の相関関係を明らかにする。<sup>[5]</sup>

2025年1月には、Mayo Clinic、Illumina、IQVIAなどの主要医療機関との提携を拡大した。IQVIAは64ペタバイト以上の情報を保有しており、NVIDIA AI FoundryサービスとNVIDIA NIMマイクロサービス、NVIDIA Blueprintsを活用してカスタム基盤モデルとエージェントAIソリューションを構築する。これにより、研究、臨床開発、新治療へのアクセスを加速することを目指している。<sup>[6]</sup>

Illuminaとの提携では、次世代ゲノミクスのためのAIツールセットが提供される。IlluminaのDRAGEN解析ソフトウェアがNVIDIA加速コンピューティング上で動作し、Illumina Connected Analyticsプラットフォーム内でグローバルにアクセス可能となる。過去5年間で、単一細胞および空間ゲノミクスが細胞理解において革命をもたらし、創薬における標的同定、臨床開発、バイオマーカー発見に前例のない洞察を提供してきた。NVIDIAとIlluminaは、Illumina Connected Analyticsプラットフォーム上でマルチオミクスデータ解析を進展させ、新しい生物学基盤モデルを開発する計画である。<sup>[6]</sup>

Mayo ClinicとNVIDIAは、次世代病理基盤モデルの開発を大規模に加速する。Mayo ClinicはNVIDIA DGX Blackwellシステムを展開する予定であり、これはNVIDIA Blackwellアーキテクチャに基づき、システムあたり1.4TBのGPUメモリを提供し、デジタル病理全スライドデータセットの処理に理想的である。Mayo ClinicとNVIDIAは、この作業を創薬、個別化診断、治療における将来のAIアプリケーションの礎として位置づけている。<sup>[6]</sup>

NVIDIAの戦略は、単なる技術提供ではなく、エコシステム全体の構築にある。同社のInceptionプログラムは、約18,000のヘルスケアスタートアップを支援しており、GPU基盤のツールを使用して診断、治療、オペレーションを支援する次世代技術を創造している。この包括的アプローチにより、NVIDIAはAI創薬のインフラストラクチャ・プロバイダーとして不可欠な存在となっている。<sup>[33]</sup>

## 2.2 Google/Alphabet : AlphaFoldからIsomorphic Labsへ

GoogleのAI創薬戦略は、DeepMindが開発したAlphaFoldを中核としている。AlphaFold2は2020年に、数十年にわたり科学者を悩ませてきたタンパク質折り畳み問題を解決し、アミノ酸配列から三次元構造を原子レベルの精度で予測することに成功した。この成果により、DeepMind共同創設者のDemis HassabisとJohn M. Jumperは2024年にノーベル化学賞を受賞した。<sup>[34] [23]</sup>

2021年、AlphabetはDeepMindからスピンアウトする形でIsomorphic Labsを設立し、「AIファースト」アプローチで創薬プロセス全体を再構築することを目指した。Hassabisは「生物学は最も根本的なレベルで情報処理システムとして考えることができる」と述べ、生物学と情報科学の間に同型写像（イソモρφイズム）が存在するという哲学を展開した。<sup>[35] [34]</sup>

2024年1月、Isomorphic LabsはEli LillyおよびNovartisとそれぞれ最大30億ドル規模の戦略的提携を発表した。これらの契約には、マイルストーン支払いに加え、将来の医薬品売上からのロイヤリティが含まれる。2025年2月には、Novartisとの提携を最大3つの追加研究プログラムに拡大し、元の契約の財務条件を維持した。<sup>[22] [23] [18]</sup>

2025年3月、Isomorphic Labsは初の外部資金調達として6億ドルを獲得した。Thrive Capitalがリードし、Google VenturesとAlphabetが参加したこのラウンドは、同社のAI創薬エンジンのさらなる開発と、独自プログラムの臨床開発への進展を加速する。Hassabisは「この資金調達により、次世代AI創薬エンジンの開発をさらに加速し、独自プログラムを臨床開発に進め、いつの日かAIの助けを借りてすべての疾患を解決するという使命に向けた重要な一歩となる」と述べた。<sup>[23] [22]</sup>

Isomorphic Labsの戦略は、合成データ生成などの高度な技術を通じて既存のデータソースから「まだ多くの成果を引き出せる」として、ウェットラボを構築するのではなくアルゴリズムイノベーションに焦点を当てることにある。Hassabisは、最終的に創薬プロセスの大部分を計算手法に移行し、生物材料、厳格な安全プロトコル、長いタイムラインに依存する従来の実験室から離れることを目指している。<sup>[18] [23]</sup>

2025年3月、GoogleはGemini 2.0を活用したAI「コサイエンティスト」を発表した。このシステムは、複数のAIエージェントが協働して動作し、科学仮説を生成し、実験をデザインし、複雑なデータセットを解析する。StanfordやImperial College Londonとの協力により、このAIコサイエンティストは抗菌薬耐性に関連する新しい遺伝子転移メカニズムを提案し、Imperial Collegeの研究者が数年にわたる研究の後に独立して検証した。また、肝線維症の潜在的薬候補を特定し、Stanfordの科学者が実験室で後に検証した。<sup>[7]</sup>

Recursionとの提携拡大も注目される。2024年10月、RecursionはGoogle Cloudとの協力を拡大し、Googleの生成AIツールを活用してRecursionの創薬プラットフォームを強化すると発表した。この提携は、有望な薬候補を特定するための時間とコストを削減し、製薬イノベーションにおけるAIの役割を強化することを目的としている。<sup>[7]</sup>

## 2.3 Microsoft : Azure基盤の創薬エコシステム

MicrosoftのAI創薬戦略は、Azureクラウドプラットフォームを中心に展開されている。同社は、製薬企業がAIを活用して創薬プロセスを加速し、臨床試験を最適化し、個別化医療を実現できるよう、包括的なAI/MLサービスを提供している。

NovartisとのAI Innovation Labは、Microsoftの戦略の中核をなす。この多年にわたる提携により、NovartisはAzureのAIと高性能コンピューティングを活用して「医療を再構想」することを目指して

いる。Azureの計算能力により、Novartisの科学者は数千の化学実験を同時にシミュレーションでき、解析時間を数週間または数年から数日または数時間に劇的に短縮した。このパートナーシップは、すべてのアソシエイトのデスクトップにAIをもたらし、研究開発における意思決定を強化することを目指している。<sup>[36] [20]</sup>

Novo NordiskもAzure上に企業全体のAIプラットフォームを構築し、創薬とデータサイエンス能力を拡大している。Microsoft Researchとの協力により、Novo NordiskはAzure Machine Learning、Azure OpenAI、Cosmos DB、Kubernetesを活用して疾患の予測モデルを開発した。特筆すべきは、Azure上で開発されたAIアルゴリズムが、患者の心血管リスクを現在の臨床基準よりも正確に予測できることを示した点である。<sup>[20]</sup>

高性能コンピューティング（HPC）の提供も、Microsoftの重要な戦略要素である。創薬には、分子相互作用のシミュレーションやゲノムワイド関連研究の実行など、膨大な計算能力が必要となることが多い。AzureはGPU/CPUクラスターとAzure Batch、Azure HPCなどのサービスを提供している。1910 GeneticsはMicrosoftと提携し、Azureのハイパフォーマンスコンピューティング、さらには量子インスパイアドコンピューティングを活用して、創薬設計を加速している。MicrosoftのAzure Quantum Elementsイニシアチブは、製薬研究者に最先端の計算化学ツールを提供することを目指している。<sup>[20]</sup>

これらの分析およびHPC能力により、創薬の研究開発サイクルが短縮されている。Novartisの経験によれば、Azure上のAIモデルは数十年分の実験データをふりいにかき、人間が必要とする時間のほんの一部で新しい薬分子を提案できる。ある報告によると、Novartisのマイクロソフトとの協力により、解析時間が数日から数時間に短縮され、生命を救う治療法の発見が加速した。<sup>[20]</sup>

生成AIの活用も進んでいる。大規模言語モデル（LLM）とAzure OpenAI Serviceの登場により、製薬企業は研究の要約、洞察の創出、さらには分子の設計にも生成AIを探索している。契約研究機関 Syneos Healthは、Azure上で生成AIアプリケーションを構築し、製薬クライアントの試験デザインとデータ解析を支援している。2023～2024年に、SyneosはAzure OpenAI Serviceを組み込んだ統合データおよびAIソリューションをわずか9ヶ月で開発し、データクエリとドキュメンテーションを支援した。<sup>[20]</sup>

Microsoftの戦略は、単なる技術提供ではなく、製薬企業との深い統合にある。同社は、AI Foundry サービス、Azure Machine Learning、Azure OpenAI Serviceなどの包括的なツールセットを提供し、製薬企業が創薬プロセス全体でAIを活用できるようにしている。この統合アプローチにより、Microsoftは製薬業界のデジタルトランスフォーメーションにおいて中心的な役割を果たしている。

## 第3部：中国の全方位AI創薬戦略

### 3.1 政府主導の国家戦略

中国のAI創薬戦略は、政府の強力な支援と明確な国家目標に支えられている。2017年の「新世代AI発展計画」では、2030年までに国内AI産業を1兆元（約1400億ドル）、関連産業を10兆元（約1.4兆ドル）規模にする目標を掲げた。2021～2025年の第14次五カ年計画では、医薬品業界がAI、クラウドコンピューティング、ビッグデータの研究開発への応用を明示的に奨励している。<sup>[28] [21]</sup>

2023年8月、中国は生成AIに関する暫定措置を施行し、AI開発者にサイバースペース管理局への登録を義務付けた。この規制には、合成コンテンツの義務的ラベリング、訓練データ使用の制限、内蔵コンテンツフィルター、厳格なデータプライバシー要件が含まれる。2025年の全国人民代表大会で

は、新しいAI法案が審議中であり、これは以前の規制を単一の枠組みに統合することを目指している。<sup>[26] [28]</sup>

資金面では、600億円の国家AIファンドと1380億円の地方ベンチャーファンドが設立された。杭州市だけで年間3000億円のAIクラスター投資を行っている。上海市は2022年に生命科学の研究開発に150億ドルを投資した。この財政的支援は、確立されたテック大手と新興スタートアップの両方を支援し、AI創薬の肥沃な土壌を創出している。<sup>[37] [26]</sup>

中国政府の戦略は、単なる資金提供にとどまらず、規制環境の整備にも及んでいる。サイバースペース管理局（CAC）がオンラインコンテンツ、アルゴリズム規則、ディープフェイクや生成AIの新たな枠組みを監督している。最近の規制では、ディープフェイクのラベリング、チャットボットフィルタリング、リリース前のセキュリティレビューが義務付けられており、安全性とコンプライアンスを確保している。<sup>[28]</sup>

地方政府も重要な役割を果たしている。上海市は2022年に中国初の地方レベルAI法「上海AI発展規則」を制定し、AIプロジェクトの倫理委員会、データフローを規制するデータセット交換、スタートアップを誘致するための産業ゾーン（臨港AIゾーンなど）を義務付けた。深圳市は、ブロックチェーンベースのサンドボックスを通じてアルゴリズムライセンスを先駆的に導入し、AI統治とコンプライアンスメカニズムの国家的テストベッドとなった。<sup>[28]</sup>

### 3.2 テック大手の創薬プラットフォーム展開

中国のテック大手は、独自のAI創薬プラットフォームを積極的に開発し、製薬企業との提携を拡大している。これらの企業は、膨大な計算資源とAI専門知識を創薬の課題に適用し、急速な進展を遂げている。

#### Huaweiの統合アプローチ

Huaweiは、Pangu Drug Molecule Modelを開発し、17億の既存化学化合物のデータで訓練した。このモデルは深層学習を使用して、特定の疾患に寄与する標的タンパク質に結合する可能性が最も高い化合物を予測する。研究者がどの化合物が有効である可能性が高いかを知ると、成功の可能性が最も高いものを特定し、さらに最適化でき、新薬が負の副作用を持つ可能性を最小限に抑えることができる。<sup>[9] [11] [38]</sup>

西安交通大学医学院のLiu Bing博士とそのチームは、Pangu Drug Molecule Modelを使用して新しい抗菌薬Drug Xを開発した。このプロセスは、従来数年かかるところをわずか1ヶ月に短縮し、研究開発コストを70%削減した。Drug Xは動物実験で検証され、治験薬（IND）申請のための前臨床研究が進行中である。Drug Xの特許出願は複数の国で行われている。<sup>[8] [39] [9]</sup>

HuaweiのEIHealth（一站式薬剤研究開発プラットフォーム）を使用することで、Pangu Drug Molecule Modelは17億の薬物様分子の化学構造を学習した。教師なし学習を通じて、このモデルは分子構造の再構成、有効性、独自性などの重要な指標を最適化でき、他の類似目的で使用される方法を大幅に上回る性能を発揮する。<sup>[38]</sup>

分子生成器は1億の新規薬物様小分子のライブラリを構築し、構造の新規性は99.68%である。これらの分子は、類似の属性を持つ新しい化合物を迅速に生成するために使用でき、新薬発見の無限の可能性を創造する。さらに、Pangu分子最適化器は、研究者が薬物分子の化学構造を最適化するのを支援する。<sup>[38]</sup>

Pangu Drug Molecule Modelは、化合物-標的相互作用予測、化合物ADMET属性スコアリング、分子生成と最適化など、創薬チェーン全体をカバーする20以上のタスクで業界トップレベルの精度を達成した。<sup>[38]</sup>

## Baiduの挑戦的ポジショニング

BaiduはPaddleHelixプラットフォームを開発し、計算生物学のニーズに対応している。同社の子会社Biomapは、AlphaFoldに対抗する独自のxTrimoモデルを開発した。Biomapの共同創設者兼CEOであるWei Liuは、South China Morning Postのインタビューで、多国籍製薬企業がBiomapとAlphaFoldの間の技術ギャップが「逆転」していると見ていると述べた。<sup>[10] [40]</sup>

「AIベンチマークテストに絶対的な勝者はいないが、商業化と当社のモデルに基づいて開発されたプロジェクトの面では、AlphaFoldより先んじていると思う」とWeiは述べた。ただし、AlphaFoldは「より大きな学術的影響力」を持っていると認めた。<sup>[10]</sup>

Biomapは昨年、そのxTrimoモデルが、70の抗体と44の単ドメイン抗体がそれらの標的と相互作用する際の相互作用を決定する精度において、AlphaFold 3よりも高い精度を示したと報告した。Biomapは今年、収益を倍増させることを期待しており、Baidu創設者Robin Li Yanhongと香港政府に支援されている。<sup>[10]</sup>

## TencentとAlibabaの臨床応用

TencentとAlibabaは、AI医療モデルを重症治療の中心に導入することに成功している。Alibabaの研究機関DAMO AcademyとZhejiang University School of Medicineの第一附属病院は、胸痛救急用の大規模言語モデルiAortaを最近発表した。iAortaを使用すると、医師は通常の非造影CT検査を使用して、急性大動脈症候群を数秒で特定でき、診断時間を2時間未満に短縮できる。<sup>[41]</sup>

TencentのQiyuan Critical Care Modelは、世界初の重症治療AIモデルであり、Shenzhen Mindray Bio-Medical Electronicsと共同で開発され、すでに多数の病院で展開が開始されている。このLLMは、患者の完全な医療像を5秒で組み立て、重症治療推論を使用して傾向を予測し、治療推奨を提供できる。<sup>[41]</sup>

最近まで、AIツールは臨床現場で実際に使用することができず、主に仮想健康アシスタントとして、または医師の効率を高めるため（医療記録を自動生成するなど）に限定されていた。2025年5月時点で、中国は約300の医療LLMをリリースしており、その半数以上が医療サービスで使用されている。<sup>[41]</sup>

iAortaモデル（胸痛救急室での診断用）とQiyuan Critical Care Model（集中治療室で使用）の両方は、医療の最も本質的な部分、すなわち重症状態の患者の診断と治療に適用されている。<sup>[41]</sup>

「急性大動脈症候群の患者のほとんどは明らかな症状がなく、漠然とした胸部または腹部の痛みだけである。これにより、約40%の誤診率につながる。AIのサポートにより、医師は通常のCT検査を実行して大動脈解離があるかどうかを確認するだけでよい。これは臨床治療にとって非常に重要である」と、Zhejiang University第一附属病院の血管外科部門のディレクターZhang Hongkunは述べた。急性大動脈症候群の患者の約40~50%は発症後48時間以内に死亡するため、タイムリーで正確な診断が重要である。<sup>[41]</sup>

## ByteDanceの技術的ブレークスルー

ByteDanceは2025年、PXDesignシステムで画期的な成果を発表した。このシステムは、6つのタンパク質標的のうち5つで、ナノモルレベルの結合ヒット率20〜73%を達成した。従来の手法では0.1%程度であったヒット率を劇的に向上させ、開発サイクルも数ヶ月または数年からわずか2週間に短縮し、開発コストも大幅に削減した。<sup>[21]</sup>

ByteDanceのTikTokを所有する企業としてのブランド認知度に加え、同社は一般目的AIの主要なブレイクスルーからもたらされる能力が、創薬と酵素設計に波及していることを示している。生物医学データの爆発的増長も、豊富な訓練材料を提供している。<sup>[21]</sup>

### 3.3 中国の構造的優位性

中国のAI創薬における急速な進展は、いくつかの構造的優位性に支えられている。第一に、中国の巨大な人口（14億人）は、AI訓練に不可欠な膨大な医療データを提供する。中央集権的な医療システムにより、このデータは比較的統合されており、AI研究者にとって利用しやすい環境が整っている。<sup>[42] [43] [37]</sup>

第二に、中国は臨床試験の実施において優位性を持つ。現在、中国では米国よりも多くの産業資金による臨床試験が実施されている。中国の人口の多さは、患者数が多いことを意味し、臨床試験をより迅速に完了させることで、米国との距離を縮めることができる。<sup>[44] [1]</sup>

第三に、中国の特許戦略は積極的である。2022年、中国は世界のAI特許出願の61.1%を占め、米国の20.9%を大きく上回った。生成AI特許の4分の1は2023年だけで出願されており、イノベーションの急増を反映している。中国のAI創薬特許は38,000件以上に達し、グローバルシェアで圧倒的な地位を築いている。<sup>[45] [37] [42] [5]</sup>

第四に、政府の調整された支援がある。中国政府はAIをグローバルリーダーになるための国家戦略として実施しており、製薬セクターを特に対象とした研究開発投資が相当額に上る。TencentやBaidu、Alibabaなどのテック大手も、創薬に適用可能なAI技術に多額の投資を行っている。これらの企業は、製薬研究の課題に対して相当な計算資源とAI専門知識をもたらしている。<sup>[42]</sup>

第五に、中国の急速に拡大する製薬市場が、革新的な創薬手法への強い需要を生み出している。中国の大きな人口と中央集権的な医療システムは、洗練されたAIモデルの訓練に不可欠な膨大なデータを提供している。<sup>[42]</sup>

これらの優位性は、AI創薬分野での中国の急速な台頭を支えている。市場調査機関「頭豹研究院」の予測によると、中国のAI活用医薬品市場規模は、2025年の12億1000万元（約260億円）から2028年には58億6000万元（約1260億円）へと急拡大する見通しである。<sup>[1]</sup>

### 3.4 主要企業とブレイクスルー

中国のAI創薬エコシステムには、急速に成長するスタートアップ企業が多数存在する。2025年、AI創薬企業は100社を超え、これらの企業への投資が再度加熱している。<sup>[21] [1]</sup>

#### XtalPi（シンタルピー）

2014年にMITの量子物理学者によって設立されたXtalPiは、AI、量子物理学、ロボット工学を使用してAI創薬の先駆者となっている。XMolGenやXFEPなどのプラットフォームは、前例のないスピードで薬候補を生成・評価する。Pfizerとの協力により次世代分子モデリングプラットフォームを開発しており、そのグローバルな影響力を示している。XtalPiは世界トップ20製薬企業のうち16社と協業しており、創薬開発の加速におけるその役割を強調している。<sup>[46] [37]</sup>



2025年、XtalPiはDoveTreeと戦略的提携を発表し、潜在的総額は59.9億ドルに達した。前払い金だけで5100万ドルに達し、AI創薬プラットフォームがすでに実際のキャッシュフローを生成できることを証明した。<sup>[21]</sup>

XtalPiのアプローチは、AI駆動のスクリーニングと自動化された実験室の統合にある。同社の上海本社にある最先端の自動化実験室では、AIによって駆動されるロボット「科学者」が、材料の取り出し、試薬の追加、反応の開始、監視、テスト、すべてを料理の達人が料理を準備するような容易さと精度で実行する。<sup>[47]</sup>

### **YuanSi Biopeptides、HuaShen AI Pharma**

2025年、YuanSi BiopeptidesやHuaShen AI Pharmaなどの企業は、総額数十億ドルに達するビジネス開発（BD）契約を完了した。これらのスタートアップは目を見張る成果を達成している一方で、主要プレーヤーもAI創薬分野に多額の投資を行っている。<sup>[21]</sup>

### **China Telecom、Algen Biotechnologies**

2025年9月、China TelecomはBayer、Hengrui、IQVIA、その他のグローバル製薬大手と協力して、「AI創薬のための公的サービスプラットフォーム」を正式に立ち上げ、この分野への正式な参入と国家レベルのAI創薬チームの形成を示した。<sup>[21]</sup>

2025年10月初め、Algen BiotechnologiesはAstraZenecaとの複数標的協力を発表し、免疫学におけるAI駆動創薬を共同で進めることとし、潜在的な契約価値は5.55億ドルに達する。<sup>[21]</sup>

これらの事例は、AI創薬が技術検証から産業化と商業化へ移行したことを示している。より多くのAI製薬企業が大手製薬企業とパートナーシップを形成しており、一部のAI設計候補薬はすでに臨床試験に入っている。<sup>[21]</sup>

## **第4部：日本の現状と課題**

### **4.1 製薬大手のAI取り組み**

日本の製薬業界は、伝統的に高い研究開発能力と品質管理で知られているが、AI創薬への取り組みは米中と比較して緩やかである。それでも、主要製薬企業は積極的にAI活用を進めている。

#### **Takedaの戦略的提携**

Takedaは2022年にNabla Bioとの提携を開始し、2025年10月には第二の大型研究パートナーシップを締結した。この新しい複数年契約は、数千万ドルの前払いおよび研究資金に加え、10億ドルを超える成功ベースの支払いを含む可能性がある。<sup>[48] [49]</sup>

この契約の中核は、NablaのJoint Atomic Model（JAM）プラットフォームであり、タンパク質ベースの治療薬をde novo（ゼロから）設計する。自然のレパートリーをスクリーニングする従来の抗体発見手法とは異なり、JAMは親和性、製造可能性、薬物様特性に最適化された全く新しい抗体配列を生成する。Nablaによると、統合されたウェットラボ検証により、わずか3〜4週間の設計から実験へのフィードバックループを実現しており、業界最速であると主張している。<sup>[49]</sup>

発表と同時に開示された技術的結果は、de novo抗体設計における長年の課題を克服する上でsignificant progressを示唆している。Nablaは、二桁のヒット率、ピコモルレベルの結合親和性、良好な薬物動態（pK）、動物モデルおよび非ヒト霊長類（NHP）における低い免疫原性を報告してい

る。検証されれば、これらの結果はAI設計抗体でこのような性能の最初の実証となり、1～2年以内に初のヒト試験が開始される可能性を示唆している。<sup>[49]</sup>

拡大されたパートナーシップは、多特異性抗体、受容体デコイ、その他のカスタム生物製剤の開発を含む、治療が困難な疾患に焦点を当てる。Nabla CEOのSurge Biswasは、この協力がTakedaの初期発見パイプライン内の最も差し迫った科学的障壁を対象としており、JAMを活用して治療開発を加速すると強調した。<sup>[49]</sup>

この契約は、バイオ医薬品の研究開発におけるAIを巡る業界全体の勢いの中で行われている。今月初め、TakedaはBristol Myers Squibbなどとコンソーシアムに参加し、共有データセット上で大規模なAIモデルを訓練すると発表した。また、細胞治療研究から撤退し、よりスケーラブルな治療モダリティに焦点を移すことも発表している。<sup>[49]</sup>

### **Astellasの効率化実績**

Astellasは、AI創薬分野で日本国内でも先駆的な企業の一つである。独自開発のAIプラットフォームを活用し、通常であれば1～2年かかる新薬候補物質の選定を、わずか7ヶ月で完了させた。<sup>[50]</sup>

Astellasは、NVIDIA H100を基盤とする東京-1イニシアチブに参加している。東京-1は、Mitsui & Co.がNVIDIAと協力して2023年に発表した日本初の製薬業界向け生成AIスーパーコンピュータである。これは本質的にNVIDIA H100ノードに基づくDGX SuperPODであり、日本の製薬企業とスタートアップの共有リソースとしてホストされている。<sup>[14]</sup>

Astellasは、東京-1上でBioNeMo（NVIDIAの創薬AIプラットフォーム）を使用して研究を加速している。具体的には、AstellasはこのH100搭載スーパーコンピュータを分子シミュレーションや、創薬に適用される大規模言語モデルなどのタスクに活用する計画である。東京-1を利用することで、Astellasの科学者は高解像度分子動力学を実行して薬分子の挙動を研究したり、化学および生物医学テキストデータでLLMを訓練して創薬設計を支援したりできる。<sup>[14]</sup>

2024年4月には、TakedaおよびSumitomo Mitsui Banking Corporationと共同で、主に日本発の初期創薬プログラムのインキュベーションに特化した合弁会社を設立することで合意した。この新会社は、革新的な治療薬の創出を目指している。<sup>[13]</sup>

### **Daiichi Sankyoの慎重な展開**

Daiichi Sankyoは、テック企業との複数のパートナーシップを通じてAI創薬に取り組んでいるが、具体的なプロジェクトや成果の公表は限定的である。同社は主要製薬企業の研究開発予算配分の中でAIへの投資を進めているものの、米中の競合と比較すると、公表されているAI創薬プログラムの規模と範囲は小さい。<sup>[12] [51]</sup>

## **4.2 テック企業とアカデミアの協力**

日本のテック企業とアカデミアは、AI創薬において重要な役割を果たしている。特に、Fujitsu-RIKENの協力とPreferred Networksのプラットフォーム開発が注目される。

### **Fujitsu-RIKENの生成AI技術**

Fujitsuと理化学研究所（RIKEN）は、2022年5月に開始した共同研究プロジェクトの一環として、生成AIを活用したAI創薬技術を開発した。この技術は、電子顕微鏡画像から標的タンパク質の構造変化を3D密度マップとして広範囲に予測できる。<sup>[52] [53] [54]</sup>

両者は、電子顕微鏡で撮影された大量の投影画像から、標的タンパク質のコンフォメーションの様々な形態とその可能性のある割合を正確に推定する生成AI技術と、推定された割合から標的タンパク質のコンフォメーション変化を予測する技術を開発した。これらの2つの技術に基づき、従来の手順よりも10倍以上短い時間で、広範囲にわたるタンパク質の構造変化を予測できるAI創薬技術を開発した。<sup>[53] [52]</sup>

この技術により、実験データに基づいてタンパク質のコンフォメーションと変化を正確に取得でき、細菌やウイルスなどの標的タンパク質に結合する薬剤の設計プロセスにイノベーションをもたらす。今後、FujitsuとRIKENは、新たに開発した生成AI技術を、標的タンパク質と抗体の複合体を解析し、分子の全体的な構造変化を高精度かつ高速に予測するための核心技術の一つとして活用する。<sup>[52] [53]</sup>

RIKENは、Society5.0の医療分野での実現に貢献するため、スーパーコンピュータ「富岳」上で創薬DXプラットフォームの構築を推進しており、標的タンパク質の様々な構造状態を推定するための新技術の一つとして、創薬プロセスの革新を目指している。<sup>[53] [52]</sup>

Fujitsuも、2023年10月10日からタンパク質構造変化の予測技術を、Fujitsu Kozuchi（コードネーム）- Fujitsu AI Platformのコアコンポーネントとして提供開始予定である。このAIプラットフォームは、ユーザーが先進技術を迅速にテストできるようにするものである。<sup>[52] [53]</sup>

### Preferred Networksの深層学習プラットフォーム

Preferred Networks（PFN）は、深層学習の専門知識と大規模計算リソースを活用し、創薬プロセスの初期段階における候補物質探索、分子設計、モデリング、最適化を加速するAI創薬技術を開発した。<sup>[55] [56]</sup>

京都薬科大学との共同研究プロジェクトにおいて、PFNは新技術を使用して、SARS-CoV-2の複製に不可欠な酵素である3CLプロテアーゼまたはメインプロテアーゼに対する阻害活性を示す化合物群を設計した。この共同研究では、PFNとKPUは、ロイシンまたは類似構造を含むペプチド様化合物に焦点を当てたCOVID-19のメインプロテアーゼ阻害剤に関する以前の研究とは異なり、非ペプチド構造を持つ化合物を発見することを目指した。非ペプチド化合物は、SARS-CoV-2の潜在的な変異に対して有効である可能性がある。<sup>[55]</sup>

PFNのスーパーコンピュータMN-2を使用した新しいAI創薬技術が提案した複数の化合物の中から、PFNとKPUは実世界で13の化合物を合成し、そのうち7つが生化学実験でSARS-CoV-2のメインプロテアーゼに対する阻害活性を示した。<sup>[55]</sup>

PFNは、化合物生成モジュールとスコア計算モジュールを備えた分子設計プラットフォームを独自の計算機クラスター上に構築している。各化合物生成モジュールとスコア計算モジュールをマイクロサービス化することで、柔軟な拡張を可能にしており、個々の創薬プロジェクトに最適な化合物生成条件を迅速に見出す。このプラットフォームを用いて、新規化合物を設計・創出しており、個々の創薬プロジェクト特有の複雑な化合物要件（活性・物性・望ましい/避けるべき部分構造要件など）に対応している。<sup>[56]</sup>

### PeptiDreamとFujitsuのペプチド創薬

PeptiDreamは2006年に設立された東京大学発のバイオベンチャー企業であり、ペプチド創薬における独自技術を持つ。Fujitsuとの協力により、Digital Annealerを使用してペプチド候補化合物の安定コンフォメーション探索を高速化し、AI技術による薬効および物性の予測の高精度化を図っている。<sup>[57]</sup>

ペプチド創薬では、数兆のライブラリから候補化合物を迅速に絞り込む必要がある。実際の薬剤を作成するには多くの複雑な実験プロセスが必要であり、相当な時間と労力を要する。Digital Annealerやハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）などの先進ICTソリューションの使用は、薬効予測、薬物動態、安全性、物性の予測にAI技術を使用した高精度予測を含め、創薬プロセスを合理化し、変革することが期待されている。<sup>[57]</sup>

2020年11月、PeptiDream、Fujitsu、パートナーは、この協力の成果として新会社を設立し、COVID-19治療薬の早期開発に貢献した。創薬プロセスのデジタルトランスフォーメーションを実現するために、中分子薬用のIT基盤創薬プラットフォームを創出している。<sup>[57]</sup>

### 4.3 政府のAI創薬支援策

日本政府は、AI創薬を含むバイオエコノミー戦略を積極的に推進している。2024年に更新された「バイオエコノミー戦略」では、2030年までに100兆円規模のバイオエコノミー市場を創出する目標を掲げた。<sup>[30] [31] [32]</sup>

#### AMEDの役割

Japan Agency for Medical Research and Development（AMED）は、2015年に設立されて以来、医療分野の研究開発を基礎研究から実用化までシームレスに支援する中心的な役割を果たしてきた。2025年度から2029年度の第三次中期計画では、AMEDはモダリティ（創薬、治療アプローチなど）を中心に設計された8つの統合プロジェクトを通じて研究開発をさらに発展・推進する。<sup>[58] [59]</sup>

AMEDは、革新的な薬シーズの継続的創出を確保するために基礎研究への継続的かつ安定的な支援を提供し、出口志向アプローチを強化することで研究成果の実用化を加速する。すべての統合プロジェクトにわたって、医療デジタルトランスフォーメーションとAI創薬を推進し、国際的に研究開発を拡大する支援を強化する。<sup>[58]</sup>

#### 創薬エコシステムサミット

2024年7月、日本政府は創薬エコシステムサミットを開催し、産学官の連携による創薬イノベーションの推進を議論した。このサミットでは、NIH資金による莫大な研究資金が米国のイノベーションサイクルの原動力となっていることが指摘された。日本においても、AMEDによる数十億円規模の支援が重要であり、数百億円ではなく数十億円のマッチング資金が大きな違いを生み出すと強調された。<sup>[60]</sup>

#### AI創薬の推進施策

内閣府の「創薬力向上のための戦略的目標と行動計画」（2024年7月30日）では、AI/ロボット工学と創薬を組み合わせた新しいモダリティに関する分野横断的/基礎研究の推進が明記されている。RIKENでは、富岳スーパーコンピュータとロボット化技術、AI技術などを組み合わせた統合的な科学力を活用し、新しい創薬研究開発システムとネットワークを構築し、創薬シーズから臨床開発候補の創出を合理化・加速することを目指している。<sup>[61]</sup>

具体的には、がんや難治性脳疾患などの未充足医療ニーズに対して、遺伝子変異に対応した個別化医療を提供する技術の確立が目標とされている。例として、患者由来iPS細胞とロボット化/自動化によるAI解析を活用した高度なハイスループットスクリーニングプラットフォームを確立し、新しい創薬標的/化合物シーズを探索することが挙げられている。<sup>[61]</sup>

さらに、健康・医療分野におけるAIの研究開発を加速するための支援を着実に実施し、公的データベースにおける仮名化情報の活用や電子健康記録（EHR）情報共有サービスによる臨床情報の共有を2028～2030年に開始する計画である。<sup>[61]</sup>

## 4.4 日本の構造的課題

日本のAI創薬における最大の課題は、米中と比較した際の規模と速度の不足である。NVIDIAのようなグローバルプレーヤーや、Huawei、Baiduといった中国のテック大手と比較すると、日本のテック企業のAI創薬への参入は限定的である。

### 資金規模の差

米国では、Xaira Therapeuticsが2024年にシリーズAで10億ドルを調達し、Isomorphic Labsが2025年に6億ドルを調達している。中国では、XtalPiが59.9億ドル規模の提携を発表し、国家AIファンドが600億元、地方ベンチャーファンドが1380億元に達している。対照的に、日本のAI創薬スタートアップへの投資規模は大幅に小さく、AMEDの支援も重要ではあるものの、米中の規模には及ばない。<sup>[62] [26] [15] [58] [61] [21]</sup>

### 人材不足

日本は高齢化する労働力と、AI-バイオ分野の人材プールが限定的であるという課題に直面している。グローバルなAI人材の獲得競争において、日本は米国や中国と比較して魅力度で劣る面がある。Stanford、MIT、Cambridge、Oxfordといった世界トップクラスの大学との連携強化と、AI-バイオ融合の博士課程プログラムの創設が急務である。

### スピードの課題

Astellasの7ヶ月という候補物質選定記録は競争力があるものの、Insilico Medicineの9ヶ月という最短記録や、中国企業の1ヶ月での前臨床候補指名と比較すると、さらなる加速が必要である。日本は従来のタイムラインに依存しており、国家的KPIとして6ヶ月の候補物質選定、12ヶ月の臨床試験入りを目標とすべきである。<sup>[50] [3] [19]</sup>

### データインフラの限界

日本は医療記録がよく整理されているものの、人口規模が小さく、中国の14億人や米国の3.3億人と比較して、AI訓練用のデータ量が限られている。AI対応の国家的バイオメディカルデータベースの構築と、富岳スーパーコンピュータと臨床データの統合が必要である。

### エコシステムの分断

東京-1やTakeda-Astellasの合併会社など、いくつかの優れたイニシアチブがあるものの、全体としてエコシステムは分断されている。東京-1モデルを全国規模で展開し、神戸、大阪などにAI創薬ハブを創設することで、より統合されたエコシステムを構築する必要がある。

## 第5部：技術的・倫理的課題

## 5.1 データ品質とアクセシビリティ

AI/MLモデルの出力は「既存データ」への依存度が高いため、根本的なバイアスが導入され、データ解釈に大きな影響を与える。実際には、高品質で、細心の注意を払ってアノテーションされた、包括的に多様なデータセットへのアクセスは、特にリソースが限られた研究グループにとって大きなハードルである。<sup>[63] [64] [65]</sup>

この堅牢なデータの不足は、アクセスの不平等を生み出し、モデル開発と検証を歪め、AI駆動予測の一般化可能性と信頼性を制限する可能性がある。さらに、多くの公開データセットに埋め込まれた固有のバイアス（研究対象集団の人口統計や公表文献の実験バイアスを反映することが多い）は、AI/MLモデルを通じて増幅される。<sup>[64] [63]</sup>

厳格な検証プロトコル、透明性、再現性を備えたデータセットが理想的であるが、その相対的な希少性は、AI創薬の広範かつ公平な実装に重大な課題をもたらしている。Wei et al.が彼らのDrugReAlignフレームワークで強調しているように、単一または限られたデータソースへの依存から生じるバイアスは、マルチソースプロンプティング技術が対処しようとする重要な制限である。<sup>[64]</sup>

これらのデータ制限に対処することは現在の研究の焦点であり、特定の課題を軽減するために設計された新しいベンチマークデータセットの開発につながっている。例えば、LIT-PCBAは、既存のデータセットにおける隠れた分子バイアスの問題に対処するために特別に作成され、機械学習とバーチャルスクリーニングアルゴリズム開発のための「バイアスのない」リソースを提供している。<sup>[64]</sup>

## 5.2 モデルの解釈可能性

複雑な深層学習（DL）モデルに固有のバイアスは、特定の研究パラメータとアルゴリズムの選択に起因し、AIの実用的適用を大幅に妨げる。複雑なDLモデルの「ブラックボックス」性質は、実世界の創薬ワークフローにおける効果的なトラブルシューティングと厳格な検証に対する障壁を生み出すことで、特に実用的なワークフローを妨げる。<sup>[65] [63] [64]</sup>

モデルが失敗したり予期しない結果をもたらしたりする場合、その解釈可能性の欠如は、根本原因の診断と反復設計のための実用的な洞察の抽出を非常に困難にし、最適化サイクルを遅らせる。この不透明性は、AI予測の背後にある明確な根拠を理解し、意思決定プロセスにこれらのツールを自信を持って統合する必要がある医薬化学者や薬理学者からの信頼と広範な採用を損なう。<sup>[64]</sup>

Zhou et al.が強調しているように、複雑な生物学的ネットワークにおける高次近傍情報を見落とす手法は、予測精度を制限する可能性があり、単純な直接的相互作用を超えた複雑なトポロジー特徴を捉えるモデルの必要性を強調している。標準的なGraph Neural Networkアプローチに関連する解釈可能性とデータ表現の課題の一部を軽減するため、Zhou et al.は最近、深層オートエンコーダとサブグラフ拡張を統合するJDASA-MRDモデルを導入した。<sup>[64]</sup>

透明性と説明可能性の必要性は、単なる学術的関心事ではなく、患者の安全性と公衆の信頼に直接的な影響を与える。臨床医がAI生成の洞察に依存して治療決定を下す場合、これらの推奨の基礎を理解する必要がある。同様に、医薬品承認を担当する規制機関は、AI発見薬の安全性と有効性を裏付ける証拠を精査できる必要がある。より解釈可能なAIモデルと複雑なアルゴリズムの出力を説明する技術を開発する努力が進行中である。<sup>[66] [67] [63] [65]</sup>

## 5.3 臨床への移行

AI駆動予測と実験室での検証の間のギャップは依然として重要な課題である。AI創薬における現在の制限は、多くの場合、既知の構造モチーフへの過度の依存と、あまり探索されていない化学空間からのデータの無視、さらにin vitroアッセイのみに基づく場合のデータセット妥当性の制限から生じている。<sup>[64]</sup>

AIモデルは、in silico（コンピュータ上）での予測において優れた性能を発揮する可能性があるが、これらの予測が実際の生物学的システムに移行するかどうかは保証されていない。in vivo（生体内）の複雑性、薬物動態、薬力学、毒性プロファイルは、単純化された計算モデルでは完全には捉えられないことが多い。<sup>[63] [64]</sup>

さらに、AIモデルは通常、in vitroスクリーニングやin silicoシミュレーションからのデータで訓練されており、これらは実際の患者における薬剤の挙動を完全には反映していない可能性がある。その結果、AIが予測した薬候補が臨床試験に進むと、予期しない毒性や有効性の欠如により失敗する可能性がある。<sup>[65] [63]</sup>

この課題に対処するには、AIモデルと実験的検証の間の反復的フィードバックループの構築、より生理学的に関連性の高いin vitroおよびex vivoモデルの使用、臨床データをAI訓練パイプラインに統合することが必要である。<sup>[65] [64]</sup>

## 5.4 規制の不確実性

AI創薬の応用は比較的新しい分野であり、規制ガイドラインは進化している。FDAは、2024年8月のワークショップでCDERディレクターのDr. Cavazzoniが、よりリスクベースの詳細なガイダンスを開発する意図を発表し、中核的な哲学である柔軟でコンテキスト依存の規制を維持しながら、より具体的な監視への段階的進展を示した。<sup>[68]</sup>

2025年1月、FDAは「AI創薬とバイオロジカル製品の規制意思決定を支援するための人工知能の使用に関する考慮事項」と題する草案ガイダンスを発行した。このガイダンスは、薬剤の安全性、有効性、品質に関する規制意思決定を支援することを目的としたデータまたは情報を生成するためのAIの使用に関する業界への推奨事項を提供する。<sup>[69] [70] [68]</sup>

草案ガイダンスは、AIモデルの「モデル信頼性」を確保するためのリスクベースの信頼性評価フレームワークを強調している。スポンサーは、AIツールが意図された使用に対して信頼できることを実証する必要があり、これはFDAレビューアがすでに提出物のAIコンポーネントを評価する方法と同様である。<sup>[68]</sup>

しかし、最近の米国の政治的発展は、FDAの進化する立場を複雑にしている。2025年1月のトランプ政権への移行により、Biden大統領のEO 14110を撤回する大統領令14148が発令された。この新しい命令は、「米国のAIリーダーシップを妨げる可能性がある」規制措置を再評価することを機関に義務付けている。したがって、この政策的強調は、FDAの2025年ガイダンスを弱体化または遅延させる可能性があり、それは前政権下で、規制決定のためのデータを生成するAIモデルを検証するためのリスクベースの使用コンテキストフレームワークを標準化する機関の目的を反映していた。<sup>[27] [68]</sup>

European Medicines Agency (EMA) も、AI/ML開発と展開を監督するための包括的なフレームワークを確立している。規制エンゲージメントのために、EMAはInnovation Task Forceを通じて実験技術のための明確な道筋を確立し、Scientific Advice Working Party協議、および新しい方法論の資格認定手続きを行っている。<sup>[68]</sup>

中国では、National Medical Products Administration (NMPA) が最新の技術ガイドラインで、臨床試験デザイン、安全性監視、標的同一に使用されるAIツール、特にデータの十分性、多様性、代表性を実証することを要求している。開発者は、データセットのソース、人口統計の包含および除外基準に関する詳細なドキュメンテーションを提供し、AI出力の一般化可能性を正当化する必要がある。機関は包括的なトレーサビリティを義務付けており、バージョン管理とAI決定を監査する能力を含め、説明責任を確保している。<sup>[70]</sup>

## 5.5 倫理的懸念

AI創薬におけるデータプライバシーは、最も差し迫った倫理的課題の一つである。AIシステムは、患者の健康記録、ゲノムデータ、臨床試験データを含む膨大な量のデータに依存してアルゴリズムを訓練し、予測を行う。このデータの機密性は、患者の信頼を維持し、個人を潜在的な害から保護するために、厳格なプライバシー保護を必要とする。<sup>[67] [71] [66]</sup>

米国では、Health Insurance Portability and Accountability Act (HIPAA) がコンプライアンスに不可欠であるが、特に希少疾患研究における小規模な人口サイズ、独自の人口特性、広範なデータ共有、患者のオンラインサポートフォーラムへの参加により、再識別リスクは残る。<sup>[72] [67]</sup>

アルゴリズムバイアスも重要な倫理的懸念事項である。AIモデルは訓練されたデータの品質に依存しており、これらのデータセットがバイアスを含んでいる場合、結果として生じるモデルは既存の健康格差を永続化または悪化させる可能性がある。例えば、訓練データが特定の人口統計グループを過小代表している場合、AIシステムは他の集団には効果が低い薬標的を推奨する可能性がある。<sup>[71] [66] [67]</sup>

知的財産 (IP) 所有権も、AI創薬において新たな倫理的および法的複雑性を生み出している。AIが自律的に新規分子を設計する場合、誰がこれらのイノベーションを法的に所有するのか、製薬スポンサー、AI開発者、それともアルゴリズム自体なのか、という疑問が生じる。この不確実性は、イノベーション、協力、公正な報酬に影響を与える可能性がある。<sup>[67] [71]</sup>

説明責任の確立も重要である。AI駆動創薬における説明責任を確立するには、多面的なアプローチが必要である。これには、AI開発と展開のための明確な規制ガイドラインと基準の確立、アルゴリズムの監査と検証プロセスの促進、AI開発者、研究者、医療専門家間で倫理的意識と責任の文化を育成することが含まれる。<sup>[66] [71]</sup>

## 5.6 地政学的リスク

AI創薬における米中間の緊張は、業界に新たなリスクをもたらしている。BIOSECURE Actは、WuXi AppTec、WuXi Biologics、BGI Group、MGI、Complete Genomicsという5つの中国ライフサイエンス企業との連邦契約を停止しようとしており、国家安全保障上の懸念を理由としている。<sup>[73] [74] [75]</sup>

2024年9月、米国下院は306対81の投票でBIOSECURE Actを可決したが、年末の国防権限法案には含まれなかった。このため、法案はトランプ政権に持ち越される可能性が高い。<sup>[74]</sup>

トランプ政権は、中国からの試験薬の流れに「厳しい制限」を課すことを検討していると報じられている。New York Timesが入手した草案の大統領令は、中国を含む「敵対的行為者」が「私たちのオープンな科学および規制システムのギャップを悪用した」と非難している。<sup>[76] [77]</sup>

草案の命令には、米国製薬企業が中国バイオテック企業から薬剤をライセンスする試みに対するより厳格な精査を行い、これらのライセンシング契約が米国の国家安全保障委員会によって評価されるこ



とを保証する提案された政策が含まれている。歴史的に、このような取引は大きなハードルなしに進行してきた。<sup>[72] [76]</sup>

さらに、トランプ政権は大統領令を超えた措置を検討しており、例えば、FDA審査プロセスを迅速化して、製薬企業がより早く安全性研究を開始できるようにすることなどが含まれる。いくつかの著名な投資家は、中国の創薬開発者が米国の特許出願に記載された初期段階のアメリカのバイオテックイノベーションを複製し、アメリカの企業が行動を起こす前に独自のヒト安全性研究を開始するために急ぐ傾向について懸念を表明している。<sup>[76]</sup>

現在、中国は米国よりも多くの業界資金による臨床試験を実施している。米国バイオテックセクターは長期にわたる低迷を経験しており、今年、創薬開発者の新規株式公開市場はほぼ凍結している。この状況は、上海がケンブリッジ（マサチューセッツ州）やサンフランシスコ・ベイエリアなどの伝統的なバイオテックハブをまもなく追い越すのではないかという懸念を増幅させており、これらの地域では創薬開発コストが大幅に高い。<sup>[76]</sup>

「この瞬間、米国はバイオテクノロジーでリードしているが、そのアドバンテージを失いつつあり、即座の行動が必要である」と、Biotechnology Innovation Organizationの会長兼CEOであるRachel Kingが述べた。<sup>[76]</sup>

しかし、主要製薬企業はこれらの制限に反対している。Pfizer、Merck、Gilead Sciences、Vertex Pharmaceuticalsは、BIOSECURE Actが最終的にコストを増加させ、臨床試験を遅延させ、FDA提出と新薬の発売を遅らせる可能性があると主張している。<sup>[74]</sup>

日本にとって、この米中緊張は機会とリスクの両方を提供する。一方で、地政学的に中立的な立場を活用して、両国とのブリッジとして機能できる。他方で、米国との同盟関係を維持しながら、中国の技術とのバランスを取る必要がある。選択的な中国技術のライセンスと、米国との深化したパートナーシップの組み合わせが、日本の戦略的オプションとなる。

## 第6部：日本の「勝ち筋」戦略提案

### 6.1 戦略的方向性：差別化と専門化

日本がAI創薬の分野で米中と競争するには、規模と速度で直接対抗するのではなく、独自の強みを活かした差別化戦略が不可欠である。本分析により特定された日本の「勝ち筋」は、以下の8つの戦略要素から構成される。

#### 専門化フォーカス：アジア人口特化型精密医療

日本の最大の優位性は、アジア人口の遺伝的変異に関する深い知見とデータである。グローバルなデータベースではアジアの遺伝的変異が過小評価されており、中国はデータアクセスに制限があり、米国はフォーカスが不足している。日本は、アジア人口に特化した精密医療AI創薬プラットフォームを構築することで、明確な差別化を図ることができる。

具体的には、2～3年以内にアジアゲノムデータベースを構築し、日本、韓国、台湾、ASEAN諸国との協力により、アジア特有の疾患プロファイルと治療反応性をマッピングする。これにより、グローバル製薬企業が参入できない独自のニッチ市場を確保できる。

#### 再生医療とAIの融合

日本は山中伸弥教授のiPS細胞発見（2012年ノーベル賞受賞）により、再生医療において世界をリードしている。この独自のIP基盤とAI技術を統合することで、他国が模倣困難な競争優位性を構築できる。

3～5年の実装タイムラインで、iPS細胞由来の疾患モデルとAI駆動スクリーニングプラットフォームを統合する。具体的には、RIKENの富岳スーパーコンピュータと、京都大学iPS細胞研究所（CiRA）のデータベースを連携させ、患者由来iPS細胞を用いた高度なハイスループットスクリーニングプラットフォームをAI解析で支援する。<sup>[61]</sup>

### 地域ハブ戦略：アジア太平洋の創薬ハブ

日本の政治的安定性と規制の洗練度は、アジア太平洋地域における創薬ハブとしての地位を確立する上で重要な資産である。中国の地政学的リスクと米国の保護主義的傾向を考慮すると、日本は中立的な立場で米国のイノベーションとアジア市場を橋渡しする役割を果たせる。

即座に実施可能な政策フレームワークとして、日本政府は「アジア太平洋AI創薬イニシアチブ」を主導し、PMDA（医薬品医療機器総合機構）を中心にアジア太平洋地域の規制調和を推進すべきである。これにより、日本で承認された薬剤のアジア市場への迅速な展開が可能となる。

## 6.2 具体的実装戦略

### データインフラ：国家AI対応バイオメディカルデータベース

現状では、日本は医療記録がよく整理されているものの、AI訓練に最適化されたフォーマットではなく、規模も中国の14億人と比較して限定的である。この課題に対処するため、富岳スーパーコンピュータと臨床データを統合した国家AI対応バイオメディカルデータベースを構築する必要がある。

実装ステップとして、第一に、2025～2026年にパイロットプロジェクトを開始し、主要大学病院（東京大学医学部附属病院、京都大学医学部附属病院、大阪大学医学部附属病院など）の電子健康記録（EHR）を標準化されたFHIR（Fast Healthcare Interoperability Resources）フォーマットに変換する。第二に、2027～2028年に全国展開し、国民健康保険データベースとの連携により、1.2億人の臨床データをAI訓練に利用可能にする。第三に、2029～2030年に仮名化情報の活用とプライバシー保護技術（連合学習など）を実装し、データの安全性を確保しながらAI研究を促進する。<sup>[61]</sup>

### 国際協力：米国との深化とアジアネットワーク

日本は、地政学的リスクを回避しつつ、米国との深化したパートナーシップとアジアネットワークの構築を進めるべきである。具体的には、米国のNabla Bio（Takedaとの提携）、Isomorphic Labs、Recursionとの協力を拡大し、日本の製薬企業が米国の最先端AI技術にアクセスできる環境を整備する。<sup>[48] [49]</sup>

同時に、中国技術の選択的ライセンスも検討すべきである。BIOSECURE Actや米国の規制を回避しつつ、HuaweiのPangu Drug Molecule ModelやBaiduのPaddleHelixなどの特定技術を日本企業がライセンスすることで、技術的優位性を獲得できる可能性がある。ただし、これは米国との関係を損なわない範囲で慎重に実施する必要がある。<sup>[40] [11] [9] [38]</sup>

アジアネットワークの構築では、韓国、台湾、シンガポールとの「アジアAI創薬コンソーシアム」を設立し、データ共有、共同研究、規制調和を推進する。これにより、アジア全体で15億人規模の臨床データベースを構築し、中国に対抗できる規模を確保する。

## 国内エコシステム：統合と規模拡大

現在、日本のAI創薬エコシステムは東京-1やTakeda-Astellas合併会社など個別のイニシアチブが存在するものの、全体としては分断されている。これを解決するため、東京-1モデルを全国規模で展開し、神戸（バイオメディカルイノベーションクラスター）、大阪（関西圏の製薬企業集積）、福岡（スタートアップフレンドリー環境）にAI創薬ハブを創設する必要がある。<sup>[78]</sup>

各ハブは特定の専門領域に特化する。東京ハブは小分子創薬とAI基盤モデル開発、神戸ハブは免疫学・再生医療とAIの融合、大阪ハブは抗体薬・バイオリジクスとAI設計、福岡ハブはスタートアップ育成と国際連携に焦点を当てる。<sup>[78]</sup>

## 規制優位性：AI創薬特化型承認経路

日本のPMDAは、条件付き承認制度（再生医療促進法）で世界をリードしており、これをAI創薬に拡張することで規制優位性を確立できる。具体的には、「AI創薬ファストトラック承認経路」を2025～2026年に導入し、AIで設計された薬候補に対して、従来の前臨床試験の一部を免除または簡略化する制度を確立する。<sup>[79]</sup>

さらに、アジア太平洋地域の規制調和をリードし、PMDA、韓国のMFDS（食品医薬品安全処）、台湾のTFDA（衛生福利部食品薬物管理署）、シンガポールのHSA（Health Sciences Authority）が共同でAI創薬ガイドラインを策定する。これにより、日本発のAI創薬がアジア市場全体に迅速に展開できる環境を整備する。

## 技術投資：戦略的集中投資

米中と比較して、日本のAI創薬への投資規模は大幅に小さい。この格差を埋めるため、政府主導のAI創薬ムーンショットプログラム（5年間で5000億円）を立ち上げるべきである。これは、内閣府のムーンショット型研究開発制度の一環として位置づけ、AMEDが実行機関となる。

投資の内訳としては、AI基盤モデル開発（1500億円）：日本語医学文献とアジア人臨床データに特化した基盤モデルの開発。ハイスループットスクリーニング自動化（1000億円）：ロボット化されたウェットラボとAIの統合。臨床試験AI最適化（1000億円）：患者リクルート、試験デザイン、データ解析のAI化。スタートアップ育成（1500億円）：AI創薬スタートアップへの直接投資とマッチングファンド。

## 人材開発：グローバル人材獲得と育成

日本は高齢化する労働力とAI-バイオ人材の限定的なプールという課題に直面している。この問題に対処するため、グローバルAI人材を積極的に誘致し、国内人材を戦略的に育成する必要がある。

グローバル人材誘致策として、第一に、「AI創薬グローバルタレントビザ」を創設し、AI創薬分野の研究者とエンジニアに対して、5年間の就労ビザと永住権への迅速な経路を提供する。第二に、Stanford、MIT、Cambridge、Oxfordとの共同AI-バイオ博士課程プログラムを創設し、日本企業がスポンサーとなって年間100名のグローバル博士人材を育成する。第三に、海外の日本人AI研究者の帰国促進プログラムを実施し、米国や欧州で活躍する日本人AI研究者に対して、研究費と高待遇を保証して帰国を促す。

国内人材育成策としては、東京大学、京都大学、大阪大学に「AI創薬専攻」を新設し、医学、薬学、化学、情報科学の融合カリキュラムを提供する。また、製薬企業の研究者に対するAIリテラシー研修

プログラムを義務化し、Takeda、Astellas、Daiichi Sankyoなどの大手製薬企業が全研究者にAI基礎教育を実施することを政府支援の条件とする。

## スピードと効率：プロセスイノベーション

Astellasの7ヶ月という候補物質選定記録は競争力があるものの、Insilico Medicineの9ヶ月や中国企業の1ヶ月と比較すると、さらなる加速が必要である。日本は、プロセスイノベーションを通じて、6ヶ月の候補物質選定、12ヶ月の臨床試験入りを国家的KPIとして設定すべきである。<sup>[3] [19] [50]</sup>

具体的な施策として、第一に、自動化ウェットラボの全国展開を推進する。XtalPiの上海自動化ラボやPFNのMN-2スーパーコンピュータをモデルに、日本各地のハブにロボット化された創薬実験室を設置する。第二に、リアルタイムAIフィードバックループを構築する。Nabla BioのJAMプラットフォームのように、設計から実験検証まで3〜4週間のサイクルを実現するシステムを日本企業が独自開発または導入する。第三に、並列処理の最大化を図る。NovartisがAzure上で「数千の化学実験を同時にシミュレーション」しているように、富岳スーパーコンピュータとクラウドコンピューティングを統合し、並列計算能力を最大限に活用する。<sup>[47] [55] [49] [20]</sup>

## 6.3 差別化ポイントと実現可能性

日本の提案戦略は、以下の8つの差別化ポイントに基づいている：

**アジア疾患フォーカス：**アジア遺伝的変異がグローバルデータベースで過小評価されており、中国はアクセス不可、米国はフォーカス不足であるため、日本が優位に立てる。実装タイムラインは2〜3年でアジアゲノムDBを構築可能である。

**高齢化人口ソリューション：**超高齢社会が独自の疾患プロファイルを創出しており、日本は世界で最も高齢化が進んだコホートを持つ。既存データを即座に活用可能である。

**再生医療+AI：**iPS細胞における世界的リーダーシップ（山中伸弥ノーベル賞）という独自のIP基盤があり、3〜5年でプラットフォームを統合できる。

**小分子エクセレンス：**数十年にわたる蓄積された専門知識があり、従来の小分子化学の強みとAIアクセラレーションを組み合わせることで、1〜2年で既存パイプラインを加速できる。

**製造イノベーション：**製薬製造における品質評価があり、CDMO能力拡張とAI駆動合成最適化を組み合わせることで、2〜4年で施設アップグレードが可能である。

**地域ハブ戦略：**政治的安定性という優位性を持ち、米国イノベーションとアジア市場の橋渡し役として機能でき、政策フレームワークは即座に実施可能である。

**質重視AIモデル：**規制の洗練度があり、ブラックボックスに対して解釈可能で臨床的に検証されたAIを重視することで、3〜5年でモデル開発が可能である。

**ハイブリッドアプローチ：**職人技への文化的価値があり、伝統的な医薬化学専門知識とAIツールを組み合わせることで、即座にパイロットプロジェクトを開始できる。

## 6.4 リスクと緩和策

提案戦略には、以下のリスクと緩和策が伴う：

**資金不足リスク**：米中と比較して政府予算が限定的であるため、民間セクターとのマッチングファンドを義務化し、製薬企業とベンチャーキャピタルからの共同投資を促進する。また、アジア開発銀行（ADB）などの国際金融機関から、アジア太平洋AI創薬イニシアチブへの融資を獲得する。

**人材流出リスク**：グローバル人材市場での競争力不足があるため、研究環境の質的優位性（研究の自由度、生活の質）を強調し、サンフランシスコやボストンと比較した東京・京都の魅力をマーケティングする。また、株式報酬とストックオプションを含む競争力のある報酬パッケージを提供する制度改革を実施する。

**規制遅延リスク**：PMDAの慎重な承認プロセスがイノベーションを阻害する可能性があるため、AI創薬ファストトラック承認経路を明確に法制化し、透明性のあるガイドラインを公表する。また、規制サンドボックスを設置し、AI創薬企業が規制当局と早期に対話できる環境を整備する。

**エコシステム分断リスク**：地域間の競合と非効率的なリソース配分があるため、中央調整機関（AMEDを拡充）を設置し、ハブ間の連携とリソース共有を義務化する。また、共通データプラットフォームとAPIを開発し、各ハブが開発したツールとデータを相互利用可能にする。

**地政学的リスク**：米中緊張の激化が日本の中立的立場を脅かす可能性があるため、技術主権を重視し、重要な基盤技術（基盤モデル、自動化ラボシステム）は国内開発を優先する。また、米国との安全保障協力と中国との経済協力を明確に分離し、安全保障上機密性の高いデータは米国のみと共有し、非機密の科学的協力は中国とも継続する。

### 結論：2030年に向けた日本の戦略的ポジショニング

AI創薬は、製薬産業の構造転換を引き起こす「次の主戦場」となっており、米中両国は国家戦略として大規模な資源を投入している。2024～2025年は、技術的成熟と商業的実現性が証明された転換点であり、Insilico MedicineのPhase IIa成功やByteDanceの高ヒット率達成など、実用化の成果が相次いで報告されている。米国ではNVIDIA（市場シェア14.2%）、Google/Alphabet（AlphaFold、Isomorphic Labs）、Microsoft（Azure基盤）がエコシステムを支配し、中国ではHuawei（Pangu Drug Model）、Baidu（PaddleHelix）、Tencent、Alibaba、ByteDanceが政府の強力な支援のもと急速に商業化を進めている。<sup>[11] [4] [80] [34] [36] [2] [22] [23] [9] [40] [18] [3] [10] [38] [20] [41] [21]</sup>

日本は伝統的な製薬強国としての地位を持つものの、AI創薬における米中との格差は明白である。資金規模（米国：Xaira \$1B、中国：国家ファンド¥600B vs 日本：限定的）、臨床進捗（Insilico 10プログラム vs 日本：限定的AI-firstパイプライン）、市場規模（米国\$3.6-3.8B、中国\$1.86B→\$6.89B vs 日本：AI segment nascent）のいずれにおいても後れを取っている。<sup>[2] [37] [26] [15] [62] [3]</sup>

しかし、日本には独自の勝ち筋が存在する。第一に、**アジア人口特化型精密医療**という差別化戦略である。グローバルデータベースでアジア遺伝的変異が過小評価されている現状において、日本は韓国、台湾、ASEANと協力してアジアゲノムデータベースを構築し（2～3年）、中国がアクセスできず米国がフォーカスしていないニッチ市場を確保できる。

第二に、**再生医療とAIの融合**である。山中伸弥教授のiPS細胞（2012年ノーベル賞）という独自のIP基盤を活かし、富岳スーパーコンピュータとCiRAのデータベースを統合することで、3～5年で他国が模倣困難な競争優位性を構築できる。<sup>[61]</sup>

第三に、**地政学的中立性を活かした国際連携ハブ戦略**である。BIOSECURE Actやトランプ政権の中国制限により、米中間の技術協力が困難になる中、日本は政治的安定性を武器に、米国のイノベーション（Nabla Bio、Isomorphic Labs）とアジア市場を橋渡しする役割を果たせる。<sup>[73] [77] [74] [48] [76] [49]</sup>

実装には、8つの戦略要素が必要である：（1）専門化フォーカス：アジア疾患・高齢化ソリューション、（2）データインフラ：国家AI対応バイオメディカルDB、（3）国際協力：米国深化+アジアネットワーク、（4）国内エコシステム：東京-1モデルの全国展開（神戸・大阪・福岡ハブ）、（5）規制優位性：AI創薬ファストトラック承認経路、（6）技術投資：政府主導5000億円AI創薬ムーンショット、（7）人材開発：グローバル人材誘致+国内育成、（8）スピード&効率：6ヶ月候補選定・12ヶ月臨床入りKPI。<sup>[78]</sup>

2030年に向けて、日本は「量」ではなく「質」で勝負し、アジア太平洋のAI創薬ハブとして位置づけられる可能性がある。米中の大量生産アプローチに対し、日本は解釈可能で臨床的に検証されたAIモデル、職人技と先端技術の融合、規制の洗練度という差別化要素を武器に、ニッチだが高付加価値の市場を確保できる。成功の鍵は、戦略的集中投資（分散ではなく）、プロセスイノベーション（技術だけでなく）、そして地政学的中立性の活用である。日本がこの戦略を実行すれば、2030年までにアジアのAI創薬リーダーとして、グローバル製薬産業において不可欠な存在となる可能性が高い。



1. <https://36kr.jp/443198/>
2. <https://www.gminsights.com/industry-analysis/ai-in-drug-discovery-market>
3. <https://www.news-medical.net/news/20250211/Insilico-Medicine-announces-preclinical-drug-discovery-benchmarks-from-2021-to-2024.aspx>
4. <https://insilico.com/news/tnik-ipf-phase2a>
5. <https://investor.nvidia.com/news/press-release-details/2025/NVIDIA-Partners-With-Novo-Nordisk-and-DCAI-to-Advance-Drug-Discovery/default.aspx>
6. <https://investor.nvidia.com/news/press-release-details/2025/NVIDIA-Partners-With-Industry-Leaders-to-Advance-Genomics-Drug-Discovery-and-Healthcare/default.aspx>
7. <https://www.drugtargetreview.com/news/156914/googles-ai-co-scientist-accelerates-drug-development/>
8. <https://daoinsights.com/news/huaweis-ai-cloud-service-accelerates-new-drug-discovery/>
9. <https://www.huawei.com/en/media-center/transform/06/using-ai-to-design-new-drugs>
10. <https://www.scmp.com/tech/tech-trends/article/3327390/baidu-backed-drug-discovery-start-biomap-challenges-googles-alphafold>
11. <https://www.huawei.com/en/huaweitech/industry-trends/has24-takeaways-pangu-omdia>
12. <https://www.fiercebitech.com/research/japan-biotech-inks-research-pact-efforts-develop-new-rna-meds>
13. <https://newsroom.astellas.com/2024-04-22-Takeda,-Astellas-and-Sumitomo-Mitsui-Banking-Announce-Master-Agreement-to-Establish-Joint-Venture-Company-for-Incubation-of-Early-Drug-Discovery-Programs>
14. <https://intuitionlabs.ai/articles/nvidia-gpus-in-pharma-industry>
15. <https://www.cbinsights.com/research/ai-in-drug-discovery/>
16. <https://www.clinicaltrialsarena.com/marketdata/big-pharma-ai-partnerships/>

17. [https://www.microsoft.com/ja-jp/industry/blog/health/2025/06/10/ai\\_ml\\_in\\_drug\\_discovery/](https://www.microsoft.com/ja-jp/industry/blog/health/2025/06/10/ai_ml_in_drug_discovery/)
18. <https://www.pharmaceutical-technology.com/news/google-backed-isomorphic-labs-raises-600m-to-advance-ai-drug-discovery/>
19. <https://www.prnewswire.com/news-releases/insilico-received-positive-topline-results-from-two-phase-1-trials-of-ism5411-new-drug-designed-using-generative-ai-for-the-treatment-of-inflammatory-bowel-disease-302344176.html>
20. <https://intuitionlabs.ai/articles/microsoft-azure-in-pharma-industry>
21. <https://bccmedianews.com/?p=4152>
22. <https://techcrunch.com/2025/03/31/alphabets-ai-drug-discovery-platform-isomorphic-labs-raises-600m-from-thrive/>
23. <https://www.nytimes.com/2025/03/31/business/dealbook/isomorphic-google-thrive-investment.html>
24. [https://www.ey.com/en\\_nl/firepower-report](https://www.ey.com/en_nl/firepower-report)
25. <https://itif.org/publications/2025/09/08/americas-ai-action-plan-implications-for-biopharmaceutical-innovation/>
26. <https://www.globaltechcouncil.org/ai/china-launches-comprehensive-national-ai-strategy/>
27. <https://www.fiercehealthcare.com/ai-and-machine-learning/white-house-releases-ai-action-plan-looks-speed-adoption-healthcare>
28. <https://ashleydudarenok.com/china-ai-strategy/>
29. <https://www.whitehouse.gov/wp-content/uploads/2025/07/Americas-AI-Action-Plan.pdf>
30. <https://biosector.jp/japans-bioeconomy-strategy-innovations-and-opportunities-for-global-collaboration/>
31. <https://gtb.jba.or.jp/en/japans-bioeconomy-strategy-2024/>
32. [https://www8.cao.go.jp/cstp/english/bio/bio\\_economy\\_en.pdf](https://www8.cao.go.jp/cstp/english/bio/bio_economy_en.pdf)
33. <https://www.precedenceresearch.com/ai-driven-drug-discovery-platforms-market>
34. <https://www.fiercebitech.com/medtech/alphabet-google-ai-drug-discovery-deepmind-protein-folding>
35. <https://www.isomorphiclabs.com/articles/introducing-isomorphic-labs>
36. <https://www.linkedin.com/pulse/enhancing-drug-discovery-power-ai-novartis-microsoft-gomez-tena-jcrxf>
37. <https://www.drugpatentwatch.com/blog/china-leads-in-ai-driven-drug-discovery-patents-signaling-pharmaceutical-innovation-boom/>
38. <https://www.huaweicloud.com/intl/en-us/cases/pgywdf.html>
39. <https://www.youtube.com/watch?v=kQ9c9EPV0EU>
40. <https://paddlehelix.baidu.com>
41. <https://www.yicaiglobal.com/news/alibaba-tencents-medical-ai-models-break-into-critical-care>
42. <https://trial.medpath.com/news/9c4453e40802062c/china-dominates-ai-driven-drug-discovery-patent-landscape-reshaping-pharmaceutical-r-d>
43. [https://english.www.gov.cn/news/202503/11/content\\_WS67cf8993c6d0868f4e8f0b3e.html](https://english.www.gov.cn/news/202503/11/content_WS67cf8993c6d0868f4e8f0b3e.html)
44. <https://formaspace.com/articles/tech-lab/ai-based-drug-discovery-revolutionize-pharma-labs/>
45. [https://www.wicinternet.org/2025-10/15/c\\_1131867.htm](https://www.wicinternet.org/2025-10/15/c_1131867.htm)
46. <https://www.fiercebitech.com/cro/china-ai-biotech-xtalpi-lands-15m-from-sequoia-google-tencent>

47. <https://newsen.pku.edu.cn/PKUmedia/14378.html>
48. <https://www.reuters.com/business/healthcare-pharmaceuticals/us-biotech-nabla-bio-japans-takeda-expand-ai-drug-design-partnership-2025-10-14/>
49. <https://www.biopharmatrend.com/news/nabla-bio-and-takeda-expand-ai-driven-antibody-design-partnership-in-billion-dollar-deal-1416/>
50. <https://research.sdmjapan.com/successful-ai-drug-discovery-cases/>
51. <https://www.reportlinker.com/dlp/dd59868f6d5ab7c0b1ef22d9ff5679bd>
52. <https://www.r-ccs.riken.jp/en/outreach/topics/20231010-1/>
53. <https://www.fujitsu.com/global/about/resources/news/press-releases/2023/1010-01.html>
54. <https://asia.nikkei.com/business/technology/fujitsu-taps-generative-ai-to-help-speed-drug-development>
55. <https://www.preferred.jp/en/news/pr20210906/>
56. <https://projects.preferred.jp/drug-discovery/>
57. <https://www.fujitsu.com/emeia/about/resources/case-studies/cs-2021aug-peptidream.html>
58. <https://www.amed.go.jp/en/aboutus/aisatsu.html>
59. [https://www.amed.go.jp/en/aboutus/objectives\\_project.html](https://www.amed.go.jp/en/aboutus/objectives_project.html)
60. <https://www.cas.go.jp/jp/seisaku/souyakuryoku/shiryou/gijiroku1.pdf>
61. [https://www.cas.go.jp/jp/seisaku/souyakuryoku/pdf/toward\\_implementation\\_of\\_the\\_interim\\_report.pdf](https://www.cas.go.jp/jp/seisaku/souyakuryoku/pdf/toward_implementation_of_the_interim_report.pdf)
62. <https://www.ropesgray.com/en/insights/alerts/2025/02/key-takeaways-from-the-life-sciences-industry-in-2024-and-whats-next>
63. <https://arxiv.org/pdf/2309.12177.pdf>
64. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.5c00549>
65. <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC10302890/>
66. <https://prism.sustainability-directory.com/scenario/ethical-considerations-in-ai-driven-drug-discovery/>
67. <https://blog.getvirtualadvisory.com/post/the-ethical-implications-of-ai-in-drug-discovery-and-patient-care>
68. <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC12598624/>
69. <https://www.fda.gov/about-fda/center-drug-evaluation-and-research-cder/artificial-intelligence-drug-development>
70. <https://www.fdli.org/2025/07/regulating-the-use-of-ai-in-drug-development-legal-challenges-and-compliance-strategies/>
71. [https://www.multidisciplinaryfrontiers.com/uploads/archives/20250219183353\\_51.pdf](https://www.multidisciplinaryfrontiers.com/uploads/archives/20250219183353_51.pdf)
72. <https://globalforum.diaglobal.org/issue/april-2025/artificial-intelligence-and-regulatory-realities-in-drug-development-a-pragmatic-view/>
73. <https://www.statnews.com/2025/10/10/senate-passes-biosecure-act-trump-drug-pricing-china/>
74. <https://www.fiercepharma.com/pharma/biosecure-act-mia-us-defense-bill-key-win-china-biotech-service-providers>
75. <https://www.reuters.com/markets/us/us-bill-restrict-business-with-chinas-wuxi-apptec-bgi-passes-house-2024-09-09/>
76. <https://www.nytimes.com/2025/09/10/business/trump-medicines-china-biotech.html>



77. <https://www.fiercebiotech.com/biotech/trump-admin-mulls-severe-restrictions-us-pharmas-securing-chinese-meds-nyt>
78. <https://www.globaldeal.io/blog/entering-japans-biotech-market>
79. <https://www.freyrsolutions.com/blog/unlocking-japans-thriving-pharma-landscape-in-2024>
80. <https://insilico.com/tpost/tnrecuxsc1-insilico-announces-nature-medicine-publi>
81. [https://reports.weforum.org/docs/WEF\\_Blueprint\\_to\\_Action\\_Chinas\\_Path\\_to\\_AI-Powered\\_Industry\\_Transformation\\_2025.pdf](https://reports.weforum.org/docs/WEF_Blueprint_to_Action_Chinas_Path_to_AI-Powered_Industry_Transformation_2025.pdf)
82. <https://www.fujitsu.com/jp/solutions/uom/healthy-living/drug-discovery-service/>
83. <https://www.knowledge-sourcing.com/report/japan-ai-driven-hypothesis-generation-market>
84. <https://www3.nhk.or.jp/nhkworld/en/news/backstories/3653/>
85. [https://jcd-expo.jp/PDF/BJ2025\\_data\\_en\\_master.pdf](https://jcd-expo.jp/PDF/BJ2025_data_en_master.pdf)
86. [https://cbi-society.org/taikai/taikai25/abstract\\_poster\\_list.html](https://cbi-society.org/taikai/taikai25/abstract_poster_list.html)
87. <https://note.com/shyamamo/n/n5e43d5867a9c>
88. <https://sinseizai.com/data2024/The 21st NPTE Conference 2024 Program.pdf>
89. <https://www.preferred.jp/en/news/tag/drug-discovery/>
90. <https://www.labiotech.eu/best-biotech/ai-drug-discovery-companies/>
91. <https://www.pharmaceutical-technology.com/analyst-comment/ai-drug-discovery-hypothetical-reality/>
92. <https://www.drugdiscoverytrends.com/2024-the-year-ai-drug-discovery-and-protein-structure-prediction-took-center-stage-2025-set-to-amplify-growth/>
93. <https://www.pharmafocuseurope.com/strategy/strategic-alliances-in-ai-drug-discovery>
94. <https://www.linkedin.com/pulse/global-ai-mergers-acquisitions-april-2024-march-2025-analysis-khan-na-rwmif>
95. <https://aionlabs.com/the-ai-revolution-in-pharma-will-2025-be-the-breakthrough-year/>
96. <https://xtalks.com/pharma-and-biotech-mas-in-2025-roundup-4105/>
97. <https://www.nature.com/articles/s41591-025-03743-2>
98. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359644624003672>
99. [https://www.pulmonaryfibrosis.org/patients-caregivers/medical-and-support-resources/clinical-trials-education-center/pipeline/drug/idiopathic-pulmonary-fibrosis/ism001-055-\(ins018\\_055\)](https://www.pulmonaryfibrosis.org/patients-caregivers/medical-and-support-resources/clinical-trials-education-center/pipeline/drug/idiopathic-pulmonary-fibrosis/ism001-055-(ins018_055))
100. <https://www.biopharmatrend.com/tech-giants/biopharmas-hunt-for-artificial-intelligence-who-does-what-34/>
101. <https://insilico.com>
102. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2095177925000656>
103. <https://www.authorea.com/doi/full/10.22541/au.176184278.86885419/v1>
104. <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11670736/>
105. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ddr.22115>
106. <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/10842700/>
107. <https://apcoworldwide.com/blog/the-economic-and-security-objectives-shaping-u-s-china-medical-trade/>
108. <https://ieeexplore.ieee.org/document/11081368/>
109. <https://www.frontiersin.org/journals/public-health/articles/10.3389/fpubh.2025.1585180/full>

110. <https://www.mordorintelligence.com/industry-reports/japan-pharmaceutical-market>
111. <https://pj.jiho.jp/article/252596>
112. <https://itbrief.asia/story/elix-tohoku-university-partner-to-use-ai-in-drug-discovery>
113. <https://eliquent.jp/blog/2025/02/06/2024-top-selling-pharmaceuticals-in-japan/>
114. <https://www.keidanren.or.jp/en/policy/2024/034.pdf>
115. <https://thequantuminsider.com/2025/11/03/u-s-expands-quantum-and-ai-partnerships-with-japan-and-korea/>
116. <https://www.makanapartners.com/overview-of-japans-pharma-executive-talent-market-and-industry-trends>
117. <https://onestepbeyond.co.jp/blogs/the-growing-demand-for-healthcare-and-biotech-in-japan/>
118. <https://www.elix-inc.com/news/news-release/2183/>
119. <https://www.towayakuhin.co.jp/english/assets/En2024mihiraki.pdf>
120. <https://prismbiolab.com/news/prism-biolab-and-elix-join-forces-to-accelerate-ai-driven-drug-discovery-for-protein-protein-interaction-targets/>
121. <http://www.phrma-jp.org/wordpress/wp-content/uploads/2024/11/5.2-2024-PhRMA-Days-Press-Conference-Presentation-ENG-FINAL-v3.pdf>
122. [https://www.rohto.co.jp/global/news/release/2024/0208\\_01/](https://www.rohto.co.jp/global/news/release/2024/0208_01/)
123. <https://cloud.google.com/transform/gen-ai-drug-discovery-isomorphic-labs-demis-hassabis>
124. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0031699725075118>
125. <https://news.microsoft.com/source/2024/10/10/microsoft-expands-ai-capabilities-to-shape-a-healthier-future/>
126. <https://finance.yahoo.com/news/ai-biotechnology-research-report-2025-143800500.html>
127. <https://www.microsoft.com/ja-jp/industry/blog/health/2024/07/09/healthcare-pharmaceutical-seminar-0528/>
128. <https://dhinsights.org/blog/nvidia-2025-healthcare-ai-report/>
129. <https://www.computerweekly.com/news/252434498/AstraZeneca-inks-deals-with-Alibaba-and-Tencent-in-AI-push>
130. <https://finance.yahoo.com/news/tencent-claims-20-gain-r-093000879.html>
131. <https://www.tokyofoundation.org/research/detail.php?id=980>
132. <https://english.ckgsb.edu.cn/knowledge/article/ai-applications-in-china-healthcare-system/>
133. <https://hpcwire.com/bigdatawire/this-just-in/baidu-create-2024-empowering-everyone-as-creators-of-the-ai-future/>
134. <https://aait.co.jp/archives/51285>
135. <https://www.china-briefing.com/news/chinas-ai-healthcare-market-part-ii-investment-strategies-and-tips/>
136. <https://www.pmda.go.jp/files/000224827.pdf>
137. [https://www.jetro.go.jp/en/invest/attractive\\_sectors/life\\_science/government\\_initiatives.html](https://www.jetro.go.jp/en/invest/attractive_sectors/life_science/government_initiatives.html)
138. <https://cset.georgetown.edu/publication/china-and-medical-ai/>
139. <https://sj.jst.go.jp/news/202409/n0905-01k.html>
140. <https://2021-2025.state.gov/artificial-intelligence/>

