

2024 年度冬期
グラデュエーションペーパー
予稿

題 目	
デジタル技術革新が創薬に及ぼす 影響に関する研究	
技術経営論文	ビジネス企画提案

学籍番号	8823257	氏名	山中 崇裕
------	---------	----	-------

教 員	
主査	加藤 晃 教授
審査委員 担当	小林 憲二 教授

東京理科大学大学院 経営学研究科 技術経営専攻

「デジタル技術革新が創薬に及ぼす影響に関する研究」

内容

1.	はじめに	3
(1)	研究の背景	3
(2)	A I 創薬の概況	3
2.	先行研究・理論	4
(1)	A I 創薬の技術階層	4
(2)	A I 創薬は段階移行確率の増加、各段階の時間減、シーズ増加に貢献	4
(3)	A I 創薬は外部環境の時間的変化によるイノベーションの可能性	5
(4)	A I 創薬の技術ブレークスルーの可能性	6
3.	リサーチクエスチョンと研究手法（事例研究）	7
(1)	A I 創薬ベンチャーの重点疾患領域	7
(2)	A I 創薬ベンチャーの技術的変換体としての Capability 考察	9
(3)	メガファーマはA I 創薬の能力獲得期から活用期へ移行	9
(4)	創薬プロセスのどの部分をA I 化するかを決定できる人材の需要	11
4.	結論	12
(1)	中小製薬企業がA I 創薬でメガファーマに下剋上を起こすには？	12
(2)	今後の課題・展望	12
5.	参考文献	13
6.	References	13

1. はじめに

(1) 研究の背景

A I 創薬に投資をしていくかどうかの意思決定はこれから中小製薬企業の多くが直面する問題である。医薬品産業においてはメガファーマと呼ばれる欧米を中心とした資本力の高い製薬会社とその経営資源の多くを新薬の創出や獲得に投入することでその世界トップクラスの地位を維持し続けている。A I 創薬においても同様の状況であり、中小製薬企業はメガファーマと比べると出遅れている。本研究では、A I 創薬は後発者優位戦略と技術蓄積による技術ブレークスルー、および経済学の視点により、中小製薬企業がメガファーマに対抗できる特性を持っていることを見出した。その特性、A I 創薬ベンチャーの分析による事業特性、およびメガファーマの対応状況を組み合わせた投資の意思決定の戦略的枠組みを提示する。

(2) A I 創薬の概況

近年、創薬プロセスにおける A I 活用が急速に進んでいる。創薬プロセスにおける A I の 5 つの主要なユースケースは、①疾患の理解、②低分子の設計と最適化、③ワクチンの設計と最適化、④抗体の設計と最適化、および⑤安全性と毒性の評価となっている[1]。また、A I を活用した創薬に関する論文のうち、約 80%以上が疾患の理解、ターゲットの発見や低分子の最適化の応用に偏っている[1]。また、A I 技術のうち機械学習と深層学習が活用されており、A I 創薬ベンチャーが創出した臨床資産は 2023 年 6 月時点で 70 品目が臨床試験に供されている[1]。

2. 先行研究・理論

(1) AI 創薬の技術階層

AI 創薬はイノベーションであると言える。シュンペーターは、イノベーションを「新規のもしくは既存の知識、資源、設備などの新しい結合」[2]と定義している。既存の知識とは従来の創薬プロセスを指し、資源とは蓄積された研究データを指し、設備とは機械学習や深層学習を応用したモデルとそれを動作させる高性能のコンピューティング環境に置き換えることができる。

前述の設備に相当するAI 創薬の技術階層は一般的なITシステムの技術階層に近い構造を有していると考えられる。最下層から順に「技術概念」、「ハードウェア」、「ライブラリ」、「プラットフォーム」、および「ファウンデーションモデル」とした。「プラットフォーム」は、創薬研究の各タスクを一連のプロセスに統合した仕組みである。最上位の「ファウンデーションモデル」とは、医学・生物学などの知識を事前学習させた創薬研究に必要な基盤となるAIモデルである[3]。

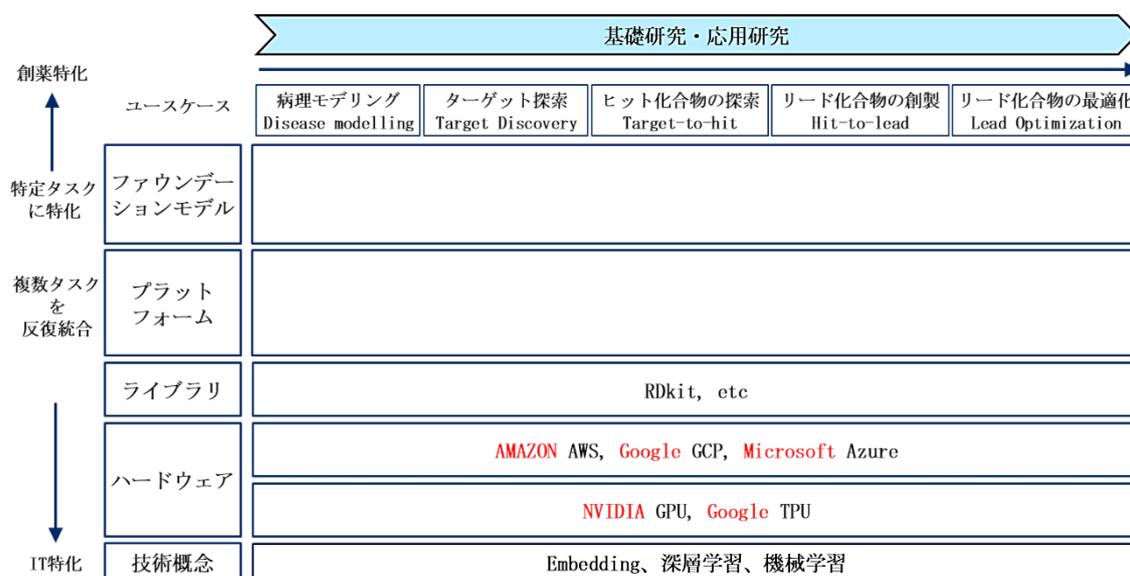


図1 : AI 創薬の技術階層図 「Progress, Pitfalls, and Impact of AI-Driven Clinical Trials」 [4]、もとに筆者作成

(2) AI 創薬は段階移行確率の増加、各段階の時間減、シーズ増加に貢献

医薬品研究開発の生産性の課題とは大きく3つあり、膨大な費用、長大な期間、および極めて低い成功率である。医薬品研究開発の生産性の構成要素には、仕掛品 (Work in

Process : WIP)、技術的成功確率 (Probability of technical success : PTS)、価値 (Value : V)、サイクル時間 (Cycle Time : CT)、および費用 (Cost : C) ある。そして $(WIP \times PTS \times V) \div (CT \times C)$ の計算式で生産性を算出する[5]。

仕掛、技術的成功確率の工場、サイクル時間の短縮につながる要因は図2の通りの関係である[6]。これらの要素に関連する創薬タスク特定し、それに特化したAIモデルを適用することが生産性向上につながる。

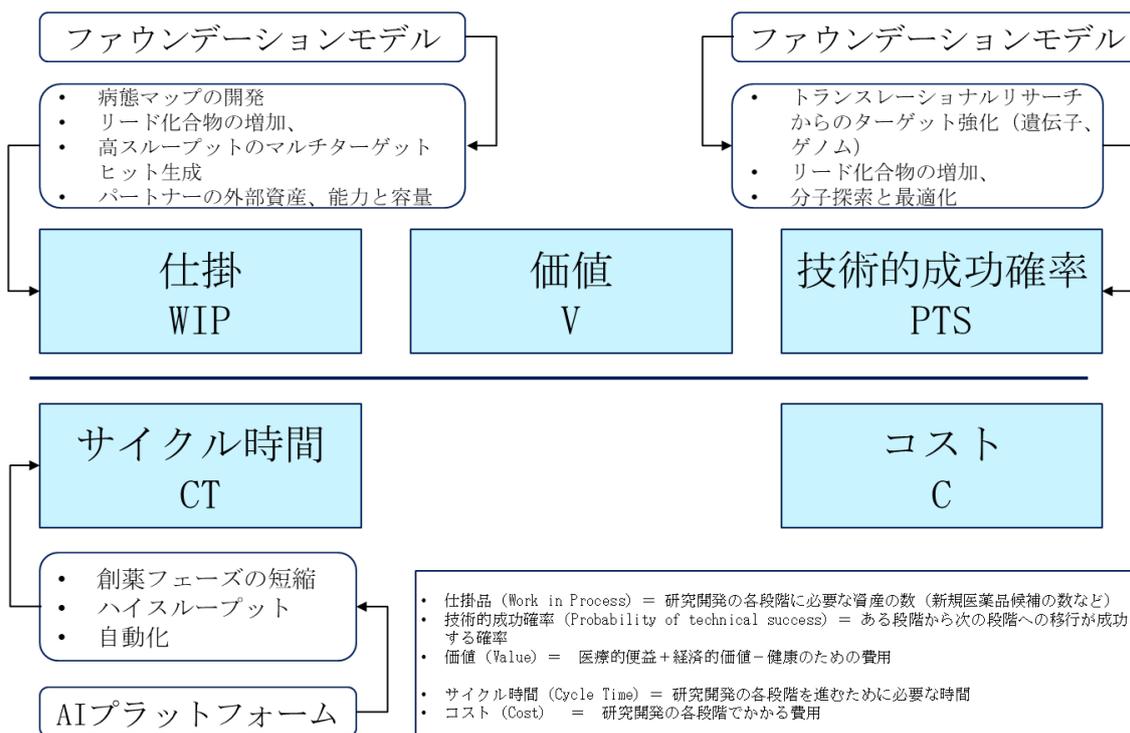


図2 : AI創薬の技術概念と研究開発の生産性の関連

「How to improve R&D productivity : the pharmaceutical industry’s grand challenge」[5]、「Revolutionizing drug R&D with Lab in a Loop, 25 November 2024」[6]をもとに筆者作成

(3) AI創薬は外部環境の時間的变化によるイノベーションの可能性

後発者優位の競争戦略が、中小製薬企業がAI創薬の競争環境に参入する際の基本戦略となる。「技術の外部環境の時間的变化とは、時間の経過とともに成否が判明したり、想定以上の性能を発揮したり、新技術の登場によるイノベーションの発生のことである」[7]。現在のAI創薬の根底にある技術概念は機械学習である。機械学習の新手法の出現と創薬への応用は時間をおいて連動している。(表1)

技術概念 (主)	技術概念 (副)	技術的転換年	手法	用途	発表年	モデル	
Machine Learning	Stastical Modeling	2012	Supervised learning	分子特性の予測	N/A	N/A	
		2020	Self-Supervised learning	活性分子の同定	2023	ImageMol	
	Reinforcement Learning				化合物設計	2020	Deep Quartet
					化合物の生成	2022	REINVENT
		2013	Deep Q-Network	分子最適化	2019	MolDQN	
				DMTAサイクル最適化	2023	Double DQN	
		Reinforcement Learning with Human Feedback	2019	分子構造評価	2023	ReLEHF	
				分子設計	2023	MolRL-MGPT	
	Neural Networks	Recurrent Neural Networks (RNN)	2012	化学空間探索	2017	ChemTS	
				分子設計	2021	PharmaNet	
			中枢神経系薬の設計	2024	CNSMolGen		
2012		Convolutional Neural Networks (CNN)	薬物-標的タンパク室相相互作用の予測	2022	DTI-CNN		
			薬物間相互作用の予測	2024	MCNN-DDI		
2014		Generative Adversarial Networks (GAN)	分子設計	2020	druGAN		
			分子設計	2024	MedGAN		
			分子設計	2024	Chemistry42		
		分子設計	2024	InstGAN			
		分子の立体構造生成	2024	ConfGAN			
2015	CNN + RNN	仮想スクリーニング	2016	DeepVS			
		化合物タンパク質親和性	2019	DeepAffinity			
		薬物-標的相互作用予測	2019	PADME			
2017	Transformer	分子設計	2021	MegaMolBART			
		タンパク質構造変化予測	2023	DeepTwin			
		分子設計	2024	drugAI			

表 1 : 機械学習の技術概念と A I 創薬応用モデルの時間的变化

An Engineer's Trek into Machine Learning[8]をもとに筆者作成

(4) A I 創薬の技術ブレークスルーの可能性

技術蓄積とは、「技術開発において明らかになる様々な技術変数間の関係性、その制御の具体的実現方法、技術メカニズムの積み重ねと[9]」である。A I 創薬における技術変数と関係性を考える。

A I 創薬における技術変数として考えられるものに、「機械学習モデル」、「データの品質と量」、「計算資源」、「創薬プロセスの各段階」を挙げることができる。これらの技術変数のうち、2.2 節の図 3 の技術階層図に当てはめると、「機械学習モデル」は、ファウンデーションモデルに対応し、「計算資源」はハードウェアに対応する。

技術変数間の相互作用を整理する際に確認すべき重要な経験則として、スケール則 (Scaling Laws) がある[10]。この経験則に従う限り、計算資源と機械学習 (深層学習) モデルは、ビッグテック企業の技術の優位性は揺るがない。ただ、「データの品質と量」には中小製薬企業にもチャンスがある。企業固有の非公開データを基にしたアウトプットは、他社との差別化が可能である。「データの品質」は、中小製薬企業がメガファーマに対して優位に立つために蓄積すべき技術変数である。

現在の AI の性能は規模の大きさによって技術的優位性が決まるが、フォスターが言う「いかなる技術にも限界があり、より高い限界を持つ新技術は不連続に発生する」ことがおそらくスケール則にも当てはまる。規模の大きさとは異なる AI 性能向上のアプローチの出現は、技術ブレークスルーにつながる新たな技術変数となる可能性が高い。

3. リサーチクエスチョンと研究手法（事例研究）

本研究のリサーチクエスチョンを「中小製薬企業が AI 創薬でメガファーマに下剋上を起こすには何が必要か？」とする。第 2 章までに整理した理論を用いて戦略的枠組みの仮説を導出するために、事例研究を行った。事例として AI 創薬ベンチャーの事業特性とメガファーマの AI 創薬への投資状況を選択した。選択の理由は、① AI 創薬事業で重要視されている疾患領域とビジネスモデルを把握するため、②メガファーマは AI 創薬でどの部分に強みがあるのかを分析するためである。B3C フレームワークを用いて中小製薬企業が自社戦略を策定するため枠組みを作成する。B3C フレームワークとは、「事業環境および競合・自社戦略の全体を捉えるためのフレームワークである。土俵（Battle Circle=BC）、競合（Competitor=C）、自社（Company=C）で B3C と呼ぶ。[11]。」本研究では 3 つの視点として、土俵=AI 創薬、競合=メガファーマ、そして自社=中小製薬企業と置き換える。

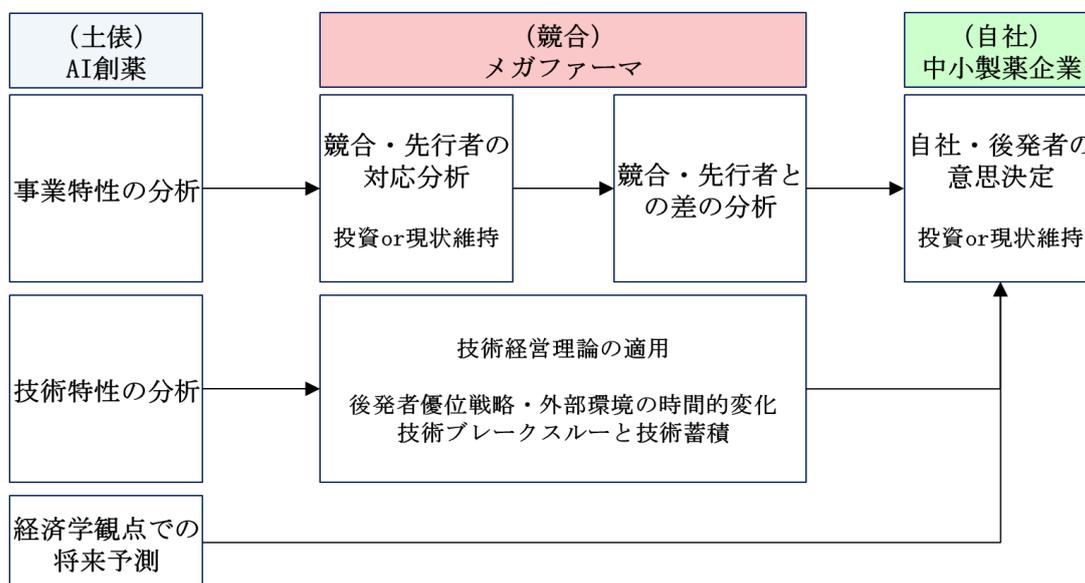


図 3：中小製薬企業の AI 創薬投資の意思決定までの枠組み 筆者作成

(1) AI 創薬ベンチャーの重点疾患領域

外部の力を借りて AI 創薬を進める場合、製薬企業にとって AI 創薬ベンチャーの注力

領域は最も基本的な情報となる。図1でリストアップしたA I創薬ベンチャー234社の重点疾患領域のABC分析を行った(図4)。Oncology(がん)領域、Immunology(免疫)領域、Neurology(神経)領域、およびinflammation(炎症)領域で全体の約80%を占めていた。

調査方法

図1でリストアップしたA I創薬ベンチャー234社を調査対象とした。情報源はA I創薬ベンチャーのホームページで公開されているパイプライン、およびホームページで会社の強みとして明記しているものとし、希少疾患やホームページから読み取ることが困難なものは、「Others」とした。「Others」は図4からは除外した。

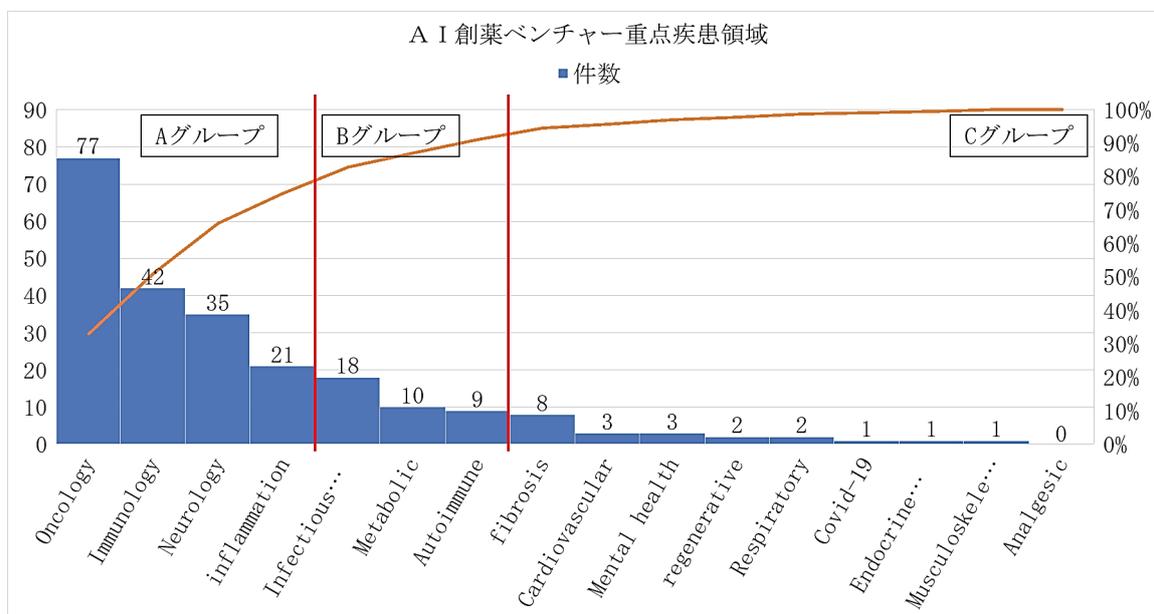


図4 : A I創薬ベンチャー疾患重点領域 筆者作成

(2) A I 創薬ベンチャーの技術的変換体としての Capability 考察

A I 創薬ベンチャーを技術的変換体として考えると図 6 のようになる。機械学習を応用した技術的変換が A I 創薬ベンチャーの価値創出プロセスである。この技術的変換の差別化要素として、A I 技術力（事業性、効果、データ）、資金力、提携実績（大手製薬企業、大手 I T 企業）、新規医薬品候補の保有とその開発段階、科学論文の有無、特化領域といった情報を用いて A I 創薬ベンチャーの特徴を分類することができる。

インプット	技術的変換	アウトプット
化合物データ オミクスデータ 臨床データ 文献情報	機械学習による分子構造処理 強化学習による化合物最適化 深層学習による創薬ターゲット予測	新規性の高い標的候補と仮説 新規化合物の構造設計 合成ルートの最適化提案

表 2 : A I 創薬ベンチャーの技術的変換の例 筆者作成

(3) メガファーマは A I 創薬の能力獲得期から活用期へ移行

メガファーマは 2022 年以降、特定の目的を持った研究のための A I 創薬ベンチャーとの提携が増加している（図 5）。それまで戦略的や多目的といった提携の主目的が抽象的な関係が主であったが、おそらく、A I を活用した創薬の理解が進み、より具体的な目標に深堀が進んでいると推察される。

特定の目的の研究について、疾患領域別に分類したところ、Oncology（がん）領域、Immunology（免疫）領域、および inflammation（炎症）領域に関する提携の件数が上位を占めており、第 3 章 2 節の A I 創薬ベンチャーの重点疾患領域の傾向と類似している。

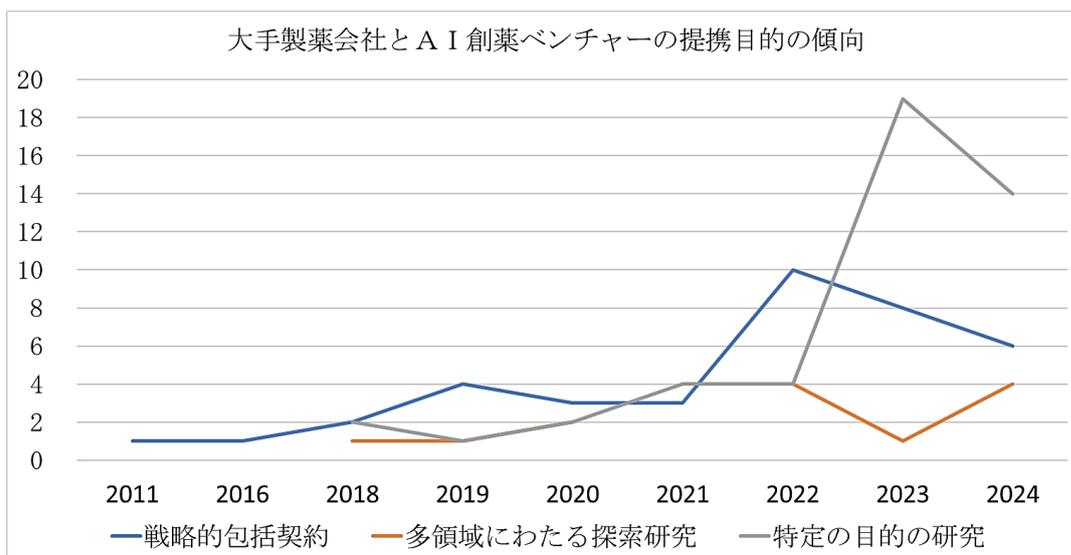


図 5 : 大手製薬会社と AI 創薬ベンチャーの提携目的の傾向 筆者作成

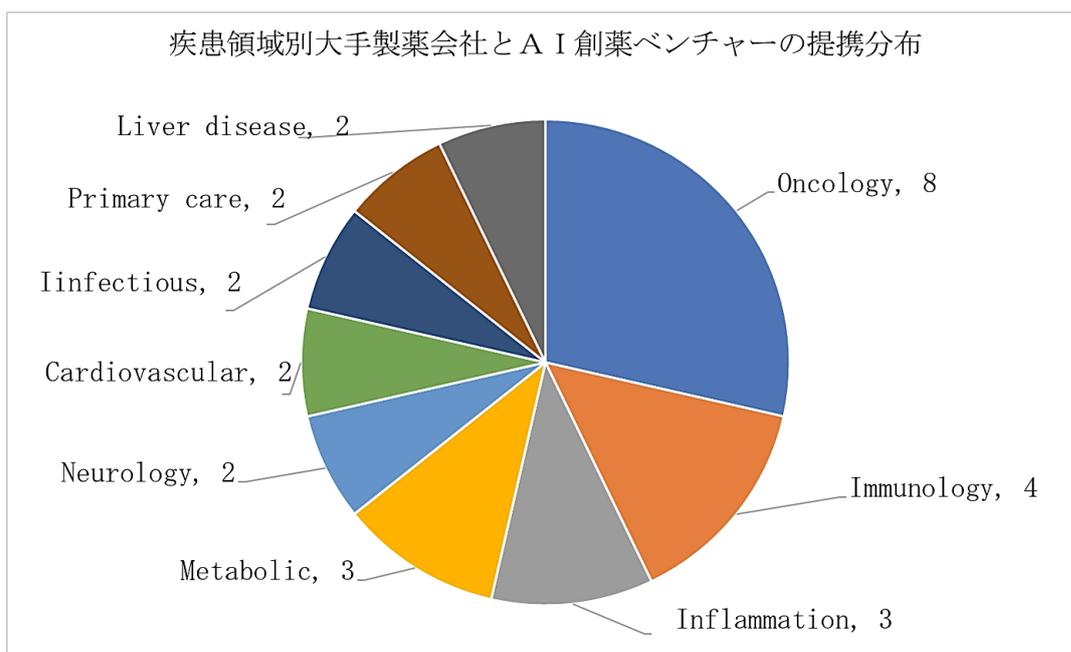


図 6 : 疾患領域別大手製薬会社と AI 創薬ベンチャーの提携分布 筆者作成

調査方法

図 1 でリストアップした AI 創薬ベンチャー 234 社が外部企業との提携を行ったニュースをインターネット上から収集した。収集した期間は 2011 年から 2024 年 10 月までの間で

ある。収集項目から、A I 創薬ベンチャー企業名、ニュースタイトル、取引日付、相手先企業名に絞りこみを行った。図 5、および図 6 は相手先企業名が日米欧の売上上位 10 位以内の企業に絞って集計を行った。

(4) 創薬プロセスのどの部分を A I 化するかを決定できる人材の需要

創薬プロセスの A I 化を経済学の観点で見えていくと、①新規参入企業の増加、②既存企業の創薬プロセス A I 化、③競争が活発化、④創薬プロセス A I 化の拡大の追求、⑤創薬プロセス A I 化の標準化が起こると考えられる。現在は③競争の活発化が始まっている段階であると推察される。今後、標準化の段階に達したとき、創薬プロセスのどの部分を A I 化するかを決定できる人材の需要が増加すると考えられる。第 3 章 2 節で述べた機械学習を応用した技術的変換という A I 創薬ベンチャーの価値創出プロセスの陳腐化が予想されるためである。A I 創薬は計算技術（ソフトウェア）の一種であるから、何を作るかを定めるプロダクトマネージャーと、A I プログラムを作成するソフトウェア開発者がおり、それぞれの関係は補完財であると言える。創薬プロセスと A I 技術の関係は第 2 章 2 節の図 4 で示した通りである。

経済学では 2 つの財が補完しあう関係の場合、一方の価格が下がると、もう一方の需要が高まることが分かっている。創薬プロセスの A I 化の標準化の状態になると、ソフトウェア開発は低コストになるため、創薬プロセスのどの部分を A I 化するかを決定できる人材の需要が増加する。

4. 結論

(1) 中小製薬企業がAI創薬でメガファーマに下剋上を起こすには？

中小製薬企業がAI創薬でメガファーマに対抗するためには、創薬プロセスのどの部分をAI化するかを決定できる人材が必要となる。その人材は次の3つの要素から投資の意思決定の材料を導出する。①競争に勝てる土俵づくり、②競合（メガファーマ）との競争優位の獲得戦略、および③自社（中小製薬企業）の技術内部蓄積である。

競争に勝てる土俵づくりとは、中小製薬企業自身にとって疾患領域的に、創薬プロセス的に、医療関係者・患者にとって有益かつ、メガファーマが参入しない自社にとってメリットのあるニーズを探していくことである。

競合（メガファーマ）との競争優位の獲得戦略とは、本研究では後発者優位戦略を基本として、外部技術環境の不確実性の時間的変化に着目した。

自社（中小製薬企業）の技術内部蓄積とは、メガファーマとの差を埋めるための企業努力に依存する。その理由は大きく2つある。①後発者優位戦略の前提条件と②技術ブレークスルーの条件を満たすためである。外部技術環境の時間的変化を生かすためには、メガファーマと中小製薬企業のAI創薬に関する技術蓄積が同程度になっていることが前提条件となる。また、後発者優位戦略が成立する条件は、この前提に加えて、メガファーマが新しい技術の対応に苦慮し、硬直化が起こることである。

(2) 今後の課題・展望

本研究を通じて、次の5つの検討課題が残った。①経営層に向けた資源動員の正当性、②製薬企業同士のAI創薬の技術的優位性を決める要因、③経営資源以外でメガファーマと中小製薬企業で差がついている要因、④AI創薬ビジネスや成果の分析手法が確立されていない。⑤政策、法令や規制がAI創薬に与える影響である。今後検討していくこととする。

5. 参考文献

- [1] 一橋イノベーション研究センター, イノベーションマネジメント入門 (新装版), 3 版. 株式会社日経 B P, 2022.
- [2] 佐藤 健太郎, 創薬科学入門 一薬はどのようにつくられる? (改訂 2 版), 2nd 版.

6. References

- [1] Boston Consulting Group, 「Unlocking the potential of AI in Drug Discovery - 2023」, 2023 年 6 月. [Online]. Available at: <https://www.bcg.com/publications/2023/unlocking-the-potential-of-ai-in-drug-discovery>
- [2] Schumpeter, J. A., *The Theory of Economic Development*. Harvard University Press, 1934. [Online]. Available at: <http://compaso.eu/wpd/wp-content/uploads/2013/01/Compaso2012-32-Croitoru.pdf>
- [3] NVIDIA, 「基盤モデルとは?」, NVIDIA. [Online]. Available at: <https://blogs.nvidia.co.jp/blog/what-are-foundation-models/>
- [4] D. Wilczok と A. Zhavoronkov, 「Progress, Pitfalls, and Impact of AI -Driven Clinical Trials」, *Clin Pharma and Therapeutics*, p. cpt.3542, 12 月 2024, doi: 10.1002/cpt.3542.
- [5] S. M. Paul ほか, 「How to improve R&D productivity: the pharmaceutical industry's grand challenge」, *Nat Rev Drug Discov*, vol. 9, no. 3, pp. 203–214, 3 月 2010, doi: 10.1038/nrd3078.
- [6] Bruno Eschli, 「Revolutionizing drug R&D with Lab in a Loop」, 2024 年 11 月. [Online]. Available at: https://assets.roche.com/f/176343/x/c6928dc7e4/digi_day2024_gred_final_online.pdf
- [7] 内海京久, 「後発者優位のメカニズム: 参入時期と外部環境不確実性 ー青色 LED 事業参入の事例分析ー」, 2024, doi: <https://doi.org/10.51094/jxiv.684>.
- [8] ML4Devs, 「An Engineer's Trek into Machine Learning」, ML4Devs. [Online]. Available at: <https://www.ml4devs.com/articles/machine-learning-intro-for-developers/>
- [9] 内海京久, 「技術ブレイクスルーにおける技術蓄積の役割」, 組織学会大会論文集, vol. 6, no. 1, pp. 62–67, 2017, doi: https://doi.org/10.11207/taaos.6.1_62.
- [10] J. Kaplan ほか, 「Scaling Laws for Neural Language Models」, 2020 年 1 月 23 日, *arXiv*: arXiv:2001.08361. doi: 10.48550/arXiv.2001.08361.
- [11] 三谷 宏治, 「B3C (ビーサンシー) フレームワーク (B3C Framework)」, [Online]. Available at: https://www.kanazawa-it.ac.jp/tokyo/im/subject/s_strategicthinking.htm