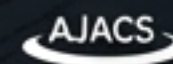


生成AIが拓く、科学研究の新たな地平

AI for Scienceの潮流から、自律型AIエージェントの実装まで

Science Aid株式会社
代表取締役 CEO 山田 涼太



科学研究の全領域をAIが変革する「AI for Science」

「AI for Science」とは、論文調査から査読まで、科学研究のあらゆるプロセスをAIが支援・自動化する広範な取り組みを指す。

AI for Academic
Survey



関連研究の検索
概要レポートの生成

AI for Scientific
Comprehension



論文テキスト、
図表の自動読解

AI for Scientific
Discovery



アイデア創出
理論分析
実験計画・実行

AI for Academic
Writing



半自動・全自動での
論文執筆支援

AI for Academic
Peer Reviewing



査読プロセスの
支援・自動化

究極の目標は、人間を超える 「AI科学者」の創造

この分野の最終的な野望は、一流の人間科学者を超える、あるいは人間には不可能なレベルで科学的発見を自律的に行う「AI科学者」を開発することである。

> "AI systems that can make significant scientific discoveries that can outperform the best human scientist may be called 'AI Scientist'" >

— Kitano 2021, Nature npj

北野氏が提唱する「AI科学者」は、ソフトウェアとハードウェアが動的に連携し、仮説生成から実験、データ解析までを閉ループで自動化するシステムとして構想されている。



世界的な潮流：「AI科学者」を目指す巨大プロジェクト群

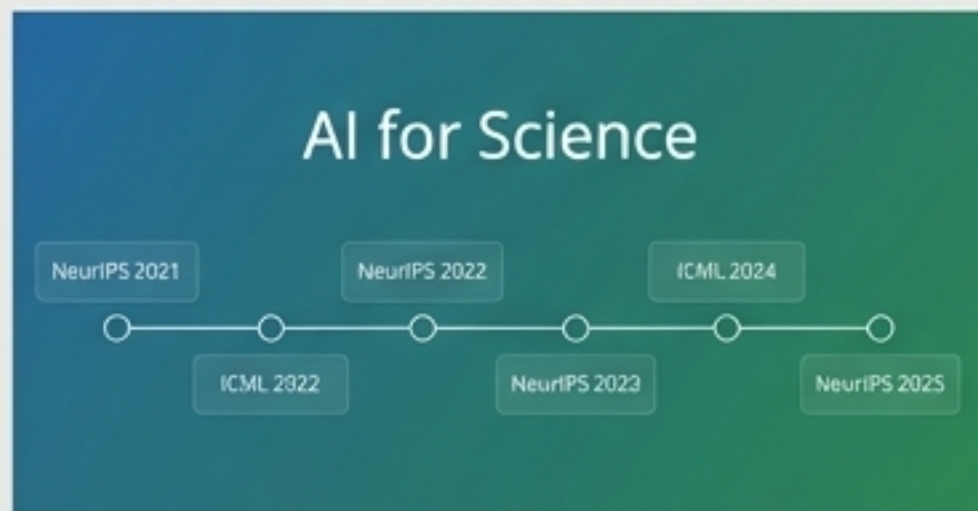
生成AIの登場を契機に、科学の自動化を目指す取り組みが世界中で加速している。

Nobel Turing Challenge (2022～)



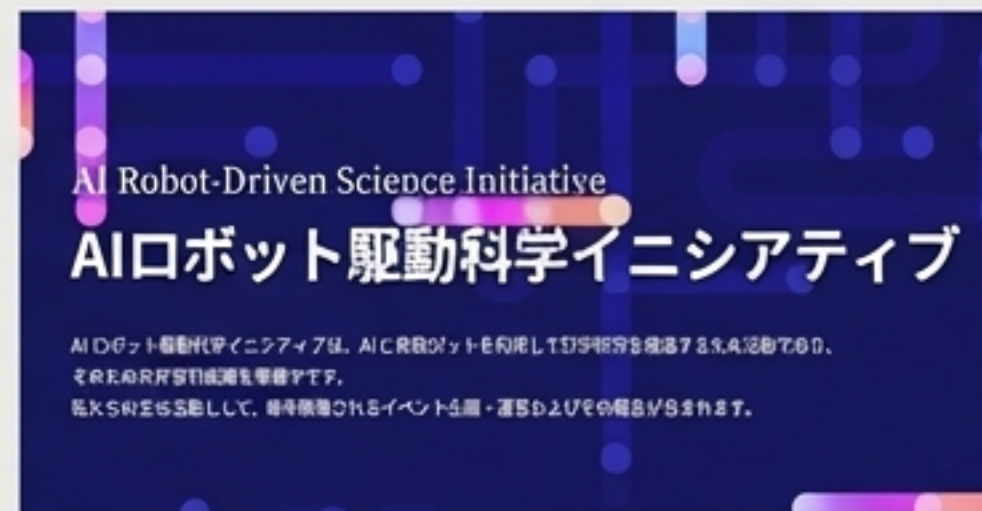
目標: ノーベル賞級の科学的発見を自律的に行えるAIとロボットシステムの開発を目指すグラウンドチャレンジ。

AI for Science Workshop (2021～)



活動: NeurIPSやICMLなど、トップクラスのAI国際会議で継続的に開催されるワークショップシリーズ。

AIロボット駆動科学イニシアティブ (2023～)

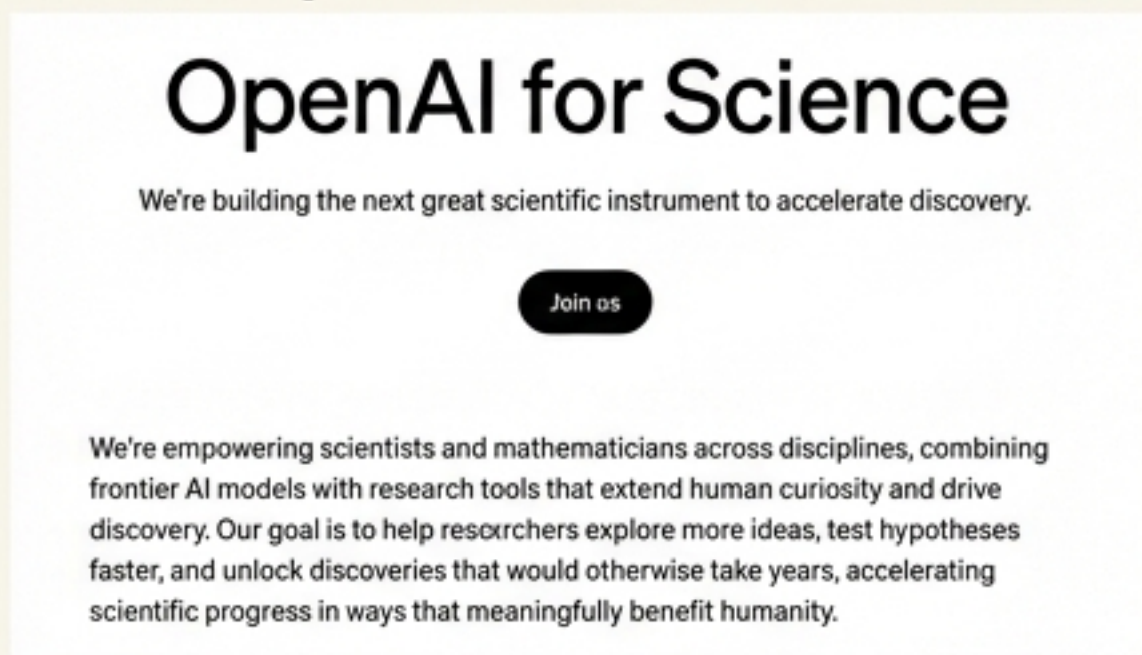


活動: 日本国内でAIと実験ロボットを活用した科学研究を推進する非営利組織。

AI業界も科学研究に熱視線：主要プレイヤーが専門チームを設立

OpenAIやAnthropicのようなフロンティアAIモデルを開発する企業が、科学研究を「次なる偉大な科学機器」と位置づけ、専門部署を立ち上げている。

OpenAI for Science



"We're building the next great scientific instrument to accelerate discovery."

活動

- 科学者や数学者がより多くのアイデアを探求し、仮説をより速く検証し、発見を加速させるためのツールとフロンティアAIモデルを組み合わせる。

Claude for Life Sciences

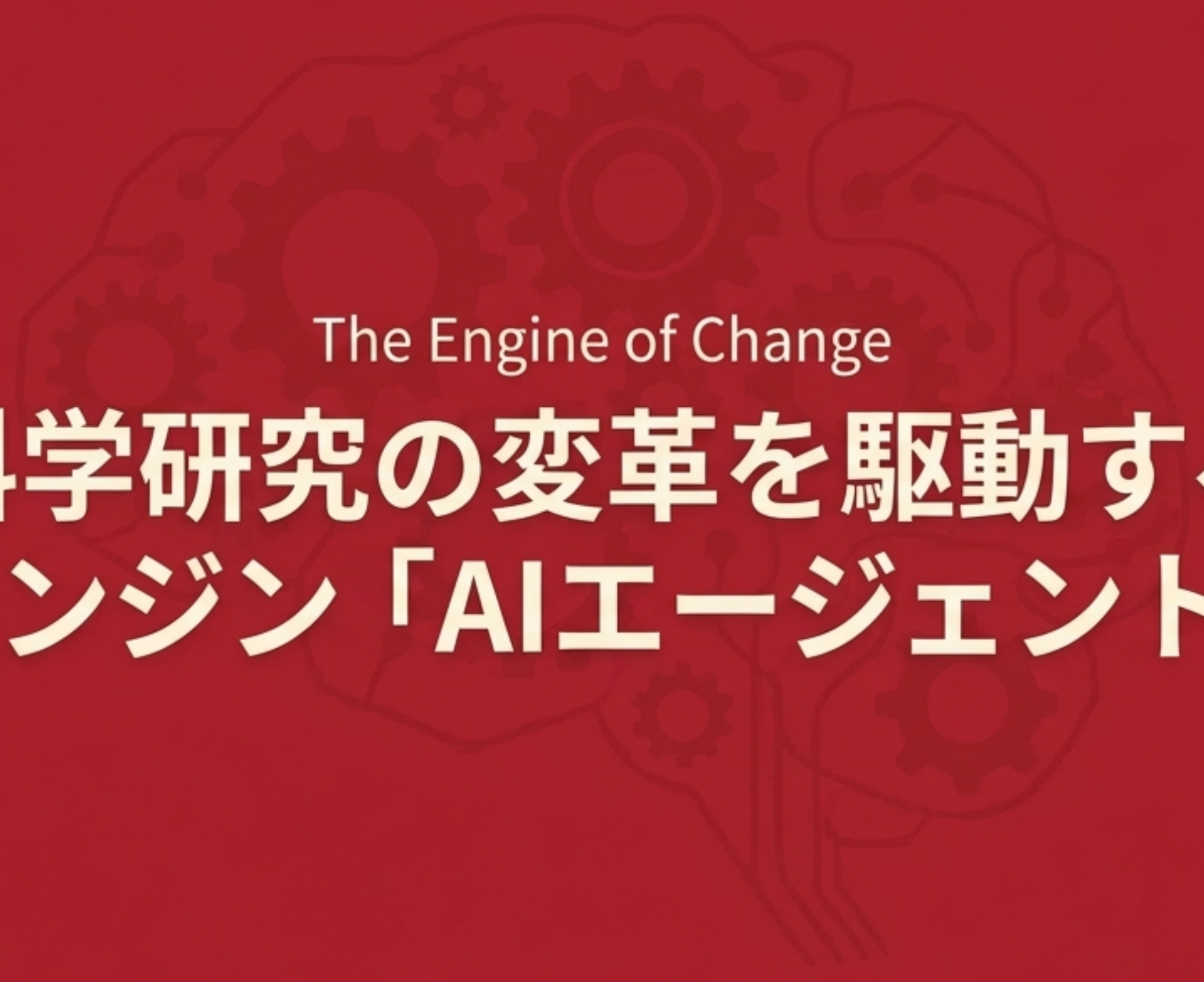


ミッション

- Anthropic社が提供するClaudeモデルをライフサイエンス研究に特化させる取り組み。

活動

- 創薬、臨床開発、ゲノミクスなどの分野で研究者を支援。論文検索ツールなどを統合。



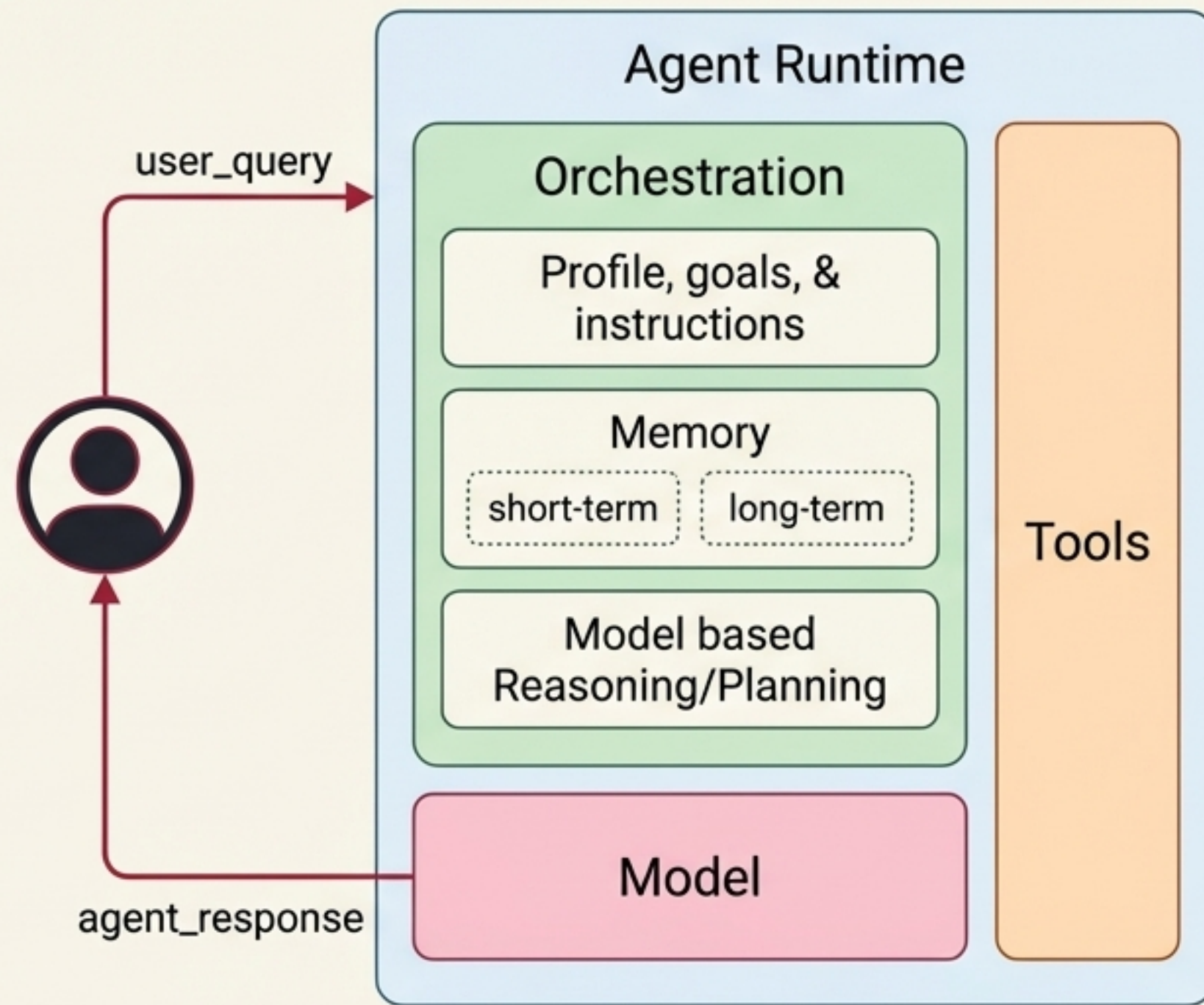
The Engine of Change

科学研究の変革を駆動する エンジン「AIエージェント」

AIエージェントとは何か？LLMを超える自律システム

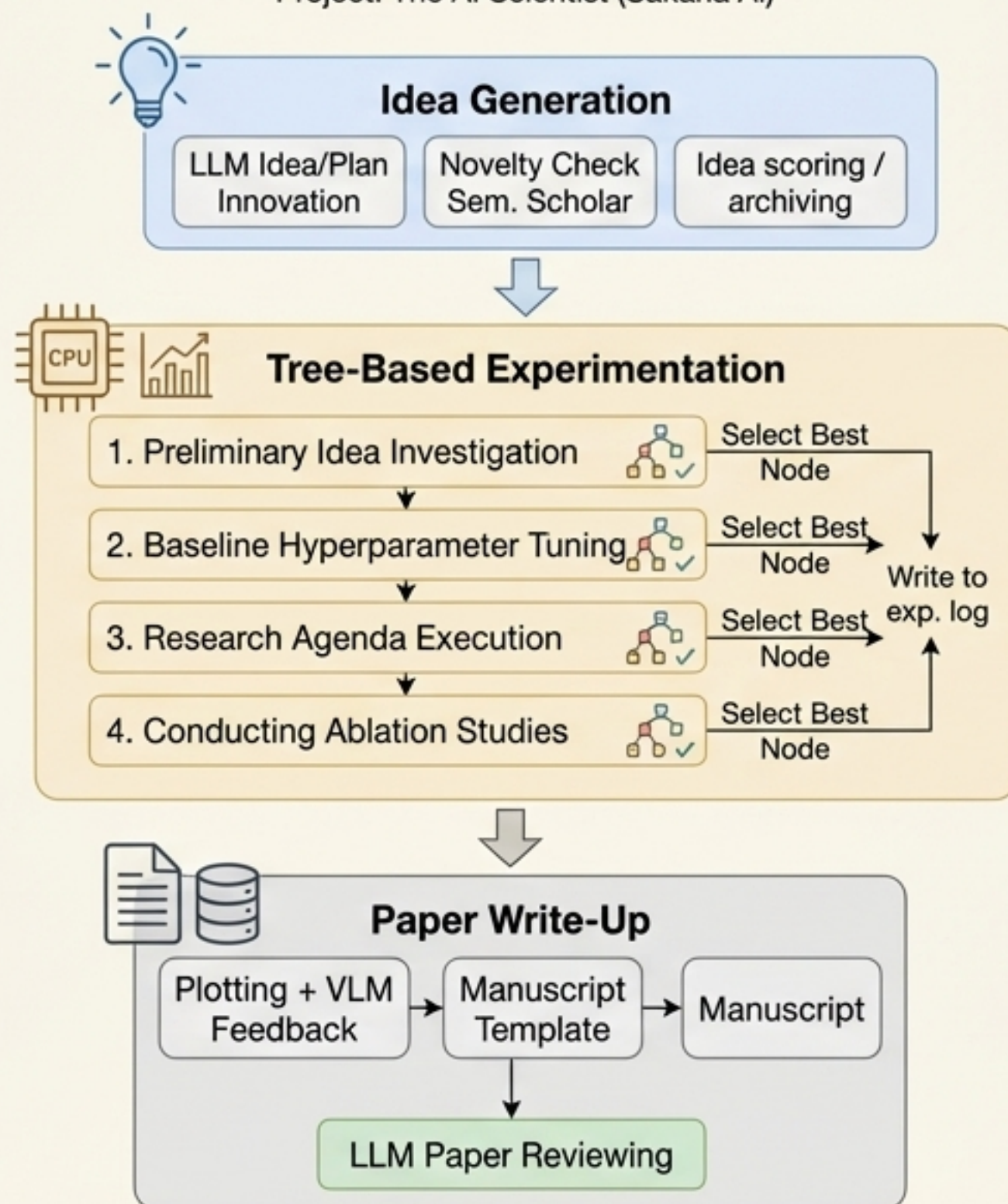
- > 「世界を観察し、自由に使えるツールを使って行動することで、目標を達成しようとするアプリケーション」 – Google Whitepaper

大規模言語モデル (LLM)	AIエージェント
- テキストの理解と生成に特化。 - 入力に対し単一の応答を返す。 - 知識は学習データに基づく。	- LLMを中核に、追加機能を組み合わせたシステム。 - 目標達成のために計画・実行する。 - 検索、計算、DBなど外部ツールを使用可能。 - 環境からのフィードバックで行動を調整できる。 - メモリ機能で過去の対話を記憶・活用できる。



実証：自律的に論文を執筆・投稿する「The AI Scientist」

Project: The AI Scientist (Sakana AI)



機械学習研究のプロセス（先行研究調査、アイデア創発、実験、執筆、レビュー）を完全に自動化するフレームワークを構築。

画期的な成果

- AIが生成した3本の論文を国際会議のワークショップに投稿。
- 査読者にはAI生成論文が含まれることのみを通知し、ブラインドで査読。
- 結果、**1本が採択**され、投稿論文の**上位45%**に位置するスコアを獲得。これはAIが人間と同等のレベルで査読を通過する能力を持っていることを示している。



A Glimpse of Today's Reality

ライフサイエンスにおける実装例：汎用AI「Biomni」



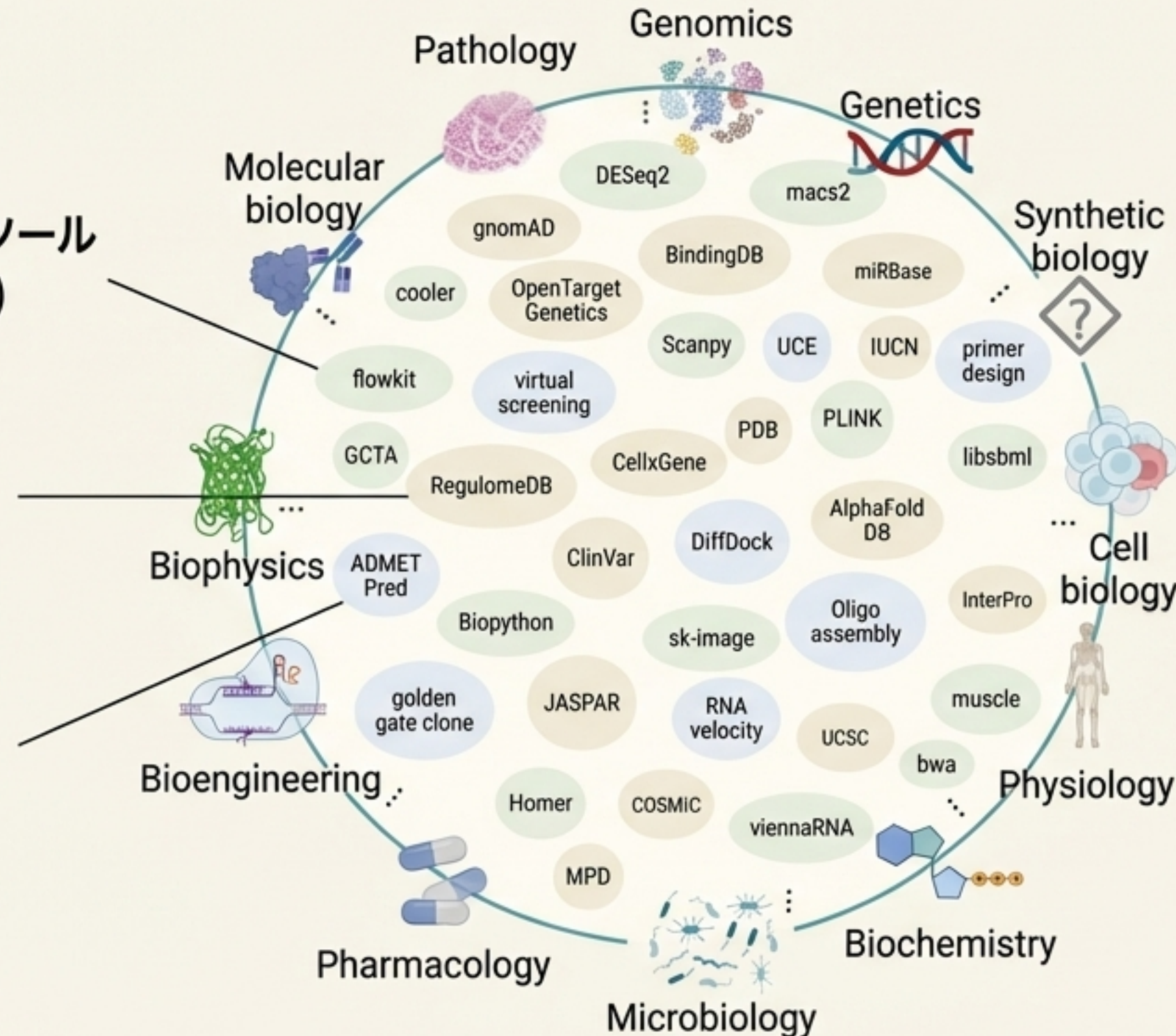
Biomni : 150の専門ツールと59のDBを使いこなす、汎用バイオメディカルAI

概要: スタンフォード大学が開発した、広範なバイオメディカル領域のタスクを遂行可能な汎用AIエージェント。

150 の生物医学的専門ツール
(e.g., AlphaFold, BLAST)

59 の専門データベース
(e.g., PDB, ClinVar, DrugBank)

105 のソフトウェア
パッケージ



可能なタスクの例:

Variant interpretation
(変異解釈)

scRNA-seq annotation
(シングルセルRNA-seqアノテーション)

ADMET property prediction
(ADMET特性予測)

Cloning protocol design
(クローニングプロトコル設計)

Rare disease diagnosis
(希少疾患診断)

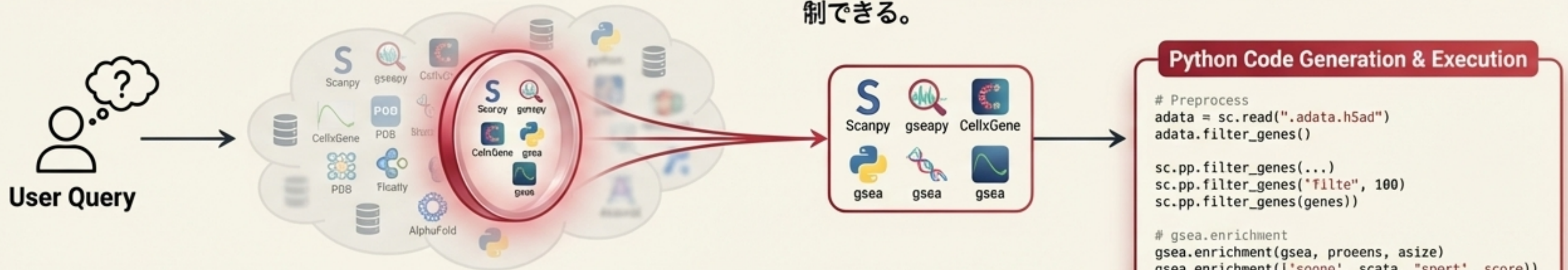
Biomniの革新性：膨大なツール群から最適なものを動的に選択し、コードとして実行する

動的なツール選定

ユーザーからのリクエストを受け取ると、300以上の全ツールの中から、そのタスクに最も関連性の高いツール群（通常10個以内）を動的に特定する。これにより、エージェントは無関係な情報に惑わされず、タスクに集中できる。

CodeActアーキテクチャの採用

複数のツールを順次呼び出すのではなく、タスク解決のための一連の処理を一つのPythonコードとして生成する。
利点: ツール間の複雑なデータ連携や処理フローをプログラムとして直接記述できるため、頑健性と再現性が向上し、ハルシネーションを抑制できる。



Process Example:

User Query: "Are oncogenic pathways enriched among differentially expressed genes in adata.h5ad?"

Reasoning (Biomniが生成する計画):

1. Preprocess, cluster and identify differentially expressed genes.
2. Load oncogenic gene sets for comparison.
3. Perform enrichment analysis to check for oncogenic pathways.
4. Validate results with literature and databases.

最終的にこれらのステップを実行するコードが生成・実行される。

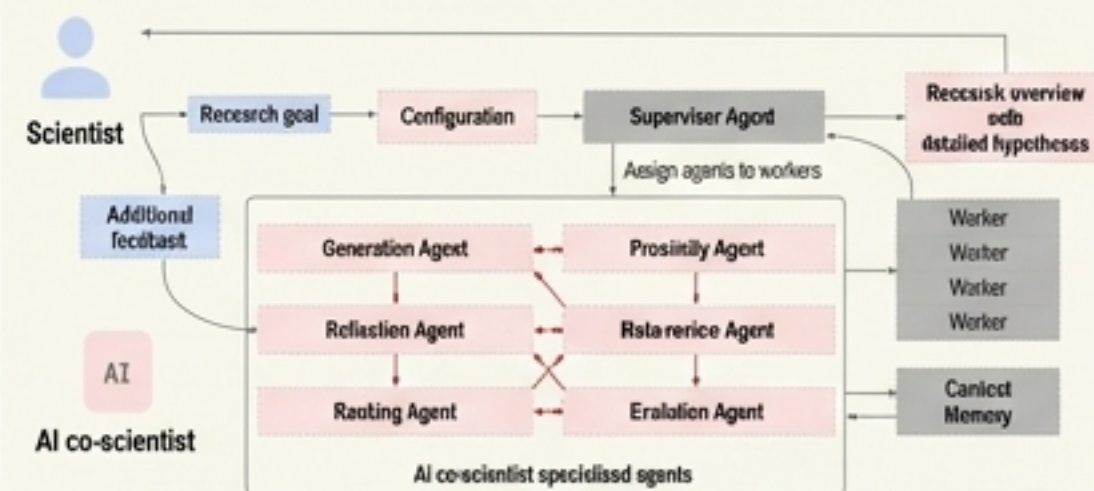
Biomniだけではない：加速するAI科学者開発エコシステム

Google、Harvard、FutureHouse/Edison Scientificなど、主要な研究機関や企業が同様のAI科学者・支援エージェントの開発に注力しており、エコシステムが形成されつつある。

AI co-scientist (Google)

virtual scientific collaborator

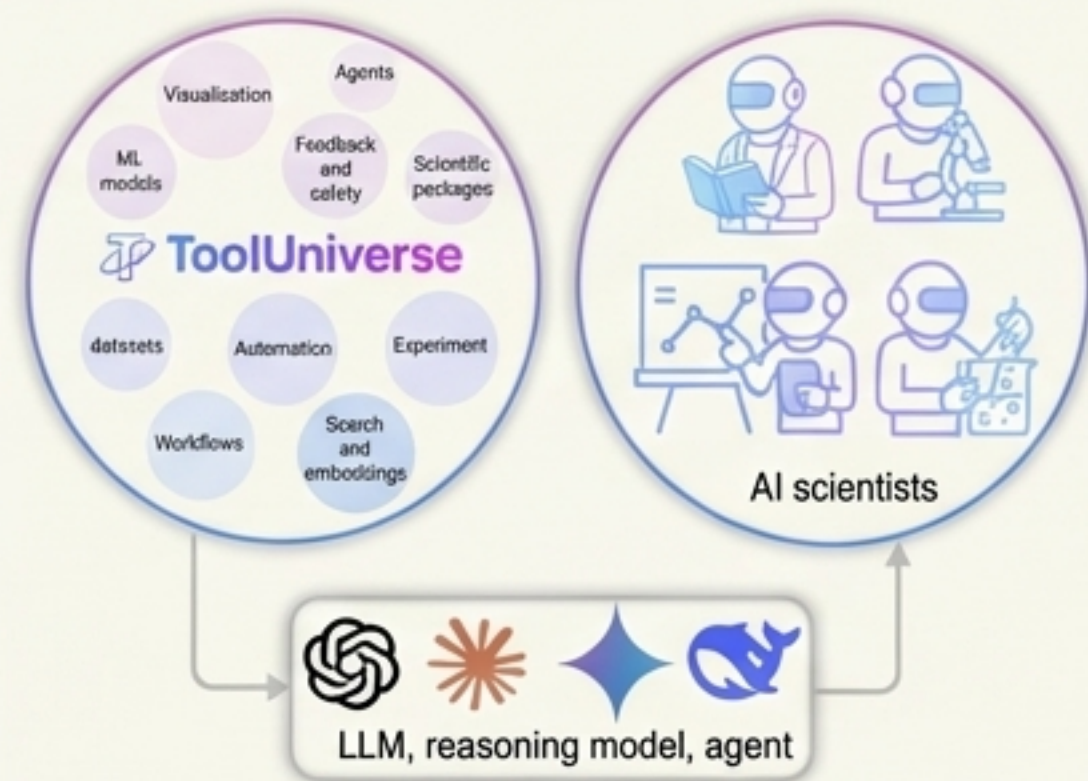
特徴: 複数の専門エージェント（生成、評価、進化など）が協調して研究者を支援するマルチエージェントシステム。



ToolUniverse (Harvard University)

ecosystem for building AI scientists

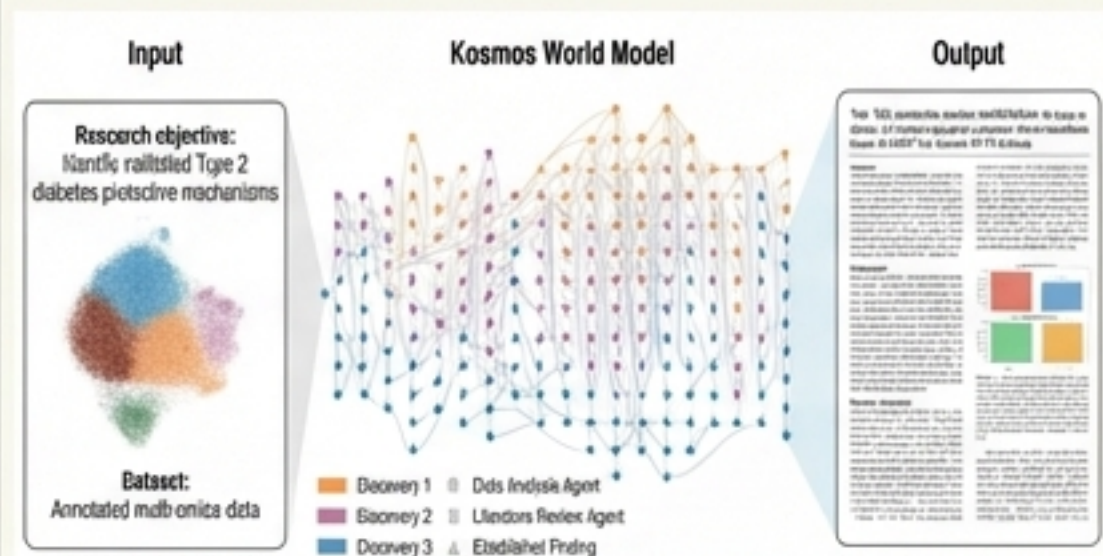
特徴: AI科学者を構築するためのツール、データセット、ワークフロー等を提供するプラットフォーム。



Kosmos (Edison Scientific)

An AI Scientist for Autonomous Discovery

特徴: マルチオミクスデータから自律的に新しい発見を導き出し、サマリーや背景情報を含むレポートを生成する。



AI科学者の時代へ：研究者の役割は「問いを立てる者」へシフトする

- **The Vision (Zoom Out):**

「AI for Science」は、人間を超えるAI科学者という壮大なビジョンを掲げ、世界的なムーブメントとなっている。

- **The Engine (Focus):**

その中核技術は、計画・ツール使用・記憶能力を持つ自律的な「AIエージェント」である。

- **The Reality (Zoom In):**

Biomniのような汎用エージェントは、すでにライフサイエンスの複雑なタスクをコード生成によって解決し始めている。

未来への問い:

データ解析、実験計画、論文執筆といったタスクがAIによって高度に自動化される未来において、人間の研究者にとって最も重要になる能力は、価値ある科学的な「問い」を立て、AIをパートナーとして探求を主導することではないだろうか。





我々の挑戦：AIと研究者を繋ぎ、 科学の可能性を拡張する

Science Aid株式会社



サイエンスを開き、人類の可能性
を広げる。

私たちの使命は、技術を活用して
人類がこの膨大な知識を導き、
活用するのを支援することです。

最近の取り組み

- 京都大学医学研究科 奥野研究室との共同研究を開始。
- 創薬研究を支援するAIエージェントの開発に着手。
標的タンパク質に関わる膨大なデータベースや文献情
報を横断的に解析し、創薬標的サイトの情報収集・戦
略提案を自動化することを目指す。

Science Aid株式会社、京都大学医学研究科 奥野研究室と共同で創
薬AIエージェント開発を開始

— 標的サイト情報抽出に特化した次世代AIで創薬研究の効率化を実現 —

Science Aid株式会社 2025年8月30日 10時00分



Science Aid株式会社（本社：東京都、代表取締役：山田遼太、以下Science Aid）は、国立大学法
人京都大学大学院医学研究科人間健康科学系専攻ビッグデータ医科学分野（奥野研究室）（所在地：京
都府京都市、総長：渡 典博、以下京都大学医学研究科 奥野研究室）と共同で創薬研究を加速するAIエ
ージェントの開発を開始しました。本取り組みは、これまで横断的に選り分けてきた創薬AI関連連携プロ
ジェクトの一環であり、標的タンパク質に関わる膨大なデータベースや文献情報を横断的に解析し、創
薬標的サイトの情報収集・整理・戦略提案を自動化することを目指します。

Science Aidは、京都大学医学研究科 奥野研究室と共に、創薬研究を支援するAIエージェント開発プロ
ジェクトを新たに開始しました。

京都大学医学研究科 奥野研究室は、一般社団法人ライフインテリジェンスコンソーシアム（LINC）を
通じて創薬研究を加速する取り組みの一環として、本取り組みを開始しました。

今日から始めるAI for Science：主要なツールとリソース

“ AI科学者の時代は、もはや未来の夢物語ではない。基盤はすでに構築されつつあり、誰でもその一端に触れることができる。

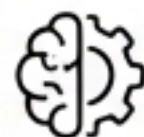
主要なWebアプリケーション（アクセス可能）



Biomni (Stanford University)

汎用バイオメディカルAIエージェント

biomni.stanford.edu



Kosmos (Edison Scientific)

自律的発見のためのAI科学者

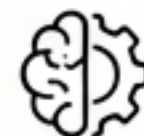
edison.ac/kosmos

主要なコミュニティ・情報源



AI for Science Community

ai4sciencecommunity.github.io



AI Robot-Driven Science Initiative

ai-robot-science.com



Nobel Turing Challenge

nobelturingchallenge.org