

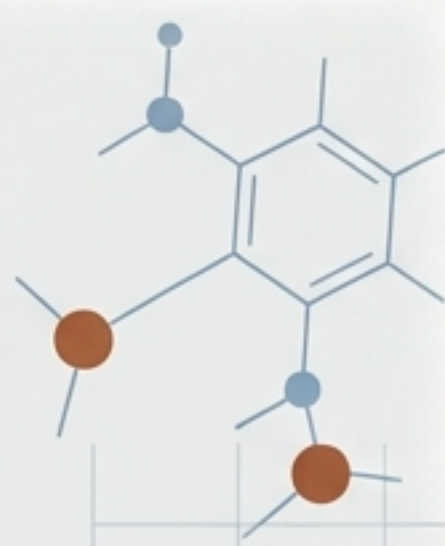


AI for Science: 科学の黄金時代の幕開け

生成AIはいかにして、新素材発見のプロセスを
「数十年」から「数日」へと短縮するのか。

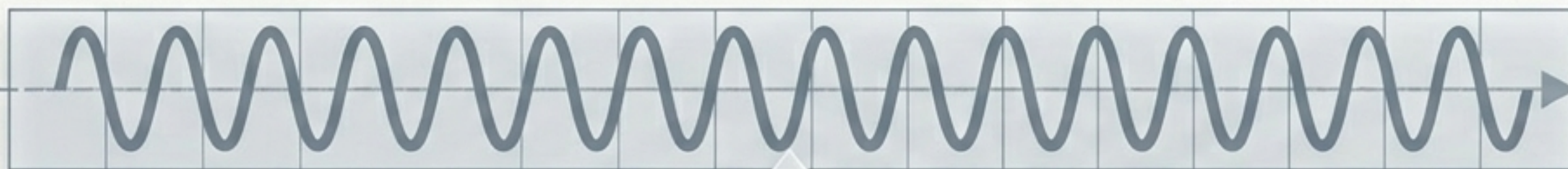
私たちは今、科学の
言語そのものを学習し
ているのです。

AIは単なる計算ツールではありません。
何世紀にもわたる人類の科学的知識を
予測モデルへと圧縮することで、研究者
たちはかつてない高さの「巨人の肩」の
上に立つことが可能になります。



新素材発見のボトルネックとパラダイムシフト

終わりのない試行錯誤 (Traditional Discovery)



無数の盲目的な実験、物理的なテストの繰り返し。

所要時間:
数十年
(Decades)

In-Silico (計算機内) 予測 (AI Discovery)



AIモデルによる事前の性質予測、
ターゲットを絞った高効率な合成。

所要時間:
数日～数ヶ月
(Days/Months)

科学のためのAI：3つのエンジン



Simulators

モデル例: MatterSim,
SimPoly, BioEmu

原子レベルの振る舞いを経時的にシミュレートし、これまで観測不可能だったシステムを可視化する。



Generators

モデル例: MatterGen

広大な化学空間 (Chemical Space) を探索し、条件に合致する全く新しい物質の構造を生成・提案する。



Reasoners

モデル例: LLMs

推論エンジンとして機能し、他のツールを連携させて大規模な科学的課題に対処する基盤となる。

自然言語で操作する自律型プラットフォーム：Microsoft Discovery

デジタル同僚
(AIエージェント)

デジタル同僚
(AIエージェント)

脱・機械学習トレーニング

研究者がAIツールを使うために、3年間の機械学習トレーニングを受ける必要はありません。



人間の研究者

自然言語 (Natural Language)

デジタル同僚との対話

人間の同僚に話しかけるように自然言語で指示を出し、複雑な計算タスクをAIに代行させます。

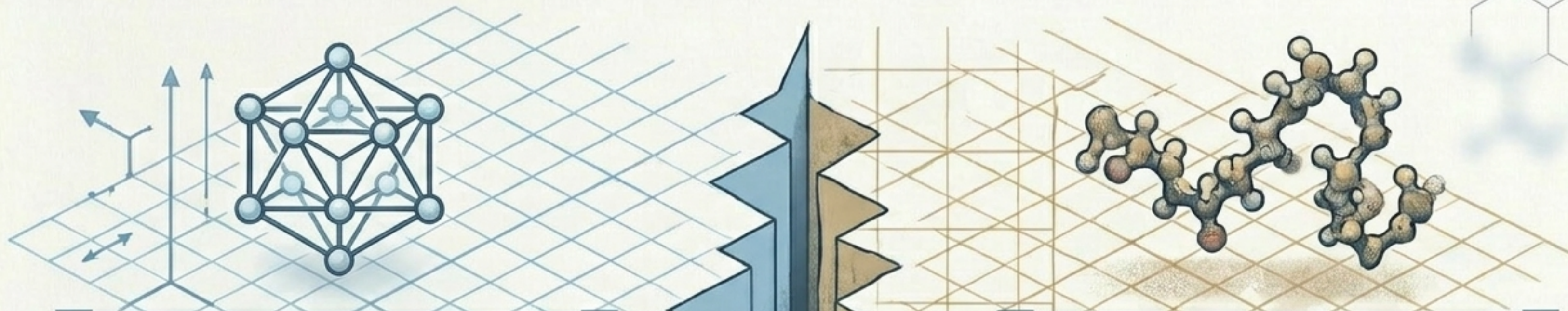
デジタル同僚
(AIエージェント)

デジタル同僚
(AIエージェント)

本来の科学への回帰

研究者は、アプリケーションや発見という「真に重要な問い」に100%集中できるようになります。

最大の障壁：「計算と実験のギャップ」



In-Silico (計算機内)

完璧なデジタルモデル。データ上は理想的な性能を示す新素材の設計図。

物理世界 (Physical Reality)

現実の不確実性。実際に合成すると生じるモデルと現実の予測不能なズレ。

AIが紙の上で完璧な分子を設計しても、それを現実世界で具現化するにはこの深いギャップを埋める必要があります。

ギャップの架け橋：ハイブリッド・エコシステム

Big Tech

- 提供: 圧倒的な計算資源とAIモデル (Microsoft Research)。

Academia

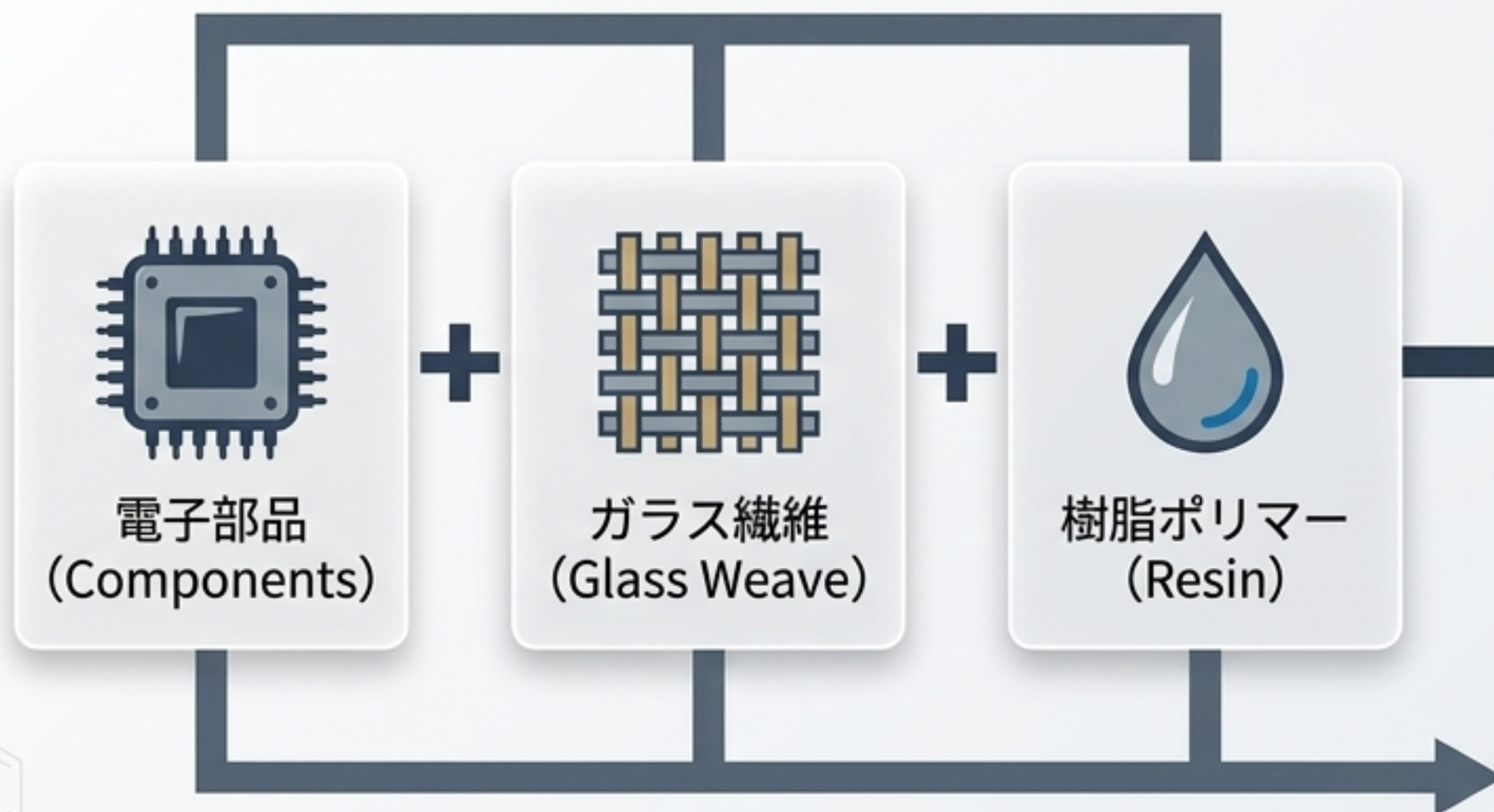
- 提供: 領域専門知識と物理的な実験設備 (ワシントン大学、イエール大学など)。理論を現実の分子として検証。

Automated Labs

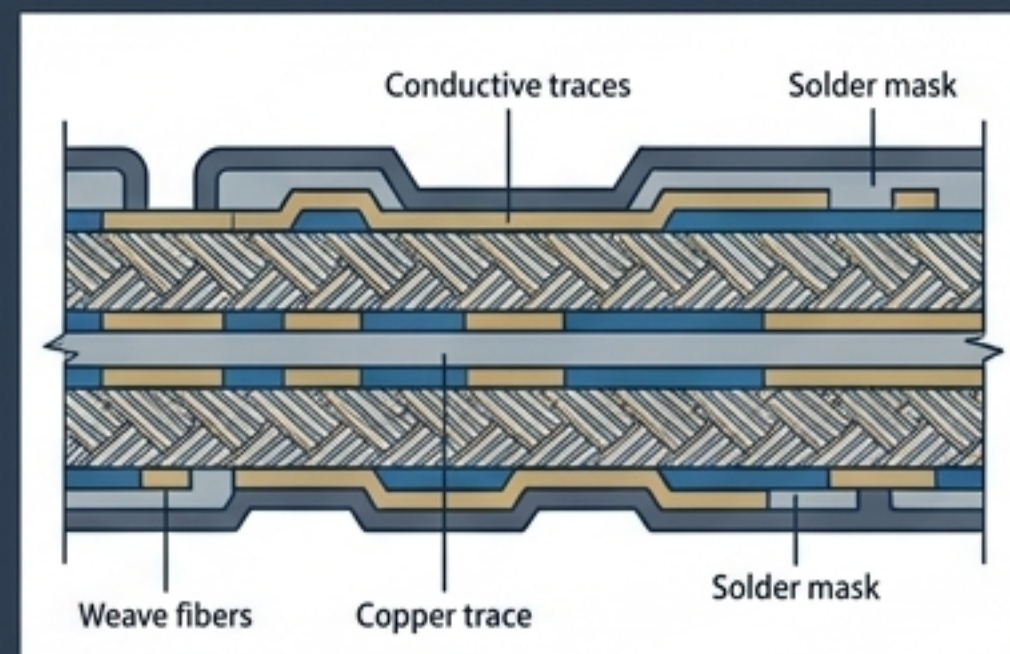
- 提供: ハイスループットな実験自動化とロボティクス (Accelerate Consortium、リバプール大学など)。ロボットによる実験ループの構築。

1社で完結する時代は終わりました。
AIの予測を現実にするのは、産学連携のハイブリッド・エコシステムです。

現実世界の課題 1： データセンターと電子廃棄物 (E-Waste)



解体不能な複合材料 (FR4)



従来の先進的な複合材料は、耐久性と引き換えにリサイクルを前提として設計されていませんでした。基板から部品を剥がすことも、樹脂を分離することもできず、大量の電子廃棄物を生み出しています。

AIによる解決策：計算設計された「リサイクル可能ポリマー」

3. 電子部品の再利用

基板上的コンポーネントを安全に回収。

1. 耐熱性の確保

IoTデバイスや基板に求められる400°C以上の温度に耐える特性をAIが予測・最適化。

2. 化学的解体

寿命を迎えた後、特定の化学プロセスで完全にマトリックスを分離・解体可能。

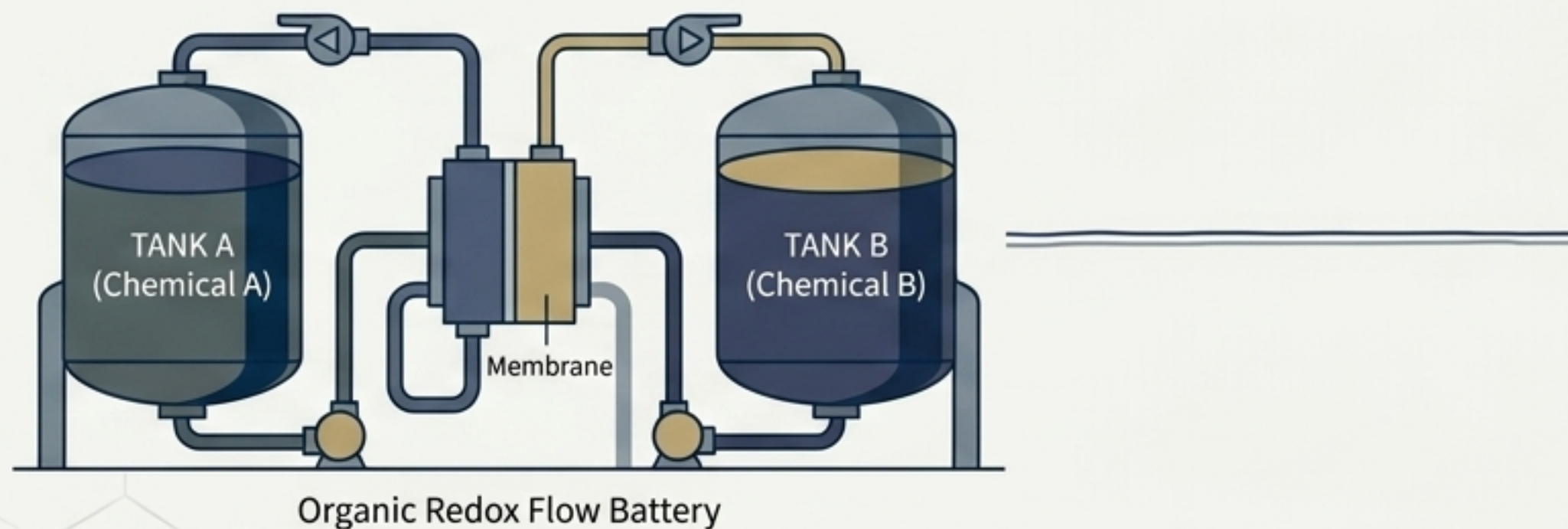
ワシントン大学との共同研究により、AIが設計したこのポリマーは現実世界で機能することが実証されました。データセンターの完全なサーキュラーエコノミーが視野に入ります。

現実世界の課題 2：グリッド規模の電力貯蔵



The Challenge

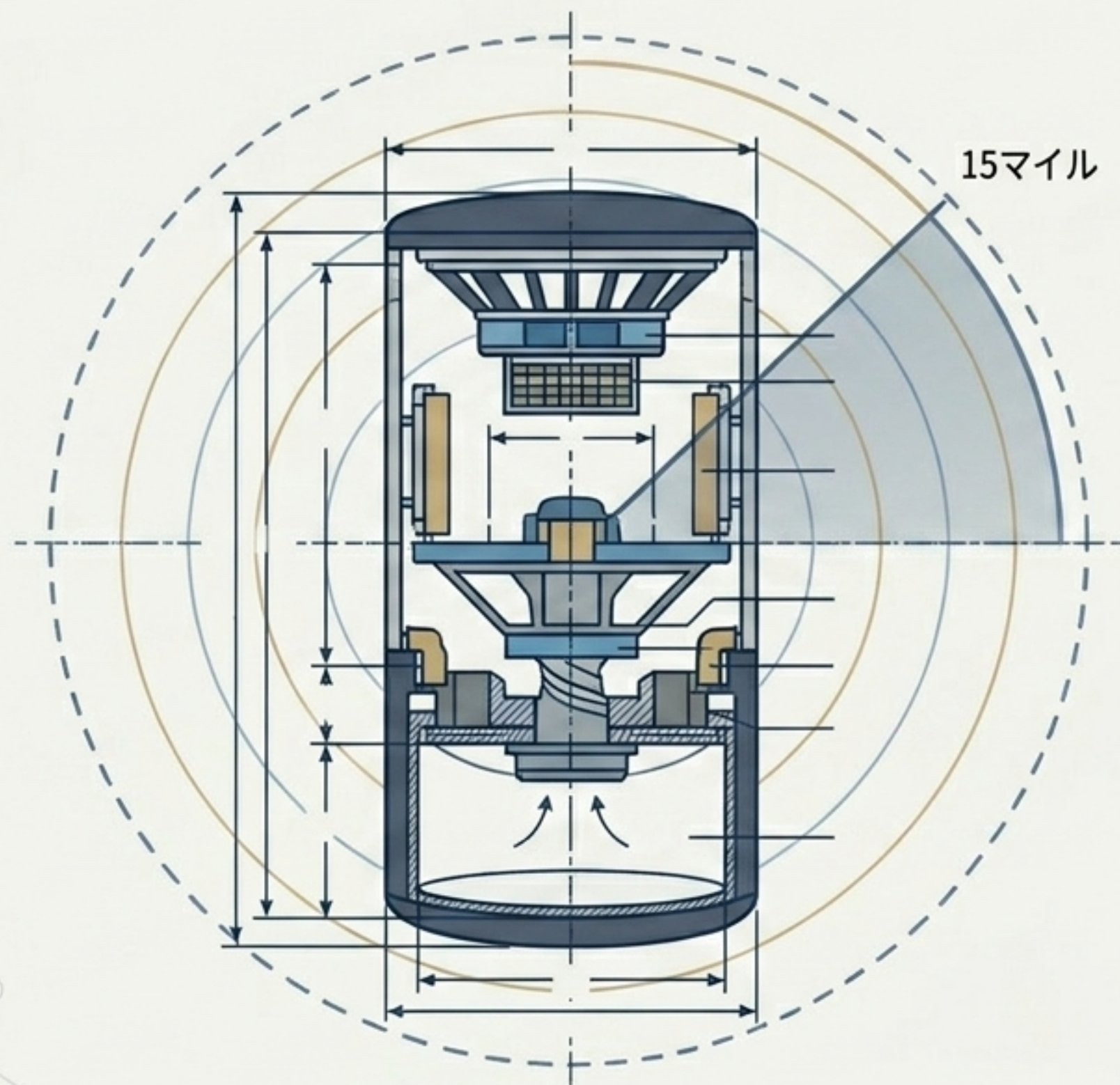
再生可能エネルギーの普及には、データセンターや風力タービンの横に設置できる、リチウムよりも環境負荷が低く巨大な蓄電池が必要です。



The AI Solution

AIモデルを使用し、2つの化学物質 (A+B) の組み合わせの膨大なパターンから、バッテリーに最適な「タフネス (靱性・耐久性)」を持つ分子をシミュレーションによって特定しました。

現実世界の課題 3：Project Premonition（病原体の予測）



1. 誘引と識別

トラップが蚊を誘引し、その羽音や特徴から「性別」と「種」をAIが瞬時に識別して捕獲。



2. DNAシーケンシング

捕獲した蚊が吸った「血液」を遺伝子解析し、未知の病原体を特定。



3. 予測と封じ込め

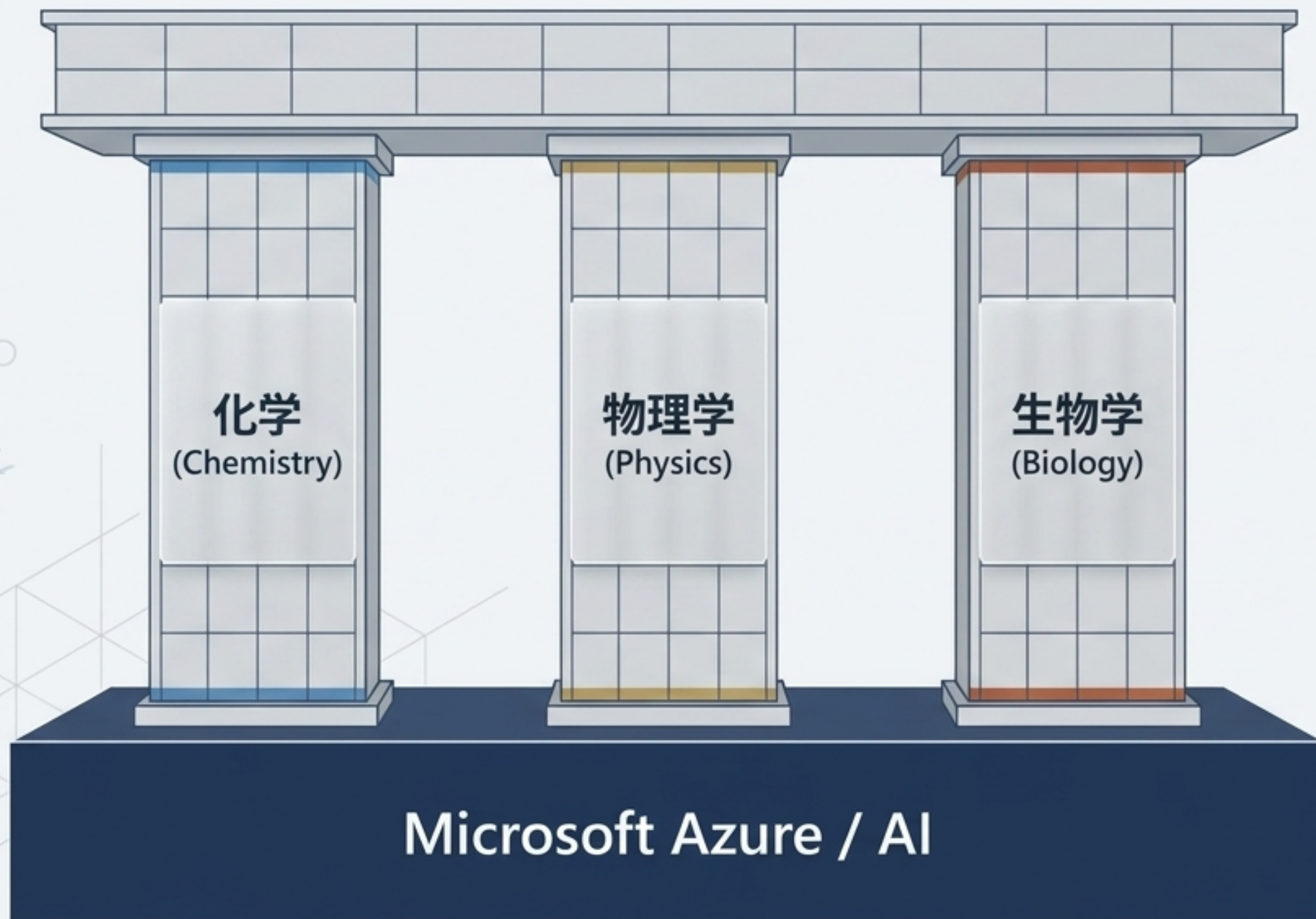
蚊の飛行範囲（孵化から最大15マイル）と地理データを掛け合わせ、アウトブレイクが発生する前にピンポイントで抑制措置を展開。

サステナビリティ・インパクト・マトリックス

	PCB (電子廃棄物)	バッテリー (電力貯蔵)	病原体追跡 (Premonition)
領域 Domain	材料科学・ハードウェア	エネルギー・化学	生物学・公衆衛生
AIの役割 AI Role	400°C耐性と解体性の トレードオフ解決	未知の分子組み合わせ (A+B) のタフネス予測	物理的識別と地理空間 データモデリング
現実世界への影響 Real-World Impact	循環型電子廃棄物 (Circular E-Waste) の 実現	低炭素なグリッド電力 網の平準化	パンデミックの事前封 じ込め

AIはソフトウェアを速くするだけでなく、私たちが生きる「物理世界のインフラ」そのものを持続可能で安全なものへと再構築しています。

なぜ、Microsoftが物理科学を主導するのか？



Microsoftはプラットフォーム企業です。

ソフトウェア企業が物理領域に投資する理由は明確です。

デジタル同僚 (AI) の支援により、科学者やエンジニアが「退屈な作業」から解放され「真の科学的探求」に専念できるプラットフォームを提供できれば、それは全人類の進歩の底上げ (Lift the entire world) に直結するからです。

次世代の科学者へ：AI時代を生き抜く3つの指針



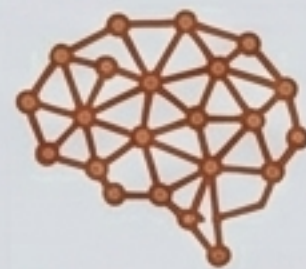
Learn to Learn - 学習能力

テクノロジーの進化は急速です。AIを活用して「効率的に新しいことを学ぶスキル」そのものを鍛え、適応し続けることが重要です。




Master Fundamentals - 基礎の探求

AIから提示された圧倒的な量の情報に対し、それが正しいか、あるいは軌道修正が必要かを判断できる「深い専門知識 (ドメイン知識)」がなくてはなりません。



Stay Curious - 知的好奇心

新しいツールを日々の研究や生活にどう組み込めるか、常に好奇心を持ち、恐れずに飛び込む姿勢を持ち続けてください。



科学の黄金時代は、 すでに始まっている。

私たちはもはや、物理世界をただ「観察」するだけの存在ではありません。
AIという新たなデジタル同僚と協力し、より良い現実世界を「設計」する
時代を生きています。

research.microsoft.com