

Microsoft の「AI for Science」への取組み分析レポート

Executive Summary

Microsoft の「AI for Science」は、単一の研究テーマではなく、**研究組織・科学向けモデル群・R&D プラットフォーム**が連結した実装戦略として理解するのが最も実務的です。中核には、2022 年 7 月に設立された **があり**、そこから生まれたモデル群が Azure AI Foundry Foundry Labs に公開され、化学・材料向けの、さらに 2025 年 5 月公開・2026 年 4 月に拡張プレビューとなったエージェンティック R&D 基盤に接続されています。研究からプロダクト化までの導線が比較的明確である点が、同社の取組みの最大の特徴です。[1]

強みは、**化学・材料分野での深さと、気候・生命科学への横展開**です。材料生成の MatterGen、材料シミュレーションの MatterSim、量子化学の Skala、地球システム基盤モデル Aurora、タンパク質構造アンサンブルの BioEmu、低分子創薬の TamGen など、タスク特化あるいは科学基盤モデルを複数そろえ、Azure HPC・知識グラフ・AI エージェントで実験計画や探索ループを短縮する方向に資源投入が集中しています。とくに、PNNL との電池材料探索、GHDDI との結核創薬、Unilever や Johnson Matthey との R&D 実装は、研究成果が企業・公共機関の現場に接続されていることを示します。[2]

一方で、**専用予算総額・人員総数・案件別投資額は公開資料では未確認**です。また、分野ごとの成熟度には差があり、材料・気候は成果の定量比較が進んでいるのに対し、生命科学や物理・工学は「研究成果は強いが、産業実装の公開情報は限定的」ないし「プラットフォーム先行」の色彩が残ります。加えて、同社自身が Responsible AI、透明性、人間の監督、用途制限、検証義務を強調しており、直接の業務判断・臨床応用・危険物質設計への即時適用を前提にしていないことは重要です。[3]

プログラム概要

の公開説明では、「深層学習が自然科学に変革的なインパクトを与える」と明示され、AI エミュレータにより速度と精度の長年のトレードオフを超えることが組織の基本思想として掲げられています。発足時の構想は、Christopher Bishop[4]が2022年7月の公式発表で「科学的発見の第5のパラダイム」として示し、2025-2026年時点の公開リーダーはBonnie Krufft[5]です。2022年の発足告知と現行ラボページを突き合わせると、拠点構成は更新されており、組織は立ち上げ後も再編・拡張が続いていると読むのが妥当です。[6]

同社の実装像は、**研究→モデル公開→業務プラットフォーム化**の三段構えです。現行のAI for Science ページにはAurora、BioEmu、MatterGen、MatterSim、RetroChimera、Skala、TamGenという少なくとも7つの研究モデルがAzure AI Foundry上に提示されており、これに対してAzure Quantum Elementsはchemistry/materials向けの科学ワークフロー、Microsoft Discoveryは知識グラフ・AI エージェント・HPCを統合する横断R&D基盤として位置づけられています。[7]

専用予算や案件別資金配分は公開資料で確認できませんでしたが、**定量的に確認**できる「**リソース配分**」の代替指標としては、Azure HPC、Azure AI infrastructure、Azure AI Foundry、Foundry Labs、知識グラフ基盤、外部パートナー拡張をDiscoveryが明示していること、そしてAI for Scienceの主要モデルが継続的にモデルカタログ・オープンソース・技術ブログへ展開されていることが挙げられます。したがって、同社の配分は「基礎研究費の個別大型投資」というより、「**汎用クラウド基盤と研究モデル公開を通じた横断活用**」に寄っていると評価できます。[8]

項目	確認できた内容	出典 URL
目的	自然科学に対する深層学習の変革的活用。AI エミュレータで速度・精度のトレードオフを超え、科学発見を加速する。[9]	/
組織体制	研究中核はMicrosoft Research AI for Science。現行公開リー	/

項目	確認できた内容	出典 URL
	ダーは Bonnie Krufft[5]。発足時の構想提示は Christopher Bishop[4]。 [10]	
主要プロダクト/サービス	研究モデル群、、、 Azure AI Foundry/Foundry Labs、 Azure HPC。 [7]	//
資金・リソース配分	専用予算総額・人員総数は未確認。公開資料では、 Azure HPC・ AI infrastructure・ Foundry・ 外部パートナー拡張が明示される。 [11]	/

以下は、公開資料から復元できる同社の「研究→配布→実装」の関係図です。 [12]

graph TD

```

A[Microsoft Research AI for Science] --> B[科学モデル群]
B --> B1[MatterGen / MatterSim / Skala]
B --> B2[Aurora]
B --> B3[BioEmu / TamGen / RetroChimera]
B --> C[Azure AI Foundry / Foundry Labs]
C --> D[Azure Quantum Elements]
C --> E[Microsoft Discovery]
D --> F[化学・材料 R&D]
E --> G[知識グラフ + エージェント + HPC]
G --> H[産業・公共機関パートナー]

```

主要プロジェクトと研究成果

以下の表では、内部開始日が未開示の案件が多いため、期間は「公開資料で確認できる初出～最新公開確認」ベースで整理しています。研究成果の中核は、(a) inverse design 型の生成モデル、(b) first-principles 近似を高速化するエミュレータ、(c) Earth system の foundation model、(d) agentic R&D orchestration に大別できます。 [13]

プロジェクト	公開確認期間	主要研究者/チーム	技術スタッフ	成果の要点	出典 URL
MatterGen	2025-01 ~ 2025-12	Claudio Zeni[14]、Tian Xie[15]ほか	拡散モデル。原子種・座標・格子を共同生成し、property adapter で化学系・対称性・物性条件へ fine-tune。[16]	Nature 論文では、従来生成法に比べて 新規かつ安定な構造の生成率が 2 倍超 、局所エネルギー最小への近さが 10 倍超 。生成候補の実験合成も行い、測定特性が目標値の 20% 以内 に収まった。Foundry モデルカードでは 38.57% の S.U.N. rate などを提示	// <input type="checkbox"/> url <input type="checkbox"/> 実装 <input type="checkbox"/> https://github.com/microsoft/mattergen <input type="checkbox"/>

プロジェクト	公開確認期間	主要研究者/チーム	技術スタッフ	成果の要点	出典 URL
MatterSim	2024-05-04 ~ 2025-04	Han Yang、Jielan Li、Hongxia Hao、Ziheng Lu、ほか	原子論シミュレーション用 deep learning model 。現行公開モデルは M3GNet 系アーキテクチャ。[18]	0-5000K、最大 1000GPa で材料物性を予測。先行 best-in-class 比で 最大 10 倍の精度向上 、高データ効率 fine-tuning により 最大 97% のデータ削減 。モデルカードでは test sets ごとの energy / force / stress MAE を公開。 [19]	/// ☒ url ☒ 実装 ☒ https://github.com/microsoft/mattersim ☒
Aurora	202	Wessel	Earth	Nature 論	///

プロジェクト	公開確認期間	主要研究者/チーム	技術スタッフ	成果の要点	出典 URL
	4-06 ～ 202 6- 06	Bruins ma、 Megan Stanley 、Ana Lucic、 Richard Turner 、Paris Perdika ris、ほ か	system foundation model。 1.3B parameter 、3D Swin Transforme r + Perceiver encoder/de coder。 [20]	文では、 100 万時間 超 の多様な 地球物理デ ータで事前 学習。大気 汚染 74%、 波浪 86%、 熱帯低気圧 トラック 100%、高 解像度気象 92% の評価 対象で既存 運用系を上 回った。 Labs ペー ジでは従来 数値予報比 約 5000 倍 の計算速度 優位も提示 。 [21]	

プロジェクト	公開確認期間	主要研究者/チーム	技術スタッフ	成果の要点	出典 URL
BioEmu	2025-02 ~ 2025-10	Frank Noé[22]、Sarah Lewis、Tim Hempel、José Jiménez-Luna ほか	タンパク質構造アンサンブル生成。AFDB 構造、MD シミュレーション、実験安定性データを統合。モデルカードでは 31M parameters [23]	単一 GPU で 1 時間あたり数千構造を生成し、millisecond-scale MD と実験に対して約 1 kcal/mol の相対自由エネルギー精度を報告。200ms 超の MD データと 50 万件超の安定性測定を活用。[24]	//// ☒ url ☒実装☒ https://github.com/microsoft/bioemu ☒
TamGen	2024-10 ~ 2025-12	Yingce Xia、Pan Deng、Tao Qin、Tie-	GPT 型 chemical language model 。protein encoder +	Nature Communications 論文では、結核菌 ClpP を標的に 14	//// ☒ url ☒実装☒ https://github.com/microsoft/TamGen ☒

プロジェクト	公開確認期間	主要研究者/チーム	技術スタッフ	成果の要点	出典 URL
		Yan Liu、GHDDI 共同チーム	molecule decoder + contextual encoder。100M parameters。10M PubChem pretrain。 [25]	個の阻害化合物を同定し、最良候補は IC50 = 1.9 μM 。Target-aware 生成と既存分子 refinement の両方に対応。Foundry では有害/有毒化合物生成禁止を明記。 [26]	
Skala	2025-06 ~ 2025-09	Christopher Bishop [27] 、Jan Herman、Rianne van den Berg ほか	deep learning-based exchange-correlation functional for DFT。高精度参照データで学習	DFT の XC functional を深層学習で置換し、化学精度 (1 kcal/mol 未満) を atomization energy で	/// <input type="checkbox"/> url <input type="checkbox"/> 実装 <input type="checkbox"/> https://github.com/microsoft/skala <input type="checkbox"/>

プロジェクト	公開確認期間	主要研究者/チーム	技術スタッフ	成果の要点	出典 URL
		か	。 [28]	達成しつつ、semi-local DFT の計算効率を維持。公開資料では MSR-ACC dataset を「largest high-accuracy dataset ever built」と位置づける。 [28]	
RetroChimera	2025-10～2026-04	Small molecules チーム	retrosynthesis prediction 。 SMILES から反応候補群を生成 。 [29]	創薬の「Design-Make-Test」ループのうち Make に相当する合成経路設計を支援。 TamGen などの生成モ	/// ☒ url ☒ 実装 ☒ https://github.com/microsoft/retrochimera ☒

プロジェクト	公開確認期間	主要研究者/チーム	技術スタッフ	成果の要点	出典 URL
				<p>デルで得た候補を実験へつなぐ補完技術として重要。</p> <p>[30]</p>	
Microsoft Discover y	2025-05 ~ 2026-04	Product Innovation / Azure / Microsoft Research 連携	<p>graph-based knowledge foundation + advanced reasoning + multi-agent orchestration + HPC</p> <p>。将来はロボティクス/IoT/量子とも接続。</p> <p>[31]</p>	<p>研究者が AI エージェント群と仮説生成・検証・分析を反復する enterprise platform。</p> <p>2025 年公開時には datacenter immersion cooling 用の新規 coolants prototype を約 200 時間で発見した事例を</p>	///

プロジェクト	公開確認期間	主要研究者/チーム	技術スタッフ	成果の要点	出典 URL
				示し、 2026 年に はプレビュー ー拡大。 [31]	

2022 年以降の重要マイルストーンを時系列で置くと、同社の戦略が「AI4Science 発足 → 化学・材料プロダクト化 → foundation models 公開 → agentic R&D 基盤化」と進んでいることがわかります。[32]

timeline

- title Microsoft AI for Science の主要公開マイルストーン
- 2022-07 : AI4Science 発足
 - 2023-06 : Azure Quantum Elements 公開
 - 2024-01 : PNNL と電池材料探索を公表
 - 2024-05 : MatterSim 発表
 - 2024-10 : TamGen 論文公開
 - 2025-01 : MatterGen の Nature 論文
 - 2025-02 : BioEmu-1 公開
 - 2025-03 : Fusion Summit 開催
 - 2025-05 : Microsoft Discovery 発表 / Aurora の Nature 論文
 - 2026-04 : Microsoft Discovery 拡張プレビュー

産学官連携・パートナーシップ

同社の協業は、単なる「共同研究」よりも、**(a) 顧客・研究機関がドメイン知識と wet-lab / 実証機能を持ち、(b) 同社が AI モデル・HPC・プラットフォームを持つ**

という役割分担が明確です。特に、材料・創薬では「生成→スクリーニング→合成/実験→再学習」のループを外部組織と回す設計が読み取れます。[33]

相手組織	区分	役割分担	成果	商用化/実装状況	出典URL
Pacific Northwest National Laboratory[34]	官 研 機 関	同社が AI + HPC による 3200 万候補 スクリーニング、PNNL が追加絞り込み・合成・構造評価・導電率評価を担当。 [35]	リチウム使用量を約 70%削減する新規固体電解質候補を発見し、9 か月未満で proof of concept まで到達。導電率は要改善。[36]	商用化は未確認。	/
Global Health Drug Discovery Institute[38]	産 学 連	同社が TamGen と AI pipeline、	結核創薬で有望阻害剤群を同定。Nature Communications	商用化	/

相手組織	区分 役割分担	成果	商用化/ 実装状 況	出典 URL
OrlJohnson Matthey	企業の Azure Quantum / AQE と Johnson Matthey の触媒・燃料電池 R&D を接続。 [42]	hydrogen fuel cell innovation を加速する協業として公式発表。AQE 顧客群の代表事例でもある。 [42]	は未確認。創薬研究段階。 [41] 顧客導入型の共同開	/

相手組織	区分 役割分担	成果	商用化/ 実装状 況	出典 URL
https://www.unilever.com/	企業が AQE / Discovery / HPC を提供し	顧客事例として 、同社は Unilever の rapid	発 。 公 開 資 料 上 の 製 品 化 成 果 は 未 確 認 。 [43]	/ 商 用 内

相手組織	区分	役割分担	成果	商用化/ 実装状 況	出典 URL
		、Unilever が 自社 R&D デー タと日用品・ 素材開発課題 を提供。[44]	computational simulations を強 調。Azure Quantum Elements を使っ て consumer products innovation を推 進。[45]	製 R& D 導 入 あ り 。 対 外 販 売 製 品 の 有 無 は 未 確 認 。 [46]	

相手組織	区分 役割分担	成果	商用化/ 実装状 況	出典 URL
https://www.novartis.com/	企業 Novartis が創薬データ・メタアナリシス・ミストリー文脈、同社が generative chemistry / retrosynthesis モデルを提供。 [47]	MoLeR や Chimera/RetroChimera 系で、分子設計から合成計画までの探索効率化を進展。協業自体は 2019 年に公表され、その後の研究成果へ接続。 [48]	企業内 R&D 協業。上市薬への直接因果は公開資料で	//

相手組織	区分 役割分担	成果	商用化/ 実装状 況	出典 URL
url NVIDIA url Synopsys url PhysicsX	企業エコーシステムは ALCHEMI/Bio NeMo、Synopsys は semiconductor AI、PhysicsX は physics foundation models を接続。 [50]	2025-2026 の Discovery エコシステム拡張を構成。材料・生命科学・半導体・工学へ横展開。 [50]	未確認。 [49] プレビュー / 共同実装段階。 案件別の本	/

相手組織	区分 役割分担	成果	商用化/ 実装状 況	出典 URL
			番稼働範囲は未確認。	[50]

学術連携の観点では、2022年の発足時にアムステルダム新ラボと、近接する大学との博士課程共同指導を公式に打ち出しており、同社は**人材・研究コミュニティ形成**も AI for Science 戦略の一部として設計しているとみられます。ただし、こうした **academic tie-up** からどの論文・製品が生まれたかの追跡可能な公開情報は、本調査範囲では限定的でした。[51]

応用分野別の事例分析

化学・材料

この分野は、同社の AI for Science の**最成熟領域**です。MatterGen は「未知材料を直接つくる」inverse design、MatterSim は「候補材料の first-principles 近似シミュ

レータ」、Skala は「電子構造計算そのものの精度改善」、Azure Quantum Elements / Discovery は「業務に載せるための実行環境」を担います。つまり、**生成・評価・量子化学・実運用**が最もつながっているのがこの分野です。PNNL の電池電解質探索、Johnson Matthey の水素/触媒、Unilever の商品開発は、この連続体が対外的成果として見えている代表例です。[52]

ただし課題も明確です。MatterGen の最終検証には DFT と実験合成が依然必要であり、MatterSim は out-of-scope として高分子や長距離相互作用系に弱さを残し、Skala も現時点では主として main-group chemistry に強い設計です。言い換えると、同社が最も前進している化学・材料分野でさえ、**AI 単独で研究完結**ではなく、計算コストの高い「後段の真値評価」をどう減らすかが残課題です。[53]

気候・地球科学

Aurora は、同社の AI for Science を materials 以外へ拡張した象徴的的案件です。Earth system 全体を対象にした foundation model として、気象だけでなく大気汚染・波浪・熱帯低気圧トラックまで一つの pretrained model から fine-tune で扱う点に新規性があります。公開結果では、運用系ベースラインに対して多くのタスクで優位を示し、かつ高解像度 forecasting を低コストで行えることが示されました。[21]

一方で、Aurora の model card は、入力変更や訓練分布外サンプルで性能が崩れる可能性、データセット由来の bias 継承、追加検証を経ない直接運用の不適切性を明示しています。したがって、Aurora は数値予報を完全置換するものというより、**高性能 surrogate / decision-support layer** として見るべきです。社会的意義は大きい一方で、ガバナンスを伴う operationalization が不可欠です。[54]

生命科学

生命科学では、同社は**タンパク質の動的構造**と**小分子創薬**の両面で攻めています。BioEmu は AlphaFold 的な「一構造予測」を越えて、平衡アンサンブルと熱力学を扱う方向へ進み、TamGen は target-aware な分子生成で wet-lab まで到達した点

が強い。さらに RetroChimera は合成経路を支援するため、Design-Make-Test のループ全体を AI で押し広げる布陣になっています。[55]

ただし、この領域は倫理的負荷も高いです。TamGen の model card は、有害/有毒化合物生成を禁じ、法令順守・安全プロトコル・倫理審査を要求し、臨床用途には不適と明示します。創薬での真のボトルネックは hit 後の ADME/T、製造、前臨床、臨床にあり、同社の公開成果も「初期探索加速」までは強いが、下流の開発リスク低減は未解決という位置づけです。[56]

物理学・工学

純粋な「物理学」よりも、現時点の同社は量子化学・材料物理・核融合工学に近い応用物理へ集中しています。Skala は電子相関の近似精度を改善する量子化学基盤であり、Fusion Summit では AI による plasma control、materials discovery、remote maintenance、physics-informed simulation が議論されています。これは、物理分野ではまだ単独の flagship product よりも「高価な物理シミュレーションを AI surrogate に置き換える」方向が中心であることを示します。[57]

言い換えると、物理・工学分野は「発見済みの代表製品」が少ないのではなく、**基盤技術が先にでき、業界別ワークフローへの埋め込みがこれから進む段階**です。Discovery と Synopsys / PhysicsX の接続は、その橋渡しを狙う動きとして理解できます。[50]

技術アプローチ比較

同社の AI for Science の技術的な特徴は、LLM をそのまま科学へ当てるのではなく、**(1) 物理・化学構造を尊重した専用モデル、(2) massive pretraining と downstream fine-tuning、(3) Azure HPC によるループ自動化、(4) 研究モデルを Foundry に載せて分配可能にすること**にあります。Discovery はその上位レイヤとして、graph-based knowledge foundation と agentic orchestration を担います。[58]

モデル/ 基盤	ハードウ ェア/計算	ソフトウェ ア基盤	データ戦略	主な評価 指標	主な限 界
ML 手法					

モデル/ 基盤	ML 手法	ハードウ ェア/計算	ソフトウェ ア基盤	データ戦略	主な評価 指標	主な限 界
Matter Gen	拡散モデ ル + adapter fine- tuning。 結晶格子 ・原子種 ・座標を 共同生成 。 [59]	学習は 8×A100 で 1 epoch 約 6 分と model card に記 載。サン プリング は 1,000 構造に単 一 V100 で 約 2 時間 。 [60]	Azure AI Foundry、 GitHub 実装 。 [61]	607,683 の stable structures を 含む Alex- MP-20、DFT 緩和と convex hull 基準を使用。 [59]	S.U.N. rate、 RMSD、 条件付き 生成での target 達 成数。 [62]	最終妥 当性は DFT / 実験依 存。20 原子超 や対象 外元素 は out- of- scope 。 [60]
MatterS im	M3GNet 系 deep learning atomistic model。 [63]	first- principles 代替とし て大量推 論向き。 学習済み 1M/5M variants を公開。 [63]	ASE interface、 Foundry、 GitHub docs 。 [64]	大規模 first- principles 計 算と active learning。 [65]	energy / force / stress MAE、 Gibbs free energy 分 解能。 [18]	高分子 、表面 、界面 、強相 関係で は限界 。PBE 由来バ イアス も残る 。 [63]
Aurora	1.3B parameter foundation model	32×A100 で約 2.5 週間の pretrainin	Azure Foundry Python API 、GitHub	100 万時間超 の多様な geophysical data を	対運用系 勝率、分 野別精度 、極端事	分布外 入力・ データ バイア

モデル/ 基盤	ML 手法	ハードウ ェア/計算	ソフトウェ ア基盤	データ戦略	主な評価 指標	主な限界
	。 3D Swin Transformer + Perceiver 。 [66]	g と Nature 本 文に記載 。 [66]	docs、 Foundry model。 [67]	pretrain、少 量高品質デー タで fine-tune。 [68]	象性能。 [66]	ス・直 接運用 不適。 追加検 証が必 要。 [69]
BioEmu	generativ e deep learning による protein ensemble emulator 。 [70]	単一 GPU で高速サ ンプリン グ。 [71]	Foundry、 GitHub、 ColabFold 接続。 [72]	AFDB 161k 構 造、216ms MD、50.2 万 dG 測定。 [73]	相対自由 エネルギー 誤差、 構造多様 性、実験 妥当性。 [74]	下流の 創薬/ 実験判 断は別 問題。 全タン パク質 ・複合 体系へ の一般 化は未 完。 [73]
TamGen	GPT 型 chemical language model + protein encoder + contextual encoder 。 [25]	化学言語 モデル pretrainin g は 8×V100 / 200k steps。 [41]	Foundry、 GitHub、 Nature Communications 論文。 [56]	PubChem 1000 万件 pretrain、 CrossDocked /PDB fine-tune。 [56]	bench top performance、 wet-lab validated inhibitors、分子品 質/合成	3D 生 成では なく、 wet-lab 検 証必須 。バイ オセー

モデル/ 基盤	ML 手法	ハードウ ェア/計算	ソフトウェ ア基盤	データ戦略	主な評価 指標	主な限 界
					可能性。 [25]	フティ 上の用 途制限 あり。 [75]
Skala	deep learning XC functiona l。 [28]	高精度 wavefunct ion-based 参照デー タの大規 模生成が 前提。 [76]	GitHub Community Edition、 Foundry 提 供予定/関連 公開。 [77]	MSR-ACC を 含む high- accuracy reference dataset を拡 張しながら改 善。 [76]	chemical accuracy 、 hybrid functiona l 競争力 、 semi- local DFT コスト維 持。 [76]	現時点 の公開 記述は 主に main- group chemis try 中 心。適 用一般 化の余 地。 [76]
Micros oft Discov ery	graph- based knowledg e foundatio n + multi- agent orchestra tion + advanced reasoning 。 [78]	Azure HPC、 AI infrastruct ure、 将来 の量子・ ロボティ クス・IoT 接続。 [79]	Azure ベー ス、 Discovery Engine、 特 殊 agent 群 。 [80]	proprietary data と external literature を グラフ化し、 矛盾する理論 /実験を文脈 化。 [81]	hypothes is generatio n、 loop automati on、 quality at scale。 [82]	2026 年時点 でも previe w 色が 強く、 案件別 ROI や 再現性 は公開 限定。

モデル/ 基盤	ML 手法	ハードウ ェア/計算	ソフトウェ ア基盤	データ戦略	主な評価 指標	主な限 界
[82]						

比較すると、同社の技術は二つの軸に整理できます。第一は、MatterGen / TamGen のように探索空間そのものを広げる生成系。第二は、MatterSim / BioEmu / Skala / Aurora のように既存の高価な物理・化学・環境計算を代替・近似する **surrogate / emulator** 系です。Discovery は、その両者を「文献・企業データ・実験ループ」と接続するシステム層に相当します。この layered architecture は、単発の論文よりも、実装可能性という点で競争力が高い構成です。[83]

倫理・規制・社会的影響

同社の公開姿勢は一貫しており、AI for Science を「速い研究支援」として押し出しながらも、**enterprise-grade trust and security, compliance, transparency, governance、人間の監督**を前提条件に置いています。Microsoft Discovery の説明では、Azure 上でセンシティブな R&D 環境向けの security / compliance / transparency / governance に適合する設計であること、physical labs や robotics との統合も under human oversight で行うことが明示されています。[84]

モデル単位の注意書きも具体的です。Aurora は直接業務判断に使う前の追加検証を要求し、MatterSim は research / experimental purposes を強調し、TamGen は有害・有毒化合物生成禁止、法令順守、倫理レビュー、臨床不適を明記しています。つまり同社は、AI for Science を「自律的に真理を返す箱」ではなく、**専門家が評価・検証する仮説生成装置**として定義していると言えます。[85]

規制面では、同社は Responsible AI Standard を公開し、governance、sensitive use review、public policy、transparency documents を Responsible AI の実装要素としています。AI for Science の文脈では、これをそのまま当てはめれば、(a) 危険な化学・生物用途の制限、(b) 研究データ・企業データ・文献データの由来とバイアス管理、(c) 業務投入前の sector-specific validation、(d) 説明可能な根拠追跡、が最低条件になります。[86]

社会的影響は二面性があります。正の面では、PNNLの低リチウム電解質や、より高速な気象・大気予測、タンパク質機能探索の加速など、**脱炭素・災害対応・創薬の速度向上**が期待できることです。負の面では、計算資源と知識グラフを巨大クラウドに集約することによる再現性・アクセス格差・IP集中の問題、そして生命科学モデルの dual-use リスクです。公開資料からは、同社がこの第二面を無視しておらず、少なくとも model card / responsible AI / security 文脈で予防的統制を強めていることが確認できます。[87]

今後の展望と推奨アクション

今後の方向性はかなり明確です。研究モデルの追加公開だけでなく、Microsoft Discovery が示すように、**graph-based scientific reasoning + domain models + HPC + specialized agents + future robotics/quantum integration** へ進んでいます。2026年4月の拡張プレビューは、同社が AI for Science を個別研究テーマから「企業 R&D の operating system」に進化させようとしていることを示しています。[78]

研究者向け

研究者にとっての最善手は、同社モデルを**仮説生成器・近似計算層・候補優先順位付け器**として使い、最終判断を DFT・wet-lab・観測データへ戻す構成を前提化することです。特に材料では MatterGen → MatterSim / Skala → DFT / 実験、生命科学では TamGen / BioEmu → docking / MD / assay、気候では Aurora → 既存運用系との ensemble / verification という組み合わせが実務的です。これは同社公開資料の設計思想と整合的です。[88]

企業向け

企業は、いきなり Discovery 全面導入を狙うより、**単一ユースケースでの ROI 検証 → proprietary data 接続 → agentic workflow 化**の順に進めるべきです。現時点で投資効率が見えやすいのは、同社事例からも、化学・材料探索、気象/環境予測、創薬初期探索、半導体設計支援です。逆に、臨床判断、完全自律実験、規制文書そ

のものの代替生成のような高リスク用途は、現行の公開スタンスからみてまだ時期尚早です。[89]

政策立案者向け

政策側の論点は、単なる“AI 推進”では足りません。必要なのは、**科学データの相互運用性、public-interest な検証データセット、計算資源アクセス、dual-use 対策、分野別 validation infrastructure** の整備です。材料・気候・生命科学のいずれも、真の差別化はモデルサイズだけではなく、「評価の標準化」と「高品質データの継続供給」にあります。公的機関は、クラウド企業・研究機関・実験施設の三者接続を支援する設計に舵を切るべきです。[90]

Open questions / limitations

本調査では、専用予算総額、人員総数、案件別投資額、各顧客案件の売上寄与、非公開プレビュー案件の再現性評価は確認できませんでした。また、生命科学と物理・工学の一部協業は「方向性」は明確でも、材料分野ほどの定量成果が公開されていません。そのため、現時点の結論としては、同社の AI for Science は**材料・環境領域**で先行して実証され、**生命科学・工学**では強い**研究基盤**を形成しつつ、**Discovery**によって全社的**R&D OS**化へ向かっている、と整理するのが最も妥当です。[91]

[1] <https://www.microsoft.com/en-us/research/blog/2022-a-look-back-at-a-year-of-accelerating-progress-in-ai/>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/blog/2022-a-look-back-at-a-year-of-accelerating-progress-in-ai/>

[2] [5] [13] [16] [17] [22] [52] [53] [58] [59] [62] [83] [88]
<https://www.nature.com/articles/s41586-025-08628-5>

<https://www.nature.com/articles/s41586-025-08628-5>

[3] [7] [9] [10] [12] [91] <https://www.microsoft.com/en-us/research/lab/microsoft-research-ai-for-science/>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/lab/microsoft-research-ai-for-science/>

[4] [25] [26] [41] <https://www.nature.com/articles/s41467-024-53632-4>

<https://www.nature.com/articles/s41467-024-53632-4>

[6] [32] [51] <https://news.microsoft.com/ja-jp/2022/07/08/220708-ai4science-to-empower-the-fifth-paradigm-of-scientific-discovery/>

<https://news.microsoft.com/ja-jp/2022/07/08/220708-ai4science-to-empower-the-fifth-paradigm-of-scientific-discovery/>

[8] [11] [80] [84] <https://azure.microsoft.com/en-us/solutions/discovery>

<https://azure.microsoft.com/en-us/solutions/discovery>

[14] [31] [50] [89] <https://azure.microsoft.com/en-us/blog/transforming-rd-with-agentic-ai-introducing-microsoft-discovery/>

<https://azure.microsoft.com/en-us/blog/transforming-rd-with-agentic-ai-introducing-microsoft-discovery/>

[15] [77] <https://www.microsoft.com/en-us/research/project/dft/use-skala/>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/project/dft/use-skala/>

[18] [19] [65] <https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/mattersim-a-deep-learning-atomistic-model-across-elements-temperatures-and-pressures/>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/mattersim-a-deep-learning-atomistic-model-across-elements-temperatures-and-pressures/>

[20] [21] [38] [66] [68] <https://www.nature.com/articles/s41586-025-09005-y>

<https://www.nature.com/articles/s41586-025-09005-y>

[23] [24] [27] [55] [71] <https://www.microsoft.com/en-us/research/blog/exploring-the-structural-changes-driving-protein-function-with-bioemu-1/>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/blog/exploring-the-structural-changes-driving-protein-function-with-bioemu-1/>

[28] [76] <https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/accurate-and-scalable-exchange-correlation-with-deep-learning/>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/accurate-and-scalable-exchange-correlation-with-deep-learning/>

[29] [30] <https://www.microsoft.com/en-us/research/project/small-molecules/>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/project/small-molecules/>

[33] [35] [36] [87] <https://azure.microsoft.com/en-us/blog/quantum/2024/01/09/unlocking-a-new-era-for-scientific-discovery-with-ai-how-microsofts-ai-screened-over-32-million-candidates-to-find-a-better-battery/>

<https://azure.microsoft.com/en-us/blog/quantum/2024/01/09/unlocking-a-new-era-for-scientific-discovery-with-ai-how-microsofts-ai-screened-over-32-million-candidates-to-find-a-better-battery/>

[34] [47] [48] <https://news.microsoft.com/de-ch/2019/10/01/novartis-and-microsoft-announce-collaboration-to-transform-medicine-with-artificial-intelligence/>

<https://news.microsoft.com/de-ch/2019/10/01/novartis-and-microsoft-announce-collaboration-to-transform-medicine-with-artificial-intelligence/>

[37] <https://azure.microsoft.com/en-us/blog/quantum/2024/03/05/responsible-computing-and-accelerating-scientific-discovery-across-hpc-ai-and-quantum/>

<https://azure.microsoft.com/en-us/blog/quantum/2024/03/05/responsible-computing-and-accelerating-scientific-discovery-across-hpc-ai-and-quantum/>

[39] [40] <https://www.microsoft.com/en-us/research/blog/ghddi-and-microsoft-research-use-ai-technology-to-achieve-significant-progress-in-discovering-new-drugs-to-treat-global-infectious-diseases/>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/blog/ghddi-and-microsoft-research-use-ai-technology-to-achieve-significant-progress-in-discovering-new-drugs-to-treat-global-infectious-diseases/>

[42] [43] <https://azure.microsoft.com/en-us/blog/quantum/2023/04/13/microsoft-and-johnson-matthey-join-forces-to-speed-up-hydrogen-fuel-cell-innovation-with-azure-quantum/>

<https://azure.microsoft.com/en-us/blog/quantum/2023/04/13/microsoft-and-johnson-matthey-join-forces-to-speed-up-hydrogen-fuel-cell-innovation-with-azure-quantum/>

[44] [45] [46]

<https://www.microsoft.com/en/customers/story/1805371430718336282-unilever-azure-consumer-goods-en-united-kingdom>

<https://www.microsoft.com/en/customers/story/1805371430718336282-unilever-azure-consumer-goods-en-united-kingdom>

[49] <https://news.microsoft.com/source/features/digital-transformation/novartis-empowers-scientists-ai-speed-discovery-development-breakthrough-medicines/>

<https://news.microsoft.com/source/features/digital-transformation/novartis-empowers-scientists-ai-speed-discovery-development-breakthrough-medicines/>

[54] [67] [69] [85] <https://ai.azure.com/catalog/models/Aurora>

<https://ai.azure.com/catalog/models/Aurora>

[56] [75] <https://ai.azure.com/catalog/models/TamGen>

<https://ai.azure.com/catalog/models/TamGen>

[57] <https://www.microsoft.com/en-us/research/project/dft/>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/project/dft/>

[60] <https://ai.azure.com/catalog/models/MatterGen>

<https://ai.azure.com/catalog/models/MatterGen>

[61] <https://www.microsoft.com/en-us/research/project/materials/?lang=ja>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/project/materials/?lang=ja>

[63] [64] <https://ai.azure.com/catalog/models/MatterSim>

<https://ai.azure.com/catalog/models/MatterSim>

[70] [73] [74] <https://ai.azure.com/catalog/models/BioEmu>

<https://ai.azure.com/catalog/models/BioEmu>

[72] <https://www.microsoft.com/en-us/research/project/biomolecules/>

<https://www.microsoft.com/en-us/research/project/biomolecules/>

[78] [82] <https://azure.microsoft.com/en-us/blog/microsoft-discovery-advancing-agentic-rd-at-scale/>

<https://azure.microsoft.com/en-us/blog/microsoft-discovery-advancing-agentic-rd-at-scale/>

[79] [81] <https://learn.microsoft.com/en-us/azure/microsoft-discovery/overview-what-is-microsoft-discovery>

<https://learn.microsoft.com/en-us/azure/microsoft-discovery/overview-what-is-microsoft-discovery>

[86] [90] <https://www.microsoft.com/en-us/ai/principles-and-approach>

<https://www.microsoft.com/en-us/ai/principles-and-approach>