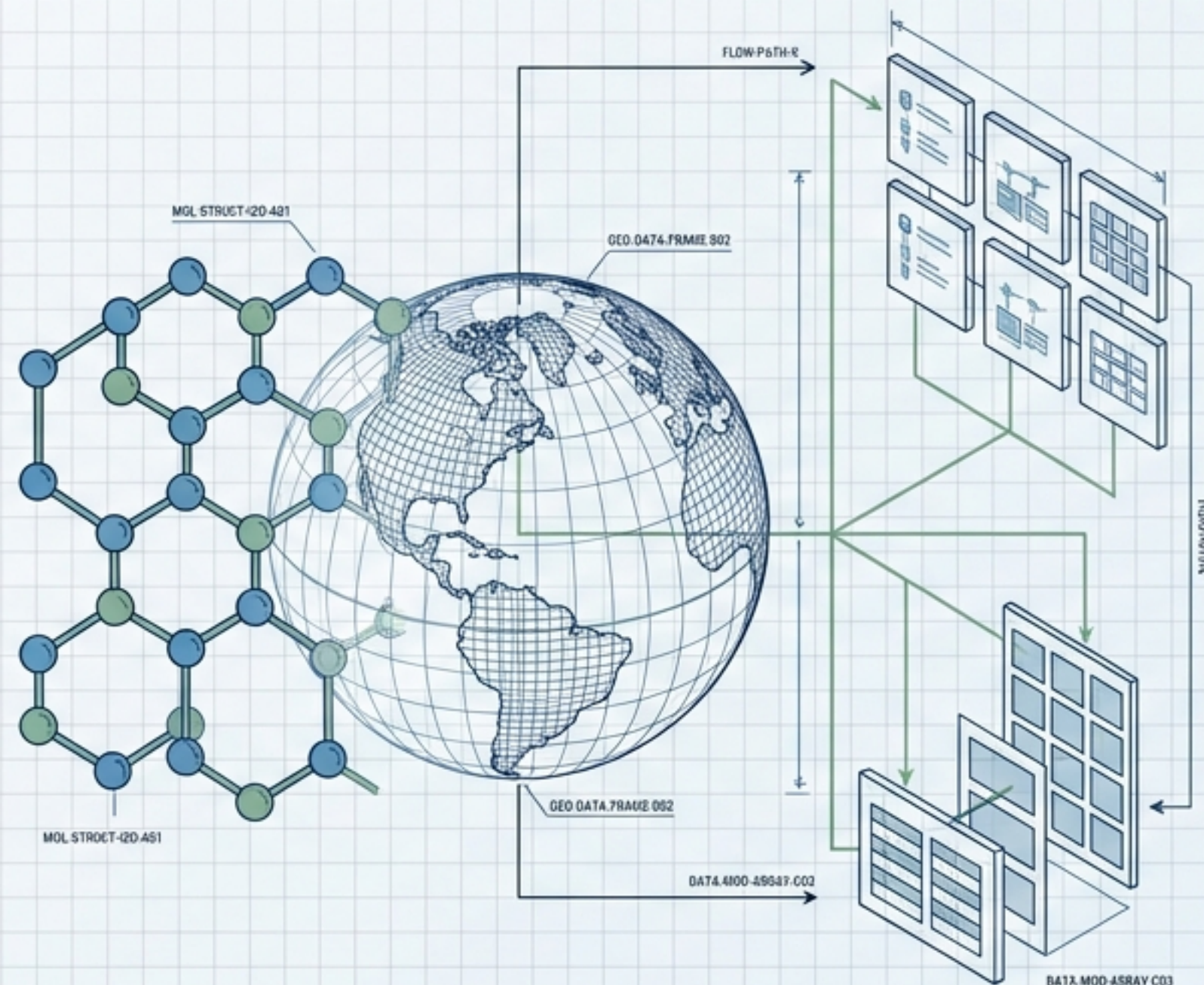
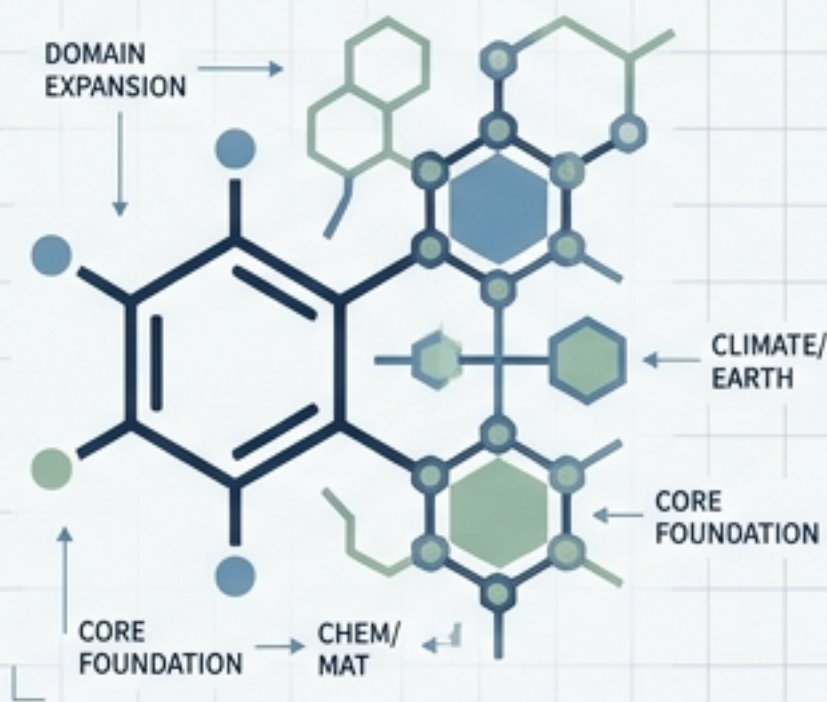


Microsoft “AI for Science” 戦略の全貌と実装構造

個別モデルの研究開発から、
エージェント型「R&D OS」への進化

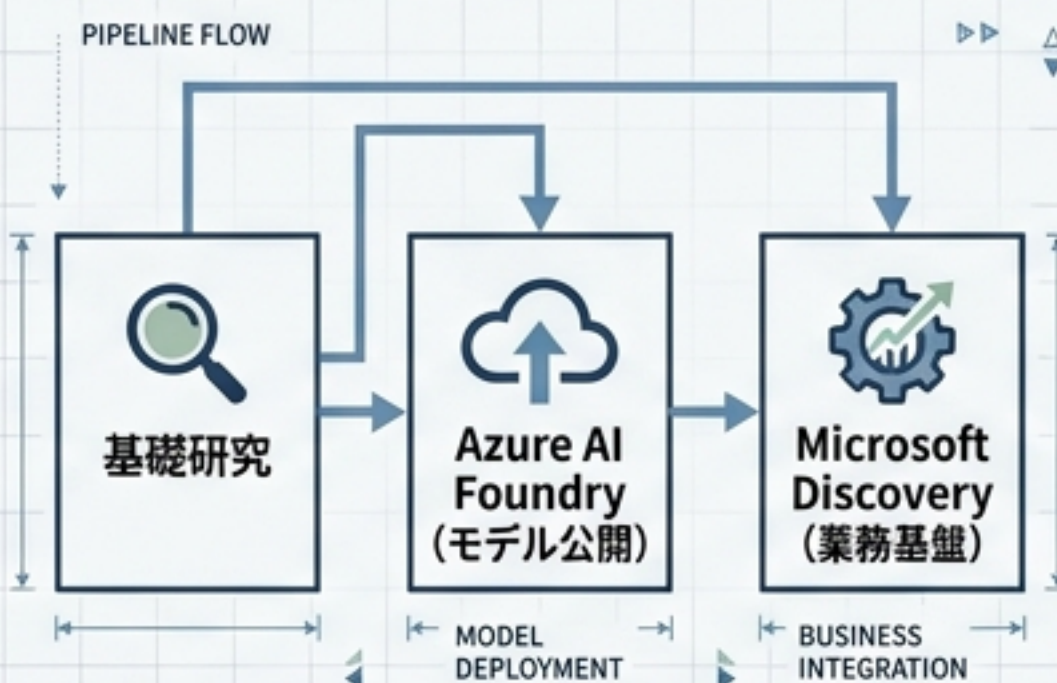


AI for Scienceの本質：単一の研究ではなく「連結されたR&Dオペレーティングシステム」



【深い専門性の横展開】

中核となる「化学・材料」領域での深い成功を基盤に、「気候・地球科学（Aurora）」「生命科学（TamGen等）」へドメインを急速に横展開。



【明確なパイプライン実装】

基礎研究から、Azure AI Foundry（モデル公開）、そしてMicrosoft Discovery（業務基盤）へと、研究成果をビジネス現場へ直結させる明確な導線。

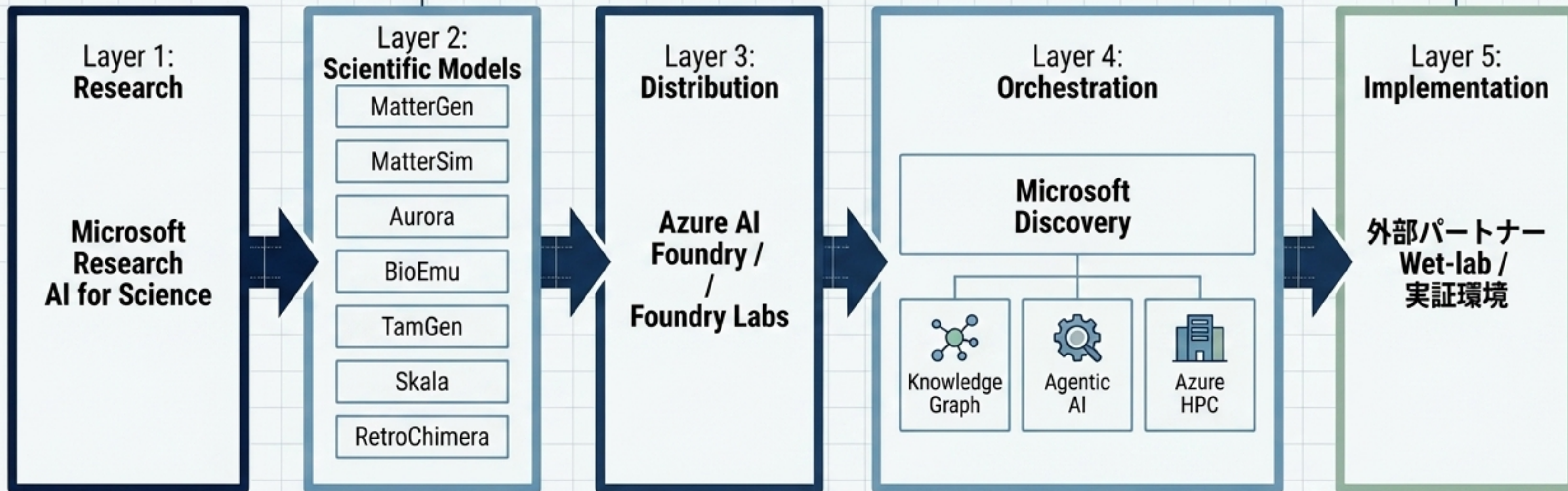


【冷静なガバナンスと監督】

完全自律ではなく、人間の専門家による監督（Human oversight）とハイブリッドな検証（DFT/Wet-lab）を必須とする安全設計。

【全体像】 「研究 → 配布 → 実装」 を直結させる連結パイプライン

モデルのオープンソース・カタログ化

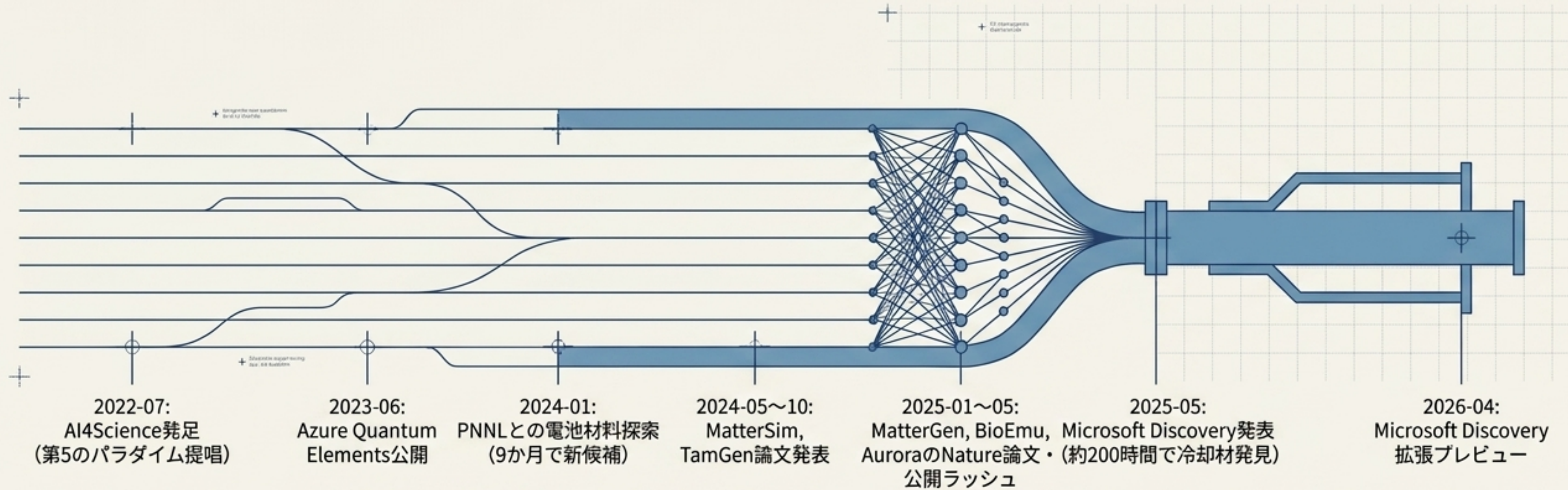


基礎研究の推進

統合R&D基盤としての機能

Insight: 基礎研究費の個別投資にとどまらず、汎用クラウド基盤を通じた横断活用へ資源を集中させている。

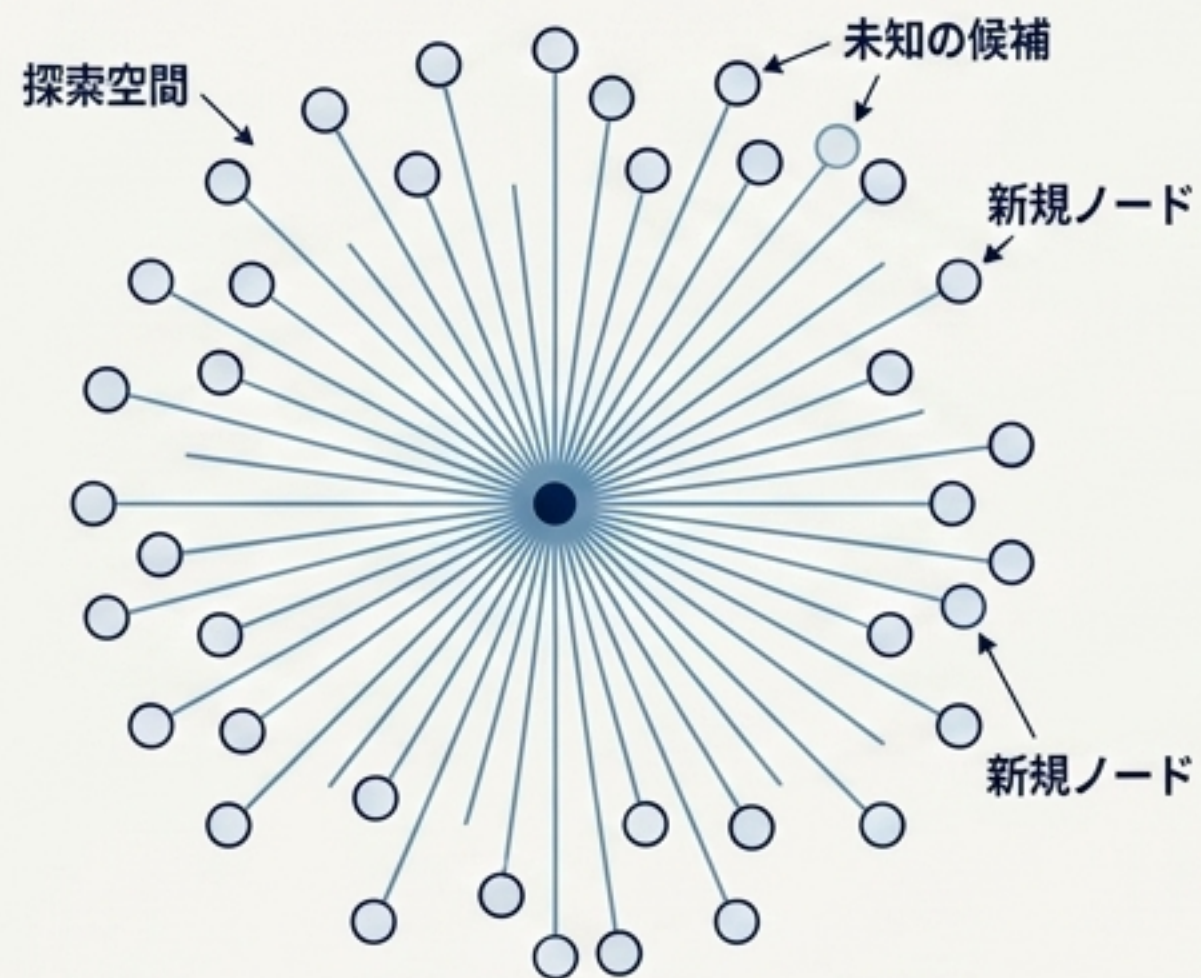
マイルストーン：単発の研究から「エージェント型R&D基盤」への急速なシフト



2024年後半からの基礎モデル発表ラッシュが、2025年以降の統合基盤（Discovery）構築のための『部品揃え』であったことが明白になっている。

AI for Scienceを支える「2つの専用技術アプローチ」

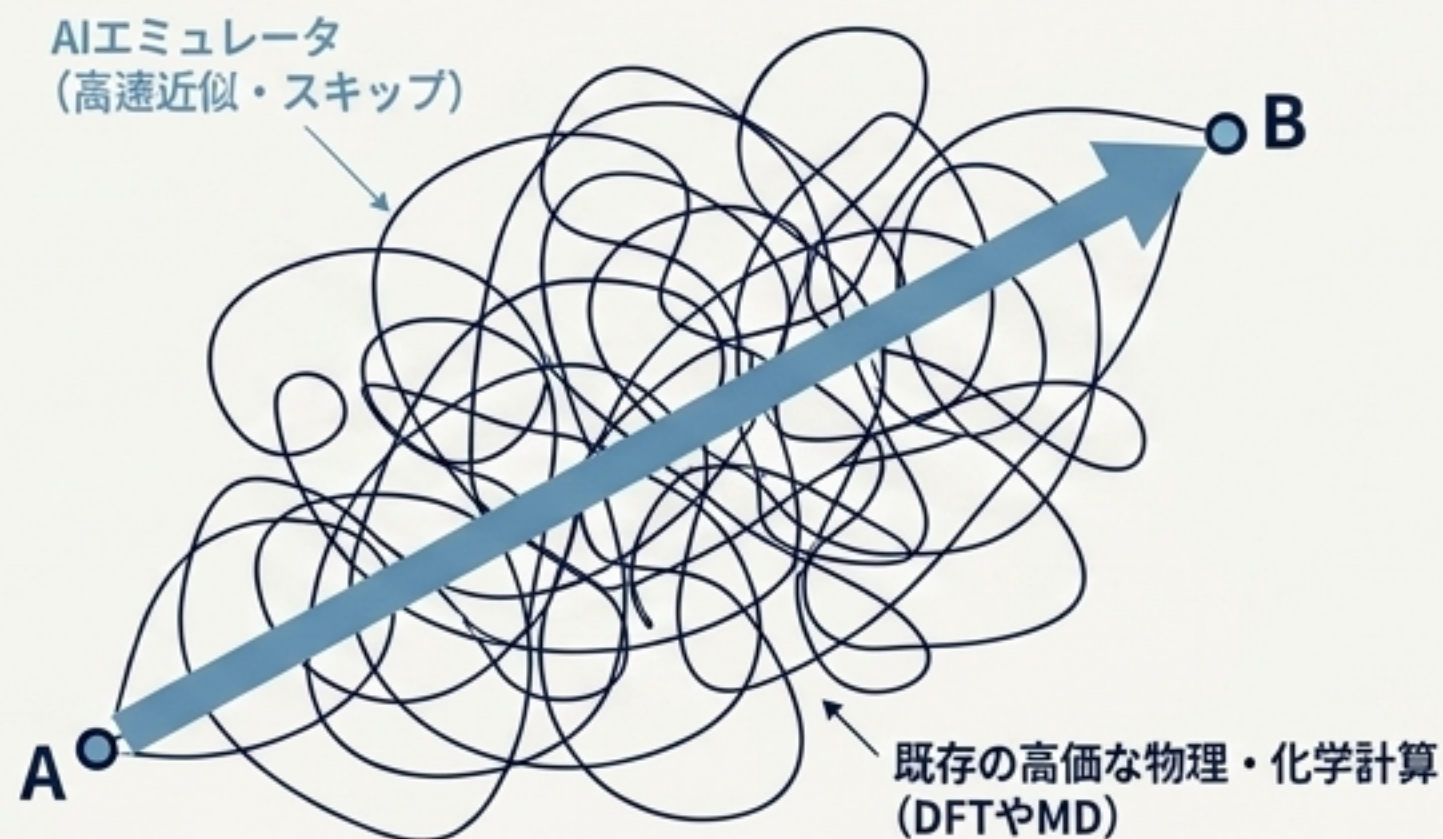
【生成系 (Inverse Design)】 探索空間の拡張



役割: 目的に合わせた未知の候補（分子・格子・原子種）を直接創り出す。

該当モデル: MatterGen, TamGen, RetroChimera

【エミュレータ系 (Surrogate)】 物理計算の代替・高速化



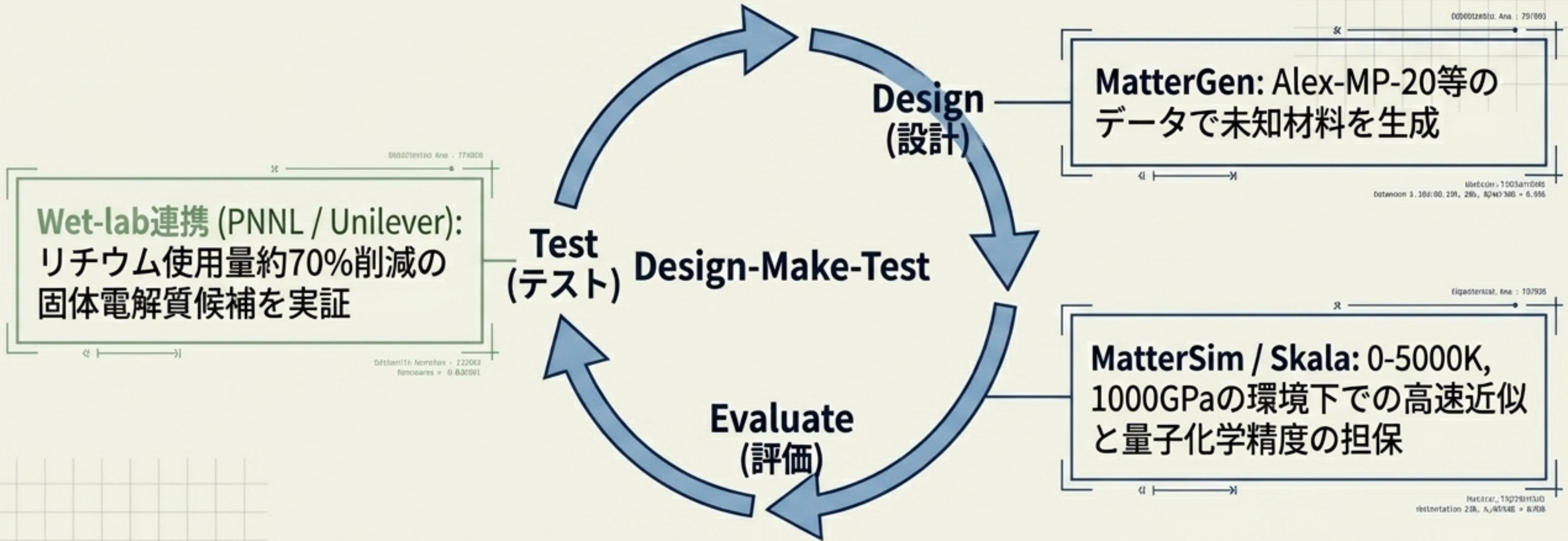
役割: 既存の高価な物理・化学計算（DFTやMD）を深層学習で高速近似・スキップする。

該当モデル: MatterSim, BioEmu, Skala, Aurora

主要科学基盤モデル・ポートフォリオ診断表 (Core Matrix)

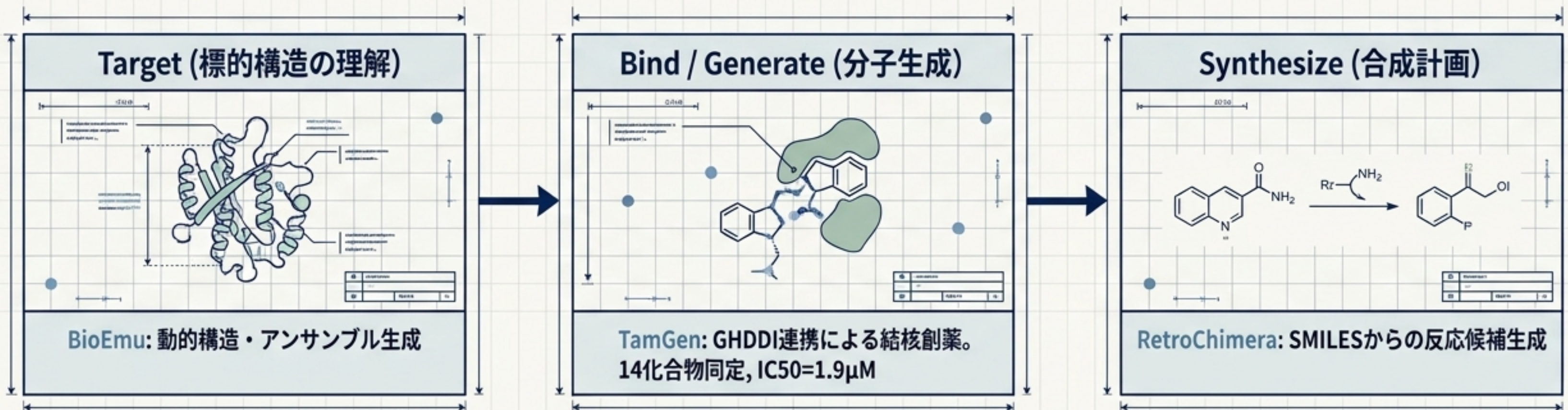
モデル名	領域	技術スタック	成果の要点	主な限界・制限
MatterGen	化学・材料	拡散モデル	S.U.N. rate 38.57%, 新規安定構造率2倍超	最終評価はDFT依存, 20原子超は対象外
MatterSim	化学・材料	M3GNet系	最大10倍精度向上, 97%データ削減	高分子・表面・強相関系に課題
Skala	物理・化学	DL XC functional	1 kcal/mol未満の化学精度達成	Main-group chemistry中心
Aurora	気候・地球	1.3B 3D Swin	従来比5000倍の速度, 熱帯低気圧100%優位	分布外入力リスク, 直接運用不適
BioEmu	生命科学	生成DL	1時間数千構造生成, 1 kcal/mol誤差	下流の創薬判断は別問題
TamGen	生命科学	GPT型化学言語	最良IC50=1.9 μ M (結核菌標的)	Wet-lab検証必須, バイオセーフティ制限
RetroChimera	生命科学	逆合成予測	Design-Make-TestのMake支援	実験補完技術としての位置づけ

領域深掘り(1) 「化学・材料」：生成から運用までが繋がる最前線



Key Takeaway: AI単独での完結ではなく、膨大な候補から有望株を絞り込み、後段の『高価なDFT計算や物理実験』の試行回数を劇的に減らすことが現在の焦点である。

領域深掘り(2) 「生命科学」：初期探索の壁を越えるDesign-Make-Test拡張



【強いガバナンスの要求】

- ・有害・有毒化合物生成のシステムの禁止、法令順守・倫理審査の必須化。
- ※AIは下流のADME/Tや臨床開発リスクを排除するものではないことに留意。

領域深掘り(3) 「気候・地球科学」：地球システム全体を包括する基盤モデル



大気汚染予測

対運用系勝率 **74%**



波浪予測

対運用系勝率 **86%**



熱帯低気圧トラック

対運用系勝率 **100%**



従来数値予報比

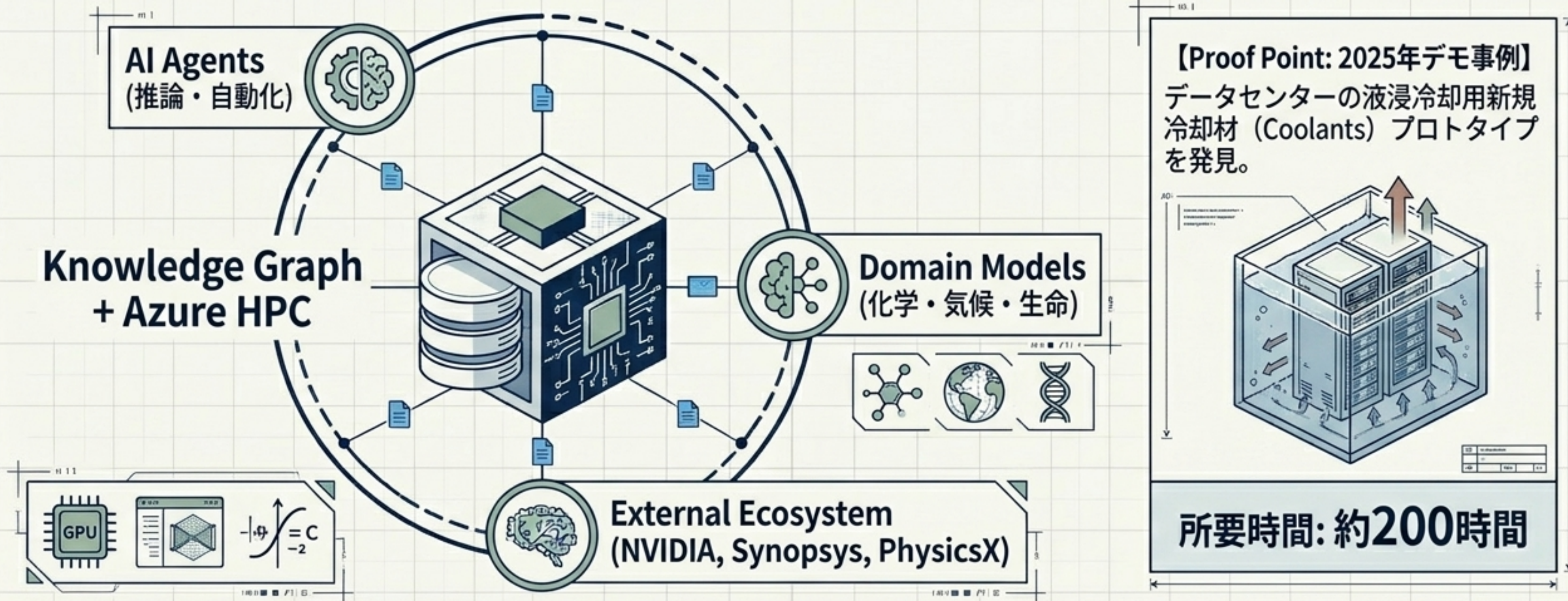
約**5,000**倍の計算速度



運用制限 (Limitations)

高性能な意思決定サポートレイヤ (Surrogate) としての位置づけ。
分布外サンプルでの精度低下リスクがあり、既存の運用系を無検証で「完全置換」するものではない。

Microsoft Discovery : 企業R&Dをオーケストレーションする「新しいOS」



点在するAIモデル群を統合し、企業R&Dのワークフロー全体を駆動する統合基盤。

パートナーシップ戦略：「AI・基盤」と「Wet-lab・ドメイン知識」の完璧な分業

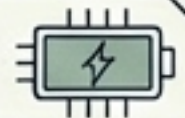
【Microsoft層】

Azure HPC / AI Foundry / 科学基盤モデル (計算力と探索速度)

【Partner層】

Wet-lab機能 / ドメインデータ / 実験による真値評価

PNNL (官・研究)



電池実証。3,200万候補から9か月未満でPoC (固体電解質) 到達。

GHDDI (産学連携)



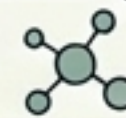
感染症創薬。結核阻害剤のターゲット知見とWet-lab検証。

Unilever (企業)



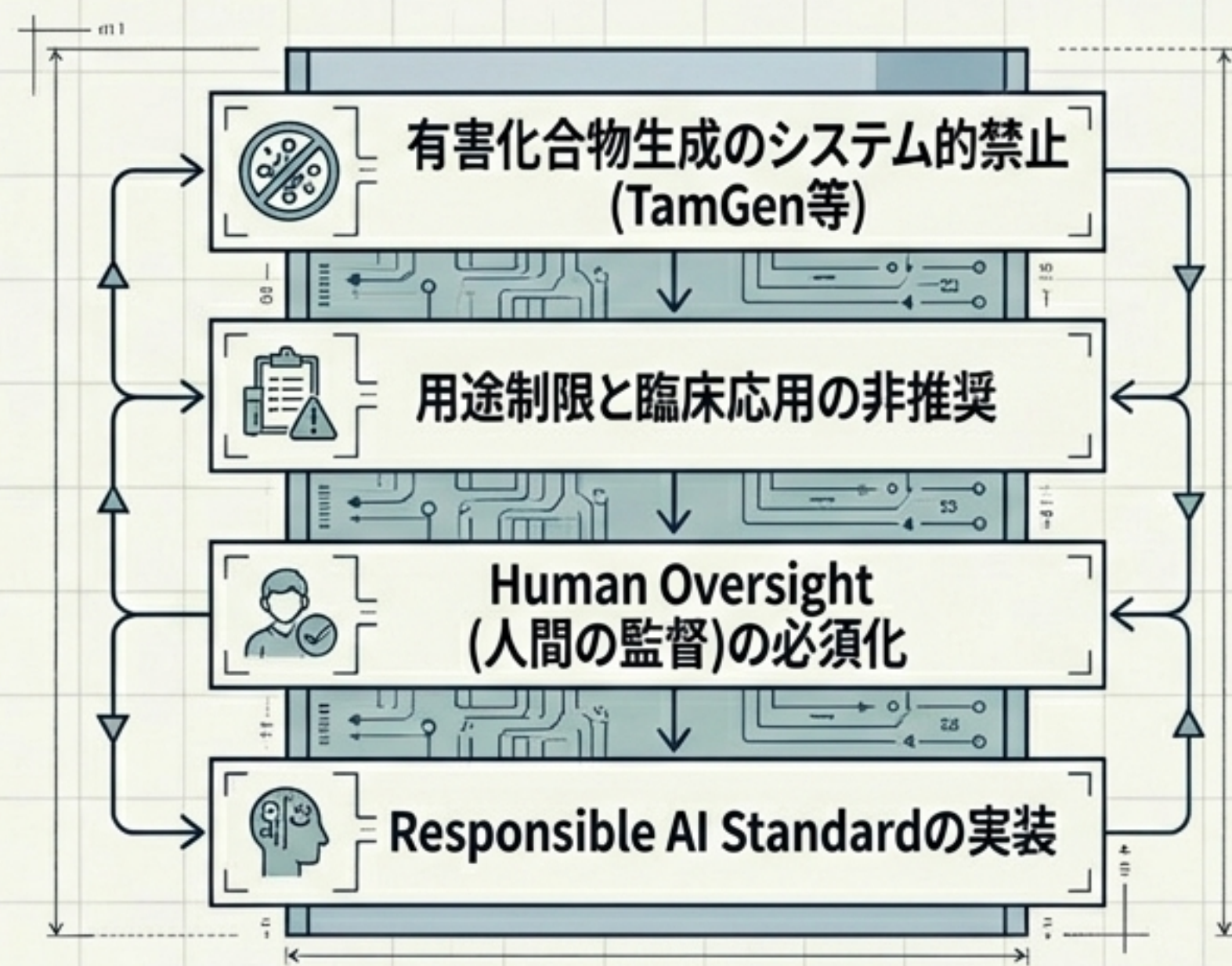
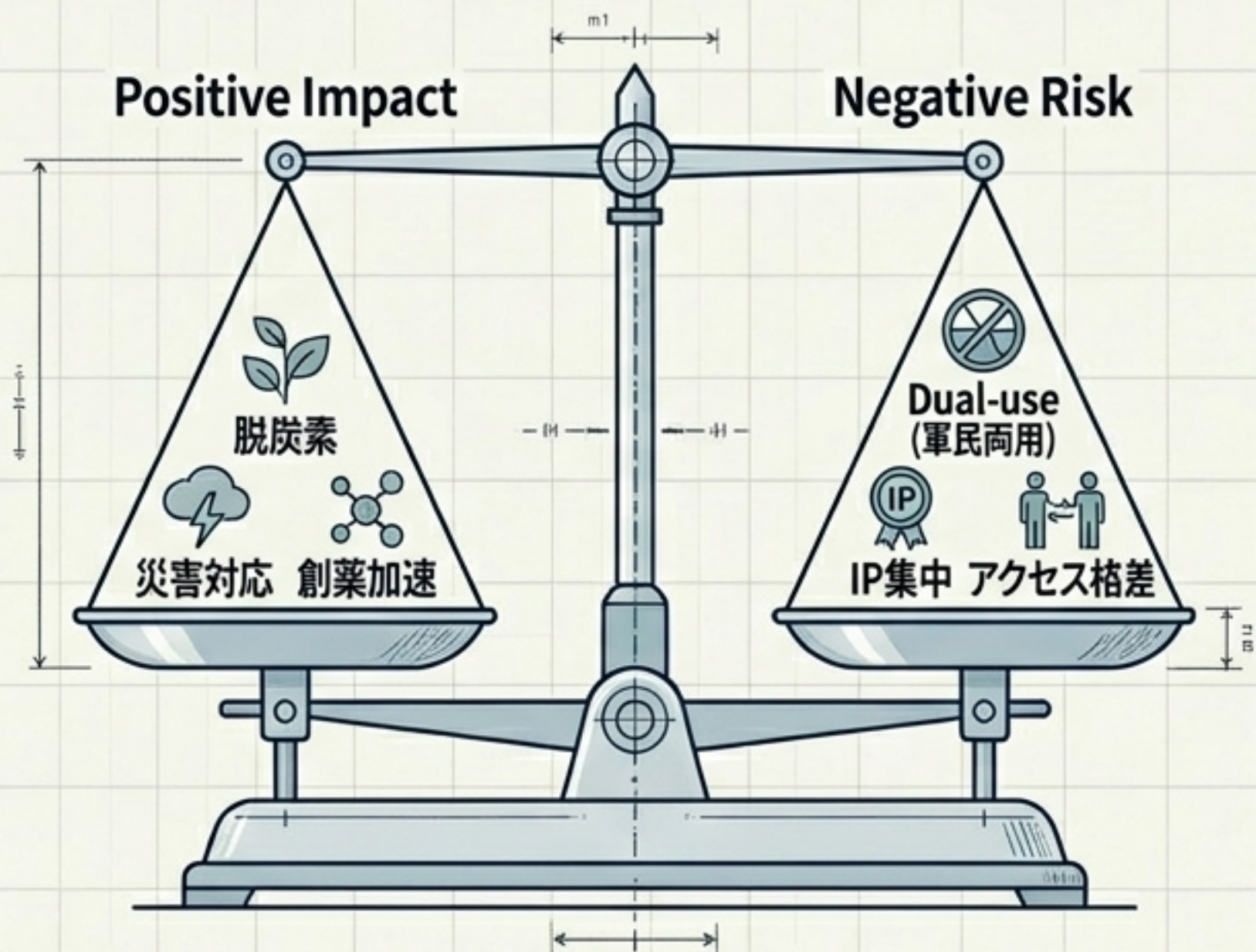
日用品R&D。自社独自のR&Dデータと素材開発課題の提供。

Novartis (企業)



製薬。メディシナルケミストリーにおける分子設計・合成計画探索。

Responsible AI for Science : 専門家が監督する「仮説生成装置」



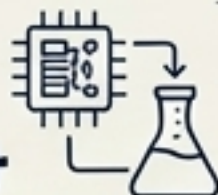
Core Message: AIは自律的に真理を決定するものではなく、厳格なガバナンスの下で人間の専門家の意思決定を高速化・拡張するためのツールである。

ターゲット別・戦略的プレイブック（推奨アクション）

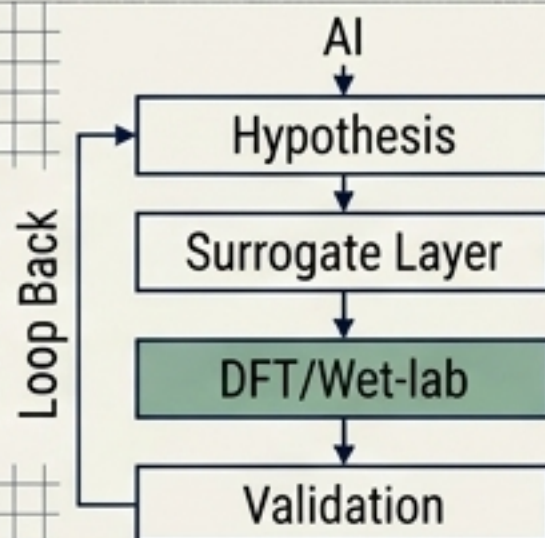
micro-typographic -0.0, 0.35, 0.87

1. 研究者

(Researchers) 向け

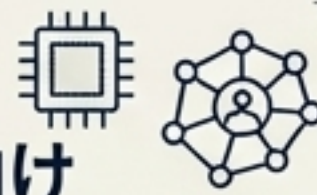


AIを仮説生成・近似計算の『Surrogate層』として組み込み、最終判断をDFTやWet-labへ戻すハイブリッド・ワークフローを直ちに前提化せよ。

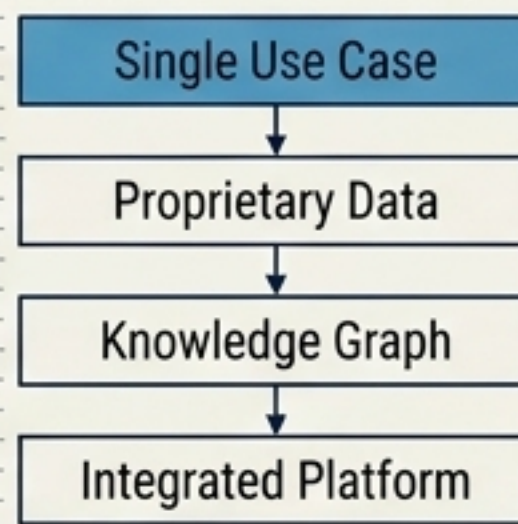


2. 企業R&D

(Enterprises) 向け



初期から統合基盤の全面導入を狙うのではなく、化学・材料探索などROIが見えやすい単一ユースケースから着手し、自社独自のデータ (Proprietary data)の知識グラフ化へ進め。

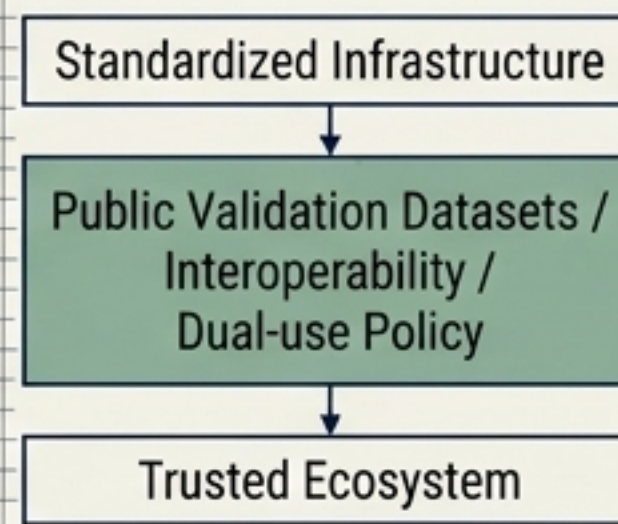


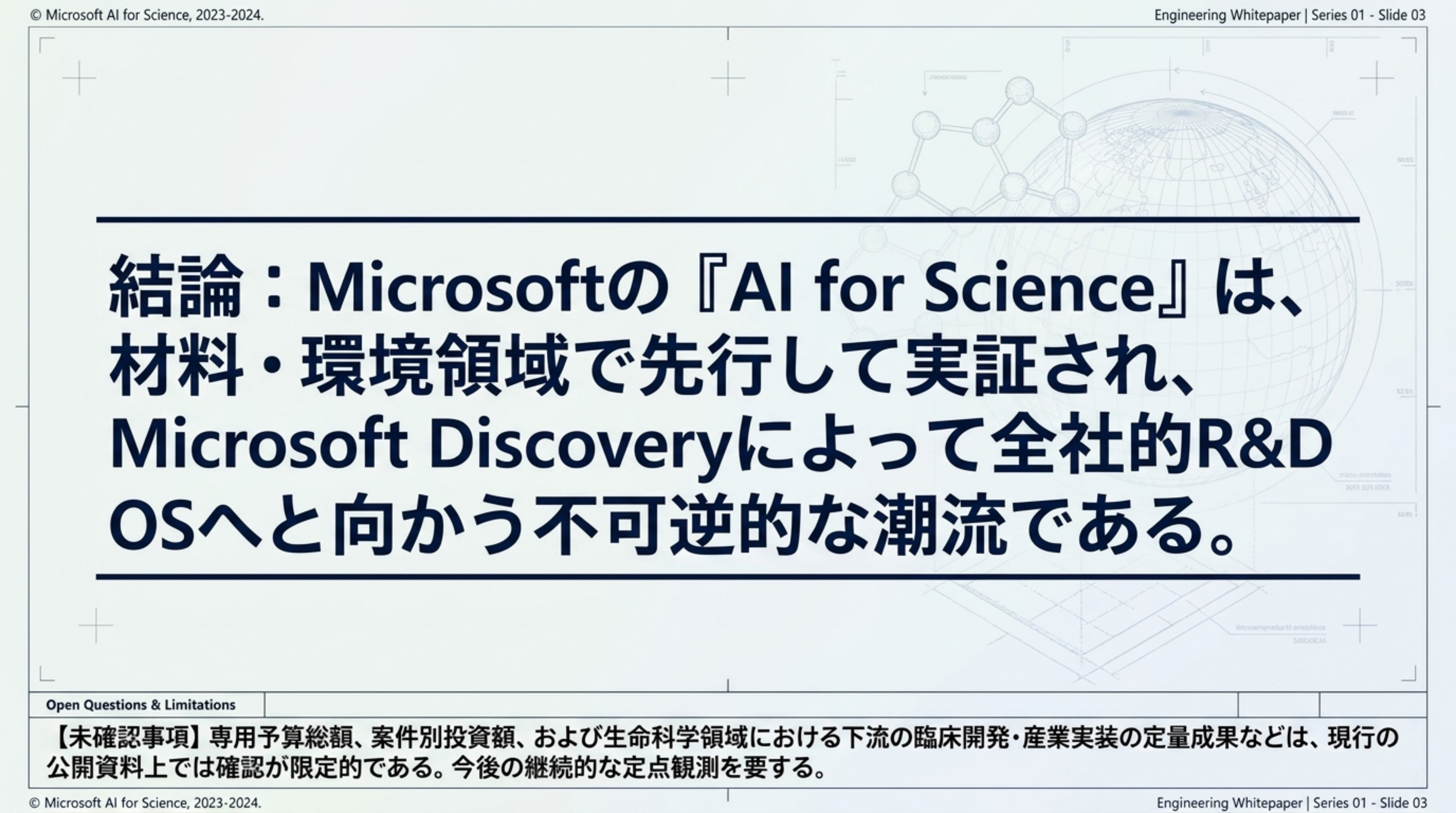
3. 政策立案者

(Policymakers) 向け



単なるAI推進や計算資源投資ではなく、公的な検証データセットの整備、データの相互運用性確保、Dual-use対策など『評価と検証の標準化インフラ』に投資せよ。





結論：Microsoftの『AI for Science』は、材料・環境領域で先行して実証され、Microsoft Discoveryによって全社的R&D OSへと向かう不可逆的な潮流である。

Open Questions & Limitations

【未確認事項】専用予算総額、案件別投資額、および生命科学領域における下流の臨床開発・産業実装の定量成果などは、現行の公開資料上では確認が限定的である。今後の継続的な定点観測を要する。