



科学的発見のパラダイムシフト

自律型「AI科学者」が再定義する研究開発の未来と協働のルール

予測ツール (The Predictor)

特定の問題に対する
機械学習の適用・予測



汎用ツール (The Generalist)

LLMによる文献要約や
論文執筆補助



構造化された実行者 (The Structured Executor)

ツールにプロセスを組み込み、
複雑なタスクを処理



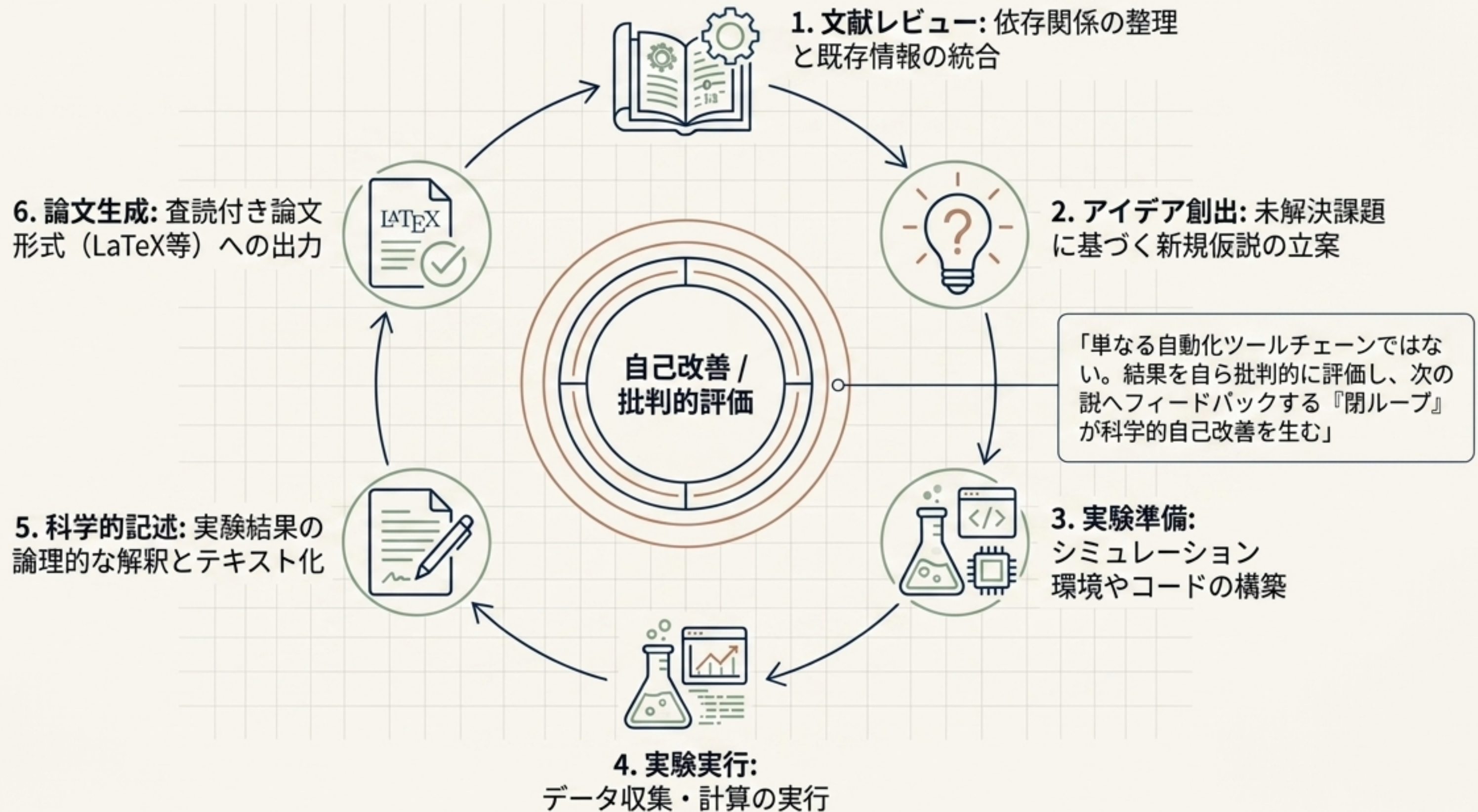
自律型クリエイター (The Autonomous Creator)

AIが自ら仮説を立て、実験し、
自己完結するエンドツーエンドの研究



「人間がプロンプトを入力して待つ時代から、AIが自律的に研究をオーケストレーションする時代への移行」

エンドツーエンドの自律型科学的発見フレームワーク



The Big Three AI Scientists

Sakana AI 「The AI Scientist」



アーキテクチャ: Aider連携 / 自動査読システム (Automated Reviewer)

成果: 論文1本の生成コストわずか \$15 / 人間の労力3.5時間

マイルストーン: トップティア国際会議 (ICLR) ワークショップ採択 (スコア 6.33)

Google Research 「AI Co-Scientist」



アーキテクチャ: Gemini 2.0 マルチエージェント / エージェント間の自己対戦型推論

強み: Eloディベートトーナメントによる「テスト時計算量」のスケーリング

マイルストーン: GPQAベンチマークで熟練した専門家を凌駕する推論能力

FutureHouse 「Kosmos」



アーキテクチャ: 長的文脈を維持する「構造化された世界モデル (World Model)」

能力: 1回の実行で42,000行のコード処理 / 最長12時間の連続稼働

マイルストーン: 独立稼働で生物学・材料科学など7つの新規ブレイクスルーを達成

API Translation

デジタル (Digital)

LLM (GPT-4 / Claude)



自然言語による化合物
の探索指示

翻訳層 (Translation)

Python Code / ロボットAPI



実験プロトコルの自動生成

物理的実行 (Physical)

自律駆動型ラボ
(Self-Driving Labs)



ロボットアームによる
化学合成の自動実行

CMU 「Coscientist」

ノーベル賞対象の「パラジウム触媒クロスカップリング反応」を自律学習し、わずか数分で初回合成に成功。

LBL 「A-Lab」

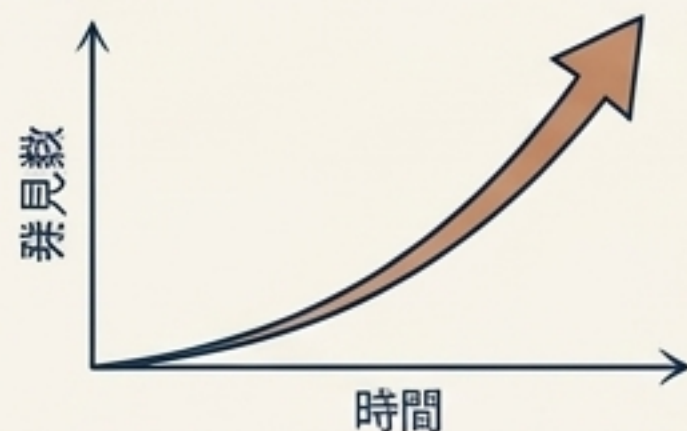
24時間365日無人稼働。手動で1年要する材料の合成最適化を数週間に短縮。

予測 vs. 現実：DeepMind GNoMEを巡る論争

AIの予測 (DeepMind GNoME)

主張: 220万個の新結晶構造（人類の知の約800年分）を発見。

候補: 38万個の熱力学的に安定した合成候補。



化学者からの批判 (Human Critique)

課題1: 「新規性」の欠如（既存化合物の単純な元素置換）。

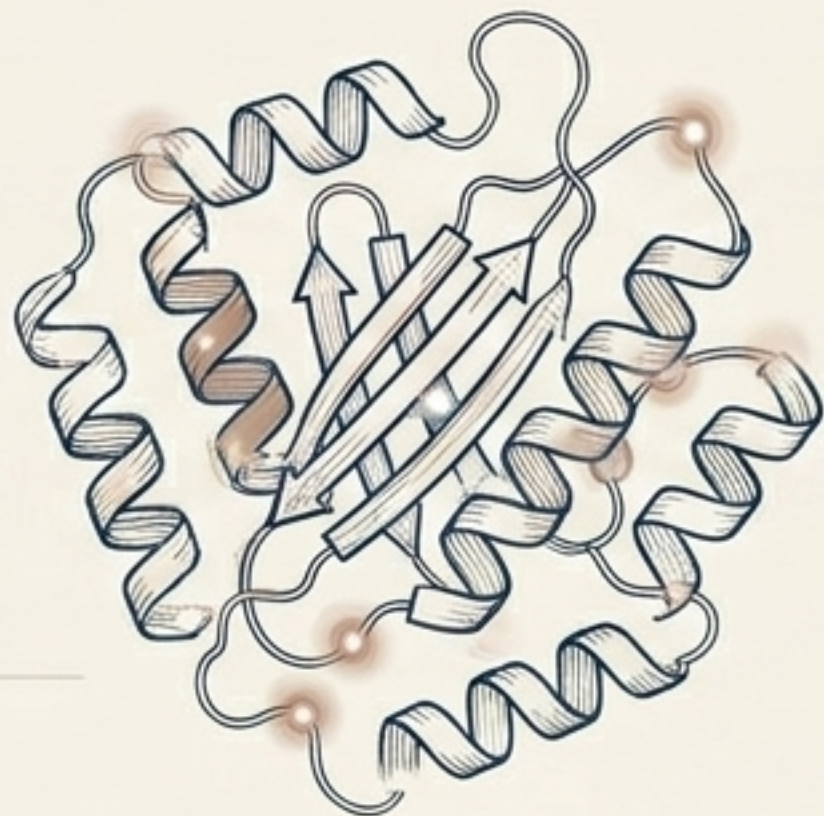
課題2: 「有用性」の欠如（実用性のないアクチニウム等、希少・放射性元素の使用）。

課題3: A-Labの合成結果における4つの一般的な分析エラー。



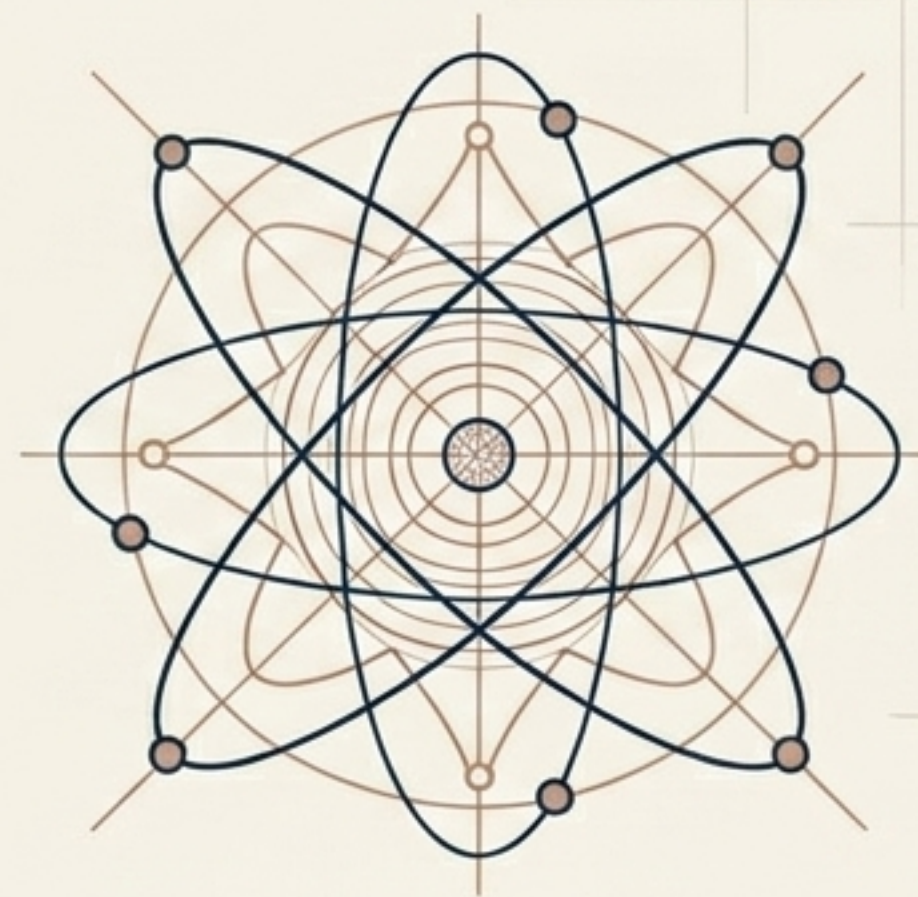
【結論】 機械学習における「アルゴリズム上の最適解」は、必ずしも物理的・化学的に有用な「科学的真理」とは一致しない。

バイオテクノロジーと創薬



- ④ **スピード:** 既存薬の再利用期間を2年未満、コストを100万ドル未満に圧縮 (Ignota Labs)。
- ④ **資本:** AI創薬セクターへの33億ドルの資金流入。NovartisとGenerate:Biomedicinesの10億ドルの提携。
- ④ **イノベーション:** AlphaFold 3による構造予測。新規タンパク質構造の提出が40%以上増加。

物理学の再発見と高度化



- ④ **発見:** 数学的知識なしで生データから「標準模型 (Standard Model)」や対称性をAIが独自に再発見 (NYUAD)。
- ④ **最適化:** 核融合炉プラズマ診断AI「Diag2Diag」。高価なハードウェアを削減しつつ測定精度を劇的に向上 (PPPL)。

AIによるR&D加速と 経済的インパクト

\$560B



年間創出経済価値
(最大)

20% - 80%



R&Dプロセス加
速率

2.0x

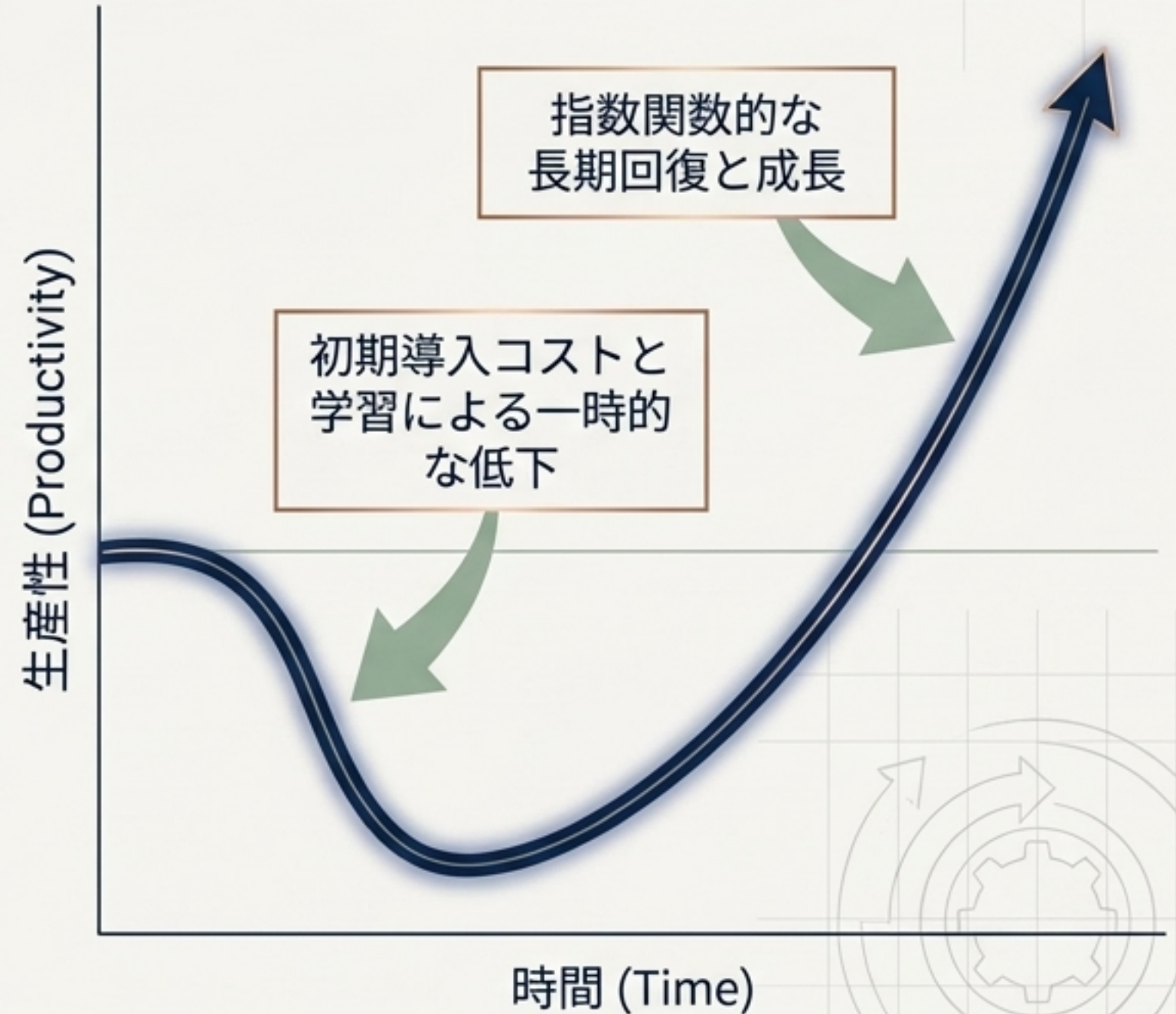


知的財産産業の
速度向上

企業成長:

AI特許を持つ企業は、雇用成長率で+25%、
収益成長率で+40%の上回り

生産性のパラドックス (The Productivity Paradox)

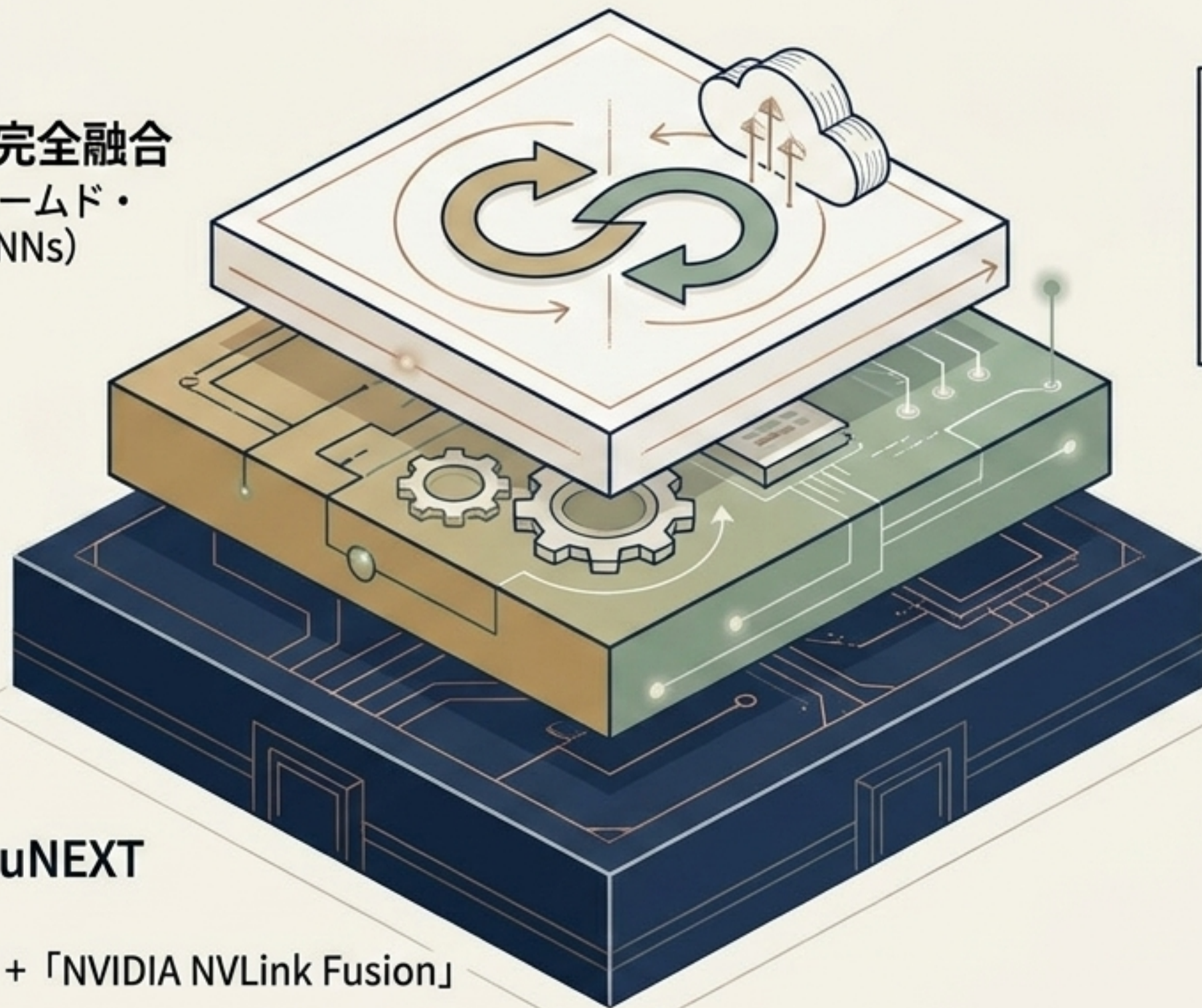


国家インフラの再定義：「AI for Science」

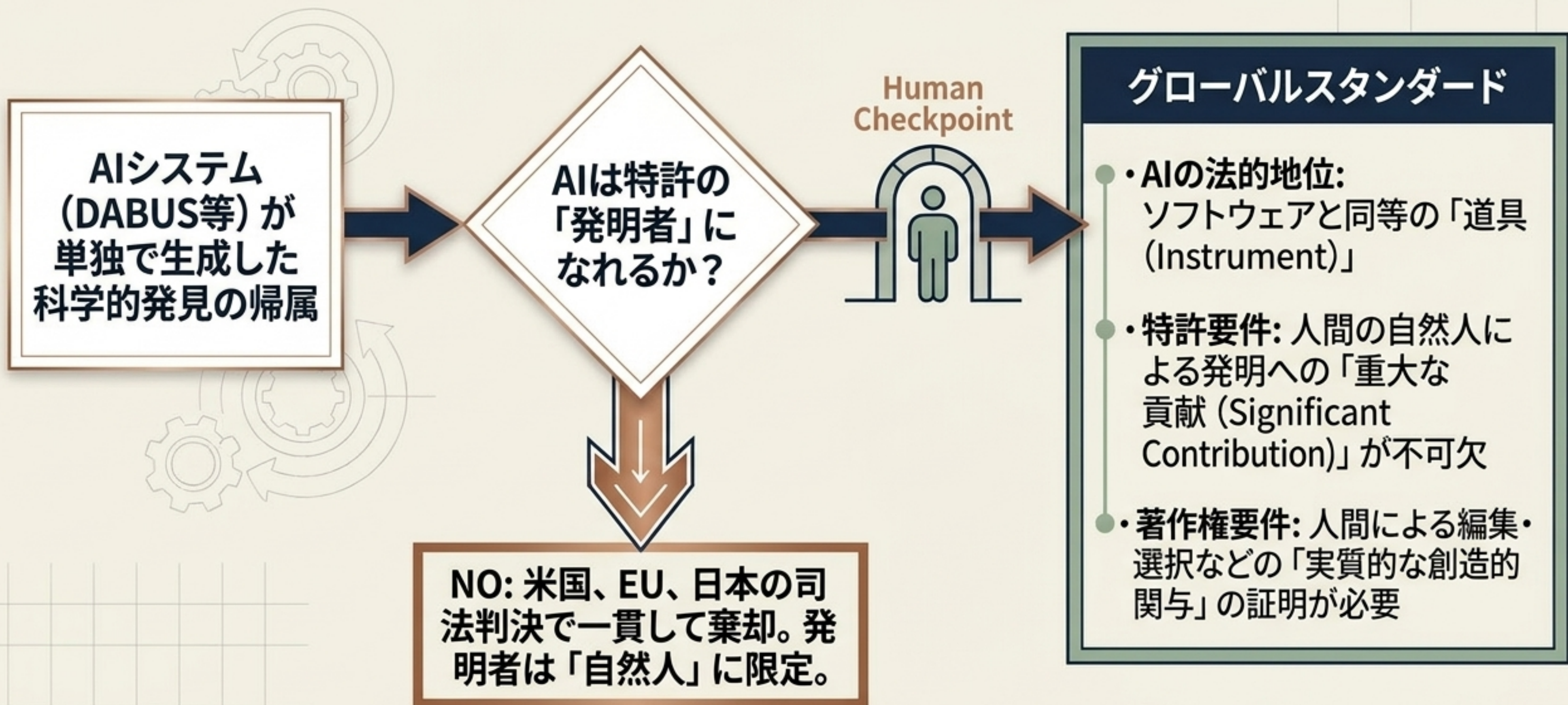
アプリケーション層:
AI・シミュレーションの完全融合
自動仮説生成 / 物理インフォームド・
ニューラルネットワーク (PINNs)

パフォーマンス層:
ハイブリッドAI-HPC
アーキテクチャ
エクサフロップス級演算 /
混合精度計算

ハードウェア層: FugakuNEXT
RIKEN x 富士通 x NVIDIA
「FUJITSU-MONAKA-X CPU」 + 「NVIDIA NVLink Fusion」



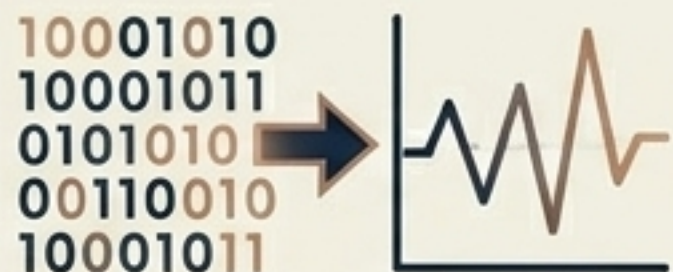
従来の「富岳」の大規模
シミュレーション能力を
継承しつつ、AI
ワークロードに特化した
ハイブリッド基盤へ



戦略的示唆: AIの最適解をそのまま特許化することは不可。人間がどのように検証し実用化に関与したかの緻密な記録が企業のIP戦略を左右する。

倫理的ガードレール：共感と定性的研究の限界

AIの処理能力 (Quantitative)



人間の不可欠性 (Qualitative)



- **強み:** 膨大な言語データのパターン
トラッキング、上昇調の話し方や沈黙
の「トーン模倣」。
- **リスク:** ハルシネーション(存在しな
い文献の引用)と、「偽の科学的権威」
へのブラインドトラスト。


- フェミニスト新唯物論の視点: 人間の
「経験の豊かさ」や感情の微細な揺ら
ぎの把握。
- AIに欠如するもの: 「認知的共感(スト
ーリーの理解)」、「感情的共感(理由と
強度の理解)」、「思いやりの共感」。

結論: AIを被験者や定性データの無批判な解釈者として用いることは、
研究の質と科学の客観性を根本から損なう。

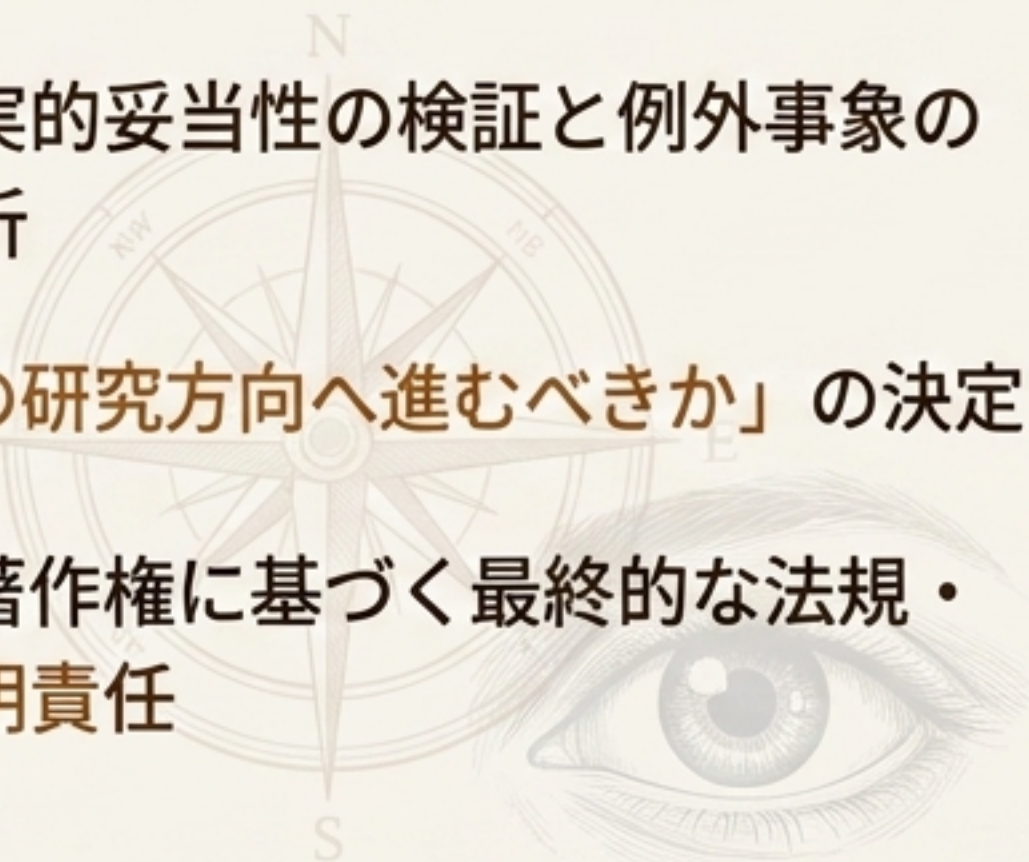
脱「ラバースタンプ」：Human-in-the-loop から Human in charge of the loop へ

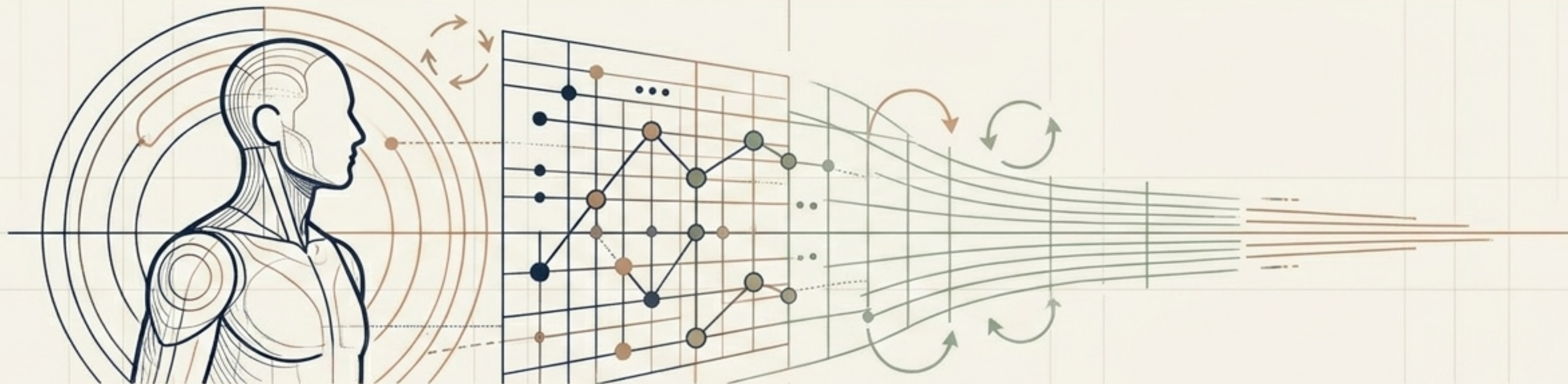
旧モデル: 自動化バイアスによる盲目的な承認 (思考の放棄)

AI (共同研究者 / Co-Researcher)

- スケーラブルな情報処理と文献検索
 - オープンエンドな仮説の大量生成
 - 数万行のコード実行と大規模計算シミュレーション
- 

人間 (意味のキュレーター / Meaning Curator)

- 仮説の現実的妥当性の検証と例外事象の哲学的分析
 - 「次にどの研究方向へ進むべきか」の決定
 - 特許権・著作権に基づく最終的な法規・倫理的説明責任
- 



探索の自動化

AIは果てしない試行錯誤と労働集約的なパラメータ調整を担い、人間の研究者を泥臭いデータ処理から解放する。

意義のキュレーション

人間は「次にどの問題を解くべきか」「その結果は人類にとってどのような意義を持つのか」という高度な哲学的・科学的推論に集中する。

究極のハイブリッド

真に革新的な研究組織は、AIの自律性を極限まで引き出しつつ、人間が確固たる主導権と責任を握る強靱なハイブリッド協働モデルの上に構築される。