

# 第5のパラダイム： AIによるR&Dの完全再構築

Microsoft "AI for Science" が牽引する自律的探索と  
次世代エコシステムの全貌

2026 | Strategic Briefing & Visionary Explainer

AIは『効率化ツール』から、  
未知の領域を自律的に探索する  
『共同研究者』へと進化した。

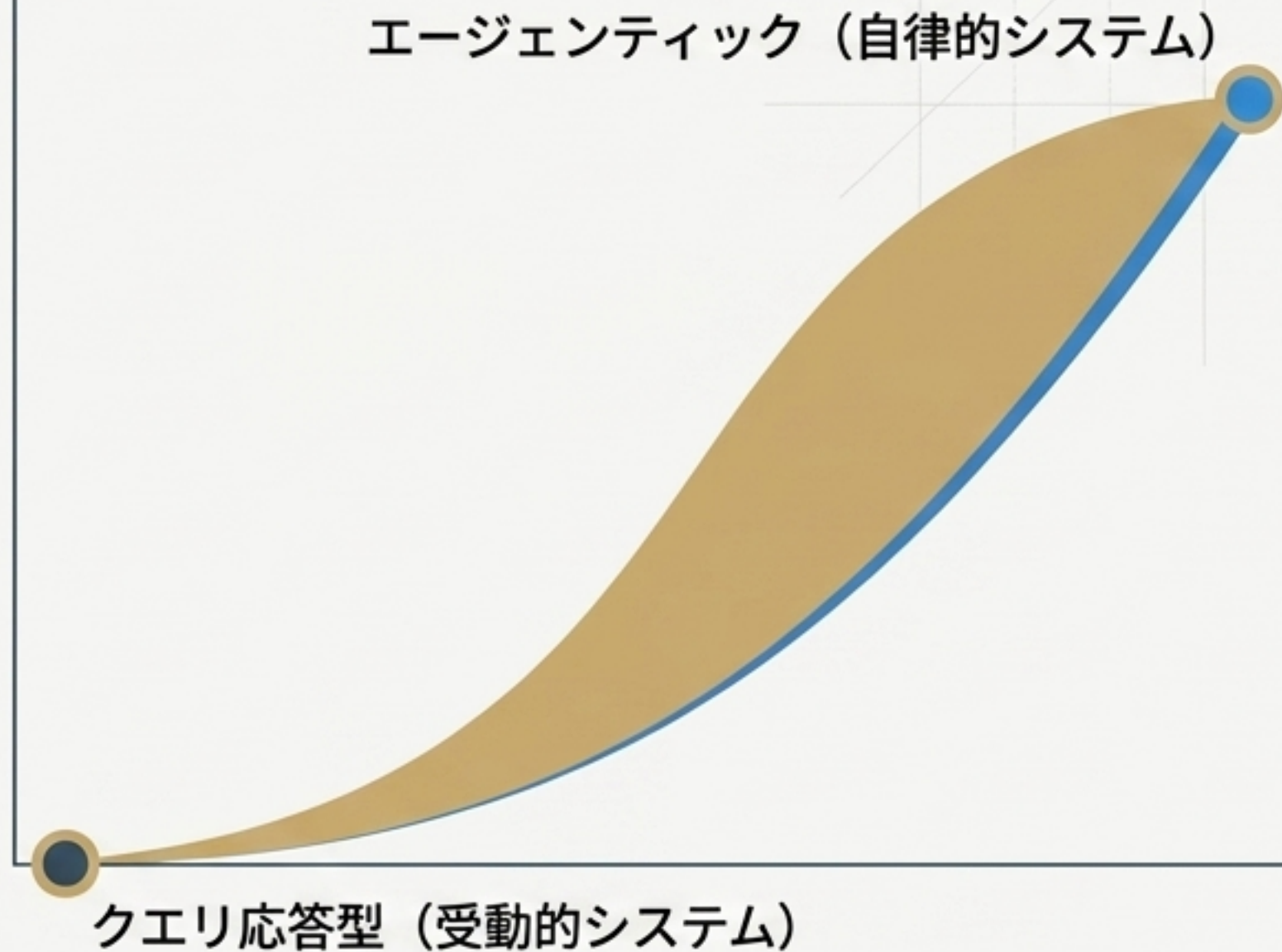
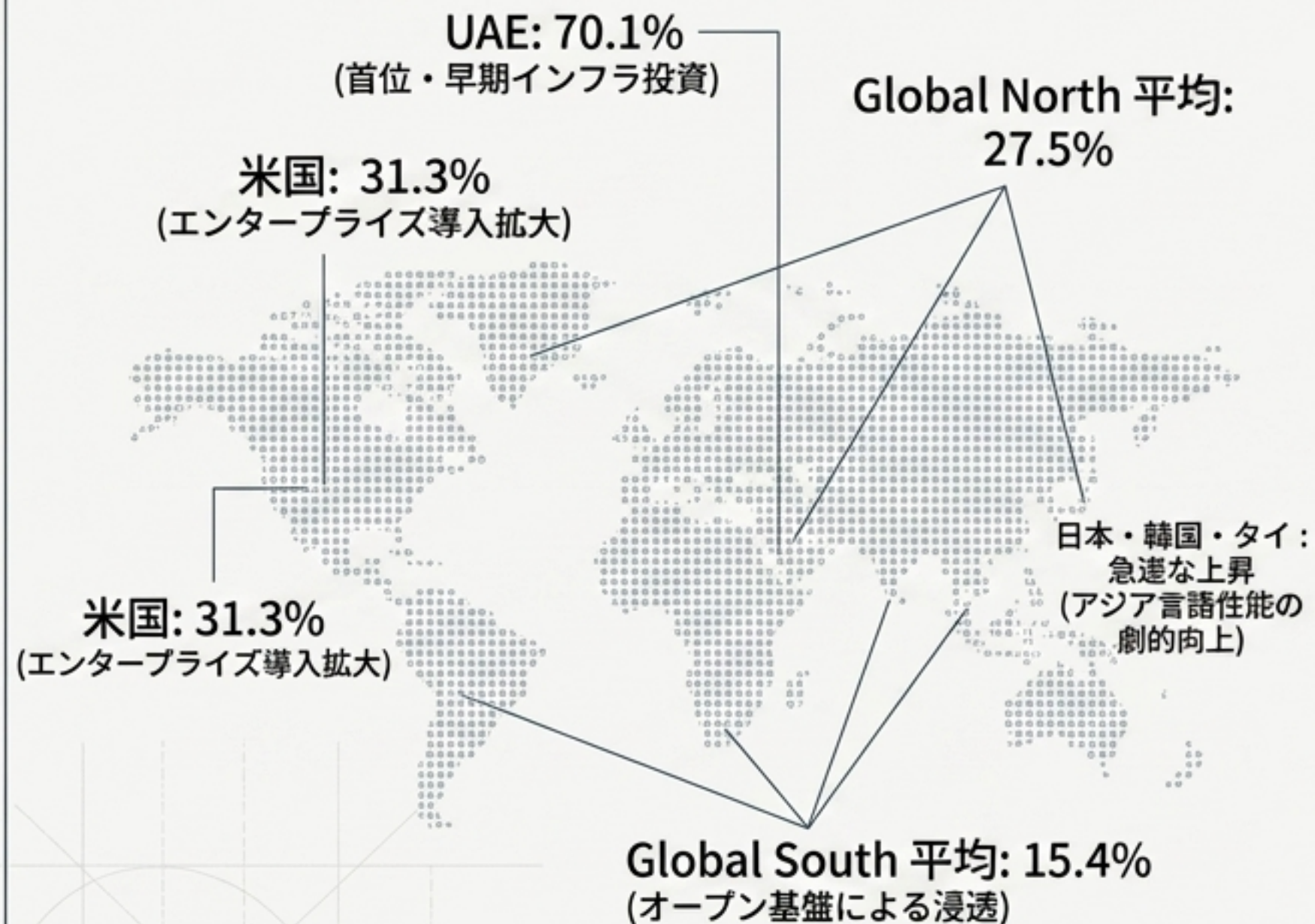


# 科学的発見の歴史的パラダイムシフト

パラダイム	プロセスと手法	AIの役割
第1～第2のパラダイム	経験的観察・理論的モデル (人間主導)	不在
第3のパラダイム	計算機シミュレーション (人間主導)	不在
第4のパラダイム	ビッグデータ解析 (データ依存)	パターン認識・ 受動的処理ツール
第5のパラダイム (現在)	AI・エミュレーション (エージェント主導)	自律的な共同研究者 (コラボレーター)

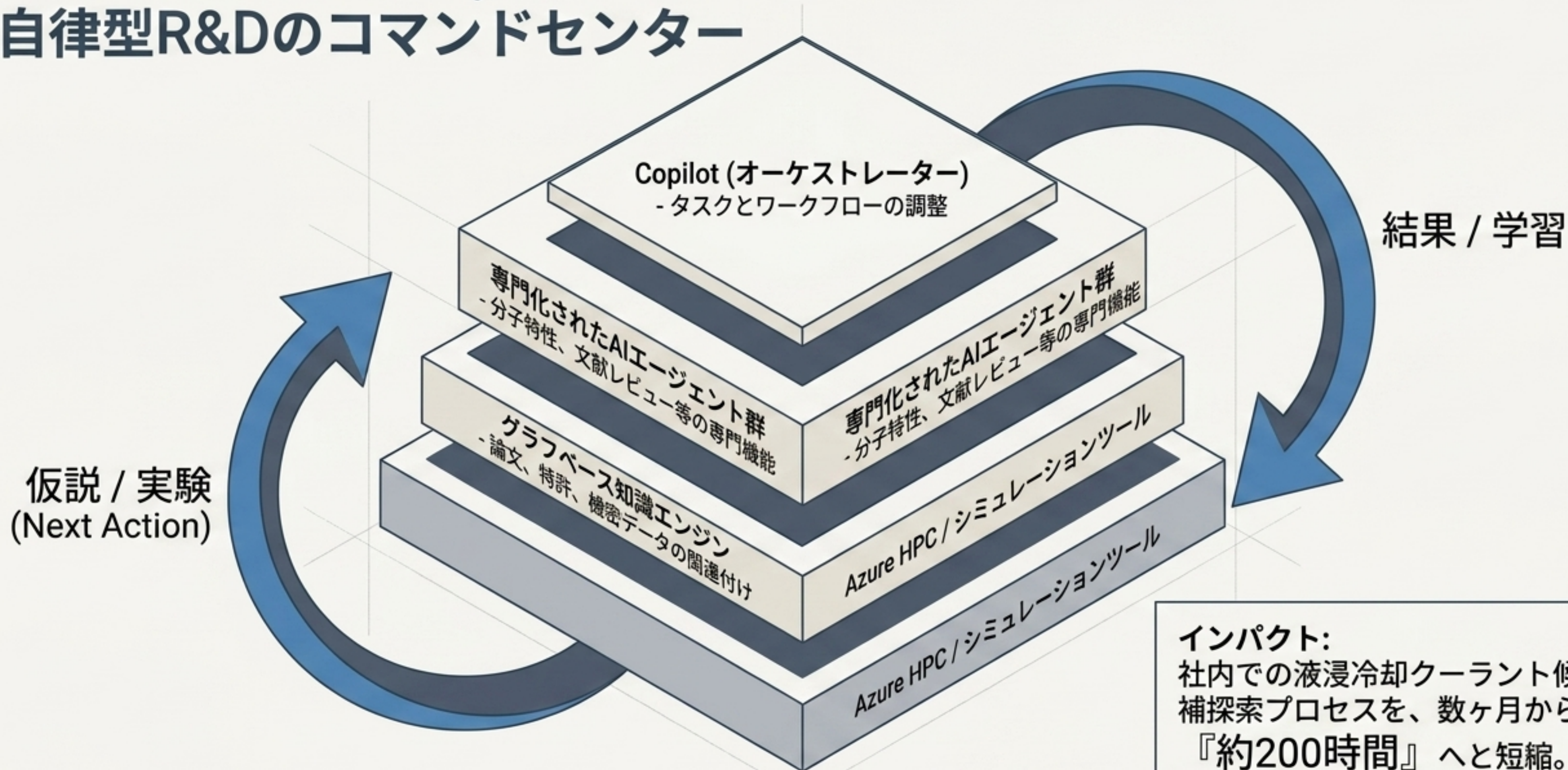
『静的なデータ処理』から『物理現象の根底からのエミュレート』への歴史的転換。

# 2026年 グローバルAI普及率と『エージェント化』の波



目的を理解し、コンテキストを保持し、  
推論からシミュレーションへ自律的に移行。

# Microsoft Discovery: 自律型R&Dのコマンドセンター

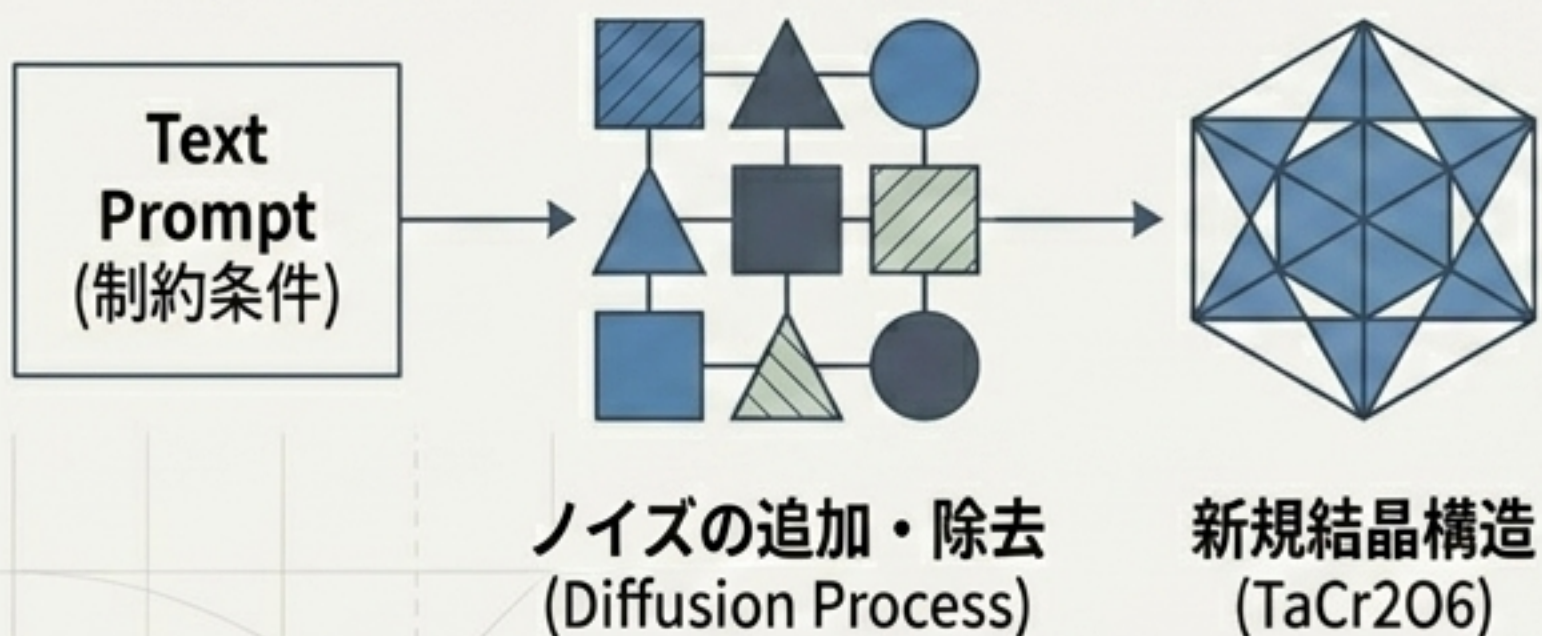


**インパクト:**  
社内での液浸冷却クーラント候補探索プロセスを、数ヶ月から『約200時間』へと短縮。

# 基盤モデル (Foundation Models) マスターカタログ

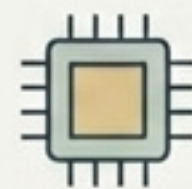
モデル名	領域	特性	達成したブレークスルー
Graphormer	グラフ構造表現学習	Transformerの化学応用	KDD Cup / Open Catalyst Challengeで世界1位獲得。
MatterSim	原子挙動予測	周期表全体を網羅する 巨大基盤モデル	DFT (密度汎関数理論) の精度向上、 電池シミュレーションの高速化。
MatterGen	新素材非経験的生成	拡散(Diffusion)ベース 生成	既存DBにない『安定かつユニーク』な 無機材料をプロンプトから直接生成。
BioEmu-1	タンパク質動態 エミュレーション	MDデータと実験データの 微調整	計算速度を1万~10万倍に向上し、動的 アンサンブルを生成。
Aurora	大気・地球環境	13億パラメータ・過去100 万時間のデータ学習	スパコンの5,000倍の速度で高解像度 気象予測を実現。

# 物質科学の革新：原子言語のマスターと非経験的生成



250年分の  
イノベーションを  
わずか25年に圧縮

既存データベースのスクリーニングを超え、  
目標物性から未知の素材を直接設計・合成成功。

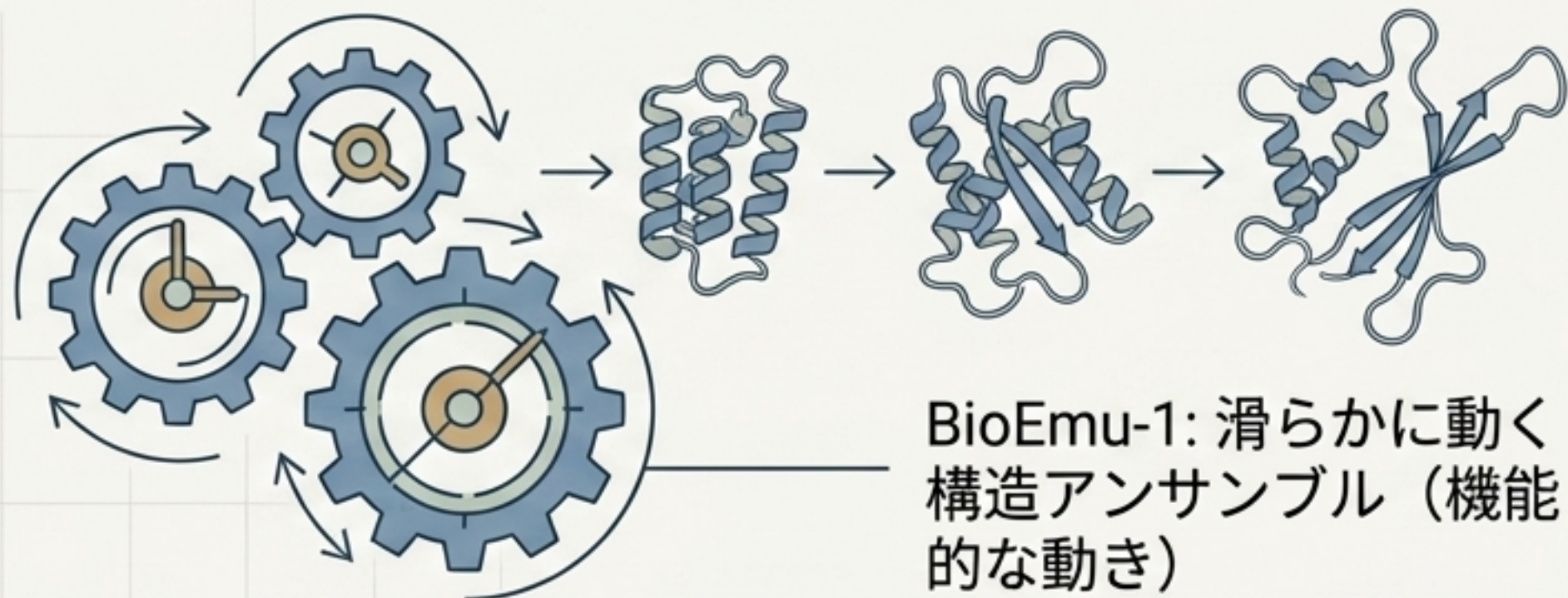


**Majorana 1:** トポロジカル量子ビット搭載。外部ノイズへの強い耐性を持つ次世代プロセッサ。

# 生命科学: 静的スナップショットから動的アンサンブルへの飛躍



従来モデル: 単一の静的な構造予測 (固定された形状)



BioEmu-1: 滑らかに動く構造アンサンブル (機能的な動き)

重要概念: 『クリプティックポケット (隠れた結合部位)』の形成を予測可能に。

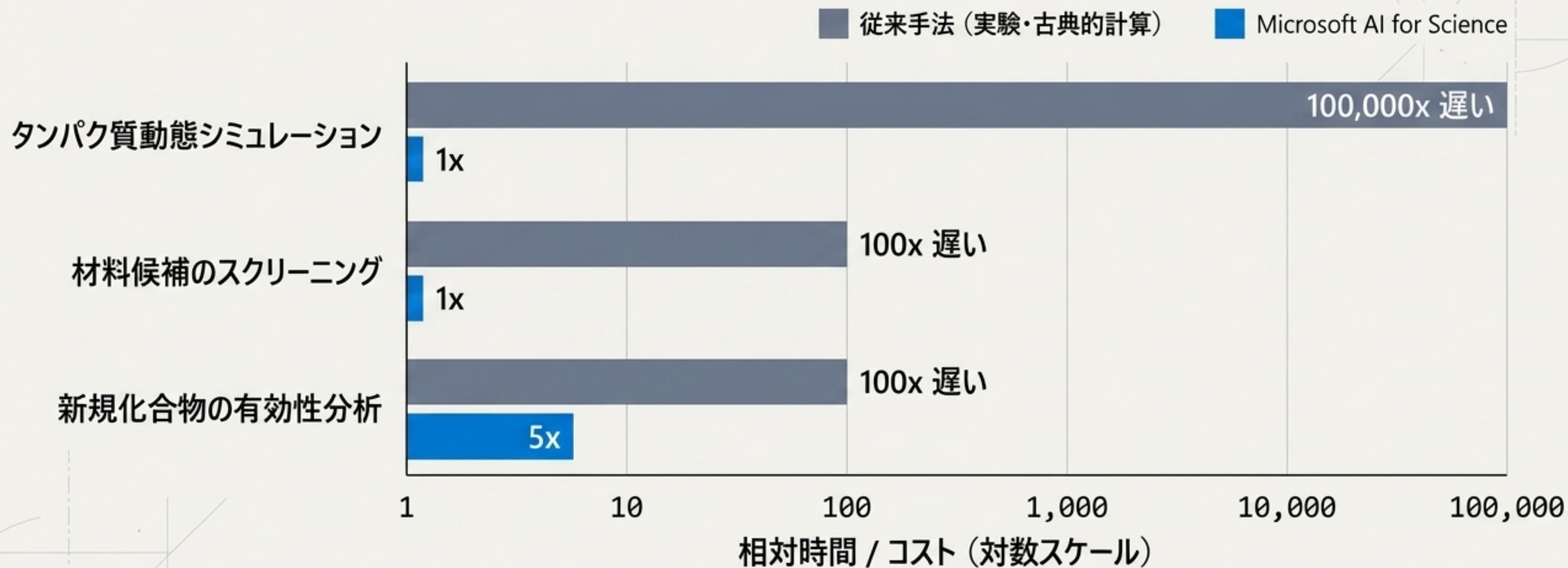
1. Step 1: AFDBによる構造の孤島マッピング

2. Step 2: 分子動力学(MD)シミュレーションによる物理的変化の学習

3. Step 3: タンパク質安定性実験データでの微調整

結果: 実験データと同等の精度 (1 kcal/mol) で相対自由エネルギーを予測。

# R&Dサイクルの劇的圧縮（時間とコストの対数スケール）



従来莫大な計算コストがかかっていたMDシミュレーションを、単一GPU上で1時間に数千構造生成可能にし、計算速度を最大10万倍に引き上げ。

# メガファーマ連携と医療AI・バイオセキュリティの確立

Novartis / Novo Nordisk:  
分析時間を数年から数時間へ圧縮。疾患予測モデルを展開。

診断AI (RAD-DINO & FCDD):  
異常検知パラダイム。乳がん等の偽陽性を25%削減。

Azure R&D Platform

MAI-DxO:  
複雑な医療ケースで85.5%の正答率（熟練医師平均20%を圧倒）。

## デュアルユースリスクと『階層型アクセス』



生物学的生成能力の悪用（病原体設計等）を防ぐため、機密レベルに応じた強固なアクセス制限と専門委員会の審査を導入。

オープンサイエンスと安全保障を両立。

# 地球環境モデリングとサステナブル・インフラへの実装

## Atmospheric Twin



- Aurora: 13億パラメータの大気ファウンデーションモデル。スパコンの5,000倍の速度(数秒)で高解像度予測。台風進路や大気汚染の圧倒的精度。
- SAR洪水マッピング: モバイルネットベースの深層学習。エチオピアでの洪水検出範囲を194%増加。

## Physical Infrastructure

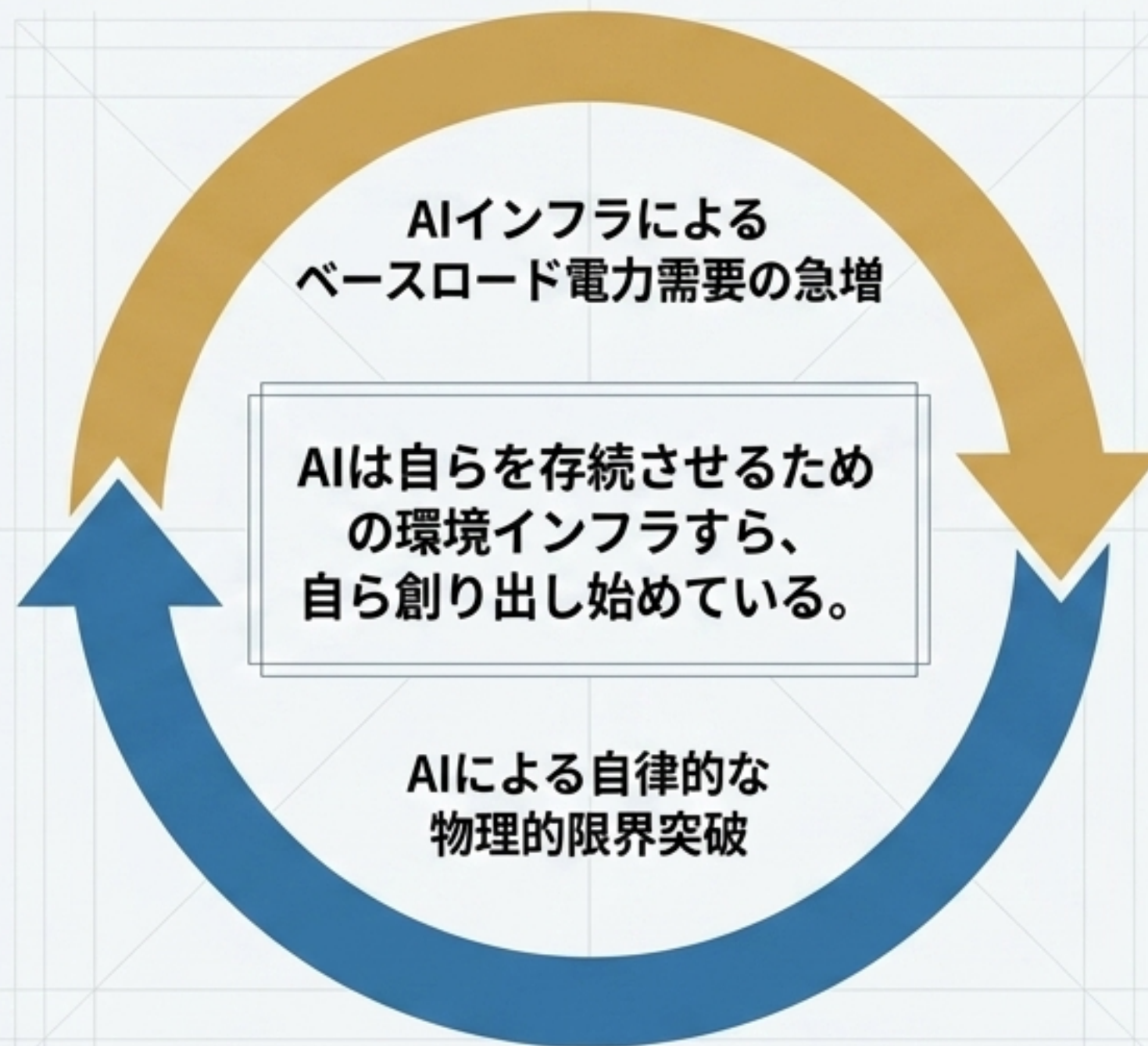
### 低炭素インフラ: 海藻セメント



コンクリートへの天然炭素吸収源 (海藻)の統合。構造強度を維持しつつ、地球温暖化係数(GWP)を21%削減。

機械学習により、通常5年を要する最適な配合比率の特定をわずか28日間に短縮。

- 100%再エネ達成の一方で、継続的な電力不足が発生
- 天然ガス発電の建設とスリーマイル島（原子力）再稼働支援へ



- 核融合エネルギー: PPPLとの連携によるプラズマ制御のHPC最適化
- アナログ光学コンピュータ: 光を用いた推論計算による消費電力の劇的削減
- Genesis Mission: DOEへの自律型ラボ機能提供

## 日本の優位性と課題

- **優位性:** 材料、製造、医療における世界屈指の『代替不可能な高品質データ』
- **ボトルネック:** 60兆円の国家科学投資にもかかわらず、『計算リソースの枯渇』が致命的な障害に

## 真のブレークスルーへ

『データのサイロ化』から解放され、HPCインフラを通じてグローバルR&Dエコシステムへ直接接続。

100億ドル規模の  
AIインフラ投資

The diagram features a central horizontal flow of blue lines representing data or investment. On the left, the flow is constricted through a narrow section, symbolizing a bottleneck. This leads to a section where the flow is significantly expanded, labeled '100 billion dollar scale AI infrastructure investment'. This expansion is supported by two vertical bars, one green and one orange. The flow then passes through another narrow section, representing a 'true breakthrough', before finally exiting as multiple parallel blue arrows pointing to the right, indicating direct connection to a global R&D ecosystem. The background includes a grid and faint circular patterns.

# MSR Asia-Tokyo：日本の強みと融合する4つの最前線

2024年設立。日本の学術トップ（東京大学・慶應義塾大学・理化学研究所）との共創エコシステム。

## 身体性AI (Embodied AI)

物理的・仮想的環境を理解し、次世代ロボティクスとの融合を目指す。

## ウェルビーイング と神経科学

脳科学の知見を応用した新しいヒューマン・AIインターフェースの開発。

## ソサイエタルAI (Societal AI)

AIの倫理的リスク評価と、人間社会の最善利益に寄与する設計の探求。

## 産業イノベーション

異分野融合を通じ、日本の産業界パートナーのDXを直接的に推進。

理研（次世代基盤モデル構築）、慶應（全学的なAI駆動型研究）との連携基盤

2030年に向けた科学的発見の未来

AIは研究の『対象』ではなく、  
自律的な『主体としてのパートナー』へと定着した。

### 完全な知識インフラの再構築

アルゴリズム、ハードウェア、オーケストレーションの統合 (Microsoft Discovery)。

### 『チーム・パフォーマンス』の最大化

個人の能力を超え、『AIを備えたチーム』が  
低コストで仮説検証を反復する時代へ。

データ処理能力の限界が消滅した今、唯一のボトルネックは  
『我々がいかに優れた問いを立てられるか』という想像力へと移行した。  
第5のパラダイムは、人間の判断を代替するのではなく、  
創造性を極限まで拡張する。