

AIが変革する研究開発 (R&D) の未来：第5のパラダイムへの進化

AIが研究開発の周辺作業から、自律的な実験・仮説生成へと進化し、科学の「第5のパラダイム」を拓く

2015-2019: AI支援による検索・読解

Semantic Scholar等の普及により、論文検索が「キーワード数」から、文脈を促える「意味検索」へと移行しました。



第4パラダイムからの移行

2020-2023: 予測科学と自律実験の台頭

AlphaFold 2による原子精度の構造予測や、ロボット化学者による24時間体制の間ループ実験が実証されました。



17日間で36種類の新材料を合成

A-Labの良機合成システムは、失敗から学習するアクティブラーニングを駆使して、人間の介入なしに成果を上げました。

10日間の予報を1分未満で生成
気象モデルGraphCastは、従来のHRESを90%以上の指針で上回り、圧倒的な計算

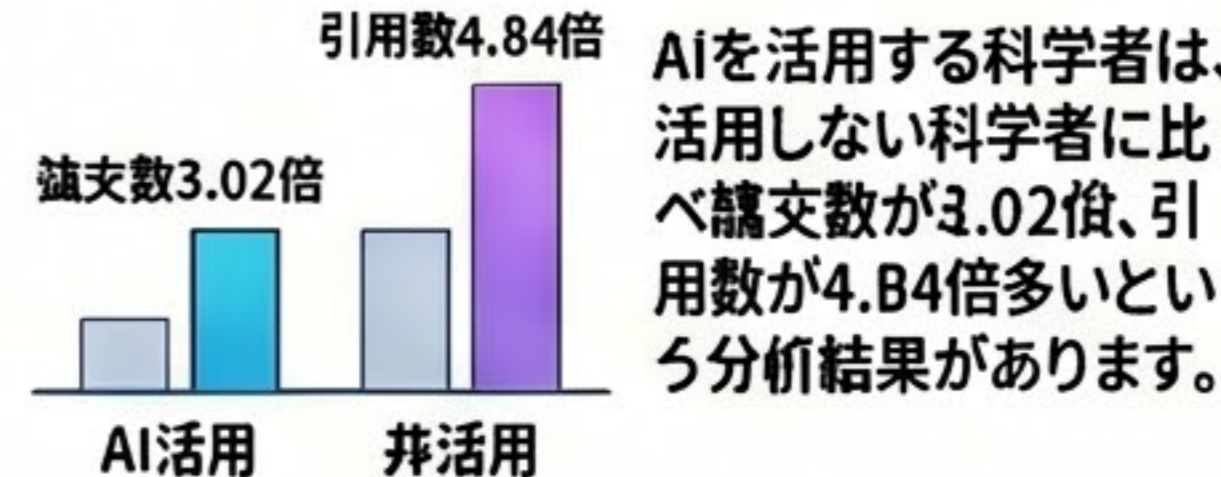


2024-2025: 研究エージェントの本格導入

PaperQA2やAI cn-scientistが登場し、文献の深い統合や豊富な仮説提案を自律的に行う段階に入っています。



研究生産性が最大4.84倍に向上



AIを活用する科学者は、活用しない科学者に比べ論文数が3.02倍、引用数が4.84倍多いという分析結果があります。

2025-2026: 限定領域での「AI科学者」

計算機上で完結する領域（機械学習や材料探索）において、アイデア生成から論文執筆、自己査読までを自動化する試みが始まっています。



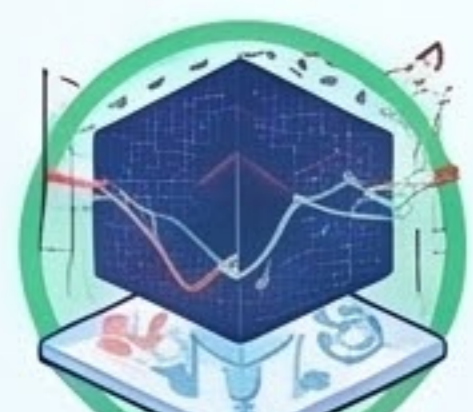
第5パラダイム (自律型科学)

研究プロセス別・AIの適用マップと実用度



文献探索・レビュー (実用度:高)

意味検索やデータ抽出により、従来の作業を10倍高速化し、36.4%の精度で系統的レビューを支援します。



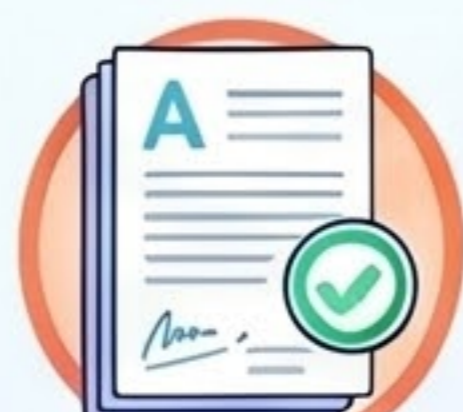
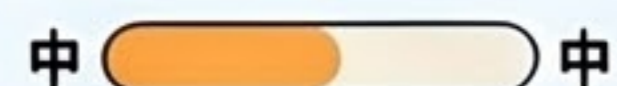
シミュレーション・予測 (実用度:高)

AlphaFold 3やGraphCast (鉄量予測)が、従来の物理シミュレーションを圧制する速度と精度で代行します。



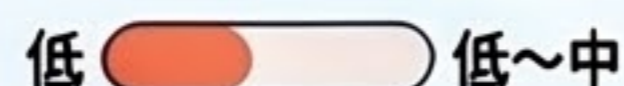
実験計画・ラボ自動化 (実用度:中)

ベイズ直達化を扱った流動学習により、最小量の試行回数で最適な材料組合や実験条件を導き出します。



査読・出版実務 (実用度:直~中)

形成評価や進捗抽出には有効ですが、検閲漏洩のリスクや人柱による業務負担の軽減が重要視されています。



戦略的導入とリスク管理 (ガバナンス)



「全面自律化」ではなく「相補的自動化」
情報検索や変換実証から先に導入し、重要工程には必ず「入組の実証データ (Human-In-the-loop)」を認識すべきでを管理します。



6つの主要リスクへの対策
ハルシネーション (相補的の権限)、バイアス、安全性、知能、不平等要件、勤続の具体への倫理的・技術的対策が必須です。

主要なAIツールとR&Dにおける実行可能範囲の比較

カテゴリ	代表的なツール	実行可能範囲
構造予測	AlphaFold 3	タンパク質・核酸・小分子の相互作用予測
文献探索	Elicit / PaperQA2	異問起点の論文抽出・比較・エビデンス統合
自律研究	The AI Scientist	アイデア生成~実験~論文作成 (全にML領域)
クラウドラボ	Emerald Cloud Lab	リモートからの実験実行・自動計測