

# デジタル時代の自律的発見：Aleks マルチエージェントシステムと AI 駆動型科学の未来に関する包括的分析

Gemini Deep Research

注記：本レポートで分析する「Aleks」は、arXiv:2508.19383 で詳述されている、植物科学における自律的な科学的発見のための AI 搭載マルチエージェントシステムです<sup>1</sup>。これは、McGraw Hill 社が提供する数学や化学などの科目を対象とした適応学習システム「ALEKS」（Assessment and Learning in Knowledge Spaces）とは異なるものです<sup>3</sup>。本レポートは、前者である科学的発見システムに特化して論じます。

## エグゼクティブサマリー

本レポートは、植物科学分野におけるデータ駆動型の科学的発見を完全に自律的に行うために設計された、画期的な AI 搭載マルチエージェントシステム（MAS）「Aleks」に関する詳細な分析を提供するものです<sup>1</sup>。Aleks は、現代科学が直面する膨大なデータ処理と再現性の課題に対する強力なソリューションとして登場しました。その中核には、人間の研究チームの協調的専門知識を模倣した 3 つの専門エージェント（ドメイン科学者、データアナリスト、機械学習エンジニア）からなるアーキテクチャが存在します<sup>5</sup>。これらのエージェントは、共有メモリを通じて連携し、人間の介入なしに反復的なサイクルで問題の定式化、モデリング戦略の探求、解決策の洗練を自律的行います<sup>6</sup>。

ブドウのレッドブロット病に関するケーススタディにおいて、Aleks はその能力を実証し、高い予測精度（決定係数  $R^2=0.82$ ）を達成すると同時に、生物学的に有意義な特徴量を特定することに成功しました<sup>1</sup>。この成果は、Aleks が単なる予測ツールではなく、科学的に解釈可能で意味のある仮説を生成できる発見エンジンとしての可能性を秘めていることを示唆しています。

Aleks は、「エージェント科学」（Agentic Science）という新たなパラダイムにおける重要な進展として位置づけられます<sup>8</sup>。これは、AI が単なるツールから自律的な研究協力者へと進化

する大きな潮流の一部です。本レポートでは、Aleks のソフトウェア中心のアプローチを、物理的な実験を自動化する「自己駆動型ラボ」 (Self-Driving Labs, SDLs) のハードウェア統合型アプローチと比較し、それぞれのアーキテクチャと科学的発見への貢献を分析します<sup>9</sup>。

結論として、Aleks は科学研究のあり方を根本的に変える可能性を秘めています。研究者が時間のかかる「下働き」から解放され、より創造的で知的な課題に集中できるようになることで、科学的発見のペースを劇的に加速させることが期待されます<sup>1</sup>。一方で、基盤となる大規模言語モデル (LLM) の信頼性や、より広範なツールとの統合といった課題も残されており、今後の研究開発の重要な指針となります<sup>7</sup>。Aleks は、人間と AI 科学者の共生がもたらす未来を垣間見せる、画期的な一歩であると言えるでしょう。

## 1. 科学研究における自動化の必要性

現代の科学研究、特に植物科学のような生命科学分野は、ますます大規模で異質なデータセットに依存するようになっていきます<sup>1</sup>。このデータの爆発的増加は、新たな発見の可能性を広げる一方で、深刻な分析のボトルネックを生み出しています<sup>5</sup>。研究者は、本来の知的な探求活動ではなく、実験計画、データの前処理、結果の再現性確保といった、膨大な時間と労力を要する「下働き」 (leg work) に多くのリソースを割かざるを得ない状況にあります<sup>1</sup>。

この「下働き」のボトルネックは、単なる非効率性の問題にとどまりません。これは、科学研究というエコシステムにおける最も貴重で高価なリソース、すなわち高度な専門知識を持つ研究者の知的資本が、本来費やされるべきでないタスクに浪費されていることを意味します。この人的資本の不適切な配分は、研究開発パイプライン全体の停滞を招き、社会に利益をもたらす発見の遅延に直結します。したがって、Aleks のような自律型システムの開発は、技術的な目新しさだけでなく、経済的・戦略的な必然性から生まれたものと解釈できます。これらのシステムは、科学的企業の労働生産性を向上させ、研究者がより創造的な問題解決に集中できる環境を整えることを目的としています<sup>9</sup>。

さらに、再現性の問題は、現代科学が抱える根深い課題です<sup>1</sup>。人間によるデータ処理は、そのプロセスが個人的な経験や暗黙知に依存することが多く、完全な文書化が困難なため、第三者による検証や再現が難しい場合があります。これに対し、自律型 AI システムは、その性質上、実行されたすべての意思決定、データ変換、分析プロセスを完璧に記録し、監査可能な軌跡を残します。Aleks のようなソフトウェアベースのシステムでは、問題の定式化からモデルの選択に至るまで、すべてのステップがプログラマ的に実行されるため、本質的に再現性が保証されます。これは、計算科学における方法論的な透明性の新たなゴールドスタンダードとなり、データ駆動型の科学的主張の信頼性を根本的に向上させる可能性を秘めています<sup>9</sup>。

このような背景から、AI 駆動型プラットフォームの登場は、研究現場が直面するこれらの喫緊の課題への直接的な応答と見なすことができます。これらのシステムは、定型的なタスクを自動化し、仮説検証を加速させ、複雑なデータから有意義な知見を抽出することを目指しており、研究から産業応用までのパイプライン全体を変革する可能性を秘めています<sup>5</sup>。最終的な目標は、人間の科学者が戦略的な監督や創造的な問題解決といった、より高次の知的活動に専念できる環境を構築することです<sup>10</sup>。

## 2. Aleks システムのアーキテクチャ詳細

### 2.1 基本理念と目的

Aleks の設計における最も重要な目的は、データ駆動型の科学的発見プロセスにおいて「完全な自律性」を達成することです<sup>1</sup>。これは、人間のオペレーターがループ内に存在し、高次の推論やタスク選択を指示する必要があった従来のシステム（**user-in-the-loop**）からの明確な脱却を意味します<sup>1</sup>。Aleks は、高レベルの研究課題とデータセットを初期入力として受け取り、その後は人間の介入なしに、複数の反復サイクルを通じて自律的に研究を遂行するように設計されています<sup>1</sup>。

### 2.2 協調的知能の中核：マルチエージェントフレームワーク

Aleks のアーキテクチャの核心は、人間の研究チームが持つ多様な専門知識と協調的な問題解決プロセスを模倣したマルチエージェントシステム（**MAS**）にあります。単一の AI エージェント、たとえそれが強力な **LLM** であっても、複雑な科学研究に必要な広範な専門知識を単独でカバーすることは稀です<sup>5</sup>。**MAS** は、認知的な労働を複数の専門エージェントに分散させることで、この限界を克服します<sup>15</sup>。このモジュール式のアプローチは、システムの柔軟性、スケーラビリティ、そして堅牢性を高める上で極めて有効です<sup>16</sup>。

Aleks は、それぞれが明確な役割を持つ 3 つの **LLM** 搭載エージェントで構成されています<sup>5</sup>。

- **ドメイン科学者（Domain Scientist, DS）**：ケーススタディでは植物病理学者として設定されました。その役割は、ドメイン固有の知識を提供し、生成された特徴量やモデルの生

物学的な妥当性を評価し、科学文献や基本原理に基づいた批判的なフィードバックを行うことです<sup>6</sup>。

- **データアナリスト (Data Analyst, DA)** : データの前処理、さまざまな分析戦略の探求、特微量エンジニアリング、そしてモデリングに適したデータセットの準備を担当します<sup>6</sup>。
- **機械学習エンジニア (Machine Learning Engineer, MLE)** : 適切な機械学習モデルの選択、ハイパーパラメータの最適化、そして統計的指標に基づいたモデル性能の評価に特化しています<sup>5</sup>。

このアーキテクチャは、単にタスクを自動化するだけでなく、「科学的方法」そのものを計算論的に実装しようとする試みと見なすことができます。DS エージェントは「背景理論の調査と仮説生成」、DA エージェントは「実験計画とデータ収集・浄化」、そして MLE エージェントは「データ分析と結論の導出」という、科学的探求の各段階を具現化しています。この構造は、将来のエージェント科学が、科学的探求の哲学的構造をソフトウェア内に明示的にモデル化する方向へ進む可能性を示唆しています。

**表 1 : Aleks マルチエージェントシステムにおける機能的役割**

| エージェント          | 主な責務          | 主要な入力                    | 主要な出力                        | ツール/手法                                      |
|-----------------|---------------|--------------------------|------------------------------|---------------------------------------------|
| ドメイン科学者 (DS)    | 生物学的妥当性の確保    | 研究課題、モデルの出力、選択された特微量     | 批判的フィードバック、ドメイン知識に基づく特徴選択の提案 | 科学文献のセマンティックメモリ                             |
| データアナリスト (DA)   | データ準備と分析戦略    | 生データセット、DS/MLEからのフィードバック | クリーニングされたデータ、設計された特微量、分析レポート | データクリーニングライブラリ、統計分析パッケージ                    |
| 機械学習エンジニア (MLE) | 予測モデリングと性能最適化 | DAからの処理済みデータ             | 学習済みモデル、性能指標（例：R2）、特微量の重要    | AutoML フレームワーク（例：auto-sklearn） <sup>7</sup> |

|  |  |  |        |  |
|--|--|--|--------|--|
|  |  |  | 度ランキング |  |
|--|--|--|--------|--|

## 2.3 運用ワークフロー：反復、記憶、収束

**Aleks** のワークフローは、単純な線形パイプラインではなく、構造化された反復プロセスです。知識は、ドメインの理解（**DS**）からデータ分析（**DA**）、そして機械学習（**MLE**）へと流れますが、その過程でエージェント間の絶え間ない相互作用とフィードバックループが存在します<sup>5</sup>。

この協調作業を可能にしているのが、「共有メモリ」システムです<sup>7</sup>。このメカニズムにより、各エージェントは他のエージェントの過去のアクション、結果、フィードバックの履歴にアクセスできます。これにより、長期にわたる一貫した推論が可能となり、各意思決定が文脈に沿ったものになります<sup>1</sup>。これは、検索拡張生成（**RAG**）やベクトルデータベースのような外部記憶システムの一形態であり、基盤となる **LLM** の能力を大幅に拡張するものです<sup>5</sup>。

**Aleks** は複数のサイクルを通じて動作し、各サイクルで問題の定式化、モデリング戦略の探求、そして協調的なフィードバックに基づく解決策の洗練を繰り返します。この反復的なプロセスを通じて、システムは徐々に最適で解釈可能なモデルへと収束していきます<sup>1</sup>。

このワークフローにおける重要な設計思想の一つが、**MLE** エージェントによる **AutoML** フレームワーク（**auto-sklearn**）の利用です<sup>7</sup>。これは、より高次のアーキテクチャ原理、すなわち「自動化ツールのエージェントによるオーケストレーション」を示しています。**MLE** エージェントは、機械学習のコードをゼロから記述するのではなく、強力な既存ツールを使用するという「戦略的判断」を下します。このような階層的な自動化（**AI** エージェントが自動化された **ML** パイプラインを制御する）は、エージェントが低レベルのコーディングタスクを管理しようとするよりも、はるかにスケーラブルで堅牢なアプローチです。これは、最も効果的な科学 **AI** システムが、単一の万能モデルではなく、多様な専門ツールの「インテグレーター」または「オーケストレーター」として機能することを示唆しています<sup>17</sup>。

## 2.4 ドメイン知識の決定的な役割

論文で報告されているアブレーション研究（システムの特定の部分を取り除き、その重要性を検証する実験）は、ドメイン知識（**DS** エージェントが提供）と記憶（共有メモリ）の両方が、一貫性のある有意義な結果を得るために不可欠であることを明確に示しました<sup>1</sup>。**DS** エー

ジェントが存在しない場合、システムは統計的に有効であっても生物学的には無意味な相関関係を見つけ出してしまう可能性があります。DS エージェントは、システムを現実の科学的理解に「接地」させる役割を果たし、最終的なモデルが単に予測的であるだけでなく、解釈可能で、確立された科学的知見と整合性が取れていることを保証します<sup>7</sup>。

## 3. 実践における Aleks：ブドウのレッドブロット病のケーススタディ

### 3.1 研究課題から実用的な知見へ

Aleks の能力を検証するため、実際の植物科学の問題、すなわち提供されたデータセットを用いてブドウのレッドブロット病の重症度を予測するというタスクが与えられました<sup>1</sup>。人間の介入なしに、Aleks は自律的にワークフローを開始しました。まず DA エージェントが初期のデータ探索とクリーニングを行い、次に MLE エージェントが DA エージェントと協力して初期のモデリング戦略を提案しました。このプロセスにおいて、DS エージェントはどの変数（特徴量）が生物学的に最も関連性が高いかについてフィードバックを提供し、特徴量エンジニアリングと選択のプロセスを導きました<sup>1</sup>。この反復的なサイクルを通じて、システムは徐々に「生物学的に有意義な特徴量」を特定し、最終的なモデルへと収束していきしました<sup>1</sup>。

### 3.2 性能と検証

このケーススタディにおける Aleks の成功は、2 つの重要な側面から評価されます。

第一に、定量的成果です。最終的に生成されたモデルは、報告された決定係数（R<sup>2</sup>）値が 0.82 という高い予測精度を達成しました<sup>7</sup>。これは、システムが技術的に堅牢な予測モデルを自律的に構築できることを示しています。

第二に、質的成果です。生成されたモデルは、単に高精度であるだけでなく、「解釈可能」でした<sup>1</sup>。科学の世界では、予測の背後にあるメカニズムを理解することが予測そのものと同じくらい重要であるため、これは極めて重要な成果です。いわゆる「ブラックボックス」モデル



は、その内部ロジックが不透明なため、科学的発見においては有用性が限られます。このモデルの解釈可能性は、DS エージェントがより少なく、より関連性の高い特徴量に基づいたモデルを優先するようにシステムを導いた直接的な結果であると考えられます<sup>18</sup>。

この2つの成功基準（高い予測精度と解釈可能性）は、AI for Science における根本的なトレードオフを浮き彫りにします。MLE エージェントは本質的に予測能力を最適化しようとし、DS エージェントは因果関係の理解と生物学的妥当性を最適化しようとしています。Aleks のアーキテクチャは、これら2つの、時には競合する目的を両立させる解決策を見出すように設計されています。このことは、成功する自律型科学プラットフォームには、純粋な予測と科学的説明との間のバランスを管理するためのメカニズムが組み込まれている必要があることを示唆しています。

### 3.3 予測を超えて：生物学的に関連する仮説の生成

Aleks の真価は、R2 値の高さだけにあるわけではありません。その価値は、「問題の定式化から特徴量エンジニアリングまで」のパイプライン全体を自動化した点にあります<sup>7</sup>。生物学的に重要な特徴量を特定することによって、システムの出力は、ブドウのレッドブロット病に影響を与える主要な要因に関する一連のデータ駆動型仮説と見なすことができます。これにより、Aleks は単なる予測ツールから、科学的発見を推進する潜在的なエンジンへと昇華します。

ただし、このケーススタディが、物理的な実験を伴う「デノボ（de novo）発見」ではなく、既存のデータセットに対する「計算論的な再現と分析」のタスクである点は重要です。Aleks は、強力な「AI リサーチアシスタント」として機能しますが、物理世界との相互作用を含む完全な「設計-構築-テスト-学習」のループを閉じるには至っていません。この位置づけを理解することは、Aleks が科学的自動化のスペクトルにおいてどこに位置し、その次の進化のステップが何であるか（すなわち、ロボットプラットフォームとの統合）を把握する上で不可欠です。

## 4. AI for Science エコシステムにおける Aleks の位置づけ

## 4.1 自律性のスペクトル：アシスタントから自律的協力者へ

植物科学における AI の応用は、人間がループ内に留まり、高次の推論やタスク選択を指示するアシスタント的なシステムから始まりました。例えば、**PhenoAssistant** は、人間の指示のもとで表現型解析を支援するシステムでした<sup>1</sup>。**Aleks** は、計算ワークフロー内での完全な自律性を目指すことにより、このパラダイムから大きな一歩を踏み出しました。

この進化は、「エージェント科学」（**Agentic Science**）というより大きな潮流と一致します。このパラダイムでは、AI システムは特定のタスクを実行する専門ツールから、仮説生成、実験計画、反復的な改善といった科学研究の核心的なプロセスを担う自律的な研究パートナーへと進化します<sup>8</sup>。「**Virtual Lab**」<sup>1</sup>や「**Robin**」<sup>23</sup>といった他の研究システムも、同様にマルチエージェントによる協調モデルを探求しており、この分野の急速な進展を示しています。

## 4.2 アーキテクチャの比較：Aleks vs. 自己駆動型ラボ（SDLs）

**Aleks** と、主に物質科学や化学の分野で注目されている自己駆動型ラボ（**SDLs**）とを比較することで、自律的科学の多様なアプローチを理解することができます。

- **Aleks**：仮想科学者（**The Virtual Scientist**）：Aleks は純粋に計算論的なシステムです。その「ラボ」はデータとアルゴリズムからなるデジタル環境であり、その強みはデータ駆動型研究の知的・分析的要素を自動化する点にあります。
- **SDLs**：ロボット科学者（**The Robotic Scientist**）：SDLs は、AI をロボット工学や自動化された実験装置と統合したシステムです<sup>9</sup>。物理的な「予測-製造-測定」または「設計-構築-テスト-学習」のサイクル全体を自動化します<sup>25</sup>。アルゴンヌ国立研究所の **Polybot** が 9 万通りの材料の組み合わせを自律的にスクリーニングした例は、**SDLs** の強力な能力を示しています<sup>10</sup>。

両者の根本的な違いは、物理世界とのインターフェースの有無です。**Aleks** は既存のデータを分析し、**SDL** は自動化された物理実験を通じて新しいデータを生成します。比喻的に言えば、**Aleks** は「頭脳」であり、**SDL** は「頭脳と手」です<sup>10</sup>。この「仮想科学者」と「ロボット科学者」のパラダイムは、現在、科学的ワークフローの異なる部分に対応していますが、将来的には融合する可能性があります。究極の目標は、**Aleks** のような高次の推論を行うマルチエージェントシステムが、必要な実験を行うために物理的な **SDL** を指示し、計算と物理的現実の間のループを完全に閉じる、エンドツーエンドの自律的発見エンジンを構築することです。

表 2：自律的科学プラットフォームの比較分析



| プラットフォームタイプ   | 代表的なシステム                         | コアアーキテクチャ           | 主要なドメイン                 | 自律性のレベル              | ハードウェア統合         | 主要な出力             |
|---------------|----------------------------------|---------------------|-------------------------|----------------------|------------------|-------------------|
| 計算論的エージェント    | Aleks                            | マルチエージェントシステム (MAS) | データ集約型の計算科学<br>(例：植物科学) | 計算ワークフロー内で完全に自律      | なし（ソフトウェアのみ）     | 予測モデル、データ駆動型仮説    |
| 自己駆動型ラボ (SDL) | アルゴンヌ<br>Polybot / リバプール大学触媒ロボット | AI 駆動のロボットプラットフォーム  | 物理学<br>(例：物質科学、化学)      | 閉ループ物理実験において完全に自律    | 不可欠（ロボット工学、センサー） | 最適化された新素材、新規化学合成法 |
| 産業用発見プラットフォーム | Exscientia DMTL                  | 生成 AI + 自動化ラボ       | 創薬                      | AI による設計、自動化された合成・試験 | 高度（合成・試験用ロボット）   | 臨床的に有望な医薬品候補      |

### 4.3 産業界のパラダイム：商用発見プラットフォームからの教訓

学術的なプロトタイプである **Aleks** を、商業的に成功している産業用プラットフォームと比較することで、実用的な知見を得ることができます。

- **Exscientia の DMTL サイクル**: Exscientia 社は、「設計-製造-テスト-学習」（Design-Make-Test-Learn）サイクルを実装しています。生成 AI をインシリコ（in silico）での設計に、自動化ロボットを合成と試験に使用することで、SDL のコンセプトを医薬品候補の創出という商業目標に特化させています<sup>28</sup>。

- **Insilico Medicine の Pharma.AI:** このプラットフォームは、創薬パイプラインを加速させるための専門的な AI ツールの集合体です（標的発見のための PandaOmics、分子設計のための Chemistry42 など）<sup>32</sup>。アーキテクチャ的には、Aleks の専門家分業アプローチに似ていますが、AWS のようなスケーラブルなクラウドインフラ上に構築された、モジュール式の製品群として提供されています<sup>32</sup>。

これらの産業界の事例は、Aleks のような専門エージェントによるモジュール式アプローチと、SDLs のような計算と物理的自動化の統合という、2 つの大きなトレンドを示しています。これらは、Aleks のような学術的プロトタイプで示された原理を、エンドツーエンドで成熟させた形態と見なすことができます。Insilico 社の製品群のようなモジュール構造は、将来の「AI for Science」が単一のプラットフォームではなく、API 駆動の専門サービスの生態系になる可能性を示唆しています。未来の Aleks は、単一の巨大なエージェントを持つのではなく、商業的およびオープンソースの AI ツール群を統括する「ゼネコン」のような役割を果たすかもしれません。

## 5. 批判的評価と将来の展望

### 5.1 内在的な限界と技術的課題

Aleks は画期的なシステムですが、その基盤技術に由来するいくつかの重要な限界と課題を抱えています。

- **LLM の信頼性:** システムの性能は、基盤となる LLM の事実の正確性と推論能力に根本的に依存します。LLM は「ハルシネーション（幻覚）」として知られる、事実に反する情報を生成する傾向があり、これがシステムの信頼性を損なう可能性があります<sup>7</sup>。
- **エージェント間の合意形成:** 複数の自律エージェント間で一貫した合意を形成することは、分散 AI システムにおける既知の難題です。論文でもこの点についての困難さが指摘されており、エージェント間の意見の対立や非効率なコミュニケーションが、全体のパフォーマンスを低下させる可能性があります<sup>7</sup>。
- **ツールとデータ形式の制限:** 現在の実装は、特定のツール（auto-sklearn）に限定されており、多様なデータ形式に柔軟に対応する能力が不足している可能性があります<sup>7</sup>。これにより、システムの汎用性が制限されています。
- **形式的検証の欠如:** システムは反復的なフィードバックに依存していますが、その中間ステップや最終的な結論を厳密に検証するための形式的な手法が欠けている可能性があります。

す<sup>7</sup>。

これらの限界は、単なる技術的な問題としてだけでなく、科学哲学の観点からも捉えることができます。「LLM の正確性」の問題は、信頼できる先行研究を引用するという科学の基本原則に対応します。「エージェント間の合意形成」の課題は、科学的な査読や討論のプロセスを計算論的に再現する難しさを示しています。「形式的検証の欠如」は、AI が人間の科学者と同様の論理的・経験的厳密性の基準を満たす必要性を浮き彫りにします。したがって、Aleks を改良するプロセスは、単なるソフトウェアエンジニアリングの挑戦ではなく、科学的方法論の認識論的な安全装置を自律システムに組み込むという、より深い挑戦であると言えます。

## 5.2 発展に向けたロードマップ

これらの課題を克服し、Aleks の能力をさらに拡張するためには、以下の方向性での研究開発が不可欠です。

- **ツール統合の拡張:** エージェントが利用できる分析、可視化、モデリングのツール群を大幅に拡張することが、将来の重要な課題です。これにより、より多様な問題に柔軟に対応できるようになります<sup>7</sup>。
- **ハードウェア統合:** 最も重要な次の一步は、Aleks を物理的な実験自動化システムに接続することです。これにより、システムは自ら実験を計画・実行し、計算と現実の間のループを閉じ、真の SDL へと進化することができます<sup>7</sup>。
- **検証と接地性の向上:** AI の出力の信頼性を保証するため、より厳格な検証メカニズムの導入が必要です。また、自律性と人間の監督との最適なバランスを見出すための、洗練された人間-AI 協調フレームワークの開発も求められます<sup>7</sup>。
- **汎用性の拡大:** ケーススタディは特定の病気に限定されていました。このシステムの有効性を確立するためには、異なる植物種、病気、さらには全く異なる科学分野への適用可能性を検証する追加の研究が必要です<sup>20</sup>。

この発展のロードマップは、人間の科学者の役割が根本的に変化することを示唆しています。将来、科学者は実験者やデータアナリストとしてではなく、高レベルの研究方針を定め、AI エージェントチームを設計し、彼らのツールを選択し、自律システムが生み出した最終的な統合的アウトプットを批判的に評価する「メタ科学者」あるいは「AI 研究ストラテジスト」としての役割を担うようになるでしょう。人間の役割は、科学的方法のステップを自ら実行することから、そのステップを実行する「システムを設計する」ことへと移行します。

## 5.3 研究機関への戦略的示唆

Aleks のような自律的科学の台頭は、研究機関にとって重要な戦略的意味合いを持ちます。アルゴンヌ国立研究所<sup>27</sup>、オークリッジ国立研究所<sup>37</sup>、国立再生可能エネルギー研究所<sup>13</sup>などは、すでに自律的発見プラットフォームへの大規模な投資を開始しています。Aleks は、これらの取り組みを推進するために必要なソフトウェアと AI アーキテクチャの青写真を提供します。

研究の資金提供や実施方法も、この新たなパラダイムに適応する必要があります。「SDL グランドチャレンジ」のようなイニシアチブは、この分野のイノベーションを促進する可能性があります<sup>9</sup>。研究機関は、モジュール式で相互運用可能なインフラと、これらのシステムを構築・管理できる人材への投資を優先する必要があります<sup>13</sup>。

さらに、AI システムが自律性を高めるにつれて、深刻な法的な問題も浮上します。現在の特許法は人間の発明者のみを認めているため、Aleks のようなシステムによる発見の商業化や資金調達に障壁が生じる可能性があります<sup>38</sup>。これらの課題に対処するためには、技術開発と並行して、法制度や倫理的枠組みの議論を進めることが不可欠です。

## 6. 結論：人間と人工知能科学者の共生の始まり

Aleks のようなシステムの出現は、科学研究における AI の役割が決定的な転換点を迎えたことを示しています。AI はもはや、高度な計算機やデータ整理ツールではなく、科学的ワークフローの知的な部分を担うことができる自律的な協力者へと変貌を遂げつつあります<sup>1</sup>。

この変化は、人間の研究者の役割を再定義します。研究の退屈で時間のかかる側面を自動化することで、これらのシステムは人間の科学者を解放し、創造性、直感、新しい問いの発想、そして戦略的な監督といった、人間にしかできない活動に集中させます<sup>9</sup>。未来は、AI が人間に取って代わるのではなく、人間と AI が強力な共生関係を築く世界です。

Aleks のような完全自律型システムの究極的な約束は、科学的発見のサイクルを劇的に加速させ、医学、物質科学、持続可能な農業といった重要分野でのブレークスルーを早めることです<sup>10</sup>。Aleks はまだ探索的な段階にありますが<sup>1</sup>、科学的方法が機械の速度で増幅され、実行される未来を力強く垣間見せてくれます。これは、科学的探求の新たな時代の幕開けに他なりません。

### 引用文献

1. Aleks: AIpowered Multi Agent System for Autonomous Scientific Discovery via

- Data-Driven Approaches in Plant Science - arXiv, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
<https://arxiv.org/html/2508.19383v1>
2. [2508.19383] Aleks: AI powered Multi Agent System for Autonomous Scientific Discovery via Data-Driven Approaches in Plant Science - arXiv, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
<https://arxiv.org/abs/2508.19383>
  3. About ALEKS, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
[https://www.aleks.com/about\\_aleks](https://www.aleks.com/about_aleks)
  4. Research Behind ALEKS, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
[https://www.aleks.com/about\\_aleks/research\\_behind](https://www.aleks.com/about_aleks/research_behind)
  5. (PDF) Aleks: AI powered Multi Agent System for Autonomous Scientific Discovery via Data-Driven Approaches in Plant Science - ResearchGate, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
[https://www.researchgate.net/publication/395032607\\_Aleks\\_AI\\_powered\\_Multi-Agent\\_System\\_for\\_Autonomous\\_Scientific\\_Discovery\\_via\\_Data-Driven\\_Approaches\\_in\\_Plant\\_Science](https://www.researchgate.net/publication/395032607_Aleks_AI_powered_Multi-Agent_System_for_Autonomous_Scientific_Discovery_via_Data-Driven_Approaches_in_Plant_Science)
  6. Aleks: AI powered Multi Agent System for Autonomous Scientific Discovery via Data-Driven Approaches in Plant Science - ChatPaper, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
<https://chatpaper.com/zh-CN/paper/183968>
  7. Can AI Carry Out Scientific Research Fully Autonomously? The Power of Multi-Agent Systems Demonstr... - YouTube, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
[https://www.youtube.com/watch?v=x\\_cq02TdB5w](https://www.youtube.com/watch?v=x_cq02TdB5w)
  8. [2508.14111] From AI for Science to Agentic Science: A Survey on Autonomous Scientific Discovery - arXiv, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
<https://arxiv.org/abs/2508.14111>
  9. Self-Driving Labs: AI and Robotics Accelerating Materials Innovation - CSIS, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
<https://www.csis.org/blogs/perspectives-innovation/self-driving-labs-ai-and-robotics-accelerating-materials-innovation>
  10. AI-Powered “Self-Driving” Labs: Accelerating Life Science R&D | Tips and Tricks - Scispot, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
<https://www.scispot.com/blog/ai-powered-self-driving-labs-accelerating-life-science-r-d>
  11. Plantae Presents: Artificial Intelligence and Machine Learning in Plant Science - YouTube, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
<https://www.youtube.com/watch?v=hyndmrXUkEQ>
  12. AI-powered revolution in plant sciences: advancements, applications, and challenges for sustainable agriculture and food security - Open Exploration Publishing, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
<https://www.explorationpub.com/Journals/eff/Article/101045>
  13. AI Could Help Bridge Valley of Death for New Materials - NREL, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
<https://www.nrel.gov/news/detail/program/2025/ai-could-help-bridge-valley-of-death-for-new-materials>
  14. Could Self-Driving Labs Lead to a New Era of Scientific Research? | College of Engineering, 9 月 15, 2025 にアクセス、  
<https://engr.ncsu.edu/news/2025/04/24/could-self-driving-labs-lead-to-a-new->

[era-of-scientific-research/](#)

15. Exploring multi-agent AI systems | Generative-AI – Weights & Biases - Wandb, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://wandb.ai/byyoung3/Generative-AI/reports/Exploring-multi-agent-AI-systems---VmldzoxMTIwNjM5NQ>
16. What is a Multi Agent System - Relevance AI, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://relevanceai.com/learn/what-is-a-multi-agent-system>
17. Multi-Agent Systems for Autonomous Laboratory Instrument Operation - Nathan Johnson, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://naterthought.com/papers/VGPT.pdf>
18. [論文審査] Aleks: AIpowered Multi Agent System for Autonomous Scientific Discovery via Data-Driven Approaches in Plant Science - Moonlight, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://www.themoonlight.io/zh/review/aleks-ai-powered-multi-agent-system-for-autonomous-scientific-discovery-via-data-driven-approaches-in-plant-science>
19. [Literature Review] Aleks: AIpowered Multi Agent System for, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://www.themoonlight.io/en/review/aleks-ai-powered-multi-agent-system-for-autonomous-scientific-discovery-via-data-driven-approaches-in-plant-science>
20. Aleks: AIpowered Multi Agent System for Autonomous Scientific Discovery via Data-Driven Approaches in Plant Science - Daily Arxiv - haebom - Slashpage, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://slashpage.com/haebom/91kwev26v77jr2y46jpg>
21. Virtuous Machines: Towards Artificial General Science - arXiv, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://arxiv.org/html/2508.13421v1>
22. The Virtual Lab of AI agents designs new SARS-CoV-2 nanobodies. | Semantic Scholar, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://www.semanticscholar.org/paper/The-Virtual-Lab-of-AI-agents-designs-new-SARS-CoV-2-Swanson-Wu/d24e37aafc48c76aca30430670bad9a61cd0fca>
23. (PDF) Robin: A multi-agent system for automating scientific discovery - ResearchGate, 9 月 15, 2025 にアクセス、[https://www.researchgate.net/publication/391910986\\_Robin\\_A\\_multi-agent\\_system\\_for\\_automating\\_scientific\\_discovery](https://www.researchgate.net/publication/391910986_Robin_A_multi-agent_system_for_automating_scientific_discovery)
24. Accelerated materials discovery using artificial intelligence, robotics and high performance computing - Natural Resources Canada, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://natural-resources.canada.ca/funding-partnerships/accelerated-materials-discovery-artificial-intelligence-robotics-high-performance-computing>
25. BioLab: End-to-End Autonomous Life Sciences Research with Multi-Agents System Integrating Biological Foundation Models - bioRxiv, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2025.09.03.674085v1.full.pdf>
26. Autonomous laboratories in China: an embodied intelligence-driven platform to accelerate chemical discovery - RSC Publishing, 9 月 15, 2025 にアクセス、<https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2025/dd/d5dd00072f>



27. Autonomous Discovery | Argonne National Laboratory, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://www.anl.gov/autonomous-discovery>
28. Exscientia Uses Generative AI to Reimagine Drug Discovery - AWS, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://aws.amazon.com/solutions/case-studies/exscientia-generative-ai/>
29. Exscientia Launches AWS AI-powered Platform to Advance Drug Discovery, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://investors.exscientia.ai/press-releases/press-release-details/2024/Exscientia-Launches-AWS-AI-powered-Platform-to-Advance-Drug-Discovery/default.aspx>
30. Exscientia: a clinical pipeline for AI-designed drug candidates - UKRI, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://www.ukri.org/who-we-are/how-we-are-doing/research-outcomes-and-impact/bbsrc/exscientia-a-clinical-pipeline-for-ai-designed-drug-candidates/>
31. How Exscientia Reduces Drug Discovery Time With Gen AI - CIO.inc, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://www.cio.inc/how-exscientia-reduces-drug-discovery-time-gen-ai-a-23015>
32. Insilico Case Study | Life Sciences - AWS, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://aws.amazon.com/solutions/case-studies/insilico-case-study/>
33. Chemistry42: An AI-Driven Platform for Molecular Design and Optimization | Journal of Chemical Information and Modeling - ACS Publications, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jcim.2c01191>
34. Chemistry42: An AI-Driven Platform for Molecular Design and Optimization - PMC, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC9930109/>
35. PandaOmics: An AI-Driven Platform for Therapeutic Target and Biomarker Discovery | Journal of Chemical Information and Modeling - ACS Publications, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jcim.3c01619>
36. Insilico Medicine Accelerates Drug Discovery Using Amazon SageMaker | Case Study, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://aws.amazon.com/solutions/case-studies/insilico-customer-case-study/>
37. AI Initiative | ORNL, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://www.ornl.gov/ai-initiative>
38. Autonomous 'self-driving' laboratories: a review of technology and policy implications | Royal Society Open Science - Journals, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rsos.250646>
39. This AI-powered lab runs itself—and discovers new materials 10x faster | ScienceDaily, 9 月 15, 2025 にアクセス、 <https://www.sciencedaily.com/releases/2025/07/250714052105.htm>