

JST-CRDSショートレポート『AIエージェントの科学研究への展開』の深掘り調査：研究自動化・自律化の現在地と展望

Gemini 3.6 Flash

序論と背景：第5の科学研究パラダイムに向けた研究プロセスの変容

科学研究の歴史は、現象の観察と記述に基づく「経験科学(第1のパラダイム)」、定式化を推進する「理論科学(第2のパラダイム)」、シミュレーションを活用する「計算科学(第3のパラダイム)」、そして大容量データから法則性を見出す「データ駆動型科学(第4のパラダイム)」という変遷を経てきた¹。科学技術振興機構(JST)の研究開発戦略センター(CRDS)は、2026年2月に公表した報告書において、人工知能(AI)が研究プロセスの各段階に入り込み、仮説生成、実験、データ解析、知識統合を結合・再編成する「第5の科学研究パラダイム」としての見方を提示している¹。

2026年8月7日に公表されたCRDSのショートレポート AI for Science Spotlights Vol.2『AIエージェントの科学研究への展開』(杉村佳織、永野智己著)は、同年7月17日公表のVol.1『AI for Scienceの現在地』における全体像の整理を受け、研究プロセスの連続的統合を牽引する核心技術である「AIエージェント」の最新動向を調査・分析したものである¹。

従来のAI for Science(AI4S)では、特定物性の予測モデルや構造予測など、個別の研究作業を支援する「ポイントソリューション」が中心であった¹。これに対し、本レポートが着目するAIエージェントは、研究者の提示した目標に基づき、文献データベース、専門ソフトウェア、計算環境、さらには実験ロボットなどを自律的に連携させ、一連の研究処理を推し進めるシステムを指す³。大言語モデル(LLM)の推論能力向上やツール連携インターフェースの整備に伴い、一部の研究領域において仮説立案、計算・物理実験、結果解釈をつなぐ複数工程の自動化・自律化の試みを実証段階に入りつつある²。

こうした技術動向は国内の政策施策とも連動している。文部科学省は2026年3月に「AI for Scienceの推進に向けた基本的な戦略方針」を定め²、JSTによる「AI for Science革新的研究推進事業(ARISE)」や、文部科学省による「AI for Science萌芽的挑戦研究創出事業(SPREAD、通称SPReAD 1000)」など、機動的な研究資金獲得やAI導入の伴走支援を行うプログラムが展開されている²。

海外におけるAIエージェントの先進事例と技術検証

海外における科学研究向けAIエージェントの開発は、IT企業、非営利研究機関、国立研究所などが主導しており、対象領域や物理実験との接続形態に応じた多様な発展をみせている³。

仮説生成の高度化において注目されるGoogleの「Co-Scientist」は、Gemini 2.0を基盤モデルとし、Supervisor agentが全体のタスク配分を管理する中で、6種類の専門エージェント(Generation, Reflection, Ranking, Evolution, Proximity, Meta-review)が非同期に連携するマルチエージェントシステムである³。Ranking agentは仮説間の対話的比較を含むElo方式のトーナメント評価によって順

位付けを行う³。Test-time compute(推論時の計算資源)を拡張することでシステム内部の評価指標(Eloスコア)が向上する特性を有しており、研究者の設定した制約条件に合わせた検証可能な仮説を出力する³。生物医学分野での実証では、急性骨髄性白血病(AML)における多剤併用療法やヒト肝オルガノイドでの抗線維化標的の提案を行ったほか、研究者が同時期に発見していた未発表の薬剤耐性(AMR)関連遺伝子伝播メカニズムを独立に再導出し、いずれも培養細胞やオルガノイドを用いた *in vitro* 実験で裏付けが得られている³。

研究工程全体の連携という観点では、米 FutureHouseが開発した「Robin」が「Lab-in-the-Loop」型の統合システムとして機能している³。Robinは、文献探索(Crow, Falcon)やデータ解析(Finch)といった専門エージェント群で構成され、提示された候補仮説のトーナメント評価には

Bradley-Terry-Luce(BTL)モデルを採用している³。失明の原因となる乾性加齢黄斑変性(dAMD)を対象とした実証研究では、網膜色素上皮(RPE)細胞の食作用向上をアプローチとして提示し、緑内障治療薬「リパスジル」の転用や、概日時計調節化合物として知られる実験的薬剤「KL001」を治療候補として同定・検証した³。Robinは551本の文献を約30分で処理(人間による作業時間推計約294時間からの大幅短縮)し、研究ワークフロー全体では手作業に比べ約200倍の時間短縮になると推定されている³。なお、Robin自体の構想から人間研究者との共同実験・解析・論文投稿に至る全工程は約2.5カ月で完了した³。

実験の物理的自動化の例としては、米ローレンス・バークレー国立研究所(LBNL)等の「A-Lab」があげられる³。A-Labは計算データ、文献から抽出した知識、能動学習、ロボット制御、粉末X線回折(PXRD)測定を組み合わせ、人間が設定した材料領域や合成条件の範囲内で、実験結果に応じて次の合成条件を変更・実行する自律的クローズドループを構成している³。なお、A-Labに関しては2026年1月にAuthor Correctionが公表され、当初の「新規材料」の定義が「予測プラットフォーム上で新規」であったことの明確化、報告された成功事例40件のPXRD再解析による36件の確認(4件は結論不能)、および誤って学習データに含まれていた1化合物の議論からの除外といった補正が行われており、自動実験における客観的データ再検証のプロセスの必要性を示している³。

システム名	主な開発・推進主体	システム構成・評価ルーチン	対象領域	物理実験との接続	達成された実証成果・定量データ
Co-Scientist	Google ³	Gemini 2.0 基盤。Supervisorが制御する6種の専門エージェント。Elo方式トーナメント評価 ³	生物医学(AML、肝線維症、AMR等) ³	仮想的(仮説提案後、人間が <i>in vitro</i> 検証) ³	肝オルガノイド標的特定、未発表AMRメカニズムの独立再導出および <i>in vitro</i> 検証 ³
Robin	FutureHous	Crow/Falcon(文献)、	創薬、生物学、材料科	仮想的(Lab-in-the-	551本文献を30分処理

	e ³	Finch(解析)等。BTLモデルによる仮説順位付け ³	学、気候テック ³	Looplによる人間との協業) ³	(手作業推計294時間分)。ワークフロー全体で手作業比約200倍高速化推定。構想から投稿まで2.5カ月 ³
A-Lab	ローレンス・バークレー国立研究所(LBNL)等 ³	能動学習、計算データ、文献知識、自動調製・熱処理ロボット、PXRD ³	無機材料科学 ³	物理接続(設定範囲内での自律クローズドループ) ³	設定条件範囲内での無機化合物自律合成。2026年著者修正により36件の合成成功を再確認 ³

日本国内における実装動向と産学官の取り組み

日本国内においても、スタートアップ、化学・電機メーカー、大学研究機関が主導する形でAIエージェントの研究現場への導入が進められている³。

国内スタートアップのSakana AIは、計算機科学研究を自動化する「The AI Scientist」およびその拡張版「The AI Scientist-v2」を開発した³。研究テーマの設定、初期成果のフィルタリング、最終論文の選定・投稿プロセスには人間が関与したものの、仮説立案、コード記述、計算実験、図表作成、論文執筆までをエンドツーエンドで実行する機能を備えている³。人間が選定してICLR 2025の併設ワークショップに提出された論文のうち1本(『Compositional Regularization: Unexpected Obstacles in Enhancing Neural Network Generalization』)が、査読者平均6.33点を得て採択水準を上回った³。事前の取り決めにより正式なメタレビュー前に撤回されたため正式公開には至っていないものの、Sakana AIによると、著者らの知る限り100% AI生成の論文が通常の査読評価で採択基準を満たした初の事例とされている³。

実業務の効率化においては、三井化学が開発した文献調査用生成AIエージェントの事例がある³。化学分野の文献や特許に掲載される複雑な化学構造式の画像をテキスト情報と統合して解釈し、化合物名、用途、物性、製造法、実験条件などを自律的に抽出・レポート化する³。社内検証において、従来手作業で約1カ月を要していた文献調査プロセスの作業時間を80%以上削減し、約1日程度へ短縮する効果を確認している³。

計算化学の領域では、Matlantis株式会社が提供するクラウド型原子レベルシミュレーター「Matlantis™」において、2026年5月にAIエージェント機能の強化が発表された³。シミュレーションの手順やAPI仕様を知識集「Skills」として整備・公開したほか、MatlantisのターミナルからClaude Code

やCodexを直接呼び出して自然言語でコード作成や解析指示を行う連携機能について近日提供予定であることを公表している³。これにより、プログラミングを本業としない実験系研究者によるシミュレーションの直接活用が期待されている³。

物理実験の自動化・自律化では、東京大学の一杉太郎教授（東京科学大学特任教授兼任）らの研究グループが、分析・機器メーカー各社と連携し、薄膜合成、自動XRD測定、解析プログラムを相互接続してコバルト酸リチウム（ LiCoO_2 ）の合成条件を自律的に最適化するシステムを構築した³。さらに東京大学と日本ファインセラミックス協会（JFCA）は、トヨタ自動車、デンソー、リガク、日本電子、三井金属鉱業、TDK、積水化学工業、三井情報などの参画企業とともに協働ラボを設置し、セラミックス・粉体材料の全自動・自律合成・評価システムの実用化を推進している³。

パナソニック インダストリーは、大阪府門真市の拠点に24時間365日稼働可能な自動実験施設「スマートラボ」を整備した³。需要が拡大するAIサーバー向け電解コンデンサの誘電体材料開発において、異分野の専門人材が連携して独自の自動実験装置を開発・運用し、反復作業の削減と試行サイクルの高速化を図っている³。

機関・企業名	システム・取り組み	導入カテゴリ	技術的アプローチ	定量的成果・提供状況
Sakana AI	The AI Scientist-v2 ³	計算研究の全自動化 ³	仮説立案、コード作成、実験、執筆、自動査読の一連処理 ³	生成論文がICLR 2025ワークショップ査読で平均6.33点を獲得（事前合意により公開前撤回） ³
三井化学	文献調査生成AIエージェント ³	知識統合・文献解析 ³	構造式画像の解釈、テキスト統合、化合物情報や実験条件の抽出 ³	文献調査時間を80%以上削減（約1カ月分を約1日に短縮） ³
Matlantis	Matlantis™ AI エージェント連携 ³	シミュレーション制御 ³	知識集「Skills」の公開、ターミナル連携機能（近日提供予定） ³	自然言語対話によるシミュレーションコード作成・実行の簡便化 ³
東京大学 / JFCA	自律実験システム・協働ラボ ³	物理実験の自律化 ³	薄膜・セラミックスの自動合成、自動XRD、機械学習による最適	LiCoO_2 合成条件の自律最適化。産学連携で粉体・セラミック

			化 ³	ス自動化協働ラ ボを展開 ³
パナソニックイ ンダストリー	スマートラボ ³	物理実験の自 動化 ³	コンデンサ誘電 体材料開発に おける24時間 365日自動実験 環境 ³	定型作業の削 減、データ取得 の連続化、開発 サイクルの高速 化 ³

本調査による考察：研究プロセスに生じ得る構造的変容

国内外の事例を踏まえると、AIエージェントの導入は単なる作業の効率化にとどまらず、研究プロセスのあり方にいくつかの構造的変容をもたらす可能性を示唆している²。

第一に、バーチャルな情報処理とフィジカルな物理実験との境界縮小である³。文献検索やコード生成といった情報空間の処理と、ロボットや測定機器を介した物理空間での実験がAPIを介して相互接続されることで、仮説立案から実験、解析、追加仮説の構築へと至るフィードバックループが一体化し、試行錯誤の高速化が期待される³。

第二に、Test-time compute（推論時計算資源）を活用した仮説空間の拡張である³。マルチエージェントによる自動討論や検索木探索に計算資源を投入することにより、個人の直感や経験に依存していた従来の仮説立案に対し、従来より広範かつ系統的に仮説空間を探索することが可能になりつつある³。

第三に、人間の研究者に求められる役割の比重の変化である²。定型的なデータ解析、コード記述、初期文献調査などをAIエージェントが支援することで、人間の研究者は「重要な問いの設定（Problem Formulation）」、「評価基準や制約条件の設計」、そして「出力された結果に対する科学的・倫理的責任の引き受け」という判断業務に比重を移す可能性がある²。

技術的・制度的課題とガバナンスのあり方

AIエージェントの適用範囲が拡大する中で、科学的妥当性の保全および安全性の確保に向けた課題の検討が進められている²。

主たる技術的課題の一つが、出力の検証可能性とハルシネーション（事実と異なる記述）の制御である³。AIエージェントが生成する仮説や論文原稿には、不適切な文献引用や論理の飛躍が含まれる可能性があり、大量に生成されるアウトプットを人間の研究者がどのように評価・検証するかという「検証の負荷」が浮き彫りとなっている³。

これに対応するためには、AIの判断プロセスの追跡可能性（トレーサビリティ）を担保するデータ基盤が必要とされる³。使用されたAIモデルのバージョン、プロンプト履歴、参照文献データ、実験装置の制御ログなどを記録し、後から第三者が実験結果や判断過程を追検証できる環境の整備が論点となっている³。

また、ガバナンスと安全対策（Human-in-the-Loop: HITL）の設計も重要な検討課題である²。自律的なWebアクセスや実験装置の操作権限を持つシステムにおいて、危険性の高い化学物質の調製や不適切なネットワークアクセス等の不確実性を排除するため、リスクのある操作の直前に人間による確認・承認を挟むシステム構造や、制限された範囲内でのみ動作を許可するサンドボックス環境の

設計について議論がなされている³。

結論と今後の展望

JST-CRDSのショートレポート Vol.2『AIエージェントの科学研究への展開』は、AI for Scienceが単一の解析支援から、研究サイクル全体をつなぐ研究基盤へと展開しつつある現状を整理している¹。海外の「Co-Scientist」「Robin」「A-Lab」や、国内の「The AI Scientist」「三井化学」「Matlantis」「東京大学協働ラボ」「パナソニック インダストリー」などの事例は、領域や目的に応じた多角的な実装の広がりを示している³。

今後の定着に向けては、AIエージェントの自律性を高める技術開発と並行して、結果の再現性、判定過程の追跡可能性、人間による適切な関与のあり方、安全性を担保する制度的・技術的枠組みの構築が必要となる³。AIエージェントを人間の補完・拡張機能として位置付け、科学者コミュニティと社会の双方が望ましい科学研究環境の形成に向けた議論を深めていくことが期待される³。

引用文献

1. CRDSフェローが解説！最新のサイエンス - 科学技術振興機構(JST),
<https://www.jst.go.jp/crds/column/kaisetsu/index.html>
2. <https://www.jst.go.jp/crds/column/kaisetsu/shortreport1.html>
3. ショートレポート AI for Science Spotlights Vol.2「AIエージェントの科学研究への展開」,
<https://www.jst.go.jp/crds/column/kaisetsu/shortreport2.html>