



## 最新の生成 AI モデルを用いて研究開発の現場でどんな革新が行われているか

生成 AI は、2024～2025 年にかけて「Scientific AI」として R&D プロセス全体に組み込まれ、仮説立案・設計・シミュレーション・実験・文書化までを高密度に自動化・高速化する方向に進んでいます。特に創薬・材料・製造・科学研究支援エージェントの 4 領域で、基盤モデルとマルチモーダルモデルを核にした実運用レベルの革新が顕在化しており、日本企業も専用スーパーコンピュータやドメイン特化 LLM を用いた取り組みを加速させています。<sup>[1][2][3][4][5][6][7][8]</sup>

### 全体像：Scientific AI による R&D 変革

マッキンゼーは、生成 AI の経済価値の約 4 分の 1 が R&D 領域から生じ得るとし、「Scientific AI」と呼ぶ科学専用 AI スタックが、単なる生産性向上にとどまらず研究パラダイム自体を変えつつあると指摘しています。具体的には、大規模言語モデルやマルチモーダル基盤モデルを用いて、テキスト・コード・分子構造・スペクトル・画像・シミュレーション結果など異種データを横断的に学習し、仮説生成から実験計画、結果解釈までを一貫して支援する研究ワークフローが構築されつつあります。arXiv の総説も、科学発見向けの AI エージェント、マルチモーダル表現、推論とデータ駆動モデリングの統合フレームワークが今後の鍵になると整理しています。<sup>[2][4][9][11]</sup>

### 創薬・ライフサイエンスでの革新

小分子創薬では、分子・タンパク質・表現型データで事前学習した基盤モデルにより、ヒット探索～リード最適化に至るまでの化合物設計・仮想スクリーニングが大幅に高速化しており、数十億規模の化合物空間を短期間で探索する事例が報告されています。MIT などでは生成モデルを用いて新規抗生物質クラスを設計し、有効な候補を従来より短期間で同定するなど、生成 AI がこれまで見つかりにくかった構造群の発見に寄与し始めています。<sup>[10][11][12][2]</sup>

日本では、三井物産と NVIDIA による東京-1 プロジェクトが、DGX H100 クラスタと BioNeMo 等を用いて創薬向け分子生成モデルや分子動力学シミュレーションを産業界に提供し、国内製薬各社の AI 創薬インフラとして機能し始めています。富士通と理研による電子顕微鏡画像からのタンパク質構造変化予測、第一三共による約 60 億化合物を 2 か月でスクリーニングした事例など、基盤モデル+HPC を組み合わせた「AI 主導の創薬パイプライン」が現実化しています。<sup>[3][5]</sup>

臨床開発でも、Chugai×ソフトバンク×SB Intuitions が臨床開発特化 LLM と AI エージェントを共同開発し、プロトコル作成・症例報告・照会対応などのタスクを自律的に処理することで、9~17 年かかるとされる新薬開発のボトルネック圧縮を狙っています。日本の医療現場全体としても、診療記録の要約、治療サマリー生成、画像診断補助などで生成 AI が広く導入されつつあり、創薬~臨床まで一貫通貫の AI 活用が進展しています。<sup>[1][6][8]</sup>

## 材料・化学・エネルギー分野の基盤モデル

Nature 系の総説は、材料分野における基盤モデルが、従来の QSPR や個別最適化された ML に比べて、構造から物性を高精度に予測し、逆問題として「所望特性を満たす材料候補の自動生成」を可能にしつつあると整理しています。これらのモデルは SMILES や SELFIES のような 2D 表現だけでなく、グラフ・量子化学記述子・3D 構造・計算化学シミュレーション出力など複数表現を統合したハイブリッド表現学習へと発展しており、汎用性と物理的一貫性の両立が進んでいます。<sup>[9][2]</sup>

材料・触媒・電池・高分子設計では、マルチモーダル基盤モデルがスペクトルデータ、結晶構造、原子シミュレーション結果を同時に学習し、合成可能性・安定性・性能を同時に考慮した候補提案や、合成条件の推奨を行う研究が報告されています。これにより、従来は高価な第一原理計算+試行錯誤に依存していたスクリーニングを、生成モデル+軽量シミュレーションの反復ループで代替し、探索スループットを 1~2 桁引き上げることが可能になりつつあります。<sup>[13][2][9]</sup>

## 製造業・自動車・ロボットにおける生成設計とデジタルツイン

日本を含む製造業では、生成 AI を用いた 3D 形状生成・トポロジー最適化により、軽量かつ高剛性な部品設計や、耐久性向上を目的とした構造リデザインが進んでいます。Fortune Business の日本市場分析によれば、製造・自動車分野では、生成モデルがプロセス条件の最適化、品質検査の高度化、シ

ミュレーションベースのデジタルツインと連携した異常検知・予知保全に活用されており、工場全体のエネルギー効率や OEE 改善に寄与しています。<sup>[14]</sup>

また、GAN 系モデルは、自動車部品の表面欠陥や希少故障パターンの合成に用いられ、実際にはほとんど発生しないがリスクとして重要な不良・事故シナリオを大量生成し、検査アルゴリズムやロボット制御のロバスト性向上に役立てられています。ロボティクス領域では、シミュレーション環境でのタスク・軌道・センサーログを生成 AI で増幅し、実機投入前に多様な状況でポリシーを事前学習する試みも進行しており、R&D サイクル短縮と安全性の両面で効果が報告されています。<sup>[14][18]</sup>

## 研究者向け AI エージェントと「AI 共同研究者」

2025 年には、Google が Gemini 2.0 を基盤とするマルチエージェント型の「AI Co-Scientist」を公開し、仮説生成・文献レビュー・実験計画立案・解析・論文草稿作成までを自動で回すシステムが登場しました。検証例として、英国の研究者が 10 年かけて明らかにした細菌の遺伝子伝達メカニズムに相当する洞察を、このシステムが約 48 時間で再発見したと報告されており、「人間研究者+AI 共同研究者」の形で研究フローを再設計する動きが加速しています。<sup>[14]</sup>

arXiv の総説も、今後は LLM 単体ではなく、「文献・データベース・シミュレータ・ロボット実験設備」にアクセスし、長期的な研究プロジェクトを自律的に推進する科学 AI エージェントが重要になると指摘しています。製薬領域では、Chugai とソフトバンクが、臨床開発タスクを自律実行する LLM エージェント群を構想しており、プロトコル設計や症例集積、規制当局向け文書ドラフトまでを自動化することで、ヒトが意思決定とクリティカルレビューに集中する形への移行を目指しています。<sup>[16][17]</sup>

## 文書作成・知識管理・周辺業務の自動化

R&D コアだけでなく、周辺のドキュメンテーションやナレッジマネジメントでの生成 AI 活用も急速に進んでいます。日本市場の分析では、医療・製薬・製造企業が、臨床ノートや検査結果の要約、治療計画・ケアサマリーの自動生成、技術文書・マニュアルのドラフト作成などに生成 AI を使い、専門人材不足を補いつつ業務時間を大幅に削減しているとされています。<sup>[13][16][18]</sup>

製薬企業では、治験関連文書や同意説明文書、症例報告書などの作成に生成 AI を用いる PoC が進んでおり、規制要件を満たしつつドラフト作成・整合性チェック・過去症例との比較を自動化する方向に進んでいます。McKinsey は、Scientific AI がラボの実験だけでなく「研究記録・レポート・技術的議論」の生成を統合的に支援することで、研究者の「思考に使う時間」を増やすことが R&D 全体の生産性向上に直結すると指摘しています。<sup>[4][1][6][3]</sup>

## 日本の R&D・IP 実務への主な示唆

- **汎用 LLM ではなくドメイン特化モデル+エージェント設計が重要**

日本のヘルスケアでは、規制要件や説明可能性の要求が高く、医療・製薬専用モデルや業務フローに密結合したエージェントの導入が進んでいます。同様に、製造・材料・ロボティクスでも、自社データとワークフローにチューニングした基盤モデルとツール連携の設計が、競争優位とコンプライアンスの両立に不可欠です。<sup>[5][2][6][8]</sup>

- **自社実験データ・シミュレーション資産と基盤モデルの統合が差別化源**

材料・創薬の事例が示すように、公開データで事前学習された基盤モデルに対し、自社のハイスループット実験・分子シミュレーション・製造ラインの時系列データで継続学習させることで、性能と業務適合性が飛躍的に高まります。東京-1 のような共同インフラを活用しつつ、「データ+モデル+ワークフロー」の組み合わせ自体をコア IP としてどう囲い込むかが戦略論点になりつつあります。<sup>[12][2][5][9][8]</sup>

- **AI 生成成果物を前提とした IP 評価・権利化・秘密管理の再設計**

基盤モデルにより設計候補・仮説・実験条件が大量に生成されるため、「どの案が誰の創造性に基づくのか」「アルゴリズム寄与と人間の発明行為をどう切り分けるか」といった問いが実務上顕在化します。科学 AI エージェントが継続的に仮説を生成する環境では、アイデア出現段階からのトレーサビリティ確保と、出願すべき発明・ノウハウとして秘匿すべき知見の選別プロセスを、AI ワークフローと一体で設計する必要があります。<sup>[7][12][8]</sup>

- **規制・評価枠組みとの整合とエビデンス文書化**

日本のヘルスケア分野では、SaMD や創薬 AI に関する当局動向も踏まえ、説明可能で監査可能な生成 AI の利用が求められており、市場調査も「高い規制要件が説明可能・特化型 AI への需要を押し上げている」としています。研究・開発・臨床・製造の各プロセスで AI が果たした

役割や意思決定プロセスを文書化し、必要に応じて規制当局・取引先・裁判所に提示できるようになることが、今後の R&D/IP ガバナンスの重要テーマになります。<sup>[15][6][8]</sup>

これらを踏まえると、日本の研究開発現場では「生成 AI を単なるツールとして導入する」のではなく、「Scientific AI を前提とした研究・設計・権利化プロセスそのものの再設計」が、次の数年の競争力を左右する論点になっていると言えます。<sup>[1][4][7][8]</sup>

\*\*

1. <https://www.mckinsey.com/capabilities/tech-and-ai/our-insights/tech-forward/scientific-ai-unlocking-the-next-frontier-of-r-and-d-productivity>
2. <https://www.nature.com/articles/s41524-025-01538-0>
3. <https://www.genspark.ai/spark/exploring-the-use-of-generative-ai-in-the-pharmaceutical-industry-a-comparative-study-of-japan-and-international-cases/d223bd92-0f1a-4165-8463-3dea2bbd30d0>
4. <https://www.mckinsey.com/capabilities/mckinsey-digital/our-insights/tech-forward/scientific-ai-unlocking-the-next-frontier-of-r-and-d-productivity>
5. <https://psachem.com/japans-first-generative-ai-for-pharmaceutical-industry/>
6. [https://www.chugai-pharm.co.jp/english/news/detail/20250130153000\\_1131.html](https://www.chugai-pharm.co.jp/english/news/detail/20250130153000_1131.html)
7. <http://www.arxiv.org/abs/2412.11427>
8. <https://www.fortunebusinessinsights.com/japan-generative-ai-market-115265>
9. <https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2025/dd/d5dd00170f>
10. <https://discover-pharma.com/exclusive-interview-how-foundation-models-are-redefining-small-molecule-drug-discovery/>
11. <https://www.oaepublish.com/articles/aiagent.2025.08>
12. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359644625002314>
13. <https://arxiv.org/html/2510.18900v1>
14. <https://www.rdworldonline.com/6-ways-ai-reshaped-scientific-software-in-2025/>
15. <https://www.pmda.go.jp/files/000277672.pdf>