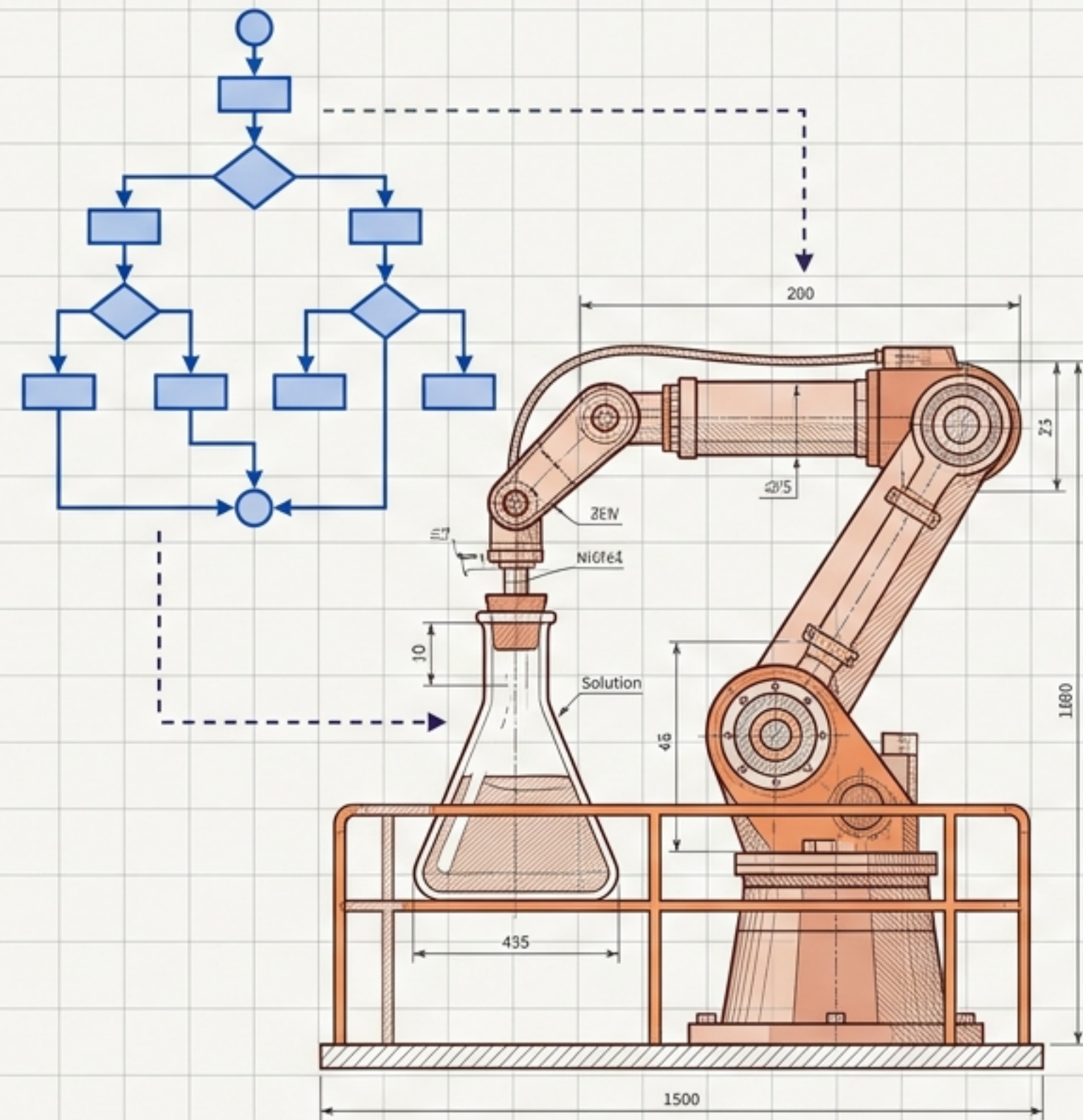




Executive Summary

第5の科学研究 パラダイムへ

AIエージェントによる研究
自動化・自律化の現在地と展望

進化する科学の基盤: 第5のパラダイムへの昇華

第5のパラダイム (AIエージェント)

AIがプロセス各段に入り込み、仮説生成・実験・解析・知識統合を自律的に結合・再編成。



データ駆動型科学

大容量データから法則性を見出す



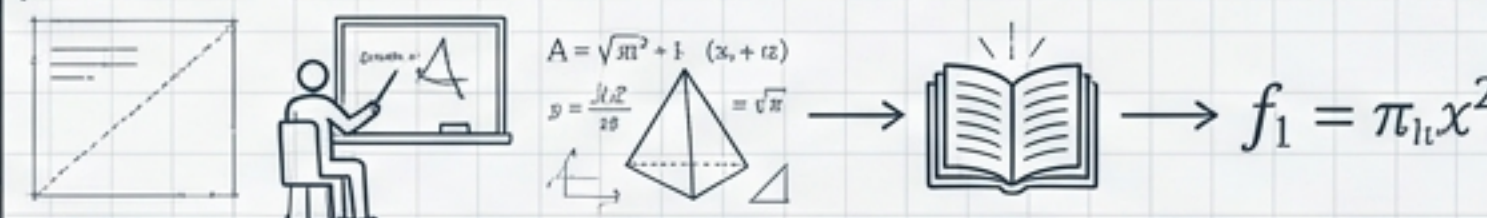
計算科学

シミュレーションによる検証



理論科学

法則性の定式化を推進



経験科学

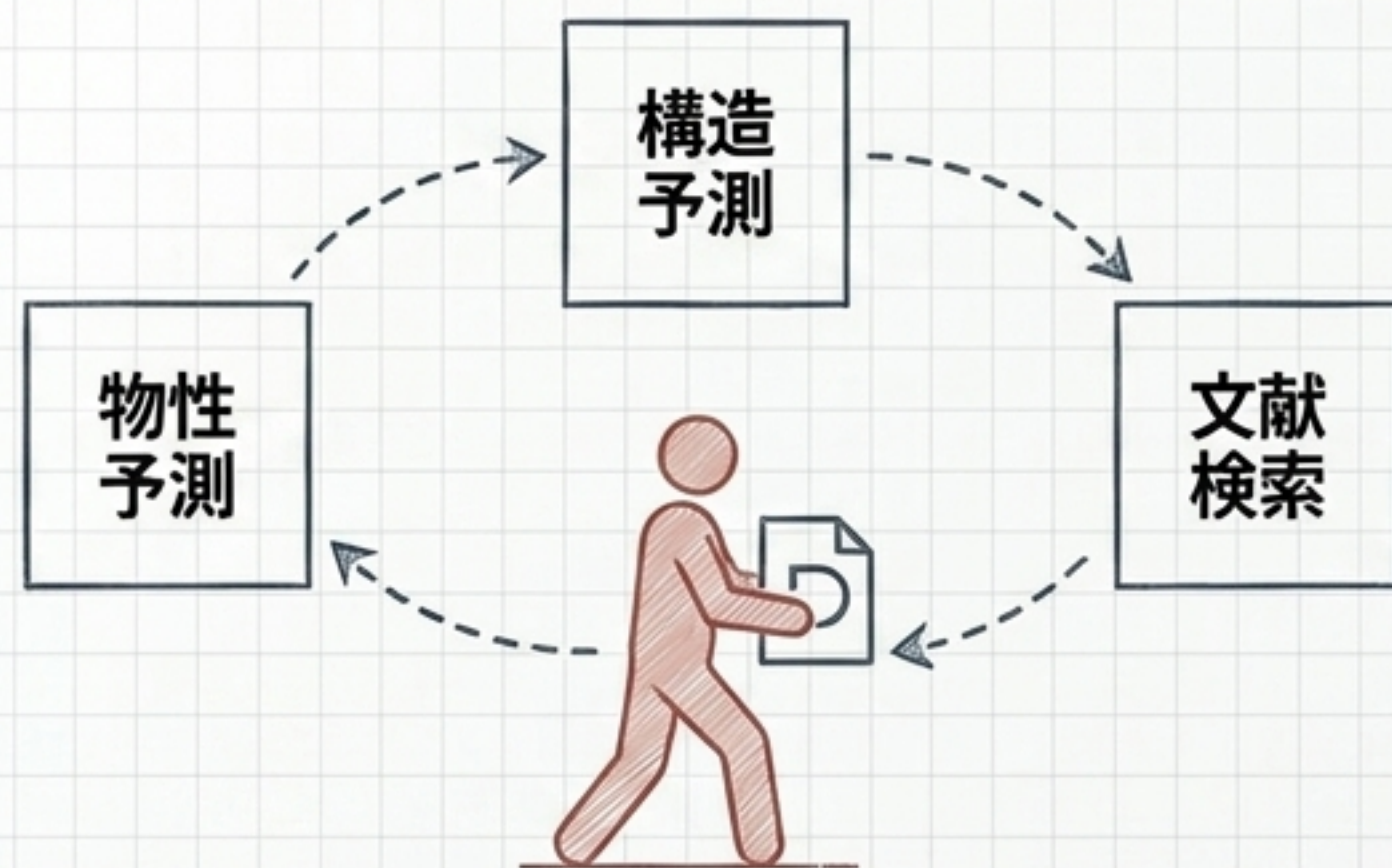
現象の観察と記述に基づくアプローチ



進化する科学の基盤: 第5のパラダイムへの昇華

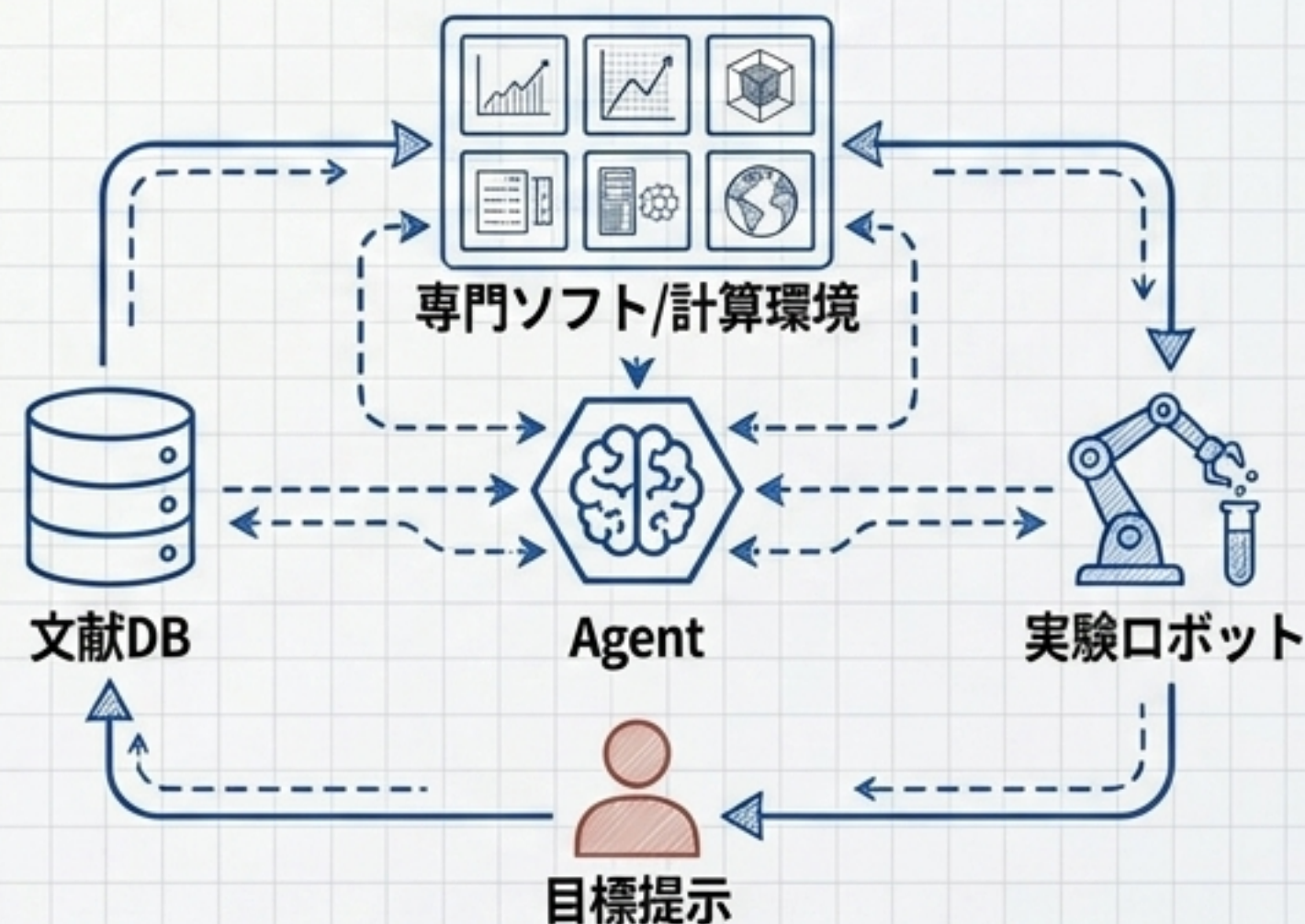
個別支援から自律的連携へ

個別支援（ポイントソリューション）



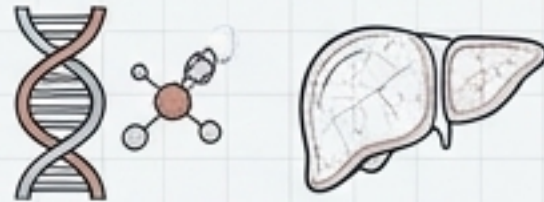
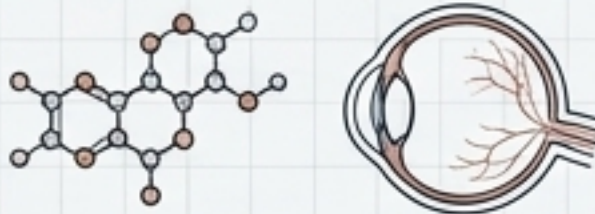
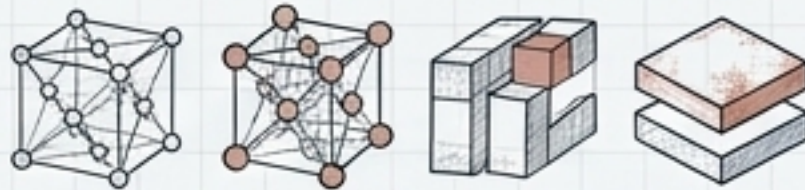
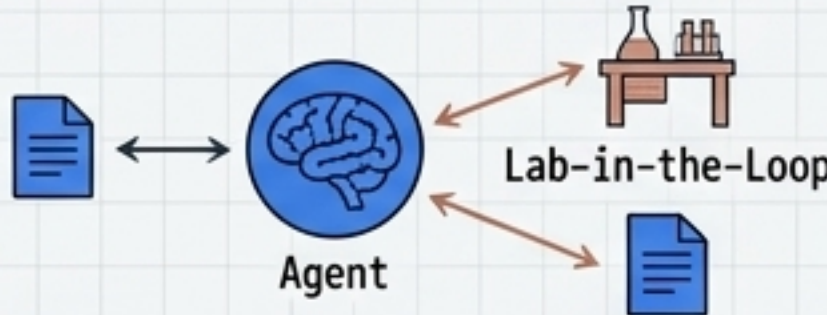
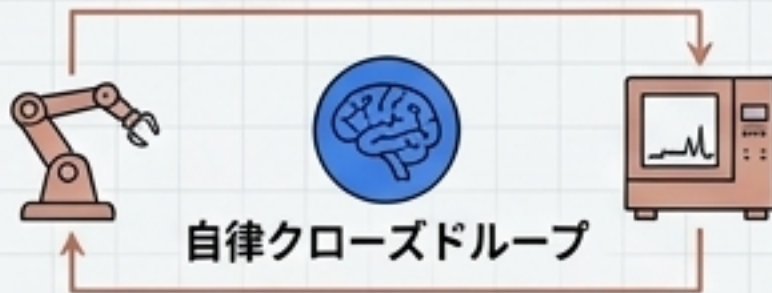
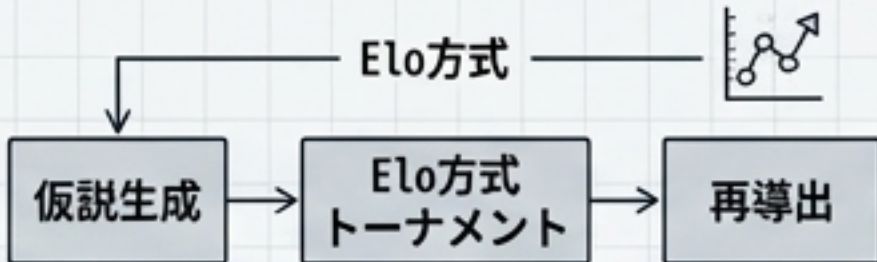
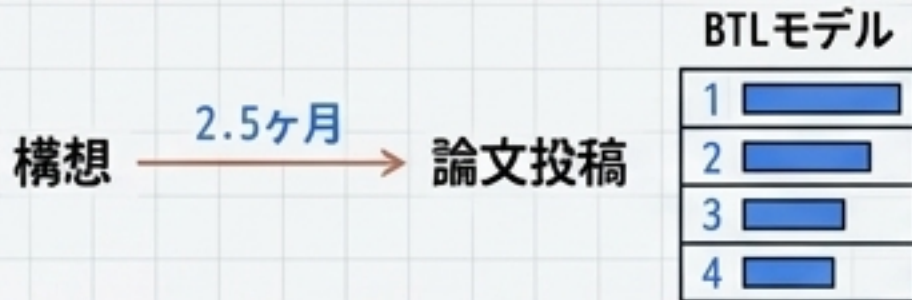
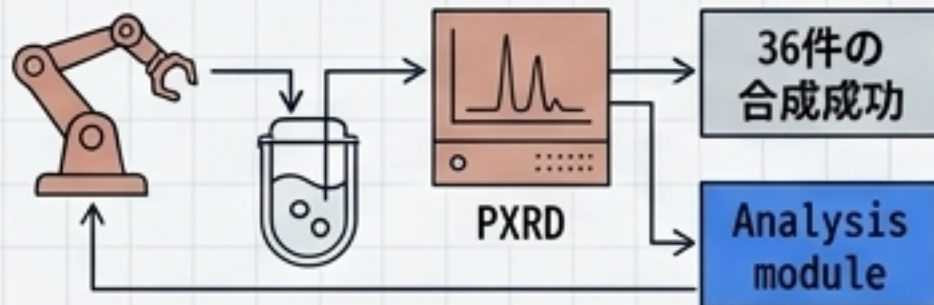
従来のAI for Science。特定タスクに特化したツール群。研究者自身が各ツールを操作し、プロセス間を属人的に接続。

自律的連携（AIエージェントシステム）

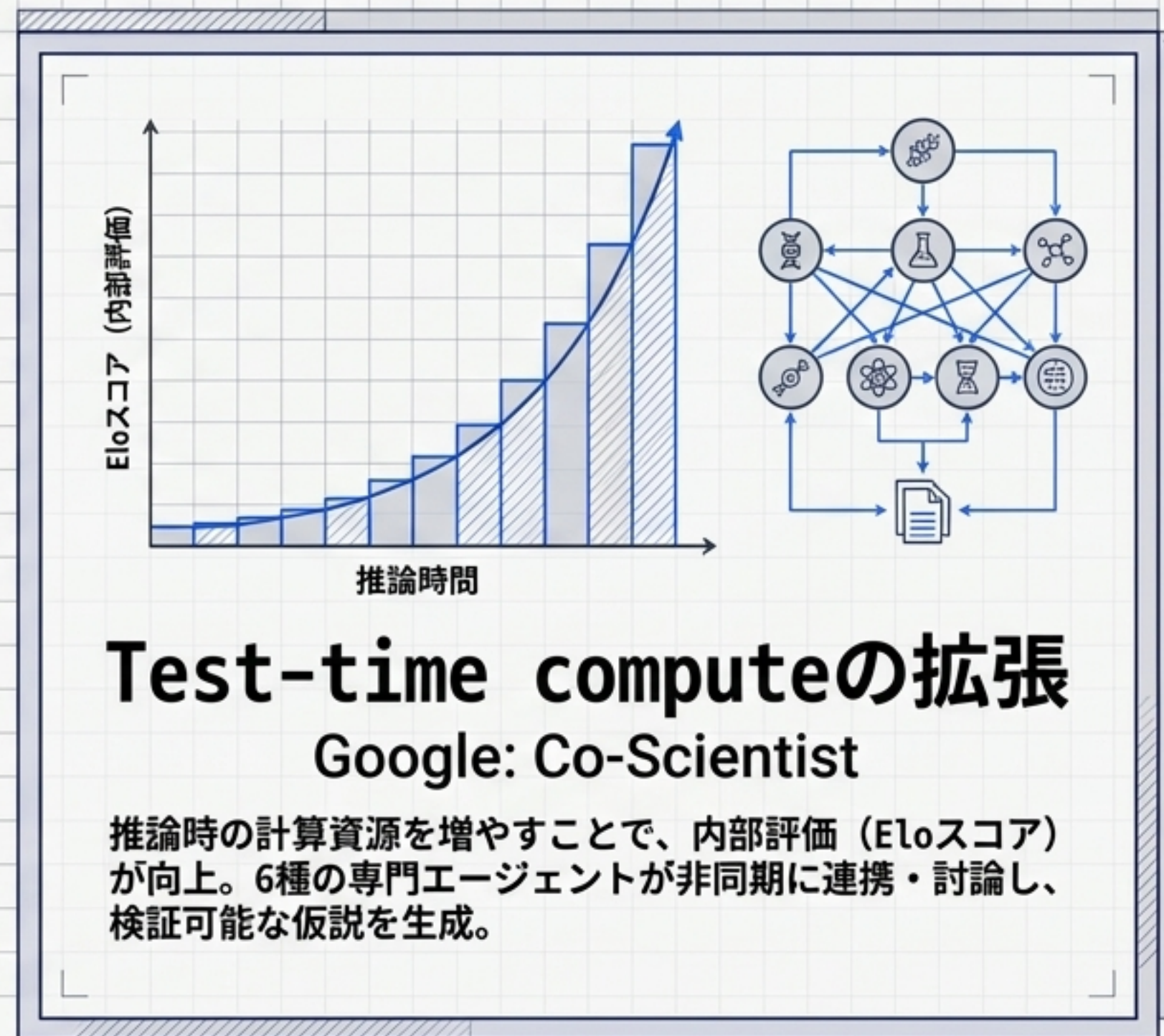


次世代のAIエージェント。目標提示のみで、文献DB、専門ソフト、計算環境、実験ロボットを自律的に連携。一連の研究処理をシステムが自律推進。

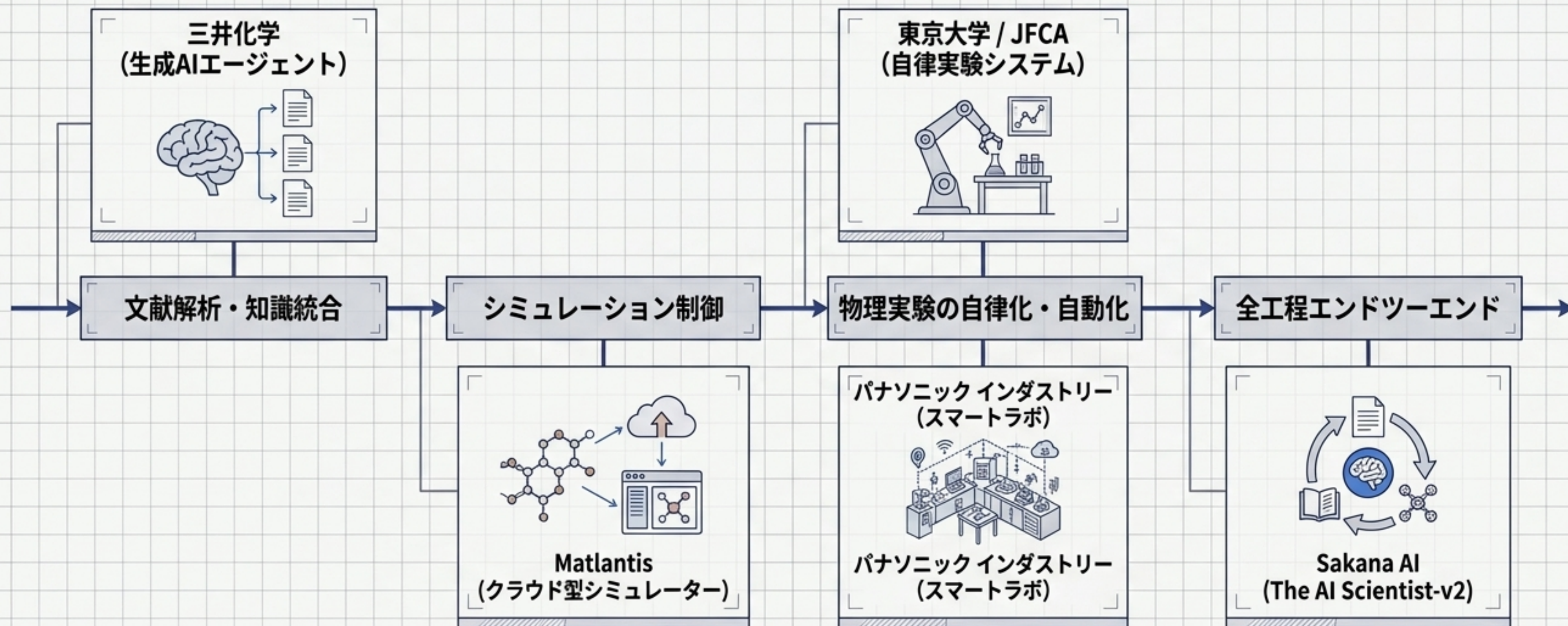
海外におけるAIエージェントの先進事例

	Google: Co-Scientist	FutureHouse: Robin	LBNL等: A-Lab										
領域	生物医学（AML，肝線維症等） 	創薬、生物学（dAMD等） 	無機材料科学 										
接続形態	仮想的連携（人間がin vitro検証） 	仮想的連携（Lab-in-the-Loop） 	物理的接続（自律クローズドループ） 										
実証成果	未発表の薬剤耐性（AMR）伝播メカニズムを独立再導出。Elo方式トーナメントによる仮説評価。 	2.5ヶ月で構想から論文投稿まで完了。BTLモデルによる仮説順位付け。  <table><tr><th colspan="2">BTLモデル</th></tr><tr><td>1</td><td> </td></tr><tr><td>2</td><td> </td></tr><tr><td>3</td><td> </td></tr><tr><td>4</td><td> </td></tr></table>	BTLモデル		1		2		3		4		自動調製ロボットとPXRDを連携し、設定条件下で無機化合物を自律合成。36件の合成成功を再確認。 
BTLモデル													
1													
2													
3													
4													

仮想空間における圧倒的な高速化と計算リソースの拡張



日本国内の実装動向：研究ライフサイクルにおける展開



産学官の連動：文科省「基本的な戦略方針」やJST「ARiSE」、文科省「SPReAD 1000」等の政策施策がエコシステムを後押し。

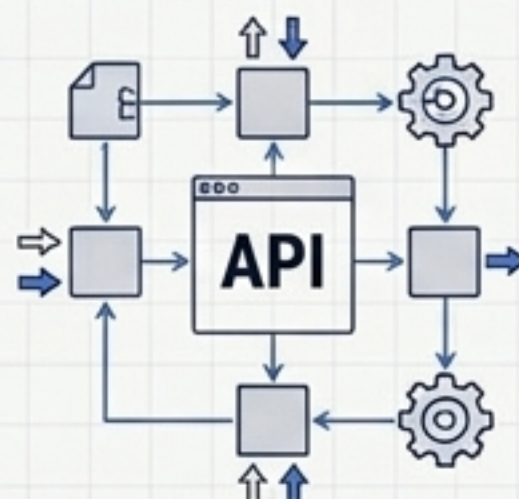
デジタル・仮想空間における国内の技術躍進



Sakana AI

計算研究の全自動化

仮説立案から論文執筆まで
エンドツーエンド実行。
生成論文がICLR 2025ワーク
ショップ査読で平均**6.33点**
を獲得し採択水準を突破。



三井化学

文献・特許調査

複雑な化学構造式画像をテ
キストと統合解釈。
従来約1カ月要した作業時間
を「**80%以上削減**」し、
約1日へ短縮。



Matlantis

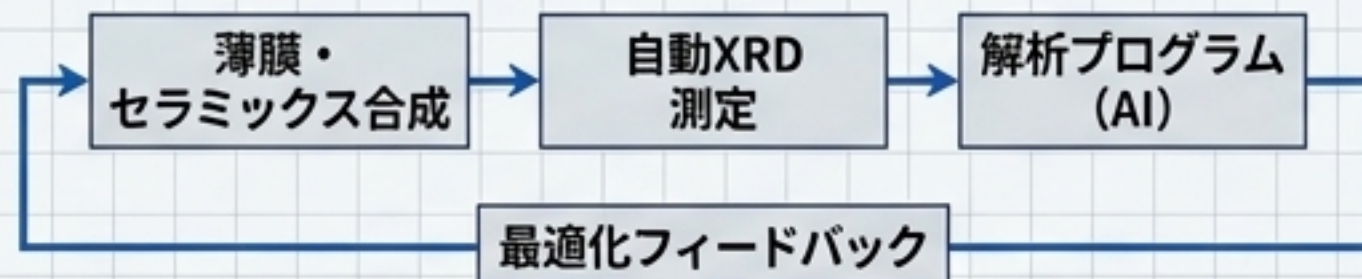
シミュレーションへの自然言語IF

知識集「Skills」の公開。
Claude/Codexと連携し、自
然言語でコード作成や解析
指示を可能に。実験系研究
者の利用障壁を破壊。

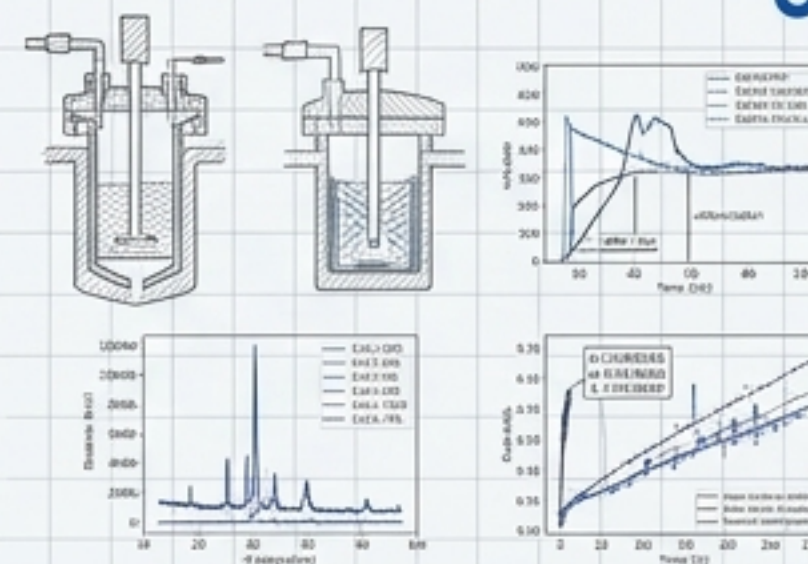
物理空間との結合：自律実験ラボの実装

東京大学 / JFCA協働ラボ

自律的クローズドループの構築



機械学習によりコバルト酸リチウム (LiCoO_2) の合成条件を自律的に最適化。参画企業多数による実用化推進。



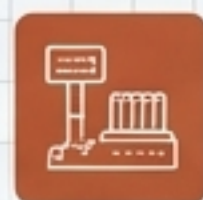
パナソニック インダストリー (スマートラボ)

24時間365日の連続稼働環境



異分野
人材連携

+

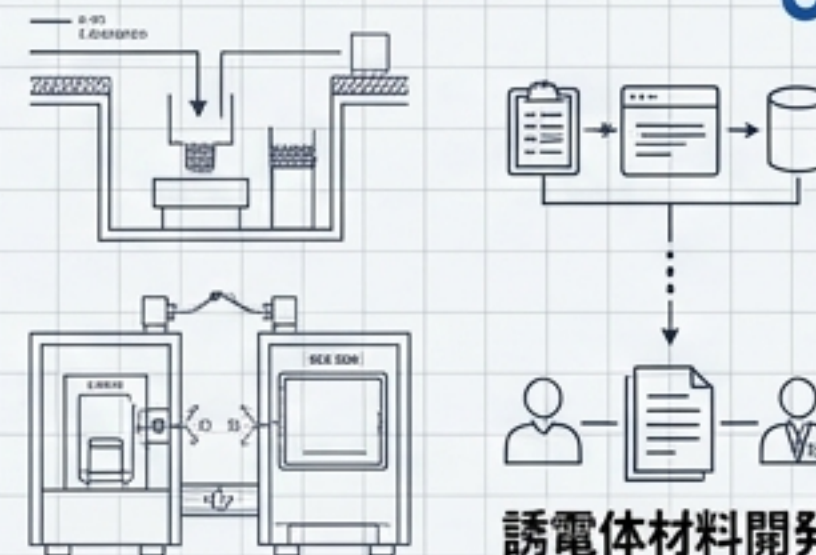


独自自動
実験装置

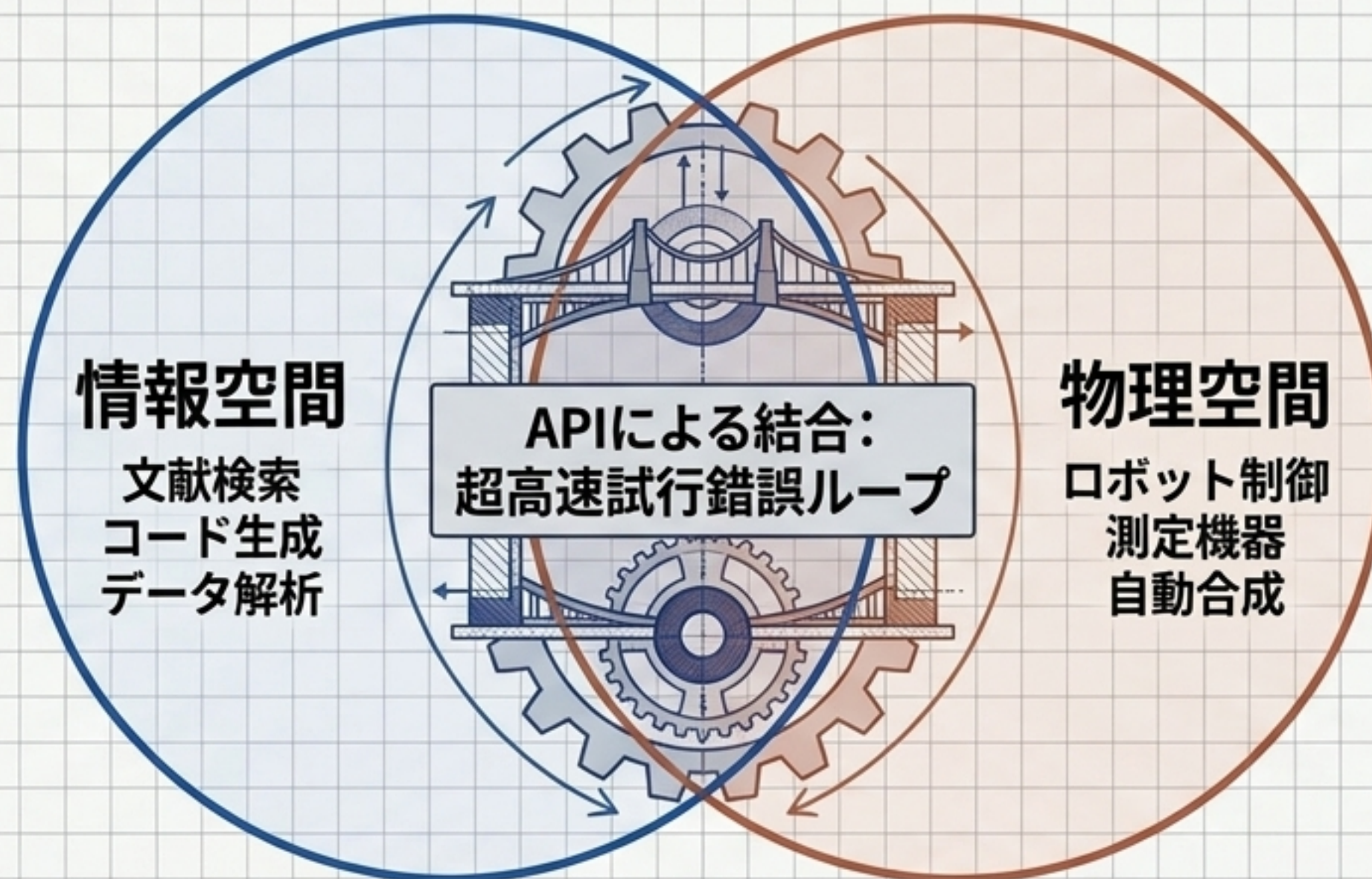


AIサーバー向け
電解コンデンサ

異分野人材が連携し、独自自動実験装置による反復作業削減と試行サイクルの極限高速化を実現。



構造的変容 1: バーチャルとフィジカルの境界縮小



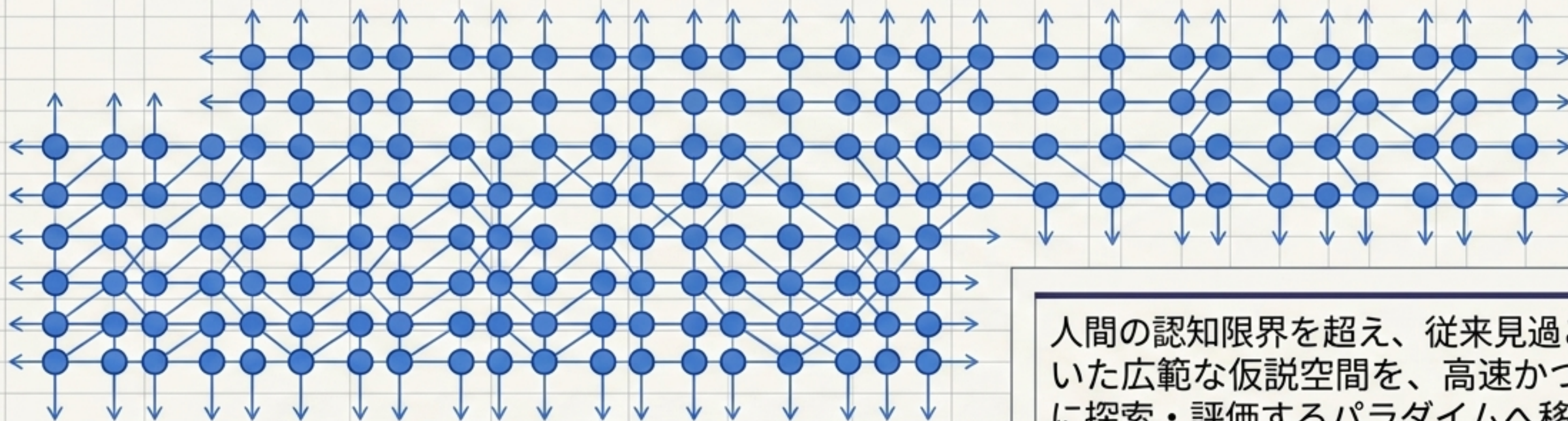
仮説立案 → 実験 → 解析 → 追加仮説構築に至るフィードバックループが
完全に一体化し、人間の介入を待たない連続的な探索が可能に。

構造的変容 2: 仮説空間の劇的な拡張

個人の直感・経験への依存：狭い探索範囲



計算資源の投入による系統的探索：Test-time computeとマルチエージェント

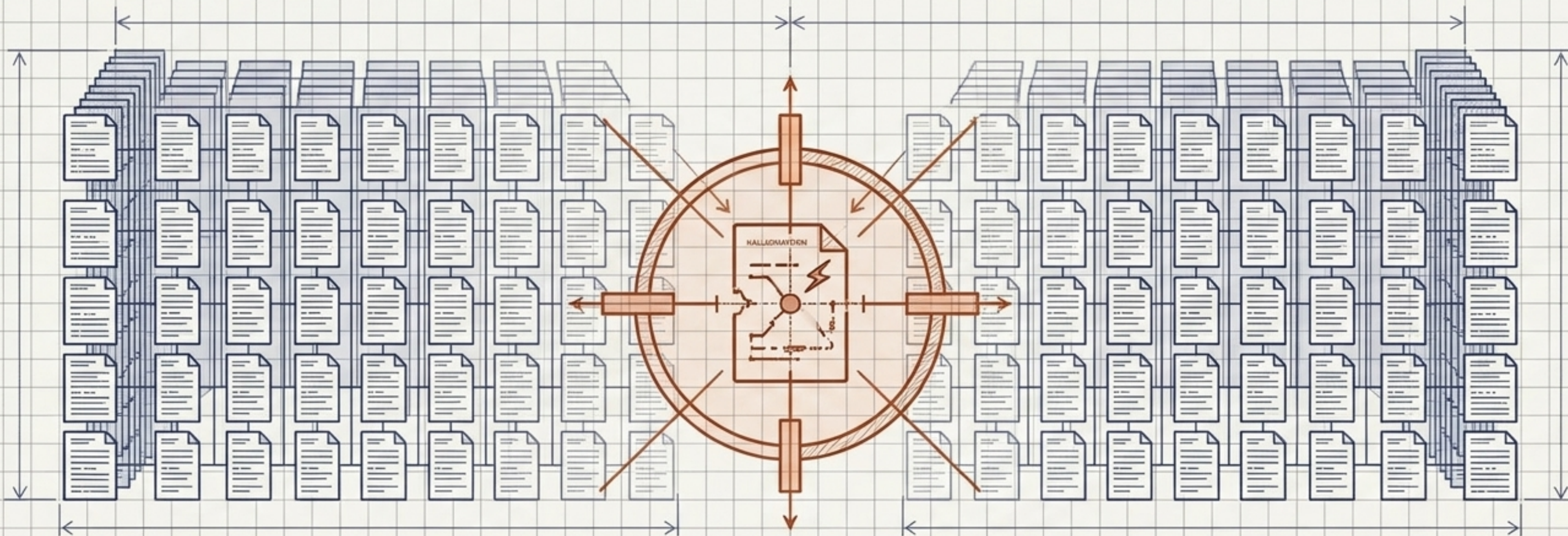


人間の認知限界を超え、従来見過ごされていた広範な仮説空間を、高速かつ系統的に探索・評価するパラダイムへ移行。

構造的変容 3: 研究者に求められる役割のシフト



新たなボトルネック：「検証負荷」の増大とハルシネーション

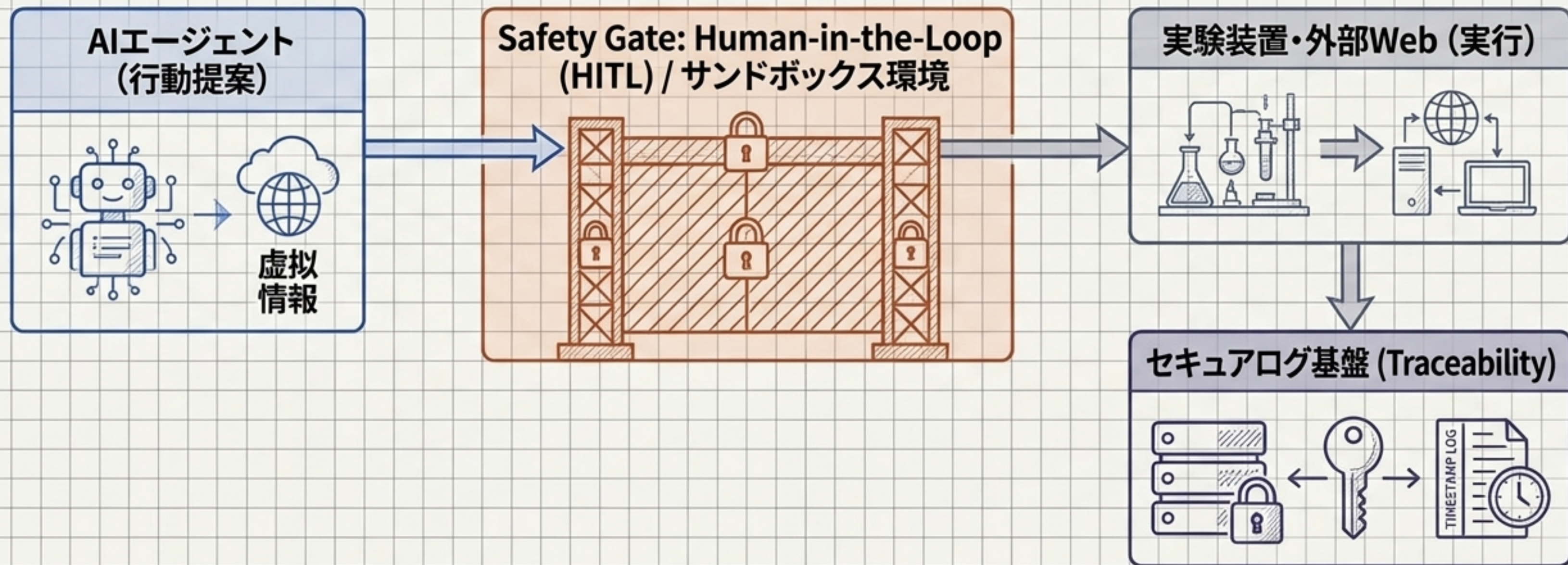


AIエージェントが超高速で大量に生成する
アウトプット（仮説・論文・コード）。その中には
不適切な文献引用や論理の飛躍（ハルシ
ネーション）が含まれるリスクが内在。



「生成」のコストがゼロに近づく一方で、そ
の科学的妥当性を人間の研究者がどのよう
に評価・検証するかが、研究プロセスにお
ける最大のボトルネックとなる。

技術的・制度的ガードレール：安全性と追跡可能性の担保

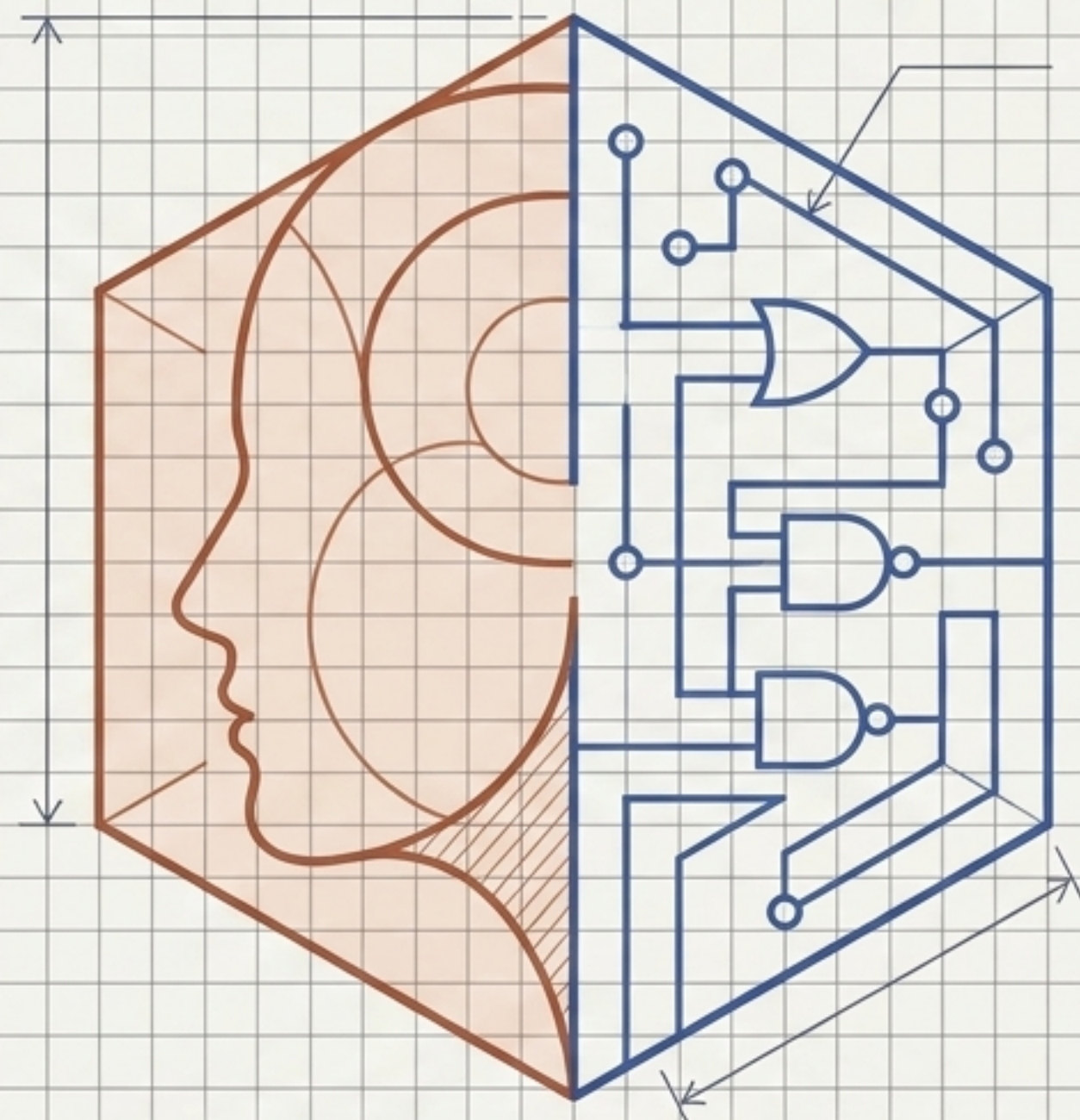


安全性 (Safety):

危険性の高い化学物質調製や不適切なアクセスを防ぐため、リスク操作直前に人間の承認 (HITL) を挟む設計。

追跡可能性 (Traceability):

第三者による追検証を可能にするため、モデルバージョン、プロンプト履歴、参考文献、機器制御ログの完全な記録基盤の整備。



人間の補完・拡張としてのAIエージェント

AIエージェントは自律性を持つが、最終的な方向性を決定し、価値を創出するのは人間である。科学的妥当性の保全と安全性を担保する枠組みを構築しながら、科学者コミュニティと社会が共に創る「望ましい研究環境の未来」へ。

出典・参考文献

本資料は、科学技術振興機構(JST)研究開発戦略センター(CRDS)によるショートレポート『AI for Science Spotlights Vol.2「AIエージェントの科学研究への展開」』(2026年8月公表、杉村佳織・永野智己 著) および『AI for Scienceの現在地』(Vol.1)の調査内容に基づき構成されています。

※事例の定量的データ(Co-Scientist, Robin, A-Lab, Sakana AI等の成果)はすべて同レポートに準拠しています。