

国立国会図書館 調査及び立法考査局

Research and Legislative Reference Bureau
National Diet Library

論題 Title	科学研究と AI—サイエンスはどう変わるのか—
他言語論題 Title in other language	Scientific Research and AI: How Will Science Change?
著者 / 所属 Author(s)	中村 真也 (NAKAMURA Shinya) / 国立国会図書館調査及び立法考査局 文教科学技術課
雑誌名 Journal	レファレンス (The Reference)
編集 Editor	国立国会図書館 調査及び立法考査局
発行 Publisher	国立国会図書館
通号 Number	898
刊行日 Issue Date	2025-10-20
ページ Pages	77-92
ISSN	0034-2912
本文の言語 Language	日本語 (Japanese)
摘要 Abstract	科学研究における AI の利用が急速に進んでいる。本稿では、科学研究の各プロセスにおける AI の利用の現状や、指摘されている利点及び課題を整理し、AI を用いた科学研究の将来を展望する。

* この記事は、調査及び立法考査局内において、国政審議に係る有用性、記述の中立性、客観性及び正確性、論旨の明晰（めいせき）性等の観点からの審査を経たものです。

* 本文中の意見にわたる部分は、筆者の個人的見解です。

科学研究と AI

—サイエンスはどう変わるのか—

国立国会図書館 調査及び立法考査局
文教科学技術課 中村 真也

目 次

はじめに

I AI の歴史と科学研究における AI

1 AI の歴史

2 科学研究における AI

II 科学研究における AI 利用の可能性と課題

1 仮説立案における AI

2 実験・シミュレーションにおける AI

3 実験データの分析における AI

4 論文執筆における AI

5 研究評価（査読等）における AI

III 科学の未来—科学研究の自動化—

1 科学研究の自動化の試み

2 科学研究の自動化の論点

おわりに

キーワード：科学研究、人工知能、AI、AI for Science

要 旨

- ① 近年の AI（人工知能）の技術発展に伴い、科学研究においても AI を利用する試みが広がっている。このような動きは「AI for Science」と呼ばれ、世界的な潮流となっている。2024 年のノーベル化学賞が、AI を利用してタンパク質の構造予測を行うソフトウェア「AlphaFold」シリーズの開発者に授与されたことは、こうした動向を象徴している。
- ② 科学研究は一般に、既存の科学的知識を出発点として、仮説立案、実験・シミュレーション、データ分析、論文執筆、研究評価（査読）を経て新たな科学的知識の獲得に至るプロセスである。これらの各段階において AI を利用することで、研究プロセスの効率化や、人間の認知能力を超えた科学的発見が可能になるといった期待がある。
- ③ 他方、AI の利用に伴う課題もある。仮説立案における AI への過度な信頼は、科学的発見の範囲を狭めてしまう可能性があることや、実験データの分析において AI ツールが不適切に利用された研究成果（論文）が存在していることなどが指摘されている。
- ④ 2020 年代に入ってから急速に普及した生成 AI は、論文執筆や研究評価のプロセスに大きな影響を与えている。生成 AI はこれらを効率化する一方、その出力の正確性は保証されなため、生成 AI を利用して執筆された質の低い、あるいは誤りを含む論文の増加が懸念されている。また、生成 AI を悪用して作成された偽の論文が出回るなどの事例もある。
- ⑤ 科学研究の将来像として、研究プロセス全体を AI が一貫して行う「科学研究の自動化」が想定されている。実際に、AI 開発スタートアップが、仮説立案から論文執筆に至る一連のプロセスの自動化に成功した事例が報告されている。また、日本、米国、英国においては、政府の研究開発プログラムや政府系研究機関のプロジェクトにおいて、科学研究の自動化を目指す取組が進められている。
- ⑥ 科学研究の自動化は、研究の多様性の喪失や、人間による理解を目的としない科学の主流化につながり得る。その結果として、社会における科学の価値や位置付けが変容する可能性も指摘されている。科学研究における AI の利用がますます拡大していくことが予想される中、将来の科学の在り方について、社会的な議論が求められる。

はじめに

近年、科学研究において AI（Artificial Intelligence: 人工知能）の利用が拡大している。科学研究に AI を利用する試みは、AI 研究の初期である 1950 年代から行われており、2010 年代のディープラーニングの台頭や、2020 年代の生成 AI の普及を契機として、様々な研究分野において AI の利用が加速している。

この取組は「AI for Science」と呼ばれ世界的な潮流となっている。新たな科学的知見の獲得が難しくなっているとされる中⁽¹⁾、AI の活用による研究の効率化や、人間の認知能力の限界を超えた科学的発見が期待されている。さらに、研究者をサポートするツールとしての AI にとどまらず、AI が一連の研究プロセスを自動的に行う「科学研究の自動化」も想定されている。

本稿では、科学研究における AI 利用の経緯と現状について整理した上で、AI を利用して行われる科学研究の将来を展望する。

I AI の歴史と科学研究における AI

AI は、人間等が行う知的な活動をコンピューターで再現する技術である⁽²⁾。この技術は、過去にブームと停滞期を繰り返しながら発展してきた。本章では、AI の発展の歴史と科学研究における AI 利用の現状を概観する。

1 AI の歴史

「人工知能」という用語が使われ始めた 1950 年代後半から 1960 年代までの時期は「第 1 次 AI ブーム」と呼ばれる。この時期には、迷路やパズルのような、ルールが明確に定義された比較的単純な問題において最適な解を見つける推論や探索の手法が主に研究された。しかし、実用的な問題が解けるシステムの実現には至らず、1970 年代に入るとブームは冷め、AI 研究は冬の時代を経験することとなった⁽³⁾。

1980 年代に入ると、特定分野の専門知識を取り込んでその分野の専門家のようにふるまう「エキスパートシステム」と呼ばれるプログラムの開発が活発化した。知識をコンピューターで扱う研究が発展したこの時期は「第 2 次 AI ブーム」と呼ばれる。しかし、専門知識をコンピューターが処理できる形式で記述し、維持管理する難しさが認識され、1990 年代には、AI 研究は再び冬の時代を迎えた⁽⁴⁾。

一方、1990 年代から 2000 年代にかけては、インターネットの普及により大量のデータが流通するようになった。こうした大量のデータからパターンや関連性を学習させたプログラム（AI モデル）によってデータの分類や予測を行う機械学習の技術が発展し、実用化が進んだ⁽⁵⁾。

* 本稿のインターネット情報の最終アクセス日は、2025（令和 7）年 9 月 19 日である。

(1) David Matthews, “Are groundbreaking science discoveries becoming harder to find?” *Nature*, Vol.641, 22 May 2025, pp.837-838.

(2) 総務省編『令和 6 年版 情報通信白書—ICT 白書—』日経印刷, 2024, p.35. <<https://www.soumu.go.jp/johotsusintokei/whitepaper/ja/r06/pdf/00zentai.pdf>>

(3) 松尾豊『人工知能は人間を超えるか—ディープラーニングの先にあるもの—』KADOKAWA, 2015, p.60.

(4) 同上, pp.60-61.

(5) 同上

2010年代には、機械学習の一種であるディープラーニング（深層学習）が普及した。従来の機械学習では、データのどの部分に注目して学習するか（特徴量設計）は人間が行っていたが、ディープラーニングはこれを自動で行う点が画期的であった。2012年に開催された画像認識の国際的なコンペティション「ILSVRC」（ImageNet Large Scale Visual Recognition Challenge）において、ディープラーニングを利用した AI モデルが従来の機械学習を大幅に上回る性能を示したことが契機となって、ディープラーニングの技術が画像・音声の認識、機械翻訳、ウェブ上のサービスにおける推薦システムなど、幅広い用途で利用されるようになった。このような、機械学習をベースとする AI 技術の研究開発や社会実装の急速な進展は「第3次 AI ブーム」と呼ばれ、現在まで続いている⁽⁶⁾。

2020年代に入ると、ユーザーの指示に応じて様々なコンテンツを生成できる「生成 AI」が登場した。それまでの機械学習は、主にデータの分類や予測を行うものであったが、生成 AI によってテキスト、画像、音声などを自在に生成できるようになった。2022年に米国の非営利団体 OpenAI が発表した「ChatGPT」は、公開から2か月で1億ユーザーを獲得した。各企業も相次いで同様のサービスを展開しており、生成 AI のユーザーは急速に拡大している。このような状況から、現在は「第4次 AI ブーム」に入ったと言われることもある⁽⁷⁾。

2024年には、機械学習の基礎技術を築いた功績により、プリンストン大学名誉教授のジョン・ホップフィールド（John Hopfield）氏とトロント大学名誉教授のジェフリー・ヒントン（Geoffrey Hinton）氏に対してノーベル物理学賞が授与された⁽⁸⁾。

2 科学研究における AI

AI の発展に伴って、科学研究にも AI の技術が導入されてきた歴史がある。ここでは、科学研究における AI 利用の経緯をまとめつつ、関連する主な出来事を紹介する。

(1) 初期の試み

科学研究に AI を応用する試みは、第1次 AI ブームの頃から行われていた。有機化合物の化学構造を特定する手順を模倣する「DENDRAL」（1960年代）や、与えられた数値データから経験的に物理法則を発見する「BACON」（1970年代）などのシステムが先駆的な試みとして知られている。しかし、初期のシステムの多くは、既に人間が行った科学的発見を AI で追試することが目的であり、真に新しい発見を行うものではなかったとされる⁽⁹⁾。

(2) 機械学習・ディープラーニングの活用

2000年代に入ると、科学研究においても機械学習の利用が拡大した。特に、材料科学や生命科学の分野では、新物質の設計に機械学習を取り入れたマテリアルズインフォマティクスや、生物学と情報学が融合したバイオインフォマティクスと呼ばれる新しい分野が発展した⁽¹⁰⁾。

また、2010年代のディープラーニングの発展は、幅広い研究分野で AI の応用を促した。ディ-

(6) 同上, pp.61-62, 144-148; AI 白書編集委員会編『AI 白書 2023』角川アスキー総合研究所, 2023, pp.43-46.

(7) 総務省編 前掲注(2), pp.35, 37-39.

(8) 「物理から築いたニューラルネットワーク」『日経サイエンス』642号, 2024.12, pp.16-17.

(9) 高木志郎・丸山隆一「研究できる AI は科学をどう変えるか?」『日経サイエンス』644号, 2025.2, p.49; 呉羽真・久木田水生「第2編第1章 AI と科学研究」稲葉振一郎ほか編『人工知能と人間・社会』勁草書房, 2020, pp.124-125.

(10) 高木・丸山 同上, p.50.

プラーニングを応用した象徴的な例として、タンパク質の立体構造を予測するソフトウェア「AlphaFold2」が挙げられる。タンパク質の立体構造は、そのタンパク質がどのような機能を持つかを特定する上で重要な手がかりとなる。その知見は創薬や医学に応用され、効果的な薬の発見や病気の原因の解明につながる。従来の手法では、タンパク質の立体構造の特定に年単位の時間を要することがあったが、2020年に英国 Google DeepMind 社が発表した AlphaFold2 により、それらの立体構造が高々 1 時間程度で予測できるようになった⁽¹¹⁾。

2024 年、この功績により、Google DeepMind 社のジョン・ジャンパー（John Jumper）氏とデミス・ハサビス（Demis Hassabis）氏に対し、ノーベル化学賞が授与された⁽¹²⁾。

AlphaFold2 は無料で公開され、タンパク質研究のプラットフォームとして広く普及した。2024 年には、後継となる「AlphaFold3」がリリースされ、タンパク質と他の物質との相互作用を予測する機能などが追加された⁽¹³⁾。

(3) 科学研究における AI 関連論文の増加

2010 年代以降、AI 関連の用語を含む科学研究論文が世界的に増加しており、科学研究における AI の利用が拡大していることがうかがえる。例えば、生命科学・医学分野では、AI 関連の用語を含む論文数は、2011 年に 1,000 件程度だったが、2023 年には 20,000 件を超えており、この間におよそ 20 倍に増加している⁽¹⁴⁾。

化学・材料科学分野及び生命科学・医学分野の AI 関連論文について、2011～2023 年間の国別の累計論文数を下表に示した。いずれの分野においても中国及び米国の論文数が突出しており、日本は、韓国や欧州主要国等に次いで、それぞれ 8 位、9 位となっている⁽¹⁵⁾。

表 AI 関連の用語を含む論文の数（2011～2023 年累計、上位 10 か国・地域）

化学・材料科学分野			生命科学・医学分野		
1	中国	24,934	1	中国	26,591
2	米国	11,181	2	米国	25,904
3	韓国	6,477	3	イングランド	6,325
4	インド	3,914	4	ドイツ	6,087
5	ドイツ	3,301	5	インド	6,001
6	イングランド	3,230	6	韓国	4,210
7	サウジアラビア	3,194	7	カナダ	4,057
8	日本	2,829	8	イタリア	3,654
9	スペイン	2,483	9	日本	3,439
10	イタリア	2,211	10	オーストラリア	3,210

（注）学術論文データベース Web of Science において、「artificial intelligence」、「machine learning」等の AI 関連の用語をキーワードとして含む論文の件数を集計したもの。国際共著論文の場合は、共著者の所属機関が属する国にそれぞれ 1 件がカウントされる（整数カウント）。

（出典）『科学技術・イノベーション白書 令和 6 年版』文部科学省，2024，p.41. <https://www.mext.go.jp/content/2024_0611-ope_dev03-000036120-5.pdf> を基に筆者作成。

(11) 「タンパク質の変異に着目した構造予測手法」『日経サイエンス』642 号，2024.12，pp.18-19。

(12) 同上

(13) Ewen Callaway, “Major AlphaFold upgrade offers boost for drug discovery,” *Nature*, Vol.629, 16 May 2024, pp.509-510.

(14) 『科学技術・イノベーション白書 令和 6 年版』文部科学省，2024，p.41. <https://www.mext.go.jp/content/20240611-ope_dev03-000036120-5.pdf>

(15) 同上

(4) 生成 AI の登場と科学研究

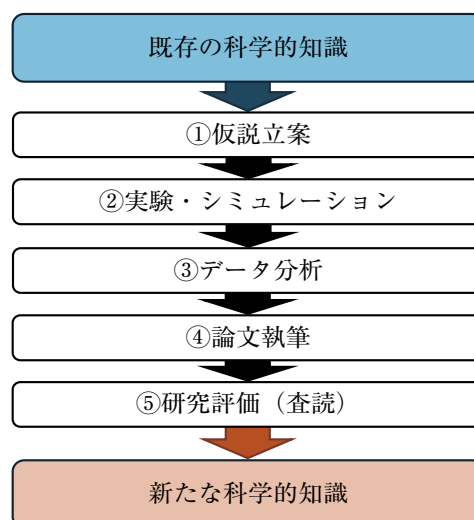
現在急速に普及している生成 AI は、科学研究においても、論文執筆などの場面で使われている⁽¹⁶⁾。学術出版社のワイリー社が人文社会科学を含む様々な分野の研究者約 5,000 人を対象に行った調査（2024 年 8～9 月実施）によると、57% の研究者が論文執筆の補助として AI を使った経験があると回答している⁽¹⁷⁾。生成 AI の利用の現状と課題については、次章で詳しく述べる。

Ⅱ 科学研究における AI 利用の可能性と課題

一般に科学研究は、既存の科学的知識を出発点として、新たな仮説を立案し、その仮説の妥当性を実験などの手段によって検証するプロセスである。検証の結果得られた知見は論文にまとめられ、専門家による研究評価（査読）を経て出版されることで学界に共有され、新たな科学的知識となる⁽¹⁸⁾。

本章では、科学研究のプロセスを、①仮説立案、②実験・シミュレーションによるデータの収集、③収集したデータの分析、④分析結果を基にした論文執筆、⑤外部の専門家による研究評価の 5 段階に分け（図）、それぞれの段階における AI 利用の可能性や課題について述べる。

図 科学研究のプロセス



（出典）筆者作成。

1 仮説立案における AI

仮説立案は、既存の科学的知識を基に、新たな現象や法則を表現する仮説を探索・生成するプロセスである。このプロセスに AI を活用することで、科学研究が効率化・高速化され、また、人間の認知能力の限界を超えた科学的発見が可能になるという期待もある。その一方で、仮説立案に AI を利用することのリスクも指摘されている。

(1) AI を利用した仮説立案による科学研究の拡張

仮説の基となるのは、先行研究として論文等の形で蓄積されてきた科学的知識である。しかし、日々多数の論文が発表される科学研究において、人間の研究者が全ての論文を読むことは現実的ではない。特に、感染症研究のような緊急性の高い課題においては、人間の探索能力の限界が研究を迅速に進める上での制約になる。さらに、人間が先行研究を基に新たな仮説の立案を行う場合、研究者の念頭にある仮説に合致する先行研究のデータだけに注目してしまうなどの認知バイアスが存在するため、候補となる仮説の探索範囲は限られたものになる。それに

(16) McKenzie Prillaman, “Is ChatGPT making scientists hyper-productive? The highs and lows of using AI,” *Nature*, Vol.627, 7 March 2024, p.16.

(17) “ExplanAItions: An AI study by Wiley,” p.25. Wiley Website <https://www.wiley.com/content/dam/wiley-dotcom/en/b2c/content-fragments/explanations-ai-report/pdfs/Wiley_ExplanAItions_AI_Study_February_2025.pdf>

(18) 佐倉統『科学とはなにか—新しい科学論、いま必要な三つの視点—』（ブルーバックス B-2158）講談社、2020, pp.50-51.

対し AI は、人間の能力の限界や認知バイアスによる制限を受けることなく、より広範囲の仮説の候補を網羅的に検討できると考えられている⁽¹⁹⁾。

また、従来の科学では、複雑な現象を扱う場合、その現象を単純な要素に分解してモデル化するという方法がとられてきた。しかし、生命科学や材料科学などの分野には、単純な要素に分解できない、あるいは、分解しても現象全体の正確なモデル化にはつながらない現象が存在すると言われている。このような現象に対しては、多数の変数で現象全体をモデル化できるディープラーニングの技術を応用することで、現象の複雑さを維持したままモデルを作ることができ、従来よりも正確に現象を捉えることが可能になると考えられている⁽²⁰⁾。

AI を利用した仮説立案の基盤となるのが、既存の科学的知識を幅広く学習した AI モデル（基盤モデル）である。科学研究向けの基盤モデルは、学習データに基づいて複雑な現象を予測することができ、これによる科学研究の加速が期待されている。我が国では、科学研究向けの基盤モデルを構築する取組として、2024（令和 6）年度から、国立研究開発法人理化学研究所において「科学研究基盤モデル開発プログラム」（AGIS）が開始されている⁽²¹⁾。

（2）仮説立案に AI を利用することのリスク

仮説立案における AI の利用については、AI モデルが出力できる仮説の範囲に関するリスクの指摘がある。AI モデルの構築に用いられているデータセットや学習方法の選択には、AI モデル作成者の価値観が反映されている。しかし、それをユーザーである研究者が認識していない場合、出力された結果が最良であるといった過信が研究者自身に生じ、その AI モデルが出力しなかった別の仮説の可能性を見落とすリスクがあるというものである⁽²²⁾。

また、AI モデルは、出力結果の理由付けの説明よりも、出力結果が与える予測の精度を重視して構築される傾向がある。その結果、AI モデルが誤りを含むものであったとしても、その原因を特定して対処することは難しく、さらには、AI モデルの誤りを認識することさえ困難になるという指摘もある⁽²³⁾。

このようなリスクは、AI を利用した科学研究が浸透し定着した場合に、科学研究の在り方を変えてしまう可能性がある。こうした点に関連する論点については次章第 2 節で述べる。

2 実験・シミュレーションにおける AI

立案した仮説の妥当性は実験により検証される。また、地球規模の気候現象のような、そもそも実験が不可能な現象の場合は、計算機を利用したシミュレーションによる検証が行われる場合もある。これらの検証においても、AI を活用する試みが進んでいる。

（1）AI・ロボットによる実験自動化の試み

科学研究における実験データは増大・複雑化しており、人手による実験の遂行が困難になり

(19) 『人工知能と科学—AI・データ駆動科学による発見と理解—戦略プロポーザル—』科学技術振興機構研究開発戦略センター、2021, pp.4-5. <<https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2021/SP/CRDS-FY2021-SP-03.pdf>>

(20) 同上, pp.5-6.

(21) 出村政彬・泰地真弘人「科学研究を加速する基盤モデル」『日経サイエンス』644 号, 2025.2, pp.42-47.

(22) Lisa Messeri and M. J. Crockett, “Artificial intelligence and illusions of understanding in scientific research,” *Nature*, Vol.627, 7 March 2024, p.54.

(23) *ibid.*

つつある。特に生命科学分野では、多くの研究者が大量の実験作業に拘束され、創造的な研究活動に時間を割けないという状況がある。また、実験結果が再現できない研究の存在や、捏造（ねつぞう）された実験データを含む研究の存在も問題となっている。AI・ロボットによる実験の自動化は、精密で迅速な動作による実験の高効率化に加え、実験プロセスの再現性を高めることが期待できるため、こうした問題の解決につながるとの期待がある⁽²⁴⁾。

生命科学分野での取組として、iPS 細胞⁽²⁵⁾を網膜の構成細胞の一種へ分化させる工程を自動で行う実験システムを開発した理化学研究所らによる例がある。従来の実験では、分化のための細胞培養の反応時間、試薬濃度、操作順序などの実験条件を人間の操作により調整する必要があり、膨大な試行錯誤を要していた。開発されたシステムは、高精度な動作が可能なヒト型ロボットを使用し、最適なパラメーターの探索を含む実験プロセスを、人間が介在することなく実行することに成功した⁽²⁶⁾。このほか、化学分野や材料科学分野においても、サンプルの合成や評価を含む実験プロセスの全体を AI・ロボットにより自動化する取組が行われている⁽²⁷⁾。

大規模な実験装置の制御に AI を応用した例もある。原子核同士が衝突して融合（核融合反応）する際に放出される大きなエネルギーを利用して発電を行う核融合炉の開発が世界的に進められている。その主な方式の一つである「トカマク方式」では、炉内の核融合反応を持続させるため、高温のプラズマ状態（原子核と電子が分離した状態）にある燃料をドーナツ状の磁場内に閉じ込める必要がある。このプラズマ状態の安定的な維持が核融合炉の実現における課題となっているが、機械学習の手法を活用してプラズマを自動的に制御する技術が近年開発され、核融合炉開発の加速に寄与するものとして期待されている⁽²⁸⁾。

(2) シミュレーションにおける AI

実験による検証が困難な現象を扱う場合は、シミュレーションが重要な役割を担う。例えば、地球の気候予測を行う場合、大気や海洋の状態を数式で表したモデルを作り、スーパーコンピュータを利用して大量の計算を行うことで将来の気候の状態を予測することができる。しかし、そうした手法による予測は、長時間の計算処理と大量の電力消費を伴う。そこで、従来のシミュレーションを AI で模倣するシステムを開発する試みが様々な分野において行われている⁽²⁹⁾。

AI モデルで気候予測を行う場合は、従来のシミュレーションの出力を訓練データとして学習し、訓練データには含まれない未知の気候シナリオの予測を行う。AI モデルは、膨大な計算を行うことなく、短時間・低消費電力で従来のシミュレーションに近い予測結果を生み出すことができ、予測に要する時間が大幅に短縮される。複数の気候シナリオの検討が可能になる

(24) 谷内江望「長鎖 DNA 合成のオートメーション化による生命科学の未来」夏目徹編『あなたのラボに AI（人工知能）×ロボットがやってくる—研究に生産性と創造性をもたらすテクノロジー—』羊土社、2017、pp.80-81。

(25) 人間の皮膚や血液などの体細胞に、ごく少数の因子を導入し、培養することによって、様々な組織や臓器の細胞に分化する能力とほぼ無限に増殖する能力をもつ多能性幹細胞。「iPS 細胞とは？」京都大学 iPS 細胞研究所 CiRA ウェブサイト <https://www.cira.kyoto-u.ac.jp/j/faq/faq_ips.html>

(26) 理化学研究所ほか「再生医療用細胞レシピをロボットと AI が自律的に試行錯誤—ロボット・AI・人間の協働は新しいステージへ—」2022.6.28. <https://www.riken.jp/press/2022/20220628_2/>

(27) 『人工知能と科学—AI・データ駆動科学による発見と理解—戦略プロポーザル—』前掲注(19)、p.8。文部科学省は、ロボットや AI を活用して実験を自動的に行う「大規模集積研究基盤施設」を、全国の研究者が共用できる施設として整備する方針とされる。「ロボ・AI で実験自動化 研究拠点整備へ」『読売新聞』2025.8.20、夕刊。

(28) Jonas Degraeve et al., “Magnetic control of tokamak plasmas through deep reinforcement learning,” *Nature*, Vol.602, 17 February 2022, pp.414-419. <<https://doi.org/10.1038/s41586-021-04301-9>>

(29) Hanchen Wang et al., “Scientific discovery in the age of artificial intelligence,” *Nature*, Vol.620, 3 August 2023, pp.53-55; Carissa Wong, “How AI is improving climate forecasts,” *Nature*, Vol.628, 25 April 2024, pp.710-712.

ため、政策立案における活用も期待される。また、従来のシミュレーションと AI モデルを組み合わせたハイブリッドモデルを作成するアプローチもあり、従来は予測が難しかった河川流量や積雪量のような現象の予測がより正確にできるようになったとの研究結果もある。ただし、AI モデルによるシミュレーションの模倣は、その結果が出力された理由の解釈が困難なため（ブラックボックス問題）、AI モデルの信頼性をいかに高めるかが課題となる⁽³⁰⁾。

3 実験データの分析における AI

実験装置の高度化に伴い、収集されるデータは大規模かつ複雑になっている。このようなデータを人間が処理することは困難であり、大量のデータを短時間で処理することが可能なディープラーニングをはじめとする AI の技術を利用した手法が重要なツールとなっている。

(1) AI を利用した実験データの分析

粒子加速器を利用して行う素粒子物理学の実験では、毎秒 100 テラバイトを超える巨大なデータが生成されるが、これらのデータのうち、科学的に意味のあるデータはごく一部とされる。データの伝送や保存容量の制約から、これらのデータに含まれる意味のあるデータをリアルタイムで検出・保存しつつ、不要なデータを破棄する必要がある。近年のディープラーニングの技術により、そのような高度な識別を行うデータ処理が実現し、利用されている⁽³¹⁾。

生命科学・医学分野では、実験画像や医療画像の解析において AI が重要な役割を担っている。ディープラーニングを基礎とする画像処理や画像認識の技術は、画像の解像度向上や、ノイズ除去といったデータの改良に利用されているほか、生体イメージング画像の解析や医療画像を用いた診断システムなどに応用されている。AI による画像診断支援システムには、医療機器として承認されているものもある⁽³²⁾。

天文学分野では、画像データを基に天体現象を分類する処理は、従来は人間が行っていたが、大量の画像を学習させた AI によって、効率的かつ人間の経験や主観に左右されずに分類を行う技術が実現している。観測データから未知の天体や現象を検出する能力においては、AI は人間の能力をはるかに上回るとも言われている⁽³³⁾。

(2) AI 利用の課題

近年、専門家でなくても利用できる AI ツール（AI を利用したソフトウェアやサービス）が普及しており、様々な研究分野において AI によるデータ解析が利用されている。しかし、そのような研究の一部には、AI ツールが誤って適用されているものがあるとされる。

ある調査は、AI を利用して予測を行っている 17 の研究分野の 294 本の論文において、本来の AI の予測性能よりも誇張された性能が示されている可能性があることを指摘している⁽³⁴⁾。これは、予測を行う AI モデルの学習手順に不備があったためとされる。例えば、AI モデルは学習用データを用いてトレーニングされた後、テスト用データを用いてその性能が評価される

(30) Wong, *ibid.*

(31) Wang et al., *op.cit.*(29), pp.48-49.

(32) *ibid.*, p.50; 『人工知能と科学—AI・データ駆動科学による発見と理解—戦略プロポーザル—』前掲注(19), p.6.

(33) 藤田真司「天文学と AI」『人工知能』230 号, 2025.3, pp.160-165.

(34) Sayash Kapoor and Arvind Narayanan, "Leakage and the reproducibility crisis in machine-learning-based science," *Patterns*, Vol.4 Issue 9, September 8, 2023, p.2. <<https://doi.org/10.1016/j.patter.2023.100804>>

が、これら 2 種類のデータが適切に分離されていないと、AI モデルにテスト用データの情報が漏洩（ろうえい）してしまう。この場合、AI モデルはテスト用データの情報を事前に学習した上で、同じテスト用データで性能が評価されることになるため、性能が過大評価されることになる。このような、AI モデルに誤った学習手法が適用された研究の存在は、その研究自体が再現性を持たないという問題に加え、他の論文による引用を通じて分野内にその負の影響が広がるという問題につながる⁽³⁵⁾。

AI ツールに関するこうした問題を防ぐために研究者に求められることとして、AI ツールの限界の理解、研究成果の批判的な検証、専門知識を持つ研究者による知識の伝達、分析手順の標準化、使用した計算環境の再現性の確保が挙げられている⁽³⁶⁾。

4 論文執筆における AI

実験等による検証を経て、当初に立てた仮説の正当性が確かめられれば、その知見は論文にまとめられる。生成 AI の登場は、この論文執筆のプロセスに大きな影響を与えている。

(1) 生成 AI による論文執筆の効率化と課題

生成 AI を論文執筆に利用する主な利点の一つが、英語で書かれることが一般的な学術論文の執筆において、英語を母語としない研究者の助けになるという点である。特に、キャリアの浅い研究者の場合、英語を母語としない研究者は英語を母語とする研究者と比較して論文執筆に多くの時間を要し、文章上の問題により論文が却下されることが多いとされる。生成 AI の利用は、この点において、研究者間の公平性を向上させると期待されている⁽³⁷⁾。

一方で、生成 AI を利用した論文執筆については、複数の面から課題の指摘がある。まず、生成 AI は、事前に学習した確率分布に従って文字列を出力する仕組みであるため、生成されたテキストに含まれる情報の正確性は必ずしも保証されない。そのため、論文執筆における生成 AI の利用拡大は、質の低い論文や誤りを含む論文の増加につながる可能性がある⁽³⁸⁾。また、学術論文自体の本数の増加は以前から課題となっており、編集者・査読者の負担増加や、意味のある研究成果の発見が困難になるといった問題が指摘される中、生成 AI によってこの傾向が更に加速することが懸念されている⁽³⁹⁾。さらに、生成 AI のシステムに関わる懸念として、生成 AI の構築に用いられた学習データのバイアスの問題や、データ取得に係る同意の問題、著作権の問題も指摘されている⁽⁴⁰⁾。

(2) 学術誌等の対応

研究者の論文執筆における生成 AI の利用については、各学術誌がルールを定めている。例えば、Nature 誌などの学術誌を発行しているシュプリンガーネイチャー社は、編集ポリシーにおいて、論文執筆に生成 AI を利用した場合は、その旨を論文中に記載する必要があるとしている。ただし、文章の読みやすさの改善や、文法・スペル等の修正のために生成 AI を利用す

(35) *ibid.*, pp.4-5.

(36) *ibid.*, pp.7-9.

(37) Gemma Conroy, “How Generative AI could disrupt scientific publishing,” *Nature*, Vol.622, 12 October 2023, p.235.

(38) *ibid.*

(39) Prillaman, *op.cit.*(16), pp.16-17.

(40) Conroy, *op.cit.*(37), p.235.

る場合は記載の必要はないとされる。また、生成 AI を利用して生成された画像は原則として掲載できない。なお、生成 AI 自体は論文著者としての責任を負うことができないため、論文の著者として認められていない⁽⁴¹⁾。

機械学習分野の主要な国際学会の一つである ICML (International Conference on Machine Learning) は、同学会で発表される論文について、執筆や研究支援のための生成 AI 等の AI ツールの利用は可能としつつ、それらによって作成されたものを含む全ての要素について、著者が責任を持つ必要があるとしている。また、シュプリンガーネイチャーと同様、生成 AI 自体を論文の著者として認めていない⁽⁴²⁾。

(3) 生成 AI を利用した偽の論文作成

生成 AI を悪用した論文作成の問題もある。論文著者の地位の販売をビジネスとして行う「ペーパーミル」(paper mill) と呼ばれる企業の存在が学術出版において問題となっている。生成 AI によって学術論文の体裁を備えた偽物の論文が簡単に作成できるようになったため、この問題が更に悪化するとの指摘がある⁽⁴³⁾。

また、論文の著者が支払う掲載料収入を目的に、十分な査読を行わずに論文を掲載する学術誌は「ハゲタカジャーナル」と呼ばれており、生成 AI で作成されたと見られる偽の論文に、実在の研究者の名前を無断で使用して掲載している事例も発生している。このケースでは、ハゲタカジャーナルが自らの権威付けのために、実在の研究者名を著者名に使用した偽の論文を生成して掲載したと見られている⁽⁴⁴⁾。

5 研究評価（査読等）における AI

研究成果をまとめた論文は、学術誌に掲載され、公表されることでその知識が学界で共有される。学術誌においては、投稿された論文の掲載可否を判断するために、同じ分野の専門家による査読（ピアレビュー）を行うことが一般的である。査読者は、学術誌の編集部からの依頼を受けて査読を行い、その結果を査読レポートにまとめて報告する。この査読プロセスにおいても生成 AI の利用が増加しているとの分析がある⁽⁴⁵⁾。

(1) 論文査読における AI 利用

現在、主要な学術誌の出版社は、査読者に対し、査読対象の論文の原稿データをオンラインの生成 AI プラットフォームへアップロードしないよう求めている。それらのデータは未公開の研究成果を含む機密情報であり、アップロードされた場合に、それらの機密情報が生成 AI の学習データにフィードバックされる懸念があるためである⁽⁴⁶⁾。また、Science 誌を発行する米国科学振興協会（AAAS）のように、査読レポートの作成における AI ツールの利用を禁止

(41) “Artificial Intelligence (AI).” Nature Portfolio Website <<https://www.nature.com/nature-portfolio/editorial-policies/ai>>

(42) “ICML 2025 Call For Papers.” ICML Website <<https://icml.cc/Conferences/2025/CallForPapers>>

(43) Conroy, *op.cit.*(37), p.235.

(44) 「生成 AI で偽論文」『毎日新聞』2025.1.14.

(45) Dalmeet Singh Chawla, “Is ChatGPT corrupting peer review? Telltale words hint at AI use,” *Nature*, Vol.628, 18 April 2024, pp.483-484. コンピュータ科学分野の主要な国際学会の査読レポートを対象に、生成 AI が頻繁に使用する用語の頻度を分析することにより、生成 AI が利用された可能性が高い査読レポートの割合を推定した。

(46) Conroy, *op.cit.*(37), p.236. 一部の出版社は、情報セキュリティが確保された AI ツールを査読者に提供することを検討している。“Artificial Intelligence (AI),” *op.cit.*(41)

している学術誌もある⁽⁴⁷⁾。

研究者に対して行われた調査によると、現時点では、生成 AI が人間の査読者よりも優れていると考える研究者は少数であるが、今後数年のうちに、AI が人間を上回る査読の能力を獲得するとの見方がある。また、これまで人間が行ってきた査読は非効率的であり、不正やバイアスへの対処が十分ではなかったが、AI によってこれらの面が改善されるとの期待もある⁽⁴⁸⁾。

(2) 論文査読以外の研究評価における AI 利用

ピアレビューによる研究評価は、論文査読以外でも、研究助成金の審査や公的な研究業績評価においても行われている。例えば、英国では、高等教育機関の研究業績をピアレビューによって評価し、その結果を公的資金の配分に反映させる国家的な研究評価制度「REF」(Research Excellence Framework) が 7 ～ 8 年ごとに実施されているが、非常に多くのコストと時間を要し、評価者として参加する研究者にとっても大きな負担となっている。このような大規模な評価制度は、AI を活用した評価の自動化によって大きく効率化できるとする指摘がある⁽⁴⁹⁾。

実際に研究評価のプロセスに AI を利用している例として、オーストラリアの研究資金配分機関である国立保健医療研究評議会 (NHMRC) は、研究助成金の審査を担当する査読者を選定する際に AI を利用している。ただし、研究評価に直接関わる部分では AI は利用していない⁽⁵⁰⁾。

なお、我が国の主要な研究助成金の一つである科学研究費助成事業 (科研費) では、ピアレビューによる審査において、個人情報や機密情報の漏洩を防止する観点から、研究計画を含む審査関係資料の内容を生成 AI に入力することを禁じている⁽⁵¹⁾。

(3) 課題

こうした期待がある一方で、研究評価への AI の利用には課題がある。AI を利用した研究評価のレポートには、誤った情報が含まれる可能性や、重要な情報が見落とされるおそれがあるが、そのようなレポートを基に判断された論文掲載や助成金採択等の決定について、誰がどのように責任を負うかが問題になる⁽⁵²⁾。研究評価に AI を導入する場合は、利用された AI についての情報や、レポートにおいて AI が利用されている箇所や利用方法を明示するなど、厳格な透明性の基準が必要であると指摘されている⁽⁵³⁾。

Ⅲ 科学の未来—科学研究の自動化—

前章では、AI を科学研究の各プロセスにおいて利用することの利点や課題について述べた

(47) “Science Journals: Editorial Policies.” AAAS Website <<https://www.science.org/content/page/science-journals-editorial-policies>>

(48) Miryam Naddaf, “Will AI take over peer review?” *Nature*, Vol.639, 27 March 2025, pp.853-854.

(49) Jackson Ryan, “Must peer reviewers be human to assess quality?” *Nature*, Vol.633, 19 September 2024, p.S20. 2021 年に実施された REF では、1,000 人以上の研究者が参加して約半年間をかけて評価が行われ、要したコストは約 4 億 7100 万ポンドに上ったとされている。

(50) *ibid.*

(51) 独立行政法人日本学術振興会「令和 7 (2025) 年度科学研究費助成事業 基盤研究 (B・C) (応募区分「一般」)、若手研究 審査の手引」2024.10, p.2. <https://www.jsps.go.jp/file/storage/kaken_0103_r7_g_3755/r07_tebiki04_kibanbc_wakate.pdf>

(52) Abeba Birhane et al., “Science in the age of large language models,” *Nature Reviews physics*, Vol.5 No.5, May 2023, pp.277-280.

(53) Naddaf, *op.cit.*(48), p.854.

が、科学における AI の将来像としては、一連の研究プロセスを AI が一貫して行う「科学研究の自動化」も想定されている。本章では、科学研究の自動化の実現を目指す取組の状況と、それによって提起される論点を紹介する。

1 科学研究の自動化の試み

論文執筆までを含む科学研究プロセスの全体を自動化する試みは、既に行われている例がある。また、各国の公的なプロジェクトにおいても、科学研究プロセス全体の自動化を長期的な目標とする研究開発プログラムが進行している。

(1) 科学研究プロセス全体の自動化の試み

科学研究の自動化を目指す研究は各国で行われている。我が国において、仮説立案から論文執筆に至る一連の研究プロセスの自動化に成功したとされる例として、東京に拠点を置く AI 開発スタートアップ Sakana AI が開発し、2024 年 8 月に発表した「AI サイエнтиスト」(The AI Scientist) が挙げられる。これは、機械学習分野において、研究アイデアの発案、実験（コンピュータ上でのプログラムの実行による検証）の設計・実施、実験結果の収集・分析、論文執筆を自動で行った上で、自ら査読を行った⁽⁵⁴⁾。これにより得られた成果自体は、学術的な意義が認められたものではないとされるが、研究プロセス全体の自動化を実現したことで研究者の注目を集めた⁽⁵⁵⁾。

さらに、2025 年 3 月には、「AI サイエнтиスト」の改良版によって作成された論文が、機械学習分野の主要な国際学会の一つである ICLR (International Conference on Learning Representations) のワークショップに提出され、査読において採択水準を上回るスコアを獲得したことが発表された⁽⁵⁶⁾。完全に AI で生成された論文が標準的な科学的査読プロセスを通過する水準に達したのは世界で初めてとされる。このような国際学会のワークショップの論文採択率は 60 ～ 70% 程度、本会議の論文採択率は 20 ～ 30% 程度とされ、Sakana AI は、国際学会の本会議の基準を満たすレベルの論文の生成が今後の課題であるとしている⁽⁵⁷⁾。

(2) 各国政府の取組

科学研究の自動化のための研究開発は、政府が推進する研究開発プログラムや、政府系研究機関においても進められている。ここでは、日本、米国、英国における例を紹介する。

(i) 日本

日本では、内閣府のムーンショット型研究開発制度⁽⁵⁸⁾において、「2030 年までに、特定の問

(54) 「「AI サイエнтиスト」: AI が自ら研究する時代へ」2024.8.13. Sakana AI ウェブサイト <<https://sakana.ai/ai-scientist-jp/>>

(55) 高木・丸山 前掲注(9), pp.49, 51.

(56) ICLR ワークショップ関係者の協力を得て、査読者には提出された論文のうちどの論文が AI によって生成されたものであるか知らせずに査読が行われた。また、AI によって生成された論文は、主催者側との事前の合意に基づいて、ワークショップで公開される前に撤回された。「世界初、100%AI 生成の論文が査読通過「AI サイエнтиスト」が達成」2025.3.13. Sakana AI ウェブサイト <<https://sakana.ai/ai-scientist-first-publication-jp/>>

(57) 同上

(58) 困難だが実現すれば大きなインパクトが期待される社会課題等について国が「ムーンショット目標」を策定し、研究開発を推進する仕組み。各目標においてプロジェクトを統括する PD (プロジェクトディレクター) の下に

題に対して自動的に科学的原理・解法の発見を目指す AI ロボットを開発する」、そして、「2050 年までに、自然科学の領域において、自ら思考・行動し、自動的に科学的原理・解法の発見を目指す AI ロボットシステムを開発する」との目標が設定されている⁽⁵⁹⁾。人間を超える身体能力と自律的に研究を行う頭脳を併せ持つ AI ロボットの開発⁽⁶⁰⁾や、人間との対話に基づいて自動的に仮説生成と検証実験を繰り返すことができる AI ロボットの開発⁽⁶¹⁾が、国内の大学や企業等の研究機関によって行われている。

(ii) 米国

米国では、エネルギー省傘下のアルゴンヌ国立研究所において、「自律的発見」(Autonomous Discovery) と呼ぶ研究開発プログラムが実施されている。このプログラムでは、特にロボット技術を活用した実験科学の自動化に取り組んでおり、実験室の自動化(実験台への固定式ロボットの設置)、科学者の自動化(実験室への人間型ロボットの導入)、科学研究プロセスの自動化(実験の実行から、結果評価、パターン認識、次の実験の計画までを自動で行う)を目標に掲げている⁽⁶²⁾。なお、アルゴンヌ国立研究所は、2024 年 4 月、日本の理化学研究所との間で、AI for Science に関する覚書を締結した。この覚書において、両者は、計算資源や研究用データセットの相互利用などを行うことを定めた⁽⁶³⁾。

このほか、同じくエネルギー省傘下のローレンス・リバモア国立研究所では、新合金の発見を目的とする自動実験システム「APEX」⁽⁶⁴⁾が、ローレンス・バークレー国立研究所では、無機粉体を用いた新材料の発見を目的とする自動実験システム「A-Lab」⁽⁶⁵⁾が開発されている。

(iii) 英国

英国のデータサイエンス・AI の国立研究機関であるアラン・チューリング研究所は、「2050 年までに、ノーベル賞級の科学的発見を高い自律性によって行うことができる最高レベルの人間の科学者に匹敵し、あるいは、それを上回る AI システムを開発する」とする目標⁽⁶⁶⁾を掲げる「チューリング AI サイエнтиストグランドチャレンジ」を 2021 年 1 月に開始した。日本や米国が政府主導の研究開発プログラムを推進しているのに対し、このプログラムでは、国際的な科学者コミュニティによる協力を英国が主導することが想定されている。研究分野とし

国内外のトップレベルの研究者が PM (プロジェクトマネージャー) として採択され、研究開発が行われる。「ムーンショット型研究開発制度とは」内閣府ウェブサイト <<https://www8.cao.go.jp/cstp/moonshot/system.html>>

(59) 文部科学省「ムーンショット目標 3 「2050 年までに、AI とロボットの共進化により、自ら学習・行動し人と共生するロボットを実現」 研究開発構想」2020.2. 内閣府ウェブサイト <<https://www8.cao.go.jp/cstp/moonshot/concept3.pdf>>

(60) 「人と AI ロボットの創造的共進化によるサイエンス開拓」科学技術振興機構ウェブサイト <https://www.jst.go.jp/moonshot/program/goal3/files/33_harada.pdf>

(61) 「人と融和して知の創造・越境をする AI ロボット」科学技術振興機構ウェブサイト <https://www.jst.go.jp/moonshot/program/goal3/files/36_ushiku.pdf>

(62) “Autonomous Discovery.” Argonne National Laboratory Website <<https://www.anl.gov/autonomous-discovery>>

(63) 「理研とアルゴンヌ国立研究所が AI for Science に関する覚書を締結」2024.4.11. 理化学研究所ウェブサイト <https://www.riken.jp/pr/news/2024/20240411_1/index.html>

(64) Shelby Conn, “Self-driving lab to automate the discovery of novel alloys,” July 21, 2025. Lawrence Livermore National Laboratory Website <<https://www.llnl.gov/article/53131/self-driving-lab-automate-discovery-novel-alloys>>

(65) Lauren Biron, “Meet the Autonomous Lab of the Future,” April 17, 2023. Lawrence Berkeley National Laboratory Website <<https://newscenter.lbl.gov/2023/04/17/meet-the-autonomous-lab-of-the-future/>>

(66) この目標は、2016 年に株式会社ソニーコンピュータサイエンス研究所代表取締役社長の北野宏明氏が提唱した目標が基になっている。北野宏明「人工知能がノーベル賞を獲る日、そして人類の未来—究極のグランドチャレンジがもたらすもの—」『人工知能』176 号、2016.3, pp.275-286. <https://doi.org/10.11517/jjsai.31.2_275>

ては、生物医学、環境科学、材料科学に焦点を当てている⁽⁶⁷⁾。

2 科学研究の自動化の論点

AI による科学研究の自動化は、研究の効率化や高度化に寄与すると期待される一方で、科学についての価値観や科学の社会位置付けを変容させる可能性があるとの見方もある。ここでは、科学研究の自動化をめぐる指摘されている幾つかの論点を挙げる。

(1) 科学的モノカルチャー化

AI を利用した科学研究は、研究の質と量を向上させることが期待されるため、AI に依存した研究は今後急激に増加する可能性がある。そうして、AI を利用した科学研究が支配的な地位を占めるようになると、「科学的モノカルチャー」が進行するおそれがあると指摘されている。科学的モノカルチャーとは、特定の研究の進め方が支配的となって研究の多様性が失われた状態のことを指す。科学的モノカルチャーが進行すると、我々の科学は、誤りや視点の偏りに対して脆弱（ぜいじゃく）になる。また、イノベーションの機会の逸失にもつながるとされる⁽⁶⁸⁾。

(2) 人間の認知能力の限界を超えた科学の出現

AI により自動化された研究は、人間の認知能力の限界を超えたものになる可能性がある。自動化された科学においては、AI は結果を与えるがその判断過程を説明しない「ブラックボックス」となるため、人間は世界の現象についての理解を得る機会を失ってしまう。現象についての理解は、それ自体に人間の知的好奇心を満たすという精神文化としての価値があるだけでなく、現象を予測し制御する際に役立つという実用的価値もある⁽⁶⁹⁾。しかし、科学研究における AI の浸透によって、人間による理解を目的としない科学が主流になる可能性がある⁽⁷⁰⁾。

(3) AI 悪用のリスク

従来は専門知識がなければ実施できなかった科学研究が、AI を利用したシステムによって容易に行えるようになった場合、悪意のある利用者が危険な物質を開発するためにそれらを利用するなどのリスクも想定される。このような AI 悪用のリスクに対しては、政府による規制の必要性が指摘される一方、規制により正当な研究が制限される可能性があるとの懸念もある⁽⁷¹⁾。

(4) 研究成果の帰属

研究プロセスの自動化によって人間が研究に介在しなくなった場合、研究の主体が曖昧になるため、得られた研究成果の権利や責任が誰に属するのかが問題となり得る。前章において、主要な学術誌や学会は AI を研究論文の著者として認めていないことを述べたが、研究成果の帰属の問題は、現行のルールでは扱えない問題を含んでおり、今後、社会的な議論が必要にな

(67) “The Turing AI scientist grand challenge.” Alan Turing Institute Website <<https://www.turing.ac.uk/research/research-projects/turing-ai-scientist-grand-challenge>>

(68) Messeri and Crockett, *op.cit.*(22), pp.49-58.

(69) 例えば、「なぜ橋が崩壊したか」についての理解は、「どうすれば壊れない橋を作れるか」を理解することにつながる。呉羽・久木田 前掲注(9), p.152.

(70) 同上, pp.132-133, 150-156.

(71) Ewen Callaway, “Scientists lay out safety guidelines for AI-designed proteins,” *Nature*, Vol.627, 21 March 2024, p.478.

ると見込まれる⁽⁷²⁾。

おわりに

本稿では、科学研究の各プロセスにおける AI の利用について、長短両面から現状を整理した。科学研究における AI の利用は発展の途上にあり、AI 技術の高度化とあいまって、今後ますます拡大していくことが予想される。

そうした中では、AI が個々の研究の役に立つかという視点だけでなく、ブラックボックスである AI が、現象の説明を目的とする自然科学の進歩に貢献するかという視点⁽⁷³⁾や、AI が科学研究の基盤となった場合に、科学研究やそれを担う研究者の役割がどのように変化するかという視点⁽⁷⁴⁾でも考えることが必要になるであろう。

(なかむら しんや)

(72) 呉羽・久木田 前掲注(9), pp.131-132, 157-159.

(73) Arvind Narayanan and Sayash Kapoor, “Why an overreliance on AI-driven modelling is bad for science,” *Nature*, Vol.640, 10 April 2025, pp.312-314.

(74) 呉羽・久木田 前掲注(9), pp.160-163.