

AIエージェント時代のインフラ革命

AIに、実行力を。

NexaScience 代表取締役 牛久 祥孝

2026年4月15日 / AI Table



AIの実行力?

Agenda

AI for Scienceで創業したからこそ気づいた**AIの実行力の壁**とは

1

AI for Science

2

AIエージェントの
現在と実行力の壁

3

実行力の壁を
越える方法

4

展望

1

AI for Science

1

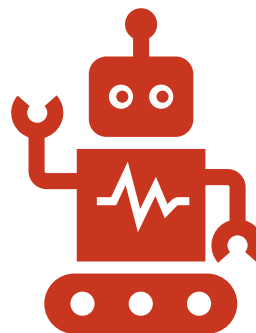
AI for Science

AI for Science とは



従来の科学研究

人間が仮説を立てる
人間が実験を設計
人間がデータを解析



AI for Science

AIが仮説を生成
AIが実験を提案
AIが大規模データを解析



企業の取り組み

Google DeepMindの研究成果であるAlphaFoldは2024年に**ノーベル賞を受賞**
AI・AIエージェントの性能向上により**科学研究自体の自律化**が現実的になった



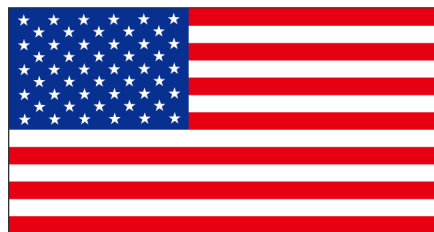
Google Impact Challenge



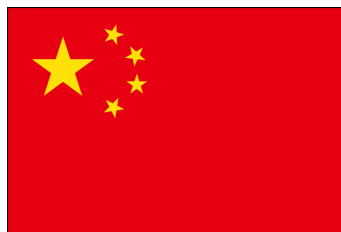
OpenAI for Science

政府の取り組み

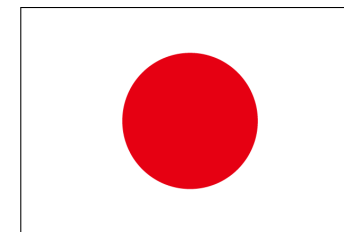
各国政府もAI×科学を**国家安全保障・産業競争力の要**と位置づけ
大規模な公的投資に踏み切っている



Genesis Mission



次世代AI研究計画



科学技術・イノベーション
基本計画

ChemLLM発展と評価、及び新物質生成手法に関する研究報告

1. AlphaFold後のChemLLM技術的発展の概要

概要

AlphaFoldの登場以降、化学分子と生成AI（People Interacting with Graph Machines）の融合が進み、特にChemLLM分野での大きな技術的進展が見られます。これにより、分子構造予測と合成が従来の手法よりも高精度かつ効率的に行えるようになりました。以下では、AlphaFoldの影響を受けたChemLLM技術の進化を、特に生成モデル、機械学習アーキテクチャの進化、化学情報学の進展という観点から紹介します。

分子生成モデルの進化

最近の研究では、深層生成モデルが分子設計に多用され、特にTransformer構造の取り入れにより予測精度が大幅に向上しています。たとえば、Directed Message Passingによる分子特性推定では、科学者たちが分子構造の細かい特性をベースにしたデータセットを用いて高精度の化学生成モデルを構築しています[44]。さらに、独自の志向性分子グラフニューラルネットワーク(E(3) Equivariant Networks)が化学空間の効率的な探索を可能にしています[47]。

機械学習アーキテクチャの進化

機械学習モデルに関しては、特に三次元分子構造を考慮に入れたEquivariantネットワークや、データ拡張技術を組み合わせたエッジケース処理促進のモデルが開発されています。例えば、Multi-Layer Perceptron (MLP)を活用したDirected Graph Attention Networks (D-GATs)では、方向特性を考慮したメッセージパッシングにより、特性予測における精度の向上が確認されています[44]。また、TensorNetによるカルテシアンテンソル表現の活用は、より高度な対称性を保持しつつ、効率を大幅に向上させています[46]。

化学情報学の進展

化学反応の理論理解の深化を目指し、生成モデルを駆使したアプローチが活発です。特に合成可能な新規分子の検出に重点が置かれ、Reaction PredictionやRetrosynthesisの分野での技術応用が進んでいます[40]。これらの技術的な発展は、新薬の発見や材料科学分野での応用だけでなく、情報学としての新たな知見を提供しています。

2. ChemLLMの評価用ベンチマーク

メソッド	データセット	評価基準	比較手法	提案された手法のパフォーマンス
------	--------	------	------	-----------------

Report Information

User's request:

AlphaFoldの登場以降のC

Request Date: 03/01/25

Table of Content

Report Content

ChemLLM発展と評価、及び新物質生成手法に関する研究報告

1. AlphaFold後のChemLLM技術的発展の概要

概要

2. ChemLLMの評価用ベンチマーク

3. ChemLLMを利用した新物質の生成事例

4. 技術的発展の問題点と解決策

5. ChemLLMの背景にある化学の課題

背景

技術への挑戦


6. 将来の展望

量子コンピューティングとChemLLM

ロボット実験自動化の未来

Technical Terms

References with Summary Links



**AI for Scienceの高度な自動化を
ビジネスへ**

内閣府ムーンショット型開発事業



株式会社NexaScience創業





2

AIエージェントの現在と実行力の壁

AIエージェント市場の急成長

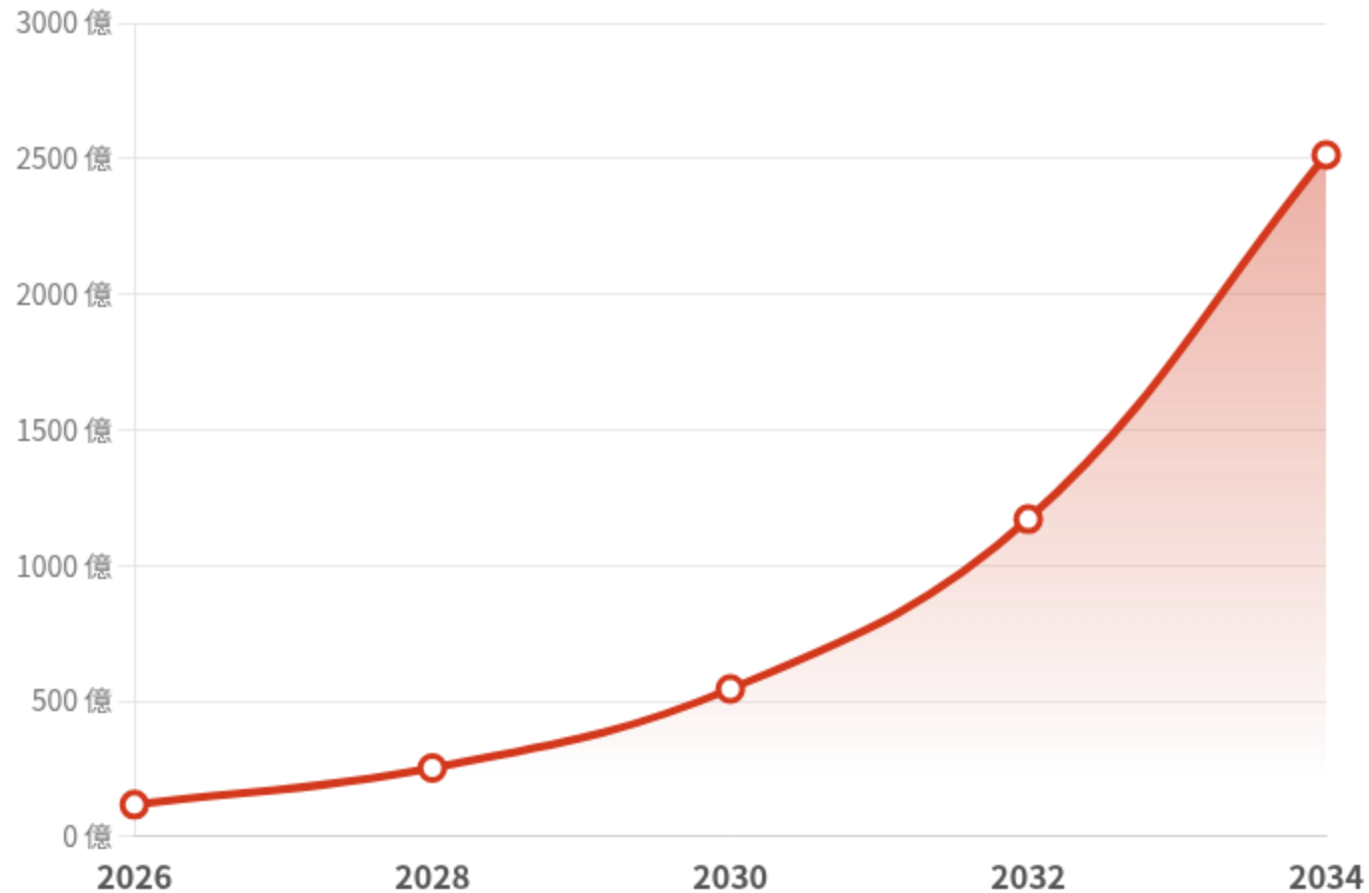
年平均成長率 (CAGR)

46.6%

2034年予測市場規模

2,513 億ドル

(2026年: 117.8億ドル)



出典: Fortune Business Insights (AIエージェント市場, 2026年予測)

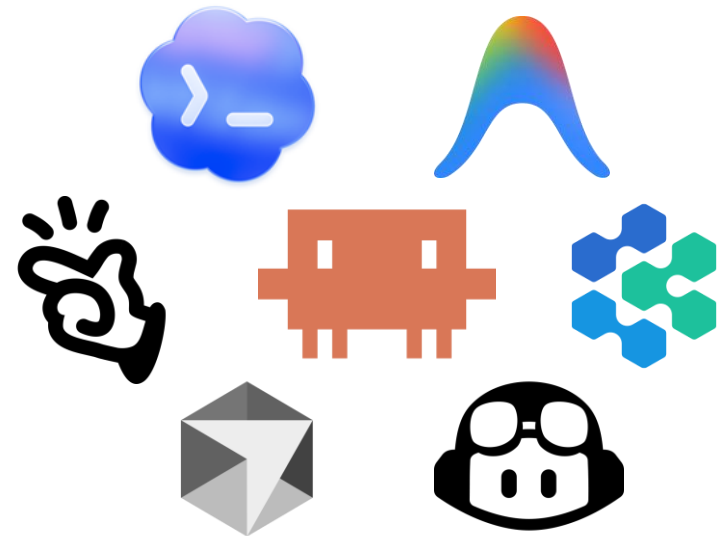
LLM

- ・人間が主体でAIはアドバイザー
- ・人間が逐次指示して実行
- ・エラーは人間が指摘して修正



エージェント

- ・AIが主体的に作業
- ・AIがステップ分解して実行
- ・エラーをAIが自ら検知し修正





AIエージェントは増えているのに
現場の自動化は進んでいない

✓ 得意なこと

指示を理解する

調べる・整理する

プログラムを書く

エラーに対応する

✗ 不得意なこと

重い仕事

長時間の処理

膨大なデータ

高度な計算資源

続ける仕事

止まっても再開する

記録を適切に残す

再現する

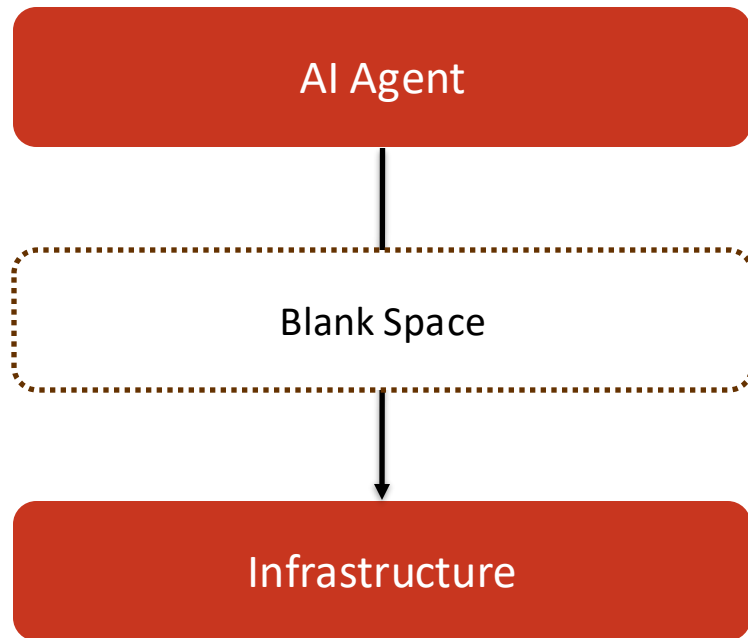
つなぐ仕事

複数システム

異なる権限

必要な情報を次の工程へ渡す

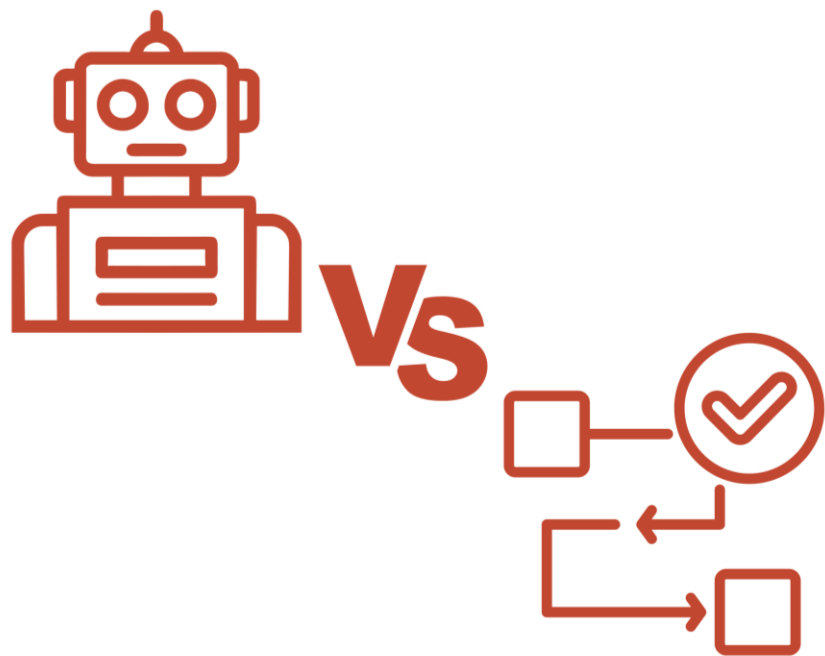
現状の課題：AIエージェント時代の "Missing layer"



エージェントとインフラの間を埋める
基盤レイヤーが次の一年の最重要課題

Goldman Sachs Research (2025)

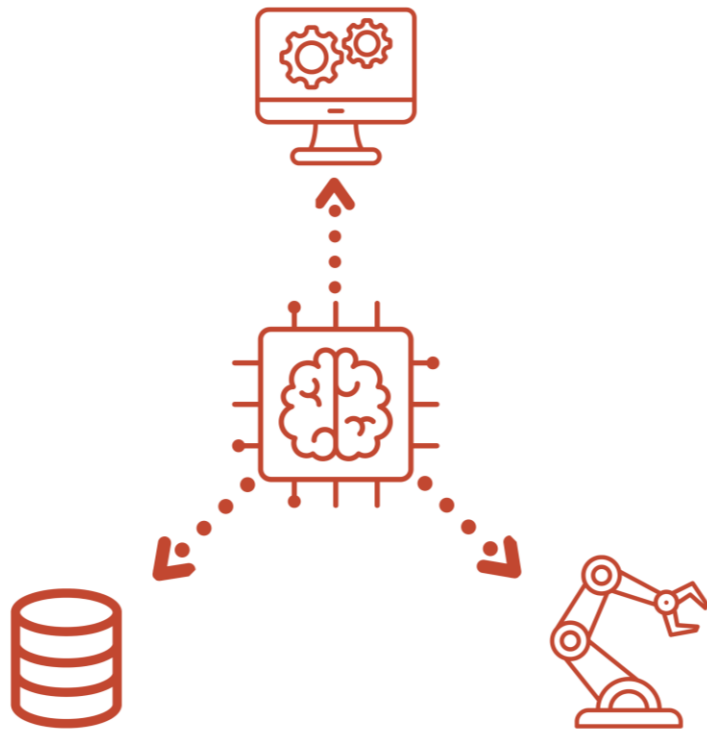
AI Agents to Boost Productivity and Size of Software Market



PAIN POINT 1

エージェント vs ワークフローのジレンマ

AIエージェントは賢すぎて暴走し、
ワークフローは硬すぎて現場に合わない



PAIN POINT 2

つながらないシステム

社内システムの大半は
まだAIから"見えていない"



PAIN POINT 3

社内ChatGPTの限界

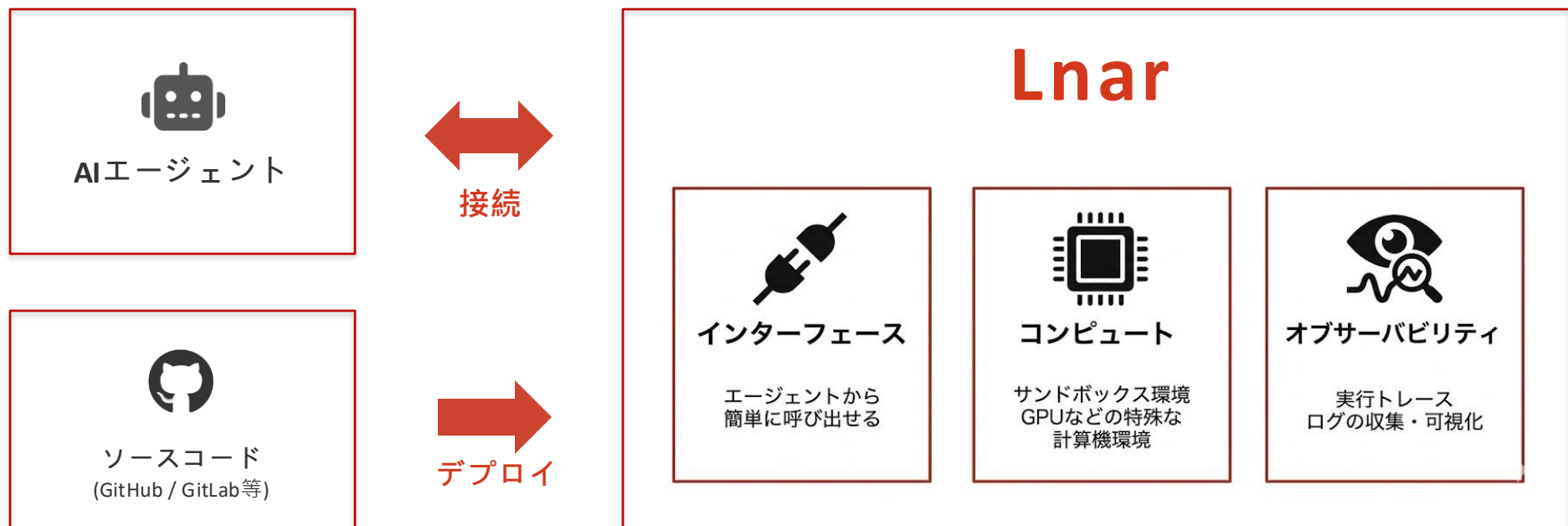
作ったけど使われない
社内AIの9割が抱える現実

3

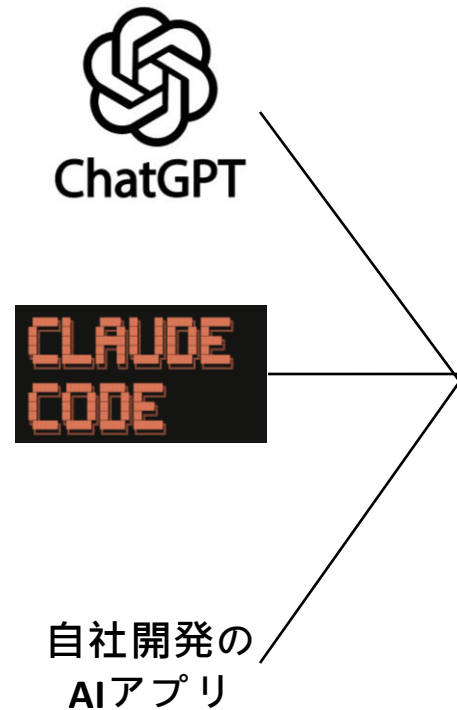
実行力の壁を越える方法

Our Solution

AIエージェントに“実行力”を与える **Lnar** (ルナー) を開発



Lnarがどう解決するか



PAIN POINT 1 エージェント vs ワークフローのジレンマ

自動化処理をデプロイ

ワークフローをAIの手足にして、
エージェントの柔軟さとワークフローの確実さを両立

PAIN POINT 2 つながらないシステム

システムへの接続手段をデプロイ

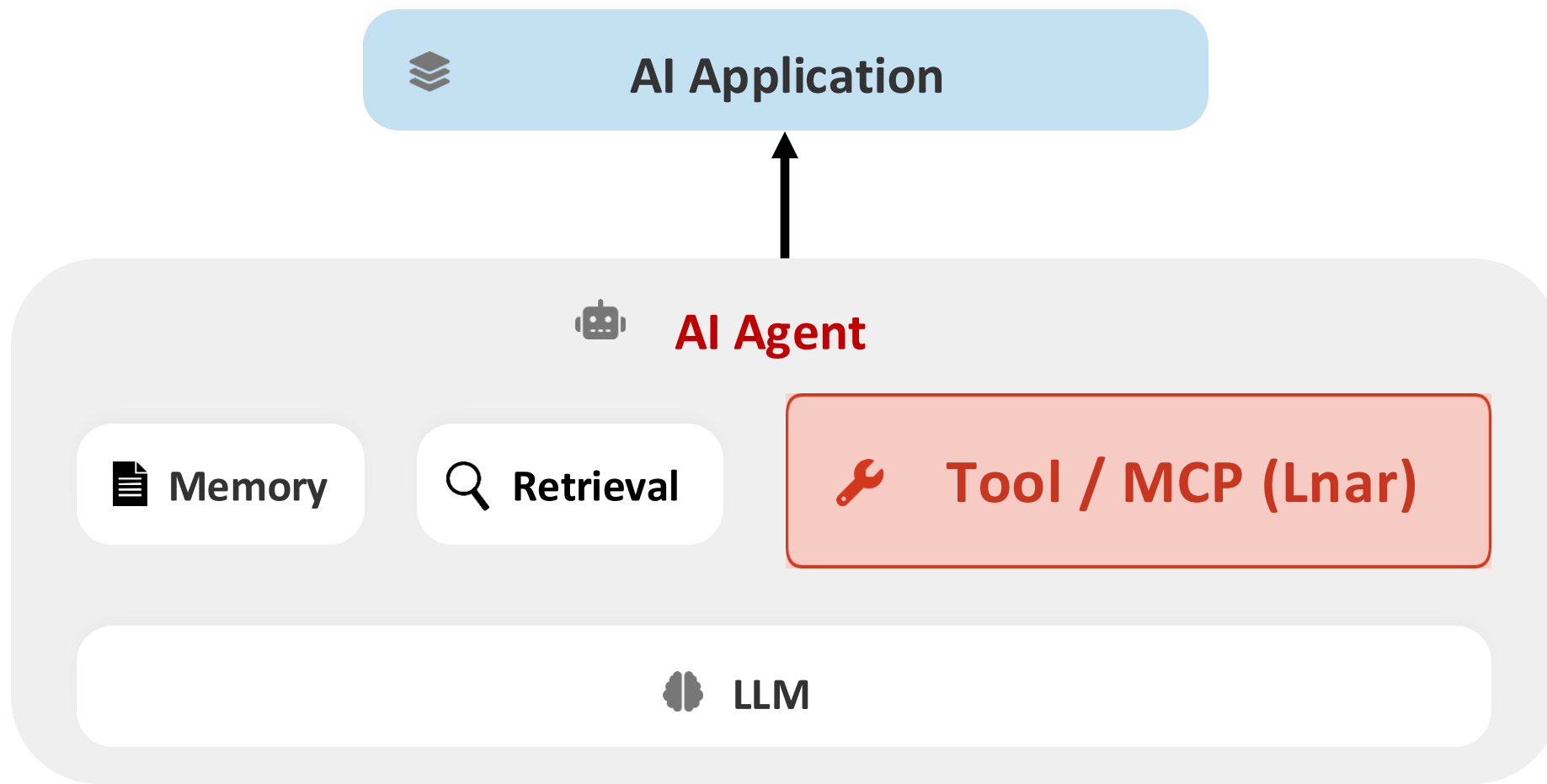
自社システムやロボットへ
どのAIエージェントからでもアクセス可能に

PAIN POINT 3 社内ChatGPTの限界

データへのアクセス方法をデプロイ

ChatGPTやClaudeがそのまま「社内を知っているAI」に
社内ChatGPTの構築・運用は不要

AIエージェント市場におけるポジショニング



Lnarのデモ画像

Claude CodeからLnarを操作しているデモ画像

```
Claude Code v2.1.92
Sonnet 4.6 · Claude Team
~/vscode/aixs/api

> /mcp
  MCP dialog dismissed

> https://github.com/NexaScience/test-lightgbm-classification-example-4-10
このリポジトリを実行して

● まずリポジトリを登録します。

● lnar - register_repository (MCP)(git_url: "https://github.com/NexaScience/test-lightgbm-classification-example-4-10")

{
  "id": "6c7cf2df-d0e1-542e-bf79-2312f4575529",
  "git_url": "https://github.com/NexaScience/test-lightgbm-classification-example-4-10"
}

● 登録できました。次に解析を実行します。
```



NexaScience/test-kernel-methods-example-5-4

main 53606982 (最新) 再分析

Execution <> Code

Summary

このリポジトリは、scikit-learnを用いたカーネル法の最小実装サンプル集です。手書き数字分類 (Digits データセット) 向けにRBF・線形・多項式の3種類のSVMカーネルをそれぞれ単独で訓練・評価するスクリプト、全カーネルを一括比較するスクリプト、および住宅価格予測 (California Housing データセット) 向けのカーネルリッジ回帰スクリプトの計5本を収録しています。すべてのスクリプトは `--seed` のみをCLI引数として受け付け、再現性の確保に特化した教育目的のシンプルな構成となっています。

Runs (5)

#1 SVMカーネル比較 Python ▶ 5 Runs

Digitsデータセット上でRBF・線形・多項式の3種類のSVMカーネルを比較し、各カーネルの精度を測定する。

> 詳細

Run Config (1) cpu-general ▶ Run



```
● Bash(curl -s "https://lnar-artifacts-dev.s3.amazonaws.com/jobs/a5b290fe-4a7e-4eec-b649cf6719ea/stdout.txt?AWSAccessKeyId=AKIAWHJMXSTALUM6VNH4S&Signature=aI60%2BX...")
  Accuracy: 0.9333

● 3つの実行が完了しました。結果をまとめます。

実行結果まとめ



| seed | Accuracy       | 実行時間 |
|------|----------------|------|
| 0    | 1.0000 (100%)  | 約30秒 |
| 42   | 1.0000 (100%)  | 約30秒 |
| 123  | 0.9333 (93.3%) | 約30秒 |



考察

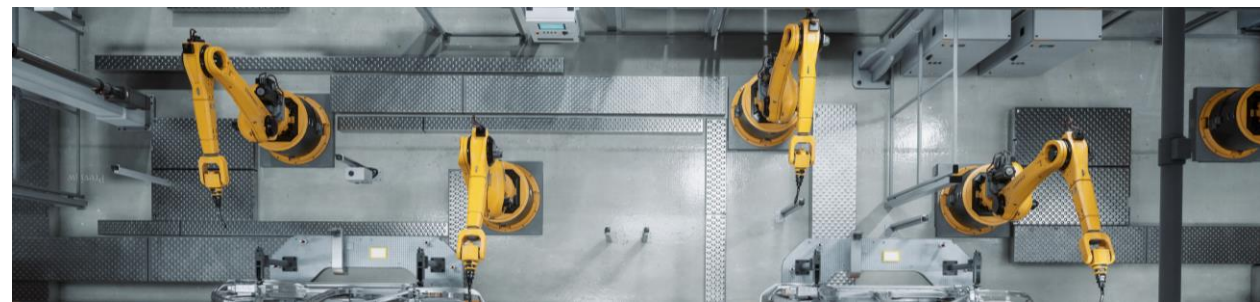
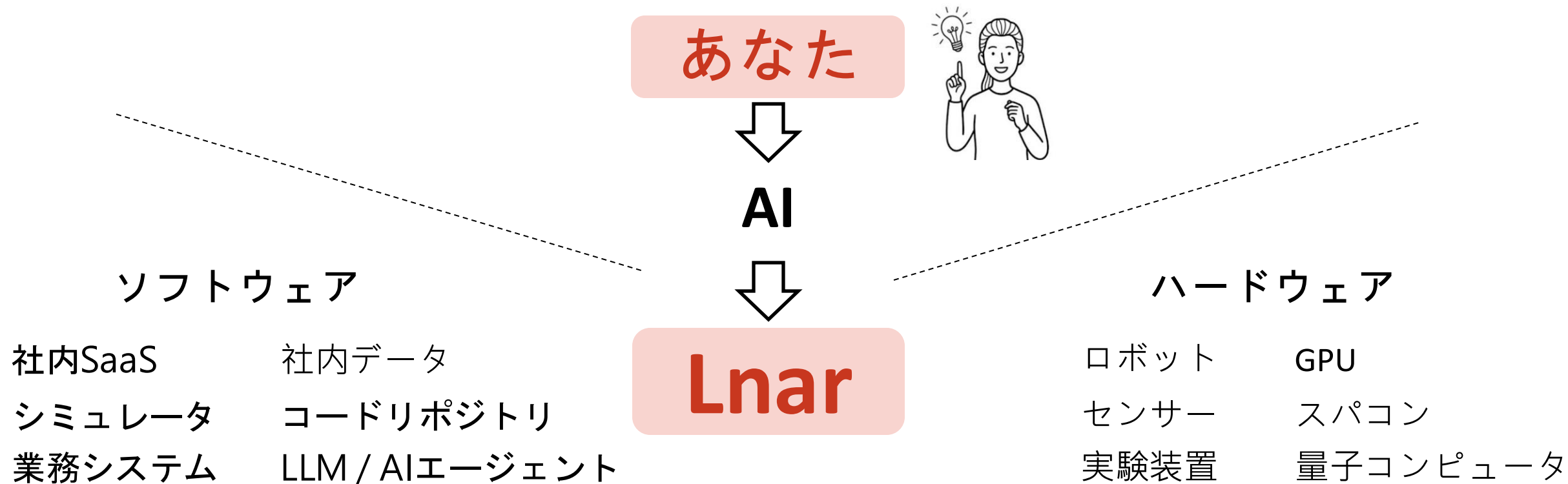
- seed 0 と 42 ではテストセットが比較的分割しやすい分割になり、100%の精度を達成
- seed 123 では若干難しい分割になり、93.3% (30サンプル中2サンプルを誤分類)
- Irisデータセット自体は単純なため、全体的に非常に高い精度
```

4

展望

我々が目指している世界

Lnarを通して**人間の創造性を最大限に発揮できる社会**の実現を目指しています。



チーム



CEO

牛久 祥孝

博士（情報理工学）
NTT研→東大→オムロン研
AIベンチャー役員も経験



COO

桑山 耕平

元総務省・内閣官房
情報通信・サイバーセキュリティ
政策を担当



CTO

田中 冬馬

データサイエンティスト・エンジニア
Lnarの構想・開発



CSO / 大阪大学 教授

吉野 幸一郎

博士（情報学）
ロボティクスおよび自然言語処理
の研究者



CRO / 理化学研究所 上級研究員

熊谷 亘

博士（情報科学）
AIエージェントの研究者

一緒に未来を創りませんか

AIエージェントによる自動化の幅をともに広げていくパートナーを募集しています

Lnar（ルナー）

お問い合わせ

✉ info@nexascience.com

