



於：文部科学省第45回情報委員会

調査報告書【未定稿】

The Beyond Disciplines Collection

AI for Science の動向2026

— AIトランスフォーメーションに伴う科学技術・イノベーションの変容 —

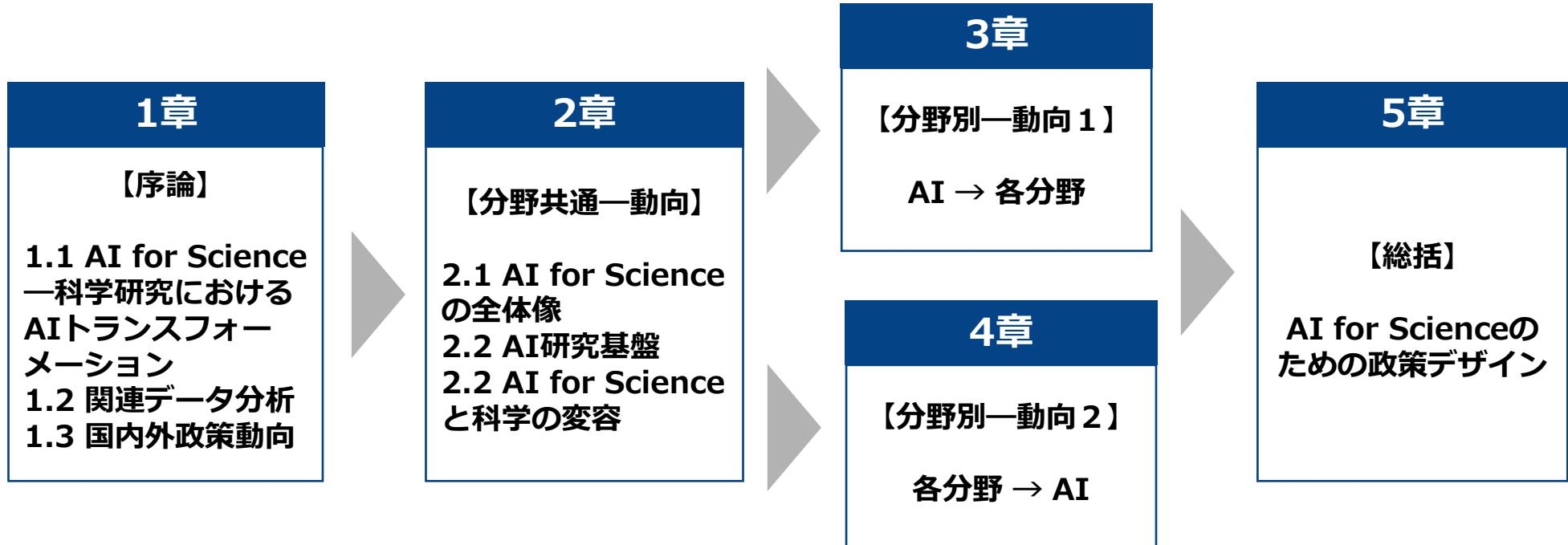
- ✓ 本内容は科学研究にAIを活用する「AI for Science」について調査し、2025年末時点の動向をまとめたものであり、2026年2月にJST-CRDSより報告書として発行を予定している。
- ✓ 文部科学省第45回情報委員会（2026年1月14日）の時点では、本スライド資料および報告書本文は未定稿であり、発行までに内容の一部修正・変更等を伴うものである。

2026年1月14日

JST研究開発戦略センター



本報告書の流れ



報告書目次

1章 【序論】AI for Science：科学研究におけるAIトランスフォーメーション

- 1-1. AI for Scienceの潮流
- 1-2. AI for Science関連データの分析
- 1-3. AI for Scienceの国内外政策動向

2章 【分野共通—動向】分野共通的なAI for Scienceの動向

- 2-1. AI for Scienceの全体像
- 2-2. AI for Scienceのための研究基盤
- 2-3. AI for Scienceと科学の変容

3章 【分野別—動向1：AI→各分野】各分野へのAIの貢献

- 3-1. AI → ライフサイエンス分野
- 3-2. AI → マテリアル分野
- 3-3. AI → 環境・エネルギー分野
- 3-4. AI → 情報科学分野

4章 【分野別—動向2：個別分野→AI】AIへの個別分野の貢献

- 4-1. 「AI研究」および「AI研究基盤の研究・整備」への各研究分野からの貢献
- 4-2. 情報科学分野 → AI
- 4-3. 数理科学分野 → AI
- 4-4. マテリアル分野 → AI
- 4-5. 環境・エネルギー分野 → AI
- 4-6. その他分野 → AI

5章 【総括】AI for Scienceのための政策デザイン

1-1. AI for Scienceの潮流

AIトランスフォーメーション

- DXは次なる飛躍したステージに進展
- AI技術の浸透に伴い、社会・産業・生活のあり方を根本から変えて新たな価値を生み出そうする「AIトランスフォーメーション (AI Transformation : AX)」への潮流
- 科学研究におけるAX (=AI for Science)**
研究の加速や科学的発見の創出のみならず、AXを支え推進する基礎・基盤研究および整備も重要な

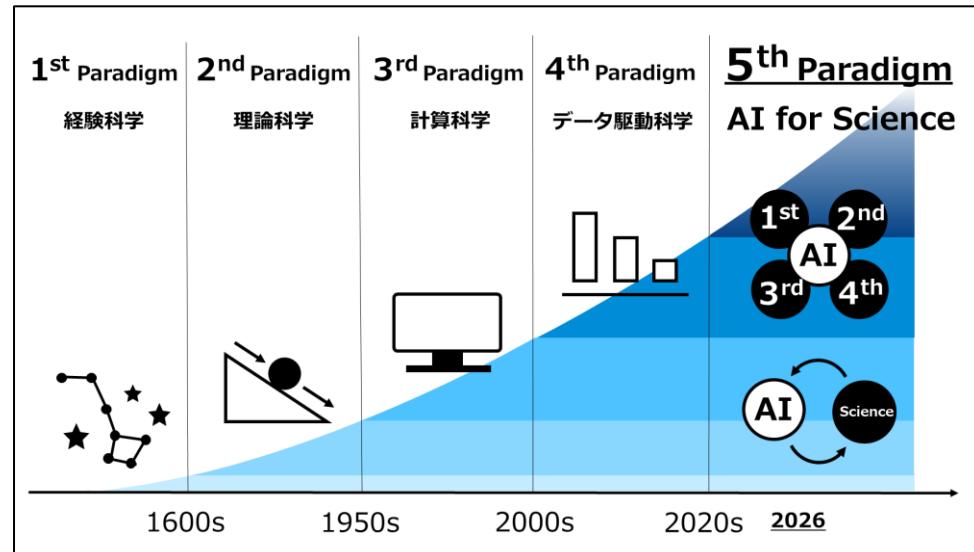
AI トランスフォーメーション (AI Transformation, AX)



AI技術がさまざまな社会・産業ドメインに浸透し、各ドメインのあり方を変容させつつある

サイエンスのパラダイム

- 第1のパラダイム「経験科学（実験科学）」、第2のパラダイム「理論科学」、第3のパラダイム「計算科学」、第4のパラダイム「データ駆動科学」と変遷してきた
- 第5のパラダイム (=AI for Science)**
AIが研究プロセスのあらゆる段階に入り込み、仮説生成や実験工程、解析、知識統合などの方法を変えつつある



Nina Miolane, The fifth era of science: Artificial scientific intelligence, PLOS Biology, 2025.

1-1. AI for Scienceの潮流

■AI for Scienceとは

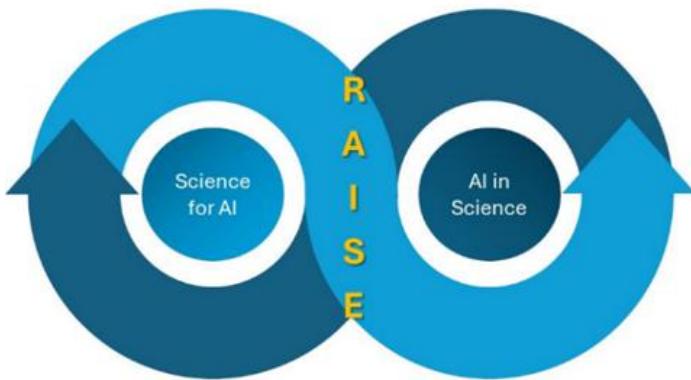
- 内閣府 人工知能戦略本部 人工知能戦略専門調査会 「人工知能基本計画（案）」（2025年12月5日）：「**科学研究に広くAIを利活用する**（こと）」
- 文部科学省 科学技術・学術審議会 情報委員会（第44回）「AI for Scienceの推進に向けた基本的な考え方について」（2025年10月6日）：「**AI技術を科学研究のあらゆる段階に適用し様々な分野で活用する取組とともに、AI研究、環境構築、人材育成、社会実装などを政策的に検討し、推進すること**」

■政策の検討状況

- 総合経済対策「「強い経済」を実現する総合経済対策」（2025年11月21日閣議決定）において、**AI for Scienceの戦略を2025年度内に策定**する旨が示された
- 内閣府科学技術・イノベーション推進会議 基本計画専門調査会がとりまとめた「**第7期科学技術・イノベーション基本計画**」における重要論点の1つ
- 文部科学省「科学の再興」に関する有識者会議「「科学の再興に向けて」提言」（2025年11月18日）で、具体的取組として、① **AI利活用研究（AI for Science）とAI研究（Science for AI）の推進**、② AI駆動型研究を支えるデータの創出・活用基盤の整備、③ AI for Science を支える次世代情報基盤の構築、④ AI関連人材の育成・確保、⑤ 大胆な投資資金の確保・環境整備、⑥ 推進体制の構築等の6点を挙げる

1-1. AI for Scienceの潮流

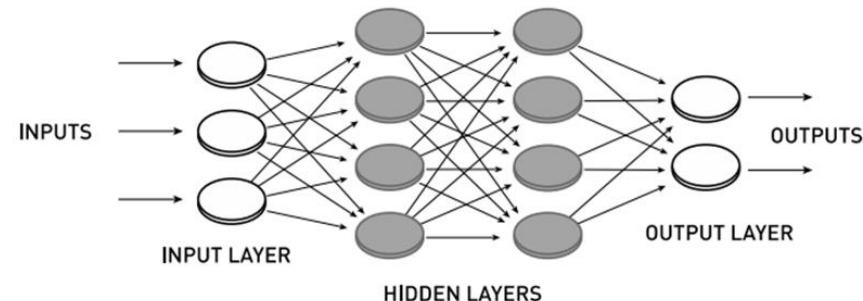
- ## 「AI in Science」と「Science for AI」
- EU「科学におけるAI戦略（European Strategy for Artificial Intelligence in Science）」（2025年10月）
 - 「AI in Science」は、AI分野における最先端の研究を促進する「Science for AI」と相互補完的に接続
 - 欧洲におけるAI研究と科学応用を統合的に推進する仮想研究所であるRAISE（Research and AI Science Europe）構想に内包される



欧洲委員会「European AI in Science Strategy」（2025年10月8日）<https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX%3A52025DC0724&qid=1762332390557>

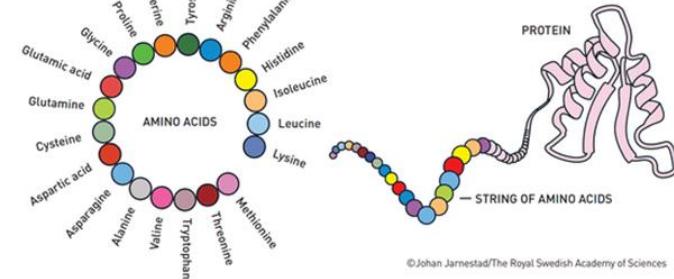
2024年ノーベル賞

「科学研究 → AI」：AIそのものの研究開発



ノーベル物理学賞：John J. Hopfield、Geoffrey E. Hinton 「人工ニューラルネットワークによる機械学習を可能にした基礎的な発見と発明」

「AI → 科学研究」：AIを活用した研究



ノーベル化学賞：Demis Hassabis、John M. Jumper 「タンパク質の構造予測（AlphaFold）」

Nobel Prize in Physics 2024,
<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2024/summary/>
The Nobel Prize in Chemistry 2024,
<https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2024/popular-information/>

1-1. AI for Scienceの潮流

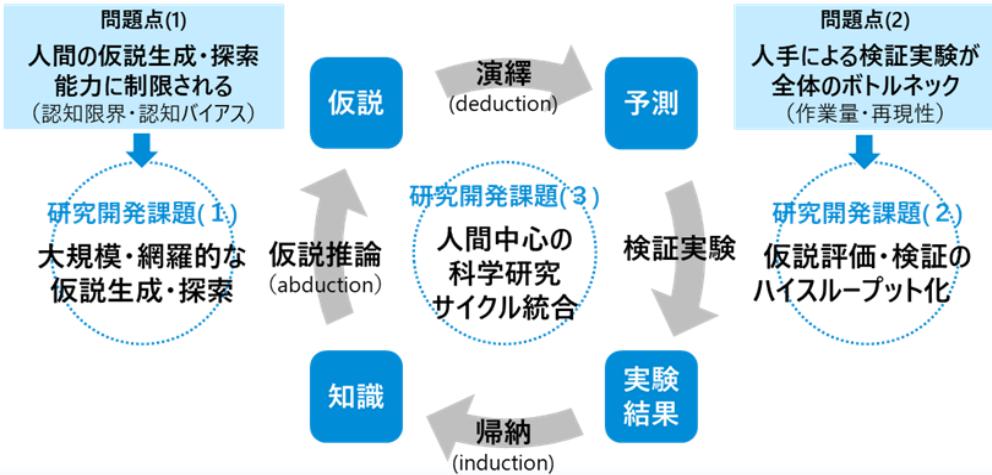
CRDS戦略プロポーザル

人工知能と科学～AI・データ駆動科学による発見と理解～



2021年8月発行

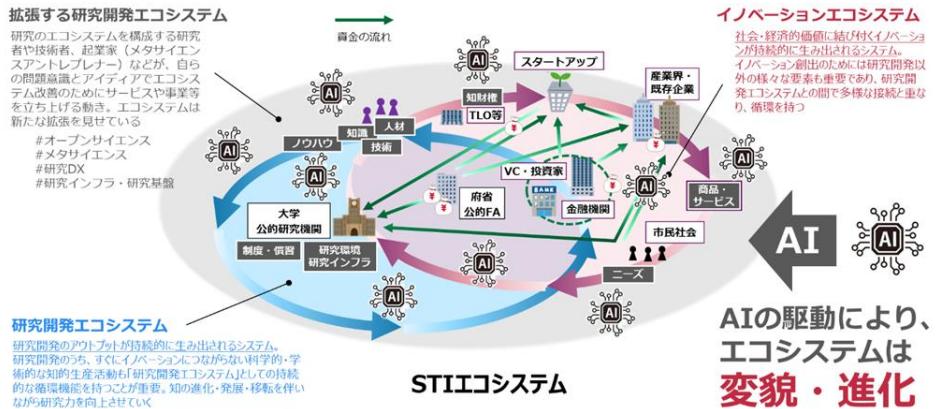
- 研究開発プロセスの変革（RX）は研究開発の効率化だけでなく、様々な分野での**新発見の促進**や**新しい科学の方法論**をも生み出しつつある
- AIの応用分野としても有望視される「**科学研究の自動化**」を目指す



AI for Scienceの枠組み（狭義）



AI for Scienceの枠組み（広義）



1-2. AI for Science関連データの分析

Scopusによる分析

AI関連キーワードを含む論文 (=AI関連論文)

(artificial intelligence、deep learning、machine learning他、主要な学習方法名・AIモデル名を対象に検索)

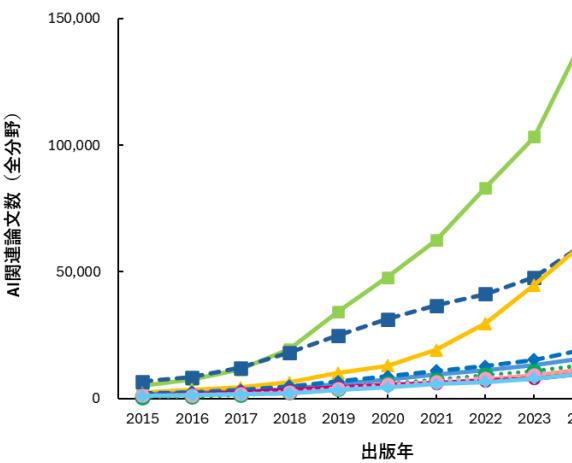
対象文献種：article, review, conference paper

対象出版年：2015-2024年 ※Top10%, 1%論文数のみ、文献収録時期の関係で2015-2023となっていることに注意。

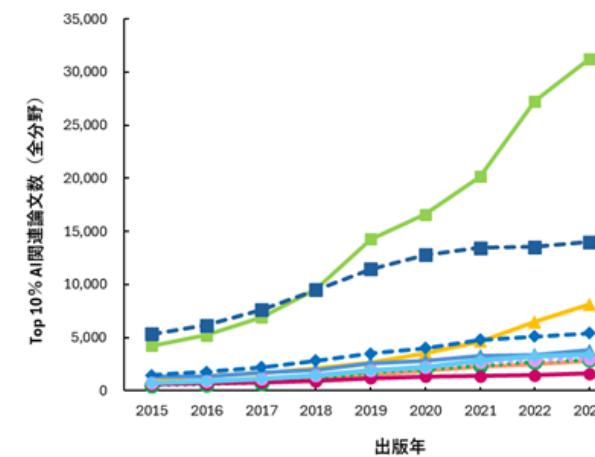
対象国：中国、米国、インド、ドイツ、英国、イタリア、韓国、日本、カナダ、豪州

検索日：2026年1月

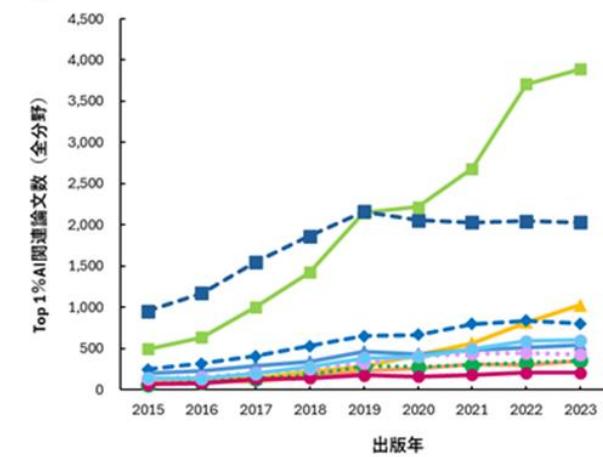
カウント方法：論文著者の所属機関の所在国（国別）およびASJC（Scopusで使用される学術分野の分類コード）（分野別）に基づき整数カウントで算出



国別のAI関連論文数（全分野）



Top 10%



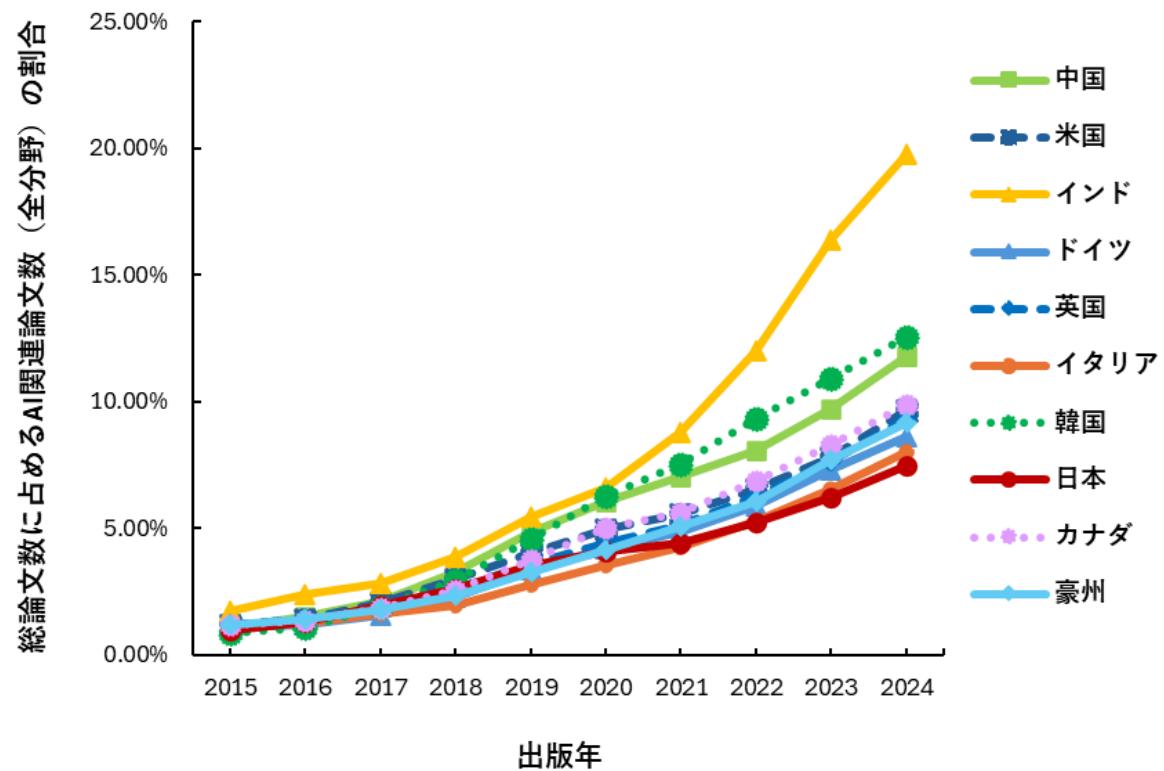
Top 1%

1-2. AI for Science関連データの分析

文部科学省「科学の再興に向けて 提言」（2025年11月18日）

2030 年度末までに日本における総論文数に対する全分野での AI 関連論文数の割合を世界 5 位まで引き上げる（2024 年における日本の AI 関連論文数割合：7.4%（10 位））

※この順位は、AI関連論文数が多い主要国の中で、AI関連論文数割合の高い順に並べたものであることに留意



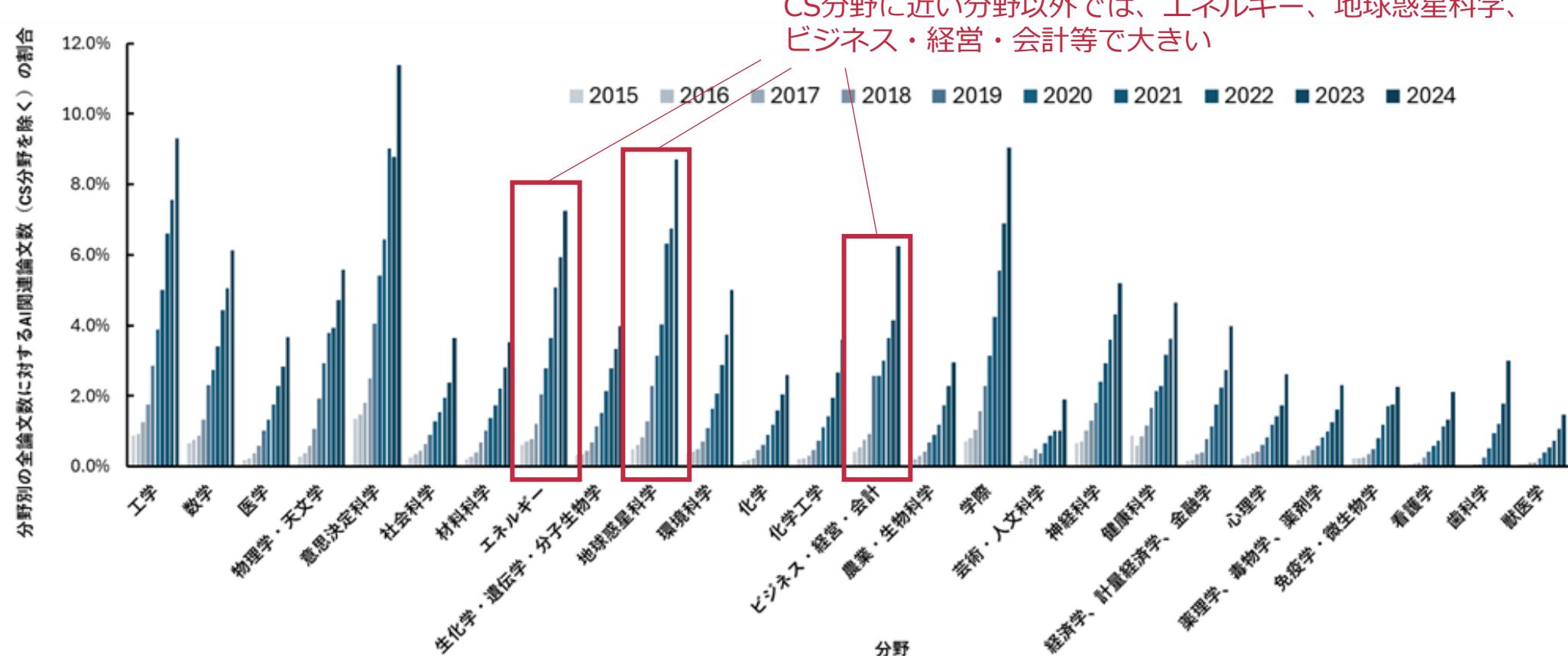
| AI関連論文割合 (AI関連論文数 上位10か国) | 2024年 | 順位 |
|---------------------------------|--------|----|
| 世界 | 10.19% | 1 |
| インド | 19.77% | |
| 韓国 | 12.53% | |
| 中国 | 11.79% | |
| カナダ | 9.89% | |
| 米国 | 9.64% | |
| 英国 | 9.35% | |
| 豪州 | 9.14% | |
| ドイツ | 8.63% | |
| イタリア | 8.02% | |
| 日本 | 7.47% | 10 |

文部科学省「科学の再興」に関する有識者会議 「科学の再興に向けて」提言（2025年11月18日）
https://www.mext.go.jp/content/20251118-mxt_chousei01-000045954-02.pdf
※表の数値は2026年1月時点の結果を示しており、より最新の状況を表している。

1-2. AI for Science関連データの分析

「AIを科学研究に応用した論文」の分析

→ AI関連論文（全分野）からコンピューターサイエンス（CS）分野に分類される論文（=Core AI 論文）を除く方法を採用



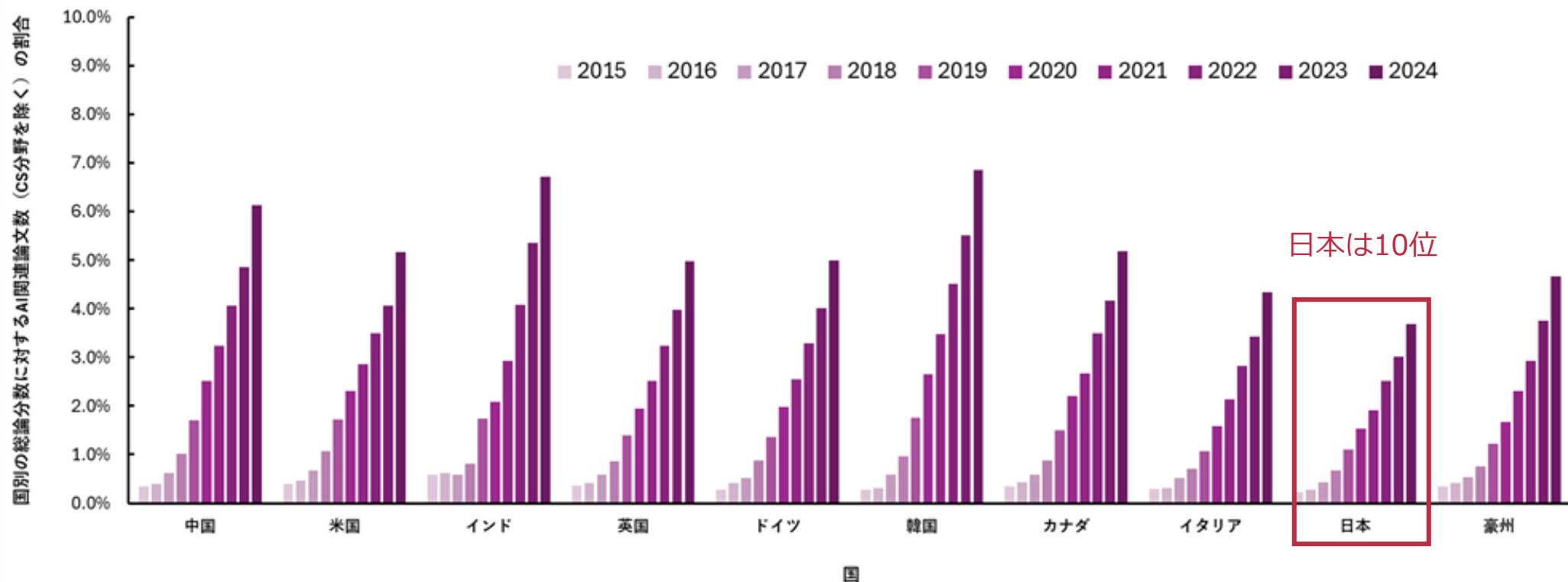
分野別の全論文数に対するAI関連論文数（CS分野を除く）の割合

※分野別の分析では、Scopusで使用される学術分野の分類コード(All Science Journal Classifications)に基づき、整数カウントにより算出を実施している。

1-2. AI for Science関連データの分析

「AIを科学研究に応用した論文」の分析

→ AI関連論文（全分野）からコンピューターサイエンス（CS）分野に分類される論文（=Core AI 論文）を除く方法を採用



国別の総論分数に対するAI関連論文数（CS分野を除く）の割合

1-2. AI for Science関連データの分析



各国・各分野におけるAI関連論文数（2024年）

| | 世界 | 中国 | 米国 | インド | 英国 | ドイツ | 韓国 | カナダ | イタリア | 日本 | 豪州 |
|---------------|---------|---------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|-------|
| 総AI関連論文数→ | 399,124 | 142,092 | 60,666 | 60,984 | 19,327 | 15,935 | 13,069 | 11,437 | 11,585 | 9,698 | 9,724 |
| コンピュータ科学 | 243,251 | 83,391 | 32,806 | 46,535 | 10,513 | 8,208 | 7,254 | 6,345 | 6,327 | 5,675 | 5,411 |
| 工学 | 171,487 | 64,082 | 20,336 | 32,839 | 6,725 | 5,125 | 6,080 | 4,214 | 3,905 | 3,820 | 3,267 |
| 数学 | 87,079 | 32,096 | 10,346 | 17,412 | 3,378 | 2,760 | 1,678 | 1,751 | 2,034 | 1,788 | 1,436 |
| 医学 | 52,267 | 13,162 | 11,473 | 10,738 | 3,145 | 2,656 | 1,606 | 1,912 | 1,918 | 1,413 | 1,526 |
| 物理学・天文学 | 47,492 | 19,290 | 5,388 | 8,016 | 1,814 | 1,570 | 1,474 | 897 | 1,410 | 1,316 | 653 |
| 意思決定科学 | 38,925 | 8,682 | 3,609 | 15,466 | 1,003 | 709 | 505 | 579 | 543 | 573 | 570 |
| 材料科学 | 29,199 | 12,551 | 3,614 | 2,858 | 1,072 | 848 | 1,916 | 625 | 691 | 939 | 530 |
| 社会科学 | 32,926 | 7,629 | 6,082 | 4,595 | 1,836 | 1,388 | 826 | 993 | 988 | 645 | 903 |
| エネルギー | 25,753 | 8,713 | 2,447 | 6,747 | 827 | 477 | 630 | 454 | 450 | 316 | 405 |
| 生化学・遺伝学・分子生物学 | 18,923 | 7,176 | 4,169 | 1,173 | 1,249 | 1,065 | 897 | 666 | 814 | 615 | 566 |
| 地球惑星科学 | 18,197 | 9,039 | 2,617 | 1,356 | 808 | 869 | 463 | 606 | 740 | 334 | 561 |
| 環境科学 | 17,285 | 7,126 | 2,280 | 2,176 | 845 | 650 | 698 | 568 | 479 | 315 | 529 |
| 化学 | 12,209 | 5,137 | 2,202 | 833 | 680 | 614 | 654 | 371 | 376 | 391 | 269 |
| ビジネス・経営・会計 | 11,304 | 2,799 | 1,603 | 2,151 | 705 | 477 | 304 | 286 | 336 | 153 | 392 |
| 化学工学 | 11,842 | 4,659 | 1,508 | 1,147 | 491 | 434 | 706 | 269 | 393 | 287 | 214 |
| 農業・生物科学 | 10,507 | 4,471 | 1,516 | 796 | 454 | 422 | 350 | 296 | 352 | 234 | 314 |
| 神経科学 | 6,675 | 2,381 | 1,496 | 873 | 569 | 434 | 197 | 275 | 278 | 184 | 258 |
| 芸術・人文科学 | 8,386 | 2,013 | 2,125 | 318 | 714 | 557 | 284 | 329 | 320 | 216 | 262 |
| 学際 | 9,335 | 3,207 | 1,660 | 942 | 619 | 486 | 513 | 283 | 272 | 321 | 260 |
| 健康科学 | 5,063 | 1,513 | 1,157 | 252 | 431 | 343 | 215 | 223 | 177 | 176 | 252 |
| 心理学 | 3,185 | 692 | 894 | 127 | 288 | 267 | 91 | 121 | 143 | 71 | 139 |
| 経済学・計量経済学・金融学 | 3,654 | 848 | 549 | 288 | 279 | 194 | 117 | 97 | 138 | 38 | 114 |
| 薬理学・毒物学・薬剤学 | 2,794 | 966 | 551 | 381 | 155 | 134 | 82 | 59 | 108 | 77 | 52 |
| 免疫学・微生物学 | 2,368 | 987 | 503 | 133 | 144 | 131 | 58 | 82 | 104 | 47 | 68 |
| 看護学 | 1,485 | 250 | 400 | 110 | 111 | 96 | 61 | 57 | 45 | 43 | 67 |
| 歯科学 | 786 | 129 | 167 | 80 | 31 | 68 | 33 | 23 | 43 | 35 | 18 |
| 獣医学 | 479 | 104 | 117 | 18 | 41 | 21 | 22 | 18 | 22 | 11 | 18 |

JST-CRDS作成

1-2. AI for Science関連データの分析



AI関連論文の分野割合の世界平均に対する各国のAI関連論文の割合（2024年）

各セル =

当該国の当該分野のAI論文数

当該国のAI論文数 × (当該分野の総AI論文数 / 総AI論文数)

当該国AI論文規模に対する
当該国当該分野のAI論文数割
合が、世界平均に比べて

多い

少ない

| | 世界 | 中国 | 米国 | インド | 英国 | ドイツ | 韓国 | カナダ | イタリア | 日本 | 豪州 |
|---------------|---------|---------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|-------|
| 総AI関連論文数→ | 399,124 | 142,092 | 60,666 | 60,984 | 19,327 | 15,935 | 13,069 | 11,437 | 11,585 | 9,698 | 9,724 |
| コンピュータ科学 | 243,251 | 0.96 | 0.89 | 1.25 | 0.89 | 0.85 | 0.91 | 0.91 | 0.90 | 0.96 | 0.91 |
| 工学 | 171,487 | 1.05 | 0.78 | 1.25 | 0.81 | 0.75 | 1.08 | 0.86 | 0.78 | 0.92 | 0.78 |
| 数学 | 87,079 | 1.04 | 0.78 | 1.31 | 0.80 | 0.79 | 0.59 | 0.70 | 0.80 | 0.85 | 0.68 |
| 医学 | 52,267 | 0.71 | 1.44 | 1.34 | 1.24 | 1.27 | 0.94 | 1.28 | 1.26 | 1.11 | 1.20 |
| 物理学・天文学 | 47,492 | 1.14 | 0.75 | 1.10 | 0.79 | 0.83 | 0.95 | 0.66 | 1.02 | 1.14 | 0.56 |
| 意思決定科学 | 38,925 | 0.63 | 0.61 | 2.60 | 0.53 | 0.46 | 0.40 | 0.52 | 0.48 | 0.61 | 0.60 |
| 材料科学 | 29,199 | 1.21 | 0.81 | 0.64 | 0.76 | 0.73 | 2.00 | 0.75 | 0.82 | 1.32 | 0.75 |
| 社会科学 | 32,926 | 0.65 | 1.22 | 0.91 | 1.15 | 1.06 | 0.77 | 1.05 | 1.03 | 0.81 | 1.13 |
| エネルギー | 25,753 | 0.95 | 0.63 | 1.71 | 0.66 | 0.46 | 0.75 | 0.62 | 0.60 | 0.50 | 0.65 |
| 生化学・遺伝学・分子生物学 | 18,923 | 1.07 | 1.45 | 0.41 | 1.36 | 1.41 | 1.45 | 1.23 | 1.48 | 1.34 | 1.23 |
| 地球惑星科学 | 18,197 | 1.40 | 0.95 | 0.49 | 0.92 | 1.20 | 0.78 | 1.16 | 1.40 | 0.76 | 1.27 |
| 環境科学 | 17,285 | 1.16 | 0.87 | 0.82 | 1.01 | 0.94 | 1.23 | 1.15 | 0.95 | 0.75 | 1.26 |
| 化学 | 12,209 | 1.18 | 1.19 | 0.45 | 1.15 | 1.26 | 1.64 | 1.06 | 1.06 | 1.32 | 0.90 |
| ビジネス・経営・会計 | 11,304 | 0.70 | 0.93 | 1.25 | 1.29 | 1.06 | 0.82 | 0.88 | 1.02 | 0.56 | 1.42 |
| 化学工学 | 11,842 | 1.11 | 0.84 | 0.63 | 0.86 | 0.92 | 1.82 | 0.79 | 1.14 | 1.00 | 0.74 |
| 農業・生物科学 | 10,507 | 1.18 | 0.94 | 0.55 | 0.90 | 1.00 | 1.01 | 0.97 | 1.15 | 0.90 | 1.21 |
| 神経科学 | 6,675 | 1.00 | 1.50 | 0.82 | 1.79 | 1.67 | 0.92 | 1.49 | 1.43 | 1.15 | 1.60 |
| 芸術・人文科学 | 8,386 | 0.68 | 1.66 | 0.25 | 1.71 | 1.65 | 1.02 | 1.39 | 1.32 | 1.06 | 1.24 |
| 学際 | 9,335 | 0.96 | 1.17 | 0.66 | 1.37 | 1.30 | 1.68 | 1.06 | 1.00 | 1.42 | 1.14 |
| 健康科学 | 5,063 | 0.84 | 1.51 | 0.34 | 1.69 | 1.68 | 1.30 | 1.50 | 1.22 | 1.50 | 1.98 |
| 心理学 | 3,185 | 0.62 | 1.79 | 0.26 | 1.84 | 2.10 | 0.87 | 1.33 | 1.53 | 0.95 | 1.80 |
| 経済学・計量経済学・金融学 | 3,654 | 0.64 | 0.97 | 0.48 | 1.58 | 1.35 | 0.93 | 0.96 | 1.26 | 0.46 | 1.24 |
| 薬理学・毒物学・薬剤学 | 2,794 | 0.97 | 1.32 | 0.89 | 1.15 | 1.20 | 0.91 | 0.74 | 1.33 | 1.16 | 0.77 |
| 免疫学・微生物学 | 2,368 | 1.18 | 1.40 | 0.37 | 1.26 | 1.39 | 0.75 | 1.21 | 1.52 | 0.82 | 1.18 |
| 看護学 | 1,485 | 0.48 | 1.80 | 0.49 | 1.57 | 1.65 | 1.28 | 1.36 | 1.06 | 1.21 | 1.88 |
| 歯科学 | 786 | 0.48 | 1.46 | 0.70 | 0.85 | 2.27 | 1.34 | 1.07 | 1.98 | 1.92 | 0.99 |
| 獣医学 | 479 | 0.61 | 1.61 | 0.25 | 1.77 | 1.10 | 1.40 | 1.31 | 1.58 | 0.95 | 1.54 |

JST-CRDS作成

日本は材料科学、化学などでAI関連論文規模が大きめの傾向

1-3. AI for Scienceの国内外政策動向



AIの基本政策

AI4S関連政策

| | | |
|----|---|--|
| 日 | <ul style="list-style-type: none"> AI法(2025) AI技術の研究開発と社会実装の適切な推進。リスクへの対応。 AI戦略2019/AI戦略2021/AI戦略2022 人間中心原則・データ基盤・国際連携等を提示 人工知能基本計画 (2025.12) 「世界で最もAIを開発・活用しやすい国」に向けて国家目標の実現に資する戦略として策定 | <ul style="list-style-type: none"> 「AI for Science」による科学研究の革新（文部科学省、2025） <ul style="list-style-type: none"> ①AI駆動型研究開発の強化、②自動・自律・遠隔化による研究データ創出・活用の高効率化、③「AI for Science」を支える次世代情報基盤の構築、④世界を先導する戦略的な产学・国際連携 AI for Science戦略を2025年度内に策定予定 |
| 米 | <ul style="list-style-type: none"> 米国AIアクションプラン(2025) <ul style="list-style-type: none"> ①AIイノベーション加速、②AIインフラ整備、③国際的協調（外交・安全保障） 大統領令「ジェネシス・ミッション」(2025.11) 科学データとスペコン能力を統合した米国科学セキュリティ・プラットフォームを構築し、科学的発見の加速、エネルギー優位性確保、国家安全保障強化 | <ul style="list-style-type: none"> 同アクションプラン「①AIイノベーション加速」にて、AIを活用した科学研究への重点的投资、世界クラスの科学データセットの構築、AIそのものの科学の推進 同ジェネシス・ミッションをDOEが中核的機関として、先進製造、バイオテクノロジー、重要材料、核分裂および核融合、量子情報科学、半導体およびマイクロエレクトロニクスなど、最低20課題に取り組む |
| EU | <ul style="list-style-type: none"> AI法 (AI Act) (2024) 人間中心の信頼できるAIの導入促進、AIシステムのリスクに応じた要件・規制の設定、イノベーション支援など。 AI大陸行動計画 (AI Continent Action Plan) (2025) 5つの重要な柱：①大規模AI計算インフラ構築、②高品質なデータへのアクセスの拡大、③戦略分野でのAI導入・普及、④AIスキル人材強化、⑤AI法の施行を簡素化 Apply AI戦略 (2025) 産業・公共部門でのAI導入を横断的に推進する新戦略 Data Union戦略 (2025) 科学・産業・公共分野でデータ共有と利活用、基盤整備を強化 | <ul style="list-style-type: none"> AI in science戦略 (2025.10) 科学研究に特化した初のEU包括戦略。研究資金としてHorizon EuropeのAI全体への年間投資を3B€以上に倍増することを目指す。 [RAISE構想] AI in Science戦略の中核構想。EUのAI資源（データ、計算インフラ、人材）を集約・調整し、一体的に整備。科学研究用AI基盤の統合・共有・拡張を目指す |

米「ジェネシス・ミッション」の概要

<https://www.whitehouse.gov/presidential-actions/2025/11/launching-the-genesis-mission/>



2025年11月24日、トランプ大統領はAIを活用して科学的発見とイノベーション創出を加速する国家的な取り組み「ジェネシス・ミッション」を開始する大統領令を発出した。

- 連邦政府の科学データセットを活用するための統合的なAIプラットフォームを構築し、DOE国立研究所のスーパーコンピューターなどのリソースを用いて運用する計画
- トランプ政権が2025年7月に発表した「米国AI行動計画」における「世界クラスの科学データセットの構築」を推進する位置づけ。これにより「10年以内に米国の科学技術の生産性と影響力を倍増させる」(DOE)としている



| 目的 | 連邦政府が持つ科学データとスペコン能力を統合し、AIによる研究の迅速化を実現 科学的発見の加速、エネルギー優位性の確保、国家安全保障の強化におけるブレークスルーを創出 |
|------|--|
| 体制 | DOEが中核的な機関として主導（上級の担当官(政治任用)を置く） 科学技術担当大統領補佐官(APST)*1が国家科学技術会議(NSTC)*2を通じ省庁連携を推進 国立研究所、産業界、大学等など国家の研究開発資源を糾合 |
| 推進方策 | <ul style="list-style-type: none">●「米国科学セキュリティ・プラットフォーム(American Science Security Platform)」の構築と運営<ul style="list-style-type: none">✓ ミッションの基盤となる以下の機能を統合：<ul style="list-style-type: none">△高性能AI計算資源△実験評価・自動化を行うAIエージェント△予測・シミュレーション用の計算ツール△分野別のドメイン固有の基盤モデル△データセットへの安全なアクセス△自律実験・製造を支える研究設備✓ 以下の手順で推進：<ul style="list-style-type: none">90日以内：利用可能な連邦政府および潜在的な産業パートナーのリソース（計算、ストレージ、ネットワーク）を特定120日以内：初期データセットの特定とプラットフォームへの導入計画策定240日以内：AI主導の実験・製造を行うための施設の能力を評価270日以内：プラットフォームの初期運用能力を評価●取り組み対象となる研究開発課題(National Science and Technology Challenges)の特定<ul style="list-style-type: none">国家科学技術覚書*3を踏まえ右記を含む最低20課題をDOEがリストアップ（60日以内）、各省庁からのインプットも踏まえAPSTが初期リストを確定各省庁は特定された研究開発課題の推進にプラットフォームを活用、リストは毎年見直し |
| 連携 | 国研等への派遣を含むフェローシップ、インターンシップ等を実施 共同研究、共用インフラ、データ共有など外部との連携枠組み整備 本取り組みに資する国際協力の機会を特定 |
| 評価 | 運用状況、実績、成果、ニーズなどについて1年以内(以降毎年)に大統領に報告 |

*1 現政権ではOSTP局長を兼務するマイケル・クラツィオス氏

*2 大統領府と各省庁の政策調整を行う閣僚級の会議体。国の研究開発戦略策定や省庁横断的な政策実施を管理運営する

*3 2027年度研究開発予算における優先事項に関する覚書を指す。同覚書は行政管理予算局(OMB)とOSTPが毎年夏に発表する

米DOEダリオ・ギル次官の公開書簡



2025年11月28日、ジェネシス・ミッションのディレクターに就任したダリオ・ギル次官はDOEおよび国立研究所のスタッフや研究者宛てに公開書簡を発出し、本取り組みの重要性とDOEの役割を強調した。

<https://www.energy.gov/science/articles/under-secretary-gils-letter-community>

書簡の主な内容

- ◆ IBM研究所での22年間にわたるAIや量子コンピューティング研究、2016年の世界初のクラウド量子コンピュータ公開などの実績を紹介。科学技術政策に関与し、PCAST委員や全米科学委員会の委員長を歴任した経験を踏まえ、今後のDOEの科学ミッションを主導する立場としての決意を示した。
- ◆ 現代の科学技術は「高性能コンピューティング + AI + 量子」の統合によって再構築されると指摘。これにより、従来指数関数的に計算コストがかかっていた問題が解決可能になり、科学研究、国家安全保障、エネルギー技術、産業競争力に根本的な変革をもたらすと強調。これらの技術は新たなスーパーコンピューティング基盤を形成し、科学的発見の速度を飛躍的に向上させるとした。
- ◆ トランプ大統領の指示に基づき始動したジェネシス・ミッションは、マンハッタン計画やアポロ計画に匹敵する国家プロジェクトとして位置づけられると強調。国家目標として、AIおよび量子コンピューティング革命を加速し、10年以内に米国の科学技術の生産性と影響力を倍増させるとした。
- ◆ DOE国立研究所、産業界、大学を結集し、世界最高性能のスーパーコンピュータ、AIシステム、次世代量子コンピュータを統合した科学・安全保障プラットフォームを構築すると掲げた。国立研究所の大型科学機器と連携させ、最大規模の科学データセットを生成し、次世代AIの開発を可能にすると説明。民間投資の急増（AIスーパーコンピュータが数百億ドル規模、米国内データセンター投資は5年間で2兆ドル）を踏まえ、国家目標達成には「前例のないパートナーシップ」が不可欠と強調。
- ◆ 競争相手として中国を明確に位置づけ、技術競争における勝利が国家の命運に関わると指摘。迅速な行動こそ成功の鍵であるとし、科学技術が国家戦略の主通貨となった現代において最大限の集中と実行が必要であると訴えた。

出典：DOE発表をもとにCRDSで再構成

1-3. AI for Scienceの国内外政策動向



AIの基本政策

AI4S関連政策

| | AIの基本政策 | AI4S関連政策 |
|---|---|---|
| 英 | <ul style="list-style-type: none"> 国家AI戦略（2021） 世界的AI強国とする10年計画： ①AIエコシステムの長期的なニーズへの投資、②AI対応経済への移行支援、③AI技術の国内および国際的ガバナンスの確保 AI機会行動計画(2025) ①AIを可能にするインフラの構築、②AI導入による生活変革、③自国で開発したAIによる未来の確保 | <ul style="list-style-type: none"> AI for Science戦略(2025) データ・計算資源・人材を通じAI駆動科学的研究を促す。①データ基盤と高品質・AI-readyデータの整備と、研究コミュニティのアクセス確保、②AI駆動科学的研究のための大規模計算資源へのアクセス保障、③人材育成や学際チーム形成を支援し、産学官連携や共同研究を促進 |
| 独 | <ul style="list-style-type: none"> 国家AI戦略（Nationale KI-Strategie）（2018、2020改訂） AIの開発・発展において、ドイツが世界を主導する拠点となり、ドイツ産業の競争力を確保する | <ul style="list-style-type: none"> BMBF(現BMFTR) 人工知能行動計画（2023） 国家AI戦略を補完し実行化するためのBMFTRのAI行動計画。 11の行動分野を特定し、研究基盤・インフラ・人材・応用・欧州連携などを強化 ErUM-Data行動計画（2021） 宇宙と物質を探る基礎科学データの管理とデジタル化を強化する枠組み。大規模・複雑なデータの効率的な処理・活用に焦点を当て、Big DataからSmart Dataへの移行を目指す |
| 仏 | <ul style="list-style-type: none"> 国家AI戦略（Stratégie nationale pour l'IA）（2018、2021、2025改訂） 2025年からの第3期では、計算機インフラとバリューチェーンとしての強化、AI人材の誘致と教育、AI利活用の促進、AIの信頼性の向上、を柱に掲げる。データセンターの設置、電力供給の優遇、AI教育・研究への投資、研究者の支援、AI企業支援の公共調達手続き簡素化、などを含む | <ul style="list-style-type: none"> PEPR IA（2024） 国家AI戦略の下、フランス2030の優先研究プログラム（PEPR）の一つ。9つのAIクラスターの卓越研究拠点を中心として、全国的なハイレベルの研究エコシステム構築を目指す CNRS; AISSAIセンターの設立（2021） |

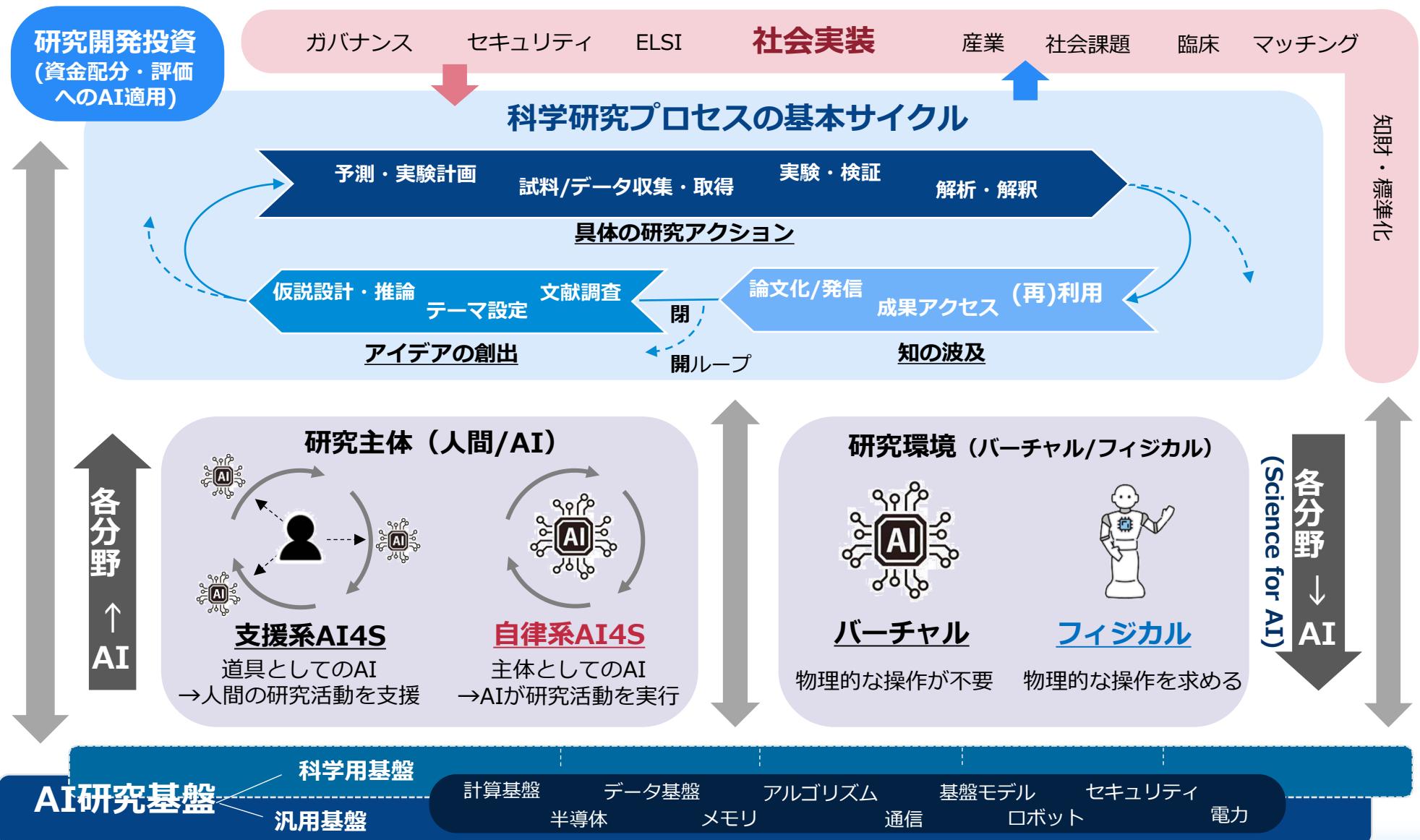
1-3. AI for Scienceの国内外政策動向



| | AIの基本政策 | AI4S関連政策 |
|--------|--|--|
| 中 | <ul style="list-style-type: none"> 次世代人工知能開発計画「AI2030」(2017) 2030年に世界的AIイノベーションセンターとなる 「人工知能+（AIプラス）」行動計画(2024) ビッグデータとAIの研究開発応用を深化。国際競争力のあるデジタル産業クラスターを建設 「人工知能+（AIプラス）」行動の実施徹底に関する意見(2025) 2027年、2030年、2035年を期限として定め、3段階の目標を掲げる | <ul style="list-style-type: none"> 人工知能駆動型科学研究（AI for Science）特別展開作業（科学技術省、2023） AIと基礎科学を融合し、専用プラットフォーム整備・オープンアクセス化・異分野融合促進 北京市人工知能科学研究高品質発展加速行動計画(2025) 北京をAI for Scienceにおける世界のリーダーにする |
| 韓 | <ul style="list-style-type: none"> AI基本法(2024) EUに次ぐ法制定。AI産業の育成支援、AIに対する安全性・信頼性・透明性の確保、違反事業者への罰則などを規定 新政府経済成長戦略(2025) 「AI3大強国」をビジョンの一つに掲げ、「AI大転換・超革新経済を推進するための30の先導プロジェクト」を推進 | <ul style="list-style-type: none"> 科学技術×AI国家戦略(2025) 6つの重点科学分野のAI基盤モデルの開発、自動化・自律型ラボの創設、研究者主導のAIトランスフォーメーション推進、研究データ活用の法制度改定、新たな研究倫理基準の提示、科学AIに対する需要の体系的把握と産業エコシステムとの接続、などを一体的に推進 |
| シンガポール | <ul style="list-style-type: none"> 国家AI戦略2.0 (National AI Strategy 2.0) (2023) 生成AIの進歩を受け、国家AI戦略1.0(2019)を刷新。 AIの安全性やセキュリティリスクに世界と連携して対応し、AI活用を通して国民と企業を力づけるため、3つのシステムと10のイネーブラーを通じて実施される15のアクションを提示 | <ul style="list-style-type: none"> 同戦略および政府によるAI for Science追加投資(2024) AIを科学研究の重要領域として位置づけ、AI研究と科学ドメイン研究の融合を推進。 ①1.2億SGDを追加投資し、材料・生命・健康分野を中心にAIを活用した科学研究の高度化を支援、②国家研究財団(NRF)がAI駆動科学の基盤整備を実施、③AI研究基盤・エコシステム・計算資源を強化し、科学研究へのAI統合を国家的に推進 |

2 【分野共通一動向】分野共通的なAI for Scienceの動向

2-1. AI for Scienceの全体像



2 【分野共通一動向】分野共通的なAI for Scienceの動向

2-1. AI for Scienceの全体像

ガバナンス

研究インテグリティ

臨床

産業

社会実装

ELSI

社会課題

標準化

マッチング

研究開発投資
(資金配分・評価
へのAI適用)

論文化/特許化
知の発信
成果アクセス
知の(再)利用

実験・検証
解析・解釈
モデリング

科学研究プロセス

各分野
↑ AI

各分野
↓ AI

文献調査
テーマ設定
仮説推論

仮説設定
予測・実験計画
データ収集

AI研究基盤

科学用基盤
汎用基盤

計算基盤

データ基盤

半導体

アルゴリズム

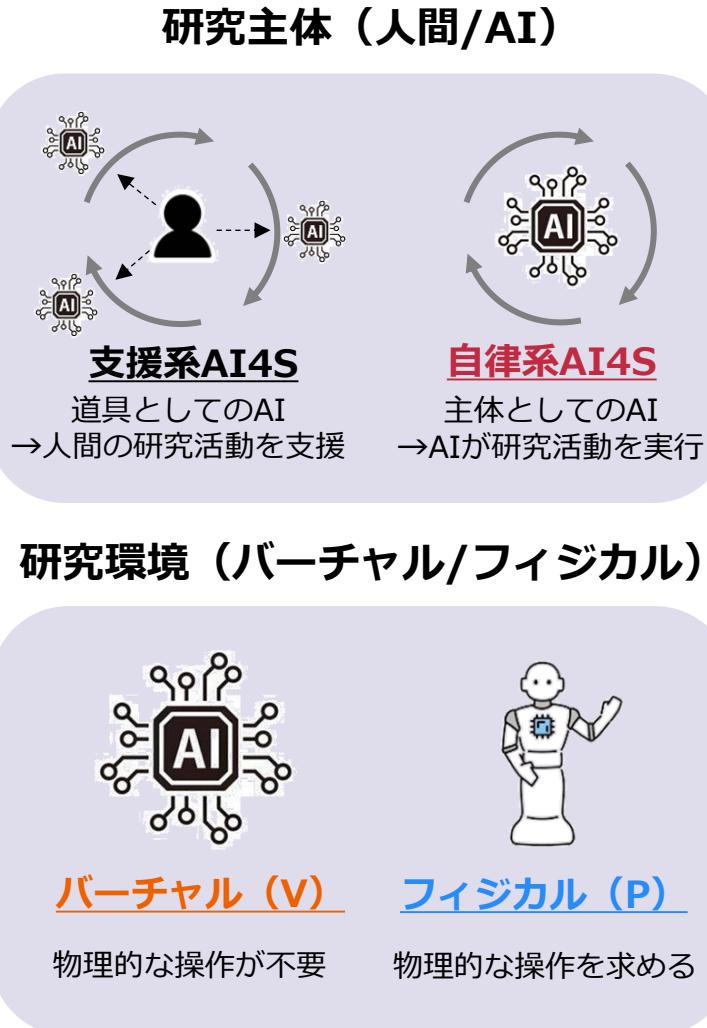
基盤モデル

セキュリティ

ロボット

電力

2-1. AI for Scienceの全体像



| 分野 | バーチャル操作 | フィジカル操作 | ■ V/P ■ レシオ |
|-----------------------|--------------------------------|-------------------------|-------------|
| 物理学 | 理論モデリング、シミュレーション、データ解析 | 機器操作、実験計測、試料調整 | |
| 化学 | 分子モデリング、反応予測、データ解析 | 合成、計測解析、物性評価 | |
| 生物学 | システムモデリング、データプロセッシング | 培養実験、顕微鏡計測、フィールドワーク | |
| 地球科学 | 環境モデリング、システムシミュレーション | フィールド調査、試料解析、モニタリング | |
| 数学 | 理論導出、数値解析、モデリング | データ収集、検証、デモ | |
| 計算機科学 | アルゴリズム開発、システム設計、ソフトウェア・プログラミング | ハードウェアテスト、システム開発、メンテナンス | |
| 工学 | 設計モデリング、シミュレーション、最適化 | 製造、試験、システムインテグレーション | |
| 医学 | イメージング、データ解析、トリートメントプランニング | 臨床試験、ラボ試験、患者ケア | |
| 農学 | 成長モデリング、システムシミュレーション、データ解析 | 圃場実験、ブリーディング、耕作 | |
| 社会科学 | データ解析、行動モデリング、シミュレーション | フィールド調査、行動調査 | |
| 人文科学 | デジタル解析、アーカイバル・プロセッシング | フィールド調査、工芸物解析、造形 | |
| バイオинформатика | コンピューター解析、モデリング、予測 | 実験バリデーション、データ収集 | |
| 認知科学 | 認知モデリング、データ解析、シミュレーション | 脳イメージング、行動実験 | |
| 環境学 | 環境モデリング、環境影響評価 | フィールドモニタリング、サンプリング | |
| ナノテク | ナノデバイスシミュレーション、プロセスモデリング | デバイス製造、材料合成・加工、センシング | |

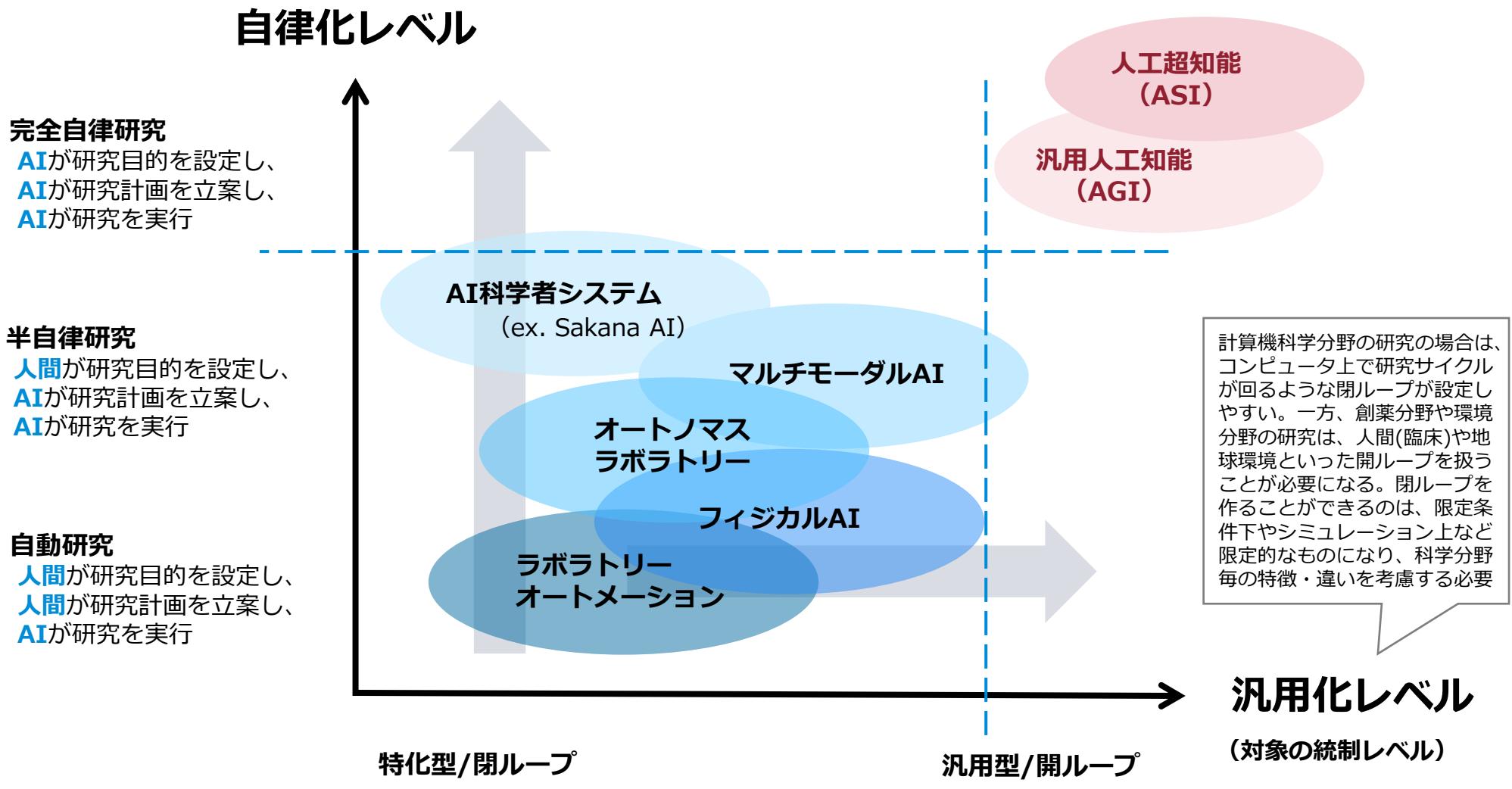
支援系AI4S

- 支援系AI4Sは、様々な科学分野、様々な研究ステップに拡大し広がっていく
- 様々な科学分野、様々な研究ステップにおいて、AIは優秀な助手の役割を担うことに加え、特定の研究ステップではこれまでの限界を打破するような変化・進展を遂げる
- 政策面では、AI4Sの底上げや裾野拡大、個々の科学分野の加速・発展や融合促進に資する施策を実施

自律系AI4S

- AI4Sの最先端、科学研究の本質的革新、圧倒的な研究競争力が、自律系AI4Sの探求から生じ得る
- 人間の介在が少ないかほとんどなしに、自動的・自律的に科学研究サイクルを高速に回す自律系AI4Sは、科学的発見において指数関数的な発展をもたらし科学研究にゲームチェンジを起こす可能性
- 自律系AI4Sが回り始めるのは、当初は閉じた限定的な科学研究ターゲットだが、急速に適用可能な対象を拡大していくかもしれない
- また、AIが「AIの研究」を自律的に推進し始めると、AIが高速に自己改良を進めることにもなり、AI研究の爆発的発展・超知能化が起り得るともいわれる
- 現在の基盤モデルAIの延長で実現されるとの見方と、もう一段ブレークスルーが必要との見方がそれぞれ存在。現時点ではどちらの変化・シナリオも想定。またメタサイエンスの観点も重要な。

2-1. AI for Scienceの全体像

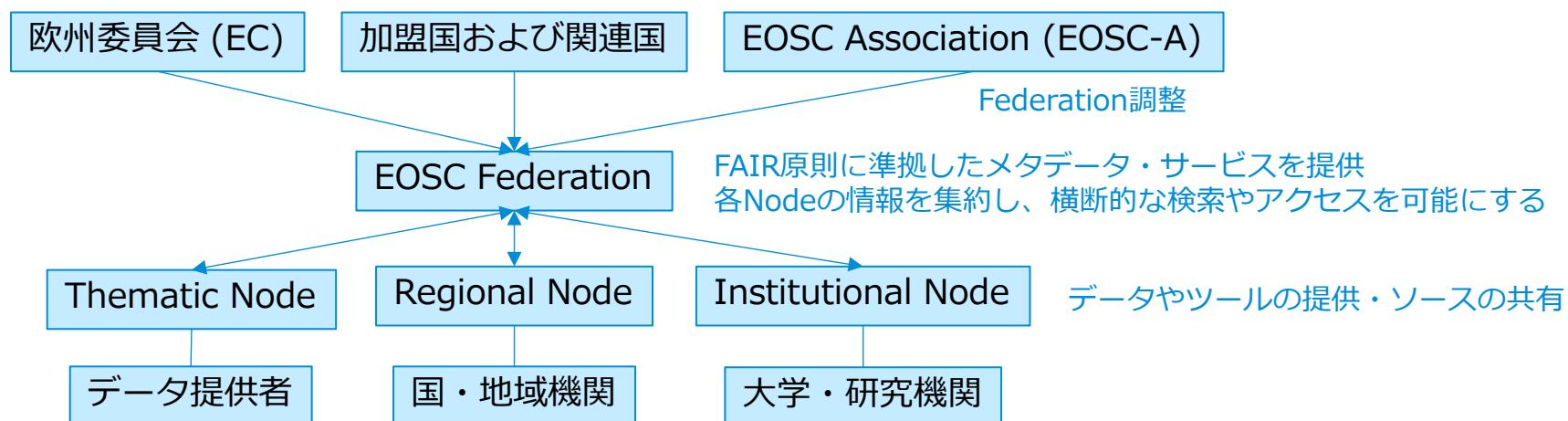


限定・特化された対象の統制レベル下で自律化レベルがまず高まり、
統制が緩和された条件下（汎用）へ拡張・発展していくのではないか

データ基盤の海外事例：欧洲オープンサイエンスクラウド (EOSC)

- EOSCは、欧洲の研究コミュニティがオープンサイエンスの原則に基づき、科学データやサービスを共有・再利用することを促進するための欧洲全体のフレームワーク。個々のNodeは、特定の地域やテーマに基づいて構成され、独自のデータやツールを提供する。複数のNodeを連携し、機能させたのがFederationであり、各国や地域の研究インフラを統合し、データの共有と管理を容易にするサービスを提供する。
- EOSCの意思決定は、主にEOSC三者ガバナンスが行い、Federationの運営や方針は、EOSC-AやECの代表者が決定、Node間協力はEOSCフレームワークに準拠しながら自律的に行動し、相互に協力しながら、共通の目標に向かって活動する。これにより、データの相互運用性やサービスの統一性を確保している。

EOSC三者ガバナンス



ELIXIR (生命科学)
 LifeWatch (生物多様性)
 ICOS (温室効果ガス観測)
 CERIC-ERIC (材料科学)
 EBRAINS (神経科学)
 など

NI4OS-Europe (南東ヨーロッパ)
 EOSC-Nordic (北欧)
 EOSC-Pillar (中・南欧)
 EOSC-Synergy (イベリア半島中心)
 など

CERN (物理学・HPC)
 EMBL-EBI (欧洲バイオインフォマティクス研究所)
 University of Ghent (EOSC実装拠点)
 FZ Jülich (ユーリッヒ研究所、HPC系)
 CINECA (伊・学術スーパーコンピュータセンター)
 SURF (オランダの研究ICT機構)
 CNRSデータセンター (フランス)
 など

EOSC Federation

■ EOSC

欧洲の研究コミュニティがオープンサイエンスの原則に基づき、科学データやサービスを共有・再利用することを促進するための欧洲全体のフレームワーク

■ EOSC Federation Architecture

Nodeが個々に特定の地域やテーマに基づいて構成され、独自のデータやツールを提供する。複数のNodeを連携し機能させたものがFederationであり、各国や地域の研究インフラを統合し、データの共有と管理を容易にするサービスを提供する。EOSC Federationは以下3つの主要要素（青字）で構成

Node

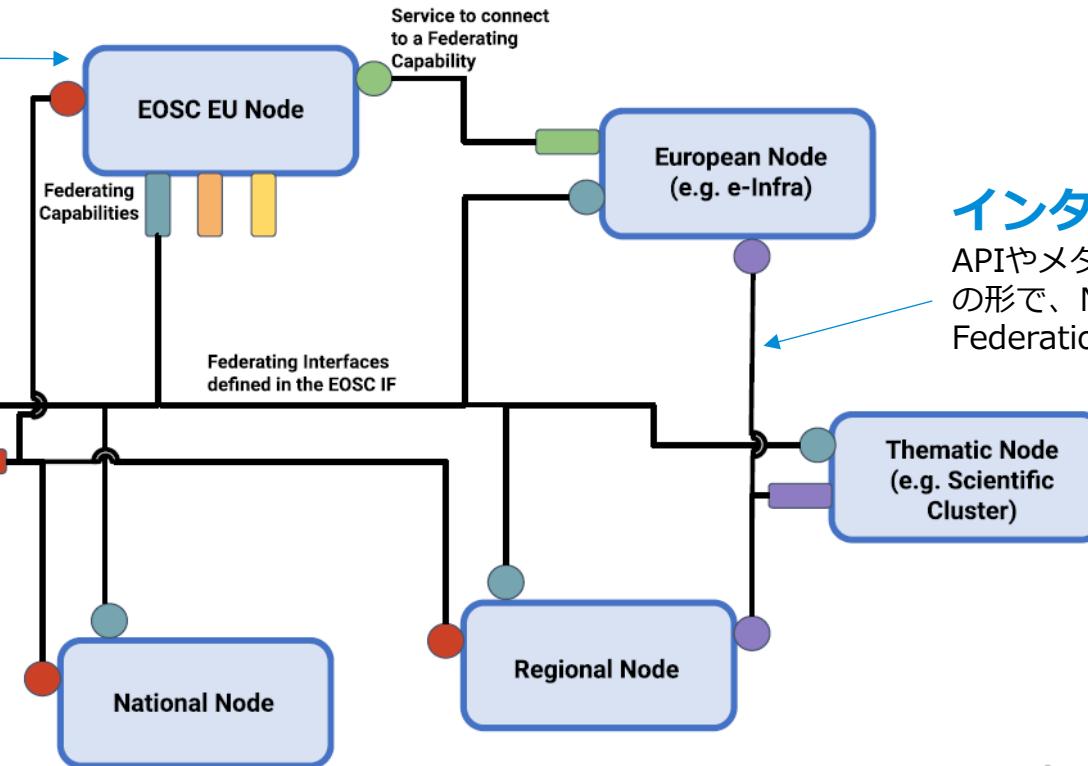
国レベル、地域レベル、テーマ別、欧洲全体にまたがる e-インフラ等によるNodeを含む

Node内のサービス

Thematic Node
(e.g. RI)

National Node

Federating Capabilities
最終ユーザーやサービス提供者が
Federation内のサービス・データ・
リソースを活用できるようにする機能



インターフェース

APIやメタデータスキーマなどの形で、Node内のサービスと Federation機能を接続。

<https://eosc.eu/eosc-about/building-the-eosc-federation/eosc-federation-handbook/>

2-2. AI for Scienceのための研究基盤

■標準的なEOSC Nodes Architectureの構成要素

標準的なEOSC Nodesは以下の3つの主要構成要素（青字）に分類：

Node Core Capabilities

Nodeの運用を可能にする基本機能：例：AAI（認証・認可インフラ）ヘルプデスクモニタリングなど

Node Resources

Nodeのエンドユーザーが直接アクセス可能なサービス、データ、他の研究成果物

a. Generic Capabilities

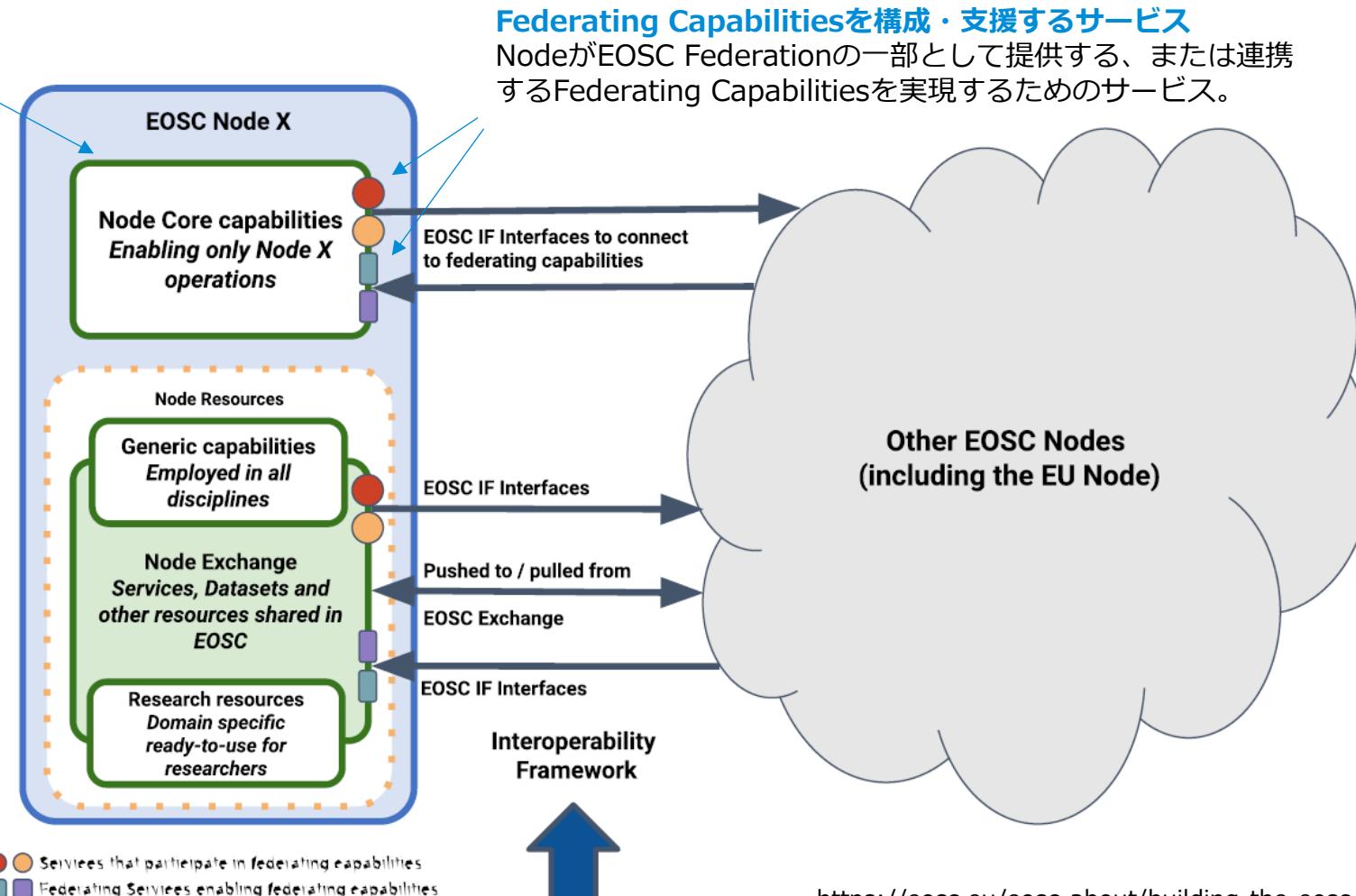
研究データ管理の日常的な作業に用いられ、ほぼすべての科学分野に関連する共通機能（例：データ転送サービス、クラウドインフラ）

b. Research Resources

特定分野に特化したサービス、データセット、研究成果物で、主にそのNodeの研究者のみが利用対象（例：特定分野のデータセットや解析アプリ）

c. Node Exchange

NodeがEOSC Federationに提供するリソースの一部。汎用機能や研究リソースの一部が対象

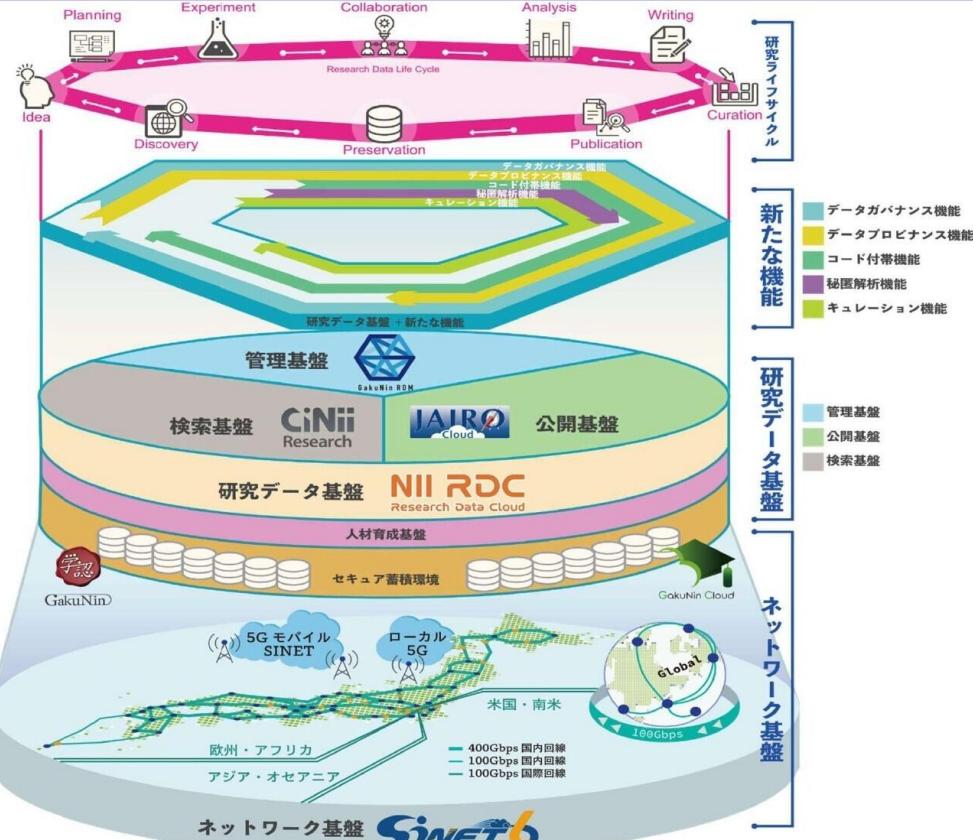


<https://eosc.eu/eosc-about/building-the-eosc-federation/eosc-federation-handbook/>

2-2. AI for Scienceのための研究基盤

国内取組：AI等の活用を推進する研究データエコシステム構築事業

NII事業の全体像

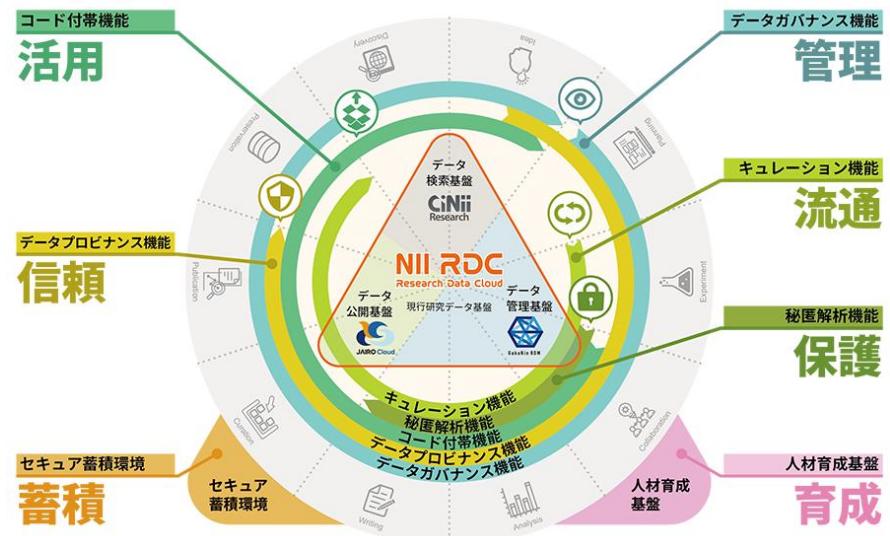


NII

研究データの管理、公開、検索を統合的に扱う
基盤整備を推進

国立情報学研究所（NII）が展開するResearch Data Cloud (NII RDC)

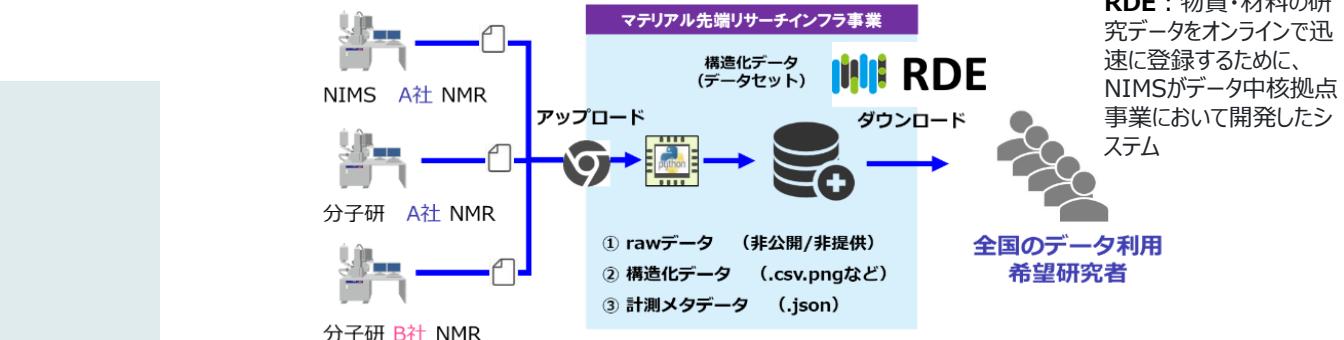
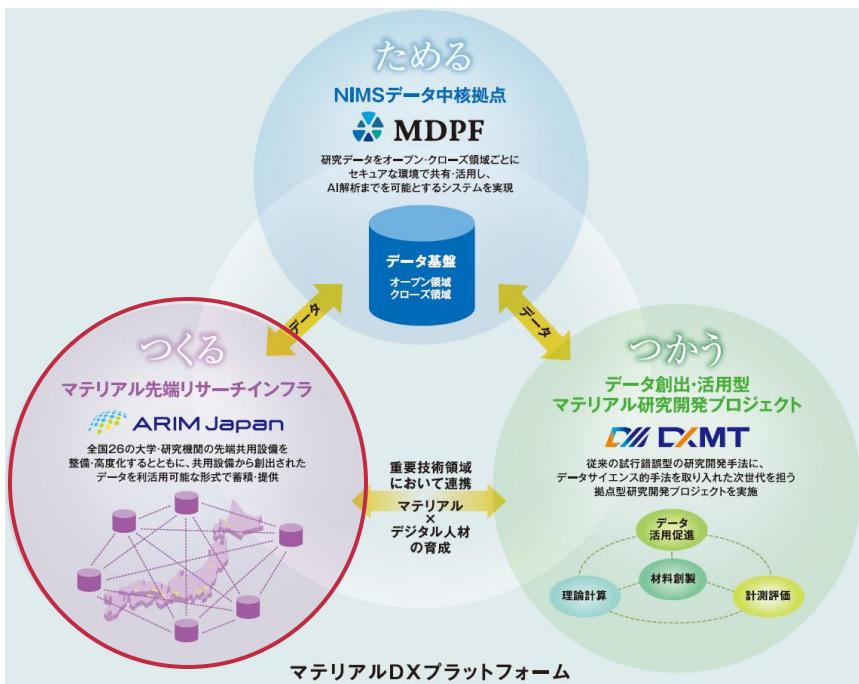
学術情報ネットワーク「SINET6」を基盤に、
セキュア蓄積環境、人材育成基盤、研究データ
基盤「NII RDC (Research Data Cloud)」を
提供



2-2. AI for Scienceのための研究基盤

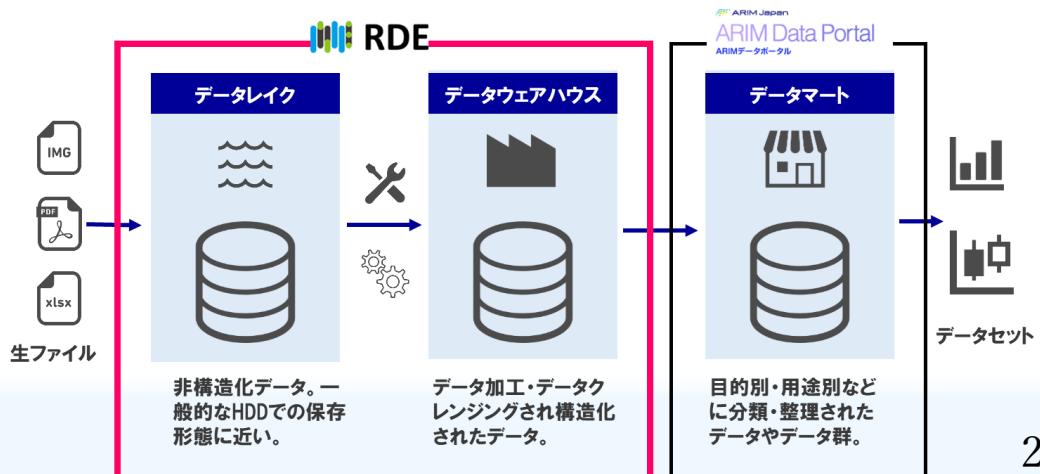
国内取組：マテリアル先端リサーチインフラ事業 + NIMSデータ中核拠点事業

- 参画26機関の共用機器利用からのマテリアルデータをワンストップで**データ構造化**
- 機械学習やデータ駆動型研究へ利活用しやすい**AI ready**な形で**「データセット」化**



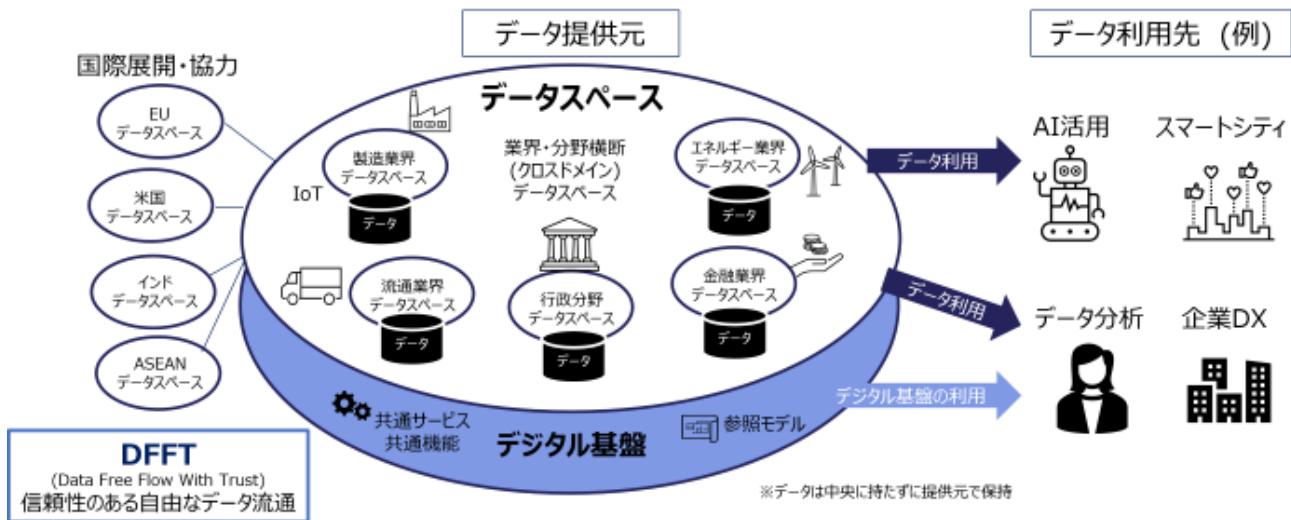
メーカーが異なる共用装置でも共通したデータ形式で構造化

- データ登録は**RDE** -「データレイク & データウェアハウス- で収集・蓄積
- データ共用はARIMデータポータル -「データマート」- から利用

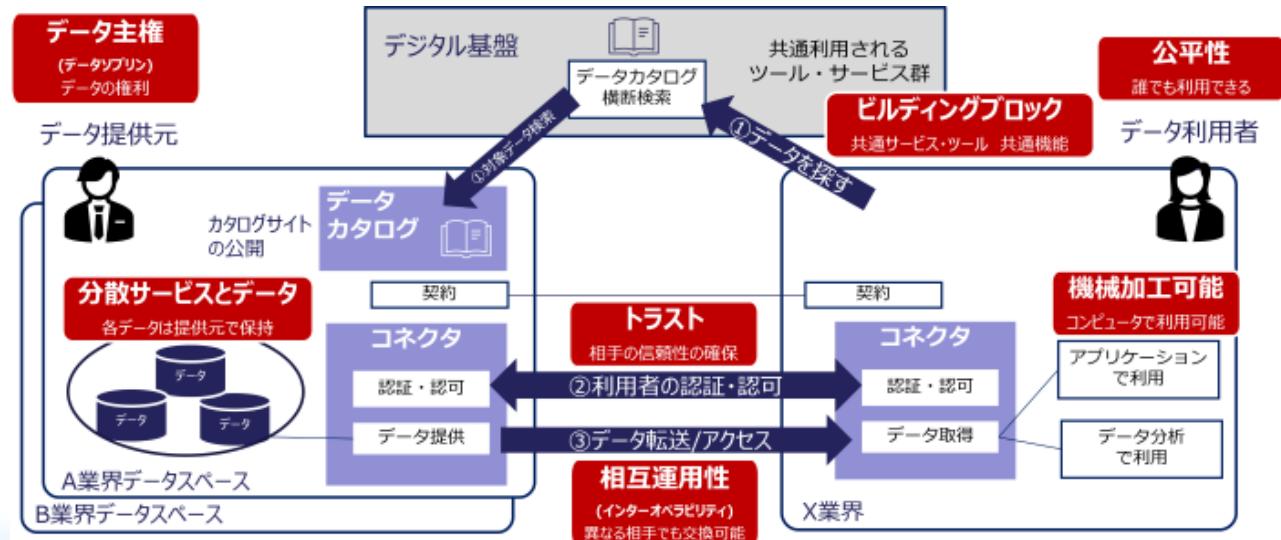


2-2. AI for Scienceのための研究基盤

国内取組：IPA（独立行政法人情報処理推進機構）データスペース



データスペース：国境や分野の壁を越えた新しい経済空間、社会活動の空間の概念。国、組織を越えてデータを連携できるルールや仕組みを整備し、これまで以上に「多種多様」で「信頼性のある」大量のデータを利用できるようにすることで、新しいサービスの創出や、既存サービスの高度化を目指すことを目的とする



特徴：

データ提供元がデータの権利を保持し続ける「データ主権」、共通のデジタル基盤を利用してすることで誰もがデータを活用することが可能な「公平性」、データ提供元と相互に信頼性を確保した上でのデータ転送/アクセス可能な「相互運用性」などが挙げられる

2-2. AI for Scienceのための研究基盤



基盤モデル

調査報告書

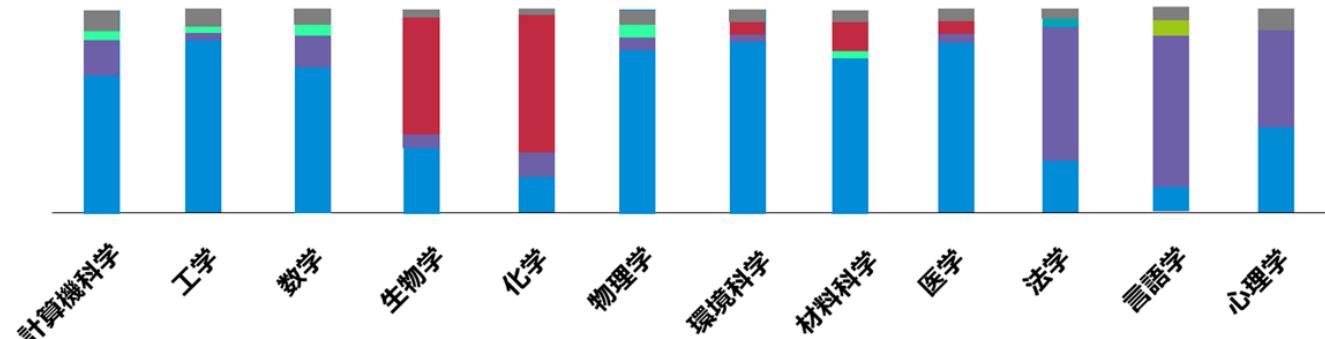
人工知能研究の新潮流 2025～基盤モデル・ 生成AIのインパクトと 課題～



2025年3月発行

| | A. そのまま利用する | B. 分野に適応させる | C. 独自モデルを開発する |
|-------|----------------------------|---|---------------------------------|
| モデル | 調整済みモデルをそのまま利用 (パラメータ固定) | モデルを修正(層の追加・削減、再学習でパラメータを更新) | 独自モデルをスクラッチから事前学習し、再学習もする |
| 適応策 | プロンプトエンジニアリング、外部ツール連携 | 再学習、転移学習、ファインチューニング、蒸留、RLHF等 (基本的には教師あり学習／強化学習) | |
| データ | 不要(学習しないので) | 再学習用に必要 | 大量・多様なデータが必要 |
| 計算資源 | ホストするには必要 | 再学習に必要 | 事前学習には大規模に必要 |
| 構成 | <p>プロンプト</p> | <p>ドメインのデータ (ラベル付き)</p> | <p>科学的コバース (論文、知識ベース等)</p> |
| 用途例 | 研究サイクル内的一般業務・周辺業務の効率化等 | 科学文献の概要・動向把握、言語・画像系作業の効率化等 | 分野固有データ(タンパク質、元素・化合物他)からの予測等 |
| システム例 | ChatGPT、Bard、Wolframプラグイン等 | Galactica、PMC-LLaMA、MatSciBERT等 | RGN2、HelixFold、ESMFold、EMBER3D等 |

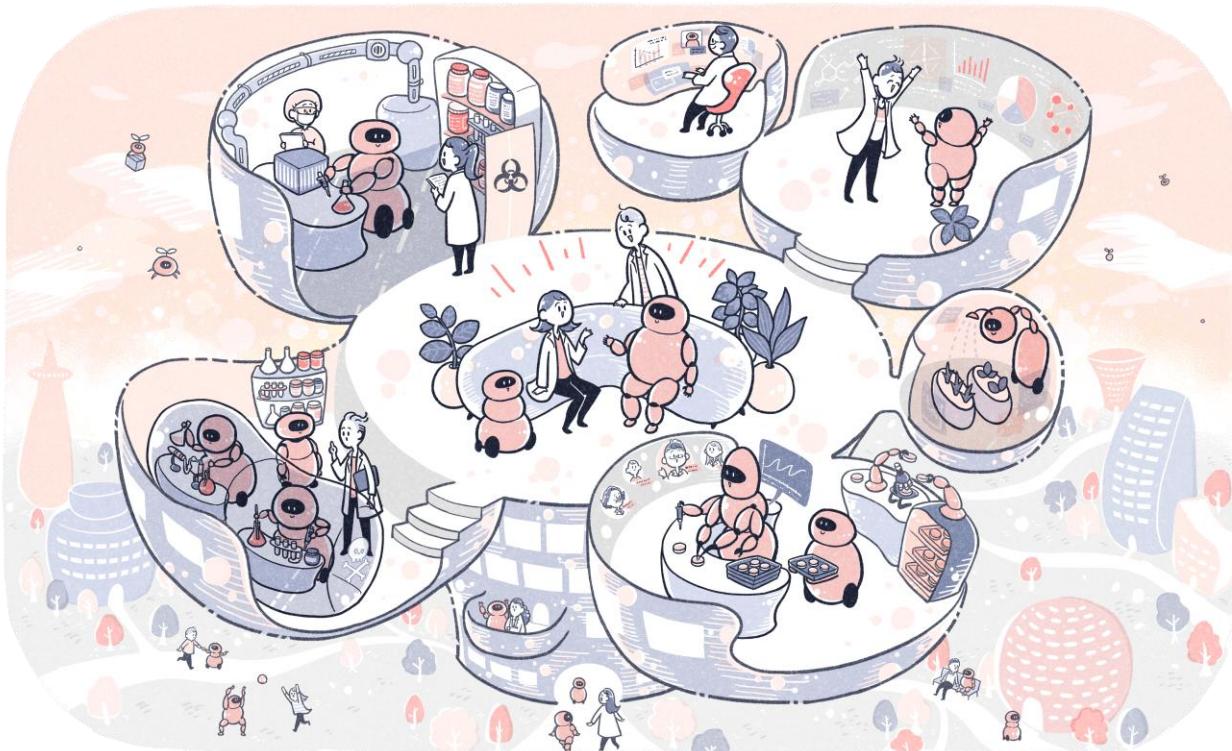
- 視覚
- 言語
- 生物学
- 画像生成
- 音声
- マルチモーダル
- その他



2-2. AI for Scienceのための研究基盤

AI科学者システム & 自律実験システム

人間科学者と自ら探究するAIロボット科学者の協働

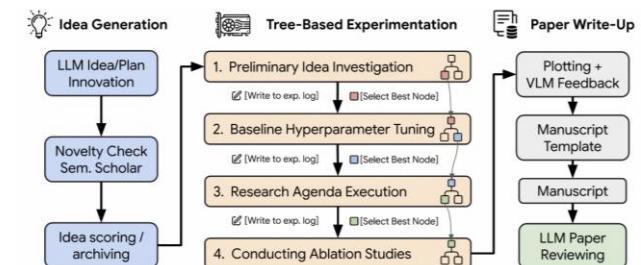


ムーンショット型研究開発事業：[目標3] 2050年までに、AIとロボットの共進化により、自ら学習・行動し人と共生するロボットを実現「人とAIロボットの創造的共進化によるサイエンス開拓」
<https://sites.google.com/g.ecc.u-tokyo.ac.jp/moonshot-ai-science-robot/>

Yutaro Yamada, Robert Tjarko Lange, Cong Lu, Shengran Hu, Chris Lu, Jakob Foerster, Jeff Clune, David Ha, The AI Scientist-v2: Workshop-Level Automated Scientific Discovery via Agentic Tree Search. arXiv., 2025.
JST未来社会創造事業 成果集 2024 本格研究（高橋課題）https://www.jst.go.jp/mirai/jp/uploads/outcome_takahashi.pdf

バーチャル領域

AI科学者システム



AI Scientist-v2 (Sakana AI)

実験

仮説形成、
データ分析

フィジカル領域

自律実験システム

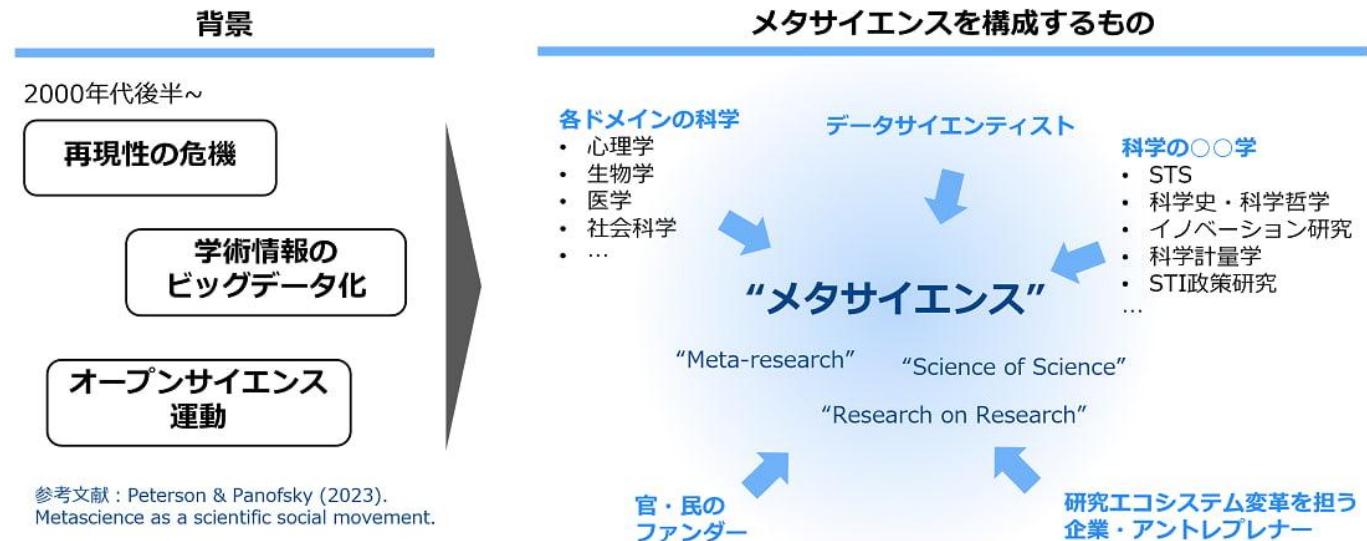


JST未来社会創造事業ロボティック・バイオロジー・
プロトタイピング・ラボ

2-3. AI for Scienceと科学の変容

メタサイエンス (Metascience)

- 「科学のあり方」自体を対象とする研究とその知見に基づく実践を含むメタサイエンス。科学史、科学哲学、科学計量学、科学人類学など、これまで科学を対象としてきた諸分野を包含する
- EU「AI in Science戦略」のエビデンレポート（2025）、英國「AI for Science戦略」（2025）で、メタサイエンスについて言及。**研究における責任あるAIの活用推進とそれを支える新たな研究倫理規範の整備**が論点に
- 英國UKRIはメタサイエンスに特化した研究助成（UKRI Metascience Research Grants）の2回目の公募を予定（2026年2月予定）
- 対象テーマの1つとして、**AI for Science の科学 (Science of AI for Science)** を指定
- AIの導入が研究環境をどのように変えつつあるか、それが科学的進歩をどのように促進、あるいは阻害するか、政府・産業界・資金提供組織がどのように対応すべきかを研究する提案を募集**



参考文献 : Peterson & Panofsky (2023).
Metascience as a scientific social movement.

UKRI Metascience research grants 2 <https://www.ukri.org/opportunity/metascience-research-grants-round-2/>

UKRI Metascience AI early career fellowships <https://www.ukri.org/opportunity/ukri-metascience-ai-early-career-fellowships/>

JST-CRDS 第75回 メタサイエンスとは何か～「営みとしての科学」を理解し、よりよく変えていく研究・実践の胎動～ <https://www.jst.go.jp/crds/column/kaisetsu/column75.html>

2-3. AI for Scienceと科学の変容



nature

NEWS FEATURE | 14 May 2025

Is it OK for AI to write science papers? Nature survey shows researchers are split

論文執筆へAIを活用することのはず

サーベイ論文DDoS攻撃 (survey paper DDoS attack) : AIが生成した信頼性の低い大量のサーベイ論文によって引き起こされる文献汚染の問題も。



AIが研究論文の筆頭著者と査読者の両方を務める初のオープンカンファレンス (2025年10月)

Is it OK for AI to write science papers? Nature survey shows researchers are split, Nature, 2025 <https://www.nature.com/articles/d41586-025-01463-8>
Jianghao Lin, Rong Shan, Jiachen Zhu, Yunjia Xi, Yong Yu, Weinan Zhang, Stop DDoS Attacking the Research Community with AI-Generated Survey Papers, arXiv, 2025. Open Conference of AI Agents for Science 2025 <https://agents4science.stanford.edu/index.html>
Lisa Messeri & M. J. Crockett, Artificial intelligence and illusions of understanding in scientific research, Nature, 2024. <https://www.nature.com/articles/s41586-024-07146-0>
Sayash Kapoor and Arvind Narayanan, Could AI slow science? Confronting the production-progress paradox, 2025. https://www.normaltech.ai/p/could-ai-slow-science?utm_source=chatgpt.com

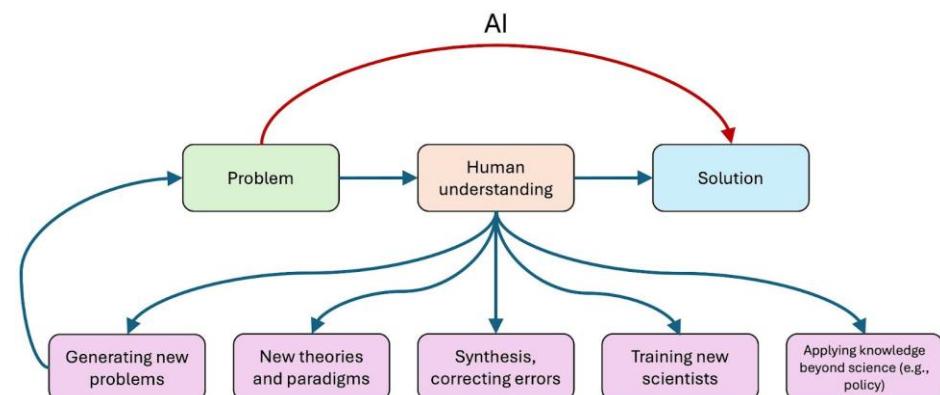
(誤) 信念



実際



AIへの過信と「理解の錯覚」



科学的「理解」のショートカット

2-3. AI for Scienceと科学の変容



AIと产学橋渡し

オープンイノベーション特化型の生成AIプラットフォーム「Bibbidi（ビビディ）」

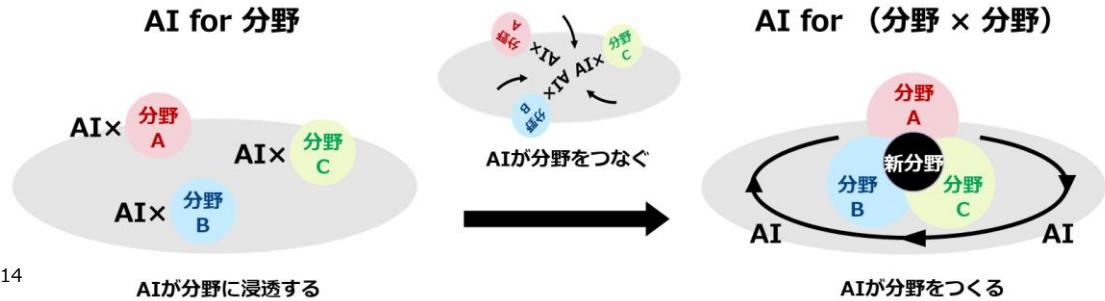
- 産業技術総合研究所が保有する約15万件の技術情報（シーズ）と企業の事業課題・市場課題などの情報（ニーズ）を、AIで結びつける
- 人間思考の枠を超えた「**予期せぬ出会い**」を発生。"イノベーションの種"の発見可能性を向上
- 産総研グループ以外の大学や研究機関が持つ技術情報も、マッチング可能な対象に拡大予定



AIと異分野融合

AGI for Science – 6つの問い合わせ (上海人工智能研究所 所長 周伯文氏)

- 今後アプローチされるべき科学とAIの間の核心的な問い合わせの1つとして、「**融合の問い合わせ**」を提起
- 「AI for Scienceの真の魅力は、**単一分野へのAIの活用にとどまらず**、むしろ**異なる分野間の深い融合**を促進し、**新たな学際分野や多分野間の相乗効果を生み出す**点にある」
- 国立情報学研究所（NII）所長 黒橋禎夫氏：
NIIの知識基盤の実現に向けて、**挑戦し得る新たな学際的研究テーマの提案**や、**連携によって研究を発展させる可能性を持つ共同研究者の探索**へのAIの活用を提起



ストックマーク株式会社、産総研の技術と企業の事業課題をつなぐ生成AI「Bibbidi」を開発、2025.10.14

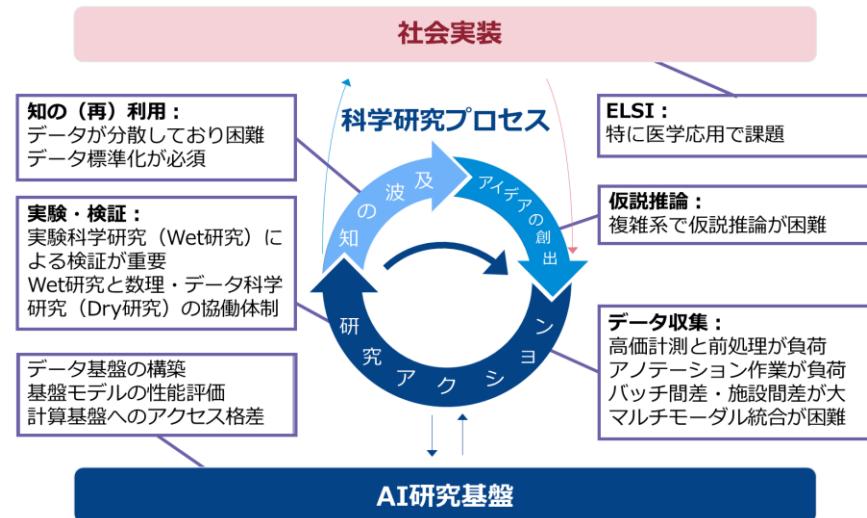
<https://stockmark.co.jp/news/20251014>

上海人工智能实验室、AGI for Science的六个前沿问题 <https://www.shlab.org.cn/news/5444211>

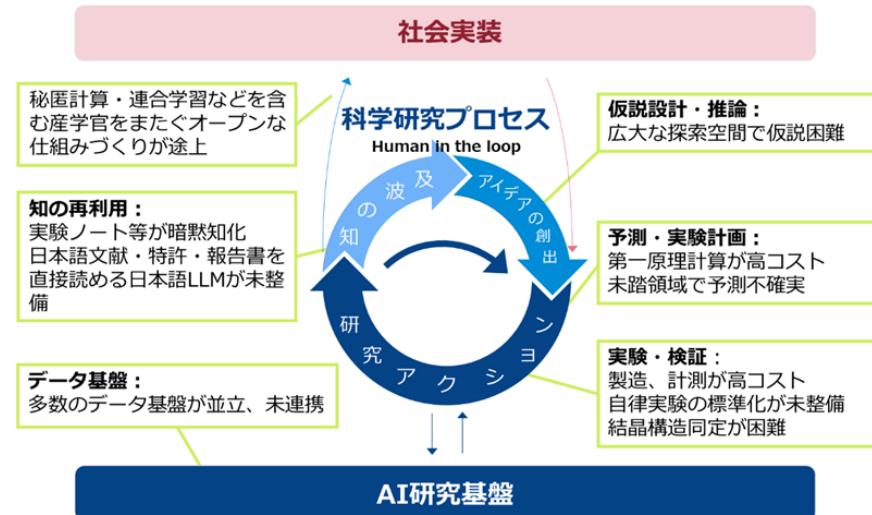
黒橋禎夫、データ基盤から知識基盤へ、学術情報基盤オープンフォーラム2025 <https://www.nii.ac.jp/openforum/upload/NIOpenForum20250616kicyo.pdf>

3 【分野別一動向 1 : AI→各分野】各分野へのAIの貢献

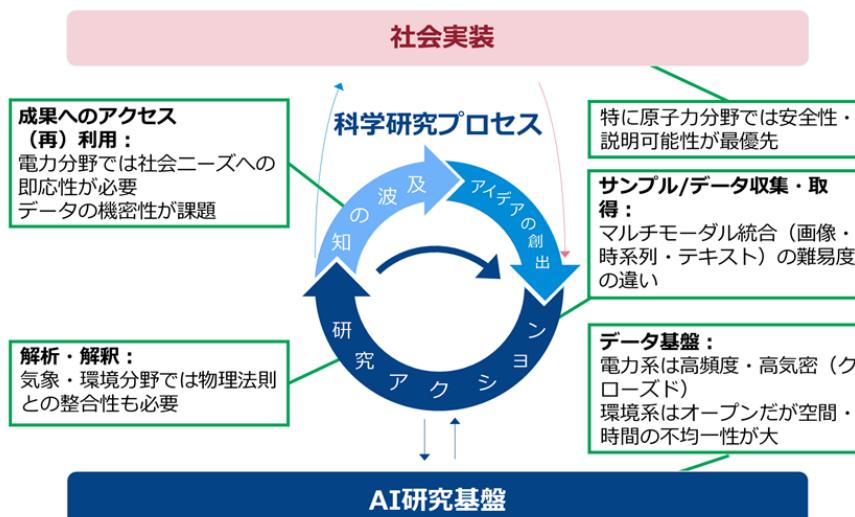
ライフサイエンス分野



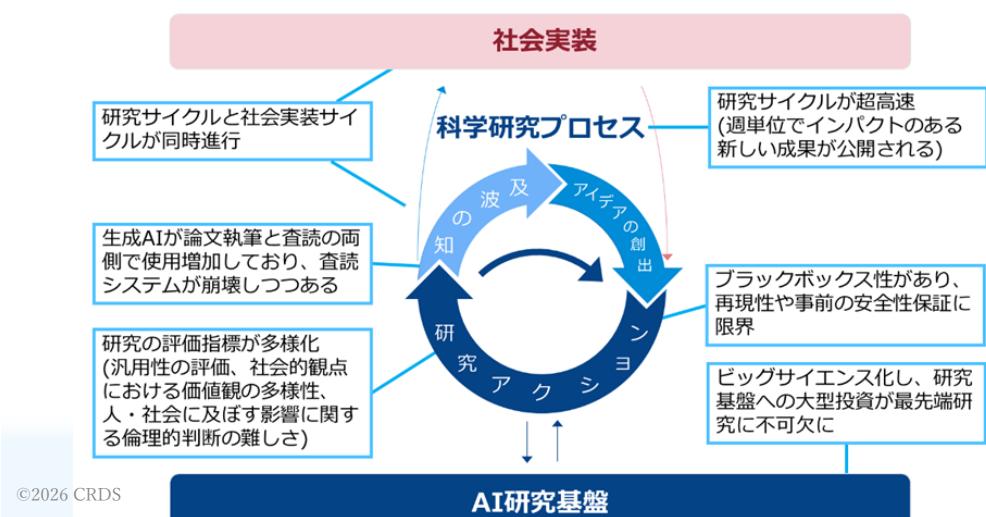
マテリアル分野



環境・エネルギー分野



情報科学分野



3-1. AI → ライフサイエンス分野

生命科学・創薬

■ タンパク質構造予測

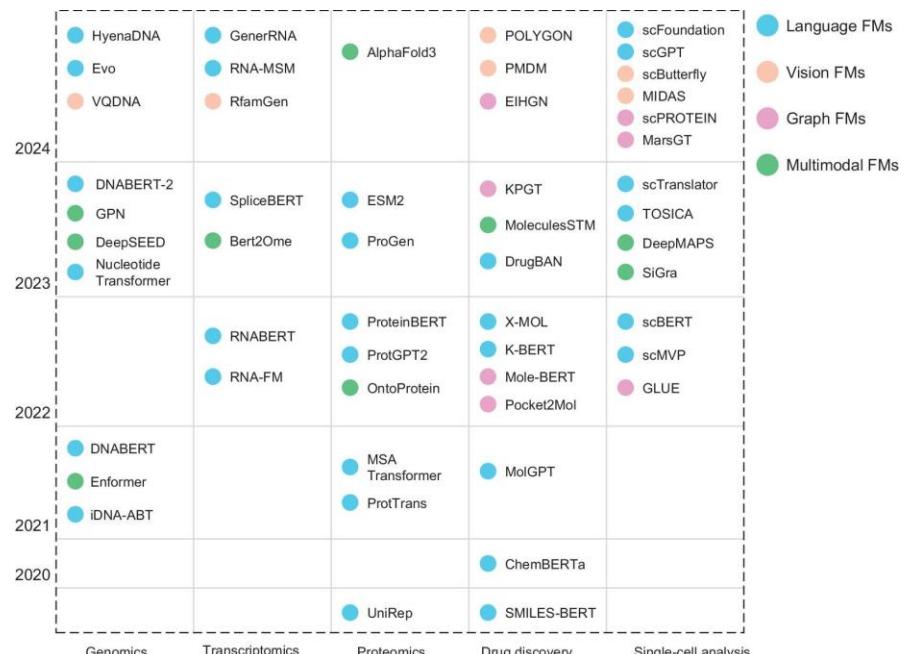
- AlphaFold2の登場以来、AIを用いたタンパク質構造予測の進展は凄まじい。
- AlphaFold3, RosettaFold, Boltz-1, Chai-1などが開発され、タンパク質分子だけでなく、RNA, DNA, 低分子化合物などの構造やそれらの複合体の構造予測が可能になっている。動的な性質の予測が課題。

■ タンパク質構造デザイン

- AIを用いた手法が発展しており、生成モデルを使ったRFdiffusionにより主鎖構造の発生が可能になり、ProteinMPNNではアミノ酸配列を設計することができる。
- 特定のタンパク質に結合する構造や特定のモチーフを含んだ構造も発生することができるため、機能の設計も行うことが可能に。

■ 基盤モデルの進化

- ゲノミクス、トランск립トミクス、プロテオミクス、ドラッグディスカバリー、シングルセル解析などの多様な下流タスクに適応する基盤モデルが、米欧中のスタートアップや大学を中心に次々と開発されている。



Foundation models in bioinformatics Open Access

Fei Guo, et al., National Science Review, Volume 12, Issue 4, April 2025,
nwaf028, <https://doi.org/10.1093/nsr/nwaf028>

微生物ものづくり

■ AIを利用した酵素工学

- AlphaFold3による生体分子立体構造予測や、酵素の機能を予測する学習ツールの開発も急速に進む。
- Meta AIが開発したESM-2はタンパク質の一次配列で予測を行うprotein language model。
- 2025年に発表されたEVOLVEproは配列の進化的妥当性をスコア化する機能を有しており、進化を模倣するAIツールとして注目を集めている。

■ AIによる生合成経路予測と物質生産への応用

- 合成生物学の進展により、宿主微生物が元来生成しない有用物質の生産事例が増加。
- バイオインフォマティクスにより、化合物構造から生合成反応が予測され、生合成反応を触媒する酵素が一次配列と基質構造から予測されることで、生合成経路が明らかとなり、その経路を実装した大腸菌で植物由来アルカロイドの高生産が実現。
- 例えば、従来、不可能だったハロゲン化物の微生物生産が可能になっている他、未知の生合成反応を実現する手法も注目。

■ AIによる微生物培養の培地最適化

- 微生物の培養においてその機能を最大限発揮させるための培地作成は生産コスト、生産性双方にとって大きな問題である。
- AIと培地機器分析、培養評価データから利用する微生物に最適な培地を設計することが可能に。

■ 微生物培養プロセスのAI制御

- 微生物培養を最適に制御するためにバイオプロセスで監視しているプロセスデータをもとに培養の時間発展予測を行なうモデルが開発され、外乱が生じた場合も最適性を確保することに成功している。
- 実験室で取られたデータをベースに大規模プロセスの予測も可能であることが示されている。

3-1. AI → ライフサイエンス分野



| 領域 | データの品質 | データの偏り | データ量 | データ対象 | アクセス形態 |
|-----------|---|--------------------------------|--|---------------------------------|---|
| オミクス | ゲノム／トランスクリプトーム／プロテオームデータ等、品質整備中・ノイズ・バッチ効果あり | モデル生物・特定条件偏重、ヒト以外少数の偏りあり | 非常に大量（次世代シーケンサー等）、配列データ+メタデータ／質量分析装置など、マスデータ+メタデータ | ゲノム／トランスクリプトーム／プロテオーム／メタボロームデータ | Natureなど主要雑誌では出版時にデータを公開データベースに登録することを義務付けている。 ヒト臨床データについては多くがクローズドあるいは倫理審査を経た上で有償配布 |
| タンパク質構造 | 構造・活性・改変／設計データ、品質高めであるが整備途上 | タンパク質ファミリー偏重、構造解析が難しい対象少数で偏りあり | 中～高（活性測定、改変系、計算予測データ） | X線結晶構造、クライオEM、分子動力学データ | 研究用オープンもあるが企業用途・工業用途はクローズド |
| イメージング | 医用・バイオイメージング（顕微鏡、MRI、CT、ライブセル）品質・標準化まだ課題あり | 機器／施設／被験者偏りあり | 非常に大量（画像データ+メタデータ） | 顕微鏡・生体イメージング、医療画像、ライブセル映像 | 公的オープンデータもあるが、医療機関／企業ではクローズド多い |
| 微生物ものづくり | 発酵／生産工程データの品質は高い | 微生物株・産業用途で偏りあり | 中（発酵データ+オミクス+プロセス） | 微生物株データ、代謝／発酵データ、オミクスデータ | 企業利用でクローズドが多い。学術用途でオープンあり |
| AI創薬 | 化合物・ターゲット・活性など多種多様なデータあり。前処理・統合に品質課題あり。 | 公開化合物偏重、成功例バイアス、データの偏りあり | 非常に大量（化学構造+バイオアッセイ+計算データ） | 化学構造、活性データ、ターゲットデータ、モーデリングデータ | クローズドが多いが、公開データベースも利用されている（化合物情報と活性データなどが紐づいた状態でデータベース公開されていることが少ない） |
| AI診断・予防 | 臨床画像・EHR・ウェアラブルデータなど品質にはばらつき。キュレーションが鍵。 | 患者群（年齢・性別・地域）偏り、施設偏りあり | 高（画像+電子カルテ+モニタリングデータ） | 医療画像、電子カルテ、健康データ、モニタリングデータ | 病院・企業データ多くクローズド。オープン研究データもあり |
| ゲノム医療 | データの品質は高いが、異機種データ・ノイズ・アノテーション不一致など課題あり | 系統・民族・地域が偏るケースが多い（欧米優勢） | 非常に大量（シーケンス、バイオバンク） | ゲノムシーケンス、バリアント、臨床表現型データ | 部分オープン（公共ゲノムDB）+多くはクローズド（企業・病院） |
| スマート農林水産業 | IoT／センサー／リモートセンシングデータが増加、品質整備中 | 収集地域・装置種類で偏りあり | 高（センサー、衛星、フィールド） | センサー値、リモートセンシング、環境・生産データ | 論文に付随するデータはオープン。データベース上にある農業データは審査の上、有償提供されている。一方、データベースに格納されていないリアルワールドデータが多い |
| 食料・フードテック | 食品加工・成分・消費者データなど、品質が多様で課題あり | 地域／文化／消費者群で偏りあり | 中（成分データ、加工データ、消費者データ） | 食品成分、加工プロセス、消費者行動／健康データ | 企業利用でクローズドが多数。オープン研究データもあり |

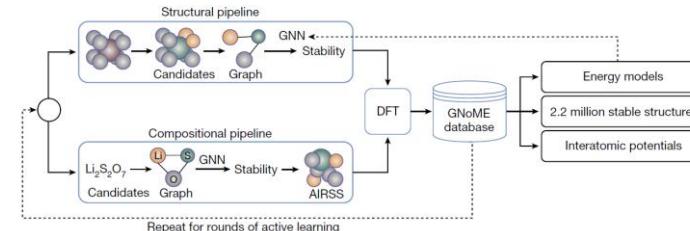
- * 多階層・多種類の大量データが創出
- * 標準化や品質管理が十分でなく、バッチ効果や機器依存性など構造的な課題あり
- * 機微性の高いデータが多く、データ共有には制度的配慮が必要

3-2. AI → マテリアル分野

■ Google DeepMind (29 Nov. 2023)

GNoME: Graph Networks for Materials Exploration

- グラフニューラルネットワーク (GNN) モデル：材料の安定性を予測
- 数100万のDFT計算による強化学習（→ 機械学習ポテンシャルの学習）
- 220万の新規結晶、38万の安定材料 (Materials Projectに提供)



■ Microsoft MatterSim (8 May 2024)

A Deep Learning Atomistic Model (interatomic potential)

- 第一原理計算とほぼ同じ精度、事前学習済みモデルとして微調整可能
- M3GNet (Materials 3D Graph Network) とGraphomer (Graph Transformer)を利用
- 1700万のデータを用いて学習

| Model | Matbench Discovery | | | | | | | | | |
|------------------|--------------------|-------|-------|-------|--------|-------|------------------|--------------------|--------|------------------------------|
| | CPS ↑ | Acc ↑ | F1 ↑ | DAF ↓ | Prec ↑ | MAE ↓ | R ² ↑ | R _{SIM} ↑ | RMSD ↓ | Training Set |
| eSEN-30M-OAM | 0.888 | 0.977 | 0.925 | 6.069 | 0.928 | 0.018 | 0.866 | 0.170 | 0.061 | 6.6M (113M) Mat24+MPt+Alex |
| ORB v3 | 0.861 | 0.971 | 0.903 | 5.912 | 0.904 | 0.024 | 0.821 | 0.210 | 0.075 | 6.47M (133M) MPt+Alex+OMat24 |
| SevenNet-MF-ompa | 0.845 | 0.969 | 0.901 | 5.825 | 0.890 | 0.021 | 0.867 | 0.317 | 0.064 | 6.6M (113M) Mat24+Alex+MPt |
| GRACE-2L-OAM | 0.837 | 0.963 | 0.884 | 5.774 | 0.883 | 0.023 | 0.862 | 0.294 | 0.067 | 6.6M (113M) Mat24+Alex+MPt |
| AlphaNet-v1-OAM | 0.804 | 0.971 | 0.903 | 5.777 | 0.883 | 0.020 | 0.868 | 0.644 | 0.032 | 6.6M (113M) Mat24+Alex+MPt |
| DPA-3.1-3M-FT | 0.802 | 0.963 | 0.884 | 5.667 | 0.866 | 0.023 | 0.869 | 0.469 | 0.069 | 163M OpenLM |
| eSEN-30M-MP | 0.797 | 0.946 | 0.831 | 5.260 | 0.804 | 0.033 | 0.822 | 0.340 | 0.075 | 146K (1.5M) MPt |
| MACE-MPtr | 0.795 | 0.954 | 0.822 | 5.825 | 0.853 | 0.028 | 0.842 | 0.412 | 0.073 | 3.37M (12M) MPt+Alex |
| MatterSim v1.5M | 0.767 | 0.959 | 0.862 | 5.852 | 0.895 | 0.024 | 0.863 | 0.574 | 0.073 | 17M MatterSim |
| GRACE-1L-OAM | 0.761 | 0.944 | 0.824 | 5.255 | 0.803 | 0.031 | 0.842 | 0.516 | 0.072 | 6.6M (113M) Mat24+Alex+MPt |
| Egnorm MPtr | 0.756 | 0.929 | 0.786 | 4.844 | 0.741 | 0.040 | 0.799 | 0.408 | 0.084 | 146K (1.5M) MPt |
| DPA-3.1-MPtr | 0.718 | 0.936 | 0.803 | 5.024 | 0.768 | 0.037 | 0.812 | 0.650 | 0.080 | 146K (1.5M) MPt |
| SevenNet-i3G | 0.714 | 0.920 | 0.760 | 4.629 | 0.708 | 0.044 | 0.776 | 0.550 | 0.085 | 146K (1.5M) MPt |

Meta社
英ベンチャーソウル大学
ルール大学ボーフム
清華大学

■ Microsoft MatterGen (16 Jan. 2025)

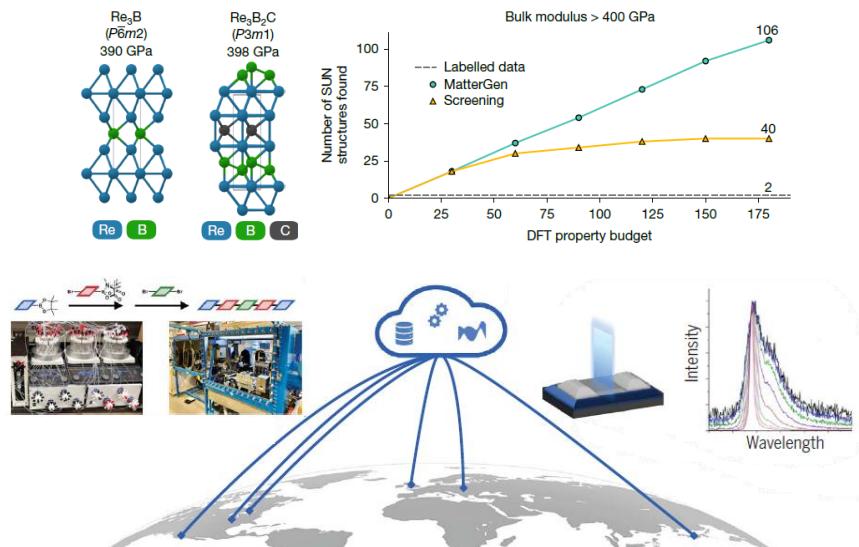
A generative model for inorganic materials design

- 設計要件に基づいたプロンプトを入力することで新規材料を生成
- 材料向けに設計され拡散モデル(画像生成に利用)
- 60万のデータを用いて学習

■ Cloud Hub for AI Experiment (17 May 2024)

Acceleration Consortium (Univ. of Toronto)が主導

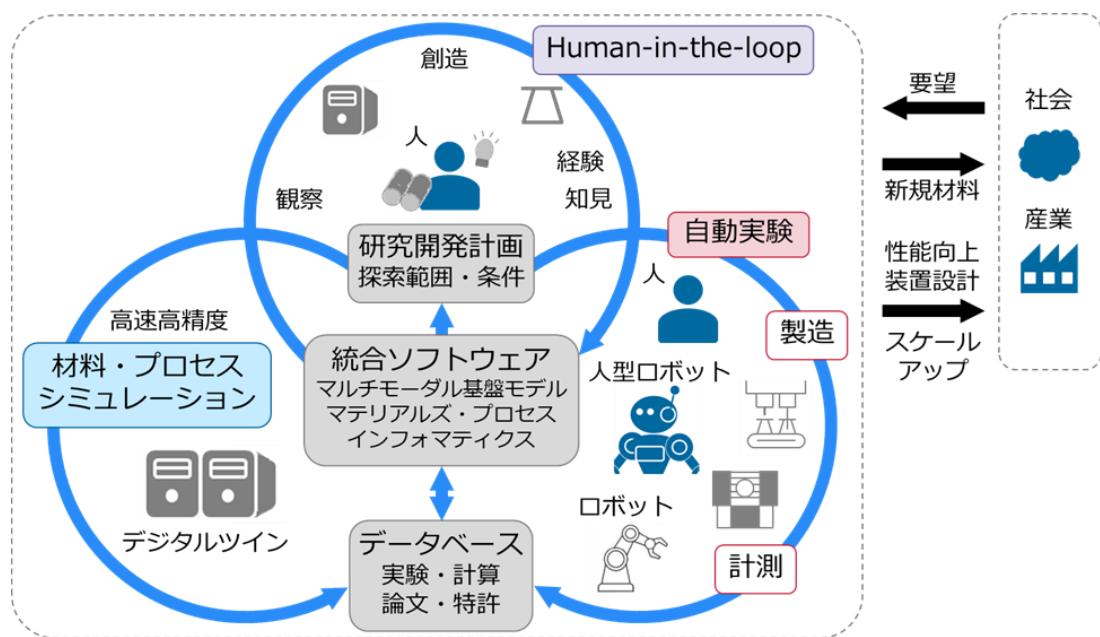
- 世界の5つの研究所（ブリティッシュコロンビア大、グラスゴー大、イリノイ大、九州大など）が参加し、分散型自動・自律実験を実証
- 有機固体レーザー用の21種類の新しい発光材料を発見



- Felix Strieth-Kalthoff et al., Delocalized, asynchronous, closed-loop discovery of organic laser emitters. *Science* 384, eadk9227 (2024). <https://www.science.org/doi/10.1126/science.adk9227>
- Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S.S. et al. Scaling deep learning for materials discovery. *Nature* 624, 80–85 (2023). <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
- H. Yang et al., "MatterSim: A Deep Learning Atomistic Model Across Elements, Temperatures and Pressures," arXiv:2405.04967 (2024). <https://arxiv.org/abs/2405.04967>
- Zeni, C., Pinsler, R., Zügner, D. et al. A generative model for inorganic materials design. *Nature* 639, 624–632 (2025). <https://doi.org/10.1038/s41586-025-08628-5>

3-2. AI → マテリアル分野

材料研究開発における自動自律化の将来像 (CRDS俯瞰WSより)



統合ソフトウェア : AI (マルチモーダルAI、LLM)、計画立案、シミュレーション、制御、スケジューリングなどの各ソフトウェアを相互に接続し、研究を**自律的**に継続

材料研究開発の自動・自律化：将来像（目標）

■ インフォマティクス

- 探索範囲・条件などの**問題設定**、自動的なデータ・情報収集を含めた自動自律化が可能
- 自動実験による大量データ、**装置設計**や**産業化**なども含む多目的な最適化が可能
- 基盤モデル**により実験室内のマルチモーダルデータの認識、**データの統合**が可能

■ シミュレーション

- 物性**ビッグデータ**の創出・探索が可能、ハイスクレープット実験との連携が進展
- 環境に応じたシミュレーション、実験全体の**デジタルツイン化**が可能

■ 自動自律実験

- 実ラインを模擬した**パイロットライン**として活用、**スケールアップ**の実践事例
- 実験・計測機器の標準化により、実験自動化とデータベース化が容易
- 汎用実験ロボット・**人型ロボット**の部分的な導入

■ 統合ソフトウェア

- 最新手法の取り込み、類似装置への展開、AIの利用が容易な**プラットフォーム**

■ 自動実験装置、シミュレータ、文献等がつながり、研究開発の自動自律化が可能

■ インフォマティクス、自動自律実験、統合ソフトウェアが有機的に連動

3-2. AI → マテリアル分野

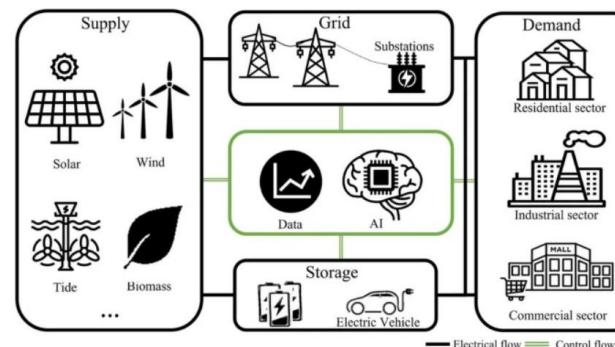
| 領域 | データの品質 | データの偏り | データ量 | データ対象 | アクセス形態 |
|---|-----------------------|--------------------|------------------------------|----------------------|------------------------|
| 低分子 CAS/ACS (米国) | 高 (専門家によるキュレーション) | 科学文献、商業的高価値化合物に偏り | 化学物質数 : 2.9億 | CAS番号・構造式・物性 | 有償 オープン (50万件) |
| 低分子 PubChem/NIH (米国) | 混在 | 医薬品に偏り | 化合物数 : 1.2億 | 構造式・物性・生物活性 | オープン (誰でもデータを登録・利用可能) |
| 有機小分子・有機金属化合物 Reaxys/Elsevier (オランダ) | 高 (人手によるキュレーション) | 科学文献、有機合成・医薬品に偏り | 化合物数 : 3400万 化学反応 : 5500万 | 化学反応・物性・生物活性 | 有償 |
| 結晶構造 (有機小分子・有機金属化合物) CSD/CCDC (英国) | 高 (専門家によるキュレーション) | 科学文献、医薬品に偏り | 構造数 : 130万 | 結晶構造・X線回折・分子構造 (実験) | 有償 |
| 結晶構造 (有機・無機化合物など) COD/国際コミュニティ | 高水準 (自動検証+コミュニティレビュー) | 科学文献、産業的高価値化合物に偏り | 構造数 : 53万 | 結晶構造 (CIF形式、実験) | オープン |
| ポリマー PoLyInfo/NIMS (日本) | 高 (採択基準) | 学術文献 (実測値)、研究対象に偏り | ポリマーサンプル数 : 17万 | 化学構造・物性・成形方法・測定条件 | 制限付 (ユーザー登録、大量DL禁止) |
| ポリマー RadonPy/統計数理研究所など (日本) | 高均質、計算精度に依存 | 産業的・学術的高価値ポリマーに偏り | ポリマー数 : 10万～1000万 (計画) | 34物性 (古典MD自動計算) | Libraryは公開、DBは段階的に公開予定 |
| 無機材料 (酸化物など) ICSD/FIZ Karlsruhe (ドイツ) | 高 (厳格な品質管理) | 学術文献、研究対象に偏り | 結晶構造数 : 32万 | 結晶構造・X線回折 (実験) | 有償 |
| 無機材料 (酸化物・合金など) AtomWork-Adv/NIMS (日本) | 高 (詳細情報付) | 科学技術文献、研究対象に偏り | 結晶構造数 : 39万 | 結晶構造・X線回折・物性 (実験・計算) | 有償 |
| 無機材料 (酸・硫・窒化物など) Materials Project/LBNL (米国) | 計算条件に依存 (使いやすさ・高信頼) | 計算可能な材料に偏り | 結晶構造数 : 20万 | 構造・物性 (第一原理計算) | オープン (ユーザー登録) |
| 無機材料 (酸・硫・窒化物など) AFLOW/Duke大学 (米国) | 計算条件に依存 | 計算可能な材料に偏り | 結晶構造数 : 390万 | 構造・物性 (第一原理計算) | オープン |
| 無機材料 (金属・酸化物・半導体など) NOMAD/FAIRmat (ドイツ) | 混在 | 有機材料に拡張中、欧洲注目材料に偏り | 材料数 : 430万 | 電子構造 (第一原理計算)、実験に拡張中 | オープン |
| 金属 Total metals/Total materia (スイス) | 高 (国際規格) | 新素材・研究材料に弱み | 材料数 : 35万 | 化学組成、機械的特性、物理的特性 | 有償 |
| 金属 Kinzoku/NIMS (日本) | 高 (学術論文) | 鉄鋼材料に偏り | 材料数 : 1000 | 機械的特性、物理的特性 | 制限付 (ユーザー登録、大量DL禁止) |

- * 化学組成や結晶構造などには構造化されたデータが多く、キュレーションが進んだデータベースも存在
- * 分野偏在やアクセス性の課題など、データの利用可能性には差あり
- * 実験・計算データの併存により、条件情報の不均等が再現性の課題

3-3. AI → 環境・エネルギー分野

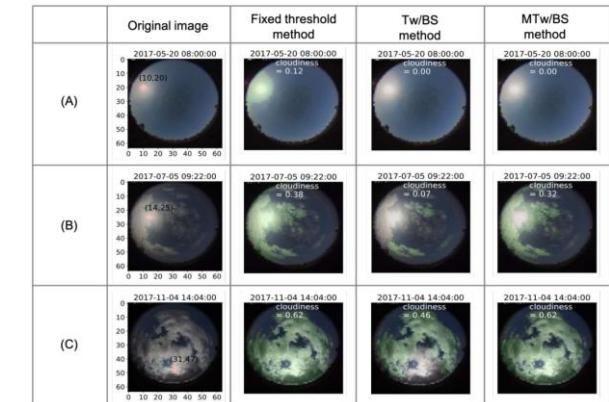
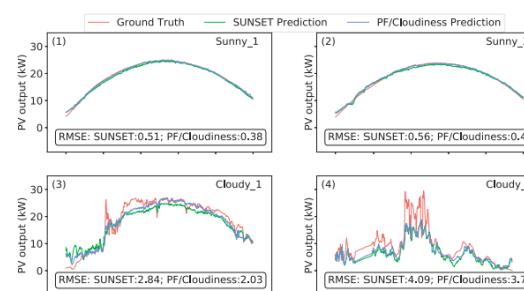
■ 電力使用傾向のリアルタイム監視・分析

- AI駆動型アルゴリズムと予測分析により、電力使用傾向のリアルタイム監視と分析を行い、需要に効果的に対応するための動的な調整を可能する
- 機械学習による需要予測・ピークシフト、DLによるスマートメータデータ解析・異常検知、強化学習による需要応答・ハイブリッドモデルを用いた最適化精度向上



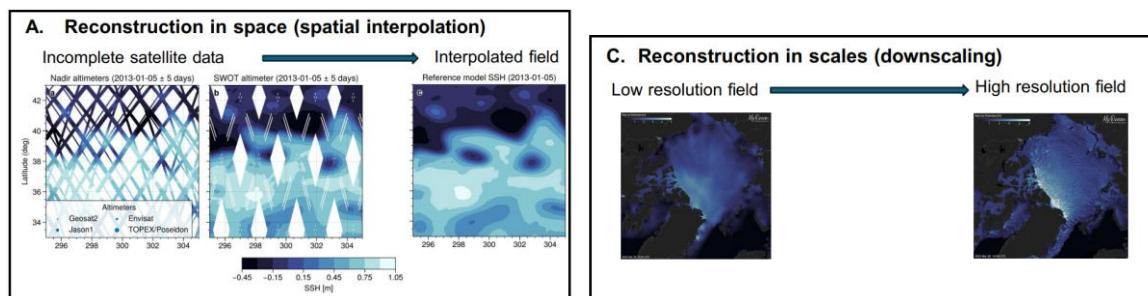
■ 太陽光発電出力予測（短期予測）

- 地上観測による天空画像 (sky images) から雲の状態など未来の出力に影響する情報を機械学習で活用
- 連続画像 + 直近のPV出力履歴を入力し、15分先の出力を直接予測する総合的 CNN モデル



■ Aurora : Microsoft 地球システム基盤 AIモデル（気候科学 x AI）

- 気候科学におけるシミュレーション解像度と観測データの量は飛躍的に増大しており、複雑性への対応に機械学習を活用
- 小スケール現象（サブグリッド）や観測補間・ギャップ補完、因果推論・物理法則との統合。従来モデルでは対応困難だった課題に ML を活用することで、予測精度と計算効率の両立



- Parag Biswas et al., AI-driven approaches for optimizing power consumption: a comprehensive survey, 116, (2024), <https://link.springer.com/article/10.1007/s44163-024-00211-7>
- Yuhao Nie et al. PV power output prediction from sky images using convolutional neural network: The comparison of sky-condition-specific sub-models and an end-to-end model, Journal of Renewable and Sustainable Energy, 12, 046101 (2020), <https://doi.org/10.1063/5.0014016>
- Annalisa Bracco et al., Machine learning for the physics of climate, Nature Reviews Physics, 7, (2025), <https://www.nature.com/articles/s42254-024-00776-3>

3-3. AI → 環境・エネルギー分野

環境・エネルギー分野では「**対象の複雑さ・解放系・スケールの広さ・公共性の高さ**」が特徴

| 観点 | 環境・エネルギー分野における特徴 |
|-----------------|--|
| 1. データスケールと多様性 | <ul style="list-style-type: none">気象・エネルギー・地理・センサーデータなど、大規模・多様なリアルワールドデータを扱う（例：数十年規模の観測データ）空間的・時間的に不均一なデータが多い（例：分解能の異なる衛星画像・地上観測） |
| 2. 説明性と信頼性 | <ul style="list-style-type: none">気候モデル・エネルギー制御等では、安全性・説明性・社会受容性が必須「責任あるAI (RAI)」や「説明可能なAI」が重要（政策・社会的合意への影響大） |
| 3. 多階層・複合モデル | <ul style="list-style-type: none">地球規模～局所スケールにまたがる「マルチスケール統合」が必要（例：天気予測×再エネ×電力系統×政策）物理法則・制約とのハイブリッドモデリングが中心 |
| 4. リスクと不確実性 | <ul style="list-style-type: none">リスクと不確実性を含む現象に対応するため、確率的AIや統計的モデルに加え、因果推論や物理モデルの同化・統合が重要 |
| 5. 社会・人間との相互作用 | <ul style="list-style-type: none">行動誘導や環境教育、社会受容、政策設計など社会・人間とのインタラクションが重要（例：EMS、再エネ導入、LCAの教育支援） |
| 6. サイバーフィジカル統合 | <ul style="list-style-type: none">デジタルツイン（仮想発電所・仮想都市）など物理空間との連携が必要 |
| 7. ガバナンス・政策との関係 | <ul style="list-style-type: none">気候・エネルギー政策に直結するため、AI活用に際し公共政策との整合性が必須（例：GX、SBT：Science Based Targets initiative、NDC評価） |

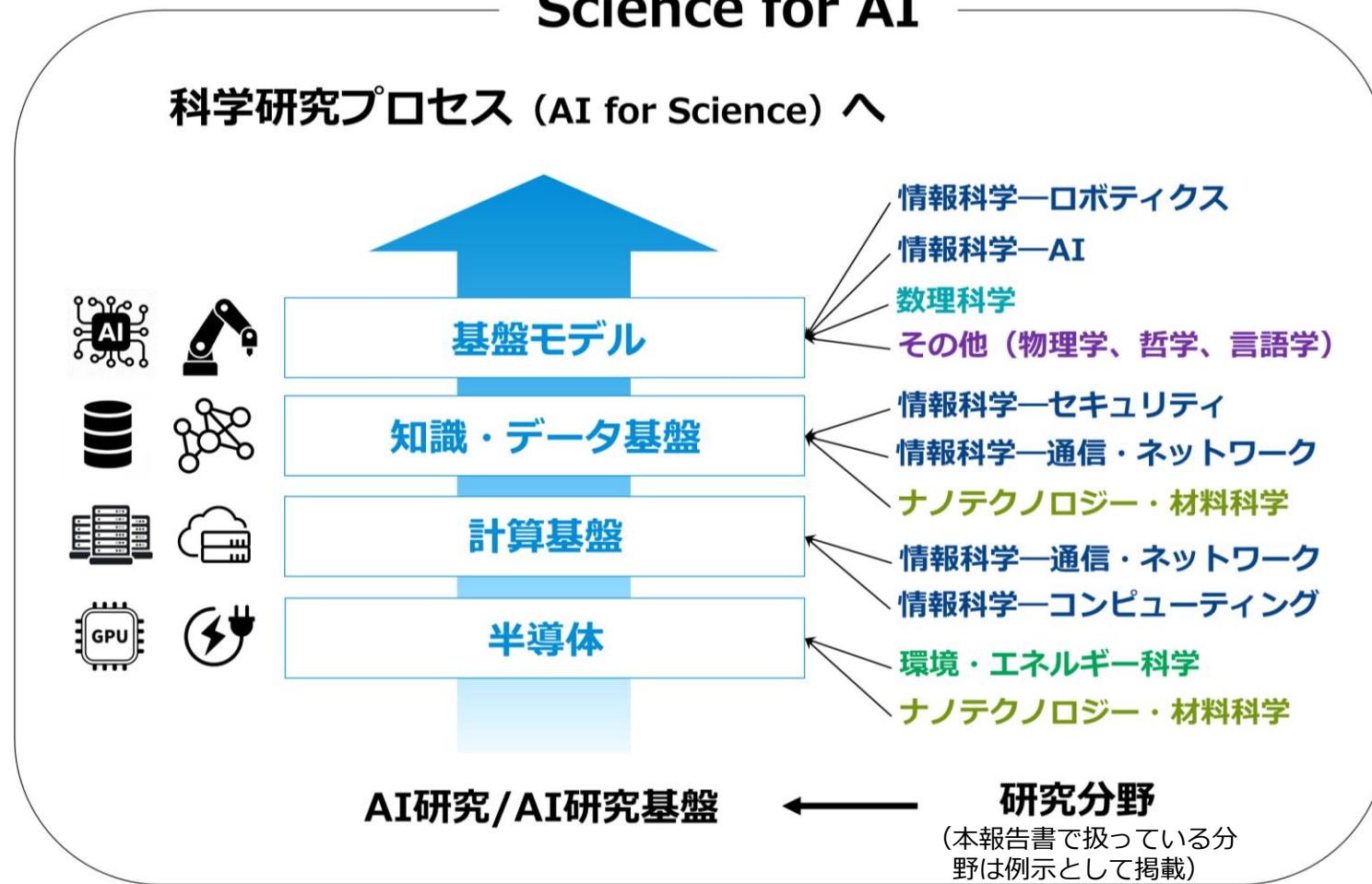
3-3. AI → 環境・エネルギー分野

※報告書から一部抜粋

| 領域 | データの品質 | データの偏り | データ量 | データ対象 | アクセス形態 |
|---------------------|--------------------------------|------------------|---|--|--------------------------|
| 電力システム運用・制御 | SCADA/メータなど実運用由来で高品質だが欠測・ノイズあり | 事業者・地域・機器構成に依存 | 大（常時連続計測+複数ノード+高頻度更新；数TB/システム・年） | 系統状態、潮流、需給、障害ログ 数Mデータポイント、秒間隔サンプリング、複数ノード、24時間365日 | クローズド（事業者資産・商用価値大） |
| 電力系統：最適化・意思決定支援・取引 | 取引/市場データは正確、ラベル付けは限定 | 市場制度・季節・需給構造の偏り | 中～大（取引ログ・需給予測・市場価格データ；数百GB～数TB/年） | 価格系列、需要予測、入札ログ 需給実績：5分間隔 × 365日 × 10エリア 市場取引ログ：スポット市場 + 時間前市場 | 主にクローズド／研究用は一部公開 |
| 太陽光出力予測 | 連続画像+実発電履歴で高精度化 | 天候・設置条件・地形に偏り | 大（高頻度画像+時系列+気象データ；数TB/年・サイト） | 雲画像、放射・気温、PV履歴 全天カメラ画像： 1MB/枚 × 1分間隔 × 24時間 気象+PV出力時系列： 数百MB/日 | 研究用一部オープン、実事業はクローズド |
| 風力・再エネ統合（VPP/仮想発電所） | センサ整備で品質向上 | 立地・風況・機種偏り | 大（センサーデータ+系統運用データ+市場取引情報；数TB/年・サイト） | 風況、タービン挙動、系統データ 100台 × 50変数 × 1秒間隔 × 365日 | ハイブリッド（研究=一部公開、運用=クローズド） |
| 原子力発電所デジタルツイン | 高忠実度モデルで整合性高 | プラント固有設計・運用条件に偏り | 中～大（詳細モデル+運転ログ；数TB/年） | 系統・炉心・機器状態、保全データ センサーデータ： 1,000点 × 1秒間隔 × 365日 シミュレーションモデル： 炉心+熱流動+構造解析 | クローズド（安全保障・機微情報） |
| 地下水・地質リスク（誘発地震評価） | 計測は高精度だが空間疎密不均一 | 地質構造・観測網配置に偏り | 中（複数観測網+長期保存；数百GB～数TB/年） | 地下水位、地震波、地層物性 地下水観測：1,000井戸 × 15分間隔 × 365日 誘発地震評価：微小地震カタログ（数万イベント）+注水履歴+応力解析 3D地質モデル+シミュレーション | 主にオープン（観測）+モデルはクローズドも |
| 気候予測 | 長期観測+再解析で高品質 | 観測カバレッジ・センサ配置偏り | 超大（グローバル格子（緯度経度）+複数変数+長期時系列（150年分）；世界規模数10PB） | 気象場、衛星/地上観測、再解析 CMIP6：1モデル × 1シナリオ × 150年 × 月次データ × 100変数 50モデル × 複数 | 研究用途はオープン多、運用成果は制限付き |

- * 実運用に基づく連続的・高頻度データが生成
- * 制度・地域・季節性に強く依存するなど、社会インフラ特有の複雑性を有する
- * 多くは事業者保有のクローズドデータであり、利用には制度的制約が伴う

4-1. 「AI研究」および「AI研究基盤の研究・整備」 への各研究分野からの貢献

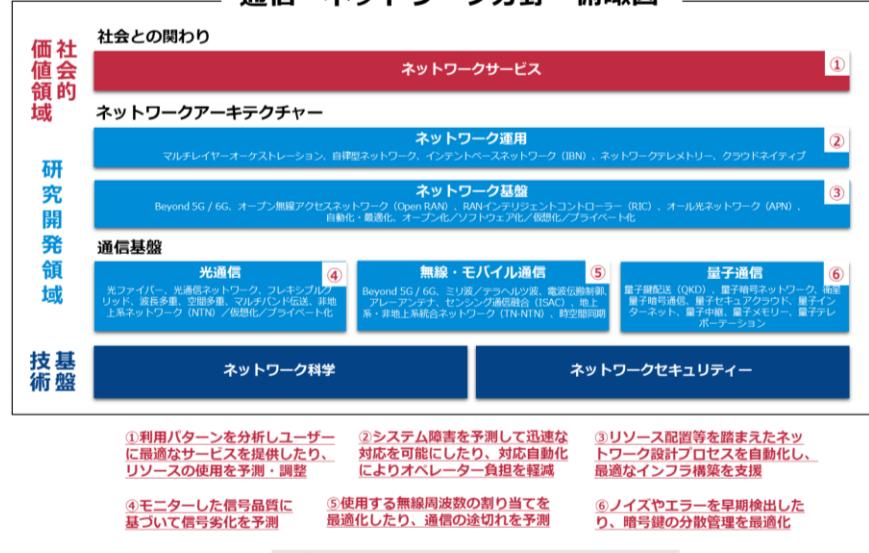


主要情報科学分野とAI4Sの相互関係

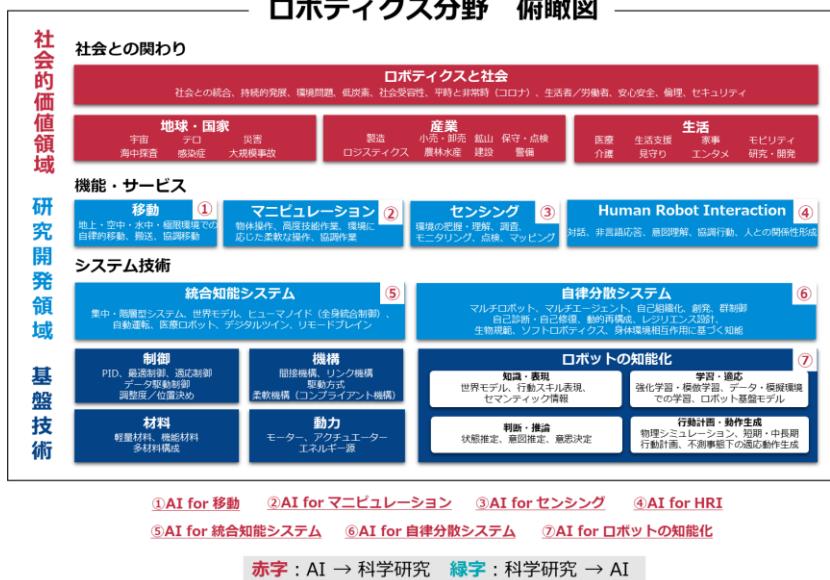
コンピューティング分野 傾瞰図



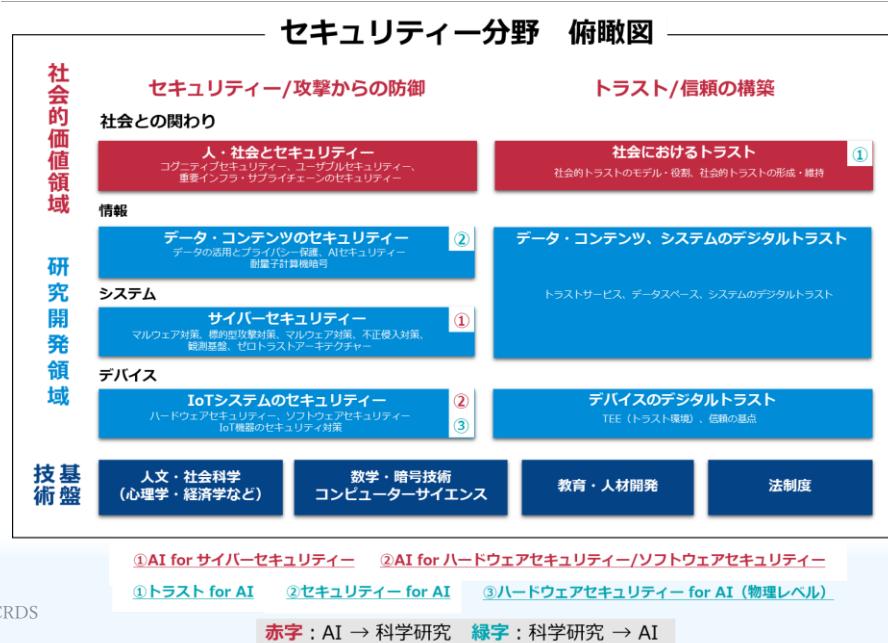
通信・ネットワーク分野 傾瞰図



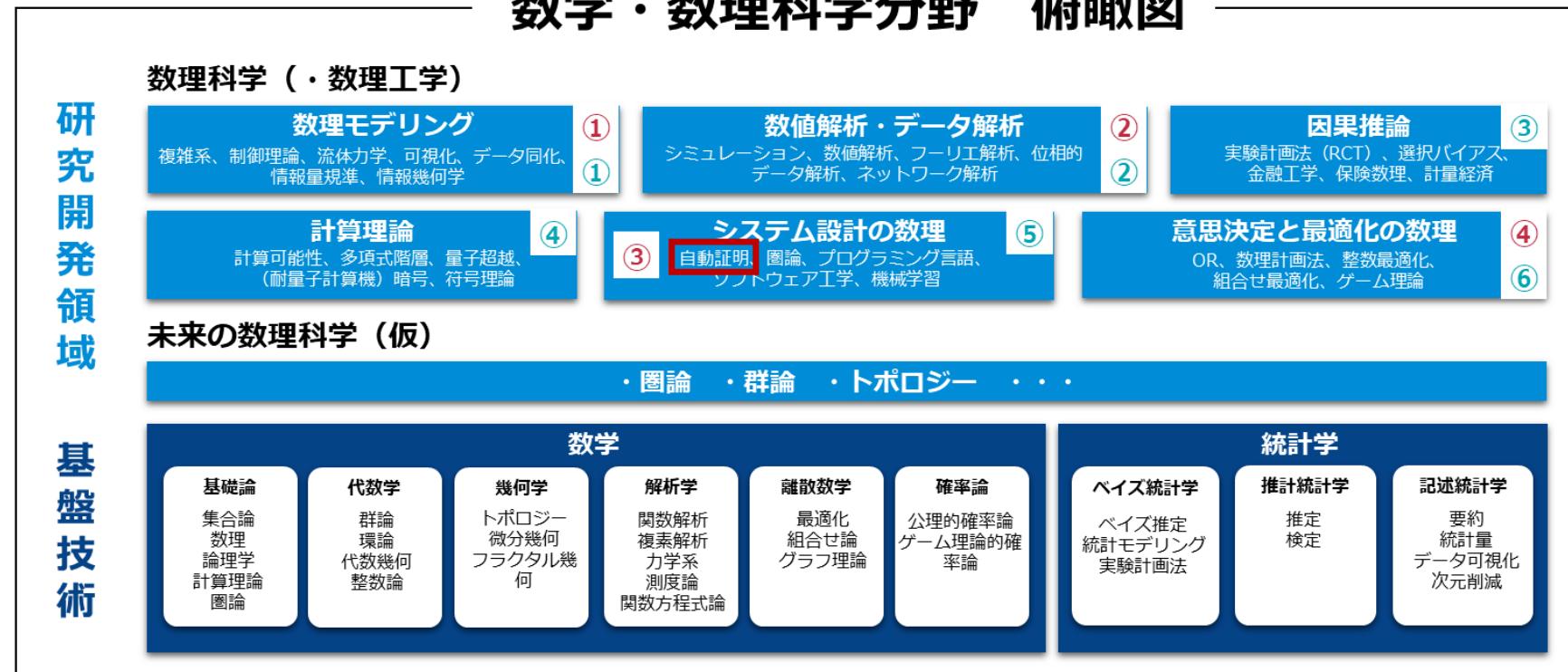
ロボティクス分野 傾瞰図



セキュリティ一分野 傾瞰図



数学・数理科学分野 俯瞰図



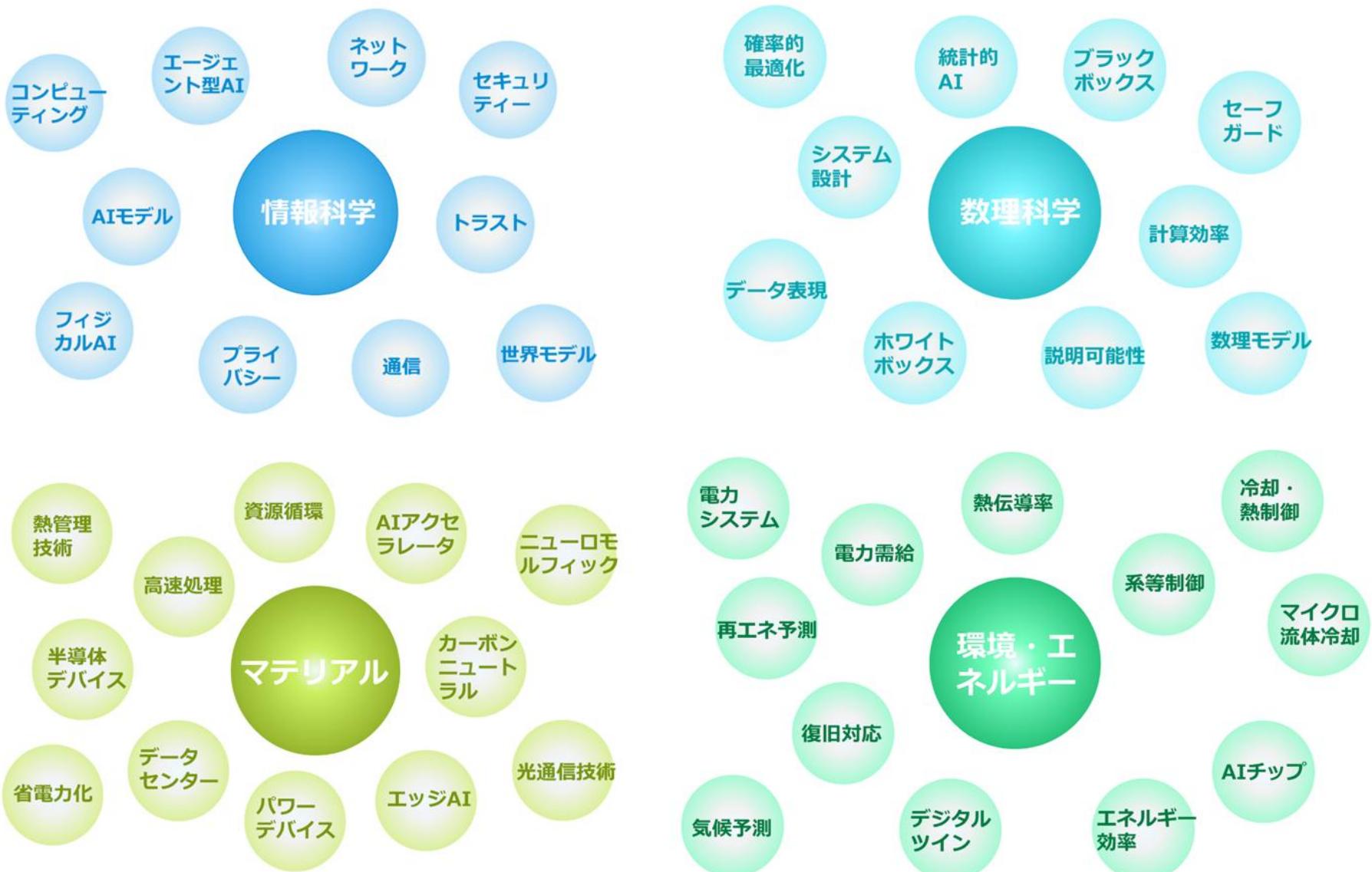
①モデリングの革新 ②解析手法の革新 ③純粹数学におけるAI活用 ④最適化手法の革新

①ホワイトボックス化 ②ホワイトボックス化 ③因果的機械学習 ④ホワイトボックス化

⑤ホワイトボックス化 ⑥機械学習モデル革新

赤字 : AI → 科学研究 緑字 : 科学研究 → AI

4-2～5. 情報科学分野、数理科学分野、マテリアル分野、環境・エネルギー分野 → AI

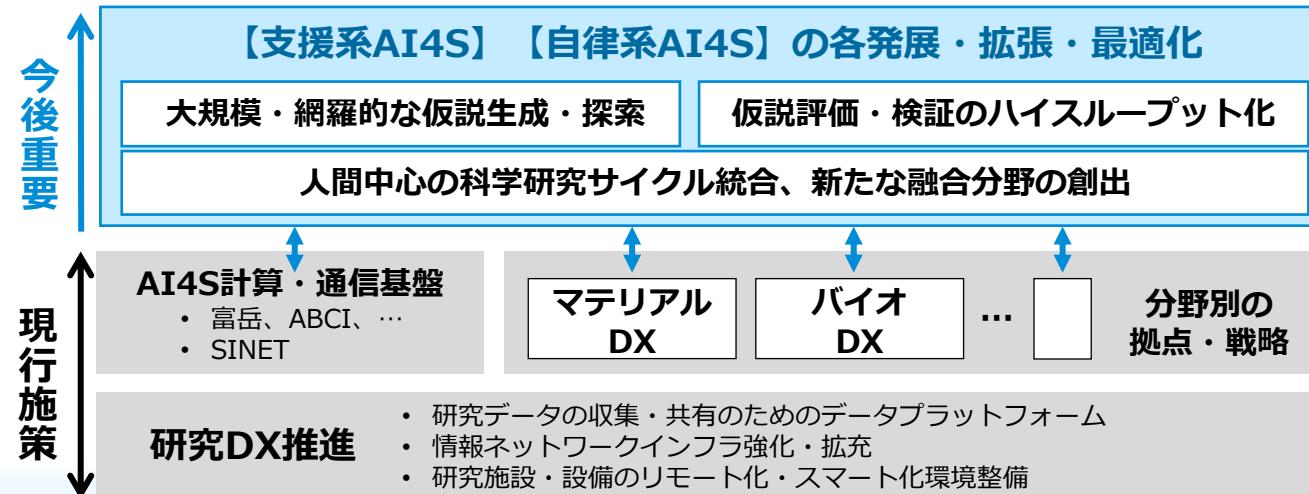
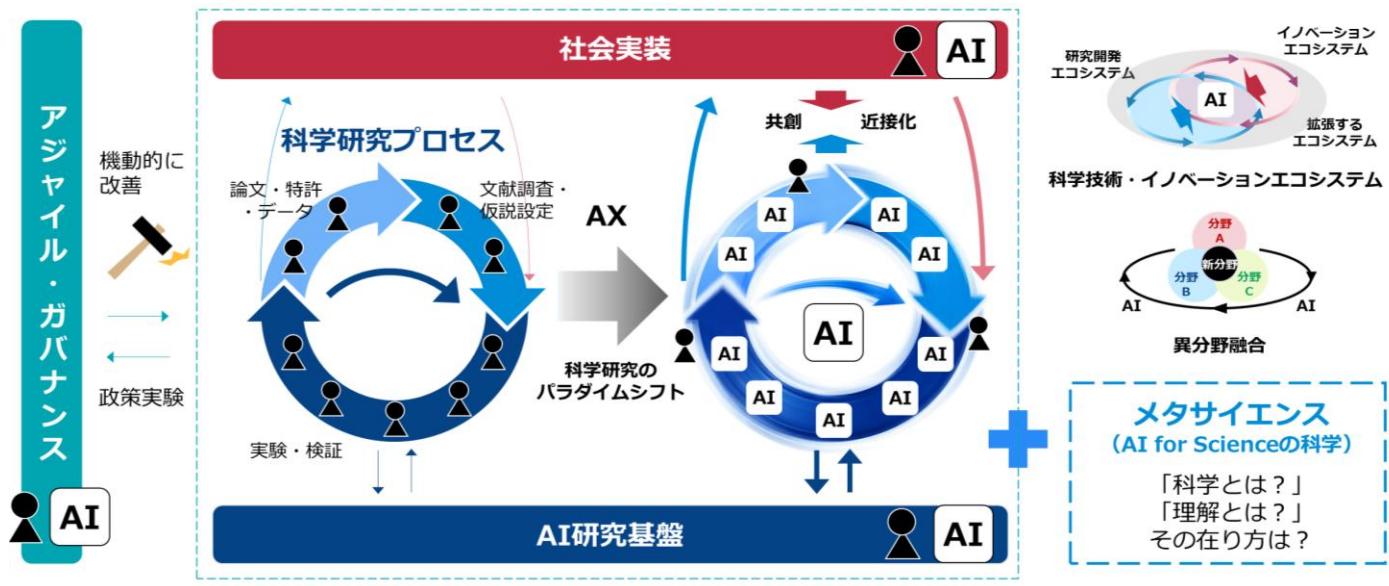


5 【総括】AI for Scienceのための政策デザイン



司令塔：政府戦略・横展開戦略、分野と連携した分野横断的活動・体制、ガバナンス・国際対応

- 科学研究プロセスとAI研究基盤とは、相補的な関係性を強化して共進化させる必要
- 米中の大規模投資のなか、日本の特長（信頼性の高い実データ、フィジカルAI等）を強化・活かす戦略が重要に
- 科学の在り方や方向性を問う国際議論に参画し存在感を発揮



加速施策

- AI4S先端研究基盤・インフラ（科学基盤モデル、計算基盤）
- グランドチャレンジの設定
- 分野を越えた人材育成やツール等の普及

CRDS戦略プロポーザル「人工知能と科学～AI・データ駆動科学による発見と理解～」(2021年8月)からの改変

■報告書作成メンバー■

CRDS - AI for Science 横断チーム

| | | |
|---------------|--|---|
| 総括責任者 メンバー | 永野 智己 阪口 幸駿 杉村 佳織 尾崎 翔 福島 俊一 大淵 真理 戸田 智美 丸 智香子 馬場 智義 濱田 志穂 柳沼 義典 村野 文菜 野澤 龍介 | 総括ユニットリーダー／横断・融合グループ リーダー 横断・融合グループ 横断・融合グループ システム・情報科学技術ユニット システム・情報科学技術ユニット ナノテクノロジー・材料ユニット ライフサイエンス・臨床医学ユニット ライフサイエンス・臨床医学ユニット 環境・エネルギーユニット STI基盤ユニット STI基盤ユニット エビデンス分析グループ(-2025.6) エビデンス分析グループ |
| 協力 | 高島 洋典 福井 章人 茂木 強 吉脇 理雄 平池 龍一 | システム・情報科学技術ユニット システム・情報科学技術ユニット システム・情報科学技術ユニット システム・情報科学技術ユニット システム・情報科学技術ユニット |

The Beyond Disciplines Collection

AI for Scienceの動向2026

— AIトランスフォーメーションに伴う科学技術・イノベーションの変容 —

令和8年2月 February 2026 (発行予定)

国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター

Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's五番町

電話 03-5214-7481, E-mail crds@jst.go.jp

<https://www.jst.go.jp/crds/>