

AI for Science / 概念と方向性

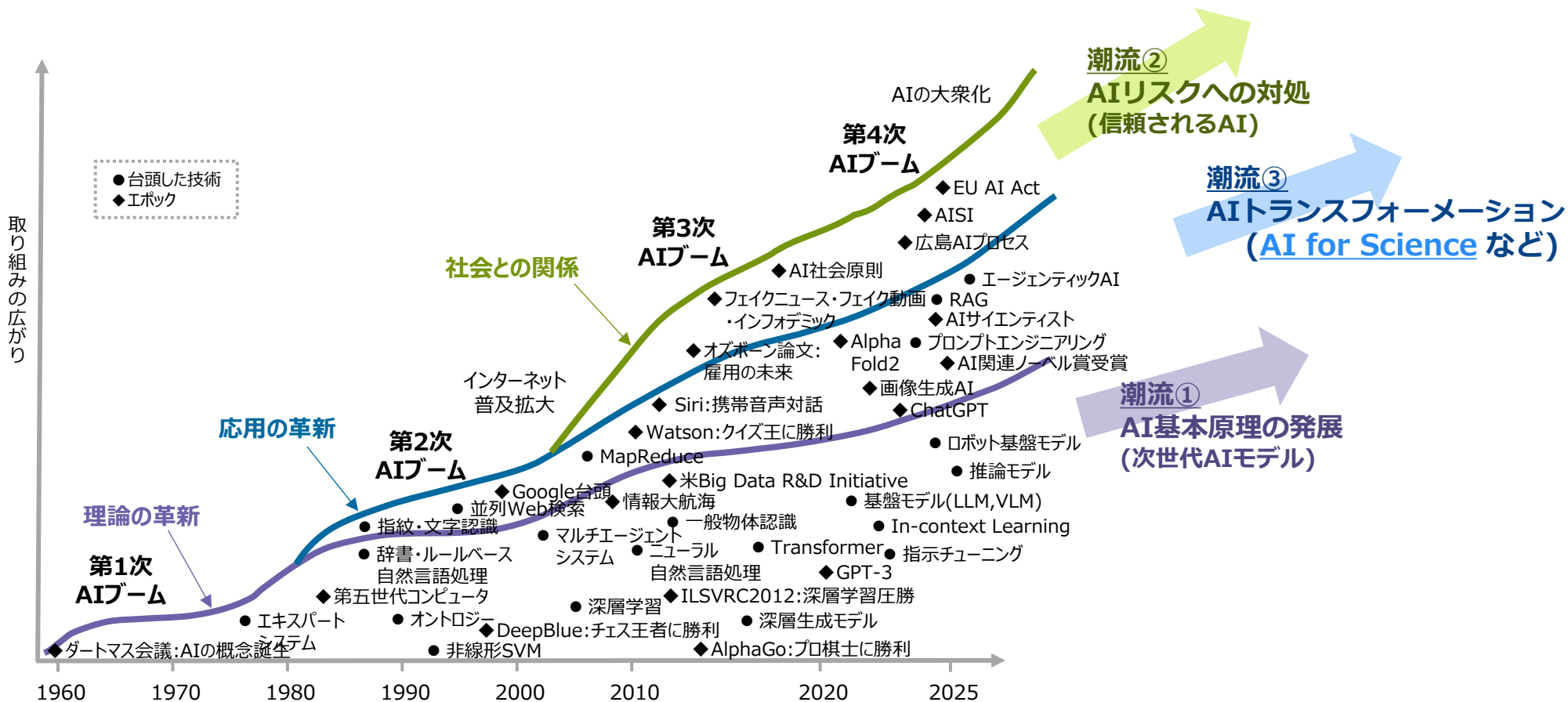
2025年10月6日

JST研究開発戦略センター



AI発展の3つの潮流

AI分野の時系列俯瞰図



JST CRDS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)に掲載した時系列俯瞰図をアップデート

AI for Science は広範囲と多様

研究開発投資
(資金配分・評価
へのAI適用)

ガバナンス

セキュリティ

ELSI

社会実装

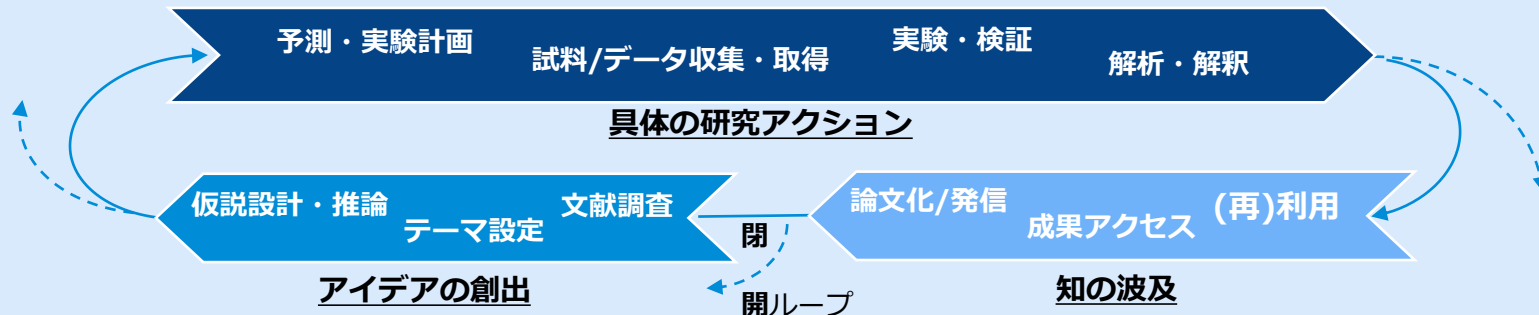
産業

社会課題

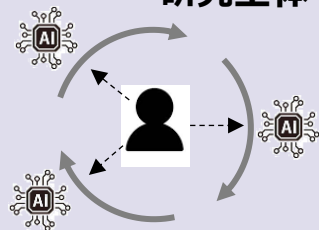
臨床

マッチング

科学研究プロセスの基本サイクル



研究主体 (人間/AI)



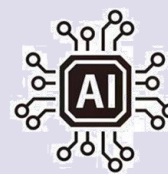
支援系AI4S

道具としてのAI
→人間の研究活動を支援

自律系AI4S

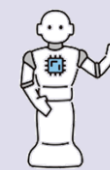
主体としてのAI
→AIが研究活動を実行

研究環境 (バーチャル/フィジカル)



バーチャル

物理的な操作が不要



フィジカル

物理的な操作を求める

AI研究基盤

科学用基盤

汎用基盤

計算基盤

半導体

データ基盤

メモリ

アルゴリズム

通信

基盤モデル

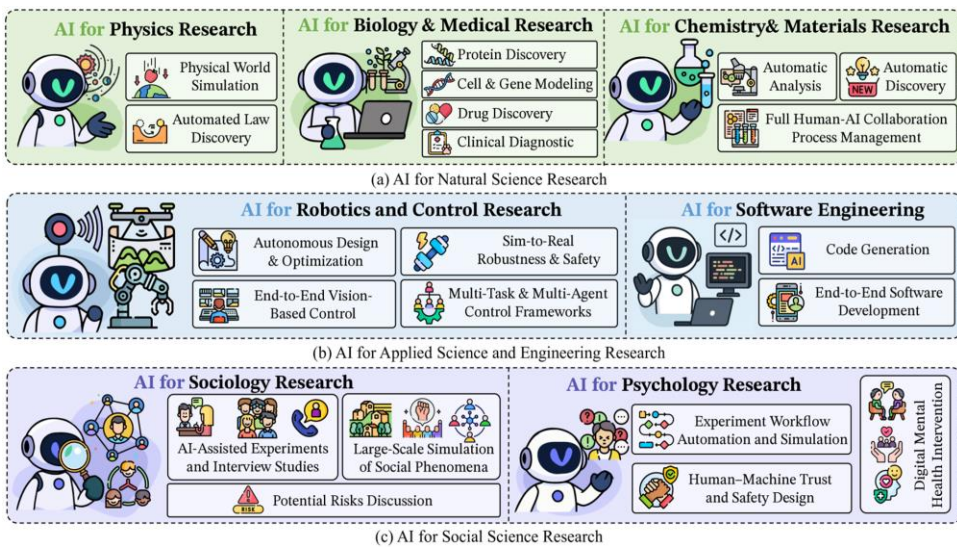
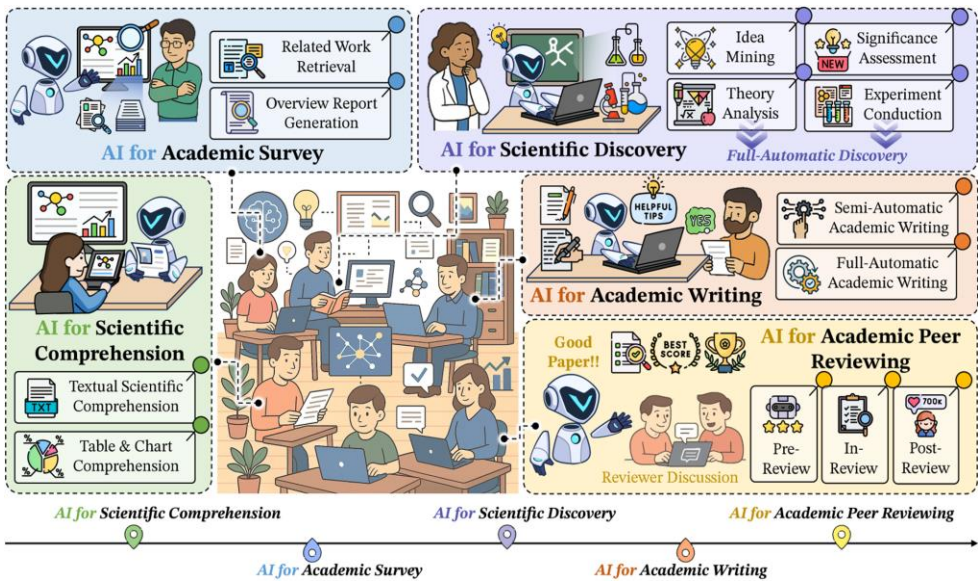
ロボット

セキュリティ

電力

研究主体の違いによるAI4S/ 支援系 ↔ 自律系

※図はイメージ



支援系AI4Sの発展

道具としてのAI
→人間の研究活動を支援
(その適切な在り方は?)

自律系AI4Sの発展

主体としてのAI
→AIが研究活動を実行
(その適切な在り方は?)

支援系AI4S

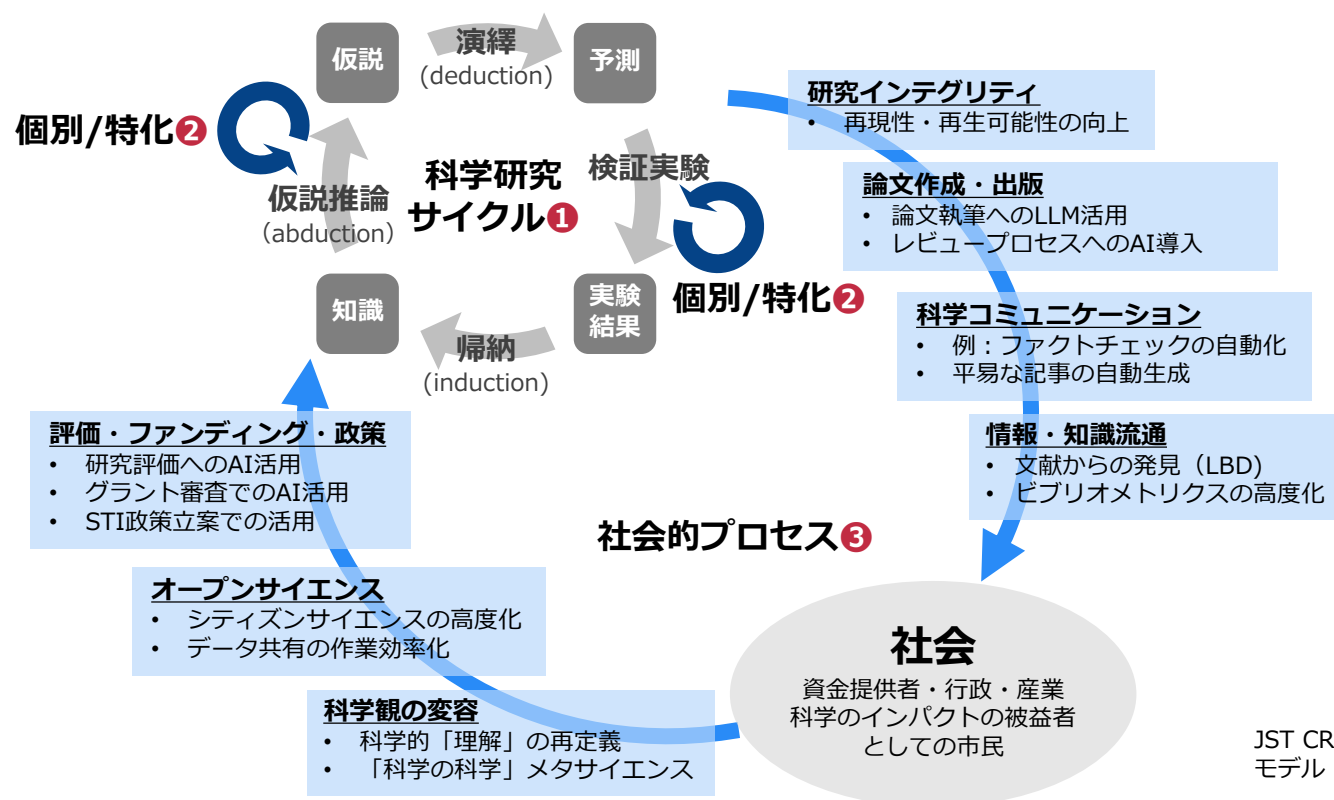
- 支援系AI4Sは、様々な科学分野、様々な研究ステップに拡大し広がっていく
- 様々な科学分野、様々な研究ステップにおいて、AIは優秀な助手の役割を担うことに加え、特定の研究ステップでは これまでの限界を打破する ような変化・進展を遂げる
- 政策面では、AI4Sの底上げや裾野拡大、個々の科学分野の加速・発展や融合促進に資する施策を実施

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す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・超知能化が起こ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に。

AI for Science の3重ループ

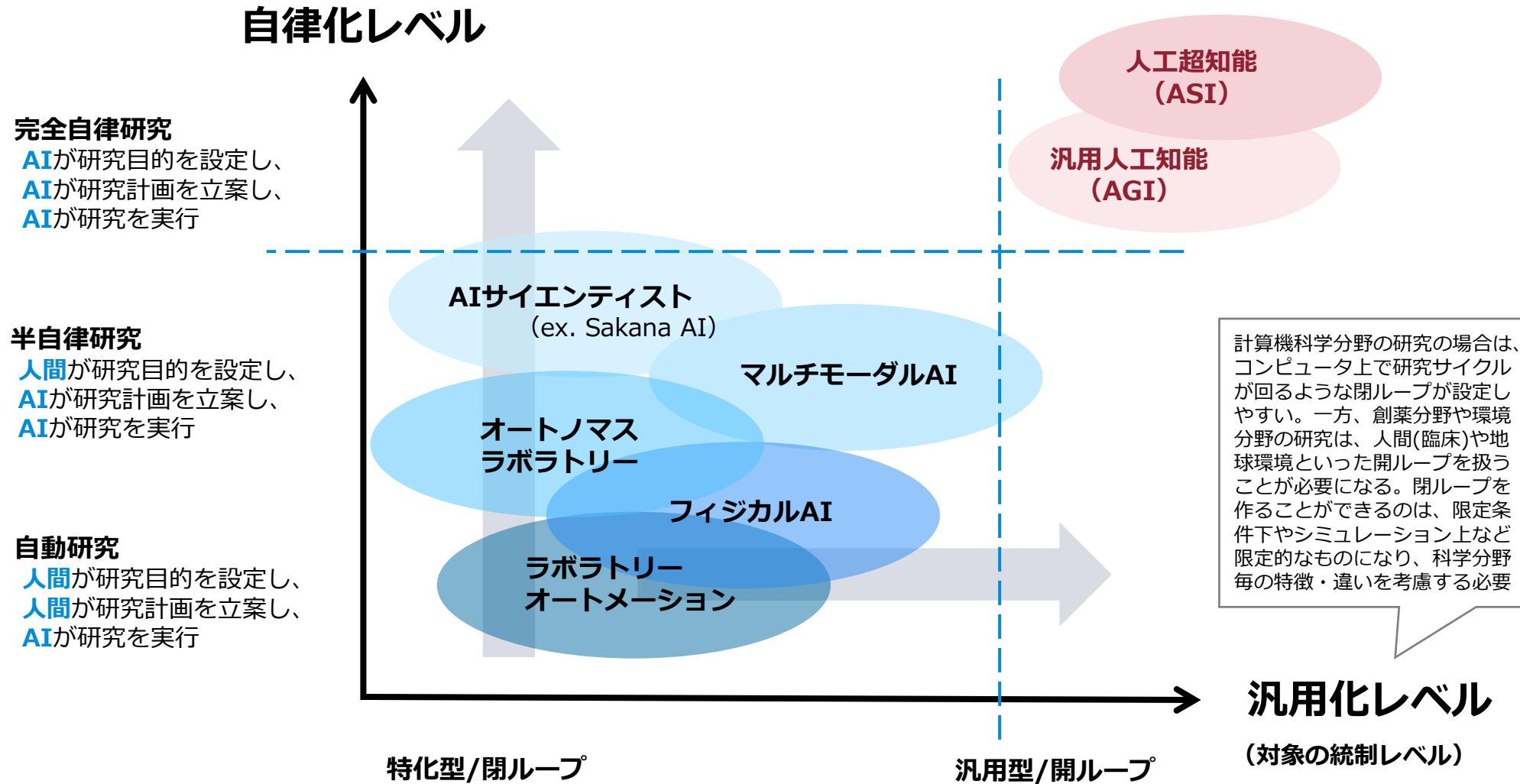
科学研究サイクル①をメインループとして、その内側で実行される個別/特化②のループと、外側を取り巻く社会的プロセス③のループでもAI活用が進む



- ループ①とループ③の内容や関係は、科学分野によって異なる側面がある
(閉じた実験環境・研究サイクルを作りやすいか、開いたサイクルか。人間や外界環境が関わるか等)
- ループ③は“メタサイエンス”コミュニティで研究・実践の検討が行われている

JST CRDS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)

自律系AI for Science/ループの発展・拡張



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と

AI4Sの考慮点：分野によるバーチャル操作/フィジカル操作度合い

主分類	分野	サブ分野	バーチャル操作	フィジカル操作	■V/P■レシオ
自然科学	物理学	古典物理、量子力学、素粒子、宇宙物理	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	<div></div>
	化学	物理化学、有機化学、無機化学、材料化学	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	<div></div>
	生物学	分子生物学、細胞生物学、遺伝学、生態学	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	<div></div>
	地球科学	地質学、計測学、海洋科学	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	<div></div>
形式科学	数学	純粋数学、応用数学、統計学、数理科学	理論導出、数値解析、モデリング	データ収集、検証、デモ	<div></div>
	計算機科学	コンピューター科学、ソフトウェア工学、サイバーセキュリティ	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	<div></div>
応用科学	工学	機械工学、電子工学、化学工学	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	<div></div>
	医学	臨床医学、生体医工学、薬学	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	<div></div>
	農学	作物栽培学、園芸学、畜産学	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	<div></div>
人文・社会科学	社会科学	経済学、社会学、政治学	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	<div></div>
	人文科学	哲学、史学、文学、芸術	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	<div></div>
学際科学	バイオインフォマティクス	システム生物学、計算生物学	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	<div></div>
	認知科学	神経科学、心理学	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	<div></div>
	環境学	環境科学、持続可能性、気象学	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	<div></div>
	ナノテク	ナノエレクトロニクス、ナノバイオ工学	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	<div></div>

各国の各分野におけるAI関連論文数（2024）

	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	フランス
総論文数→	394,199	140,418	59,977	60,063	19,289	15,802	13,104	11,371	11,556	9,552	9,688	8,206
コンピュータ科学	237,752	81,452	32,140	45,332	10,392	8,054	7,247	6,261	6,291	5,541	5,313	4,453
工学	169,271	63,619	20,065	31,983	6,686	5,082	6,093	4,199	3,870	3,755	3,227	2,686
数学	85,376	31,131	10,159	17,218	3,313	2,725	1,665	1,722	2,028	1,751	1,407	1,631
医学	51,117	12,904	11,235	10,342	3,093	2,609	1,567	1,879	1,887	1,376	1,502	1,318
物理学・天文学	46,886	19,051	5,344	7,965	1,790	1,563	1,457	892	1,401	1,278	632	914
意思決定科学	37,400	7,895	3,531	15,342	977	709	500	571	532	555	547	589
材料科学	29,147	12,589	3,614	2,720	1,080	855	1,925	629	698	932	528	461
社会科学	32,387	7,617	6,105	4,569	1,867	1,392	850	974	991	632	915	482
エネルギー	24,300	8,334	2,338	6,202	793	464	628	440	443	308	374	294
生化学・遺伝学・分子生物学	18,920	7,225	4,085	1,212	1,240	1,059	883	656	808	616	562	544
地球惑星科学	18,009	9,012	2,621	1,283	804	862	458	611	740	332	563	526
環境科学	17,039	7,079	2,259	2,050	844	648	701	568	463	315	520	309
化学	12,312	5,160	2,201	868	681	622	659	374	379	390	269	282
ビジネス・経営・会計	11,480	2,864	1,669	2,198	735	497	317	295	338	153	409	319
化学工学	12,312	5,160	2,201	868	681	622	659	374	379	390	269	282
農業・生物科学	10,507	4,471	1,516	796	454	422	350	296	352	234	314	262
神経科学	6,675	2,381	1,496	873	569	434	197	275	278	184	258	193
芸術・人文科学	8,386	2,013	2,125	318	714	557	284	329	320	216	262	218
学際	9,185	3,173	1,528	951	581	451	510	266	261	315	245	226
健康科学	5,063	1,513	1,157	252	431	343	215	223	177	176	252	147
心理学	3,185	692	894	127	288	267	91	121	143	71	139	110
経済学、計量経済学、金融学	3,654	848	549	288	279	194	117	97	138	38	114	125
薬理学、毒物学、薬剤学	2,794	966	551	381	155	134	82	59	108	77	52	70
免疫学・微生物学	2,368	998	502	132	145	132	59	83	105	48	68	69
看護学	1,485	253	403	109	113	97	62	57	48	44	63	31
歯科学	786	136	182	81	33	68	34	25	46	35	21	16

JST-CRDS作成：

AI関連キーワードを含む論文を「AI関連論文」として、各国の論文数を算出。

データベース：Scopus、ScopusAPI

対象文献種：article, review, conference paper、対象出版年：2024（2024年のデータは完全でないことに留意）

対象国：中国、米国、インド、英国、ドイツ、韓国、カナダ、日本、豪州、フランス（2024年のAI関連論文数上位11カ国を採用）

AI論文の検索式：artificial intelligence、deep learning、machine learning他、主要な学習方法名・AIモデル名で検索

©2025 CRDS

各国のAI論文規模に対する各国各分野のAI論文規模(2024)

各セル =
$$\frac{\text{当該国の当該分野のAI論文数}}{\text{当該国のAI論文数} \times (\text{当該分野の総AI論文数} / \text{総AI論文数})}$$

当該国のAI論文規模に対して
当該国当該分野のAI論文数が

小さい

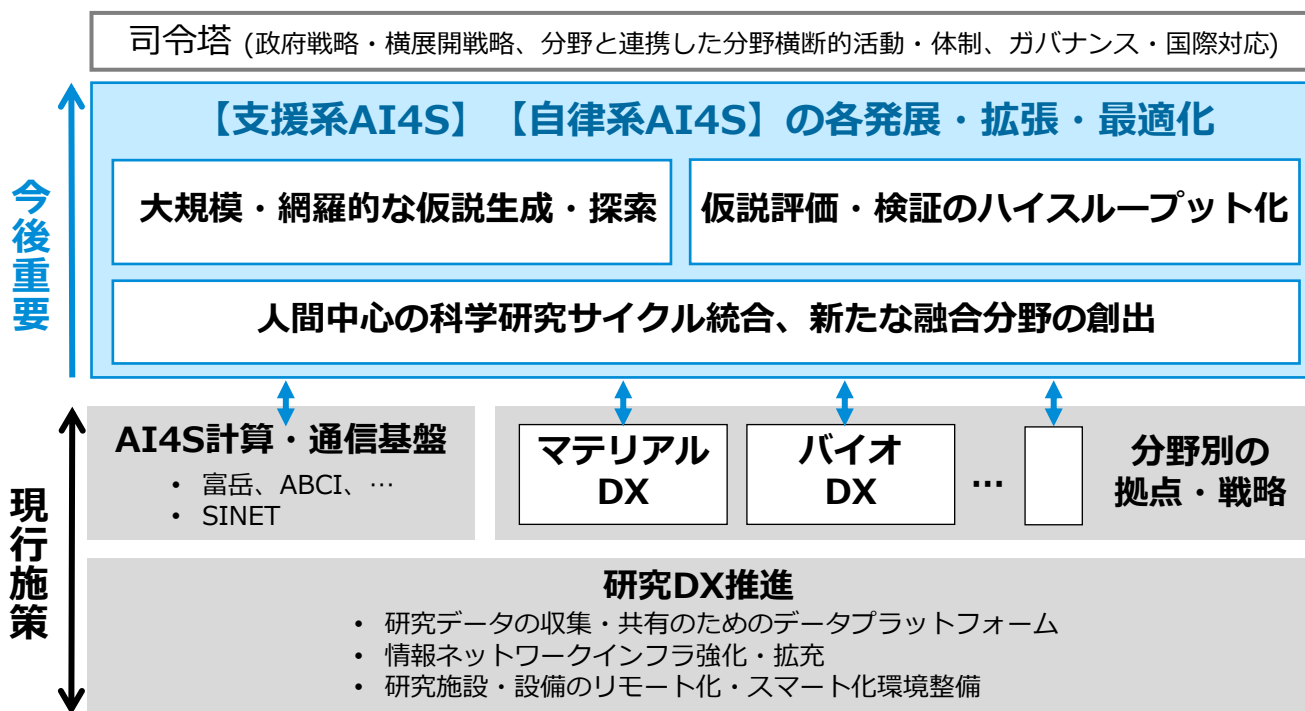
大きい

	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	フランス
総AI論文数→	394,199	140,418	59,977	60,063	19,289	15,802	13,104	11,371	11,556	9,552	9,688	8,206
コンピュータ科学	237,752	0.96	0.89	1.25	0.89	0.85	0.92	0.91	0.90	0.96	0.91	0.90
工学	169,271	1.06	0.78	1.24	0.81	0.75	1.08	0.86	0.78	0.92	0.78	0.76
数学	85,376	1.02	0.78	1.32	0.79	0.80	0.59	0.70	0.81	0.85	0.67	0.92
医学	51,117	0.71	1.44	1.33	1.24	1.27	0.92	1.27	1.26	1.11	1.20	1.24
物理学・天文学	46,886	1.14	0.75	1.11	0.78	0.83	0.93	0.66	1.02	1.12	0.55	0.94
意思決定科学	37,400	0.59	0.62	2.69	0.53	0.47	0.40	0.53	0.49	0.61	0.60	0.76
材料科学	29,147	1.21	0.81	0.61	0.76	0.73	1.99	0.75	0.82	1.32	0.74	0.76
社会科学	32,387	0.66	1.24	0.93	1.18	1.07	0.79	1.04	1.04	0.81	1.15	0.71
エネルギー	24,300	0.96	0.63	1.68	0.67	0.48	0.78	0.63	0.62	0.52	0.63	0.58
生化学・遺伝学・分子生物学	18,920	1.07	1.42	0.42	1.34	1.40	1.40	1.20	1.46	1.34	1.21	1.38
地球惑星科学	18,009	1.40	0.96	0.47	0.91	1.19	0.77	1.18	1.40	0.76	1.27	1.40
環境科学	17,039	1.17	0.87	0.79	1.01	0.95	1.24	1.16	0.93	0.76	1.24	0.87
化学	12,312	1.18	1.17	0.46	1.13	1.26	1.61	1.05	1.05	1.31	0.89	1.10
ビジネス・経営・会計	11,480	0.70	0.96	1.26	1.31	1.08	0.83	0.89	1.00	0.55	1.45	1.33
化学工学	12,312	1.18	1.17	0.46	1.13	1.26	1.61	1.05	1.05	1.31	0.89	1.10
農業・生物科学	10,507	1.19	0.95	0.50	0.88	1.00	1.00	0.98	1.14	0.92	1.22	1.20
神経科学	6,675	1.00	1.47	0.86	1.74	1.62	0.89	1.43	1.42	1.14	1.57	1.39
芸術・人文科学	8,386	0.67	1.67	0.25	1.74	1.66	1.02	1.36	1.30	1.06	1.27	1.25
学際	9,185	0.97	1.09	0.68	1.29	1.22	1.67	1.00	0.97	1.42	1.09	1.18
健康科学	5,063	0.84	1.50	0.33	1.74	1.69	1.28	1.53	1.19	1.43	2.03	1.39
心理学	3,185	0.61	1.84	0.26	1.85	2.09	0.9	1.32	1.53	0.9	1.78	1.66
経済学、計量経済学、金融学	3,654	0.65	0.99	0.52	1.56	1.32	0.96	0.9	1.29	0.4	1.27	1.64
薬理学、毒物学、薬剤学	2,794	0.97	1.30	0.89	1.13	1.20	0.9	0.7	1.32	1.1	0.8	1.2
免疫学・微生物学	2,368	1.18	1.39	0.37	1.25	1.39	0.7	1.2	1.51	0.8	1.2	1.4
看護学	1,485	0.48	1.78	0.48	1.56	1.6	1.3	1.3	1.1	1.2	1.7	1.0
歯科学	786	0.49	1.52	0.7	0.9	2.2	1.3	1.1	2.0	1.8	1.1	1.0

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

AI for Science の分野横断的推進と分野推進

この数年で分野から分野横断への動きが進みつつある



**哲学的論点／
メタサイエンス**
「科学とは？」
「理解とは？」
その在り方は？

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

參考資料

各国のAIおよびAI4S関連政策

	AIの基本政策	AI4S関連政策	AI4S関連施策・プログラム
米	<ul style="list-style-type: none"> ・ 米国AIアクションプラン（2025） 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） 	<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」において、AIを活用した科学研究への重点的投資、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 	<ul style="list-style-type: none"> ・ FASST（DOEのラボ資源を活用し、AI-readyデータ／計算基盤を整備） ・ NAIRR Pilot（研究者対象のAI基盤を全国的に整備）
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規定。（科学研究開発の目的のみのために開発・稼働されるAI等は適用対象外） ・ AI大陸行動計画（AI Continent Action Plan）（2025） AI政策の包括的枠組み。5つの重要な柱を発表： ①大規模AIコンピューティング・インフラの構築、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スキルと人材強化、⑤AI法の施行を簡素化 	<ul style="list-style-type: none"> ・ AI in science戦略（2025年10月） 科学研究分野に特化した初のEU包括戦略。研究資金としてHorizon EuropeのAI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。欧州の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。 ・ Apply AI戦略（2025年10月） 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年10月末公表予定） 科学・産業・公共分野におけるデータの共有と利活用について、政策および基盤整備を強化する戦略。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ AI Factories（超高性能な計算資源を基盤に、EUでAIモデル開発・実証拠点を整備） ・ AI Giga-factories（研究者が先進モデルを訓練・活用できる基盤を提供。600M€規模の科学研究向け計算資源の専用確保。） ・ Data Labs（科学用AI readyデータを統合・精製する拠点。EOSC、Data Spacesと連携。） ・ RAISE Pilot（2025年10月） Horizon Europe2026-27で108M€を投入。AI 博士ネットワーク・卓越ネットワーク(58M€)、AI Gigafactoryアクセスなどを実施。
英	<ul style="list-style-type: none"> ・ 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戦略を策定中（2025年秋目途） ・ データ活用促進、国立スーパーコンピュータセンターを設立、AI研究リソース（AIRR）を20倍に拡大。生物工学、フロンティア物理学、材料科学、医学研究、量子技術など、ミッション主導型の重要研究分野を設定 	<ul style="list-style-type: none"> ・ AIRR：Isambard-AI（ブリストル大学）／Dawn（ケンブリッジ大学）で研究者や産業界に大規模モデルの開発・学習環境を提供 ・ OpenBind（AIとスーパーコンピュータを活用し創薬研究を加速） ・ Compute Roadmap（AIの利活用を促進する計算インフラの強化）
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BMFT) 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BMFT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） 宇宙および物質を探索基礎科学研究におけるデータ管理とデジタル化の横断テーマを強化する枠組み。大規模・複雑なデータをどのように効率よく処理・活用するかに焦点を当て、Big DataからSmart Dataへの移行を目指す。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ AI創薬応用プロジェクト（創薬分野でのAI活用（予測・設計・スクリーニング）を対象にした研究費スキーム） ・ JAIF-JUPITER AI Factory（欧州最上位級HPC「JUPITER」を核に、科学研究向けのAIワークロードを工場のように回すためのサービス拠点）
仏	<ul style="list-style-type: none"> ・ 国家AI戦略（Stratégie nationale pour l'IA）（2018、2021、2025改訂） データセンターの設置、電力供給の優遇、AI 教育・研究への投資促進、研究者の支援、AI企業支援のための公共調達手続き簡素化 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 国家AI戦略 AI Factoriesと3台の主要スーパーコンピュータの連携推進、海外研究者受け入れ環境整備、戦略的科学技術分野の大規模プロジェクト支援 ・ Choose France for Scienceプラットフォーム（2025） 健康、気候、デジタル技術、AIといった主要分野における研究プロジェクトへの共同資金提供を通じて、国際的な科学者を誘致 	<ul style="list-style-type: none"> ・ AI Factory France（政策レベルではMESRが主管し、大規模モデルの開発と利用のためのコンピューティングリソース、トレーニング、サポートサービスを提供）

各国のAIおよびAI4S関連政策

中

韓

印

日

AIの基本政策

AI4S関連政策

AI4S施策・プログラム

- ・ **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

- ・ **AI技術戦略ロードマップ (2023)**
「12 大国家戦略技術ミッション中心戦略ロードマップ」の1つとして策定
- ・ **国家AI戦略の政策方針 (2024)**
①AIコンピューティング・インフラの大幅拡充、
②民間AI投資の大幅拡大、③包括的な国家AI変革、
④AIの安全・安心とグローバル・リーダーシップ
- ・ **国家AI行動計画 (2025年11月目途)**

- ・ **国家AI戦略「#AIForAll」 (2018)**
インド政府として初めての部門横断的な国家戦略
- ・ **国家AI戦略「インドAIミッション」 (2023)**
包括的な国家レベルのミッション。2030年までにインドを世界的 AI 超大国にする

- ・ **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
- ・ **AI基本計画 (2025年内目途)**
「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

- ・ **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
- ・ 「AIプラス」：科学技術基盤モデル構築、基礎研究プラットフォーム、高品質の科学データセットの整備、異分野融合強化。AI駆動の0から1への新しい科学的発見の加速
- ・ **北京市人工知能科学研究高品質発展加速行動計画 (2025-2027年)** 北京をAI for Scienceにおける世界のリーダーにする

- ・ **AI+S&T (AI+Science & Technology) 推進戦略 (2025)**
有望8分野に特化したAIモデルの開発と、AIを活用した科学研究のためのインフラ整備 (計算資源、データ活用環境、人材育成、研究行政支援)

- ・ 「学際的サイバーフィジカルシステム国家ミッション」 (2019)
- ・ 「インドAIミッション」
AI/MLを通じたイノベーション推進。インドAIイノベーションセンター、AIアプリケーション開発イニシアティブ、データセット、計算資源の構築

- ・ **「AI for Science」による科学研究の革新 (文部科学省、2025)**
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産学・国際連携

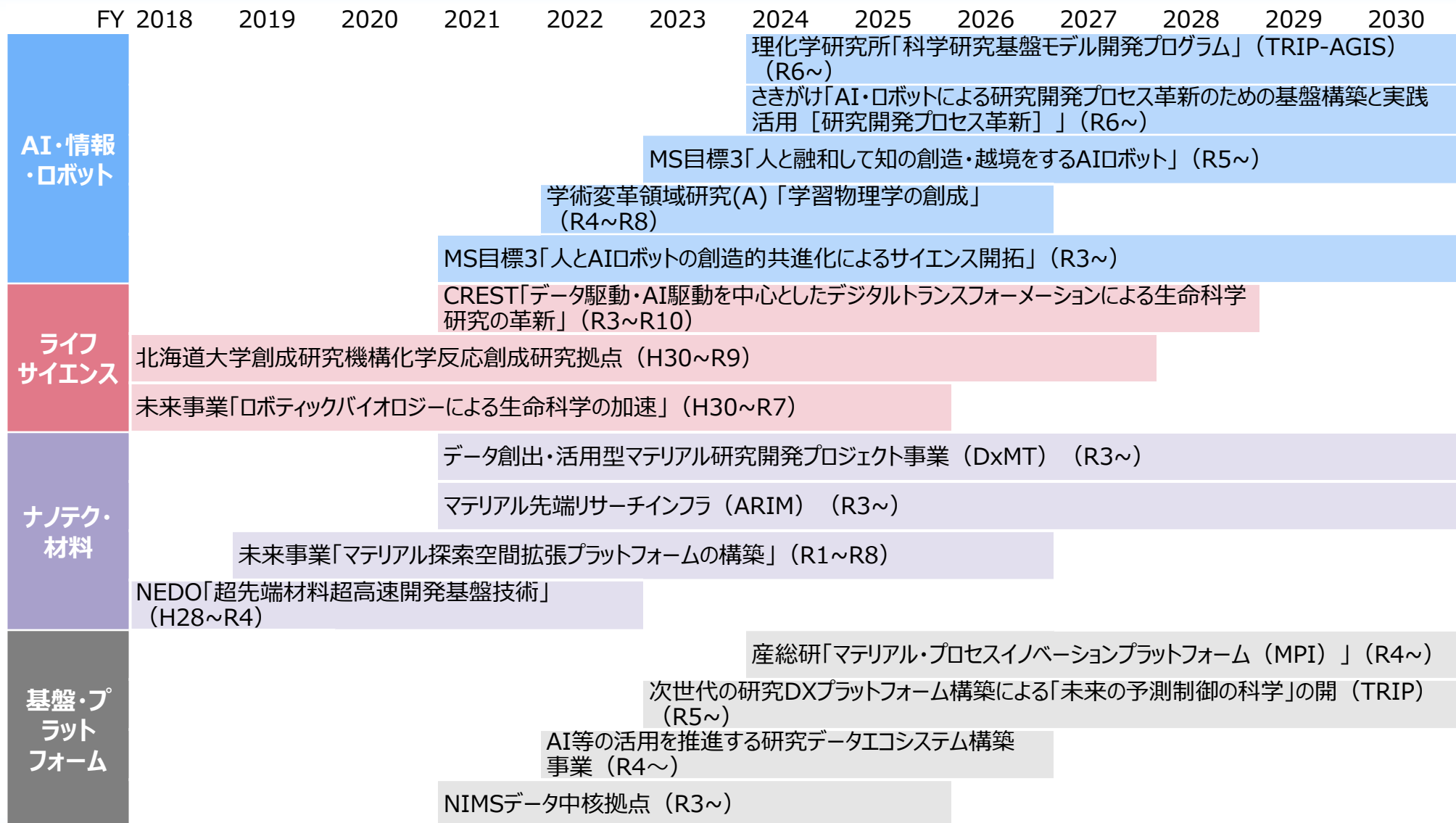
- ・ 1+N AIプロジェクト (1つの大規模 AI 科技プロジェクト (“1”) と、複数 (“N”) の関連連携プロジェクトを動かす)
- ・ **上海人工知能研究所「AI4Sクライマーズ・アクションプラン (2025)」** 世界中から応募受付。変革をもたらす次世代AI4S技術を開発。大規模分散学習インフラ (DeepLink) など基盤整備と研究チームへ支援プログラムを提供
- ・ 国家重点研究開発計画「破壊的技術革新重点プロジェクト」において「**AI駆動型科学研究プロジェクト**」を募集

- ・ K-Cloud R&Dプロジェクト(2025~2030)(国内 AI 半導体をベースに、AI 計算インフラ (ハードウェア・ソフトウェア・クラウド技術) を開発)

- ・ AI専用コンピューティングインフラ (IndiaAI Compute, NSM / AIRAWAT / PARAM Siddhi-AI)
- ・ 国産AI基盤モデル (ドメイン特化型モデル開発に貢献)
- ・ IndiaAI Datasets Platform

- ・ 科学研究向けAI基盤モデルの開発・共用 (TRIP-AGIS)
- ・ Advanced Integrated Intelligence Platform Project (AIP)
- ・ スーパーコンピュータ「富岳」、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ
- ・ 大規模AIクラウド計算システムABCI 3.0 等

日本における関連施策・プログラム



分野事例) ライフサイエンス分野のAI4S

生命科学・創薬

■ タンパク質構造予測

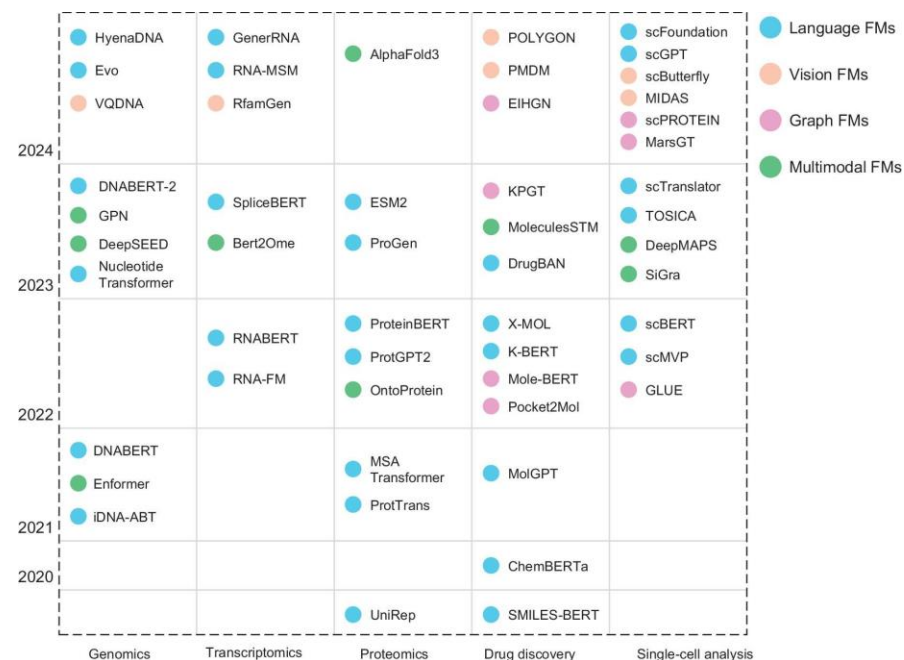
- AlphaFold2の登場以来、AIを用いたタンパク質構造予測の進展は凄まじい。
- AlphaFold3, RosettaFold, Boltz-1, Chai-1などが開発され、タンパク質分子だけでなく、RNA, DNA, 低分子化合物などの構造やそれらの複合体の構造予測が可能になっている。動的な性質の予測が課題。

■ 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RFdiffusion25により主鎖構造の発生が可能になり、ProteinMPNN26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、トランスクリプトミクス、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。



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

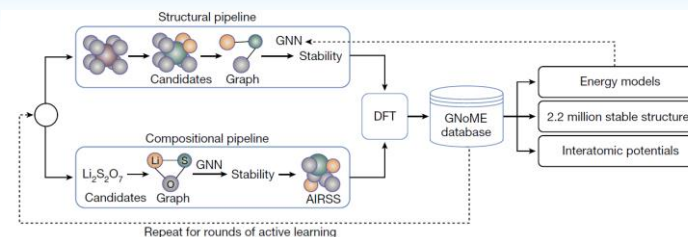
- 微生物培養を最適に制御するためにバイオプロセスで監視しているプロセスデータをもとに培養の時間発展予測を行うモデルが開発され、外乱が生じた場合も最適性を確保することに成功している。
- 実験室で取られたデータをベースに**大規模プロセスの予測**も可能であることが示されている。

分野事例) マテリアル分野のAI4S

■ 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に提供予定)



■ 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Graphormer (Graph Transformer)を利用
- **1700万のデータ**を用いて学習

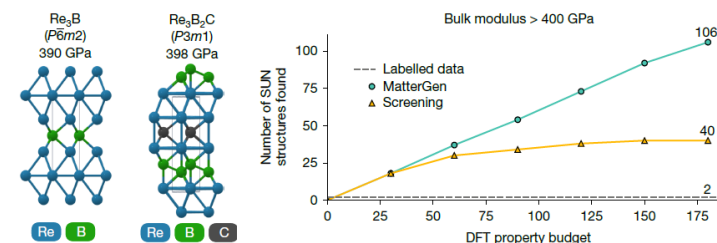
Model	CPS ↑	Acc ↑	F1 ↑	DAF ↑	Prec ↑	MAE ↓	R ² ↑	%SME ↓	RMSD ↓	Training Set
eSEN-30M-OAM	0.888	0.977	0.925	6.069	0.928	0.018	0.866	0.170	0.061	6.6M (113M) MPJr+Alex+OMat24
ORB v3	0.861	0.971	0.905	5.912	0.904	0.024	0.821	0.210	0.075	6.47M (113M) MPJr+Alex+OMat24
SevenNet-MF-ompa	0.845	0.969	0.901	5.825	0.890	0.021	0.867	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+Alex+MPJr
GRACE-2L-OAM	0.837	0.963	0.880	5.774	0.883	0.023	0.862	0.294	0.067	6.6M (113M) OMat24+Alex+MPJr
AlphaNet-v1-OAM	0.804	0.971	0.909	5.777	0.883	0.020	0.868	0.644	0.032	6.6M (113M) OMat24+Alex+MPJr
DPA-3.1-3M-FT	0.802	0.963	0.884	5.667	0.866	0.023	0.869	0.469	0.069	163M OpenLAM
eSEN-30M-MP	0.797	0.946	0.831	5.260	0.804	0.033	0.822	0.340	0.075	146k (1.58M) MPJr
MACE-MPA-0	0.795	0.954	0.852	5.582	0.853	0.028	0.842	0.412	0.073	3.37M (12M) MPJr+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) OMat24+Alex+MPJr
Eqnorm MPJr	0.756	0.929	0.786	4.844	0.741	0.040	0.799	0.408	0.084	146k (1.58M) MPJr
DPA-3.1-MPJr	0.718	0.936	0.803	5.024	0.768	0.037	0.812	0.650	0.080	146k (1.58M) MPJr
SevenNet-1315	0.714	0.920	0.760	4.629	0.708	0.044	0.776	0.550	0.085	146k (1.58M) MPJr

Meta社
英ベンチャー
ソウル大学
ルール大学ボフム
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



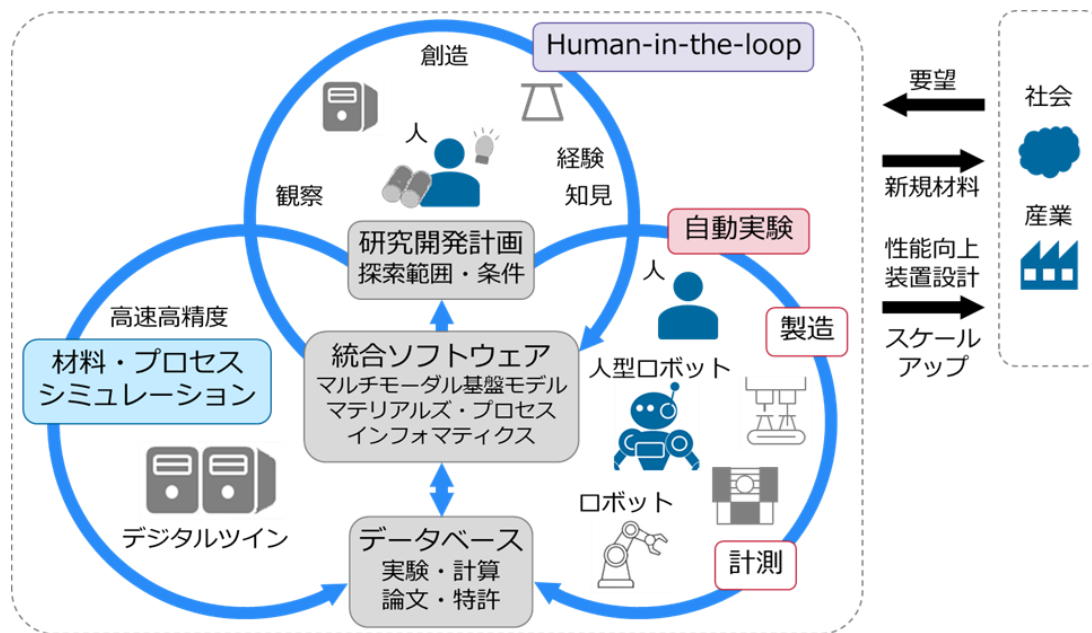
■ Cloud Hub for AI Experiment (17 May 2024)

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



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、ハイスル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**

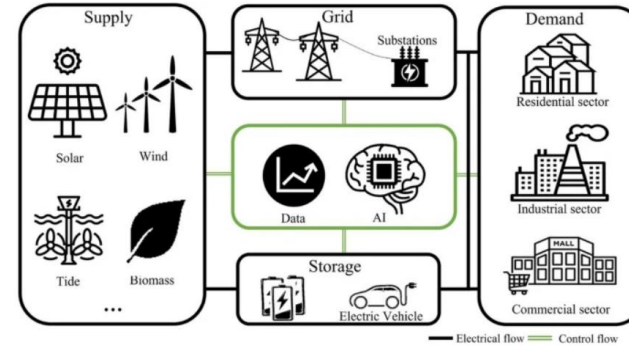
■ 自動実験装置、シミュレータ、文献等がつながり、研究開発の自動自律化が可能

■ 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

分野事例) 環境・エネルギー分野のAI4S

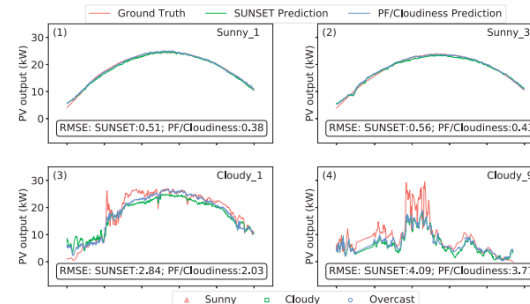
■ 電力使用傾向のリアルタイム監視・分析

- 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）

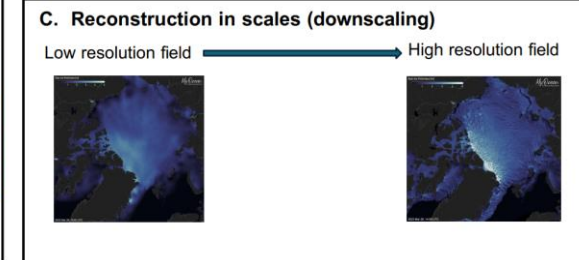
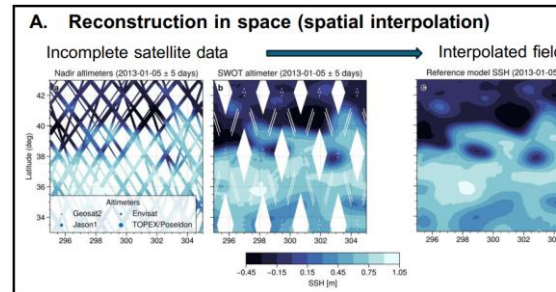
- 地上観測による天空画像（sky images）から雲の状態など未来の出力に影響する情報を機械学習で活用
- 連続画像+直近のPV出力履歴を入力し、15分先の出力を直接予測する総合的 CNN モデル



	Original image	Fixed threshold method	Tw/BS method	MTw/BS method
(A)				
(B)				
(C)				

■ 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



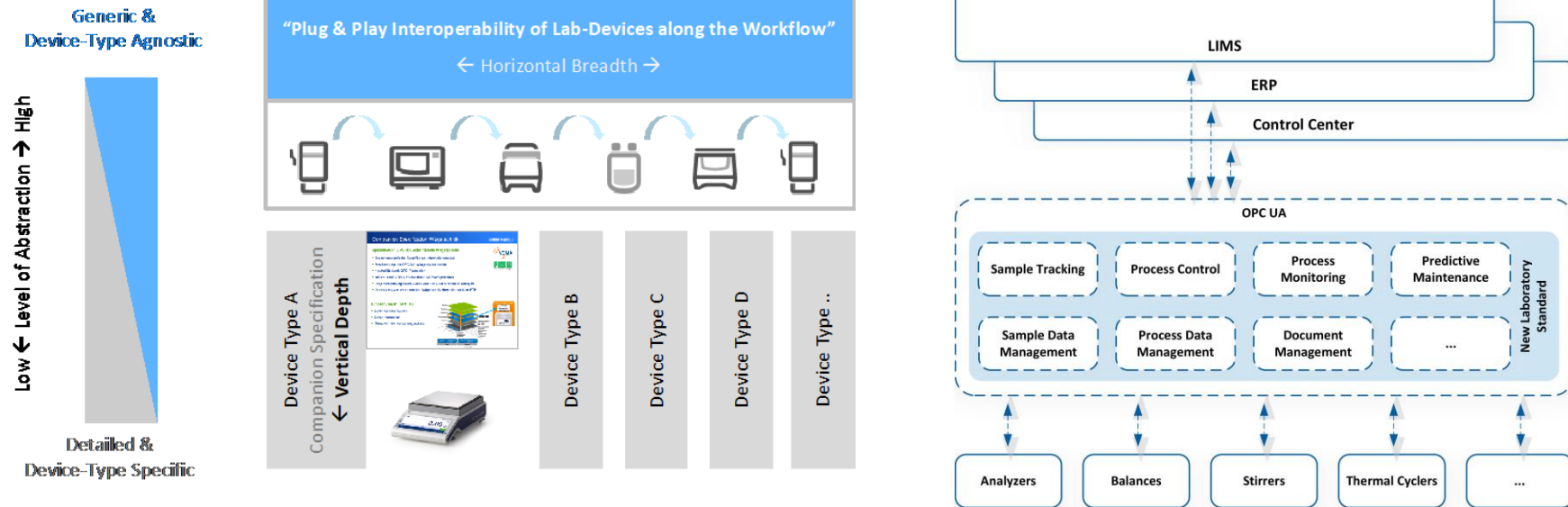
- Parag Biswas et al., AI-driven approaches for optimizing power consumption: a comprehensive survey, 116, (2024), <https://link.springer.com/article/10.1007/s44163-024-00211-7>
- Yuhao Nie et al. PV power output prediction from sky images using convolutional neural network: The comparison of sky-condition 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>

分野事例) 環境・エネルギー分野のAI4S

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活用の際に公共政策との整合性が必須 (例：GX、SBT : Science Based Targets initiative、NDC評価)

LADS – Laboratory and Analytical Device Standard



- ラボにおける研究機器類は、様々なメーカーの高度に専門化した多くの機器によって構成されており、インターフェースやデータフォーマットが異なるため、これらの機器を相互にネットワーク化し、既存のITインフラに統合することは困難
- しかしこれは、エンド・ツー・エンドのデジタル化と効率的なオートメーションの最も重要な前提条件
- LADSは、分析機器およびラボ機器のためのメーカーの違いに依存しないオープンな規格を作成し、デジタル化および自動化の将来の要件にも適合することを目標とする標準化活動
- LADSは国際的な非営利団体OPC Foundationが開発・推進する産業用オートメーションプロセスにおける、ベンダー間通信と相互運用性のためのオープンコミュニケーションプラットフォーム「OPC UA」がベース
- LADSで規定された情報モデルは、監視・制御、通知、プログラム・結果管理、資産管理、メンテナンスなどのユースケースの情報をOPC UAアプリケーションに公開する目的で、OPC UAコンストラクトを用いたUAコンパニオン仕様に定義
- 日本からは、日本分析機器工業会（JAIMA）がLADSの標準化活動に参画