

AI for Science の実現に向けた 計算基盤等の動向調査

報告書

2026 年 3 月 31 日

アドバンスソフト 株式会社

目次

Executive Summary	1
1. はじめに	4
1.1. 調査目的	4
1.2. 調査項目	4
1.3. 情報源	4
1.4. 本書の構成	5
2. 国内外の計算資源配分や計算基盤の環境整備に関する動向調査	6
2.1. 欧米の AI for Science に関連する政策	6
2.1.1. 情報源	6
2.1.2. 欧州 HPC 共同事業体 EuroHPC JU	6
2.1.3. 米国 Genesis Mission	9
2.1.4. 米国エネルギー省 国家核安全保障庁 DOE/NNSA	11
2.1.5. 米国エネルギー省 科学局 DOE/SC	13
2.1.6. 米国国立科学財団 NSF	17
2.1.7. まとめ	20
2.2. 欧州のデータ戦略	23
2.2.1. 情報源	23
2.2.2. 欧州データ戦略 European strategy for data	24
2.2.3. 共通の欧州データ空間 Common European Data Spaces : CEDS	27
2.2.4. 共通の欧州データ空間の分野毎の取組	29
2.2.5. 欧州オープンサイエンスクラウド European Open Science Cloud : EOSC	35
2.2.6. 欧州バイオインフォマティクス研究所 EMBL-EBI	36
2.2.7. 欧州地球観測プログラム Copernicus	38
2.2.8. 欧州原子核研究機構 CERN	40
2.2.9. まとめ	40
2.3. 欧米の動向	41
2.3.1. 情報源	41
2.3.2. EuroHPC JU	42
2.3.3. 英国	47
2.3.4. スイス	49
2.3.5. イタリア	51
2.3.6. フランス	52

2.3.7. フィンランド	54
2.3.8. ANL (米国)	55
2.3.9. ORNL (米国)	57
2.4. 国内の動向	60
2.4.1. 情報源	60
2.4.2. 産業利用への資源配分	61
2.4.3. 産業利用の状況	63
2.4.4. 分野別のユーザ動向	66
2.4.5. データ流通量	71
2.4.6. 公募状況	74
2.4.7. まとめ	76
3. AI ユーザのトレンドに関する調査分析	77
3.1. AI 市場予測・将来的な社会的影響の調査	77
3.1.1. 情報源	77
3.1.2. Hyperion 社調査報告書からの情報	80
3.1.3. HPCwire 報道からの情報	91
3.1.4. まとめ	106
3.2. ライフサイエンス分野の基盤モデル	109
3.2.1. 情報源	109
3.2.2. 基盤モデルの現状	110
3.2.3. AI 基盤モデルを支えるデータ基盤	114
3.2.4. AlphaFold (Google DeepMind)	116
3.2.5. HyenaDNA (Stanford 大学)	120
3.2.6. ESM-3(Meta)	123
3.2.7. BioBERT(Korea University)	125
3.2.8. DNABERT-2 (カリフォルニア大)	127
3.2.9. scGPT(Toronto 大)	129
3.2.10. Geneformer (MIT)	133
3.2.11. まとめ	136
3.3. 材料分野の基盤モデル	137
3.3.1. 情報源	137
3.3.2. 基盤モデルの現状	138
3.3.3. AI 基盤モデルを支えるデータ基盤	141
3.3.4. GNoME (Google DeepMind)	144
3.3.5. MatterSim (Microsoft Research AI for Science)	148
3.3.6. MACE-MP-0 (ケンブリッジ大学、アムステルダム大学)	153

3.3.7. MatterGen (Microsoft Research AI for Science)	157
3.3.8. A-Lab (LBNL)	159
3.3.9. Omol25 と UMA (Meta 社)	165
3.3.10. まとめ	166
3.4. 気象分野の基盤モデル	166
3.4.1. 情報源	166
3.4.2. 基盤モデルの現状	167
3.4.3. AI 基盤モデルを支えるデータ基盤	172
3.4.4. NVIDIA の基盤モデル	174
3.4.5. Google の基盤モデル	177
3.4.6. Microsoft の基盤モデル	182
3.4.7. ECMWF の基盤モデル	184
3.4.8. IBM の基盤モデル	187
3.4.9. Huawei の基盤モデル	189
3.5. 海洋分野の基盤モデル	190
3.5.1. 情報源	190
3.5.2. 基盤モデルの現状	190
3.5.3. IBM の基盤モデル	191
3.5.4. Mercator Océa の基盤モデル	192
3.5.5. Hawaii univ の基盤モデル	193
3.6. 地球環境分野の基盤モデル	194
3.6.1. 情報源	194
3.6.2. 基盤モデルの現状	195
3.6.3. AI 基盤モデルを支えるデータ基盤	197
3.6.4. IBM+ESA の基盤モデル	198
3.7. 防災分野の基盤モデル	199
3.7.1. 情報源	199
3.7.2. 基盤モデルの現状	200
3.7.3. IBM の基盤モデル	200
3.8. 将来の見通しの分析	202
3.8.1. 情報源	202
3.8.2. 研究プロセスに着目した基盤モデルの分類方法	203
3.8.3. 研究プロセスに着目した事例の分類	204
3.8.4. 国内外における AI ユーザ数のトレンド	208
3.8.5. 汎用 LLM に関する情報	210
4. 将来的な計算基盤整備に係る提案	224

4.1. 分野別計算資源特性の分析	224
4.2. 研究プロセスに着目した分類別特性の分析	226
4.2.1. 知識体系化と知見抽出	226
4.2.2. 現象予測と計算加速	227
4.2.3. 実験・検証の自律化	228
4.3. 基盤モデルのパラメータ数およびデータ量の分析	229
4.4. 2030 年に必要な計算基盤の推定	233
4.5. AI for Science 計算基盤のユーザビリティ向上に向けた方策	235
4.6. 計算基盤整備に係る提案	236
4.6.1. 2030 年の計算基盤整備に係る提案	236
4.6.2. 2045 年の計算基盤整備に係る提案	239
5. 結論	243
6. 付録 A：用語・略語集	245
7. 付録 B：要約資料	250

通貨について

本報告書において、通貨は下記のように取り扱った。

- ① 通貨の換算：米ドルおよびユーロに関しては、2025 年 3 月のレートの平均を 10 円単位で四捨五入し、185 円＝1 ユーロ、160 円＝1 ドルとして換算している。また、ポンド、スイスフランについても同様である。
- ② 本報告書では過去のレートにさかのぼっての換算は行っていない。現在のレートで過去の値を換算している。
- ③ 可能な限り、現地通貨での表記と上記の基準の円表記の併記を行った。
- ④ 本報告書では、可能な限り、〇M ドル、〇M ユーロと記述し（M は百万を指す。）、日本円は〇億円または〇兆円との表記を行う。なお日本円に換算した場合の小数点以下は四捨五入した。
- ⑤ 下記の表 A のレートを利用した。

表 A. 通貨の換算

国・地域名	現地通貨	日本円
EU	1 M ユーロ	1.85 億円
米国	1 M ドル	1.60 億円
英国	1 M ポンド	2.10 億円
スイス	1 M スイスフラン	2.00 億円

本報告書に記載の製品・サービス等の名称は、各企業の商標または登録商標の場合がある。

Executive Summary

調査の目的

本調査は、生成 AI の技術革新が科学研究のプロセスを根本から変革する AI for Science の潮流を受け、我が国が次世代の科学技術競争において主導権を確保するための計算基盤整備の在り方を検討することを目的とした。文部科学省が進める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（以下「HPCI」という。）は、これまで多様な計算ニーズに応え、産学官の連携を軸に社会課題解決へ大きく貢献してきた。現在、AI はシミュレーションと融合し「科学の第 5 のパラダイム」として定着しつつあり、計算資源の需要は指数関数的に高まっている。本報告書では、これまでの HPCI の成果と現在検討されている「富岳 NEXT」の方向性が、この激動する国際情勢において極めて戦略的かつ勝利に直結する道筋であることを、定量的データと国内外の動向調査に基づき詳述する。

AI for Science による研究プロセスの変化

AI for Science は、単なる解析ツールを超え、研究プロセスのあらゆる段階において劇的な効率化と深化をもたらしている。第一に、知識の体系化と仮説生成である。膨大な論文や実験データから大規模言語モデル（以下「LLM」という。）が知見を統合し、人間では把握困難なキーワード間の相関を抽出することで、新たな研究仮説の立案を支援する。第二に、現象予測と計算加速については、物理法則を学習した基盤モデルが、従来のスーパーコンピュータによるシミュレーションを数万倍に加速させ、例えば、材料分野やライフサイエンス分野では、新材料や新薬の候補を極めて短時間で絞り込むことを可能にしている。第三に、実験の自律化である。ここでは、AI がロボットや計測機器をリアルタイムに制御し、24 時間稼働の自律型ラボを実現することで、検証サイクルから人為的ミスを排除し、発見のスピードを物理的限界まで高めている。

国際的な競争環境と戦略的投資の加速

欧米の主要国は、AI for Science を国家の競争力とデジタル主権を左右する戦略的資産と位置付け、インフラと研究開発を一体化した大規模投資を実施している。米国の Genesis Mission において、米国エネルギー省（DOE）は、AI により科学的生産性を 10 年で倍増させる戦略計画を始動させた。世界初のエクサスケール機 El Capitan 等を基盤に、科学基盤モデルの構築へ資源を集中させている。また、欧州の EuroHPC JU は、AI 最適化スーパーコンピュータと専門的な技術サポートを垂直統合した AI Factory を欧州全域に展開し、スタートアップや研究者が最先端資源へ即座にアクセスできる環境を構築している。また、データ基盤の統合については、欧州データ戦略に基づき、分野横断的な「共通欧州データ空間」の整備が進められ、AI 学習の「燃料」となる高品質データの流動性を確保している。

計算需要の推計と「富岳 NEXT」への展望

本調査の分析により、2030 年に向けて計算資源およびデータストレージへの需要を明確にした。現在、基盤モデル学習のための演算量は指数関数的に増大している。2030 年には、AI for Science の高度な基盤モデルの開発において、FP16（半精度）で 500 EFLOPS 級の演算能力が求められると推計される。このために、次世代高性能 GPU を約 12 万基統合したいわゆる「AI Gigafactory」級の演算基盤の超大規模インフラが必要となってくる。また、基盤モデルのためのストレージ需要も爆発し、2030 年には最大 640PB 規模の高品質な科学データ蓄積プラットフォームが必要となる。

一方で、世界の評価軸が実行性能や電力効率へ移行する中、日本の政策もそのトレンドとの整合性を持っている。文部科学省が検討する「富岳 NEXT」の多精度演算や CPU-GPU 密結合アーキテクチャの採用は、これらの国際的な技術トレンドと完全に一致している。

次世代計算基盤整備に向けた具体的な提案

我が国が AI for Science 時代の主導権を確保し、HPCI および「富岳 NEXT」の政策を深化・拡大させるため、以下の施策を提案する。まず、2030 年までの AI for Science 先導的実装期に関する提案である。第一に、HPCI の高度化による超大規模インフラ構築として、「富岳 NEXT」を中核とし、次世代 GPU を大量集積した演算基盤と、PB 級の分野横断的データ共有基盤を整備する。第二に、日本発基盤モデルの国家戦略化として、材料科学、気象・防災、海洋資源といった我が国の世界的に卓越した高品質データを核に、「日本独自の科学用 AI 基盤モデル」を整備し、経済安全保障を担保する。第三に、伴走型支援とキャリアパス確立として、GPU 技術を中心とした計算科学技術者を育成・確保し、既存の Fortran 等の膨大なコード資産を次世代機へ最適化するプログラムを強化する必要がある。

次に、2045 年までには、自律型研究システムの社会実装期を位置付ける。第一に、自律型研究エコシステムの確立として、AI が仮説立案から実験、検証までを自動で行うクロードループ環境を、HPCI から地方、エッジまで有機的に結合させた「重層的計算エコシステム」として確立する。第二に、持続可能な科学技術基盤として莫大な電力需要に対し、廃熱利用や AI によるエネルギー指向スケジューリングを統合した、極めて環境負荷の低い次世代計算環境を実現する。

総括

AI for Science の実現は、単なる技術的進歩ではなく、我が国の研究開発能力を根本から規定する国家戦略上の最優先課題である。これまでの HPCI の運用で培われた「利用者支援のノウハウ」や「産業利用の裾野」といった日本固有の強みは、AI for Science という新パラダイムにおいても盤石な基礎となる。この既存政策の延長線上に、「富岳 NEXT」を

核とする次世代インフラを大胆に構築し、データ・アルゴリズム・人材を有機的に結合させることこそが、2030年以降の日本の科学技術の地位を不動のものにする。

1. はじめに

1.1. 調査目的

我が国においては、多様な利用者の計算ニーズに応えるため HPCI を構築し、スーパーコンピュータを利用した研究開発や種々の社会課題に対応するための計算資源の活用を推進している。

昨今、科学研究での AI の利活用による科学研究の高度化・高効率化等を行う「AI for Science」を推進する潮流や、シミュレーションと AI を組み合わせた手法等の発展により、計算基盤（計算資源を含む。）の需要はますます高まる一方である。今後、AI に関する研究のみならず、あらゆる分野の研究開発で AI を活用することが想定される。その中で、必要となる計算資源の見込みや計算基盤の在り方に係る動向を把握することは喫緊の課題であり、調査が必要となっている。

本調査研究は、「AI for Science の実現に向けた計算基盤等の動向調査」として、国内外の計算資源の配分制度や計算基盤の環境整備に関する動向を調査するものである。あわせて、将来の AI ユーザ増加のトレンドを AI 市場の状況や分野ごとの実態等を踏まえて俯瞰的に分析し、今後の我が国における計算資源の理想的な提供体制の構築や、ユーザビリティ向上に向けた検討に役立てることを目的とする。

1.2. 調査項目

次の3項目を調査・分析し、必要な提案を行った。

- ① 国内外の計算資源配分や計算基盤の環境整備に関する動向調査；仕様書に記載の項目に対して、我が国の HPCI 等の共用に供している計算基盤の調査・分析を行う。EU や米国など国外における計算基盤の調査・分析を行う。
- ② AI ユーザのトレンドに関する調査分析；AI 市場予測等を整理し、AI の将来的な社会的影響や展開を俯瞰する。各分野での基盤モデルの開発・実装の具体的な状況を文献調査する。国内外における将来の見通しを分析する。
- ③ 将来的な計算基盤整備に係る提案；分野別に必要とされる計算資源特性を分析、整理する。2030 年頃と 2045 年頃等にマイルストーンを設定し、必要な計算基盤の環境整備、そのユーザビリティを高める施策を提案する。

1.3. 情報源

本調査研究では、次の情報源を利用した。

- ① 公開された文献や調査結果・Web 情報を活用
- ② 日常での業務や調査業務で得られた海外・国内の人的ネットワークを活用して、情報を収集

- ③ 最新の情報として、SC25 の情報を活用
- ④ 文献情報収集のため、データベースは J-Dream を活用

1.4. 本書の構成

本書は 5 つの章から成る。1 章では本調査の目的、項目、および情報源を明示し、全体の枠組みを概説する。2 章では、欧米と国内における計算資源の配分制度や基盤整備の動向に加え、欧州のデータ戦略や共通データ空間の現況を調査・分析する。3 章では AI 市場の将来予測に基づき、ライフサイエンス、材料、気象、海洋、地球環境、防災といった各専門分野における基盤モデルと、それを支えるデータ基盤の現状を詳述するとともに、国内外のユーザトレンドを分析する。4 章では、分野別および研究プロセスの特性を踏まえ、2030 年および 2045 年のマイルストーンに向けた計算資源需要の推定と、計算基盤整備およびユーザビリティ向上に係る具体的な施策を提案する。5 章ではこれら一連の調査結果を総括し、今後の提供体制の構築に向けた結論を述べる。

最後に、付録には、Epoch AI を利用したデータ分析方法、および、AI 基盤モデルとその基盤モデルを支えるデータの一覧表を記載した。

2. 国内外の計算資源配分や計算基盤の環境整備に関する動向調査

2.1. 欧米の AI for Science に関連する政策

2.1.1. 情報源

主として、下記の予算書を中心とした資料を情報源とした。本節は、これらの予算書から、AI for Science の関連を抜粋した内容である。

- [1] EuroHPC JU JOINT UNDERTAKING DECISION OF THE GOVERNING BOARD OF THE EuroHPC JU JOINT UNDERTAKING No 54/2025 Adopting the Joint Undertaking's Work Programme and Budget for the year 2026
- [2] Executive Order 14363 of November 24, 2025, Launching the Genesis Mission
- [3] Department of Energy FY 2026 Congressional Justification Volume 1, National Nuclear Security Administration, May 2025
- [4] Department of Energy FY 2026 Congressional Justification Volume 5, Science, May 2025
- [5] NATIONAL SCIENCE FOUNDATION FY 2026 Budget Request to Congress, May 30, 2025

2.1.2. 欧州 HPC 共同事業体 EuroHPC JU

本節は、[1]より AI 関連の政策を抜粋した。

(1) AI 政策の特徴

- ① AI Factory の展開と垂直統合：
 - AI に最適化されたスーパーコンピュータ、または既存システムの AI 専用パーティションを取得・運用し、AI 研究に必要なフルレンジの活動を支援する。
 - 「AI Factory Antennas」と呼ばれる接続拠点を設置し、スタートアップや中小企業、科学研究者へ計算リソースや技術サポート、トレーニングへのアクセスを容易にする。
 - 2026 年までに、ルクセンブルク、スウェーデン、ドイツ、イタリアなど欧州全域で 10 拠点以上の AI 最適化システムの調達・運用が計画されている。
- ② 「HPC-QC-AI」によるハイブリッド基盤の構築：
 - 古典的な HPC と AI 最適化システムに加え、量子コンピューティング (QC) を統合した世界クラスのインフラ構築を目指している。
 - 2026 年には、量子計算を AI ワークフロー（例：Quantum Enhanced ML）に組み込むための新たなアクセス・ポリシーや技術開発が推進される。

- ③ 信頼できる AI (Trustworthy AI) の推進:
- 欧州のリーダーシップを確立するため、信頼性が高く倫理的な AI モデルの開発、学習、および検証を支援することを新たな目的として掲げている。
 - 「STEP Seal」という品質ラベルを導入し、欧州の戦略的自律性に貢献する高品質な AI プロジェクトを公式に認定する仕組みを整えている。
- ④ 戦略的資産の保護と供給網の安全性:
- AI Factory やインフラに関連する調達において、ハイリスク・サプライヤーの関与を制限し、欧州のデジタルインフラの完全性とサイバーセキュリティを保護する厳格な基準を設けている。
 - 欧州独自のプロセッサ (RISC-V ベース等) 開発を支援し、AI 計算に必要な重要技術の外部依存を低減させ、自律的な供給網の構築を図っている。
- ⑤ 将来的な AI Gigafactory への拡大:
- 2026 年には、現在の AI Factory の取組を更に強化し、大規模な「AI Gigafactory」の設立を支援するための新たな規制提案の採択が予定されている。

(2) 計算基盤のユーザ動向・利用実績

EuroHPC JU は、欧州連合 (European Union: EU) が保有する計算資源の割り当てにおいて、公平かつ偏りのないアクセスを保証するため、国際的なピアレビュー (査読) プロセスを実施している。このプロセスは既存のスーパーコンピュータのみならず、将来運用されるすべてのシステムにも適用されるものである。利用実績の可視化に関しては、2031 年までに調達されたスーパーコンピュータや量子コンピュータの台数、および EuroHPC JU システムへのアクセスが許可されたプロジェクト数などの指標を年次ベースで追跡している。また、ユーザとの関わりを強化するため、2026 年 9 月にアイルランドで「User Days 2026」を開催し、計算基盤を利用したプロジェクトの成果を広く普及させる予定である。

(3) 公募・利用制度の詳細

2026 年には、量子コンピューティングを統合した新たなアクセス・ポリシーが運用される。具体的には、独自のピアレビュー・プラットフォームを調達し、生成 AI や機械学習 (ML) といった高度な計算ニーズに対応したワークフローへと進化させる計画である。この新プラットフォームの導入に当たっては、既存の PRACE ポータルからデータを移行し、中断のない査読プロセスを確保する。更に、修正されたアクセス・ポリシーに基づき、従来の HPC 利用者に加えて量子コンピューティングのユーザも対象としたアクセス手順の更新が行われる。

(4) AI for Science の資源配分状況

AI Factory（の確立により、信頼できる AI の開発とエコシステム支援に向けた資源配分が加速している。これは、一般的な AI モデルの学習や機械学習を可能にする AI 最適化スーパーコンピュータ、あるいは既存スーパーコンピュータの AI 専用パーティションの取得・運用を目的としている。

2025 年に合意された AI Factory の調達が 2026 年も継続され、ルクセンブルク（MeluXina AI）、スウェーデン（MIMER）、ドイツ（HammerHAI）などで AI 最適化システムの導入が進められる。2026 年度の予算配分においては、AI Factory の調達と運用コストに 291M ユーロ（538 億円）が割り当てられており、関連する助成金としても 58M ユーロ（107 億円）が計上されている。これらのインフラは、科学分野における大規模な AI 活用を支える中心的な役割を果たす。

(5) HPC・統合基盤の整備状況

欧州全体で世界最高水準のスーパーコンピュータおよび量子コンピューティング基盤の整備が進行している。フランスに設置される 2 台目のエクサスケール・スーパーコンピュータ「Alice Recoque」は、2027 年の稼働を目指している。中規模および量子基盤については、ギリシャの「Daedalus」やスウェーデンの「Arrhenius」が 2026 年に稼働を開始するほか、オランダとルクセンブルクで新たな量子コンピュータの調達が同年中に開始される。また、計算資源間の連携を強化するフェデレーション・サービスやハイパーコネクティビティの構築が進み、2026 年中に完全に展開される見込みである。

(6) 産業界との連携の枠組み

スタートアップや中小企業（SME）を対象とした AI エコシステムの支援が強化されている。産業利用に特化したスーパーコンピュータ「INNOVATE（イタリア）」の契約は、2026 年第 2 四半期に予定されている。また、欧州の技術的自律性を確保するため、産業界が主導する RISC-V ベースのプロセッサ開発や、エクサスケール向けマイクロプロセッサ技術の強化に対して、48.6M ユーロ（89.9 億円）の予算が投じられている。

学術および産業向けのアプリケーション開発を支援するため、欧州量子エクセレンスセンター（QECs）が 2025 年から 2028 年にかけて稼働する。また、HPC センター・オブ・エクセレンス（CoE）や HPC ライトハウス・コードの公募が実施され、科学的な戦略アプリケーションの実行に不可欠なハイエンド・スーパーコンピュータへのアクセスが提供される。更に、2026 年には量子コンピューティングを統合した新たなアクセス・ポリシーが採用され、古典的な HPC と量子計算を組み合わせたハイブリッドな科学計算アプローチが制度的に整備される。

(7) 国際協力

更に国際協力として、日本やインドとの協力に続き、2026年にはラテンアメリカの利害関係者とのHPC協力体制を構築するための公募が開始される予定である。

(8) 今後の展開

2026年は、AI Gigafactoryの設立支援や量子技術の権限強化など、新たな規制提案に基づく活動が焦点となる。2025年7月に採択された改正規則案に基づき、AI Gigafactoryの設置や量子技術への取組が更に強化される計画である。量子アプリケーションの分野では、具体的な課題解決を通じて量子アドバンテージを実証することを目的としたインセンティブ賞が実施される。

2.1.3. 米国 Genesis Mission

本節は、2025年11月24日に発行された大統領令14363号「ジェネシス・ミッションの立ち上げ」(Executive Order 14363 of November 24, 2025, Launching the Genesis Mission) [2]をまとめた内容である。

<https://www.federalregister.gov/documents/2025/11/28/2025-21665/launching-the-genesis-mission>

(1) 概要

「ジェネシス・ミッション」を創設し、AIによる科学的発見を加速することが述べられている。本ミッションは、エネルギー長官が実施と資源統合の責任を負い、大統領補佐官(科学技術担当)が関係省庁間の調整を含め、全体を主導する。

この文書は、第1条：目的、第2条：ジェネシス・ミッションの設立、第3条：アメリカ科学・セキュリティ・プラットフォームの運用、第4条：国家科学技術課題の特定、第5条：関係省庁間の調整および外部との連携、第6条：評価および報告、第7条：一般条項の構成になっている。

(2) 目的

このミッションの目的は、下記のとおりである。米国はAIの世界的優位を巡る競争に勝つため、マンハッタン計画に匹敵する歴史的な国家的取り組み「ジェネシス・ミッション」を始動する。連邦政府の膨大な科学データを活用した統合プラットフォームを構築し、AIエージェント等を用いて研究を自動化・加速させる。国立研究所、民間、大学の資源を結集することで科学的発見を劇的に早め、国家安全保障やエネルギー主導権、米国の戦略的リーダーシップを確固たるものにすることを目指す。

(3) 基盤の構築・運用

エネルギー長官は、ミッションの基盤となる「アメリカ科学・セキュリティ・プラットフォーム」を構築・運用する。この基盤は、国立研究所のスーパーコンピュータやAIエージェント、科学用基盤モデル、セキュアなデータアクセス、自律型実験ツールを統合して提供するものである。運用に当たっては、国家安全保障に合致する厳格なセキュリティ基準を適用する。長官は、発令から 90 日以内に計算リソースを特定し、120 日以内にデータ資産の特定と外部データの統合計画を策定する。更に 240 日以内にロボット研究所等の能力を調査し、270 日以内に特定の課題に対して初期運用能力を実証することが求められる。

(4) 国家科学技術課題

ミッションが取り組むべき「国家科学技術課題」の特定プロセスが詳細に規定されている。まず、命令から 60 日以内にエネルギー長官は、少なくとも 20 の科学技術課題を特定し、大統領補佐官（科学技術担当）へ提出しなければならない。優先領域には、先端製造、バイオテクノロジー、重要材料、核分裂および核融合エネルギー、量子情報科学、半導体とマイクロエレクトロニクスの 6 分野が含まれる。提出から 30 日以内に、大統領補佐官は他機関の提案も含む拡張リストを作成し、ミッションが取り組む初期課題を確定させる。参加機関はこのリストに沿ってプラットフォームを活用し、研究開発を推進する。また、この課題リストは進捗状況や新たな国家的ニーズ、政権の優先事項を反映させるため、毎年更新される仕組みとなっている。

(5) 進め方

関係機関のAIプログラムやデータをミッションと整合させ、民間の参画を促す資金提供や賞金企画を推進する。また、研究フェローシップ等の教育プログラムを通じた人材育成や、外部機関との共同研究の枠組みを構築する。その際、知的財産権の保護や厳格なサイバーセキュリティ基準、ユーザ審査の徹底が求められる。第 6 条では評価と報告について定めており、エネルギー長官は発令から 1 年後、その後は毎年、大統領に報告書を提出しなければならない。これにはプラットフォームの運用状況、研究の進捗や論文・試作機の成果、学生の参加状況、官民連携の成果、およびミッション達成に必要な追加措置の推奨事項を記述する。

(6) 備考

本ミッションの発表は、2025 年 11 月 24 日である。したがって、DOE 傘下の各省庁の予算への反映は、FY2026 以降と考えられる。

2.1.4. 米国エネルギー省 国家核安全保障庁 DOE/NNSA

本節は、[3]より AI 関連の政策を抜粋した。

(1) AI 政策の特徴

- ・ 核安全保障任務への戦略的統合と専用組織の創設: AI 技術を単なる補助ツールではなく、核兵器の管理・維持（ストックパイル・スチュワードシップ）における中核的な能力と位置付け、新設の「核安全保障のための人工知能（AI4NS）」サブプログラムに 60M ドル（96 億円）を計上して既存の関連活動を統合している。
- ・ 「AI for Science」による設計・製造プロセスの加速: 物理ベースのシミュレーションと実験データセットを連携させた AI サロゲート（代理）モデルを開発し、兵器システムの設計、材料特性の評価、非核コンポーネントの製造、および核分裂心の CT スキャンにおける欠陥特定などのプロセスを大幅に迅速化している。
- ・ 機密保護を前提とした専用ハードウェアの配備: AI モデルの評価・開発を安全に行うため、TOP SECRET レベルを含む機密ネットワーク（SECRET/Restricted Data など）上での専用 AI 計算ハードウェアの配備と、データの適切な仕分け・保護を行うガードレールの構築を重視している。
- ・ 組織横断的なコラボレーション基盤への投資: 「DICE (Digital Infrastructure for Collaborate Ecosystem)」プロジェクトを通じて、設計機関と製造機関が大規模な科学データや AI モデルを安全かつシームレスに共有・分析できるセキュアな環境整備を推進している。
- ・ 学術・産業界との多層的なアライアンス: 新設の「人工知能学術戦略アライアンス (AIASA)」による人材パイプラインの強化や、米国の AI 産業界との提携による商用ソリューションの活用・国家安全保障用途への最適化など、外部知見の積極的な取り込みを図っている。
- ・ AI リスクの科学的評価と対策: LLM などが核兵器関連の情報拡散に与える影響を評価するフレームワークを維持し、AI 自体がもたらす情報セキュリティ上の脅威や拡散リスクに対して科学的な知見から先制的な対策を講じている。
- ・ デジタル変革 (DX) との一体的な推進: AI/ML の導入を、サプライチェーンの監視、サイバー防御 (Endpoint Detection and Response)、および「デジタル・エンジニアリング」の推進と密接に関連付け、業務全体の効率化と情報の信頼性向上を目指している。

(2) 計算基盤のユーザ動向・利用実績

NNSA の計算基盤は、核実験を伴わずに核兵器の安全性、機密性、信頼性を評価する「科学ベースの核兵器管理」の根幹を成している。主な利用実績として、寿命延長プログラム (LEP) や近代化プログラム、兵器解体活動、および「重大な発見事象 (SFI)」の調

査において、統合設計コード（IDC）を用いた詳細な分析が継続的に実施されている。

近年の動向として、El Capitan 等の高度な計算資源へのコード移行と活用が加速しており、年次評価報告書（AAR）や兵器信頼性報告書（WRR）を支える科学的根拠の提供に不可欠な存在となっている。また、「大規模計算イニシアチブ（LSCI）」を通じて、従来は実行不可能であった極めて複雑な物理計算を日常的な業務とするための取組も進められている。

(3) AI for Science の資源配分状況

2026 年度予算では、AI 技術を核安全保障任務へ全面的に統合するため、新たに「核安全保障のための人工知能（AI4NS）」サブプログラムを創設し、60M ドル（96 億円）の予算を計上した。このプログラムは、従来の「先進機械学習イニシアチブ（AMLI）」や小規模な研究開発を吸収し、ストックパイル・スチュワードシップ（核兵器管理）のミッションエリアに AI/ML 能力を配備することを目指している。具体的には、機密情報の保護、設計・製造・認定の加速、AI 支援による材料発見、そして専用ハードウェアの配備という 4 つの主要分野に重点を置いている。

資源配分の主な優先事項は、機密情報を保護するためのセキュアな AI モデルの開発や、設計・製造・認定プロセスの迅速化に向けた AI の導入である。特に、TOP SECRET レベルを含む機密ネットワーク上での AI 専用計算ハードウェアの配備に注力しており、実験データセットや HPC シミュレーションを活用した AI 支援による「材料発見」を加速させるための投資も行われている。

AI for Science の核心となる取組として、物理ベースのシミュレーションと実験データセットを連携させた AI サロゲートモデルの開発が推進されている。これにより、核兵器システムの候補設計や材料特性の迅速な評価が可能となり、従来多大な計算時間を要していたプロセスが大幅に短縮される。また、非核コンポーネントの製造やピット（核分裂心）の CT スキャンにおける欠陥特定・検査プロセスに AI を導入することで、製造の効率化と品質認定の自動化を同時に図る「デジタル変革」を加速させている。

(4) HPC ・ 統合基盤の整備状況

HPC 基盤は、最先端の「先進技術システム（ATS）」と汎用的な「コモディティ技術システム（CTS）」を組み合わせることで、安定かつ拡張可能な計算環境が構築されている。整備状況としては、ローレンス・リバモア国立研究所（LLNL）においてエクサスケール・システム「ATS-4 El Capitan」の機密運用が進んでおり、ロスアラモス国立研究所（LANL）では「ATS-3 Crossroads」が継続稼働している。更に、2027 年度の導入を目指した「ATS-5」の調達とプロトタイプ環境の準備も着手されている。

また、組織横断的な統合基盤として、「DICE（Digital Infrastructure for Collaborate Ecosystem）」の整備が推進されている。これは設計機関（DA）と製造機関（PA）の間で

大規模な科学データやモデルを安全かつ効率的に共有・共有するための環境であり、ネットワークのアップグレードやデータストレージの拡充が進められている。

(5) 産業界・学界との連携

NNSA は、民間セクターの革新的な技術を取り込むため、産業界との協力体制を強化している。AI 分野では、米国の AI 産業と提携して商用ソリューションを活用しつつ、それを国家安全保障独自のユースケースに合わせて最適化する共同研究が求められている。

資源の調達と運用においては、HPC やストレージ、可視化クラスタの整備に際し、プログラムのおよび財務的価値が最も高いと判断された場合に「リース購入」契約を積極的に活用し、柔軟な資産管理を行っている。また、ローレンス・リバモア国立研究所における「Prototyping Enclave」の構築計画では、産業界パートナーや起業家を交えた共同作業スペースを設けることで、技術移転の迅速化と次世代の労働力育成を図っている。

AI 分野における技術的優位性を維持するため、NNSA は民間セクターおよび学界との協力を不可欠としている。産業界とは商用 AI ソリューションの活用や国家安全保障独自のユースケースに合わせた最適化について提携し、学界に対しては「人工知能学術戦略アライアンス (AIASA)」を新たに開始した。AIASA は、AI 分野における NNSA の研究と人材パイプラインを強化するために設計されており、予測科学学術アライアンスプログラム (PSAAP) においても AI/ML 技術の応用による予測能力の向上が重要なテーマとして掲げられている。

(6) 今後の展開

今後の展望として、AI および機械学習をサイバーセキュリティ対策や兵器コンポーネントの自動検査に全面的に組み込むなど、デジタル変革 (DX) がより深化したフェーズへ移行する。製造プロセスに物理ベースのシミュレーションを導入する「PSI (Production Simulation Initiative)」を通じて、製造と同時に品質を保證する「Born qualified」モデルの確立を目指す方針である。

長期的には、エクサスケールを超える技術の探索も視野に入れており、量子計算 (QC)、ニューロモフィック計算、および再構成可能な計算機技術といった次世代プラットフォームの研究・評価に引き続き注力していく計画である。

2.1.5. 米国エネルギー省 科学局 DOE/SC

本節は、[4]より AI 関連の政策を抜粋した。

(1) AI 政策の特徴

DOE は、科学的発見を加速し、米国の科学技術リーダーシップを確実なものにするため、AI 技術を科学分野へ統合することを最優先事項としている。特に、大規模で多次元なデー

タセットを扱い、科学的な意思決定に不可欠な高精度の回答を生成する「Scientific AI（科学向け AI）」の推進に重点を置いている。2026 年度予算案では、AI と物理ベースのアプローチを組み合わせ、複雑な問題の分析や信頼性の高い予測を行うための基礎研究への投資が増額されている。

- ・ 科学専用 AI（Scientific AI）の定義と推進: 大規模な多次元データを扱い、科学的な意思決定に耐えうる高精度かつ信頼性の高い答えを出すための「Scientific AI」の開発を最優先課題としている。
- ・ 物理モデルとの融合: 単なるデータ駆動型 AI ではなく、物理ベースのアプローチと AI 技術を組み合わせることで、複雑な問題の分析や高精度な予測・意思決定を実現することを目指している。
- ・ エクサスケール計算資源の戦略的活用: 世界最高峰のエクサスケール・システム（Frontier や Aurora）を、AI モデルのトレーニングや大規模シミュレーションのための計算基盤として最大限に活用している。
- ・ 科学基礎モデル（Foundation Models）の構築: 基礎科学や応用科学の幅広い分野で転用可能な「科学基礎モデル」を構築するためのツール開発や、その動作原理を深く理解するための数学的基盤の研究に投資を集中させている。
- ・ 自律的実験・ワークフローの実現: AI、自動化ロボティクス、エッジセンサーを統合し、実験の設計からデータ解析までを自動化・自律化させることで、科学的発見のサイクルを劇的に加速させようとしている。
- ・ 統合研究基盤（IRI）によるデータ連携: 実験施設、データ資産、計算リソースをシームレスかつ安全に接続する「統合研究基盤（IRI）」を構築し、データ集約型の AI 研究を支えるエコシステムを整備している。
- ・ 横断的・多角的な応用展開: ゲノム科学におけるバイオデザイン、材料科学における新材料発見、核物理・高エネルギー物理における施設制御や希少事象の特定など、DOE 傘下の全科学領域に AI を浸透させている。
- ・ 産業界・他機関との強力なパートナーシップ: 産業界、アカデミア、他政府機関との連携を強化し、AI を統合した次世代の計算ハードウェア（ニューロモーフィック・デバイスなど）やソフトウェアの共同開発（REP）を推進している。
- ・ 次世代 AI 人材の育成: 「AI・エクサスケール時代」をけん引する高度なスキルを持つ人材を確保するため、科学計算大学院フェローシップ（CSGF）などを通じて、AI 専門知識を持つ科学者の育成を支援している。

(2) 計算基盤のユーザ動向・利用実績

DOE が提供する高度科学計算基盤は、数千人の研究者が利用する世界最高峰のリソースである。国立エネルギー研究科学計算センター（NERSC）では、2026 年度に 11,000 人の利用者を見込んでいる。利用者の属性は多岐にわたり、全体の約半分は大学所属、約 3 分

の 1 は DOE 国立研究所所属であり、残りは他の政府機関、非営利団体、産業界の研究者で構成される。また、リーダーシップ計算施設 (LCF) であるアルゴンヌ (ALCF) およびオークリッジ (OLCF) では、それぞれ年間約 1,750~1,800 人の利用が想定されている。計算リソースへの需要は極めて高く、NERSC では供給能力に対して 3~10 倍の要求が毎年寄せられている状況である。ALCF と OLCF においても、INCITE プログラムで約 3 倍、ALCC プログラムでは約 5 倍の需要超過となっており、リソースの希少性が示されている。

AI の能力を最大限に引き出すため、世界初のエクサスケール・システムである「Frontier」や「Aurora」を AI 対応の基盤としてフル活用している。特にアルゴンヌ国立研究所の「Aurora」は、DOE で最も AI 対応能力が高いシステムとして位置付けられており、AI テストベッドとしての役割も担っている。これらの計算基盤を活用し、科学やエネルギー、国家安全保障の新たなアプリケーションを支えるための「科学用基礎モデル (Foundation Models)」の構築およびその理解を深めるためのツール開発に、戦略的な資源配分が行われている。

AI を活用したデータ集約型の研究を支援するため、実験施設、データ資産、計算リソースをシームレスに接続する「統合研究基盤 (IRI)」の構築が進められている。これは、複数の施設から得られるデータをリアルタイムで分析し、AI 駆動の自律的なワークフローを実現するための土台となるものである。また、新たなデータ拠点となる「高性能データ施設 (HPDF)」の設計も、データ集約型の AI 研究を支えるための重要なステップとして継続されている。

(3) 公募・利用制度の詳細

主要な計算リソースの配分は、他の Office of Science (SC) 科学利用者施設と同様に、メリットレビュー (査読) に基づく公開アクセスモデルを通じて行われる。代表的な制度として、学术界、国立研究所、産業界の研究を対象に大規模な計算時間を配分する「INCITE」プログラムがある。また、DOE のミッションに不可欠なアプリケーションや、国の緊急事態・優先事項に対応するための配分枠として「ALCC」プログラムが運用されている。これらに加え、AI テストベッドや商用量子コンピュータへのアクセスについても、競争的なメリットレビューに基づき提供されている。

(4) AI for Science の資源配分状況

2026 年度予算案では、AI 技術の加速とその統合が最優先事項の一つとして位置付けられている。科学的発見を加速するための Scientific AI の推進が明記されており、大規模な多次元データを扱い、科学に必要な高精度な答えを出す AI の開発を支援している。具体的には、科学分野で有用な基礎モデルの構築と理解を促進するツールの開発や、産業界・他機関との提携による新アプリケーション開発に資金が投じられる。特に ALCF においては、DOE で最も AI 対応能力が高いエクサスケール・システムである「Aurora」の運用を強化

し、ユーザコミュニティへ提供している。

- ① 計算科学 (ASCR) : AI とエクサスケール計算、量子情報科学 (QIS) を融合させ、ハイブリッド・アーキテクチャに適した高効率なアルゴリズムやソフトウェアの開発を進めている。
- ② 生物・環境研究 (BER) : ゲノム科学と自動化された実験システムに AI を統合し、微生物や植物の迅速な再設計 (バイオデザイン) を目指している。また、環境・気候モデルの解像度向上や不確実性の定量化にも AI が活用されている。
- ③ 基礎エネルギー科学 (BES) : 膨大な実験データや理論計算データベースから知識を抽出するため、物理学に導かれた AI (physics-guided AI) による新材料の発見や合成の自動化を推進している。
- ④ 核物理・高エネルギー物理 (NP/HEP) : 加速器や検出器のリアルタイム制御、複雑な物理プロセスのシミュレーション、膨大なデータからの希少な事象の特定に AI/ML を導入し、実験効率と発見の精度を向上させている。

(5) HPC・統合基盤の整備状況

HPC 基盤については、世界初のエクサスケール計算機 2 台の運用と新たなデータ基盤の整備が着実に進んでいる。具体的には、2021 年に配備された世界初のエクサスケール・システム「Frontier」(OLCF) および 2023 年に配備された「Aurora」(ALCF) がフル運用されている。また、NERSC では AI 対応の GPU-CPU システムである「Perlmutter」が稼働中である。将来に向けた計画として、OLCF-6、ALCF-4、NERSC-10 といった次世代アップグレードプロジェクトがターゲットプロファイルに沿って推進されている。更に、実験・観測施設、データ資産、計算リソースをシームレスかつ安全に統合する「統合研究基盤 (IRI)」の構築が進められており、データ集約型のワークフローを加速させる基盤としての整備が図られている。一方、新たなデータ拠点となる「高性能データ施設 (HPDF)」については、2026 年度は設計の完了を目指している。

(6) 産業界からの枠組み

高度科学計算リサーチ (ASCR) プログラムは、米国の競争力強化のため、産業界との多面的なパートナーシップを維持している。研究評価プロトタイプ (REP) 活動を通じて、米国のベンダーと協力し、AI、HPC、ロボティクス向けの次世代計算技術 (スケーラブルな量子アーキテクチャやニューロモーフィック・デバイスなど) の開発が行われている。また、計算施設の専門スタッフは産業界のパートナーと連携し、次世代のコンピューティングやネットワーキング技術の配備を推進している。更に、産業界のユーザがリーダーシップ計算施設を利用することで、自社での HPC リソースへの投資が促進されるなど、波及効果による米国の産業基盤の強化も期待されている。

AI for Science の成果を社会実装につなげるため、産業界とのパートナーシップ (REP)

を通じて、AI 向けの新ハードウェアやロボティクス、エッジセンサーなどの共同開発が行われている。同時に、この「AI・エクサスケール時代」をけん引する高度な人材を育成するため、科学計算大学院フェローシップ（CSGF）などを通じた専門的なスキルの習得とキャリア形成を強力に支援している。

(7) 今後の展開

今後の展望として、AI と計算の融合、および量子技術の社会実装に向けた挑戦が継続される。AI を活用し、物理システムのシミュレーションや最適化をこれまで不可能な精度で行う能力を全米の研究コミュニティへ提供することを目指している。量子コンピューティングに関しては、商用プラットフォームへのアクセス拡大に加え、エンタングルメントの配布など量子ネットワークを通じて複数の量子技術を接続する取組を強化する方針である。これらの技術革新を支えるため、科学計算大学院フェローシップ（CSGF）などを通じて、エクサスケール計算、AI、量子情報科学（QIS）に対応できる高度な人材を育成し、米国の指導的地位を永続させることを目指している。

2.1.6. 米国国立科学財団 NSF

本節は、[5]より AI 関連の政策を抜粋した。

(1) AI 政策の特徴

- ・ 多分野融合による信頼性の高い AI の推進: AI をコンピュータ科学のみならず、認知科学、経済学、倫理学、教育研究、哲学といった多様な学術分野と融合させ、知覚、学習、推論、行動の各側面において「信頼できる AI (Trustworthy AI)」のフロンティアを拡大することを目指している。
- ・ 基礎研究と実用化の同時並行: AI の基礎理論の開発と同時に、農業、製造、バイオテクノロジー、ヘルスケア、輸送といった特定の応用分野における実例に触発された「ユースケース主導 (Use-inspired)」の AI 手法の開発を両輪で進めている。
- ・ 国家的な AI 研究インフラの構築: 「国家 AI 研究リソース (NAIRR)」のパイロット運用を継続し、高度な計算資源、クラウド、データ、ネットワークへのアクセスを全米の研究者に広げている。これは、AI 開発が市場原理のみに左右されず、広範な公共利益に資するようにするための基盤である。
- ・ 人材育成と教育への強力な関与: ホワイトハウスの「米国青少年のための AI 教育推進に関する大統領令」に合わせ、次世代の AI 研究者や実務家を育成するだけでなく、AI を活用して学習効果を高めるための教育研究にも投資を行っている。
- ・ 国立 AI 研究機関を中心としたエコシステム: 2019 年度から開始された「国立 AI 研究機関 (National AI Research Institutes)」プログラムを通じて、大学、政府機関、産業界、非営利団体を結集するハブを構築し、AI 分野における米国の国際競争力と主導

権の維持を図っている。

- ・ 経済・国家安全保障との直結: AI をバイオテクノロジーや量子コンピューティングと並ぶ変革的技術と位置付け、供給網の回復、製造業の競争力強化、軍事的な優位性の確保など、経済成長と国家安全保障を直接的に支えるための最優先事項として投資を集中させている。
- ・ 責任あるイノベーションの追求: AI の利便性だけでなく、説明責任や堅牢性、サイバーセキュリティとの相互作用を重視し、現実世界の環境下で AI の手法やシステムが適切に機能するかをテストするためのプラットフォーム (AI テストベッド) を整備している。

(2) 計算基盤のユーザ動向・利用実績

NSF は、米国の科学・工学研究コミュニティに対し、他では実現不可能な発見を可能にする独自かつ高度な計算・データ分析能力を提供している。2026 年度に運用開始が予定されている「リーダーシップ級計算施設 (LCCF)」は、NSF のポートフォリオにおいて、オープンな科学研究に捧げられた最大の学術用スーパーコンピュータ「Horizon」を配備する計画である。この基盤は、知的好奇心に基づく基礎研究から社会実装を目的とした利用まで、あらゆる科学分野の研究を支援する。また、単なる研究ツールにとどまらず、データサイエンスや計算科学分野における次世代の STEM 人材を育成するための教育・アウトリーチ活動の場としても機能し、将来の労働力育成に寄与している。

(3) 公募・利用制度の詳細

計算基盤の構築や大規模な整備は、「主要研究設備・施設建設 (MREFC)」アカウントを通じて支援される。この資金提供を受けるには、プロジェクトが科学・工学のフロンティアを開く例外的な機会であり、科学的理解のパラダイムを転換させる可能性を持つ変革的なものであることが、NSF および国家科学委員会 (NSB) の審査によって認められる必要がある。NSF はアクセスの民主化を重視しており、全米の研究者が計算リソースやサービスを利用できるよう、4 つの分散型科学センター (DSC) と提携する体制を整えている。利用形態も多様化しており、大規模シミュレーションや AI 研究に加え、人間がプロセスに介入するインタラクティブ・コンピューティングや、緊急事態への対応を目的としたリアルタイム・データ処理が必要な「緊急コンピューティング」といった新たなモードも促進されている。

(4) AI for Science の資源配分状況

NSF は AI を、科学的発見を加速させ、人間と協力して研究効率を高める「ハイパー効率的なラボパートナー」と定義し、重点的な投資を行っている。2026 年度の AI 関連予算要求額は全体で 655.23M ドル (1,048 億円) に達する。

主な組織別の配分状況は以下のとおりである。

- ・ コンピュータ・情報科学・工学 (CISE) : 284.54M ドル (455 億円)
- ・ 数理・物理科学 (MPS) : 90.07M ドル (144 億円)
- ・ 工学 (ENG) : 83.19M ドル (133 億円)
- ・ 技術・イノベーション・パートナーシップ (TIP) : 72.23M ドル (116 億円)

これらの予算は、「国立 AI 研究機関」の 22 プログラムへの継続支援や、AI とライフサイエンス、エネルギー、製造、農業などの各専門領域を統合した革新的な研究、および信頼性の高い AI 理論の開発に充てられる。

(5) HPC・統合基盤の整備状況

HPC とサイバーインフラを統合した整備が進められている。その中核となる LCCF は、テキサス高度計算センター (TACC) を筆頭に、アトランタ大学センター・コンソーシアム (AUCC) やイリノイ大学などの分散型科学センター (DSC) が連携する分散型施設として構築されている。主力の Horizon システムは、現行の Frontera システムを大幅に上回る計算能力とデータ分析能力を備える予定である。更に、責任ある AI の発見とイノベーションを促進するための共同国家研究インフラとして、「国家 AI 研究リソース (NAIRR)」パイロットが運用されており、計算資源、クラウド、データ、ネットワークへのアクセス拡大が進められている。

(6) 産業界からの枠組み

民間部門の R&D を補完し、米国の技術的リーダーシップを強化するため、産業界との強固なパートナーシップが推進されている。特に技術・イノベーション・パートナーシップ総局 (Directorate for Technology, Innovation and Partnerships : TIP 総局) は、公的資金と民間投資を統合し、研究成果を市場へ迅速に提供するための戦略的ツールとして位置付けられている。具体的には、「NSF 地域イノベーション・エンジン」プログラムにおいて、当初 150M ドル (240 億円) の NSF 投資に対し、州政府や民間企業などから 1B ドル (1,600 億円、B は 10 億) 以上のマッチング投資のコミットメントを引き出すことに成功している。また、SBIR/STTR プログラムを通じてスタートアップ企業のイノベーションを支援しており、過去 10 年間で 1.6B ドル (2,560 億円) の投資から 32B ドル (5 兆 1,200 億円) 以上の後続資金を生み出すなど、大きな成果を上げている。

(7) 今後の展開

NSF は、制約のある財政環境下で、経済成長と国家安全保障に最大のインパクトをもたらす領域ヘリソースを集中させる戦略をとる。LCCF は 2026 年内の運用開始を目指しており、全科学分野における計算研究の革命をけん引することが期待されている。研究ガバナンス面では、CHIPS および科学法に基づき、SECURE プログラムを通じて海外からの干

渉リスクから研究エコシステムを保護する活動を強化する。組織運営においても、2026 年度より AOAM（機関運営および資金配分管理）アカウントを 1 年予算から 2 年予算へ移行し、IT 予算などを「ミッション支援サービス（MSS）」として R&RA アカウントへ集約することで、運用の効率化とガバナンスの強化を図る方針である。

2.1.7. まとめ

2026 年の動向は、単なる計算能力の増強にとどまらず、AI を科学プロセスそのものに組み込み、自律的な発見を可能にする「基盤の高度化」と、それを支える「人材・制度の整備」へとシフトしていることがわかる。欧米の動向として、EuroHPC JU、DOE/NNSA、DOE/SC、NSF の 2026 年の予算と計画のうち、「AI for Science」に関する内容を表にまとめた。項目は、政策の特徴、AI 予算、ユーザ動向、統合基盤、公募、産業界・学界との連携、今後の課題や計画とした。

(1) EuroHPC JU

EuroHPC JU は、「AI Factory」構想を軸に、AI 研究を包括的に支援する垂直統合型の体制を構築している。2026 年までにドイツ、イタリア、ルクセンブルク、スウェーデンなど欧州全域に 10 拠点以上の AI 最適化システムを設置し、スタートアップや研究者のアクセスを容易にする計画である。予算面では AI Factory の調達と運用に 291M ユーロ（538 億円）を投じ、量子計算と AI を統合したハイブリッド基盤の構築も推進している。また、信頼できる AI を公式に認定する「STEP Seal」の導入や、RISC-V ベースの独自プロセッサ開発を通じた供給網の安全性確保を追求している。2026 年には Daedalus や Arrhenius が稼働を開始し、2027 年の次世代エクサスケール機「Alice Recoque」の稼働を見据え、欧州のデジタル主権を強化する方針である。

(2) DOE/NNSA

DOE/NNSA は、AI を核兵器の管理・維持における中核能力と位置付け、新設の「AI4NS」プログラムに 60M ドル（96 億円）を計上している。物理シミュレーションと実験データを連携させた AI サロゲートモデルを開発することで、材料発見や設計プロセスの劇的な迅速化を図る方針である。機密ネットワーク上での専用 AI ハードウェア配備や、組織間で大規模データを安全に共有する統合基盤「DICE」の整備も重点的に進められている。現在、エクサスケール機「El Capitan」の機密運用が進行中であり、2027 年度の導入を目指した次世代システム「ATS-5」の準備も着手されている。更に、学術アライアンス（AIASA）を通じて次世代の人材パイプライン強化を図り、産業界の商用ソリューションも積極的に取り込んでいる。

(3) DOE/SC

DOE/SCは、大規模データから高精度な回答を生成する「科学向けAI（Scientific AI）」の推進を最優先課題としている。世界初のエクサスケール機「Frontier」や、AI 対応能力が特に高い「Aurora」を戦略的に活用し、DOE 傘下の全科学領域へ AI 技術を浸透させている。NERSC では年間 11,000 人の利用者を見込むが、需要は供給能力の 3 倍から 10 倍に達しており、リソースの希少性が顕著である。このため、実験施設と計算資源をシームレスに結ぶ「統合研究基盤（IRI）」や高性能データ施設（HPDF）の整備を継続し、AI 駆動の自律的なワークフローによる科学的発見サイクルの劇的な加速を目指している。2026 年度予算案では AI 関連に 655M ドル（1,048 億円）を投じ、次世代の OLCF-6 や ALCF-4 といったアップグレード計画もターゲットプロファイルに沿って推進されている。

(4) NSF

NSF は、多分野融合による「信頼できる AI」の実現を目指し、2026 年度に総額 655.23M ドル（1,048 億円）の予算を要求している。その中核となるのはテキサス高度計算センターに配備されるスーパーコンピュータ「Horizon」であり、現行の Frontera を大幅に上回る能力で科学研究の革命をけん引することが期待されている。また、高度な計算資源へのアクセスを全国の研究者に広げる「国家 AI 研究リソース（NAIRR）」のパイロット運用を通じて、AI 開発の民主化を推進している。研究ガバナンス面では海外からの干渉リスクからエコシステムを保護する活動を強化しつつ、TIP 総局を通じて民間投資を呼び込む戦略をとっている。SBIR/STTR プログラム等の支援により、過去 10 年間で 1.6B ドル（2,560 億円）の投資から 32B ドル（5 兆 1,200 億円）以上の後続資金を生み出すなど、産業界との強力な協力によって技術的主導権の維持を図っている。

表 2.1 欧米の AI for Science に関する 2026 年の政策

項目	EuroHPC JU[1]	DOE/NNSA[3]	DOE/SC[4]	NSF[5]
政策の特徴	AI Factory, AI Factory Antenna, AI Gigafactory HPC-QC-AI Trustworthy AI	シミュレーションと実験を連携させた AI モデル(兵器用) AI4NS : 核安全保障用 AI DICE : 組織横断的な基盤	DOE 傘下の全科学領域に AI を浸透させる AI・エクサスケール時代の人材育成	Trustworthy AI NAIRR AI テストベッド
AI 予算	AI Factory : €291M 関連補助金 : €58M ドイツ・ルクセンブルグ・スウェーデンで導入開始	AI4NS:\$60M (←AMLI) 機密情報保護、設計加速、AI での材料発見、専用ハードウェア	いずれのプログラムでも AI 開発を支援 ASCR, BER, BES, NP/HEP	AI 予算 : \$655M CISE\$285M, MPS\$90M ENG\$83M, TIP\$72M
ユーザ動向	2031 年まで同一の指標で追跡している	El Capitan の高度な利用を開始している	1/2 : 大学、1/3 : DOE 傘下残り : 政府機関・産業界	2026 年稼働の Horizon の有効活用し、人材育成
統合基盤	Alice Recoque 2027 年稼働 Daedalus, Arrhenius: 2026 年稼働 オランダ・ルクセンブルクで量子コン調達開始	El Capitan, Crossroad の利用 2027 年導入の ATS-5 準備 組織横断的な統合基盤 DICE	Frontier, Aurora の活用 次世代へのグレードアップ : OLCF-6, ALCF-4, NERSC-10 統合研究基盤(IRI)	TACC の Horizon イリノイ大 DSC アトランタ大 AUCC
公募	量子コンピュータ 生成 AI・機械学習 PRACE からの完全移行		INCITE, ALCC などの公募継続	公募は主要研究設備、施設建設 (MREFC) から拠出される。
産業界・学術界	産業用スーパーコンピュータ INNOVATE がイタリアで契約開始 RISC-V ベースのプロセッサ開発	民間技術の利用 AIASA : AI 学術アライアンス、PSAAP : 予測科学学術アライアンス	AI, HPC, ロボティクスで産業界と連携	10 年間で\$1,600M の投資から\$32,000M の資金を得ている
今後	AI Gigafactory 推進 量子コン推進	AI と ML を兵器コンポーネント自動検査に組み込み エクサスケールの次の技術への研究を進めている	AI と計算の融合 量子技術の社会実装 AI・量子・エクサスケール人材の育成	特定領域ヘリソースを集中

2.2. 欧州のデータ戦略

2.2.1. 情報源

本節は、欧州のデータ戦略に関し、その背景と方向性に関し、EU がまとめた下記の報告書に基づき記述したものである。主として、当該報告書の概要と結論から抜粋した。これらの文書では、欧州の大規模データリポジトリは、受動的なストレージから、欧州のデジタル経済、AI 開発、および競争上の優位性のための戦略的資産へと移行しつつある。PB 規模に及ぶことが多いこれら中央集積型の膨大なデータコレクションは、複雑な機械学習モデルのトレーニング、ビッグデータ分析の実現、ならびにヘルスケア、気候政策、研究といった分野におけるイノベーションの推進において極めて重要である。

- [1] “EUROPEAN DATA STRATEGY”, NCP network for the Digital Europe Program, Last update: January 2025 より抜粋
<https://topictree.ideal-ist.eu/topic/6153/annotation/46/download>
- [2] COMMISSION STAFF WORKING DOCUMENT on Common European Data Spaces, Brussels, 24.1.2024
<https://ec.europa.eu/newsroom/dae/redirection/document/101623>
<https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/policies/data-spaces>
- [3] Story 5 – Unlocking the Data Vault: How Large-Scale Data Repositories Are Powering Europe's Digital Future – Update of the European Data Market –, February 2026, European Commission, DG CONNECT
- [4] https://research-and-innovation.ec.europa.eu/strategy/strategy-research-and-innovation/our-digital-future/open-science/european-open-science-cloud-eosc_en
- [5] Copernicus Data Space Ecosystem, Annual report 2024

このうち、[1]では欧州のデータ戦略。[2]では共通の欧州データ空間、[4]では、欧州オープンサイエンスクラウドについてまとめられている。また、[3]では、欧州のデータ戦略の背景や概要がまとめられている。また、[3]では成功事例についても記載されており、その内容については 2.2.6 節以降に述べる。なお、[3]については、

<https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/library/european-data-market-study-2024-2026>
に公開された表 2.2 に記載のレポートのうち一つである。

表 2.2 データ市場に関する EU のレポート[4]

項目	内容の概要
メディアデータスペース	欧州メディアデータスペースの実装状況に焦点を当て、その導入によって期待される利益やメディアセクターへの影響を詳細に分析している。
創薬に向けたデータ・イノベーション	ヘルスセクターで活動するデータ関連のスタートアップやスケールアップ企業の概要を提供し、特に AI と創薬の交差点における企業の動向や 4 つの詳細なケーススタディを紹介している。
共通欧州モビリティデータスペース	共通欧州モビリティデータスペース（EMDS）を中心に、欧州のモビリティ分野におけるデータ共有を広範に分析している。デジタル・ヨーロッパ・プログラムから資金提供を受けた最初の展開プロジェクトやその他の欧州のイニシアチブからの知見を活用している。
In-Situ（現地）環境モニタリングデータの価値	気候変動への対応や持続可能性の推進に不可欠な現地環境モニタリングデータの社会経済的価値を検証している。効果的な環境管理やリスク軽減、政策策定のための重要なリアルタイムの洞察を提供している。
大規模データリポジトリ [3]	ヘルスケア、マーケティング、農業などの多様な領域において、研究や応用目的で大量のデータのアクセスと活用を保証する大規模データリポジトリ（LSDR）ストレージシステムについて検討している。
EU オープンデータの世界的ユーザ	イノベーションや透明性、経済成長を支える戦略的資産となった EU オープンデータについて、EU 域外の主体がどの程度アクセス・再利用しているかを、特に高付加価値データセットに焦点を当てて調査している。

2.2.2. 欧州データ戦略 European strategy for data

（本節は、文献[1][4]を基に記載している。）

(1) 市場価値と経済的影響

市場価値について見ると、世界の研究データリポジトリ市場は、オープンサイエンスと透明性に後押しされ、2024 年の 3.8B ユーロ（0.70 兆円）から 2033 年には 8.0B ユーロ（1.48 兆円）に達すると予測されている。2024 年時点では北米が世界市場の約 38%を占めるリーダーであり、欧州が約 30%でこれに僅差で続いている。更に、デジタルインフラへの継続的な投資と国境を越えた協力に支えられ、欧州市場は年率 8.4%で成長すると見込まれている。

EU は、公共部門情報の再利用を促進し、2030 年までにその経済的価値を 194B ユーロ（35.9 兆円）に高めることを目指している。180 万件以上のデータセットをホストする欧州データポータルは、この目標を支えるツールである。経済的側面では、LSDR は長期的なデータスチュワードシップを促進し、研究実施コストを削減する。また、FAIR 原則

（検索可能、アクセス可能、相互運用可能、再利用可能）に基づき、実務家、産業界、政策立案者による蓄積データの再利用を大幅に増加させている。

(2) 戦略

欧州データ戦略（European strategy for data）は、欧州の世界的競争力とデータ主権を確保する「データの単一市場」の創出を目指している。ここで「データの単一市場」とは、欧州のグローバルな競争力とデータ主権を確保するために構築される、統一されたデータ市場のことである。これにより、欧州共通データ空間（Common European Data Spaces）が構築されることになる。これらは、データを生成する企業や個人による管理を維持しつつ、経済や社会でより多くのデータが利用可能になることを保証するものである。

(3) 政策と法的枠組み

2020 年に開始された「欧州データ戦略」は、統一データ市場と「共通欧州データスペース」の創出を目指している。2025 年 11 月、欧州委員会は、高品質でキュレートされたデータセットへのアクセスを改善することにより AI イノベーションを加速させる「欧州データ連合戦略」を発表した。この戦略の中心となるのは、実用的な結果に焦点を当て、4 つの法的文書を単一の枠組みに統合して規制を簡素化する「デジタル・オムニバス」法案である。主要な柱となる規制は以下のとおりである。

- ・ データ法（Data Act）：2028 年までに EU の GDP を 270B ユーロ（50.0 兆円）押し上げることが期待されている。
- ・ データガバナンス法（Data Governance Act）：2023 年から適用されており、データ共有における信頼を強化する。
- ・ オープンデータ指令（Open Data Directive）：地理空間や気象などの「高価値データセット」を、再利用のために無償で提供することを義務付けている。

また、欧州オープンサイエンスクラウド（EOSC）は欧州の研究者に「システムの連邦型システム」を通じたデータアクセスを提供し、欧州高性能計算共同事業（EuroHPC JU）は 2021 年から 2027 年にかけて約 7B ユーロ（1.3 兆円）の予算で世界最高水準のデータインフラの構築を目指している。

(4) 具体的な政策

この欧州データ戦略が適用されている、DEP（Digital Europe Program）にける特定目標（SO：specific objectives）の数多くの部分に直接関連している。

例えば、EU レベルの支援が明確な付加価値をもたらす分野に焦点を当て、投資は HPC を含む欧州レベルの既存の計算能力の相互接続も対象とし、必要に応じてデータ処理リソースの能力を集約する。その目的は、公共の利益に資する共通データおよび世界水準のクラウドインフラの出現を支援し、公的部門や研究機関による安全なデータの保存と処理を

可能にすることである。

また、欧州オープンサイエンスクラウド（EOSC）や、コペルニクス（Copernicus）地球観測データに基づくサービスへのアクセスを提供するクラウドベースのプラットフォーム「DIAS（Data and Information Access Services）」との相互接続からも期待される。中小企業（SME）を中心とする民間部門も、セキュリティ、持続可能性、相互運用性、拡張性という不可欠な機能を備えたデータ・クラウドインフラおよびサービスを必要としている。大規模データは下記のような科学分野で具体的な成果を上げている。

表 2.3 成功事例

項目	内容
薬剤耐性と公衆衛生	欧州バイオインフォマティクス研究所（EMBL-EBI）は 120PB 以上のデータを管理している。抗生物質耐性（AMR）ポータルは、このインフラを活用して薬剤開発に不可欠な統合システムを提供している。PopPIPE などのツールは、迅速なゲノム解析を通じて感染経路を特定し、公衆衛生のレジリエンスと経済効率を高める。
地球空間データの活用	コペルニクス計画は 84PB を超える地球観測アーカイブを維持している。Nazka Mapps のような中小企業は、この生データを都市のレジリエンス計画に役立つアプリケーション（BUILDSPACE プラットフォームなど）に変換している。検証シナリオでは、洪水対策の導入により被害額が 32M ユーロ（59.2 億円）から 3M ユーロ（5.6 億円）に減少することが示された。
タンパク質構造予測	Google DeepMind と EMBL-EBI が開発した AlphaFold は、アミノ酸配列からタンパク質の 3D 構造を高い精度で予測する。2 億件以上の構造を含むデータベースは、世界の研究者に無償公開されており、薬剤発見の合理化と開発サイクルの短縮、ならびに構造生物学の民主化を実現している。

(5) 今後と課題

欧州のデータ市場は着実な成長を遂げており、研究データリポジトリ市場は 2033 年までに 8B ユーロ（1.48 兆円）規模に達すると予測されている。2024 年時点で、EU27 加盟国には 4,300 社を超えるデータ関連スタートアップ・スケールアップ企業が存在しており、その半数以上がフランス、ドイツ、スペイン、オランダの 4 か国に集中している。企業の質的変化も顕著であり、評価額 100M ユーロ（185 億円）以上の主要データ企業の約 48% が既に AI 技術を導入している。AI の活用は年率 10% のペースで成長を続けており、データ戦略が欧州の産業構造のデジタル化と AI 化を強力に後押ししている状況が伺える。

ここで説明した現状にもかかわらず、欧州の環境は様々な専門分野や加盟国間で依然として断片化されており、相互運用性と標準化における継続的な努力が必要である。PB 規模のデータにおいては、真の価値はキュレーションと翻訳（curation and translation）にあり、生のデータと実用的な API の間の溝を埋める専門的なアクターがいなければ、大規模リポジトリの使い勝手は制限されたままである。標準化が進むコミュニティでは再利用

が改善されつつあるが、機密データや産業関連分野、国境を越えた信頼できるアクセスには依然として大きなギャップがあり、EU による重点的な投資とガバナンスが求められる。

(6) まとめ

全体として、欧州の LSDR 利用は、FAIR 原則を強制しつつ、機密保持と知的財産保護のバランスをとる実利的なオープンサイエンス政策によって特徴付けられる。CERN やコペルニクスが生成する膨大な規模のデータは、専門のアクターによるキュレーションと翻訳 (curation and translation) を通じて初めて「オープンデータ」としての真の価値が実現される。AI 駆動型の科学研究の要求に応え続けるためには、この連邦型インフラへの継続的な投資が不可欠である。

2.2.3. 共通の欧州データ空間 Common European Data Spaces : CEDS

共通の欧州データ空間 Common European Data Spaces : CEDS について、2024 年 1 月に EU により政策の現状報告や分析を行うための文書[2]がまとめられた。本節は本文献を基に記載している。

(1) データ単一市場の構築

データは、我々の生産、消費、そして生活の在り方を再構築している。リアルタイムのナビゲーションから、個別化医療の向上、精密農業、あるいは二酸化炭素排出量の削減に至るまで、データは革新的な製品やサービスにとって不可欠な要素である。欧州の経済と社会の利益のためにデータの価値を活用すべく、2020 年 2 月の「欧州データ戦略」は、以下の多くの戦略的分野における「欧州共通データスペース」創出への道筋を提示した。①保健（ヘルスケア）②農業③製造④エネルギー⑤モビリティ⑥金融⑦公共行政⑧スキル⑨欧州オープンサイエンスクラウド⑩グリーンディール

それ以降、メディア、言語、観光、研究・イノベーション、文化遺産といった他の重要な分野においてもデータスペースが登場している。これらのデータスペースは、今後徐々に相互接続され、「データ単一市場」を形成することになる。

(2) コンセプト

ステークホルダーがデータスペースの進化をけん引する。各セクターの利用者がこれらのスペースの形成に寄与しており、その結果、独自の形態や特徴が生まれている。しかし、すべての欧州データスペースの根底にあるのは共通の「データインフラ」と「ガバナンス枠組み」であり、これらがデータの蓄積、アクセス、共有を促進している。更に、欧州共通データスペースは以下の主要な特徴を備えている。

- ・ すべての組織や個人の参加に対して開かれている。
- ・ データの蓄積、アクセス、共有、処理、および利用を行うための、安全かつプライバ

シーが保護されたインフラを有している。

- ・ データへのアクセスと利用のための明確かつ実用的な構造である。適切に定義された信頼できるデータガバナンス・メカニズムにより、公正、透明、均衡、かつ非差別的なアクセスルールが設けられている。
- ・ EU の規則と価値観、特に個人データ保護、消費者保護、および競争法を尊重する。
- ・ データ保持者が、特定の個人データまたは非個人データへのアクセス許可や共有を行うことを可能にする。
- ・ データ保持者が、無償または対価と引き換えに、自らのデータを再利用に供する権限を付与する。

(3) 目的

欧州共通データスペースは、データ駆動型イノベーションの巨大な潜在能力を解き放つ一助となる。これにより、EU 全域のデータを信頼性が高く安全な方法で利用可能にし、交換できるようになる。EU の企業、公的機関、および個人は、自ら生成したデータを自ら管理（コントロール）することになる。同時に、これらのデータ保持者は、イノベーション目的でデータを共有するための安全で信頼できる枠組みの恩恵を受ける。

欧州共通データスペースは、EU における新しいデータ駆動型の製品やサービスの開発を促進し、相互接続され競争力のある欧州データ経済の核心的な組織（基盤）を形成する。

(4) 現状

欧州理事会の要請に応じ、欧州共通データスペースの現状の概要を示す 2 つのスタッフ作業文書（SWD）が公開されている。現状に関する最新のレポートは 2024 年 1 月に公開された。

また、2022 年 2 月に公開されたデータスペースに関する最初の SWD、および 2024 年 1 月に公開された第 2 の SWD を確認することも可能である。

(5) 今後の展望

2025 年、ステークホルダーは欧州共通データスペースの本格展開に向けた取組を継続する。

EU は、「デジタル・ヨーロッパ・プログラム」および「ホライゾン・ヨーロッパ」の下で、セクター別・分野別のイニシアチブに関連する複数の取組に資金を投じている。特に、データスペース支援センター（DSSC）や、オープンソースのミドルウェアである「SIMPL（Smart Open-source Middleware）」がその代表的な例である。

更に、EU は実現に向けた立法手段の実施に注力する。特に、データガバナンス法（DGA）に基づいて設立された欧州データ・イノベーション・ボード（EDIB）が、ガイドラインの策定に取り組む。「認定データ利他主義組織」や「データ仲介者」の創設、および「公

共部門が保有する保護データの欧州レジストリ」の整備により、大量のデータの安全かつ確実な共有が可能になる。

欧州委員会はまた、データスペース支援センターを通じて、リファレンス・アーキテクチャ、ビルディングブロック、セマンティクス、相互運用性の仕様、およびデータモデルを提供し、関連するアドバイザリーサービスとともに、欧州共通データスペースの開発を支援している。

2025 年 11 月に採択された「データ連合戦略 (Data Union Strategy)」では、防衛分野の欧州共通データスペースの導入を含む、データスペースの更なる拡大に向けた提案がなされた。

2.2.4. 共通の欧州データ空間の分野毎の取組

共通の欧州データ空間の分野毎の取組は 14 分野から構成されており、そのひとつに「研究・イノベーション(Research and Innovation)」のテーマがある[2]。その中で次の節に示す欧州オープンサイエンスクラウド European Open Science Cloud : EOSC が実施されている。また、ライフサイエンス分野では、欧州バイオインフォマティクス研究所 EMBL-EBI と、衛星データ分野では欧州地球観測プログラム Copernicus、素粒子の分野では欧州原子核研究機構 CERN と連携してプロジェクトが進められている。

農業分野では持続可能な生産に向けたデータ共有が進み、文化遺産では 3D 化等によりデジタル変革が加速している。エネルギー分野ではスマート充電等の革新的サービスを支援し、金融ではオープンファイナンスや共通アクセスポイントを通じ透明性を高める。グリーンディールは環境データの共有や製品パスポートにより緑の移行を支え、健康分野では EHDS (European Health Data Space) により診療や研究への安全なデータ活用を可能にする。製造業は価値チェーンの回復力を強化し、言語分野は AI 開発に必要な多言語データ基盤を構築する。メディア分野は協力体制の構築で競争力を高め、モビリティは効率的な多目的輸送を支援する。行政は法的・調達データの透明化や「ワンスオンリー」原則による事務の簡素化を図り、研究分野は EOSC によりオープンサイエンスを推進する。スキル分野は教育と求職のマッチングを最適化し、観光は安全なデータ共有により持続可能なサービスを創出する。これらは相互接続され、単一データ市場の柱を形成していく。

表 2.4 Common European Data Space の各分野の取組

分野	取組の要約
農業	農作や土地利用等のデータ共有により持続可能性と競争力を強化する。農家がデータを制御しつつ、機械メーカーや公共機関と安全に連携できる環境を、2024 年末からの本格展開により実現する計画である。
文化遺産	文化遺産のデジタル化と再利用を促進する。「Europeana」を基盤に高品質な 3D データの蓄積や AI 活用を進め、教育や観光等への展開を図ることで、資産保護と次世代への継承を確実にする。
エネルギー	再生可能エネルギーの統合や効率化を目的とする。電気自動車のスマート充電や建物の省エネ改修等のデータサービスを優先し、2024 年から運用版を展開してエネルギー市場の競争力向上を目指す。
金融	オープンフィナンスや欧州単一アクセスポイント（ESAP）を通じ、デジタル変革を推進する。顧客のデータ制御権を確保しつつ、中小企業の視認性向上や革新的な金融サービスの創出を支援する。
グリーン・ディール	環境地理空間データの共有や、デジタル製品パスポートによる製品の持続可能性追跡を支援する。地球の高精度モデル等を通じ、環境政策の透明性向上と行政の意思決定の質の向上を図る。
健康	電子健康記録の管理や研究への安全な活用を可能にする。国境を越えた処方箋交換や、がん画像・ゲノムデータの解析基盤を展開し、個別化医療の進展と欧州ヘルスユニオンの強化を推進する。
製造	複雑なサプライチェーンでのデータ共有により、柔軟性と回復力を高める。アセット管理や予知保全等のビジネスモデルを構築し、2026 年までに運用型データスペースの確立と中小企業の参画を目指す。
言語	多言語データの収集・共有により欧州の AI 産業を支援する。高品質な LLM の開発に不可欠なインフラを展開し、自動翻訳やチャットボット等の革新的なサービス基盤を構築する。
メディア	メディア組織間のデータ駆動型協力を促進し、巨大プラットフォームに対抗する。AI 導入や誤情報対策、3D 資産の共有を支援し、多言語での情報発信と視聴者分析の精度向上を通じて競争力を高める。
モビリティ	交通・モビリティデータの統合により、効率的な輸送システムを実現する。都市モビリティや物流のデータ共有を通じて、到着予測の改善や資源管理の最適化を 2026 年までの運用展開により図る。
公共行政	法的データ、公共調達、行政手続き、法執行機関向けデータの 4 領域で構成される。透明性の向上や事務負担の軽減、イノベーション創出を共通の相互運用性ソリューションで支援する。
研究・革新	既存の研究データインフラを連邦化し、オープンサイエンスを推進する。研究者が分野を超えてデータを再利用できる環境を整備し、2026 年までに民間部門との接続拡大や連邦の拡張を目指す。
スキル	教育やスキル、労働市場のデータを共有し、最適なマッチングを支援する。デジタル資格証等の活用により学習成果を安全に共有可能とし、労働力の需給ギャップ解消と生涯学習を促進する。
観光	観光データの安全な共有により、公共・民間部門のデータ需要に応える。消費者の利便性向上や持続可能な観光計画の策定を支援し、他セクターと接続された高品質な情報アクセスを 2027 年までに展開する。

(1) 農業 (Agriculture)

共通欧州農業データスペースは、共通農業政策（CAP）および「農場から食卓まで」戦略の目標を達成するために構築されている。この取組は、生産、土地利用、環境などのデータを共有することで、欧州農業の持続可能性と競争力を高めることを目的としている。現在、デジタル・ヨーロッパ（DIGITAL）が支援する調整支援アクション（CSA）を通じて、ガバナンスとビジネスモデルの策定が進められている。また、統合管理システム（IACS）のデータ統合や、農場持続可能性データネットワーク（FSDN）への移行も並行して進んでおり、公共データの活用が強化されている。2024 年末からは本格的な運用展開が予定されており、農家が自身のデータを制御しつつ、機械メーカーや公共機関と安全にデータを共有できる環境が整備される見通しである。

(2) 文化遺産 (Cultural Heritage)

文化遺産データスペースは、欧州の文化部門のデジタルトランスフォーメーションを加速させ、コンテンツの再利用を促進する旗艦プロジェクトである。2021 年の欧州委員会勧告に基づき、加盟国には資産のデジタル化が促されており、「Europeana」のインフラを基盤として展開が進められている。現在、AI を活用したデータの充実や、専門家の能力構築、他セクター（教育や観光など）との接続強化に重点が置かれている。特に「Twin it! 3D for Europe」キャンペーンを通じて、高品質な 3D コンテンツの蓄積が推進されている。これにより、文化資産の保護だけでなく、将来世代への継承や、物理的な損傷を与えることのない広範な再利用が可能となる環境が構築されている。

(3) エネルギー (Energy)

エネルギーシステムをデジタル化することは、欧州のグリーンおよびデジタル移行を支える重要な政策課題である。2022 年 10 月に採択された行動計画に基づき、エネルギーデータの共有を促進する枠組みの構築が進められている。主な優先事項は、エネルギーシステムの柔軟性サービス、電気自動車のスマート充電、および建物の改修を支援するデータサービスの 3 点である。法的には、電力計データへのアクセスに関する実施規則が 2023 年 6 月に採択されており、データの所有者が第三者と安全に共有できる仕組みが整えられた。2024 年からは、ホライゾン・ヨーロッパの支援を受けた複数のプロジェクトの成果を踏まえ、最初の運用版の展開が開始される予定である。

(4) 金融 (Financial)

金融分野では、データの活用によるパーソナライズされた金融ソリューションの提供と、顧客の利便性向上を目指している。このデータスペースは主に 3 つの要素で構成されている。第一は、金融データアクセス（FIDA）フレームワークの提案による、オープン

フィナンスの推進である。第二は、金融サービスや資本市場の情報に無料で公開アクセスできる「欧州単一アクセスポイント（ESAP）」の設置であり、2027年半ばまでの完全運用を予定している。第三は、監督当局への報告負担を軽減するための、報告要件の標準化とデータ共有の改善である。更に、AIモデルのトレーニングのために合成データを提供する「データハブ」イニシアチブも進められている。

(5) グリーンディール（Green Deal）

グリーンディールデータスペースは、ゼロ汚染戦略などの環境政策をデータで裏付けることを目的としている。中核となるのは「GreenData4All」イニシアチブであり、INSPIRE 指令の評価に基づき環境地理空間データの共有規則の改定が進められている。また、製品の持続可能性を追跡する「デジタル製品パスポート（DPP）」の導入準備も進んでおり、電池、繊維、電子機器の価値チェーンにおける実装が分析されている。更に、地球の高精度デジタルモデルを作成する「Destination Earth（DestinE）」も2024年7月の稼働を目指して開発されている。スマート・コミュニティ向けのデータスペースも統合され、都市部における洪水や熱曝露の予測など、具体的な市民生活への還元が図られている。

(6) 健康（Health）

共通欧州ヘルスデータスペース（EHDS）は、欧州ヘルスユニオンの重要な柱であり、個人が自身の電子健康データを管理できるようにするとともに、研究や政策立案への安全なデータ活用を可能にする。一次利用（診療）の面では、処方箋や患者概要を国境を越えて交換できるMyHealth@EUがすでに12か国で稼働している。二次利用（研究・開発）については、HealthData@EUというインフラのパイロットプロジェクトが進められている。特定疾患への対応として、がん画像を共有しAIツールの開発を支援するEUCAIMプロジェクトや、臨床・ゲノムデータの国境を越えたアクセスを可能にするGDIプロジェクトも展開されており、個別化医療の実現に向けた基盤整備が加速している。

(7) 製造（Industrial/Manufacturing）

製造業向けのデータスペースは、複雑なバリューチェーンにおいてデータの価値を最大化し、サプライチェーンの回復力を高めることを目指している。この取組は、アセット管理、予知保全、アジャイルなサプライチェーン管理における、主権的かつ責任あるデータ共有を可能にするものである。2022年には「Data Space 4.0」プロジェクトが開始され、ガバナンスや製造特有の構成要素の設計図（ブループリント）が作成された。現在、アセット管理に焦点を当てた2つの運用型データスペースの展開が進められており、中小企業の参加も積極的に促されている。最終的には、これらを統合して統一的な欧州製造データ

スペースを確立し、環境規制や製品パスポートの要件にも対応できる体制を構築する計画である。

(8) 言語 (Language)

共通欧州言語データスペースは、欧州の多言語性を反映した AI 技術の発展を支えるための生態系を構築している。2023 年 1 月から実装が開始され、翻訳、スマートアシスタント、チャットボットなどの革新的なサービスに必要な多言語・マルチモーダルなデータの収集と共有を推進している。本取組は 2 つの柱からなる。第一は、言語技術センターオブエクセレンス (CELT) を設立し、各加盟国と連携してガバナンスやビジネスモデルを策定することである。第二は、言語技術に関するデジタルインフラ財団 (ALT-EDIC) と協力し、欧州が必要とする LLM の開発に不可欠なインフラを展開することである。これにより、欧州企業の競争力を高め、市民に高度な AI サービスを提供することを目指している。

(9) メディア (Media)

メディアデータスペースは、メディア組織がデータ駆動型の協力関係を築き、巨大オンラインプラットフォームが支配する市場での競争力を高めることを目的としている。2023 年 10 月に開始された「TEMS」プロジェクトが中心となり、AI や仮想現実技術の導入、誤情報の防止、視聴者分析の改善に向けたインフラの整備が進められている。具体的な活用例として、独立系のニュース制作者がデータを共有して視認性を高めることや、放送局が 3D アセットを共有して低コストで共同制作を行うことが想定されている。また、複数の言語での字幕提供を可能にするデータ共有プロトコルの整備も進んでいる。並行して、信頼できる情報を多言語で発信するためのメディアプラットフォームの構築も進められており、民主的な議論の場を支えるデータ基盤の確立を図っている。

(10) モビリティ (Mobility)

共通欧州モビリティデータスペース (EMDS) は、持続可能でスマートなモビリティ戦略を支援し、既存および将来の交通データソースの統合を目指している。この取組により、鉄道、道路、水運、航空といった異なる輸送モード間のデータ共有が促進され、到着予定時刻の精度向上や効率的な物流管理が可能になる。法的には、ITS 指令の改定や鉄道テレマティクス、電子貨物輸送情報に関する規制が貢献している。技術面では

「deployEMDS」プロジェクトが 2023 年 11 月に開始され、9 つの都市・地域において交通および都市モビリティのデータ共有ユースケースの展開が進められている。これにより、利用者のニーズに即した、持続可能で包括的な交通システムの実現を目指している。

(11) 公共行政 (Public Administrations)

公共行政データスペースは、ガブテック (GovTech) やリーガルテックなどの革新的なアプリケーションを支援し、市民や企業に公共価値を提供することを目的としている。この分野は4つのサブセクションに分かれている。第一は「法的データスペース」で、ELIやECLIなどの識別子を用いてEU法と国内法の相互リンクを強化している。第二は「公共調達データスペース (PPDS)」で、EU全域の調達通知を一元的に分析可能にし、支出の透明性を高める。第三は「ワンスオンリー・テクニカルシステム (OOTS)」で、行政手続きに必要な証拠書類を加盟国間で直接交換可能にする。第四は「イノベーションのためのセキュリティデータスペース」で、法執行機関がAIアルゴリズムを検証・トレーニングするための安全な環境を構築している。

(12) 研究・イノベーション - EOSC (Research and Innovation)

欧州オープンサイエンスクラウド (EOSC) は、欧州研究エリア (ERA) の政策目標に基づき、オープンサイエンスの実践を深めるためのデータスペースである。EOSCは、既存の研究データインフラを連邦化 (フェデレーション) し、研究者が分野を超えてデータを公開、検索、再利用できる「システムのシステム」として構築されている。コアサービスのプロトタイプ作成が完了し、現在は「EOSC EU Node」というフル稼働ノードの調達が進められている。具体的な成果として、COVID-19プラットフォームを通じた迅速なデータ共有や、海洋研究のための「Blue Cloud」などの成功事例がある。今後は、2024年から2026年にかけて研究コミュニティを超えた公共・民間部門への接続を拡大し、持続可能なガバナンス体制を確立する計画である。

(13) スキル (Skills)

共通欧州スキルデータスペースは、教育、スキル、労働市場に関するデータを共有するための人間中心のインフラを提供している。この取組は、求職者と学習機会の適切なマッチングを実現し、労働市場のトレンドを分析することを目的としている。欧州スキル分類 (ESCO) やEuropass (ユーロパス) などの既存イニシアチブと相乗効果を図り、データの断片化を解消することを目指している。特に「学習用欧州デジタル資格証 (EDC)」の導入により、個人が自身の学習成果を安全な環境で雇用主などと共有できるようになった。2024年1月からは展開アクションが開始され、エッジサービスの構築や、全てのユーザが利用可能なアクセス環境の整備が進められている。これにより、生涯学習の促進と労働力の適切な配置が支援される。

(14) 観光 (Tourism)

観光データスペースは、観光セクターのデータ需要に応え、官民双方でのデータの共有、処理、分析を安全に実施するための基盤である。このデータスペースは、モビリテ

ィ、文化、健康などの他のデータスペースと接続されることで、多角的で高品質な情報へのアクセスを可能にしている。2023年2月には、中小企業間の信頼構築を目的としたデータ共有に関する行動規範（Code of Conduct）が策定された。また、観光客の動きの予測や公共サービスの調整、エネルギー消費データに基づく持続可能性の向上など、具体的な活用シナリオが想定されている。現在、デジタル・ヨーロッパ（DIGITAL）の資金援助により設計図（ブループリント）が完成しており、2024年から2027年にかけて本格的な運用展開が実施される予定である。

2.2.5. 欧州オープンサイエンスクラウド European Open Science Cloud : EOSC

本節は[2]を中心にまとめた。

(1) 役割と位置付け

EOSC（European Open Science Cloud）は、欧州の研究コミュニティにおいてオープンサイエンスの実践を深化させることを主眼に置いた基盤である。これは、欧州研究エリア（ERA）の「2022-2024年政策アジェンダ」に掲げられた20のアクションの一つに数えられており、欧州の科学技術政策における最重要課題の一つとして位置付けられている。研究者が地理的、あるいは専門分野の境界を越えて、データをシームレスに共有・再利用できる環境の構築を目指している。

(2) 主な目標

EOSCが掲げる主な目標は、既存の研究データインフラを統合（フェデレーション）し、一貫性のあるコアサービスを展開することにある。これにより、バラバラに存在していた研究資源を一つの巨大なネットワークとして機能させる。また、欧州の研究コミュニティ全体に対してオープンサイエンス政策やベストプラクティスを主流化（mainstream化）させることも重要なミッションである。更に、投資やインフラ能力を客観的に評価し、ベンチマークするためのモニタリングメカニズムの確立も進められている。

(3) 現在の進捗状況

インフラの整備面では、コアコンポーネントやポータル、マーケットプレイスの試作が既に運用環境で行われている。2023年には、運用ノードの核となる「EOSC EU Node」の管理サービスに関する公共調達が開始された。また、2022年11月には「EOSC Observatory」というダッシュボードが立ち上げられた。これは、加盟国ごとのオープンサイエンスへの準備状況や進捗をリアルタイムで追跡・可視化するためのツールとして機能している。

(4) 具体的な活用例（ユースケース）

EOSC の枠組みは、既に具体的な成果を生み出している。代表例として「欧州 COVID-19 データプラットフォーム」が挙げられ、ウイルス研究を促進するための迅速なデータ共有と分析支援が行われている。また、海洋研究分野では「Blue Cloud イニシアチブ」が展開されており、FAIR 原則（見つけられる、アクセスできる、相互運用できる、再利用できる）に基づくエコシステムとして、グリーンディールデータスペースなど他の重要施策とも連携している。

(5) 今後の展開

2024 年から 2026 年にかけては、複数の研究インフラを相互に接続する分散型の「システムのシステム（system of systems）」として、EOSC 連盟を更に拡大させる計画である。2025 年までには欧州の研究者に対するサービス提供を本格化させる予定であり、更に 2024 年以降は、その対象を研究コミュニティ内にとどめず、公共セクターや民間セクターへと拡大していくことも検討されている。

2.2.6. 欧州バイオインフォマティクス研究所 EMBL-EBI

本節は[3]を中心にまとめた。

(1) 組織の役割と国際的な立ち位置

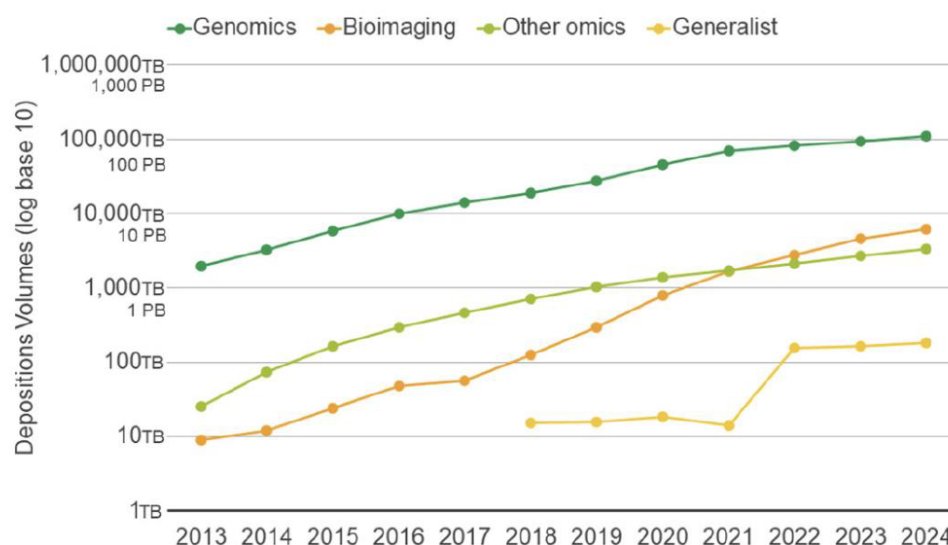
EMBL-EBI は、欧州分子生物学研究所（EMBL）の一部門として、生命科学データの管理と提供を担う国際的な中核拠点である。イギリスのケンブリッジ近郊に拠点を置き、ドイツやフランスを含む 29 の加盟国によって支えられる政府間国際機関としての性質を持つ。同機関は、日本の DDBJ やアメリカの NCBI と密接に連携し、世界中で生成されるゲノム配列やタンパク質構造などの情報を集約・共有する「世界のバイオデータの心臓部」としての役割を果たしている。

(2) 膨大なデータアーカイブの規模

EMBL-EBI が管理するデータ量は、ゲノム解析技術の飛躍的な向上に伴い指数関数的に増加している。2026 年時点での累計データ容量は約 130PB に達し、年間の増加量は 20～25PB に及ぶと推計されている。ライフサイエンス分野の学習用データセットとしては 1PB 程度の規模が確保されており、これはゲノム配列情報の複雑さと、数十億件に及ぶ膨大な蓄積データを反映したものである。

EMBL-EBI のサイトでは、データベース毎のデータ量の統計が掲載されている。電子顕微鏡の画像データの伸びが大きく現在 10PB 弱であるが、毎年 1～2PB 程度増加していることがわかる。

Figure 9 - Cumulative volumes of data deposited into EMBL-EBI archival resources in TeraBytes (log scale, base 10)



Source: Thakur et al. (2025)

Note: Genomics includes ENA, EGA, and EVA (European Variation Archive). Bioimaging includes EMPIAR, BIA, and EMDB. Other Omics include PRIDE (PRoteomics IDentifications Database) and MetaboLights. Generalist includes BioStudies.

図 2.1 欧州バイオインフォマティクス研究所のデータ量

出典：<https://www.ebi.ac.uk/emdb/statistics>

https://www.ebi.ac.uk/emdb/statistics/empiar_size_increase_year

(3) ライフサイエンスにおける基盤モデルの動向

ライフサイエンス分野の研究プロセスにおける基盤モデルは、Transformer アーキテクチャが主役となっている。代表的なモデルである「ESM-3」は 980 億のパラメータを持ち、配列、構造、機能を一つのモデルで統合的に扱うマルチモーダル化が進行している。また、AlphaFold 3 や ESM-3 などの最新鋭モデルには拡散モデル (Diffusion) が採用されており、単一の予測値を出すだけでなく、不確実性を含む構造生成や確率的な予報を可能にしている点が大きな特徴である。

(4) 分野固有の特性とスケーリング

ライフサイエンス分野の基盤モデルは、材料科学や気象分野と比較してパラメータ数が一桁から三桁ほど大きく、汎用 LLM に近いスケールアップが進行している。材料科学が物理的な対称性を利用してパラメータ数を抑制するのに対し、ライフサイエンス分野ではデータの多様性を吸収するためにモデルの巨大化が不可欠となっている。このように、EMBL-EBI が提供する高品質かつ大規模なオープンデータは、AI を用いた生命現象の解明や創薬の加速において、極めて重要な計算資源の供給源となっている。

2.2.7. 欧州地球観測プログラム Copernicus

本節の内容を報告書[5]に基づいて記述している。

(1) 役割と位置付け

コペルニクスは、EU の宇宙プログラムにおける地球観測コンポーネントであり、環境管理の改善、気候変動の影響把握・緩和、および市民の安全確保を主目的としている。正確かつタイムリーな情報提供を通じて、持続可能な社会の実現と安全保障に寄与する。欧州のみならず、全世界の環境監視において不可欠なインフラとしての地位を確立している。

(2) 新体制への移行とデータ規模

運用体制については大きな転換期を迎えており、2023 年 7 月に「コペルニクス・データスペース・エコシステム (CDSE)」が稼働を開始した。同年 11 月以降、従来のデータアクセスサービスは完全にこの新システムへと置き換えられている。公開されているオンラインデータ量は約 80PB に達しており、2024 年単年で約 20.6 PB 分 (3,400 万件以上) の新しい Sentinel 製品が追加されるなど、その規模は急速に拡大し続けている。

(3) 利用状況と主要ミッション

ユーザ層は劇的に増加しており、登録ユーザ数は 2024 年に約 29 万人と、前年の 3 倍以上に急増した。また、登録不要の「Copernicus Browser」への訪問も年間 370 万件に上り、広く普及している。ミッション別では、Sentinel-1、2、3、5P、6 などの衛星群が運用されているが、特に高解像度光学画像を扱う「Sentinel-2」の人气が圧倒的であり、全ダウンロード数の約 82.8%を占めている。2024 年には新たに Sentinel-2C や Sentinel-1C が打ち上げられ、観測網の継続性と強化が図られた。

(4) 技術的特徴と利便性

技術面では、従来の「まずデータをダウンロードする」方式から、「データが存在するクラウド上で直接処理する」方式への転換が推進されている。Sentinel Hub や openEO といった高度な API の導入により、ユーザは巨大な生のデータを手元に落とすことなく、数秒で解析結果を得ることが可能となった。また、衛星が観測してから数時間以内にデータが利用可能になる迅速性も、コペルニクスの大きな強みである。

(5) 公開されている情報

2022 年 12 月の CDSE サービスの開始から 2024 年末までに、合計 7,164 万 5,613 件のコペルニクス・センチネル (Copernicus Sentinel) ユーザレベルデータ製品が公開され、

その累積データ量は 44,475.52 TB に達した（図 2.2）。2024 年単年では、3,410 万件を超えるユーザレベル製品が公開され、総データ量は約 20.7PB に達した。これは、CDSE サービス開始以降に公開された製品総数の 48%、および総データ量の 46%に相当する。センチネル 2（Sentinel-2）は、公開された製品数とデータ量の両方で最大のシェアを占めており、3,050 万件以上の製品（総数の 89%）と 17.4 PB（総データ量の 84%）を記録した。

センチネル 1（Sentinel-1）については、2024 年末時点のコンステレーション（衛星群）には A 衛星および C 衛星が含まれているものの、2024 年 12 月に打ち上げられたセンチネル 1C がまだ完全に運用開始（コミッショニング）されていなかったため、2024 年に稼働しデータを提供したのはセンチネル 1A のみであった。A、B、および C 衛星で構成されるセンチネル 2 では、2024 年 9 月に打ち上げられたセンチネル 2C のデータは 12 月からのみ利用可能となった。センチネル 3（Sentinel-3）は、以前と同様に A 衛星と B 衛星の両方で運用を継続している。

Mission	No. of user-level data published		% for 2024 of total number published on CDSE	Volume of user-level data published [TB]		% for 2024 of total volume published on CDSE
	2024	Since CDSE service start (DEC 2022)	2024 vs DEC 2022	2024	Since CDSE service start (DEC 2022)	2024 vs DEC 2022
S1	1,262,211	5,315,352	24%	2,584.01	7,891.49	33%
S2 STRD	8,651,217	17,732,293	49%	4,923.98	10,093.23	49%
S2 RPRO	21,849,463	42,442,732	51%	12,465.06	24,389.54	51%
S3 STRD	2,314,714	4,975,120	47%	534.52	1,100.56	49%
S3 RPRO	-	438,869	-	-	70.07	-
S5P	112,771	741,247	15%	167.18	930.63	18%
ALL	34,190,376	71,645,613	48%	20,674.75	44,475.52	46%

TABLE 2: Overall number and volume of published user-level data on the CDSE in 2024 compared to data published since the start of the CDSE service in Dec 2022.

図 2.2 2024 年に CDSE において公開されたセンチネル製品の総数および総量と、センチネルの運用開始以来の製品の累積数および累積量との比較 [5]

(6) 今後の展望

2025 年にかけては、更なるデータの多様化と高度化が計画されている。米国の Landsat や MODIS といった他機関データとの連携拡充に加え、新しい STAC API の進化が進められる予定である。更に、AI 機能を活用した自動分析や、多種多様なデータの融合による洞察生成を加速させることで、より高度な意思決定支援ツールの提供が目指されている。

2.2.8. 欧州原子核研究機構 CERN

(本節は、参考文献[3]に基づき記述している。)

高エネルギー物理学の分野において、CERN（欧州原子核研究機構）はこの分野における世界で最も重要な実験データの一部をホストする著名な組織である。CERN オープンデータポータルは、ATLAS、CMS、LHCb を含む大型ハドロン衝突型加速器（LHC）の共同研究から放出される大規模な実験データのリポジトリである。ポータルでは、キュレートされたデータセット、付属ソフトウェア、裏付け文書、および分析例が提供されており、組織のデータ放出ポリシーに基づき、すべての分析可能なデータは収集から 10 年以内に一般公開される。

CERN におけるデータ生成の規模は膨大であり、LHC は毎秒 6 億回以上の陽子衝突を発生させ、結果として毎秒約 1PB の生データストリームをもたらしている。この負担を軽減するために、特定の複雑な「トリガー」システムを使用してこの情報の洪水をフィルタリングし、最も興味深いイベントのみを選択することで、データストリームをより管理しやすい毎秒 200MB にまで削減している。一般的に、LHC の実験では、保存と処理が必要な生データが毎年約 15PB 生成される。CERN オープンデータポータル自体は、素粒子物理学に関する「5PB 以上」のオープンデータをホストしており、単一のリリースだけで 2PB を超える陽子衝突データが追加されることもある。

このデータの対象ユーザコミュニティは二重の目的を持っている。ポータルは、実験チーム以外の研究者を含む広範な科学コミュニティだけでなく、教育や訓練を目的とした市民科学者や学生にも役立てられている。すべてのデータは持続的識別子（PID）を伴って放出され、最大限の再利用とインパクトを確保するために、クリエイティブ・コモンズ CC0 標準パブリック・ドメイン提供（権利放棄）の下、オープンかつ FAIR 原則を適用している。この規模のデータにおいて、「オープンデータ」の価値はその生のボリューム（量）ではなく、キュレーション（整理・保存）にあるという点に注目することが重要である。キュレーションプロセスによって、CERN のような専門的なリソースを持たないより広範なコミュニティにとっても、データがアクセス可能で分析可能なものとなるのである。

2.2.9. まとめ

本書で参照した欧州の政策に関する 3 つの文書においては、いずれもデータが AI を推進する原動力であり、戦略的資産であることが述べられている。それぞれの文書でのデータと AI の位置付けをここでまとめておく。

(1) 欧州データ戦略に関する政策

欧州データ戦略は、単一市場の創出により欧州の競争力を確保することを目指す。デー

タ法は、増大する産業データの潜在力を活用し、欧州をデータ経済のリーダーにするための柱である。デジタル・ヨーロッパ・プログラムを通じた投資は、ビッグデータ分析能力の格差を埋め、最新技術を導入できる人材を育成する。これにより、AI を含むデジタル分野でのリーダーシップ獲得を推し進めている。

(2) 共通の欧州データスペースに関する作業文書

データはAI アルゴリズムの訓練・改善のための「燃料」であり、イノベーションの「不可欠な原動力」である（Above all, data is the fuel for training and improving artificial intelligence (AI) algorithms and it is an essential driver for innovation in AI.）と述べられている。特に進化する生成AI の分野では、高品質なデータの供給が欧州の競争力と技術的卓越性を左右する。データ、計算能力、才能の組み合わせが、信頼できるAI における欧州のリーダーシップをけん引する主要な原動力となる。データスペースは、AI イノベーションの土台となる安定的なデータ供給を担う。

(3) 大規模データリポジトリに関する市場調査（2024-2026 年）

大規模データリポジトリは、AI 開発を支える「戦略的資産」である。これらは複雑な機械学習モデルの訓練に不可欠な量と多様性を提供し、これらなしではAI は現実の複雑さに対応できない。LLM の進歩は膨大なデータでの訓練に直接起因している。政策的にもデータはAI の「核心的な原材料」と定義され、データの解放がAI イノベーションを加速させる鍵となる。

2.3. 欧米の動向

2.3.1. 情報源

本節は、下記に示す各機関に置ける報告書等を情報源として、欧州共同体および欧米各国の動向をまとめた。

- [1] CONSOLIDATED ANNUAL ACTIVITY REPORT 2024, EuroHPC JU
- [2] Review of Digital Research Infrastructure Requirements for AI, The Alan Turing Institute, Oct 2022
- [3] Department for Science, Innovation & Technology ANNUAL REPORT AND ACCOUNTS 2024-25, Department for Science, Innovation & Technology, July 2025
- [4] Swiss Roadmap for Research Infrastructures in view of the 2025-2028 ERI Dispatch, Part I: National Research infrastructures, State Secretariat for Education, Research and Innovation SERI
- [5] Swiss National Supercomputing Center (CSCS) General Terms and Conditions for the Operation of HPC Systems, Provision of HPC Resources, and Services Provided

to the Swiss Research Community, CSCS, Updated in May 2025

- [6] Alps: Cloud-native HPC at the Swiss National Supercomputing Centre, CSCS, March 26th, 2024
- [7] ITALIA AI Factory. (2025). ITALIA AI Factory Service Portfolio. CINECA.
- [8] SUMMIT POUR L'ACTION L'IA / AI ACTION SUMMIT - MAKE FRANCE AN AI POWERHOUSE, French Republic / Business France, February 2, 2025
- [9] Kurt Lust, "LUMI Introduced: Opportunities and limitations", LUMI-BE User Day 2023, October 2023.
- [10] Michael E. Papka, "Intersection of AI and HPC", 2024 年 9 月 13 日.
- [11] Argonne Leadership Computing Facility, "ALCF 2025 Science Report", 2025 年.
- [12] Operational Assessment Oak Ridge Leadership Computing Facility, April 2025

2.3.2. EuroHPC JU

(本節は[1]からの抜粋である。)

(1) 計算基盤のユーザ動向・利用実績

2024 年における計算資源の利用実績は、欧州の研究および産業コミュニティによる需要の高さを反映している。通年で実施された各種アクセスコールを通じて合計 892 件の申請があり、そのうち 706 件のプロジェクトに対して合計約 4,125 万ノード時間のアクセスが割り当てられた。全体のプロポーザル採択率は 79%に達している。

国別の利用動向では、イタリア、スペイン、フランス、ドイツ、デンマーク、スウェーデン、トルコ、英国、ポルトガル、オランダが上位 10 か国を占めている。研究領域別では、工学・数学・計算機科学が 44%と最大の割合を占め、化学・材料科学 (19%)、計算物理学 (19%)、生化学・ライフサイエンス・医学 (11%) がこれに続く。地球システム科学や環境研究は 6%にとどまっている。

具体的なシステム別では、Leonardo Booster、Mare Nostrum 5 GPP、LUMI-G の各パーティションが、総ノード時間において最も多く割り当てられた。利用者の属性については、主任研究者 (PI) の 88%が男性であり、女性は 11%にとどまるなど、依然として大きなジェンダー格差が存在している。

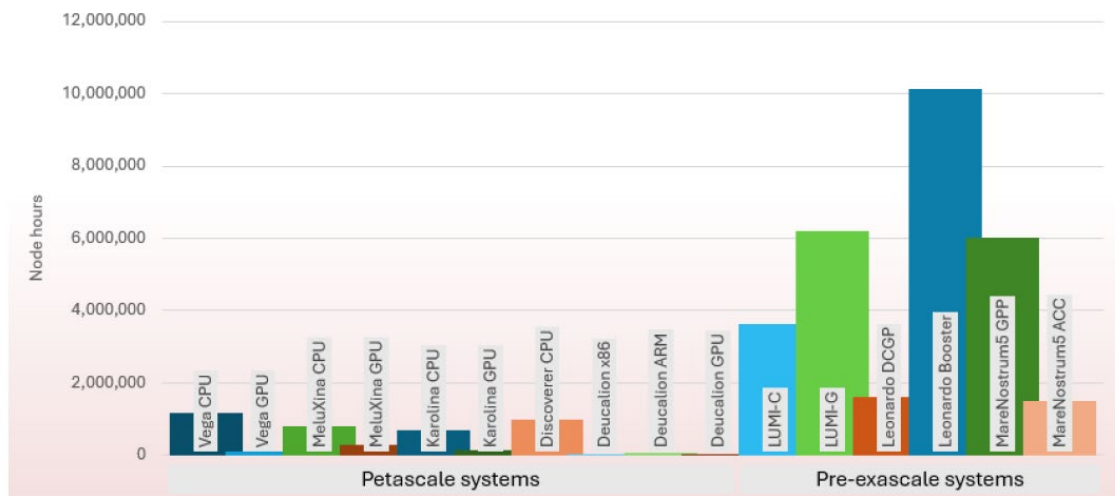


Figure 20: Awarded systems in 2024.

図 2.3 2024 年に資源が割り当てられたシステム [1]

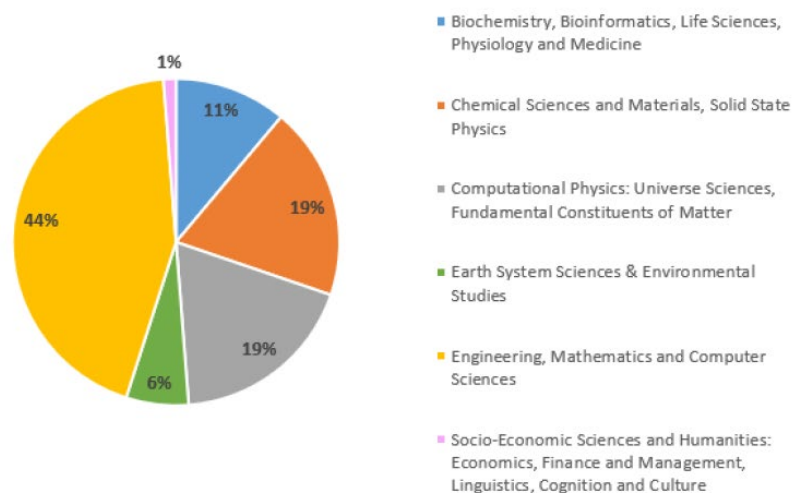


Figure 22: Research domains distribution in awarded projects under the AI and data-intensive Applications, Regular and Extreme-scale Access calls in 2024.

図 2.4 2024 年の AI およびデータ集約型アプリケーション、定期（Regular）および超大規模（Extreme-scale）アクセスコールにおける採択プロジェクトの研究領域分布 [1]

(2) 公募・利用制度

EuroHPC JU は、ユーザの習熟度や計算ニーズの規模に応じた多様な公募制度を運用し

ている。

まず、小規模な資源を利用する「ベンチマーク・アクセス」および「開発アクセス」は、コードのテストやアルゴリズム開発、ワークフローの最適化を目的としており、簡素化された評価プロセスにより毎月のカットオフから約 2 週間で資源へのアクセスが可能となる。大規模な計算ニーズに対しては、研究・公共セクター向けの「定期公募 (Regular Access)」(審査期間 4 か月) と、革新的でインパクトの大きい研究を対象とした「超大規模アクセス (Extreme-scale Access)」(審査期間 6 ヶ月) が用意されている。

2024 年の特筆すべき動向として、産業界、中小企業 (SME)、スタートアップを主なターゲットとした「AI・データ集約型アプリケーション・アクセス」が新設された。この制度は AI 開発のスピード感に対応するため、カットオフから最短 1 ヶ月で資源提供を開始する迅速なピアレビュー体制を構築している。EU はこれらの運用において、各スーパーコンピュータの計算容量の 35% から 50% の割り当てを管理している。

(3) AI for Science 関連の資源配分状

2024 年は AI Factory イニシアチブの導入により、AI 分野への資源配分が質・量ともに大幅に強化された年となった。2024 年 6 月の規制改正に基づき、AI 最適化スーパーコンピュータの取得や既存システムの AI 機能アップグレードが活動の柱に加えられた。

同年 12 月には、フィンランド、ドイツ、ギリシャ、イタリア、ルクセンブルク、スペイン、スウェーデンの 7 拠点が最初の AI Factory として選定された。これらの拠点は、AI モデルのトレーニングや機械学習を専門に支援するハブとして機能する。

また、戦略的アクセスの枠組みを通じた重点配分も行われており、「Large AI Grand Challenge」では、LLM を開発する 5 つの中小企業に対し、LUMI-G 等のプリ・エクサスケール機での 880 万 GPU 時間が提供された。更に「Destination Earth (DestinE)」プロジェクトに対しても、地球のデジタルツイン構築のために総アクセス時間の最大 10% が割り当てられている。採択された AI 関連プロジェクトで使用する主要技術は、ディープラーニング (23%)、生成型言語モデル (20%)、コンピュータビジョン (19%) など多岐にわたる。

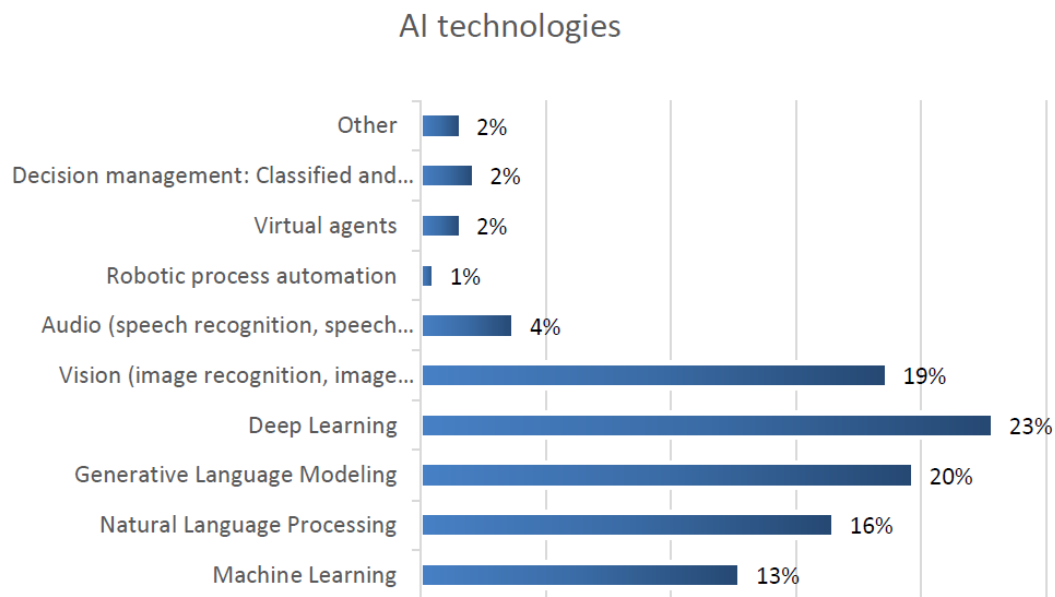


Figure 26: Preferred AI Technologies

図 2.5 主要な AI 技術 [1]

(4) HPC・統合基盤の整備状況

インフラ面では、LUMI、Leonardo、MareNostrum 5、Vega、MeluXina、Karolina、Discoverer、Deucalion の 8 つのスーパーコンピュータが稼働しており、そのすべてが世界の TOP500 リストにランクインしている。

現在、欧州初のエクサスケール機「JUPITER」の設置がドイツのユーリッヒ・スーパーコンピュータセンターで進んでおり、その第一モジュールである JEDI は、省エネ性能を示す Green500 で世界第 1 位を獲得した。JUPITER は 1EFLOPS の性能を達成し、SiPearl Rhea1 CPU と NVIDIA GPU を BullSequana XH3000 プラットフォームに統合する構成となっている。

ストレージ基盤も極めて強力であり、LUMI は合計 117PB うち 7PB は超高速フラッシュ)、Leonardo は 100PB 以上、MareNostrum 5 は 248PB のネット容量に加え 402PB のテープアーカイブを備えている。

更に、計算資源の統合管理に向けた「EuroHPC JU 連盟プラットフォーム」の構築が進められており、スーパーコンピュータ、量子コンピュータ、データ資源を単一窓口で提供するセキュアなエコシステムの形成が図られている。量子計算については、2024 年にポーランド、フランス、ドイツ、チェコで量子コンピュータの調達契約が締結され、2025 年末までの稼働が計画されている。

(5) 産業界からの投資の枠組み

EuroHPC JU の活動は、EU（欧州連合）、参加国（Participating States）、および民間メンバーの三者による強固な投資枠組みに支えられている。

特に AI Factory 等の大規模インフラの構築においては、ホスト国が調達コストの最大 50%を、サービス運営費の少なくとも 50%を負担する共同出資構造が採用されている。民間側からは ETP4HPC、DAIRO、QuIC の 3 団体が公式メンバーとして参画し、現物貢献（in-kind contributions）を通じて技術開発やエコシステムの拡大に寄与している。

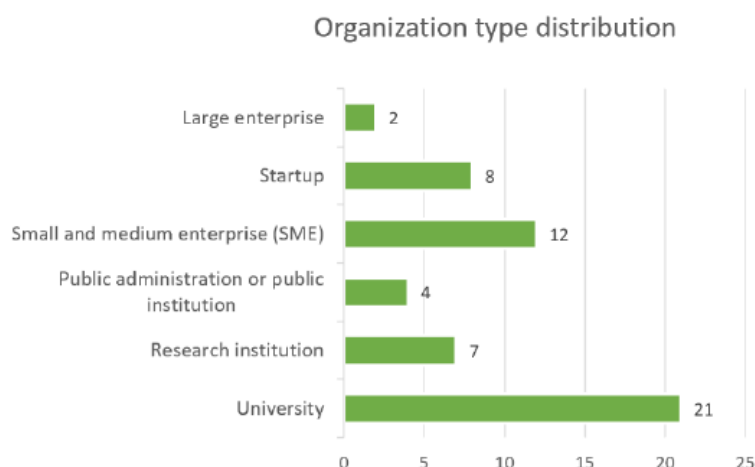


Figure 24: Distribution of access by organisation type - AI and Data-intensive applications

図 2.6 組織タイプ別のアクセス分布 - AI およびデータ集約型アプリケーション [1]

2024 年に締結された助成金契約のデータによれば、受益者の 18%が中小企業（SME）であり、EU 助成金の 10%がこれら企業に配分された。また、大企業（Large Enterprises）は受益者の 4%を占め、助成金の 19%を受け取っている。予算執行の観点では、2024 年の運営予算（Title 3 と呼ばれている分類）において約 212M ユーロ（392 億円）のコミットメントがなされ、資源調達と研究助成の両面で産業界との連携が強化された。AI 活動の実施に向けては、EU が最大 980M ユーロ（1,813 億円）を、参加国が同額の少なくとも 980M ユーロ（1,813 億円）を拠出する計画となっている。

(6) 今後の展開

将来の展望として、EuroHPC JU はインフラの更なる高度化とユーザベースの拡大を掲げている。

インフラ面では、2025 年の JUPITER の完全稼働に続き、2026 年にはフランスの Alice Recoque（第 2 のエクサスケール機）およびギリシャ、スウェーデンのミッドレンジ機の稼働が予定されている。また、量子計算と HPC のハイブリッド運用を実現するための量子エクセレンスセンター（QEC）が本格始動し、2026 年第 2 四半期にはオランダとルクセ

ンブルクの量子コンピュータも加わる予定である。

戦略レベルでは、2025 年第 3 四半期に予定されている「EuroHPC JU 連盟プラットフォーム」の初期運用開始が最大の焦点であり、これにより欧州全域のハイパー接続されたエコシステムが完成に近づく。

国際協力も加速しており、日本とは量子計算アルゴリズムおよびユースケース開発（気象・ライフサイエンス・材料等）における連携が、インドとは HPC アプリケーションの共同開発（プロジェクト GANANA 等）が継続される。教育面では「EUMaster4HPC」を通じた次世代専門家の育成を継続し、高度なスキルを持つ労働力の確保を目指している。

2.3.3. 英国

英国について、AI に関連する計算基盤のユーザ動向、制度、資源配分、インフラ整備状況、投資枠組み、および今後の展開を[2][3]に基づき記述する。

(1) 計算基盤のユーザ動向・利用実績

英国の AI 研究者は、主に所属する研究室や所属機関の計算資源（ティア 3）、および商用クラウドサービスを組み合わせて利用している。AI 研究者の半数以上が研究グループや学内の計算資源を主要なリソースとして活用しており、これは初期段階の開発が小規模なローカルシステムで行われる実態を反映している。具体的な利用実績としては、LLM の開発、神経科学における合成脳画像の生成、ロンドンの人流を分析するコンピュータビジョンプロジェクト、自動運転や医療に適用されるベイズ深層学習などが挙げられる。また、公共セクターにおいても、政府全体で 2 万人のユーザが Microsoft 365 Copilot の試用を行っているほか、ビジネスユーザによる GOV.UK Chat の試験運用で約 2 万 4,000 件の質問が寄せられるなどの実績がある。

(2) 公募・利用制度の詳細

英国の HPC インフラは、国家レベルのサービス（ティア 1）、地域・専門ハブ（ティア 2）、所属機関・大学レベルのシステム（ティア 3）という 3 層構造で構成されている。ティア 2 施設は主に学術利用を優先しているが、産業界との連携や利用も推奨されている。しかし、ティア 2 センターへのアクセスプロセスは複雑で、AI プロジェクトにとっては技術的環境が不慣れであるといった課題が報告されている。国際的な制度としては、米国の Argonne や Oak Ridge 国立研究所の施設を利用できる INCITE プログラムや、欧州の PRACE、ELIXIR、中期予報センター（ECMWF）を通じたアクセスがあるが、これらは競争的なプロセスであり、国内の国家計算施設の代替とはならない。また、英国は欧州の Horizon Europe に準加盟しており、国内の企業や研究者はこのスキームを通じた資金援助やプロジェクトへの参加が可能である。

(3) AI for Science 関連の資源配分状況

AI for Science を支援するため、多額の予算配分が行われている。DSIT は 2025-26 年度に総額 15.1B ポンド（3.17 兆円）の資金を確保しており、公的 R&D 支出は過去最高レベルの 20.4B ポンド（4.28 兆円）に達する見込みである。具体的な資源配分の例としては、がんの早期発見などを目指す EDITH 試験に 11M ポンド（23.1 億円）、最先端 AI の安全性・セキュリティリスクを研究する AI セキュリティ研究所（旧 AI 安全性研究所）への投資、および政府内での AI 活用を推進する「フロンティア AI エグゼンプラー（Frontier AI Exemplars）」基金への 42M ポンド（88.2 億円）の割り当てがある。また、UKRI を通じて AI 研究用計算資源（AI Research Resource）への資金提供も行われている。

(4) HPC・統合基盤の整備状況（計算資源やストレージ等）

英国の現在の計算基盤は、地域や国家レベルでの AI 向け計算能力が他国に比べて低い状況にある。国家的なティア 1 施設である ARCHER2 は、大規模な AI ワークロードに必要な GPU などのアクセラレータを搭載していない。ティア 2 施設には、JADE2 や Baskerville など AI をサポートするシステムが含まれており、これらは合計で約 26PFLOPS のピーク性能を有しているが、既に最大稼働の状態にある。データ基盤については、気候・地球科学用の JASMIN や、高容量ストレージを提供する UK Research Data Facility (RDF) などが整備されている。研究者が扱うデータ量は今後 5 年間で 10 倍に増加すると予想されており、1EB 級のストレージ需要も見込まれている。これに対し、政府はデータセンターを「重要国家インフラ（Critical National Infrastructure）」に指定し、保護を強化している。

(5) 産業界からの投資の枠組み

産業界からの AI 投資を促進するための様々な枠組みが導入されている。2024 年 7 月以降、DSIT は AI 分野で 44B ポンド（9.24 兆円）の民間投資コミットメントを確保した。半導体スタートアップを支援する ChipStart プログラムでは、最初の 2 つのコホートで 40M ポンド（84 億円）以上の民間投資を調達している。また、マンチェスター賞（Manchester Prize）のような賞金制度を通じて AI スタートアップへの資金提供が行われており、クリーンエネルギーシステムのための AI 開発などが促進されている。産業界との協力枠組みとしては、インドとの技術セキュリティ・イニシアチブ（TSI）があり、AI やバイオテクノロジーなどの重要技術分野で、政府・産業界・アカデミア間の協力を推進している。

(6) 今後の展開

英国は、国家 AI 戦略に基づき、10 年間で英国を「AI スーパーパワー」にすることを目指している。今後は、GPU アクセラレータを備え、国際的に競争力のある国家レベルのテ

イア1施設の構築が計画されている。また、2025年には「GOV.UK App」や「Wallet」の提供、マンチェスター・デジタル・キャンパス（Manchester Digital Campus）の設置など、デジタル政府の変革を加速させる予定である。データ活用においては、経済成長のためにデータの力を活用する「データ（利用およびアクセス）法」の施行や、データの相互運用性を高めるための FAIR 原則（検索可能、アクセス可能、相互運用可能、再利用可能）に沿った基準の策定が進められる。計算資源の拡大に加え、研究技術専門職（RTP）の育成やアップスキリングプログラムへの投資を並行して行うことで、AI 研究の潜在能力を最大限に引き出す方針である

2.3.4. スイス

スイス国立スーパーコンピューティングセンター（CSCS）を中心とした計算基盤の現状と今後の計画について、[4][5][6]に基づき記述する。

(1) 計算基盤のユーザ動向と利用実績

CSCS のユーザラボ（User Lab）プログラムには、2,300 人以上のユーザが参加し、130 を超えるプロジェクトが進行している。研究分野は化学・材料科学、物理学、地球・環境科学、生命科学、コンピュータサイエンスと多岐にわたり、関連する出版物の数も年々増加傾向にある。具体的な利用実績としては、スイス気象台（MeteoSwiss）が日次の数値天気予報に CSCS のスーパーコンピュータを利用しているほか、スイス粒子物理学研究所（CHiPP）による LHC データの解析や、ポール・シェラー研究所（PSI）による 10PB を超えるアーカイブデータの管理などが挙げられる。また、チューリッヒ大学（UZH）のように、学内のローカルな HPC サービスを CSCS の共有リソースへ移行して運用する形態も定着している。

(2) 公募・利用制度の詳細

ユーザラボへのアクセスは、科学的な卓越性を基準とした透明性の高い査読（ピアレビュー）プロセスによって管理されている。資源配分には階層（Tier）が設けられており、年間最大 100 万ノード時間までのプロジェクトを対象とする「Tier 1」は CSCS の科学諮問委員会などによって選定され、より大規模な世界中の研究者を対象とした「Tier 0」は欧州レベルの枠組みを通じて公募が行われる。技術的なアクセス面では、標準的な SSH 接続に加えて、HPC リソース管理のための RESTful API である「FirecREST」や、ジョブスケジューラ「Slurm」が提供されている。契約面では、ETH チューリッヒおよび CSCS とパートナー間で締結される共同研究契約（Collaboration Agreement）に基づき、特定のサービス範囲や利用条件、料金体系が明確に定義される。

(3) AI for Science 関連の資源配分状況

2025 年から 2028 年の ERI Dispatch（教育・研究・イノベーションに関する連邦政府の指針）において、「HPCN-28（シミュレーションとデータサイエンスのための科学的ユーザラボ）」が戦略的優先事項として掲げられており、総額 25M スイスフラン（50 億円）の予算が見積もられている。また、データサイエンスおよび AI の科学的サービスへの需要急増に対応するため、EPFL、ETH チューリッヒ、PSI の拠点を統合・拡張する「SDSC+（スイス・データサイエンス・センター）」が計画されており、これには 80M スイスフラン（160 億円）の予算が割り当てられている。インフラの配分優先順位については、ユーザラボとしての使用や気象予測等の国家ミッションが最上位に置かれている。

(4) HPC・統合基盤の整備状況

フラッグシップシステムである「Alps」は、HPE Cray EX スーパーコンピュータを採用しており、従来の HPC の性能とクラウドの柔軟性を融合させた「クラウドネイティブ・アーキテクチャ」を特徴とする。計算資源としては、AMD Milan/Rome を搭載した 1,024 個のマルチコアノードや 144 個の NVIDIA A100 GPU ノードに加え、数千の NVIDIA GraceHopper（GH200）スーパーチップノードが導入されている。ストレージ側面では、約 1TB/s の性能を誇る 100 PiB の大容量ディスクストレージ「Capstor」と、3.2 PiB の高速全フラッシュストレージ「Iopsstor」が整備されている。これらの基盤は Kubernetes や Nomad によってオーケストレーションされ、「vCluster（仮想クラスター）」という論理単位で各ユーザコミュニティに提供されている。

(5) 産業界からの投資の枠組み

CSCS のリソースは、アカデミアだけでなく産業界やビジネス部門のユーザにも広く開放されている。特に SDSC+ は、行政や産業界を含むスイス全土のコミュニティに向けた科学的サービスプラットフォームとして構築が進められている。投資とコスト負担の枠組みについては、特定のプロジェクトのために専用システムを構築する場合、パートナー側が調達、設置、および運用のためのコストを原則として全額負担する仕組みとなっている。

(6) 今後の展開

今後の展望として、HPCN-28 計画では、HPC とクラウドネイティブ技術を組み合わせ、地理的に冗長化された高度なデータセンターインフラへのアップグレードを目指している。また、共通インフラ、IaaS、PaaS、および DevOps 技術を統合することで、研究の初期段階から解決策の提示までの時間を短縮する「Science as a Service（サービスとしての科学）」という概念の実現を推進している。SDSC+においては、全学問分野に共通する「水平的」な標準サービスと、特定の研究ドメインに特化した「垂直的」な専門サービスを組み合わせた体系的な提供が計画されている。

2.3.5. イタリア

ITALIA AI Factory のサービスポートフォリオにおける計算基盤の現状と今後の計画について、[7]に基づき記述する。

(1) 公募・利用制度の詳細

計算資源へのアクセスは、主に ITALIA、ISCRA、または EuroHPC JU の公募を通じて提供される。利用者はスタートアップ、中小企業（SME）、大規模企業、研究機関、公共機関などを対象としており、計算資源の無料提供を含むオープンコールが用意されている。実際の利用に当たっては、まず専門家との「アセスメント・ミーティング」が行われる。この 2 時間のセッションを通じて、ユーザのユースケース、課題、目的が議論され、その結果として、ユーザのニーズに合わせた最適なサービスパッケージや具体的な支援内容をまとめた「テーラード・サポート・レポート」が作成される。サービスパッケージは、ニーズや資源の需要レベルに応じて 3 つのサイズで提供される。

(2) HPC・統合基盤の整備状況

基盤となるインフラには、EuroHPC JU のスーパーコンピュータ「LEONARDO」、AI 機能を強化したアップグレード版「LISA」、クラウド基盤の「GAIA」、およびサイバーセキュリティ専用システム「MEGARIDE」が含まれる。これらのインフラは既に数千の GPU をエコシステムに提供している。また、データの管理・活用を支える基盤として、API 経由で GPU 支援による並列分析が可能な「ハイパフォーマンス・データレイク」や、科学シミュレーションデータの保存・管理に特化した「シミュレーション・データレイク」が整備されている。更に、気象データの取得・配信を行う「MeteoHub」などのプラットフォームも統合されており、多様なデータパイプラインの構築が可能となっている。

(3) AI for Science 関連の資源配分状況

科学研究の推進に向けた特定のサービスが展開されている。地球物理学分野では、地震学、火山学、津波科学などのシミュレーションデータを管理し、FAIR 原則（検索可能、アクセス可能、相互運用可能、再利用可能）に則ったデータ共有を支援するインフラが提供されている。これにより、大規模なシミュレーションデータと実世界の観測データを結びつけたデジタルツインの開発が可能になる。また、人文科学や文化遺産分野、創造的文化産業における研究を支援するため、AI を用いた古文書の翻刻やアーカイブ資料の復元、メタデータ付与などの専門的なツールとワークフローが提供されている。気象分野においても、エネルギー産業や防災に不可欠な高精度の気象データへのアクセス支援が行われている。

(4) 産業界からの投資の枠組み

本プロジェクトは、イタリア大学・研究省（MUR）および国家サイバーセキュリティ庁（ACN）による資金提供を受けている。また、欧州共同事業「EuroHPC JU」を通じた欧州委員会からの共同出資（Grant Agreement No. 101234224）に加え、オーストリア、スロベニア、Cineca、エミリア＝ロマーニャ州、イタリア国立核物理学研究所、イタリア国立人工知能研究所、ブルーノ・ケスラー財団、イタリア気象庁などの多様な機関からの寄付によって構成されている。この枠組みは、インフラとサービスを通じて、イタリアおよび欧州の AI 環境を変革し、イノベーションと競争力を促進することを目的としている。

(5) 今後の展開

インフラ面では、間もなく AI に最適化されたスーパーコンピュータが導入され、既存のコンピューティング資源が更に強化される予定である。また、サービス面では、今後数ヶ月以内に、GPU を備えた安全なクラウド環境で合成データ生成サービスが利用可能になる予定である。プロジェクト全体として、AI テクノロジーへの意識、アクセシビリティ、信頼を促進することで、産業や社会の広範な分野における AI の普及と長期的なインパクトの創出を目指している。

2.3.6. フランス

フランスにおける AI 関連の計算基盤、投資、および今後の展開について、[8]をもとに項目ごとに内容をまとめる。

(1) 計算基盤のユーザ動向・利用実績

フランスの公共スーパーコンピュータは、研究および産業プロジェクトにおいて重要な役割を果たしている。特に「ジャン・ザイ（Jean Zay）」スーパーコンピュータは、2018 年以来、1,200 件以上の AI プロジェクトを支援してきた実績を持つ。その中には、1,000 人以上の欧州の研究者が参加した Hugging Face（ハギング・フェイス）調整の「BigScience（ビッグサイエンス）」プロジェクトも含まれている。また、産業界での利用も進んでおり、ルノー（Renault）は製造チェーン全体に AI を導入して物流の最適化や製品設計の効率化を図っており、フランス国鉄（SNCF）は車両の故障検知やリアルタイムのチャットボットによる利用者支援に AI を活用している。メディア企業の Brut（ブリュット）も、情報の信頼性向上と制作の効率化のために生成 AI をプロセス全体に統合している。

(2) 公募・利用制度の詳細

計算資源へのアクセスを容易にするため、欧州レベルのイニシアチブである EuroHPC JU AI Factory を通じた枠組みが構築されている。このプログラムは、スタートアップや

中小企業、研究者がスーパーコンピュータ、技術サポート、専用トレーニングにワンストップでアクセスできるハブ・ネットワークを構築することを目指している。フランスでは、Genci（ジェンシ）と Inria（インリア）がこの AI Factory の国内誘致を主導している。また、「AI for Efficiency」という公募（意向表明）を通じて、AI アクション・サミットで発表される優れた AI プロジェクトの選定も行われており、600 件以上のユースケースが記録されている。更に、France 2030 投資計画を通じて、公共および民間の研究開発に対する直接支援も実施されている。

(3) AI for Science 関連の資源配分状況

科学研究における AI の強化に向けて、フランスは「AI クラスタ（AI Clusters）」と呼ばれる 9 つの卓越した教育・研究拠点を設置している。このプログラムには 360M ユーロ（666 億円）の予算が割り当てられており、大学や学校、企業のトレーニングと研究を強化し、世界トップクラスの教育機関を育成することを目指している。また、戦略的な科学分野にリソースを集中させており、特にヘルスケア分野では、利害関係者を結集させる「AI ヘルス・キャンパス（AI Health Campus）」プロジェクトを中心としたガバナンスモデルが検討されている。

(4) HPC・統合基盤の整備状況

フランスは、戦略的自律性の確保に向けて、3 つの主要なスーパーコンピュータの強化を続けている。

Jean Zay（ジャン・ザイ）：フランスで最も強力なスーパーコンピュータであり、拡張によって累積演算能力は 125.9PFLOPS、1,400 基以上の H100 GPU を搭載するに至っている。

Adastra（アダストラ）：性能とエネルギー効率に優れ、1W 当たり 69.1 GFLOPS という性能で、世界の Green500 で 3 位にランクインしている。

Alice Recoque（アリス・ルコク）：次世代の欧州エクサスケール・スーパーコンピュータであり、NVIDIA H100 GPU 25,000 基相当の演算能力を備える予定である。

これらに加え、フランス全土にはデータセンターに適した 35 の候補地が特定されており、その総面積は 1,200 ヘクタールを超える。また、フランスは EU に陸揚げされる海底ケーブルの 3 分の 2 を占めるなど、高度に接続された通信網も保有している。

(5) 産業界からの投資の枠組み

産業界からの投資を促進するため、フランスは強力な財政・税制上の優遇措置を講じている。年間 7B ユーロ（1.30 兆円）規模の研究税額控除（Research Tax Credit）や、R&D に投資するスタートアップ向けの「若手革新企業（Young innovative company）」ステータスによる税制・社会保障費の免除がその代表例である。また、アラブ首長国連邦（UAE）

との共同枠組み合意により、AI に特化した 1GW 規模のキャンパス構築に向けて最大 50B ユーロ（9.25 兆円）の投資が見込まれている。民間企業では、アマゾン（Amazon）がクラウド基盤拡張に 1200M ユーロ（2,220 億円）以上、ブルックフィールド（Brookfield）が AI インフラに 2000M ユーロ（3,700 億円）、マイクロソフト（Microsoft）が 4000M ユーロ（7,400 億円）の投資を発表している。

(6) 今後の展開

AI 戦略の第 3 フェーズでは、戦略的インフラの展開支援とともに、企業や公共サービスにおける AI の広範な導入を促進する。具体的には、2030 年までに年間 10 万人の AI 人材を育成する目標を掲げている。規制面では、データセンタープロジェクトを「国家的に重大な関心を持つプロジェクト（PINM）」の対象に含める新法案の導入により、許可手続きの大幅な短縮（9～18 ヶ月の削減）を目指している。また、2025 年 1 月に設立された国立 AI 評価・セキュリティ研究所（INESIA）を通じて、AI モデルの安全性評価やシステムリスク分析を行い、信頼できる AI の構築を主導していく方針である。

2.3.7. フィンランド

フィンランドの LUMI スーパーコンピュータにおける AI 関連の状況や基盤整備、利用制度などについて、[9]に基づきまとめる。

(1) 公募・利用制度の詳細

LUMI のユーザは、LUMI-BE または EuroHPC JU のチャンネルからプロジェクト申請が可能である。利用目的に応じて複数のチャンネルが設定されており、プロジェクト申請の準備のためのベンチマーク（通常 4 ヶ月）、ソフトウェア開発（1 年）、通常プロジェクト（1 年）、そして非常にスケーラブルなコードと大規模シミュレーションを対象とした EuroHPC JU エクストリームスケールプロジェクト（1 年）に分かれている。審査に関しては、EuroHPC JU のプロジェクトでは学術的および技術的レビューの両方が実施されるが、LUMI-BE プロジェクトでは、対応する科学プロジェクトが既にレビュー済であれば技術的レビューのみが行われる。なお、研究成果を公開しない非公開研究についても、後述の産業界向け枠組みを通じてアクセスが可能となっている。

(2) HPC・統合基盤の整備状況

LUMI は、HPC、AI、およびハイパフォーマンズ・データ分析（HPDA）の融合を可能にする Tier-0 の GPU 加速型スーパーコンピュータとして設計されている。計算資源の核となる GPU パーティション（LUMI-G）は、AMD Instinct GPU を搭載し、490 PFLOPS 以上の FP64 ベクトル性能を誇る。一方、CPU パーティション（LUMI-C）は約 260,000 個の AMD EPYC CPU コアを備えており、これら異なるリソースを単一の実行内で組み合

わせることも可能である。ストレージ基盤については、Lustre ベースの並列ファイルシステムとして、ディスクベースの LUMI-P と、極めて高い I/O 帯域 (2 TB/s) を持つフラッシュベースの LUMI-F が整備されている。更に、データの共有やステージングに適した 30 PB の Ceph オブジェクトストレージ (LUMI-O) も提供されている。ソフトウェア面では、AI 開発を支援するために PyTorch や TensorFlow などのコンテナ利用が推奨されており、そのためのツール (lumi-container-wrapper や container) や、事前ビルド済の AI コンテナが用意されている。

(3) 産業界からの投資の枠組み

企業ユーザに対しては、そのニーズに応じた複数の利用モデルが用意されている。まず、大学や研究機関といったアカデミックパートナーとの共同研究プロジェクトがあり、その成果を公開・出版する場合は無償で利用できるが、成果を企業が独占する場合は有料となる。また、完全な有料利用 (Pay per use) モデルも存在し、この場合は成果を公開する必要はない。更に、LUMI の適合性を事前に評価するための「Try&Buy」プログラムが提供されており、準備用プロジェクトと同等の限定的な計算・ストレージリソースを無償で試用することが可能である。ただし、これらはいずれも研究開発を目的としたものであり、商用のプロダクション実行を目的としたものではない点に注意が必要である。

(4) 今後の展開

今後の展望として、システムの高度な活用を支えるサポート体制の強化と教育機会の提供が計画されている。サポート面では、EuroHPC JU センター間で高度なサポートネットワークを構築する「EPICURE プロジェクト」への参加が挙げられる。教育面では、LUMI コンソーシアムのメンバであるベルギー向けの導入トレーニングの実施や、将来的には LUMI 上での AI 活用に特化したアプリケーション向けトレーニングの開催も検討されている。また、技術的な将来像として、AMD の次世代 APU (MI300A など) による計算基盤の更なる発展の可能性も示唆されている。

2.3.8. ANL (米国)

アルゴンヌ国立研究所 (ANL) およびアルゴンヌ・リーダーシップ計算施設 (ALCF) の [10][11]に基づき、AI に関連する計算基盤の利用状況や整備状況、制度について以下にまとめる。

(1) 計算基盤のユーザ動向・利用実績

科学研究のためのデータセンターにおける GPU 統合は、2006 年の GPGPU 初期採用から始まり、2023 年から 2024 年にかけてのエクサスケール時代の到来と AI の民主化へと進展している。現在、研究者は LLM や基盤モデルを、膨大なデータセットの分析や複雑な

シミュレーションの解釈・加速、更には新しいモデルを訓練するためのデータ生成に活用している。具体的な利用実績として、ALCF が新たに導入した「Inference Service（推論サービス）」では、初期段階で数十人のユーザが数百万の推論タスクを処理し、数十億のトークンを生成した。また、Llama 3 のような大規模モデルの訓練においては、数千から数万規模の GPU クラスタが利用されているが、ハードウェア故障による頻繁な中断が実環境での課題となっている。

(2) 公募・利用制度の詳細

ALCF の計算資源へのアクセスは、米国エネルギー省（DOE）およびアルゴンヌが支援する、競争的で査読を伴う割当プログラムを通じて提供される。

- ・ INCITE: 大規模で計算集約的なプロジェクトを対象とし、科学・工学上の大きな課題を解決することを目指す。
- ・ ALCC: DOE のミッションを推進するプロジェクトや、リーダーシップ計算資源を利用できる研究者コミュニティの拡大に焦点を当てる。
- ・ Director's Discretionary (DD): リーダーシップ計算の準備や、INCITE/ALCC へのスケーリング、利用効率の最大化を目的としたプロジェクトに割り当てられる。
- ・ Early Science Program (ESP): 新しいスーパーコンピュータの稼働開始前に、そのアーキテクチャや規模に合わせてアプリケーションを準備するために実施される。また、AI Testbed の資源（Cerebras CS-2 や SambaNova 等）についても、DD アワードを通じて割り当てが提供されている。

(3) AI for Science 関連の資源配分状況

2025 年の資源配分実績（ノード時間換算）を見ると、INCITE プログラムでは物理学（40%）が最大で、次いで生物科学（17%）、材料科学（15%）となっている。一方、ALCC プログラムでは化学（35%）が最も多く、物理学（21%）、工学（14%）、エネルギー技術（13%）と続く。AI に特化した成果では、タンパク質デザインのためのマルチモーダル・フレームワーク「MProt-DPO」の訓練において、Aurora を用いて混合精度で 5.57EFLOPS の性能が達成されている。また、地球システムモデル「AERIS」の訓練では、12 万個以上の GPU タイルを使用し、混合精度で 10.21 EFLOPS の持続性能を記録した。

(4) HPC・統合基盤の整備状況

2025 年 1 月にエクサスケール・スーパーコンピュータ「Aurora」が導入された。Aurora は 2 EFLOPS のピーク性能を持ち、10,624 ノード、63,744 個の GPU（Intel Data Center GPU Max シリーズ）を備えた、世界でも有数の AI 性能を誇るシステムである。ストレージ面では、分散非同期オブジェクトストレージ（DAOS）が採用され、220PB の容量と極めて高いスループットを実現しており、大規模な AI 訓練時のチェックポイント作

成やデータ管理を支えている。加えて、AI Testbed として、Cerebras CS-2/CS-3、SambaNova Cardinal SN30/Metis SN40L、Graphcore Bow POD-64、GroqRack といった次世代 AI アクセラレータ群が整備されている。更に、クラウドのような感覚で LLM や基盤モデルを利用できる「ALCF Inference Service」も展開されている。

(5) 産業界からの投資の枠組み

ALCF のチームは産業界とのパートナーシップを促進しており、その一環として JPMorgan Chase や Qubit Pharmaceuticals、GE Aerospace Research といった企業が、DD アワードや INCITE、ALCC を通じて計算資源の割り当てを受けて研究開発を行っている。Aurora の構築に当たっては、Intel や HPE といったベンダーとの密接な協力体制が取られた。

(6) 今後の展開

ALCF は、Aurora を大幅に上回る性能を持つ次世代リーダーシップシステム「ALCF-4」の計画を進めており、HPC、AI、データ駆動型アプローチの更なる統合を目指している。また、DOE の「Integrated Research Infrastructure (IRI : 統合研究インフラ)」イニシアチブを通じて、高度な実験施設 (APS 等) とスーパーコンピュータをシームレスに接続し、リアルタイムでのデータ解析や実験制御を可能にする取組を Nexus エフォートとして推進している。更に、科学全般の自律的発見を加速させるための大規模基盤モデル「AuroraGPT」プロジェクトも進行中である。

2.3.9. ORNL (米国)

オークリッジリーダーシップ計算施設 (OLCF) の資料[12]に基づき、AI に関連する計算基盤の利用実績や整備状況、将来の展開について以下に記す。

(1) 計算基盤のユーザ動向・利用実績

2024 暦年において、OLCF は 2,072 人のユーザと 639 のプロジェクトを支援した。主要な計算資源であるエクサスケール・スーパーコンピュータ「Frontier」のシステム利用率は 86.66%に達し、前世代の「Summit」は 73.34%であった。ユーザ動向としては、従来のモデリングやシミュレーションに加え、AI、機械学習 (ML)、ビッグデータ分析を活用した科学的成果が目立っている。特に AI 手法と混合精度演算は、世界的に重要な計算キャンペーンにおいて不可欠なものとなっている。実績面では、Frontier を用いた AI 基盤モデルによる地球システム予測プロジェクトが HPCwire の賞を受賞したほか、Frontier と Summit を活用した気候エミュレータの開発や、AI モデルを用いたタンパク質設計などの大規模な研究が行われた。また、Frontier の混合精度 HPL (HPLMxP) ベンチマークでは 11.39EFLOPS を達成し、AI ワークロードに適応する能力を示している。

(2) 公募・利用制度の詳細

OLCF の計算資源は、主に「INCITE」(60%)、「ALCC」(30%)、「ディレクター裁量 (DD)」(10%) という 3 つのプログラムを通じて配分される。2024 年にはこれに加え、Summit の運用延長に伴い「SummitPLUS」という独自の公募プログラムが実施された。このプログラムは、計算準備の整ったプロジェクトに資源を提供し、統合研究インフラ (IRI) プロジェクトや国家 AI 研究リソース (NAIRR) のパイロットプログラムを支援する役割も果たした。DD プログラムについては、INCITE や ALCC への応募準備、非伝統的な研究分野の開拓、およびエネルギー省 (DOE) やオークリッジ国立研究所 (ORNL) の戦略目標に沿った研究開発パートナーシップの支援を目的としている。

(3) AI for Science 関連の資源配分状況

AI for Science に関連して、Frontier の資源はタンパク質設計のための LLM トレーニングや、気候変動予測、材料科学における AI 活用プロジェクトなどに配分されている。また、Frontier 上で動作する対話型 AI アシスタント「chatHPC」の開発が進められており、科学者が複雑なデータセットから洞察を抽出したり、計算ワークフローのトラブルシューティングを行ったりすることを支援する仕組みが整えられつつある。更に、NAIRR パイロットとの提携を通じて、Frontier のセキュアな環境下で合成データ生成技術を開発し、機密性の高い大規模な実データへの段階的なアクセスを可能にする取組も行われている。

(4) HPC・統合基盤の整備状況

計算資源としては、世界初のエクサスケール・システムである「Frontier」(HPE Cray EX) が主力として運用されており、9,856 のコンピュータノードを備えている。一方、長年貢献した「Summit」(IBM AC922) は 2024 年 11 月に退役した。ストレージ面では、Lustre ベースの「Orion」や GPFS ベースの「Alpine2」が運用されており、長年使用された HPSS に代わり、ディスクとテープを組み合わせた新しい多層ストレージシステム「Kronos」が導入された。統合基盤としては、異種計算・データ資源をシームレスに連携させる「高度計算エコシステム (ACE)」イニシアチブが推進されており、エネルギー科学ネットワーク (ESnet) と統合されたテストベッドの展開や、実験施設との双方向データストリーミング (DS2HPC) の実現に向けた技術開発が行われている。

(5) 産業界からの投資の枠組み

産業界との連携については「ACCEL」プログラムを通じて推進されており、2024 年には 38 の産業プロジェクトが実施された。これには Pratt & Whitney、Boeing、Lockheed Martin といった大手企業から、AI スタートアップの Atomic Canyon や量子計算分野の IonQ といった中小企業までが含まれる。産業ユーザは INCITE、ALCC、DD、

SummitPLUS の各枠組みを通じて計算資源にアクセスしており、2024 年には Summit と Frontier の合計計算時間の約 14%を産業プロジェクトが占めた。具体的な成果として、RTX 社による Summit を用いたチタン合金のシミュレーションなどが挙げられ、物理的な試験期間の大幅な短縮とコスト削減に寄与している。

(6) 今後の展開

次世代システム「OLCF-6」に向けた準備が加速しており、提案依頼書（RFP）には AI ワークロードを重視したベンチマーク「FORGE」が組み込まれた。FORGE は科学データセットを用いた LLM トレーニングにおける低精度演算や通信帯域、エネルギー効率を評価するものである。また、量子計算（QC）と HPC の統合も重要な柱となっており、2025 年初頭には「Quantum-HPC グループ」が新設された。2025 年中頃にはハードウェアに依存しないテストベッドとして「Quantum Brilliance」のプロトタイプが設置される予定である。更に、デジタルツインフレームワーク「ExaDigiT」の国際的なコミュニティ形成や、実験施設と HPC をリアルタイムで結ぶ統合研究インフラの高度化も継続して進められる。

2.4. 国内の動向

2.4.1. 情報源

本節では、次の内容を情報源とし、国内の動向として、「AI for Science」に関する内容をまとめた。項目は、国内の計算資源配分、ユーザの分野動向、産業利用状況、データ流通量、政策の特徴、公募状況についてまとめた。

表 2.5 大学の情報基盤センターの情報源

機関名	組織名	リンク
北海道大学	情報基盤センター	https://www.hucc.hokudai.ac.jp/supercomputer/sc-overview/
東北大学	サイバーサイエンスセンター	https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/
筑波大学	計算科学研究センター	https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/supercomputer/
東京大学	情報基盤センター	https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/
東京科学大学	情報基盤センター	https://www.t4.cii.isct.ac.jp/hardware
名古屋大学	情報基盤センター	https://icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/overview.html
京都大学	学術情報メディアセンター	https://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/supercomputer/system/specification
大阪大学	D3 センター	https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/onion/
九州大学	情報基盤研究開発センター	https://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/system/Genkai/hardware/

表 2.6 参考にした国立研究開発法人の情報源

機関名	組織名	リンク
理化学研究所	計算科学研究センター	https://www.r-ccs.riken.jp/fugaku/system/
海洋研究開発機構	地球情報科学技術センター	https://www.jamstec.go.jp/es/jp/system/system.html
産業技術総合研究所	ABCI	https://abci.ai/ja/about_abci/computing_resource.html
国立遺伝学研究所	生命情報・DDBJ センター	https://sc.ddbj.nig.ac.jp/guides/overview/

表 2.7 各大学で公開されている情報（○印は情報あり）

機関名	組織名	公募	利用	資源 配分	スト レージ
北海道大学	情報基盤センター	○	—	○	○
東北大学	サイバーサイエンスセンター	○	—	○	○
筑波大学	計算科学研究センター	○	—	—	○
東京大学	情報基盤センター	○	○	—	○
東京科学大学	情報基盤センター	○	—	○	○
名古屋大学	情報基盤センター	○	—	—	○
京都大学	学術情報メディアセンター	○	○	—	○
大阪大学	D3 センター	○	—	—	○
九州大学	情報基盤研究開発センター	○	—	○	○

国内の情報については、一般財団法人 高度情報科学研究機構（以下「RIST」という。）により、HPCIおよびスーパーコンピュータ「京」・「富岳」の情報が[1]に掲載されている。したがって、本章の以下の節では、[1]のまとめ方を基にし、同様の情報が各大学で情報が公開されているかどうかを確認し、まとめたものである。いずれの節も冒頭に「HPCI（RIST）で公表された情報」として図表を示した。

[1] https://www.hpci-office.jp/about_hpci/statistics

2.4.2. 産業利用への資源配分

(1) HPCI（RIST）で公表された情報

「富岳」の資源配分が[1]に掲載されている。

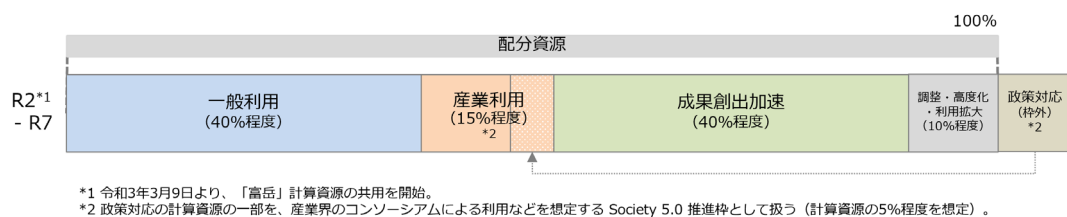


図 2.7 「富岳」の資源配分 [1]

(2) 東京科学大学

(下記情報より抜粋) 東京工業大学 学術国際情報センターでは独自事業として TSUBAME 共同利用制度により、他大学や公的研究機関の研究者を対象とした「学術利用」、民間企業を対象とした「産業利用」にも TSUBAME の計算資源を提供している。産業利用においては、学術利用と同様な成果公開カテゴリに加えて、課題名や課題代表者なども秘匿できる成果非公開カテゴリでの利用も可能である。TSUBAME 共同利用の採択課題により生じた知的財産権は、原則として利用者に帰属する。学外利用者のサポートは共同利用推進室が担当している。

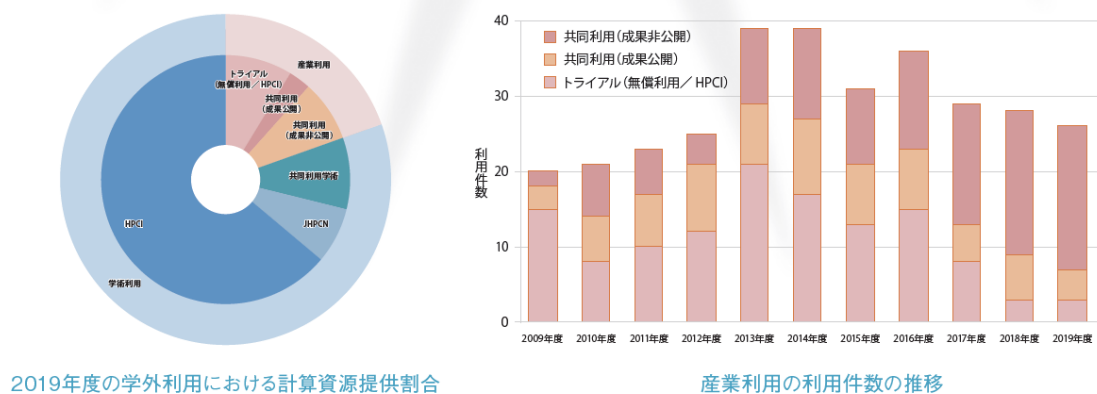


図 2.8 TSUBAME の産業利用の割合 (東京科学大)

出典：https://www.gsic.titech.ac.jp/sites/default/files/GSIC2020_J.pdf

(3) 東北大学

(下記情報より抜粋) 1999 年から本センターで取り組んでいる共同研究数の推移を示す。この図を見ても分かるとおり、サイバーサイエンスセンター共同研究は恒常的に年 10 件程度実施されていることに加えて、近年、JHPCN、HPCI を介した共同研究数が増加していることが確認できる。これは、サイバーサイエンスセンター共同研究を通してユーザアプリケーションが高度化・大規模化し、JHPCN あるいは HPCI 採択課題へとステップアップしているためであり、継続的な高速化支援活動が一定の成果を挙げていることがわかる。また、継続的な産学連携に基づく共同研究を実施し、その成果を広く社会に還元している。

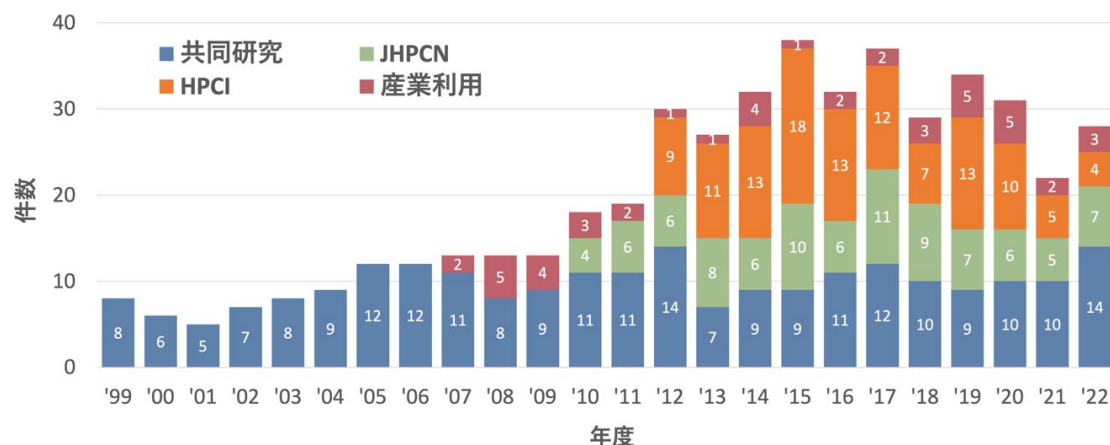


図 2.9 採択課題の産業利用の割合（東北大学）

出典：https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/sscc/tuning-08/3_chapter2.html

2.4.3. 産業利用の状況

(1) HPCI（RIST）で公表された情報

京・富岳への定期募集における採択課題参加企業数の推移が[1]に掲載されている。

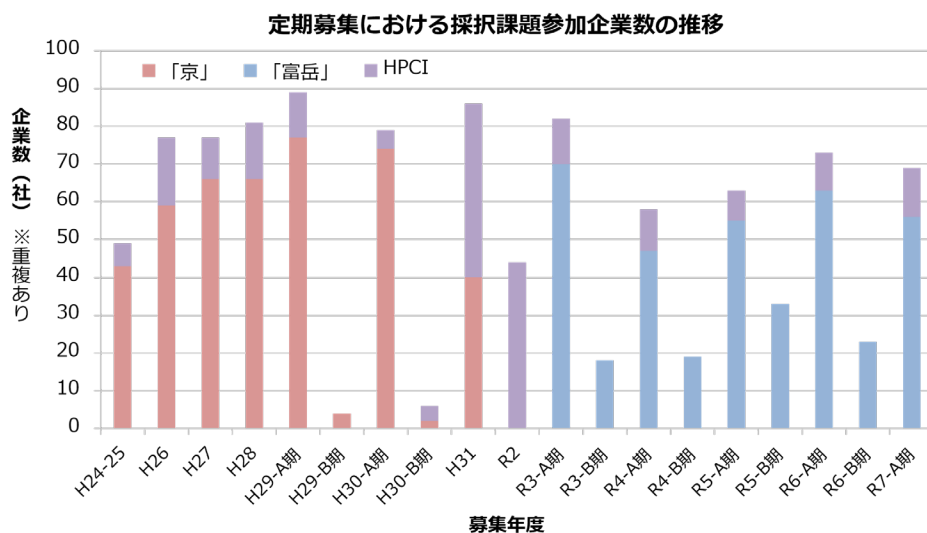


図 2.10 京・富岳への定期募集における採択課題参加企業数の推移 [1]

(2) 北海道大学 民間企業等利用 成果公開

北海道大学における成果公開型の民間企業等利用例を示す。

表 2.8 民間企業等利用の成果公開（北海道大学）

年度	企業名	課題名
令和 5 年度	アズビル株式会社	調節弁におけるテーパー形状穴の流体現象に関する研究
	村田製作所	全固体電池向け高容量活物質の開発
令和 4 年度	アズビル株式会社	調節弁の騒音現状に関する研究
令和 2 年度	アズビル株式会社	調節弁の流量特性と騒音に関する研究
	パナソニック株式会社	固体電解質・電極活物質間のヘテロ固固界面におけるイオン伝導と劣化の研究
平成 31・令和元年度	日本自動車工業会	先端スーパーコンピュータを活用した自動車先端 CAE の開発
	アズビル株式会社	調整弁の流量特性と騒音に関する研究

(3) 筑波大

令和 4 年度までは下記の情報が年報に記載されているが、それ以降は年報への掲載なしとなっている。民間機関からの参加は数%である。

稼働状況	Cygnus	Oakforest-PACS
使用者の所属	年間利用者数	年間利用者数
学内（法人内）	170	142
国立大学	85	100
公立大学	0	1
私立大学	29	10
大学共同利用機関法人	7	12
独立行政法人等公的研究機関	22	17
民間機関	6	12
外国機関	14	4
その他	18	4
合計	351	302

図 2.11 学際共同プログラムおよび一般利用の参加状況（筑波大学）

出典：https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/wp-content/uploads/sites/14/annualreport2021_all.pdf

(4) 東京科学大学

東京科学大学（旧東京工業大学）は初代の Tsubame 時代から産業利用には力を入れており、下記の情報が年報等で公開されている。また、産業でのテーマおよびテーマ未公

表の企業名も掲載されている。

利用区分 / 年度		2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	合計
学術利用	HPCI	-	-	-	-	-	6	5	10	14	5	9	12	16	14	8	10	10	119
	JHPCN	-	-	-	4	6	5	11	10	10	12	11	15	14	8	7	6	7	126
	有償利用	-	-	1	4	9	14	17	22	23	25	23	27	25	28	30	28	26	302
産業利用	無償/HPCI	11	15	15	8	10	12	21	17	13	15	8	3	3	1	1	1	0	154
	有償利用	公開	-	-	3	6	7	9	8	10	8	5	6	4	5	2	1	0	82
	非公開	-	-	2	7	6	4	10	12	10	13	16	19	19	20	14	12	10	174

図 2.12 課題採択数（東京科学大学）

出典：<https://www.gsic.titech.ac.jp/sites/default/files/R6kobo3.pdf>

表 2.9 成果公開型 産業利用 令和 7 年度採択利用課題一覧（東京科学大学）

会社名	課題名
Axelidea 株式会社	特許情報により学習した特化型 AI の研究
Sakana AI 株式会社	AI エージェントの基盤技術に関する研究開発
株式会社デンソーアイティラボラトリ	自動運転 AI の実現にむけた超軽量特徴点マッチング技術の確立
株式会社 CoeFont	深層学習を用いたリアルタイム AI 音声合成プラットフォームの技術開発
JT 生命誌研究館	クモ胚に基づく発生・進化の数理解析
株式会社 Quemix	有機高分子材料の量子化学的研究
アヘッド・バイオコンピューティング株式会社	IT 創薬向け並列計算化学シミュレーション手法の開発
株式会社アラヤ	EEG を用いた大規模 Brain Computer Interface の開発
住友金属鉱山株式会社	機械学習と第一原理計算による固体 NMR スペクトル予測
株式会社クレハ	機械学習ポテンシャルを用いた有機無機界面に関する分子動力学シミュレーション
株式会社 DubGuild	感情豊かな音声合成技術の開発

表 2.10 成果非公開型 産業利用 令和 7 年度採択利用課題（東京科学大学）

大鵬薬品工業株式会社、エトリア株式会社、株式会社 MQue、東芝デジタルソリューションズ株式会社、JSR 株式会社、中外製薬株式会社、中外製薬株式会社、住友重機械工業株式会社、アリヴェクシス株式会社、太陽誘電株式会社、住友資源開発株式会社、協和キリン株式会社、千代田化工建設株式会社、田中貴金属工業株式会社、株式会社クレハ中央研究所、株式会社 ZENKIGEN、株式会社本田技術研究所、曙ブレーキ工業株式会社、日鉄ケミカル&マテリアル株式会社、株式会社 CeSPIA、アステラス製薬株式会社

(5) 九州大学

九州大学情報基盤研究開発センター民間利用は、「成果公開」制度であり、下記の情報が公開されている。

表 2.11 民間利用（九州大学、2024 年度）

課題名	企業名
リチウムイオン電池内の電極電解液反応モデルの検討	トヨタバッテリー株式会社
日英マルチリンガル文表現の構築	株式会社レトリバ
ものづくりに（半導体材料）、ガラス材料）に適した第一原理計算の比較検討	住友電気工業株式会社

出典：https://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/service/minkan/minkan_report.html

2.4.4. 分野別のユーザ動向

(1) HPCI（RIST）で公表された情報

「富岳」採択課題数の分野別分布が[1]に掲載されている。

採択課題数の分野別分布（累計）

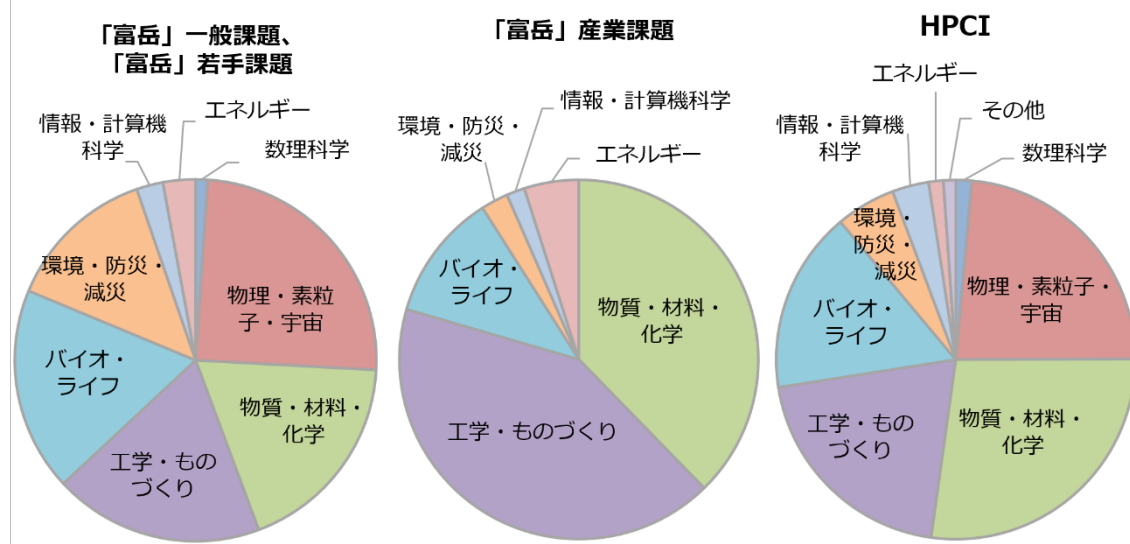


図 2.13 「富岳」採択課題数の分野別分布 [1]

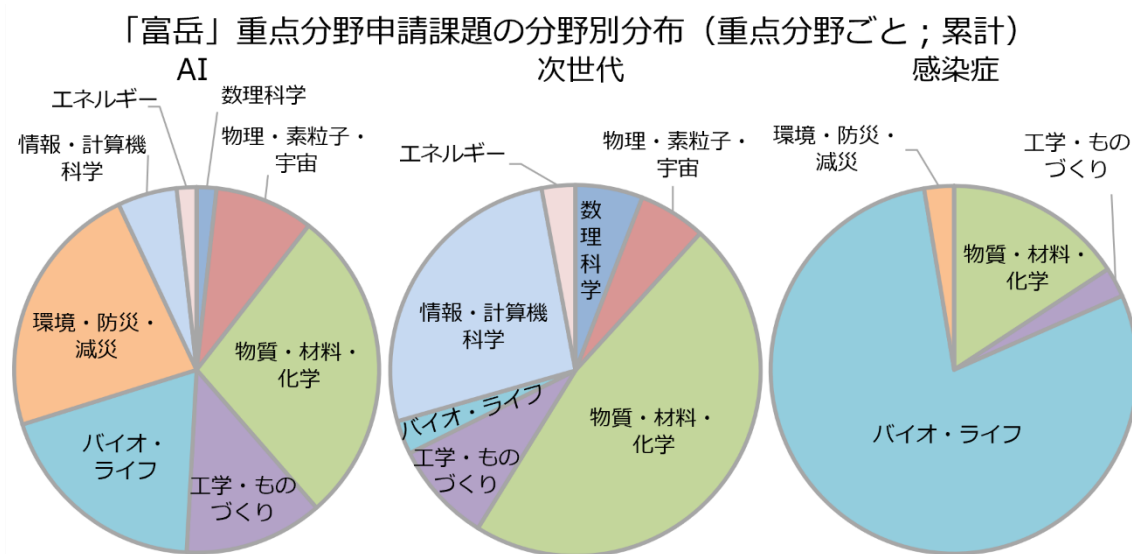


図 2.14 「富岳」重点分野申請課題の分野別分布 [1]

(2) 東京大学

東京大学の利用者情報（計算資源割合）に関しては、2020 年から継続的に同じ形式で各種の資料で公開されている（年報には記載されていないが、いくつかの講演会で中島研吾教授が発表）。

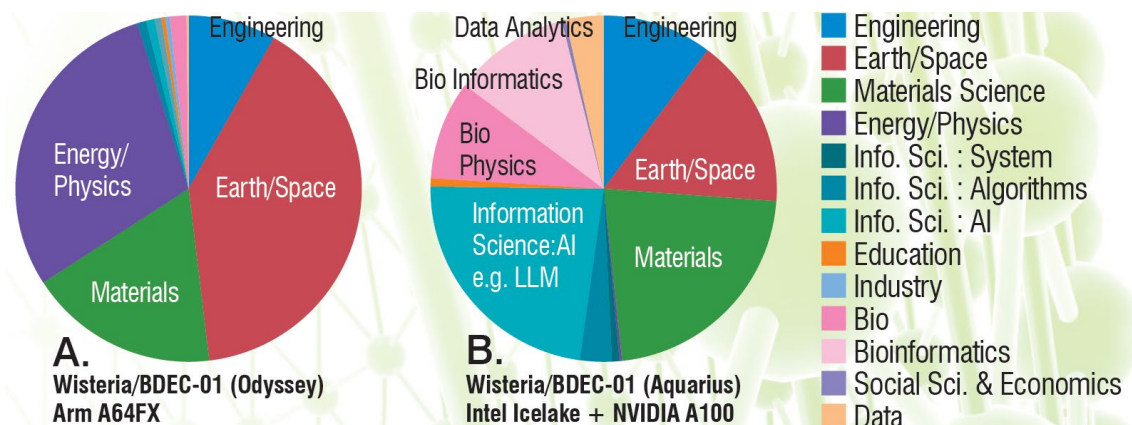
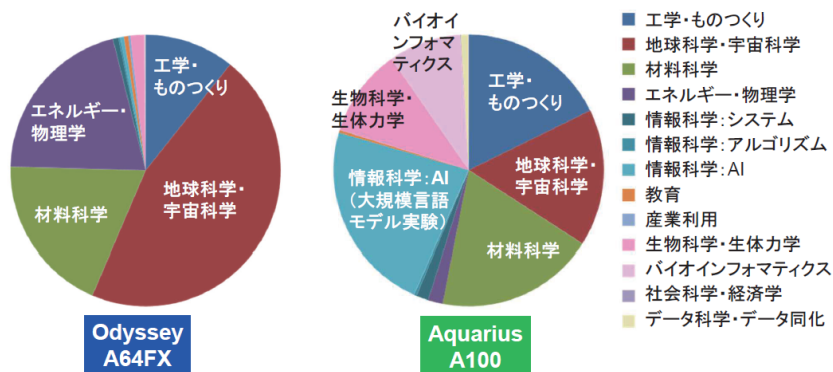


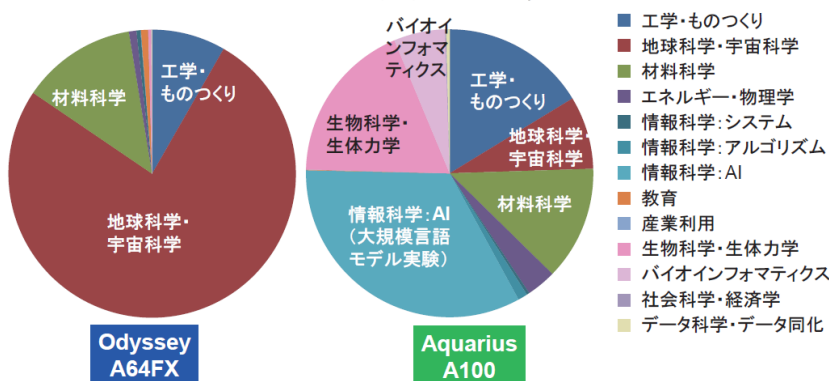
図 2.15 分野別計算資源利用割合（東京大学、2023 年度）

出典：https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/SDS_2024.pdf

2024年度分野別計算資源利用割合 Wisteria/BDEC-01 ■汎用CPU, ■GPU



2025年度分野別計算資源利用割合(4-9月) Wisteria/BDEC-01 ■汎用CPU, ■GPU



2025年度分野別計算資源利用割合(4-9月) Miyabi ■汎用CPU, ■GPU

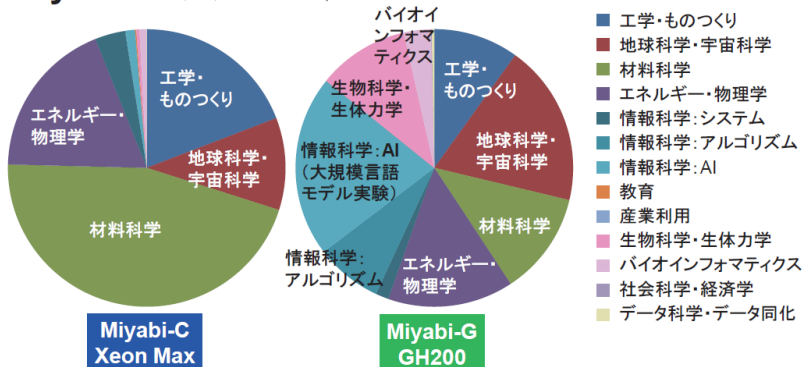


図 2.16 分野別計算資源利用割合（東京大学、2024 年度と 2025 年度上期）

（出典：2025 年 12 月 19 日 アドバンスシミュレーションセミナー講演資料）

(3) 筑波大学

定期的に公開されている資料には掲載がないが、センターの広報誌に 2022 年以前の分野別採択課題が掲載されている。

学際共同利用プログラム採択件数(2010年度以降)

年度	採択件数	計算機システム
2010年度	24件	PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST
2011年度	31件	PACS-CS, T2K-Tsukuba, FIRST
2012年度	48件	T2K-Tsukuba, HA-PACS
2013年度	59件	T2K-Tsukuba, HA-PACS
2014年度	41件	HA-PACS, COMA
2015年度	51件	HA-PACS, COMA
2016年度	62件	HA-PACS, COMA
2017年度	61件	HA-PACS, COMA, Oakforest-PACS
2018年度	67件	COMA, Oakforest-PACS
2019年度	78件	Oakforest-PACS, Cygnus
2020年度	83件	Oakforest-PACS, Cygnus
2021年度	75件	Oakforest-PACS, Cygnus
2022年度	73件	Cygnus, Wisteria/BDEC-01(Odyssey)

2022年度応募課題件数の分野別割合

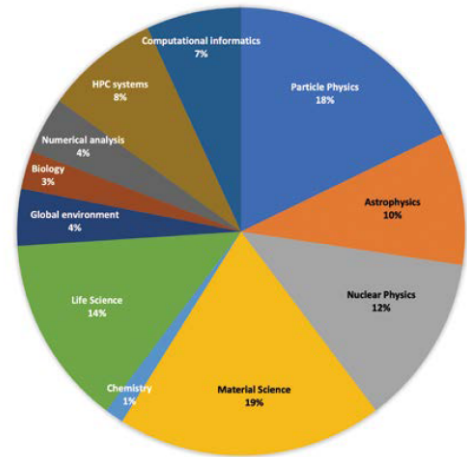


図 2.17 学際共同プログラム採択課題の分野別分布（筑波大学）

出典：

<https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/wp-content/uploads/sites/14/2024/12/59389573a5d8658b7ae9c2abcc61d125.pdf>

(4) 京都大学

京都大学では、毎年の年報（京都大学 情報環境機構年報 自己点検評価報告書）に、ユーザ数およびアプリケーションの利用状況が公開されている。アプリケーション利用状況から、利用分野を推測できる。現在は 2024 年度まで公開されている。

表 3.3.5 利用者の新規および継続申請内訳

	2020 年	2021 年	2022 年	2023 年	2024 年
新規利用者	572	457	331	633	741
継続利用者	1,063	1,135	1,092	881	1027
総計	1,635	1,592	1,423	1514	1768

図 2.18 ユーザ数（京都大学）

出典：https://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/sites/default/files/2025-11/iimc_nenpou2024.pdf

表 3.3.7：アプリケーションの利用状況

分野	アプリケーション	システム A		システム B		システム C		システム G	
		利用件数	利用者数	利用件数	利用者数	利用件数	利用者数	利用件数	利用者数
可視化・図形処理	AVS	—	—	15	5	0	0	0	0
	Tecplot	—	—	445	6	0	0	7	1
	IDL	—	—	927	15	0	0	0	0
	ENVI	—	—	36	9	0	0	0	0
数式処理	Maple	—	—	26	3	0	0	0	0
	Mathematica	—	—	11,886	10	0	0	4	2
技術計算	MATLAB	—	—	381	6	0	0	0	0
計算科学	Gaussian09	5490	2	73	5	0	0	0	0
	Gaussian16	174,965	25	237,398,184	75	2,910	2	4,393	4
	GaussView	0	0	2,811	25	0	0	229	3
構造解析	MSC Nastran	—	—	116	1	0	0	0	0
	Adams	—	—	0	0	0	0	0	0
	Marc	—	—	8,781	36	0	0	18	1
	Marc Mentat	—	—	5,240	35	0	0	195	3
	Patran	—	—	2,560	6	0	0	0	0
	LS-DYNA	—	—	292	9	0	0	0	0
	ANSYS	—	—	2,096	8	49	1	3,887	5

図 2.19 アプリケーションの利用状況（京都大学）

出典：https://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/sites/default/files/2025-11/iimc_nenpou2024.pdf

(5) 名古屋大学

名古屋大学からは古い情報（2020 年の情報）しかないが、講演で公表されたデータを下記に示す。

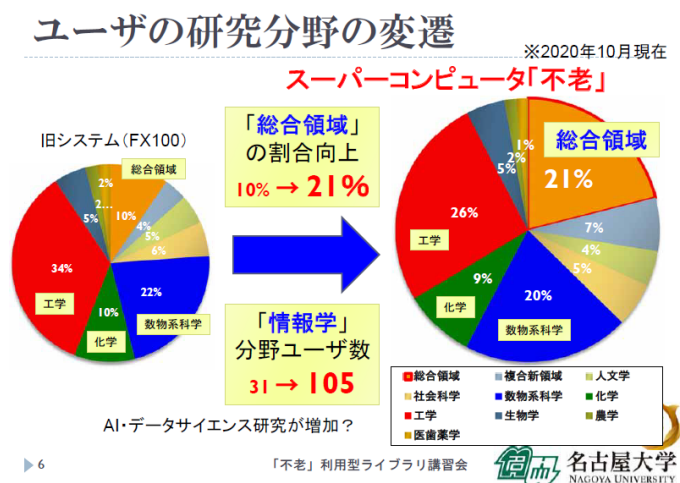


図 2.20 利用ユーザの分野別分布（名古屋大学、2020 年）

出典：https://icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/course/pdf/20210705_library.pdf

(6) 公益財団法人計算科学振興財団

公益財団法人計算科学振興財団（以下「FOCUS」という。）の中期事業計画（令和5年度～9年度）に下記の利用法人数の業種別の割合が示されている。

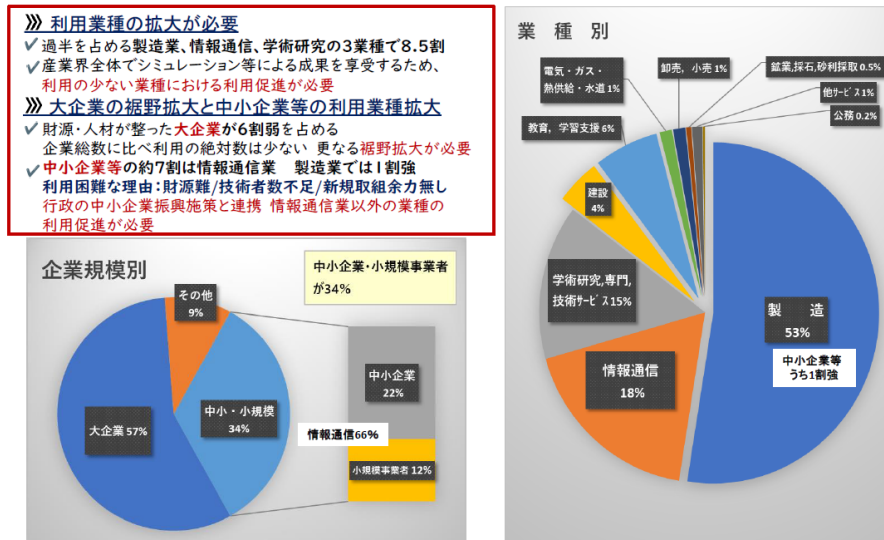


図 2.21 スーパーコンピュータの利用法人の分野別分布（FOCUS）

出典：<https://www.i-focus.or.jp/archives/001/202305/tyukijigyoukeikaku.pdf>

2.4.5. データ流通量

本節は、データ流通量の根拠となるストレージのサイズについてまとめた。また、データ流通量およびストレージサイズに関する海外の動向については、「2.2 欧州データ戦略」の章で記載した。ここでは、データ流通量のデータとして、(1) 各大学等でのストレージ、(2) HPC および AI で利用される巨大なデータ事例、(3) 公募で利用されているデータ容量の3種類の情報を収集した。これらの情報は、通常のスーパーコンピュータとして利用されている状況であり、AI for Science に利用するもののみではなく、従来からの HPC にも利用されているデータである。

(1) 各大学等でのストレージ

各大学および国立研究開発法人で運営され公開されている計算機システムのストレージをまとめ、その機関から出されている公募で利用可能とされているストレージの量をまとめた。

また、国立遺伝学研究所では大量のデータを公開しており、関連するデータも公開している。国立遺伝学研究所から公開されているデータは AI for Science で利用されるデータでもあるため、HP に掲載されたデータ量のグラフも示す。

表 2.12 各大学と研究機関のストレージサイズ

機関名	ストレージ[PB]	公募で利用可能な ストレージ[PB]
北海道大学	16.95	1.5
東北大学	7.0	5.6
筑波大学	12.0	2.0
東京大学	50.0	4.6
東京科学大学	44.2	2.0
名古屋大学	40.0	—
京都大学	40.0	5.0
大阪大学	20.0	10.0
九州大学	55.2	3.2
海洋研究開発機構	60.0	—
産業技術総合研究所	75.0	—
国立遺伝学研究所	68.0	—

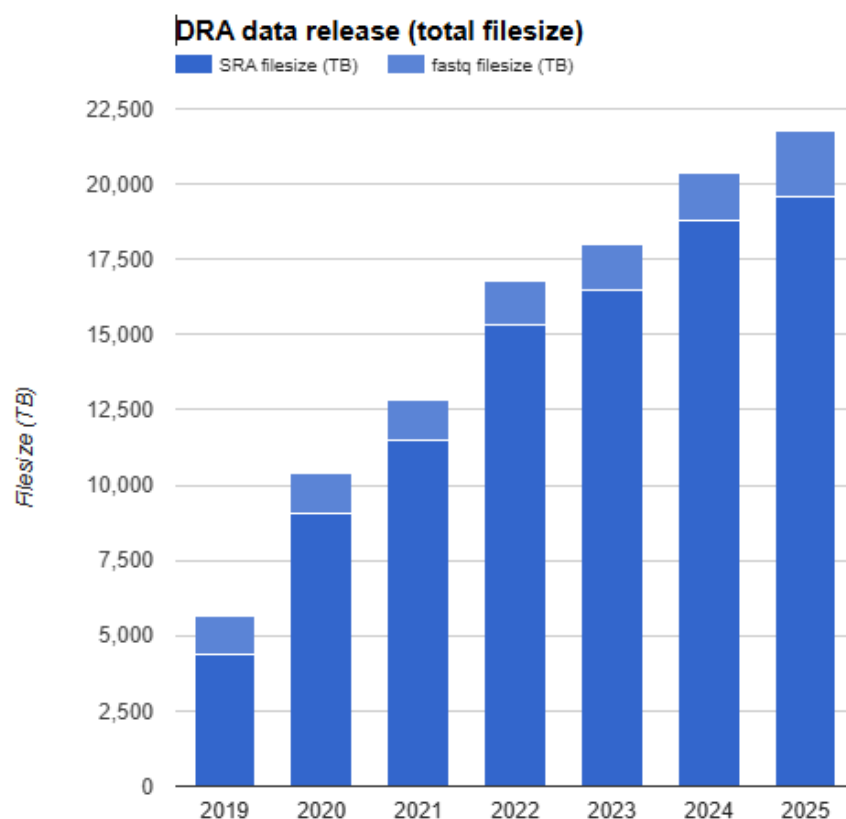


図 2.22 国立遺伝学研究所が公開している国際塩基配列データベースのサイズ

出典： <https://www.ddbj.nig.ac.jp/statistics/index.html>

- ・ DRA : DDBJ Sequence Read Archive
- ・ DDBJ : DNA Data Bank of Japan 遺伝研が運営する国際塩基配列データベース

- ・ SRA : Sequence Read Archive
- ・ fastq : 次世代シーケンサーの塩基配列データ形式

(2) HPC および AI で利用される巨大なデータ事例

本調査の別項目でも示しているが、気象分野のデータは過去の観測データやシミュレーションデータが巨大である。そのサイズを表に示す。今後とも時間の経過および解像度の改善でデータが更に増大する。また、衛星データにも注意が必要である。衛星データは、気象のみならず土地利用にも AI データとして利用される。現在の NASA の衛星データは現在 100PB 程度である。また、現在世界の観測衛星は 1000 機以上であり、例えば、日本の観測衛星である GOSAT シリーズ（現状でも下記の 3 機が現役として運用されている）は

- ・ GOSAT-GW(2026～):1TB/day
- ・ GOSAT-2(2018～):40GB/day
- ・ GOSAT(2009～):5GB/day

程度のデータ量となる。観測衛星は今後とも解像度および取得データは増加していくことを考えておく必要がある。

また、シミュレーション結果も非常に大きく、例えば、材料シミュレーションの結果をアーカイブして公開している NOMAD では、気象分野でのデータに 1PB 程度の大きさで公開されている。このアーカイブは、1 件当たり数重 MB のデータと計算結果を 1,000 万ケース程度アーカイブしている。基本的に登録したら削除しないという方針で運営されている。

表 2.13 気象データベースのデータ量

データ名	ストレージ容量
ERA5	1 to 5 PB (2020)
CMIP6	約 1.1PB (2015)
MERRA-2	800TB ～ 1PB
HLS	約 5 PB
HRES	731PB

(3) 公募で利用されているデータ容量

公募で利用されているデータ容量として、令和 6～8 年度 HPCI 共用ストレージ資源配分一覧が下記に掲載されている。

https://www.hpci-office.jp/application/files/5517/7145/9210/adoptionlist2026_10.pdf

https://www.hpci-office.jp/application/files/9717/4235/1059/adoptionlist2025_21.pdf

https://www.hpci-office.jp/application/files/7117/2369/4761/adoptionlist2024b_10.pdf

この情報を目安として本調査に利用できるよう、下記のとおりまとめた。

表 2.14 公募で申請されたデータ容量

統計量		令和 8 年度	令和 7 年度	令和 6 年度
採択数		20	13	18
データ容量 [TB]	最大	1,500	8,000	1,435
	平均	764	1,585	241
	中央値	500	200	58
	標準偏差	582	2,662	396
	最小	10	1	1
総和		15,273	2,0602	4,346

2.4.6. 公募状況

(1) 大学からの公募一覧

JHPCN や HPCI 等への公募状況は、RIST がまとめられている。ここでは、各大学が進めている公募制度の一覧および、その中から、AI の公募について抜粋して説明する。また、国立研究開発法人からの公募では、産業技術総合研究所の公募は AI に特化した公募となっているため、その内容を説明する。

表 2.15 各大学での公募制度

機関名	公募名	採択件数
北海道大学	北海道大学情報基盤センター 萌芽型共同研究採択課題 A：計算資源利用型、B：研究集会開催支援型	A 型 5 件
東北大学	2025 年度共同研究課題（一般課題）	2 件
筑波大学	学際共同研究プログラム	100 件
東京大学	大規模 HPC チャレンジ	
東京科学大学	TSUBAME グランドチャレンジ大規模計算制度	4 件/2 年
名古屋大学	2025 年度(令和 7 年度) 名古屋大学 HPC 計算科学連携研究プロジェクト採択課題	22 件
京都大学	スーパーコンピュータ共同研究制度（大規模計算支援枠）	3 件/2 年
大阪大学	若手・女性研究者支援萌芽枠	
	大規模 HPC 支援枠	4 件
	人工知能研究支援枠 採択課題	1 件

表 2.16 人工知能研究支援枠 2025 年採択課題（大阪大学）

所属機関名	代表者名	課題名
大阪大学 工学研究科	浜口 智志	反応性プラズマと物質の相互作用を解析するための機械学習原子間力場の構築

(2) 産業技術総合研究所の公募

(a) ABCI グランドチャレンジ (2021 年～継続中)

ABCI の計算リソースを最大規模（全ノード独占など）で短期間利用できる公募である。ここでは、世界最高レベルの AI 研究やシミュレーションを支援することを目的に、2021 年～2023 年には LLM の学習課題が急増した。また、2024 年以降は、量子・古典融合計算を対象とした公募も並行して実施されている。

表 2.17 ABCI グランドチャレンジ 2022 年採択課題

所属機関名	代表者名	課題名
東京工業大学	横田理央	ABCI 全系を用いた億単位の人工画像の事前学習
LINE 株式会社	中町礼文	大規模日本語 BERT(~6.7B パラメータ)による BERT ベース(110M パラメータ)への蒸留
エヌビディア合同会社	森野慎也	GPU を用いた大規模量子回路シミュレーション
東京工業大学	横田理央	億単位までスケーラブルな人工画像データセットの構築
ソニーグループ株式会社	早川顕生	学習済 Text to Image 拡散モデルを用いた動画生成タスクへの finetuning
早稲田大学	河原大輔	長い系列に対応した日本語大規模汎用言語モデルの構築

表 2.18 ABCI グランドチャレンジ 2023 年採択課題

所属機関名	代表者名	課題名
東北大学	坂口慶祐	日本語大規模言語モデル学習の三点スケールアップとオープンソース化
富士通株式会社	笠置明彦	量子化学計算の大規模厳密解法実行

(b) 開発加速利用

ABCI 3.0 は、基盤モデル、生成 AI、マルチモーダル AI 等の最先端 AI 技術の研究開発、評価、人材育成を目的とした公的利用等に、重点的に提供する。これを実現するため、共用高性能計算機 ABCI 利用約款に定める利用（以下、「標準利用」という）のうち、目的への合致性、開発の公開性、利用者・利用原資の属性について要件を満たす利用を「開発加速利用」として認定し、標準利用料金からディスカウントした料金にて計算リソースを提供する。

- ・ 2024 年 47 件（大学 13 件、産総研 21 件、国研 3 件、民間 10 件）
- ・ 2025 年 96 件（大学 38 件、産総研 37 件、国研 18 件、民間 3 件）

(c) その他の公募

その他に下記の公募がある。

- ・ ABCI-Q 量子・AI 融合技術ビジネス開発 (2024 年～)：2024 年に本格稼働した量子・古典融合計算基盤「ABCI-Q」に関連する公募である。ここでは、量子コンピュータ

のシミュレーションや、AI との融合アルゴリズム開発を行う。

- ・ 覚醒プロジェクト（2021 年～2025 年）：独創的なアイデアを持つ若手研究者や未踏的 IT 人材を対象とした公募である。ここでは、ABCI の無償利用枠（100 万円～300 万円相当）の提供＋事業費支給する。毎年、1 月～3 月に募集され、5 月からプロジェクトが開始されるサイクルである。
- ・ AI スタートアップ支援（2023 年～）：経済産業省の「GENIAC」プロジェクト等と連動し、スタートアップ企業の LLM 開発支援の計算資源提供が行われている。

また、ABCI 3.0 では、非東京圏（東京都、神奈川県、千葉県、埼玉県以外の道府県）で AI 開発を行う事業者等の支援、AI 開発人材の育成を図るため、地方優先枠を導入している。

(d) 経済産業省プロジェクト GENIAC の公募

経済産業省と NEDO では、生成 AI の持続的な開発力を高め、社会実装を加速するため、Generative AI Accelerator Challenge 「GENIAC」を実施している。この中で生成 AI 開発支援に関する公募は、第 1 期（2024 年 2 月～）は 10 社、第 2 期（2024 年 7 月～）は 21 社、第 3 期（2025 年 7 月～）は 24 社が採択されている。

2.4.7. まとめ

- ① 産業界の参加は、各大学ともほとんど 1 割に満たない。積極的に進めている東京科学大学では 43%が産業界であり、突出している。また、令和 7 年度の調査でも、欧州は 2 割の目標を設定して進めているが実態としては到達には程遠い状況であることがわかった。「富岳」で産業利用の割合が高いのは、文部科学省を中心とした RIST、FOCUS による活動が効いていると考えられる。
- ② ストレージについては、遺伝研のデータサイズ、気象データサイズ、およびシミュレーション結果のサイズなどから、AI の研究開発で利用するデータは数十 PB になると考えられる。
- ③ 公募状況については、ABCI の公募状況を見ると、多くの AI 課題に応募があることがわかる。ただし、「ABCI グランドチャレンジ」および「開発加速利用」における 2～3 年間の情報では、民間からの公募が減少している。これは、民間が独自に計算リソースを確保し始めていることが原因と考えられる。
- ④ 今後の傾向として、各企業ではデータや計算内容の秘匿性の観点から、独自の基盤モデルを開発し、社内リソースへの転換を図ろうとしている。この基盤モデルが企業の競争における原動力となる。したがって、公的機関の今後 AI の公募は大学・研究機関が中心となることが予測される。

3. AI ユーザのトレンドに関する調査分析

3.1. AI 市場予測・将来的な社会的影響の調査

3.1.1. 情報源

(1) Hyperion 社報告書一覧

Hyperion 社が HP に掲載している報告書一覧を示す。この中から、関連の深い調査報告書（表 3.1 中に○印をつけた報告書）について、以下の節において各 1 ページ程度にまとめた。

表 3.1 Hyperion 社調査一覧 <https://hyperionresearch.com/buy-documents/>

日付	対象	タイトル
—		AI 諮問委員会概要
—		推論の実践に関する特別調査概要
—		HPC-QC 統合戦略に関する書面概要
—		HPC サイトチェックアップのファクトシート
2013 年 10 月		HPC 投資と経済的 ROI およびイノベーションの関係を示す経済モデルの作成
2017 年 03 月		スーパーコンピュータが経済的・社会的利益にもたらす実世界事例
2019 年 10 月		NASA 向け専用スーパーコンピュータの選択肢の探求
2020 年 11 月		HPC 投資からの ROI と ROR に関する SC20 アップデート
2021 年 05 月		HPC ストレージ TCO - \$/GB を超えた重要な要因
2021 年 07 月		HPC ユーザフォーラム：NERSC の Perlmutter アップデート
2021 年 08 月		HPC ストレージに関する特別報告書：2021 年上半期レビュー
2021 年 10 月		2021 年エンドユーザのプロセッサ・アクセラレータ・HPC 予算に関する視点
2021 年 11 月		QC ユーザの採用に関する調査（D-Wave スポンサー）
2021 年 11 月		D-Wave スポンサーによる QC の商業的成功に関する調査
2022 年 02 月		Supermicro-AMD パートナシップの技術スポットライト
2022 年 04 月		アウトコンピュートはアウトコンピートである：米政府 HPC リーダーシップに関する競争上の脅威と機会
2022 年 11 月		HPC とクラウド - 強固で成熟した関係
2022 年 12 月		HPC の分類法（タキシノミー）
2023 年 05 月	○	HPC-AI の成功事例に関する特別報告書
2023 年 07 月	○	大規模言語モデル（LLM）の HPC エコシステムにおける位置付け
2024 年 02 月		2024 年 Hyperion Research 研究アジェンダ
2024 年 06 月		QC ベースの最適化の現状と展望
2024 年 10 月		クラウドベースの AI 活動に関する特別報告書概要
2024 年 10 月	○	NERSC コンピューティングの価値測定に関する特別報告書
2025 年 03 月	○	2025 年 HPC/AI 予測トップ 10
2025 年 04 月		最新の Hyperion Research 報告書（2025 年 4 月）

2025 年 04 月		量子コンピューティング/量子センサー市場の状況と展望
2025 年 04 月		量子コンピューター市場の状況と展望
2025 年 04 月		量子センサー市場の状況と展望
2025 年 05 月		LLM の性質評価：人類中心主義への注意喚起
2025 年 05 月	○	HPC データセンターのエネルギー課題と持続可能なソリューション
2025 年 06 月	○	HPC における AI 利用の進化を理解する
2025 年 06 月	○	ISC25 市場アップデート：プレゼンテーション
2025 年 06 月	○	HPC-AI ストレージと相互接続に関する展望 (ISC25 プレイベント)
2025 年 06 月	○	HPC-AI in the Cloud に関する展望 (ISC25 プレイベント)
2025 年 06 月	○	ISC25 プレイベントの結論
2025 年 09 月		トップ・オブ・マインド (ToM) 調査結果 第 2 回
2025 年 09 月		最新の Hyperion Research 報告書 (2025 年 9 月)
2025 年 11 月	○	AI 投資の ROI に関する特別分析概要
2025 年 11 月	○	SC25 ブレックファストブリーフィング
2026 年 1 月	○	AMD 搭載 IBM Cloud による先進 AI コンピューティング

(2) HPCwire 社報道一覧

HPCwire が HP に掲載している報告書一覧を示す。この中から、関連の深い調査報告書 (表 3.2 中に○印) について、以下の節において各 1 ページ程度にまとめた。

表 3.2 HPCwire 社報道一覧 <https://www.hpcwire.com/>

日付	対象	タイトル
2025 年 2 月 7 日		欧州 AI 法、初の規則が適用開始
2025 年 3 月 10 日		TSMC、2025 年 2 月の収益報告を公開
2025 年 4 月 7 日		スタンフォード大、2025 年 AI インデックス公開
2025 年 5 月 13 日	○	Musk 氏、20 万 GPU の「Colossus」を稼働
2025 年 6 月 10 日		スーパーコンピュータ「JUPITER」、世界 4 位で初登場
2025 年 6 月 11 日	○	ISC2025：HPC-AI が科学をけん引する理由
2025 年 6 月 28 日		超党派「ASAP」計画、科学 AI を強化
2025 年 7 月 2 日		Microsoft の量子ロードマップへの課題
2025 年 7 月 14 日		インテル、エッジおよびエージェンツ AI に注力
2025 年 8 月 30 日		中国政府、NVIDIA H20 チップの使用禁止通達
2025 年 9 月 1 日	○	NSF：NAIRR 運営センター設立に対し資金提供
2025 年 9 月 9 日		ブロードコム、AI チップで NVIDIA に挑戦
2025 年 9 月 17 日	○	Gartner：2025 年の世界 AI 支出額、1.5 兆ドルの予測
2025 年 9 月 29 日		Dario Gil 氏、DOE 次官に指名承認
2025 年 10 月 2 日		政府閉鎖中もスーパーコンピュータ拠点は稼働継続
2025 年 10 月 3 日		MIT、全米最強の大学 AI スーパーコンピュータを公開
2025 年 10 月 3 日		MIT の科学発見用新 AI プラットフォーム
2025 年 10 月 6 日		AI のビッグデータ・ステップファンクション
2025 年 10 月 23 日	○	中国 Sunway スーパーコンピュータ、AI で量子化学を拡張
2025 年 10 月 24 日		計算主権レースと原子力発電の重要性

2025 年 10 月 27 日	○	ORNL に新型スーパーコンピュータ「Discovery」と「Lux」
2025 年 10 月 27 日		NVIDIA と SCSP、AI 雇用タスクフォース設立
2025 年 10 月 28 日	○	NVIDIA と DOE、7 つの科学用 AI スーパーコンピュータ発表
2025 年 10 月 28 日		Microsoft と OpenAI、提携を刷新
2025 年 10 月 30 日	○	ACM、欧州の AI 規制再考を提言
2025 年 10 月 30 日	○	AI データセンター再構築の裏側
2025 年 11 月 4 日		Google Cloud、科学的発見のための HPC/AI 統合
2025 年 11 月 5 日	○	ORNL ら、量子・AI 計算の進化で連携
2025 年 11 月 5 日		NVIDIA RTX PRO サーバー世界販売開始
2025 年 11 月 6 日	○	ハイペリオン・リサーチ：HPC における AI 投資の ROI 調査
2025 年 11 月 6 日		Nebius、英国に Blackwell インフラ導入
2025 年 11 月 6 日		VAST Data、CoreWeave と 11.7 億ドル提携
2025 年 11 月 13 日	○	BSC、創立 20 周年祝典にて欧州 AI の進展を称賛
2025 年 11 月 18 日		DOE、量子制御プラットフォーム製造提携
2025 年 11 月 18 日	○	Infleqtion と ORNL が量子・HPC 統合の推進で提携
2025 年 11 月 19 日		ユーリッヒ研、量子スーパーコンピュータ統合を推進
2025 年 11 月 24 日	○	DOE、AI 技術革新計画「Genesis Mission」始動
2025 年 11 月 26 日		IQM、フィンランド工場に 4 千万ユーロ投資
2025 年 11 月 26 日		CIQ、中東地域へ進出拡大
2025 年 12 月 1 日	○	ALCF、2025-2026 年度利用者諮問委員会を発足
2025 年 12 月 1 日	○	Genesis Mission： 米 AI for Science 政策における戦略的転換
2025 年 12 月 9 日		量子市場調査への業界協力要請
2025 年 12 月 12 日	○	IDC、世界のサーバー市場収益は 2025 年第 3 四半期に 61%増と予測
2025 年 12 月 12 日		シーメンスと GF、AI 駆動製造で提携
2025 年 12 月 17 日	○	NIST、製造業・主要インフラ向け AI センターを設立
2025 年 12 月 17 日	○	2025 年 HPC 年間回顧録
2026 年 01 月 06 日	○	2026 年半導体市場予測：AI アクセラレータの台頭
2026 年 01 月 15 日		AI テーマが政策から運用へシフトする中、 IBM が Sovereign Core を発表
2026 年 01 月 16 日	○	IDC、AI プラットフォームソフト市場の急成長を報告： 2028 年までに 1530 億ドル規模に拡大
2026 年 01 月 16 日		Meta Compute：AI 開発の転換点
2026 年 01 月 21 日		オハイオ・スーパーコンピュータ・センター、4 月に NSF AI ワークショップを開催
2026 年 01 月 26 日		星国立スーパーコンピュータセンター、HPC 増設・人材開 発向けに \$2.7 億調達
2026 年 02 月 09 日	○	米政策変更がデジタル主権・研究開発に与える影響
2026 年 02 月 17 日		欧で独自 AI モデル開発競技会開催：HPC 主権に脚光
2026 年 03 月 04 日		革新的 HW/SW 連携により、クラウドでの 高度 AI コンピューティングを実現
2026 年 03 月 04 日	○	デロイト AI 白書 2026：企業の AI 導入が遅れている理由
2026 年 03 月 04 日		ACM TechBrief、LLM 開発 or 購入選択における リスクについて政府に警告
2026 年 03 月 09 日	○	AI ブームによる CPU 需要の再燃

3.1.2. Hyperion 社調査報告書からの情報

本節では、情報源で示した Hyperion 社調査報告書一覧のうち AI for Science に関連の深い記事を抜粋した。まとめた記事については、それぞれの内容が関連の深い項目を「市場」「計算機」「利用」に分類して表 3.3 に示した。

表 3.3 Hyperion 社の関連記事 <https://hyperionresearch.com/buy-documents/>

番号	タイトル	市場	計算機	利用
1	HPC-AI の成功事例に関する特別報告書	—	—	○
2	大規模言語モデル（LLM）の HPC エコシステムにおける位置付け	○	—	—
3	NERSC コンピューティングの価値測定に関する特別報告書	—	—	○
4	2025 年 HPC/AI 予測トップ 10	○	○	○
5	HPC データセンターのエネルギー課題と持続可能なソリューション	—	○	—
6	HPC における AI 利用の進化を理解する	—	—	○
7	ISC25 市場アップデート：プレゼンテーション	○	—	—
8	HPC-AI ストレージと相互接続に関する展望（ISC25 プレイベント）	—	○	—
9	HPC-AI in the Cloud に関する展望（ISC25 プレイベント）	○	—	—
10	ISC25 プレイベントの結論	—	—	○
11	AI 投資の ROI に関する特別分析概要	○	—	—
12	SC25 ブレックファストブリーフィング	○	—	○
13	AMD 搭載 IBM Cloud による先進 AI コンピューティング	—	○	—

(1) HPC-AI の成功事例に関する特別報告書

原題：Recent HPC-centric AI Success Stories

[# Hyperion-Research-HPC-AI-Success-Story-Report-May-2023.pdf](#)

HPC 中心の AI 技術が、世界的な社会問題や現代的な課題解決にいかに関与しているかを示す成功事例を集めた特別報告（2023 年 5 月）。これは、最先端の計算技術が実現する具体的かつ多様な解決策への認識を広げることを目的とする。

(a) 医学・創薬分野での貢献

Cornell 大学の Rong Yang 助教は、AI と生産技術を組み合わせるポリマーナノ粒子の製造をリアルタイムで解析し、正確な薬物送達を目指す。また、この手法は都市の大気汚染物質（煤、粉塵、排気ガス）の高精度な計算モデルにも応用され、公衆衛生当局による地域の空気質評価を支援する。UT Health San Antonio と UCAM の研究チームは、AI 技術の支援により、抗うつ薬イミプラミンが特定の乳がんの成長を阻害する薬剤として再利用可能であることを発見し、特許を取得し臨床試験中である。Centivax 社は AWS クラウド上で ML モデルを訓練・実行し、ユニバーサルインフルエンザワクチンの開発を進めるほ

か、ヘビ咬傷、HIV、新型コロナウイルス株など、様々な病原体に対する広域スペクトル抗体医薬プログラムを展開する。

(b) 科学研究・工学分野での貢献

INDRC（国際神経変性疾患研究センター）の DMSC は、正確なデータ取得、安全なデータ保存、高品質なデータセットへのアクセスを提供し、アルツハイマー病やパーキンソン病などの神経変性疾患の臨床研究を推進。University of Münster の Dr. Claus-Peter Rückemann は、Conceptual Knowledge Reference Implementation (CKRI)などのフレームワークを開発し、異分野間の概念的知識の整合的な文脈化を可能にした。これは、考古学や火山学における自動「インテリジェント」オブジェクト文脈発見など、持続可能な科学研究に肯定的な影響を与える。Georgia Polytechnical Institute での燃焼研究では、AI（DNN、ML）を活用することで、従来莫大な計算資源を要したモデリングとシミュレーションの所要時間を劇的に短縮しつつ、高信頼度（90-99%）の結果を達成。これは、よりクリーンな燃料の開発と気候変動対策に寄与する。

(2) 大規模言語モデル（LLM）の HPC エコシステムにおける位置付け

原題：Hyperion Research Special Report Overview Large Language Models: Finding Their Place in the HPC Ecosystem

[# Hyperion-Research_LLM-Study-Summary.pdf](#)

LLMs が HPC エコシステムに与える影響と、その位置付けに関する Hyperion Research の特別調査概要（2023 年半ば実施）。LLMs は、クエリ応答、簡潔な要約、コンテンツ生成といった独自の機能により、HPC コミュニティにおいて重要な新興技術とみなされている。

(a) LLM への関心の背景

LLMs は、コンテンツ作成、言語翻訳、コード開発などの主要分野で新たな能力をもたらす可能性を持つ。HPC のエンドユーザは、金融、バイオサイエンス、先端製造など、要求の厳しい計算問題の一部を加速させる LLM の可能性に強い関心を寄せ、幅広い組織が複数の LLM アプリケーションを検討中である。

(b) 課題と対応

LLM の導入には、既存の HPC ワークロードへの統合の複雑性や、LLM 専用ハードウェア・ソフトウェアのコストといった課題が伴う。しかし、サプライチェーンの遅延や頻繁なハードウェアリフレッシュサイクルといった外部要因もあり、調査対象組織の過半数は LLM の組み込みを支援するためにコンピューティング予算を増額する意向を示している。また、組織は LLM の開発・運用をサポートするための幅広い専門知識を求めている状況

である。

(c) 市場成長予測

LLM を支える AI 中心のコンピューターシステム市場は、少なくとも 2027 年まで年間 30%以上の成長率で拡大すると予測される。アナリストは、この分野の急速な発展に遅れることなく対応することが、組織にとって最適な意思決定を行う上で不可欠であると強調する。LLM は、HPC サイトの計算能力向上とイノベーション促進に貢献する強力なツールとしての位置付けを確立しつつある。

(3) NERSC コンピューティングの価値測定に関する特別報告書

原題 : Measuring and Assessing the Value and Scientific ROI of NERSC's Leadership Computing in Advancing Science

[#Hyperion-Research-Special-Report-Measuring-the-Value-of-NERSC-Computing-October-2024.pdf](#)

NERSC (National Energy Research Scientific Computing Center) で実施された研究の価値と影響を測定し、その科学的 ROR (Return on Research) を評価した特別報告。50 年にわたる NERSC の活動を通じて達成された研究成果は、世界のリーダーシップコンピューティングサイトの中でも最高レベルの価値と影響を持つとの結論に達した。この研究は、7 つのノーベル賞受賞成果を含め、42 名の主要な科学者・研究者へのインタビューとレビューに基づいている。

(a) 評価フレームワーク

Hyperion Research は伝統的な財務的 ROI ではなく、政府資金による基礎科学研究の価値をより適切に捉える RoR メトリックに焦点を当てた。RoR は、イノベーションの「重要性」(過去 10 年間でトップ 3 からトップ 50 の発見)と「影響度」(有用な組織の数: 専門家のみ認識から 50 以上の組織)という 2 つのパラメータで測定される。これらを組み合わせたイノベーションクラス指数 (Class 1 が最高位) により、NERSC の研究成果が他の HPC リーダーシップサイトと比較して最も高いレベルを示すことが実証された。

(b) 研究の貢献と多様性

NERSC の科学プログラムは、化学、地球・環境システム、核融合エネルギー科学、材料科学、原子核物理学など、幅広い科学分野を網羅。科学的価値フレームワークの 5 つの貢献分野 (科学の進歩、工学の進歩、経済成長、人命救助、国家安全保障) すべてにわたり貢献を示し、「科学の進歩」が主要なミッションである。

(c) NERSC のその他の功績

1998 年のテラスケール性能障壁の突破、幅広い国際的な協力の促進、科学者・研究者人材の強化が挙げられる。NERSC の運用特性に関しても、研究参加者はその計算能力の卓越性、リソースの信頼性とアップタイム、利用プロセスの簡潔さ、および優れたサポート体制を、他の科学計算施設の基準となるべきものと高く評価する。

(4) 2025 年 HPC/AI 予測トップ 10

Top 10 Predictions for the Global HPC-AI Community for 2025

[# Hyperion-Research-2025-HPC_AI-Predictions.pdf](#)

2025 年のグローバル HPC-AI コミュニティに向けたトップ 10 予測を提示。市場の成熟、技術的な転換、および新たな課題への対応が主要なテーマとなる。

- ① AI における人間的要素の再浮上：AI の採用において、人間の監視、倫理的判断、コラボレーションの重要性が高まり、「Human-in-the-loop」設計や人間をより生産的にするための AI 活用が焦点となる。
- ② AI 成熟に伴う焦点の変化：AI の統合が進むにつれ、ユーザの焦点は新しいユースケース、システムの最適化、規制の整備、そして具体的な ROI (Return on Investment; 投資収益率) の実現へと移行する。
- ③ LLM トレーニング要件の鈍化：LLM のトレーニングに必要な計算要件の急速な増加は、一部の巨大組織を除き、より小規模で効率的、かつ集中的なデータセットを使用するモデルへのシフトにより減速し始める。
- ④ 低精度ハードウェアの探求：AI の計算需要にけん引され、GPU 設計が最適化される中、従来の 64 ビット浮動小数点形式に投資してきた HPC ユーザは、混合・低精度ハードウェアの性能向上を探る必要に迫られる。
- ⑤ 「コンティニュウムコンピューティング」の受容：ユーザは、クラウドをオンプレミスインフラと連携させるハイブリッド環境を完全に受け入れ、リソースの最適化とアジリティを可能にする。
- ⑥ Neo-Cloud の台頭：サプライチェーンの遅延、ハードウェアリリースサイクルの短縮、サステナビリティ目標といった複合的な要因により、AIaaS や GPUaaS プロバイダーを含む CSP (クラウドサービスプロバイダー) リソースの利用が加速する。
- ⑦ オンプレミス QC への関心の増加：HPC/QC 統合、ベアメタルアクセス、およびセキュリティ確保のニーズから、主要な HPC サイトがオンプレミスの量子コンピューティング (QC) 取得を発表し、この分野への関心が高まる。
- ⑧ エネルギー供給のイノベーション需要：AI 関連ハードウェアの電力需要増大に対応するため、HPC センター、AI データセンター、ハイパースケーラーは、サイト評価、効率的なハードウェア設計、原子力などの新たな電源の模索といったエネルギー供給におけるイノベーションへの需要を増大させる。

- ⑨ ソブリンの取組の市場影響の限定性：プロセッサ、半導体製造、LLM などにおける各国のソブリンな取組は継続するが、2025 年のグローバルサプライチェーンへの実質的な影響はまだ現れない。
- ⑩ HPC・AI 人材不足の深刻化：HPC 人材の高齢化と、AI 関連ハードウェア・ソフトウェアの複雑化により、HPC および AI の専門人材の不足が、大手以外の組織にとってより大きな制約となる。

(5) HPC データセンターのエネルギー課題と持続可能なソリューション

原題：HPC Data Center Energy Challenges and Sustainable Solutions

[#Jaclyn-Ludema_Hyperion-Research-Pre-ISC25-Virtual-Event_HPC-Data-Center-Energy-Challenges-Sustaina.pdf](#)

HPC データセンターのエネルギー課題と持続可能な解決策に関する現状報告。世界のデータセンターにおける電力消費は大幅な増加傾向にあり、2022 年の世界の総電力需要の 1～1.3%から、AI および HPC ワークロードの高密度化を主要因として 2026 年までに倍増するとの予測である。このエネルギー需要の急増は、アイルランドやオランダなどの欧州市場でデータセンター開発の一時停止措置を引き起こす要因の一つとなっている。

これに対し、各国政府は持続可能なソリューションを推進している。米国の COOLERCHIPS プログラムは、エネルギー効率の高い冷却技術や再生可能エネルギー源の活用を支援。EU の REPowerEU Plan は、化石燃料依存からの脱却を加速。

技術的な効率化ソリューションの導入状況としては、HPC センターにおける液冷技術の採用率が現在 67%に達し、今後 12～18 か月で 80%に増加する見込み。特に、既存施設での L2A 冷却などの段階的なアップグレードがブラウンフィールドサイトで一般的に見られる。また、フィンランドの Nebius や Microsoft のデータセンタークラスタでは、大規模な廃熱回収システムが導入されており、熱エネルギーの再利用を通じてサステナビリティに貢献する。更に、コア数を倍増させつつ消費電力を削減するシングルソケットサーバー市場のプレイヤー増加も電力効率改善の一環である。

サステナビリティ戦略として、データセンターサイトは平均 3 つの優先事項を実行しており、「冷却と電力配分の最適化」「効率的なハードウェア構成」「再生可能エネルギー調達」が上位を占める。また、AIaaS や GPUaaS プロバイダーを含む「Neo-clouds」といったクラウドリソースの活用は、高コストなアップグレードの回避や炭素排出量の削減といった ESG 目標達成を加速させる手段の一つとなる。長期的には、一貫したカーボンフリー電力供給を可能とする小型モジュール炉（SMRs）の活用が、HPC のエネルギー需要に応える革新的な電源ソリューションとして注目を集める。

(6) HPC における AI 利用の進化を理解する

原題：Understanding the Evolving Use of AI in HPC

[#Tom-Sorensen_Hyperion-Research-Pre-ISC25-Virtual-Event_Understanding-the-Evolving-Use-of-AI-in-HPC.pdf](#)

HPC 環境における AI 利用の進化と、その成熟に伴う新たな課題と機会に関する分析。AI 技術の HPC 環境への統合が進むにつれて、ユーザはより長期的な視点を持つようになり、リソース調達の効率性、クラウド利用の程度、規制ガイドラインの包括性といった新たな問いに直面する。

(a) 課題の現実的な評価

ユーザの動向として重要である。ユーザは、AI がもたらすメリットを認識しつつも、高額な維持コスト（電力とインフラ）、社内専門知識の継続的な教育、規制要件の管理といった課題を現実的に評価している。

Hyperion Research は、HPC/AI ユーザの行動、期待、課題を追跡する研究を継続しており、特にインファレンス（推論）のプロビジョニングと管理が注目分野となる。最近の調査結果では、インファレンスが HPC ユーザにとって高い重要性を持ち、クラウドとオンプレミスの両方で AI オプションが探求・実験されている状況が示された。懸念事項は、統合の複雑さ、ハードウェア/ソフトウェアのコスト、技術的な問題に集中する。予算配分では、オンプレミスとクラウドの AI 推論予算がほぼ均衡しており、推論への支出割合は増加傾向にあることが予測される。

(b) Top of Mind

AI の統合が進むにつれて、AI 技術の有効性と限界がよりよく理解されることが挙げられる。AI 統合システムの標準化に伴い、ユーザは堅牢な ROI や新しいレベルの効率性を期待する。また、LLM トレーニングの計算要件の急速な増加は減速し、より集中的なデータセットを用いた小さく効率的なモデルへのシフトが進む見込み。これは、一部の巨大組織を除き、主流の HPC コミュニティにとってより現実的なアプローチとなる。

(7) ISC25 市場アップデート：プレゼンテーション

原題：The ISC25 Hyperion Research Market Update

[#Hyperion-Research-Pre-ISC25-Virtual-Event_Presentations.pdf](#)

ISC25 プレイベントの市場アップデートプレゼンテーション資料。HPC/AI 市場の動向、予測、量子コンピューティング（QC）、ストレージ、相互接続など、幅広いテーマにわたる最新のインサイトを提供。

(a) HPC/AI 市場の動向

2024 年は、オンプレミスサーバーの 23.4% 増、クラウド利用の 21.3% 増という、過去 20 年で最高の成長率（23.5%）を記録。総支出は 60B ドル（9.6 兆円）を超えた。市場は

AI、LLM、生成 AI などの新技術とユースケースによって引き続き成長すると予測され、2029 年までに市場全体は 120B ドル（19.2 兆円）近くに倍増する見込み。市場の成長をけん引するのは、GPU、クラウド、AI/ML/DL/LLM といった高成長分野である。一方、電源と人材の不足が、成長の懸念材料となる。

(b) 量子コンピューティング (QC) 市場

QC 市場は 2024 年に 1.070B ドル（1,712 億円）と推定され、2027 年までに 27%の年平均成長率で 2.2B ドル（3,520 億円）に達すると予測される。2027 年の主要なエンドユーザセクターは、化学/化学研究と QC R&D であり、ユーザの動機は「新しいアルゴリズムの実装」や「将来の古典的性能への懸念」が上位を占める。市場の課題は、IT 統合の複雑さ、社内専門知識の不足、そして LLM が関心を奪う可能性。アクセス手段はクラウドが優勢だが、オンプレミスでの QC 導入への関心も高まっている状況にある。

(c) HPC-AI ストレージと相互接続

AI データパイプラインの各段階（インジェスト、トレーニング、推論など）は、アクセスパターン、アクセス頻度、ロケーションが異なるため、多様なストレージ要件を持つ。相互接続の分野では、光 I/O が将来の HPC アーキテクチャの主要な課題（スケーラビリティ、コンポーザビリティ、スループット）を改善する上で、非常に高い可能性を持つ技術として期待を集める。システムリソースの非集約化も重要なトレンドの一つ。

(8) HPC-AI ストレージと相互接続に関する展望 (ISC25 プレイベント)

原題：Perspectives on HPC AI Storage and Interconnects

[#Mark-Nossokoff_Hyperion-Research-Pre-ISC25-Virtual-Event_Perspective-on-HPC-AI-Storage-and-Interconn.pdf](#)

HPC-AI データパイプラインの進化に伴うストレージと相互接続の展望に関する報告。AI ワークロードは、インジェスト、データ準備 (ETL)、トレーニング、チェックポイント、推論といった多様な段階で構成され、それぞれに固有のストレージ要件が存在する。これには、アクセスパターン（シーケンシャルまたはランダム）、アクセスタイプ（読み書き）、アクセス頻度（Idle から Intense）、データサイズ（Small から Large）、およびロケーション（Edge、Cloud、On-premises）の多様性が含まれる。特に、トレーニングにおいてはランダムなアクセスと集中的な頻度、推論においてはシーケンシャルな読み込みと中程度の頻度といった、各段階の特性に合わせたストレージ構成が不可欠となる。

ストレージ市場の動向としては、Blackstone による DDN への 300M ドル（480 億円）の投資が特筆すべき出来事の一つである。Dell や HPE などのシステムベンダーに加え、DDN、Hammerspace、VAST、Weka といったデータプラットフォームベンダーが製品を発表し、市場の競争を促進する。

相互接続の分野では、GTC（GPU Technology Conference）においてオンチップ光通信とイーサネットへの強い焦点が見られ、InfiniBand への言及は限定的であった。標準化の取組としては、UltraEthernet Consortium (UEC)および UltraAccelerator Link (UALink) Consortium での進展が重要となる。また、EuroHPC JU では BXIv3 の展開と BXIv4 のロードマップ開発が計画されている。

将来の HPC アーキテクチャの改善に最も高い可能性を持つ技術として、光 I/O がユーザとベンダーの両方から強く期待されている点も注目すべきである。これは、システムのスケーラビリティ、コンポーザビリティの欠如、ネットワークスループットといった主要なシステム課題に対処するためである。更に、回答者の 75%がシステムリソースの非集約化の強い必要性を認識しており、将来のコンピューティング設計における重要なテーマとなる。今後の研究は、AI データパイプラインがストレージアーキテクチャおよび相互接続アーキテクチャに与える影響、そしてオンプレミスとクラウドストレージリソースの最適な活用戦略の評価を主要な焦点とする。

(9) HPC-AI in the Cloud に関する展望 (ISC25 プレイベント)

原題：Perspectives on HPC AI in the Cloud

[Mark-Nossokoff_Hyperion-Research-Pre-ISC25-Virtual-Event_Perspectives-on-HPC-AI-in-the-Cloud.pdf](#)

HPC-AI ワークロードにおけるクラウドサービスの利用動向と市場シェアに関する展望。HPC/AI/HPDA ワークロードのプライマリクラウドプロバイダーとして、回答者の間で AWS が最も選好され、Google、Microsoft がそれに続く。ただし、全てのクラウドプロバイダーを考慮した場合、Microsoft は 2 番目に選好される CSP に上昇する。特に、AI ワークロードの 50%以上をクラウドで実行するサイトでは、Microsoft がプライマリ CSP の 2 位に浮上するなど、特定のワークロードにおける選好度の違いが認められる。

(a) CSP 市場シェアの推定

AWS が引き続き最大のシェアを維持する一方、Google はシェアを拡大し、「その他」のカテゴリ（欧州クラウド、中国クラウド、および Neo-clouds）も成長を見せている。SC24 以降の技術的な進展としては、Google Cloud Platform による TPU7、H4D CPU VM、NVIDIA Blackwell サポートの導入、AWS による Trainium の一般提供と NVIDIA Blackwell インスタンスのサポート、Microsoft Azure による NVIDIA Blackwell サポート、HPv5 VM、新しいカスタムシリコンの開発などが挙げられる。

「Neo-Cloud」の台頭は、複数の要因によって加速されている。AIaaS や GPUaaS プロバイダーは、サプライチェーンの遅延、頻繁なハードウェアリフレッシュサイクル、そして高価な液体冷却アップグレードの回避といった課題に対応し、最先端ハードウェアへの即時アクセスを提供。これは、組織がサステナビリティ目標（炭素排出量削減）を達成し

つつ、コンピューティングニーズを満たすための重要な手段となる。CSP は、パイロット、テスト、プレプロダクション段階の組織に特化したサービスを提供することで、AI/ML/DL 統合と市場投入時間の短縮を加速させる。レポートでは、CSP/aaS、Hybrid、Hyperscaler の分類を示し、それぞれの焦点特性（外部/内部技術提供、集中型/フルアレイのサービス提供）を明確にする。

(10) ISC25 プレイベント俯瞰

原題：Pre-ISC Breakfast Briefing

[# Earl-Joseph_Hyperion-Research-Pre-ISC25-Virtual-Event_Conclusions.pdf](#)

ISC25 プレイベントにおける市場アップデートの結論を俯瞰する内容。主旨は、リーダーシップコンピューティングの価値を測定する新しい方法の提示である。従来の ROI 測定が科学的ブレークスルーの完全な価値を定量化しにくいという課題に対応するため、Hyperion Research はイノベーションの「重要性レベル」と「結果の広範な影響度」という 2 つのスケールを用いた評価手法を提案。

「重要性レベル」は、そのイノベーションが過去 10 年間でその分野における発見のトップ 50 からトップ 3 のどこに位置するかでランク付け。「広範な影響度」は、そのイノベーションがエキスパートのみに認識されるレベルから 50 以上の組織に有用であるレベルまで、どれだけ広範囲に利益をもたらすかを示す。この二軸を統合したイノベーションクラスインデックスを用いることで、多様な研究開発プロジェクトの成功とイノベーションレベルを、より包括的かつ比較可能な形で示すことが可能となる。

事例として、2024 年の研究から、理化学研究所と NERSC（National Energy Research Scientific Computing Center）におけるリーダーシップコンピューティングプロジェクトが取り上げられ、650 の他のプロジェクトと比較したマッピング図が示された。このマッピングにより、NERSC のプロジェクトは他の HPC プロジェクトの平均よりも高い位置、すなわちより高い重要性と広範な影響を持つクラスに多く属することが視覚的に実証され、リーダーシップコンピューティングが科学と社会にもたらす高い価値が裏付けられた。この新しい測定方法は、HPC コミュニティにおける研究開発の成功を評価し、その価値を利害関係者に明確に伝えるための強力なツールとなる。資料には、今後の HPC User Forum や Hyperion Research ミーティングの予定も含まれた。

(11) AI 投資の ROI に関する特別分析概要

原題：AI Investments for HPC and Advanced Computing Continue to Expand and Begin to Show ROI Results

[# Hyperion-Research-Special-Analysis-AI-ROI-November-2025_Overview.pdf](#)

HPC および科学ユーザによる生成 AI 統合への ROI に関する特別分析の概要（2025 年 11 月）。本レポートは、HPC コミュニティにおける生成 AI の導入戦略が、急速な拡大か

ら「洗練化」と「戦略的な調整」へとシフトしていることを示している。組織は、実装を精査し、成功指標に基づいて取組をスケーリング、維持、または再調整するアプローチに焦点を移している。

(a) 利用実態と成果

AI は現在、データ前処理やワークフロー管理といった支援的な役割で主に使用されており、これは科学・工学分野で極めて重要な精度と再現性への要求を反映したもの。調査では、回答者の 75.8%が AI プロジェクトが期待を「満たしたか、上回った」と報告。74.9%が HPC ワークロードをサポートするために生成 AI の使用を拡大する計画であり、約 40%がすでにエージェント AI モデルを使用する。使用を縮小すると予想する組織は 3%未満であり、AI 技術への強いコミットメントが示される。

(b) 課題と展望

技術的な課題は依然として広範な採用の障壁である。特に科学・工学の文脈では、ハルシネーション（誤情報生成）、説明可能性の欠如、統合の複雑性が継続的な懸念事項となる。また、生成モデルの高い計算需要が課題を増幅させる。

(c) 財務的側面

AI 統合のコストはしばしば予想を上回る傾向にある。しかし、ユーザは短期的な金銭的リターンよりも長期的なイノベーションの推進を目的とし、AI への投資を継続する。これは、科学・工学ユーザが研究の進歩を最優先する姿勢を反映した結果である。結論として、HPC コミュニティは生成 AI を慎重かつ戦略的に採用し、技術的な課題を乗り越えながら、その長期的なイノベーション価値を追求し続けるという現状にある。

(12) SC25 ブレックファストブリーフィング

原題：Hyperion Research SC25 Advanced Computing Update

[#Hyperion-Research-SC25-Breakfast-Briefing-November-2025-1.pdf](#)

2025 年 11 月の SC25 ブレックファストブリーフィングにおける HPC/AI 市場の最新アップデート。HPC 市場は現在、歴史的な 7～8%の成長率を大きく超える 20%以上の高成長モードに突入した。これは、AI、量子コンピューティング（QC）システム、および新しい技術とユースケースの迅速な拡大によってけん引されている。政府は AI Factory や AI Gigafactory といった大規模な AI 投資を行い、データセンターの電力要件は GW 規模で増大する見込みである。

(a) 市場規模と予測

2024 年はオンプレミスサーバーが 23.4%増、クラウド利用が 21.3%増という、過去 20

年で最高の成長率（23.5%）を記録し、総支出は60Bドル（9.6兆円）を超えた。市場予測では、HPC オンプレミスサーバー市場は2029年までに約50Bドル（8.00兆円）、HPC クラウド支出は約23Bドル（3.86兆円）に達し、市場全体は5年間で倍増し120Bドル（19.2兆円）近くに成長すると見込まれる。成長の主要因は、AI/LLMs/生成 AI といった新しいユースケースと、R&D への投資価値の認識である。

(b) 生成 AI の利用状況

生成 AI の HPC ワークロードへの統合は進んでおり、科学データ分析が最も一般的なエンドユース（80.6%）である。性能については、ほとんどのユーザ（75.8%）が期待を満たすか上回ったと報告しているが、コストについては 52.5%が予想を上回ったと感じている。しかし、ユーザの約 75%が今後 AI の使用を拡大する計画であり、技術へのコミットメントは高い。ROI については、回答者の約半数が 2 年以内に測定可能な金銭的リターンを期待している。

(c) 量子コンピューティング

QC 市場は 2024 年に 1.07B ドル（1,712 億円）と推定され、2027 年までに 2.2B ドル（3,520 億円）に成長すると予測される。パートナーシップが活動の基本となり、オンプレミスでの QC 導入への関心が高まる傾向にある。

(13) AMD 搭載 IBM Cloud による先進 AI コンピューティング

原題：Enabling Advanced AI Computing with IBM Cloud Powered by AMD

[# hyperion-research-enabling-advanced-ai-computing-with-ibm-cloud-powered-by-amd-whitepaper.pdf](#)

AI ワークロード・HPC システムの急速な発展に伴う、インフラ要件の複雑化への対策としての IBM Cloud・AMD の戦略的パートナーシップ統合ソリューションについて。AI 統合が組織のほぼ全体で進み、回答者の 74.9%が AI インフラを HPC ワークロードにも拡大する計画。

(a) AI コンピューティングの現状と課題

- ・ ハイブリッド環境の主流化: AI 推論のコンピューティングニーズを満たすため、オンプレミスとクラウドを組み合わせたハイブリッド環境の利用が主流。純粋なオンプレミス利用は 16%にとどまる。
- ・ ハードウェアの選好: AI 推論のプライマリ GPU として、ハイパフォーマンス GPU（例：Blackwell、MI300X、H200）が 37.0%と最も高い選好度。
- ・ ユーザの主要な懸念: 大規模モデル対応の「スケールと複雑さ」、オンプレミス・クラウド間の「ハイブリッドデプロイメント」、高価なリソースの「価格と可用性」、「エ

エネルギーと持続可能性」、「セキュリティとコンプライアンス」。

(b) IBM Cloud と AMD の提供価値

- ・ 統合ソリューション: IBM Cloud が AMD の最新世代 MI Instinct™シリーズ GPU を統合。高メモリ帯域幅を提供し、大規模モデルの推論とファインチューニングに最適化。
- ・ 主要な特徴:
 - パフォーマンスとスケーラビリティ: AMD MI Instinct シリーズによる massive models のサポート、FP4~FP16 のデータタイプに対応。
 - ハイブリッド柔軟性: Red Hat OpenShift on IBM Cloud によるコンテナのポータビリティと Kubernetes オーケストレーション。watsonx.ai との連携によるシームレスな AI ワークフローのスケーリング。
 - セキュリティとコンプライアンス: 規制業界向けの組み込み制御、ゼロトラスト ID 管理、ポスト量子暗号対応。
- ・ 事例: オープンソース AI 研究企業の Zephyra が、IBM Cloud 上の AMD Instinct GPU クラスタで、大規模 MoE 基盤モデル「ZAYA1-Base」のトレーニングに成功。実測で 750 PFLOPs 超のトレーニング性能を達成。
- ・ 将来の展望: HPC ワークロード向け AMD EPYC 9005 Turin シリーズの採用に加え、IBM と AMD による量子コンピューティング (QC) を古典的な HPC エコシステムに統合するための提携計画がある。

3.1.3. HPCwire 報道からの情報

本節では、情報源で示した HPCwire 社 (<https://www.hpcwire.com/>) の報道一覧のうち AI for Science に関連の深い記事を抜粋した。まとめた記事については、それぞれの内容が関連の深い項目を「市場」「計算機」「利用」に分類して表 3.4 に示した。

表 3.4 HPCwire 社の関連記事 <https://www.hpcwire.com/>

番号	タイトル	市場	計算機	利用
1	Musk 氏、20 万 GPU の「Colossus」を稼働		○	
2	ISC2025 : HPC-AI が科学をけん引する理由			○
3	NSF : NAIIR 運営センター設立に対し資金提供		○	
4	Gartner : 2025 年の世界 AI 支出額、1.5 兆ドルの予測	○		
5	中国 Sunway スーパーコンピュータ、AI で量子化学を拡張		○	○
6	ORNL に新型スーパーコンピュータ「Discovery」と「Lux」		○	
7	NVIDIA と DOE、7 つの科学用 AI スーパーコンピュータ発表		○	
8	ACM、欧州の AI 規制再考を提言	○		
9	AI データセンター再構築の裏側	○	○	
10	ORNL ら、量子・AI 計算の進化で連携			○

11	ハイペリオン・リサーチ：HPCにおけるAI投資のROI調査	○		○
12	BSC、創立20周年祝典にて欧州AIの進展を称賛	○	○	○
13	InflectionとORNLが量子・HPC統合の推進で提携		○	○
14	DOE、AI技術革新計画「Genesis Mission」始動			○
15	ALCF、2025-2026年度利用者諮問委員会を発足		○	○
16	Genesis Mission：米AI for Science政策における戦略的転換			○
17	IDC、世界のサーバー市場収益は2025年第3四半期に61%増と予測	○		
18	NIST、製造業・主要インフラ向けAIセンターを設立			○
19	2025年HPC年間回顧録		○	
20	2026年半導体市場予測：AIアクセラレータの台頭		○	
21	IDC、AIプラットフォームソフトウェア市場の急成長を報告：2028年までに1530億ドル規模に拡大	○		
22	米政策変更がデジタル主権・研究開発に与える影響			○
23	デロイトAI白書2026：企業のAI導入が遅れている理由			○
24	AIブームによるCPU需要の再燃		○	

(1) Musk氏、20万GPUの「Colossus」を稼働

原題：Colossus AI Hits 200,000 GPUs as Musk Ramps Up AI Ambitions

<https://www.hpcwire.com/2025/05/13/colossus-ai-hits-200000-gpus-as-musk-ramps-up-ai-ambitions/>

(a) 要約

イーロン・マスク氏率いる xAI のスーパーコンピュータ「Colossus」が、20 万個の NVIDIA GPU を搭載し完全稼働に達したニュース。当初 10 万個で稼働を開始し、わずか数か月で 20 万個（H100/H200 等）まで倍増させた驚異的な拡張スピード。テスラの定置型蓄電池「メガパック」を電源バックアップに活用し、エネルギー供給の安定化を図る。自社の AI モデル「Grok」の訓練を支え、Google や Microsoft に対抗する独自の AI 拠点の確立。テネシー州メンフィスの廃工場を利用し、122 日間で初動稼働に至る驚異の建設工程。将来的には電力を更に追加し、30 万世帯分に相当する 300MW 規模への拡張を計画。ガスタービン発電機から系統電力への移行を進め、環境負荷の低減と運用効率の向上を追求。

(b) 具体例

- ① 20 万個の NVIDIA H100 GPU を高速インターコネクトで接続した、世界最大級の AI 計算クラスタの構築
- ② 停電や電圧変動に対応するため、Tesla Megapack をデータセンターの主電源補助として統合
- ③ 自社開発 AI 「Grok 3」以降の学習に向けた、オンプレミスでの超大規模計算リソ

ースの確保

(2) ISC2025 : HPC-AI が科学をけん引する理由

原題 : ISC2025 Keynote: How and Why HPC+AI is Driving Science

<https://www.hpcwire.com/2025/06/11/isc2025-keynote-how-and-why-hpc-ai-is-driving-science/>

(a) 要約

ISC2025 の基調講演において、AMD の Mark Papermaster 氏と ORNL の Scott Atchley 氏が語った HPC と AI の融合。ハードウェア、ソフトウェア、そして解くべき問題の性質が共通化し、両分野が不可分な関係にある現状。2 年ごとに GPU の演算性能とメモリ、ネットワーク帯域を倍増させる必要があるという「AI 時代の演算要求」。計算効率、特にエネルギー効率の向上と、オープンなエコシステム（標準化）の重要性。流体力学（ジェットエンジンの騒音低減）や新素材探索（超硬炭素 Bc8）における、HPC と AI の融合の具体的な成果。従来の物理シミュレーションでは計算が困難だった乱流などの複雑な現象を、AI で補完する新手法。持続可能なイノベーションに向けた、シリコンからラック全体にわたるホリスティックな設計アプローチ。

(b) 具体例

- ① オープン・ファン型ジェットエンジンの騒音問題を解決するための、AI を用いた高度な乱流シミュレーション
- ② ダイヤモンドを超える硬度を持つとされる炭素結晶「Bc8」の理論的解明に向けた大規模シミュレーション
- ③ 2024 年ゴードン・ベル賞受賞者による、AI を活用した創薬分野の量子化学計算の進展

(3) NSF : NAIRR 運営センター設立に対し資金提供

原題 : NSF Announces Funding to Establish the National AI Research Resource Operations Center

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/nsf-announces-funding-to-establish-the-national-ai-research-resource-operations-center/>

(a) 要約

米国国立科学財団（NSF）による、国家 AI 研究資源（NAIRR）運営センター設立のための 35M ドル（56 億円）の資金提供計画。試験運用段階（パイロット）から、スケーラブルで持続可能な国家プログラムへの正式な移行。研究者や学生、教育機関に対し、高度な AI 計算資源やデータセットへの公平なアクセスを保障。アカデミアと巨大 IT 企業間のリソース格差を是正し、医療、農業、国家安全保障などの分野での革新を支援。14 の連

邦機関と 28 の民間・非営利パートナーが協力する、国家規模の戦略的な投資。集中管理ツール、ステークホルダー・エンゲージメント戦略、および運用のフレームワーク構築を支援。AI イノベーションの民主化を図り、米国のグローバルなリーダーシップを維持・強化。

(b) 具体例

- ① 研究者向けに計算プラットフォーム、ソフトウェア、学習済モデルを一括提供するポータル構築
- ② 490 件以上の既存の研究プロジェクト（サイバーセキュリティや教育など）に対する継続的な支援
- ③ 特定の企業に依存しない、独立した技術研究を支えるための政府主導の計算資源供給スキーム

(4) Gartner：2025 年の世界 AI 支出額、1,500B ドル（240 兆円）の予測

原題：Gartner Says Worldwide AI Spending Will Total \$1.5T in 2025

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/gartner-says-worldwide-ai-spending-will-total-1-5t-in-2025/>

(a) 要約

ガートナーの最新発表に拠れば、2025 年における全世界の AI 関連支出は、前年比の大幅な増加を記録し、総額 1.5T ドル（240 兆円）に達する見込み。この急激な市場拡大の背景には、企業が生成 AI を単なる実験的な導入から、実用的なビジネス価値を生み出すための本格的な運用フェーズへと移行させている実体がある。特にソフトウェア、ハードウェア、および専門サービスへの投資が加速しており、IT 予算全体に占める AI 関連の割合が過去最高水準にまで高まっている。今後、焦点は多額の投資に見合うだけの明確な ROI を示せるかという点に集まり、組織には戦略的な資源配分が求められることになる。

(b) 具体例

- ① 生成 AI の基盤となる LLM の構築や、それらを活用したアプリケーション開発へのソフトウェア支出が急増
- ② AI ワークロードを支えるためのデータセンター基盤や、高性能サーバーチップ等のハードウェアへの支出が市場をけん引

(5) 中国 Sunway スーパーコンピュータ、AI で量子化学を拡張

原題：China's Sunway Supercomputer Scales Neural Networks for Quantum Chemistry

<https://www.hpcwire.com/2025/10/23/chinas-sunway-supercomputer-scales-neural-networks-for-quantum-chemistry/>

(a) 要約

中国の新型スーパーコンピュータ「Sunway（新神威）」を用いた、ニューラルネットワークによる量子化学シミュレーションの飛躍的進歩。3,700 万個のプロセッサコアをフル活用し、分子の量子状態をシミュレートするニューラルネットワークを訓練。SW26010-Pro プロセッサの特性を活かし、3,700 万コア規模で 98%という極めて高い並列化効率を達成。従来は量子コンピュータでしか扱えないと考えられていた複雑な分子問題を、古典スーパーコンピュータで処理可能に。物理法則とデータ駆動型学習を組み合わせた NNQS（Neural Network Quantum States）手法の採用。120 軌道の分子システムという、古典計算機としては過去最大規模の AI 駆動型量子計算を実現。高価で不安定な量子デバイスを待たず、既存のエクサスケール・インフラで実用的な材料・創薬研究が可能であることを証明。

(b) 具体例

- ① 3,700 万プロセッサコアという、世界最大級の計算リソースを用いたニューラルネットワークの分散学習
- ② データの移動を精密に制御する階層型通信モデルの導入による、ボトルネックの解消
- ③ 量子コンピュータと同等の精度で、巨大な分子系の電子の振る舞いを予測する計算モデルの構築

(6) ORNL に新型スーパーコンピュータ「Discovery」と「Lux」

原題：ORNL, AMD and HPE to Deliver DOE's Newest AI Supercomputers: Discovery and Lux

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/ornl-amd-and-hpe-to-deliver-does-newest-ai-supercomputers-discovery-and-lux/>

(a) 要約

オークリッジ国立研究所（ORNL）に導入される、AMD と HPE による次世代 AI スーパーコンピュータ「Discovery」と「Lux」。「Discovery」は HPE Cray GX5000 をベースに、次世代 AMD EPYC（Venice）と Instinct MI430X GPU を搭載。AI モデルの学習と科学的シミュレーションを統合し、研究の意思決定を劇的に加速させる設計。「Lux」は 2026年初頭に導入予定の、核融合や材料科学、グリッド管理などの国家課題に特化した AI クラスタ。エクサスケール機「Frontier」の成果を継承しつつ、AI 中心のアプローチで技術革命を推進。計算、AI、量子コンピューティングの融合を目指し、高精度医療やがん研究、航空宇宙などの分野で画期的な成果を狙う。グローバルな競争環境下での米国のリーダーシップ維持を目的とした、国家的な投資プロジェクト。

(b) 具体例

- ① 未発表の次世代プロセッサ「Venice」と、最新 GPU「MI430X」を組み合わせた「Discovery」の計算基盤
- ② 核融合（フュージョン）や先進製造業、サイバーセキュリティなどの特定分野を加速する「Lux」クラスター
- ③ 従来のシミュレーション手法と AI モデルを融合させ、解析時間を大幅に短縮する統合型ワークフロー

(7) NVIDIA と DOE、7 つの科学用 AI スーパーコンピュータ発表

原題：NVIDIA, DOE Announce Seven New AI Supercomputers Built for Science

<https://www.hpcwire.com/2025/10/28/nvidia-doe-announce-seven-new-ai-supercomputers-built-for-science/>

(a) 要約

NVIDIA と米国エネルギー省（DOE）による、科学研究を加速させるための AI スーパーコンピュータ 7 基の共同開発計画。アルゴンヌ国立研究所に設置される、10 万個の NVIDIA Blackwell GPU を搭載した「Solstice」システム。2026 年前半に稼働予定の、1 万個の Blackwell チップを搭載した「Equinox」システム。ロスアラモス国立研究所における、NVIDIA Vera Rubin プラットフォームを採用した「Mission」および「Vision」システム。科学的発見の最前線を維持し、国家のレジリエンスを強化するための戦略的なパートナーシップ。AI エージェントによる電力、冷却、ワークロードの継続的な最適化の実現。従来のスーパーコンピュータと AI を融合させ、気候変動、エネルギー、医療などの難問に挑む新時代の計算基盤。

(b) 具体例

- ① 10 万個の Blackwell GPU を搭載し、Oracle と共同で構築される世界最大級の「Solstice」システム
- ② デジタルツイン技術（NVIDIA Omniverse）を用いた、データセンターのエネルギー効率の最大化
- ③ インフィニバンド・ネットワーキング（Quantum-X800）を活用した、超高速データ通信環境の構築

(8) ACM、欧州の AI 規制再考を提言

原題：ACM Policy Group Proposes Fundamental Rethinking of AI Regulation in Europe

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/acm-policy-group-proposes-fundamental-rethinking-of-ai-regulation-in-europe/>

(a) 要約

ACM（計算機学会）の欧州技術政策委員会による、欧州における AI 規制の根本的な見直し案。環境リスクの明示的な考慮や、国際的な技術互換性の確保を柱とする提言内容。AI システムの炭素排出量に加え、原材料採掘による土地劣化や冷却水の消費まで含めた包括的な環境評価の必要性。グローバルな AI エコシステム維持に向けた、各国の規制間での相互運用性の重視。生成 AI の特殊性に応じた要件や、「正当性」「異議申し立て」の権利に関する定義の明確化。オープンソースのフレームワークやモデルのアーティファクトに対する適切なガイドラインの策定。イノベーションを促進しつつ、AI による被害を防ぐための透明性の高い規制プロセスの追求。研究者や組織が有害な AI の決定に対して異議を唱えられる仕組みの構築。将来的なリスク評価と社会的利益を両立させるための、政策立案者への具体的な勧告。

(b) 具体例

- ① データセンターの冷却に伴う水資源消費量を規制対象に含める環境評価の導入
- ② OECD の基準に準拠した AI 定義の統一による、国際的なビジネス障壁の排除
- ③ 有害な AI の判断結果に対し、ユーザが救済を求めるための権利保護スキームの構築

(9) AI データセンター再構築の裏側

原題：Powering Data in the Age of AI: Part 3 – Inside the AI Data Center Rebuild

<https://www.hpcwire.com/2025/10/30/powering-data-in-the-age-of-ai-part-3-inside-the-ai-data-center-rebuild/>

(a) 要約

AI ワークロードの急増に伴う、従来型データセンターの物理的・構造的な限界と再構築の現状。電力密度の劇的な上昇に対応するため、空冷から液冷（液浸冷却など）への移行が不可欠な状況。電力網（グリッド）との高度な連携や、ラック単位での電力管理の最適化。従来の汎用計算機用設計（ラック当たり 7～15kW）から、AI 専用の高密度設計への転換。ワークロードの特性に基づき、空気の流れやケーブル配線、構造支持を設計する「インサイドアウト」方式の採用。稼働までのスピードを重視しつつ、規制や電力確保の障壁をいかに突破するかが鍵。ハードウェアの進化だけでなく、インフラ側の静かなる再設計が AI の発展を左右する構造。

(b) 具体例

- ① 従来の空冷システムを代替する、冷却効率に優れた液浸タンク（Immersion Tanks）の導入

- ② AI エージェントを活用した、送電網の負荷と冷却システムのリアルタイムな自動最適化
- ③ 建物全体の設計を決定する前に行われる、特定の AI クラスタ需要に基づいた配線・構造設計

(10) ORNL ら、量子・AI 計算の進化で連携

原題：ORNL, NVIDIA, HPE Advance Quantum Computing, AI and HPC for Science

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/ornl-nvidia-hpe-advance-quantum-computing-ai-and-hpc-for-science/>

(a) 要約

ORNL、NVIDIA、HPE の 3 者による、科学研究を加速するための量子・AI・HPC の統合プラットフォーム構築。NVIDIA の量子シミュレーションプラットフォーム「CUDA-Q」と HPE のハードウェアインフラを組み合わせた開発環境の提供。従来の古典的アルゴリズムでは解けなかった複雑な物理現象を、量子と AI のハイブリッド手法で解明する試み。

科学者が複雑なコードを書かずに量子プログラミングを行えるよう、高抽象度なライブラリの整備。この提携は、将来のエクサスケール以降の計算機アーキテクチャのプロトタイプ作成も兼ねる。

(b) 具体例

- ① 量子化学計算における、触媒反応プロセスの分子レベルでの精密な模倣
- ② AI を用いた量子回路の最適化による、計算ステップ数の劇的な削減

(11) ハイペリオン・リサーチ：HPC における AI 投資の ROI 調査

原題：Hyperion Research Announces Availability of New AI in HPC ROI Study

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/hyperion-research-announces-availability-of-new-ai-in-hpc-roi-study/>

(a) 要約

調査会社ハイペリオン・リサーチによる、HPC 分野における AI 導入の ROI に関する最新調査報告。AI の統合が、計算コストの削減だけでなく、研究成果の質的向上と市場投入までの時間短縮に寄与していることを実証。産業界における具体的な成功事例に基づき、投資 1 ドル当たりの売上および利益への貢献度を数値化。AI 導入における最大の障壁は、技術的な困難さよりもデータ管理体制と専門人材の不足にあると指摘。今後、生成 AI の活用が HPC 予算に占める割合は、今後 3 年間で大幅に増加すると予測。

(b) 具体例

- ① 自動車産業における、衝突安全テストの物理試作削減による数 M ドル（数～10 数億円）のコスト回避
- ② 宇宙開発企業における、衛星データの AI 解析による異常検知精度の向上

(12) BSC、創立 20 周年祝典にて欧州 AI の進展を称賛

原題：BSC Marks 20 Years Advancing Supercomputing and AI in Europe

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/bsc-marks-20-years-advancing-supercomputing-and-ai-in-europe/>

(a) 要約

バルセロナ・スーパーコンピューティング・センター（BSC）は、欧州におけるスーパーコンピュータと AI の研究開発をけん引して 20 周年を迎え、その成果を公表した。BSC は設立以来、「MareNostrum」シリーズを運用し、EU の科学技術基盤として気象、生物学、宇宙物理学などの分野で数多くのブレークスルーを支えてきた。現在は最新鋭の「MareNostrum 5」を稼働させており、従来の HPC 計算に加えて、AI の大規模な学習や推論に特化したリソースを欧州中の研究者に提供している。同時に独自のチップ設計プロジェクトを積極推進する等、欧州の技術主権の確保においても中心的な役割を果たし続けている。

(b) 具体例

- ① 欧州デジタルツイン・プロジェクト「Destination Earth」における地球規模の気象予測
- ② 創薬開発を加速する、数十億規模の分子ドッキングシミュレーションの実施

(13) Infleqtion と ORNL が量子・HPC 統合の推進で提携

原題：Infleqtion and ORNL Partner to Advance Quantum-HPC Integration

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/infleqtion-and-ornl-partner-to-advance-quantum-hpc-integration/>

(a) 要約

量子コンピューティング企業の Infleqtion 社とオークリッジ国立研究所（ORNL）は、量子コンピュータと既存の HPC 環境を統合するための共同研究を開始した。この提携の下、量子プロセッサをスーパーコンピュータのアクセラレータとして機能させることで、従来のコンピュータでは求解の難しい計算問題への対応にも積極的に取り組む。特に、量

子アルゴリズムと古典的アルゴリズムをシームレスに組み合わせる、ハイブリッド型の計算プラットフォーム開発に焦点を当てることで、物流最適化や複雑分子構造のシミュレーション等、実社会課題解決策としての量子技術利用を一層加速させる。

(b) 具体例

- ① 量子コンピューティング資源を ORNL の HPC インフラに接続し、利用者が直接アクセス可能な環境を整備
- ② 複雑な物理現象の解析において、量子ビットを活用した高精度な計算モデルの開発を共同推進

(14) DOE、AI 技術革新計画「Genesis Mission」始動

原題： DOE Launches ‘Genesis Mission’ to Transform American Science and Innovation Through the AI Computing Revolution

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/energy-department-launches-genesis-mission-to-transform-american-science-and-innovation-through-the-ai-computing-revolution/>

(a) 要約

米国エネルギー省（DOE）は、米国科学分野とイノベーションの抜本改革を AI による技術革新を通じて進める「Genesis Mission」を始動させた。この取組では、国立研究所に配置された既存のスーパーコンピュータ群に最新の AI 機能を統合することで、科学的課題の解決を従来の数倍から数十倍へ高速化することを目指す。具体的には創薬、新素材開発、気候変動予測といった国家的重要課題解決において、AI 主導のシミュレーションとデータ解析を全面的に導入する。同時に、これら実現のための次世代ハードウェア開発と、専門知識を持つ人材育成にも積極的に巨額投資する。

(b) 具体例

- ① AI を活用した科学的成果創出の、1,000 日以内での達成を目指し、国立研究所間の連携を強化
- ② クリーンエネルギー実現や癌治療研究において、AI が自律的に仮説検証を進めるシステムを構築

(15) ALCF、2025-2026 年度利用者諮問委員会を発足

原題： ALCF Announces Its 2025-2026 User Advisory Council

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/alcf-announces-its-2025-2026-user-advisory-council/>

(a) 要約

アルゴンヌ・リーダーシップ・コンピューティング施設（ALCF）による、2025 年から 2026 年にかけての利用者諮問委員会の新体制発表。本委員会は、学术界、産業界、国立研究所の専門家で構成され、施設の戦略的計画とユーザ支援体制の改善を目的とする。最新のスーパーコンピュータ「Aurora」の本格運用に伴い、ユーザの技術的要望を開発側へフィードバックする役割を担う。AI for Science の推進に向けた計算リソースの最適化配分が議論の中心。データ管理の効率化や、計算機スタックのオープンソース化に関する提言も期待される。

(b) 具体例

- ① 多様な学術・産業分野から選出された有識者委員が、計算資源の公平な分配と利用効率の向上について議論
- ② 「Aurora」上での大規模 AI モデル学習や、複雑なシミュレーションを円滑化するための技術開発を積極支援

(16) Genesis Mission : 米 AI for Science 政策における戦略的転換

原題 : Genesis Mission: America's Strategic Shift in AI for Science

<https://www.hpcwire.com/2025/12/01/genesis-mission-americas-strategic-shift-in-ai-for-science/>

(a) 要約

米国政府が打ち出した「Genesis Mission」は、AI を活用して国内の科学的生産性を 10 年で倍増させることを目指す、国家規模の戦略的イニシアチブ。この計画では米国エネルギー省（DOE）傘下の国立研究所やスーパーコンピュータ、膨大な科学データを統合、一つの共有研究基盤の構築を目指す。背景には、中国等の競合国に対する技術的優位性の確保があり、AI をかつての原子力技術と同様の戦略的資産と位置付けている。このミッションを通じて、エネルギー、材料科学、国家安全保障といった多岐にわたる分野で、従来のシミュレーションを超える速度での発見と革新が期待されている。

(b) 具体例

- ① 核融合研究や次世代グリッドの近代化を加速、エネルギー主権の強化を目指す
- ② 民間企業や大学、17 の DOE 国立研究所を連携させ、共有 AI プラットフォーム「American Science and Security Platform」を構築

(17) IDC、世界のサーバー市場収益は 2025 年第 3 四半期に 61%増と予測

原題 : IDC: Worldwide Server Market Revenue Increased 61% During Q3 2025

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/idc-worldwide-server-market-revenue-increased-61-during->

(a) 要約

IDC 調査に拠れば、2025 年第 3 四半期の全世界サーバー市場は生成 AI 基盤への投資拡大を背景に、売上高が前年同期比 61%増の 112.4B ドル（18 兆円）という記録的な水準に達した。この急成長の主因は、ハイパースケーラーやクラウドサービスプロバイダーによる、GPU を搭載した「アクセラレーテッド・サーバー」への莫大な支出にある。市場の内訳を見ると、従来の x86 サーバーも堅調に推移しているが、AI 処理に特化した非 x86 サーバーの伸び率がそれを大幅に上回っている。地域別では米国が最大の成長を記録しており、AI がサーバー市場の構造を根本から塗り替えている現状が浮き彫りとなった。

(b) 具体例

- ① GPU 搭載サーバーの収入は前年比 49.4%増に達し、市場全体の売上高の半分以上を占める結果に
- ② 非 x86 サーバーの収入は前年同期比 192.7%増の 36.2B ドル（5.8 兆円）を記録し、特定用途向けチップの爆発的需要を裏付けた

(18) NIST、製造業・主要インフラ向け AI センターを設立

原題：NIST Launches Centers for AI in Manufacturing and Critical Infrastructure

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/nist-launches-centers-for-ai-in-manufacturing-and-critical-infrastructure/>

(a) 要約

NIST（米国国立標準技術研究所）は、製造業および主要インフラにおける AI の安全かつ効果的な活用推進のため、新たな専門センターを開設した。当イニシアチブは、AI 技術が社会の基幹システムに導入される際の信頼性を担保し、技術標準の策定やリスク管理の枠組みを提供することを目的とする。特に、工場の自動化やエネルギー網の最適化における AI の活用を支援し、産業全体の生産性向上と強靱化を図る。産学官の連携を強化することで、最新の研究成果を迅速に現場へ適用できる環境を整備し、安全性を維持しつつ国際的な競争力を維持することを目指す。

(b) 具体例

- ① 製造現場における品質管理や予測保全に AI を導入するための「製造 AI センター」を開設
- ② サイバーセキュリティや送電網の管理といった、国家的に重要なインフラ保護を目的とした AI 安全基準の策定を積極推進

(19) 2025 年 HPC 年間回顧録

原題：2025: An HPC Year in Review

<https://www.hpcwire.com/2025/12/17/2025-an-hpc-year-in-review/>

(a) 要約

2025 年の HPC 業界は、AI ブームの持続と技術革新、更には政治的な動向が複雑に絡み合った一年であった。殊に AI エージェントや推論モデルへの関心の高まりが、従来の科学計算の枠組みを大きく変容させたことが特筆される。また、世界各地で新型スーパーコンピュータが稼働を開始し、計算能力の限界を押し広げる一方で、電力供給や冷却技術といったインフラ面の課題がより深刻化した。加えて、量子コンピューティングの実用化に向けた進展や、国際的な技術覇権を巡る緊張感の継続など、業界全体が多極的な進化を遂げた年と言える。

(b) 具体例

- ① ドイツのユーリッヒスーパーコンピュータセンター（JSC）にて、TOP500 で 4 位を記録した「JUPITER Booster」システムが運用開始
- ② 科学分野において AI を活用し、新材料の発見や生物多様性のモニタリングを加速させる取組「AI for Science」が世界的に開花

(20) 2026 年半導体市場予測：AI アクセラレータの台頭

原題：2026 Semiconductor Predictions: Here Come the AI Accelerators

<https://www.hpcwire.com/2026/01/06/2026-semiconductor-predictions-here-come-the-ai-accelerators/>

(a) 要約

2026 年の半導体業界は、AI アクセラレータが市場のけん引役となり、設計/製造の両面で大きな変革期を迎えると予測。昨年は従来の汎用プロセッサに加え、特定の AI アルゴリズムに最適化されたカスタムチップの需要が、データセンターからエッジデバイスに至るまで爆発的に増加した。これに伴い、高帯域幅メモリ（HBM）の供給確保や、先進的なパッケージング技術の重要性が一段と高まっており、主要メーカーは巨額の設備投資を続けている。またエネルギー効率の向上が最優先課題となっており、性能向上と消費電力低減を両立させる新素材やアーキテクチャの導入が本格化している。

(b) 具体例

- ① NVIDIA や AMD に限らず、クラウドベンダー各社による独自 AI 専用チップ

(ASIC) 開発競争が激化

- ② 生成 AI ワークロード処理のため、次世代「HBM4」メモリ技術の採用が半導体メーカーの間に焦点に

(21) IDC、AI プラットフォームソフト市場の急成長を報告：2028 年までに 153B ドル（24.5 兆円）規模に拡大

原題：IDC Reports Rapid Growth in AI Platforms Software Market with \$153B Forecast by 2028

<https://www.hpcwire.com/bigdatawire/this-just-in/idc-reports-rapid-growth-in-ai-platforms-software-market-with-153b-forecast-by-2028/>

(a) 要約

IDC の報告によると、AI プラットフォームおよび関連ソフトウェア市場は、企業の生成 AI 導入意欲に支えられ、極めて高い成長率を維持している。これまでは実験的なパイロット運用が中心であったが、2026 年に向けて多くの企業が実用化フェーズへと移行しており、それに伴って開発ツールや基盤ソフトウェアへの投資が加速した。特に、既存のビジネスプロセスに AI を統合するためのミドルウェアや、データのガバナンスを確保するためのプラットフォーム機能に対する需要が顕著である。市場の拡大は、今後数年に渡り継続すると見込まれており、ベンダー間では機能の差別化とエコシステムの構築を巡る競争が激化している。

(b) 具体例

- ① 企業による独自 AI アプリケーション構築のための「AI プラットフォーム・ソフトウェア」投資が急増
- ② 生成 AI (GenAI) の台頭により、ソフトウェア市場全体の成長率は、従来の予測を大きく上回るペースで推移

(22) 米政策変更がデジタル主権・研究開発に与える影響

原題：Digital Sovereignty Initiatives and the U.S. Assault on Research

<https://www.hpcwire.com/2026/02/09/digital-sovereignty-initiatives-and-the-u-s-assault-on-research/>

(a) 要約

HPC や AI 等の先端技術を戦略的資産とみなし、国外、特に米国への依存を低減しようとする「デジタル主権」の動きが世界各地で強まっている。欧州や中国は独自のサプライチェーン構築を急いでいるが、半導体製造や原材料の確保を完全に国内で完結させることは困難であり、現実的な目標は「供給網の安全性確保」へとシフトしている。一方で、米

国国内では政府による科学研究予算の削減や、留学生の受け入れ制限といった「研究活動への圧力」とも呼べる政策が進行しており、これが米国の技術的優位性を揺るがす要因となっている。各国がデジタル主権を追求する中で、米国の閉鎖的な政策は結果として国外の技術革新を後押しし、世界的リーダーシップの勢力図を塗り替える可能性が出てきている。

(b) 具体例

- ① 国防総省やエネルギー省などの科学関連機関において、米国政府が大規模な人員削減を断行
- ② 米国製チップへのアクセス制限を受ける中、中国は独自のリソグラフィ技術の確立を2026年までに目指す

(23) デロイト AI 白書 2026：企業の AI 導入が遅れている理由

原題：Deloitte's State of AI 2026: Why Enterprise Execution Is Falling Behind Adoption

<https://www.hpcwire.com/aiwire/2026/03/04/deloittes-state-of-ai-2026-why-enterprise-execution-is-falling-behind-adoption/>

(a) 要約

デロイトによる報告では、企業の AI 導入は加速する一方、データ基盤やガバナンス、人材の再編が大幅に遅れている現状を指摘。AI ツールへのアクセス権を持つ従業員は前年比 50%増と急増したが、実際にそれらを定期利用できている割合は限定的であり、パイロット版から本格運用へ移行できた組織はわずか 25%にとどまっている。加えて、多くの企業が自律型 AI エージェントの導入を計画しているものの、適切なガバナンス体制を構築できているのは約 2 割に過ぎず、セキュリティやプライバシーへの懸念が根強い。結論として、AI による収益向上を実現するためには、単なるツールの導入ではなく、組織構造や業務プロセスの抜本的な再設計が必要と断じている。

(b) 具体例

- ① 自律型 AI エージェントの導入計画を持つ組織は 7 割超存在するものの、ガバナンスの整備まで完了済の組織に限れば、僅か 21%にまで減少
- ② AI 戦略の準備が整っていると回答した企業は約 40%に上るが、人材の準備にまで及ぶと 20%と未だ低水準

(24) AI ブームによる CPU 需要の再燃

原題：AI Boom Comes for CPUs, Which Are 'Cool Again'

<https://www.hpcwire.com/2026/03/09/ai-boom-comes-for-cpus-which-are-cool-again/>

(a) 要約

AI ブームの進展に伴い、これまで主役であった GPU に加え、CPU の需要も急速に高まってきている。当初は大規模言語モデルの学習に GPU が多用されたが、焦点が推論フェーズや自律型 AI エージェントの実行へと移るにつれ、前処理やオーケストレーションを担う CPU の役割が再評価されている。インテルや AMD の幹部は、2025 年から 2026 年にかけて X86 CPU の需要が想定を上回るペースで拡大中と述べており、特にエッジデバイスやオンプレ環境での推論処理において、低消費電力かつ汎用性の高い CPU が不可欠となっている。今後のデータセンター構築においては、GPU と CPU を融合させたヘテロジニアスな構成が主流となるものと予測される。

(b) 具体例

- ① インテル：産業用エッジ AI 向けにマルチスレッド性能を高めた「Core Series 2」を投入
- ② AMD：医療や産業用 PC を標的とした「Ryzen AI Embedded P100」シリーズを展開。同時に、データセンターにおける Direct-to-Chip 冷却システムの採用も拡大中。

3.1.4. まとめ

Hyperion 社調査（公開レポート）および HPCwire の報道（ここ 1 年間の報道）の一覧を作成し、本調査のテーマに一致する内容を選択し、まとめた。このまとめの情報源は、3.1.2 節以下に記載した情報のみからまとめている。

(1) AI 市場の動向

市場は歴史的な高成長モードにあり、AI、LLM、生成 AI がその主要なけん引役となっている。

- ・ 急速な市場拡大：2024 年のサーバー・クラウド市場は過去 20 年で最高の成長率（23.5%）を記録し、総支出は 60B ドル（9.6 兆円）を超えた。市場全体は 2029 年までに約 120B ドル（19.2 兆円）へと倍増する見込みである。
- ・ 投資と ROI の洗練化：AI 投資は拡大を続けているが、ユーザの関心は単なる導入から、具体的な ROI の実現や、成功指標に基づいた戦略的な調整へとシフトしている。
- ・ クラウドの台頭（Neo-Cloud）：サプライチェーンの遅延や頻繁なハードウェア刷新、高価な液体冷却への対応を背景に、AIaaS や GPUaaS を提供する「Neo-Cloud」の利用が加速している。

(2) 計算機・インフラの発展

AI の膨大な要求に応えるため、計算プラットフォームとデータセンターの設計思想が根

本から変革されている。

- ・ 超大規模計算クラスタの構築: 20 万個の NVIDIA GPU を搭載した xAI の「Colossus」や、10 万個の Blackwell GPU を搭載予定の「Solstice」など、驚異的な規模の計算基盤が稼働・計画されている。
- ・ 次世代インフラと効率化技術: 冷却技術の標準化: 電力密度の急上昇に対応するため液冷技術の採用が進み、HPC センターでの採用率は今後 12~18 か月で 80%に達すると予測されている。
- ・ モデルの効率化: 計算要件の抑制に向け、より小規模で効率的、かつ集中的なデータセットを用いたモデルへのシフトが始まっている。
- ・ 量子コンピューティングとの統合: HPC と量子コンピューティング (QC) のハイブリッド運用が進み、特定の物理現象や化学計算をスーパーコンピュータと連携して解明する試みが加速している。

(3) 利用分野の拡大

(a) 生命科学・医療・創薬

AI は、膨大なデータの解析とシミュレーションを加速させることで、人命救助に直結する分野で飛躍的な成果を上げている。

- ・ 新薬開発と薬剤再利用: 既存の抗うつ薬（イミプラミン）が特定の乳がん成長を阻害することを発見し臨床試験に至るなど、薬剤再利用（ドラッグ・リポジショニング）の効率を劇的に高めている。
- ・ ワクチン・抗体医薬: ユニバーサルインフルエンザワクチンや、ヘビ咬傷、HIV、新型コロナウイルスに対する広域スペクトル抗体医薬のプログラムに ML（機械学習）モデルが活用されている。
- ・ 精密医療とナノ技術: ポリマーナノ粒子による正確な薬物送達（ドラッグデリバリー）のリアルタイム解析や、がん研究における高精度医療の実現に寄与している。
- ・ 神経変性疾患の研究: アルツハイマー病やパーキンソン病の臨床研究において、正確なデータ取得と高品質なデータセットの提供を通じた支援が行われている。

(b) エネルギー・環境・地球科学

持続可能な社会の実現に向け、複雑な物理現象の解明とリソースの最適化に AI が導入されている。

- ・ 次世代エネルギーの開発: 核融合（フュージョン）発電の実用化に向けたプラズマ挙動のリアルタイム予測や、グリッド（電力網）管理の最適化に AI が活用されている。
- ・ 気候変動対策と環境保全: 二酸化炭素回収・貯留（CCS）技術のための新材料探索

や、地球規模の気象予測を行うデジタルツイン・プロジェクト「Destination Earth」が推進されている。

- ・ 公衆衛生と空気質評価: 大気汚染物質（煤、粉塵、排気ガス）の高精度な計算モデルを構築し、地域の空気質評価を支援している。

(c) 先端工学・材料科学

従来の物理シミュレーションでは膨大な時間を要した課題に対し、AI が計算時間を劇的に短縮しつつ高い信頼性を確保している。

- ・ 燃焼・流体シミュレーション: ジェットエンジンの騒音低減に向けた高度な乱流シミュレーションや、クリーンな燃料開発のための燃焼モデリングにおいて、信頼度 90-99%を維持しつつ計算時間を大幅に短縮している。
- ・ 新材料・結晶構造の解明: ダイヤモンドを超える硬度を持つとされる炭素結晶「Bc8」の理論的解明や、触媒反応プロセスの分子レベルでの精密な模倣が行われている。
- ・ 製造プロセスの最適化: 先進製造業におけるサイバーセキュリティの強化や、製造現場での意思決定を支援する AI モデルの統合が進んでいる。

(d) 基礎科学・量子科学

物理法則と AI を融合させることで、これまでは量子コンピュータでしか扱えないと考えられていた領域にもスーパーコンピュータで挑んでいる。

- ・ 量子化学計算の拡張: 中国の「Sunway（新神威）」スーパーコンピュータを用い、3,700 万プロセッサコアを活用して分子の量子状態をシミュレートするニューラルネットワーク訓練が実施されている。
- ・ 異分野間の知識文脈化: 考古学や火山学における自動的な「インテリジェント」オブジェクトの文脈発見など、分野を越えた概念的知識の整合的な利用を支援するフレームワークが開発されている。

(e) 社会インフラ・国家安全保障

国家レベルのレジリエンス（強靱性）強化や、公共サービスの向上を目的とした大規模な活用が進んでいる。

- ・ 国家安全保障とサイバー対策: サイバー攻撃の検知や、国家的な課題解決に向けた AI クラスタ（例:「Lux」）の運用が進められている。
- ・ 科学研究の民主化: 国家 AI 研究資源（NAIRR）を通じて、医療、農業、教育、サイバーセキュリティなど幅広い分野の研究プロジェクトに対し、AI 計算資源とデータセットが提供されている。

3.2. ライフサイエンス分野の基盤モデル

3.2.1. 情報源

下記の文献および Web 情報を情報源とした。

- [1] Fei Guo et al., "Foundation models in bioinformatics", National Science Review, Vol. 12, nwaf028, 2025.
- [2] Xiangrui Liu et al., "Foundation Model in Biomedicine", arXiv:2503.02104v2 [cs.LG], 2025.
- [3] Asher Moldwin & Amarda Shehu, "Foundation Models for AI-enabled Biological Design", arXiv:2505.11610v1 [cs.AI], 2025.
- [4] Abramson, J., et al., "Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3", Nature, 2024
- [5] Nguyen, E. D., et al., "HyenaDNA: Long-Range Genomic Sequence Modeling at Single Nucleotide Resolution", NeurIPS 2023 (arXiv), 2023
- [6] Hayes, T., et al., "Simulating 500 million years of evolution with a language model", Science, 2025
- [7] Lee, J., et al., "BioBERT: a pre-trained biomedical language representation model for biomedical text mining", Bioinformatics, 2020
- [8] Zhou, Z., et al., "DNABERT-2: Efficient Foundation Model and Benchmark for Multi-Species Genomes", ICLR 2024 (arXiv), 2023
- [9] Cui, H., et al., "scGPT: toward building a foundation model for single-cell multi-omics using generative AI", Nature Methods, 2024
- [10] Theodoris, C. V., et al., "Transfer learning enables predictions in network biology", Nature, 2023
- [11] TCGA : <https://www.cancer.gov/ccg/research/genome-sequencing/tcga>
- [12] Target Finder : <https://github.com/shwhalen/targetfinder>
- [13] ArrayExpress : <https://www.ebi.ac.uk/arrayexpress/>
- [14] GEO : <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/geo/>
- [15] ENCODE : <https://www.encodeproject.org/>
- [16] UniProt : <https://www.uniprot.org/statistics/>
- [17] PDB : https://www.rcsb.org/stats/data_storage_growth
- [18] ChEMBL : <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>
- [19] ZINC : <https://zinc22.docking.org/>
- [20] PubChem : <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/statistics/>
- [21] Single-Cell Exp. Atlas : <https://www.ebi.ac.uk/gxa/sc/home>

[22] Human Cell Atlas : <https://data.humancellatlas.org/>

3.2.2. 基盤モデルの現状

(1) 概要

ライフサイエンス分野の基盤モデルは、タンパク質、ゲノム、単一細胞解析の三領域に大別される。タンパク質領域では、980 億のパラメータを持つ「ESM-3」が、配列・構造・機能を統合的に扱う最新のマルチモーダル生成 AI として際立っている。また、Google DeepMind の「AlphaFold 3」は、拡散モデルを導入することで、タンパク質に加え DNA を含む複合体の構造予測を可能にした。ゲノム解析においては、100 万塩基の長配列を処理できる「HyenaDNA」や、DNA 特有のトークン化技術を持つ「DNABERT 2」が活用されている。単一細胞解析では、数千万細胞のデータを学習した「scGPT」や、遺伝子の相互作用を抽出する「Geneformer」が、発現データのコンテキスト学習に寄与している。これらのモデルは、生命科学の膨大なデータから高度な予測や生成を実現している。

(2) 基盤モデル開発の経緯と背景

ライフサイエンス分野の基盤モデルについて、2025 年以降に出版された 3 編のサーベイの[1]～[3]を基にする。論文[1]は表 3.5 に示す 5 つの分類となっている。[2]は、表 3.6 に示す幅広い分野での分類であり、2 項目以降はすべて BERT 系のモデルとなっている。また、[3]は、対象の分子の大きさをモデルで分類（CLM (Chemical)、PLM (Protein)、GLM (Genomic)）しているが、AlphaFold 等の基盤モデルが重視されていないので除外する。本報告書では、調査の目的に沿った[1]を中心にまとめるものとする。

表 3.5 論文[1]における基盤モデルの分類

分野	主なタスク	代表的なモデル例
ゲノミクス	変異効果の予測、プロモーター・エンハンサーの特定	DNABERT, HyenaDNA, Evo
トランスクリプトミクス	RNA 二次構造予測、スプライス部位予測、RNA 修飾検出	RNA-FM, SpliceBERT, GenerRNA
プロテオミクス	タンパク質構造予測、配列生成、変異検出	AlphaFold シリーズ, ESM2, ProtGPT2
創薬	分子特性予測、分子生成、標的タンパク質との相互作用	SMILES-BERT, MolGPT, Pocket2Mol
単一細胞解析	細胞型アノテーション、細胞クラスタリング、マルチオミクス統合	scGPT, scBERT, scFoundation

表 3.6 論文[2] における基盤モデルの分類

領域	主な内容・タスク	代表的なモデル例
計算生物学	ゲノム (DNA)、トランスクリプトーム (RNA)、プロテオーム (タンパク質) の解析	DNABERT-2, scGPT, AlphaFold 3
医療画像解析	放射線、病理、網膜画像のセグメンテーションや診断	MedSAM, CheXzero, Virchow
臨床情報学	電子カルテ(EHR)の要約、質問回答、患者表現学習	ClinicalGPT, BEHRT, Med-PaLM2
創薬・開発	分子表現学習、特性予測、臨床試験の成功予測	MoleculeSTM, ChemBERTa, HINT
公衆衛生	疾患監視、メンタルヘルス検出、パンデミック予測	PsychBERT, COVIDSum

(3) 基盤モデルの経緯

下記に[1]に示された基盤モデルとデータベースの経緯を記載する。

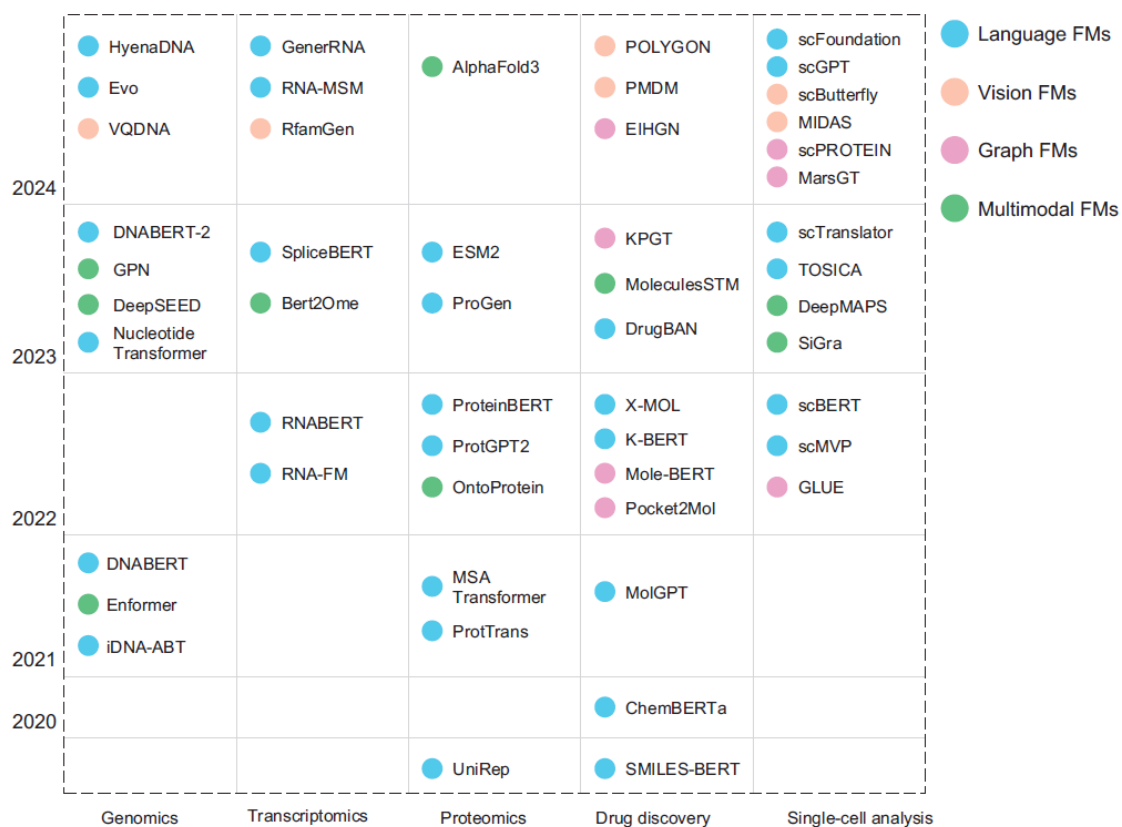


Figure 2. Evolution of FMs in bioinformatics.

図 3.1 ライフサイエンス分野での基盤モデル [1]

ライフサイエンス分野において、大規模なデータセットで学習を行う基盤モデルは、複雑な生命現象の解析に向けた重要な要素となっている。[1]に記載された基盤モデルを中心に表 3.7 に選定した 6 つのモデルは、表 3.5 の 5 つの主要分野において、それぞれの特性に応じた役割を担っている。

ゲノミクスでは、HyenaDNA が長い塩基配列を効率よく処理する技術を有し、DNABERT-2 は計算効率の向上により多種多様な生物種のゲノム解析を可能にしている。トランスクリプトミクスおよび単一細胞解析においては、scGPT が細胞の状態や制御ネットワークを推論するための統一的な基盤を提供し、Geneformer も細胞の機能変化を予測する一助として期待されている。プロテオミクスでは、ESM-3 が配列情報からタンパク質の性質を捉え、AlphaFold3 はタンパク質や核酸、小分子を含む複合体の構造を詳細に予測する機能を持つ。これらのモデルは、創薬において標的分子との相互作用の理解を深め、効率的な探索を支える基盤となっている。

表 3.7 ライフサイエンス分野の基盤モデル（その 1）

モデル名	開発元	アーキテクチャ	学習データ	データ量	データサイズ	パラメータ数
ESM-3	EvolutionaryScale	Multimodal Transformer	タンパク質配列・構造・機能	~27.8 億 配列	約 1.0 ～ 2.0 TB	980 億
HyenaDNA	Stanford Univ.	Hyena Operator	ヒトゲノム配列 (HG38)	32 億 塩基対	数 GB	(160 万)
DNABERT-2	UCSD 等	Encoder-only Transformer	多種ゲノム配列 (RefSeq)	~300 億 塩基対	約 5.0 ～ 10 TB	1 億 1,700 万
scGPT	Toronto Univ.	Generative Transformer	単一細胞 RNA 発現データ	約 3,300 万細胞 / 7,710 億トークン	約 2.0 ～ 4.0 TB	約 5,300 万
Geneformer	Broad Institute	Encoder-only Transformer	単一細胞 RNA 発現データ	約 9,500 万～1 億 300 万細胞	約 6.0 ～ 10 TB	3 億 1600 万 (V2 Large)
AlphaFold3	Google DeepMind	Diffusion /Pairformer	PDB 構造データ、リガンド等	17 万件超の構造 / 数億件の配列	約 3 TB	5 億

表 3.8 ライフサイエンス分野の基盤モデル（その2）

モデル名	ライセンス	主な用途・特徴	アーキテクチャの特徴
ESM-3	ESM Open License	タンパク質の配列・構造・機能を統合的に扱い、狙った役割を果たす最適な配列を設計・生成することでプログラマブル・バイオロジーを実現する。	980億パラメータを持ち約27.8億個のデータを学習。既存の枠組みを超えて人工の蛍光タンパク質設計に成功するなど、圧倒的な生成・予測精度を誇る。
HyenaDNA	Apache 2.0 (商用可)	最大100万塩基の長配列を一度に処理し、離れた遺伝子間の相互作用や制御領域、種の分類などをシングルヌクレオチド解像度で精密に解析・予測する。	Transformerの弱点を克服するHyena階層を採用し、計算量が長さに比例。従来の数百倍の文脈を高速に理解し、微細な情報の変化を捉える。
DNABERT-2	Apache 2.0 (商用可)	多種ゲノムを対象にプロモーター特定やメチル化検出、変異の影響予測を行い、ヒトを含む130種以上の生物に共通する進化的なパターンを解析する。	BPEトークン化を採用し、DNAのサブワードを効率的に抽出。1.17億の軽量パラメータで、従来比56倍の高速な学習と最先端の解析能力を両立する。
scGPT	MIT (商用可)	シングルセル解析で細胞型の自動判別、バッチ補正、遺伝子摂動予測、遺伝子制御ネットワークの推論を一手に引き受け、個別化医療の進展に寄与する。	約3300万個の細胞データを学習した初の生成AI。数万個の遺伝子間の相互作用を捉える5300万パラメータの脳を持ち、生物学的な直感で変化を捉える。
Geneformer	MIT (商用可)	遺伝子同士の関係性や疾患によるネットワークの乱れを深く理解し、遺伝子操作の影響シミュレーションや疾患に関わる重要因子の特定、転移学習を行う。	世界最大級の約1億個の細胞データを学習。心不全等の研究で有効性が実証されており、少量のデータから高精度な解析が可能な優れたデータ効率を持つ。
AlphaFold 3	非営利研究限定	タンパク質、DNA、RNA、リガンド、イオン等を含む巨大な複合体の3D構造をアミノ酸配列のみから一つのシステムで同時に高精度に予測する。	拡散モデルを導入し、原子の位置をノイズから復元。低分子化合物との結合予測精度を50%以上向上させ、創薬プロセスへの強力な支援能力を発揮する。

3.2.3. AI 基盤モデルを支えるデータ基盤

ライフサイエンス分野のデータ基盤は、ゲノム、タンパク質、創薬、シングルセルの各領域で巨大化が進行している。ゲノミクスでは、33 種のがんを対象とした 2.5 PB 規模の「TCGA」や、600 万サンプルを擁する世界最大の遺伝子発現アーカイブ「GEO」が研究の中核をなす。タンパク質領域では、1 PB 以上の配列情報を集約する「UniProt」や、生体高分子の立体構造を精密に収める「PDB」が標準リソースである。創薬分野では、膨大な化学構造を扱う「PubChem」や、バーチャルスクリーニングに特化した「ZINC」が圧倒的な規模を誇る。更に、シングルセル解析では「Human Cell Atlas」等が約 1,400 万細胞をマッピングし、生命科学のデジタル地図を提供している。これらの基盤は年間最大で数百 TB のペースで増大し続けており、AI 学習に不可欠な資源となっている。

ライフサイエンス分野において、基盤モデルは生物学的データの質に依存しており、それは膨大な量のマルチオミクスデータで構成されている。表 3.9 に示すように、ライフサイエンス分野の基盤モデルにおいては生物学的データベースが一般的に使用されている。

ゲノミクスにおいては、The Cancer Genome Atlas (TCGA) が、33 種類の異なるがんタイプをカバーする、正常サンプルと一致させた 20,000 以上のがんサンプルを分析している。ArrayExpress には、ハイスループットな機能ゲノミクス実験のデータが含まれている。

トランスクリプトミクスにおいては、Gene Expression Omnibus (GEO) が、マイクロアレイやその他のハイスループットな手法に由来する機能的ゲノミクスデータをアーカイブしている。Encyclopedia of DNA Elements (ENCODE) は、タンパク質や RNA に加えて、細胞活動や遺伝子発現を制御する調節要素を含む、ヒトゲノムにおける必須要素の包括的なデータベースである。

プロテオミクスにおいては、Universal Protein Resource (UniProt) が、包括的なタンパク質配列とアノテーションを含んでいる。Protein Data Bank (PDB) は、大きな生物分子の配列および 2 次元／3 次元構造を保持している。

創薬においては、ChEMBL は薬物様の特性を示す生物活性分子を細心の注意を払ってキュレーションしたデータベースである。ZINC は、バーチャルスクリーニング用に設計された、市販の化合物の一般公開データベースである。PubChem は、自由へのアクセスが可能な化学情報のコレクションである。

単一細胞データにおいては、Single-cell Expression Atlas が、様々な種にわたる単一細胞遺伝子発現の包括的なデータベースとして機能している。Human Cell Atlas は、人体の各細胞タイプをマッピングし、それによってヒト細胞の 3 次元アトラスを作成することを目指している。

(本節の以上の内容は[1]からの抜粋である)

表 3.9 ライフサイエンス分野のデータ基盤（その1）

分類	名称	期間	内容
ゲノミクス	TCGA	NIH (NCI/NHGRI)	33 種のがんを対象とした大規模なゲノム解析データ。変異や発現、臨床情報を統合した、がん研究に欠かせない包括的リソースである。
機能的ゲノミクス	ArrayExpress (BioStudies に統合)	EMBL-EBI	次世代シーケンス等の遺伝子発現データの公共リポジトリ。機能ゲノミクス実験の詳細なメタデータと生データを、欧州を拠点に提供する。
統合アーカイブ	BioStudies	EMBL-EBI	論文の全データを集約するデータベース。ArrayExpress を統合し、マルチモーダルな研究データの一括管理とリンクで再現性を支える。(データ量は電子顕微鏡データ EMPIRE が支配的)
機能的ゲノミクス	GEO	NCBI (NIH)	NCBI が運営する世界最大の機能ゲノミクスレポジトリ。公開されたマイクロアレイや NGS の生データを収集し、検索や再利用を可能にする。
機能的ゲノミクス	ENCODE	NHGRI (NIH)	タンパク質、RNA、遺伝子発現や細胞活動を制御する調節要素などヒトゲノムの必須要素を網羅した、包括的な機能ゲノミクスデータベース
プロテオミクス	UniProt	UniProt Consortium (EMBL-EBI,SIB,PIR)	タンパク質の配列情報と機能注釈を統合した世界標準のリソース。高精度なキュレーションデータにより、生物学研究の基盤を広く支える。
プロテオミクス	PDB	wwPDB	タンパク質や核酸など、生体高分子の 3 次元立体構造データを集約。新薬開発や生命現象の解明など、世界の生命科学研究を支える必須の基盤。
創薬	ChEMBL	EMBL-EBI	医薬品候補やバイオアクティブ分子の活性情報を収録。標的タンパク質との相互作用データを整理し、データ駆動型の創薬研究を強力に支援。
創薬	ZINC	UCSF 医薬化学科	バーチャルスクリーニングに特化した市販化合物の巨大 DB。ドッキング計算に即時利用可能な 3D 構造や物理化学的特性データを公開。
創薬	PubChem	NCBI (NIH)	化学物質の名称、構造、生物活性を網羅した世界最大級の DB。化合物とタンパク質の関係や毒性情報を統合し、オープンに提供している。
シングル	Single-Cell	EMBL-EBI	1,000 万超の細胞を対象とした、シング

セル	Exp. Atlas		ルセル遺伝子発現の包括的 DB。異なる組織や疾患間での発現差異を細胞レベルで精密に解析可能。
シングルセル	Human Cell Atlas	HCA Consortium (Broad Institute, EMBL-EBI 等)	ヒトの全身の細胞をマッピングする国際プロジェクトの成果。細胞の種類や状態、位置情報を網羅した、生命科学のデジタル地図を提供。

表 3.10 ライフサイエンス分野のデータ基盤（その 2）

名称	件数（目安）	データサイズ	年間増加量（目安）
TCGA	実験: 77,585 件	2.5 PB	プロジェクト終了
ArrayExpress	アッセイ: 2,429,810 件	56.68 TB	—
BioStudies	26.464.332 files; 10.369.537 links; 2.398.055 studies	8PB 以上	1PB 以上
GEO	Samples: 8,388,256 件	数百 TB	15%
ENCODE	Series: 280,160 件	1 PB 以上	不明
UniProt	Platforms: 28,191 件	1TB 以下(2KB/エントリと仮定)	2%
PDB	DataSets: 4,348 件	366 TB	87 TB
ChEMBL	実験: 23,439 件	10~20GB (ChEMBL 34)	10%程度
ZINC	ファイル: 1,171,460 件	数十 TB	10%程度
PubChem	エントリ 203,130,941 件	約 1.4TB 以上	約 5~10%
Single-Cell Exp. Atlas	(アミノ酸:約 757 億個)	数 TB 以下	10%程度以上
Human Cell Atlas	250,496 件の登録	830 TB	約 100 TB

3.2.4. AlphaFold（Google DeepMind）

本節は、[4]をまとめたものである。

(1) 開発機関

AlphaFold は、イギリスのロンドンに拠点を置く AI 研究企業である Google DeepMind によって開発された。DeepMind 社は、かつて囲碁 AI の「AlphaGo」で世界を驚かせたことでも知られているが、その高度な深層学習技術を生命科学の難問である「タンパク質の

立体構造予測」に応用した成果が AlphaFold である。この開発プロジェクトは、DeepMind 社の共同創業者であり CEO の Demis Hassabis 博士や、シニアリサーチサイエンティストの John Jumper 博士らを中心とするチームによって推進された。彼らの功績は科学界に革命をもたらしたと高く評価され、2024 年にはハサビス氏とジャンパー氏の両名がノーベル化学賞を受賞している。

また、AlphaFold の普及においては、欧州分子生物学研究所の欧州バイオインフォマティクス研究所(EMBL-EBI)との強力なパートナーシップも重要な役割を果たしている。DeepMind 社と EMBL-EBI は共同で「AlphaFold Protein Structure Database」を構築し、予測された数億件ものタンパク質構造データを全世界に無償で公開することで、創薬や生物学研究の基盤を支える公共的なインフラを提供している。

(2) 概要

AlphaFold は、Google DeepMind によって開発された、アミノ酸配列のみからタンパク質の 3 次元構造を予測する AI システムである。「タンパク質がどのように折り畳まれるか」という問題は、生物学における 50 年来の難問であったが、AlphaFold はこの分野に革命をもたらし、生命科学の研究スピードを劇的に加速させた。

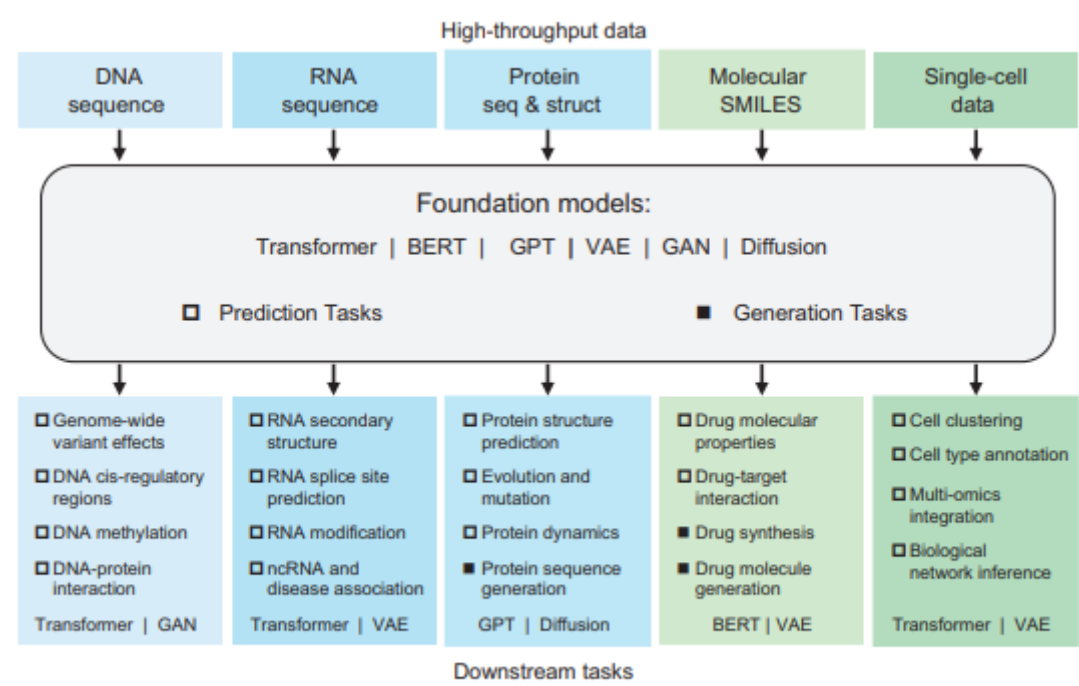


Figure 1. Foundation models in bioinformatics.

図 3.2 バイオインフォマティクスにおける基盤モデル(AlphaFold 3)の構造とタスク体系。
National Science Review 12: nwaf028, 2025 の Figure 1。

(a) AlphaFold の進化の歴史

AlphaFold は、数年おきに抜本的なアーキテクチャの更新を行い、その性能を飛躍させてきた。

- ・ AlphaFold (2018 年): 2018 年のタンパク質構造予測コンテスト (CASP13) で初登場した。この時のモデルは、既存のバイオインフォマティクスの手法とディープラーニングを組み合わせたものであったが、それでも従来の予測精度を大きく上回り、世界を驚かせた。しかし、まだ実験データと完全に置き換わるほどの精度ではなかった。
- ・ AlphaFold2 (2020 年): 2020 年の CASP14 で発表された AlphaFold2 は、完全に新しい「エンドツーエンド」の学習アルゴリズムを導入した。ここでは「Evoformer」と呼ばれる独自の Transformer 構造を採用し、進化の過程で保存されている情報の相関関係を直接学習できるようになり、ほぼ実験データと同等の精度で構造を予測できるようになった。この功績により、開発の中心人物である Demis Hassabis と John Jumper は、2024 年にノーベル化学賞を受賞している。
- ・ AlphaFold 3 (2024 年): 2024 年に発表された最新の AlphaFold 3 は、タンパク質単体にとどまらず、「生命のすべての分子」の相互作用を予測できるまでに進化した。タンパク質同士の結合だけでなく、DNA、RNA、リガンド（低分子化合物）、更にはイオンや化学修飾までを含めた複合体の構造を予測できる。従来の複雑な工程を簡略化し、Diffusion を採用したことで、より柔軟かつ高精度な分子間相互作用の描写が可能となった。

(3) 主な機能

AlphaFold 3 は、Google DeepMind と Isomorphic Labs が共同で開発した最新世代のモデルであり、その最大の特徴はタンパク質単体の予測を超え、「生命を構成するほぼすべての分子」の相互作用を一つのシステムで予測できるようになった点にある。

主な機能の第一は、広範なバイオ分子コンプレックス（複合体）の予測である。従来のモデルが主にタンパク質同士の結合を扱っていたのに対し、AlphaFold 3 はタンパク質、DNA、RNA、そして低分子化合物、更にはイオンや化学修飾までを含めた巨大な複合体の 3D 構造を同時に予測できる。これにより、例えば「特定の薬物（低分子）がタンパク質のどこに結合し、その結果 DNA との結合がどう変化するか」といった、生命現象の核心に迫るシミュレーションが極めて高い精度で可能になった。

第二の重要な機能は、Diffusion の導入による予測精度の向上である。AlphaFold 3 は、生成 AI の画像生成技術（Stable Diffusion など）に近い仕組みを採用しており、原子の位置を「ノイズから復元する」プロセスを通じて構築する。この手法により、分子間の結合部位や、これまでの手法では予測が難しかったタンパク質の柔軟な構造（ループ領域など）も、物理法則に矛盾しない形でより自然に描き出すことができるようになった。特に、従来の物理学ベースの計算手法と比較しても、低分子化合物との結合予測において 50%以上

の精度向上を達成している。

第三の機能は、創薬プロセスへの強力な支援能力である。AlphaFold 3 は、抗体と標的タンパク質の結合様式を予測する能力が飛躍的に向上しており、新しい抗体医薬の設計に直接活用されている。また、タンパク質の表面にある「ドラッグブル・ポケット（薬がはまりそうな窪み）」を特定し、そこへの化合物の適合度を評価できるため、実験室での膨大な試行錯誤を大幅に削減し、新薬候補の発見を加速させる役割を担っている。

更に、これらの機能を専門知識がない研究者でも手軽に利用できるよう、「AlphaFold Server」という無料のクラウドツールが提供されている点も特筆すべき機能的側面である。数回のクリックで複雑な分子の組み合わせを指定するだけで、数分から数時間以内に高精度な 3D モデルを取得できる環境が整っている。

このように、AlphaFold 3 は単なる構造予測ツールから、「生命の動的な相互作用をシミュレートするデジタルラボ」へと進化した。

(4) 学習時間

AlphaFold 3 は、タンパク質、核酸、低分子化合物、イオンなどを一律に扱う革新的なアーキテクチャを採用しており、その計算規模もそれ相応に巨大なものとなっている。

(a) パラメータ数

AlphaFold 3 の最新の最適化モデルのパラメータ数は、約 6 億 (600M) から約 5 億 (500M) パラメータ程度と報告されている。これは、AlphaFold 2 (約 9,300 万パラメータ) と比較して約 6 倍以上の規模に拡大している。この拡大は、タンパク質だけでなく、DNA や RNA、更には複雑な有機化合物といった多様な分子間の相互作用を一つのネットワークで統合的に処理するために必要となったものである。内部には、従来の「Evoformer」を改良した「Pairformer」や、構造生成を担う「Diffusion Module」が組み込まれており、モデルの「表現力」が格段に向上している。

(b) 学習時間と計算リソース

AlphaFold 3 の事前学習には、Google が誇る膨大な計算インフラが投入されている。ハードウェア: 主に Google 自社開発の AI プロセッサである TPU v4、あるいは NVIDIA H100/A100 GPU のクラスタが使用されている。学習データ量: タンパク質構造データバンク (PDB) に登録されている約 17 万件以上の構造データに加え、数億件の配列データを含む広範なデータベースが学習に用いられた。学習時間 (推定値): 具体的な合計学習時間は環境によるが、開発時の報告やオープンソースによる再現プロジェクト (OpenFold2 や Boltz-1 など) のデータに基づくと、128 個の GPU を使用した場合でも約 11 日間以上の連続稼働が必要な計算量とされている。Google DeepMind によるフルスケールの事前学習では、更に大規模なクラスタ (100~200 基単位の GPU/TPU) を数週間稼働させることで、

モデルの収束を図っている。

(c) 学習の特徴

AlphaFold 3 の学習プロセスで特筆すべきは、Diffusion Model の導入である。従来の AlphaFold 2 が座標を直接出力していたのに対し、AlphaFold 3 はノイズから構造を復元するプロセスを学習している。この学習には非常に高い計算コストがかかるが、その代わり、原子レベルでの接触や結合の「正しさ」を、物理法則に即してより柔軟に学習できるようになった点が、長時間の学習を要する大きな要因の一つとなっている。

3.2.5. HyenaDNA (Stanford 大学)

ゲノム解析の世界に「長いコンテキスト (文脈)」という革命を持ち込んだ非常に興味深いモデルである。本節は、[5]をまとめたものである。

(1) 開発機関

HyenaDNA は、主にスタンフォード大学の研究チームによって開発された。中心となったのは、AI の効率化や新しいアーキテクチャの研究で知られる Hazy Research グループである。また、ミラ・アルゴリズム研究所 (Mila) やカナダ高等研究機構 (CIFAR) の研究者も協力しており、アカデミックな知見が集結したプロジェクトと言える。

(2) 概要

「DNA という非常に長い『文字列』を、これまでの AI よりも圧倒的に長く、かつ高速に理解できるモデル」である。ChatGPT などに使われている「Transformer」技術は、入力が長くなればなるほど、計算量が爆発的に増えてしまう (二乗の法則) という弱点があった。DNA は数千〜数億の塩基配列 (A, T, C, G) が連なる超巨大なデータであるため、Transformer では「一度に読み取れる範囲」が非常に限定的であった。

HyenaDNA は、Transformer の代わりに「Hyena (ハイエナ) 階層」という新しいアーキテクチャを採用している。最大で 100 万トークン以上の配列を一度に処理できる。これは従来のモデル (数千トークン程度) に比べて数百倍の長さである。長さに比例して計算量が増える設計 (線形時間) のため、長い配列でも現実的な時間で処理が可能である。シングルヌクレオチド解像度として、DNA を数文字ずつの「単語」に区切るのではなく、1 文字 (1 塩基) 単位で処理するため、微細な遺伝情報の変化も見逃さない。

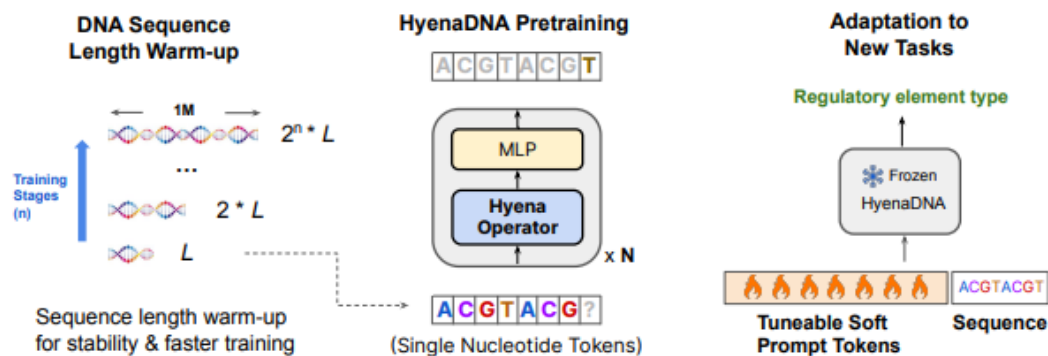


Figure 1.1: HyenaDNA recipe for long-range foundation models in genomics. The HyenaDNA architecture is a simple stack of Hyena operators (Poli et al., 2023) trained using next token prediction. (See Fig. 1.3 for block diagram of architecture). We introduce a new sequence length scheduling technique to stabilize training, and provide a method to leverage the longer context length to adapt to novel tasks without standard fine-tuning by filling the context window with learnable soft prompt tokens.

図 3.3 HyenaDNA における超長鎖ゲノム配列の学習・適応プロセスと単一塩基解像度の実現 [5]

(3) 主な機能

ゲノムを読み解くために特化した AI モデルである。従来のモデルでは難しかった、以下の 4 つの主要な機能を備えている。

(a) 超長鎖配列のダイレクトな処理

最大の機能は、最大 100 万塩基もの長い DNA 配列を一度に処理できる点である。従来の AI (Transformer 型) は、一度に読み込める長さが数千〜数万塩基が限界であったが、HyenaDNA はこれまでの 100 倍以上の長さを一気に「文脈」として理解でき、これにより、離れた場所にある遺伝子同士の相互作用も捉えることが可能である。

(b) 単一塩基レベルの精密な解析 (シングルヌクレオチド解像度)

多くのモデルは DNA を数文字ずつの「単語」にまとめて読み取るが、HyenaDNA は 1 文字 (1 つの塩基) 単位で処理する。このため、たった 1 文字の違い (SNP : 一塩基多型) が病気や体質にどう影響するかといった、非常に細かい変化を正確に判別する能力を持っている。

(c) 高速かつ効率的な計算

長いデータを扱う際、従来の AI は計算量が爆発的に増えて処理が追いつかなくなる課題があった。HyenaDNA は「Hyena 階層」という数学的な工夫 (高速フーリエ変換を用い

た畳み込み演算)により、配列が長くなっても計算時間が急激に増えない仕組みを持っており、巨大なゲノムデータも現実的な時間で解析できる。

(d) ゲノム特性の予測と分類

学習した知識を応用して、種の分類 (DNA の断片から、それがどの生物のものかを特定)、制御領域の予測 (遺伝子のスイッチを入れる「プロモーター」や「エンハンサー」といった重要な領域の特定)、クロマチンアクセシビリティの予測 (DNA のどの部分が読み取りやすい状態にあるかを予測し、細胞の働きを分析) といった多様なタスクを実行できる。

(4) 学習時間

このモデルの学習効率は、従来のモデルと比較して劇的に向上している。開発チームの報告によると、100 万塩基 (1M context) という非常に長い配列を学習させる際、従来の Transformer モデルでは計算量が膨大になりすぎて処理が停止してしまうのに対し、HyenaDNA は単一の NVIDIA A100 GPU を使用した場合でも、現実的な時間で処理を完結できることが示されている。

具体的なベンチマークの一例として、16万塩基 (160k) 程度の長さのデータを処理する場合、HyenaDNA は Transformer よりも約 160 倍高速に動作する。これを実際の学習時間に当てはめると、従来のモデルで数ヶ月を要するような膨大なゲノムデータの事前学習が、HyenaDNA のアーキテクチャを用いることで、標準的な GPU クラスタを利用して数日から数週間という単位にまで短縮されている。

また、ヒトゲノム全体 (約 30 億塩基対) をカバーする事前学習においても、その計算効率の良さが発揮されている。百万塩基単位の長いコンテキストを保持したまま学習を進めても、計算コストが入力長の長さにほぼ比例 (線形) してしか増えないため、限られた計算リソースで非常に深いレベルの遺伝子情報の理解が可能になった。

このように、HyenaDNA は「時間の壁」を打ち破ることで、これまでスーパーコンピュータ級の設備がなければ不可能だった「ゲノム全体を一気読みする学習」を、より身近な研究環境でも実現可能にしている。

HyenaDNA の事前学習には、主にヒト参照ゲノム (Human Reference Genome) が使用されている。具体的には、「HG38」(別名 GRCh38) と呼ばれる、世界中で標準的に利用されているヒトゲノムの最新の参照配列データがベースとなっており、この約 30 億塩基に及ぶ巨大な配列データを、1 文字単位 (シングルヌクレオチド解像度) でモデルに読み込ませることで、DNA の基本的なパターンや構造を学習している。

事前学習を終えた HyenaDNA が、特定の機能を果たすために追加で学習 (ファインチューニング) や評価を行う際には、GenomicBenchmarks (ゲノム解析モデルの性能を測定するための標準的なベンチマーク集)、Nucleotide Transformer ベンチマーク (先行す

他のゲノム解析 AI の性能を比較するために用意された 10 以上のデータセット)、エピゲノム関連データ (DNA のスイッチの入りやすさを測る「クロマチンアクセシビリティ」などの予測において、公開されている公的なオミクスデータ) といった専門的なデータセットも組み合わせて使用される。

3.2.6. ESM-3(Meta)

本節は、[6]をまとめたものである。

(1) 開発機関

ESM-3 (Evolutionary Scale Modeling 3) は、EvolutionaryScale 社によって開発された。この企業は、従来 Meta (旧 Facebook) の AI 研究部門 (Meta AI) でタンパク質言語モデル「ESM」シリーズをけん引していた中心メンバーたちがスピンオフして設立したスタートアップである。Meta 時代に培われた技術を更に進化させ、より大規模で汎用的なモデルとして ESM-3 を世に送り出した。

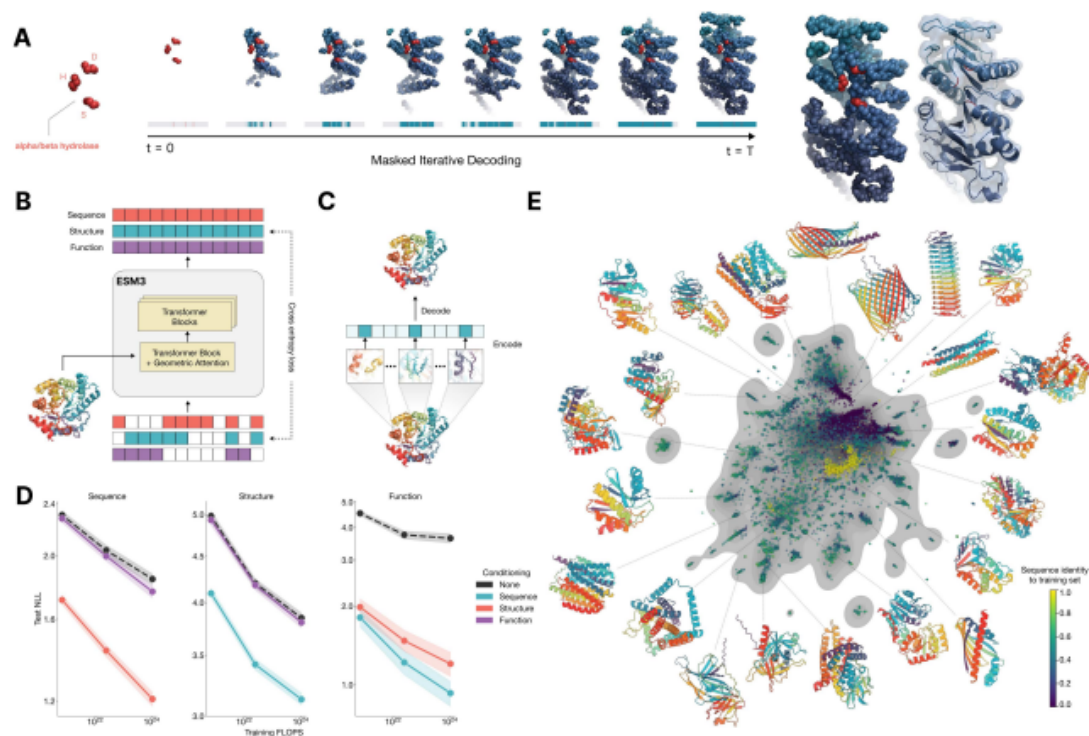


Figure 1. ESM3 is a generative language model that reasons over the sequence, structure, and function of proteins. (A) Iterative sampling with ESM3. Generation of an alpha/beta hydrolase. Sequence, structure, and function can all be used to prompt the model. At each timestep t , a fraction of the masked positions are sampled until all positions are unmasked. (B) ESM3 architecture. Sequence, structure, and function are represented as tracks of discrete tokens at the input and output. The model is a series of transformer blocks, where all tracks are fused within a single latent space; geometric attention in the first block allows conditioning on atomic coordinates. ESM3 is supervised to predict masked tokens. (C) Structure tokenization. Local atomic structure around each amino acid is encoded into tokens. (D) Models are trained at three scales: 1.4B, 7B, and 98B parameters. Negative log likelihood on test set as a function of training FLOPs shows response to conditioning on each of the input tracks, improving with increasing FLOPs. (E) Unconditional generations from ESM3 98B (colored by sequence identity to the nearest sequence in the training set), embedded by ESM3, and projected by UMAP alongside randomly sampled sequences from UniProt (in gray). Generations are diverse, high quality, and cover the distribution of natural sequences.

図 3.4 ESM-3 におけるマルチモーダル生成プロセスとトークン化の全体像[6]

(2) 概要

ESM-3 は、タンパク質の「配列」「構造」「機能」という 3 つの異なる要素をひとつのモデルで同時に扱う「マルチモーダルな理解」を実現している。従来の AI モデルは、アミノ酸の配列か 3D 構造のどちらか一方の解析に特化する傾向があったが、ESM-3 はこれらを統合的に捉えることができ、この能力により、特定の形（構造）を持ち、かつ狙った役割（機能）を果たすための最適な配列を、科学者が自在に設計できるようになった。

この驚異的な精度の背景には、圧倒的な学習データ量が存在する。ESM-3 は、土壌や海洋、更には極地といった地球上のあらゆる環境から収集された約 27.8 億個ものタンパク質データを学習している。これにより、自然界が数億年という長い歳月をかけて積み重ねてきた「進化」のパターンを AI がシミュレートし、生命の設計ルールを深く取り込んでいる。

以上の高度な理解に基づき、ESM-3 は「プログラマブル・バイオロジー（プログラミング可能な生物学）」という新たな地平を切り開いている。これは、科学者が「特定の機能を持つタンパク質を作ってほしい」という指示（プロンプト）を与えるだけで、自然界には存在しない新しいタンパク質をゼロから設計できる技術である。

ESM-3 の実力を証明する具体的な実証事例として、開発チームは全く新しい人工の蛍光タンパク質「esmGFP」の設計に成功した。この人工タンパク質は、自然界に存在する緑色蛍光タンパク質（GFP）と配列が 58% しか一致していないが、同様の鮮やかな輝きを放ち、ESM-3 が既存の枠組みを超えて、生命の複雑なパズルを正しく解き明かせることを如実に示した。

(3) 主な機能

ESM-3 の最も革新的な機能は、タンパク質の「配列」「構造」「機能」という 3 つの異なるモダリティを同時に、かつ双方向に扱うことができる「マルチモーダル生成」にある。従来のモデルは、配列から構造を予測する、あるいは構造から配列を設計するといった一方のタスクに特化していたが、ESM-3 はこれらを統合されたひとつの潜在空間で処理でき、これにより、例えば「特定の 3D 形状を持ち、かつ特定の化学反応を触媒する機能を持つ配列」といった、複雑な条件（プロンプト）を組み合わせた設計が可能である。

また、ESM-3 は「生成 AI」としての側面を強く持っており、自然界の進化のプロセスをデジタル上でシミュレートする機能を備えている。単に既存のタンパク質を模倣するだけでなく、28 億個にも及ぶ膨大な学習データから生命の設計ルールを抽出することで、自然界には存在しない全く新しいタンパク質をゼロから「書き出す」ことができる。この機能は、薬の種となる抗体の設計や、環境負荷を低減するプラスチック分解酵素の開発、更には二酸化炭素を回収する新しいバイオ素材の創出など、幅広い分野への応用が期待されている。

更に、実用面では「プログラマブル・バイオロジー（プログラミング可能な生物学）」を実現するプラットフォームとしての機能も重要である。ユーザは、アミノ酸の特定の部位を指定したり、断片的な構造情報を与えたりすることで、モデルと対話するように設計案を洗練させていくことができる。このように、数億年かかる自然界の試行錯誤を、コンピュータ上の数ステップの計算に凝縮して実行できる点が、ESM-3 が「生命の科学を加速させるツール」と呼ばれる所以である。

(4) 学習時間とパラメータ

ESM-3 は、生物学分野の AI モデルとしては過去最大級のスケールを誇り、そのパラメータ数は最大で 980 億 (98B) に達する。これは、先行モデルである ESM-2 (150 億パラメータ) と比較して約 6.5 倍もの規模であり、汎用的な大規模言語モデルである GPT-3 の半分以上に相当する巨大な「脳」を持っていると言える。また、研究コミュニティ向けには扱いやすい 70 億 (7B) や 14 億 (1.4B) といった異なるサイズのモデルも展開されており、用途に応じた選択が可能になっている。

この巨大なモデルを構築するために投入された計算資源も、他に類を見ない圧倒的なものである。学習には、地球上のあらゆる環境から収集された約 27.8 億個ものタンパク質配列が使用され、総計で 7,710 億トークンもの膨大なデータを処理している。計算量の観点では、約 1.07×10^{24} 回という天文学的な演算が行われ、これは生物学特化型のモデルに投入された計算量としては、これまでで最大規模のものとなる。

具体的な学習期間については公式な日数は明示されていないが、最新の GPU である NVIDIA H100 を数千枚規模で稼働させたとしても、完了までには数か月単位の時間を要したと推測される。このように、ESM-3 は膨大なパラメータ数と、それに見合う極めて大規模な計算ステップを経ることで、自然界が数億年かけて積み上げてきた進化のルールをデジタル上で精緻に再現することに成功した。

3.2.7. BioBERT(Korea University)

本節は、[7]をまとめたものである。

(1) 開発機関

BioBERT は、韓国の高麗大学校 (Korea University) と、検索エンジンや AI 開発で知られる NAVER Corp の研究チームによって共同開発された。このモデルは、Google が開発した汎用的な言語モデル「BERT」をベースに、生物医学分野に特化させた言語表現モデルである。一般的なテキストデータで学習された BERT だけでは、医学や生物学の専門用語、あるいは論文特有の複雑な文脈を正確に理解することが難しかったため、この課題を解決するために誕生した。

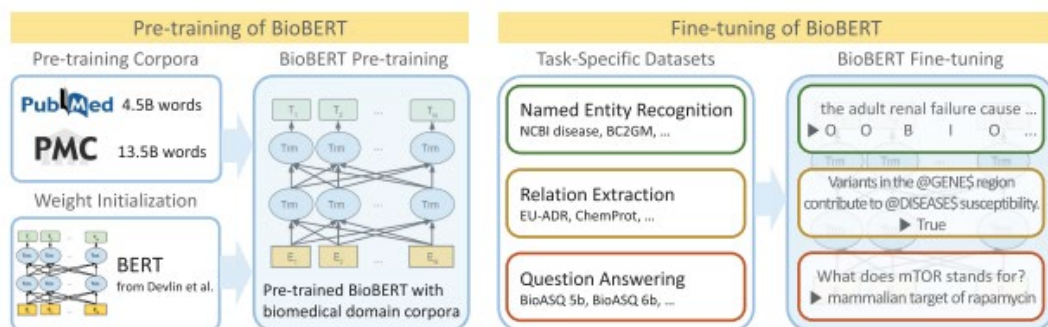


Fig. 1. Overview of the pre-training and fine-tuning of BioBERT

図 3.5 BioBERT の事前学習プロセスとバイオメディカル・テキストマイニングへの応用フロー[7]

(2) 概要

PubMed の論文抄録（約 45 億ワード）や、PMC（PubMed Central）の全文記事（約 135 億ワード）といった膨大な生物医学文献を対象に追加の事前学習が行われている。この特化した学習プロセスにより、BioBERTは医学的なエンティティ（病名、薬剤名、遺伝子名など）の抽出や、質問応答、更には医学文献の要約といったタスクにおいて、従来の汎用モデルを大きく上回る性能を発揮する。現在では、膨大な医学論文から新たな知見を効率的に掘り起こす「テキストマイニング」の分野で、世界中の研究者に広く利用されている標準的なツールとなっている。

(3) 主な機能

BioBERTの主要な機能は、膨大な医学・生物学文献から有益な知識を自動的に抽出する「バイオメディカル・テキストマイニング」に特化している。最も代表的な機能は「固有表現抽出（NER）」であり、文章の中から病名、薬剤名、遺伝子、タンパク質といった専門的なエンティティを正確に特定し、分類することができる。一般的な言語モデルでは見落とされがちな、複雑な学術用語や略語の判別においても、専門文献を用いた事前学習の効果によって極めて高い精度を発揮する。

また、抽出されたエンティティ同士のつながりを読み解く「関係抽出（RE）」機能も非常に強力である。例えば、ある特定の遺伝子がどの疾患に関連しているか、あるいは特定の薬物がどのタンパク質に作用するかといった「エンティティ間の相互作用」を文脈から特定でき、これにより、個別の論文を人間が読み解く手間を省き、数百万件もの学術データから新たな薬の候補や疾患のメカニズムを効率的に掘り起こすことが可能になる。

更に、BioBERTは「質問応答（QA）」システムとしての機能も備えている。医療従事者や研究者が「この薬剤の副作用は何か？」といった具体的な問いを投げかけた際、膨大な医

学文献ベースから根拠となる情報を探し出し、適切な回答を提示するタスクに応用されている。これらの機能は、個々の研究効率を高めるだけでなく、創薬の加速や精密医療の実現に向けた膨大なデータの統合管理を支える、現代の生命科学研究に欠かせないインフラとなっている。

(4) 学習時間とパラメータ

BioBERT は、Google が開発した BERT の設計（アーキテクチャ）を継承しており、パラメータ数は約 1 億 1,000 万（110M）となっている。これは「BERT-Base」と呼ばれる標準的なモデル構成に基づいた数値であり、医学・生物学の専門用語を効率よく学習するのに適したサイズである。また、より大規模な構成である「BERT-Large」をベースにした、約 3 億 4,000 万（340M）パラメータのバージョン（BioBERT-Large）も存在する。これらは、一般的な言語モデルと比較して決して「巨大」とは言えないが、特定の専門領域に特化させることで、そのサイズからは想像できないほど高い精度を発揮する。

このモデルを構築するための学習プロセスでは、非常に丁寧な追加学習が行われた。開発チームの報告によると、8 枚の NVIDIA V100 GPU を使用し、PubMed の抄録や PMC の全文記事といった膨大な医学文献データを対象に、合計で 23 日間かけて事前学習が行われた。これは、汎用的な知識を持つ BERT をベースにしながらも、数億ワードに及ぶ専門的な論文データをじっくりと読み込ませることで、医学的な文脈を「翻訳」できるようにするための重要な工程である。

このように、BioBERT は数億単位のパラメータと約 3 週間以上にわたる集中的な学習プロセスを経て、生物医学分野の専門家が書くような複雑なテキストを深く理解できるモデルへと成長した。この事前学習済のモデルを更に特定のタスク（病名の特定など）に合わせて調整する「ファインチューニング」は、標準的な GPU 環境であれば 30 分から数時間程度で完了するため、多くの研究者が手軽に高性能な AI の恩恵を受けられるようになっている。

3.2.8. DNABERT-2 (カリフォルニア大)

本節は、[8]をまとめたものである。

(1) 開発機関

DNABERT-2 は、主にカリフォルニア大学サンディエゴ校（UCSD）の研究チームを中心に、ニューヨーク大学やイリノイ大学アーバナ・シャンペーン校の研究者らによって共同開発された。このモデルは、ゲノム解析のための「効率的な基礎モデル（Foundation Model）」として設計されており、先行モデルである DNABERT が抱えていた計算コストや汎用性の課題を克服するために誕生した。

(2) 概要

最大の特徴は、DNA 配列を「単語」として切り出す手法に、自然言語処理で広く使われている BPE (Byte Pair Encoding) を採用した点である。従来のモデルが、固定された長さの塩基配列 (k-mer) をスライドさせながら読み取っていたのに対し、BPE を用いることで、DNA の中にある重要なパターンを効率よく、かつ柔軟な長さで捉えることが可能になった。この工夫により、計算量を大幅に削減しつつ、モデルの「記憶容量」をより重要な情報の学習に割くことができるようになっている。

また、DNABERT-2 は「多種ゲノム」への対応力も非常に高く、ヒトゲノムだけでなく多種多様な生物のデータを一度に扱うことができる。更に、研究チームは「GUE (Genome Understanding Evaluation)」という包括的なベンチマークを同時に提案しており、プロモーターの予測や種間の分類、エピジェネティックな標識の特定など、28 もの多様なタスクにおいて DNABERT-2 が従来のモデルを圧倒する性能、あるいは同等の性能をはるかに少ない計算リソースで達成することを証明した。

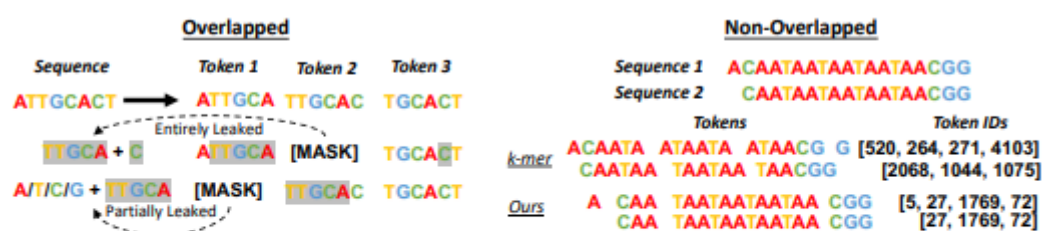


Figure 1: Illustration of the drawbacks of k-mer tokenization. In the overlapping setting, information about a masked token is leaked by its adjacent tokens, while in the non-overlapping setting, adding/deleting one nucleotide base leads to a dramatic change in the tokenized sequence.

図 3.6 k-mer トークン化の構造的欠陥と BPE (Byte Pair Encoding) による改善の比較 [8]

(3) 主な機能

DNABERT-2 は、ゲノム配列を「生命の言語」として高度に理解し、多様な解析を可能にするマルチタスクな機能を備えている。最大の機能的特徴は、BPE (Byte Pair Encoding) というトークン化手法の採用により、DNA の塩基配列から意味のある「サブワード」を柔軟に切り出せる点にあり、これにより、遺伝子のスイッチとして機能するプロモーターやエンハンサーといった重要な領域の特定において、従来のモデルを凌駕する極めて高い精度を発揮する。

また、DNABERT-2 は特定の生物種に依存しない「マルチスピーシーズ (多種) 解析機能」を持っている。ヒトだけでなく、130 種以上の多様な生物のゲノムデータを学習しているため、異なる種の間で共通する進化的に重要なパターンを見つけ出したり、未知の生

物のゲノム断片がどの種に属するかを分類したりすることが可能である。更に、ALiBi (Attention with Linear Biases) という技術の導入により、入力できる配列の長さ制限を実質的に排除しており、より広範なゲノム領域のコンテキストを一貫して読み解くことができる。

実用的な応用範囲は非常に広く、DNA のメチル化といったエピジェネティックな修飾の検出や、疾患に関連する遺伝子変異 (バリエント) の影響予測、更には転写因子の結合部位の特定など、ゲノム科学における主要な課題の多くに対応している。これらの機能は「GUE」と呼ばれる包括的なベンチマークによってその有効性が実証されており、少ない計算リソースで最先端の解析結果を提供できる「効率的かつ万能なゲノム解析ツール」として、バイオインフォマティクスの現場で重宝されている。

(4) 学習時間とパラメータ

DNABERT-2 は、モデルの巨大化が進む現代の AI トレンドとは対照的に、計算効率を極限まで追求した設計がなされており、パラメータ数は約 1 億 1,700 万 (117M) となっている。これは、先行モデルや同等の性能を持つ他のゲノム言語モデルと比較して、約 21 倍も少ないパラメータ数で同等以上の精度を達成していることを意味する。この軽量化により、膨大な計算リソースを持たない一般的な研究室や企業でも、高度なゲノム解析を現実的なコストで実行できるようになっている。

学習時間に関しても驚異的な短縮を実現しており、従来のモデルが必要とした GPU 時間に比べて約 56 倍もの高速化に成功している。具体的な学習プロセスでは、マルチスピーシーズ (多種) の広範なゲノムデータを対象にしているが、効率的なトークン化技術とアテンション機構の改良により、短期間で事前学習を可能にした。これにより、新たなゲノムデータが追加された際の再学習や、特定の生物種に特化させた追加学習 (ファインチューニング) も、極めてスムーズに行うことができる。

以上で述べたように DNABERT-2 は「小さく、速く、それでいて強力」という、実用性を重視したモデルと言える。限られた計算リソースの中で、ヒトゲノムの複雑な構造をいかに効率よく捉えるかという課題に対し、パラメータの最適化と学習時間の劇的な削減という形で一つの最適解を提示した。

3.2.9. scGPT(Toronto 大)

本節は、[9]をまとめたものである。

(1) 開発機関

scGPT は、トロント大学 (University of Toronto) の Bo Wang 教授率いる研究チームによって開発された。また、カナダのベクトル研究所 (Vector Institute) やユニバーシティ・ヘルス・ネットワーク (UHN) などの著名な研究機関もプロジェクトに関与している。

(2) 概要

scGPT (single-cell GPT) は、シングルセル (単一細胞) 解析の分野における基盤モデルとして設計された初の生成 AI モデルである。

従来のシングルセル解析は、特定の小規模なデータセットごとにモデルを構築していたが、scGPT は自然言語処理の ChatGPT のように、数千万もの細胞データを事前に学習 (事前学習) することで、細胞内の遺伝子発現パターンを「生命の言語」として理解する。これにより、少量のデータしかない未知の課題に対しても、事前学習済の知識を活かして (転移学習) 高い精度で解析を行うことが可能になった。

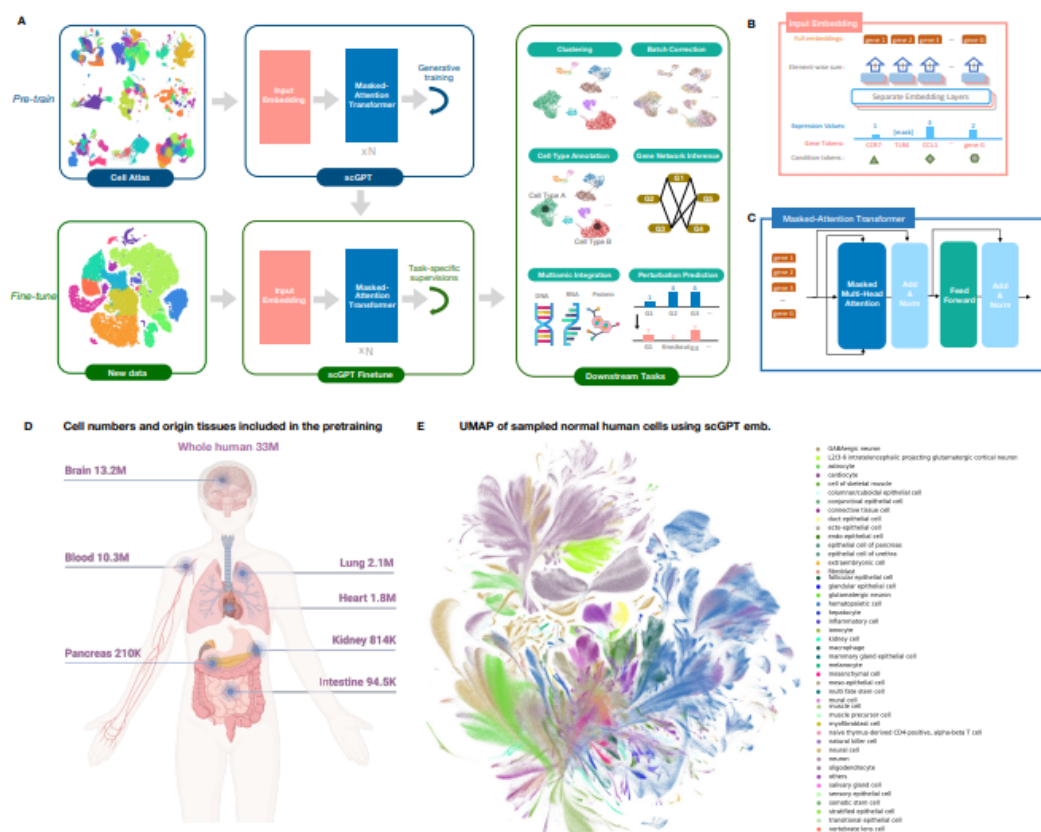


Figure 1: Model Schematic. (A) The workflow of scGPT. The model is generatively pre-trained on large-scale scRNA-seq data from cell atlases. For downstream applications, the pre-trained model parameters can be fine-tuned on new data. The core component of scGPT contains stacked transformer blocks with specialized attention masks for generative training. We applied scGPT on a variety of tasks including cell type annotation, batch correction, multi-omic integration, genetic perturbation prediction, and gene network inference. (B) The detailed view of the input data embeddings. The input contains three layers of information, gene tokens, expression values, and condition tokens (modality, batch, perturbation conditions, etc.). (C) The detailed view of the scGPT transformer layer. We introduced a specially designed attention mask in the Masked Multi-Head Attention block to conduct generative pre-training on single-cell sequencing data. (D) The diagram illustrating the size of training data and the organs of origin. The scGPT whole-human model was pre-trained on the scRNA-seq data of 33 million normal human cells. (E) UMAP visualization of the pre-trained scGPT cell embeddings (a random 10% subset), colored by major cell types.

図 3.7 scGPT の全体アーキテクチャとマルチタスク学習・推論のワークフロー [9]

(3) 主な機能

scGPT は、シングルセル（単一細胞）解析における多種多様な課題を一手に引き受ける「汎用的な知能」を備えている。最も基本的かつ強力な機能は、細胞の種類を自動的に判別する「細胞型アノテーション」である。3,300 万個以上の細胞データを学習した経験を活かし、新しい実験データが入力された際に、それが免疫細胞なのか神経細胞なのか、あるいは特定の希少な細胞なのかを、人間が手作業で行うよりも迅速かつ高精度に特定する。また、複数の異なる実験データを一つにまとめ上げる「マルチバッチ・マルチオミクス統合」機能も非常に重要である。研究室の違いや測定技術の差によって生じるデータの偏り（バッチ効果）を、モデルが内部で適切に補正することで、異なる条件下で得られたデータを同一の基準で比較できるようにする。更に、RNA の発現データだけでなく、DNA のアクセシビリティ（ATAC-seq）などの異なる層の情報も統合して解析できるため、多角的な視点から細胞の状態を理解することが可能である。

更に、高度な応用機能として「in silico（コンピュータ内）遺伝子摂動予測」が挙げられ、これは特定の遺伝子をノックアウト（破壊）したり過剰に発現させたりした場合に、細胞がどのように反応するかを仮想的にシミュレーションする機能である。この予測により、膨大なパターンがある遺伝子操作実験の中から、最も有望なものだけを実際の実験室で検証するといった、研究の効率化が可能になる。

加えて、モデル内部の「アテンション（注意）」という仕組みを利用して、遺伝子同士がどのように影響し合っているかを探る「遺伝子制御ネットワーク（GRN）の推論」機能も備えている。単なる統計的な相関関係を超えて、細胞の機能を司る背後のメカニズムをモデルから直接抽出できる点は、基礎生物学や創薬研究において非常に大きな価値を提供している。scGPT は、膨大な細胞データを学習した「生物学的な直感」を持つ AI として、従来の解析手法では見逃されていた微細な変化を捉えることができる。

(a) ガン治療における個別化医療と薬剤耐性の解明

最近の研究では、膵管腺がん（PDAC）などの難治性がんの臨床試験データに scGPT を適用する試みが進んでいる。従来の解析では、治療前後の細胞の変化を単純な集団としてしか比較できなかったが、scGPT は細胞一つ一つの「状態の変化」を深く理解する。例えば、特定の薬剤を投与した際に、どのがん細胞が生き残り、どのような遺伝子ネットワークを駆使して薬剤耐性を獲得したのかを予測・特定でき、これにより、患者一人ひとりの細胞の反応に基づいた、より効果的な治療法の選択（個別化医療）が可能になりつつある。

(b) 「in silico 摂動」による未知の遺伝子機能の発見

scGPT の最もエキサイティングな応用例の一つが、コンピュータ上での仮想的な遺伝子操作（in silico perturbation）である。これまでの研究では、ある遺伝子を破壊したとき

の影響を知るために、実際に膨大な時間とコストをかけて実験を行う必要があったが、scGPT を用いることで、例えば「POU3F2」や「CDKN1B」といった重要な遺伝子を操作した際に、細胞全体の遺伝子発現がどう変化するかを事前に高精度でシミュレートでき、研究者は数万通りの可能性の中から、病気の進行を止める鍵となる「真に重要な遺伝子の組み合わせ」を絞り込み、効率的に新薬のターゲットを発見できるようになった。

(c) 空間オミクスへの拡張 (scGPT-spatial)

最新の進展として、細胞の「配置」情報を加味した「scGPT-spatial」の研究が進んでいる。病気、特にがんは、細胞単体だけでなく「周囲にどのような細胞がいるか（微小環境）」が進行に大きく関わる。scGPT-spatial は、組織内の細胞の空間的な位置関係を考慮して学習を行うことで、例えば「腫瘍の境界線にいる特定の細胞の状態」など、空間的な文脈に依存した新しい細胞状態の発見に貢献している。これは、アルツハイマー病などの脳疾患において、特定の神経細胞が周囲の免疫細胞とどのように相互作用して変性していくかといった、複雑なメカニズムの解明に役立てられている。

(d) mRNA デリバリーなどの創薬プラットフォーム (LUMI-lab)

更に、scGPT の技術は「LUMI-lab」のような自律型 AI ラボとも統合されている。ここでは、scGPT が予測した細胞への影響に基づき、mRNA を効率的に細胞に届けるための新しい脂質ナノ粒子 (LNP) の設計などが行われており、AI が設計し、ロボットが合成し、その結果を再び AI が学習するという「閉ループ」の研究サイクルにおいて、scGPT は細胞側の反応を正確に予測する「核」としての役割を担っている。

(4) 学習時間とパラメータ

scGPT は、シングルセル解析における「基盤モデル」として、従来の生物学 AI とは一線を画す規模で構築されている。その詳細なスペックと学習のプロセスは以下のとおりである。

(a) パラメータ数と内部アーキテクチャ

scGPT のフラッグシップモデル（ヒト全細胞モデル）は、約 5,300 万（53M）パラメータで構成されている。一見すると、数百億パラメータを持つ GPT-4 などの言語モデルに比べて小さく感じるかもしれないが、これは「細胞」という情報の単位に最適化された結果である。内部構造は、12 層の Transformer ブロックと 8 つのアテンションヘッドを備えており、隠れ層のサイズ (Embedding size) は 512 に設定されており、この設計により、細胞内の数万個の遺伝子（トークン）がどのように相互作用しているかを、非常に高密度に計算することが可能になっている。

(b) 学習データと計算規模

学習には、世界最大級のシングルセルデータリポジトリである「CELLxGENE」などから集められた、約 3,300 万個（33 million）もの細胞データが投入された。データトークン数: 学習に使用された総トークン数は約 7,710 億トークンに及び、これは、自然言語処理の最先端モデルに匹敵する膨大な情報量である。学習の工程: 事前学習は「マスク付き遺伝子発現予測（Masked Gene Expression Prediction）」という手法で行われた。これは、細胞内の遺伝子発現の一部を隠し、周囲の遺伝子情報からその値を予測させることで、遺伝子同士の深い関係性を AI に叩き込むプロセスである。

(c) 学習時間とリソース

この規模のモデルをゼロから構築するためには、非常に強力な計算リソースと時間が必要とされた。

- ・ 使用リソース: 事前学習には、高性能な NVIDIA A100 GPU が使用された。
- ・ 学習時間（事前学習）: 3,300 万個の細胞を全 6 エポック（データを 6 回繰り返して学習）分回すのに、膨大なコンピューティング時間が費やされている。公式な総日数は環境によりますが、この規模の計算量を考慮すると、ハイエンドな GPU クラスタを用いても数週間から 1 か月以上の連続稼働が必要な規模である。
- ・ ファインチューニングの効率: 一方で、一度出来上がったモデルを特定の研究目的（自分の実験データの解析など）に合わせて調整する「ファインチューニング」は非常に高速であり、標準的なワークステーションであれば、数分から数時間以内に完了するように最適化されており、一般の研究者が手軽に恩恵を受けられるよう工夫されている。

3.2.10. Geneformer (MIT)

本節は、[10]をまとめたものである。

(1) 開発機関

Geneformer は、ブロード研究所（Broad Institute of MIT and Harvard）の研究チームによって開発された、大規模なシングルセル（単一細胞）遺伝子発現データの基盤モデルである。ブロード研究所は、ゲノム研究の世界的拠点として知られている。

(2) 概要

Geneformer は「遺伝子の言語」を学習した Transformer ベースのモデルである。約 3,000 万個という膨大なシングルセル遺伝子発現データを事前学習しており、細胞内での遺伝子同士の関係性や、特定の疾患における遺伝子ネットワークの乱れを深く理解している。特に、データのサンプル数が少ない希少疾患の研究においても、事前学習で得た知識を転用（転移学習）することで、高精度な解析を可能にした。

このモデルの大きな特徴は、特定の細胞の種類（心筋細胞や内皮細胞など）における遺伝子の重要度を予測したり、遺伝子を操作した際の影響をシミュレーションしたりできる点にある。開発チームは実際に、Geneformer を用いて心不全に関連する重要な遺伝子ネットワークを特定するなど、具体的な疾患研究における有効性も実証している。

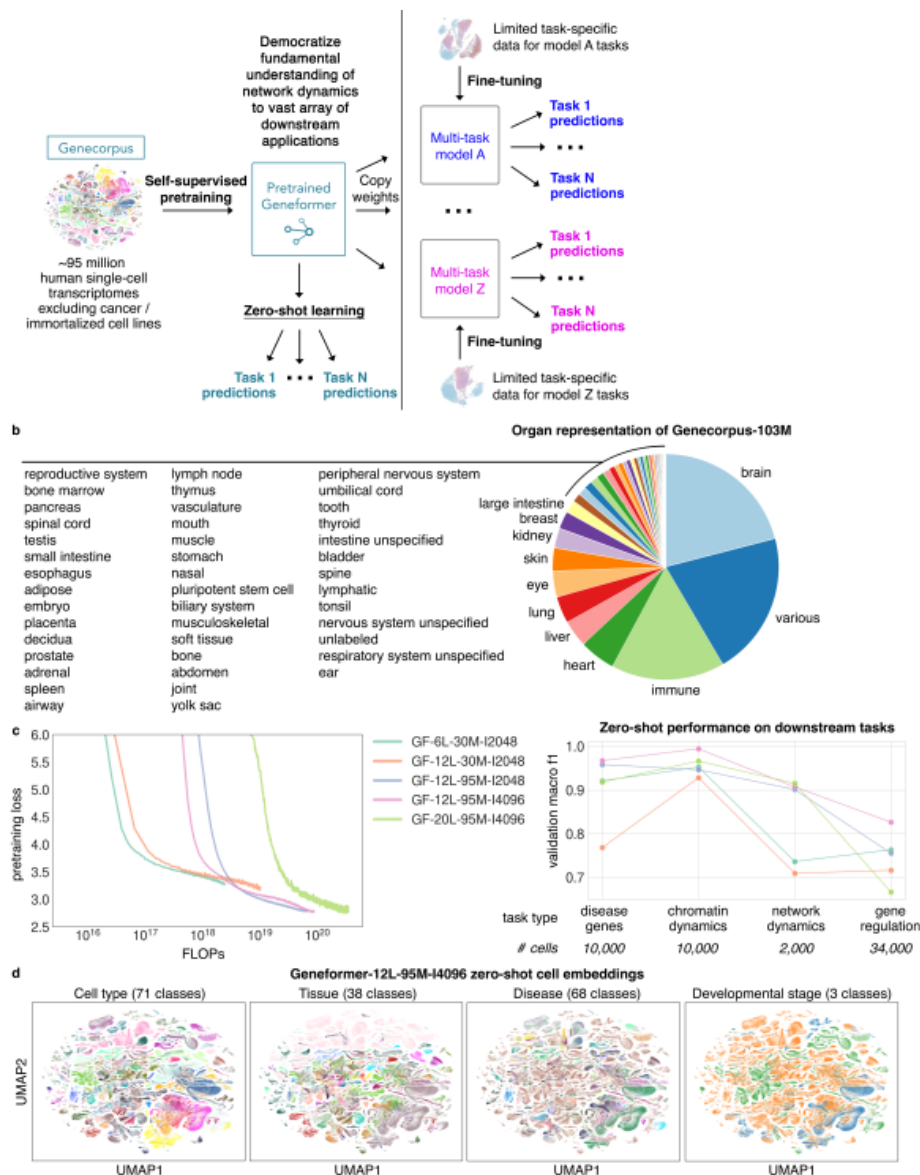


Fig. 1 | Geneformer transfer learning strategy. Legend on next page

図 3.8 Geneformer における大規模自己教師あり学習と多様な下流タスクへの転移学習戦略 [10]

(3) 主な機能

Geneformer の最大の機能的特徴は、膨大なシングルセルデータから学習した「遺伝子

ネットワークの動態」への深い理解を基に、限られたデータからでも高精度な予測を行える「転移学習」能力にある。具体的には、特定の遺伝子の機能が変化した際の影響を予測する「in silico（コンピュータ内）摂動解析」が非常に強力であり、この機能を用いることで、特定の遺伝子を仮想的に欠失させた場合に、細胞全体のネットワークがどのように変化するかをシミュレーションでき、疾患の原因となる重要な遺伝子や新しい治療標的の候補を効率的に絞り込むことが可能である。

また、Geneformer は「遺伝子用量感受性（Dosage Sensitivity）」の予測においても優れた性能を発揮する。これは、遺伝子のコピー数や発現量のわずかな変化が、どの程度疾患に結びつくかを判別する機能である。心筋症などの疾患モデルにおいて、どの遺伝子の発現を抑制すれば細胞の収縮機能が改善するかといった治療的介入のシミュレーションを行い、実際に iPS 細胞を用いた実験でその予測の正しさが証明されるなど、理論だけでなく実証的な裏付けを持つ機能として高く評価されている。

更に、遺伝子発現データのみから、その背後にある「クロマチン構造」や「エピジェネティックな状態」の変化を読み解く機能も備えている。これにより、細胞の種類や状態に応じた複雑な遺伝子制御メカニズムを可視化し、従来の統計解析では見逃されていた希少な細胞状態の特定や、細胞分化のプロセスの理解を深めることができる。

このように、Geneformer は単なるデータの分類器ではなく、遺伝子同士の相互作用を「文脈」として理解し、未知の生物学的反応を予測する「シミュレーター」としての機能を中核に据えている。この能力は、希少疾患の病態解明や、効率的な創薬ターゲットの探索といった、現代のバイオ医学が抱える最前線の課題を解決するための強力な武器となっている。

(4) 学習時間とパラメータ

Geneformer は、研究目的に応じて主に 2 つのモデルサイズが展開されている。標準的な「6 レイヤー」モデルのパラメータ数は約 1,030 万（10.3M）であり、より高度な解析に適した「12 レイヤー」モデルのパラメータ数は約 1 億 600 万（106M）に達する。先行する自然言語処理モデルの BERT と同様のアーキテクチャを採用しており、12 レイヤーモデルでは、768 次元の隠れ層と 12 のアテンションヘッドを備えることで、遺伝子同士の複雑な相互作用を深く学習できる構造になっている。

学習データの規模については、当初は約 3,000 万個のヒトシングルセル・トランスクリプトームデータを用いて事前学習が行われたが、2024 年にリリースされた最新バージョン（Geneformer v2）では、約 9,500 万から 1 億 300 万個という、世界最大級のシングルセルデータセットである「Genecorpus-103M」が活用されており、この膨大なデータには、さまざまな組織や疾患状態にある細胞が含まれ、モデルが「健康な細胞」と「病的な細胞」のネットワークパターンの違いを学習する基盤となっている。

学習時間と計算効率に関しては、NVIDIA の BioNeMo フレームワークなどの活用によ

り最適化が進んでおり、大規模な事前学習にはハイエンドなGPU（NVIDIA A100やH100など）を用いたクラスタ環境が不可欠である。具体的な事前学習の日数は公式には詳細に公開されていないが、3,000 万～1 億細胞という規模の学習には、数週間単位の計算時間が費やされたと推測される。一方で、構築済みのモデルを特定の研究データに合わせて微調整する「ファインチューニング」は、一般的な研究環境の GPU でも短時間で完了するように設計されており、わずか 5,000 個程度の細胞データからでも、高精度な遺伝子ネットワークの再構築が可能という、非常に優れたデータ効率を実現している。

このように、Geneformer は「中規模なパラメータ」と「圧倒的な学習データ量」を組み合わせることで、計算コストを抑えつつも、生物学的な深い洞察を引き出せる実用的なバランスを保っている。

3.2.11. まとめ

ライフサイエンスのAIは、単なるデータの分類から「生命の動的なシミュレーター」へと進化している。AlphaFold 3やESM-3に代表されるように、自然界の進化のルールをAIが学習することで、未知のタンパク質設計や創薬の劇的な加速が可能となった。また、欧州の BioEXCEL-3 プロジェクトのように、AI とスーパーコンピュータによる物理シミュレーションを高度に融合させる取組が、次世代のライフサイエンス研究インフラとして重要な役割を担っている。

基盤モデル構築に必要とされる計算機スペックの目安について述べる。まず、大規模なライフサイエンス基盤モデルの事前学習には、単体性能だけでなく、ノード間を高速につなぐネットワーク構成が不可欠である。

ハードウェア構成のうち、計算プロセッサ(GPU/TPU)は、NVIDIA H100、A100、または Google 自社開発の TPU v4 などが主流である。特定のタスク（例：P-FEP）では、独自開発のAIプロセッサ（MN-Core など）やスーパーコンピュータ（MN-3/MN-5）が活用される例もある。また、ネットワーク（インターコネクト）は、100～200 基単位、あるいは数千枚規模の GPU を同期させるための超高速な接続環境が求められる。

学習に必要な時間的リソースについて、まず、事前学習（Pre-training）としてゼロからの構築には、強力な GPU クラスタを用いても数週間から数か月単位の連続稼働が必要である。更に、Fine-tuning については、構築済みのモデルを特定のデータに適応させる場合は、標準的な GPU 環境やワークステーションで数分から数時間、あるいは数日以内に完了するよう最適化されている。

3.3. 材料分野の基盤モデル

3.3.1. 情報源

本節は、下記のサーベイ文献の内容をまとめたものである。

- [1] Minh-Hao Van et al., “A SURVEY OF AI FOR MATERIALS SCIENCE: FOUNDATION MODELS, LLM AGENTS, DATASETS, AND TOOLS”, arXiv:2506.20743v1 [cs.LG] 25 Jun 2025
- [2] GNoME: Amil Merchant et al., "Scaling deep learning for materials discovery", Nature, 2023
- [3] MatterSim: Han Yang et al., "MatterSim: A Deep Learning Atomistic Model Across Elements, Temperatures and Pressures", arXiv, 2024
- [4] MACE-MP-0: Ilyes Batatia et al., "A foundation model for atomistic materials chemistry", The Journal of Chemical Physics (arXiv 版は 2024 年 1 月), 2024
- [5] MatterGen: Claudio Zeni et al., "A generative model for inorganic materials design", Nature, 2025
- [6] A-Lab: Nathan J. Szymanski et al., "An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials", Nature, 2023
- [7] ICSD : <https://icsd.products.fiz-karlsruhe.de/>
- [8] Materials Project (MP) : <https://matbench-discovery.materialsproject.org/data>
- [9] OQMD : <http://oqmd.org/>
- [10] NOMAD : <https://nomad-lab.eu/>
- [11] OMat24 : <https://hyper.ai/en/datasets/35287>
- [12] SNUMAT : <http://snumat.com/>
- [13] OC20 / MPTrj : <https://opencatalystproject.org/>
- [14] Alexandria : <https://alexandria.icams.rub.de/>
- [15] QM9 : <https://hyper.ai/en/datasets/38089>
- [16] PubChem : <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
- [17] ZINC-22 : <https://zinc22.docking.org/>
- [18] Guacamol / Moses : <https://github.com/BenevolentAI/guacamol>

3.3.2. 基盤モデルの現状

材料分野の基盤モデルは、新材料の発見、原子シミュレーション、自律型実験の三軸を中心に発展している。Google DeepMind の GNoME は、グラフニューラルネットワークを用い 220 万個の新材料を発見したことで知られ、大規模な結晶構造データによる学習が強みである。Microsoft の MatterSim は、極低温から高温高圧まで幅広い条件下で正確な物性予測を可能にする。また、拡散モデルを採用した MatterGen は、指定した物性を持つ構造を直接生成するアプローチをとる。更に、予測モデルとロボット制御を統合し、AI が提案した材料を自動で合成する A-Lab のようなシステムも登場している。Meta の UMA プロジェクトに見られるように、高精度かつ効率的な汎用原子間ポテンシャルの構築が進んでおり、材料開発のプロセスを劇的に加速させている。

表 3.11 材料分野の基盤モデル（その1）

モデル名	開発元	アーキテクチャ	学習データ	データ量	データサイズ	パラメータ数
GNoME	Google DeepMind	Message Passing GNN	Materials Project, ICSD, OQMD	2.8 万件(基礎) / 220 万種(予測)	約 0.1 ～ 0.2 TB	数百万規模
MatterSim	Microsoft	Equivariant GNN	DFT 計算データ	約 1,700 万件	約 0.5 ～ 1.0 TB	1 億 3000 万
MACE-MP-0	Cambridge Univ.	Higher-order MPNN	Materials Project Trajectory (MPtrj)	約 160 万件	11.35GB	469 万
MatterGen	Microsoft	Diffusion Equivariant GNN	Materials Project, Alexandria	約 60 万 8,000 件	72GB	4,680 万
UMA	Meta (FAIR)	Equiformer V2 / MACE	3D 構造データ	50 億個以上の原子	約 0.05 ～ 0.1 TB	14 億
A-Lab	LBNL	Integrated Agent System	論文・実験データ等	58 材料の合成	MB 級	—

表 3.12 材料分野の基盤モデル（その2）

モデル名	ライセンス	主な用途・特徴	アーキテクチャの特徴
GNoME	Apache 2.0 (商用可)	グラフニューラルネットワークを用い、未知の無機結晶構造の安定性を予測することで、次世代電池等のための新材料をコンピュータ上で高速に発見する。	220 万個の新材料を予測し 38 万個の安定物質を特定。AI の予測と物理計算を循環させるアクティブラーニングで、探索速度を指数関数的に向上させた。
MatterSim	MIT (商用可)	全元素に対応し、絶対零度から数千度の高温高压といった極限環境下における物質の挙動や物性を、第一原理計算に匹敵する精度で動的にシミュレートする。	1.82 億パラメータの脳を持ち、AI が自信のない領域を物理計算で自ら補強。少量のデータで実験値に近い精度へ微調整可能な「デジタルツイン」を推進。
MACE-MP-0	MIT (商用可)	周期表の 89 元素をカバーし、結晶、液体、ガス等の多様な状態で、原子にかかる力、エネルギー、応力を DFT に近い精度で圧倒的スピードで計算する。	高次の等変メッセージパッシング技術により多体相互作用を正確に記述。160 万件のバルク結晶データを学習し、専門領域へは少量の追加学習で即座に適合。
MatterGen	研究用限定 (Microsoft)	指定された磁性や硬度などの物性から逆算して、それに合致する新しい無機材料の構造をゼロから生成する「逆設計（インバース・デザイン）」を実現する。	拡散モデルを応用し、ノイズから原子の種類や座標を最適化。従来のリストから探す方式に比べ、新規かつ安定な材料をピンポイントで提案する点が画期的。
UMA	CC-BY-NC 4.0 (非営利限定)	分子、材料、触媒などの化学の複数領域を横断的にカバーし、大規模な原子ポテンシャルの構築や高速な特性予測、複雑な化学現象のシミュレーションを行う。	50 億個以上の原子を含む 3D 構造を学習。14 億パラメータの大規模モデルでありながら、Mixture of Linear Experts 構造により推論速度が非常に高速。
A-Lab	BSD-3-Clause 等 (オープン)	自律型実験プラットフォーム。AI が提案した材料をロボットが実際に合成する仕組み。モデル単体ではなく、GNoME などの予測モデルや能動学習アルゴリズムを組み合わせで動作する。	単一の AI ではなく、能動学習、強化学習、およびロボット制御アルゴリズムを組み合わせた統合システム。

(1) 基盤モデルの発展の経緯

材料基盤モデルを分類し、それらをタスク（データ抽出、原子論的シミュレーション、物性予測、材料設計と発見、プロセス最適化、マルチスケールモデリングなど）およびモデルタイプ（特化型の単一モーダル基盤モデルからマルチモーダル基盤モデル、LLM エージェントまで）に従って整理した。これらのカテゴリの中で、GNoME、MatterSim、MACE-MP-0、MatterGen といった基盤モデルは、AI 駆動型材料発見の実現可能性を示している。

近年の研究では、MatterChat、Text+Chem T5、nach0 のようなマルチモーダル基盤モデルは、多角的な材料情報を統合している。また、LLM 駆動型エージェント（HoneyComb、MatAgent、LLMatDesign 等）は、データを分析するだけでなく、テキスト、構造、画像、プロトコルの形式を総合的に推論し、相互作用させることへの可能性を示している。下記に[1]に示された基盤モデルとデータベースの経緯を記載する。

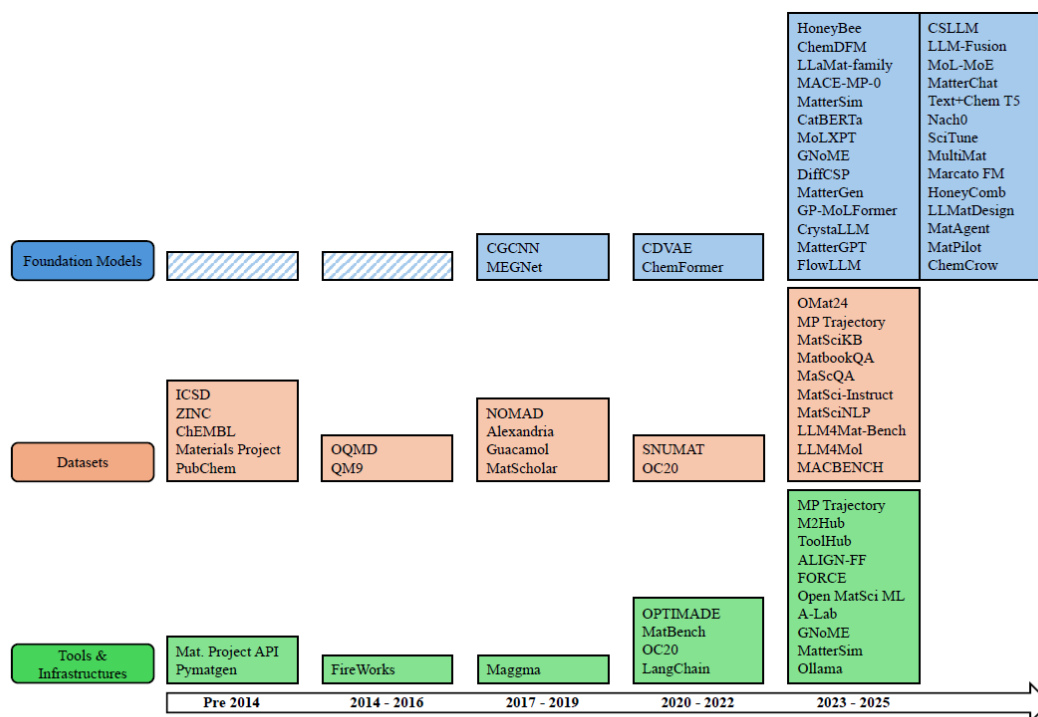


Figure 3: Development of AI in materials science over time: foundation models, datasets, and tools and infrastructure.

図 3.9 材料分野での基盤モデル [1]

(2) 基盤モデルの特徴

GNoME（Graph Networks for Materials Exploration）システムは、密度汎関数理論（DFT）の生成エネルギーデータで訓練されたグラフニューラルネットワークのアンサンブル、対称性を考慮した結晶生成、および能動学習ループ内での反復的な DFT 検証を用い

ることで、この可能性を例証した。GNoME は、従来の取組を桁違いに上回る 220 万以上の新しい安定な無機材料を特定し、化学空間の未探索領域を占める 4 万 5,000 以上の新しい結晶プロトタイプを発見した。

一方、1,700 万以上の DFT ラベル付き構成で訓練された汎用機械学習原子間ポテンシャルである MatterSim は、高温や非平衡状態においてさえ、原子当たりのエネルギー予測誤差が 50 meV 未満という精度で、ゼロショットの分子動力学シミュレーションを可能にしている。MACE-MP-0 などの他のモデルも、周期系に適用されたメッセージパッシング・ニューラルネットワークを用いて、DFT に近い精度を実証している。

MatterGen は、教師無しの事前学習とアダプターベースの微調整を組み合わせることで、化学的に妥当で構造的に安定し、かつ物性が最適化された無機結晶を生成する。

GP-MoLFormer のような言語ベースのモデルは、物性条件付き生成を通じて、分子設計を機能性材料やドラッグライクな化合物へと拡張している。

nach0 や ChemDFM といったモデルが、分子生成、逆合成、物性予測、および質疑応答に関するクロスモーダルな能力を示している。構造化・非構造化された化学コーパスで訓練されたこれらのモデルは、合成経路を抽出し、SMILES 文字列を解釈し、文献からのハイスループットな知識抽出を可能にする。

LLM ベースのエージェントは初期段階にあり、HoneyComb、LLMatDesign、MatAgent、および MatPilot といった最近の開発はエージェントシステムの構築において有望な進展を示している。MatAgent、LLMatDesign、および MatPilot は、LLM を利用して、候補のスクリーニング、シミュレーション計画、合成経路の生成といった多段階のプロセスを、最小限の人間による介入で調整する。

A-Lab は、言語計画、熱力学的推論、ロボット工学、および能動学習をクローズドループの実験プラットフォームに統合している。17 日間にわたる稼働で、A-Lab はターゲットとした 58 種類の材料のうち 41 種類を合成し、人間による介入を最小限に抑えながら 71% の成功率を達成した。

(3) 基盤モデルの学習時間

MatterSim や GNoME などのモデルは数万 GPU 時間を必要とし、また、GPT、Gemini、LLaMA のような大規模言語モデルは数百万 GPU 時間を必要とし、独自のコンピューティングリソースに依存していることもある。この状況は、多くの学術研究者の手が届かないところとなる。一方、FORGE、Open MatSci ML、ALIGNN-FF のようなオープンソースのツールやフレームワークは、アクセスを民主化し、小規模な実験を可能にするための有望な一歩となっている。

3.3.3. AI 基盤モデルを支えるデータ基盤

材料分野のデータ基盤は、無機結晶構造、DFT 計算結果、および機械学習向けの超大規

模材料 DB の三軸で構成されている。ICSD は 1913 年からの実験データを収録する世界最大の無機結晶構造 DB であり、Materials Project (MP) や OQMD は、DFT 計算に基づく材料特性をオープンに提供している。

近年では、Meta が公開した 1 億件超の無機材料 DB 「OMat24」や、触媒表面の原子軌跡を扱う「OC20」など、材料基盤モデルの訓練に特化したデータセットの存在感が増している。また、有機分子の量子化学特性を扱う QM9 や、370 億件の化合物を収録しバーチャルスクリーニングを支援する ZINC-22 など、化学・創薬領域と重なる基盤も極めて大規模である。これらの膨大な計算・実験データは、データ駆動型の新材料探索やシミュレーションの高速化を強力に支えるリソースとなっている。

表 3.13 材料分野のデータ基盤（その 1）

分類	名称	期間	内容
無機結晶構造	ICSD	FIZ Karlsruhe	世界最大の無機結晶構造データベース。1913 年からの実験データを収録し、単位格子定数や原子座標、空間群などの詳細な情報を提供。
結晶固体・材料特性	Materials Project (MP)	LBNL (米国)	第一原理計算により、既知および未知の無機結晶材料の構造や熱力学的安定性、電子状態などの物性データを網羅的に提供し、材料探索を支援する
材料特性・DFT	OQMD	Northwestern Univ.	130 万件超の材料に関するハイスループット DFT 計算結果を収録。熱力学的・構造的特性を網羅し、新材料探索や機械学習に活用。
データ管理	NOMAD	NOMAD Lab. (Max Planck 等)	計算材料科学データを標準化し共有・解析する世界最大級の基盤。膨大な計算結果を公開し、研究の効率化や AI による新材料探索を支援
大規模材料 DB	OMat24	Meta FAIR	1 億 1 千万件以上の DFT 計算結果を収録する、材料特性予測モデル訓練用の大規模な無機材料オープンソースデータセット。
合成材料	SNUMAT	SNU	約 1 万件の合成材料とその DFT 計算特性を収録した DB。API を通じてデータアクセスが可能であり、合成可能性の評価等に利用。
触媒・原子軌跡	OC20	Meta FAIR/CMU	触媒表面の吸着エネルギーや原子軌跡を対象とした大規模データセット。原子間ポテンシャルの開発や複雑な反応シミュレーションに貢献。
トラジェクトリ	MPTrj	"Materials Project(LBNL, UCB)"	aterials Project の構造緩和過程を集約した 158 万件のデータセット。CHGNet 等の汎用的な機械学習原子間ポテンシャルの学習に活用
分子構造(DFT)	Alexandria	ICAMS	結晶構造 DB。DFT 計算による 580 万件超の 3D/2D/1D 材料データを集積。AI による高速な材料探索と物性予測の基盤として世界最大級
有機分子	QM9	Prof. Raghunathan Ramakrishnan (Univ. of Basel)	最大 9 個の重原子を含む約 13.4 万個の小有機分子の量子化学的性質（幾何構造、エネルギー等）を網羅した機械学習用ベンチマークデータセット

表 3.14 材料分野のデータ基盤（その 2）

名称	件数（目安）	データ サイズ	年間 増加量（目安）
ICSD	約 327,833 件	数百 GB 以下（想定 50KB/件）	約 1.2 万件 （4%程度）
Materials Project (MP)	20 万件以上の材料	14 GB	10%程度
OQMD	1,407,395 件	10 TB 以下（数 MB/件 を想定）	10%程度
NOMAD	19,295,396 件	114.4 TB	不明
OMat24	約 1 億 1,800 万 構造	185.67 GB	不明
SNUMAT	15,280 件	100GB（数 MB/件を想 定）	不明
OC20	DFT 計算結果：2 億 6000 万件以上	1.2 TB（ダウンロード 時）	不定期に update
MPTrj	1,580,395 件（構造デ ータ数）	約 11.35 GB	不定期に update
Alexandria	約 580 万 構造	数 TB と推定（学習済で 72GB）	1 回の update で 130 万件
QM9	133,885 件	172.68 MB	（固定）

※ 表 3.13 と 3.14 は、[7]～[18]の情報をまとめたものである。

初期段階では、ICSD が 1913 年に最初の記録を受け取り、その後 2003 年にウェブ上で利用可能となった。これは無機結晶構造の最大のデータベースであり、約 30 万件のエントリで構成されている。各エントリには、単位格子パラメータ、空間群、原子座標、サイト占有率、分子式、分子量などの詳細な結晶学的情報が含まれている。

その後、Materials Project (MP)、OQMD、NOMAD、Open Material 2024 (OMat24)、SNUMAT といった、結晶固体、材料特性、および DFT 計算のための他の一般的なデータセットが、主にディープラーニングや基盤モデルの訓練データとして提供される目的で公開された。具体的には、MP はウェブインターフェースや API を通じて 20 万件以上の材料のオープンデータベースを提供している。OQMD は、131 万 7,811 件の材料の熱力学的および構造的特性に関するハイスループット DFT 計算結果を含む別のデータセットである。NOMAD は、材料科学データの管理、分析、共有のためのオープンアクセスプラットフォームとして機能しており、現在は約 21 万 4,000 件の構造をホストしている。

最近、Meta の FAIR によって公開された OMat24 は、学習済モデルのセットを伴う無機材料の大規模データベースを提示している。これには、全エネルギー、原子間力、およびセル応力などの特性がラベル付けされた約 1 億 1,800 万件の構造が含まれている。これらの結晶構造を生成するプロセスは、緩和された構造のランダムサンプリングから始まり、

その後、3つのリファインメント（精緻化）技術（Rattled Boltzmann サンプリング、第一原理分子動力学（AIMD）、または Rattled 緩和）のいずれかが続く。SNUMAT は、約 1 万件の合成材料とその DFT 特性のデータベースへの API アクセスを提供している。Open Catalyst 2020 (OC20) や MPTrj といった他のデータセットは、触媒表面における大規模な吸着エネルギーと構造、原子間ポテンシャル、および原子軌跡を対象に設計されている。

分子特性を探索するために、Alexandria データセットは、DFT 計算された約 500 万件の分子構造のオープンコレクションを提供している。このデータセットは材料タイプ（3D、2D、1D 材料を含む）によって分類されている。QM9 は、DFT 計算された量子化学特性を持つ 10 万件以上の小さな有機分子を含んでいる。分子設計をサポートするために、Guacamol と Moses は、分子生成タスク用に訓練されたモデルを評価するためのベンチマークとなっている。

一部の化学データセットは、材料に関する特定の情報を取得するための追加リソースとしても機能する。例えば、PubChem は、名称、化学式、構造、その他の識別子を含む化学情報の最大のオープンデータベースである。このデータベースは約 1 億 2,100 万件の化学構造と、数十万件のタンパク質および遺伝子をホストしている。ZINC は、バーチャルスクリーニングのための化合物の別の化学データベースであり、10 億以上の分子が含まれている。ChEMBL は、生理活性分子やドラッグライクな特性を含む、創薬のためのデータベースである。

3.3.4. GNoME (Google DeepMind)

本節は、[2]を中心にまとめたものである。

(1) 概要（開発機関等）

Google DeepMind が開発した「GNoME (Graph Networks for Materials Exploration)」は、ディープラーニングを活用して未知の無機結晶材料を驚異的なスピードで探索する AI ツールである。本プロジェクトの主目的は、次世代のバッテリー、太陽電池、超電導体などの開発に不可欠な新しい安定材料を、コンピュータ上でハイスループットに発見することにある。GNoME は、既存の材料データベース（Materials Project など）から得られた約 2.8 万件の結晶構造を基礎データとして学習し、そこから得た「原子の並びと安定性の相関」という知見を基に、人類がこれまでの歴史で発見してきた数の約 45 倍に相当する 220 万種類もの新構造を予測した。

技術的な核心は、結晶構造を原子間のネットワークとして捉える「グラフニューラルネットワーク (GNN)」と、AI が予測した結果を物理計算 (DFT) で検証して学習データへフィードバックする「アクティブラーニング」の組み合わせにある。この仕組みにより、従来の試行錯誤では約 800 年かかると見積もられていた規模の探索を劇的に短縮し、実際に安定して存在できる可能性が高い 38 万種類の物質データを特定することに成功した。

DeepMind 社はこれらの成果をオープンサイエンスとして無償公開しており、すでに外部のロボットラボとの連携によって数百種類以上の新物質が実際に合成可能であることも証明されている。

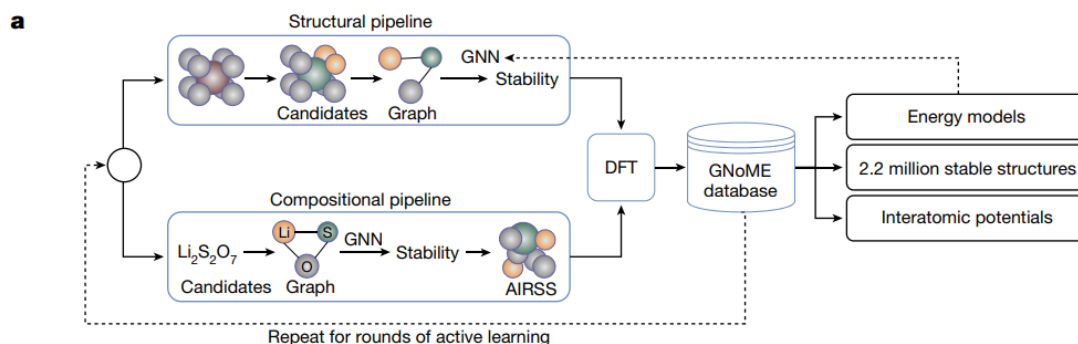


図 3.10 GNoME による材料探索の能動学習（アクティブラーニング）ワークフロー [2]

(2) 機能

GNoME は、単にデータを検索するシステムではなく、高度な AI 技術を組み合わせて「未知の材料を自ら予測・選別する」という一連の機能を有している。主な機能は以下の 4 点に集約される。

- ① 新規候補構造の自動生成機能 まず、既存の材料データをもとに、まだ誰も見たことがない新しい結晶の組み合わせ（候補）を大量に作り出す。
 - ・ 構造置換法: 既知の結晶構造に含まれる原子を、別の原子に置き換えて新しい組み合わせを作る。
 - ・ ランダム構造探索: 化学式だけをヒントに、全く新しい構造を一からシミュレーションして生成する。
- ② 分解エネルギーの予測（安定性の評価） 生成された膨大な候補の中から、現実の世界で「安定して存在できるか」を瞬時に判定する。
 - ・ 安定性の指標: 物質が他の状態に分解しにくいかどうかを示す「分解エネルギー」を予測する。
 - ・ 高速フィルタリング: 従来の物理計算では数日かかる評価を、AI（グラフニューラルネットワーク）によって一瞬で行い、有望なものだけを絞り込む。
- ③ 大規模アクティブラーニング（自己進化機能） GNoME は、自身の予測精度を自分自身で高めていく仕組みを持っている。
 - ・ 検証と学習: AI が出した予測結果を、より厳密な物理計算（DFT 計算）にかけて「正解」を確認する。
 - ・ 精度の向上: その正解データを再び AI に学習させることで、使えば使うほど予測のズレを修正し、精度を飛躍的に高めていく。

- ④ 多元素系の複雑な探索機能 人間や従来のシステムが苦手としていた、複雑な組み合わせの探索を得意としている。
- ・ 多元素対応: 5 種類以上の異なる元素が組み合わさった複雑な結晶構造（例：新しい合金や多機能セラミックス）についても、その安定性を効率的に見つけ出すことができる。

(3) 学習について

GNoME の学習プロセスとパラメータに関する詳細は、従来の大規模言語モデルとは異なる特筆すべき特徴を持っている。まず、GNoME のモデル構成についてであるが、これは原子間の相関をグラフ構造として捉える「グラフニューラルネットワーク (GNN)」を基盤としている。パラメータ数については、GPT のような数千億規模の言語モデルとは異なり、物理的な対称性や結晶構造の制約を効率よく処理することに特化しているため、数百万から数千万程度の規模に収まっていると考えられる。これは、単にモデルを巨大化させるのではなく、物理法則に即した「質の高い学習」を優先しているためである。

(a) 材料データベース

学習用データベース（インプット） GNoME が最初に「どのような結晶が安定か」を学ぶために使用したのは、世界中の研究者が蓄積してきた以下の主要な公開データセットである。

- ・ Materials Project (MP): 数十万種類の材料の物理的性質を網羅した、世界最大級のオープンデータベースである。
- ・ ICSD (Inorganic Crystal Structure Database): 1913 年以降に発表された、実験で確認済の無機結晶構造を集めた歴史あるデータベースである。
- ・ OQMD (Open Quantum Materials Database): 理論計算によって得られた材料データを集約したプロジェクトである。これら約 2 万～5 万件の「安定した結晶データ」を教師データとして学習し、そこから 220 万種という膨大な新候補を予測する能力を装備した。

(b) 成果データベース（アウトプット）

GNoME が発見したデータは、DeepMind 社内にとどめられるのではなく、広く一般に公開されている。

- ・ Materials Project への統合: GNoME が予測した約 38 万種類の安定物質データは、Materials Project に提供されている。世界中の研究者は、同プロジェクトのウェブサイトや API を通じて、これらの新材料の構造データを自由に検索・ダウンロードすることが可能である。
- ・ 公開の目的: 新材料をコンピュータで見つけるだけでなく、実際に世界中の研究室

で「作ってもら（合成してもら）」ことを促進し、実用化を早めるためである。

(c) 学習プロセスにおけるデータの循環（アクティブラーニング）

学習用データと成果データの関係は一方通行ではなく、以下のような循環構造になっている。

- ① 既存データ（MP/ICSD 等）を AI が学習する。
- ② AI が 220 万種類の新候補を予測する。
- ③ 予測結果を物理計算（DFT）で検証し、正解・不正解を判定する。
- ④ その結果を新たな学習データとして AI に追加する（アクティブラーニング）。
- ⑤ 精度が向上した AI が、更に正確な予測を行う。このサイクルを繰り返すことで、最終的に非常に信頼性の高い 38 万種類の安定物質データベースが完成した。

(4) 学習時間

学習時間において最も重要なのは、単純なモデルの訓練時間ではなく、「能動学習（アクティブラーニング）」と呼ばれる反復的なプロセスに費やされた時間である。GNoME はまず未知の結晶構造を予測し、その安定性を DFT（密度汎関数理論）という非常に計算負荷の高い物理シミュレーションで検証する。その検証結果を再び学習データとしてモデルにフィードバックするというサイクルを繰り返した。

このサイクルを通じて、GNoME は最終的に 220 万個もの新構造を予測し、そのうち約 38 万個の安定物質を特定することに成功した。この膨大なシミュレーションと学習のループには、Google の強力な計算リソースを用いても膨大な時間が必要であるが、人間が従来の計算手法で行えば 800 年かかると言われるほどの成果を約 1 年で達成している。結論として、GNoME の凄みはパラメータの量にあるのではなく、AI の予測と物理的な裏付けを高度に融合させ、材料科学の探索スピードを指数関数的に向上させた点にあると言える。

(5) 課題

GNoME は「理論上の安定性」を予測することには長けているが、その物質を実際にどのような手順で合成するかという「製造レシピ」の確立や、特定の産業用途に必要な「具体的な機能（電気伝導率や耐熱性など）」の完全な予測にはまだ改善の余地がある。また、実用的な材料に多い、あえて不純物を加えた複雑な欠陥構造のシミュレーションも今後の重要なテーマである。今後は、GNoME による設計と、ロボットによる自動合成ラボ（A-Lab など）が高度に連携することで、AI が新材料の発見から実証までを一貫して担う「自律的な科学発見」の時代へと移行していくことが期待されている。

3.3.5. MatterSim (Microsoft Research AI for Science)

本節は、[3]を中心にまとめたものである。

(1) 概要 (開発機関等)

Microsoft Research AI for Science が開発した MatterSim (マターシム) は、材料科学におけるシミュレーションの精度と速度を劇的に向上させる原子レベルの基盤モデルである。このモデルは、従来の物理計算が抱えていた「高い精度を求めると計算が遅くなる」という課題を、深層学習 (ディープラーニング) を用いることで解決している。MatterSim は、周期表にあるほぼすべての元素に対応しており、絶対零度から数千度の高温、更には超高压といった極限環境下における物質の挙動を、第一原理計算に匹敵する精度でシミュレートすることが可能である。

技術的な基盤には、LLM の概念を応用した「Graphormer」というアーキテクチャが採用されており、原子同士の複雑な相互作用を高度に理解する仕組みを備えている。約 1,700 万に及ぶ大規模な計算データを学習しており、AI が予測に自信を持たない場合には自ら物理計算を行って学習データを補強する「アクティブラーニング」によって、モデルの信頼性を極限まで高めている。また、特定の専門領域に合わせて少量のデータを追加学習させるだけで、実験結果と極めて近いレベルまで精度を微調整できる柔軟性も持っている。

Google DeepMind の GNoME が、膨大な数の新物質を「発見・リスト化」することに特化しているのに対し、MatterSim は発見された物質が「特定の環境下でどのように機能するか」を動的に解析することを得意としており、両者は材料開発の両輪をなす存在と言える。将来的な課題としては、より大規模で複雑なタンパク質や生体分子などの系への適用範囲の拡大が挙げられるが、Microsoft の生成 AI である「MatterGen」と連携することで、AI による設計から詳細な検証までをデジタル上で完結させる「デジタルツイン」の構築を強力に推進している。このように、MatterSim は材料開発における試行錯誤のプロセスを劇的に短縮し、次世代のイノベーションを加速させる極めて重要な技術として位置付けられている。

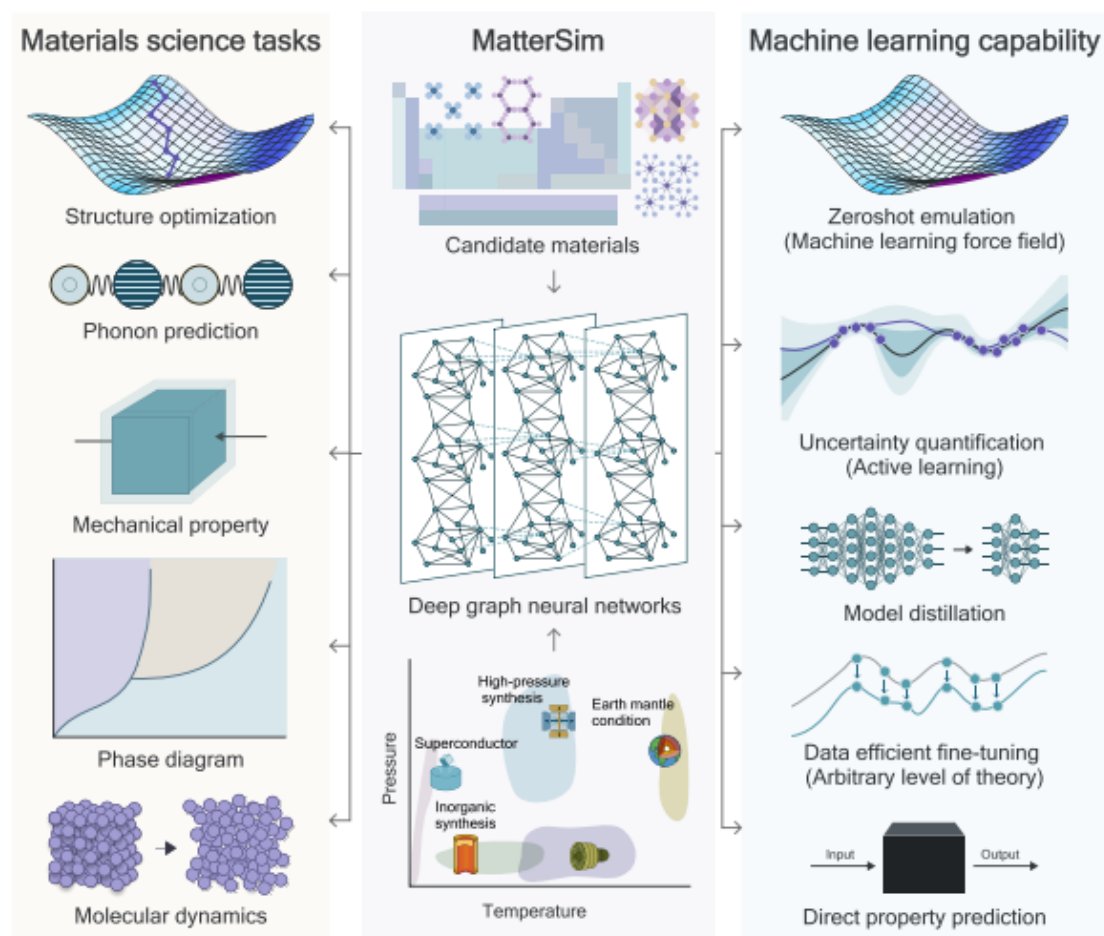


Fig. 1: MatterSim is a deep learning atomistic model for predicting materials properties with high predictive accuracy across chemical elements, temperatures and pressures, enabling a wide range of applicability and functionality.

図 3.11 MatterSim の全体像と応用可能性 [3]

(2) 機能

Microsoft Research AI for Science が開発した MatterSim（マターシム）は、原子レベルのシミュレーションにおいて、物理的な正確さと計算速度を両立させるために設計された多機能な基盤モデルである。その核となる機能は、単なる静的な数値予測にとどまらず、現実世界の多様な条件下で物質がどのように動くかを精密に再現する点にある。

技術的な最大の特徴は、量子力学の第一原理計算に裏打ちされた高度なエネルギーおよび力の予測能力である。MatterSim は、絶対零度から 5,000K という超高温、更には標準大気圧から 1,000 万気圧という超高圧環境に至るまで、極めて広範な熱力学的条件下でのシミュレーションに対応している。これにより、金属や酸化物、硫化物の結晶状態だけでなく、アモルファス（非晶質）や液体状態、更には極限環境下での相転移（物質の状態変化）までもが高精度で解析可能である。この広範な対応能力を支えているのが、約

1,700 万件という大規模な合成データを用いた学習であり、AI が自ら不確実な領域を見つけて出して物理計算で補強する「アクティブラーニング」の手法が、モデルの信頼性を盤石なものにしている。

また、**MatterSim** は単一のツールとして完結しているのではなく、特定の研究ニーズに合わせてカスタマイズできる柔軟な適応機能を備えている。少量の追加データを用いる「ファインチューニング（微調整）」機能により、特定の化合物や特殊な反応条件に対しても、ゼロからモデルを構築する場合のわずかな数パーセントのデータ量で、実験結果とほぼ一致するレベルまで精度を高めることができる。更に、構造データから直接的に物性を予測する「アダプターモジュール」を組み込むことで、複雑なシミュレーションプロセスを経ることなく、材料の特性を瞬時に導き出すことも可能である。

(3) 学習について

MatterSim は、材料科学における汎用基盤モデルを目指して設計されており、その核となるアーキテクチャには、原子間の相互作用を精緻に捉えるグラフニューラルネットワーク（GNN）が採用されている。具体的には、既存の **M3GNet** などの設計思想を継承しつつ、周期表のほぼすべての元素（100 種類以上）をカバーできるよう拡張されている。パラメータ数については、一般的な材料予測モデルを大きく上回る約 1 億 8200 万（182M）規模に達しており、これにより結晶構造のわずかな歪みや、複雑な元素の組み合わせによる物性の変化を、極めて高い解像度で学習することが可能となった。

学習方法において最も特徴的な点は、データの量と質の双方を追求した「能動学習（アクティブラーニング）」のプロセスである。**MatterSim** は単に既存のデータベースを学習するだけでなく、自ら生成した膨大な数の結晶構造に対して、密度汎関数理論（DFT）に基づく高精度なシミュレーションを実行し、その結果をフィードバックとして取り込むサイクルを繰り返した。この過程で、絶対零度から 5000K という超高温域、更には 1000GPa という超高压下に至るまで、極限状態を含む広範な熱力学的条件のデータを学習している。

また、モデルの訓練プロセスでは、エネルギー、原子にかかる力、そして応力（ストレス）という 3 つの重要な物理量を段階的に学習させる手法が採られている。まず基本的なエネルギーと力の予測精度を高めた後、そのネットワークの重みを一部固定した状態で応力の予測能力を最適化することで、物理的な整合性を保ちながら高い汎用性を獲得した。

このように、膨大なパラメータと過酷な環境条件下での学習を組み合わせた結果、**MatterSim** は従来のモデルと比較して物性予測の誤差を大幅に削減することに成功している。これは、新しい材料を発見するだけでなく、その材料が実際の動作環境でどのように振る舞うかを、実験室でのテストに先んじて正確にシミュレーションできる強力なツールとなったことを意味している。

(a) 材料データベース

学習用データベースの構成と規模

MatterSim の学習には、第一原理計算 (DFT) によって算出された約 1,700 万件にも及ぶ膨大な構造データが使用されている。このデータセットは、単に既存の材料データを集めたものではなく、AI が未知の領域を探索するために独自に生成された「合成データ」を核としている。具体的には、周期表の全元素を網羅しつつ、絶対零度から 5,000K (約 4,727°C) の温度範囲、および標準気圧から 1,000 万気圧 (約 1,000GPa) という極限状態の圧力をカバーしている。これにより、一般的な結晶構造だけでなく、液体、アモルファス、更には高エネルギー状態の「非平衡状態」における原子の配置までがデータベースに含まれており、現実の複雑な化学反応や相転移をシミュレートするための盤石な基礎となっている。

データの生成戦略：2つの探索機 この膨大なデータベースを構築するために、Microsoft は2種類のデータ生成プロセスを組み合わせていた。一つは、物質が最も安定する状態を特定するための「基底状態エクスプローラー (Ground-state explorer)」である。これにより、エネルギー的に安定した結晶構造の基盤を学習する。もう一つは、高温・高圧下での原子の乱れをサンプリングする「非平衡エクスプローラー (Off-equilibrium explorer)」である。これらを通じて、通常の方法では得られない材料データベース (Materials Project など) が持っている「安定状態に偏ったデータ」というバイアスを克服し、壊れゆく材料や極限状態の材料までも理解できる汎用性を獲得した。

成果物の公開とモデルの展開

現在、MatterSim の成果は GitHub などのプラットフォームを通じて段階的に公開されている。特に、100 万件のデータで最適化された汎用版 (v1.0.0-1M) や、500 万件のデータを用いて複雑な構成でも高い精度を発揮する高精度版 (v1.0.0-5M) といった学習済みモデルがリリースされており、研究者はこれらを利用して独自のシミュレーションを行うことが可能である。また、このモデルは単なる静的なデータベースではなく、少量のデータを追加して特定の課題に特化させる「継続的な学習プラットフォーム」としての側面も持っており、ユーザが持ち寄るドメイン固有のデータと統合することで、常に最新の知見を取り込み、進化し続ける構造となっている。

(4) 学習時間

まず、学習データの生成についてであるが、MatterSim は独自のデータセットを含む数千万件規模の DFT 計算データを学習に用いている。特に、絶対零度から 5000K という極めて広い温度範囲や、超高圧下での挙動を網羅するために、膨大な数の「分子動力学 (MD) シミュレーション」が実行された。これら一つ一つの構造に対して厳密な物理計算を行い、教師データを作成する工程が、プロジェクト全体の中で最も時間を要する部分である。Microsoft の持つ Azure Quantum などの強力なクラウド基盤をフル活用したとし

でも、この規模のデータ生成には数ヶ月単位の時間が必要となる。

次に、モデル自体の訓練時間についてである。MatterSim は約 1.8 億パラメータという、この分野では比較的大規模なネットワークを採用している。GNoME のような構造探索モデルよりも複雑な物性（応力や動的な振る舞い）を学習させる必要があるため、1 回の学習サイクルにも相応の負荷がかかる。しかし、MatterSim は「能動学習」を採用しており、最初からすべてのデータを一度に学習させるのではなく、モデルが苦手な領域を特定してはデータを追加し、追加学習（ファインチューニング）を繰り返すという手法を採っている。このため、一度の連続した学習で終わるのではなく、シミュレーションと学習が並行して進む「継続的な進化」に時間が充てられた。

このように、MatterSim の「学習時間」は単なる計算機の稼働時間というだけでなく、広大な材料空間の中から過酷な環境下での挙動を正しく理解させるための、戦略的な試行錯誤の積み重ねであると言える。その結果として、従来のモデルでは到達できなかった「現実世界に近い条件下での高精度なシミュレーション」を、実時間で見れば 1 年足らずという短期間で実現するに至っている。

(5) 課題

最大の課題の一つは、シミュレーションの対象となるシステムの規模と複雑さへの対応である。MatterSim は現在、数千原子程度の系を第一原理計算に近い精度でシミュレートすることを得意としているが、電池の電極界面や生体分子の反応といった、よりマクロで複雑な現象を扱うには、計算コストと精度のバランスを更に最適化する必要がある。また、結晶や液体といった比較的均一な系だけでなく、不純物や欠陥が機能に重要な役割を果たす実用材料において、それらの「不完全性」をいかに正確にシミュレーションに取り込むかも重要なテーマである。

更に、理論上のシミュレーション結果と、実際の合成プロセスとの橋渡し（ギャップの解消）も大きな課題である。MatterSim によって特定の温度や圧力下での安定性や物性が明らかになったとしても、それが現実の製造ラインで再現可能か、あるいは長期的な使用において劣化しないかといった「実用上の信頼性」の担保には、実験データとの更なる統合が必要である。これに関連して、AI が予測した物性が、実験室での測定誤差や環境要因にどれほど敏感であるかを評価する「不確実性の定量化」機能の強化も求められている。

将来的には、これらの課題を克服するために、Microsoft の生成 AI である「MatterGen」とのより緊密な連携が鍵となる。AI が目的の物性から逆算して材料を設計し、MatterSim がその動的な挙動を瞬時に検証し、更には自律型ロボットラボがそのレシピを試行するという、デジタル空間と物理空間が完全に融合した「自動化された科学発見」のサイクルを確立することが、次世代の材料開発における究極の目標とされている。

3.3.6. MACE-MP-0 (ケンブリッジ大学、アムステルダム大学)

本節は、[4]を中心にまとめたものである。

(1) 概要 (開発機関等)

ケンブリッジ大学の Gábor Csányi 教授のグループを中心とし、ドイツ連邦材料試験研究所 (BAM) やローレンス・バークレー国立研究所、そして Materials Project (MP) の研究者らが共同で開発した。MACE-MP-0 は、極めて正確ながらも計算負荷が非常に重い密度汎関数理論 (DFT) を、機械学習によって代替することを目的に開発された。このモデルの最大の特徴は「汎用性」の追求にあり、特定の物質に限定されず、周期表の 89 元素という広範な範囲をカバーする「ユニバーサルモデル」として設計されている。これにより、物理的な精度を維持したまま、従来の DFT 計算と比較して数千倍から数万倍という圧倒的なスピードでシミュレーションを実行することが可能となった。

技術的な側面においては、「MACE (Multi-ACE)」と呼ばれるアーキテクチャを採用しており、高次の等変メッセージパッシング (Higher-order Equivariant Message Passing) という高度な技術が組み込まれている。この技術により、原子間の複雑な多体相互作用を、回転や平行移動といった物理的な対称性を保ったまま正確に記述できるのが強みである。学習には、Materials Project Trajectory (MPtrj) に含まれる約 160 万件のバルク結晶構造データセットが使用されており、強固な基礎データに基づいたトレーニングが行われている。

実際の活用事例としては、チタン酸バリウム (BTO) の構造相転移やシリカの高圧下での相変化など、高度な解析に利用されている。また、結晶のような固体状態だけでなく、液体やアモルファス、更にはガス相のモデリングまで対応しており、極めて応用範囲が広いのが特徴である。更に、特定の材料系に対して少量のデータを追加学習させる「ファインチューニング」を行うことで、専門的な領域において更なる精度向上を図る運用も推奨されている。

先行してご紹介した GNoME が「未知の結晶構造を探索し、発見すること」に主眼を置いているのに対し、この MACE-MP-0 は「提示された構造のエネルギーや力を精密に計算し、動的な挙動をシミュレーションするためのインフラ」としての役割を担っている。現在は Materials Project の一部として統合され、オープンソースとして広く公開されており、世界中の研究者が次世代材料の開発に役立っている。

(2) 機能

まず、このモデルの核心的な能力は、量子力学に基づく密度汎関数理論 (DFT) に極めて近い精度で、原子にかかる力、エネルギー、および応力 (ストレス) を算出できる点にある。従来、これほど高精度な解析にはスーパーコンピュータを用いた膨大な計算時間が必要であったが、MACE-MP-0 を活用することで、一般的な計算環境においても圧倒的な

スピードで実行できるようになった。

汎用性の面においても非常に優れており、周期表の 89 元素に対応しているため、特定の物質に依存せず、ほぼ全ての無機材料を単一のモデルで扱うことが可能である。その適用範囲は結晶のような固体にとどまらず、液体、ガス、アモルファス、更にはこれらが混在する複雑な状態のシミュレーションにまで及ぶ。

また、実用的な解析機能として、不安定な原子の配置から最もエネルギーが低く安定した構造へと導く「構造最適化」を行うことができる。これに加え、温度や圧力を変化させた際に生じる「相転移」、例えば氷が水へと変化するような動的なプロセスを、分子動力学法 (MD) を用いて詳細にシミュレートする機能を備えている。

更に、MACE-MP-0 は強力な「学習基盤」としての役割も果たしている。モデルを一から訓練し直す必要はなく、このモデルを「土台 (基盤モデル)」として利用し、特定の触媒や電池材料といった専門性の高い少量のデータを追加学習させる「ファインチューニング (微調整)」が可能である。これにより、研究者は極めて短時間で、自身の専門領域に特化した超高精度な専用モデルを構築できるようになる。

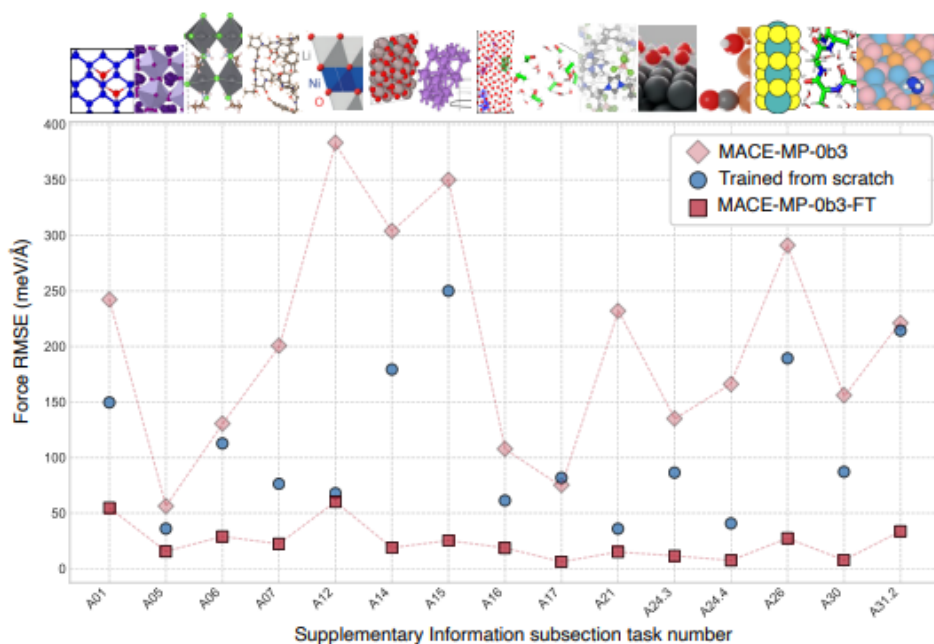


Figure 4: **Fine-tuning.** A comparison of force RMS error on selected applications in the SI for which fine-tuning was performed. The MACE-MP-0b3 model is shown with pink diamonds and the fine-tuned model (MACE-MP-0b3-FT) for each application with red squares. For comparison, in each case we also show the results corresponding to a model trained “from scratch” only to the small amount of fine-tuning data (blue circles).

図 3.12 MACE-MP-0 のファインチューニングによる精度向上とデータ効率 [4]

(3) 学習について

MACE-MP-0 は、材料科学における万能な「基盤モデル」を構築するため、世界最大級の材料データベースである **Materials Project (MP)** の膨大な計算データを活用して学習されている。具体的には、**MPtrj (Materials Project Trajectory)** と呼ばれるデータセットに含まれる約 160 万件の構造データが使用されており、これは結晶が安定状態に至るまでの計算過程（トラジェクトリ）における原子の配置、エネルギー、力、および応力を網羅したものである。学習の範囲は周期表の 89 元素におよび、これにより特定の物質に依存しない圧倒的な汎用性を獲得している。

技術的な側面では、「高次の等変メッセージパッシング (Equivariant Message Passing)」というアーキテクチャを採用しており、原子間の複雑な多体相互作用を物理的な対称性（回転や平行移動）を保ったまま効率的に学習できる点が特徴である。この学習アプローチにより、結晶のような整った構造だけでなく、液体やアモルファス、更には原子が大きく歪んだ非平衡状態における物理現象までも正確に再現することが可能となった。また、一度この大規模なデータで学習を終えた「**MP-0 (チェックポイント)**」を土台とすることで、研究者が自身の少量のデータを用いて追加学習（ファインチューニング）を行い、特定の材料系に対して短時間で極めて高い精度を持つ専門モデルへ進化させることができる設計になっている。

(a) 材料データベース

MACE-MP-0 は、材料科学分野の広範な領域をカバーする「汎用的な基盤モデル」を構築するため、世界最大級のオープンデータベースである **Materials Project (MP)** の膨大な計算データを基盤として学習されている。具体的には、**MPtrj (Materials Project Trajectory)** と呼ばれる、約 160 万件の構造データセットが使用されている。このデータセットには、結晶が最も安定した状態（基底状態）に至るまでの計算過程（トラジェクトリ）における原子の配置、エネルギー、力、および応力の情報が網羅されており、これによりモデルは理想的な構造だけでなく、そこから歪んだ状態やエネルギーの高い非平衡状態についても深く理解することが可能となった。

また、このデータベースの最大の特徴は、周期表の 89 元素という圧倒的な網羅性にある。従来の多くのモデルが特定の材料系や少数の元素に限定されていたのに対し、**MACE-MP-0** は **MPtrj** を通じて多様な化学的組成を学習しているため、ほぼ全ての無機材料に対して物理的に整合性のある予測を行うことができる。更に、この大規模な学習済モデルは、ユーザが保有する特定の専門的なデータセット（独自の実験値や高精度な計算値）を用いて追加学習（ファインチューニング）を行う際の強力な出発点としても機能し、データが少ない未知の領域においても高い信頼性を維持する土台となっている。

(4) 学習時間

MACE-MP-0 の具体的な学習時間（合計何時間など）についての直接的な数値は公表されていないが、その学習コストやプロセスの規模から、開発に要した計算資源の大きさを推察することができる。MACE-MP-0 の学習は、Materials Project から提供された約 160 万件という膨大な構造データ (MPtrj) を用いて行われた。これほどの大規模なデータセットに対し、原子間の複雑な多体相互作用を記述する「高次のメッセージパッシング」という計算負荷の高いアルゴリズムを適用するためには、極めて強力な GPU クラスタによる並列処理が必要となる。一般的な深層学習モデルの傾向から推測すると、この規模の基盤モデルをゼロから構築するには、高性能なコンピューティング環境を用いても数週間から数ヶ月単位の連続的な計算時間を要したと考えられる。

しかし、研究開発において重要なのは、一度この大規模な学習が完了した「チェックポイント (学習済モデル)」が提供されていることで、個別のユーザが同じ膨大な学習時間を繰り返す必要がないという点である。MACE-MP-0 を土台として、特定の材料系に特化させる「ファインチューニング (微調整)」を行う場合、元の学習にかかった膨大な時間とは対照的に、数千件程度の追加データであれば、標準的な GPU 環境でも数時間から数日程度で高精度なモデルへと進化させることが可能となっている。このように、MACE-MP-0 は莫大な計算資源を投じて「知の基盤」を築くことで、個々の研究者が費やすシミュレーション時間を大幅に短縮することに貢献している。

(5) 課題

学習データに起因する精度の限界 MACE-MP-0 は DFT 計算（主に PBE 汎関数）のデータを学習しているため、「元の物理計算 (PBE) が持つ弱点」をそのまま引き継いでしまう。

分子間相互作用の不正確さ: PBE 汎関数は分散力 (ファンデルワールス力) の記述が苦手なため、水のような分子構造や有機物、分子結晶の密度・構造を正確に再現できない場合がある。

反応障壁の過小評価: 化学反応における遷移状態や障壁のエネルギーが正しく算出されないことがあり、複雑な触媒反応などの動的解析には注意が必要である。

特定の物理属性への対応不足 現在のモデルは「原子の種類と位置」からエネルギーや力を予測するが、材料の挙動に重要な「電子状態」の情報の欠如が課題となっている。

電荷・スピン状態の区別: 同じ構造であっても、全電荷やスピン状態 (磁性) が異なる場合のエネルギー差を、現在の入力形式 (構造のみ) では区別できない。

長距離相互作用: 基本的に近傍の原子配置から予測を行う「短距離設計」であるため、静電相互作用のような長距離に働く物理現象の記述には限界がある。

特定の材料系での精度低下 あらゆる元素をカバーする「汎用性」を追求している反面、特定の材料グループにおいて専門モデルに劣る場合がある。

分布外（OOD）データへの脆弱性: 学習データ（Materials Project）に含まれないような極端な環境や特殊な組成の材料では、予測の信頼性が低下する。

複雑なエネルギー材料: 例えば、次世代電池用の特定のカソード材料などのシミュレーションでは、汎用モデルよりも「その材料系に特化して一から学習したモデル」の方が精度が高いことが報告されている。

3.3.7. MatterGen（Microsoft Research AI for Science）

本節は、[5]を中心にまとめたものである。

(1) 概要（開発機関等）

Microsoft Research AI for Science が開発した「MatterGen（マタージェン）」は、材料科学における設計プロセスを根本から変える「逆設計（インバース・デザイン）」を可能にする生成 AI モデルである。従来の材料探索が、膨大な候補リストから有望なものを絞り込む「スクリーニング方式」であったのに対し、MatterGen はユーザが求める特定の物性（磁性、導電性、安定性など）を入力として、それに合致する新しい無機材料の構造を直接生成できる点が最大の特徴である。この手法は、画像生成 AI が言葉から新しい画像を作り出すプロセスと似ており、広大な材料空間の中から目的に対して最短距離で到達するアプローチを実現している。

技術的な基盤には、画像生成技術などで実績のある「拡散モデル（ディフュージョン・モデル）」が採用されており、結晶構造特有の周期性や 3 次元的な原子配置を考慮した高度な設計がなされている。MatterGen は、周期表のほぼ全元素を組み合わせることができ、生成された材料の熱力学的な安定性は従来の AI 手法に比べて大幅に向上している。実際に、中国深圳先進技術研究院（SIAT）との共同研究により、MatterGen が設計した新材料「TaCr₂O₆」の合成に成功しており、AI による予測と実際の物理特性が高い一致を示したことで、その実用的な有効性が証明されている。

(2) 機能

目的とする物性から逆算して新しい材料をゼロから設計する「逆設計（インバース・デザイン）」に特化した革新的な生成 AI モデルである。従来の材料開発は、膨大な既知のリストから条件に合うものを探し出す「スクリーニング（選別）」という手法が主流であったが、MatterGen は画像生成 AI などを用いられる「拡散モデル」を材料科学に応用することで、ユーザが指定した化学的、機械的、電子的、あるいは磁気的な特性を満たす結晶構造を直接的に生成する機能を備えている。

具体的には、ランダムに配置された原子のノイズ状態から、徐々に原子の種類、座標、および結晶格子を微調整して最適化していく独自の拡散プロセスを採用しており、これにより周期表の全元素を対象とした極めて自由度の高い設計が可能である。機能の詳細としては、ベースとなるモデルが安定した多様な材料を生成する能力に加え、特定の物性制約

(例えば「高い硬度」や「低いサプライチェーンリスク」など)に合わせてモデルを適応させる「ファインチューニング」機能や、追加の特性を柔軟に組み込むための「アダプターモジュール」を備えている。これにより、単一の物性だけでなく、複数の複雑な制約を同時に満たす新材料をピンポイントで提案することが可能となり、従来の AI モデルと比較して、生成された材料が新規かつ安定である確率が大幅に向上している。

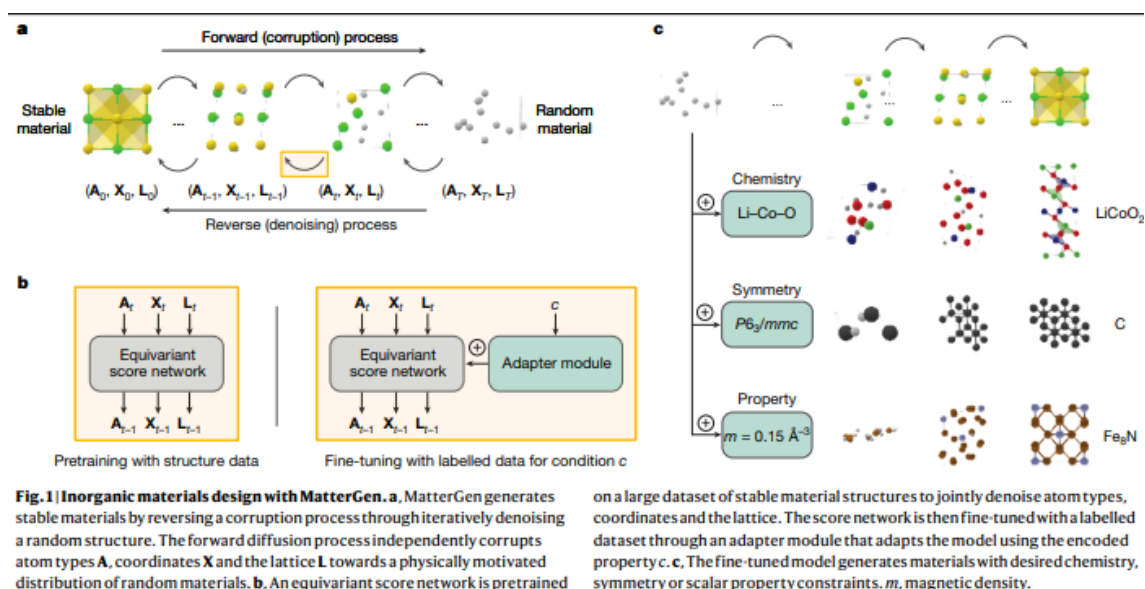


図 3.13 MatterGen による無機材料の拡散プロセスと逆設計の仕組み [5]

(3) 学習について

材料データベース AI が「安定性」と「目的の物性」を同時に理解するための極めて高品質な学習基盤として構築されている。このデータベースは、世界最大の材料情報リソースである「Materials Project」と、広範な理論計算データを有する「Alexandria」という 2 つの主要なソースから統合された、約 60 万 8,000 件の安定した無機材料データによって構成されている。MatterGen が実用的な新材料を高い確率で生成できる理由は、この膨大なデータに対して「エネルギー的な安定性」という厳格なフィルタリングを適用し、現実的に存在可能な構造のみを学習させている点にある。また、単なる構造データだけでなく、磁性、電子状態、機械的強度といった具体的な「物性ラベル」が紐付けられており、これにより画像生成 AI が言葉から絵を描くように、望みの性能から未知の材料構造を逆引きで設計することが可能となっている。

マイクロソフトは、このモデルのソースコードと共に学習および微調整用のデータセットも公開しており、研究者が自らの特定のニーズに合わせてモデルをカスタマイズできるオープンな環境を整えている。このデータベースとそれに基づく生成プロセスは、従来の「既存のリストから探す」という受動的な探索から、AI が「必要なものを直接作り出す」

という能動的な設計へのパラダイムシフトを実現する上での強固な土台となっている。

(4) 課題

MatterGen (マタージェン) が材料設計に革新をもたらす一方で、実用化と更なる普及に向けた将来的な課題も明確になっている。それらを整理すると、主に「合成の実現性」「複雑な系の設計」「データの多様性」の3点に集約される。

まず最大の課題は、AI が設計した構造が「実際に安定して作れるか (合成可能性)」という点である。MatterGen は熱力学的に安定な構造を生成することには長けているが、その物質をどのような温度や圧力、化学的な手順で合成すべきかという「製造レシピ」までは提示できない。理論上は安定でも、現在の化学技術では合成が極めて困難な「エキゾチックな構造」が生成されることもあり、設計から実機評価までのリードタイムを短縮するためには、AI による合成経路の予測や自律型ロボットラボとのより緊密な連携が不可欠である。

次に、より複雑で巨大なシステムへの対応が挙げられる。現在の MatterGen が主に扱うのは、原子数が数十個程度の比較的小規模な結晶構造 (ユニットセル) であるが、産業界で求められる材料は、異なる材料が重なり合う「界面」や、意図的に微細な欠陥を導入した構造、あるいは数千から数万の原子が関与する複雑なポリマーなど多岐にわたる。こうした大規模かつ非周期的な系の設計には、計算コストが飛躍的に増大するため、より効率的なアルゴリズムの開発が求められている。

最後に、データのバイアスと未知の物性への対応である。MatterGen は既存の材料データベースを元に学習しているため、過去の研究データが乏しい「未知の元素の組み合わせ」や「極端な条件下で発現する物性」については、予測精度が低下する懸念がある。これを克服するためには、実験データだけでなく物理学的な第一原理に基づいたシミュレーションデータを更に拡充し、AI が既成概念を超えた真に革新的な材料を創出できるような「データの多様性」を確保し続けることが将来的な大きなテーマとなる。

3.3.8. A-Lab (LBNL)

本節は、[6]を中心にまとめたものである。

(1) 概要 (開発機関等)

(a) 開発機関と協力体制

A-Lab は、産学の高度な連携によって構築・運営されている。

- ・ ローレンス・バークレー国立研究所 (Berkeley Lab): システムの構築と運用を担当している。
- ・ カリフォルニア大学バークレー校 (UC Berkeley): ガーブランド・セダー (Gerbrand Ceder) 教授のチームが主導している。

- ・ Google DeepMind: AI モデル (GNoME) による新材料の予測データと、合成プロセスの最適化アルゴリズムを提供している。

(b) システムの概要と目的

A-Lab は、計算科学で見つかった膨大な新材料候補を、実際に「物質」として現実化するスピードを劇的に高めるために開発された。

- ・ 「自律型ラボ (SDL)」の実現: 実験の計画、実行、結果の分析、そして失敗に基づいた改善までを AI が自動で行う。
- ・ ボトルネックの解消: コンピューターによる予測 (数日) に対し、人間の手による合成 (数か月) という時間の乖離 (ギャップ) を埋めることが目的である。
- ・ 主要な機能 A-Lab は、粉末状の無機材料を対象とした一連の合成プロセスを完全自動化している。
- ・ 合成レシピの生成: 500 万件以上の過去の論文からテキストマイニングで得た知識と、熱力学データに基づき、最適な「作り方 (レシピ)」を AI が考案する。
- ・ ロボットによる自動操作: ロボットアームが原料を正確に計量し、混ぜ合わせ、加熱処理 (焼成) を行う。
- ・ 自動評価と学習: 出来上がった物質を X 線回折 (XRD) などの装置で分析し、目標どおりに作れたかを判定する。失敗した場合は、そのデータを基にレシピを修正して再挑戦する。
- ・ 驚異的な実績 2023 年に発表された成果では、従来の常識を覆す成果を上げた。
- ・ 短期間での大量合成: 17 日間の稼働で、目標とした 58 種類の新物質のうち 41 種類の合成に成功した。
- ・ 圧倒的なスピード: 人間が数か月から数年かかる作業を、1 日当たり平均 2 種類以上のペースで遂行した。

(c) 将来への課題

A-Lab のようなシステムが普及する上では、まだいくつかの課題も残されている。

- ・ 対応材料の拡大: 現在は空気中で安定な「粉末材料」が中心であるが、より複雑な薄膜材料や、空気に触れると劣化する敏感な材料への対応が必要である。
- ・ 合成の不確実性: 合成成功率は現在約 70%前後であり、残りの 30% (失敗事例) からいかに効率よく学習し、成功率を 100%に近づけるかが今後の焦点である。

(2) 機能

A-Lab (エー・ラボ) は、材料の「設計・合成・評価」という科学研究の全工程を、AI とロボティクスによって完全自動化した自律型ラボ (Self-Driving Lab) である。その詳細な機能は、人間が数か月かける試行錯誤を数日に短縮する「クローズドループ (閉ループ)

プ)」システムにある。A-Lab は、以下のプロセスは人間を介さずに 24 時間体制で繰り返される。

- ・ 合成レシピの自動生成（設計フェーズ）：GNoME などの AI が提案した新材料候補に対し、過去数百万件の論文から抽出した知識と熱力学データを組み合わせて、最適な「材料の混ぜ方」や「加熱温度」といったレシピを考案する。
- ・ ロボットによる自動合成（実行フェーズ）：AI からの指示を受けたロボットアームが、粉末原料の計量、混合、および電気炉での加熱処理（固体反応）を精密に実行する。
- ・ 自動測定と相の同定（評価フェーズ）：合成された物質を X 線回折（XRD）などの分析装置に自動で投入し、原子の並びを測定する。独自アルゴリズムを用いて、目標とした新材料が正しく生成されたかを瞬時に判定する。
- ・ 自己修正と継続学習（最適化フェーズ）：実験が失敗した場合、その結果を AI が分析して「なぜ失敗したか」を理解し、次の実験に向けたレシピの修正案を自ら提示する。

(a) 技術的特徴

圧倒的なスループット：人間の研究者の 数百倍から数千倍 の速度で材料を合成・評価できる。

- ・ 完全な自律性：仮説の生成からコードの記述、実験の実行、最終的なレポート作成までを AI が単独で行うことが可能である。
- ・ 高い再現性：全ての測定データや手順がデジタル化され、電子実験ノートに正確に記録されるため、人間の手作業による誤差を排除した高い信頼性を確保している。

(b) 実績と今後の展望

実績：17 日間の稼働で 41 種類の新物質合成に成功（成功率約 70%）するという、これまでの常識を覆す成果を上げている。

展望：現在は「粉末材料」が中心であるが、今後は「薄膜材料」や、より複雑な化学反応を伴う系への対応が進められている。

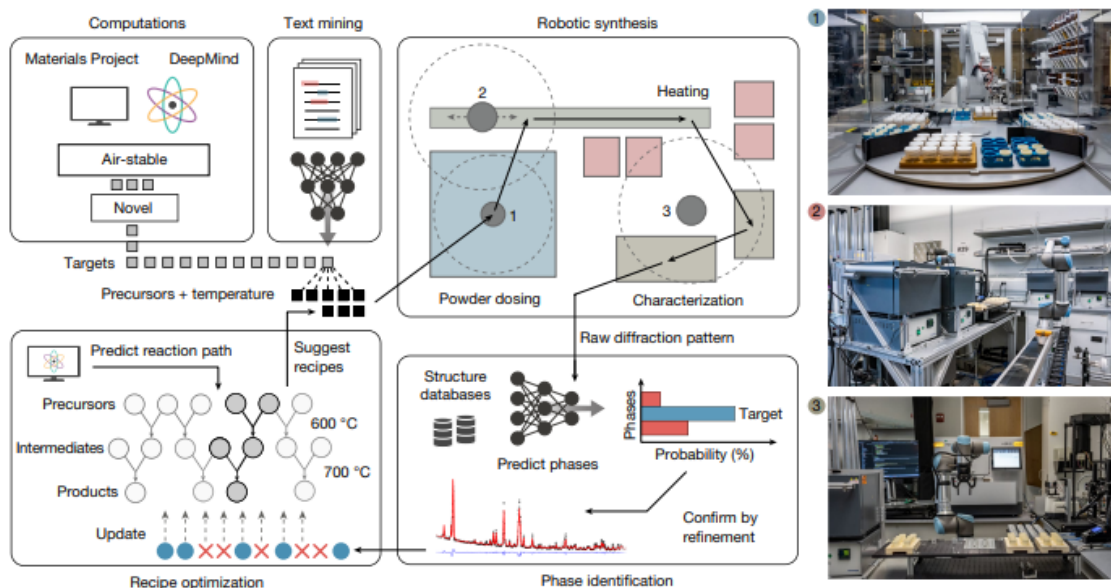


Fig. 1 | Autonomous materials synthesis with the A-Lab. Air-stable targets are identified using DFT-calculated convex hulls consisting of ordered ground states from the Materials Project and Google DeepMind. Synthesis recipes for each target are proposed using ML models trained on synthesis data from the literature. These recipes are tested using a robotic laboratory that automates (1) powder dosing, (2) sample heating and (3) product characterization with XRD. All sample transfer between these stations is performed using robotic arms,

forming a fully automated sequence from chemical input to characterization. Phase purity is assessed from XRD, which is analysed by ML models trained on structures from the Materials Project and the ICSD, and confirmed with automated Rietveld refinement. In cases in which high (>50%) target yield is not obtained, new synthesis recipes are proposed by an active-learning algorithm that identifies reaction pathways with maximal driving force to form the target.

図 3.14 A-Lab における自律的材料合成の統合ワークフロー [6]

(3) 学習について

文献からの「レシピ」の事前学習 A-Lab は、実験を始める前に、人類がこれまでに蓄積した膨大な化学の知識を学習している。

- ・ データソース: 500 万件以上の過去の学術論文から、テキストマイニング技術を用いて「どのような材料を」「どのような温度で」「どう混ぜたか」という情報を抽出している。
- ・ 自然言語モデルの活用: 抽出されたテキストデータは、化学に特化した言語モデルによって処理され、未知の新材料に対する「初期の合成レシピ」を自動生成する能力を養った。
- ・ 「能動学習 (Active Learning)」による試行錯誤 A-Lab の真骨頂は、実際に実験を行い、その結果を受けて自らの知識を更新していくサイクルにある。
- ・ 失敗からの学習: 実験が失敗 (目的の物質ができない、不純物が混ざる等) した場合、そのデータを「負のデータ」として即座にモデルへフィードバックする。
- ・ 不確実性の探索: AI は「次にどの条件で実験すれば最も多くの新情報が得られるか (不確実性が高い領域はどこか)」を判断基準にして、次の実験計画 (温度や時間、原料比率の変更) を立てる。
- ・ クローズドループ: 「予測 → 実験 → 評価 → 再学習」というプロセスを人間を介さ

ずに回し続けることで、短期間で最適な合成条件に辿り着く。

- ・ 評価アルゴリズムの学習 合成された物質が「正解」かどうかを判定するための学習も行われている。
- ・ 自動 XRD 解析: 測定された X 線回折 (XRD) パターンを、既存の結晶構造データベースと比較し、生成物の純度や結晶性を AI が自動でスコアリングする。
- ・ 継続的な精度向上: 実験回数が増えるほど、AI は特定の化学反応系における「成功のパターン」をより深く理解し、合成成功率を向上させていく。

(4) 材料データベース

A-Lab が自律的な実験を行うために活用しているデータベースは、主に「計算科学による予測データ」と「過去の文献から抽出された知識」の 2 つの軸で構成されている。

(a) GNoME (予測材料データベース)

A-Lab が実際に「何を合成するか」を決定する際の最大のソースは、Google DeepMind の AI モデル「GNoME (GNNs for Materials Exploration)」が予測した新材料のデータベースである。

- ・ 未踏の材料群: GNoME によって予測された、熱力学的に安定して存在しうるとされる約 38 万種類の新物質データからターゲットを選定する。
- ・ 計算値の活用: 材料のエネルギー安定性や結晶構造といった、計算機上で事前に検証された数値を基に実験を計画する。

(b) Materials Project (基礎データベース)

A-Lab のシステムの背後には、世界最大のオープンソース材料データベースである Materials Project (MP) の知見が統合されている。

- ・ 物理データの参照: 既存の既知物質の構造、エネルギー、物性データ (XRD パターンなど) を参照し、実験で得られた結果が目標どおりか、あるいは不純物なのかを判定するための比較基準として利用する。
- ・ 論文マイニング・データベース (合成知識) A-Lab は、物質を「どう作るか」というレシピを考案するために、過去の膨大な実験論文を学習したデータベースを利用している。
- ・ 500 万件以上の文献知見: 過去数十年間に発表された 500 万件以上の科学論文から、自然言語処理 (NLP) を用いて抽出された「合成手順 (温度、時間、原料、反応環境など)」の膨大な知識ベースを活用している。
- ・ 熱力学的反応経路: 過去の実験でどのような化合物が中間体として現れたかなどの実証データを学習し、未知の材料に対する最適な反応経路を予測する。

(c) 自社生成データベース（実験フィードバック）

A-Lab 自身の実験プロセスを通じて、新しい独自のデータベースがリアルタイムで構築されている。

- ・ 失敗データの蓄積：実験の成功例だけでなく、従来の論文にはほとんど記載されない「失敗した合成条件（負のデータ）」を詳細に記録し、それを次の学習に活かすことで、システムの精度を継続的に向上させている。

(5) 学習時間

A-Lab の学習時間は、一般的な AI モデルのように「一度学習して終わり」ではなく、「過去の膨大な知識の事前学習」と「実験現場でのリアルタイムな学習」の二段構えで構成されている。

(a) 文献からの事前学習（過去の知見の習得）

A-Lab は、実験を開始する前に、人類が蓄積した膨大な化学の知識を学習している。

- ・ 学習対象：500 万件以上の過去の学術論文から、自然言語処理（NLP）を用いて「材料」「温度」「混合方法」などの合成レシピ情報を抽出した。
- ・ 役割：この学習により、未知の新材料に対しても、最初の一步となる「初期レシピ」を AI が自ら考案できるようになる。

(b) リアルタイムな「能動学習（Active Learning）」の時間

A-Lab の最大の特徴は、実験を行いながらその結果を数時間～数日単位で学習し、レシピを更新し続けるサイクルにある。

- ・ 17 日間の連続稼働実績：実際に報告されたプロジェクトでは、17 日間の連続運転で 58 種類のターゲットのうち 41 種類の合成に成功した。
- ・ 1 日当たりの処理能力：1 日当たり 100～200 個のサンプルを処理・評価できる能力を持っており、これは人間の研究者の 50～100 倍のスピードに相当する。
- ・ 学習のサイクル：実験が失敗した場合、その日のうちに「なぜ失敗したか」を負のデータとして学習し、翌日の実験計画に反映させる「クローズドループ」を実現している。

(c) 学習時間の短縮効果

従来の材料開発における「学習（試行錯誤）」の時間と比較すると、その差は顕著である。

- ・ 開発期間の短縮：人間が数ヶ月から数年かけて行っていた「実験条件の最適化」という学習プロセスを、数日に短縮している。
- ・ 自律的な改善：A-Lab は 24 時間 365 日稼働するため、人間が眠っている間も常にデ

ータを取り込み、モデルの精度を向上させ続けている。

(6) 課題

合成成功率の向上と「失敗」の分析 初期の実験では約 71%の成功率を記録したが、残りの約 30%は目標物質を合成できなかった。単に成否を判定するだけでなく、「なぜ失敗したのか」という物理的な理由を AI が深く理解し、仮説を立てる能力の向上が求められている。

(a) 対応可能な材料・環境の制限

現在は主に「空气中で安定な無機粉末材料」を対象としている。空気に触れると劣化する材料や、液体、薄膜、より複雑な化学反応を必要とする多成分系への対応には、ハードウェアの大幅な拡張が必要である。

データの質とバイアスの問題 AI が学習に使う論文データには「成功例」ばかりが記載されており、実験の改善に不可欠な「失敗データ」が圧倒的に不足している。企業の独自技術（レシピ）は公開されないことが多く、学習データの網羅性が制限されるという産業上の課題もある。

(b) 物理的な検証と評価のボトルネック

材料の「形（結晶構造）」は自動分析できるが、それが「実際に役立つ性能（電池寿命や電気伝導性など）」を持っているかの評価は依然として時間がかかり、完全自動化が難しい領域である。シミュレーション上の予測値と、複雑な実機環境での性能の乖離をどう埋めるかが課題となっている。

(c) 導入コストと柔軟性の両立

高度な自律型ラボの構築には多額の設備投資が必要であり、中小規模の現場への普及にはコストが障壁となる。特定のプロセスに特化した「堅牢さ」と、新しい実験手法に即座に対応できる「柔軟性」をいかに両立させるかも、システム設計上の大きなテーマである。

3.3.9. OMol25 と UMA（Meta 社）

本モデルは、Meta 社から 2025 年 5 月 15 日に発表されたものである。Meta の FAIR(Fundamental AI Research)チームと複数の研究機関による共同研究チームが、非常に大規模かつ高精度な量子化学データセット「Open Molecules 2025(OMol25)」と、それを基に学習した AI モデル「Universal Model for Atoms(UMA)」を発表した。

OMol25 OMol25 は、分子化学における機械学習モデルの開発と評価に資することを目的として、密度汎関数理論(DFT)による 1 億件以上の単一分子構造に対する計算結果を収録したデータセットである。最大 350 原子の分子サンプルをはじめとする約 8300 万種類

のユニークな分子構造と 83 種類の元素情報を含む多様な分子系が収録されており、計算には「 ω B97M-V/def2-TZVPD」という高精度な手法が採用された。OMol25 の構築には約 60 億コア時間が費やされており、Meta の内部クラウド資源を活用した大規模分散計算によって実現されている。

UMA UMA は、分子、材料、触媒など化学の複数領域を横断的にカバーすることを目指しており、50 億個以上の原子を含む 3D 構造を訓練データとして用いて構築された。特に、モデルアーキテクチャには「Mixture of Linear Experts」と呼ばれる新しい構造が採用されており、計算効率を損なわずにモデル容量を拡大することを可能にしている。UMA の medium モデルは全体で 14 億パラメータを有しながらも、1 構造当たりの計算に用いられるパラメータ数は約 5000 万に抑えられている。これにより、UMA は大規模モデルでありながら推論速度が非常に高速となっている。

3.3.10. まとめ

材料の基盤モデルの学習には、数万 GPU 時間が必要であると論文[1]に述べられている。数万 GPU 時間とは、数百 GPU を利用して 100 時間であり、数日から 1 週間の計算時間が必要となる。気象・環境分野と異なり、材料分野での学習には、ユーザが個別に fine tuning を行う必要がある。すなわち、ユーザ毎に着目した材料に関する fine tuning を行わなければならない。

また、[2]においては、OMol25 の構築のための DFT 計算に約 60 億コア時間との記載がある。これは、Meta 社の社内リソースを利用したようだが、富岳フルノード 763 万コアであることを考えると富岳フルノードの 1 か月分程度の計算リソースとなる。

材料探索を行う研究者や実験の材料研究者や民間の検収書も合わせると、国内では 100 グループ程度で研究開発を進めていると想定される。したがって、国内では 1 万 GPU 程度の計算機資源が必要である。また、基盤モデルの学習のためにシミュレーションによるデータベース構築が必要であり、この分野のみで富岳程度のリソースが必要である。

材料分野では、「CNN 系(GNN)による局所的な安定性」から「Transformer 系による全元素対応の汎用モデル」への移行が完了しつつあり、現在はそれを使って「いかに未知の材料を AI に自動設計させるか」というフェーズに入っている。

3.4. 気象分野の基盤モデル

3.4.1. 情報源

当分野の報告は次の文献を情報源としている。

- [1] [Jean Kossaifi, et al., Demystifying Data-Driven Probabilistic Medium-Range Weather Forecasting \(2026\)](#)

- [2] [Boris Bonev, FourCastNet 3: A geometric approach to probabilistic machine-learning weather forecasting at scale \(2025\)](#)
- [3] [Ferran Alet, et al., Skillful joint probabilistic weather forecasting from marginals \(2025\)](#)
- [4] [Kochkov, et al., Neural General Circulation Models for Weather and Climate \(2024\)](#)
- [5] [Ferran Alet, et al., GenCast: Diffusion-based ensemble forecasting for medium-range weather \(2023\)](#)
- [6] [Remi Lam, et al., GraphCast: Learning skillful medium-range global weather forecasting \(2022\)](#)
- [7] [Cristian Bodnar, et al., A Foundation Model for the Earth System \(2024\)](#)
- [8] [Tung Nguyen, et al., ClimaX: A foundation model for weather and climate \(2023\)](#)
- [9] [Simon Lang, et al., AIFS-CRPS: Ensemble forecasting using a model trained with a loss function based on the Continuous Ranked Probability Score \(2024\)](#)
- [10] [Christian Lessig, et al., AtmoRep: A stochastic model of atmosphere dynamics using large scale representation learning \(2023\)](#)
- [11] [Johannes Schmude, et al., Prithvi WxC: Foundation Model for Weather and Climate \(2024\)](#)
- [12] [Kaifeng Bi, et al., Pangu-Weather: A 3D High-Resolution Model for Fast and Accurate Global Weather Forecast \(2022\)](#)
- [13] 気象庁, 2030 年に向けた数値予報技術開発重点計画(2018)
- [14] [Mark Govett, et al., Exascale Computing and Data Handling: Challenges and Opportunities for Weather and Climate Prediction \(2024\)](#)
- [15] ERA5 : <https://www.ecmwf.int/en/forecasts/dataset/ecmwf-reanalysis-v5>
- [16] HRES : <https://www.ecmwf.int/en/forecasts/datasets/set-i>
- [17] CMIP6 : <https://pcmdi.llnl.gov/CMIP6/>
- [18] MERRA-2 : <https://gmao.gsfc.nasa.gov/reanalysis/MERRA-2/>
- [19] JRA-3Q : https://jra.kishou.go.jp/JRA-3Q/index_ja.html
- [20] GHCN : <https://www.ncei.noaa.gov/products/land-based-station/global-historical-climatology-network>

3.4.2. 基盤モデルの現状

気象分野における基盤モデルは、従来の数値予報を大幅に上回る推論速度と精度を両立させている。Google DeepMind が開発した GraphCast は、GNN（グラフニューラルネットワーク）を採用し、10 日先の全球予報を 1 分未満で完了させ、スーパーコンピュータを凌ぐ精度を実現した。同社の GenCast は拡散モデルをベースとした生成 AI であり、台風

や熱波といった極端気象を確率的に高精度で予測する。NVIDIA の Earth-2 は、70 種以上の気象変数に対応し、高精度な 15 日間予報を可能にしている。また、FourCastNet3 は AFNO 技術を用い、確率的な予測を高速かつ高解像度で行う。Microsoft は、13 億パラメータ規模の Aurora を展開しており、多種多様な大気データを統合して従来の 5,000 倍の速さでの予測を可能にした。同社の Climax は ViT (Vision Transformer) を基盤とし、予報から地域の詳細化まで幅広く対応する。物理法則と AI を融合させた NeuralGCM は、シミュレーションを従来比 3,500 倍以上高速化させた革新的なモデルである。更に、NASA と IBM による Prithvi-WxC は、階層型 ViT により全球と地域の双方に対応し、現象の検出や解像度向上を可能にする。海洋特化型では、IBM の Granite-Geospatial-Ocean が炭素循環を解析し、清華大学等の GLONET が水温や海流の予測を行う。これらのモデルは、拡散モデルや Transformer といった最新技術を駆使し、地球規模の気象理解を劇的に加速させている。

表 3.15 気象分野の基盤モデル（その1）

モデル名	開発元	アーキテクチャ	学習データ	データ量	データサイズ	パラメータ数
Earth-2 Medium Range	NVIDIA	Diffusion Transformer	ERA5 + 高解像度シミュレーション	110,960pnts	16TB	25 億
FourCastNet3	NVIDIA	AFNO (Fourier/CNN)	ERA5 / 40 年分	6 時間刻み 鉛直 13 層	数十 TB と推測	3 億
WeatherNext2	Google DeepMind	FGN / 生成 AI ベース	ERA5, HRES-fc0	1 時間刻み	数十 TB と推測	1 億 8,000 万
NeuralGCM	Google DeepMind	Hybrid (物理 + GNN/CNN)	ERA5, HRES-fc0	6 時間刻み 鉛直 32 層	数十 TB と推測	3,670 万
GenCast	Google DeepMind	Diffusion / GNN	ERA5, HRES-fc0	6 時間刻み 鉛直 13 層	数十 TB と推測	5,700 万
GraphCast	Google DeepMind	GNN+Multimesh	ERA5, HRES-fc0	6 時間刻み 鉛直 37 層	数十 TB と推測	3,670 万
Aurora	Microsoft	3D Swin Transformer	ERA5, CMIP6, IFS, GFS	6 時間刻み 鉛直 13 層	数十 TB と推測	13 億
ClimaX	Microsoft	Swin Transformer	CMIP6	6 時間刻み 鉛直 13 層	約 1 TB	1 億 700 万
AIFS ENS	ECMWF	GNN	ERA5+IFS	6 時間刻み 鉛直 13 層	約 20 ~ 40 TB	1 億
AtmoRep	ECMWF + JSC + CERN	Transformer (Multiformer)	ERA5	1 時間刻み 鉛直 137 層	約 273 TB	24 億
Prithvi-WxC	IBM + NASA	ViT(MAE)	MERRA-2 (NASA 再解析)	1 時間刻み 鉛直 16-25 層	数百 TB	23 億
Pangu-Weather	Huawei	Swin Transformer	ERA5	1 時間刻み 鉛直 13 層	約 20 ~ 100 TB	2 億 5,600 万
Granite-Geospatial-Ocean	IBM	ViT(MAE)	海面温度・塩分濃度データ	2.56 億 (256M)	2.5 TB	5,000 万

GLONET	Mercator Ocean	CNN	全球気象データ / GLORYS12	海流、塩分、海水温、海面高度	2～数十 TB	3,000 万
WV-Net	Hawaii Univ	ViT(MAE)	GOAL 1, WV Image, ERA5	画像 1,000 万枚	4～10TB	3,100 万

表 3.16 気象分野の基盤モデル（その2）

モデル名	ライセンス	主な用途・特徴	アーキテクチャの特徴
Earth-2 Medium Range	非公開	0.25° の空間解像度で全球の地表・上空予測を行い、最長 15 日先までのアンサンブル予報を数秒で完了させ、意思決定を迅速に支援する。	25 億パラメータの Diffusion Transformer を採用。16TB のデータを学習し、既存のスーパーコンピュータを上回る精度と圧倒的な推論効率を両立している
FourCastNet3	Apache 2.0	熱帯低気圧の進路、豪雨、暴風、極端な気温変化といった異常気象の発生を、最長 60 日先まで高速かつ高解像度で確率的に予測する。	7 億パラメータの CNN アーキテクチャを採用。H100 GPU 256 基により短期間で学習。確率的な予測を高速に行う AFNO 技術を駆使している。
WeatherNext2	MIT	最長 15 日の全球アンサンブル予報に対応。地域の詳細化から広域予測まで幅広く対応し、TPU インフラを駆使して地球規模の気象理解を加速させる。	1.8 億パラメータの Functional Generative Network を採用。TPU v5p 等 490 基で学習。1 分弱という高い推論効率と精度を誇る。
NeuralGCM	Apache 2.0	物理的な数値予報と CNN を融合させ、気象・気候シミュレーションを従来比 3500 倍以上高速化し、物理法則に基づいた精緻な全球予測を実行する。	3670 万パラメータのハイブリッドモデル。物理的な整合性と AI の学習能力を両立させ、スーパーコンピュータのリソースを節約する革新的なモデル。
GenCast	Apache 2.0	拡散モデルを用いた生成 AI により、台風や熱波などの極端気象や地域風力発電の出力を確率的に高精度で予測し、アンサンブル予報の新境地を開く。	約 5700 万パラメータを搭載。GNN と拡散モデルを統合したアーキテクチャにより、複雑な気象現象を確率的な分布として捉える能力に優れている。
GraphCast	Apache 2.0	10 日先の全球予測を 1 分未満で完了。異常気象の早期警戒、航空運航ルート最適化、電力需給管理など、実運用における決定論的予測を高度化する。	GNN を採用し 3670 万パラメータで構成。スーパーコンピュータを凌ぐ精度を低コストで実現し、早期警戒システムなど実用化実績が豊富な先駆的モデル
Aurora	MIT	多種多様な大気データを統合し、10 日先までの全球予測を決定論的に実行。爆弾低気圧の進路予測や世	13 億パラメータの 3D Swin Transformer を採用。ERA5 や CMIP6 を含む複数の気象・気候データセッ

		界規模の大気汚染予報などで高い成果を上げている。	トを横断的に学習した汎用性の高いモデル。
ClimaX	MIT	短期・中期予測から2ヶ月の中長期予測、更には地球全体の長期気候変動予測までをカバーし、広域予測から地域の詳細化まで幅広く対応する。	Vision Transformer (ViT) を基盤とした約1.07億パラメータのモデル。多様な大気データに適応し、気候監視における科学的根拠を提示する。
AIFS ENS	ECMWF Open	15日先までのアンサンブル予報を行い、気温、風速、降水確率などの気象変数を算出。ECMWFの運用において高効率な予測インフラとして機能する。	1億パラメータのGNNを採用。わずか4基のGPUで3日間という低リソースでの学習を実現。実用的なアンサンブル予測を低コストで提供する。
AtmoRep	CC-BY-4.0	短期気象予報のほか、降水量補正や時間解像度を超える高精度化を実現し、大気動態を大規模表現学習を通じて精密にモデリングする。	約24億パラメータのTransformer (Multiformer) 構造を採用。CERN等と開発され、大気の状態を多角的に表現する確率的確率モデル。
Prithvi-WxC	Apache 2.0	台風進路予測、熱波発生確率推計、CO2上昇に伴う長期気温変化のシミュレーション等、全球と地域の気象現象を高速・高解像度で予測する。	23億パラメータのVision Transformerを採用。NASAとIBMが共同開発。MERRA-2等のデータを用いて気候変動解析に特化している。
Pangu-Weather	非営利研究限定	台風の進路予測や航空・海運ルートの自動選定、都市部の浸水リスク早期警戒など、決定論的な全球予報を通じて実用的な意思決定を強力に支援する。	約2.56億パラメータのSwin Transformerを採用。最長60日先までの予測が可能。従来比で圧倒的な推論速度と高い精度を世界に示した。
Granite-Geospatial-Ocean	Apache 2.0	海面水位上昇、生態系解析、海流データに基づく低燃費航路、海氷変動の監視、船舶の安全航行支援を行い、地球規模の海洋環境理解に寄与する。	5000万パラメータのViTを採用。Sentinel-3データを学習。少量のサンプルでも高い精度を維持し、学習効率が極めて高い海洋特化型モデル。
GLONET	研究用	海流、塩分、海水温、海面高度の予測を高速に行い、海水温の長期変動や海流動向の把握、オンデマンドの海洋予測シミュレーションに利用される。	約3000万パラメータのCNN。Mercator Oceanが開発。10日先の予測を10秒内で行う高い推論速度を備え、実運用レベルの解析を実現する。
WV-Net	研究用	衛星画像から直接波高や海面温度を推定。風筋、冷水塊、雨といった物理現象を識別・監視し、海表面付近の動向を決定論的にモニタリングする。	3100万パラメータのViT。1000万枚のSAR衛星画像を用いた自己教師あり学習が特徴。画像から直接、物理量を推定する能力に優れる。

表 3.17 気象分野の基盤モデルの計算機コスト

開発組織	モデル	予測対象	学習コスト	推論コスト(例)
NVIDIA(米)	Earth-2 Medium Range (2026Jan)	全球予測 (アンサンブル予報)	NVIDIA A100 & H100 計 32 基	NVIDIA A100 GPU 1 基 x3.3 秒 (リトグラフタイム：6 時間)
	FourCastNet 3 (2025Jul)	全球予測 (アンサンブル予報)	NVIDIA H100 GPU 256 基 x8 時間	NVIDIA H100 GPU 1 基 x60s (リトグラフタイム：15 日)
Google Deepmind (欧・米)	WeatherNext 2 (2025Nov)	全球予測 (アンサンブル予報)	Google TPU v5p+v6e 490 基 x3 日	Google TPU v5p 1 基 x1 分弱 (リトグラフタイム：15 日)
	NeuralGCM (2024Jul)	全球予測 (決定論的)	Google TPU v5 256 基 x3 週	Google TPU v5 1 基 x1 分内
	GenCast (2023Dec)	全球予測 (アンサンブル予報)	Google TPU v5 32 基 x3.5 日	Google TPU v5 1 基 x8 分 (リトグラフタイム：15 日)
	GraphCast (2022Dec)	全球予測 (決定論的)	Google TPU v4 32 基 x4 週	Google TPU v4 1 基 x1 分内
Microsoft Research(米)	Aurora (2024May)	全球予測 (決定論的)	NVIDIA A100 GPU 32 基 x2.5 週	NVIDIA A100 GPU 1 基 x 数秒 (リトグラフタイム：10 日)
	ClimaX (2023Jan)	全球予測 (アンサンブル予報)	NVIDIA V100s GPU 80 基 x7 日	(※未公表)
ECMWF(欧)	AIFS ENS (2024Dec)	全球予測 (アンサンブル予報)	NVIDIA A100 GPU 4 基 x3 日	NVIDIA A100 GPU 1 基 x2 分半 (リトグラフタイム：10 日)
ECMWF+CERN +JSC(欧)	AtmoRep (2023Sep)	全球予測 (アンサンブル予報)	NVIDIA A100 4 台@node x32nodes x (4.5 時間 x epoch)	(※未公表)
IBM+NASA(米)	Prithvi-WxC (2024Sep)	全球予測 (決定論的)	NVIDIA A100 GPU 64 基 x15 日	NVIDIA T4 GPU 1 基 x 数分 (リトグラフタイム：6 時間)
Huawei (中)	Pangu- Weather (2022Nov)	全球予測 (決定論的)	NVIDIA V100S GPU 192 基 x16 日	NVIDIA V100S GPU 1 基 x 約 1.4 秒 (1 回分)

3.4.3. AI 基盤モデルを支えるデータ基盤

気象分野のデータ基盤は、再解析、予報、地上観測等の多岐にわたる。中核となる「ERA5」は 1940 年以降の全球気象再解析データであり、10 PB という膨大な規模を誇る世界標準のリソースである。将来予測を担う「CMIP6」は IPCC 報告書の根拠となる共通の気候予測シナリオを集約しており、データサイズは 80 PB に達する。地域特性の把握には、1947 年以降の台風や梅雨等を正確に再現する日本気象庁の「JRA-3Q」が貢献している。

また、NASA の「MERRA-2」は大気組成の変化を精密に捉える再解析データとして重要であり、地上観測の「GHCN」は 10 万地点以上の歴史的な気温記録を分析するための基盤となっている。これらは、日次の高解像度予報（HRES）から長期の気候監視に至るまで、不可欠な科学的根拠を提供している。

表 3.18 気象分野のデータ基盤（その 1）

分類	名称	機関	内容
気 候 再 解 析	ERA5	ECMWF	1940 年から現在までの全球気象再解析データ。過去の状況を最新モデルで再現した標準セットとして、気候学研究で多用。
気 象 予 報	HRES	ECMWF	ECMWF による最高解像度 9km の全球気象予報モデル。10 日先までの詳細な予測を日々提供し、極端気象への早期警戒を支援。
気 候 予 測	CMIP6	WCRP PCMDI	IPCC 報告書の根拠となる世界共通の気候予測。多様な将来シナリオに基づく地球システムモデルの結果を集約し対策策定を支える。
気 候 再 解 析	MERRA-2	NASA (GMAO)	NASA による衛星データ同化に強みを持つ全球再解析。特にエアロゾルやオゾン等の大気組成の変化を精密に捉え、理解を深める。
長 期 再 解 析	JRA-3Q	気象庁 (JMA)	日本気象庁作成の 1947 年以降の最新全球再解析。台風やアジアのモンスーン、梅雨等の地域特性を正確に再現し気候監視に貢献。
地 上 観 測	GHCN	NOAA (NCED)	全国の観測所から収集された地上気温等の歴史的記録。100 年以上の変化を分析する基盤データであり、温暖化の証拠を示す。

表 3.19 気象分野のデータ基盤（その 2）

分類	名称	件数（目安）	データ サイズ	年間 増加量（目安）
気候再解析	ERA5	数兆レコード	10 PB	約 500 TB ～ 1 PB
気象予報	HRES	（日次運用）	50 TB	（運用データのため膨大）
気候予測	CMIP6	数百万 データセット	40 ～ 80 PB	（フェーズ毎に数 PB 増加）
気候再解析	MERRA-2	数百万 ファイル	800 TB	約 15 ～ 20 TB
長期再解析	JRA-3Q	75 年分の一貫データ	473.33 TB	約 20 TB
地上観測	GHCN	10 万以上の地点	100 GB	約 1 GB
気候再解析	ERA5	数兆レコード	10 PB	約 500 TB ～ 1 PB

表 3.20 代表的気象データ (Pretrain データ)

データ名	ストレージ容量	期間	時間粒度	空間分解能
ERA5	1 to 5 PB (2020)	1979-	1h	0.25deg(31km) 四方
HRES	731 PB	1979-	1h	0.1deg(9km) 四方, 鉛直 137 層
CMIP6	約 1.1PB (2015)	1850-	6h	0.8deg(100km) 四方
MERRA-2	800TB ~ 1PB	1980-	1h	0.5deg x 0.625deg 四方
HLS	約 5 PB	2013-	2-3d	30m

表 3.21 代表的気象データのサイト

データ名	サイト	アドレス
ERA5	ECMWF 公式	https://confluence.ecmwf.int/display/CKB/ERA5
HRES	ECMWF 公式	https://www.ecmwf.int/en/forecasts/datasets/set-i
CMIP6	ドイツ気候コンピューティングセンター公式	https://cmip-data-pool.dkrz.de/
MERRA-2	NASA 公式	https://disc.gsfc.nasa.gov/datasets/M2T1NXSLV_5.12.4/summary
HLS	NASA 公式	https://www.earthdata.nasa.gov/data/projects/hls/data-access-tools#toc-harmonized-landsat%20and%20sentinel-2-hls-datasets

3.4.4. NVIDIA の基盤モデル

(1) Earth-2 Medium Range (2026Jan)

本節は、[1]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

NVIDIA が提供する「Earth-2 Medium Range (Atlas)」は、25 億個のパラメータを持つ Diffusion Transformer (DiT) アーキテクチャを採用した最新鋭のモデルである。本モデルは、ERA5 データセットから抽出された 16TB のデータを学習ソースとし、NVIDIA A100 および H100 GPU 計 32 基を投入して事前学習が行われた。性能面では、0.25°の空間解像度で地表および上空の全球予測を 6 時間刻みで行い、最長 15 日先までのアンサンブル予測（8~32 メンバー）を可能にしている。推論コストは A100 GPU 1 基で 1 リードタイム（6 時間分）当たり 3.3 秒と極めて高速であり、既に AI スタートアップ「Brightband」※による地球規模予報や、「DTN」の意思決定支援ソリューションへ統合されている。

※ <https://www.brightband.com/company/news/earth2-medium-range-model>

(b) 潜在空間モデリングと ATLAS の基本構造

気象データの高次元性は深層学習における計算コストの増大を招くが、ATLAS

(Atmospheric Transformer in Latent Space) はこの課題を洗練された潜在空間アプローチで解決している。一般的なコンピュータビジョンで用いられる変分オートエンコーダ (VAE) は、気象変数の不均質性によりスペクトルバイアスや時間的整合性の欠如を引き起こす傾向がある。これに対し、ATLASはバイリニア補間による直接的なダウンサンプリングを採用し、解像度を 16 分の 1 に圧縮した潜在空間上で確率的な推論を行う手法をとる。

この潜在空間で全地球的な動態をモデル化するのは、画像生成分野で実績のある Diffusion Transformer (DiT) をベースとしたバックボーンである。予測された潜在変数の残差は、過去の履歴条件を付与されたローカルプロジェクター (デコーダ) を介して元の高解像度空間へと復元される。この「グローバルな動態」と「局所的な高解像度物理」の切り分けにより、複雑なドメイン固有の制約を課すことなく、標準的なコンポーネントのみで高い予測スキルを実現している。

(c) 多様な確率論的手法への適応と堅牢性

ATLAS の際立った特徴の一つは、特定の確率推定フレームワークに依存しない手法依存性の低さにある。本モデルは、確率的補間 (Stochastic Interpolants)、拡散モデル (Diffusion Models)、および CRPS (連続ランク確率スコア) に基づくアンサンブル学習の 3 つの異なるアプローチにおいて、シームレスに動作することが確認されている。

学習プロセスにおいては、1980 年から 2019 年までの ERA5 データを活用し、75 の気象変数を対象としている。特に予測の安定性を高めるため、単一の状態ではなく時間的な残差を予測対象とし、更に一つ前の状態を条件として加えることで、15 日間 (60 ステップ) に及ぶ長期の自己回帰的なロールアウトにおいても誤差の蓄積を抑制している。また、パッチサイズを 2×3 に設定することで、擬似等方的な特性を持たせ、数値気象予測における物理的な妥当性と安定性のバランスを最適化している。

(d) 予測スキルの検証と実用的な優位性

ATLAS の予測性能は、欧州中期予報センター (ECMWF) の統合予報システム (IFS) および既存のデータ駆動型モデルである GenCast と比較して、統計的に有意な改善を示している。具体的には、地表風 ($u10m$, $v10m$) などの変数において、IFS-ENS に対して初期段階で約 50% の CRPS 改善を達成し、多くの変数で 2 週間にわたってその優位性を維持する。

実際の気象事象に対する適応力も高く、2020 年に発生した爆弾低気圧「ストーム・デニス」の事例分析では、ERA5 の解析データと極めて近いエネルギー・スペクトルを維持しつつ、急速な発達を正確に捉えることに成功した。また、熱帯低気圧の追跡性能においても、ハリケーン・エータがニカラグア上陸後に東へ転向する進路を、GenCast よりも高い確率で予測するなど、極端現象の予報における実用性の高さが証明されている。これらの

成果は、気象予測の精度向上がアーキテクチャの複雑化ではなく、汎用的な基盤モデルのスケールアップによって達成可能であることを示唆している。

(2) FourCastNet3 (2025Jul)

本節は、[2]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

2025年7月に発表された「FourCastNet 3 (FCN3)」は、約7億1千万のパラメータを持つ純粋な畳み込みニューラルネットワーク (CNN) アーキテクチャを採用している。本モデルは、NVIDIA Eos スーパーコンピュータの H100 GPU 256 基を用いて、わずか8時間で最終段階のファインチューニングを完了させた。最長60日先までの全球予測能力を持ち、熱帯低気圧の進路予測、大気の流れの分布推移、豪雨や暴風、極端な気温変化といった異常気象現象の発生予測に広く活用されている。幾何学的な機械学習アプローチを導入することで、球体である地球の形状や物理的な対称性を尊重した、極めて精度の高い確率的なアンサンブル予測を実現している。

(b) 幾何学的アプローチとアーキテクチャの革新

FCN3 の技術的基盤は、球面幾何学を直接的に扱う「球面ニューラルオペレーター (SNO)」にある。従来のモデルで多用されていたトランスフォーマー型とは異なり、球面調和関数を利用したグローバルな畳み込みと、離散・連続 (DISCO) 畳み込みによるローカルな処理を組み合わせることで、惑星規模の波動から局所的な地形の影響までを、格子の解像度に依存しない形でモデル化している。更に、予測の鮮明さを維持するために、空間ドメインだけでなくスペクトルドメインでも連続ランク確率スコア (CRPS) を最小化する独自の損失関数を導入した。これにより、従来の機械学習モデルに見られた予測の「ボケ」を排除し、物理的に整合性のあるエネルギー分布を再現することに成功している。

(c) 高い計算能率とスケーラビリティ

本モデルは、従来の数値気象予報 (NWP) や最新の拡散モデルベースの AI と比較して、高い計算速度を誇る。単一の GPU を用いるだけで、0.25 度解像度での 60 日間にわたる全球予報をわずか4分未満で実行可能であり、これは既存手法の約8倍から60倍の高速化に相当する。このパフォーマンスは、大規模分散学習フレームワーク「Makani」によって支えられている。Makani は、ドメイン分解によるモデル並列と、アンサンブル・バッチ単位のデータ並列を同時に行う新しいパラダイムを提供し、1000 基以上の GPU を用いた効率的なスケーリングを可能にした。

(d) 長期安定性と将来の展望

FCN3 は、サブシーズナル (季節内) 領域に踏み込む 60 日間の長期予測においても、極

めて高い安定性を示している。従来の自己回帰型モデルで課題となっていた誤差の蓄積や物理的破綻を克服し、長期にわたって鋭いスペクトル特性を維持できる点は、早期警告システムの信頼性向上において極めて重要な進歩である。今後は、降水量予測の統合やデータ同化の不確実性の取り込みなどが計画されており、次世代の気象予報および大気科学研究における強力な基盤ツールとなることが期待されている。

3.4.5. Google の基盤モデル

(1) WeatherNext2 (2025Nov)

本節は、[3]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

Google Deepmind は、自社の TPU インフラを最大限に活用し、多様なアプローチで全球予測モデルを展開している。最新の「WeatherNext2 (2025Nov)」は、約 1 億 8,000 万パラメータの Functional Generative Network (FGN) を採用し、ERA5 および HRES-fc0 データを用いて TPU v5p と v6e 計 490 基で約 3 日の学習を経て構築された。本モデルは最長 15 日のアンサンブル予報 (64 メンバー) に対応し、TPU v5p 1 基で 1 分弱という高い推論効率を誇る。こうした最新鋭の AI 気象モデルが物理ベースの予測モデルとどのように競合し、どのような基準で評価されるべきかを定義しているのが、「Weather Bench 2 (WB2)」というベンチマークフレームワークである。WB2 は、データ駆動型気象予測の進歩を加速させるために設計された、オープンソースの評価環境と公開データセットの統合体である。

(b) Weather Bench 2 の設計思想と目的

WB2 は、2020 年に発表された初代 WeatherBench (WB1) を大幅に拡張・更新したものであり、現在の高解像度かつ高度な AI モデルの評価に耐えうる設計となっている。その根幹にあるのは、物理ベースの数値気象予測 (NWP) で培われた確立された評価手法を、AI コミュニティが容易に利用できるようにすることである。WB2 は単なるモデルの比較ツールではなく、入力データの選択から学習設定、モデルアーキテクチャに至る「予測システム全体」を評価するベンチマークとして機能する。これにより、ERA5 再解析データを初期値として利用する現状の AI モデルと、実運用される物理モデルとの公平な比較 (apples-to-apples comparison) を促進し、実社会における AI 予報の有用性を検証可能にしている。

(c) 評価指標とデータセットの構成

評価の基準となる「ヘッドラインスコア」には、世界気象機関 (WMO) や欧州中期予報センター (ECMWF) の基準に準拠した変数が採用されている。具体的には、大気上層

の 500hPa 高度 (Z500) や 850hPa 温度 (T850)、地上付近の 2m 温度 (T2M) や 10m 風速 (WS10)、そして 24 時間降水量 (TP24hr) などが含まれる。評価は主に 2020 年の 1 年間を対象に行われ、決定論的な指標として平均二乗根誤差 (RMSE) や異常相関係数 (ACC) が、確率論的な指標として連続ランク確率スコア (CRPS) やスプレッド・スキル比が用いられる。検証データには ERA5 再解析データが用いられるが、物理モデルの評価においては初期値の不整合を避けるため、運用解析 (Operational Analysis) との比較も考慮されている。

(d) 現在の AI モデルの課題と今後の展望

Pangu-Weather や GraphCast、NeuralGCM といった最新の AI モデルは、決定論的なスコアにおいて従来の物理モデル (IFS HRES) に匹敵するか、あるいはそれを上回る精度を示している。しかし、これらのモデルには、リードタイムが長くなるにつれて予測結果が過度に平滑化 (スモージング) され、現実的な気象状態を再現できなくなる「ぼやけ (blurriness)」という特有の問題が存在する。これは主に、平均二乗誤差 (MSE) を最小化するように学習される性質に起因している。この課題を克服するため、WB2 ではアンサンブル予測や生成的アプローチによる確率的予報の重要性を強調しており、極端現象の予測精度向上や、観測データに基づく直接的な検証の拡充を将来の指針として掲げている。

(2) NeuralGCM (2024Jul)

本節は、[4]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

物理的な数値予報 (NWP) と CNN を組み合わせたハイブリッドモデル「NeuralGCM (2024Jul)」は、約 3,670 万パラメータで構成され、TPU v5 256 基を用いて 3 週間学習された。本モデルは、大気力学を解くための微分可能な力学コアと、雲形成などの小規模な物理プロセスを表現するニューラルネットワークを統合した、初の完全微分可能なハイブリッド大気循環モデルである。従来の機械学習モデルが長期的な安定性や物理的な整合性に課題を抱えていたのに対し、NeuralGCM は決定論的な気象予報だけでなく、アンサンブル予報や数十年にわたる気候シミュレーションにおいても、物理ベースのモデルや最新の機械学習モデルに匹敵、あるいは凌駕する性能を示す。

(b) ハイブリッド構造による物理法則と学習の融合

NeuralGCM の中核は、JAX※で実装された微分可能な力学コアであり、静力学的な基本方程式を数値的に解く役割を担う。一方で、放射伝達や降水といった格子スケール以下の現象は、単一の垂直カラム内の情報を用いるニューラルネットワークによってパラメータ化されている。この微分可能性により、力学コアと機械学習コンポーネントが相互作用する中で最適化を行う「オンライン学習」が可能となり、従来の機械学習モデルに見られ

た気候ドリフトや数値的不安定性の問題を大幅に軽減することに成功した。また、エンコーダとデコーダにも学習可能な補正を導入することで、初期化時の衝撃による重力波の発生といった誤差も抑制されている。

※ Google DeepMind が開発した、高速な数値計算と大規模な機械学習のための Python オープンソースライブラリ

(c) 予報精度と物理的一貫性の両立

気象予報において本モデルは、1 日から 10 日間の決定論的予報で既存のトップクラスの機械学習モデルと競合し、1 日から 15 日間のアンサンブル予報では欧州中期予報センター (ECMWF) のシステムを凌駕する精度を達成している。特筆すべきは、純粋な機械学習モデルが苦手とする物理的な一貫性の維持である。NeuralGCM は地衡風バランスや水収支を正確に描写し、解像度が比較的粗い設定であっても、熱帯低気圧の頻度や経路といった創発的な気象現象を現実的に再現することが可能である。気候変動の追跡においても、海面水温を条件として与えることで、数十年間にわたる地球平均気温の変化を ERA5 再解析データに即して忠実に追跡できる。

(d) 高い計算効率と将来の拡張性

計算コストの面では、従来の気候モデルと比較して数桁単位の節約を実現している。例えば、NeuralGCM は単一の TPU 上で 24 時間以内に 7 万日以上のシミュレーションを実行可能であり、これは膨大な CPU コアを必要とする物理ベースのモデルに比べて劇的な効率化である。この特性は、従来は計算負荷が高すぎて困難であった大規模なアンサンブル予測を実用的なものにする。今後は海洋や陸面モデルとの結合、更には化学組成の統合といった拡張が期待されており、気象学のみならず、材料科学やタンパク質構造予測といった、物理法則と経験的關係が混在する科学分野全般にわたるシミュレーション技術へも適用可能である。

(3) GenCast (2023Dec)

本節は、[5]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

拡散モデルを統合した「GenCast (2023Dec)」は約 5,700 万パラメータを持ち、地域風力発電の予測等に利用されている。Google DeepMind によって開発された GenCast は、条件付き拡散モデルを基盤とした革新的な確率論的気象予測モデルである。本モデルは、物理方程式を近似的に解く従来の数値気象予測 (NWP) とは異なり、数十年にわたる再解析データを学習した機械学習気象予測 (MLWP) 手法を採用している。全球を 0.25 度の緯度・経度解像度でカバーし、80 以上の地表および大気変数を 12 時間刻みで 15 日間予測することが可能であり、アンサンブル予測をわずか 8 分で生成するという驚異的な速さを誇

る。

(b) 技術的アーキテクチャと予測手法

GenCast の中核を成すのは、反復的な洗練プロセスを通じてノイズから候補状態を生成する条件付き拡散モデルである。このプロセスでは、エンコーダ、プロセッサ、デコーダで構成されるニューラルネットワークが適用される。プロセッサにはグラフ・トランスフォーマーが採用されており、6 回精緻化された二十面体メッシュ上の近傍ノード間で自己注意機構を働かせることで、高度な空間表現を学習している。予測は自己回帰的に行われ、現在の状態と直前の状態を条件として次の時間ステップをサンプリングする仕組みである。また、ERA5 の再解析データとアンサンブルデータ同化 (EDA) 由来の摂動を初期条件に用いることで、初期値の不確実性を適切に反映している。

(c) 予測スキルと鮮明度の向上

欧州中期気象予報センター (ECMWF) のトップレベルの運用アンサンブル予測「ENS」との比較において、GenCast は評価対象とした 1,320 のターゲットの 97.4%で ENS を上回るスキル (CRPS : 連続ランク確率スコア) を示した。従来の機械学習モデルの多くは平均二乗誤差 (MSE) を最小化するように訓練されていたため、特に長期予測において結果が「ぼやける」という課題があったが、GenCast は拡散モデルの特性を活かすことで、15 日後であっても真値に近い鮮明な気象状態を再現することに成功している。また、風速のような非線形に派生する変数においても、MSE 訓練モデルで見られるような負のバイアスが極めて小さく、物理的な妥当性が高い。

(d) 実社会への応用と将来展望

本モデルは、重要かつ困難な意思決定を支援する高い価値を提供する。熱波や極端な低温、熱帯低気圧 (台風) の経路予測において、ENS よりも高い経済的価値を示しており、防災計画の策定に寄与する。特に再生可能エネルギー分野では、地域的な風力発電の予測において ENS より約 20%高い精度を示し、電力網の供給・需要バランスの最適化や化石燃料への依存低減に貢献する可能性を示唆している。GenCast は、最先端の生成 AI 手法が複雑な時系列ダイナミクスを捉え、気象予測の新たな章を開く強力なツールとなり得ることを実証した。

(4) GraphCast (2022Dec)

本節は、[6]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

GNN ベースの「GraphCast (2022Dec)」は約 3,670 万パラメータで、異常気象の早期警戒や航空運航ルート of の最適化、電力需給管理用途で実用化されている。本モデルは、従来

の数値予報（NWP）システムを上回る精度と効率を両立させた機械学習ベースの全球気象予測モデルである。具体的には、0.25 度の高解像度で数百の気象変数を、10 日先まで 1 分以内に予測することが可能となっている。

(b) 予測精度と効率性の飛躍

GraphCast は、欧州中期予報センター（ECMWF）が運用する世界最高峰の決定論的予報システム「HRES」と比較して、1,380 の検証ターゲットのうち 90%において有意に高い予測精度を示している。特に、層厚や気圧分布の指標となる高度 500hPa のジオポテンシャルにおいて、全てのリードタイムで 7%から 14%の精度向上が確認された。

効率性の面では、従来の HRES がスーパーコンピュータを用いた数時間の計算を要するのに対し、GraphCast は単一の Google Cloud TPU v4 デバイス上で 1 分足らずで 10 日間の予報を生成できる。この高い計算スピードは、気象予測における速度と精度のトレードオフを劇的に改善するものである。

(c) 革新的な GNN アーキテクチャとマルチメッシュ

モデルの根幹には、「エンコード・プロセス・デコード」構成のグラフニューラルネットワーク（GNN）が採用されている。入力データは緯度・経度グリッドから、正二十面体を段階的に細分化した「マルチメッシュ」表現へとマッピングされる。

このマルチメッシュ構造は、全球でほぼ均一な解像度を保ちつつ、長距離のノード間を接続するエッジを保持している。これにより、従来の畳み込みニューラルネットワーク（CNN）では困難だった広域的な気象パターンの相互作用を、少ないステップ数で効率的にモデル化できる。また、トランスフォーマーのような二次のメモリ計算量を回避しつつ、大規模な全球データの処理を可能にしている。

(d) 異常気象への対応と学習データ

GraphCast は、熱帯低気圧の進路、大気の川（水蒸気の輸送路）、極端な気温変化といった激甚災害の予測においても優れた能力を発揮する。熱帯低気圧の追跡アルゴリズムを適用した検証では、HRES よりも低い予測誤差を記録した。

学習には、ECMWF の再解析データ「ERA5」の過去 39 年分（1979 年～2017 年）が使用されている。機械学習モデルの利点として、最新のデータを追加して再学習することで、気候変動による新たな気象パターンを迅速に取り込める点が挙げられる。

(e) 課題と今後の展望

現時点での課題は、予測の不確実性の扱いである。GraphCast は決定論的な手法をとっており、不確実性を空間的な「ぼかし（ブラー）」として表現する傾向がある。そのため、個別の予報値を出すだけでなく、アンサンブル予報のように確率分布を明示的にモデル化

することが次なる重要なステップとされている。

GraphCast は従来の NWP に取って代わるものではなく、数十年の歴史を持つ物理学的手法と補完し合うことで、より強靱な意思決定支援を可能にするものである。今後はエネルギー、農業、航空、エコロジーといった気象に依存する多種多様な分野での応用が期待されている。

3.4.6. Microsoft の基盤モデル

(1) Aurora (2024May)

本節は、[7]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

Microsoft Research 「Aurora」は、13 億パラメータの 3D Swin Transformer (3D Perceiver ベース) を採用し、ERA5、CMIP6、IFS、GFS を学習ソースとして A100 GPU 32 基で約 2.5 週間学習されたモデルである。12 時間刻みで最長 10 日先までの全球予測を決定論的に行い、世界規模の天気・大気汚染予報や、2023 年 11 月の爆弾低気圧「キアラン」の進路予測などで高い実績を示している。先行して 2023 年 1 月に発表された Pangu-Weather などの既存モデルに対し、より広範な地球システムのドメインをカバーする基盤モデルとして位置付けられている。

(b) 柔軟な設計と基盤モデルとしての特性

Aurora は、単なる気象予測モデルではなく、地球システム全体の動態を学習する汎用的な基盤モデルとして設計されている。その最大の特徴は、解像度や変数、気圧レベルが異なる不均一なデータセットを柔軟に取り込める点にある。3D Perceiver エンコーダが、多様な入力を共通の潜在的な 3 次元表現へと圧縮し、3D Swin Transformer U-Net をバックボーンとするプロセッサがその時間発展をシミュレートする仕組みとなっている。この柔軟な構造により、膨大な大気データを用いた事前学習から得られた知見を、比較的少ない計算コストで特定のタスクへ適応させる「ファインチューニング」が可能となった。

(c) 各種予測ドメインにおける卓越した予測性能

Aurora は、既存の高度な数値予報システムを複数の領域で凌駕する結果を示している。大気質予測では、従来の数値シミュレーション (CAM5) に対し、全ターゲットの 74% で同等以上の精度を達成し、3 日先の予測においては 89% の変数で上回っている。海洋波予測においても、高度な数値モデルである HRES-WAM に対し、86% の変数で優れた精度を記録した。更に、熱帯低気圧の進路予測では、世界各地の主要な 7 つの運用センターによる公式予報を、5 日先までのすべてのリードタイムにおいて 100% 上回るという驚異的な成果を収めており、台風ドクスリの事例などでもその有効性が証明されている。0.1°という

高解像度の気象予測においても、最新の数値気象予測（NWP）モデルを 92%のターゲットで上回る性能を発揮している。

(d) 効率性とスケーリングによる将来性

特筆すべきは、これらの高精度な予測を、従来の数値モデルと比較して数桁小さい計算コストで実現している点である。例えば、大気組成予測においては CAMS に対して約 5,000 倍もの高速化を達成しており、単一の GPU で 1 時間リードタイム当たり約 1.1 秒という速さで予測生成が可能である。また、低ランク適応（Low-Rank Adaptation）を用いた効率的な学習プロトコルの導入により、大規模モデルでありながら効率的なメモリ運用と高精度な長期予測の両立に成功している。モデルの規模を 10 倍にすると検証性能が約 6%向上するというスケーリング則も確認されており、今後の更なるデータの多様化とモデルの巨大化によって、農業や防災、再生エネルギー分野などへの更なる応用が期待されている。

(2) ClimaX (2023Jan)

本節は、[8]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

ClimaX は、気象および気候科学の多様な課題を解決するために設計された、柔軟かつ汎用的なディープラーニング基盤モデルである。本モデルは、約 1 億 700 万パラメータを持つ Swin Transformer ベースのアーキテクチャを採用しており、80 基の NVIDIA V100 GPU を用いて 7 日間にわたり事前学習が行われた。短期・中期予測といった気象予報から、2 週間から 2 ヶ月に及ぶ亜季節・季節予測、更には地球全体の将来的な気候変動予測までをカバーする広範な能力を備えている。従来の数値予報モデルや特定のタスクに特化した既存のデータ駆動型手法とは異なり、異なる変数や解像度を持つ不均一なデータセットを統合して学習・応用できる点が最大の特徴である。

(b) 異種データを統合する革新的な設計

ClimaX の優れた柔軟性は、気候データの不均一性を克服するために導入された「変数別トークン化（Variable Tokenization）」と「変数集約（Variable Aggregation）」という二つの独自のブロックによって支えられている。

気候データは気圧、温度、湿度といった多種多様な物理量を含み、データセットによって含まれる変数の組み合わせが異なる。ClimaX は各変数を個別のモダリティとして扱い、変数ごとに独立してトークン化を行うことで、任意の入力変数のセットに対応できる。

また、変数トークン化によって増大した系列長を効率的に処理するため、空間的な位置ごとに情報を統合する変数集約ブロックが導入された。これにより、計算コストを抑えつつ、モデルの深層部である Transformer ブロックへ統一されたセマンティクスを持つトークン

を渡すことが可能となっている。

(c) シミュレーションを活用した大規模事前学習

本モデルは、CMIP6（第6次気候モデル比較計画）から提供される約100種類の異なる気候シミュレーションモデルの実行結果を用いて事前学習されている。この際、将来の任意のタイミングにおける任意の気象変数を予測する「ランダム化予測（Randomized Forecasting）」という自己教師あり学習の目的関数が採用された。

この学習アプローチにより、モデルは特定のタスクに縛られない普遍的な物理的相関を学習することができる。事前学習済のClimaXは、その後のファインチューニングを通じて、ERA5再解析データを用いた高精度な気象予報や、地理的に限定された地域予報、更には学習時に経験していない変数を用いた予測タスクへと容易に適応させることが可能である。

(d) 気象予報から気候投影までの卓越した性能

実験の結果、ClimaXは多くのベンチマークにおいて従来のデータ駆動型モデルを凌駕し、世界最高峰の数値予報モデルであるIFS（統合予報システム）に匹敵する性能を示した。特に、低解像度のデータから高解像度の情報を生成する「ダウンスケーリング」や、将来の社会経済シナリオに基づく「気候投影」といった、気象予報とは性質の異なるタスクにおいてもその有効性が実証されている。

更に、モデルのスケーリング則に関する分析では、データ量、モデルの容量、および空間解像度が増大するにつれて、予測性能が継続的に向上する傾向が確認された。これは、より大規模な計算リソースと高精細なデータを用いることで、ClimaXが将来的に更なる高精度な地球システム予測の基盤となり得ることを示唆している。

本研究は、従来の数値計算によるモデリングと、近年の大規模なデータ駆動型アプローチを融合させることで、地球システム科学における新手法を提示している。

3.4.7. ECMWFの基盤モデル

(1) AIFS ENS (2024Dec)

本節は、[9]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

欧州中期予報センター（ECMWF）が開発した人工知能予報システム「AIFS」は、気象予測の新たな手法である。その一翼を担う「AIFS ENS」は、1億パラメータのグラフニューラルネットワーク（GNN）を採用し、ERA5およびIFSデータを用いてA100 GPU 4基で3日間という低リソースでの学習を実現した。最長15日先までのアンサンブル予報（50+1メンバー）により、気温、風速、降水確率などの予測を提供する。本報告では、2025年2月25日に運用が開始され、2025年8月に更なる改良が施された最新バージョン

「AIFS Single v1.1.0」の内容を中心に、その技術と成果をまとめる。

(b) 物理的整合性の強化と境界層の導入

最新の AIFS における最大の改良点は、出力変数に対して物理的な制約を課す「境界層 (bounding layers)」の導入である。従来の機械学習モデルは、負の降水量や、合計値を上回る対流性降水量といった、物理的に矛盾した値を出力する課題を抱えていた。

これに対し、AIFS Single v1.1.0 では、出力層に特定の活性化関数を組み込むことで、ハード制約を設けている。具体的には、降水量には負の値を排除する ReLU 関数を、雲量や土壌水分には 0 から 1 の範囲に収める HardTanh 関数を適用した。更に、対流性降水や降雪量は、総降水量の一定割合として計算される「Fraction Bounding」戦略を採用し、変数間の整合性を確保している。この手法により、降水の有無の判別が容易になり、微弱な降水の過大評価といったバイアスが劇的に改善された。

(c) 予測変数の拡充と実用性の向上

モデルの有用性を高めるため、エネルギー分野や水文分野に直結する新しい変数が大幅に追加された。

- ・ エネルギー分野: 再生可能エネルギーの予測に不可欠な 100 メートル風速や、地表日射量（太陽放射および熱放射）が導入された。
- ・ 水文・陸面分野: 干ばつ予測や水資源管理に寄与する土壌水分（レベル 1・2）、土壌温度、および流出量（runoff）が追加された。
- ・ 雲・降水: 多層の雲量（低層・中層・高層）や降雪量が加わり、より詳細な天候表現が可能となった。

これらの変数は、ERA5 再解析データと ECMWF の運用解析データを用いて学習されており、各変数間で気象学的な一貫性が保たれていることが確認されている。

(d) 学習スケジュールの最適化と運用パフォーマンス

学習プロセスにおいても、データセットの拡充とスケジュールの効率化が行われた。

- ・ データの拡張: 事前学習に使用する ERA5 の期間が 2022 年まで延長され、より多くの気象パターンを学習させている。
- ・ ファインチューニングの簡素化: これまで段階的に行っていた「ロールアウト」のファインチューニングを、初期段階から最新の運用解析データを用いて直接実施する手法に変更した。これにより計算コストが削減され、予測性能の向上にもつながった。

評価結果によれば、新バージョンは従来の AIFS と比較して、全変数・全高度において 4～6%の精度向上を達成している。特に成層圏（100hPa や 50hPa）での予測精度が大幅に改善された。また、2025 年 1 月に米国南部を襲った歴史的な大雪「ストーム・エーウィン」

の事例では、AIFS は従来の物理モデル (IFS) よりも早い 10 日前の段階で正確な予測を出しており、極端現象に対する高い予測能力を証明している。

これらの進展は、高速な推論 (10 日間の予測を単一の GPU で約 2 分 30 秒で完了) と高精度な予測を両立させ、現代の気象予報における AI の優位性を確固たるものになっている。

(2) AtmoRep (2023Sep)

本節は、[10]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

CERN や JSC と共同開発された「AtmoRep」は、35 億パラメータの Transformer (Multiformer) 構造を持ち、A100 GPU 32 ノードを用いて学習された。本モデルは短期気象予報に加え、レーダーデータによる降水量補正や、時間解像度を超える高精度予測を可能にしている。大気力学を確率的な動的システムとして捉え、大規模な表現学習を通じて、観測に基づき制約された大気の歴史的軌跡からその複雑な挙動を記述する汎用的なモデルである。既存の数値シミュレーションが抱える物理プロセスの記述不足や膨大な計算コストといった課題に対し、AI を用いたタスク依存性のない「基盤モデル」という新たなアプローチを提示している。

(b) 革新的なアーキテクチャ「Multiformer」と学習手法

AtmoRep の核心は、自然言語処理の成功を 4 次元の時空間ドメインへと拡張した自己監督型学習にある。モデルは「Multiformer」と呼ばれる独自の構造を採用しており、風速、温度、湿度といった物理場ごとに独立したエンコーダ・デコーダのスタックを備え、それらをクロスアテンションによって結合することで、変数間の複雑な相互作用を学習する。学習には ERA5 再解析データが用いられ、時空間の近傍領域を「トークン」と呼ばれる小さなパッチに分割し、ランダムにマスクされた箇所を復元するタスクを通じて大気力学の本質的な表現を獲得している。これにより、地域的または全地球的な適用が可能であり、かつ入力変数の数に縛られない柔軟な運用を実現している。

(c) 確率的予測を実現する独自のアンサンブル手法

本モデルのもう一つの大きな革新は、学習データ内の固有のばらつきを反映した新しいアンサンブル手法である。従来の気象モデルのように初期値やパラメータに人為的な摂動を加えるのではなく、ニューラルネットワーク内の複数の予測ヘッドが、同一の入力に対して物理的に整合性のある異なる状態をサンプリングするように設計されている。この手法により、AtmoRep は単一の決定論的な予測ではなく、大気の状態が持つ本質的な不確実性を伴う確率分布を提供することができる。このアンサンブル生成は線形レイヤーのみで構成されるため、計算負荷が極めて低く、効率的な推論を可能にしている。

(d) 多彩な「ゼロショット能力」と応用可能性

AtmoRep は特定のタスクに特化した追加訓練を行わなくても、多様なアプリケーションを実行できる「ゼロショット能力」を備えている。これには、未来の状態を予測するナウキャストイング、欠損した情報を埋める時空間補間、更には既存の物理モデルの出力を ERA5 の分布に近づけるモデル補正が含まれる。特に時間補間においては、線形補間を大きく上回る精度が実証されている。また、「もし別の条件下であったら」という仮定に基づく予測を行う「反実仮想 (Counterfactuals)」の生成も可能であり、気候変動による統計的なシフトを評価する科学的な探究ツールとしての道も開いている。

(e) 外部データによる拡張とバイアス補正

基盤モデルとしての汎用性は、タスク固有のネットワークを追加することや、異なる観測データセットを統合することでも示されている。高解像度の COSMO REA6 データを用いたダウンスケーリングでは、既存の GAN ベースの手法を凌駕する RMSE 性能を達成した。更に、ERA5 が持つ既知のバイアスを解消するため、RADKLIM レーダーデータを用いた微調整 (ファインチューニング) により、降水量予測の精度を大幅に向上させることに成功している。このように AtmoRep は、膨大な観測記録を直接的に活用し、従来の第 1 原理に基づく物理シミュレーションを補完・強化する次世代の地球システムモデルとしての可能性を示している。

3.4.8. IBM の基盤モデル

(1) Prithvi-WxC (2024Sep)

本節は、[11]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

IBM と NASA による「Prithvi-WxC」は、23 億パラメータの Vision Transformer (ViT/MAE) アーキテクチャに基づき、HLS や MERRA-2 データを活用するモデルである。降水量や気温の分布を従来手法より高速かつ高解像度で予測する能力を持ち、台風の進路予測や熱波・干ばつの発生確率推計、更には二酸化炭素濃度上昇に伴う長期的な全球気温変化のシミュレーションといった気候変動解析に活用されている。

(b) 多様な気象変数を統合する基盤モデルの構造

Prithvi-WxC は、従来の数値予報モデルが膨大な計算資源を必要とするのに対し、深層学習を用いることで計算コストを大幅に削減しつつ、高精度な予測を実現している。本モデルは、NASA の MERRA-2 データセットから抽出された 160 もの大気変数を用いて学習されており、地上から上空約 48hPa までの広範な高度における風速、気温、湿度、雲量などのデータを統合的に処理する。アーキテクチャの核となるのは 25 個のエンコーダブロッ

クと5個のデコーダブロックで構成されるスケーラブルな2D Vision Transformerであり、領域的および全球的なデータの依存関係を効果的に捉える設計がなされている。この柔軟な構造により、長方形の格子データだけでなく、将来的にはガウス格子など異なるトポロジーへの適応も視野に入れている。

(c) マスク再構成と予測を組み合わせた学習手法

本モデルの大きな特徴は、マスク自己符号化器（MAE）の概念を取り入れた独自の学習目的にある。これは入力データの一部を隠してその内容を復元させる「マスク再構成」と、将来の気象状態を予測する「予測」の2つのタスクを融合させたものである。特に、観測データが欠落している場合や疎らな場合でも、残された情報から大気の状態を正確に再構成する能力を養うことができ、ゼロショット評価においてデータの5%からでも大気状態を復元できることが示されている。また、学習時には単なる物理量の変化だけでなく、過去20年間の統計に基づいた「気候値」からの偏差（アノマリー）を予測対象とすることで、季節や日夜の周期的な変動に左右されない汎用性を獲得している。

(d) 高精度な台風追跡とダウンスケーリングの成果

実証実験において、Prithvi-WxCは既存のAI予報モデルや伝統的な数値モデルを凌駕する成果を上げている。2017年から2023年にかけての大西洋の台風（カテゴリー3から5）を対象とした検証では、進路予測精度において他の主要なAIモデルを大きく上回った。例えば、2021年に壊滅的な被害をもたらしたハリケーン・アイダの事例では、上陸地点の予測誤差を5km未満に抑え、従来モデルが20km以上の誤差を出した中で際立った正確性を示した。また、低解像度の気象データから詳細な局所情報を導き出す「ダウンスケーリング」タスクでも、単純な補間手法と比較して4倍以上の精度向上を達成しており、全球モデルから地域的な気候影響を評価するツールとしての有効性が証明されている。

(e) 気候モデルの高度化とパラメータ化への寄与

本モデルの応用範囲は大気の状態予測に留まらず、気候モデルにおいて解像度が不足している小規模な物理現象を近似する「パラメータ化」にも及んでいる。具体的には、雷雨や山岳地帯での空気の流れによって生じる「大気重力波」の運動量フラックスを予測するタスクにおいて、高い再現性を発揮した。重力波は地球の運動量収支に重要な役割を果たすが、従来の粗い気候モデルでは直接計算することが困難であった。Prithvi-WxCをファインチューニングすることで、アンデス山脈やヒマラヤ山脈、更には熱帯域の激しい対流系で発生する重力波の影響を正確にモデル化することに成功した。これにより、数十世紀にわたる長期的な気候変動シミュレーションの精度を維持しつつ、計算負荷を現実的な範囲に抑える新たな道が拓かれている。

3.4.9. Huawei の基盤モデル

(1) Pangu-Weather (2022Nov)

本節は、[12]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

Huawei が開発した「Pangu-Weather (盤古気象)」は、深層学習を基盤とした革新的な全球気象予測システムである。約 2.56 億個のパラメータを持つ 3D Earth Specific Transformer (3DEST) という独自のネットワークアーキテクチャを採用しており、欧州中期予報センター (ECMWF) の再解析データである ERA5 の 43 年分 (1979 年～2021 年) を学習に用いている。本システムは、192 基の NVIDIA Tesla-V100 GPU を使用し、100 エポック (約 16 日間) の集中的な学習を経て構築された。最大の特徴は、従来の数値予報 (NWP) における最高峰のモデルである ECMWF の IFS を、予測精度と計算速度の両面において初めて上回った点にある。

(b) 技術的革新：3D 構造と時間集約アルゴリズム

Pangu-Weather の成功は、主に 2 つの戦略によって支えられている。第一に、大気の状態を高度 (気圧面) 情報を含む 3 次元データとして定式化した「3D Earth Specific Transformer (3DEST)」の導入である。従来の AI モデルが 2 次元 (緯度・経度) データのみを扱っていたのに対し、本モデルは 13 の気圧面における垂直的な相関関係を捉えることで、複雑な気象パターンの把握を可能にした。また、球体である地球の特性に合わせ、絶対座標に基づいた「地球固有位置バイアス」を適用することで、不均一な空間分布による誤差を補正している。

第二の戦略は、「階層的予測時間集約アルゴリズム」の採用である。これは、リードタイムの異なる複数のモデル (1 時間、3 時間、6 時間、24 時間予測用) を個別に学習させ、推論時にそれらを組み合わせて使用する手法である。これにより、中長期予測 (1 週間程度) においてモデルを反復実行する回数を最小限に抑え、AI モデル特有の累積誤差を劇的に軽減することに成功した。

(c) 予測精度と実用的優位性

Pangu-Weather は、気圧高度 (Z500)、気温 (T850)、風速、比湿といった主要な気象要素すべてにおいて、IFS を凌駕する精度を達成した。例えば、5 日先の決定論的予測における Z500 の RMSE (平方根平均二乗誤差) は、IFS の 333.7 に対して 296.7 まで改善されている。驚筆すべきはその推論速度であり、1 台の GPU で 24 時間予測をわずか 1.4 秒で完了させる。これは IFS と比較して 1 万倍以上の高速化を意味しており、リアルタイムでの大量のアンサンブル予測を可能にする。

実用面においても、Pangu-Weather は極端気象の追跡において卓越した能力を示してい

る。2018 年の台風（コンレイやイウトウ）の進路予測では、IFS よりも正確な経路を 48 時間以上早く予測した実績がある。更に、2022 年の台風 6 号（トカゲ）の正確な進路予測や、ジェット気流予測に基づく燃費効率の高い航空・海運ルートの自動選定、都市部の浸水リスク早期警戒システムへの応用など、社会インフラを支える多岐にわたるシナリオでの実用化実績が報告されている。

(d) 社会的意義と今後の展望

本システムは、AI ベースの手法が従来の数値予報を凌駕できるかという議論に終止符を打ち、深層学習による気象予測の新たな方向性を提示した。その高速な推論能力は、これまでスーパーコンピュータの膨大な計算資源を要していた気象予報のコストを大幅に削減し、より頻繁かつ詳細な予報アップデートを可能にする。今後は、学習データの更なる高解像度化や、時間軸を統合した 4 次元モデルへの拡張により、降水予測の精度向上や、更に長期的な予測の実現が期待されている。

3.5. 海洋分野の基盤モデル

3.5.1. 情報源

当分野の報告は、次の文献を情報源としている。

- [1] [Geoffrey Dawson, et al., A Sentinel-3 foundation model for ocean colour \(2025\)](#)
- [2] [Anass El Aouni, et al., GLONET: Mercator's end-to-end neural Global Ocean forecasting system \(2025\)](#)
- [3] [Yannik Glaser, et al., WV-Net: A foundation model for SAR WV-mode satellite imagery trained using contrastive self-supervised learning on 10 million images \(2024\)](#)

3.5.2. 基盤モデルの現状

表 3.22 基盤モデル一覧 [海洋分野]

開発組織	モデル	予測対象	学習コスト	推論コスト(一例)
IBM (米)	Granite- Geospatial- Ocean (2025Sep)	海洋環境の諸変動 (決定論的)	NVIDIA A100 GPU 4 基 x 3 時間	NVIDIA T4 GPU 1 基 x 数分 (6.6MB tif)
Mercator Océan (仏)	GLONET (2025Sep)	海流, 各種濃度, 水温, 波高 (決定論的)	NVIDIA A100 GPU 32 基 x 3 週	NVIDIA A100 GPU 1 基 x 数秒 (リットタイム: 10 日)
Hawaii univ. (米)	WV-Net (2024Jun)	海表面付近動向 (決定論的)	NVIDIA V100 GPU 8 基 x 12 日	(※未公表)

3.5.3. IBM の基盤モデル

(1) Granite-Geospatial-Ocean (2025Sep)

本節は、[1]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

IBM の「Granite-Geospatial-Ocean」は、5,000 万パラメータの Vision Transformer (ViT)アーキテクチャ、具体的には Masked Autoencoder (MAE)方式を採用した、海洋科学に特化した最新の人工知能基盤モデルである。本モデルは、Sentinel-3 衛星が捉えた 2.5TB におよぶ膨大な公開データを用いて事前学習が行われ、NVIDIA A100 GPU を 4 基使用してわずか 12 時間という極めて効率的な学習を実現した。特筆すべきは、ラベル付きデータが極めて希少で収集コストが高い海洋観測において、少量のサンプル入力からでも高い予測パフォーマンスを維持できる点にある。これにより、海面水位上昇予測やサンゴ礁の白化といった生態系解析、海流データに基づく船舶の低燃費航路選定、北極・南極の海水変動モニタリング、更には船舶の安全航行支援といった、地球規模の課題から産業応用まで幅広い分野での活用が期待されている。

(b) 技術的構成と海洋への最適化

本モデルは、NASA と共同開発された陸域向けモデル「Prithvi-EO」の設計思想を継承しつつ、海洋観測の特性に合わせて最適化されている。Sentinel-3 衛星の OLCI（海洋陸上着色計）が持つ 21 バンドのうち 16 バンドと、SLSTR（海面・陸面温度放射計）による海面水温データを入力として使用する。従来の陸域モデルでは 224×224 ピクセルの画像処理が一般的であったが、本モデルでは海洋データの解像度特性を考慮して 42×42 ピクセルの画像パッチを採用し、ピクセルレベルでの精緻な再構成を可能にしている。事前学習データには、世界の海域を 83 の領域に区分した Longhurst 領域（海の生態学的な区分け）に基づき、地理的・季節的に偏りのない約 47 万件のサンプルが使用された。

(c) 希少データ下での高い推定精度

モデルの評価は、海洋生態系の健全性を示す「クロロフィル a 濃度」と「海洋初生産量」の推定という 2 つの重要な下流タスクを通じて行われた。これらの分野では現場観測 (in-situ) データの不足が課題となっているが、本基盤モデルを微調整（ファインチューニング）した手法は、ゼロから学習させたモデルや従来のランダムフォレストなどの機械学習手法を上回る精度を示した。特に海洋初生産の推定においては、利用可能な訓練データを 25%まで削減した極端な条件下でも学習が進み、データ効率の高さが実証された。

(d) 空間パターンの再現性と実用性

数値的な誤差評価（RMSE）以上に顕著な成果が得られたのは、広域推論における空間的な忠実度である。従来のモデルやゼロから学習させた手法では、出力される画像が平滑化され、海洋の微細な構造が失われる傾向にあった。対して、Granite-Geospatial-Ocean から派生したモデルは、現場観測値と一致するだけでなく、海洋色アルゴリズムが描く複雑な渦やパターンの詳細を正確に捉えることに成功している。この優れた空間再現能力は、有害藻類ブルーム（赤潮）の追跡や河口域の環境モニタリング、更には気候変動が海洋炭素循環に与える影響の解明といった実社会の複雑な課題に対して、より堅牢でデータ駆動型の洞察を提供することを可能にする。

3.5.4. Mercator Océa の基盤モデル

(1) GLONET (2025Sep)

本節は、[2]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

フランスの Mercator Océan による「GLONET」は、約 3,000 万パラメータの CNN アーキテクチャを用い、GLORYS12 データ（2～数十 TB）を学習ソースとして A100 GPU 32 基で 3 週間学習された。海流、塩分濃度、海水温、海面高度の予測を、10 日分につき 10 秒以内という高速な推論で行い、海水温予測や海流動向把握、オンデマンドの海洋予測シミュレーションに利用されている。

(b) 革新的なマルチスケール・アーキテクチャ

GLONET は、従来の物理モデルが抱えていた膨大な計算コストや改善の遅さという課題を解決するために開発された。その核心は、海洋を「関数空間の写像」として捉えるオペレーター学習の視点にある。大規模な海洋循環やテレコネクションなどの広域パターンを捉えるためにフーリエ神経作用素（FNO）を採用する一方で、局所的な渦や前線といった微細な構造を再現するために畳み込みニューラルネットワーク（CNN）を並行して機能させている。これら異なるスケールの特徴量はエンコーダ・デコーダを介して統一された潜在空間で統合され、物理的な整合性を保ちながら高精度な予測を実現している。この階層的な構造により、大陸境界線などの複雑な境界条件による計算の困難さも克服している。

(c) 物理的整合性と診断指標による厳格な検証

モデルの評価には、従来の点単位の誤差評価だけでなく、海洋物理学的な妥当性を検証する高度なプロセス指向指標が導入された。具体的には、海面高度から派生する地衡流や、海水温・塩分濃度プロファイルから計算される混合層深度（MLD）の再現性が評価されている。検証の結果、先行する AI モデルである「Xihe」で見られたような派生変数におけ

るノイズやアーティファクトが、GLONET では大幅に抑制されていることが確認された。また、渦度分析を通じたエネルギーカスケードの保存特性においても、GLONET は物理モデルである GLO12 と同等の安定性を示し、予測期間中も微細な海洋構造を維持し続ける能力が証明されている。

(d) 運用上の利点と今後の展望

GLONET は、欧州のデジタル・ツイン・オーシャン・プラットフォーム「EDITO」を通じて実験的な日次予測を公開しており、実運用レベルのパイプラインに統合されている。海流や海面高度偏差（SLA）の予測においては物理モデルに近い、あるいは一部で上回る性能を示している。海水温予測、特に熱帯域においてはリアルタイムの観測データを同化する物理モデル（GLO12）に依然として優位性があるものの、計算効率の高さは、アンサンブル予測や迅速なシナリオ探索を可能にする。本システムは、純粋なデータ駆動型アプローチと伝統的な物理原則の橋渡しを果たす次世代の海洋予測ツールとして、海洋科学から意思決定支援まで幅広い領域での貢献が期待されている。

3.5.5. Hawaii univ の基盤モデル

(1) WV-Net (2024Jun)

本節は、[3]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

ハワイ大学の研究チームが開発した「WV-Net」は、欧州宇宙機関（ESA）の Sentinel-1 衛星が観測した約 1,000 万枚の合成開口レーダー（SAR）画像を用いて構築された、海洋・大気現象解析のための初の基盤モデルである。本モデルは、3,100 万パラメータ規模の構造を持ち、V100 GPU 8 基を用いて 12 日間にわたり学習された。ユーザの記述では ViT（MAE）とされているが、本論文における最終的な WV-Net は、SimCLR フレームワークを用いた ResNet50 アーキテクチャをベースとしており、コントラスト自己教師あり学習によって構築されている。この学習過程では、ERA5 再解析データを教師データとした学習も含まれており、衛星画像から直接、波高や海面温度差を推定できるほか、風筋（Wind Streaks）、冷水塊（Cold Pools）、雨といった複雑な物理現象の識別・モニタリングにおいて、従来の自然画像（ImageNet）で事前学習されたモデルを凌駕する性能を発揮する。

(b) 自己教師あり学習によるドメイン特化型モデルの構築

従来の遠隔探査データの解析では、ImageNet などの自然画像で学習されたモデルを転用する転移学習が一般的であったが、衛星画像との「ドメインギャップ」が性能のボトルネックとなっていた。これに対し WV-Net は、ラベルのない膨大な SAR WV モード画像

(20x20 km、空間分解能 5 m) を直接活用し、画像内の特徴的なテクスチャやパターンを自己教師あり学習によって抽出する。

学習においては、SAR 画像の特性に合わせたデータ拡張 (Augmentation) の最適化が行われた。具体的には、Mixup や回転、色の反転、シャープネス変換などを組み合わせることで、衛星軌道や観測条件に左右されない頑健な特徴表現 (埋め込み) の獲得に成功している。一方で、周波数領域でのノッチフィルタリングといったドメイン知識に基づく手法は、必ずしも性能向上に寄与しないという知見も得られている。

(c) 多様な地球物理学的タスクにおける実証

WV-Net の有効性は、複数の下流タスクを通じて証明されている。代表的な成果として、波高 (H_s) の推定において RMSE (二乗平均平方根誤差) を 0.60 から 0.50 へと大幅に改善したことが挙げられる。また、海面温度と大気温度の差 (T_{v10}) の推定においても、ImageNet ベースのモデルより優れた精度を示している。

更に、GOALI データセットを用いたマルチラベル分類タスクでは、12 種類の海洋・大気現象 (風筋、マイクロスケール対流セル、雨、内部波、海氷など) を高い精度で識別できることが確認された。特筆すべきは、ラベル付きデータが極めて少ない設定 (900 サンプル程度) においても、WV-Net は高い AUROC を維持しており、データ効率の面で極めて優秀であるという点である。

(d) 教師なし画像検索と将来の展望

WV-Net は、教師あり学習のみならず、ラベルを一切使用しない教師なしの画像検索タスクにおいても卓越した能力を発揮する。例えば、出現頻度が 0.5% 以下と極めて稀な大気重力波 (AW) の検索において、ImageNet モデルを遥かに上回る平均適合率 (mAP) を達成した。これは、モデルが海洋表面の微細な後方散乱パターンを、ドメイン固有の知識として深く理解していることを示唆している。

本研究の成果は、海洋・大気境界層 (MABL) の研究を「データ不足」から「データ豊富」な時代へと転換させる可能性を秘めている。今後は、より大規模な ViT アーキテクチャへの拡張や、SWOT などの次世代衛星観測技術への応用が期待されており、遠隔探査コミュニティにおける基盤モデル活用の先駆けとなるものである。

3.6. 地球環境分野の基盤モデル

3.6.1. 情報源

当分野の報告は、次の文献を情報源としている。

- [1] [Johannes Jakubik, et al., TerraMind: Large-Scale Generative Multimodality for Earth Observation \(2025\)](#)

- [2] [actuIA, IBM と ESA、TerraMind を発表：オープンソースの地球観測モデル \(2025\)](#)
- [3] [Xiao Xiang Zhu, et al., On the foundations of Earth foundation models \(2026\)](#)
- [4] HLS : <https://hls.gsfc.nasa.gov/>
- [5] Sentinel-5P : <https://sentinel.esa.int/web/sentinel/missions/sentinel-5p>
- [6] ひまわり 8/9 号 : <https://www.data.jma.go.jp/mscweb/ja/index.html>
- [7] GPM IMERG : <https://gpm.nasa.gov/data/imerg>
- [8] MODIS : <https://modis.gsfc.nasa.gov/>
- [9] CAMS : <https://atmosphere.copernicus.eu/>
- [10] CHIRPS : <https://www.chc.ucsb.edu/data/chirp>

3.6.2. 基盤モデルの現状

環境分野の基盤モデルは、衛星画像等の地球観測データを活用し、地表の変化を解析する。Alibaba 等が開発した「TerraMind」は、マルチモーダルなデータを学習し、森林や都市の環境変化を精緻に捉える。一方、NASA と IBM による「Prithvi-EO」は、ViT を採用した汎用地理空間 AI であり、土地利用の変化や自然災害の解析を高度化する。これらは、地球環境の保全に資する重要な基盤技術である。

表 3.23 環境分野の基盤モデル（その 1）

モデル名	開発元	アーキテクチャ	学習データ	データ量	データサイズ	パラメータ数
TerraMind	IBM + ESA	TiM	TerraMesh	気象データ・ 土地利用	17 TB	5,000 万
Prithvi-EO	IBM + NASA	ViT(MAE)	HLS V2(30m)	1 億	8~10 TB	6 億

表 3.24 環境分野の基盤モデル（その 2）

モデル名	ライセンス	主な用途・特徴	アーキテクチャの特徴
TerraMind	研究用	森林の違法伐採監視、都市開発や農業用地の変化分析、洪水・山火事の被害把握など、地表の環境変化を精緻に捉え最適な土地活用支援に貢献する。	IBM と ESA が開発した 5000 万パラメータの ViT。17TB のデータを学習。地球観測データの欠測補完やセグメンテーション、特徴検出を行う。
Prithvi-EO	Apache 2.0	自然災害の予見や被害解析のほか、収穫量予測、バイオマス推計、干ばつ監視、インフラモニタリング、避難経路の最適化など、リアルタイム支援を行う。	6 億パラメータの Vision Transformer を採用。NASA と IBM が HLS V2 データを学習。多様な時間軸・地域に対応する汎用地理空間 AI。

表 3.25 基盤モデル一覧【地球環境分野】

開発組織	モデル	予測対象	学習コスト	推論コスト(一例)
IBM +ESA (米,欧)	TerraMind (2025Sep)	欠測補完, セグメンテーション, 特徴検出	NVIDIA A100 GPU 32 基 x 約 39 日	NVIDIA T4 GPU 1 基 x 約 30 秒 (2k x 2k px)

3.6.3. AI 基盤モデルを支えるデータ基盤

衛星分野のデータ基盤は、地表、大気、降水等の地球環境を多角的に捉える観測リソースで構成されている。NASA と USGS による「HLS」は、Landsat と Sentinel-2 を統合した 30m 解像度の一貫性のある地表反射率データを提供し、詳細な土地被覆解析を可能にする。欧州宇宙機関の「Sentinel-5P」や ECMWF の「CAMS」は、対流圏の NO₂ や温室効果ガスを監視し、大気質のモニタリングや排出源特定に貢献する。

気象・防災面では、日本気象庁の静止気象衛星「ひまわり 8/9 号」が 10 分毎の高頻度観測を行い、台風や集中豪雨の監視に不可欠な役割を果たす。また、NASA と JAXA による「GPM IMERG」は、30 分毎の全球降水マップを提供し、洪水予測や水資源管理に活用されている。25 年以上の実績を持つ「MODIS」は、大気・海洋・陸域の長期的な生態系変化を分析するための巨大なアーカイブを形成している。

表 3.26 衛星分野のデータ基盤（その 1）

分類	名称	機関	内容
地表観測	HLS	NASA GSFC + USGS	Landsat と Sentinel-2 を 30m 解像度で統合。雲除去等を施した一貫性のある地表反射率データにより詳細な土地被覆解析を実現。
大気成分	Sentinel-5P	ESA (欧州宇宙機関)	対流圏の NO ₂ や O ₃ 等を毎日全球規模で観測。大気質のモニタリングや排出源特定、気候変動研究に不可欠なデータを提供。
気象衛星	ひまわり 8/9 号	気象庁 (JMA)	日本周辺を 10 分毎に多バンド観測する静止気象衛星。高頻度画像は台風の監視や集中豪雨の予測、防災業務において極めて重要。
降水観測	GPM IMERG	NASA GSFC + JAXA	複数の衛星観測と地上計を統合した全球降水マップ。0.1 度解像度で 30 分毎の降水量を提供し洪水予測や水資源管理に活用。
広域観測	MODIS	NASA	NASA の衛星による 25 年以上の環境観測データ。大気、海洋、陸域の状態を全球で捉え、生態系変化や温暖化の長期分析を支える。
大気組成	CAMS	ECMWF	大気汚染物質や温室効果ガスの監視・予測を行う。衛星データとモデルを融合した再解析を提供し、大気環境の健全性評価を支援。
降水データ	CHIRPS	UCSB CHC	衛星と地上観測を融合した 1981 年からの高解像度降水データ。農業支援や干ばつ監視に特化し食料安保のリスク評価に利用。

表 3.27 衛星分野のデータ基盤（その 2）

分類	名称	件数（目安）	データ サイズ	年間 増加量（目安）
地表観測	HLS	約 3,090 万件以上 NASA Earth Search より	8.7 PB	10TB/day
大気成分	Sentinel-5P	約 420 万件	1.7 PB(2024 年 1 月)	1.5TB/day
気象衛星	ひまわり 8/9 号	約 7,000 万件以上 2 万件 /day	1.5 PB	150 TB
降水観測	GPM IMERG	約 120 万件以上	1.6 PB	200～300 TB
広域観測	MODIS	数億件以上	約 5 ～ 10 PB 以上	約 200 ～ 300 TB
大気組成	CAMS	約 6,700 億件（気象フィ ールド数）	22PB 以上	175 TB
降水データ	CHIRPS	1981 年～現在	数百 GB～数 TB	不明

3.6.4. IBM+ESA の基盤モデル

(1) TerraMind (2025Apr)

本節は、[1]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

IBM と欧州宇宙機関（ESA）が共同開発した「TerraMind」は、5,000 万パラメータの ViT (MAE) アーキテクチャを持ち、17TB の TerraMesh データセットを A100 GPU 32 基で約 36 日間学習した地表環境予測モデルである。新興国における森林の違法伐採監視、都市開発や農業用地の変化分析を通じた最適な土地活用支援、洪水や山火事の被害状況の迅速な把握などに活用されている。本モデルは、地球観測（EO）領域において、任意のモダリティから別のモダリティを生成できる「any-to-any」の生成能力を備えた初の全方位型生成基盤モデルとして位置付けられている。

(b) 多様なモダリティを統合するデュアルスケール学習

TerraMind の最大の特徴は、ピクセルレベルとトークンレベルの両方の表現を組み合わせた、独自の「デュアルスケール初期融合」アプローチを採用している点にある。トークンレベルでは高次元の文脈情報を符号化してモダリティ間の相関を学習し、ピクセルレベルでは空間的な細部を捉えることで、従来のトークンのみを用いた学習よりも優れた表現力を実現している。学習に用いられた「TerraMesh」データセットは、Sentinel-1 のレーダー画像や Sentinel-2 の光学画像に加え、土地被覆（LULC）、デジタル標高モデル（DEM）、正規化植生指数（NDVI）、地理座標、更には自然言語によるキャプションなど、

9 種類の多様なデータが時空間的に整列された 900 万個のサンプルで構成されている。各画像データは有限状態量子化（FSQ）と拡散デコーダを組み合わせた手法でトークン化され、情報の圧縮と高精度な再構成を両立させている。

(c) 「Thinking in Modalities」による性能向上

本研究では、大規模言語モデルにおける「Chain-of-Thought（思考の連鎖）」に着想を得た、「Thinking in Modalities（TiM：モダリティによる思考）」という新たな概念が導入された。これは、ファインチューニングや推論の過程でモデルが中間的な人工データを生成し、それを入力に加えることで最終的な出力を改善する手法である。例えば、光学画像からまず土地被覆マップを生成し、その情報を活用して水域マッピングを行うことで、単一のモダリティのみを使用する場合と比較して、精度が最大で 2 パーセントポイント向上することが実証されている。この能力により、特定の観測データが欠落している場合でも、他のデータから補完することで高度な分析が可能となる。

(d) 汎用性とベンチマークにおける成果

TerraMind は、事前学習のみで特定のタスクを実行する「ゼロショット」性能においても極めて高い能力を示している。水域マッピングや地理情報の推定において、既存のベンチマークモデルが対応できないゼロショット設定で実用的な精度を達成した。また、業界標準のベンチマークである「PANGAEA」を用いた評価では、12 種類の既存モデルを上回る最高水準の性能を記録した。特筆すべきは、特定のタスクに特化してゼロから学習された U-Net などのモデルを、汎用基盤モデルである TerraMind のファインチューニング版が初めて上回った点である。モデルの重みやコードは、コミュニティの発展を支援するために、許容度の高いライセンスでオープンソース化される予定である。

3.7. 防災分野の基盤モデル

3.7.1. 情報源

当分野の報告は、次の文献を情報源としている。

- [1] [Daniela Szwarzman, et al., Prithvi-EO-2.0: A Versatile Multi-Temporal Foundation Model for Earth Observation Applications \(2024\)](#)
- [2] [Aman Raj, et al., AI and Generative AI Transforming Disaster Management: A Survey of Damage Assessment and Response Techniques \(2025\)](#)
- [3] [技術評論社 web メディア, IBM/NASA Prithvi が切り開く災害予測と都市計画の未来 \(2025\)](#)

- [4] [IBM Research et al., The infrastructure powering IBM's Gen AI model development \(2025\)](#)
- [5] [Mark Govett, et al., Exascale Computing and Data Handling: Challenges and Opportunities for Weather and Climate Prediction \(2024\)](#)

3.7.2. 基盤モデルの現状

表 4.3.28 基盤モデル一覧 [防災分野]

開発組織	モデル	予測対象	学習コスト	推論コスト(一例)
IBM +NASA (米)	Prithvi-EO (2024Dec)	マッピング, 分類 セグメンテーション, 特徴検出, 時系列生成	NVIDIA A100 GPU 240 基 x 2.4 日	RedHatAI Inference Server3.3 x 40ms (HLS-2 512x512 px)

3.7.3. IBM の基盤モデル

(1) Prithvi-EO (2024Dec)

本節は、[1]を中心にまとめたものである。

(a) 概要

IBM と NASA の「Prithvi-EO」は、6 億パラメータの ViT (MAE) アーキテクチャを採用し、HLS V2 データ（約 8～10TB）を A100 GPU 240 基を用いて約 2.4 日間で事前学習を行った。洪水・浸水域、森林火災延焼痕、土砂崩れ等の自然災害予見のほか、避難経路や救援物資配分の最適化といったリアルタイム支援に活用されている。更に、収穫量予測やソーラーパネル設置状況、地上バイオマス推計、干ばつ監視など、インフラや生態系の多角的なモニタリングにも対応している。

(b) モデルの設計思想とスケーラビリティ

Prithvi-EO-2.0 は、先行モデルである Prithvi-EO-1.0 の成果を基盤としつつ、世界規模のデータセットへの拡張とモデルの大規模化を実現した次世代の地球観測基盤モデルである。NASA の Harmonized Landsat and Sentinel-2 (HLS) アーカイブから、過去 10 年間にわたる 420 万件のグローバルな時系列サンプルを事前学習に用いている。モデルサイズは 3 億および 6 億パラメータに拡大され、これは地球観測分野において最大規模の部類に属する。この膨大なデータセットにより、モデルは長期的なトレンドや季節変動、更には短期間の急激な変化を捉えることができる。

(c) アーキテクチャの革新：時空間情報の統合

技術的な最大の特徴は、空間と時間の両軸に対して明示的なトランスフォーマー・アテ

ンションを適用した点にある。従来のモデルの多くが単一時期の画像や小さなパッチに限定されていたのに対し、本モデルは 3 次元パッチ埋め込みを採用し、時期が不規則な衛星データの特性を考慮した設計となっている。また、画像データだけでなく、中心緯度・経度や日付（年、通算日）といったメタデータを埋め込みベクトルとして統合し、特定の地域性や季節バイアスを学習に反映させることに成功した。これらの情報は、学習中にランダムに欠落させるメカニズムを導入することで、メタデータが利用できない場面でも柔軟に対応できる堅牢性を備えている。

(d) ベンチマークにおける卓越性の検証

モデルの汎用性は、地球観測基盤モデルのための厳格な評価枠組みである「GEO-Bench」によって実証された。600M パラメータ版のモデルは、前バージョンの性能を 8% 上回り、分類およびセグメンテーションの全 12 タスクにおいて、既存の主要な 6 つの基盤モデルを凌駕する総合スコアを記録した。特筆すべきは、30m 解像度のデータで学習されたにもかかわらず、0.1m から 15m という極めて高い解像度のタスク（牛の個体識別や樹冠の特定など）においても優れた転用可能性を示した点である。これは、本モデルが物理的なスケールを超えた普遍的な視覚的特徴を学習していることを示唆している。

(e) 実社会の課題に対する専門家主導の応用

実用性の検証においては、AI 研究者と各分野の専門家（SME）が設計段階から密接に連携し、多様な実証応用が実施された。災害対応分野では、Sen1Floods11 を用いた洪水マッピングで従来モデルより高い精度を達成し、森林火災の焼失面積特定でも IoU（Jaccard 係数）を有意に向上させている。また、土砂崩れの検出においては、学習データを全体の 2.5% に制限した極端な条件下でも、モデルの規模と事前学習の効果により、従来の U-Net と比較して高い汎用性と頑健性を維持できることが証明された。農業・生態系分野でも、欧州の作物分類においてベースラインを上回る性能を示し、総一次生産性（GPP）の推定では従来のランダムフォレスト手法を決定係数で最大 20% 上回るなど、広範な領域での有効性が確認されている。

(f) 信頼されるオープンサイエンスへの貢献

Prithvi-EO-2.0 は、透明性と再現性を重視した「信頼できるオープンサイエンス」のアプローチに基づき開発された。学習済モデルの重みとコードは Hugging Face および GitHub で公開されており、更にモデルのカスタマイズを容易にする「TerraTorch」ツールキットにも統合されている。これにより、高度な AI 知識を持たない専門家であっても、自身の特定の課題に合わせてモデルを迅速に微調整し、実務に導入することが可能となっている。

3.8. 将来の見通しの分析

3.8.1. 情報源

国内外における AI ユーザ数のトレンドや計算基盤整備に関する将来の見通しを分析する。これまでの調査内容および、現状を俯瞰した下記の情報を基に分析した。

このうち、文献[1]は、文献[2]を引用しつつ、急速に発展する基盤モデルや生成 AI の動向を踏まえ、日本の国際競争力を強化するための研究開発戦略をまとめた報告書である。AI 技術の潮流を「基本原理の発展」「リスクへの対処」「AI によるプロセス変革」の 3 軸で捉え、次世代 AI モデル、信頼される AI、AI for Science の重要性を提言している。国内外の動向比較や、人・AI 共生社会に向けた課題も詳述している資料である。

また、文献[2][4]は、科学研究を AI で革新する AI for Science の最新動向をまとめた報告書である。AI が科学の第 5 パラダイムとして、仮説生成から実験自動化まで研究プロセス全般を変容させる現状を分析している。国内外の政策やライフ、材料、環境等の分野別動向を網羅し、日本の特長を活かした次世代情報基盤の構築や人材育成、メタサイエンスの重要性を提言の資料である。

更に、文献[3]の 4 章は、科学研究における AI 利活用 (AI for Science) の現状と展望をまとめたロードマップである。素粒子・原子核、材料科学、生命科学、気象、宇宙など多岐にわたる分野で、計算コスト削減のためのサロゲートモデル構築や、膨大な実験データの統合解析、生成 AI による構造設計などが進み、次世代のスーパーコンピュータと AI の融合が、科学的発見を劇的に加速させることが期待されることを示している。

資料[5][6]は、スタンフォード大の HAI から出版されている汎用的な LLM の基盤モデルに関する計算資源・資金に関するレポートを含む AI 全般の報告書である。特に資料[5]は毎年発行されており、多くの機関で講評され参考にされている文献である。

- [1] AI for Science の推進に向けた基本的な考え方について, 文部科学省、資料 1・5 科学技術・学術審議会情報委員会 (第 44 回) 令和 7 年 10 月 6 日
- [2] 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—, 2026 年 2 月 9 日 JST 研究開発戦略センター、参考資料 5 AI for Science 推進委員会 (第 1 回)
- [3] 計算科学ロードマップ 2023, HPCI コンソーシアム計算科学フォーラム, 2024 年 5 月 (第 1 版)
- [4] 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～, 国立研究開発法人科学技術振興機構 (JST) 研究開発戦略センター (CRDS) 令和 7 年 3 月
- [5] Artificial Intelligence Index Report 2025, Stanford Institute for Human-Centered Artificial Intelligence (HAI). 2025

https://hai.stanford.edu/assets/files/hai_ai_index_report_2025.pdf

[6] How much does it cost to train frontier AI models? ,EPOCH AI (Last updated Jan 13, 2025)

<https://epoch.ai/>

3.8.2. 研究プロセスに着目した基盤モデルの分類方法

資料[1]の p.2 に「AI for Science による科学研究の革新」がまとめられている。これらを AI for Science の計算基盤と基盤モデルを整理するため、「研究プロセスに着目した基盤モデル」の視点から次の3分類に整理した。

- ① 知識体系化と知見抽出
- ② 現象予測と計算加速
- ③ 実験・検証の自律化

このうち、①は膨大な論文やデータから知見を抽出するために、膨大な論文や実験データを学習させた LLM、および、分野に特化しファインチューニングした基盤モデルを想定している。また、②は膨大な解析結果を学習したサロゲートモデルや複雑な物理現象を表現するために、従来のシミュレーションを高速化・高精度化した基盤モデルである。最後に、③は①と②で得られた仮説を検証するために、実験・計測等を自動化および自律化して繰り返すための基盤モデルである。

AI for Science による科学研究の革新



● 日本固有の強みを活かし、**ライフサイエンス**や**マテリアルサイエンス**をはじめとした分野横断的・組織横断的な取組を進めるとともに、**情報基盤**の強化や先端研究設備・機器の戦略的な整備・共用・高度化、**大規模集積**等を通じて「AI for Science」の先導的実装に取り組み、**科学研究システムを革新**する。

■（政策として）AI for Science による科学研究の革新とは・・・

➢ 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。**

- ・ AIが科学研究を高度化・高効率化すること
- ・ AIが科学研究を自律的に駆動すること
- ・ AIそのものの研究開発（Science for AI）
- ・ AI for Scienceを実現するための環境構築
- ・ 科学研究から社会実装への取組

多様な分野におけるAIの活用	活用例
① 科学研究で創出されるデータの改良や情報の抽出	医学領域における超音波画像診断支援／宇宙観測データのノイズ除去／古文書に記述されている内容の自動解析
② シミュレーションの高度化・高速化	タンパク質の立体構造予測／気象予測／材料分野における望ましい特性を持つ材料や反応の発見／仏像の顔の類似度や制作年代・地域の推定
③ 実験や研究室の自律化	自律的な物質探索ロボットシステム／抗体遺伝子クローニング（同じ遺伝子型となる細胞集団を作製すること）の自動化システム
① 新しい研究テーマ等の提案	研究データや論文情報の解析による科学的仮説の生成

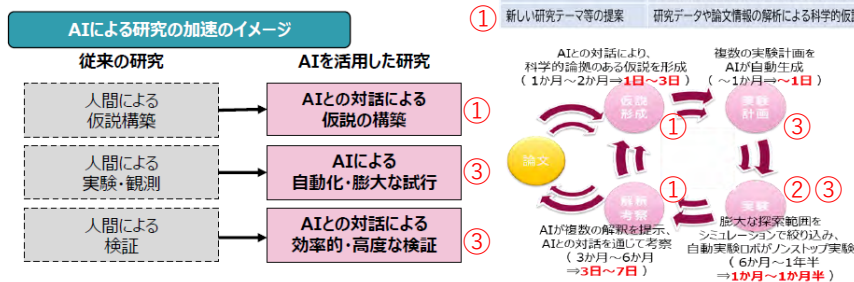


図 3.15 [1] p.2 より抜粋（赤い丸印①②③の数字は本業務で追記したもの）

従来の研究手法では、①大量の論文数や実験データなどを理解するための時間、②スーパーコンピュータによる膨大な計算時間、③実験における人手と時間の制約、がボトルネックとなっていた。これらを AI の基盤モデルが解決する。

表 3.29 研究プロセスに着目した基盤モデルの 3 分類

分類	基盤モデルの目的（上段）と AI への期待（下段）
①知識体系化と知見抽出	膨大な論文、特許、実験レポートなどの情報を学習し、把握困難な知見を統合する。キーワード間の潜在的な相関を抽出し、新たな研究仮説の立案や、専門分野を跨いだ知識の再発見を支援する。 時間的な制約や認識する内容の限界を超える。
②現象予測と計算加速	物理法則などを学習し、シミュレーションを AI が代替することで処理時間を短縮する。例えば、未知の物質が持つ性質を予測する、目標とする新材料や新薬の構造の探索すべき候補を短時間で絞り込む。 膨大なシミュレーション時間を短縮する。
③実験・検証の自律化	AI が、実験ロボットや計測機器を制御する。実験結果をリアルタイムで解析し、次に試すべき条件を自律的に再実行する。24 時間稼働の「自律型ラボ」を実現することができ、検証全体を加速する。 時間的な制約や人為的なミスを排除する。

これら 3 つの要素は独立に存在するのではなく、「①で仮説を立て、②で仮想検証し、③で実証する」というデジタルとフィジカルが融合した一連の研究サイクルを形成している。このサイクルが高速化することで、従来の科学的方法論が根本から変わり、短期間で研究を完遂させる競争力の源泉となると予測できる。

3.8.3. 研究プロセスに着目した事例の分類

(1) 文献[3]事例の①②③への分類

文献[3]では、各分野の研究者が AI に対し多くの期待を述べている。具体的な事例なども提示されている。ここでは、上記の分類①②③の具体的な事例を抽出し、分類①②③の妥当性を確認する。

本作業で分類した「①情報体系化と知見抽出」のカテゴリは、人間が読み切れない膨大な科学情報を AI が統合・解析し、新たな知的発見を支援する役割を担う。Galactica や PMC-LLaMA、MatSciBERT といった LLM を用いることで、数百万報の論文や Materials Project のようなデータベースから潜在的な相関関係を抽出し、研究者の認知バイアスを排除した学際的な仮説立案を可能にする。近年では、産学のニーズとシーズを結びつける Bibbidi のようなプラットフォームや、タンパク質配列を扱う ESM-2 といった、ドメイン固有の「AI-ready データ」を学習させた科学特化型モデルの開発が急速に進んでおり、これにより従来は数カ月を要していた文献調査を数日単位へと劇的に短縮し、知見抽出のプロセスに変革をもたらす。

また、「②シミュレーション高度化」では、物理法則や化学反応を学習した AI モデルが、従来のスーパーコンピュータによる膨大な数値計算を代替・加速させる「エミュレータ」として機能する技術である。AlphaFold 3 による構造予測や、MatterSim のような原子レベルの深層学習モデルが、第一原理計算（DFT）などの極めて計算コストの高い処理を数万倍の速さで代行する。更に、設計要件から新材料を直接提案する MatterGen や、未知の結晶構造を特定する GNoME といった「生成 AI による設計」へと進化しており、Aurora のような地球システム基盤モデルも気候科学の複雑な予測に応用されている。これらの技術は、スーパーコンピュータを用いても数百年を要するような広大な探索空間から目的の候補を現実的な時間枠で絞り込み、劇的な加速を実現している。

更に、「③実験・検証の自律化」では、バーチャルな AI とフィジカルなロボットや計測機器を高度に融合させ、実験プロセスそのものを自律的に実行・最適化するものである。AI Scientist-v2 のような「AI 科学者システム」が研究計画を立案し、Cloud Hub for AI Experiment や NIMS-OS、ChemOS といったプラットフォームを通じて、人間が介在しない 24 時間 365 日稼働の「自律型ラボ」を動かす。この変革により、人型ロボットを用いた分化誘導工程や PHYSBO によるベイズ最適化が実用化され、人手による作業量や再現性の欠如といった物理的な制約が排除される。結果として、仮説生成から実証までを高速に繰り返すクロズドループが構築され、科学的新発見に至るまでのスピードを指数関数的に向上させている。

表 3.30 参考文献[2]に記載された AI for Science の基盤モデルの研究開発事例

分野	① 知識体系化と知見抽出	② 現象予測と計算加速	③ 実験・検証の自律化
素粒子・原子核	潜在空間への次元削減	IMSRG-Net (PINN を用いた代理モデル)、人工ニューラルネットワークによる量子多体問題解析・試行波動関数構築	実験データを用いた核力ポテンシャルのフィッティング
ナノサイエンス・デバイス	Material Project 等の DB 利用、分光データからの構造推定（逆解析）、GNN によるガラス構造秩序の推定	機械学習ポテンシャル分子動力学（MLP-MD）、量子コンピュータによるサロゲートモデル構築、GNN によるガラス動力学予測	自律自動実験システム、ベイズ最適化による材料探索（電極触媒等）、TRHEPD データ解析（2DMAT）
エネルギー・材料	材料設計への LLM（ChatGPT 等）活用、生成 AI による初期座標提供、有効ハミルトニアンデータベース構築	運動エネルギー密度汎関数の生成 AI 基盤モデル、GNOME による新材料結晶構造特定、ハイスループット・シミュレーション（太陽電	AI によるスーパーコンピュータのジョブ制御・自動実行（HPC API 連携）

		池材料等)	
生 命 科 学	AlphaFold2 (構 造 推 定・参照)、タンパク 質相互作用の情報圧縮 (SVD, CP 分解)、 VAE を用いたダイナミ クスの表現学習	FMO 計算の機械学習モ デル化 (IFIE 予 測 等)、MD-GAN による 計算コスト低減、ノイ ズ除去拡散モデルによ る粗視化力場開発	「世界モデル」を組み 込んだ強化学習による 自律操作 (細胞培養装 置等)、AI 指針に基づ く構造サンプリング
脳・神 経科学	ニューロインフォマテ ィクス (大規模 DB)、 電子顕微鏡画像からの 神経セグメンテーショ ン (ASEM 等)	大規模詳細神経回路シ ミュレーション、SNN (スパイキングニュー ラルネットワーク) の 構築	DeepLabCut 等を用い た動画からの行動解 析、アンサンブルカル マンフィルタ (EnKF) 等を用いた計測データ のデータ同化
創 薬・ 医療	臨床言語モデル (EMR 向け LLM)、タンパク 言 語 モ デ ル (ESM 等)、ゲノム/DNA 言 語モデル (HyenaDNA 等)	マルチモーダル基盤モ デル (HAIM, IRENE) による臨床転帰予測、 化合物-タンパク質相互 作用 予 測 (GNN, Transformer)	生成モデルによる分子 設計 (ChemTS 等)、 疾患発症予防プランを 提示する介入シミュレ ーション AI
設 計・ 製造	CNN-AE による流れ場 の特徴抽出、3D データ セット (富岳による多 ケース計算) の作成	LEAE による流れの低 次元ダイナミクス抽出 と制御、3D 生成 AI (DeepSDF 等) による 構造最適設計	LLMs as Layout Interpreter (自然言語 による 3D 形状パラメー タ制御)
地 震・ 津波	地球科学における生成 AI・基盤モデルの活 用、SeisCLIP (地震学 基盤モデル)	PINN を用いた地殻変 動・地震発生サイクル 計算、グリーン関数の サロゲート化によるシ ミュレーション求解加 速	地震波到達時間のサロ ゲートモデルに基づく 震源位置のベイズ推定
気 象・ 気候	台風コンペティション 等を通じたデータ分析 知見の獲得	雲微物理過程のサロゲ ートモデル、全球数値 気象モデルのエミュレ ーション (Pangu- Weather, GraphCast 等)、リザーバー計算に よる気象予測	降 水 ナ ウ キ ャ ス ト (ConvLSTM 等) と数 値予報の融合予測
宇 宙・ 天文	天文ビッグデータ (掃 天観測データ等) から の情報抽出	(輻射) 流体シミュレ ーションのサロゲート モ デ ル、Dark Emulator (宇宙論パラ メータ推定)、3D U- Net による超新星爆発サ ロゲート	Simulation-based inference (SBI) による 宇宙論的推論

(2) 文献[2]の事例

文献[2]でも具体的な事例などが提示されている。先ほど示した文献[3]と合わせ、ここで

は文献[2]を用いて分類①②③の妥当性を確認する。この分類の概要は次の箇条書きのとおりである。

- ① 情報体系化と知見抽出：既存モデルをそのまま利用するだけでなく、ドメイン固有データ（タンパク質、元素、化合物等）を用いてスクラッチから事前学習する「独自モデル開発」が示されている。
- ② シミュレーション高度化：特にマテリアル分野において、第一原理計算と同等の精度を保ちつつ計算を加速させる「MatterSim」のような基盤モデルの普及がマイルストーンとして挙げられている。
- ③ 実験・検証の自律化：人間の介在なしに仮説生成から実験までを回す「自律系 AI for Science」が、将来的な科学競争力の核心として位置付けられている。

表 3.31 参考文献[2]に記載された AI for Science の研究開発事例

分野	① 情報体系化と知見抽出	② シミュレーション高度化	③ 実験・検証の自律化
ライフサイエンス・創薬	Galactica , PMC-LLAMA , MatSciBERT , ESM-2 (protein language model)	AlphaFold2 , AlphaFold 3 , RosettaTTAFold , Boltz-1 , Chai-1 , RFdiffusion , ProteinMPNN , EVOLVEpro , RGN2 , ESMFold , EMBER3D , Enformer , DNABERT / DNABERT-2 , HyenaDNA , scFoundation , scGPT , DrugBAN , MolGPT , ChemBERTa , SMILES-BERT , GPN , DeepSEED , Nucleotide Transformer , SpliceBERT , Bert20me , ProGen , MoleculesSTM , RNABERT , RNA-FM , ProteinBERT , ProtGPT2 , OntoProtein , MSA Transformer , ProtTrans , UniRep , scTranslator , TOSICA , DeepMAPS , SiGra , scBERT , SCMVP , GLUE , GenerRNA , RNA-MSM , RfamGen , Evo , VODNA , POLYGON , PMDM , EIHGN , scButterfly , MIDAS , scPROTEIN , MarsGT	ロボティック・バイオリロジー・プロトタイピング・ラボ、ヒューマノイドロボットによる分化誘導、生合成経路予測、微生物培養プロセスの AI 制御モデル、培地最適化設計
マテリアル	Materials Project (データ提供) , GNoME database	GNoME (Graph Networks for Materials Exploration) , MatterSim (Deep Learning Atomistic Model) , MatterGen (Generative model for inorganic materials) , M3GNet , Graphormer , RadonPy (古	Cloud Hub for AI Experiment (分散型自動・自律実験), 加速コンソーシアム (Acceleration Consortium), 自律自動

		典 MD 自動計算)	実験システム
環境・エネルギー	Aurora (Microsoft 地球システム基盤モデル), スマートメーターデータ解析・異常検知, 太陽光発電出力予測用の天空画像解析	太陽光発電出力予測用総合的 CNN モデル, 電力需要予測モデル, 気候科学における小スケール現象(サブグリッド)予測, 観測補間・ギャップ補完, 物理法則との統合モデリング, 再解析データ	AI 駆動型アルゴリズムによる電力使用傾向のリアルタイム監視・動的調整, 強化学習による需要応答(DR)・需要予測ハイブリッドモデル, デジタルツイン(仮想発電所・原子力発電所)
分野共通・その他	ChatGPT , Bard , Wolfram プラグイン , Bibbidi(産学ニーズ・シーズマッチングプラットフォーム), 科学文献の概要・動向把握 LLM, 検索・記号処理・四則演算ツール連携	物理法則とのハイブリッドモデリング, 予測・シミュレーション用の計算ツール, SINDy (非線形力学のスパース同定), CNN-AE (流れの特徴抽出)	AI Scientist-v2 (Sakana AI), オートノマス・ラボラトリー, ラボラトリー・オートメーション, フィジカル AI, 米国科学セキュリティ・プラットフォーム (ASSP), AI エージェント(実験評価・自動化)

3.8.4. 国内外における AI ユーザ数のトレンド

(1) 社会的な背景 (ユーザ)

まず、Hyperion 社調査から、次のような傾向がわかる。AI ユーザは、研究成果の質的向上と長期的イノベーションの推進を背景に、顕著な拡大傾向を示している。

- ① 利用拡大の意向: 調査回答者の 74.9%が HPC ワークロードをサポートするために生成 AI の使用を拡大する計画であり、縮小を予想する組織は 3%未満である。
- ② 成果への評価: 回答者の 75.8%が、AI プロジェクトが期待を満たした、あるいは上回ったと報告している。
- ③ エージェント AI の普及: 約 40%の組織がすでに「エージェント AI モデル」を使用しており、AI が支援的な役割を超えて自律的にワークフローに関与し始めている。
- ④ クラウド利用の定着: AIaaS や GPUaaS (Neo-Cloud) の台頭により、最先端ハードウェアへの即時アクセスを求めるユーザ層が拡大している。

(2) 社会的な背景 (ハードウェア)

AI 市場は、生成 AI の爆発的普及により、従来の HPC 成長率 (7~8%) を大きく上回る 20%以上の高成長モードに突入している。

- ① 市場規模の予測: 2024 年の市場総支出は 60B ドル (9.6 兆円) を超え、2029 年までに 1,200 億ドル (19.2 兆円) 近くまで倍増する見通しである。
- ② 社会的影響と政府投資: 政府主導の AI Gigafactory への大規模投資が加速しており、データセンターの電力要件は GW 規模に増大すると予測される。

- ③ 戦略の洗練化: 2025 年以降、AI 導入は単なる拡大から、成功指標に基づき取組を再調整する「洗練化」と「戦略的調整」のフェーズへ移行しつつある。
- ④ 科学研究への貢献: 従来のシミュレーションに AI を融合させることで、数十年を要した研究期間を数年単位に短縮する「科学イノベーションの変革」が期待されている。

(3) 計算基盤の環境整備に関する将来の見通し

AI の計算需要増大に伴い、データセンターの設計思想は根本的な変革を迫られている。インフラ技術の進化については次のとおりである。

- ① 冷却技術の標準化: 電力密度の劇的な上昇に対応するため、空冷から液冷への移行が進み、採用率は今後 80%に達する見込みである。
- ② エネルギー供給の革新: GW 級の電力需要に応えるため、テスラの「メガパック」を活用した電源バックアップや、小型モジュール炉 (SMRs) といった新電源の模索が始まっている。

(4) 現在のユーザ数から 2030 年のユーザ数の予測

表 3.32 は、2030 年に向けた基盤モデルのユーザ数予測に関する検討の結果をまとめたものである。ユーザ層はヘビーユーザ、研究機関・公的研究所、産業の三つに分類され、それぞれの現状と将来像を示した。

まず、ヘビーユーザ層については、現在、経済産業省の GENIAC に採択されたチームや潜在的需要を含め、約 100 チームが存在すると推定されている。2030 年に向けては、HPC および AI 市場が 2029 年までに倍増することや、AI 中心のコンピューターシステム市場が 2027 年まで年率 30 パーセント以上の高い成長率で拡大することを根拠に、少なくとも 200 チーム規模へ拡大する見通しである。ただし、成長を阻害する要因として、電源と人材の不足が懸念材料として挙げた。

次に、研究機関や公的研究所の動向については、現在は ABCI の利用者や各大学の GPU 利用者を合わせて約 1500 人のユーザが存在すると推定される。将来予測の根拠として、文部科学省の学校基本調査による大学院所属の教授数 12,250 人を参照しており、1 教授 1 研究室との前提の下、理工系に限らず全分野の研究室の約半数が AI を活用すると想定している。これに国立研究開発法人の需要を加味することで、2030 年には 6,000 から 10,000 の研究テーマにおいて AI が利用されると推定している。

最後に、産業分野については、民間事業者の法人契約数は現状では「不明」としたが、産業需要は民間主導の GPU 基盤によって支えられていくものと考えられている。

産業から研究機関まで、また、ベビユーザからライトユーザまで、総じて、2030 年に向けて AI 基盤の利用規模は劇的な拡大を遂げる予測である。

表 3.32 2030 年における GPU ユーザ数の予測

分類	現在公表されている統計数字	現在のユーザ数	2030 年を推定する根拠	2030 年のユーザ数
ヘビーユーザ	経産省の GENIAC に選択されたチームが年間 20 件ある。現在 50 社ほどが公開されている。潜在的な需要も合わせ 100 チームと推定できる。	100 テーマ	(Hyperion 社調査) ・ HPC/AI 市場は 2029 年までに倍増 ・ AI 中心のコンピュータ市場は 2027 年まで年間 30%以上の成長率 ・ 電源と人材の不足が、成長の懸念材料	少なくとも 200
研究機関 公的研究所	ABCI3.0 のユーザ 1,000 人と各大学のセンターでの GPU 利用者を合わせた数、両者合わせて 1,500 人と推定できる。	1500 ユーザ	大学院に所属する大学教授は 12250 人（文部科学省、学校基本調査）、教授 1 名が 1 研究室として、大学院の全研究室（理工系のみではなく全分野）のうち半数程度は AI を利用する前提とする。+国研	6,000 ～ 10,000 テーマの研究
産業	さくら、GMO, SB などの法人契約数	不明	（産業は民間の GPU で支える？）	

3.8.5. 汎用 LLM に関する情報

汎用の LLM については、[5] スタンフォード大 HAI のレポート（Artificial Intelligence Index Report 2025, Stanford Institute for Human-Centered Artificial Intelligence (HAI).）の一部分に計算資源の定量的な情報がまとめられている。また、このスタンフォードのレポートの著者がスタッフとして関わっている EPOCH AI の記事に今後のトレンドの情報がまとめられている。本節は、[5]を中心にまとめた。

(1) 学習データセットサイズと学習時間

モデルの学習に用いられるデータセットが肥大化したことで、学習時間は大幅に長期化している（図 3.17）。「Llama 3.1-405B」のような最先端モデルの中には、学習に約 90 日間を要したものもあるが、これは今日の基準では一般的な期間である。2023 年末に発表された Google の「Gemini 1.0 Ultra」は約 100 日間を要した。

Training dataset size of notable AI models, 2010–24

Source: Epoch AI, 2025 | Chart: 2025 AI Index report

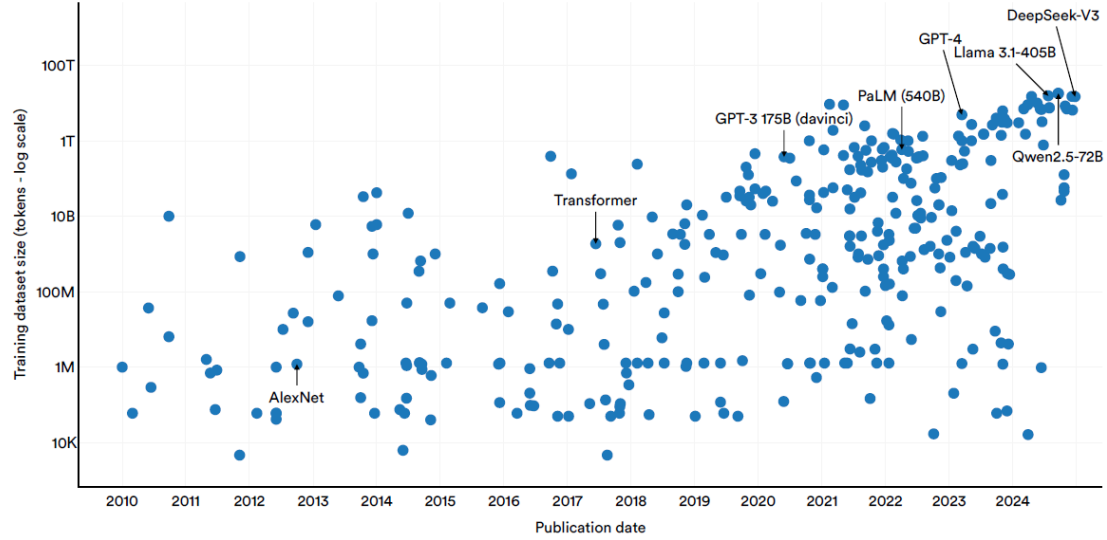


Figure 1.3.13

図 3.16 学習データセットサイズの推移（トークン数） [5]

Training length of notable AI models, 2010–24

Source: Epoch AI, 2025 | Chart: 2025 AI Index report

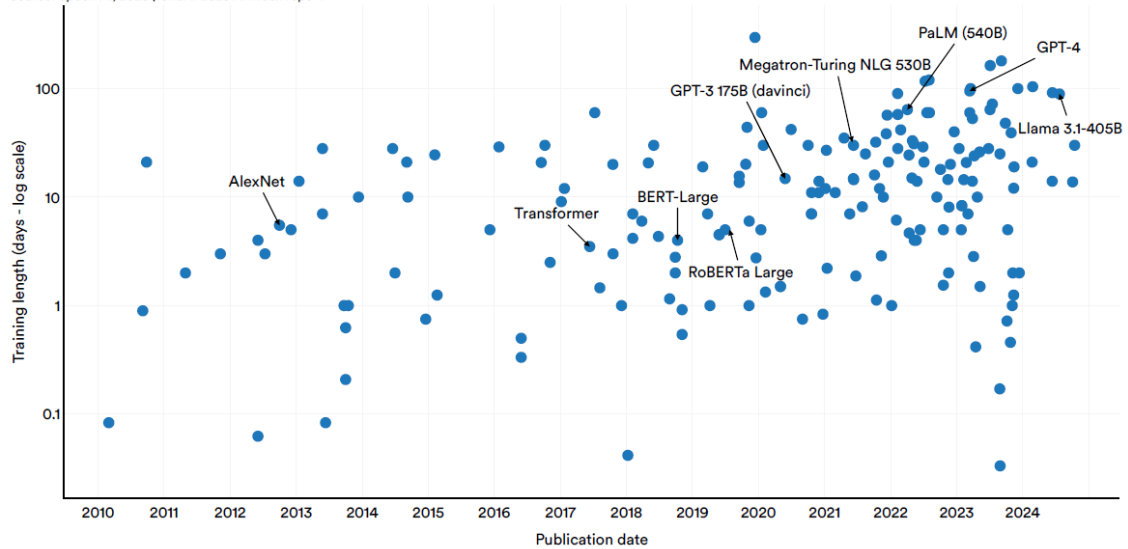


Figure 1.3.14

図 3.17 学習時間の推移 [5]

(2) 学習に必要な計算資源

AI モデルにおける「コンピュート（計算資源）」という用語は、機械学習モデルの学習

および運用に必要な計算リソースを指す。一般的に、モデルの複雑性と学習データセットのサイズが、必要とされるコンピュータ量に直接影響を与える。モデルが複雑であればあるほど、また基となる学習データが大規模であればあるほど、学習に必要なコンピュータ量は増大する。

最終的な学習（ファイナル・ラン）に至る前、研究者は研究開発（R&D）フェーズを通じて数多くのテスト・ランを繰り返す。単一のモデルを学習させるコストは比較的小さく抑えられることもあるが、繰り返される R&D の実行と膨大なデータセットにかかる累積コストは、瞬く間に莫大なものとなる。なお、これらの数値は最終的な学習実行のみを反映したものであり、R&D プロセス全体を含んでいるわけではない。

図 3.18 は、過去 22 年間における主要な機械学習モデルの学習に必要なコンピュータ量を可視化したものである。近年、主要な AI モデルのコンピュータ使用量は指数関数的に増加している。Epoch の推定によれば、主要モデルの学習コンピュータ量はおよそ 5 か月ごとに倍増している。この傾向は、特に過去 5 年間で顕著となった。

図 3.19 は、2012 年以降の主要な機械学習モデルの学習コンピュータ量を強調している。例えば、AI モデルを向上させるために GPU を使用するという現在の標準的な手法を普及させたモデルの一つである「AlexNet」は、学習に推定 470PFLOP を必要とした。2017 年に発表された初代「Transformer」は約 7,400 PFLOP を要し、現在の最先端基盤モデルの一つである OpenAI の「GPT-4o」では、380 億 PFLOP が必要であった。

最先端の AI モデルを構築するには、今やアカデミア（学术界）では到底確保できないほどの膨大なデータ、計算能力、そして資金が必要となっている。主要な AI モデルのほとんどが民間企業から輩出されているが、これは昨年の「AI Index」で初めて強調されたトレンドである。今年、その格差はわずかに縮まったものの、この傾向は依然として続いている。

Training compute of notable AI models by sector, 2003–24

Source: Epoch AI, 2025 | Chart: 2025 AI Index report

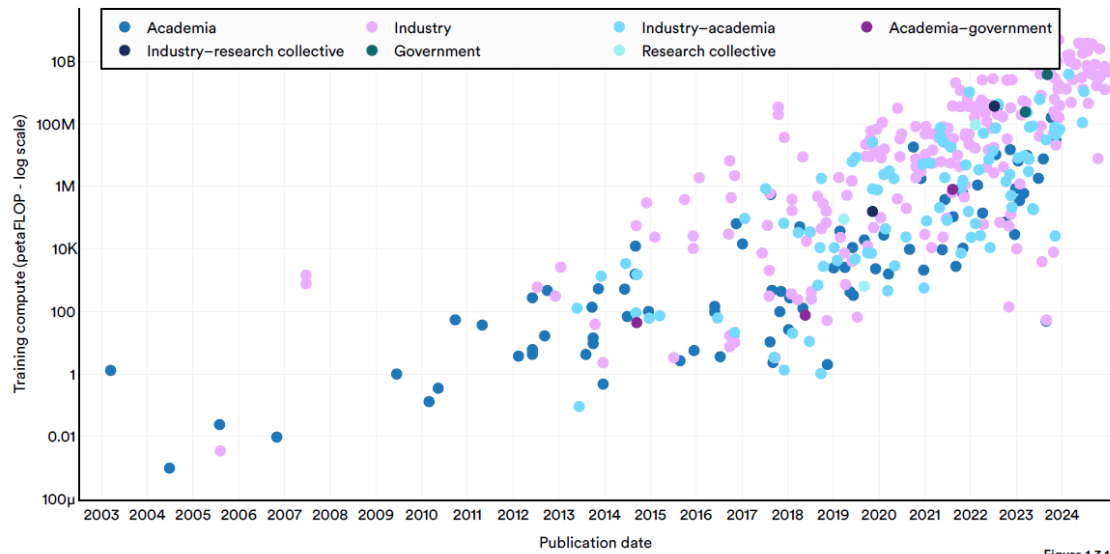


Figure 1.3.15²³

図 3.18 学習に必要な計算資源 [5]

Training compute of notable AI models by domain, 2012–24

Source: Epoch AI, 2025 | Chart: 2025 AI Index report

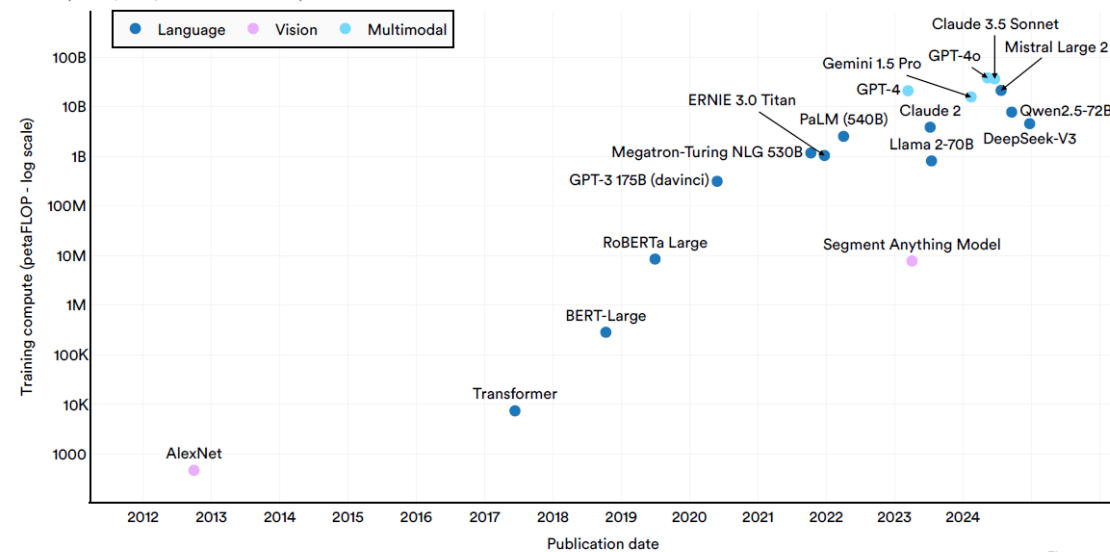


Figure 1.3.16

図 3.19 代表的な基盤モデルの学習に必要な計算資源 [5]

2024 年 12 月の DeepSeek-V3 モデルのリリースは、大きな注目を集めた。特に、多くの主要な LLM よりもはるかに少ない計算リソースで、極めて高い性能を実現したためである。

図 1.3.17 は、アメリカと中国の主要な機械学習モデルの学習コンピュート量を比較したものであり、重要なトレンドを浮き彫りにしている。すなわち、アメリカのトップティア

AI モデルは、一般的に中国のモデルよりもはるかに計算集約的であるという点だ。Epoch AI によると、学習コンピュータ量で見た中国の上位 10 モデルは、2021 年末以降、年間約 3 倍のペースでスケールアップしている。これは、2018 年以降に世界の他の地域（主に米国）で見られる年間 5 倍というトレンドに比べ、かなり緩やかな成長速度となっている。

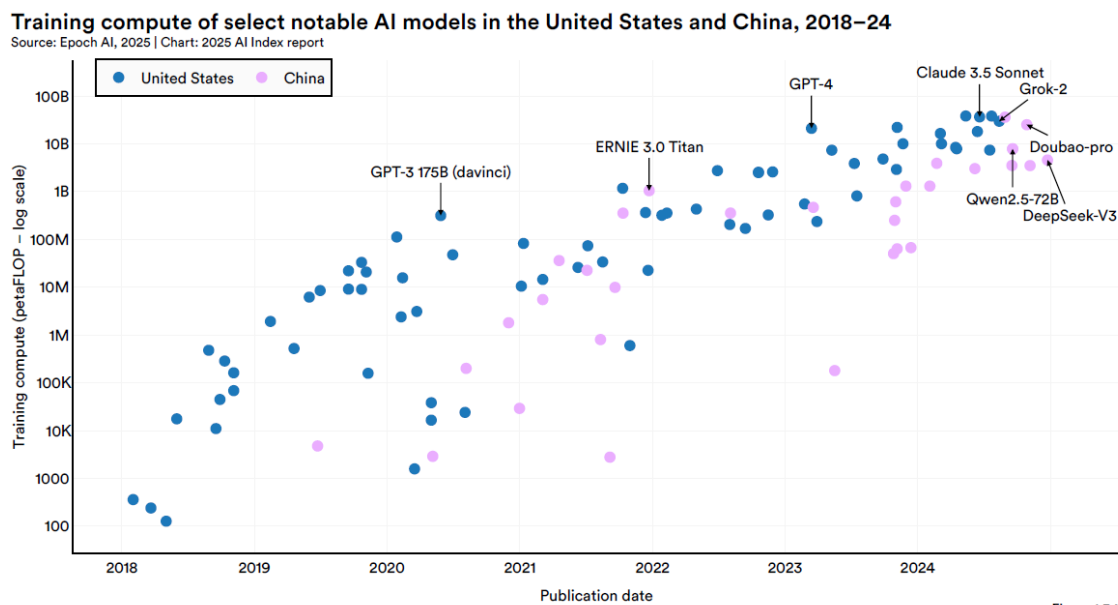


図 3.20 米国と中国の基盤モデルの学習時間の比較 [5]

AI システムの飛躍的なアルゴリズム改善を支えてきた主な要因の一つは、モデルのスケールアップと、かつてないほど大規模なデータセットによる学習である。

しかし、インターネット上の学習データの供給が枯渇しつつある中、このスケールアップ手法の持続可能性や、規模の利益が減少する「データ・ボトルネック」の発生に対する懸念が高まっている。昨年の AI Index では、既存のインターネットデータの可用性や、合成データを用いたモデル学習の可能性など、この議論における様々な要因を調査した。今年の新たな研究は、現在のデータストックが以前の予想よりも長く持ち堪える可能性を示唆している。

Epoch AI は、AI 研究者がいつデータを使い果たすかについての従来の予測を更新した。最新の研究において、同チームはモデル学習に利用可能なデータの総有効ストックをトークン数に基づいて推定した（図 3.20）。AI 学習に頻繁に利用されるウェブクロールデータのオープンリポジトリ「Common Crawl」には、中央値で 130 兆トークンが含まれると推定されている。また、インデックス化されたウェブ全体には約 510 兆トークン、インターネット全体には約 3,100 兆トークンが存在するという。更に、画像の総ストックは 300 兆、動画は 1,350 兆トークンと推定されている。

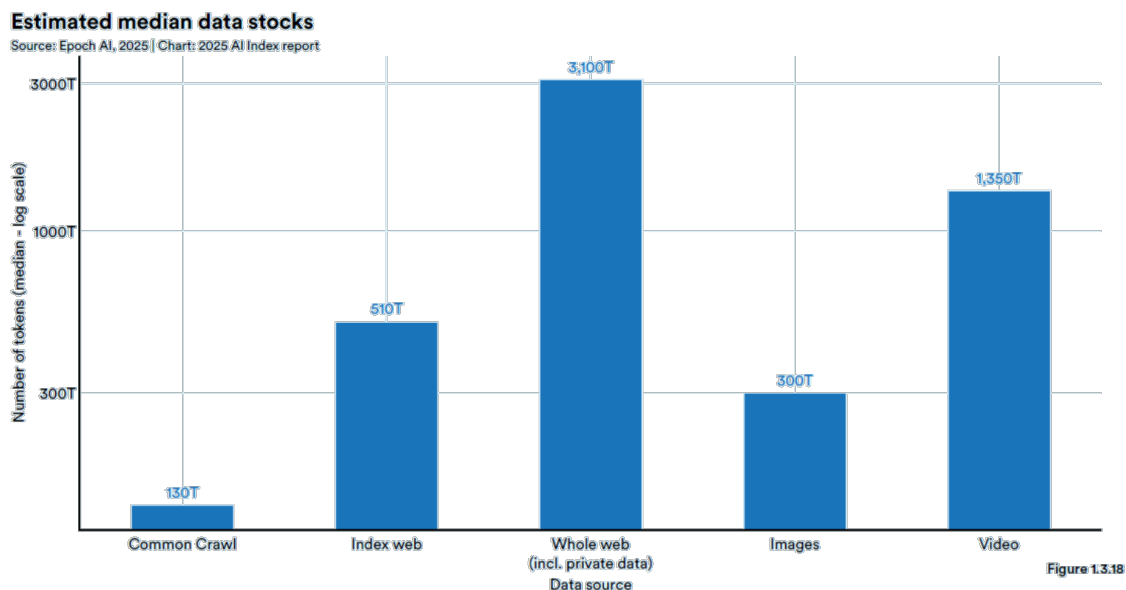


図 3.21 モデル学習に利用可能なデータの総有効ストック [5]

(3) 基盤モデルに必要な資金

図 3.21(上)は、クラウド・コンピュータのレンタル価格に基づき、特定の AI モデルに関連する推定学習コストを可視化したものである。また、図 3.21(下)は、AI Index が推定値を持つすべての AI モデルの学習コストを可視化している。

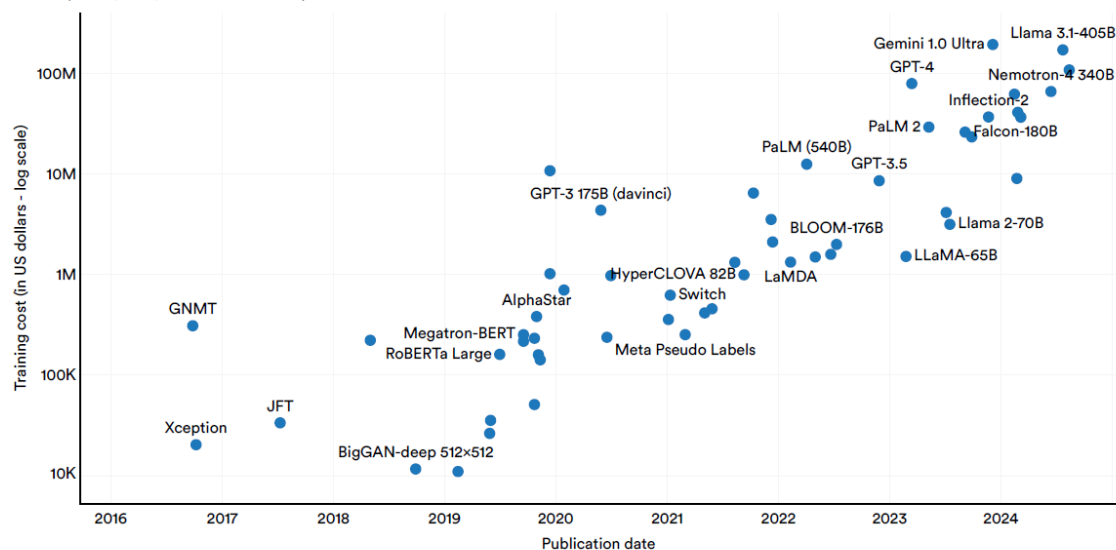
AI Index による推定は、近年モデルの学習コストが著しく上昇しているという疑念を裏付けるものとなった。例えば、2017 年に発表され、実質的にあらゆる現代の LLM の基礎となるアーキテクチャを導入した初代「Transformer」モデルの学習コストは、約 670 ドル（10 万 9 千円）であった。2019 年にリリースされ、SQuAD や GLUE といった標準的な理解度ベンチマークで当時の最先端を記録した「RoBERTa Large」の学習コストは約 16 万ドル（2560 万円）であった。そして 2023 年まで時を進めると、OpenAI の「GPT-4」の学習コストは約 78M ドル（125 億円）に達したと推定されている。

Epoch が 2024 年のモデルの中で学習コストを推定できた数少ない例の一つが「Llama 3.1-405B」であり、その推定コストは 170M ドル（272 億円）にのぼる。AI を巡る状況が競争激化の一途を辿る中、各企業は自社の学習プロセスに関する情報の開示を控えるようになっており、計算コストの推定はますます困難になっている。

これまでの AI Index レポートで確立されているとおり、AI モデルの学習コストとその計算要件（計算リソースへの需要）の間には直接的な相関関係がある。下図が示すように、学習により多くの計算能力を必要とするモデルほど、その学習コストも大幅に高くなっている。

Estimated training cost of select AI models, 2016–24

Source: Epoch AI, 2024 | Chart: 2025 AI Index report



Estimated training cost and compute of select AI models

Source: Epoch AI, 2024 | Chart: 2025 AI Index report

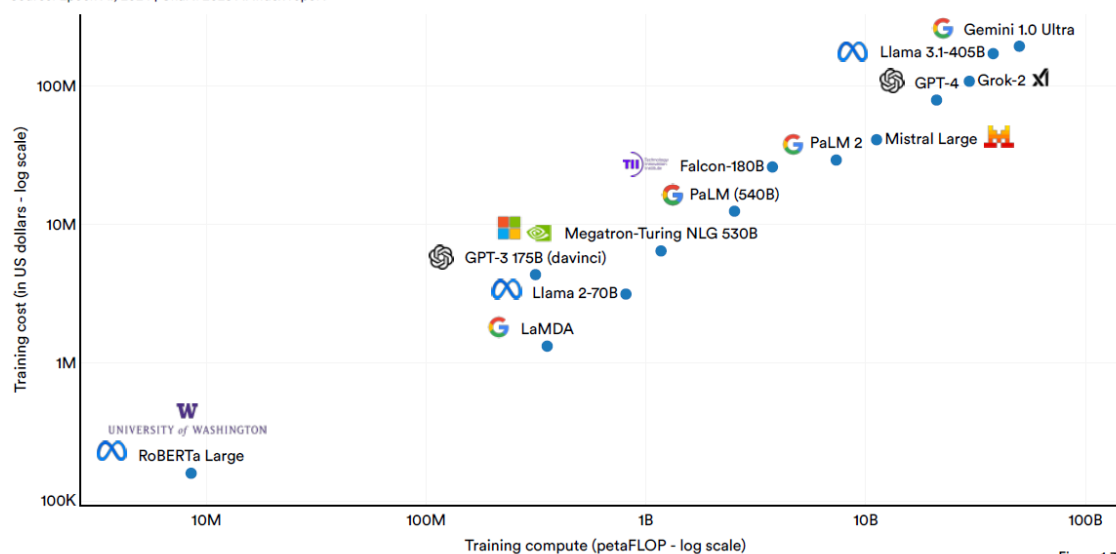


図 3.22 基盤モデルに必要な資金（上）、および、計算資源と必要な資金（下） [5]

(4) 基盤モデルのパラメータ数

本参考文献には、パラメータ数のトレンドに関する掲載は無いが、付録に示す EpochAI の HP において、パラメータ数のトレンドを表示することができる。このトレンドによると、パラメータ数は、9.6 か月で倍増する傾向にある。



図 3.23 パラメータ数のトレンド [5]

(5) EPOCH AI のレポート

本レポートは、前節で示したスタンフォード大 HAI のレポートと相互に関連して作成されたものである。著者の一部重なっており、前節のレポートを更に分析を進めた内容となっている。また、両者で両者を参照している。

<https://epoch.ai/blog/how-much-does-it-cost-to-train-frontier-ai-models>

EPOCH AI のアプローチでは、モデルの学習期間における「ハードウェアの減価償却費」と「エネルギー消費量」に基づいて学習コストを算出している。ハードウェアコストには、AI アクセラレータ・チップ（GPU や TPU）、サーバー、およびインターコネクト（相互接続）ハードウェアが含まれる。特定のモデルにおけるハードウェアの種類や数、および学習期間の特定・推定に当たっては、開発元による公開情報、または信頼性の高い第三者機関のレポートを使用している。また、各モデルの最終学習（ファイナル・ラン）時におけるハードウェアのエネルギー消費量についても推定を行った。この手法を用いて、45 のフロンティアモデル（リリース時に学習コンピュート量でトップ 10 に入っていたモデル）の学習コストを推定した結果、全体的な成長率は年率 2.4 倍であることが判明した。

代替アプローチとして、クラウド上のレンタルハードウェアを使用してこれらのモデルを学習させた場合のコストも算出している。クラウドプロバイダーはチップ 1 時間当たりの固定料金を設定しており、その価格にはエネルギー消費やインターコネクト（相互接続）のコストも含まれているため、この手法による計算は非常に単純である。しかし、多くのフロンティアモデルはクラウドのレンタルではなく開発者が自社で所有するハードウェアで学習されることが多いため、この手法ではコストが過大評価される傾向にある。

この手法を用いた場合、年率 2.6 倍という非常に近い成長率が示された。

エネルギーは総コストに占める割合こそ小さいものの、これらのモデルに必要とされる電力量に関し、**Gemini Ultra** には推定 **35MW** が必要であった。電力要件の歴史的な成長スピードを単純に当てはめると、**AI スーパーコンピュータは 2029 年までに GW 規模の電力供給を必要とすること**を示唆している。

Amortized hardware and energy cost to train frontier AI models over time

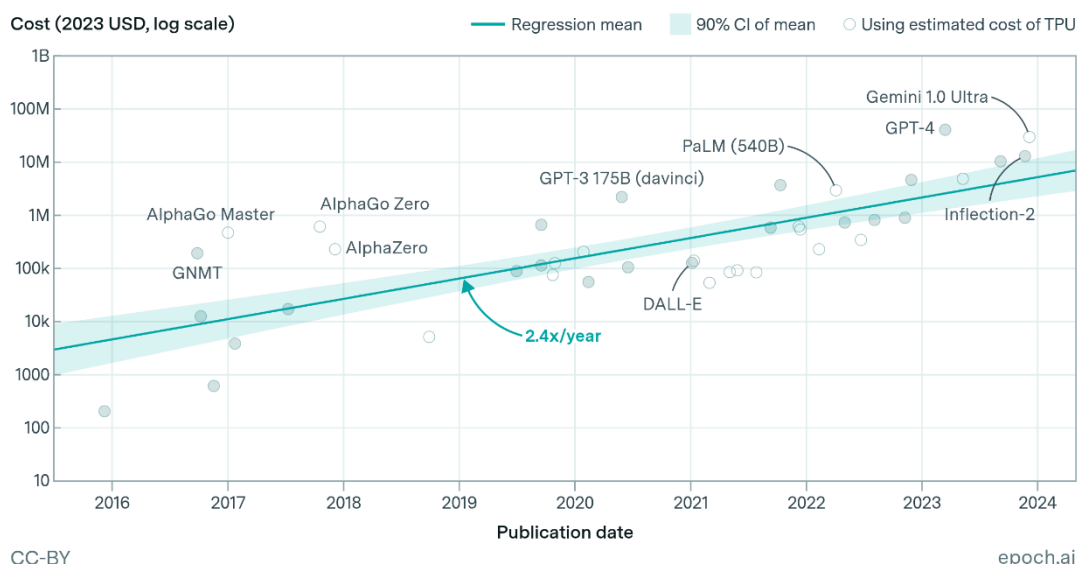


図 3.24 基盤モデルに必要な資金 [6]

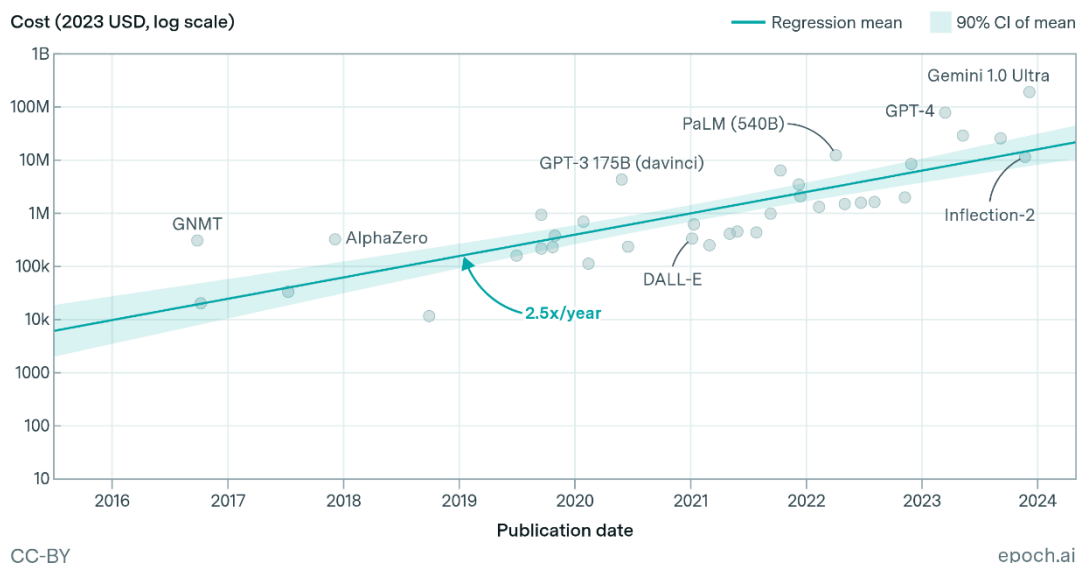


図 3.25 基盤モデルに必要なクラウド資金 [6]

(6) スタンフォード大レポートのまとめ

今後の検討に利用するため、重要な2つの図を示しておく。いずれも、参考文献に掲載され、本報告書で説明をした図に、本調査で書き込んだ図である。

Stanford AI Index Report 2025に基づく分析によれば、LLMの学習用データセットのサイズは、約8か月ごとに倍増している。データ量の換算は1トークン当たり4Bとされており、例えばCommon Crawlの規模は200TBから10PB程度に及ぶ。

一方、著名なAIモデルの学習に投入される計算資源量は、データセットの拡大を上回る速度である約5か月ごとに倍増を続けている。これらの指標は、近年のAI開発において必要とされるデータ量と計算能力の双方が、極めて短期間のうちに指数関数的な拡大を遂げている現状を如実に示している。いずれもデータは、FP16の演算量である。1EFLOPS×1000日相当の演算量をメモリに示した。ちなみに、AI学習等に用いられる混合精度(HPL-MxP)の演算性能において、El Capitanは16.7 EFLOPSを記録している。これに次ぐAuroraは11.6 EFLOPSに達しており、Frontierは11.4 EFLOPSという高い性能を保持している。また、欧州初のエクサスケール機であるJUPITERは、6.25 EFLOPSの演算能力を達成している。

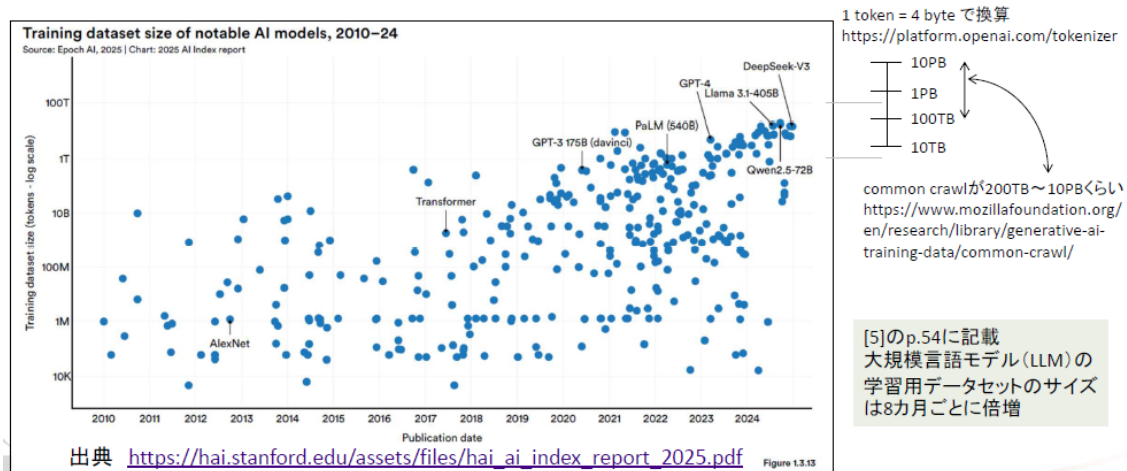


図 3.26 学習用データセットサイズのトレンド

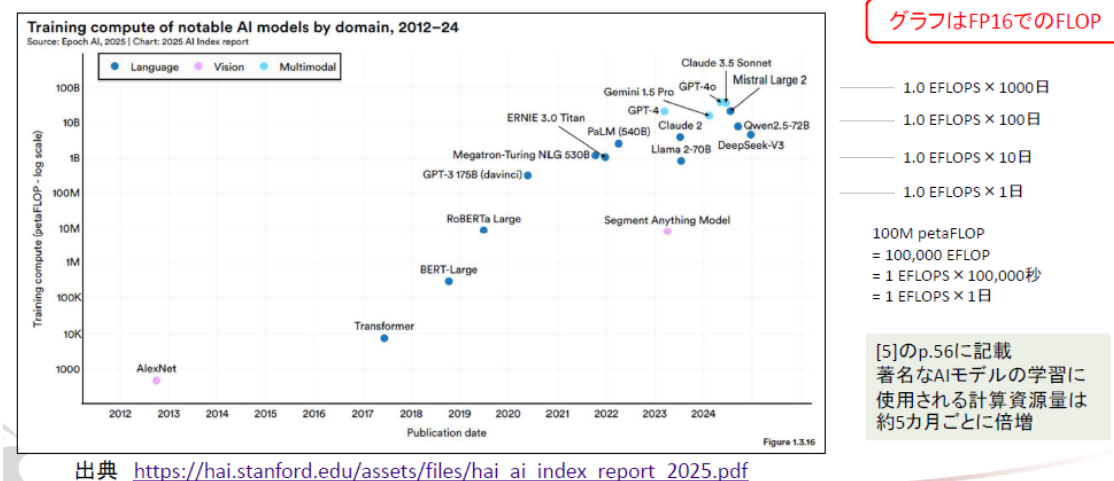


図 3.27 学習に必要な計算資源量のトレンド

(7) 学習データ量に関する補足（倍になる月数の算定）

(a) 引用した文献における説明（Index Report より引用）

2017年に発表され、LLM革命の火付け役として広く認識されているTransformerモデルは、約20億トークンで学習された。2020年までに、初期のChatGPTを支えたモデルの一つであるGPT-3 175Bは、推定3,740億トークンで学習されている。対照的に、2024年夏にリリースされたMetaのフラッグシップLLMであるLlama 3.3は、約15兆トークンもの膨大なデータで学習された。Epoch AIによれば、LLMの学習データセットの規模は、約8か月ごとに倍増している。

The Transformer model, released in 2017 and widely credited with sparking the large language model revolution, was trained on approximately 2 billion tokens. By 2020, GPT-3 175B—one of the models underpinning the original ChatGPT—was trained on an estimated 374 billion tokens. In contrast, Meta’s flagship LLM, Llama 3.3, released in the summer of 2024, was trained on roughly 15 trillion tokens. According to Epoch AI, LLM training datasets double in size approximately every eight months.

(b) EPOCH AI から公表されているデータ

3節で説明する手順により、EPOCH AI のページで表示可能な「Training dataset size」と「Publication date」グラフは下記のとおりである。グラフ上に表示された破線の直線に「doubling time」として「8.0 months」が示されている。



図 3.28 学習データ量に関する推定（EPOCH AI のサイト[6]で表示）

(8) 学習演算量に関する補足（倍になる月数の算定）

(a) 引用した文献に関する説明（Index Report より引用）

なお、示されている数値は最終的な学習実行のみを反映したものであり、R&D プロセス全体を網羅しているわけではない点に注意が必要である。

図 1.3.15 は、過去 22 年間にわたり主要な機械学習モデルに必要とされた学習計算量を可視化したものである。近年、これら主要な AI モデルの計算量使用は指数関数的に増加している。Epoch の推定によれば、主要モデルの学習計算量は約 5 か月ごとに倍増しており、この傾向は特に過去 5 年間で顕著となっている。

These figures reflect only the final training run, not the entire R&D process. Figure

1.3.15 visualizes the training compute required for notable machine learning models over the past 22 years. Recently, the compute usage of notable AI models has increased exponentially. Epoch estimates that the training compute of notable AI models doubles roughly every five months.

(b) EPOCH AI から公表されているデータ

3 節で説明する手順により、EPOCH AI のページで表示可能な「Training compute(FLOP)」と「Publication date」グラフは下記のとおりである。グラフ上に表示された破線の直線に「doubling time」として「5.5months」が示されている。本データは Index Report よりも新しいデータが反映されていることが「roughly every five months」との違いと考えられる。



図 3.29 学習演算量に関する推定 (EPOCH AI のサイト[6]で表示)

(9) (参考) EPOCH AI について

本節は EPOCH AI の HP[6]の about us より引用した。

(a) 目的

Epoch AI は、中立的な視点に立ち、可能な限り最良のエビデンスに基づいて、AI 分野の現状を理解するための支援を行うことを目的として設立された。

Epoch AI の目標は、AI の推進要因、進歩、およびその影響に対する社会の理解を深めることである。特定の意図に左右されない、AI に関する思考の共通の科学的基盤を構築することに注力しており、それによって、この技術に関する意思決定が、入手可能な最良の

データに基づいて行われることを目指している。

(b) 経緯

Epoch AI は 2021 年、AI に関するデータの収集と分析を行い、数百もの機械学習モデルから情報をキュレーションする有志グループとして活動を開始した。彼らは、AI 業界には「ハype（過剰な期待）」や「バيبス（主観的な雰囲気）」ではなく、より高い厳密性と実証主義が必要であると確信していた。2022 年に発表した学習計算量の推移を分析する論文が大きな反響を呼んだことを受け、同グループは AI の動向調査の取組を更に拡大させるため、組織としての Epoch AI を設立した。

ここ数年で、Epoch AI は学際的かつグローバルで、知的好奇心に基づいたチームへと成長を遂げた。現在は、AI 技術の急速な進化を理解し、その進路を見極めようとする世界中の個人や組織を支援することに尽力している。

4. 将来的な計算基盤整備に係る提案

4.1. 分野別計算資源特性の分析

各分野におけるいくつかの基盤モデルの具体的な例を示し、その分野における特性を示す。それを基に、必要とされる計算資源量を分析、整理する。

(1) ライフサイエンス分野

ライフサイエンスでは、大規模な分子動力学シミュレーション、およびAI創薬のための超大規模な深層学習トレーニングと推論処理能力が必要である。この目的には、GPUを中心としたHPCが最適である。計算スペックを決定付ける要因として、以下の特徴が挙げられる。

- ・ コンテキスト長の増大：DNA配列の解析（HyenaDNAなど）では、100万塩基といった超長鎖を一度に処理する必要があり、メモリエフィシェンシーの高いアーキテクチャが求められる。
- ・ マルチモーダル処理：タンパク質の「配列・構造・機能」を同時に扱うESM-3や、多分子間相互作用を扱うAlphaFold 3は、単一モダリティのモデルに比べパラメータ数と計算量が飛躍的に増加する。
- ・ 物理シミュレーションとの融合：P-FEPのように物理化学の原理に基づいた厳密な計算（自由エネルギー摂動法）をAIと組み合わせる場合、モデルの重み学習とは別に、膨大な物理演算を並列処理するスーパーコンピュータ級の資源が必要となる。

(2) 材料科学分野

材料科学では、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）のための大規模な並列計算と、LLMなどを活用した探索的ワークロードが必要である。ここではAIアクセラレータを活用したシミュレーション環境が必要である。基盤モデル構築に必要な計算機スペック（目安）として、モデルの学習には、単体性能だけでなく、複数のGPUを高速につなぐネットワーク（InfiniBand等）を備えたサーバー構成が一般的である。

他の分野も同様であるが、構築コストには2つの壁がある。基盤モデルを構築するには、AIの学習（Training）だけでなく、その前のデータ生成（DFT計算）に莫大なコストがかかる。

- ・ データ生成の壁（DFT計算）：GNoMEの場合、220万構造を最適化するために膨大なDFT計算を行った。これは数万～数十万CPUコアを数か月稼働させる規模の演算量である。MatterSimも1,700万件の高品質なデータを揃えるために、Microsoftのクラウド資産（Azure）をフル活用している。
- ・ モデル学習の壁（GPU学習）：MACE-MP-0の学習には、40～80枚のH100 GPU

を使用し、10～20 ノードに分散させて約 2,600 時間を費やした。MatterGen（拡散モデル）は、8 枚の A100 GPU を数日間動かし続けることで収束するが、最適なパラメータを見つけるための試行錯誤を含めると、更に多くのリソースを消費する。また、A-Lab（自律型ラボ）の構築スペック A-Lab の場合、計算機スペック以上に「ハードウェア（物理設備）」が重要である。

- ・ 計算機：実験レシピ生成用の LLM を実行するためのサーバー、または API 利用環境である。
- ・ 物理設備：産業用ロボットアーム、自動計量器、自動 XRD（X 線回折装置）、プログラム制御可能な電気炉などである。

表 4.1 材料分野での計算機構築容量

項目	小～中規模な構築 (MACE-MP-0 級)	大規模な構築 (MatterSim / GNoME 級)
GPU 数	40 枚 ～ 80 枚	数百枚 ～ 千枚規模
GPU モデル	NVIDIA H100 (80GB) / A100	NVIDIA H100 / Google TPU v4
学習時間	約 2,600 GPU 時間 (約 1～2 週間)	数週間 ～ 数ヶ月以上
ノード間接続	InfiniBand (200-400 Gbps)	InfiniBand / NVSwitch
システムメモリ	512GB ～ 1TB 以上	数 TB 以上の分散メモリ
ストレージ	数 TB の高速 NVMe SSD	数百 TB 規模の分散ストレージ

(3) 地球環境分野

地球環境分野（衛星リモートセンシング領域）では、地球全域を対象に数十年分の観測データを学習する必要があるため、演算性能/メモリ/ストレージの全ての面で最高水準が要求される。光学/SAR 衛星画像・気象再解析データ・テキスト情報等を統合して学習に用いる「マルチモーダル学習」や、ラベル無しリソースから、自らその意味合いを見出して学習を進めていく「ゼロショット学習(自己教師あり学習)」の普及も進んでおり、パラメータ数の膨らみがちな ViT 系モデルの性質も相まって、公開されている主要データセットの総量は既に 100PB 規模に達している(2025 年末時点)。今後、更なる増加が見込まれており、より少ない学習リソースで済むモデルアーキテクチャの開発も並行して進められている[2]。

(4) 気象分野

気象学では、天気予報・気候変動予測のための準リアルタイムでの超並列計算処理能力と、AI による予測モデル実行能力である。ここでは、専用の高性能 HPC システムと、高速ネットワークによる大容量データの転送が必要である。

気象分野のアーキテクチャは、時系列データの時間的依存関係に特化した RNN 系、空間的特徴抽出に優れた CNN/GNN 系、そして長期依存関係を効率的かつ高精度に捉える Transformer 系の大きく 3 つに大別される。今後は「全球アンサンブル予報」「データ同

化」が標準化し[13]、高精細化（1km 解像度）・アンサンブルメンバ数の増加が進むことで、生成データ量は現在の 64～100 倍に達し、1 回の実行当たりの出力が 50PB を優に超える可能性も指摘されている[14]。この爆発的なデータ増大に対応するため、100 万～1 億 CPU コア規模の計算資源、高速分散ファイルシステム、および PB 級の階層型ストレージ管理を備えたエクサスケール・コンピューティング環境の整備が、持続可能な予測技術開発において喫緊の課題となっている。

(5) 海洋分野

海洋分野は「大気海洋分野」として一体的に捉えられることが多いことから、基本的には気象分野相当の計算資源特性・性能が必要になるものと考えられる。これには高速演算性能やファイル I/O の確保、学習データ高精細化に伴うストレージ負荷の膨大化が含まれる。

一般に防災分野の学習には、メディア報道(テキスト情報)・防犯カメラ映像・緊急通報の音声信号等を統合して入力に使用する「マルチモーダル学習」が用いられる [2]。社会的な重要性も鑑みると、数百～数千 GPU 規模を備える CPU-GPU hybrid クラスタ環境、ノード当たり 80GB 以上の潤沢な VRAM、400GB/s 以上の低レンテンシ・高スループット通信環境 (InfiniBand)、高速並列分散ファイルシステム、および PB 級の大規模ストレージ程度の構成は必要になるものと考えられる [3][4][5]

(6) 防災分野

一般に防災分野の学習には、メディア報道(テキスト情報)・防犯カメラ映像・緊急通報の音声信号等を統合して入力に使用する「マルチモーダル学習」が用いられる [2]。社会的な重要性も鑑みると、数百～数千 GPU 規模を備える CPU-GPU hybrid クラスタ環境、ノード当たり 80GB 以上の潤沢な VRAM、400GB/s 以上の低レンテンシ・高スループット通信環境 (InfiniBand)、高速並列分散ファイルシステム、および PB 級の大規模ストレージ程度の構成は必要になるものと考えられる [3][4][5]。

4.2. 研究プロセスに着目した分類別特性の分析

4.2.1. 知識体系化と知見抽出

(1) 基盤モデル

知識の統合と理解の基盤モデルでは、人間の能力を拡張し、科学研究プロセスにおける知識の統合と理解を担う。膨大な科学文献やデータを学習することで、学際的な知識の橋渡しを行い、研究の潮流把握や仮説生成を支援する。また、自然言語だけでなく、数式やプログラミングコード、更にタンパク質配列 (ESM 等の基盤モデル) やゲノム配列

(HyenaDNA 等の基盤モデル) を扱うドメイン固有のモデルへと発展している。これにより、研究者が数か月を要する文献調査や初期座標の作成に要する時間を短縮する役割を確立しつつある。

一方で、事実と異なる回答を行う不正確性や、トレーニングデータに由来するバイアスの排除、高度なコンテキスト理解の維持が、信頼性の高い科学的発見を支える上での重要な技術的課題となっている。

(2) 計算基盤

知識の統合と理解の計算基盤の構築・運用には、極めて巨大な計算資源と持続可能なエネルギー供給が不可欠である。計算基盤としては、数千基以上の GPU を並列稼働させるクラスターが前提となり、学習効率を最大化するためのハードウェア技術の最適化が進められている。

また、Python 等の多様なライブラリを柔軟に構築できるユーザ環境の提供や、ジョブスケジューラとの緊密な連携が求められる。将来的に医療や生命科学のビッグデータをスケールさせるためには、現行のフラッグシップマシンよりも高い実効性能が必要である。

4.2.2. 現象予測と計算加速

(1) 基盤モデル

現象の予測に関する基盤モデルは、物理法則や化学反応を学習し、未知の現象を高速・高精度に予測する「エミュレータ」として機能する。従来の第一原理計算では膨大な時間を要した物性予測や材料の安定性評価を、学習済の AI (MLP-MD や GNOME 等) が代行することで、現象の追跡を数万倍に加速する。これらのモデルは、テキストだけでなく 3 次元構造や時系列、物理定数等のマルチモーダルな情報を扱い、特定の現象に限定されない普遍的な予測能力を備える。また、求めたい特性から分子構造を導く逆問題の解決を可能にし、広大な探索空間から革新的な材料を直接提案する。

課題としては、AI 予測のブラックボックス性による再現性の保証や、物理法則に厳密に準拠した保存則の維持が挙げられ、PINN 等の手法による物理情報と AI モデルの融合が、モデルの信頼性向上に向けた主要な研究課題となっている。

(2) 計算基盤

シミュレーションを加速するサロゲートモデルの構築には、HPC と大規模 GPU リソースの高度な融合が要求される。この基盤には、物理シミュレーションを担う CPU ノードと、深層学習を担う GPU ノードがシームレスにデータ連携できるマルチアーキテクチャ環境が不可欠である。特に、シミュレーション過程の一部を AI に置換するワークフローでは、頻繁なデータ通信がボトルネックとなるため、低レイテンシのネットワークや、CPU

上での推論を高速化するエンジンの最適化が鍵を握る。

次世代の計算基盤には、従来の「富岳」の10倍以上の性能に加え、不確かさの定量化を目的とした数千ケース規模のアンサンブル計算を並列実行できる高いスループットと、巨大な学習データセットを高速に処理するストレージ I/O 性能の両立が求められている。

4.2.3. 実験・検証の自律化

(1) 基盤モデル

自律化と最適化に関する基盤モデルは、実空間への物理的介入を最適化し、研究サイクルの自律化を実現する AI である。これらは複雑な実験環境に対して、これまでの結果を踏まえて次に試すべき条件や操作を自律的に決定・実行する。特徴として、ノイズや不確実性を含むリアルワールドのデータに対応できる頑健性を持ち、複数の計測手法から得られるマルチモーダルな情報を統合して物理的なパターンを抽出する。例えば、先端計測では、高次元の計測データから計測の不確かさを定量化しつつ、リアルタイムで構造特定を行う。これにより、人間が気づかない微細な物理的兆候の検知や、死蔵されていた断片的なデータからの知見抽出が可能となる。

今後は、大規模言語モデルを活用し、自然言語による指示で物理的な実験パラメータを制御する「フィジカル AI」としての高度化が期待される。

(2) 計算基盤

実験・実測を支える計算基盤には、実験装置と計算リソースを高度に接続する「リアルタイム性」と「データインフラの信頼性」が求められる。自律実験ロボットや超並列細胞培養装置が24時間稼働し続ける環境では、実験現場で発生する高頻度データを即座に処理し、次のアクションを決定するための低レイテンシの計算フローが必要となる。計算基盤の要件としては、複数の拠点に分散した計測装置と中央の大型スーパーコンピュータを高速連携させるデータ共有プラットフォーム（European Open Science Cloud (EOSC)やNII研究データ基盤（NII Research Data Cloud : NII RDC）等）の整備が極めて重要である。

また、実験者が現場でライブラリを容易に導入できる柔軟なソフトウェア環境と、AIがジョブ制御を行う際のセキュリティ上の安全性を担保するガバナンス設計の両立が、実社会実装に向けた不可欠な要素となっている。

4.3. 基盤モデルのパラメータ数およびデータ量の分析

(1) 分析範囲

ここでは、各分野の代表的な基盤モデルに対して、アーキテクチャとパラメータ数に着目して、分析を行った。対象とした基盤モデルは次のとおりである。

表 4.2 ライフサイエンス分野基盤モデルのアーキテクチャとパラメータ数

モデル名	開発元	アーキテクチャ	パラメータ数
ESM-3	EvolutionaryScale	Transformer	98,000,000,000
HyenaDNA	Stanford Univ.	Hyena (非 Trans/非 GNN)	(1,600,000)
DNABERT-2	UCSD 等	Transformer	117,000,000
scGPT	Toronto Univ.	Transformer	53,000,000
Geneformer	Broad Institute	Transformer	316,000,000
AlphaFold 3	Google DeepMind	Diffusion / Transformer	500,000,000

表 4.3 材料分野基盤モデルのアーキテクチャとパラメータ数

モデル名	開発元	アーキテクチャ	パラメータ数
GNoME	Google DeepMind	GNN (等変/MPNN)	5,000,000
MatterSim	Microsoft	GNN (等変/MPNN)	130,500,000
MACE-MP-0	Cambridge Univ.	GNN (等変/MPNN)	4,690,000
MatterGen	Microsoft	Diffusion / GNN	46,800,000
UMA	Meta (FAIR)	GNN (等変/MPNN)	1,400,000,000

表 4.4 気象・環境分野基盤モデルのアーキテクチャとパラメータ数

モデル名	開発元	アーキテクチャ	パラメータ数
Earth-2	NVIDIA	Diffusion / CNN	2,500,000,000
FourCastNet3	NVIDIA	AFNO (Fourier 系)	300,000,000
WeatherNext2	Google DeepMind	Transformer (Swin)	180,000,000
NeuralGCM	Google / ECMWF	Hybrid (物理+GNN)	36,700,000
GenCast	Google DeepMind	Diffusion / GNN	57,000,000
GraphCast	Google DeepMind	GNN (MPNN)	36,700,000
Aurora	Microsoft	Transformer (Swin)	1,300,000,000
ClimaX	Microsoft	Transformer (ViT)	107,000,000
AIFS ENS	ECMWF	GNN (Graph)	100,000,000
AtmoRep	ECMWF/JSC/CERN	Transformer (BERT)	2,400,000,000
Prithvi-WxC	NASA / IBM	Transformer (ViT)	2,300,000,000
Pangu-Weather	Huawei	Transformer (Swin)	256,000,000
GGO	IBM	Transformer (ViT)	50,000,000
GLONET	Mercator Ocean	GNN (Global)	30,000,000
WV-Net	Hawaii Univ.	Transformer	31,000,000
TerraMind	IBM/ESA	Transformer	50,000,000
Prithvi-EO	NASA / IBM	Transformer (ViT)	600,000,000

(2) 各モデルのアーキテクチャ

AI for Science 基盤モデルは、対象データの幾何学的性質や物理的制約に基づき、独自の技術的進化を遂げている。ライフサイエンス分野では、タンパク質やゲノムの配列情報を扱うため、広域的なパターン把握に長けた **Transformer** が主役となっている。特に 980 億ものパラメータを持つ **ESM-3** に代表されるように、数十億件の膨大なデータに含まれる複雑な多様性を吸収するため、汎用 **LLM** に近いスケールアップが進行しているのが特徴である。

一方、材料科学分野では、原子や結晶の立体的な繋がりを表現するグラフニューラルネットワーク (**GNN**) が主流である。技術的には、回転や反転といった操作に対して物理的一貫性を保つ「等変性」などの空間的対称性をモデルに組み込むことで、数百万から 1.5 億程度の比較的小規模なパラメータ数でも、高精度な物性予測と安定性を効率的に実現している。

気象・地球科学分野においては、画像的な文脈抽出を行う **Vision Transformer** と、地球の計算メッシュを扱う **GNN** が併用されている。この分野のパラメータ数は 3,000 万から 30 億規模であり、流体力学等の物理法則が強力な制約として機能するため、**LLM** ほどの巨大化をせずとも高精度な確率的予報が可能である。更に、AI の高速性と従来のシミュレーションを融合した **NeuralGCM** のようなハイブリッド型モデルも、信頼性の高い予測において重要な役割を担っている。

(3) 分析結果

汎用 **LLM** と AI for Science における **Transformer** 系モデルのパラメータ数を比較すると、AI for Science 基盤モデルの規模は汎用 **LLM** と比較して 1 桁から 3 桁ほど小さい。このため、仮に学習データ量が同一であれば、必要となる演算量も同様に 1 桁から 3 桁少なくなると評価される。また、モデル規模の拡大ペースに関しては汎用 **LLM** と類似した傾向にあり、約 8.9 ヶ月で倍増する伸び率を維持している。



図 4.1 ライフサイエンス、材料、気象分野のパラメータ数と発表年

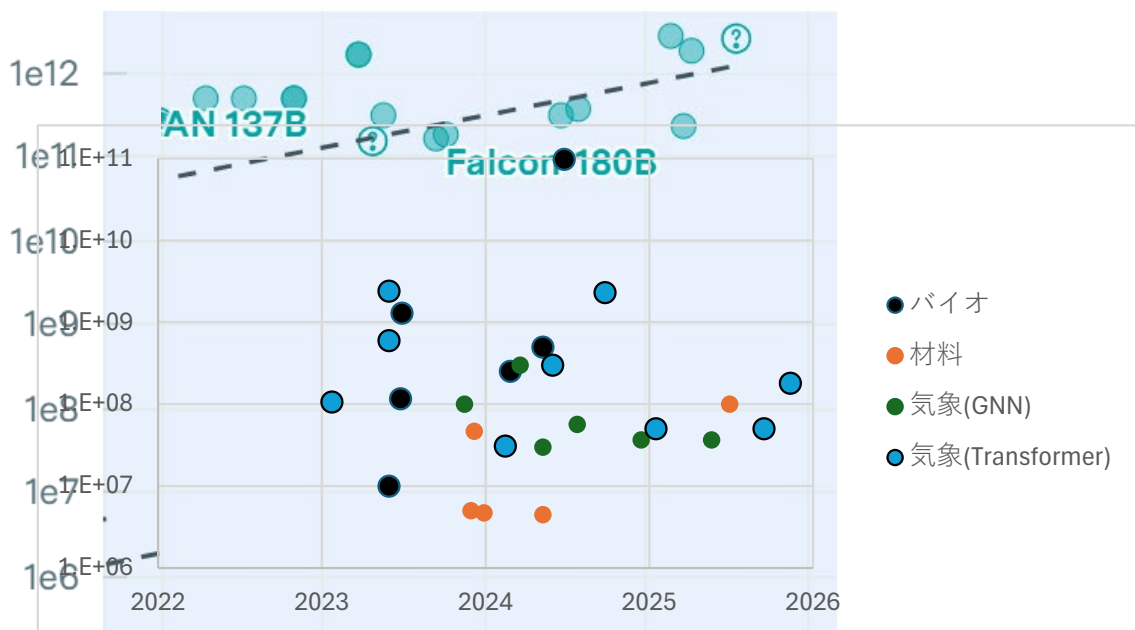


図 4.2 ライフサイエンス、材料、気象分野のパラメータ数と発表年の LLM との比較

(4) パラメータ数のまとめ

AI for Science における基盤モデルは、対象とする分野の物理的特性やデータ構造に応じ

て、アーキテクチャやパラメータ規模が明確に使い分けられている。ライフサイエンス分野では **Transformer** が主役となっており、特に **ESM-3** に代表される 980 億パラメータ規模のモデルが登場するなど、汎用 **LLM** に近いスケールアップが進行している。これは、数十億件に及ぶ膨大なデータ蓄積と、ゲノムやタンパク質の配列情報の複雑さを吸収するために、モデルの巨大化が不可欠なためである。

対照的に、材料科学分野では原子間のつながりを表現するグラフニューラルネットワーク（**GNN**）が主流であり、パラメータ数は数百万から 1.5 億程度と比較的小規模に抑えられている。これは、物理的な空間の対称性や、回転などの操作に対して不変な結果を出す「等変性」をモデルに組み込むことで、少ないパラメータ数でも効率的に学習し、十分な精度を実現できるからである。また、気象・地球科学分野においては、画像処理に適した **Vision Transformer (ViT)** とメッシュを扱う **GNN** が併用されており、パラメータ数は 3,000 万から 30 億規模が主流となっている。この分野では扱うデータ自体は極めて膨大であるものの、流体力学などの物理法則による制約が存在するため、**LLM** ほどの巨大なパラメータを必要とせず高精度な予測が可能となっている。更に、**AI** の高速性と従来のシミュレーションを組み合わせた **NeuralGCM** のようなハイブリッド型モデルも登場している。

全体として、広域的な文脈やパターンを読み取るタスクでは **Transformer** が圧倒的な優位性を持ち、点と線の立体的なつながりや物理的な近接作用を重視するタスクでは **GNN** が中心的な役割を果たしている。このように、各分野はそれぞれの科学的要請に基づいた独自の進化を遂げている。

表 4.5 各分野のパラメータ数の特徴

比較項目	ライフサイエンス	材料科学	気象・地球科学
アーキテクチャ	Transformer (配列重視)	GNN (結晶構造を利用)	GNN / Transformer (混合)
パラメータ数	1 億 ～ 1000 億	100 万 ～ 2 億	3000 万 ～ 30 億
特徴	配列の理解	物理的な対称性と安定性	高速な推論と確率的予報

(5) 基盤モデルの学習に利用するデータ量

ライフサイエンス、材料、気象の各分野における **AI** モデルの学習データ量の推移（2022 年から 2026 年まで）を示したものである。縦軸は学習データのサイズを対数スケールで表しており、横軸はモデルの公開時期を示している。同様の分析範囲におけるデータ量をプロットした。

- ・ 気象分野の突出: 気象分野、特に **Transformer** アーキテクチャを採用したモデルは、全分野の中で最も巨大なデータ量を利用する傾向にあり、最大で 1PB 近くに達している。**GNN**（グラフニューラルネットワーク）を用いたモデルも、10TB～100TB 超の極めて大きなデータ量で学習されている。
- ・ ライフサイエンス分野の急拡大: ライフサイエンス分野のモデルは、2023 年時点で

は 1GB 程度の比較的小規模なものも見られたが、2024 年半ばには 10TB~100TB 規模へと、学習データ量が急速に増大している。

- ・ 材料分野の規模感: 材料分野のモデルは、他の 2 分野と比較すると相対的に学習データ量が少なく、概ね 10GB から 1TB の範囲に分布している。
- ・ 全体の傾向: いずれの分野においても、公開時期が新しくなるにつれて学習データ量が指数関数的に増加しており、2026 年に向けて AI for Science 基盤モデルの巨大化が加速している現状が示されている。



図 4.3 基盤モデルの学習に利用するデータ量と発表年のトレンド

4.4. 2030 年に必要な計算基盤の推定

(1) 2030 年の推定

2030 年に向けた AI for Science の基盤モデルの開発においては、演算量とデータサイズの双方が指数関数的に拡大する見通しである。

演算量に関しては、現状、AI for Science 基盤モデルは汎用 LLM に比べて 1 桁から 3 桁少ない水準にある。しかし、AI モデルの学習に要する演算量は 5 か月ごとに倍増しており、このペースが維持されれば 4 年間で約 750 倍に達する。現在、汎用 LLM の学習には「1 EFLOPS の性能で 100 日間」に相当する演算量が必要とされているが、4 年後にはこれが「500 EFLOPS で 150 日間」という極めて巨大な規模に膨れ上がる計算となる。AI for Science 基盤モデルはこの汎用 LLM の 0.1%から 10%程度の演算量で済むと仮定しても、

「500 EFLOPS で 0.15 日間から 15 日間」の連続稼働が必要になる。

データサイズについても同様の傾向にあり、学習用データセットのサイズは 8 カ月ごとに倍増し、4 年間で 64 倍となる予測である。現状、AI for Science の学習データ量は 100 TB から 1,000 TB 程度であるが、4 年後には 6.4 PB から 64 PB という、PB 級の規模に達する。

これらの予測に基づき、2030 年時点での具体的なリソース需要を試算する。例えば、国内で 200 の主要な研究チームが同時に活動すると仮定した場合、モデルを 1 回学習させるだけでも、合計で「500 EFLOPS の性能を 30 日間から 3,000 日間」占有する規模の演算資源が求められる。実際の開発プロセスでは、試行錯誤やハイパーパラメータ調整のためにこの 10 倍から 100 倍のリソースが必要となるため、需要は更に膨大になる。データストレージについても、複数のテーマが同時進行することを考慮すると、数百 PB から最大で 640 PB 程度の容量が必要となる。これらの莫大なリソース需要を、次世代スーパーコンピュータ「富岳 NEXT」や HPCI、そして民間の GPU 基盤を総動員して支えていく必要がある。

表 4.6 2030 年に必要な計算基盤

項目	2026 年現状 (目安)	伸び率 (4 年間)	2030 年予測 (1 モデル当たり)	2030 年全体需要 (200 ユーザ想定)
学習演算量	汎用 LLM の 0.1%~10%	約 750 倍 (5 カ月で倍増)	500 EFLOPS × 0.15~15 日	500 EFLOPS × 30 ~3,000 日※試行錯 誤を含めこの 10~ 100 倍が必要
学習データ サイズ	100 ~1,000 TB	約 64 倍 (8 カ月で倍増)	6.4~64 PB	64~640 PB(同時進 行テーマを考慮)

(2) 必要な GPU 数

本資料は、2030 年に FP16 精度で 500 EFLOPS の演算性能を実現するために必要な GPU 数を試算したものである。現在、世界最高峰の演算性能を誇る El Capitan は 44,544 基の GPU で約 16.7 EFLOPS、JUPITER は 24,000 基で 6.25 EFLOPS の HPL-MxP 性能を達成している。目標とする 500 EFLOPS は JUPITER の 50 倍に相当する規模である。GPU のロードマップによれば、2023 年の Hopper 世代から 2028 年の Feynman 世代に向けて 1 基当たりの性能は向上し続け、2030 年には単体性能が現在の 10 倍に達すると見込まれる。この性能向上を加味した結果、2030 年において 500 EFLOPS 級の計算機を構築するには、合計で約 12 万基の GPU が必要であると算出される。これは現在の主要スーパーコンピュータの GPU 搭載数を大幅に上回る、極めて大規模なシステム構成を想定した予測となっている。

図 4.4 現在のエクサスケールスーパーコンピュータとその性能および GPU 数

スーパーコンピュータ名	GPU 総数 (基)	1 ノード構成	FP16 Rpeak (EFlop/s)	搭載アクセラレータの種類	HPL-MxP 性能 (EFlop/s)	FP16 Rpeak (EFlop/s)	(参考) FP64 Rpeak
El Capitan	44,544	4 基 / ノード	29.1	AMD Instinct MI300A (APU)	16.7	約 25.0 ~ 30.0	2.74 EFlop/s
Aurora	63,744	6 基 / ノード	53.4	Intel Data Center GPU Max	11.64	約 20.0 ~ 22.0	1.98 EFlop/s
Frontier	37,632	4 基 / ノード	14.5	AMD Instinct MI250X	11.39	約 18.0 ~ 20.0	1.71 EFlop/s
JUPITER	24,000	4 基 / ノード	23.7	NVIDIA GH200 (Superchip)	6.25	約 10.0 ~ 12.0	1.25 EFlop/s

表 4.7 NVIDIA の GPU ラインアップ

世代	代表チップ名	登場時期(予定)	FP16 Rpeak (1 基当たり)
Hopper	GH200 (H100)	2023 年	約 1.0 PFlop/s
Blackwell	GB200 (B200)	2024-25 年	約 2.2 ~ 2.5 PFlop/s
Rubin	R100	2026 年	約 4.0 ~ 5.0 PFlop/s
Feynman	F100 (仮)	2028 年	約 8.0 ~ 10.0 PFlop/s

4.5. AI for Science 計算基盤のユーザビリティ向上に向けた方策

AI for Science を真に日本の科学技術力向上に結びつけるためには、単に計算資源のスペックを追求するだけでなく、それを研究者が使いこなせる「ユーザビリティ」の確立が不可欠である。現状、我が国の計算環境においては、GPU を中心とした最新の演算基盤を自在に操れる研究者や技術者が極めて不足していることが、深刻なボトルネックとなっている。かつて日本が直面した「ベクトル型からスカラー型へ」というアーキテクチャの転換を乗り越えた歴史があるように、現在は「高並列 GPU をいかに使いこなすか」という新たな技術的課題に直面している。

この壁を突破するためには、まず商用プログラムや研究用ソフトウェアの GPU 最適化を強力に推進する必要がある。現代の科学計算におけるコードは極めて大規模化しており、気候モデルなどでは 100 万行を超えるケースも珍しくない。こうした巨大な既存コードを、データ構造から根本的に見直して GPU へ対応させる作業は、研究者個人の努力では限界がある。特に、多くの科学計算が伝統的に Fortran で記述されている一方で、最新の AI ミドルウェアやライブラリの多くは C++ を前提としており、言語間での断絶も課題となっている。単にプログラムの一部に GPU を導入するだけでは、全体としての高速化はもはや望めない段階に来ており、ハードウェアベンダーの積極的な参入と協力を得ながら、シス

テム全体としての最適化を図る体制を整えなければならない。

表 4.8 ユーザビリティ向上に向けた方策

分野	内容
レガシーコードの GPU 最適化	気候モデルのように 100 万行を超える大規模な既存コード を、データ構造から見直して GPU へ最適化するためのツール群やライブラリを整備する。
マルチ言語・ミドルウェアの架け橋:	科学計算で主流の Fortran と、AI 開発の主流である C++/Python を高度に連携させるミドルウェアを開発し、研究者が言語の壁を意識せずに「AI とシミュレーションの融合」を行えるようにする。
高度専門人材の育成と裾野の拡大	GPU を自在に使いこなせる技術者が不足している現状 を踏まえ、HPCI の枠組みを活用したトレーニングプログラムや、コード変換支援サービスを提供し、AI for Science のユーザ層を抜本的に拡大する。

また、将来的な基盤整備においては、単なる「学習専用機」の構築を目指すのではなく、従来の HPC から GPU へのスムーズな移行を促進する柔軟な仕組みが求められる。これには、既存の HPCI の枠組みを超えた、新しい視点での取組が必要である。また、我が国の施策として、少数のトップ研究者による国際的な賞の獲得を優先するのか、それとも広範な研究分野での AI 利用という裾野の拡大を目指すのか、その方針を明確にし、それに応じた支援策を講じるべきである。更に、研究者が技術的な障壁に阻まれることなく、AI とシミュレーションを高度に融合させられる環境を構築することこそが、今後の日本の計算基盤に求められる真のユーザビリティである。

4.6. 計算基盤整備に係る提案

本業務で収集した情報に加え、社会環境に関する追加情報を収集し、これらの情報を分析し、受注者側に必要な計算基盤の環境整備、そのユーザビリティを高める施策の案を作成する。ここでは、本業務で収集・調査・分析した情報を、将来的な計算基盤整備に係る提案の観点でまとめる。

4.6.1. 2030 年の計算基盤整備に係る提案

2030 年の計算基盤整備に関し、これまでの調査を基に、調査担当者を中心に議論を行い、下記にまとめた。

(1) 科学研究の変革と AI for Science の定義

2030 年に向けた科学研究のパラダイムシフトは、AI が単なる補助ツールから、研究プロセスそのものを変革する基盤へと進化する「AI for Science」の時代として定義される。文部科学省の検討資料や国内外の動向に基づけば、この新しい研究環境を実現するための計算基盤整備は、知識の体系化、現象の予測、そして実験の自律化という三つの大きな役割を支えるものでなければならない。まず「知識体系化と知見抽出」においては、LLM が

膨大な論文、特許、実験レポートなどの情報を学習し、人間が把握困難な知見を統合することが期待されている。これにより、キーワード間の潜在的な相関を抽出し、新たな研究仮説の立案や、専門分野を跨いだ知識の再発見を支援することで、人間の時間的な制約や認識の限界を超えることが可能となる。次に「現象予測と計算加速」の役割では、物理法則を学習した AI が従来のシミュレーションを代替することで処理時間を劇的に短縮し、未知の物質が持つ性質の予測や、新薬の構造探索における候補絞り込みを加速させる。そして「実験・検証の自律化」では、AI が実験ロボットや計測機器をリアルタイムで制御し、解析結果から次に試すべき条件を自律的に決定する「自律型ラボ」の実現を目指す。これは、24 時間稼働による検証全体の加速と、人為的なミスの排除を同時にもたらすものである。

(2) ライフサイエンス・材料・気象分野におけるモデル特性の分析

2030 年を見据えた計算資源の需要を予測する際、AI for Science の各分野が求めるモデルの特性を精査する必要がある。ライフサイエンス分野においては、Transformer が主役であり、ESM-3 (980 億パラメータ) に代表されるように、データの多様性を吸収するためにモデルの巨大化が進行している。これは、配列情報の複雑さと数十億件に及ぶ膨大なデータ蓄積を反映した結果である。一方、材料科学分野では原子間のつながりを表現するグラフニューラルネットワーク (GNN) が主流であり、物理的な空間の対称性をモデルに組み込むことで、数百万から一億程度の比較的少ないパラメータ数で十分な精度を実現している。気象・地球科学分野はその中間的な性格を持ち、画像処理に近い Transformer とメッシュを扱う GNN を併用し、物理法則による制約を利用することで、数千万から 30 億規模のパラメータで高精度の予測を実現している。更に、全ての分野において拡散モデル (Diffusion) の活用が始まっており、単一の予報値を出す従来のモデルから、不確実性を含む構造やシナリオを生成するモデルへと進化している。

(3) 2030 年に向けた計算資源需要の定量的予測

これらの高度な基盤モデルを開発・運用するために必要な計算資源の量は、現在の汎用 LLM の進化速度から逆算することで導き出される。著名な AI モデルの学習に使用される計算資源量は約 5 か月ごとに倍増するという予測があり、これを適用すると 4 年間で約 750 倍の演算能力が必要となる計算になる。現在、最先端の LLM 学習には 1 EFLOPS の計算機で 100 日程度の演算が費やされているが、2030 年には AI for Science のモデル開発においても試行錯誤を含めると莫大なリソースが求められる。AI for Science 基盤モデルは汎用 LLM と比較してパラメータ数が一桁から三桁ほど小さい傾向にあるが、学習の伸び率は LLM に近い傾向を示している。これらの要因を総合すると、2030 年には FP16 精度において 500 EFLOPS という演算能力を備えた計算基盤が必要になると試算される。

(4) 超大規模計算基盤 AI Gigafactory とデータ基盤の整備

この 500 EFLOPS という性能をハードウェア構成で具体化すると、GPU の進化を考慮しても膨大な規模となる。2030 年までに GPU1 基当たりの性能が現在の 10 倍程度に向上すると仮定しても、500 EFLOPS を実現するには約 12 万基の GPU を統合したシステムを構築しなければならない。これは現在の世界最高レベルのスーパーコンピュータである JUPITER の約 50 倍に相当する規模であり、まさに AI Gigafactory と呼ぶべき超大規模施設の整備が不可欠となる。更に、学習データの蓄積も加速しており、汎用 LLM のデータセットサイズが 8 カ月ごとに倍増するペースを前提とすれば、2030 年には 6.4PB から 64PB、複数テーマの同時進行を考慮すれば全体で 640PB 規模のストレージが必要になる。現状では気象分野で数 PB、ライフサイエンス分野で 1PB 程度の学習データが扱われているが、今後はこれらが桁違いに増大することを見込む必要がある。

(5) 研究利用者層の拡大と次世代 HPCI の展望

利用者層の拡大も重要な検討材料である。2030 年には、高度な AI モデルを開発するヘビーユーザが約 200 の研究機関に広がり、大学や公的研究所における利用者は大学院の理工系研究室の半数以上に相当する 6,000 から 10,000 テーマ規模に達すると推計される。これら一万件に近い研究プロジェクトが、富岳の次世代機である「富岳 NEXT」や HPCI、そして民間の GPU クラウドを柔軟に活用できる環境を整えることが、日本の科学技術競争力を左右することになる。また、学習データ作成のためのシミュレーションには膨大な CPU リソースも必要であり、例えば材料分野では富岳フル稼働 1 か月分に相当する 60 億コア時間が必要とされる事例もあることから、GPU と CPU のバランスの取れた基盤整備が求められる。

(6) 計算基盤運用における技術的課題と人材育成

しかし、計算基盤を物理的に整備するだけでは十分ではない。最大の懸念材料は、これほど大規模な GPU 群を使いこなせる研究者や技術者が決定的に不足していることにある。日本はこれまで「ベクトル型からスカラー型へ」という計算機アーキテクチャの変化を乗り越えてきた歴史があるが、10 万基を超える高並列 GPU 環境を最大限に活用するためには、既存のシミュレーションコードの抜本的な書き直しが必要となる。気象モデルのように 100 万行を超える巨大なコードを GPU に最適化するのは容易ではなく、部分的な適用だけでは十分な高速化が得られないという技術的な壁も顕在化している。また、開発言語においても、依然として Fortran が主流である科学計算の世界において、C++や最新の AI ミドルウェアをいかに融合させるかというソフトウェアスタックの課題も解決しなければならない。

(7) まとめ

結論として、2030 年に向けた計算基盤整備は、単なるハードウェアの増強にとどまらず、次世代 GPU12 万基と 640PB のストレージを軸とした AI Gigafactory の構築、およびそれらを自在に操るためのミドルウェア開発と人材育成をパッケージとして推進するものである。この基盤こそが、知識の体系化から実験の自律化までを一貫して支え、科学研究のスピードを従来の数百倍へと加速させるエンジンとなる。富岳 NEXT や民間の計算リソースを有機的に結合させ、多様な研究ニーズに応えるための「科学用 AI インフラ」の確立が、2030 年における日本の科学技術の地位を確固たるものにする唯一の道である。

4.6.2. 2045 年の計算基盤整備に係る提案

2045 年頃の状況については、例えば、エネルギーの供給および温暖化の動向も踏まえながら状況設定をし、検討した。以下は、調査結果を基に、担当者が議論を行い、その内容をまとめたものである。

(1) ユーザビリティ向上に向けた方策

2030 年頃に「富岳 NEXT」が稼働し、AI for Science の活用が一定の成果を収めた後、2045 年に向けては既存の発展モデルが重大な限界に直面すると予想される。現在の延長線上にある、巨大な計算資源を投入して「知識の体系化」や「現象の予測」を行う手法は、2030 年代には高品質な学習データの枯渇、莫大な電力消費と排熱に伴うエネルギー制約、そして指数関数的に増大する計算コストという経済的合理性の喪失という、三つの決定的な壁に突き当たる。

2045 年に向けた次世代の計算基盤は、こうした「力ずくの規模拡大」ではない、新しい形への進化を遂げている必要がある。そこでは、単なる計算性能の向上ではなく、アルゴリズムの抜本的な革新によって、より少ない演算量で高度な知見を得る手法が主流となるだろう。また、巨大なデータセンターに依存するだけでなく、省電力で高性能な「分散型エッジ AI」が普及し、個々の実験現場や計測機器そのものが高度な判断能力を持つようになる。この技術進展により、2030 年時点では発展途上であった「実験・検証の自律化」が完成形へと近づく。AI が自ら仮説を立て、実験ロボットを制御し、結果を解析して次のステップへ進む「自律型研究システム」が実現し、現実世界とデジタルツインが完全に同期する環境が整うのである。

しかし、こうした技術的進展を追求する上で、地政学的リスクと経済安全保障の視点を欠かすことはできない。現在、AI 計算基盤の多くを海外ベンダー、特に NVIDIA 等の特定企業に依存している現状は、供給網の寸断や技術移転の制限といったリスクを孕んでいる。当面の間はこれらグローバルベンダーとの戦略的な協調は不可避であるが、同時に日本が「ソブリン（主権的）AI」としての自律性を維持することは国家的な至上命題である。そのためには、次世代旗艦機である「富岳 NEXT」が、単なる国内専用機にとどまるのでは

なく、ハードウェアおよびソフトウェアの両面において、国際市場で十分に生き残り、デファクトスタンダードの一部を形成できるだけの競争力を備えなければならない。独自の命令セットやアーキテクチャの強みを活かしつつ、グローバルな開発コミュニティが積極的に参加したくなるようなオープンで強力なソフトウェアエコシステムを構築することこそが、真の経済安全保障につながるのである。

日本がこの未来において主導権を握るためには、フラッグシップ機一台に頼る現状の体制から、複数のシステムが特定の目標に向かって有機的に連携する、真の HPCI の高性能化・高度化へと舵を切らなければならない。2045 年頃には、単一の巨大システムによる性能追求は電力供給や冷却技術の物理的な限界に突き当たると予想されるため、フラッグシップ機のみで全ての需要を賄うのは現実的ではない。そのため、最先端のフラッグシップ機を中核としつつも、それよりも一桁小さい規模ながら特定のタスクに最適化された計算機群を全国的に整備し、これらが相互に補完し合う重層的な計算エコシステムの構築が必要となる。このような分散協調型の基盤こそが、エネルギー制約を克服しつつ、多様化する研究ニーズを支える持続可能な日本の計算資源供給体制の鍵となる。

更に、日本独自の強みを持つ高品質なデータを核とした「日本発の AI 基盤モデル」を、国家戦略として多角的に整備すべきである。既に先駆的な取組が進んでいる気象分野をモデルケースとし、日本が世界的に卓越している材料科学分野の高品質データを活用したデータ駆動型の新材料開発モデルや、複雑な地形を反映した高精度な地震・津波予測モデルなど、日本固有の知見が価値を生む分野に注力することが肝要である。これらのモデルは、単なる国内の学術振興にとどまらず、レアアース探査を含む海洋資源開発や、核融合炉の安定制御といった地球規模の難題解決に直接寄与することで、国際的なプレゼンスを確固たるものにする役割を担う。2045 年の計算基盤は、これら日本が誇るドメイン知識と自律化された研究環境が高度に融合し、世界をリードする新たな知の創造基盤として社会実装されるべきである。

表 4.9 ユーザビリティ向上に向けた方策

分野	内容
高品質材料データに基づく材料科学モデル	日本が世界的に卓越している材料科学分野の実験データおよび高品質なシミュレーションデータを活用し、新材料創製（MI）を加速する日本独自の基盤モデルを構築する。
日本特化型の気象・防災基盤モデル	複雑な地形や島国特有の気象現象を反映した日本独自の気象モデル、および世界トップレベルの観測網に基づく地震・津波予測モデルを整備する。
海洋資源・エネルギー制御モデル	レアアース探査などの海洋資源開発 や、将来のクリーンエネルギーとして期待される核融合炉のリアルタイム安定制御 など、国家のエネルギー安全保障に直結する分野をターゲットとする。

(2) 産業界での夢（2045 年）

2045 年の産業界においては、2030 年代に直面した「学習データの枯渇」「エネルギー消費の爆発」「経済的合理性の限界」という 3 つの壁を乗り越えた、新しい次元の計算基盤活用が求められる。単なる予測や効率化の段階を過ぎ、計算基盤は「国家の存立と産業競争力の核」としての役割を担うことになる。

産業界の究極的なニーズは、計算資源の確保に奔走することなく、蛇口をひねれば水が出るように、日本独自の高品質なデータと高度に最適化された計算力が、経済安全保障の壁に守られた状態でいつでも利用できることである。

(3) 資源・エネルギー

21 世紀後半の主要な電源として期待される核融合発電においては、プラズマの不安定性を 100 万分の 1 秒単位という極めて微細な時間軸で予測し、絶えず制御し続けることが不可欠なニーズとなる。この過酷な要求に対し、日本独自の核融合基盤モデルが構築され、これが HPCI 上の計算資源と実際の発電所をネットワークで直結する体制が整備される。このシステムにより、プラズマの崩壊を未然に防ぐ高度なリアルタイム制御が実現し、日本のエネルギー自給率を劇的に向上させるための決定的な役割を果たす。

また、経済安全保障の観点からレアアースや重要鉱物の輸入依存を脱却することも喫緊の課題であり、計算機上で既存元素を最適に組み合わせた代替材料を秒単位で設計するニーズが産業界で高まっている。具体的な展開としては、深海探査ロボットと連携した AI が、海底から得られる膨大な地質データをリアルタイムで解析してレアアースの賦存量を精緻に把握する。それと同時に、希少資源を一切必要としない革新的な超電導材料などの代替物質を、AI が主導する自律型ラボによって並行して生成する仕組みが想定される。このようなデータ駆動型かつ自律的な研究開発体制は、日本の資源確保における自律性と強靱性を抜本的に強化するものである。

(4) ライフサイエンス

2045 年のライフサイエンス産業においては、「超パーソナライズ化」が変革の核となる。ライフサイエンス分野では、計算基盤の飛躍的な進展により、モデルの規模が現在の汎用 LLM を遥かに凌駕する数十兆パラメータ規模へとスケールアップし、個々の人間や生物個体を計算機上で完全に再現するニーズが主流を占める。

この進展により、「創薬プロセスを実質ゼロ化」する世界が実現する。従来の「平均的な患者」を想定した統計的な薬剤開発から脱却し、個人の遺伝情報や日々の生活習慣を詳細に反映した 1 億人分のデジタルツイン上でのシミュレーションのみによって、最適な治療法を決定するニーズが高まる。具体的な活用例として、未知のウイルスが発生した際には、24 時間以内に全住民のデジタルツイン上でワクチンの有効性と副作用を網羅的に検証することが可能となる。これにより、長期間を要する物理的な治験プロセスをスキップし、

即座に個別の体質に最適化された治療薬を配布できる社会体制が構築される。

(5) 国土強靱化

国土強靱化を担う気象や地質などの地球科学分野においても、不確実性に対する即応型の予測が大きな役割を果たす。これまでの単なる現象の「予報」から、AI が人間や社会に対して最適な「行動」までをリアルタイムで提示するニーズへと進化を遂げる。

特に地震や津波の発生時には、Diffusion モデル等の確率的な生成手法を駆使することで、建物やインフラの損壊状況を瞬時に複数のシナリオとして可視化する。「動く都市」のリアルタイム避難誘導においては、発災から数秒以内に各個人のスマートデバイスへ、現在地から 5 分後に予測される浸水域を回避するための最適ルートが個別提示される。更に、AI が自律走行車や信号機などの交通インフラを直接制御し、避難行動を能動的に最適化することで、人為的なミスを排除し、被害を極限までゼロに抑え込むことが可能となる。

(6) 2045 年モデルにおける産業界を支える計算基盤の提供形

2045 年の産業界が求める計算基盤は、文部科学省が長年にわたり継続してきた HPCI 政策の集大成として構築される。それは単一のシステムに依存するのではなく、多様なニーズに応えるための「重層的なインフラ」として提供される必要がある。

まず、インフラの最上位に位置するのは、国家プロジェクト級の巨大計算を担う「フラッグシップ級 (HPCI)」である。この階層は、核融合の安定的な運用を支える高度な制御や、全地球規模での精緻な気候変動シミュレーション、更には日本の経済安全保障の核となる「ソブリン AI」の継続的な再学習といった、極めて膨大な演算能力を要するタスクを専門に引き受ける。

次に、特定の分野における研究開発を効率化するのが、全国の研究拠点に配置される「分散型ドメイン専用機」である。これはフラッグシップ機と比較して一桁小さい規模の計算機群であり、それぞれの学問領域や産業分野に最適化されたアーキテクチャを備える。具体的には、原子間のつながりや物理的な対称性を重視する材料科学分野向けの低電力 GNN (グラフニューラルネットワーク) プロセッサ群や、膨大なゲノム・タンパク質配列の解析に特化した Transformer 専用機などが該当し、各分野の専門的なニーズに対して高い投資対効果で応える。

そして、実社会の最前線で機能するのが「自律型エッジ AI 基盤」である。工場内に構築された「自律型ラボ」や、各地の観測施設に直接組み込まれた AI が、中央の HPCI とリアルタイムで連携しながら運用される。これにより、現場で取得された膨大なデータに基づき、中央の計算資源による高度な知見を反映した即時判断を行うことが可能となる。このように、フラッグシップからエッジまでが有機的に結合した計算基盤こそが、2045 年における日本の産業競争力の源泉となる。

5. 結論

本調査研究は、「AI for Science の実現に向けた計算基盤等の動向調査」として、国内外の計算資源の配分制度や計算基盤の環境整備に関する動向を調査した。あわせて、将来の AI ユーザ増加のトレンドを AI 市場の状況や分野ごとの実態等を踏まえて俯瞰的に分析し、今後の我が国における計算資源の理想的な提供体制の構築や、ユーザビリティ向上に向けた検討に役立てる資料をまとめた。本調査の結果、AI 技術を用いて科学研究を加速させる「AI for Science」の流れは、単なる一時的な流行ではなく、国の研究開発能力を左右する重要な段階に入っていることが明らかになった。これまでの調査結果をまとめ、我が国が今後取り組むべき方向性を以下のとおり述べる。

(1) 科学研究の進め方の大きな変化

AI の導入により、研究のあらゆる場面で効率化が進んでいる。本報告書では、研究プロセスにおける変化を以下の 3 点に整理した。

- ・ 知識の整理と活用： 人間では読み切れない膨大な論文や実験データを AI が分析し、新しい研究の仮説を立てるための支援が可能となっている。
- ・ 計算の高速化： 物理のルールを学んだ AI モデルが、これまでのスーパーコンピュータによるシミュレーションを数万倍の速さで代行し、新材料などの候補を短時間で絞り込めるようになっている。
- ・ 実験の自動化： AI が実験ロボットを操作して 24 時間休まず実験を繰り返し、得られた結果から次の条件を自律的に決定する「自律型ラボ」が実用段階に入りつつある。

(2) 2030 年に向けて準備すべき計算基盤

AI の学習に必要なとなる計算量は約 5 か月ごとに倍増しており、2030 年には現在よりも桁違いに大きな設備が必要となる。

- ・ 必要な計算能力の規模： 2030 年に国内の主要な約 200 の研究チームを支えるには、FP16（半精度浮動小数点）において 500 EFLOPS 級の演算能力が必要であると試算される。これを実現するには、次世代の高性能な GPU（画像処理用装置を転用した計算部品）が約 12 万基必要となる見込みである。
- ・ データの蓄積と共有： 学習に使うデータ量も増大し続けており、2030 年には合計で 640PB 規模の保存容量を備えた、分野を超えて高品質なデータを共有・蓄積できる仕組みの構築が欠かせない。

(3) 我が国の強みを活かした独自の取組

他国の技術に依存するだけでなく、日本が持つ独自の強みを活かした戦略的な準備が求められる。

- ・ 得意分野での AI モデル開発： 日本が世界的に高い水準にある「材料科学」や「気

象・防災」などの高品質なデータを活用し、日本独自の使い勝手の良い基盤モデルを構築することが、将来の競争力の源泉となる。

- ・ 人材育成とプログラムの最適化：大規模な GPU 群を自在に使いこなせる技術者が決定的に不足しているため、専門人材の育成が急務である。あわせて、長年使われてきた既存のシミュレーション用プログラムを、最新の計算機（GPU）で動くように最適化する作業も並行して進める必要がある。

(4) 総括

AI for Science を実現するためには、単に高性能な計算機を導入するだけでは不十分である。一部のトップ研究者だけでなく、幅広い分野の研究者が AI の恩恵を等しく受けられるような「使いやすい環境」を整えることが、日本の科学技術全体の底上げにつながる。

6. 付録 A : 用語・略語集

本書で掲載した内容に関し、(1) 機関名、(2) 政策、(3) AI、(4) HPC、(5) ライフサイエンス、(6) 材料、(7) 気象・衛星に分類して、用語・略語の説明を行う。それぞれの分類の中では、アルファベット順・あいうえお順で掲載している。

(1) 機関名

- ・ CERN (European Organization for Nuclear Research, 欧州原子核研究機構) : 大型ハドロン衝突型加速器 (LHC) などの巨大データを管理する機関である。「Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire (欧州原子核研究評議会)」が由来。
- ・ DOE (Department of Energy, 米国エネルギー省) : 科学・エネルギー分野の高度な計算資源を管理する政府機関である。
- ・ ECMWF (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, 欧州中期予報センター) : 欧州の気象予報およびデータ提供を担う機関である。
- ・ EMBL-EBI (European Bioinformatics Institute, 欧州バイオインフォマティクス研究所) : 生命科学データの中核的な管理・提供拠点である。
- ・ ESA (European Space Agency, 欧州宇宙機関) : 欧州の宇宙開発および地球観測を主導する機関である。
- ・ EuroHPC JU (European High Performance Computing Joint Undertaking, 欧州 HPC 共同事業体) : 欧州連合のスーパーコンピュータ能力を統合・強化する共同事業体である。
- ・ HPDF (High Performance Data Facility, 高性能データ施設) : データ集約型の AI 研究を支えるために設計された新たな拠点である。
- ・ JAXA (Japan Aerospace Exploration Agency, 宇宙航空研究開発機構) : 日本の宇宙航空分野の研究開発を行う機関である。
- ・ JMA (Japan Meteorological Agency, 気象庁) : 日本の気象業務を司る政府機関である。
- ・ NASA (National Aeronautics and Space Administration, アメリカ航空宇宙局) : 地球観測や宇宙開発を主導する米国の政府機関である。
- ・ NNSA (National Nuclear Security Administration, 国家核安全保障庁) : 核兵器の安全性等を科学ベースで管理する DOE 傘下の機関である。
- ・ NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration, アメリカ海洋大気庁) : 海洋と大気の調査・監視を行う米国の機関である。
- ・ NSF (National Science Foundation, 米国国立科学財団) : 広範な学術研究と AI インフラ構築を支援する政府機関である。
- ・ RIST (Research Organization for Information Science and Technology, 一般財団法人)

人高度情報科学技術研究機構）：HPCI の運用支援や利用統計の管理を行う組織である。

(2) 政策

- ・ AI Factory (AI Factory, AI ファクトリー)：AI 研究を包括的に支援するため、計算資源、技術サポート、訓練を統合した欧州の拠点である。
- ・ AI Gigafactory (AI Gigafactory, AI ギガファクトリー)：大規模な AI Factory 設立を支援するための、2026 年に向けた新たな規制・構想である。
- ・ AIASA (Artificial Intelligence Academic Strategy Alliance, 人工知能学術戦略アライアンス)：AI 分野の研究と人材育成を強化する米国の枠組みである。
- ・ CEDS (Common European Data Spaces, 共通欧州データ空間)：欧州内でセクターを跨いだデータの単一市場を構築する戦略である。
- ・ Copernicus (Copernicus Programme, コペルニクス計画)：欧州連合(EU)が主導する世界最大規模の地球観測プログラムである。
- ・ Genesis Mission (Genesis Mission, ジェネシス・ミッション)：米国 DOE が始動させた、AI により科学的生産性を 10 年で倍増させる戦略計画である。
- ・ GENIAC (Generative AI Accelerator Challenge, ジェニアック)：日本の経済産業省による、生成 AI の開発・社会実装を加速させるプロジェクトである。
- ・ NAIRR (National AI Research Resource, 国家 AI 研究リソース)：米国の研究者に高度な計算資源やデータへのアクセスを提供するプラットフォームである。
- ・ Stockpile Stewardship (Stockpile Stewardship, 核兵器管理)：核実験を伴わずに核兵器の安全性や信頼性を評価・維持する活動である。
- ・ ソブリン AI (Sovereign AI, ソブリン AI)：一国の自律性や経済安保を担保するため、自国で管理・開発される AI 基盤である。

(3) AI

- ・ AlphaFold 3 (AlphaFold 3, アルファフォールド 3)：タンパク質、DNA、リガンド等の相互作用を予測する AI (Google DeepMind) である。
- ・ Diffusion Model (Diffusion Model, 拡散モデル)：データにノイズを加え、それを逆プロセスで除去することで新しいデータを生成する手法である。
- ・ ESM-3 (Evolutionary Scale Modeling 3, イーエスエム 3)：タンパク質の配列、構造、機能を同時に扱う巨大なマルチモーダル生成 AI である。
- ・ GNN (Graph Neural Network, グラフニューラルネットワーク)：ノードとエッジでつながったグラフ構造を扱うネットワークである。
- ・ GraphCast (GraphCast, グラフキャスト)：10 日先の全球気象予報を 1 分未満で完了させる気象予測モデルである。
- ・ MoE (Mixture of Experts, 混合エキスパート)：巨大なモデルの一部だけを状況に応

じて動かすことで、高精度と高速化を両立する仕組みである。

- ・ PINN (Physics-Informed Neural Networks, 物理情報ニューラルネットワーク) : 学習に物理法則を制約として導入した AI である。
- ・ Transformer (Transformer, トランスフォーマー) : データ内の離れた要素間の関係性を捉える「注意機構(Attention)」を特徴とする、現在の生成 AI の標準的な構造である。
- ・ ViT (Vision Transformer, ビジョン・トランスフォーマー) : 画像や格子状のデータをパッチに分割して Transformer で処理する手法である。
- ・ サロゲートモデル (Surrogate Model, サロゲートモデル) : 物理シミュレーションを AI で近似し、処理時間を劇的に短縮する代理モデルである。
- ・ ゼロショット学習 (Zero-shot Learning, ゼロショット学習) : 未知の課題に対しても、事前学習知識を転用して直接対応する手法である。

(4) HPC

- ・ ATS/CTS (Advanced/Commodity Technology Systems, 先進技術システム/コモディティ技術システム) : 米国 NNSA におけるシステム分類の略称である。
- ・ Aurora (Aurora, オーロラ) : 米国 ALCF に設置された AI 対応能力が極めて高いエクサスケール・システムである。
- ・ Colossus (Colossus, コロッサス) : xAI 社が稼働させた、20 万個の NVIDIA GPU を搭載した超大規模システムである。
- ・ EFLOPS (Exa Floating point Operations Per Second, エクサフロップス) : 1 秒間に 100 京回の計算ができる能力を表す性能単位である。
- ・ El Capitan (El Capitan, エル・キャピタン) : 米国 LLNL で運用される、核安全保障任務を主目的としたエクサスケール機である。
- ・ Frontier (Frontier, フロンティア) : 米国 OLCF に設置された、世界初のエクサスケール・システムである。
- ・ JUPITER (Joint Universal Processor for Interferometric Telecommunication Evaluation and Research, ジュピター) : ドイツに設置された欧州初のエクサスケール・スーパーコンピュータである。
- ・ LUMI (Large Unified Modern Infrastructure, ルミ) : フィンランドに設置された GPU 加速型のブリ・エクサスケール・システムである。

(5) ライフサイエンス

- ・ GEO (Gene Expression Omnibus, 遺伝子発現オムニバス) : 世界最大の遺伝子発現データの公共アーカイブである。
- ・ In silico (In silico, イン・シリコ) : 「コンピュータの中で」行われる、仮想的な実験

やシミュレーションである。

- ・ **Ligand** (Ligand, リガンド) : 特定のタンパク質に結合する小さな分子である。
- ・ **NGS** (Next-Generation Sequencing, 次世代シーケンシング) : 高速に塩基配列を読み取る次世代のゲノム解析技術である。
- ・ **PDB** (Protein Data Bank, タンパク質データバンク) : 生体高分子の 3 次元立体構造データの国際拠点となるデータベースである。
- ・ **TCGA** (The Cancer Genome Atlas, がんゲノムアトラス) : 33 種のがんを対象とした、包括的なゲノム解析データセットである。
- ・ **UniProt** (The Universal Protein Resource, ユニプロット) : タンパク質の配列情報と機能注釈を統合した世界標準のデータベースである。
- ・ **シングルセル解析** (Single-cell analysis, シングルセル解析) : 細胞一つひとつの遺伝子発現パターンを精密に解析する技術である。

(6) 材料

- ・ **CHGNet** (Crystal Hamiltonian Graph network, チャグネット) : 量子力学的なエネルギー原理を学習に取り入れた、結晶構造解析のためのグラフ AI である。
- ・ **DFT** (Density Functional Theory, 密度汎関数理論) : 電子密度分布から量子力学的に物質の性質を解明する計算手法である。
- ・ **GNOME** (Graph Networks for Materials Exploration) : 220 万個の新材料候補を発見したグラフニューラルネットワークモデルである。
- ・ **Materials Project** (Materials Project, マテリアルズ・プロジェクト) : 物理・化学的性質を網羅した、世界最大級のオープン材料データベースである。
- ・ **MatterGen** (Matter Generative, マタージェン) : 指定した物性から新しい材料構造を直接生成する拡散モデルベースの AI である。
- ・ **MI** (Materials Informatics, マテリアルズ・インフォマティクス) : 情報科学を用いて新材料開発を効率化する材料科学の学問分野である。
- ・ **自律型ラボ (SDL)** (Self-Driving Lab, 自律型ラボ) : AI が実験の計画・実行・解析・改善を完全に自動で行う次世代研究所である。
- ・ **等変性 (Equivariance, 等変性)** : 回転や平行移動に対して、物理的な整合性 (エネルギー等) が保たれる性質である。

(7) 気象・衛星

- ・ **CMIP6** (Coupled Model Intercomparison Project Phase 6, 結合モデル相互比較計画第 6 期) : IPCC 報告書の根拠となる世界共通の気候予測シナリオ集である。
- ・ **ERA5** (ECMWF ReAnalysis 5th Generation, イーアールエー5) : ECMWF が提供する、1940 年以降の全球気象再解析データの現在の世界標準セットである。

- ・ HLS (Harmonized Landsat Sentinel-2, 統合化ランドサット・センチネル 2 号) : NASA と ESA の衛星データを統合し、30m の高解像度で地表を観測するデータセットである。
- ・ JRA-3Q (Japanese Reanalysis for Three Quarters of a Century, ジェイアールエー 3Q) : 日本気象庁による、1947 年以降の状況を再現した全球再解析データである。
- ・ SAR (Synthetic Aperture Radar, 合成開口レーダー) : 雲や夜間を透過して地表を観測できる衛星レーダー技術である。
- ・ Sentinel-5P (Sentinel-5 Precursor, センチネル 5P) : 対流圏の大気質モニタリングに特化した欧州の衛星観測データである。
- ・ アンサンブル予報 (Ensemble Forecast, アンサンブル予報) : 初期値を少しずつ変えた複数の計算を行い、予測の確からしさや確率を評価する手法である。
- ・ データ同化 (Data Assimilation, データ同化) : 観測データとモデル予測を統計的に統合し、予測精度を高める手法である。

7. 付録 B : 要約資料

本書の要約資料として、本作業で主として 4 章で検討した結論までの道筋をスライドにまとめた。また、主として 3 章で調査した基盤モデルおよびそれらを支えるデータの一覧表をしめす。

- ① AI for Science の実現に向けた計算基盤等の動向調査（要約）－ 2030 年に必要とされる計算資源の分析を中心に －（A4 サイズ 18 枚、本書では 2up で添付）
- ② 基盤モデル一覧（A3 サイズ 1 枚の一覧表）
- ③ 基盤モデルを支えるデータ一覧（A3 サイズ 1 枚の一覧表）