

国が推進しているキーワードAI for Scienceとは何か？

https://www.mext.go.jp/content/20250701-mxt_sinkou01-000043465_02.pdf

AI時代にふさわしい科学研究の革新～大規模集積研究基盤の整備による科学研究の革新～

(意見等のまとめ)【概要】

令和7年7月1日

科学技術・学術審議会学術分科会研究環境基盤部会

資料2 科学技術 学術審議会学術分科会 (第96回) 令和7年7月2日

AI時代に ふさわしい 科学研究の姿

我が国全体の研究の質・量を最大化するため、基盤となる研究環境を高度化・高効率化（自動化、自律化、遠隔化等）（意義）◆時間短縮や効率化に加え、研究者が単純作業の繰り返しから解放され、**より創造的な研究活動に従事**。
◆研究の過程から得られる様々な**データやAIを最大限活用し、科学研究の進め方・在り方を変革**。

単に設備・機器の集積、自動化、自律化、遠隔化等を図るのみでなく、科学研究の進め方・在り方そのものを変革するというマインドが根付くことも重要。

☞ **変革の原動力となり得る組織や機関等が一体となり、拠点やネットワークを形成して取り組んでいくことが必要**。

AI時代にふさわしい科学研究の革新に向けた取組の方向性

①大規模集積研究基盤の整備

- 中核となる研究装置を核として、**先端設備群や関連する設備・機器を段階的に整備・集積**。ワンストップでシームレスに統合された研究環境を構築。
- 研究の加速化やセレンディピティを誘発し、遠方からでも意欲・能力ある優れた研究者が研究環境にアクセスできるよう、集積される設備・機器は、**最も効果が最大化される形で自動化、自律化、遠隔化**。

②データの蓄積と、AIとの協働による研究の最適化・新領域の開拓

- 研究の過程から得られたデータを保存・管理、流通、活用し、**研究者等の専門的知見とAIが協働することにより、研究サイクルの加速や探索領域の拡大等、分野・領域を超えた研究力を強化**。AI for Scienceの可能性を最大限引き出すためにも、情報基盤の強化・高度化や持続的な体制を構築。

③体制の構築と人材育成

- 新たな科学研究の姿の構築には、研究者とソフトウェア・ハードウェアエンジニア等が、一体的となって検討することが必要。**研究のコンサルテーション、技術・実験支援を行う体制の整備、研究や技術の素養を有し全体を統括・マネジメントできる人材の配置、処遇**。
- 科学研究の姿を**教育資源と捉え、大学等と連携し、新たな科学研究の姿を牽引できる人材育成の仕組みを構築**。

④産業界との協働

- 研究環境の高度化・高効率化を構築するフェーズや、新たな科学研究の姿を活用するフェーズにおいて、**理化学機器産業やロボット産業をはじめとする産業界とも協働**。世界的な研究拠点や国際的標準にも重要な要素。

⑤国際頭脳循環の促進

- 我が国の強みを活かしたオリジナルのあり方で取り組み、**国際頭脳循環のハブの一つとなり主導**。

取組の具体化に向けて

- 実現のためには、**組織として大規模な設備・機器や人的資源等の基盤を有し、科学研究の変革の原動力となることが必要**。
- 大学共同利用機関は、有しているポテンシャルを活かし、分野や組織の枠を超えた多様なユーザーに対して、新たな共同利用の環境を構築・提供することで、**AI時代にふさわしい科学研究の姿を実現するための拠点やネットワーク形成の中心的機関の一つとして期待**。
- 大学共同利用機関法人のリーダーシップの下、大学共同利用機関間における役割分担・連携を促進しつつ、共同利用・共同研究拠点との連携やその他の様々な機関及び組織と協力し、**オールジャパンの研究推進体制を構築することが必要**。

文科省の進めるAI for Science施策

- 2030年台の実現に向けた変革の方向性
 - AIが科学研究を高度化・高効率化すること：
研究支援業務の効率化、実験・解析などの自動化・自律化・遠隔化、シミュレーションの高速化・高精度化など。
 - AIが科学的発見を加速すること：
大量のデータからの情報抽出やパターンの発見、仮説の生成・推論、リアルタイムでの予測や制御など。
- 1. 研究基盤の整備
 - 大規模集積研究基盤の整備：
AIも活用した自動化・自律化・遠隔化の機能を備えた研究設備群を大学共同利用機関などに整備し、全国の研究者に高度で高効率な研究環境を提供します。
 - 次世代情報基盤の整備：
科学研究向けAI基盤モデルの開発・共用、AIも活用した先端研究基盤の大規模集積、堅牢で大容量通信を支える次世代ネットワーク (SINET) の整備などを進めます。
- 2. 人材育成と研究支援
 - 若手研究者・エンジニア人材の育成：
AIの知識を国民に浸透させるための教育振興や、若手研究者・エンジニアの育成を支援します。
 - 研究資金の安定提供：
若手研究者を対象とした安定した研究資金と研究に専念できる環境を一体的に提供する支援を強化します。

A I の多様な研究分野での活用が切り拓く新たな科学

https://www.mext.go.jp/b_menu/hakusho/html/hpaa202401/1421221_00006.html

- 1－1． A I を活用した科学データの改良や情報の抽出
 - 膨大な科学データの分析に高度な A I を活用することで、従来の伝統的な研究方法では見逃されがちな情報や関連性を明らかにし、新しい発見や革新的な洞察をもたらす。
- 1－2． A I を活用したシミュレーションの高度化・高速化
 - 深層学習技術等を用いて、膨大な科学データから立体構造や候補物質等を予測するモデルを作成し、特定プロセスを効率化、迅速化する。
- 1－3． A I を活用したリアルタイムでの予測や制御
 - A I を活用することで、環境に応じて予測を行いながら、人間と同様に複数のタスクをこなす技術の開発
- 1－4． A I を活用した科学的仮説の生成や推論
 - A I を活用した大規模なデータからの仮説の生成や探索によって、人間の認知限界やバイアスを越えた科学的発見につながる。
- 1－5． A I を活用した実験・研究室の自律化
 - A I とロボット技術を組み合わせることで、研究実験の一部又は全部を自動化

惑星探査データアーカイブ部門 ほか共通

惑星探査シミュレーション部門
地球外サンプル分析部門 ほか共通

搭載機器開発部門、地球外サンプル分析部門 ほか共通

A I の多様な研究分野での活用が切り拓く新たな科学

https://www.mext.go.jp/b_menu/hakusho/html/hpaa202401/1421221_00006.html

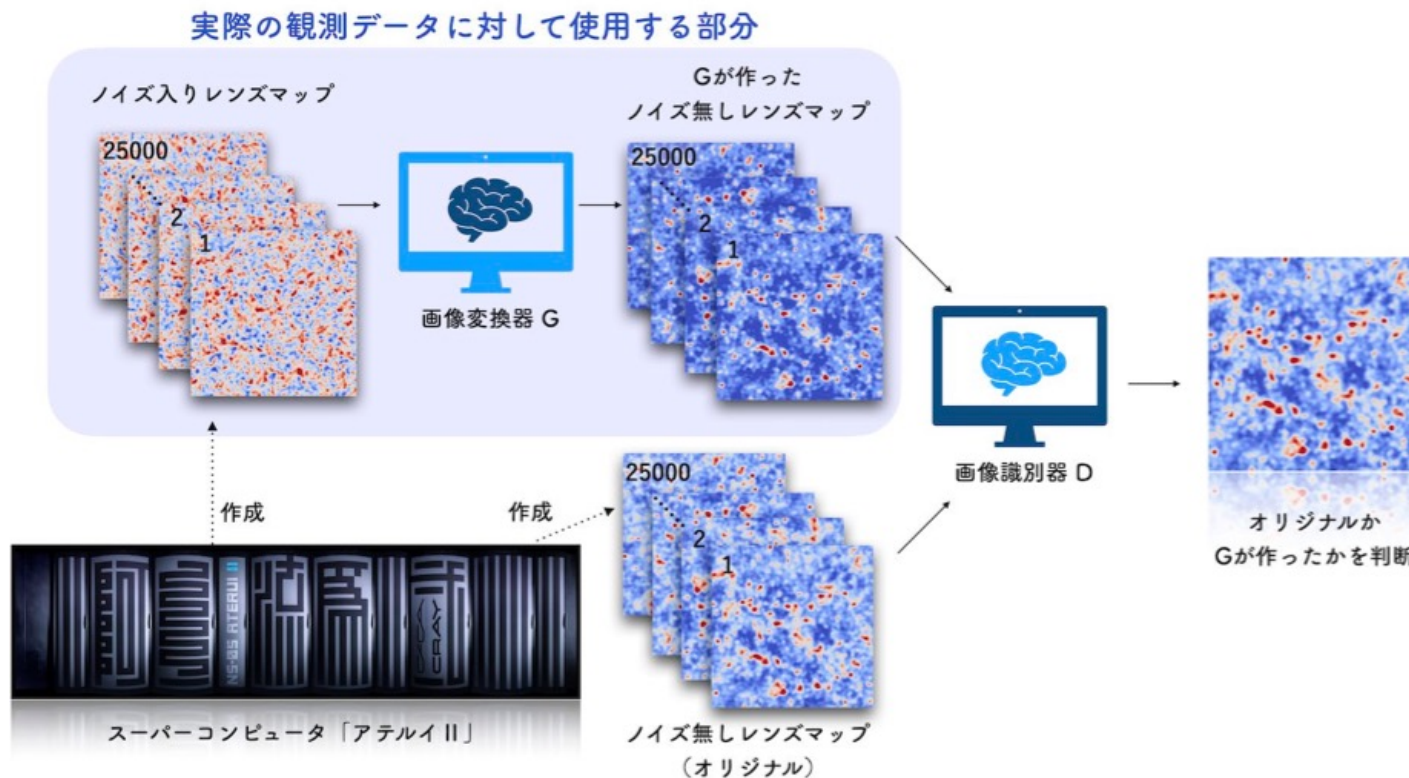
- 1 - 1. A I を活用した科学データの改良や情報の抽出

膨大な科学データの分析に高度な A I を活用することで、従来の伝統的な研究方法では見逃されがちな情報や関連性を明らかにし、新しい発見や革新的な洞察をもたらす。

- 事例：宇宙観測データのノイズ除去
情報・システム研究機構統計数理研究所と自然科学研究機構国立天文台は、**2021年**、深層学習技術（敵対的生成ネットワーク）を活用して、実際の銀河データから暗黒物質地図を作成する際に生じるノイズを除去して暗黒物質の分布を解明した。

- <https://www.ism.ac.jp/ura/press/ISM2021-06/pr0702.pdf>

本日の発表にも！



1 件目

深層学習を用いたクレーター形態分類による火星地下氷圏への示唆

4 件目

基盤モデルのファインチューニングによる小惑星ボルダー検出精度改善についての検証

1-2. AIを活用したシミュレーションの高度化・高速化

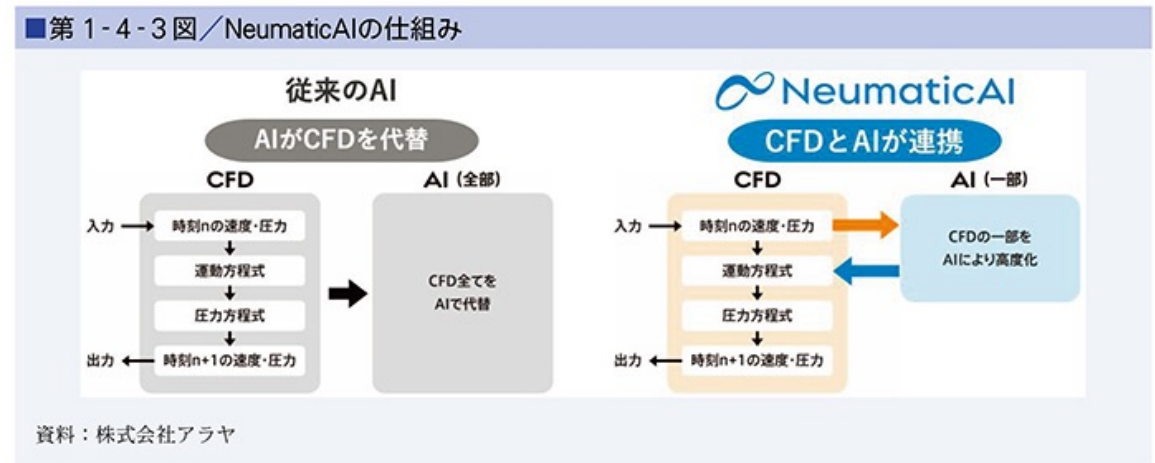
深層学習技術等を用いて、膨大な科学データから立体構造や候補物質等を予測するモデルを作成し、**特定プロセスを効率化、迅速化**する取組も加速しています。

・ 気象予測

- 2023年（令和5年）11月、Google DeepMind社は、10日間の天気予報を、前例のない精度で1分以内に提供することが可能なAIモデル「GraphCast」を発表
- <https://deepmind.google/blog/graphcast-ai-model-for-faster-and-more-accurate-global-weather-forecasting/>
- 従来の物理方程式やアルゴリズムに基づく数値予報モデルの代わりに、現在から未来の地球の天気の変化を支配する因果関係のモデルを数十年にわたる過去の気象データを用いて学習させ、予報を出力する。

・ 流体科学シミュレーションの短縮化

- 空気抵抗等を調べるための流体シミュレーション（CFD）には多くの計算機リソースが必要でしたが、株式会社アラヤが開発した「NeumaticAI」は、AIとCFDのハイブリッドにより、設計サイクルの総合的な時間の短縮化を実現
- AIがCFDにおいて担う箇所を最小限にとどめているため、少量の学習データでの高い汎化性と信頼性を備えた解析が期待されている。



注：物理モデルの一部をEndToEndモデルで代替して効率化高速化

1-4. AIを活用した科学的仮説の生成や推論

AIを活用した大規模なデータからの仮説の生成や探索によって、人間の認知限界やバイアスを超えた科学的発見につながることに興味も高まっています。

- 科研費学術変革領域研究 (A) 2022年～
『学習物理学』の創成
ー機械学習と物理学の融合新領域による基礎物理学の変革
- <https://mlphys.scphys.kyoto-u.ac.jp>

総括班: 橋本幸士 (領域代表)

B01: 深層学習の数理と応用: 田中章詞 (理研AIP)

B02: 高次元統計的機械学習: 樺島祥介 (東大理)

B03: 機械学習と位相幾何学: 福岡健二 (東大理)

A01: 計算物理学: 富谷昭夫 (大阪国際工科専大)

A02: 素粒子物理学: 野尻美保子 (KEK)

A03: 物性物理学: 大槻東巳 (上智大)

A04: 量子・重力物理学: 橋本幸士 (京大理)

学習物理学

新法則の発見、新物質の開拓

MLPhys 学術変革領域研究 (A) 学習物理学の創成
Foundation of "Machine Learning Physics"

CONTACT Members only En Jp

領域概要 研究組織 イベント 成果 アウトリーチ

機械学習と物理学の
理論的手法群の統合により基礎物理学の
根本課題を解決

物理学

自然科学で最も精密な実験場
多層の諸問題+数理の連携

機械学習

計算科学の爆発的進展分野
社会・技術のイノベーション

学習物理学

新法則の発見、新物質の開拓

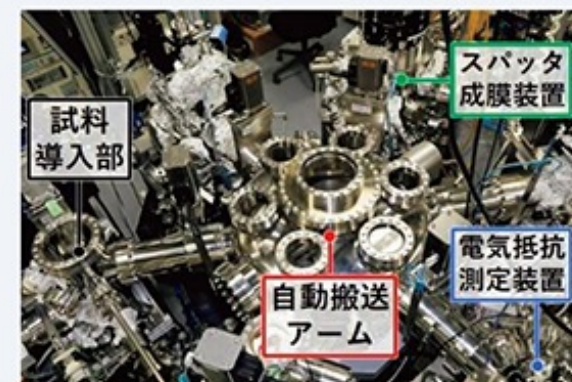
機械学習と物理学の理論的手法群の統合により基礎物理学の根本課題を解決

1-5. AIを活用した実験・研究室の自律化

AIとロボット技術を組み合わせることで、研究実験の一部又は全部を自動化する
例：高速な化合物スクリーニング、自動化された実験

- 東京工業大学では、無機固体物質において世界で初めてとなる、全自動で自律的に物質探索を行うシステム（自律物質探索ロボットシステム）を令和2年（2020年）に開発しました
 - 本ロボットシステムの利用により、人間が介在することなく最適な物性値を有する薄膜を従来の10倍程度の実験効率で作製することが出来ます（第1-4-5図）。

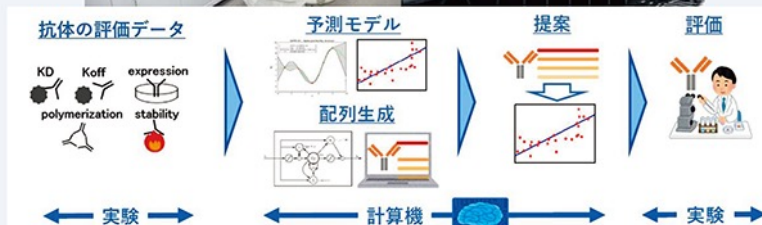
■第1-4-5図／自律的な物質探索ロボットシステム



提供：東京工業大学

- 中外製薬株式会社では、ラボオートメーションやデジタル技術の活用により、創薬実験の効率化に取り組んでいます。
 - 抗体創薬では、ロボティクスの活用により、数百から数千の抗体の作り出し、網羅的なデータ収集を通じて、抗体の多面的な最適化を実現しています。さらに、自社開発されたAIを用いた「IMALEX[®]」は、得られた膨大なデータを学習することによって、研究員が考えるよりも優れた性質を持つ抗体配列のデザインを可能としています（第1-4-7図）。

■第1-4-7図／抗体創薬研究を支援する遺伝子クローニングシステム及びAI技術



提供：中外製薬株式会社

- 研究者は、研究の自動化により、繰り返し作業の負担を軽減し、創造的な研究に集中することが出来ます。自律的な実験プラットフォームは、単に自動化された実験を行うだけでなく、実験の最適化やデータの解析など、研究者の作業をサポートします。

AI for Science、バズワードで終わらせず、私たちの研究開発に導入して効率化高速化を図りませんか？

- **ARC-Space**は既にいくつか取り組んでいるものがありますし、会津大学情報科学研究者との共同研究で助言等も可能です。
- 共同利用・共同研究拠点としてできそうなことは
 - 公募型事業として皆様の導入を支援
 - （複数）拠点に計算機リソースを集中して、大型基盤モデルのデータ蓄積／学習を行い、研究者に結果を利用してもらう
 - （複数）拠点に自動処理システムを導入して、研究者がリモートでそれを利用する環境を構築する
 - などなど...