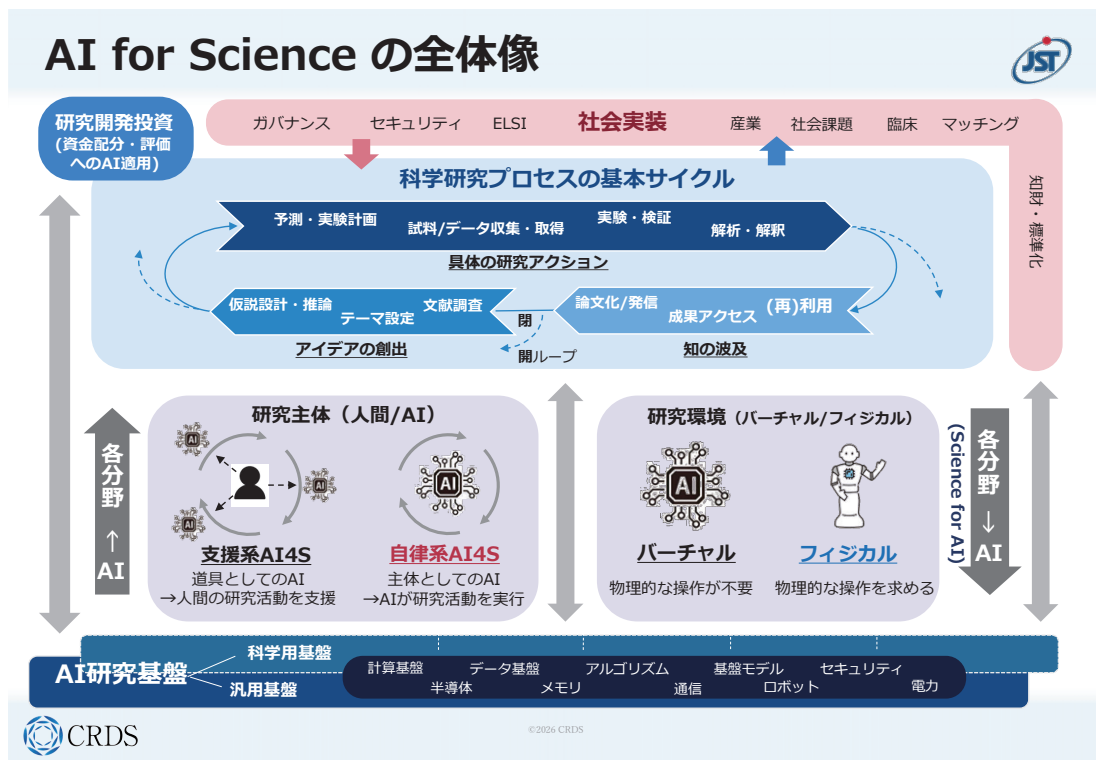


本講演では、JST-CRDSの報告書「AI for Scienceの動向2026」における分析を出発点として、AIの進展が研究開発の方法論および科学技術・イノベーションのエコシステム全体にもたらす構造変化を整理するとともに、その含意について考えたい。AIは、単にデータ解析の効率を高めるといった段階を超え、研究プロセスそのものに入り込んでいる。具体的には、仮説の生成、実験条件の探索、シミュレーションの高度化、さらには異なる分野の知識をつなぐ役割まで担い始めている。こうした変化は、これまで実験・理論・計算・データ駆動と発展してきた科学が、AIを組み込んだ新たなパラダイムへと移行しつつあると捉えることができる。

この変化の特徴は、AIと科学の関係が一方ではなく、相互に影響し合う構造にある。科学データの高度化と蓄積がAIモデルの進化を支え、そのAIが新たな科学的発見を加速するという循環が形成される。この構造は、個別分野の高度化にとどまらず、従来は接続されにくかった分野間の横断的な知識統合を促進する。従来のディシプリン単位の深化的研究から、問題駆動型・統合型研究へのシフトを推し進める駆動力を与えらるるとも期待されている。



この変化を比較的イメージしやすい例として、タンパク質構造予測の進展をドライブしたAlphaFoldに代表される手法がある。配列情報から高精度な構造を推定することを可能にし、従来は実験的に時間を要したプロセスの一部を劇的に短縮した、このこと自体はよく知られているが、重要なのは、それにより研究のボトルネックが移動している点である。すなわち、構造決定そのものよりも、その機能解釈や相互作用の理解、さらには創薬応用に向けた検証といったレイヤーへ重心がシフトしつつある。このように、AIの導入は単一の工程を効率化するだけでなく、研究プロセス全体の構造を変化させ始めている。

一方で、この変化は自律的に進むものではなく、研究基盤や研究体制の在り方に強く依存する。米・欧・中の主要国の動向を見ると、AI for Scienceは明確に国家戦略として位置づけられており、いずれも計算資源、データ、人材を一体として強化することを志向している。特に、AIとHPCの統合的運用を前提とした研究基盤の構築や、国家的なミッション設定型の研究推進は、研究成果の創出速度を大きく左右する要素となっている。

日本においても今春、政府は「第7期科学技術・イノベーション基本計画」を開始し、あわせて文部科学省は「AI for Scienceの推進に向けた基本的な戦略方針」を策定した。これにより、AI時代の研究システムへの移行は、国家戦略として推進される枠組みができた。ただし、それが研究現場でどのように実装し得るのかについては、今後の取り組みに依存する部分が多い。日本にとっての主要なボトルネックは、個別要素の不足というよりも、それらの統合的運用の設計にある。すなわち、計算資源、データ基盤、人材が個別には存在していても、それらが連携して機能する仕組みが十分に確立されていない点が、研究開発の加速を制約している。

この認識に立てば、主要な論点は大きく三点に整理できる。

第一に、AIとHPCを統合した計算基盤と、分野横断的に利用可能なデータ基盤の整備である。単なる資源の拡充ではなく、研究者が実際に利用可能な形での提供、すなわちアクセス性と運用設計が重要となる。

第二に、AI時代の科学の在り方や、分野横断型の研究体制の構築である。AI人材と分野専門人材の協働は不可欠であるが、現状では、その枠組みや評価の在り方は依然として試行錯誤の段階にある。

第三に、国際連携の再設計である。AI基盤においては米国が、制度設計においては欧州が先行するなか、日本はすべてを自前で対応することは現実的でない。したがって、どの領域で自律性を確保し、どの領域で国際連携を積極活用するかの戦略的選択が重要となる。

これらの変化は研究環境の変化にとどまらず、科学技術研究の営みそのものに影響を及ぼす。特に、仮説生成や知識統合のプロセスにAIが関与することにより、研究課題の設定や成果の評価の在り方も変化していく。この点は、期待とともに難しさも認識しておく必要がある。すなわち、データの質やバイアス、モデルの解釈可能性といった問題は依然として重要であり、分野によるAIの適用可能性にも多様性が存在する。

AI for Scienceは、科学技術・イノベーションのエコシステムの構造的転換を伴う長期的な潮流である。その中で重要なのは、技術の進展を前に受動的に対応するのではなく、どの領域に資源を投入し、どのような研究体制を構築して価値創出をしようとするかを主体的に見極めていくことが求められる。本講演では、こうした変化を俯瞰しつつ、AI for Science時代の研究開発への視座を提示する。

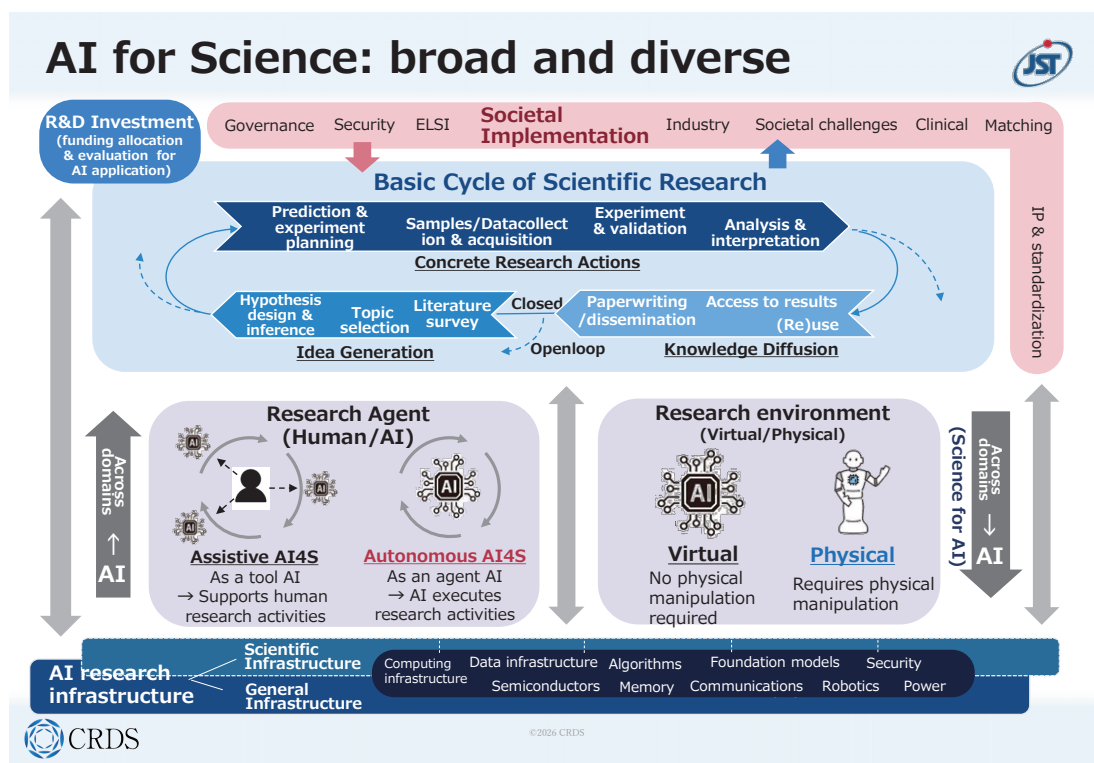
略歴

学習院大学理学部化学科 物理化学教室 卒、グロービス経営大学院経営学修士 (MBA)。
2003年科学技術振興事業団 (現 科学技術振興機構/JST)
2007年JST研究開発戦略センター (CRDS) フェロー、ナノテクノロジー・材料ユニットリーダー等を経て、
2018年よりJST研究監、同年CRDS総括ユニットリーダー・フェロー (現職)。
AI for Scienceや先端研究インフラ、産学連携によるエコシステム形成を推進・支援。2015年より文部科学省 技術参与として、政府戦略の立案と実行に携わり、材料関連の国家プログラム「マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM)」を統括するプログラムオフィサーを兼任。

This lecture builds on the analysis presented in the JST-CRDS report *“Trends in AI for Science 2026”* and aims to organize the structural changes that advances in AI are bringing to research and development methodologies and to the broader ecosystem of science, technology, and innovation, as well as to consider their implications.

Recent developments in AI go beyond merely improving the efficiency of data analysis and are becoming increasingly embedded in the research process itself. AI is beginning to play roles in hypothesis generation, exploration of experimental conditions, enhancement of simulations, and connecting knowledge across disciplines. These developments suggest that science — traditionally evolving through experimental, theoretical, computational, and data-driven paradigms — is transitioning toward a new paradigm that incorporates AI.

A key feature of this transformation is the mutually reinforcing relationship between AI and science. The accumulation of scientific data supports the advancement of AI models, which in turn accelerate new discoveries. This feedback loop not only advances individual disciplines but also facilitates cross-disciplinary knowledge integration that has been difficult to achieve. It is also expected to provide a driving force for a shift from discipline-centered research toward more problem-driven and integrative approaches.



An illustrative example is protein structure prediction, exemplified by methods such as the AlphaFold system. These approaches enable highly accurate structure prediction from sequence data, dramatically reducing the time required for experimental determination. More importantly, they shift research bottlenecks from structure determination to downstream stages or layers, including functional interpretation, interaction analysis, and validation for applications such as drug discovery. In this way, AI not only improves individual steps but is beginning to reshape the overall structure of the research process.

At the same time, this transformation depends heavily on research infrastructure and systems. In major actors such as the United States, Europe, and China, AI for Science is positioned as a national strategy, with integrated efforts to strengthen computational resources, data, and human capital. In particular, the integration of AI and high-performance computing (HPC), together with mission-driven research programs defined around clearly articulated goals, has become a key factor influencing the pace and scale of scientific output.

In Japan, the 7th Science, Technology and Innovation Basic Plan was formulated in March 2026, alongside the Strategic Policy Framework for the Promotion of AI for Science by MEXT. Together, these developments have

established a framework for promoting the transition toward AI-enabled research systems as a national strategy. However, how this can be implemented in practice at the research level will largely depend on future efforts. For Japan, the primary bottleneck lies less in the lack of individual elements and more in their integration. Although computational resources, data infrastructures, and human talent exist, mechanisms for coordinated operation remain insufficient, constraining the acceleration of research and development.

From this perspective, several key issues can be framed in three areas.

First, the development of integrated computational infrastructure combining AI and HPC, together with cross-disciplinary data platforms. What matters is not only expanding resources but also ensuring accessibility and effective operational design.

Second, the evolving nature of science in the AI era, along with the establishment of cross-disciplinary research systems. Collaboration between AI specialists and domain researchers is essential, yet frameworks for collaboration and evaluation remain under development.

Third, the redesign of international collaboration. With the United States leading in AI infrastructure and Europe in institutional design, it is not realistic for Japan to develop all capabilities independently. Strategic choices are therefore required regarding where to maintain autonomy and where to actively leverage international collaboration.

These changes extend beyond research environments to influence the very practice of scientific research itself. As AI becomes involved in hypothesis generation and knowledge integration, it may reshape how research questions are formulated and how outcomes are evaluated. At the same time, it is important to recognize not only the opportunities but also the challenges. Issues such as data quality, bias, and model interpretability remain critical, and there is substantial heterogeneity in how AI can be applied.

AI for Science represents a long-term structural transformation of the science, technology, and innovation ecosystem. In this context, it is important not to respond passively to technological progress, but to actively assess where to invest resources and how to design research systems to create value. This lecture presents a conceptual lens on research and development in the era of AI for Science, based on an overview of these developments.

Brief Biography

B.S. in Chemistry, Gakushuin University (Physical Chemistry Lab). Holds an MBA from Globis University Graduate School of Management.

Joined the Japan Science and Technology Agency (JST) in 2003.

Since 2007, has served at the Center for Research and Development Strategy (CRDS), JST, as a Fellow and Unit Leader for Nanotechnology and Materials, among other roles. Since 2018, serves as Director at JST and as Principal Leader at CRDS (current position).

Engaged in the promotion of AI for Science, advanced research infrastructures, and ecosystem development through industry-academia collaboration. Since 2015, has also served as a Science and Technology Advisor to MEXT, contributing to national strategy formulation and implementation, and serves as Program Officer for the national program "Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan (ARIM)."