AI for Science革新的研究推進事業
AI to Redesign Scientific Exploration：ARiSE

国際・融合型について

2026.10.13

推進統括（PO）：上田　修功（理化学研究所）

自己紹介

上田 修功 (Naonori Ueda) 博士(工学)

略歴

1984年 大阪大学大学院通信工学専攻修士課程修了.
　　日本電信電話公社(現NTT) 横須賀電気通信研究所入所
1993年 米国Purdue大学客員研究員
1997年 トロント大学 招聘研究員
1999年、2000年　英国ロンドン大学 招聘研究員
2010年 NTTコミュニケーション科学基礎研究所(NTT CS研) 所長
2016-2023年 同研究所 上田特別研究室室長(NTTフェロー)
2019-2026年 JST CREST(数理的情報活用基盤)　研究総括
2019年 理化学研究所革新知能統合研究センター(RIKEN AIP) 副センター長

2023年-現在 RIKEN AIP 副センター長
　　NTT CS研　リサーチプロフェッサ(客員フェロー)

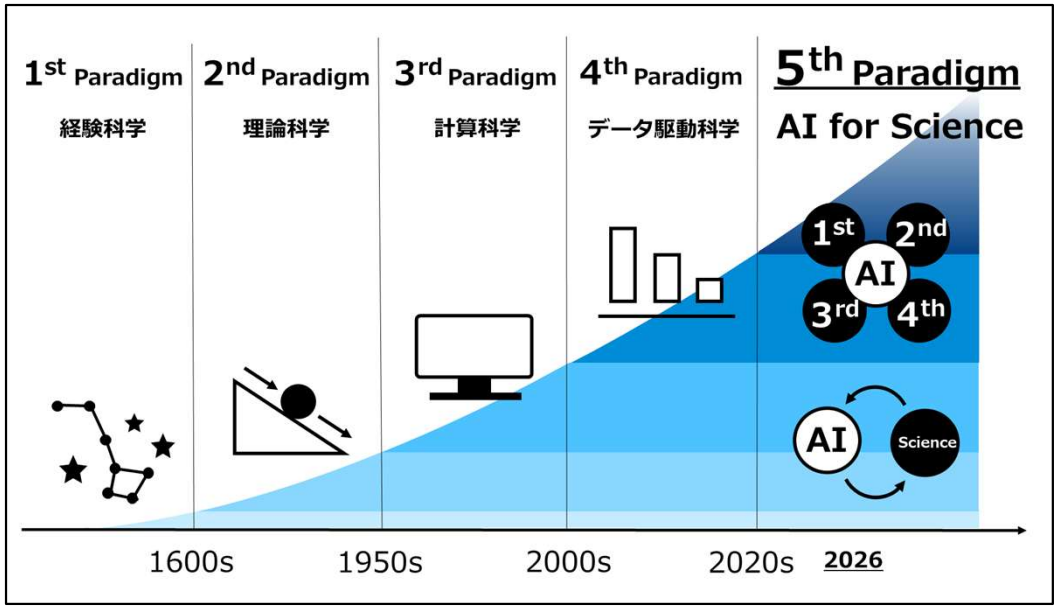
専門

機械学習(AI)とその自然科学(物理学、医学など)への応用

AI for Scienceの潮流

サイエンスの新たな時代

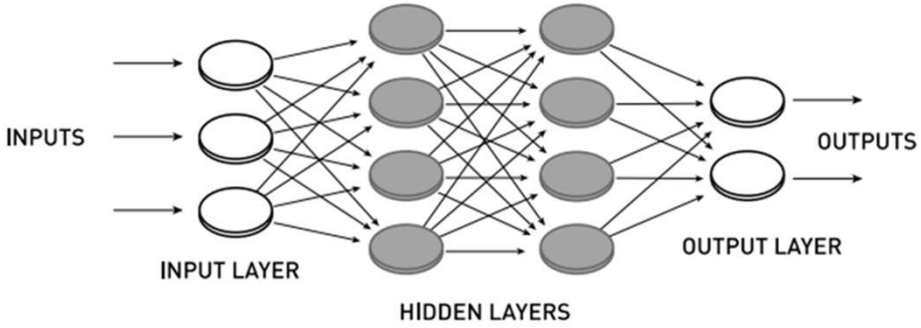
- 第1のパラダイム「経験科学」（実験科学）、第2のパラダイム「理論科学」、第3のパラダイム「計算科学」、第4のパラダイム「データ駆動科学」と変遷してきた
- 2020年代に入り、AIが研究プロセスのあらゆる段階に入り込み、仮説生成や実験工程、解析、知識統合などの方法を変えつつある
- **第5のパラダイム（＝AI for Science）**



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

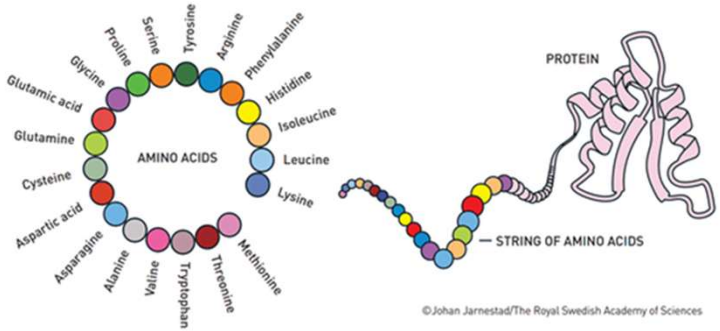
2024年ノーベル賞

「科学研究 → AI」：AIそのものの研究開発



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

「AI → 科学研究」：AIを活用した研究



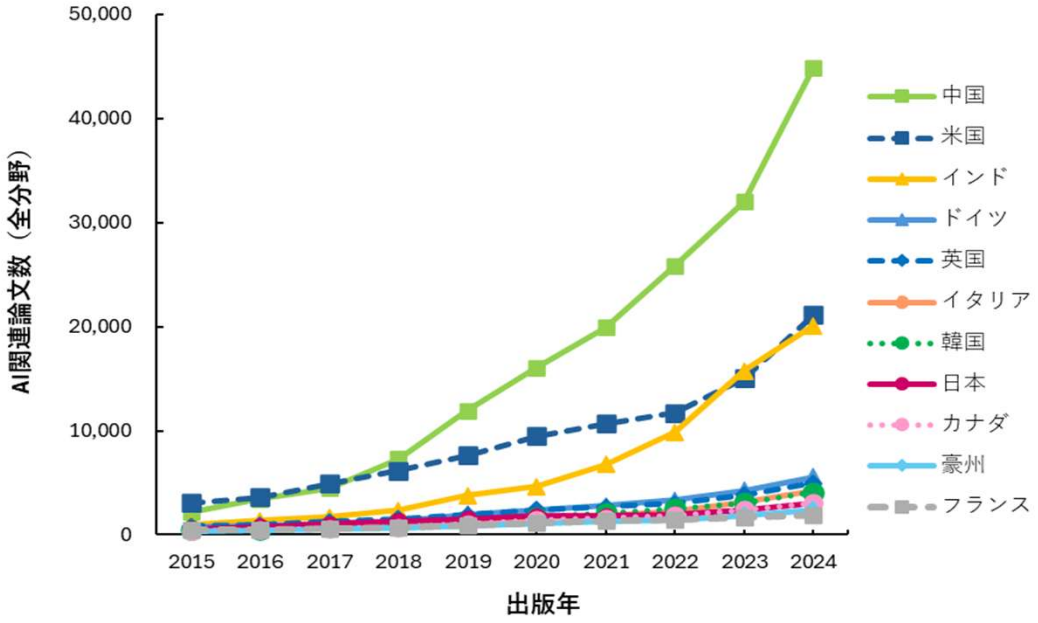
ノーベル化学賞：Demis Hassabis、John M. Jumper「タンパク質の構造予測（AlphaFold）」

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

© Japan Science and Technology Agency (JST) ARiSE

現状分析とARiSEで目指す方向性

国別のAI関連論文数（全分野）



2015年～2024年における全論文数に占めるAI関連論文数（全分野）の割合を示している。2024年を同10か国で比較すると、多い順に、インド、韓国、中国、カナダ、米国、英国、豪州、ドイツ、イタリア、日本であり、日本は10位（7.5%）

〔ARiSE採択課題の国際連携パートナー〕

＊提案書をもとに算出。1提案につき複数国・地域との連携あり

相手国・地域	件数*
アメリカ	10
ドイツ	7
イギリス	5
シンガポール	4
カナダ	2
フランス	2
スペイン	2
デンマーク	1
韓国	1
インド	1
アイルランド	1
イタリア	1
オランダ	1
オーストリア	1
ノルウェー	1
オーストラリア	1
台湾	1

量の競争から、科学的知識を活かした質の競争へ

日本の強みである科学・工学の理論・知識とAIを融合し、
Theory-driven AI for Scienceで国際競争力の確立を目指す

© Japan Science and Technology Agency (JST) ARiSE

Data-driven からTheory-drivenへ

Theory-driven AI for Scienceは、サイエンス分野の理論をAIへの制約として利用するだけでなく、理論をモデルの構造や学習原理に組み込む考え方。
科学データから規則性を学習することに加え、サイエンス分野の理論とともに学習することにより、少量データでの推定、未知の条件への汎化、科学的理解の深化を目指す。

考え方	科学知識の扱い	主な狙い
Data-driven AI	観測・シミュレーションデータから規則性を学習	データに基づく予測・推定
Physics-informed AI	支配方程式や保存則等を損失関数や制約に反映させる	物理法則と整合する学習
Theory-driven AI	理論をモデル構造、表現空間、学習原理に反映させる	理論に支えられた汎化・理解

科学理論は支配方程式だけを意味するわけではなく、対称性、不変性、保存則、幾何構造、因果構造、境界条件、スケーリング則なども含む。これらを損失関数だけでなく、ニューラルネットワークのアーキテクチャ、表現空間、学習アルゴリズムに反映することにより、汎用（外挿）や科学的理解が可能になる。

© Japan Science and Technology Agency (JST) ARiSE

国際・融合型の提案対象・研究費・採択課題数

提案対象	研究費上限 (間接経費含む)	採択 課題数
新興・融合分野や戦略方針に定められた重点分野を含むあらゆる分野 AI for Scienceに係る独創的な研究およびツール開発を推進し、**新たな勝ち筋の探求**、もしくは国際的なチャレンジへの参画や国際ベンチマークでの高スコアの達成などの**国際トップリーグへの参画を目指す**。 既存のAI技術の適用ではなく、これまで解けなかった科学的な問いの解決を目指して、特定の科学分野における固有の理論、法則、構造的知見、制約条件等をAIに組み込み、それらを学習・推論過程と統合した革新的なAI技術（AI駆動型ロボット等も含む、以下同様）を創出していく研究開発を推進する。 ● 特定の研究分野における独自のデータや実験プロトコール、シミュレーション技術等をもとに、当該研究分野の科学的な整合性を有するAIモデル・AIエージェントの開発、AI駆動型ロボットやモジュール等の試作開発や実証を推進する研究開発課題 ● AIモデルの適用を拡大するためのAI技術に適したデータの構築方法の開発や、質の高いデータ収集のための自動計測・分析手法の開発や実証まで挑戦する研究開発課題 なお、「国際・融合型」では、国際連携パートナーと連携する研究開発提案を推奨※1します。	総額2億円※2 （直接経費： 約1.5億円）	19件

※1 詳細については、公募要領「3.3.3 国際連携体制について」をご確認ください。
※2 研究費は、原則として2億円（間接経費含む）です。ただし、提案する研究開発課題の目標達成に向けて真に必要な場合は提案時点から、予算額の必要性と妥当性を示していただくことで、最大6.5億円（通期；2年半以内、間接経費含む）を上限に提案することも可能とします。

© Japan Science and Technology Agency (JST) ARiSE

国際・融合型　採択課題

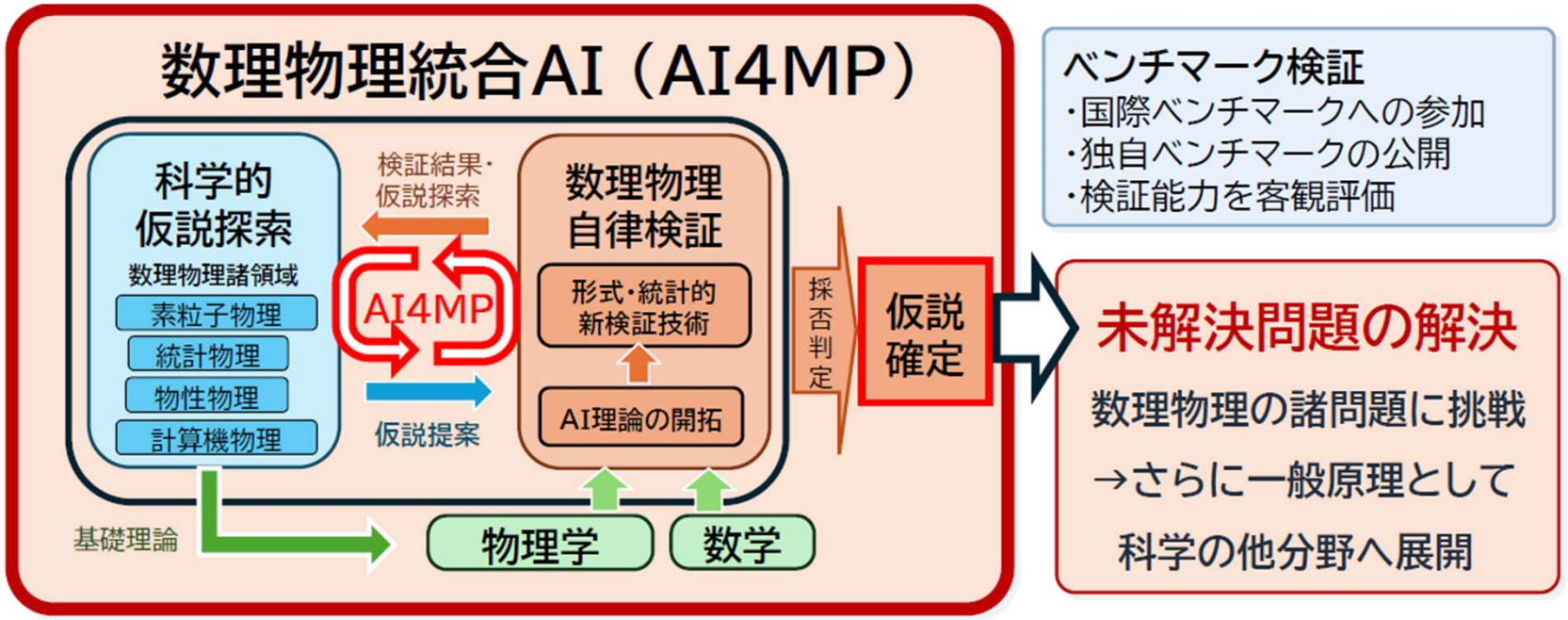
「数理物理統合AIの創成」
研究開発代表：**橋本 幸士**（京都大学 大学院理学研究科　教授）
共同研究開発代表：**今泉 允聡**（東京大学 大学院総合文化研究科　准教授）

数学・物理による自律検証で、科学の未解決課題に挑む

データから答えを予測するだけでなく、科学的に考え、答えが正しいかを検証できるAI

数理物理とAIの双方向融合：

1. AI活用の新自律検証技術で科学仮説を判定
2. 数理物理の成果をAI理論と技術へ還元



領域内体制：数理物理サイド5グループ・AIサイド3グループの協力体制
領域外体制：学習物理学コミュニティの継承、米Genesisミッションとの連携

© Japan Science and Technology Agency (JST) ARiSE

国際・融合型　採択課題

「国際連携AI駆動型MOF-X研究基盤の構築」

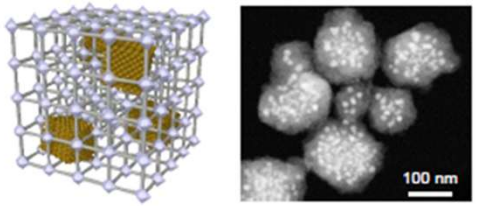
研究開発代表：田中 功（京都大学 高等研究院　AI for Materials 国際連携研究拠点 特定拠点教授）
共同研究開発代表：鹿島 久嗣（京都大学 大学院情報学研究科　教授）
チンユー・ヤン（南洋理工大学　材料科学工学系　材料科学プレジデンツ・チェア教授）

人間を研究から外すAIではなく、人間の発見能力を拡張するAI

新しいAI技術を実現し、材料研究の進め方を変える

「何を変えると何が変わるか」という仮説を、AI・研究者・実験・計算の循環で検証

対象：MOF（金属有機構造体）に異種要素Xを組み合わせたMOF-X
（北川 進2025ノーベル化学賞）
脱炭素型エネルギーシステムに貢献



課題：同じ材料でも、実験条件で性能が変わる
既存の手法では、こうした違いを十分に扱えない

AI for MOF-Xを実現する3つの中核技術を統合

① 動的科学表現
MOF-Xを実験文脈に応じて動的に表現

↓

② 反実仮想推論
「何を変えると何が変わるか」という科学仮説生成

↓

③ 研究者フィードバック（Human-in-the-loop）
研究者の選択理由と検証結果を学び、次の仮説提案を改善

AI仮説を実験・計算で検証する日本における研究基盤
系統合成・計算・自動構造評価・機能測定・オペランド測定

実験・計算 → データ → AI → 仮説 → 研究者判断 → 次の実験・計算

MOF-Xで実証

→　AI4M-hubに研究基盤・人材を集積

→　他材料・国内研究者に展開

AI4M-hub

AI × 計算 × 合成・処理 × 先端計測 × データ

国際研究ネットワークとの日常的な交流

シンガポールの国際研究拠点

ドイツ　NOMAD / FAIRmatとの連携

国際トップリーグとの交流 × 日本独自のAI4M研究基盤

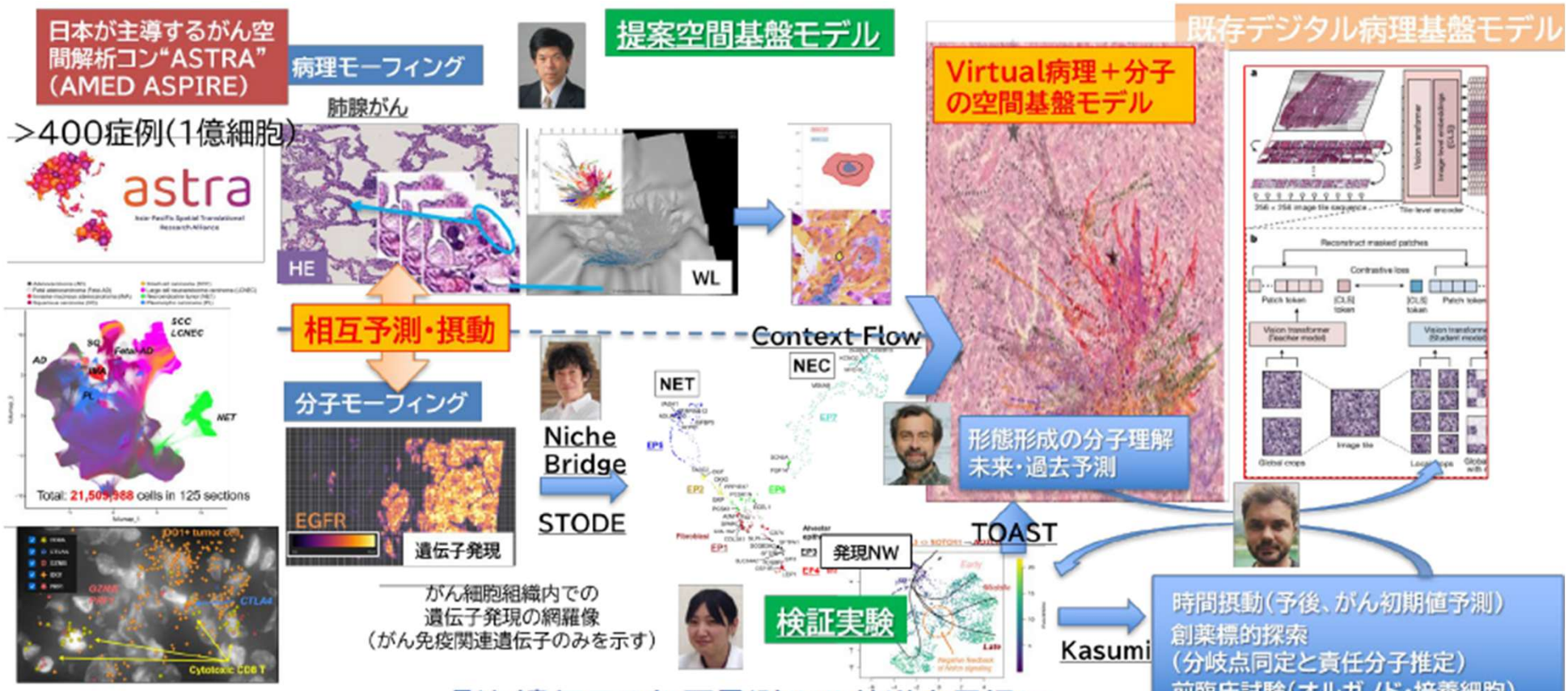
© Japan Science and Technology Agency (JST) ARiSE

国際・融合型　採択課題

「がん空間解析データを起点とした基盤モデルの構築と応用」

研究開発代表：鈴木 穣（東京大学 大学院新領域創成科学研究科　教授）
共同研究開発代表：角田 達彦（東京大学 大学院理学系研究科　教授）
鈴木 絢子（杏林大学 医学部　教授）

データから学ぶAIから、がんの仕組みに基づいて考えるAIへ



形と遺伝子の相互予測：WL軌道を足場に、
がん進行に伴う組織形態－遺伝子発現の連続変化（モーフィング）を生成

© Japan Science and Technology Agency (JST) ARiSE

AI for Scienceの国際ネットワークへの参画

優れた研究を起点に、日本のAI for Scienceを世界へつなぐ

POが研究の進捗を把握しつつ、国際連携の機会に裁量経費を採択課題へ配賦し、機動的な支援へ

1 研究項目を拡張

国際連携パートナーを追加

特にAI研究での連携を奨励し、必要な研究項目の追加を支援

2 共創機会を形成

国際連携イベント等を企画

共同ワークショップ、研究交流などの企画・実施を追加支援

3 世界と接続

国外イベント等へ参加

AI for Scienceに関する海外イベントでの発表・交流・ネットワーク形成を支援

ARiSEの国際連携を戦略的・機動的に強化

AI 連携体制・研究内容

世界のAI研究者との連携を組み込み、研究項目を拡張・高度化

NET 共創・ネットワーク

共同企画を起点に、継続的な研究交流と次の連携機会を形成

GO 国際発信・参画

ARiSEの成果と人材を発信し、AI for Scienceの国際的な場へ接続

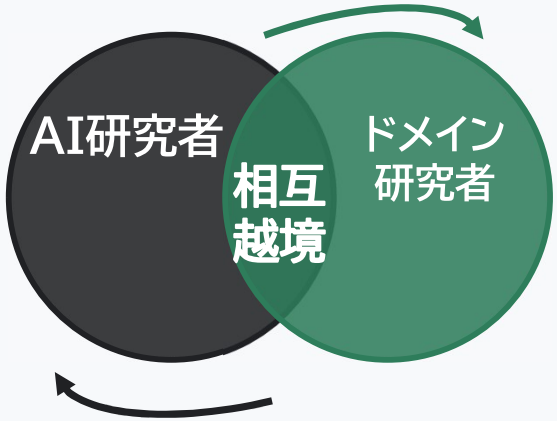
© Japan Science and Technology Agency (JST) ARiSE

ARiSE研究における相互越境の推進

「AIを科学に使う」から、「AIと科学がともに進化する」へ

共同研究

共同提案・共同研究開発



互いの問い・方法・データに踏み込む共創

研究成果

AI研究基盤
AI
新たなAIモデル、AIエージェント、AI駆動型ロボット基盤等

科学的成果
知
新たな知見、データ等獲得

人材
人
AI for Scienceネイティブな人材育成

展開と将来像

AIモデル等の他分野への展開

USE
社会・民間企業への実装につながるユースケース創出

3～5年後の科学研究プロセスの革新へ

AIと科学が共進化し、研究の進め方そのものを変える

© Japan Science and Technology Agency (JST) ARiSE