ACTIVITY REPORT

2024年度活動報告

国立研究開発法人産業技術総合研究所

覚醒プロジェクト

「覚醒プロジェクト」は、若手人材が、
産総研の保有する先端的研究設備等を活用することにより、
ディープテック分野の独創的かつ斬新な研究開発を推進し、
社会課題解決にチャレンジするプロジェクトです。

産業技術総合研究所（産総研）では2023年度より、ディープテック分野（社会課題の解決を目指す研究領域）における優れた若手人材の発掘・育成事業として、「覚醒プロジェクト」を創設しました。このプロジェクトでは、①１研究テーマあたり300万円の事業費の支援に加え、②各分野のトップクラスの研究者がプロジェクトマネージャー（PM）として伴走し、助言を行います。そして、③産総研が保有する最先端の研究施設、AI向けスーパーコンピューター「AI橋渡しクラウド（ABCI）」「マテリアル・プロセスイノベーション（MPI）プラットフォーム」などが無償で利用できる点が大きな特徴です。また、④事業終了後もPMや参加者による情報交換の場（アラムナイネットワーク）を用意しています。

2年目となる2024年度は、AI、生命工学、材料・化学、量子の4分野を対象とし、24件の研究テーマを採択しました。本冊子は、その活動成果を報告するものです。

覚醒プロジェクトはこれからも、さまざまな分野の若手研究者が混ざり合い、お互いの研究文化をリスペクトし合いながら、さらに飛躍していく場となることを目指します。

研究者自身だけでなく、世の中を覚醒させる研究を。

この制度の名称である「覚醒」というのは、一義的には採択された研究者がこの制度の研究を通じて「覚醒」してほしいという希望を表現していると思いますが、研究実施者たちの取り組みを見ていると、異なる意味もあるのではないかと思うようになりました。

それは、研究者がその研究を通じて世間あるいは世の中を「覚醒」させてほしいという希望を表現しているということです。自らも「覚醒」し、世間も「覚醒」させる。私自身も採択された研究者から刺激をもらうことによって「覚醒」したいと希望しています。

ぜひみんなで世の中をあっと言わせていこうではありませんか。

スーパーバイザー（SV）

松原 仁

京都橘大学 工学部情報工学科・
大学院情報学研究科 教授／
情報学教育研究センター長

1959年東京都生まれ。1981年に東京大学理学部情報科学科を卒業し、1986年に同大学大学院工学系研究科情報工学専攻博士課程を修了（工学博士）。同年、電子技術総合研究所（現産業技術総合研究所）入所。2000年に公立はこだて未来大学システム情報科学部教授、2020年に東京大学次世代知能科学研究センター教授となり、2024年より現職。専門は人工知能研究で、ロボカップの提唱者の1人でもある。著書に『将棋とコンピュータ』『鉄腕アトムは実現できるか？』『AIに心は宿るのか』など。人工知能学会元会長、観光情報学会前会長、株式会社未来シェア取締役会長。

高齢者との継続的な会話を行うための対話型エージェントシステムの開発

研究実施者　五十嵐俊治（東京大学大学院／東京都立産業技術大学院大学）

高齢者が自立した生活を行える社会の実現を支援する

■研究の背景

厚生労働省の健康寿命延伸プランでは、介護予防やフレイル対策、認知症予防を通じて健康寿命を3年延伸することが目標とされています。一方で、2025年度には約245万人もの介護人材が必要とされ、新規に年間6万人以上の確保が求められていますが、労働人口の減少によりその解決は困難です。また、高齢者の独居世帯や高齢者夫婦のみの世帯が増加しており、内閣府の方針にもロボットや音声デバイスが日常生活における生活支援や話し相手として関わりを深めることが言及されています。

■研究の概要

本研究の目的は、高齢者とエージェントが日常的に継続的な会話を行うことで、随意反応および不随意反応（ボイスバイオマーカー）をデータとして活用し、会話内容をベースとした健康寿命の延伸、そして高齢者の自立した生活を支援するための技術基盤を構築することです。ユーザーに継続的に会話を行ってもらうことが非常に難しい課題であるという経験から、物理的なロボットではなく、画面上の対話型エージェントシステムを開発し、モデリングや動作の柔軟性を高めました。

モデリングにおいてはVRoid Studioを使用し、私自身に似たAIエージェントをデザインしました。また、@pixiv/three-vrmを利用してパソコン画面上に3Dキャラクターを表示。背景には対話施設の相談室の風景を使用しました。さらに、半構造化面接を採用してユーザーの回答内容に合わせてChatGPT APIを用いた応答を実装し、Koeiro APIによる音声読み上げと、リップシンクによるAIエージェントの口の同期を実現しました。

このシステムを用い、参加者20名に対し、一人あたり1時間半から2時間程度の評価実験を実施しました。実験では、会話の発話内容に加え、認知機能を図るMMSE（Mini Mental State Examination）、老年期うつ病評価の尺度となるGDS15（Geriatric depression scale 15）、心電図、会話時の心理的な負担度を測るSTAI（State-Trait Anxiety Inventory）、および負担強度を測定する視覚的評価VAS（Visual Analogue Scale）といった多岐にわたる項目を取得しました（**図**）。

その結果、心理的負担と情報取得の検証について、2つの重要な知見が得られました。心理的負担の検証としては、人間による会話とAIによる会話の間では、心理的な負担度（STAI/VAS）に有意な差は見られませんでした。これは、高齢者にとってAIとの会話は、人間との会話と比較して大きな心理的な違いがないことを示唆しています。また、情報量の検証においては、AIと人間との会話で正答率や発話語数・情報量に大きな違いは見られませんでした。これは、高齢者がAIに対して自分の生活エリアや最近の出来事、ADL（日常生活動作）に関する内容を聞かれても、嘘をついたり、情報量を意図的に少なくしたりせず、正確な情報を答えてくれる可能性が高いことを示しています。

これらの成果は、AIが人間と同等の心理的な受容度を持ちつつ、安定した情報を引き出せる可能性を示しており、本研究内容は国際ジャーナルへの投稿という学術的な成果につながりました。

■今後の展望

今回開発したシステムを、さまざまな分野で使ってもらえるような汎用化システムとして構築していきます。さらに、ユーザーがどのような内容に興味を持っているのかをシステムが学習し、より相手のことを知った状態で会話ができるよう改善します。将来的には、数日前に怪我をした情報などを覚えて気にかけることで、人間とAIとの間に社会的な信頼関係が芽生えるのかといった、より深いインタラクションに関する検証を行います。

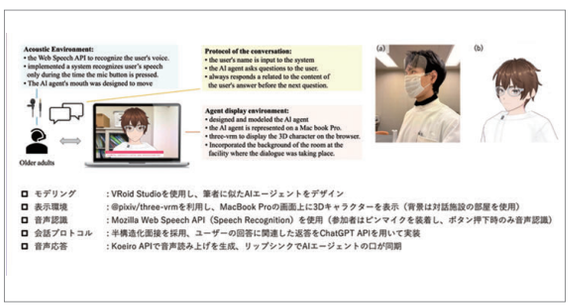


図　パソコンを使って被験者の心理的負担を評価する実験を実施。

SV/PMから　大西正輝

覚醒プロジェクト全体のスーパーバイザーをしながら、AI分野で2名の研究実施者を受け入れ、PMを担当しました。研究者は自分で問題設定を行い、解法を考え、それを実装・評価し、研究発表としてまとめるという一連の作業を繰り返します。そして、このサイクルを通して困難に直面しながらも、それを乗り越えて成長していきます。
五十嵐俊治さんは、自発的に研究を進め成果を上げました。綱島秀樹さんは、系統的汎化という難しい問題設定を行い、機械学習で解くための手法を開発してベンチーマーク問題を作成し、提案手法の有効性の評価を行いました。研究の詳細を理解してもらえなかったり、思うような結果が出ないこともありましたが、丁寧に時間をかけて乗り越えていきました。
覚醒の研究期間は短く、研究としての道はまだまだ半ばですが、覚醒で得られた成果や人的ネットワークを活用しながら次のステージへの挑戦に活かしてほしいと思います。

因果推論による系統的汎化エージェント

研究実施者　綱島秀樹（早稲田大学）

未知物体に遭遇した際に適切な行動選択率を向上させる

■研究の背景

公共性が高い自動運転を見据えた事業の中では、未知の物体に遭遇した際の運転制御が問題になっています。一方で、統計的手法である機械学習自体は学習したデータ（分布内データ）に強く依存しているため、学習していないデータ（分布外データ）に対しての汎化性能は著しく低下します。そこで、タスクを実行するエージェントの分布外データの一種である、「組み合わせ内挿データ」への汎化性能の向上を目指しました。

■研究の概要

研究では「組み合わせ内挿データ」への汎化性能向上を目的として、系統的汎化エージェントの開発に取り組みました。系統的汎化とは、テストの際に訓練時に登場しない組み合わせと、訓練時に登場しない系列長のデータに対して性能を向上させることを目的にする分野です。この問題を解くにあたっては、記号接地の問題として捉えました。例えば、画像と言語指示に「緑色の丸」が与えられた場合、機械学習モデルは統計情報に引っ張られ、「緑色の丸」という一つの概念として処理しがちです。しかし、正しくは「色：緑」と「形：丸」という要素に分解し、記号を適切に接地する必要があります。この誤った記号接地が、機械学習の統計的な性質によって生じるバイアスの原因であると考えました。

このバイアスを取り除くために因果推論を導入し、画像、言語指示から行動を決定するエージェントにおいて、学習の悪影響となるものの観測が困難な未観測交絡因子が存在すると仮定しました。そして、この未観測交絡因子の影響を軽減するため、因果推論におけるフロントドア調整を利用することを提案しました。さらに、因果推論のメカニズムを組み込んだ、新しいアーキテクチャFASG（Front-door Adjusted Symbol Grounding）を提案しました（**図**）。FASGは特徴量の融合の後にフロントドア調整を行う構造を採用し、ファインチューニング時のみに追加する外付けモジュールのような形で利用されます。また、FASGを効果的に活用するために、言語と空間的なアテンションを取るVaLSAN（Vision-and-Language Spatial Attention Network）という新規アーキテクチャも提案しました。

事前学習では、教師データの行動との交差エントロピー（Behavioral Cloning）とInfoNCEと呼ばれる距離学習（対照学習）を組み合わせ、事前学習済みのVaLSANを利用して強化学習によるファインチューニングを実施しました。評価指標としては、ゴール到達時の報酬を要したステップ数で調整した平均報酬と、平均タスク達成率の2つを用いています。そして、既存の強化学習手法の中で最も高い性能を示したものをベースラインとして採用し、系統的汎化テストにおける性能を比較しました。

実験の結果、提案手法であるFASG-VaLSANは、ベースラインに対して系統的汎化テストで平均約8.5ポイントの向上を達成し、因果推論を用いた記号接地のアプローチが、組み合わせ内挿データに対する汎化性能を大幅に改善する上で非常に有効であることを示しました。

■今後の展望

本研究では、外挿問題の一種である系統的汎化を扱うエージェントのためのベンチマークを開発し、因果推論によってバイアスを軽減するFASGを提案しています。さらに、その活用を促進するアーキテクチャVaLSANを提案しました。この成果を国際ジャーナルであるTMLRへ投稿することで、より実世界に近い設定、例えばロボティックシミュレーションや自動運転シミュレーションへと応用して、ベンチマーク開発と提案手法の検証を進めていきます。

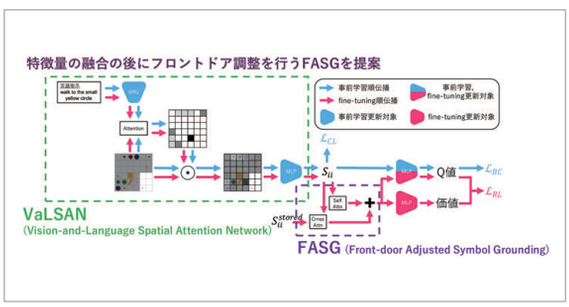


図　特徴量の融合の後にフロントドア調整を行うFASGを提案した。

産業技術総合研究所 人工知能研究センター　社会知能研究チーム長

2002年大阪府立大学大学院博士後期課程修了。同年理化学研究所バイオ・ミメティックコントロール研究センター研究員。2006年産業技術総合研究所情報技術研究部門研究員。その後、同所サービス工学研究センター、人間情報研究部門を経て、現在人工知能研究センター社会知能研究チーム長。大規模な人の流れの計測とシミュレーション、同化、最適化の研究に従事。コロナ禍においてはＪリーグなどと協力しながら安全な大規模イベントの開催方法を検討してきた。深層学習のハイパパラメータ最適化、アーキテクチャの探索などAutoMLの研究にも興味を持つ。2020年度、2021年度電子情報通信学会ISS論文賞、第77回電子情報通信学会論文賞、2021年度人工知能学会現場イノベーション賞などを受賞。博士（工学）。

CAE活用の幅を広げ、熟練技能を代替する高速なFEMサロゲートモデルの構築

研究実施者　加藤拓也（大阪公立大学）

溶接技術の熟練者が持つノウハウを数値化

■研究の背景

ものづくり分野では、仮想空間での設計や最適化により開発期間を短縮する、「フロントローディング」が推進されています。船舶外板の線状加熱成形や金属積層造形などの溶接・加熱加工において、熱変形や残留応力を事前に評価することは極めて重要ですが、高精度な熱弾塑性解析は多大な計算時間を要するため、現場のリアルタイムな要求に応えることは困難です。本研究では、詳細解析の精度を維持しつつ、物理法則を考慮したAIによって、高速・高精度な予測を行うシミュレーション基盤の構築を目指します。

■研究の概要

本研究では、熱弾塑性解析理論とグラフニューラルネットワーク（GNN）を融合させた、3次元物理場予測のための高速代理モデル「STEPS（SE(3) Thermal Elastic-Plastic Simulation）」を開発しました。従来の断面寸法から固有変形を予測する手法では、3次元的な拡張や複雑な溶接順序が影響するタスクへの対応が困難でした。そこで本手法においては、任意のメッシュ構造に対して、熱伝導解析から得られる時系列の温度場を入力として、過渡状態を含む応力・ひずみ場を3次元的に予測する手法を構築しました。

手法の核となる特徴の1つは、予測値が物理法則を満たすように、熱弾塑性理論の基礎式を微分方程式としてモデルに組み込んだ点にあります。具体的には、応力の釣り合いや全ひずみの定義式から導出される物理量を算出し、空間微分を介して損失関数に組み込むことによって、予測結果が物理的整合性を維持するように学習を誘導しています。また、マルチタスク学習における対数尤度に基づいた動的な重み付けを採用し、スケールの異なる複数の物理場を安定的に同時学習させる仕組みを構築しました。

さらに、3次元物理場予測の精度向上を目的として、モデルにSE(3)同変性を導入しました。応力のようなテンソル量は、物体の回転に伴いその成分値が変化しますが、本手法では球面調和関数を用いた基底変換により、この回転変換規則をネットワーク内に明示的に組み込んでいます。これにより、任意の方向での加熱に対して物理的に等価な応答を予測できるようになり、従来のデータ拡張（Data Augmentation）に頼ることなく、高度な汎化性能を実現しました。

本手法の検証として、200mm四方の鋼板に対するガス加熱を模した移動熱源の解析データ1000ケースを用いて学習を行いました。その結果、熱弾塑性FEM解析では約345秒要していた計算を約3.14秒で完了し、約110倍の高速化を達成しました。予測された物理分布は、過渡状態を含めFEM解析結果と良好に一致することを確認しています。

■今後の展望

本技術を、多層溶接や複雑な曲面加工を伴う船舶外板成形へ拡張する予定です。現在は単一の加熱条件を予測対象としていますが、今後は複数の加熱線が交差するケースや、熱源サイズ、板厚などのパラメータを変化させた多様なデータセットで学習し、モデルの汎化性能を検証します。将来的には、この高速代理モデルを最適化アルゴリズムと組み合わせることで、熟練技能を代替する「AI線状加熱」や、金属積層造形のリアルタイム制御への貢献を目指します。

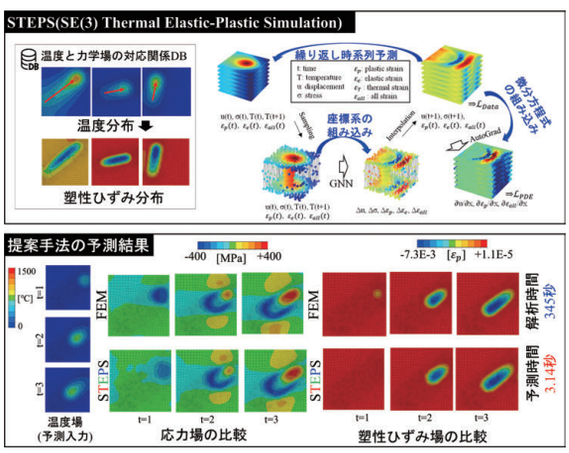


図　提案手法STEPSとその予測結果

PMから　牛久祥孝

今年度は篠田理沙さんがAI×農学、加藤拓也さんがAI×溶接ということで、AI応用の最前線を開拓する意義深い取り組みになりましたし、私自身非常に勉強になりました。

篠田さんは、自分自身で各所に問い合わせてデータを集めてラベルを付けて…といった、泥臭い作業に突き進むバイタリティが既に確立されている方でした。さらに生成AIの農学向けベンチマークとしての整理や体系化といった、上位レイヤーの取り組みにも幅を広げられたのが奏功したと思います。加藤さんは、溶接のシミュレーションと機械学習の融合という未開拓エリアを果敢に挑戦された姿が非常に印象的でした。グラフニューラルネットワークとの奮闘は大変だったと思いますが、現場で使われるようなサロゲートモデルの実現を目指して引き続き取り組んでいただければと思います。

今後も積極的に異分野融合へ挑戦し、私の思いもよらないテーマへと「覚醒」されることを楽しみにしております。

農業分野における現場応用のための大規模言語視覚モデルの開発

研究実施者　篠田理沙（京都大学）

農家でも使える大規模視覚言語モデルの構築を目指す

■研究の背景

近年、大規模視覚言語モデルは目覚ましい発展を遂げる一方で、農業分野においては個々のタスクに対するモデル開発が主流で、それらは実際の農業現場で高度なコンピュータ知識が求められるため普及しにくいという課題があります。そこで、機械学習モデルと農作業従事者をつなぐ、農業分野特化型の大規模言語視覚モデル（VLM）の開発に取り組み、農作業を支援するために必要な広範な知識領域にわたる情報をモデルから得ることを目指します。

■研究の概要

農業において作物の状態を正しく理解し、適切な対応策を取ることは持続可能な作物生産にとって必要不可欠です。視覚言語モデルの進捗によって自然言語ベースのコミュニケーションを通じ、農家が簡単にAIを使えるようになると期待されています。一方で、大規模言語視覚モデル（VLM）が農業分野において何を得意とし、何を不得意としているのか、また今後どの能力を強化すべきかについては、これまで十分に明らかにされていませんでした。そこで本研究では、これらの点を体系的に明らかにすることを目的として、農業工学における主要分野および実際の農業に関連する7つの農業トピックを横断的に評価可能なベンチマーク「Agronomist AI Benchmark（AgroBench）」を提案します（**図**）。データセットの構築にあたっては、海外の研究者によって収集された、権利上問題がない画像を活用し、QAは信頼性の高い情報源を基に、人手による確認・補正を加えて作成しました。これにより、既存のデータセットでは十分に分析できなかった視覚言語モデルの特性や課題を、より詳細に明らかにすることが可能となりました。

AgroBenchを、8つのオープンソースVLMとAPIを持つ4つのクローズドソースVLMを使用して評価した結果、最も困難なタスクは雑草識別（WID）であることが分かりました。これは、作物に比べて雑草に関する知識がVLMの訓練時に十分に訓練されていないことを示唆しています。また、すべてのモデルの病気識別（DID）の結果は、病害管理（DMN）の結果より低くなりました。これは、視覚言語モデルが文脈情報においては比較的広範な知識を持っている一方、知覚的な改善の余地がまだあることを意味します。

農業タスクに応じて発生する誤りの種類を分析した実験では、どのように誤った回答に至ったかを手動で分析しました。その結果、VLMが選択肢の外観や関連知識を正確に説明できない場合（例：病気の症状や昆虫の特徴を説明できない、病気にかかった作物の治療方法や高収量の作物管理方法を知らない）を含む知識不足のエラーが51.92％となりました。また、VLMが画像内の回答に関連する部分に注意を払えない場合の視覚的エラーが32.69％と次いで多く、回答をサポートするためにハルシネーションを起こしている例も確認できました。また、VLMが選択肢を正確に説明できるが、誤った結論を導く場合に発生する推論エラーが7.6％という分析結果になりました。

このように、視覚言語モデルが農業分野で誤りを犯す主な原因は、知識不足であることが分かりました。そこで、知識を補う手段としてRetrieval-Augmented Generation（RAG）を実装しました。現在は実装段階にあり、さまざまな農業関連の文書を収集し、それらをデータベースとしてRAGの開発を進めています。

■今後の展開

AgroBenchは、画像認識分野におけるトップカンファレンスである ICCV 2025 に採択され、すでに発表およびデータセットの公開を行っています。今後は、本ベンチマークを基盤として、RAGやファインチューニングといった手法を用いた、性能向上のアプローチについても検討・実施していく予定です。

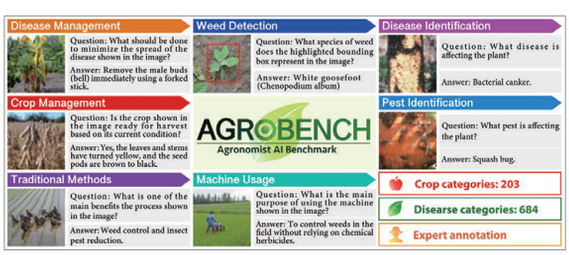


図　AgroBenchの概要

株式会社NexaScience　代表取締役／
オムロン サイニックエックス株式会社 リサーチバイスプレジデント

2013年日本学術振興会特別研究員およびMicrosoft Research Redmond Intern。2014年東京大学大学院情報理工学系研究科博士課程修了、NTTコミュニケーション科学基礎研究所入所。2016年東京大学情報理工学系研究科講師。2018年よりオムロンサイニックエックス株式会社Principal Investigatorおよび2019年より株式会社Ridge-i Chief Research Officer、2024年よりオムロンサイニックエックス株式会社Vice President for Research並びに株式会社NexaScience 代表取締役、現在に至る。主としてコンピュータビジョンや自然言語処理を対象として、機械学習によるクロスメディア理解、AI for Scienceの研究に従事。

統合的音声言語モデルの開発：世界の言語に通用する自然言語処理の実現に向けて

研究実施者　髙橋 舜（奈良先端科学技術大学院大学）

どんな言語に対しても、音声から文字記号の体系を作り出すAI技術を開発

■研究の背景

現在の自然言語処理技術の進歩は目覚ましいものの、「テキストありき」という根本的な限界があります。世界に現存する自然言語のうち、約93%には文字体系が確立・普及していないため、テキストを前提とする従来技術は世界のほとんどの言語には使えません。一方で、人間はどんな言語であっても、読み書きより先に音声から言葉を獲得します。これが、テキストに強く依存する現在のAIの言語獲得との決定的なギャップとなっています。

■研究の概要

本研究は、世界各地のさまざまな言語の話者を、技術発展から取り残さないというゴールに向けた基礎研究です。どんな言語に対しても、音声から文字記号の体系を自ら作り出すAI技術の開発を目指します。獲得する記号や文字の種類は、その後の「聞く」「話す」などの基礎言語能力の獲得に強く影響することが先行研究で分かっています。そこで、基礎言語能力に合わせた記号表現を獲得する学習タスクの枠組みを確立し、文字の重要な特性である「誰が書いたか」を表さない話者不変性を記号に持たせるため、話者IDを活用して記号の話者不変性を向上させます。

本研究では、主に次の2つ課題に取り組みました。1つは、「基礎言語能力の獲得を通じた記号獲得を可能にする統合枠組みの提案・評価」、もう1つは「話者不変性向上のために効果的な話者埋め込み表現の獲得と活用方法の確立」です。研究実施期間の前半では、確率論（ベイズの定理）に基づいたトップダウン方式の学習枠組みを提案し、対象言語の文字記号の種類数（音素目録の大きさ）の推定・学習が可能となりました。実験評価の結果、人手で作られた記号表現（音素表記）と強く対応する表現の学習が確認されたものの、先行研究の評価手法であるABX評価では従来手法に劣後する結果となりました。一方で、事前学習済み話者埋め込みを利用したアプローチの実験評価からは、話者埋め込みが話者不変的な記号の獲得に強く貢献することを確認しました。話者不変性をさらに高める活用方法が必要であり、英語以外の言語での評価が必要との課題が浮き彫りになりました。

そこで、研究実施期間の後半ではこうした課題に取り組んでいます。まず、「話者不変性向上のために効果的な話者埋め込み表現の獲得と活用方法の確立」について、話者埋め込みを元にした、ある種の連続分布による記号表現の揺らぎを導入しました（**図**）。また、他言語（英語以外）で評価するために、フランス語や中国語、ウォロフ語で追加実験を行ったことで、ABX評価の観点において性能差が明らかになりました。

他にも、「文字記号の埋め込み表現間への斥力の導入」「符号化過程の可変レート化/セグメンテーションの導入」「連続分布の離散化による柔軟な記号の種類数分布の導入」といったさまざまなアイデアを試したものの、ABXやAMI（補正相互情報量）の性能改善には至りませんでした。その結果、ABXとAMIの2つの評価の観点が必ずしも相関しているわけではなく、両方ともきちんと調べる必要があることが分かりました。また、データノイズに対しては、今回の揺らぎによってよりロバストになったことが考えられます。

■今後の展望

今後は、モデルの実装レベルでの改良や、音声生成を含めた音声言語モデリングへの拡張を目指します。また、さまざまな複雑性の音素体系を持つ言語間での比較実験を行い、対象言語の音韻に合わせた記号体系を学習できるか検証します。そして、大規模なデータセットでの実験評価や、より高度な自然言語処理への応用展開を通じた評価を行います。

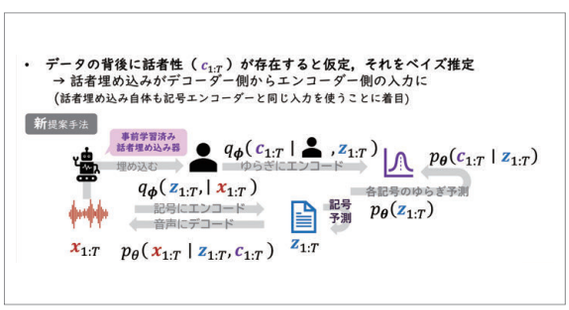


図　話者埋め込み表現の獲得について、連続分布による記号表現の揺らぎを導入した。

PMから　**金崎朝子**

今年度は音声処理分野の2名の研究実施者のPMを担当しました。髙橋 舜さんは、世界の言語の約93%を無文字言語が占めているという点に着目し、音声データから（書き起こしテキストを利用せず）直接言語理解を行う「統合的音声言語モデル」の理論設計→実装→検証のサイクルを着実に回し、緻密に手法を練り上げる力が序盤から大きく進化しました。滝沢 力さんは、口まね音声からの効果音合成という先進的テーマで、持ち前のプレゼン力に加えて大規模データ収集とクラウドソーシング評価実験を粘り強く完遂し、学術的成果を確実なものにしました。近接テーマの研究実施者2名の並走により、知見を共有・相互レビューしつつ進めることができました。覚醒プロジェクトは、少人数で深く取り組みつつ、キックオフ・中間・最終成果報告会で多様な仲間と交差できる「継続×対話」の場となる点が魅力です。研究実施者の皆さんの今後の活躍にも大いに期待しています。

人の発音能力を活用した音響合成技術の研究

研究実施者　滝沢 力（京都産業大学）

人の口まねから簡単に効果音を作成

■研究の背景

効果音制作においては、音素材の選定やフォーリー（豆を転がして水の流れる音を作る作業など）、レコーディング、加工編集などの手間がかかります。一方で、画像や動画、音声、音楽分野と比較して、効果音制作に関する生成AIを活用した事例は少なく、まだ研究が進んでいません。そこで、音素材を口まねして、そこからニュアンスを反映させる形で合成できれば、新しい効果音合成技術が確立できるのではと考えました。

■研究の概要

本研究は、生成AIによる効果音合成技術の確立を目指します。自動化するのではなく、人が介在する制作手法の確立を目指し、クリエイターなどが所望の効果音を容易に作成できるツールへの応用や、専門知識を必要としない制作方法を確立したいと考えています。

口まねからの効果音合成では、音の特徴をまねして情報として扱います。まず、爆発音にフォーカスした効果音約1800種類と、それに対応する口まね約8000サンプル（20代男性話者3名）を用意しました。それによって、ある程度口まねのニュアンスを考慮した合成が可能であることを確認しており、狙った音が合成可能であることも確認しました。

その後、爆発音やゲームの効果音、風の音、ロボットの動作音などの高品質な効果音を購入し、爆発音に対する口まねのデータセットの拡充を実施。それらの爆発音から100個を選定し、20代話者6名（男性5名、女性1名）の協力で口まねを録音しました。

一方で、既存研究の合成音の自然性や品質の主観評価は、非現実的な音やデフォルメ音も扱う効果音合成においては不適切であると考え、本研究では説明変数と目的変数の妥当性に着目しました。所望の音が得られたかという「再現性」に関しては、再現性主観評価、およびFAD（Fréchet Audio Distance）による客観評価を実施しました。また、口まねのニュアンスが合成音に反映できたかという「ニュアンス反映性」に関しては、ニュアンス反映性主観評価（MOS：Mean Opinion Score）を実施しました（**図**）。

FAD客観評価については、作成した6名による爆発音の口まねデータセットを使用し、参照爆発音100サンプルを評価セットと設定しました。比較モデルとして、本研究の提案手法（Ours）に加えて、T-Foley（TF）、Stable Audio 2.0（SA2）の3つを用意しました。それによって、提案手法はT-Foleyよりも爆発音らしい合成が可能であるという結果が得られました。

また、口まねニュアンスが合成音に反映できたかという実験では、6名の口まね42サンプルと、3つのモデルによる合成音126サンプルを使用し、クラウドソーシングを実施して1実験につき100人で評価を行いました。その結果、提案手法が最も高いスコアを出し、3モデルの全ての間で有意差がありました。このことから、口まねのニュアンス反映性に優れ、周波数スペクトルの変換という手法には意義があると考えます。

さらに、今後はニュアンス反映性MOSだけでなく、再現性MOSも評価したいと考えています。合成音と目標になった参照音を比較して、どれだけ参照音に近いかを、クラウドソーシングで大規模に評価します。

■今後の展望

今回のモデルや合成音の評価をまとめて、ジャーナル論文を執筆する予定です。また、別の効果音に対するデータセット構築を進めます。さらにユーザースタディを実施し、HCI（ヒューマン・コンピューター・インタラクション）やエンターテインメント・コンピューティング分野への展開を目指します。

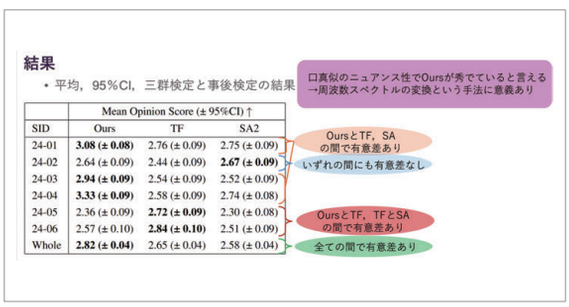


図　評価実験の結果、口まねのニュアンス反映性で提案手法が秀でていると考える。

東京科学大学 情報理工学院 准教授

2008年3月東京大学工学部卒業。2010年3月同大学院情報理工学系研究科修士課程修了。2010年4月より日本学術振興会特別研究員（DC1）。2013年3月同大学院同研究科博士課程修了、博士（情報理工学）。㈱東芝研究開発センター正規職員、同大学院同研究科助教を経て、2016年4月より産業技術総合研究所人工知能研究センター勤務。2020年4月より東京工業大学准教授、現在に至る。機械学習を用いた三次元物体認識、物体検出、ロボットビジョン、ナビゲーションの研究に従事。IEEE RAS Japan Chapter Young Award、PRMU研究奨励賞、船井研究奨励賞、RSJ研究奨励賞、日本機械学会奨励賞（研究）を受賞。

動作の位置と力に着目した Motion Image Captioning+Fusion モデルに基づくロボットの未知動作生成

研究実施者　田中雄輝（慶應義塾大学）

ロボットに多種多様な仕事を覚えさせて人間の労働力の代替を目指す

■研究の背景

労働人口の減少に伴い、ロボットによる労働力の代替が求められています。これまで、ロボットは工場などの変化の少ない環境において、決められたタスクをこなすことを得意としていました。しかし、変化が大きな未知環境においては、多種多様なタスクを成功させることが難しいという課題があります。そこで、人間の動作データによるロボットへの動作教示に関する共通基盤の確立と、変化の大きな環境下でも対応できる未知のタスクを模倣するフレームワークの構築を目指します。

■研究の概要

本研究では、タスク間の関係性や順序を考慮した一連の動作（ロングホライゾンタスク）の教示に焦点を当て、フレームワークの構築に取り組みました。具体的には、アクションセグメンテーションモデルを用いて人間の動作を動詞と名詞のAP（アクションプリミティブ）ラベルに要素分解し、この分解モデルの出力（APラベル）に応じて時系列生成モデルを選択してパラメータ調整を行うことで、動作を生成することを目的としました。

本研究で構築を目指したシステムでは、まず人間がタスクを行っている手続き教示動画を入力とし、APラベル（動詞と名詞のペア）を推定しました。次に、訓練時にAPラベルを教師データとして学習し、推論時にはAP分解モデルで推定されたAPラベルを入力として、ロボットの動作（時系列データ）を生成しました。

AP分解モデルは、次の3つの手法を組み合わせて実装されています。まず、汎用的なアクションカメラであるGoProで撮影した一人称の動画からRGBとオプティカルフローを抽出し、Denseflowを用いて画像内における横軸と縦軸のオプティカルフローを計算しました。次に、この計算によって算出された特徴量とRGB画像から得られた特徴量をもとに、Temporal Binding Network（TBN）というネットワークを用いて特徴量を抽出しました。そして、これらによって計算された特徴量に基づき、Frame-Action Cross-Attention Temporal Modeling（FACT）と呼ばれるアクションセグメンテーションモデルの手法を用いて、APのラベルを推定しました。

推定されたAP系列の一例では、動詞（1/97）と名詞（1/300）の組み合わせでラベルが推定され、例えばフォークを持っている「take」という動詞が正解と一致していることが確認できました。ただし、今回の動画については、データセットにないキッチン環境で撮影されたため推定の精度が落ちており、今後はファインチューニングを検討する必要があります。

AP合成モデルに関しては、Action Chunking with Transformers（ACT）を用いた動作生成の訓練環境を構築しました。その際には、ロングホライゾンタスクの例として、複数の食材を順序に沿って重ねる必要があるサンドイッチ調理に着目しました。サンドイッチ調理を4つのサブタスクに分割し、訓練したACTの推論結果を用いて各サブタスクがロボットで実行可能であることを確認しました（**図**）。

■今後の展開

今回は学術的な成果として、人工知能学会全国大会とROBOMECHへ論文を投稿しました。今後はハードウェアを改良し、単純にシーケンシャルな系列だけでなく、シーケンスの中にある遷移モデルを推定することや、大規模言語モデル（LLM）との融合を図ります。さらに、より高精度な制御が可能なシステムに転用し、最終的には遠隔操作ではなく、動画から手続き情報と軌道情報も直接抽出するようなシステムへと発展させます。

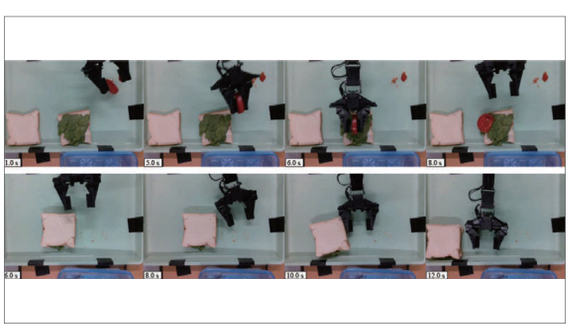


図　サンドイッチ調理のサブタスクである「put tomato」や「move sandwich」が、ロボットで実行できることを確認した。

PMから　谷中 瞳

昨年度に続き、AI分野2名の研究実施者のPMを担当しました。今年度からは研究実施者とPMと産総研研究者と三人四脚で研究課題に取り組み、昨年度よりもさらに創発的な研究を推進できたと思います。田中雄輝さんは、複数のサブタスクによって構成される動作タスクの実行をサブタスクに関する言語指示で支援することで、ロボットの未知動作生成を実現する研究に取り組みました。最終発表会に向けて、少しでも良い成果を示そうと実験を進めている様子が印象的で、田中さんの本研究に対する粘り強さを感じました。髙橋利孔さんは、物語作成支援に向けて大規模言語モデルを用いた、階層的な言説分析の研究に取り組みました。創作者の使いやすいインタフェースの実現に向けて試行錯誤する姿勢が印象的で、髙橋さんの本研究に対する熱意を感じました。

覚醒で短期間で集中して研究に取り組んだ経験は、きっと人生の糧になると思います。今後の活躍を楽しみにしています。

大規模言語モデルを用いた階層構造に従った手続き的な物語作成支援システム

研究実施者　髙橋利孔（公立はこだて未来大学）

生成AIで個人の趣向に合ったテーマを持つ創作活動を支援

■研究の背景

現在の社会では、DEI（多様性、公平性、包摂性）やSDGs（持続可能な開発目標）といった観点から、多様性を盛り込んだ平等な表現が強く求められています。とはいえ、特定の思想や人種に偏りすぎたり、逆に軽視しすぎることも望ましくありません。その一方で、生成AIが確率的にデータを生成することで、マイノリティの人々を軽視する社会になる可能性も懸念されています。そのため、マイノリティとマジョリティが、それぞれ自分が表現したいものをうまく表現できるようになることが求められています。そのためには、AIによる生成だけでなく、人間自身が創作を発展させていけるような社会をつくっていくことが非常に重要だと思われます。

■研究概要

本研究の目的は、個人の趣向に合ったテーマを持つ創作活動を支援することです。最終的な社会課題解決のゴールとして、誰もが創作に関して平等で自由な活動ができる社会、そして上級者よりも初心者や中級者の人口増加を目指した「総クリエイター時代」の地盤創生を目指します。現状、創作支援ツールには明確なルールに基づいたものが不足しており、物語言説論を用いた分析も少ないため、階層構造を意識した分析を通じ、読み手の理解を意識した支援システムの構築を目標としました。

プロジェクト期間中の具体的なゴールは、階層的な分析を行う「分析器」の実現と、それを使用したシステムの構築でした。この分析器は、鑑賞的な「良い・悪い」やジャンル分類ではなく、技術を重視した安定した物語評価基準の作成を目的としています。そこで、大規模言語モデル（LLM）を「読者的な分析機器」として利用するシステムを想定し、主に物語の内容分析に向けた言説の分析に取り組みました（**図**）。

データセットの作成では、青空文庫の上位ランキング100本の小説から1万字以下の作品を選び、そこからさらに400字以下の段落45件を分析対象としました。分析に用いたラベル（観点）は、物語言説論に基づき、「持続」「距離」「焦点化」「語りの時間」「語りの水準」「人称」と多岐に渡ります。これらについて0から3でクラス分けを行い、ラベルをつけて分析しました。プロンプトには、Wikipedia上の物語言説論に関する言説分析を知識として入力しました。

その結果、ラベルの分布が極端に偏ってしまい、分析はうまくいきませんでした。そこで、次に観点を「距離」に絞り、1文ごとの粒度で分析を試みました。ここでは、ミメーシス性（動作や言葉の形態を模倣する度合い）とディエゲーシス性（状態を正確に記述する度合い）という概念を用いて、直接話法をミメーシス性が高い（1相当）、地の文をディエゲーシス性が高い（10相当）として、10段階評価の目安をプロンプトに設定しました。この手法でも、期待した結果は得られませんでした。たとえば、書簡体小説（手紙の形をとって進行する小説）の一文である「この美しい、楽しい島はもうスッカリ地獄です」という文をChatGPTに与えると、「地の文」（10）と評価されましたが、「スッカリ地獄です」といった内面的な知覚表現が含まれていることから、不適切な判断であると考えています。

■今後の展望

今回の実験を通じて、LLMが物語を正確に理解すること自体が困難であることが分かりました。一方で、物語言説に関する分析器のプロトタイプの作成と、それに適した分析プロンプトの作成は達成できました。今後の研究においてはこの言説分析をもとにした段落ごとの分析を実用化し、最終的にテキストの評価システムを実装することで、初心者や中級者の創作活動を技術的に支援したいと考えています。

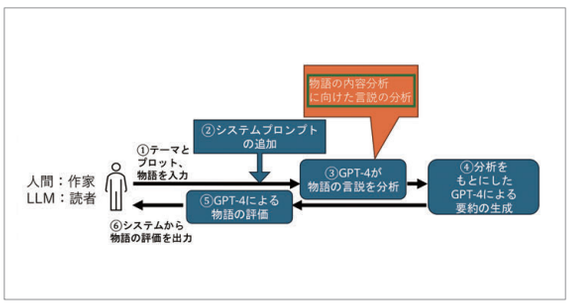


図　LLMを物語の内容分析に向けた、言説の分析に利用することに取り組んだ。

東京大学大学院 情報理工学系研究科 准教授（卓越研究員）

2013年、東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻修士課程修了。同年、株式会社野村総合研究所に入社し、特許検索システムの開発に従事。2018年、東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻博士課程修了、博士（工学）。2018年理化学研究所革新知能統合研究センター特別研究員を経て、2021年、東京大学卓越研究員に採択。人のようにことばの意味を理解する自然言語処理技術を目指して、理論言語学に基づく言語モデルの分析や、機械学習と記号論理の融合による推論技術の研究に取り組む。

母語話者音声コーパスのみを用いたデータ拡張による外国語訛りに頑健な自動音声認識システムの構築

研究実施者　恩田健太郎（東京大学大学院）

外国語訛りを含む場合でも音声認識できる技術を目指す

■研究の背景

国際化が進み、誰もが外国語を話す時代になってきましたが、そこには話者の言語背景に基づく「訛り」が生じます。しかし、訛りのある音声データセットは非常に少ないのが現状です。外国語の訛りの問題は、つまるところ母語の影響であり、例えば日本人が英語を話す際の訛りは、日本人の先生の発音を真似しているわけではなく、日本語という母語を持っているから生じるものです。そこで、豊富にある母語話者音声のみをうまく活用すれば、訛りがあっても音声認識が可能なシステムを構築できると考えました。

■研究の概要

本研究の最大の目的は、母語話者音声のみを用いた、外国語訛りに頑健な自動音声認識（ASR）の実現です。母語話者音声のみを用いて訛り音声を合成する研究として、離散トークンを用いた音声処理技術を発展させました。離散トークンは、SSL（自己教師あり学習）特徴量、例えばHuBERTやwav2Vec2.0といったものの特徴量空間をK-Meansクラスタリングし、そのクラスターのインデックスをトークンとして、音声を各フレームごとに表す手法になります。このトークンは、すでに実際の音素と強い対応があることが分かっており、日本語で学習すれば日本語の音素に対応するクラスターになり、英語で学習すれば英語の音素に対応するクラスターになるという性質を持っています。

離散トークンを活用し、外国語訛りに頑健なASRを実現するために、主に2つのアプローチを検討しました。1つは、英語のネイティブ音声を日本語の離散トークンにしてから合成することで、日本語訛りの英語を生成し、これをASRの学習データとして使用するアプローチです。もう1つ が、ISIB（Interlanguage Speech Intelligibility Benefit）の再現を目指すアプローチで、話者と共通の母語を持つ聴取者が、そうでない聴取者よりも聞き取りに有利になる現象です。この、人間の音声認知を模擬した現象を離散トークンベースのASRで再現することで、頑健なASRを実現しようと試みました。

まず、離散トークンベースのASRでISIBが起きるか検証したところ、単語誤り率（WER）の比較ではアメリカ英語に対しては英語の離散トークンが、日本人英語に対しては日本語の離散トークンが、それぞれより高い性能を示すという結果が得られ、ISIBが再現されました（**図**）。次に、日本人英語以外の、より多様な訛りの認識精度をL2-ARCTICデータセットを用いて検証しました。これらの結果によって、「Matched」ISIB（話者の母語の離散トークンを使った場合）については、話者の母語の離散トークンを使った場合が最も認識精度が良いという結果が得られました。

また、「Mismatched」ISIB（母語とは異なる言語のトークンを使った場合でも改善するケース）が起こるかどうかを検証したところ、多くの訛り音声に対して、英語の離散トークンを使った場合が最も精度が低い結果となりました。これによって、話者の母語が未知であったり、K-Meansモデルを学習しきれない場合でも、似ている言語のトークンを使えば有効である可能性を示したことが、大きな成果と考えます。

■今後の展望

本研究の内容はInterspeech 2025に採択され、2件の発表を行いました。プロジェクト期間終了後も本研究の改善に取り組み、現在はより高度なISIBの再現によって認識精度を高める手法について論文を執筆しています。引き続き、母語話者音声を活用した外国語訛り音声処理に関する研究に取り組みます。

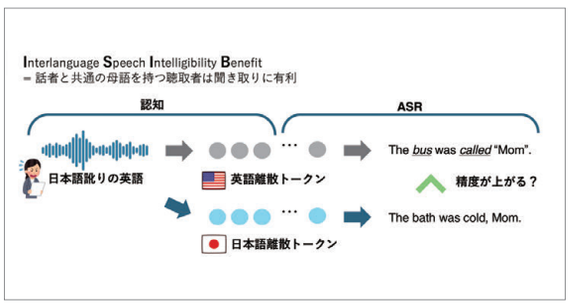
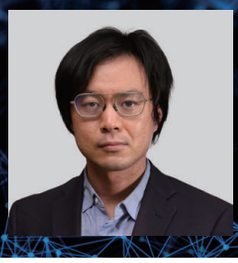


図　離散トークンベースのASRでISIBが起きるか検証した。

PMから　井本桂右

恩田健太郎さん、安田裕介さんは共に音声処理を専門としていることもあり、PMや受け入れ研究者とだけでなく、研究実施者同士でも活発に議論されていたことが印象に残っています。恩田さんは、自己教師ありモデルが出力する離散トークンを用いて音声を分析し、母語が共通する話し相手の訛り音声は聞き取りやすくなるというInterlanguage Speech Intelligibility Benefitを、機械の音声認識で再現可能なことを世界で初めて示しました。安田さんは、音声へのアクセント付与など多数の専門家評価を必要とするアノテーション作業を、最小限の評価数で実現するアルゴリズムを構築し、クラウドソーシングでも安定して動く評価基盤としてまとめました。生成AI用データの作成や品質評価を低コストで実現できる大きな成果です。
覚醒プロジェクトは、さまざまな分野の研究者がつながり、自由闊達に議論できる環境が整っています。ここで得られた人脈や経験を、今後の挑戦につなげてもらえることを期待しています。



オープンなデータに対して生成AIの信頼性を改善する最適主観評価のシステム基盤

研究実施者　安田裕介（名古屋大学情報基盤センター）

人間が信頼できる生成AIを利用できる社会を目指す

■研究の背景

自然言語処理分野においては、生成AIの品質向上に伴い、人間の知覚に基づく評価と改善が困難になってきました。例えば、音声合成の分野で一般的な主観評価実験では、クラウドソーシングを利用すると数万円から数十万円という高コストになるにもかかわらず、合成品質の向上により微妙な品質差の識別が困難になる問題が生じています。こうしたことから、今後は評価の際に最適化の技術を導入し、より効率的な評価を行うことが重要になると考えます。

■研究の概要

従来の標準的な評価方法の5段階MOS（Mean Opinion Score）評価では、近年の高品質な合成音声では評価精度が悪くなっているため、より品質差を評価しやすい比較評価が求められています。一方で、比較評価を行う場合、ペアの組み合わせ数が爆発的に増大するという課題があります。

そこで、2者を比較するA/Bテストによる評価を行うにあたって、オンライン学習やブラックボックス最適化といった技術を組み合わせることで、最適なペアの組み合わせを選択するという解決方法を取りました。この方法を音声のアクセントに対するアノテーションに応用し、アノテーションの規模をスケールさせて、高精度かつ低コストで評価できるのかという問題に取り組みました。

研究では評価の最適化として、「アクセントの自動アノテーション」という生成AIの評価改善問題を解くことをゴールとしました。アクセントなどの言語知識のアノテーションには、通常は高度な専門知識が必要で規模がスケールしないという背景があります。

そのため、VITSと呼ばれるテキスト音声合成手法を採用し、アクセントの自動アノテーションシステムを構築してさまざまなアクセントを反映した合成音声のレンダリングを可能にしました。さらに、合成音声のアクセント候補の中から、最も好ましいアクセントを探索するために、トーナメント形式のオンライン学習手法を開発し、異なるアクセントでレンダリングされた音声のペアを被験者（非専門家）に提示して比較評価する実験を行いました。実験では、アクセント規則を網羅するように選定した56単語句を評価対象としてクラウドソーシングを用いた結果、8万7200個という大規模なアクセント主観比較評価値データを取得しました（**図**）。

その結果、アクセントアノテーションシステムの実装と大規模実験の実施という成果が得られ、非専門家を用いた低コストかつ高精度なアノテーションが実現可能であることが分かりました。すなわち、クラウドソーシングで集めた言語学者ではない一般の人による評価であっても、正解アクセントと不正解アクセントの音声を比較してもらった場合にその違いは顕著でした。

さらに、わずかな評価数であっても、正解を正確にアノテーションできることが証明されたことで、専門的な知識を持たない一般の日本語母語話者のフィードバックだけで、高精度なアクセントラベルを低コストで獲得できることが示されました。

■今後の展望

今回取得した主観評価値のさらなる学術的活用を進めるため、コーパス公開、アクセント予測、音声合成に対する人間フィードバックへの活用を進め、学術成果をまとめた論文執筆に注力します。さらに、アクセントアノテーションに留まらず、この評価最適化技術を他の学術・産業分野へと広げていきます。

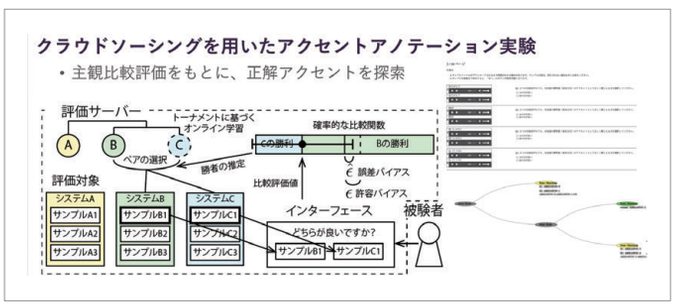


図　クラウドソーシングを用いて、アクセントアノテーションの実験を行った。

京都大学大学院 情報学研究科 准教授

2010年京都大学大学院都市環境工学専攻修士課程修了、NTTサイバースペース研究所入社。2017年総合研究大学院大学複合科学研究科博士課程修了、博士（情報学）取得。2017年より立命館大学助教、2020年より同志社大学准教授、2025年より京都大学准教授、現在に至る。機械学習および信号処理を用いた環境音認識や合成技術を専門とし、聴覚ロボットやメディアコンテンツの自動生成の実現を目指している。

迅速構造決定手法の開発による新規有用酵素の発掘・合理改変サイクルの加速

研究実施者　佐久間航也（名古屋大学）

知財となる酵素の新しい発見法を見つける

■研究の背景

広く注目されている有名酵素と機能的には類似しているにもかかわらず、研究者の目に触れていない酵素が自然界には無数に存在します。例えば、PETaseはポリエチレンテレフタレート（PET）を分解する活性を示すために大きく注目されています。本研究では、PETaseの類縁無名酵素を、立体構造ベースでのデータマイニングにより発掘することを課題に設定しました。特に、インフォマティクス（情報解析）パート、実験パート（酵素活性のアッセイや熱安定性の検討）を経て、最終的に構造決定とそれに基づいた合理的な酵素性能向上を行うことを目指しました。

■研究の概要

近年、生体高分子の立体構造予測精度が向上してきたため、従来の1次元的な核酸・アミノ酸の配列情報だけではなく、3次元構造をヒントに新規酵素を探索できるようになってきています。立体構造はアミノ酸配列よりも進化的に保存される傾向にあることから、構造情報を活用することで既存の知財の権利範囲から外れるものが見つかる可能性が高まります。この探索手法の信頼性を高めるには、情報解析パートの答え合わせを行うための立体構造決定を迅速化する手法も必要になると考えられます。

まず、ターゲット酵素としてPETase を設定し、Ideonella sakaiensis（イデオネラ・サカイエンシス）由来のPETase の構造を検索クエリとして使用しました（**図**）。メタゲノムに由来する予測構造データベースに対して検索を行い、PETase-like なタンパク質を 1 万 544 個回収しました。このうちPET代謝系に存在する別の遺伝子と共起しているものに注目することで 902 配列まで絞り込みました。

ここで、すでに実験構造が決定されているタンパク質は、すでに他者の研究モチベーションが高いとみなし、すべて以降の探索対象から除外しました。さらに、候補配列をクラスタリングし、特許と紐づいた配列データベースに含まれるものから類似度が最小の配列を各クラスターから選定することで、最終的に 22 個の候補に絞り込みました。これらの候補は、ポジティブコントロールとして用いた HotPETase との配列相同性が 19%から 30%程度であり、進化的にかなり遠い遺伝子であることが期待されました。

次に、絞り込んだ 22 個の候補について発現チェックと酵素活性スクリーニングを実施しました。発現性や可溶性が高く、発色基質を用いたスクリーニングで活性を確認できた有望候補を選定しました。その結果、一部の候補はポジティブコントロール（HotPETase）よりは活性が低かったものの、エステラーゼとして機能することが確認できました。

さらに、炭素鎖がやや長い基質を用いて活性を測定したところ、そのうちの1つはポジティブコントロールとほぼ同程度の活性を示しました。この候補の由来を調査したところ、サンプル取得温度が約 60°C を超える温泉由来の遺伝子であることが分かりました。この候補について 60°C で活性測定を行ったところ、37°C と同様に高い活性を維持しており、耐熱性の高いエステラーゼとして極めて有望であることが実証されました。

■今後の展望

PET に対する分解活性が未検証であるため、速やかに活性を検証したいと考えています。また候補遺伝子の選定に想定以上に時間がかかってしまったため、期間内に当初の目標であった構造決定実験に進めませんでした。今後は、活性測定の定量性を高めること、基質や反応条件の探索、そして本フレームワークを他のターゲットへ応用することを検討していきます。

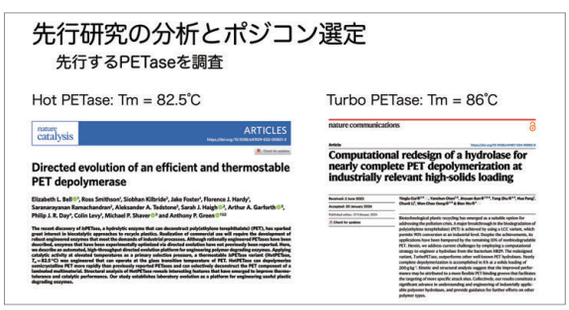


図　ターゲット酵素として、既存のPETaseの構造をクエリとして使用した。

PMから　阿部敬悦

新設の生命工学分野の研究実施者2名を担当しました。両名とも学術的に挑戦的、かつ応用的にも価値のある課題を設定しました。受け入れ担当の先生方の細やかな支援もあり、短期間で有意義な成果を生み出せたと考えています。

佐久間航也さんは、自身の構造生物学の専門性を社会に役立てるという意識で提案されたのが印象的でした。研究の計画と実施の両方で、Dry研究の強みをうまくWet研究に反映させました。その成果は、現行特許制度における制約を回避し得る手法を提供するもので、社会的需要が高いものと言えます。安田佳生さんは、MDシミュレーションと生化学の両研究をバランスよく実施しました。生化学解析では試料の取り扱いに難しい面もありましたが、粘り強く条件を詰める姿勢に感心しました。成果も抗体医薬領域での応用展開の可能性を感じさせる意義あるものといえます。覚醒は多様な社会的視点で研究を中長期的に捉えた人材育成であるのが良い点です。

実験データと分子シミュレーションを融合し機械学習で実現する、抗体小型化を指向した環状ペプチド設計手法の開発

研究実施者　安田佳生（東京大学）

医療コストの削減と患者のQOLを向上させる

■研究の背景

抗体医薬は複数の課題を抱えています。例えば、低分子薬品の約400円に対して抗体医薬品は約73万円であるなど、抗体医薬の生産コストが他の医薬品のモダリティに比べ非常に高価であることが挙げられ、患者に経済的な負担を強いる傾向にあります。また、抗体分子の分子量が非常に大きいことから膜透過性が低くなるため、抗体というモダリティを活用できる創薬ターゲットが限定されてしまいます。

■研究の概要

本研究では、既存の抗体を小型化し環状ペプチドに変換することで、抗体が持つ問題点を克服する設計手法の開発を目的とします。それによって、細胞膜内の分子をターゲットとした創薬戦略の増加と医療コストの削減、および患者のQOL（Quality of Life）の向上を目指します。プロジェクト期間中は、環状ペプチドを抗体のCDR（相補性決定領域）から切り出して設計する際に、機能維持を可能にする足場配列を機械学習のアプローチから明らかにすることを具体的な目標としました。

まず、抗体小型化によって得られたさまざまな環状ペプチドの初期構造を用意して分子動力学（MD）シミュレーションを実施し、MDトラジェクトリを取得します。一方で、実験系ではSPR測定などにより、抗原への結合親和性などのデータを取得します。最終的には、これらのMDトラジェクトリを入力とし、MDシミュレーションの結果からペプチドの結合親和性を予測する機械学習モデルを構築することを目指しました（**図**）。そして、中間報告までに実験的に抗原（SARS-CoV-2 RBDなど）に結合する環状ペプチドを11種類、非結合ペプチドを12種類取得し、これらについてMDシミュレーションを行って結合・非結合の判別モデルを構築することに取り組みました。

分子動力学シミュレーションの結果を解析する中で、分子内水素結合が機能維持に極めて重要な役割を果たしている可能性を発見し、VHH抗体から切り出した環状ペプチドについて、その結合親和性の高さと分子内水素結合の形成頻度との関係を調査しました。その結果、高い親和性を持つ環状ペプチドほど、残基レベルでの分子内水素結合の形成頻度が上昇していることが判明しました。また、元の抗体（VHH）の分子内相互作用の構造を維持できるような切り出し方（足場配列の設計）が、活性を維持する上で決定的に重要であるという設計指針の示唆が得られました。

一方で、全ての環状ペプチドが「分子内水素結合維持」という指針で明確に説明できるわけではないため、MDシミュレーションと畳み込みニューラルネットワーク（CNN）を組み合わせた手法を環状ペプチドに応用しました。その結果、CNNモデルは訓練およびテストの両方で約99.9%の正答率を達成し、実験的に既知の結合・非結合ペプチドの判別が可能であることが示唆され、CNNが残基レベルでペプチド間の運動性の違いを捉えることができていることを示しました。

■今後の展望

本研究によって、抗体の小型化を指向した環状ペプチド設計において、分子内水素結合の維持が活性保持の重要な設計指針となる可能性を示しました。今後の課題としては、CNNモデルの応用可能性を高めるため、ペプチド活性を判別する必要最低限の要素を特定することや、CNN以外の手法を用いた予測モデルの構築を検討します。さらに、実験的に未知のペプチドの結合能や親和性を予測することや、より高い親和性（ナノモーラーオーダー）を持つペプチドを取得します。将来的には、医療経済にも貢献したいと思っています。

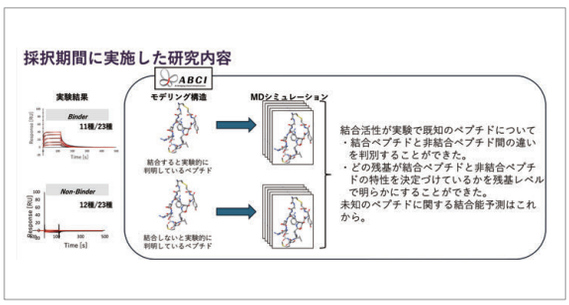


図　ペプチドの結合親和性を予測する、機械学習モデルの構築について研究した。

東北大学大学院 農学研究科 教授

1981年 東北大学農学部農芸化学科卒業後、キッコーマン㈱に入社、1996年 同社研究本部 微生物グループリーダー。この間、細菌、糸状菌の研究開発・工業化に従事。1999年 東北大学大学院農学研究科 助教授、2009年 同 教授、現在に至る。大学では基礎と応用が表裏一体となった微生物研究を行っている。2019年 同 研究科長・学部長（～2022年）、2024年 東北大学副理事（人事戦略担当）（～現在）。2019年 日本農芸化学会副会長（～ 2021年）、2020年 JST 創発的研究支援事業PO（～現在）、2023年NEDO GI基金 社会実装委員会委員（～現在）。2022年 日本農芸化学会功績賞。専門：応用微生物学。

感染症の制御に向けたウイルス進化予測技術の開発

研究実施者　川久保修佑（東京大学）

毎年変異するインフルエンザウイルスの感染制御につながるAI技術

■研究の背景

ウイルス感染症の制御が難しい要因の1つは、ウイルスが短期間で進化することで、新しい性質を獲得した変異株が次から次へと出現するからです。そうした変化を通して、ウイルスが免疫系にどのように認識されるかを決定する要素である「抗原性」を常に変化させることによって、流行の波が繰り返し引き起こされます。ウイルスの抗原性は、ある変異株Aに感染した場合に誘導された抗体を含む血清が、別の変異株Bの感染をどれだけ阻害できるかという、定量的な抗原距離として評価されます。

■研究の概要

このような中和試験（実験）は多大なコストと時間を要することから、ウイルスの構造タンパク質の配列から、実験を経ることなく抗原性を直接予測できるAI技術の開発を目的としました。また、将来的に出現するウイルス変異株を予測し、ウイルス感染症の制御に貢献することを目指します。

本研究では、網羅的なアミノ酸配列を学習した大規模言語モデルである、タンパク質言語モデルを活用することで、ウイルス遺伝子のアミノ酸配列情報から抗原性を直接予測するPLANTモデルを開発しました。また、PLANTと分子系統解析を統合することで、巨大な進化系統樹のどのブランチ（枝）で抗原性の大きな進化イベントが起きたのかを検出する枠組みを確立しました。これにより、進化の過程でウイルスが何の変異を獲得することで抗原性を進化させたのかという、抗原性の責任変異の特定が可能になりました。

A型インフルエンザウイルス（H3N2亜型）のHA（Hemagglutinin）タンパク質を対象に、PLANTモデルが予測した変異の効果量を解析した結果、中和抗体が結合するエピトープ（抗原決定基）の位置として既に知られている変異を高い精度で特定できることが確認されました。さらに、ウイルスがN結合型グリコシル化（糖鎖結合に関連するモチーフ）の獲得・損失を繰り返すことによって、抗原性を変化させているという進化パターンが示唆されました（**図**）。

また、ある一定の系統に属する変異株に対して非常に高い抗原性の変異効果を持つ一方で、別の系統に対してはあまり効果がない、生物学の分野でバックボーンエフェクトと呼ばれる効果を正しく捉えることができました。これらの系統ごとの抗原性の違いに関する予測結果は、実験的な中和試験の結果ともある程度整合性があることが確認されました。

この検出フレームワークをさらに発展させ、インフルエンザウイルスの特定の時間ポイントで分割し、その時点以前の情報のみを用いてPLANTモデルのファインチューニングを実施。分割した時点のウイルスの配列に対して、コンピューター上で19種類のアミノ酸を全ポジションに網羅的に挿入するシミュレーションを行いました。その後、PLANTが予測した最も抗原性を変化させやすいアミノ酸置換が翌シーズン以降に本当に出現したかどうかを検証したところ、未来に獲得される変異を、一定の精度で予測できていることが示されました。

■今後の展望

本研究で得られた、PLANTを活用したウイルスの進化予測技術は、現在計画している感染症疫学の数理モデルと融合させることで、将来的なウイルス感染症の流行規模を予測するフェーズへと進む予定です。今後は、配列情報や実験データが少ないようなウイルスに対しても、拡張可能な技術開発に取り組みたいと思います。

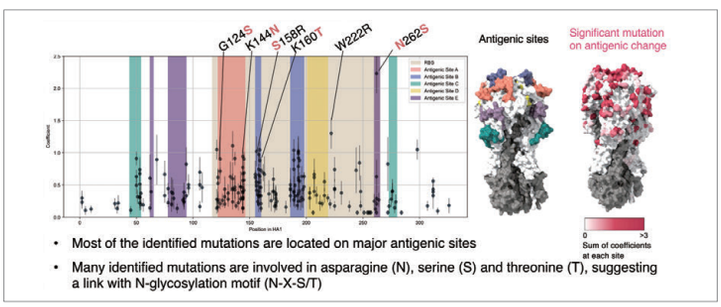


図　ウイルスの抗原性進化に寄与する責任変異の特定に成功した。

PMから　**瀬々 潤**

昨年度はAI分野で2名のPMを担当しましたが、本年度は生命工学分野で2名を担当しました。いずれの研究も応募当初の仮説検証を着実に進め、学術的な意義にとどまらず社会課題解決に向けた有望な成果が得られました。

川久保さんは、タンパク質言語モデルという最先端AIとインフルエンザのパンデミック予測を組み合わせ、既存の枠を超えた挑戦的な研究を推進しました。毎回、新規実験結果を大量に持参する情熱と優れた仮説検証能力に強く刺激を受けました。羽田さんは、精子細胞中DNAの高次構造解析という、一見容易ながら誰も実現していない課題に挑戦しました。試薬や濃度条件の検討を論理的に進める姿勢が印象的で、研究を通じ不妊治療への新たな光が見えました。

両名とも科学的探求心と社会還元の視点を兼ね備えており、新時代の研究者としての可能性を強く感じました。今後の飛躍を大いに期待しています。

ジアリールエテンを用いた新規高次クロマチン構造解析方法 DE-C法の開発とマウス精子への応用

研究実施者　羽田政司（東京大学）

非侵襲で行える男性向けの不妊検査の実現を目指す

■研究の背景

日本における不妊治療は深刻で、最新のデータでは4組に1組のカップルが悩んでいます。そのうち、約半分のケースにおいて男性側にも要因があることが知られています。現在、男性の不妊検査では主に精子の量や運動性といった項目が使われていますが、運動性や形が良好にもかかわらず受精できない精子や、逆に運動性や形が悪くても不妊治療によって受精できるケースも知られ、既存の基準からは漏れてしまう精子の質を判断できる指標（検査項目）の追加が求められています。

■研究の概要

不妊治療においては、精子の頭部に内包されたゲノムDNAに何かしらの障害（DNAの傷）が存在している可能性が高く、侵襲的な（DNAを傷つける）検査は避けたいという課題があります。そこで、精子のゲノムDNAの折りたたまれ方（高次クロマチン構造）に着目し、非常に硬い核を持つ精子の解析に応用するため、特定の波長の光を当てることで構造が変化するジアリールエテン（DAE）を使用しました。すでに、DAEを細胞に加えて特定の光（UV）を当てることで、DNAを切断するメカニズムが提唱されています。それに対して本研究では、DAEを用いたゲノムDNA構造の解析方法「DE-C法」を確立し、不妊検査に有用な知見を提供する精子ゲノムDNAの折りたたまれ方を明らかにします。

まず、培養細胞にDAE/UV処理を施すと細胞のアポトシス（細胞死）は誘導できたのですが、ゲノムの状態を確認するとDNAが切断されているような変化は見られませんでした。その後、DAEのフォームや濃度を変更するなどさまざまな条件検討を行い、デタージェント（界面活性剤）を同時に処理させたりすることで、ようやくDNAの切断の誘導が可能となりました（**図**）。

次に、DAEがゲノムDNA配列中のどのような領域を優先的に切断するのかについて、切断バイアス（特性）を解析しました。切断後のゲノムDNAを回収し、末端修飾を施してライブラリを作製することで、次世代シークエンサーを用いた網羅的な配列解析を行いました。その結果、DAEはゲノムDNAを特定の配列に偏ることなく、均一に切断できるという優れた特性を有することが明らかになりました。

マウス精子においても同一条件下でDNAが切断可能かを検討するため、培養細胞と同じ条件でマウス精子にDAE/UV処理を施しましたが、ゲノムDNAを回収することはできませんでした。そこで、DNA抽出前に行うタンパク質分解処理後の精子の状態を観察したところ、DAE処理によって精子がタンパク質分解抵抗性を獲得していることが明らかとなりました。ビタミンC処理によりタンパク質分解抵抗性を低下させることには成功したものの、最終的にはDAE/UV処理に特異的なゲノムDNA断片を、マウス精子から回収することはできませんでした。

これらの結果から、精子核内タンパク質はDNAを強固に保護する性質を有することが知られており、精子ゲノムDNAを切断するためには、さらに精密な条件設定が必要である可能性が示唆されました。

■今後の展望

今後は、まずDAE/UV処理による精子ゲノム切断条件の探索を継続し、培養細胞および精子を対象としたDE-C法の開発を進めてデータを取得します。本技術をヒト精子解析にも応用できれば、優良な精子の選抜や、ゲノムDNA構造に起因する遺伝性の疾患を受精前に回避できる可能性があります。将来的には、良質な精子をピックアップしたり、生まれてくる子供の性別を事前に選択することも可能になるかもしれません。

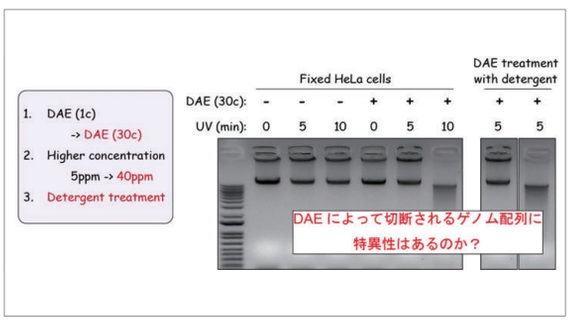


図　いろいろと条件を変えることで、細胞のゲノムDNAを切断できる条件が決定できた。

ヒューマノーム研究所　代表取締役社長

東京大学大学院新領域創成科学研究科にて博士号を取得。東京大学・助教、お茶の水女子大学・准教授、東京工業大学・准教授、産業技術総合研究所・研究チーム長を歴任。日本メディカルAI学会理事などを兼任。
機械学習・数理統計アルゴリズムの手法開発および生命科学の大規模データ解析を専門とする。医療に限らず、生物・農学分野なども含めオミックス、ゲノム、フェノタイプ解析を実施している。米国計算機学会のデータ解析コンテスト KDD Cup 2001 優勝、Oxford Journals-JSBi Prize 受賞。2018年より株式会社ヒューマノーム研究所・代表取締役社長に就任し、AIの普及に向けたノーコード解析ツールの開発・販売や、IoTデバイスを用いたリアルワールドデータの計測・統合解析・フィードバックを実施している。

「超」ヒト脳オルガノイドにより切り拓く次世代バイオコンピュータ開発

研究実施者　飽田寛人（広島大学大学院）

人間の脳を超えるバイオコンピューターの実現に向けて

■研究の背景

ヒトの脳は、スーパーコンピューターと同等の処理速度を持つと推定されながら消費エネルギーが格段に小さいため、その構造を模した脳オルガノイド（Organoid）を次世代バイオコンピューターとして活用する「オルガノイド・インテリジェンス（OI）」が期待されています。しかし、現状のバイオコンピューターはゴキブリよりも小さいニューロンネットワークで構成され、寿命が6カ月と短く高価であるなど多くの課題を抱えています。

■研究の概要

本研究では、ヒトの脳が持つ「サイズが大きい」「エネルギー効率が高い」「寿命が長い」といった優れた特徴をさらに発展させ、より高性能で耐久性の高い“超”ヒト脳オルガノイドを開発し、次世代バイオコンピューターとしての可能性を切り拓くことを目的としました。具体的な目標は、ヒト脳オルガノイドよりも大きく、より多くのニューロンを含むオルガノイド、およびより広範囲で複雑なネットワークを持つオルガノイドを作ることです。この目標を達成するため、「薬理学的“超”ヒト化」と「遺伝学的“超”ヒト化」という2つの研究に取り組みました。

薬理学的アプローチでは、ヒトがマウスやチンパンジーに比べて長期間にわたって神経幹細胞を増殖させることで、多くのニューロンを生み出し脳を大きくしてきた特性に着目しました。その要因として、ヒトはマウスに比べてエネルギー代謝が低いことが、近年明らかにされつつあります。

そこで、エネルギー代謝を薬剤でさらに低下させることで、ヒトよりも長い期間神経幹細胞の増殖を促し、より多くのニューロンを産生できるのではないかという仮説を立て、エネルギー代謝の中核である電子伝達系に対する4種類の阻害剤を使用して検証しました。ヒトiPS細胞からオルガノイドを誘導し、10日間成長させた後2週間薬剤を作用させ、オルガノイドのサイズを計測したところ、薬剤を添加した群では一時的にサイズが低下する結果が得られました。今後は薬剤の濃度や作用期間を調整し、タンパク質分解や翻訳速度といった下流の経路を抑制するなどの改善策を検討しています。

遺伝学的アプローチでは、AI技術を用いて将来ヒトに起きる変異を予測して導入することで、より多くの神経細胞を生み出すオルガノイドを創出することを目指しました（**図**）。そこで、6億種超のタンパク質構造を予測したAIであるESM-2をモデルとして、指向性進化を再現する既存のツールEvoProtoGradで予測しました。同じ配列をもとに3回予測し、予測された配列とヒトのタンパク質の相同性を計算しながら、最終的にはタンパク質やDNA、RNAなどの分子からなる生体分子複合体の構造を予測するALphaFold3を用いて、全体の構造を予測しました。

それによって、非常に多くの変異が3回のうち1回しか再現されないことと、相同性がわずかに低下してしまう結果が得られました。将来的は、より多く繰り返しの予測を行って共通した変異を抽出することや、マウスからヒトへの進化を考慮した予測モデルの構築が重要だと考えています。

■今後の展望

今後はエネルギー代謝についての基礎研究レベルの知見を蓄積し、原著論文として投稿することを目指します。また、ESMの学習やパイプラインを向上させ、予測精度の向上を進めます。DNA言語モデルであるEvo 2など、最新のAI技術についても注視し検討していきたいと考えています。今後は「知能の定量化」についても、継続的に取り組んでいきます。

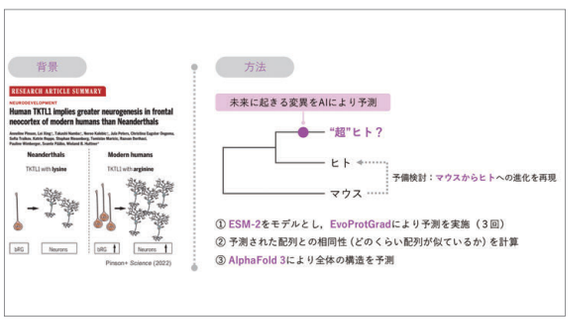


図　遺伝学的“超”ヒト化の予測では、AI技術を用いて将来ヒトに起きる変異を予測して導入した。

PMから　湯元 昇

今年度から募集が始まった、生命工学分野の2名の研究実施者のPMを担当しました。両名とも、実験動物や培養細胞を用いる時間のかかる研究のため、十分な研究期間ではない中、今後につながる成果を出せたと考えています。

飽田寛人さんは、「超」ヒト化という大変チャレンジングな課題に精力的に取り組み、他の研究実施者との交流からタンパク質進化予想法を取り入れるなど、多角的な視点をどんどん獲得していったのが印象的でした。武井仁志さんは、使用予定の実験動物が入手困難になるという大きなトラブルがありましたが、動物の生産会社の違いにより結果が異なることなどは、深堀すれば面白い課題と思います。今後、良い成果につながることを期待しています。

覚醒の良い点は、「研究実施者が普段交流のない分野の研究者と交流できること」です。いろいろな人と議論を重ねることで、幅広い視野を持つことや、実験結果を多角的に考察する力が涵養されると思います。

マウスへの心理的ストレス負荷による慢性睡眠障害の発症におけるオレキシン神経系の関与

研究実施者　武井仁志（東京理科大学大学院）

不眠症に関する性差のメカニズムを解明する

■研究の背景

現代社会において不眠症は深刻な問題であり、日本人の10人に1人が慢性不眠症を有していると言われています。不眠は認知機能の低下による生産効率の低下や、日中の眠気による労働災害といった経済損失、さらには生活習慣病や精神疾患といった健康被害のリスク増加を引き起こすため、発症メカニズムの解明が求められています。一方で、不眠症の発症には性差という特徴的な側面があり、男性に比べて女性の方が不眠症リスクが1.41倍高いという報告や、睡眠脳波の測定から男性の方が睡眠の質が悪い可能性も示唆されています。

■研究の概要

不眠症の臨床研究は生物学的な性差だけでなく文化的な背景も含むことから、生物学的な性差を正確に評価するためには実験動物を用いた研究が必要となります。本研究では、研究室で開発された慢性睡眠障害（CSD）モデルマウスを用いて、ストレスによる睡眠障害の発症メカニズムの解明を目指しました。通常、夜行性であるマウスは床敷きが敷かれた回転かご付きのケージで飼育され、明期（昼間）は睡眠し暗期（夜間）に活動を始めます。これに対し、CSDモデルでは床敷きを取り除いてケージの下に水を張ることで、水への恐怖から本来眠っているはずの明期に不眠症状が見られ、暗期には眠気のようなものが見られることが確認されています。このCSDモデルマウスを用いて、主に活動量、睡眠脳波、およびオレキシン神経活性を評価項目として研究を進めました。

この実験によって、CSD負荷後のマウスの活動量（回転かごを回した数）の変化に性差があることが分かり、オスのマウスではCSD負荷直後から活動量の急激な減少が見られました。一方、メスのマウスでは負荷直後に活動量の減少は見られず、徐々に減少していくといった様子が見られています。この結果から、メス特異的なストレス耐性が存在するのではないかという仮説を立て、さらなる評価を進めています（**図**）。

明期マウスが睡眠している状態で目から明るいという情報が入ってくると、その情報がオレキシン神経に伝わり、オレキシン神経が不活性化されることで睡眠が促進されます。一方、暗期だと暗いという情報が目から入ることで、今度はオレキシン神経が活性化され、覚醒を促進する神経群に興奮性の入力が入り、覚醒が促進されることが知られています。この時、心理的なストレスが働くと、明期であってもオレキシン神経が過度に活性化されてしまうことで、覚醒が促進されて不眠になってしまうと考えられています。この現象が実際にCSDモデルで起きているのか確認する手法として、マウスの脳切片を作成して、脳内のオレキシン神経を染色する手法を取りました。オレキシン神経活性の定量測定では、オレキシン神経細胞の活性化率を免疫染色により明期と暗期で比較した結果、明期では全個体で低い値を示しましたが、暗期では明期に比べて比較的高い値が見られています。ただし、値が低いマウスでは暗期でも10 ～ 15%程度の活性化率でしたが、高いマウスでは50%近くに達するものもあり、CSDの評価を正確に行うには、このばらつきを減らしていくことが重要な課題となります。

■今後の展望

今後の課題として、プロジェクト期間内に完了できなかった免疫染色の条件検討や手技向上を継続して行っていきます。また、睡眠脳波の測定も実施していく予定です。将来的には今回の研究をさらに発展させ、どのような要因が性ホルモンや神経の発生の過程で性分化していくのか、その性分化が睡眠にどのような影響を与えるのかを解明します。

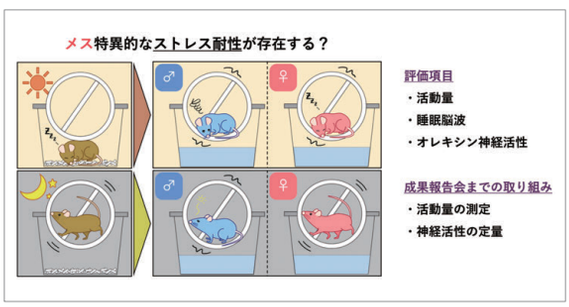


図　マウスを使って、メス特異的ストレス耐性が存在するかを調べた。

神戸大学先端バイオ工学研究センター 客員教授

1978年、京都大学理学部卒業。1983年、同大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了（理学博士）。学振・奨励研究員、JST-ERATO・研究員、京大・助手を経て1992年大阪工業技術試験所（現産総研）入所。産総研で、研究部門長、理事、フェローなどを経て2016年に国立循環器病研究センター・特任部長。同センター・オープンイノベーションセンター長、大阪大学大学院薬学研究科 特任教授を歴任。バイオインダストリー協会・評議員などを兼務。専門はバイオサイエンス、バイオテクノロジーで、酵素化学、蛋白質科学、神経科学、ペプチド工学、ナノバイオ工学など多様な分野で研究を実施。

ハイスループット実験と大規模計算によるゼオライト触媒設計およびデータベースの構築

研究実施者　伊東周昌（東京大学）

シミュレーションで物性予測、ゼオライト触媒設計に新たな指針

■研究の背景

近年、原子シミュレーションやAIモデルを活用した触媒開発が盛んです。ところが、含まれる近似やスケールの差異から、シミュレーションと実験の間には無視できないギャップが存在します。特に、重要な工業プロセスで触媒として利用されるゼオライトは、複雑に入り組んだ細孔空間が多様な環境を提供するため、予測には複雑かつ多様な環境のモデリングが重要です。そこで、自動実験装置（MPIプラットフォーム）による実験データの収集と新たなAI技術（汎用NNP）による計算の高速化を通じ、ゼオライト触媒の新たなモデリング手法構築に取り組みました。

■研究の概要

ゼオライト触媒では、さまざまな反応においてブレンステッド酸点やルイス酸点が重要な役割を持ちます。そこで、ゼオライト触媒の酸性質を評価する実験手法として、NH_3-TPD（アンモニア昇温脱着）測定を行いました。一方で計算による再現のために、触媒構造のモデリングを自動化して大量のモデルを作成し（**図**）、ワークフローの開発と数理モデルへの適用を行いました。

NH_3-TPD測定では、ゼオライト内の酸点にアンモニアの分子を吸着させて昇温します。その際、温度が上がるにつれて、酸強度が弱いゼオライトは簡単にアンモニア分子を離してしまいます。一方、酸強度が強いゼオライトは高温になるまでアンモニア分子を離さない性質があります。この性質を利用し、アンモニア分子が低温側と高温側のどちらから出てきたかによって、弱い酸と強い酸の存在と分布を調べます。自動実験装置を用いることで、数多くのゼオライト触媒を一挙に調製し、酸性質を測定しました。

この分布を計算によって予測することを目指し、ゼオライト内部のアルミニウム原子の配置に注目しました。シミュレーションでは通常、数百原子程度までを考慮します。しかし実験環境下では、より膨大な原子数で構成されるゼオライトの性質を測定するため、実験と同じ組成の原子モデルについて多様なアルミニウムの配置パターンを生成し、任意の酸点を導入しました。この過程を自動化し、何度も繰り返すことで、実験環境を表現しうる網羅的なゼオライト触媒構造を作成しました。

また、急脱着の挙動をシミュレートする際には、アンモニア分子間の相互作用を考える必要があります。計算の速度を落とさず、効果的に相互作用を考慮するためクラスタリング手法を用いて、近接するアンモニアの判別を自動化しました。これにより、アンモニア間相互作用を考慮するものと考慮しないものに分けて、ワークフローの中で個別に処理しました。アンモニアが脱着していく様子を計算機上で再現しつつ、酸強度を表す物理量を大量に取得することによって、実験スケールとの差異を埋めることを狙いました。得られた計算結果は、実験データの傾向を十分に捉えていました。また数理モデルの適用によって、実験データそのもののある程度の再現に成功しました。

さらに、通常のNH_3-TPD実験では測定しない高温域におけるピークの存在が、本手法によって予測されました。そこで、特定のゼオライト触媒サンプルについて、測定温度条件を変えた追加実験を行うと、本手法から予測された高温域に確かなピークの存在が確認されました。この結果は、本手法の有用性を強く支持するもので、これまで未確認であった強い触媒活性点（酸点）の存在を示唆する重要な結果と考えています。

■今後の展望

今後はさらに、文献データを利用することで、触媒反応と触媒種の対応関係を把握し、それぞれの触媒がどのような酸性質を持つのかについて計算していきます。さらに、それらすべてのデータを統合し、1つのデータベースに集積します。文献知識に加え、酸性質の計算結果を利用したスクリーニングを通じて、有望なゼオライト触媒の選定、および実証実験を進めていきます。

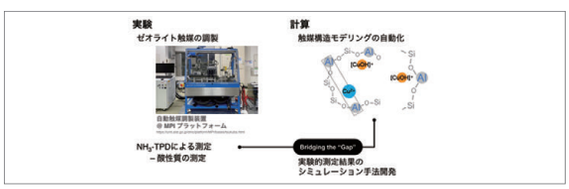


図　実験による測定と計算による再現をつなぐ、シミュレーション手法を開発した。

PMから　谷池俊明

覚醒プロジェクトには、さまざまな立場や思いを持つ研究者が集う。私が携わったのは、プロフェッショナルな立場から現実的かつ着実な進展を目指す菅野杜之助教と、体力と野心で果敢に挑戦する伊東周昌さん（修士課程）の２名であった。どちらも真剣であり、私自身もその熱意を受け止め、真摯に向き合った。前者は覚醒プロジェクトの成果をすでにQ1論文として発表し、後者はアメリカ留学へとつながり、近日中に論文発表を予定している。いずれもプロジェクト終了後も共同研究として関係を発展させ、より大きな研究展開へとつながっている点が印象的である。

共通して言えるのは、皆（PMも含め）が「この機会を通じて自らを覚醒させたい」と強く願っていたことだ。多様な志を持つ仲間が互いに刺激し合い、成長の糧を得、それが持続的なつながりへと発展していくことこそ、覚醒プロジェクトの最大の魅力である。

マテリアルズインフォマティクスを用いたハイエントロピー酸化物の探索

研究実施者　菅野杜之（東北大学）

AI・機械学習を活用、金属元素の組み合わせルールを発見

■研究の背景

近年、5種類以上の金属元素を含む酸化物であるハイエントロピー酸化物(HEO)が注目を集めており、リチウムイオン電池材料など、多様な応用が期待されています。しかし、単相のHEOを形成するための金属元素の組み合わせにおける重要な因子が明確でないという課題があります。この因子を見つけることは、今後のHEO材料開発における設計指針となり、材料開発の加速が期待できます。一方、周期表上の金属元素から5種類を選ぶだけでも膨大な組み合わせとなり網羅的な実験は困難であるため、効果的な探索が求められます。

■研究の概要

本研究の目的は、AIや機械学習などによって材料開発を行うマテリアルズインフォマティクスを活用し、単相HEOを形成する金属元素の組み合わせのルールを発見することです。これにより、研究者が新たなHEOを開発する際に、効率的な探索を可能にする材料設計指針の獲得を目指します。

研究を進めるにあたり、まず我々自身でデータセットの構築に取り組みました。周期表の中から特定の金属元素を選択し、実際に固相合成を行いXRD（X線回折）によって単相HEOであるか否かを判定しました。この際、ランダムに元素を選定すると単相にならない組み合わせが非常に多くなります。そこでサンプリング方法に工夫を加え、最終的にバランスのとれた259個のデータサンプルからなるデータセットを構築し、機械学習に利用しました。学習モデルとしてはランダムフォレストを選択し、元素の持つさまざまな物理化学的性質を表す記述子の中から、単相HEOの形成を予測できる最適な2つの組み合わせを探索しました。

その結果、単相HEOの形成を決定づける重要な記述子として、「共有結合半径の範囲」と「原子量の範囲」の2つが見つかりました。さらに、これらの記述子を説明変数としてプロットし、単相HEOになった組み合わせと、ならなかった組み合わせを可視化しました。それによって、単相HEOとなる組み合わせは、共有結合半径と原子量の両方の範囲が狭い領域に集中していることが明らかになりました（**図**）。

共有結合半径の範囲は、結晶構造が許容できる格子の歪みに関連しています。例えば、ピンポン玉とゴルフボールで構成された結晶格子の一部をサッカーボールに置き換えようとすると、大きさが違いすぎて入りません。このことから、結晶の格子が許容できる歪みの範囲、すなわち「共有結合半径の範囲」が重要であると解釈できます。また、単相HEOにならなかった組み合わせの多くは、第5周期や第6周期といった重い元素を含んでいました。これは、合成プロセス中における元素の拡散の難しさが影響している可能性を示唆しています。

これらの結果から、わずか259個という少ないサンプリング数でも、単相HEOを合成するための明確な基準、すなわち設計指針が獲得できました。本研究の意義は、単相HEOの設計指針や、今までに報告されていないHEOの発見、データセットの作成にあります。特にサンプリング方法を工夫することで、単相HEOとなる組み合わせの成功率を高めたデータセットを得られた点に価値があります。

■今後の展開

現状は金属元素の組成比を、すべて等モル量に絞って検討しています。しかし、実際にはHEOの探索範囲は、等モル量に限らず存在します。また、5種類以上の元素数も考慮すると、探索範囲は非常に膨大になります。今後は、これらの混ぜる割合（組成比）や元素の数といったパラメーターを拡張し、さらに検討を進めます。

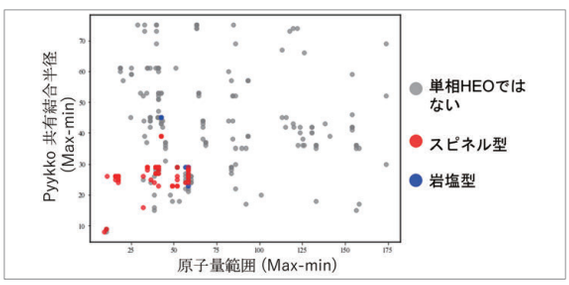


図　共有結合半径と原子量の範囲に対する各元素組み合わせが単相か否かに関するプロット。

北陸先端科学技術大学院大学 教授

2004年日本学術振興会特別研究員。2006年東京大学大学院理学系研究科博士課程を修了後、北陸先端科学技術大学院大学の助教に着任。2013年より北陸先端科学技術大学院大学の准教授として研究室を主宰。2020年より教授、マテリアルズインフォマティクス国際研究拠点長を兼務し、現在に至る。主に、触媒や高分子などを対象としたハイスループット実験技術の開発や、ハイスループット実験と機械学習を併用した大規模な材料探索に取り組んでいる。

ハイスループット実験により加速する可視光駆動型分子性金属酸化物によるCO_2変換触媒の覚醒

研究実施者　長田浩一（東北大学）

二酸化炭素を「有用な化合物」へ エネルギー変換効率5%以上の壁を超える

■研究の背景

化石燃料に依存しない持続可能な社会の構築に向けて、さまざまな取り組みが進んでいます。本研究では、そうした重要な取り組みの1つである、CO_2を有用な化合物へと変換する技術の確立を目指しました。CO_2変換技術には、主に「汎用性の高い有機化合物への変換法と選択性の向上」「触媒効率の向上」「反応の低エネルギー化」という3つの課題がありますが、本研究では反応の低エネルギー化の課題に対して、太陽光エネルギーを利用した光触媒システムに着目しました。

■研究の概要

太陽光エネルギーを効率よくクリーンエネルギーに変換するには、実用可能性の観点から5%以上の変換効率が求められています。現在光触媒には主に3つの手法があり、例えば太陽電池と電解装置の組み合わせや光電極（半導体）系といった手法では、5%以上の変換効率が出ているものの、整備コスト高額化の問題があります。それらに対して、粉末（分子）系による手法は整備コストは抑えられるものの、現状のエネルギー変換効率は1%未満に留まります。そこで、本研究では粉末系の変換効率を5%に引き上げることを目指しました（**図**）。

近年はAI技術を活用した触媒開発が盛んですが、実験結果とのギャップがあるため、制限的になっているという課題があります。そのため、本研究においてはハイスループット実験と計算科学を融合させることによって、可視光駆動型分子性金属酸化物（POM）を用いた、CO_2変換触媒の性能向上を目指す理論的な基盤を確立することにしました。

主に、分子性金属酸化物と光増感剤の複合化触媒システムについて実験的検討を進め、さまざまな組み合わせにおいてどのような傾向が出るかを検証しました。光増感剤については、ローダミンB（Rhodamine B）と呼ばれる増感色素が最も性能が良いという結果が得られ、POMについては2種類を検討した結果、一方がわずかに性能が良いという感触を得ました。

また、触媒の性能を示すTON（Turnover Number）については、90%の収率の場合、155という数値が得られました。さらに、TOF（Turnover Frequency）についても2桁程度の値となり、客観的に先行報告例よりも優秀であるとの評価を得ました。

この実験結果を理論計算（DFT）の結果と照らし合わせて検証したところ、実験的に高い活性を示した触媒の組み合わせに対して、理論計算上の考察では「組み合わせが悪い」という結果が示されました。これは、計算レベルが実験とマッチしていない、あるいは触媒の反応性を単純にエネルギー準位の高さだけで判断するには不十分であるという2つの可能性を示唆しています。このギャップを埋めることが、今後の機械学習を用いた評価において重要になると考えています。

こうした実験と並行して、機械学習を行うためのデータセット構築も進め、POM側の特徴量（記述子）として290個を、光増感剤側からは208個のデータポイントを取得しました。今後は、DFT計算で得られた特徴量もこれに追加し学習する予定です。一方で、データ数より特徴量の方が多いため、不要な特徴量を削減する必要があります。

■今後の展望

今後は、これらの実験データを用いて評価を進めます。特に、特徴量の削減については、PCA（主成分分析）やLassoといった手法を検討し、学習を行いながら最適な触媒の設計指針を導き出します。さらに、触媒インフォマティクスの技術を習得し、AIと計算化学を融合した触媒探索のための研究プロセスを確立します。

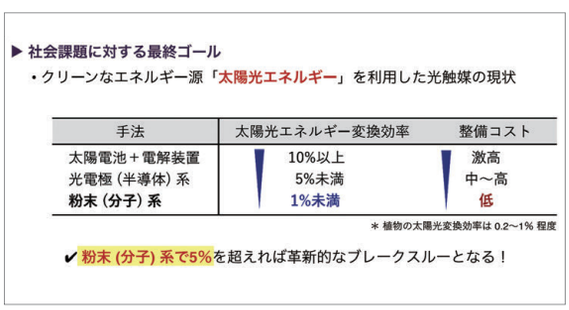


図　粉末（分子）系で太陽光エネルギーの変換効率5%以上を目指す。

PMから　藤井幹也

今年度より材料・化学分野のPMを担当し、堀優太さんと長田浩一さんの研究を伴走しました。覚醒PJとしては、AI分野が先行して開始されている中、材料・化学として新機軸を持ち込み、相乗効果を生み出せるテーマ設定と推進が重要だと感じました。受け入れ研究者として産総研の矢田陽先生と中村功先生がお引き受けくださり、およそ10カ月の間はチーム全体で触媒化学×理論化学×AIという方向性で研究を推進できたと思います。その結果、堀さんは反応活性化エネルギーデータベースから回帰モデルを構築し、題材とする触媒反応に鍵となる因子を同定しました。長田さんは新しい高効率光触媒反応を開拓するとともに、量子化学計算で候補材料を網羅的に計算し、今後の機械学習活用に向けた指針を見出すなど新しい挑戦を進めました。
覚醒PJは、異分野連携を通じて挑戦と成長を後押しし、次の「覚醒」へつなげる場である点が大きな魅力です。

メタン酸化触媒の設計に向けた量子化学とデータ駆動型触媒インフォマティクス

研究実施者　堀 優太（筑波大学）

メタンガスをクリーンエネルギー・システムとして活用する基盤技術

■研究の背景

天然ガスの主成分であるメタンは、地球環境に優しいクリーンなエネルギー源と考えられていますが、ガス状態であるため利便性は高くありません。そのため、メタノールに変換して液体状態にすることで持ち運びがしやすくなり、さまざまな化学製品の原料として利用できます。一方、メタンからメタノールへの変換プロセスは大量のエネルギーを消費する上に、生成ガスにCOが含まれるという問題があります。そこで、メタンの直接部分酸化によるメタノール変換が、触媒化学の目指す最重要課題の1つになっています。

■研究の概要

この課題の解決には、メタンからメタノールに直接的の変換できる、触媒の開発が非常に重要になっています。その一方で、この課題は非常に難しく、例えば非常に安定したメタンを反応させるために、C–H結合を切断してメタノールを生成しても、このメタノールがさらに反応してしまうという問題があります。この問題を解決するため、メタンと金属表面やゼオライトでの反応エネルギーをデータとしてデータ駆動型の触媒インフォマティクスを実施することで、最適な触媒候補を探索します。また、産総研が所有するマテリアル・プロセスイノベーションプラットフォーム（MPI）のハイスループット技術を活用しながら、触媒探索を行う理論的な基盤を構築したいと考えています。

本研究の最終的なゴールは、計算化学とAIによる新たな触媒設計技術を確立させ、メタン酸化触媒開発をモデルケースとして、クリーンエネルギーシステムの基盤技術を確立することです。一方で、プロジェクト期間中の具体的なゴールとしては、「機械学習を行うためのエネルギーと構造組成データセットの構築」「機械学習モデルの構築と解析の実施」「機械学習モデルの逆解析により最適な触媒候補の提案」の3つを目指しました。

まず、金属表面やゼオライトなど触媒候補となる材料群の記述子（密度、格子定数、結晶系など）から、量子化学計算や第一原理計算などによってエネルギーを評価してデータベースを構築しました（**図**）。次に、構築したデータベースに対して、Random ForestやLASSO回帰、PLS（部分的最小二乗回帰）といったモデルを使って、機械学習による回帰を行いました。その結果は誤差が大きく、初期の段階では予測がうまくいっていない状況が見られました。この状況を改善するには、データ量を増したり他の特徴量をさらに入れていくなどの検証が必要になると考えられます。

その後、特にRandom Forestで得られた回帰について、どの記述子（特徴量）がメタン酸化触媒の反応エネルギー予測において重要であるかを調べる特徴量重要度解析を実施しました。メタンとメタノール生成の反応エネルギーの差分に対する特徴量重要度を分析した結果、共有結合半径が重要な特徴量の共通項の1つとして現れました。それによって、この段階で、触媒設計にフォーカスを当てるべき、重要な記述子の試行的な知見が得られました。

■今後の展望

学術的な成果として、研究に関連する内容を学会などで発表し、本プロジェクトに関連したGX（グリーン・トランスフォーメーション）関連の研究計画が評価されています。今後は、「機械学習ポテンシャル」を用いた吸着エネルギーデータを目的変数として、追加で収集することを目指します。さらに、触媒インフォマティクスの技術を継続して習得し、AIと計算化学を融合した触媒探索のための研究プロセスを確立します。

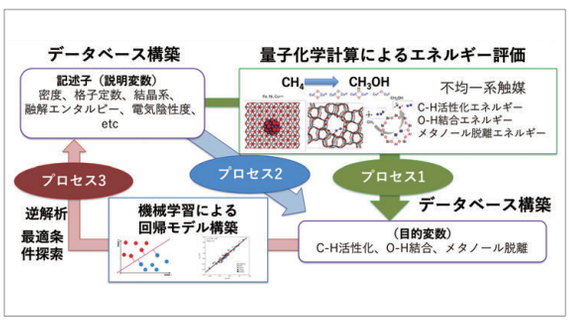


図　量子化学計算や第一原理計算などによってエネルギーを評価してデータベースを構築した。

奈良先端科学技術大学院大学
データ駆動型サイエンス創造センター・先端科学技術研究科 教授

2008年、東京大学大学院総合文化研究科広域科学相関基礎科学系博士課程修了。博士（学術）。マルチチャンネル化学反応の統計速度理論を研究。東京大学大学院にて特任研究員、サイボウズ株式会社にてソフトウェアエンジニアを経て、2010年東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻助教。有機薄膜太陽電池における電荷分離メカニズムを「京」コンピュータ等の大型計算機を用いて解析し、機械学習を用いた研究にも着手。2017年からパナソニック株式会社㈱に勤務、2019年からは課長職としてマテリアルズ・インフォマティクス部門を牽引。2021年に奈良先端大の教授に着任し、マテリアルズ・インフォマティクス研究室を主宰。デジタル技術とリアル技術を融合して新材料を発見することを目指している。

誰もがラボラトリーオートメーションを実装できる社会を目指した自動実験技術の開発

研究実施者　中島優作（大阪大学大学院）

熟練者の勘やコツを伝授した職人ロボットの開発

■研究の背景

材料科学の分野では、「混ぜる」という作業において勘やコツが必要です。例えば、燃料電池の粉砕では粉だけを混ぜる場合はさらさらにする必要がありますが、バインダーを加える際にはしっとりするまで混ぜることが求められます。こうした熟練者の勘やコツが必要な作業をロボットで再現するにあたっては、数百マイクロメートルから数百ナノメートルまでの非常に高い精度が求められることから、自動化が困難です。

■研究の概要

本研究では、10年後の、ロボットが材料実験の勘やコツを習得して実験している世界を見据え、手作業の粉体粉砕の混ぜ方を習得させることに取り組みました。まず、熟練者の動作をロボットに習得させるため、「見る」「触る」「砕く」という3つのステップを通じてシステムを開発し、検証しました。

「見る」ステップでは、人が混ぜる際と同様に、上部から観察するカメラを用いて乳鉢内の粉体状態を観察しながら作業しました。「触る」ステップでは、粉のざらざら感などの繊細な触り心地を教示できるよう、ロボットの手先の構造を人の手の仕組みを模倣して工夫しました。そこではコンプライアンス制御を採用することで、力のセンサーのフィードバックを受け、しなやかな筋肉を反映する柔らかい制御を実現しました。また、制御を安定化させるためにゲルを挟んで手首や皮膚の柔軟さを模擬し、高周波数で取れるフォースセンサー（1200 Hz）を装着しました。さらに、粉のざらざらといった高周波の情報を取得し、指先の繊細な触覚を模擬しました。これによって、教示デバイス越しにスムーズな粉体粉砕ができるようになり、粉の感触を教示者が手元で感じながら混ぜる様子が確認されました。

「砕く」ステップでは、クエン酸粉砕動作を教示データとして学習させ、模倣学習アルゴリズムとして、Transformerを使ったCVAEであるVAE-ACT（Action Chunking with Transformers）に力情報を追加した、Comp-ACTという手法を採用しました。その結果、乳棒を押し付けて粉砕する動作や、粉が集まった位置を狙って粉砕するといった、研究者の無意識の粉砕動作を反映している様子が見られました。

さらに、ロボットならではの「見る」手法として、透明乳鉢を用いた乳鉢底面からの観察を提案しました（**図**）。クエン酸の1粒粉砕を観察したところ、透明乳鉢の底から粉砕像が観察でき、粉砕時の力の応答も同時に計測できました。これにより、粉体種類や粒子の大きさによって、「ばきっ」と多段階で割れるのか、「ぐしゃっ」と脆く割れるのかといった、視覚と力覚を組み合わせた粉体粉砕の情報が得られました。今後はこの情報を用いて、制御や学習のパラメータ最適化につなげます。また、応用アプリケーションとして、手順が少なく評価しやすい低温セラミックス合成（バリウムゲルとジルコニアゲルを混合し100°Cで加熱）に焦点を当てた研究を進める予定です。

■今後の展望

今後さらに多様な粉で、粒度分布などを用いた定量評価へと展開したいと考えています。また、燃料電池合成を題材とし、さまざまな人の混ぜ方が実際の材料合成にどう影響するのかを調査し、定量化に取り組みます。さらに、ハイパワーなGPUを入手して高性能な手法を試したり、材料の知見を活かして性能向上を目指します。最終的には、模倣学習で可能なことと不可能なことを見極め、人の動きを単純に模倣するだけでなく、固定モーションと最適化を組み合わせることで、職人ロボットを作ることを目指します。

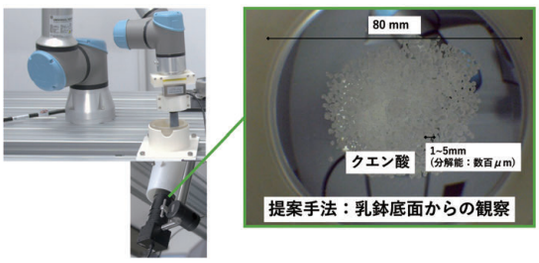


図　乳鉢底面からクエン酸の1粒粉砕を観察する実験を行った。

PMから　長藤圭介

D3、M1と覚醒最年少に相当する身分でありながら、ご自身の強い課題意識から発し、かつ分野を越えた領域に踏み込む、まさに「覚醒」的テーマを推進されました。

中島優作さんは、セラミックス・金属研究の拠点である中部センターと連携し、材料研究に欠かせない無機粉体の粉砕プロセスの自動化の研究に取り組んでいます。従来、慣れた研究者にしかできなかった難しい物理現象に基づくプロセスに果敢に取り組み、自身の得意技のメカトロ技術を組み合わせつつ、見事に遠隔ロボットで再現されました。

渡辺悠生さんは、木質材料研究の拠点である中国センターと連携し、化粧品などに用いられるナノ粒子を、現状のプラスチック由来からSDGs親和性の高い植物性由来に転換する研究に取り組んでいます。セルロースナノファイバーの前処理・ナノ粒子化に関する評価を中国センターの最先端計測群を使いこなされた姿は、現在求められている分野横断的な研究者の鏡です。

セルロースナノファイバーで被覆された木質模倣真球微粒子の粒径制御と機能設計

研究実施者　渡辺悠生（九州大学大学院）

化粧品に含まれるマイクロプラスチックの代替材料の開発を目指す

■研究の背景

現在、直径5mm以下の微細なプラスチックである、マイクロプラスチックによる海洋汚染が深刻な問題になっています。特に、生産された段階ですでに5mm以下である一次マイクロプラスチックは、化粧品の手触りや質感を向上させるために多量に含まれており、代替品が必要です。そこで、地球上で最も豊富に存在するバイオマス資源である樹木に着目し、樹木の化学構造を模倣した生分解性微粒子による海洋汚染の改善を目指しました。

■研究の概要

樹木は主に、セルロースという繊維状の高分子と、リグニンという複雑な網目構造を持つ高分子で構成されています。特に、セルロースをナノ化することで得られるセルロースナノファイバー（CNF）は、軽量で高強度、物理的・化学的な安定性の高さ、生分解性などの特徴を有するため、材料開発の分野を中心に注目を集めています。さらに、CNFは両親媒性であるため、固体の界面活性剤として油水界面に吸着し、Pickeringエマルションを形成できることが知られています。Pickeringエマルションは従来のエマルションに比べて安定性が高く、様々な機能性材料の創出に利用することができます。

本研究ではこの技術を利用して、木質模倣真球微粒子を合成しました。この微粒子は、内相である人工リグニンの表面をCNFが被覆した複合微粒子であり、木質成分が有する生分解性と、高い真球度、均一な化学構造、環境に優しい合成プロセスという優位性を有しています。

すでに木質模倣真球微粒子の合成自体は成功していましたが、物性や化学構造の分析が不十分で、化粧品として実用化するための機能も未検討でした。そのため、多角的な分析から得られた知見をもとに、化粧品としての機能設計を試みることを計画しました。検討事項として、「微粒子の形態観察と熱安定性」「微粒子の化学構造の分析」「化粧品としての機能設計（抗酸化作用、SPF効果、色彩）」の3点に注目しました。その結果、微粒子の断面を観察し、表面のCNF層の厚みや内部の構造が把握できました。また、Klason法という手法を用いて構成成分の比率を定量化し、セルロースの含有量が全体の1～3%であることを明らかにしました。

その後、特に化粧品機能に焦点を当てて検討を進め、体内で生じた活性酸素を取り除き、皮膚の老化を防ぐ抗酸化作用について評価しました。その際、天然のリグニンが抗酸化作用を持つことから、木質模倣微粒子にも期待しましたが、人工リグニン由来の抗酸化活性は確認できたものの、比較対象であるDPPHよりは低い結果になりました。SPF（Sun Protect Factor）効果の検証では、UV-Bを防ぐ効果を評価しました。この微粒子を化粧品クリームに混合したところ、SPF効果が向上し、SPF30の商品と同程度のUV透過率を示しました（**図**）。さらに色彩の検証では、化粧品に配合した際に肌になじみやすい色になるか（天然リグニンは茶色で化粧品には不向き）を評価し、微粒子表面がCNFで被覆されているため、化粧品に混合しても色相の変化が少ないことが確認できました。これらの成果により、天然由来の物質を利用して、生分解性以外の付加価値を有する化粧品微粒子の開発に成功したと考えます。

■今後の展望

表面に官能基を導入したCNFを利用すれば、微粒子の質感制御（しっとり、さらさら）や、微粒子表面への有効成分の担持が可能になると考えています。今後は、この研究で得られた知見をさらに発展させ、マイクロプラスチック代替材料としての実用化に向けた研究を進めていきます。

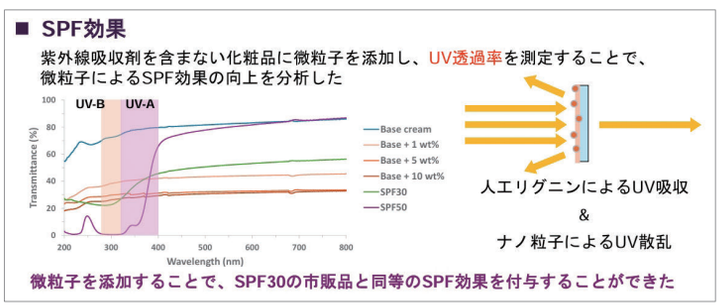


図　微粒子を含ませることで、紫外線の透過を防ぐ効果が検証された。

東京大学工学部 教授

2009年、東京大学大学院工学系研究科産業機械工学専攻にて博士課程修了、機械工学専攻助教着任。2012年講師、2016年准教授より現職。その間、カールスルーエ工科大学客員研究員、JSTさきがけ研究員を兼任。2019年より人工物工学研究センター兼任。「粉体プロセス統合工学」を掲げ、プロセスインフォマティクスを用いて、材料・構造を最大限に活かすプロセス最適化に従事。特に燃料電池触媒層、積層造形における粉体プロセスの自律探索とモデリングを用いた、革新的なプロセスデザインを目指す。JST未来社会創造事業、NEDO水素事業を手掛ける。2025年設立一般社団法人「AIロボット駆動科学イニシアティブ」発起人の一人。

スピン量子ビットの シミュレーションとゲート最適化

研究実施者　佐藤優大（東京理科大学大学院）

既存の微細加工技術が利用できる スピン量子ビット型コンピューター実現へ

■研究の背景

高速な計算が実行できると期待されている量子コンピューターは、現状ではノイズの影響によって正しい計算ができないという課題があります。そこで、スピン量子ビット型の量子コンピューターのシミュレーターを開発して、ノイズに強い制御手法を探る研究を行いました。スピン量子ビットはパソコンやスマートフォン用の半導体を作る微細加工技術が応用でき、コンピューターの大規模化に向いています。一方で、制御性能の向上が不可欠であるため、スピン量子ビット方式における量子ゲート実装の正確性を誤り訂正が可能な水準まで向上させ、量子コンピューターを活用したアルゴリズムを実行可能にすることを目指しました。

■研究の概要

本研究は量子制御理論（断熱ショートカット、数理最適化、強化学習など）と、実デバイス開発（QPU、制御系など）との間のギャップを埋める位置づけにあり、ノイズありのシミュレーターと現実的な制御方法に焦点を当てました。量子系の時間変化はハミルトニアンに規定されるため、その状態制御はハミルトニアンのうちの制御可能な部分（電圧やマイクロ波など）を調整することで実現されます。しかしながら、古典系とは異なり、量子系での測定は確率的で一度の測定では状態を確定できない難しさがあります。また、測定によって量子状態が破壊されてしまうため、途中で軌道修正（フィードバック）ができません。

これらの課題を克服するため、関数評価にコストがかかる場合に測定回数を減らして最適化を行う、ベイズ最適化の利用を考えました。ベイズ最適化の適用にあたっては、一つの課題がありました。通常のベイズ最適化が仮定する測定モデルではガウスノイズが用いられますが、実際のスピン量子ビット系で発生するノイズの1つであるチャージノイズは、周波数が低い領域でパワースペクトル密度が高くなる1/fノイズのような特性を持っています。そのため、ガウスノイズを仮定した従来モデルでは実際の状況と乖離してしまうのです。

そこで、このノイズの特性を取り込む工夫としてベイズ最適化に忘却の概念を導入しました。具体的には、測定モデルのノイズ項に忘却係数を乗じることでノイズの分散が時間変化するように変更しました（**図**）。これにより、古いデータよりも最近測定された新しいデータの方を重視する形となります。

この忘却付きベイズ最適化の効果をシミュレーションにより検証した結果、定期的に最適化を行うことで、忠実度を高く保てることが示されました。また、最適化をしない場合（最初の最適化値を使い続けた場合）と比較して、定期的な最適化を行った方が正確性が良いことが確認されました。さらに、さまざまな忘却の手法（指数関数的、対数関数的）を比較した結果、今回試したモデルにおいては、対数関数的な忘却を導入した場合において、平均的に最も良い忠実度が得られました。ただし、この結果は設定に依存して変化する可能性があるため、最適な条件は今後も探索する必要があります。

■今後の展望

期間中の学術的成果として、シミュレーターの内容に関する論文を執筆中です。また、アメリカで開催された国際学会（APS Global Physics Summit 2025、IEEE Quantum Week 2025）で今回の内容を発表しました。今後は、ベイズ最適化を用いた手法をさらに改良し、現在手動で決定している探索範囲の自動決定や忘却係数などのハイパーパラメーターの削減を進め、最も良い設定を自動で見つけられるようにします。

忘却の導入

測定モデルを**ノイズの分散が時間変化**するよう変更

$$y = f(x) + \Lambda_i \epsilon \quad \left(\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)\right)$$

忘却係数

$$\Lambda_i = \lambda^{-\frac{t_i}{T}} \text{ or } \Lambda_i = 1 + \left(\frac{1}{\lambda} - 1\right) \log_2 \frac{t_i + T}{T}$$

$\lambda \in (0,1]$: 忘却因子，t_i: データ取得からの経過時間

直感的には…

古いデータより新しいデータを重視

図　ベイズ最適化に忘却を導入し、測定モデルをノイズの分散が時間変化するように変化させた。

PMから　藤巻 朗

2024年度から量子分野の覚醒プロジェクトが始まり、PMとして2名の方を担当しました。いずれも、博士前期課程1年生で、フレッシュな顔ぶれでした。

佐藤優大さんは、計算によって量子システムにアプローチする試みでした。所属する研究室には、同様なテーマを行っている先輩はいないということで、独学で覚醒プロジェクトに臨んでいました。好奇心の強さと意欲の高さがなせる業かと思いますが、自らどんどんと研究を進めており、PMは傍で見ていればよいというような方でした。

竹田一志さんも意欲的でした。世界中でだれも取り扱っていない新しい材料で、トランジスタを作ろうという挑戦的なテーマでした。本人とは関係のない環境の問題で失敗することもありましたが、それでもめげることもなく、着実に前に進んでいきました。

2人の若者が、研究者としてどんどん成長していく姿を見て、PMとして本当に頼もしく感じていたところです。

単分子誘電体デバイスの性能向上

研究実施者　竹田一志（広島大学）

不揮発性メモリーの微細化の課題を解決する

■研究の背景

現代社会においては、データ保存に関して2つの大きな課題に直面しています。1つはデータ量が指数関数的に増加している点で、もう1つは次世代デバイスに必要な微細化と低消費電力化の両立が難しいという技術的な課題です。従来のメモリ技術である強誘電体は、電気双極子の長距離秩序や相転移によって発現する性質であり、通常は結晶でのみ発現するという制約がありました。このような結晶の制約を克服するため、単一分子で強誘電体のように振る舞う性質を持つ、単分子誘電体に着目しました。

■研究の概要

本研究では、単分子誘電体の中でも「W48POM」という分子に着目しました。W48POMは、先行研究で知られるプレイスラー型POMよりも、単分子誘電物性を発現する温度範囲が広いという利点を持っています。この単分子誘電体デバイスを開発することで、記録密度を1000倍以上に向上させることが可能になり、「記録密度が高い」「高速」「低消費電力」という三拍子が揃った次世代メモリを実現します。

まず、メモリ機能を評価するため、単分子誘電体層をゲート絶縁膜の一部に用いたFeFET（強誘電体電界効果トランジスタ）の作製に取り組みました。FeFET作製プロセスにおいては、W48POMと既知のプレイスラー型POMについて薄膜成膜と特性評価を実施しました。

プロセスの中でW48POMの成膜を試みたところ、プレイスラー型POMと同じ組成、似た骨格を持ちながらも、分子量が大きいために同様の方法では薄膜を成膜できませんでした。また、予備的なXPS（X線光電子分光法）分析では、W48POMの組成に含まれる元素のピークを確認できず、共用器具の使用が原因とみられる組成外の金が含まれていることが分かりました。

一方で、プレイスラー型POMの再成膜には成功し、XPS分析によってプレイスラー型POMの組成に含まれる元素のピークを確認できました（**図**）。また、SiO2 MOSFETのプロセスへの移行も成功し、プレイスラー型POMの膜厚や結晶性を持つことが確認されました。

FeFETの測定結果としては、メモリウィンドウがないという結果になりました。これは、ゲート電圧を印加しても、単分子誘電体層によってチャネルの状態を保持できなかったことを意味します。この失敗の原因を分析した結果、単分子誘電体膜とSiO2膜の誘電率の差が非常に大きいため、単分子誘電体層に十分な電場が印加されなかったことが判明しました。単分子誘電体の誘電率に比べてSiO2の誘電率が非常に低く、ゲート部分のリークを防ぐためにSiO2膜を厚くした結果、単分子誘電体に十分に電圧がかかりませんでした。一般的に、誘電率が低いほど電圧がかかりやすいという性質があります。

今回の研究では、FeFETを作製したものの、思ったような特性（メモリウィンドウ）は得られませんでした。ただ、プロセス移行の可能性や材料の結晶性に関する知見が得られました。

■今後の展望

今後は単分子誘電体の膜質の向上や成膜プロセスの確立、単分子誘電体の性能を十分に発揮できるような構造への改良を行っていきます。さらに、単分子誘電体薄膜の特性の整理・検証を進め、単分子誘電体デバイスの性能向上へとつなげます。最終的には単分子誘電体デバイスの微細化を推進し、記録密度を1000倍以上に向上できる次世代メモリの作製を目指します。また、単分子誘電体の1量子ビット（qubit）としての活用の可能性も考えます。

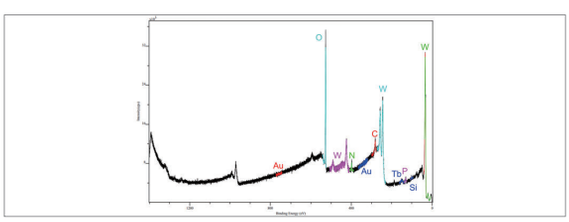


図　プレイスラー型POM薄膜のXPSスペクトル。プレイスラー型POMを構成する元素のピークが観測された。

名古屋大学 未来社会創造機構 特任教授

1982年東北大学工学部電子工学科を卒業、1987年工学研究科電子工学専攻博士後期課程を修了（工学博士）。同年6月より、カリフォルニア大学バークレー校客員研究員。1988年より、名古屋大学工学部に助手として着任。同大教授・副総長を経て、現在は同大未来社会創造機構・特任教授。学生時代より、超伝導デバイスや回路の研究に従事。特に、ジョセフソン接合に基づく回路内の磁束量子の振舞いについて、先駆的な研究を手掛けた。最近では、π位相シフト磁性ジョセフソン接合の集積化技術を確立し、負性インダクタンスなど従来の素子だけでは得られない量子効果が顕著に現れる超伝導回路の解析や実証を手掛け、新たな超伝導エレクトロニクスの開拓を目指している。

産総研

ともに挑む。つぎを創る。

覚醒プロジェクト 公式サイト

https://kakusei.aist.go.jp/

覚醒プロジェクト 2024年度活動報告

2025年12月31日発行

制作　株式会社角川アスキー総合研究所
発行　国立研究開発法人産業技術総合研究所

Copyright © National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)