

Synthesiology

大規模データからの日常生活行動予測モデリング

食品・環境中の有害成分分析のための有機標準物質の拡充

産業技術の社会受容

グリッドが実現するE-サイエンス

ユビキタスエネルギーデバイス開発のための材料基礎解析

蒸留プロセスのイノベーション

創薬の効率を飛躍的に高めた化合物スクリーニング計算

シンセシオロジー編集委員会

新ジャーナル「Synthesiology – 構成学」発刊の趣旨

研究者による科学的な発見や発明が実際の社会に役立つまでに長い時間がかかったり、忘れ去られ葬られたりしてしまうことを、悪夢の時代、死の谷、と呼び、研究活動とその社会寄与との間に大きなギャップがあることが認識されている^(注1)。これまで研究者は、優れた研究成果であれば誰かが拾い上げてくれて、いつか社会の中で花開くことを期待して研究を行ってきたが、300年あまりの近代科学の歴史を振り返れば分かるように、基礎研究の成果が社会に活かされるまでに時間を要したり、埋没してしまうことが少なくない。また科学技術の領域がますます細分化された今日の状況では、基礎研究の成果を社会につなげることは一層容易ではなくなっている。

大きな社会投資によって得られた基礎研究の成果であっても、いわば自然淘汰にまかせたままでは^(注1)、その成果の社会還元を実現することは難しい。そのため、社会の側から研究成果を汲み上げてもらうという受動的な態度ではなく、研究成果の可能性や限界を良く理解した研究者自身が研究側から積極的にこのギャップを埋める研究活動(すなわち本格研究^(注2))を行うべきであると考えます。

もちろん、これまでも研究者によって基礎研究の成果を社会に活かすための活動が行なわれてきた。しかし、そのプロセスはノウハウとして個々の研究者の中に残るだけで、系統立てて記録して論じられることがなかった。そのために、このような活動は社会における知として蓄積されずにきた。これまでの学術雑誌は、科学的発見といった基礎研究(すなわち第1種基礎研究^(注3))の成果としての事実的知識を集積してきた。これに対して、研究成果を社会に活かすために行うべきことを知として蓄積する、すなわち当為的知識を集積することを目的として、ここに新しい学術ジャーナルを発刊する。自然についての知の獲得というこれまでの科学に加えて、科学的知見や技術を統合して社会に有益なものを構成するための学問を確立することが、持続的発展可能な社会に科学技術が積極的に寄与するための車の両輪となる。

この「Synthesiology」と名付けたジャーナルにおいては、成果を社会に活かそうとする研究活動を基礎研究(すなわち第2種基礎研究^(注4))として捉え直し、その目標の設定と社会的価値を含めて、具体的なシナリオや研究手順、また要素技術の構成・統合のプロセスが記述された論文を掲載する。どのようなアプローチをとれば社会に活かす研究が実践できるのかを読者に伝え、共に議論するためのジャーナルである。そして、ジャーナルという媒体の上で研究活動事例を集積して、研究者が社会に役立つ研究を効果的にかつ効率よく実施するための方法論を確立することを目的とする。この論文をどのような観点で執筆するかについては、巻末の「編集の方針」に記載したので参照されたい。

ジャーナル名は、統合や構成を意味する Synthesis と学を意味する -logy をつなげた造語である。研究成果の社会還元を実現するためには、要素的技術をいかに統合して構成するかが重要であるという考えから Synthesis という語を基とした。そして、構成的・統合的な研究活動の成果を蓄積することによってその論理や共通原理を見いだす、という新しい学問の構築を目指していることを一語で表現するために、さらに今後の国際誌への展開も考慮して、あえて英語で造語を行ない、「Synthesiology - 構成学」とした。

このジャーナルが社会に広まることで、研究開発の成果を迅速に社会に還元する原動力が強まり、社会の持続的発展のための技術力の強化に資するとともに、社会における研究という営為の意義がより高まることを期待する。

シンセシオロジー編集委員会

- 注1 「悪夢の時代」は吉川弘之と歴史学者ヨセフ・ハトバニーが命名。「死の谷」は米国連邦議会 下院科学委員会副委員長であったバーノン・エーラーズが命名。ハーバード大学名誉教授のルイス・ブランスコムはこのギャップのことを「ダーウィンの海」と呼んだ。
- 注2 本格研究： 研究テーマを未来社会像に至るシナリオの中で位置づけて、そのシナリオから派生する具体的な課題に幅広く研究者が参画できる体制を確立し、第2種基礎研究^(注4)を軸に、第1種基礎研究^(注3)から製品化研究^(注5)を連続的・同時並行的に進める研究を「本格研究 (Full Research)」と呼ぶ。本格研究 http://www.aist.go.jp/aist_j/research/honkaku/about.html
- 注3 第1種基礎研究： 未知現象を観察、実験、理論計算により分析して、普遍的な法則や定理を構築するための研究をいう。
- 注4 第2種基礎研究： 複数の領域の知識を統合して社会的価値を実現する研究をいう。また、その一般性のある方法論を導き出す研究も含む。
- 注5 製品化研究： 第1種基礎研究、第2種基礎研究および実際の経験から得た成果と知識を利用し、新しい技術の社会での利用を具体化するための研究。

Synthesiology 第2巻第1号(2009.2) 目次

新ジャーナル「Synthesiology – 構成学」発刊の趣旨	i
研究論文	
大規模データからの日常生活行動予測モデリング — 実サービスを通じたベイジアンネットワークの学習と推論 — ・・・本村 陽一	1-11
食品・環境中の有害成分分析のための有機標準物質の拡充 — 定量 NMR 法による効率的な計量トレーサ ビリティの実現 — ・・・井原 俊英、齋藤 剛、杉本 直樹	12-22
産業技術の社会受容 — 既存の3モデルを統合した環境製品普及評価モデルの構築 — ・・・松本 光崇、近藤 伸亮	23-31
グリッドが実現するE-サイエンス — 地球観測グリッド(GEO Grid) の設計と実装 — ・・・田中 良夫	32-41
ユビキタスエネルギーデバイス開発のための材料基礎解析 — リチウムイオン電池正極材料、燃料電池電 極、金触媒での展開 —・・・香山 正憲、秋田 知樹、田中 真悟、前田 泰、田中 孝治、岡崎 一行、吉川 純	42-50
蒸留プロセスのイノベーション — 理想状態からの「デチューニング」によるプロセス強化 — ・・・中岩 勝、大森 隆夫	51-59
創薬の効率を飛躍的に高めた化合物スクリーニング計算 — 3次元構造の化合物データベースの開発 — ・・・福西 快文、杉原 裕介、三上 義明、酒井 広太、楠戸 寛、中村 春木	60-68
座談会	
システムデザイン工学と構成学	69-74
シンセシオロジー 創刊一周年を迎えて	75-80
編集委員会より	
編集方針	81-82
投稿規定	83
読者フォーラム・編集後記	90
Contents	
Research papers	
Daily life behavior modeling from large scale data — Statistical learning and probabilistic reasoning of Bayesian networks through real services — --- Y. Motomura	1
Expansion of organic reference materials for the analysis of hazardous substances in food and the environment — Realization of an efficient metrological traceability using the quantitative NMR method — --- T. Ihara, T. Saito and N. Sugimoto	12
Modeling the social acceptance of industrial technologies — Development of an eco-product diffusion analysis model that incorporates three existing models — --- M. Matsumoto and S. Kondoh	23
How Grid enables E-Science? — Design and implementation of the GEO Grid — --- Y. Tanaka	32
Basic materials research for the development of ubiquitous-energy devices — Applications to positive electrode materials of Li-ion batteries, electrode catalysts of proton-exchange fuel cells and gold catalysts — --- M. Kohyama, T. Akita, S. Tanaka, Y. Maeda, K. Tanaka, K. Okazaki and J. Kikkawa	42
Innovation in distillation processes — Process intensification for energy savings through concept of “detuning” from ideal state — --- M. Nakaiwa and T. Ohmori	51
Advanced in-silico drug screening to achieve high hit ratio — Development of 3D-compound database — --- Y. Fukunishi, Y. Sugihara, Y. Mikami, K. Sakai, H. Kusudo and H. Nakamura	60
Messages from the editorial board	84-85
Editorial policy	86-87
Instructions for authors	88-89

大規模データからの日常生活行動予測モデリング

— 実サービスを通じたベイジアンネットワークの学習と推論 —

本村 陽一

ベイジアンネットワークの統計的学習、確率推論技術とユーザモデリング技術、大規模データ収集技術を要素技術として構成した生活行動予測モデルの構築技術について述べる。また因果的な構造をグラフィカルモデルであるベイジアンネットワークを状況や文脈も含んだ大規模データから構築するための必然から生まれた「実サービスを通じた調査・研究」の概念についても議論する。

キーワード: ベイジアンネットワーク、統計的学習、確率推論、ユーザモデル、行動分析、知識循環

Daily life behavior modeling from large scale data

– Statistical learning and probabilistic reasoning of Bayesian networks through real services –

Yoichi Motomura

Daily life behavior modeling is discussed. This modeling framework consists of statistical learning, probabilistic reasoning, user modeling, and large-scale data collecting technologies. Bayesian networks can represent causality relationship as graphical structures. Such models should include situations and contexts of daily life behavior through real services. In order to collect large-scale data connected with them, we have to provide real services supported by many users. This concept is named “Research as a service” and discussed in this paper.

Keywords: Bayesian network, statistical learning, probabilistic reasoning, user model, behavior analysis, knowledge circulation

1 はじめに

情報処理技術の適用領域は益々拡大している。それにともない日常生活を支援する情報サービスが望まれてきている。そのためには様々な状況において人が何を目的としているか、という日常生活行動を計算論的レベルで記述したモデルが必要となる。この計算論的モデルを利用することで、ユーザの行動からその背後にある要求や期待している結果を予測し、システムがそれを速やかに実現することで日常生活を支援する新たなサービス開発が可能となる。またそうした人間との協調動作を日常生活中でシステムが実行し続けることで、これまでの実験室環境では得られなかった大量で意味のあるデータが獲得できるようになる。この大規模なデータを用いて、絶えずモデルを更新しつつサービスを運用し続ける循環を産み出すことができる。

しかし、こうした日常生活中においては不確実な情報（例えば、真か偽に断定できないような予測や不完全な観測情報）のもとでの情報処理が本質的に重要となり、これまでのシステムの記述方式で中心的な役割を果たしていた決定論的なアプローチから非決定論的アプローチへのパラダイ

ムシフトが必要になる。非決定論的アプローチとは、あいまいで不確実な情報をできるだけそのまま取扱い、計算するアプローチである。対象となる変数を確率分布として計算し、推論を行う確率的推論もその一つである^[1]。この確率的推論は事後確率を最大化するパターン識別器などではナイーブベイズや隠れマルコフモデル (HMM) として自然に用いられてきたものでもある。さらに意思決定理論に基づいてシステムを制御し、有用な知識を表現し、複雑な処理を行うためには、多数の変数からなる高次元確率分布の計算が必要になる。変数の数が膨大になると高次元確率分布の計算は困難になるため、局所的には低次元の確率分布を用いて近似する他なく、そのために変数間の関係を規定したグラフ構造を導入する。このようなグラフ構造を持つ多次元確率分布モデルとしてベイジアンネットワーク（以下ベイジアンネット）^[2]がある。ベイジアンネットは多変数間の依存関係を条件付き確率とネットワーク構造により規定した一般的なモデルである。またベイジアンネットは大規模データからの統計的学習によってモデルを構築でき、これもまた不確実性に対処するためには重要な性質となる。

産業技術総合研究所 サービス工学研究センター / デジタルヒューマン研究センター 〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1 中央第2 / 〒135-0064 江東区青海 2-41-6

Center for Service Research/Digital Human Research Center, AIST Tsukuba Central 2, Umezono 1-1-1, Tsukuba 305-8568, Japan/Aomi 2-41-6, koto-ku 135-0064, Japan E-mail: y.motomura@aist.go.jp

Received original manuscript September 24, 2008, Revisions received January 13, 2009, Accepted January 13, 2009

本稿ではまず、非決定論的アプローチと確率モデリングについて述べた後、ベイジアンネットとそれを用いた日常生活における人の行動予測モデルの構築技術と応用事例について述べるとともに、これらを実現する過程において必然として構成されることとなった「Research as a Service (サービスを通じた調査・研究)」について議論する。

2 非決定論的アプローチの選択

実世界の問題においては、直接観測することができない対象（確率変数）について、その状態（値）やその可能性（確率）を知りたい。人間を対象にした計算処理にも必然的にこうした不確実性が入り込む。システムが何らかのタスクを実行する場合に、システムの中ではそのタスクがモデル化され、計算操作の対象になっているとみなせる。つまりプログラムは対象とするタスクのモデルと計算操作をプログラム言語によってコード化したものと理解できる。さらにどのユーザに対しても全く同じように動作するのではなく、ユーザによって動作を変えるようなことを考えると、システムの中では、タスクのモデルとユーザのモデルの2つを実装することが必要になる。通常はタスク（プロセス）のモデルに関しては明確に記述できることが多いが、ユーザに関しては人間に関する不確実性を取り扱うために多くの場合で非決定論的な計算モデルが必要になる。ユーザの意図や要求のような人間系内部の潜在変数は現在の所、明示的にモデル化することが難しく、こうした要素はそもそも非決定論的な枠組みで記述せざるを得ない。また多様なユーザが様々な状況においてシステムを利用する際の、システムがとるべき最適な動作を全て事前に規定しておくこともまた難しい問題である。システムが提供する機能はシステム設計者があらかじめデザインすべきであるが、システムのユーザが何を要求していて、提供された情報やサービスについてどのように受け止めたのか、システムの動作は正しかったのか、ユーザの期待とは違ったものであったのか、などはシステムの実行時や実行した後でないとわからない。つまり真に目の前のユーザにとっての最適な動作設計を事前に確定することは難しい。したがって目の前にいるユーザの期待や要求通りにシステムを動作させるためには、単に非決定論的な枠組みを用いるだけでも不十分で、さらにユーザの反応を実行時に予測した上で、その反応や評価を最適化するように、ユーザのモデルを動的に構築できる枠組みも重要になる。これが人間に関する不確実性である。

また計算対象としての情報が大量に出現し、計算可能な量との間に大きな隔たりが生まれることでも不確実性への対処が必要になる。例えば我々はインターネットの普及により、有限ではあるが、直接取り扱うことが困難な大量の

データというものに直面している。ある一つの Web ページが全てのユーザに読まれた頻度というものは計測可能ではあるが、これを全ての Web ページについて数え挙げるといような決定論的な取り扱いには現実的ではない。こうした場合に、Web ページの間の遷移確率というものを考え、これを定常的な確率過程として非決定論的にモデル化することによって、Google の PageRank は計算されている^[3]。つまり元の Web ページやリンク・被リンク構造は決定論的に記述されており、それを扱うコンピュータもまた決定論的なものであるにも関わらず、決定論的枠組みではなく、非決定論的なモデルを用いることで、記述量やデータ数の爆発に対応できているのである。こうした実世界や大量データ、人間を含めた系の不確実性に対処することが、これからの社会問題を解決するための人工知能システムには強く求められ、そこでは非決定論的なモデルとして問題を記述することが一つの解決策である。

不確実性を含む問題を非決定論的な計算モデルで記述したとしても、それを現在の決定論的なコンピュータで取り扱うということは、計算対象が何であるか、という計算論レベルのプロセスを、計算方法がどのように書かれ（アルゴリズムレベル）、どのように実行されるか（インプリメントレベル）、というレベルとは独立に考えるべきであるという Marr の計算論^[4]を想起させる。つまり、決定論的なシリコンチップのコンピュータの上で、決定論的なコンピュータ言語により記述されたプログラムで実行されているとしても、また先の Web の例のように元のデータやメカニズムが決定論的なものであったとしても、その計算対象のモデルとして非決定論的に考えることが有益な場面があるということである。トイ・問題を対象とする限りは計算対象も決定論的に考えていても十分であるが、我々の目の前にある実問題を計算論的にモデル化しようとする、そこに内在する不確実性に対処するために非決定論的な枠組みで記述せざるを得ない。

3 ベイジアンネット

3.1 確率モデリング

非決定論的アプローチの一つとして、確率を用いる方法がある。確率を用いることで事象の不確実性を定量的にモデル化し、公理的確率論により厳密に取り扱うことが可能となる。観測可能な事象の確率値そのものは大量の観測データから得ることができ、観測不可能な事象については、ベイズ的な確率推論（ベイズ推定）によって推定することができる。これは条件付き確率によって、変数の不確実性と変数間の関係性をモデル化し、ある変数に関する不確実性を他の変数の情報から求めるものとして考えるとい

かりやすい。古典的なベイズ推定ではこの未知 (unknown) の確率分布を主観的な事前分布として扱うために、非ベイズの統計学者からは批判を浴びていたが、最近では大量データが取り扱い可能になったことで、この確率分布を大量の統計データから経験的に構成することが可能になり、多くの不確実性を持つドメインにおける実用的な方法として有望視されている。

例えば、完全に観測できない事象を扱う確率的な枠組について考えてみる。実世界には将来の天気や雑音混じりの信号、ユーザの意図のように確定値を得ることが難しい不確実な情報が多く存在する。これらを体系的に取り扱うために確率的な枠組を導入する。複雑な要因やノイズの影響などによって不確実性を含む対象を確率変数として X で表し、その変数がとりうる具体値を x_1, x_2, \dots, x_n と表すことにする。

次に変数間の依存関係を考える。例えば変数 X_i が x という値を取るならば、 X_j は y となる、という関係が成立しているとき、 X_j が X_i に依存していると考える (if $X_i = x$ then $X_j = y$)。現実には起きている複雑な事象を考えると、複数の変数間の依存関係は複雑になり、「if $X_i = x_1, \dots, X_i = x_n, \dots$, then $X_j = y$ 」のように明示的に全ての関係を列挙することはあまり現実的でない。また、たとえこのような if-then ルールを膨大に挙げたとしても実際には例外などがあり、必ずしも完全に状況を記述することは難しいだろう。そこで厳密な表現をあきらめ、主要な変数のみに注目し、ルールが成立する確信の度合いを定量的に表すために「 $X_i = x_i$ であるとき $X_j = y$ である確率は $P(X_j = y | X_i = x_i)$ 」という確率的な表現を導入する。二つの量 x, y の間の一意的な依存関係は、例えば関数 $y = f(x)$ によって表せるが、これと同様に、確率変数 X_i, X_j の依存関係は条件付確率分布 $P(X_j | X_i)$ によって表すことができる。これは X_i のとる値に応じて、 X_j の分布が影響をうけ、その依存関係の定量的関係が条件付確率分布 $P(X_j | X_i)$ で定められることを示している。

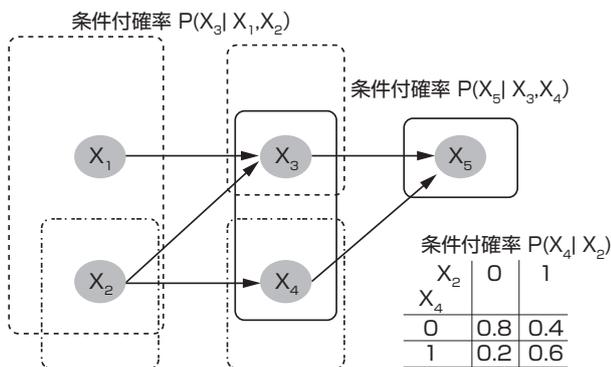


図1 ベイジアンネットワーク

さらに複数の確率変数の間の定性的な依存関係をグラフ構造によって表し、個々の変数間の定量的な関係を先の条件付確率で表したモデルがベイジアンネットである。説明変数、目的変数の区別なく、任意の変数の確率分布が効率よく計算できるのがベイジアンネットの特長でもあり、モデルは様々な用途に再利用することができる。

望ましい入力と出力の組からなるデータを与えることで、モデルやシステムの振る舞いを決定する枠組みが機械学習や統計的学習と呼ばれる。ベイジアンネットを実データからの統計的学習により構築することもできる。ベイジアンネットの上で行われる確率分布の計算は確率推論と呼ばれる。以降ではモデル、データからのモデル構築、確率推論のそれぞれについて簡単に述べる。

3.2 ベイジアンネットモデル

ベイジアンネットは数理的には確率変数をノードとするグラフ構造と、各ノードに割り当てられた条件付き確率分布群によってモデルが定義される (図1)。

各変数の条件付き確率分布は、離散的な確率変数の場合は条件付き確率表 (conditional probability table; CPT) として表現できる。このように条件付き確率を表として与えることで、確率分布を密度関数とパラメータで与えるよりも表現の自由度は高くなる。つまり、対象がどのようなものであるかが事前にはわからない対象に対する非決定論的なモデル化手法として有用である。

条件付確率が与えられる側の変数を子ノードと呼び、親ノードから子ノードの向きへ有向リンクを張る。このように変数とグラフ構造、条件付確率表により定義した非循環有向グラフをベイジアンネットモデルとして構築する。

3.3 データからのモデル構築

ベイジアンネットのモデルが大きなものになってくると、ネットワークの構造や全ての条件付確率表を手手で全て決定することはなかなか容易ではない。そこで大量のデータからの統計的学習によってモデルを構築する方法が必要となる。

学習に用いるデータセットが条件付確率表の全ての項目に対応する事例を含んでいる場合は完全データと呼ばれ、この場合には統計データを数え上げて頻度を得て、それを正規化したものが条件付確率値の最尤推定値となる。欠損がある不完全データの場合には各種の補完を行うことで条件付確率値を推定する。モデルのネットワーク構造も

$P(y_1 Pa(X_1) = x_1)$...	$P(y_1 Pa(X_1) = x_m)$
:	...	:
$P(y_n Pa(X_1) = x_1)$...	$P(y_n Pa(X_1) = x_m)$

表1 条件付き確率表 (CPT)

データから決定したいことがある。構造の学習はグラフ構造をある初期状態から探索するものになる。グラフ構造の良さをはかる評価規準としては、尤度の他に AIC や BIC、MDL などの情報量規準が用いられる。グラフのノード数が大きくなると探索空間は爆発的に増大し、グラフ構造を全て探索することは計算量の点から困難になるため、欲張り法 (Greedy algorithm) や各種のヒューリスティックを使い準最適な構造を探索することが必要となる。こうしたグラフ構造の学習アルゴリズムとして K-2 アルゴリズム^[5]がある。これは (i) 各ノードについて親ノードになりえる候補を限定しておく、(ii) ある子ノードを一つ選び、候補となる親ノードを一つずつ加えてグラフを作る、(iii) そのグラフのもとでパラメータを決定し、評価する、(iv) 評価が高くなった時だけ親ノードとして採用し、(v) 親ノードとして加える候補がなくなるか、加えても評価が高くならなくなったら他の子ノードへ移る、(vi) 全ての子ノードについて (i) - (v) を繰り返す、という探索アルゴリズムである。一般的には親の探索空間は組み合わせ的に大きくなるので、始めにノードを順序づけして候補となる親ノードの組合せを限定して計算量の増大を避ける工夫が必要になる。またグラフの探索部分(ii)、(v) とモデルの評価部分 (iii) をそれぞれ独立に考えることで様々な学習方法が考えられる。

ベイジアンネットを用いることで大量のデータから非決定的なモデルを統計的学習によって構築するアプローチの有効性が期待できる。しかし因果的構造を統計データだけから求めることは本質的に困難であり、またグラフ構造の探索問題は NP 困難である。そこで実際には変数候補や探索範囲の限定などを巧妙に行うことや適切な潜在変数の導入も必要である。

3.4 確率推論

グラフ構造を持つモデルは他にもあるが、その多くはデータを説明するグラフ構造を可視化するために用いられることが多い。一方、ベイジアンネットは離散確率変数と条件付確率表で構成されていることにより、モデルの中の任意の確率変数の確率分布推定を行う確率推論のアルゴリズムを非常に効率良く実行することができる。これが他のグラフィカルモデルにはない大きな特長であり、知的な学習システムを現実的な計算量で動作させるために重要な性質である。

ベイジアンネットの上の確率的推論は、i) 観測された変数の値 (e) をノードにセットする、ii) 親ノードも観測値も持たないノードに事前確率分布を与えておく、iii) 知りたい対象の変数 (X) の事後確率分布 $P(X|e)$ を計算する、という手順で行なわれる。iii) における事後確率を求めるために、変数間の依存関係にしたがって各変数の確率分布を更新していく確率伝搬法が用いられる。

ベイジアンネットのリンクの向きを考慮しないグラフ構造内の全てのパスがループを持たない時、そのベイジアンネットは singly connected なネットワークと呼ばれる。この場合には、親ノード、子ノードが複数存在するような構造のネットワークでも、条件付独立性の性質を使うことで、各ノードについて上流からの伝搬、下流からの伝搬、上流への伝搬、下流への伝搬の 4 種についての確率伝搬計算を行なうことで計算は完了する (図 2)。

この計算量はネットワークのサイズ (リンク数) に対して線形オーダーで済み、計算効率は非常に高い。リンクの向きを考慮しないでネットワークを見たときに、どこか一つでもパスがループしている部分がある時、このベイジアンネットは multiply connected と呼ばれる。この場合には厳密解となる保証はないが、近似解法として確率伝搬法を適用することができ、LoopyBP 法と呼ばれている。

4 ユーザのモデリング

情報システムとユーザが対話的に処理を進めるということは、その情報システムは部分であって、動作主体としてのシステム全体としては、情報システムとそのユーザ、さらにそれらを取りまく環境や状況まで含めて考えなければならない。したがって制御対象としてのシステム全体をみると人間の行動や反応も計算対象の一部として考えるべきである。そこでユーザがある状況下では何を要求しており、またシステムの出力結果を得てどのように反応するのか、などを評価したい。そこでこうしたユーザの認知的な状態をシステム内で計算可能なモデル、ユーザモデルとして記述し、取り扱うことが必要となる。

機械学習の発展により機械 (プログラム) がデータにより学習する、つまりモデルはデータによって構築され、逐次的に修正されるというアプローチが可能となった。機械学習におけるモデル構築は、統計的検定を情報量規準による自動的なモデル選択として繰り返し実行し、最適なモデルを結果としている。すなわち、統計的に有意なモデルを広範な探索空間の中から機械学習により選んでいるわけで

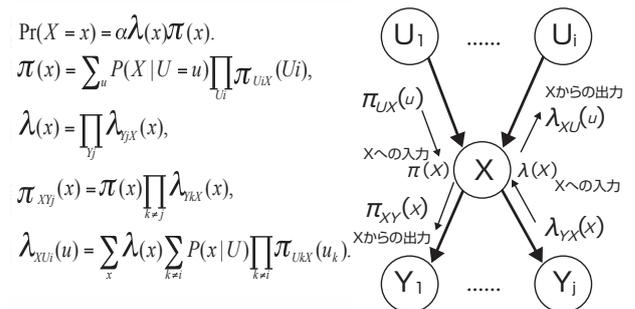


図2 確率伝搬法

$$\begin{aligned} \Pr(X=x) &= \alpha \lambda(x) \pi(x). \\ \pi(x) &= \sum_u P(X=U=u) \prod_{U_i} \pi_{U_i X}(U_i), \\ \lambda(x) &= \prod_{Y_j} \lambda_{Y_j X}(x), \\ \pi_{X Y_j}(x) &= \pi(x) \prod_{k \neq j} \lambda_{Y_k X}(x), \\ \lambda_{X U_i}(u) &= \sum_x \lambda(x) \sum_{k \neq i} P(x|U) \prod_{k \neq i} \pi_{U_k X}(u_k). \end{aligned}$$

ある。

さらに確率モデルを用いることによって、従来の心理学が普遍的な人間のモデルを扱おうとするために捨象していた分散としての要素、例えば個々に存在する個人の特性なども含めてモデル化することも可能になる。これは最近の人間中心設計やユーザビリティに配慮した情報処理において必要とされる個人適応、パーソナライゼーションを実現するためにも重要な観点である。確率モデルとしてベイジアンネットワークを用いた様々なユーザのモデル化が行われている^[6]。とくに人間の認知・評価構造をベイジアンネットワークとしてモデル化するために、臨床心理学やマーケティングで用いられているインタビュー法が適用されている^[7]。これによりシステムやサービスのユーザをモデル化し、確率推論を実行することで、嗜好性や意図を推定することが可能になる。具体的な例を7節で紹介する。

5 日常生活行動のモデリング

不確実性に関するコンピューティングの実際の例として、前節ではユーザのモデル化という観点で見えてきたが、様々な実サービスとして日常生活支援^[8]に目を向けてみると、ユーザとしての日常生活者のモデル化が重要になる。これまでにセンサを家の中に埋め込み、日常生活行動を分析するためにセンサハウスの研究開発も進められてきている^[9]。これまで計測されたデータの中にあるパターンを定常分布としてモデル化することで、外れ値を検出することで異常を判定するような応用はいくつか提案されているが、さらに応用を広げるためには、定常分布のモデル化だけでは不十分であり、ユーザの意図に応じて、効用や価値の最大化などを考える必要がある。つまり、直接観測できないユーザの意図や価値感や評価を、観測可能な行動から予測するための高次の推論が必要になる。そのためには、ある状況と行動に応じて結果がどうなるかという依存関係、因果関係をモデル化することが必要で、そのために行動のみならず原因となる変数も含めた包括的な観測データを収集し、得られた大量の変数間の関係から因果構造を探索することが必要である。

これはセンサ技術とモデリング技術が切り開く新たな行動分析学と見なせる。行動分析学^[10]は1900年代半ばにスキナーにより心理学における行動科学アプローチの一つの研究分野として確立され、その後は教育や臨床の場などで多大な貢献を示し、例えば障害児に対する高い教育効果を上げていることなどが知られている。そこでは人間の行動は先行条件と行動随伴性とよぶ、行動の結果として期待される環境の変化との三項関係より規定されるものと考えられる。そしてある特定の行動に注目した時の先行条件と行動

随伴性の間の因果関係を明らかにし、これを明示的にモデル化すること、その上で行動随伴性や先行条件を変化させることで行動の制御（行動変容）を実現するものである。

行動の因果を発見するために行動を観測したビデオ映像を解釈しラベル付けするような手段が必要となるが、これを人手で行う場合には手間と時間が膨大にかかることから、日常生活環境における自然な行動を効率良く分析することが難しい。また人手による解釈では、行動の制御変数として少数のものしか分析対象にできないため、日常生活行動の分析のためには自動的に大量の観測データを取り扱う技術が必要である。

そこで環境に埋め込んだセンサネットワークにより行動を自動的に観測し、これと統計的学習手法を活用することが考えられる。収集した大量のセンサデータからの統計的学習によりベイジアンネットワークモデルを構築することによって、行動随伴性の候補となる行動の理由・目的や、先行条件となる環境、状況の中での必然性などと結びつけることが可能になる。このようにして、日常生活行動を包括的に観測できるセンサ技術とそこで観測される大量データの中から因果的関係の強い変数を抽出するモデル構築技術の貢献が行動分析学を大きく発展させるという期待がある。これまでにベイジアンネットワークと超音波センサネットワークを用いた行動モデリングによる日常生活行動分析^[11]や、子供の傷害予防への応用^{[12][13]}などの研究が進められている。以下では子供の行動推定の例^[14]を紹介する。

部屋の中の人や物体に超音波発信機をつけることで超音波受信機を埋め込んだセンサルーム内の人や物体の各時刻における位置情報を x , y , z の座標データとして取得できる。また同時に部屋の天井部分に設置した魚眼カメラにより、部屋の中で人が行動する様子を動画として撮影する。この撮影された部屋の中の人や物体の行動に対する動画像を1秒ごとに人手でラベル付けを行う。例えば対象となる人が歩いている、座っている、立っているといった行動ラベルが部分的に付与されたデータベースを収集した。このデータを利用して、日常生活行動のモデル化と、それを用いた画像からの行動推定実験を行う。

行動をセンサや画像によってシステムが観測するものとして問題を考えると、これは一種のパターン識別の問題として定式化することもできる。実世界の日常において生成されるデータは人間の生活行動や生活環境を背景にしているから、データが発生する状態空間や頻度の偏りなどの性質は当然人間にとって解釈される意味が強く反映したのになっている。このようなデータが生成される空間に特有な制約や発生頻度の偏りを確率分布として扱うことができる。物理法則のようにその世界で成り立っている因果

構造を全て列挙することは記述量の点で困難であるが、その中の重要なものを確率として表現することは近似的に有効な手段である。そこで、実空間におけるこうした確率的な構造をベイジアンネットによりモデル化し、これによるベイズ推定に利用することが考えられる^[15]。

ベイズ推定では、複数のクラスラベルを C_i とし、信号パターン x に対する尤度 $P(x|C_i)$ と事前分布 $P(C_i)$ の両者を組み合わせた事後確率、

$$P(C_i|x) = P(x|C_i) P(C_i) / \sum_j P(x|C_j) P(C_j) \quad (1)$$

を最大化するクラスラベル C_i を決定する。これはベイズ誤り確率を最小にする最適な識別を可能にすることが知られている。データへの当てはまり具合は尤度で表し、事前知識は事前確率分布によって表される。そしてこの両者の積である事後確率を最大にするものを推定結果とすることで、データからの学習と事前知識が自然に統合されている。

クラスラベルの発生頻度が観測時間や観測場所に依存しているような場合、事前分布 $P(C_i)$ は状況 S に依存したものになっている。そこでこれを条件付確率 $P(C_i|S)$ として考え、これを式 (1) の $P(C_i)$ と置き換えて式 (2) の事後確率を最大とするクラスを識別結果とする。

$$P(C_i|x, S) = P(x|C_i) P(C_i|S) / \sum_j P(x|C_j) P(C_j|S) \quad (2)$$

式 (2) 右辺分子の第2項 $P(C_i|S)$ は、ラベル空間における状況 S の下での行動ラベル C_i の事前確率である。ここで、ラベル空間における確率的因果構造を考えることにする。場所や行動の系列の間の因果関係をベイジアンネットとして構築すると、例えば「状況 S で時刻 t に C_i^t という行動が起きたら、次の時刻 $t+1$ に C_i^{t+1} という行動が起きやすい」といった因果構造の形で事前知識を導入し、人が領域 S に入った時の行動の確率を $P(C_i^{t+1} | C_i^t, S)$ として表し、ベイジアンネットでモデル化することができる。実際にリビングルームを模した実験環境で子供が遊んでいる際の行動を観測したデータセットに対する統計的学習によってモデルを構築したところ、過去の行動の他に室内のソファや壁などの相対距離、移動速度などの依存関係が確認された。さらにある子供の行動データでベイジアンネットとナイーブベイズを学習し、これらを用いた式 (2) によるベイズ推定による別の子供の行動を推定したところ、ナイーブベイズのみの最尤推定では約50%未満の識別率であったものが、ベイジアンネットを用いたベイズ推定によって約60%~80%まで向上できることを示した^[14]。この行動推定アルゴリズムにより、日常生活行

動の観測画像などから行動ラベル付きデータを効率的に生成することが可能となった。

6 Research as a Service (RaaS)

日常における大規模データが観測できるようになったことで、統計的学習により複雑な問題に取り組めるようになった。しかし、統計的学習特有の問題として、モデルが高度で複雑なものになるにつれ、学習のために必要なデータ量が増えることがある。表層的に観測可能なセンサデータなどは比較的容易に取得できるが、人間行動の内部的状態は心理的なものであるため、被験者を用いたアンケート調査も必須になりコストが大きい。またデータを取得する上で、プライバシーの問題や、単に研究目的のためには協力が得られにくいという現実的な問題もある。またたとえ外部的な要因で観測容易な事象だとしても、実際に使う場面において、状況依存性の高い説明変数を網羅的に収集するためには、データを観測する環境が日常的な利用環境とできるだけ合致するように統制しておく必要がある。

そこで、筆者はこうした問題に対して実サービスと調査・研究を一体化すべきであるとする「サービスとしての調査・研究 (Research as a service)」という概念を提唱している^[22]。これによって、行動分析学における人間の行動随伴性としての手段目的連鎖を明らかにし、状況依存性も含めて包括的にモデル化することが容易になる。そのためには、調査・モデル化の段階とそのモデルを用いた応用を切り離すことなく、情報サービスを社会の中で実行しながら、そこで得られる観測や評価アンケート、利用者のフィードバック（心理的調査）の結果を網羅的に収集する。これは古くはサイバネティクス、また信頼性工学ではデミングサイクルとして知られるPDCA (Plan, Do, Check, Action) サイクルを実問題を通じて回し続けることで、モデルを常に修正していくというものである。不確実性に対する本質的な解決のためには対象を実データによりモデル化し、そのモデルを用いて制御しながらさらにデータを収集する、というサイクルを永続的に続けるアプローチが必要になる。これは単に実データの収集だけにとどまらず、研究という視点で実フィールドに没入することで新しい価値・評価を生み出すという新しい研究のあり方^[16]に通じるものである。

そのためにも実サービスとして耐えられる製品として社会の中にインフラとして組み込める応用システムの実現が重要である。

7 ベイジアンネットの応用システム

確率推論アルゴリズムやモデル構築のアルゴリズムをコンピュータプログラムとして実装することでベイジアンネット

の応用システムが開発できる。筆者は2001年までのリアルワールドコンピューティングプロジェクト、IPA未踏ソフトウェアプロジェクトなどを通じて、2002年にベイジアンネットワークを大量データから探索し、その上で確率推論を実行することのできるソフトウェア BayoNet を開発した^{[17][18]}。このソフトウェアは民間企業へのライセンス供与、製品化もされたが、これを特定の問題解決に適用するためには高度な専門知識が必要なこと、利用手順が自明ではないことから、ソフトウェアを使いこなせるユーザがなかなか育たなかった。通常特定の目的のために開発されたソフトウェアであれば、ありえないことであるが、純粋に基礎的な数理モデル研究として生まれたベイジアンネットワークを実装したソフトウェアは、非常に幅広い目的のために適用することが可能であり、実用化できた時点で、あらためて、より価値の高い目的とのマッチングを検討するということが起こりえる。こうした状況の中で、ベンチャー開発戦略センターのタスクフォースが2003年に開始され、研究者自らがこの技術を使ったビジネスモデルの探索をはじめるといった機会を得た。この時点でアルゴリズムの洗練や高速化、推論精度の向上など要素技術としての研究課題も多く残っていたが、アウトカムが明らかでない状態で技術の先鋭化を進めることに抵抗を感じた。そこで、その時点での性能で十分対応可能な問題解決としてのアウトカムの探索を優先することにした。

ベイジアンネットワークを用いるメリットは、確率推論を行うことで、任意の変数に関する確率分布を求め、さまざまな条件における定量的な評価ができる点である。従来の多くの多変量解析的手法では、定量的な関係は、変数間の線形（線形独立）の共変関係に基づいてモデル化が行われることが多い。ベイジアンネットワークモデルでは定量的関係を条件付き確率表によって表わす。条件付き確率表では確率分布族を仮定することがなく、非線形、非正規な関係や交互作用も表現できる自由度の高いモデルになっている。また説明変数と目的変数を明示的に区別しないので、潜在変数の導入も容易である。つまり観測が得られない変数であっても、それを潜在変数として扱うことができる。これによりユーザや顧客の統計データを分析する際に、カテゴリとなる潜在変数を導入して、同じ行動をとるような集団の属性を抽出して顧客層を分類することができ、顧客セグメンテーションなどにも利用できる。

こうした性質はユーザや顧客の行動（Webブラウジング履歴など）や属性、状況に応じて、嗜好性にあった情報や商品を推奨するような応用にとっては非常に重要である。顧客やユーザにとって望ましいと思われる情報や商品を携帯電話やカーナビなどで表示する場合に、協調フィルタリングでは

状況依存性が反映できない。こうした動的に変化する環境での情報推薦技術は実空間で多様な状況変化が想定されるユビキタスコンピューティングにおいても重要である。

7.1 カーナビによるユーザ・状況適応型情報推奨

車を運転している途中で、どこかに立ち寄りたくなることがある。例えばある目的でドライブ中に、食事のためレストランに立ち寄ることを考える。これまでのカーナビではカテゴリを指定し、該当する全レストランが距離の近い順にリストアップされる。ユーザはリストの中から適切なレストランを見つけなければならないが、詳細な情報はタッチスイッチやリモコンを操作しないと確認できないためドライバーにとって望ましいレストランを見つけることは容易ではない。

そこでカーナビシステムがドライバーの嗜好性を表すベイジアンネットワークを利用し、これを使った確率推論によって、システムが運転中のドライバーに代わって自動的に適切な立ち寄り先を選定することが実現できれば非常に実用的な機能となる。人の嗜好は個性が大きく、また運転中の状況にも強く依存している。運転中には刻々と変化する状況の中で、その時々での最適な選択が必要である。

こうした状況依存性や個人差を表すために、変数間の複雑な依存関係と不確実性をモデル化できるベイジアンネットワークが有効に適用できる。そこで我々はユーザに適応してコンテンツを推薦するカーナビシステムの試作を行い評価した^[6]。このシステムは、ユーザの嗜好モデルをベイジアンネットワークとして車載情報システム内に持ち、レストランや音楽などコンテンツプロバイダより提供されるコンテンツがその時の状況、ユーザにどれだけ適切であるかを示すスコアを状況とユーザ属性を与えた時の条件付き確率として計算し、このスコアの高い順に上位のコンテンツに限って提示するものである。実際に品川周辺の182のレストランに対し、6つの状況（シナリオ）の場合に行きたい店を選択させる質問を300名の被検者に対してアンケート実施し、収集したデータからモデルを構築した。品川周辺の182のレストランに対し、6つの状況（シナリオ）の場合に行きたい店を選択させた。選択手順は、最初に好きなカテゴリを質問し、そのカテゴリに該当する店を表示し、気に入らなければ次のジャンルを選ぶ、という現在の既存のカーナビと同様の選択方法をとった。選択レストランは複数回答であり、結果的に計3778レコードを得た。状況の属性数は12、レストラン属性は17、ユーザの属性数は12である。その結果として、図3のモデルを構築した。ユーザを表す属性ノードは4個、状況を表すノードは3個、レストランを表す属性ノードは6個の計13個の確率変数からなるモデルとなり、ある状況における特定のユーザが好むレストラン属性の確率分布が確率推論により計算できる。

図3のモデルでは運転歴が浅いドライバーではファミリーレストランやファーストフードチェーンのようなフランチャイズレストランが選ばれる確率が高く、逆に運転歴の長いドライバーはこうしたレストランを選ぶ確率は低い。これはフランチャイズレストランでは駐車場が整備されていることが多く、若者や初心者ドライバーに好まれる傾向を表している。さらに「運転歴」に加えて「次の予定（がある）」との交互作用があり、運転歴が長い場合でも、次の予定があり急いでいる状況ではフランチャイズレストランを利用する確率が上がるという傾向が反映されている。他にも予算レベルと車種の関係など直感的にも妥当な傾向が獲得されている。

また構築した図3のモデルを用いて、レストラン推薦システムを試作した(図4)。ユーザ変数、状況変数より、好みのコンテンツ属性を確率分布として予測する。これとコンテンツの属性の値を対数尤度により評価し、次のスコアを求める。

$$A_i = \sum_{j=1}^n \log p(c_j = C_{ij}) \quad (3)$$

このスコアの値が高いコンテンツ順に、推薦することで状況とユーザに適応したカーナビが実現できる。この試作システムと従来のカーナビと比較したところ推薦結果のユーザの好みと状況にあったレストランが上位に提示される点で

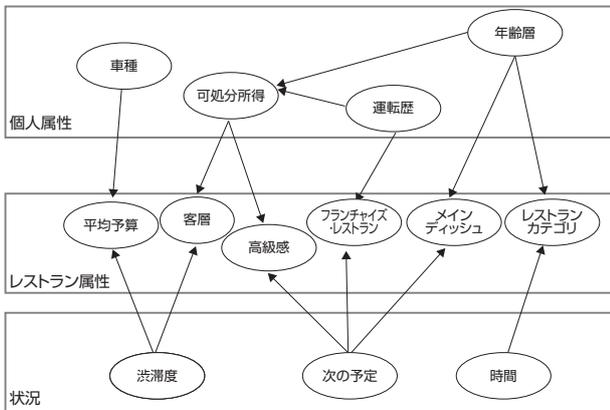


図3 レストラン嗜好ベイジアンネットワークモデル

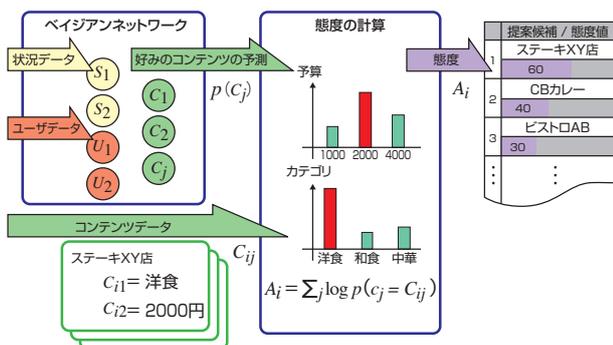


図4 レストラン推薦システムの概要^[6]

有効性が確認された^[6]。

7.2 携帯電話によるユーザ・状況適応型情報推奨

次世代の携帯電話サービスにおいても、多様なユーザや状況に適応する情報推奨技術は重要である。ここでは携帯電話サービスにおける映画推奨サービスにベイジアンネットワークを適用した事例^{[19][20]}を紹介する。まず、約1600名の被験者に対して映画コンテンツを提示するアンケート調査によりユーザ属性、コンテンツ属性、コンテンツ評価履歴を取得した。年齢・性別・職業などのデモグラフィック属性の他にライフスタイルなどに関する質問項目、さらに映画視聴に関する態度属性として鑑賞頻度、映画選択時の重視項目、映画を見る主要目的(感動したい等7項目)、コンテンツに対する評価{良い・悪い}、その時の気分(感動した等7項目)などを収集した。さらに約1000人について別途、各映画コンテンツについて、どんな気持ちや状況で、どこで(映画館、DVDで家)、誰と何人で、どんな時に、鑑賞するか、を自由記述文により収集した。このデータを筆者が開発したベイジアンネットワーク構築ソフトウェア BayoNet^{[17][18]}に入力し、自動的にベイジアンネットワークモデルを構築した。

こうして構築したベイジアンネットワークにより状況とユーザの嗜好性に応じて映画を推薦する携帯情報システムのプロトタイプを開発した。ユーザが携帯電話からサービスへの要求を状況に関する情報とともに送ると、システムはデータベースから登録済みのユーザ属性情報と状況情報を使って確率推論を実行する。その結果選択される確率が高いと判断されたコンテンツを上位から推薦する(図5)。この映画推薦システムはインターネットサービスにも発展し、auoneラボ(<http://labs.auone.jp>)において2007年から一般に公開されるべ約7000件の推薦を実行した。その推薦履歴からさらにモデルの再学習を行うことで推薦精度を向上させる実験も行っている。またこのように構築された映画選択の計算モデルを用いて、今度は映画公開が終わったコンテンツのDVD販売戦略の最適化を映画配給会社と共同

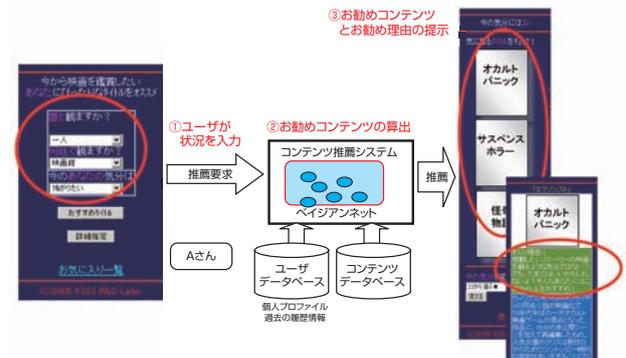


図5 ユーザと状況に応じて映画を推奨する携帯情報サービスシステム^{[19][20]}

で推進している^[21]。

こうした情報サービスが普及し、多数のユーザがシステムを利用することによって、選択したコンテンツの履歴がさらに大量の統計データとして集積する。そのデータによりベイジアンネットモデルの改善が進み、モデルの適合度や推論精度も向上するといった好循環と別のサービスへの水平展開も実現できる。これは実サービスを通じて市場から得られるデータが計算モデルにより再利用可能な知識となり、これがさらに次のサービスに反映される知識循環、すなわち先に述べた、Research as a Serviceの好例と言える（図6）。このような実サービスを通じた研究活動はサービス工学研究センターにおいても実践され、大規模データからの計算モデル構築によって、最適設計ループをフィールドの中に実装し、サービス産業の生産性を向上させるための事業として推進されている^[22]。

8 おわりに

本研究においてソフトウェアの開発までは第一種基礎研究的であったが、ソフトウェアの開発が一段落した後は明らかにアウトカムを志向した第二種基礎研究を意識したものになった。その過程で直感的に進めてきたアプリケーションの選択基準を今あらためて考えてみるといくつかの条件があったように思う。

1. 既存手法では解決できていない問題であること
2. 利用者が必要としている顕在化している問題であること
3. その問題解決により利益を得、それに見合うコストとリスクを負担するステークホルダーが存在すること

このような条件の中で、ベイジアンネットを人間行動のモデル化に用いて、顧客やユーザの行動を予測すること、それによりサービスを最適化することで価値の向上と効率性の向上を果たすことが適切なアウトカムであると考えられ

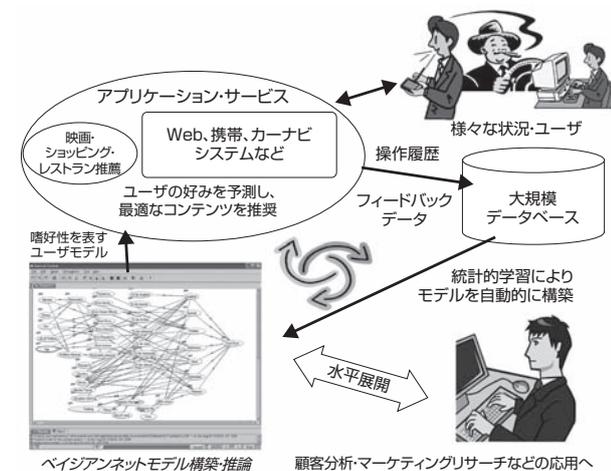


図6 ベイジアンネットによる知識循環サービス

た。このアウトカムを実現できるクライアント企業は多様な顧客との接点（チャネル）を持つ業種の中に存在した。先述したアウトカムを選択したことで、適用フィールドはインターネット、携帯電話、カーナビ、コールセンターなどの顧客からの大量データが集積できるチャネルであることになる。しかし、これらの選択肢の中で、現時点の技術を移転することで十分対応できるものと、アウトカム実現のためにさらなる技術開発が必要なものと2種類があった。そこで前者にはベンチャーが対応し、後者は産総研と企業との共同研究を進めるという選択をした。

工学的な実現と社会的な実現は異なる。工学的にはすでに確立した技術であっても、社会的な価値を生み出すためにはさらに多くのステークホルダーの関与を必要とする。必ずしも工学的バックグラウンドを持つわけではないこうしたステークホルダーにアウトカムの価値を伝え、コストとリスクを担ってもらうためには、アウトカムの効果を信頼性の高い形で示すことが必要であった。そのために事業部レベルでの共同研究や産総研技術移転ベンチャーを通じた社会実装が必要となり、効果は実フィールドで実証される必然性を持つ。つまりアウトカムの評価と社会実装は同時に行われることになったのである。

社会的実装が可能な条件を明らかにするために、ベンチャータスクフォースの中で市場調査を行った。そこでは第一種基礎研究では考える必要のなかったコストベネフィット分析が重要であった。社会実装を円滑に進めるためにはベネフィットの向上とともにコストとリスクの低減が求められる。この段階でアウトカム自体の修正、あるいは新たなアウトカムが必要となることから、基礎研究の駆動力となる可能性がある。これこそが本格研究を推進する上で新たに生まれる第一種基礎研究へのフィードバックであり、デジタルヒューマン研究センターのポリシーステートメントとして

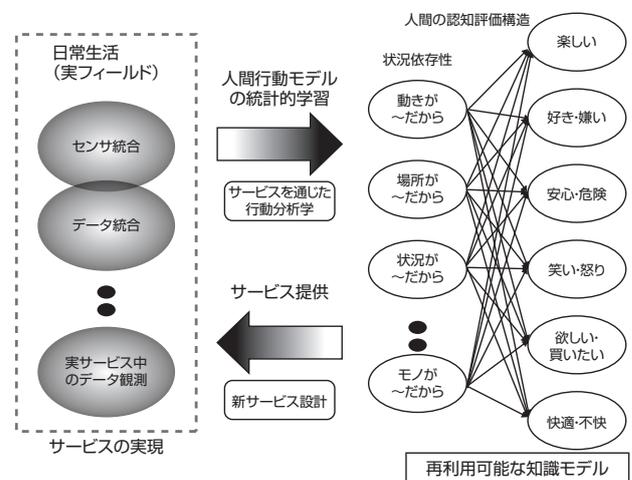


図7 再利用可能な人間の認知・評価構造モデル

掲げられている「アプリケーションに駆動された基礎研究」ということになる。そして実サービスを通じた活動の結果、実ユーザをとりまく状況や文脈までも含んだ大規模データを獲得することが可能になった。またこのデータから構築したベイジアンネットは実在する消費者、生活者の認知・評価構造や行動を予測し、データの記述モデルにとどまらない因果的モデルであることにより、これは他のサービスにも水平展開可能な再利用性の高い知識モデル（図7）として集積し活用できるものになる^[23]。

社会実装のために要請される課題に対してどのように基礎研究の立場で迅速な回答が生み出せるかが、これからの社会から要請される問題解決型の基礎研究を確立する際の重要課題であると考えられる。社会技術としてのスピードが求められるからこそ、あらかじめ多くの芽を養っておく必要がある。その選択は基礎研究に通暁した者にしか行えないが故に、基礎的な研究を行うためには将来を見据えた社会技術を志向する見識が強くと求められるであろう。

参考文献

- [1] S. Russell and P. Norvig(古川康一監訳): エージェントアプローチ人工知能, 共立出版 (2003).
- [2] J. Pearl: *Probabilistic inference and expert systems*, Morgan Kaufmann, CA, (1988).
- [3] P. Baldi, P. Frasconi and P. Smyth: *Modeling the internet and the web – probabilistic methods and algorithms*, [確率モデルによるWebデータ解析法, 森北出版 (2007)].
- [4] D. Marr: *Vision: A computational investigation into the human representation and processing of visual information*, W.H. Freeman and Company (1982).
- [5] G. Cooper and E. Herskovits: A Bayesian method for the induction of probabilistic networks from data. *Machine Learning*, 9(4), 309-347 (1992).
- [6] 本村陽一, 岩崎弘利: *ベイジアンネット技術*, 東京電機大学出版局 (2006).
- [7] Y. Motomura and T. Kanade: Probabilistic human modeling based on personal construct theory. *Journal of Robotics and Mechatronics*, 17 (6), 689-696 (2005).
- [8] 本村陽一, 西田佳史: 日常環境における支援技術のための行動理解. *人工知能学会誌*, 20 (5), 587-594 (2005).
- [9] 美濃導彦: ユビキタスホームにおける生活支援. *人工知能学会誌*, 20 (5), 579-586 (2005).
- [10] B. F. Skinner: *Behavior of Organisms*, Appleton-Century-Crofts (1938).
- [11] 白石康星, 保川悠一郎, 西田佳史, 本村陽一, 溝口博: 日常生活行動情報収集管理システム. *人工知能学会全国大会*, 3G3-03 (2008).
- [12] Y. Nishida, Y. Motomura, G. Kawakami, N. Matsumoto and H. Mizoguchi: Spatio-tempora semantic map for acquiring and retargeting knowledge on everyday life behavior. *Lecture Notes in Artificial Intelligence, JSAI 2007 Conference and Workshops, Revised Selected papers*, 63-75, Springer-Verlag (2008).
- [13] 川上悟郎, 西田佳史, 本村陽一, 溝口博: ロケーションEMGセンサを用いた行動の時空間展開記述に基づく日常生活行動モデリング手法. *知能情報ファジィ学会誌*, 20 (2), 190-200 (2008).
- [14] 石川詔三, 河田論志, 本村陽一, 西田佳史, 原一之: 日常生活行動における確率的因果構造モデルの構築と行動推定. *人工知能学会全国大会*, 3G3-04 (2008).
- [15] 本村陽一, 西田佳史: ベイズ推定における事前分布のグラフ構造モデリングと実生活行動理解. *情報処理学会論文誌コンピュータビジョンとイメージメディアCVIM*, 18, 43-56 (2007).
- [16] 科学技術振興事業団, 科学技術未来戦略ワークショップ (電子情報通信系俯瞰WS) 報告書 (2007).
- [17] Y. Motomura: BAYONET: Bayesian network on neural network. *Foundation of Real-World Intelligence*, 28-37, CSLI california, (2001).
- [18] 本村陽一: ベイジアンネットソフトウェアBayoNet. *計測と制御*, 42 (8), 693-694 (2003).
- [19] C. Ono, M. Kurokawa, Y. Motomura and H. Asoh: A context-aware movie preference model using a Bayesian network for recommendation and promotion. *Proc. of User Modeling 2007, LNCS*, 4511, 257-266, Springer, (2007).
- [20] 小野智弘, 本村陽一, 麻生英樹: 移動端末におけるユーザの状況を考慮した嗜好抽出技術. *情報処理*, 48 (9), 989-994 (2007).
- [21] 落合, 下角, 小野, 麻生, 本村: ベイジアンネットワークを用いた映画コンテンツのマーケティング支援. *人工知能学会全国大会* (2009). (投稿予定)
- [22] 本村陽一他: サービスイノベーションのための大規模データの観測・モデリング・サービス設計・適用のスパイラル. *人工知能学会誌*, 23 (6), 736-742 (2008).
- [23] 本村陽一, 西田佳史: 人間行動理解研究はなぜ難しいのか? ~研究を加速するための知識共有システム~, *人工知能学会全国大会*, (2007).

執筆者略歴

本村 陽一

1993年電気通信大学大学院博士前期課程修了。同年工業技術院電子技術総合研究所入所、2000年情報科学部主任研究官、2001年産業技術総合研究所情報処理研究部門主任研究員、2003年～同研究所デジタルヒューマン研究センター主任研究員、2008年～同研究所サービス工学研究センター大規模データモデリング研究チーム長兼任。博士(工学)。モデライズ(株)取締役兼CTO。人工知能学会全国大会優秀賞、研究奨励賞、ドコモモバイルサイエンス賞など受賞。電子情報通信学会、日本神経回路学会、日本認知科学会、日本行動計量学会、マーケティングサイエンス学会、IEEE各会員。

査読者との議論

議論1 構成学としての独創性を明瞭に記述することについて

質問・コメント(中島 秀之)

論文(第1稿)の第2章前半に日常生活行動をモデル化することの困難性と統計学習によるアプローチの重要性が書かれていますが、専門外の人には分かりにくいので、もう少し具体的な話題に展開していただく方が分野外の人にもわかりやすいと思います。また第2章の後半に、「サービスとしての調査・研究(Research as a service)」が書かれていますが、これがこの論文の本質でしょう。この部分を膨らませてください。

質問・コメント(持丸 正明)

本研究はブレイクスルー型の本格研究と見ることはできないでしょうか(図a)。ベイジアンネットワーク技術が中核となる重要技術要素で、それにセンシング技術やインタビュー技術などが周辺技術として統合され、実社会の問題解決につながったという“構成学”であると考えられます。ここで“構成学”として特に興味深い点は、単に周辺技術を統合するだけではこの研究は完遂しないという点です。

そのために、「実社会で有効なサービスを実現しながら、それを通じて調査・研究を遂行する」という新しい“構成学”の枠組みを提案している点に、“構成学”としての独創性があると思います。社会循環型の本格研究と言えるでしょうか（図 b）。過去に Synthesiology 誌に掲載された論文にも、この社会循環型の本格研究の類型に当てはまりそうなものもありますが、やはり、本論文がもっとも明瞭にそれを体現していると思います。“構成学”の学術誌でもあるので、やはり、この独創性の部分をより明瞭に記載してください。

回答（本村 陽一）

ご指摘の点を踏まえ、アブストラクトにおいて各要素技術とその構成としての本研究のポイントを明記し、題目、位置づけを Research as a Service を主体として修正しました。

議論2 論文の構成（章立て）について

質問・コメント（持丸 正明）

人工知能学会誌の論文ではなく、構成学の論文であることを考えると、導入部分は統合された技術がもたらす「夢」であるべきと思います。「人間がなんの目的を持って行動するかを理解するシステムによって人間生活を支援するサービスを実現する」という夢とその具体的な事例イメージを、読者に最初に提示するのがよいと思います。その夢を実現するためのブレイクスルーポイントが「日常生活を計算論的に、記述・理解・実現する」ということになるでしょう。それをブレイクスルーするための難しさとして、(1) 人間の行動という曖昧で不確実な要素を含んでいる点があります。それを乗り越えるための方策として非決定論的枠組みが有効であり、具体的技術としてベイジアンネットワークを適用したと言うことになるでしょう。また、ベイジアンネットワーク技術によって派生する難しさとして、(2) 大量データの観測というものがあります。これをユビキタスセンシングや実社会でのサービス（RaaS）によって解決していくという筋道だと理解しています。そのような章立てに直した方が読みやすいと思います。

質問・コメント（中島 秀之）

「1. はじめに」の最後の部分にそれ以降のあらすじを記述していたのが良いかと思います。第2章（RaaS）が唐突に書かれていて、その後うまくつながっていません。

質問・コメント（持丸 正明）

副査読者の中島氏からも指摘があるとおりの、第2章（RaaS）の配置がスムーズな論旨展開の妨げになっているようです。主査として3つの解決策を提案します。第一は、副査読者の中島氏が提案しておられるように、章立ては変えず、第1章（はじめに）の末尾に本論文の論旨展開を記載するというものです。第二は、第2章（RaaS）と第3章（非決定論的アプローチ）の順番を入れ替えるというものです。第三は、第2章（RaaS）を思い切って、第8章（おわりに）の前に持ってくるというものです。第一の「論旨展開」を第1章の末尾に書くというのは、章立ての順番を入れ替えることとは独立の方策ですので、いずれにせよ、実践いただくのが読者のためによいかと思います。

主査としては第三の解決策を推奨します。本論文では「人間行動モデルに非決定論的な方法論を選択」「非決定論的な方法論としてのベ

イジアンネットワーク」に加えて「RaaS」が書かれています。具体的な事例を提示する前に、これらの理論（あるいは考え方）を一斉に読者に示しても、受け止めきれないのではないかと懸念します。そこで、前半では「非決定論的なアプローチ」を中心に論旨を展開し、具体的な事例を通じて、それを実現するのに意味のある大量データが必要であることに触れ、それを取得して研究を推進する方法として「RaaS」を提案して、さらにそれを展開するためにステークホルダーとの連携形成が不可欠である、という流れにしたいかどうか、ということです。

回答（本村 陽一）

ご指摘どうもありがとうございます。いただきましたコメントに基づきまして、章立てを第三の解決策に従って修正いたしました。

議論3 具体事例に関する記述の追加について

質問・コメント（中島 秀之）

「こうした情報サービスが普及し、多数のユーザがシステムを利用することによって、選択したコンテンツの履歴がさらに大量の統計データとして集積する。そのデータによりベイジアンネットワークモデルの改善が進み、モデルの適合度や推論精度も向上するといった好循環が実現できる。」という部分がこの論文のもっとも肝要なポイントであると思います。もう少し具体的にどのようなスパイラルになったのかを記述して下さい。1000名以上を対象に実証実験を行ったことは評価しますが、ちょっときつい言い方かもしれませんが、これだけでは実用に供したとは言えません。社会科学ではこれくらいの数のアンケートは普通ですし、システムの試作と実証実験までは従来より情報系でも行われてきたことです。そこで止まらず、実際のサービス提供をするというフェーズが大事なのだと思います。

回答（本村 陽一）

ご指摘の点を補強して、事例に関する情報を追記いたしました。

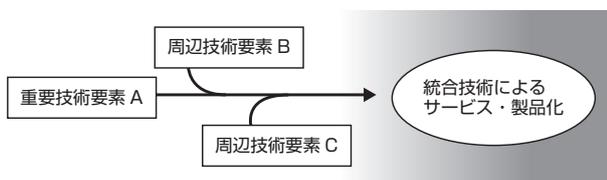
議論4 再利用可能なモデルの説明について

質問・コメント（持丸 正明）

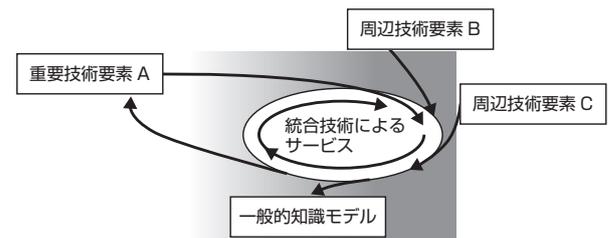
「再利用可能なモデル」の具体的なイメージを示している図（最終稿の図7）は、査読者がコメント1で提示した当該論文の“構成学”の枠組みの図（図b）における「一般的知識モデル」に相当するものかと思っています。サービスを実施しながら調査・研究を進めることで、他のアプリケーション（サービス）に水平展開できるモデルができるというのが、この論文の提案・実証する“構成学”としての面白味であります。一方で、実社会でのサービス循環を通じて研究を進めると言うことに加えて、「再利用可能なモデル」が生成されるというのは、読者にとってはやや情報量が多く、即座に理解しにくいのではないかと懸念します。そこで、論文前半ではこの点にさらっと触れるのみにして、事例を示したあと、第8章（おわりに）のところで図を提示して、改めて「再利用可能なモデル」が生成されることを詳細に述べる方が効果的ではないかと考えます。

回答（本村 陽一）

ご指摘の通りに図の移動と第2章、第8章を修正いたしました。



図a ブレイクスルー型



図b 社会循環型

食品・環境中の有害成分分析のための有機標準物質の拡充

— 定量 NMR 法による効率的な計量トレーサビリティの実現 —

井原 俊英^{*1}、齋藤 剛¹、杉本 直樹²

食品や環境中の有害成分の正確な分析には標準物質が不可欠であるが、特に有機化合物に関しては、多様かつ急増するニーズに標準物質の供給が追いつかない状況にある。そこで、分析技術を高度化することによって、1つの基準となる物質から多様な有機化合物の定量を可能とする方法を開発した。具体的には、水素原子を対象とする核磁気共鳴法に着目し、異なる化学シフトの水素原子の信号量を精密に比較できるように改良することで、水素原子の基準から多様な有機標準物質に対して実用的な不確かさでの校正を可能とした。この成果により、国家標準物質の種類を最小限にできる効率的な計量トレーサビリティの実現の見通しを得た。

キーワード: 化学計量、トレーサビリティ、標準物質、核磁気共鳴法、一次標準測定法

Expansion of organic reference materials for the analysis of hazardous substances in food and the environment

– Realization of an efficient metrological traceability using the quantitative NMR method –

Toshihide Ihara^{*1}, Takeshi Saito¹ and Naoki Sugimoto²

Reference materials are indispensable for accurate analysis of hazardous substances in food and the environment. For organic substances, however, the dissemination of reference materials is hopelessly unable to catch up with today's rapidly proliferating analytical needs. To solve this problem, analytical techniques were improved to develop a method in which a single primary reference material could provide accurate quantitative measurements for a wide variety of organic compounds. In pursuit of this goal, we turned our attention to the ¹H NMR method. We improved upon the method to allow precise comparisons of signal quantities from protons with different chemical shifts, enabling calibration at an acceptable level of uncertainty for a variety of organic reference materials using a primary reference material for protons. This result opens the prospect of highly efficient metrological traceability, reducing the required number of national reference materials to a minimal level.

Keywords: Chemical metrology, metrological traceability, reference material, nuclear magnetic resonance spectroscopy, primary method of measurement

1 はじめに

今日、私たちは様々な化学物質に囲まれて生活を営んでいる。それら化学物質をより安全に使用し、人の健康を損ねたり環境に悪影響を与えたりしないよう、種々の法律が定められている。特に近年は国民の安全・安心への意識の高まりから、規制対象となる化学物質の種類を増加させたり規制値をより厳しくするなど、規制強化が加速している。例えば食品衛生法では、2006年5月に食品残留農薬に関してポジティブリスト制度^{用語1}が施行され、これまでの約250種類から国内外で流通する約800種類の農薬等が規制の対象となる大幅な規制強化が図られた。それとあわせて、規制物質を測定するために必要な新たな分析技術が公定分析法^{用語2}として次々と制定され、食品分析や環境

分析においてガスクロマトグラフ質量分析計 (GC/MS) や液体クロマトグラフ質量分析計 (LC/MS) などの多成分同時測定が可能な高度な分析機器を用いるケースが急速に増えている。これを受けて、化学物質の検査・試験機関においても GC/MS や LC/MS の導入が加速している。

これらの分析機器は多成分の化学物質を同時測定できるという機能を有する一方、分析結果の信頼性を確保するためには、測定試料の分析対象成分毎に機器の感度を校正する必要がある。そのためには、「ものさし」の役割を果たす標準物質を分析対象成分の種類だけ用意することになる。検査・試験結果の正しさが特に問われるこの種の分析においては、「ものさし」の信頼性はきわめて重要であり、認証標準物質^{用語3} またはそれに準じた標準物質の使

1 産業技術総合研究所 計測標準研究部門 〒305-8563 つくば市梅園 1-1-1 中央第3、2 国立医薬品食品衛生研究所 環境衛生化学部 〒158-8501 世田谷区上用賀 1-18-1

1. National Metrology Institute of Japan, AIST Tsukuba Central 3, Umezono 1-1-1, Tsukuba 305-8563, Japan *E-mail: t.ihara@aist.go.jp, 2. Division of Environmental Chemistry, National Institute of Health Sciences Kamiyoga 1-18-1, Setagaya-ku 158-8501, Japan

Received original manuscript October 6, 2008, Revisions received December 26, 2008, Accepted December 26, 2008

用が強く推奨されるため、規制対象物質の増加にあわせてそれら標準物質の整備を急ぐべき状況にある。

2 現行の標準物質の問題

標準物質の計量学的に妥当な手順による値付けは、国際単位系の定義（この場合、物質質量）へのトレーサビリティ^{用語4}を確保した測定法によって実現される。この作業は、通常、各国の国家計量標準機関^{用語5}によって行われており、生産される標準物質は国家標準物質と呼ばれる。国家標準物質は一般に、最高の正確さを持ったものであるため、労力、時間、経費をかけて周到に整備される。分析を実際に行う検査・試験機関に国家標準物質そのものを直接供給することは、通常、量的にも経済的にも合理的ではないので、国家標準物質で二次標準物質を校正し、さらに二次標準物質で実用標準物質を校正するといったピラミッド型構造を利用して上位標準から下位標準を多数生産することで、ねずみ算的に標準物質の数（量）を増やし、正しい「ものさし」が多くの実用者に行き渡るトレーサビリティ体系が構築されている。このような概念は、例えば、天秤の校正に用いる分銅のトレーサビリティ体系と基本的には同じであり、標準物質に特有のものではないが、現在の標準物質のトレーサビリティ体系には分銅とは異なる次のような特徴がある。

図1に我が国で行われている河川水・水道水の水質試験等に用いられる揮発性有機化合物分析用の標準物質のトレーサビリティ体系を示した。国家標準物質は揮発性有機化合物23種類を成分に含む溶液の形で製造され、国際単位系へのトレーサビリティは凝固点降下法により値付けされた成分毎の純物質を介して確保される。二次標準物質および実用標準物質も国家標準物質と同様に揮発性有機化合物23種類を成分に含む溶液であるが、上位標準から下位標準への校正は成分毎に行われるため、トレーサビリティ体系は一対一対応になっており、

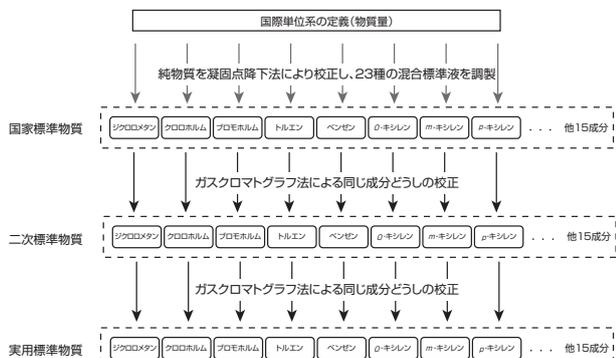


図1 揮発性有機化合物分析用の標準物質のトレーサビリティ体系

標準物質の種類に関してはピラミッド型構造をしていない。すなわち、ある成分の国家標準物質で同じ成分の二次標準物質を校正し、さらにこの二次標準物質で同じ成分の実用標準物質を校正する。同じ化学物質同士の一対一の校正であるため、ガスクロマトグラフ法のような市販機器による分析技術を用いて実用標準物質までの校正を高い信頼性で行うことができ、このメリットにより、現在、世界中でこのようなトレーサビリティ体系が運用されている。

一方、このトレーサビリティ体系では、分析を行う化学物質それぞれに対応して多種類の国家標準物質を揃えなくてはならないため、特に多大な時間と労力、経費を要する国家標準物質の開発がトレーサビリティ体系の整備のボトルネックになっている。したがって、先に述べたポジティブリスト制度のように化学物質の規制強化によって急増する標準物質のニーズに機動的に対応するには、新たな発想に基づく効率的なトレーサビリティ体系の構築が必要である。

3 研究の目標—効率的なトレーサビリティ体系の構築

現在の標準物質のトレーサビリティ体系は、国家標準物質をよりどころとし、同じ化学物質どうしの校正の連鎖によって成り立っているために、多種類の化学物質の分析に標準物質の整備が迅速に対応できない問題があることを前章で述べた。この問題は、多種類の実用標準物質の校正を最小限の種類の上位標準で行うことができれば解決するが、現行の同じ化学物質どうしの校正を前提とした校正技術では対応できず、新たな校正技術の開発と導入が必要である。すなわち、分子構造によらずに化学物質の量を測れるようなユニバーサルな校正技術が求められる。

そこで本研究では、新たな校正技術を開発することで、化学物質毎の国家標準物質を整備することなく、分析現場で使用する多種類の実用標準物質までのトレーサビリティを確保できる効率的な体系の構築を目標とした。具体的には、近年の規制強化における化学物質のほとんどが有機化合物であることを踏まえ、有機化合物を対象としたユニバーサルな校正技術の開発を行った。

4 目標を実現する分析方法—定量NMR法

4.1 求められる校正技術

物質質量の絶対値は、国際単位系にトレーサブルな測定によって得られる。このような測定法は一次標準測定法^{用語6}と呼ばれている。一次標準測定法の資格を有する分析法には表1に示すものがあり、一次標準直接法と一次標準比率法に分類される。一次標準直接法は、「物質質量の基準となる他の化学物質を用いずに、自分自身で目的の化学物質の物質質量を測れる方法（絶対測定法）」であり、電量分析

法^{用語7}、重量分析法^{用語8} および凝固点降下法^{用語9}がある。これらの分析法は物質量の絶対値が得られるので国家標準物質の値付けには適しているが、一般に分析の迅速性に欠け、また分析できる物質の種類が限られるなど、本研究で目標とするユニバーサルな校正技術としては適格とは言えない。一方、一次標準比率法は、「物質量の基準となる別の化学物質を用い、それとの比較において目的の化学物質の物質量を測れる方法」であり、すでに実用化されているものに滴定法^{用語10}及び同位体希釈質量分析法^{用語11}がある。また、分析技術として十分に確立されていないものの、原理的に一次標準比率法の資格を有する分析法として、定量核磁気共鳴法（定量 NMR 法）がある。

以上の測定法について、多様な実用標準物質の校正という視点で見直した場合、①市場の要求する不確かさを満足しつつ迅速性や簡便性などに優れること、②様々な化学物質（本研究では有機化合物全般）に適用可能な高い汎用性を有すること、などが要件となる。そこで、現在十分に確立されていないものの、①、②の要件をクリアするという課題に関しては、定量 NMR 法が最も可能性が高いと考え、有機化合物における実用標準物質のユニバーサルな校正技術として確立を図ることとした。

4.2 定量NMR法の原理

核磁気共鳴（NMR）法は化学物質の分子構造を決定するための代表的な分析法の1つであり、タンパク質の解析

等、分子構造の決定に多くの成果を上げている。NMR で得られる化学シフト（原子の結合状態や環境に依存する共鳴ピークの位置）やスピン結合（化学結合の数、結合次数及び結合角に依存するピークの分裂）の情報は、その化学種や近傍の環境を示唆する。これらに加え、化学シフトの異なる各ピークの面積比は、一般にそのピークに寄与する原子の数の比を示すので、特に水素原子の核磁気共鳴に着目した¹H NMR では図2に示すように、有機化合物の定性分析に重要な各炭素に結合する水素原子の数の比を簡単に確認することができる。

従来、この NMR の特性はもっぱら分子構造の決定に使われており、水素原子の数を整数比で確認するに留まっている。しかし、発想を逆転して、もし有機化合物の分子構造が分かった状況であれば、各共鳴周波数のピークに寄与する水素原子の数が明確なため、化学物質の定量分析に応用することが可能であると考えられる。すなわち、測定対象物質が含まれている試料溶液中に別の基準となる化学物質を加えて¹H NMR 測定を行うと、図3に示すように2種類の化学物質のスペクトルが混ざって得られる。このとき、加える化学物質（以下、基準物質という）の質量（秤量値）、分子量、純度が既知であれば、図中のピーク I の面積に相当する物質質量（分子数）が分かるので、これを基準として測定対象物質の分子数を求めることができる。具体的には、例えば基準物質の水素原子 I と測定対象物質

表1 一次標準測定法の分類とその特徴

分析法	一次標準直接法			一次標準比率法		
	電量分析法	重量分析法	凝固点降下法	滴定法	同位体希釈質量分析法	(定量核磁気共鳴法)
測定法の概要	特定の物質を電気分解させたときの電気量を測定	溶液中での特定の物質の沈殿量を測定	融点付近における融解量と温度の関係を測定	化学反応を用いて特定の物質を測定	安定同位体を用いた質量分析	化学シフトの異なる ¹ Hピーク的面積比を測定
主な対象物質	金属元素	無機塩	高純度有機化合物	酸、塩基、元素	微量金属、微量有機化合物	有機化合物
基準となる物質	不要	不要	不要	滴定原理に即した基準が必要	対象物質毎に必要	¹ Hの基準となるものが必要
不確かさ(1%未満)	○	○	○	○	○	△(未知数)
迅速性	×	×	×	×	○	○
汎用性	×	×	×	×	×	○

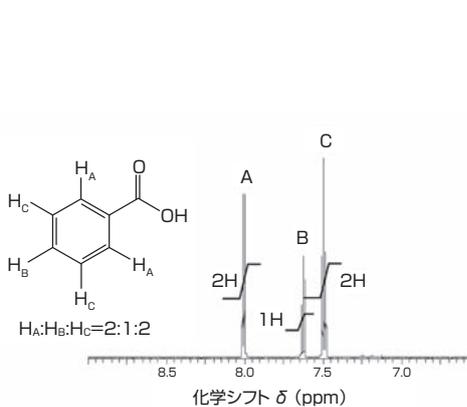


図2 ¹H NMRによる化学物質の定性分析

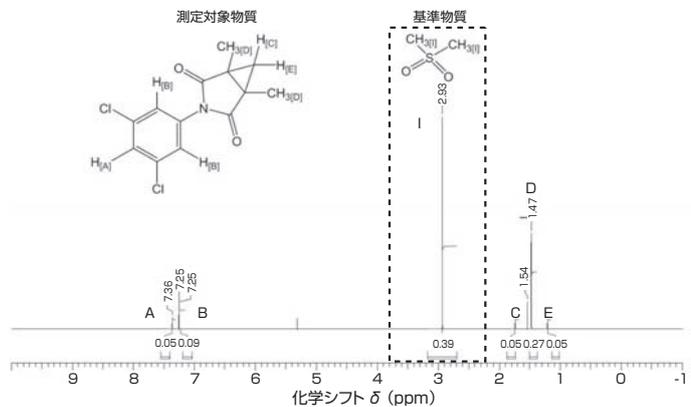


図3 ¹H NMRによる化学物質の定量分析

の水素原子 D の 1 分子当たりの数は同じ（どちらも 6）なので、ピーク I の面積とピーク D の面積比がそれぞれの分子数の比になる。ゆえに、[ピーク I の面積] / [基準物質の分子数] = [ピーク D の面積] / [測定対象物質の分子数]、という関係が成り立ち、基準物質の分子数が既知であるので、測定対象物質の分子数が得られ、測定対象物質の質量（秤量値）と分子量から測定対象物質の純度が求まる^[3]。したがって、定量 NMR 法は、原理的に測定試料中にある水素原子の数、言い換えれば物質中にトレーサブルな測定値を得ることが可能な一次標準比率法である。

図 3 の例は、測定対象物質および基準物質それぞれを純物質とし、それらを質量比で混合後に重水素化溶媒に溶解させて定量 NMR 法による測定を行い、測定対象物質の純度を求めたものであるが、実用標準物質は溶液状態で供給されるものも少なくない。ある程度の濃度（0.1 % 程度）であれば、適切な重水素化溶媒に実用標準物質を溶解することによって定量 NMR 法が適用でき、得られた測定対象物質の分子数、加えた試料溶液の質量および測定対象物質の分子量から、実用標準物質の濃度を求めることも可能である。

4.3 定量 NMR 法の可能性

定量 NMR 法の一次標準比率法としての可能性については、ドイツの連邦材料・試験研究所 (BAM) が早くから着目しており、当所を含め物質質量諮問委員会^{用語 12}のメンバーである各国の計量標準機関が興味を示していた。そこで、2001 年にイギリスの国立化学研究所 (LGC) と BAM が幹事機関となり、主要国から 10 機関が参加して水溶液中のエタノールの定量分析に関する国際比較^{用語 13}が行われた際に、ガスクロマトグラフ法 (GC) など従来からの測定とあわせて定量 NMR 法による測定も同じ試料について実施された^[4]。試料は幹事機関の LGC において精密な質量測定により調製され、エタノールの濃度は 1.072 mg/g ±

0.006 mg/g であったが、この調製値は伏せられた形で参加機関に試料が配布された。また、定量 NMR 法による測定を行うことを表明した参加機関には BAM から濃度が既知の基準物質 (3-トリメチルシリルプロピオン酸ナトリウム-*d*₄) の重水溶液が別途配布された。

測定結果は幹事機関に個別に報告され、図 4 はそれらをまとめたものである。各データ点が報告値であり、それに付随するエラーバーは、それぞれの参加機関が見積もった測定の不確かさ (95 % 信頼区間) である。定量 NMR 法の結果に関しては、ほとんどの機関で不確かさが % レベルであり、調製値から大きく外れる機関も散見されるなど、GC など従来からの分析技術と比べて正確さは劣るものであった。したがって、この国際比較の結果からは、定量 NMR 法は技術的に未だ十分に確立されたものとは判断されず、その後、国際的には特に注目されることなく今日に至っている。

一方、図 4 を見ても分かるように、当所の報告した測定結果は調製値と良く一致し、不確かさも他の参加機関の定量 NMR 法と比べて十分に小さかったことから、我々は定量 NMR 法に対して異なる見解を持つに至った。国際比較の際に当所が幹事機関に報告した定量 NMR 法の不確かさが図 5 である。不確かさの要因ごとにその大きさを評価したものであるが、最も大きい要因は幹事機関から配布された ¹H の基準物質の濃度の不確かさである。当所における定量 NMR 法の測定の不確かさはそれよりも小さいことから、より正確な基準物質を当所が自ら用意すれば測定の不確かさをさらに小さくできる見込みがあることが明瞭になった。

ここで注目すべき点は、国際比較に用いられた GC など従来からの分析技術は同じ種類の化学物質の間でのみ濃度を比較する校正技術であるために、被測定物質と同じ種類の基準物質が必要であるのに対して、定量 NMR 法は異なる種類の化学物質の間で物質質量を比較できる校正技術であるために、基準物質は測定対象物質と同じ種類の

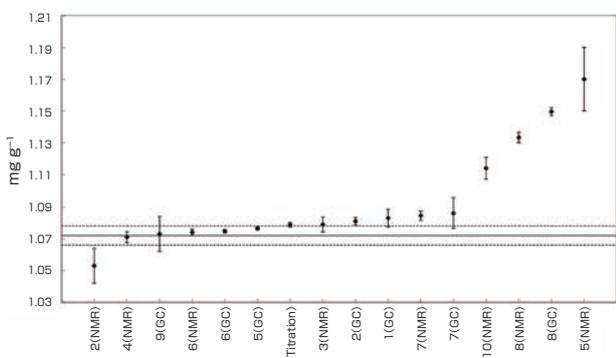


図 4 水溶液中のエタノールの定量分析に関する国際比較の結果
図中の実線が調製値、点線が調製値の不確かさ、当所の結果は No. 6 参加機関 (順不同) : BAM (独)、KRIS (韓)、LGC (英)、LNE (仏)、NIST (米)、NMI (蘭)、NMIJ (日)、NRC (加)、NRCCRM (中)、VNIM (露)

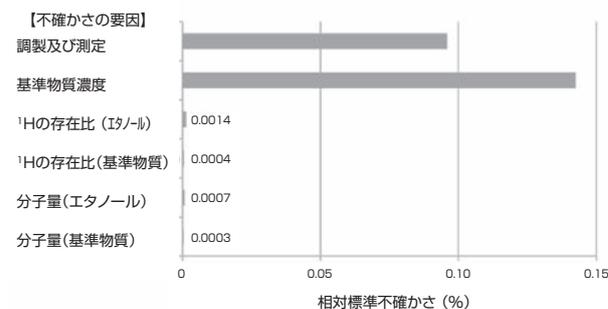


図 5 水溶液中のエタノールの定量分析に関する国際比較における ¹H NMR の不確かさ

化学物質である必要がないという点である。このことから、定量 NMR 法は ^1H の基準となる化学物質が最低限 1 種類は必要であるが、水素を含む有機化合物であれば基本的に測定可能であることから、広範囲な適用可能性が期待できる。そこで筆者らは、定量 NMR 法に特化した要素技術を開発し、それらを統合することで、実用標準物質の校正に広く用いることができると考えた。

5 定量NMR法の実現のための要素技術とその統合

5.1 コアとなる要素技術

定量 NMR 法をユニバーサルな実用標準物質の校正技術として実現するために、筆者らが行った要素技術の開発とそれらの統合プロセスを図 6 に示す。定性分析に目的を特化して分析技術を開発する場合と、定量分析に特化する場合には、NMR に求める要件に大きな差がある。定量 NMR 法では、測定の迅速性や信号の S/N 向上よりも、分析しようとする原子の数に信号強度が正確に比例することを最優先に考え、コアとなる要素技術を選択し、条件設定を見直した。

一般に NMR の信号は、スピン-格子緩和時間 (T_1) と呼ばれる寿命で緩和する（すなわち励起状態から基底状態に戻る）が、 T_1 は水素原子の周囲の環境（結合状態など）によって異なる。定性分析を目的とした NMR の場合は、信号の S/N を向上させるために高い頻度でマイクロ波パルス照射し、信号を積算する。しかし、そのような場合にはしばしば遅延時間が T_1 よりも短くなり、必ずしも全ての水素原子が基底状態に戻らないうちに再励起することになる。その結果、測定対象物質と基準物質のそれぞれ着目した水素原子の T_1 に差がある場合、それぞれの原子の数に正確に比例したピーク面積が得られない。そこで、遅延時間とピーク面積の関係を測定したところ、測定対象の水素原子の T_1 の 6 倍以上の遅延時間をとることで、NMR 信

号の 99.9 % 以上が緩和し、安定したピーク面積比が得られることを実験的に確認した^[5]。測定対象の水素原子のうち最も長い T_1 よりも十分に長い遅延時間を取ることで、これまでよりも数倍の測定時間が必要となったものの、水素原子の T_1 によらないピーク面積比が得られた。

また、通常、NMR では信号の S/N を向上させるために、オーディオフィルタを用いて測定の帯域幅を狭めることが行われる。ところが、フィルタは帯域幅の全域でフラットな感度特性を示すわけではなく、特にフィルタ帯域の端で感度低下が著しく、化学シフトによっては数%以上の感度低下を生じる。したがって、測定対象物質と基準物質の着目した水素原子の化学シフトの差が大きいほど、正しいピーク面積比が得られにくい。そこで、化学シフトによらないフラットな感度を得るために、オーディオフィルタに関しては、これまでの定性的な NMR では 10 ppm ~ 20 ppm であったスペクトルの観測幅を 100 ppm 程度に広げるとともに、その 60 % ~ 70 % がカバーされるフィルタを設定した。帯域幅の広いフィルタを設定することで、 ^1H NMR 信号の存在する範囲（通常、0 ppm ~ 10 ppm）についてはフィルタ特性が十分に平坦な部分を使い、期待したようにフラットな感度が得られた。このようなフィルタの設定は一方で、大量のデータを取り込まなければならないので、通常の NMR では考えられない設定ではあるが、測定値の正確さを最優先してこれまでの常識にとらわれないアプローチにより問題点を解決した^[5]。

なお、上記 2 つの要素技術以外に、位相補正の仕方、ベースラインの引き方や積分範囲の設定などに注意することが測定値の再現性を向上する上で重要であった。

5.2 仲介物質の活用

定量 NMR 法による測定では ^1H の基準物質を必要とするが、それは測定対象と同じ化学物質である必要はない。基準物質（ここでは純物質に限定）に求められる要件は、

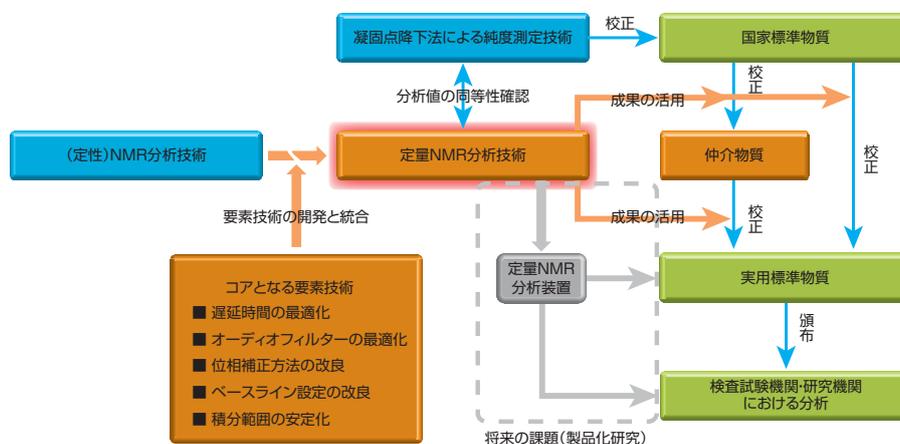


図 6 ユニバーサル校正技術構築のための要素技術の開発とそれらの統合プロセス

①可能な限り不純物が少なく、不確かさの小さな純度値が付与されていること、②できるだけ多種類の溶媒に溶け易く、溶液中で安定なこと、③揮発性（昇華性）や吸湿性が低く質量測定（秤量）がしやすいことであるが、さらに、④測定対象物質と化学シフトが重ならないことである。現有の国家標準物質の中にも基準物質としての条件を満たしているものがあるが、②に関しては基準物質と測定対象物質の両者が溶解する適切な溶媒が見つからない場合があり、④に関しても測定対象物質に依存することから、測定対象物質によって基準物質を使い分けなくてはならない。

測定対象物質に合わせていくつもの基準物質を用意するのは、実質的に国家標準物質の数を減らすことができない。そこで、定量 NMR 法の特徴を生かし、図 7 のような校正方法でこの問題を解決した。すなわち、基準物質および測定対象物質と化学シフトが重ならない化学物質を仲介物質として選定し、ステップ 1 として、基準物質（国家標準物質）を用いて定量 NMR 法により仲介物質中の特定のピークを校正する。ステップ 2 として、校正された仲介物質の特定のピークを基準に測定対象物質の校正を行った。この二段階の校正方法をとれば、トレーサビリティの基点となる国家標準物質の種類をできるだけ少なくとどめることができる。また、仲介物質は標準物質の要件である均質性や長期の安定性を必ずしも確保する必要がないため、測定対象物質の測定に適した物質を幅広く選定できる。定量 NMR 法における仲介物質の導入は、要素技術を統合する過程で重要な技術開発であった。

5.3 統合した技術の評価

5.1 節と 5.2 節で述べたように要素技術を統合して定量 NMR 法による校正技術を構築したが、その技術の信頼性を従来から確立されている方法と比較することにより検証した。まず、市販されている高純度の有機化合物から何種

類かを測定試料として選択し、従来から確立されている一次標準直接法であり、かつ当所で国家標準物質の値付けに用いている凝固点降下法（表 1 参照）によって純度値を求めた。次に同じ試料を今回開発した定量 NMR 法で測定して純度値を求め、両者の測定値が互いの不確かさの範囲内で一致するかどうかを確認した。

一連の定量 NMR 法による測定の前には、米国国立標準技術研究所 (NIST) から頒布されている国家標準物質である安息香酸 (NIST SRM 350a, 99.9958 % ± 0.0027 %) を用いた。安息香酸を基準物質としたときに主な化学シフトのピークが重なってしまう測定対象物質に関しては、ジメチルスルホン又は 1,4-BTMSB- d_4 (1,4-ビス-トリメチルシリルベンゼン- d_4) を仲介物質として用いる二段階校正とした。なお、基準物質と測定対象物質を溶かす溶媒には、溶媒自身および溶媒中の不純物に含まれる水素原子による妨害の少ない重水素化溶媒の中から、基準物質および測定対象物質の溶解性等を考慮し、それぞれ適切と思われるものを選び、1000 mg/L 程度の濃度の溶液を調製した。

得られた測定結果を表 2 に示すが、定量 NMR 法で測定した純度値の多くは凝固点降下法で測定した結果よりも不確かさが大きかったものの、両者の値は不確かさの範囲内でおおよそ一致し、定量 NMR 法による校正技術が十分な信頼性を持っていることが検証された^[6]。また、定量 NMR 法の測定の不確かさは 0.3 % ~ 1.2 % ($k=2$: 95 % 信頼区間) の間にあり、純度の測定技術としては凝固点降下法と比べて精度の点ではやや劣るものの、凝固点降下法では測定できない物質に対しても校正が可能であるなど広範な有機化合物に対して適用でき、かつ市場が実用標準物質に要求する不確かさを満足する水準である。

6 今後に残された課題

国家標準物質をよりどころとし、同じ物質どうしで一对一の校正を行うトレーサビリティ体系から、一对多の校正が可能となるトレーサビリティ体系への転換を図るため、中核技術として多種類の有機化合物に適用できるユニバーサルな校正技術の開発を行った。定量 NMR 法を有望な方法としたシナリオを設定し、照射パルスの遅延時間やオーディオフィルタを最適化することなどにより要素技術を開発し、市場の要求する不確かさを満足する校正技術としての適格性を検証した。このとき、仲介物質を活用することで、物質量の基準となる国家標準物質の種類を最小限にできることが分かり、最終的に図 8 に示すような効率的なトレーサビリティ体系の実現の見通しが得られた。

本体系は、国家標準物質から実用標準物質まで同じ物

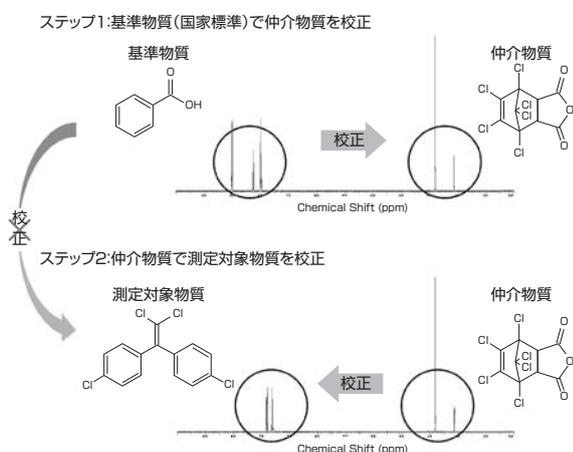


図 7 定量 NMR 法における仲介物質の活用

質を一对一に整備する必要のないきわめて効率的なトレーサビリティ体系であり、標準物質に関しては世界的にも類を見ない新しい発想である。したがって、多くの実証実験を通して広く成果を公表するとともに、本体系の中核である定量 NMR 法に関しては、分析法の標準化を進めることに加え、新たに国家計量標準機関間の国際比較を実施することなどにより定着させることが必要である。

同時に、社会で必要とされる多様な実用標準物質の校正を産業界自身で行える体制に早期に移行するためのインフラ整備も重要である。このためには、定量 NMR 法の基準物質となる使いやすい国家標準物質を実際の適用事例とともに供給することに加え、定量 NMR 法による測定のパラメータセットからデータ解析に至るまでの自動化ツールなどを用意することも必要である。

7 将来の展開

定量 NMR 法は、今後、測定装置の製品化を伴うことにより大きな市場性を有すると思われる（図 6：将来の課題）。すなわち、定量 NMR 法に特化した安価で使いやすい装置の開発や¹H 以外の他の核種への応用などにより、実用標準物質の校正技術に留まらず、検査・試験機関や研究機関などにおける幅広い分野での有機化合物の定量分析に活用が期待される。

また、例えば、生理活性物質や生薬などの天然物に含まれる有効成分の定量的評価は、自ら単離した有効成分や対応する市販試薬を標準として使う場合が多いが、その純度（あるいは濃度）評価が不十分であることから測定値の信頼性が十分ではない。定量 NMR 法はこのように適切な標準が得にくい場合にも信頼性の高い有力な定量分析法になりうる（図 9）^[7]。

表 2 定量 NMR 法による有機化合物の純度測定結果

対象物質	凝固点降下法		定量 NMR 法				
	参照値 (%)	不確かさ (% $k=2$)	分析値 (%)	不確かさ (% $k=2$)	基準物質	仲介物質	溶媒
<i>trans</i> -Nonachlor	99.6	0.2	99.5	0.6	安息香酸	----	アセトン- <i>d</i> ₆
<i>cis</i> -Nonachlor	99.8	0.2	99.9	0.5	安息香酸	----	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
Oxychlorthane	99.9	0.1	99.3	0.5	安息香酸	----	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
Endrin	99.7	0.2	99.2	0.8	安息香酸	----	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
<i>trans</i> -Chlordane	99.8	0.3	99.5	0.6	安息香酸	----	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
<i>cis</i> -Chlordane	99.7	0.4	99.1	0.5	安息香酸	----	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
Trichlorfon (DEP)	99.7	0.3	99.6	0.5	安息香酸	----	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
Heptachlor	99.7	0.3	99.3	0.3	安息香酸	----	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
4,4'-DDT	99.6	0.3	99.9	1.2	安息香酸	ジメチルスルホン	アセトニトリル- <i>d</i> ₃
4,4'-DDE	99.7	0.3	99.8	0.7	安息香酸	ジメチルスルホン	アセトニトリル- <i>d</i> ₃
4,4'-DDD	99.8	0.2	99.9	0.6	安息香酸	ジメチルスルホン	アセトニトリル- <i>d</i> ₃
Procymidone	99.9	0.2	99.3	0.5	安息香酸	ジメチルスルホン	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
Fenobucarb (BPMC)	99.8	0.2	99.8	0.7	安息香酸	1,4-BTMSB- <i>d</i> ₄	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
Fenitrothion (MEP)	99.8	0.3	99.6	0.6	安息香酸	1,4-BTMSB- <i>d</i> ₄	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
α -HCH	99.6	0.3	99.2	0.6	安息香酸	----	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
β -HCH	熱分解のため測定不可		99.5	0.3	安息香酸	----	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
Atrazine	熱分解のため測定不可		99.7	0.7	安息香酸	1,4-BTMSB- <i>d</i> ₄	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
EPN	凝固しないため測定不可		99.4	0.7	安息香酸	1,4-BTMSB- <i>d</i> ₄	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
Diazinon	凝固しないため測定不可		99.8	0.7	安息香酸	1,4-BTMSB- <i>d</i> ₄	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
Malathion	凝固しないため測定不可		99.5	0.7	安息香酸	----	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂
Etofenprox	凝固しないため測定不可		99.5	0.5	安息香酸	ジメチルスルホン	ジクロロメタン- <i>d</i> ₂

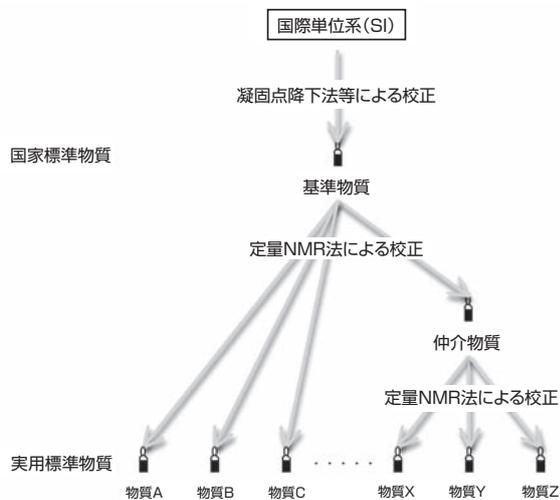


図 8 定量 NMR 法を中核技術とする効率的なトレーサビリティ体系

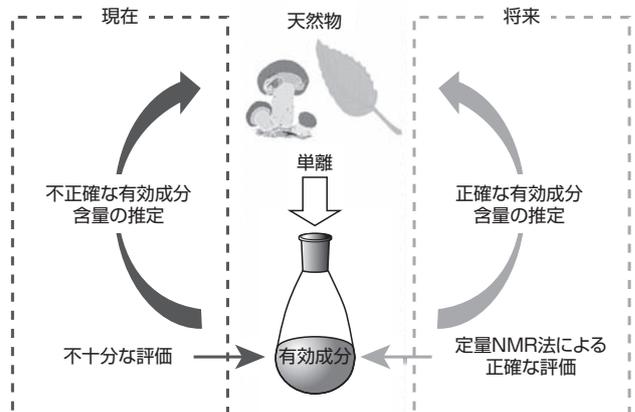


図 9 定量 NMR 法による天然物中の有効成分の定量的評価

さらに、ここで述べた有機化合物の校正技術における効率的なトレーサビリティ体系は、広がる標準物質のニーズに機動的に応えるための有力なスキームである。その中核技術としては、今のところ定量 NMR 法以外に可能性を示せていないが、合理的なトレーサビリティ体系を構築するためのユニバーサルな校正技術は他にも考えられるであろう。本論文がそのようなユニバーサルな校正技術開発の出発点になることを期待する。

謝辞

本研究成果のうち、有機塩素系化合物における測定結果は、中小企業知的基盤整備事業「ハロゲン系有機汚染物質の標準物質作成のための研究開発」によって得られたものであり、共同研究者である藤峰慶徳氏、平井哲也氏、能勢和聡氏（以上、大塚製薬株式会社）、小池昌義博士（産業技術総合研究所）に謝意を表します。また、農薬類における測定結果は、和光純薬工業株式会社からの委託研究である「トレーサビリティの確保された食品残留農薬関連標準物質の供給に関する研究」によって得られたものであり、試料の提供および評価等にご協力いただいた山田裕子氏、中尾慎治氏（以上、和光純薬工業株式会社）に謝意を表します。さらに、本論文における 6 章および 7 章で提案した内容は、共同研究「qNMR 標準化のための測定法の確立」ならびに「qNMR 普及のためのインフラの整備」によるものであり、西村哲治博士、棚元憲一博士、山崎 壮博士、多田敦子博士（国立医薬品食品衛生研究所）、末松孝子博士（日本電子株式会社）、有福和紀氏（日本電子データム株式会社）、上森仁志氏、大野桂二氏、吉田雄一博士（以上、和光純薬工業株式会社）、千葉光一博士、前田恒昭博士（以上、産業技術総合研究所）に謝意を表します。

最後に、本論文の執筆内容について、多くの貴重なご助言をいただいた衣笠晋一博士（産業技術総合研究所）に深く感謝いたします。

用語説明

用語 1: ポジティブリスト制度：一定量を超えて農薬等が残留する食品の販売等を禁止する目的で、食品衛生法の改正に基づいて 2006 年に施行された制度。人の健康を損なうおそれのない量（残留基準）が定められている農薬等はその基準値に従い、定められていないものは 0.01 ppm の一律基準が適用される。

用語 2: 公定分析法：試験機関や検体間における分析結果の比較を可能とするために、化学物質等の法規制とあわせて公示される公的な分析法。日本工業規格 (JIS)、日本農林規格 (JAS)、日本薬局方 (JP) などがあり、

堅牢性や汎用性などを重視して制定される。

用語 3: 認証標準物質：標準物質に関する国際的な指針である ISO ガイド 35 において、「一つ以上の規定特性について、計量学的に妥当な手順によって値付けされ、規定特性の値及びその不確かさ、並びに計量学的トレーサビリティを記載した認証書が付いている標準物質」と定義されている。

用語 4: トレーサビリティ：切れ目のない校正の連鎖を通して、参照標準（通常は国家標準）に関係づけることができる測定結果の性質のこと。食品等の流通の履歴管理と区別する意味で国際計量用語集第 3 版では「計量トレーサビリティ」と改訂されている。

用語 5: 国家計量標準機関：国の定める計量の標準を設定する研究機関で、我が国では産業技術総合研究所計量標準総合センターが該当する。

用語 6: 一次標準測定法：「最高の計量学的な特性をもち、その方法の操作が完全に記述され理解されるものであり、その不確かさが SI 単位を用いて完全に記述される方法」と定義されている分析法であり、国家標準物質の値付け等に利用される。

用語 7: 電量分析法：ファラデーの法則に基づき、特定の物質を電気分解させたときの電流および時間の測定から物質量を測定する方法。金属元素などの無機イオンの分析の他、微量水分の分析などにも用いられる。

用語 8: 重量分析法：試料中の目的成分のみが特異的に反応する試薬等を用いて分離し、得られた質量から目的成分を定量する分析法。一般的には、溶液中の特定成分を沈殿として分離する手法であるが、試料中の特性成分を気体として分離し吸着剤に吸収させて、その吸着量を質量として求める方法もある。

用語 9: 凝固点降下法：試料中に存在する不純物が凝固点を下げる効果を利用し、試料の凝固点降下度を温度および熱量の測定から求めることにより、試料中の不純物の物質分率を求める分析法。一般に高純度有機化合物の純度測定に用いられる。

用語 10: 滴定法：狭義には容量分析法のことを指し、試料と反応する基準となる物質を含む溶液を試料溶液中に滴下し、ある平衡点まで達するまでに消費した基準物質の量から試料溶液中の目的成分を定量する分析法。利用する化学反応によって、中和滴定（酸塩基滴定）、酸化還元滴定、錯滴定、沈殿滴定などがある。

用語 11: 同位体希釈質量分析法：目的成分を安定同位体でラベル化した成分を定量的に試料中に加え、得られた目的成分およびその安定同位体成分の質量スペクトルの強度比から試料中の目的成分量を得る分析法。目的成分とその安定同位体の化学的性質がほぼ同じであることから、夾雑物の多い試料の精製工程の影響を排

除することができる（目的成分とその安定同位体成分の強度比が維持される）とされる。なお、目的成分の基準となる物質で安定同位体成分の濃度をあらかじめ得ておく必要がある。

用語 12:物質質量諮問委員会：メートル条約に加盟する機関からなる国際度量衡委員会傘下の諮問委員会の1つで、化学計量に関する問題を審議する委員会として1993年に設置された。

用語 13:国際比較：国家計量標準機関の校正測定能力および標準物質に付与する値の同等性の程度を確認するための試験所間比較。通常は研究的な国際比較（パイロットスタディ）から始められ、ある程度の技術的基盤が構築された後に、正式な国際比較である基幹比較に移行する。

参考文献

- [1] ISO Guide 35: *Reference materials – General and statistical principles for certification*, p.2, International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland (2006).
- [2] 日本分析化学会編: *分離分析化学事典*, p.350, 朝倉書店 (2001).
- [3] G. Maniara, K. Rajamoorthi, S. Rajan and G. W. Stockton: Method performance and validation for quantitative analysis by ^1H and ^{31}P NMR spectroscopy. Applications to analytical standards and agricultural chemicals, *Anal. Chem.*, 70, 4921-4928 (1998).
- [4] 齋藤 剛, 井原俊英, 佐藤浩志, J. Harald, 衣笠晋一: ^1H 核磁気共鳴法による水溶液中のエタノールの定量に関する国際比較, *分析化学*, 52, 1029-1036 (2003).
- [5] T. Saito, S. Nakaie, M. Kinoshita, T. Ihara, S. Kinugasa, A. Nomura and T. Maeda: Practical guide for accurate quantitative NMR analysis, *Metrologia*, 41, 213-218 (2004).
- [6] T. Saito, T. Ihara, M. Koike, S. Kinugasa, Y. Fujimine, K. Nose and T. Hirai: A new traceability scheme for the development of international system-traceable persistent organic pollutant reference materials by quantitative nuclear magnetic resonance, *Accred. Qual. Assur.*, in press.
- [7] 杉本直樹, 末松孝子, 内海博明, 齋藤 剛, 井原俊英, 小島 豊, 伊藤澄夫, 佐藤恭子, 山崎 壮, 棚元憲一: qNMRを用いた天然色素カルミン酸の絶対定量, *日本生薬学会第55回年会講演要旨集*, 298 (2008).

執筆者略歴

井原 俊英 (いはら としひで)

1994年東京都立大学大学院工学研究科博士課程修了。1996年工業技術院物質工学工業技術研究所入所、揮発性有機化合物等の有機標準物質開発に従事。2002年～2003年NIST(米国標準技術研究所)にて、健康食品関連標準物質開発に従事。2005年～2006年BIPM(国際度量衡局)にて、有機化合物の純度評価技術開発に従事。2006年より、産業技術総合研究所計測標準研究部門標準物質システム科(現、計量標準システム科)に所属し、環境、食品、臨床検査分野における新たな標準供給システムを研究、現在に至る。本論文では、化学計量における新たなトレーサビリティ体系を構想、具体的なアプローチ手法を設計した。

齋藤 剛 (さいとう たけし)

2000年工業技術院物質工学工業技術研究所入所。有機化合物のスペクトルデータベース(SDBS)の高度化研究に従事し、現在はSDBSを統括している。入所以来、NMRを利用した研究を行っており、NEDO委託事業「ナノ計測基盤」では、NMRを利用した液中粒径計測の研究に従事した。現在は、NMRを用いた定量技術の高精度化研究と、この技術の汎用化に向けた課題に取り組んでおり、本論文では定量NMR法に関わる基礎的な技術構築を行った。

杉本 直樹 (すぎもと なおき)

1997年金沢大学大学院自然科学研究科博士課程修了。1997年国立衛生試験所(現、国立医薬品食品衛生研究所)入所、食品添加物等の規格設定に従事。2005年～2006年FDA(米国食品医薬品局)、CFRAN(食品安全応用栄養センター)にて、国際標準化を目指した食品添加物の複合分析法の開発研究に従事。2008年より、国立医薬品食品衛生研究所環境衛生化学部第三室長として、水道水質に関わる化学物質の規格基準の設定、分析法の開発に従事。本論文では定量NMR法の応用技術を担当、本技術を社会で広く活用するために必要な自動化ツールを提案した。

査読者との議論

議論1 全体的評価

コメント(小野 晃)

食品や環境中に含まれる有害な有機化合物を正確に分析する技術は、現在多様なニーズに追いつけず、困難な状況にあると思います。本研究で開発した定量NMR法とそれに基づく新しい効率的なトレーサビリティ体系はこの困難を打ち破るもので、大きな革新につながる可能性があるかと期待されます。

当初、従来からある定性を目的としたNMR装置を使って定量分析を始めたと思いますが、必要な要素技術に立ち戻って定量NMR法のコア技術を完成させた点で、本研究は優れた第2種基礎研究だと思います。

コメント(一條 久夫)

校正技術主体の効率的なトレーサビリティ体系への転換という大目標へ向け、シナリオを描きつつ着実に研究開発を続けられていることが、分かり易く記述されていると思います。

議論2 記述内容の絞り込み

質問・コメント(小野 晃)

定量NMR法は新しいトレーサビリティ体系を提唱するものであり、これだけでも十分な成果ですので、これを分かりやすく記述することに集中したほうが良いと思われます。凝固点降下法は、純物質の純度測定に使われるものとして簡単に記述してはどうでしょうか。

質問・コメント(一條 久夫)

本論文は、目標、社会とのつながり、要素等が明確に記されていると思います。「定量NMR法は適切(多くの物質に適用可能で市場の要求する不確かさの範囲)」、「凝固点降下法は不適(結晶化の問題)」と判断されたわけですが、判断の理由(結晶化の難しさや対象物質に限られる等)について、本研究を通して得られた知見をもとに若干説明を加えられた方が理解し易いように感じます。

回答(井原 俊英)

凝固点降下法と対比した論理展開を変更し、定量NMR法についての技術構築に絞り込む内容に書き改めました。なお、凝固点降下法については既に確立した技術として位置づけ、定量NMR法の妥当性検証のためとして記述しました。

議論3 シナリオと統合の明示

質問・コメント(小野 晃)

分野外の読者にも分かりやすいように、第2種基礎研究としての本

研究のシナリオと要素技術の統合を示す図を追加してください。

回答（井原 俊英）

ユニバーサルな校正技術構築のための要素技術の統合プロセスとして図6を作成しました。

議論4 基準物質の選択

質問・コメント（小野 晃）

表2の測定において、定量NMR法の基準物質に米国NISTの国家標準物質である安息香酸を用いていますが、産総研で既に多数整備した高純度の有機化合物の国家標準物質を使わなかった理由は何ですか。

回答（井原 俊英）

基準物質に求める要件は、5.2節で説明した通りですが、使用した米国NISTの国家標準物質である安息香酸（NIST SRM 350a）は、本文中に示した要件①～③に優れるという点で、現有する国家標準物質の中では定量NMR法に最適であると考えました。要件①に関しては、産総研の国家標準物質であるフタル酸水素カリウム（NMIJ CRM 3001-a）や1,4-ジクロロベンゼン（NMIJ CRM 4039-a）も匹敵する品質ですが、フタル酸水素カリウムに関しては有機溶媒に溶解しにくい点で要件②の点で不十分と判断し、一方、フタル酸ジエチルに関しては昇華性が高いため要件③の点で不十分と判断しました。現在、定量NMR法のために開発された国家標準物質はないので、要件①～③に加えて要件④にも優れる産総研の国家標準物質の開発を進めています。

議論5 最終的な基準物質の姿

質問・コメント（小野 晃）

定量NMR法を活用した場合、原理的には、最終的な基準物質となる国家標準物質は1種類でよいと述べられていますが、将来新しいトレーサビリティ体系が完成したときに、現実に国家標準物質は何種類くらい必要と予想していますか。そのとき具体的にどのような有機化合物が国家標準物質の有力候補と考えていますか。

回答（井原 俊英）

本研究では、開発に時間や経費を要する国家標準物質の種類を最小限にすることを優先したことから、仲介物質を用いた多段階の校正手法を提案し、これまで測定した有機化合物ではすべて安息香酸を基準物質としています。したがって、¹H NMR測定が可能な有機化合物に対しては、1種類の国家標準物質からトレーサビリティ体系を構築することは実際に可能であると考えています。

一方、このようなトレーサビリティ体系は、多段階の校正によって不確かさや手間が増えるというデメリットがあるので、高精度あるいは迅速分析のニーズが高いユーザが多ければ、極性や化学シフトの異なる何種類かの国家標準物質を用意し、可能な限り一段階の校正とする方向性も考えられます。

なお、水素原子を持たない有機化合物にも対応すべく、リンやフッ素など他の核種の定量NMR法の開発とそれに合わせた基準物質となる国家標準物質が必要と考えています。

議論6 仲介物質の調製と使用方法

質問・コメント（小野 晃）

仲介物質の使い方について質問します。将来新しい効率的なトレーサビリティ体系が完成したときに、仲介物質は産総研が整備・保管して適宜頒布するのでしょうか。あるいは仲介物質は、実用標準物質を調製する機関がそれぞれ調製するときに合わせて自分で適宜作成し、調製が終了したら廃棄するといったやり方を想定していますか。

回答（井原 俊英）

本論文では、仲介物質について、実用標準物質を開発・供給する

機関（標準物質生産者）が目的に応じて用意するものと位置付けています。この際、適切に評価を行うことで、試験の度に調製するのではなく、標準物質生産者自らの責任で一定期間保管することも可能と思われる。

また、7章で述べたように、定量NMR法が有機化合物の定量分析法として様々な機関で活用されるようになれば、用時調製的な仲介物質の運用にとどまらず、使いやすい仲介物質を標準物質として、産総研もしくは標準物質生産者が頒布することも考えられます。

議論7 定量NMR法と凝固点降下法の比較

質問・コメント（小野 晃）

表2の測定値に関して質問します。凝固点降下法では、純度の測定値が不確かさの上限で100%を超えるものは少ないのに対して、定量NMR法では多くのもので、不確かさの上限が100%を超えるという合理的でない結果になっています。凝固点降下法は、純物質に対してその不純物の量を直接測定する方法なので、100%を超えることが少ないと思いますが、一方、定量NMR法では、純物質をいったん1000 mg/L程度の濃度に薄めたのち、主成分の測定を行っています。これが100%を超えやすい原因ではないでしょうか。定量NMR法は溶媒中の成分の測定に適しており、純物質の純度測定にはむしろ向かない方法といえませんか。その意味では、図6の破線で囲った製品化研究では、定量NMR法は最も期待されるころと思えますが、著者はどのように考えますか。

回答（井原 俊英）

図5に示した定量NMR法の不確かさの要因では、調製の不確かさと測定の不確かさを分離して表していませんが、調製の不確かさは相対的に小さいものではありません。したがって、純度測定に適用する場合には、直接測定できる凝固点降下法と比べて溶液調製を伴う定量NMR法が不確かさの点で不利になることは否定できず、結果として不確かさの上限で100%を超える純度が得られることがあるのはご指摘の通りです（ただし、純度値に偏りがあるわけではないと考えています）。

一方、溶液の成分濃度測定には凝固点降下法は適用できないので、本来、定量NMR法の特徴が生かせる応用例であることもご指摘の通りですが、多くの有機溶媒が水素を含むので、水素原子を対象とするNMRにおいては、この影響の抑制が大きな課題となります。定量NMR装置の開発を含めた製品化研究において、溶媒中の水素原子の問題を解決し、溶液の成分濃度測定を実用レベルで可能とすることが、定量NMR法の定着の鍵を握っているかもしれないと考えています。

議論8 ユニバーサルな校正技術の他の可能性

質問・コメント（小野 晃）

7章「将来の展開」の中で、定量NMR法以外にもユニバーサルな校正技術がありうるという示唆をしていますが、現時点で可能性がありそうな校正技術には何があると考えますか。

回答（井原 俊英）

4.1節でユニバーサルな校正技術には、原理的に一次標準比率法物質の基準となる別の化学物質を用い、それとの比較において目的の化学物質の物質量を測れる方法（の資格を有する分析法が必要であると述べています）。

分析技術として確立しているわけではありませんが、筆者らが検討しているその種の分析法の1つにクロマトグラフ法と発光分光分析法を組み合わせた手法があります。この分析法は、目的成分を含む試料をクロマトグラフ法により時間的・空間的に分離した後、化学物質ごとに高温のプラズマ中に導入、炭素原子、水素原子、酸素原子などに原子化し、例えば分光された炭素原子の発光量を測定するというものです。あらかじめ試料中に、一定量の炭素を含む基準物質を加えておくことで、基準物質自体も原子化されるので、物質量と炭素

の発光量が結びつけられ、目的成分の物質量が求められます。ポイントは分子種に依存しない原子化効率ですが、ガスクロマトグラフ法とヘリウムプラズマの発光分光分析法との組み合わせにおいて、現状では5%程度の不確かさ(95%信頼区間)であり、実用化には更なる改良が必要と考えています。

議論9 溶媒の重水素化の理由

質問・コメント (小野 晃)

4.2節に重水素化溶媒が用いられたことが記述されています。定量NMR法で溶媒を重水素化する理由をご説明ください。通常の水素の溶媒を使った場合には、定量NMR法はほとんど使えないと考えてよいのでしょうか。

回答 (井原 俊英)

本研究のように、測定核種として ^1H (プロトン) を利用する場合、通常の水素である ^1H を含む溶媒を用いると、溶媒由来の ^1H 信号が定量したい化合物の ^1H 信号と比較して非常に強くなり、装置のダイナミックレンジの関係で定量したい化合物の信号を精密に測定できないという問題があります。そこで、定量NMR法に限らず ^1H NMR測定では、通常、重水素化によって ^1H を無くした溶媒を用いること

で、この問題を解決しています。

一方、4.3節で例示したエタノールの定量分析に関する国際比較における測定試料の溶媒は、重水 (D_2O) ではなくほぼ軽水 (H_2O) なので、通常の測定条件設定では上述した問題が生じます。このような場合、溶媒 (水) 由来の水素原子共鳴位置に比較的強度の低いラジオ波を照射してこの信号を飽和させた直後に、通常と同様なパルス測定を行うプレサチュレーション法と呼ばれる技術を適用することで、妨害ピークを消去することができます。ただし、ここで利用したラジオ波のピーク選択性が低いため、照射位置と定量したい試料由来の信号の共鳴位置が近い場合には定量値の正確性が失われます。それ以外の場合でも、正確な定量値を得るためには照射強度や時間などを適切に設定することが必要なため、可能な場合は重水素化溶媒の使用が簡便かつ安全です。

なお、NMR測定では磁場の安定性を得るために、一般的に重水素化溶媒からの信号周波数が一定になるように磁場強度の調整を随時行っています (重水素ロック)。定量NMR法を含め、比較的長時間にわたる測定が必要で、かつ分解能の高いスペクトルを得るためには重水素ロックが不可欠であり、このため試料溶液が重水素化されていない場合は、重水素化溶媒の添加が必要です。

産業技術の社会受容

— 既存の3モデルを統合した環境製品普及評価モデルの構築 —

松本 光崇^{*1}、近藤 伸亮²

技術開発を通じて社会の変革を実現するためには、技術の社会受容を評価・分析することも重要な課題になる。本研究では特に温暖化対策に資する環境製品を対象にして製品普及の評価モデルの構築を行った。長期の普及分析と各種普及促進策の効果分析をともに実現するために、これまで個別に議論されてきた3つのモデル、すなわちBassモデル、消費者選好モデル、学習曲線モデル、を統合した評価モデルを構築した。本稿では、研究の目的、既存モデル、構築した統合モデル、統合モデルと必要データ組み込んだツール、分析事例を示す。

キーワード: 技術の社会受容、環境製品、普及モデル、Bass モデル、消費者選好

Modeling the social acceptance of industrial technologies

— Development of an eco-product diffusion analysis model that incorporates three existing models —

Mitsutaka Matsumoto^{*1} and Shinsuke Kondoh²

In order to bring change to society through technological developments, analysis of the social acceptance of a given technology is indispensable. In this research, we developed a model that includes the effects of the diffusion of environmentally conscious products. To analyze the long term diffusions and to analyze the effects of various diffusion promoting measures, we have incorporated three existing models: the Bass diffusion model, the consumer preference model, and the learning curve model. These models have been argued for individually to date. The paper describes the research objective, existing models, the developed model, the related developed tools, and an analysis example.

Keywords: Social acceptance of technologies, eco-products, product diffusion model, Bass model, consumer preference

1 はじめに

技術は社会と相互作用することで発展していき、その中では新しい技術が社会に即座に受容されないことによる技術の悪夢の時代もやってくる^[1]。技術により社会を変革するためには技術と社会の相互関係をモデル化する研究も必須である。本研究は技術と社会の関係を理解しモデル化していくことを目指している。技術と社会の関係は言うまでもなく多数のフェーズ、多様な側面がある。研究では、関連する課題に取り組み、対応するモデルを一つ一つ構築していくことを通じて、包括的で多面的なモデルに組み上げていくことを目指している。

本稿で示すのはそうした研究の一事例として我々が位置づける、環境製品の社会普及モデルの構築の研究の内容である。本研究は経済産業省の地球温暖化問題対策調査の一環として実施した^{[2][3]}。

本調査の研究のプロセスは次のとおりであった。

1. 研究の目標の明確化 (本稿 2 章)

2. 既存モデルの調査 (同 3 章)

3. モデルの決定 (同 4 章)

4. データの収集 (同 5 章)

5. ツールの作成 (同 6 章)

6. 分析 (同 7 章)

本研究ではモデルとして、3つの既存のモデルを組み合わせ統合して用いた。1つは製品普及モデルである Bass モデル、第2は消費者選好モデルに関連するコンジョイント分析、3つ目は技術進歩による価格低下のモデルである学習曲線モデルである。基本的には第1の Bass モデルをベースにした。以下本稿では上記の各過程を各章で記す。次章で本研究の目標を記し、3章で製品普及分析に関連する既存研究を示す。4章で本研究で構築したモデルを示す。5章では収集したデータを示し、6章ではモデルとデータを簡易に使用できるように作成したツールを示す。7章では省エネエアコンの普及評価に適用した例を示し、最終章で結論と今後の課題を示す。

1 産業技術総合研究所 サービス工学研究センター 〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1 中央第2、2 産業技術総合研究所 先進製造プロセス研究部門 〒305-8564 つくば市並木 1-2-1

1. Center for Service Research, AIST Tsukuba Central 2, Umezono 1-1-1, Tsukuba 305-8568, Japan *E-mail: matsumoto-mi@aist.go.jp, 2. Advanced Manufacturing Research Institute, AIST Namiki 1-2-1, Tsukuba 305-8564, Japan

Received original manuscript October 14, 2008, Revisions received December 2, 2008, Accepted December 2, 2008

研究に際しては上記の6過程が一方向に円滑に進んだわけではなかった。特に1と3の議論を往き来する作業を何度も繰り返した。つまりモデルを考慮する中で、研究の目標を再検討し、それに応じてモデルを再構成したり元に戻したりという作業を繰り返し行った。その過程については4章で記す。

2 研究の目標の明確化

本研究は経済産業省の地球温暖化問題対策調査の一環として実施した。本調査の目標について、当初から明らかだったものと、研究を進める中で明らかにしていったものがあるが、以下に併せて示す。

本調査は環境製品の普及予測・分析を目標とした。分析対象製品は次のとおりであった。

- (1) 温暖化対策(CO₂排出削減)に寄与する製品
- (2) 一般消費者が購入者である製品

具体的には、省エネ自動車(ハイブリッド車等)、省エネ家電(省エネエアコン・冷蔵庫等)、高効率給湯器、高効率照明、家庭用太陽光発電システム等である。

また、誰の視点に立つ分析かという点については、

- (3) 「政策決定者」として有用な普及分析とした。次のような問いに答えることが調査の目標であった。

- 分析対象の環境製品が今後どれくらいの早さでどこまで普及が進むか?
- その環境製品に補助金を付与したときに、その普及への影響はどの程度か?
- その環境製品の省エネ性能が今後さらに向上すれば普及への影響はどの程度か?

最初の問いを基本分析と呼び、後の2つを変化影響の分析あるいは感度分析と呼ぶ。要件として、

- (4) 基本分析、感度分析の実施を可能にする

また、

- (5) 分析を容易に行えるよう「分析ツール」を作成する

最後に普及分析の期間について、

- (6) 「数十年の長期」を対象とした分析

とした。

最初の2点(対象製品)は調査開始当初から決定していたが、後の4点は自明ではなかった。後の4点を明確化することが、分析に適するモデルを選択・決定するのに必要であることが研究を進める中で明らかになってきた。4節で再度触れる。

3 既存モデルの調査

製品の普及分析のモデルは大きく2つに分類できる。

1つはロジスティック曲線モデル(Bassモデル)であり、も

う1つは消費者選好モデルである。以下で概要と特性を示す。また技術・生産革新のモデルとして良く取り上げられるのが、新技術の長期の価格低下の推移を記述する学習曲線モデルである。併せて記す。

3.1 Bassモデル^{[4]・[6]}

製品の普及曲線はS字型の形状を示すことが多い。図1に過去の代表的な製品の普及曲線を示す。Frank Bassは、元々物理学や生物学で用いられてきたロジスティック曲線モデルに購買行動の解釈を与えて普及モデルとして定式化した^[4]。

数学的な定式化は次のとおりである。 X_t を t 期の新規購入者数、 N を最終的な普及数(率)、 n_t を t 期の普及率(N に対する割合)とすると、

$$X_t = (p+r \cdot n_t) \cdot (1-n_t) \cdot N \quad (1)$$

で定式化される。 p が革新係数、 r が模倣係数と呼ばれる。図1では $N \cdot n_t$ が縦軸、 X_t が曲線の傾きに相当する。式(1)は

$$\frac{dn_t}{dt} = (p+r \cdot n_t) \cdot (1-n_t) \quad (2)$$

とも表せる。境界条件を $n_{t=0}=0$ とすると、 n_t は次式である^{[2][6]}。

$$n_t = \frac{1-e^{-(p+r)t}}{1+r/p \cdot e^{-(p+r)t}} \quad (3)$$

式(1)、(2)、(3)より、3つのパラメータ p, r, N が決定されれば、 X_t, n_t の時間推移が決まる。

環境製品の普及分析への応用では、1980年代に欧州のIIASA(国際応用システム研究所)が新エネルギー技術の普及予測に用いた。Bassモデルは普及の長期の時間推移を近似することができる一方、変化要因があったときの影響分析が困難である。例えば補助金政策によって製品価格が変化したときの普及への影響の分析や消費者選好の

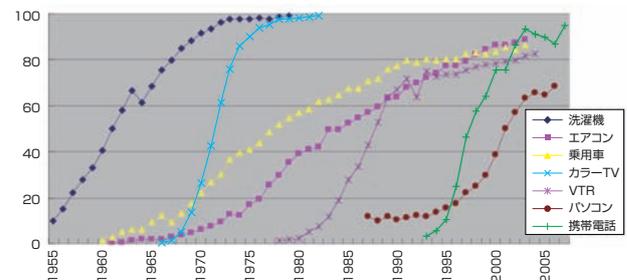


図1 過去の主な製品の普及推移曲線

縦軸は世帯普及率。出典：携帯電話以外は内閣府経済社会総合研究所「家計消費の動向-消費動向調査年報」、携帯電話は総務省「通信利用同行調査報告書世帯編」。

変化が普及に及ぼす影響の分析が困難である。これまで Bass モデルを拡張して価格変化や製品広告の影響をモデルに組み入れようとした試みもなされてきたが^{[5][6]}、十分な実績統計データがあることが前提であり、実際の適用は困難であった。

3.2 消費者選好モデル

消費者の製品選好モデルを構成して、それに基づき普及を分析するアプローチがある^{注1)}。消費者選好モデルの単純な形としては、消費者が最も経済的に合理的な技術・製品を選択するという仮定を置くものがある。また消費者の選好と意思決定をさらに精緻にモデル化するものもあり、精緻なモデル化には後述のコンジョイント分析が良く用いられる^{[7][8]}。こうしたアプローチは価格や性能等の変化が消費者選好に及ぼす影響を精緻に分析できるため、その変化が普及に及ぼす影響を分析できることが長所であるが、原則として時間項を持たないため、普及の時間推移、特に長期推移を分析するのが困難である。

3.3 学習曲線モデル

学習曲線モデルは工業製品のコスト低下の分析に用いられる^{[9][10]}。新しい製品は量産とともにコストが低下する傾向がある。学習曲線はその傾向を記述するモデルである。図2は太陽電池の生産量と価格の推移実績である。過去の実測からは「累積生産が2倍になると生産コストや生産に要する時間が一定割合だけ低下する」という経験則がある。低下の割合は半導体産業で15～30%、機械組立産業で5～20%とされる^[10]。

3.4 既存モデルの特性

以上のモデルの特性を表1にまとめる。

4 モデルの決定

4.1 モデル決定までの過程

前節で3つの既存モデルを示した。これらをいかに用いるか（あるいは用いないか）、いかに統合するかについては長い試行錯誤が必要であった。この過程で研究目標を明確化し、説得性の高さを基準にモデルを構成した。本研究

で依拠した説得性は3種ある。①結果の説得性、②論理の説得性、③類推の説得性、である。①はモデルの結果と現実が一致することによる説得性であり、本来最も説得力がある。しかし予測の場合現実の結果が得られないことが多く（例えば「20年後の普及」は現時点で分からない）、この基準は使えないことが多い。しかしモデルが普及実績を説明できない際に、反証、つまりモデルの非妥当性を知るのに使える。②はモデルの前提と論理が妥当であることによる説得性であり、③は現実と類似のケースをモデルが参照することによる説得性である。

これらを踏まえ本研究のモデル決定の過程を示すと図3のとおりである。当初消費者選好の把握が第一と考え、消費者選好モデルベースの普及モデルを構築した。しかし現実と符合する普及曲線を描けず（①が×）、そこでいくつかの補正を加えて現実と符合するものとしたが、結局は予測値に対する十分な説得性が得られなかった（②が×）。ここでモデルを再考した。再考の中で鍵になったのは、普及分析の対象が長期間（数十年）か短期間（数年）かという点であった。短期に対しては消費者選好モデルが、長期には Bass モデルが有効であることに気づいた。これは既存文献にも記載がなかった点である。本研究が長期を対象とすることを確認し、Bass モデルベースのモデルとした。Bass モデルでは類似製品の普及係数を参照することができる（3.1節）。これにより例えばハイブリッド車の普及には過去の他の自動車製品（AT車等）と同様に40年から50年を要することや、省エネ型家電の普及には関連製品と同程度の年数を要すること等を参照することができる。これは③の類推の説得性である。

次に Bass モデルで困難な感度分析を可能にするために、消費者選好モデルを組み入れることを図った。統合の方法は次節で示す。検討した統合方法の中で最善の説得性を持つと判断した（②が最良）。ただしこの統合方法はまだ議論の余地があると考えている。

4.2 モデルの定式化

本研究では Bass モデルの元の式（1）を修正して次のモデル式でモデルを定式化した。

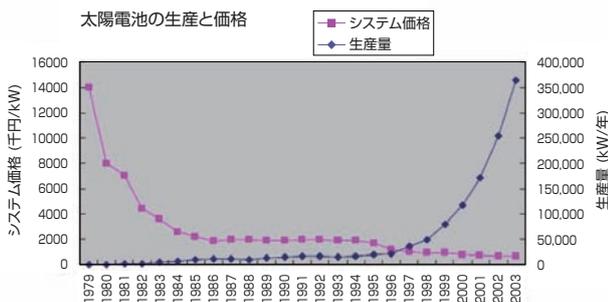


図2 太陽電池の生産量と価格の推移

表1 既存モデルの特性

モデル	特性
Bass モデル	普及推移を総体で見えるマクロモデル。長期の普及推移分析に適する。感度分析が困難。
消費者選好モデル	普及を消費者選好から見るミクロモデル。短期の普及推移分析と感度分析に適する。長期の普及分析は困難。
学習曲線モデル	工業製品のコスト低下の推移のモデル。

$$X_t = (p+r \cdot n_t) \cdot (1-n_t) \cdot N \cdot \frac{H_t}{H^0} \quad (4)$$

$$U_{ik} = \sum_j w_{ij} \cdot s_{kj} \quad (5)$$

式(1)に H_t/H^0 を乗じた形である。 H_t, H^0 は消費者選好モデルを反映して算出される値であり次の定義とする。消費者は環境製品(EC)と従来製品(TR)の2つの選択肢を持つとし、消費者(i)の環境製品と従来製品に対する選好の差($U_{i,EC} - U_{i,TR}$)の分布を求める。 U の定義は4.4節で示す。 H を従来製品よりも環境製品を選好する消費者の割合($U_{i,EC} - U_{i,TR} > 0$ を満たす消費者 i の割合)とする。現状の水準(s 値)で求めた H 値を H^0 、 t 期の H 値を H_t とする。 H 値は補助金や性能向上等により変化するので、式(4)は、環境製品を選好する消費者の割合 H_t が t 期に変化すると、その変化率分だけ t 期の新規購入者 X_t が変化するとしたものである。 H_t が t 全体を通して H^0 と同値であればBassモデル曲線と同一になる。

j は選好要素項目(属性)であり、 s_{kj} は製品 k の属性 j の値水準である。7章で示す省エネ型エアコンの例では、
 $k = \{ \text{通常型エアコン, 省エネ型エアコン} \}$
 $j = \{ \text{初期価格, 年間電気代, 環境イメージ, その他} \}$
 とした。設定の1例である。 w_{ij} は各要素の選好の重みであり、定量化にはコンジョイント分析を用いる。以上より U_{ik} を定量化し、それを元に式(4)の H 値を算出する。5.2節と7.2節で例を示す。

4.5 分析のフロー

図4に分析の流れを示す。最初に基本設定を行う。まず分析の開始年と終了年を設定する。次に対象製品の普及係数 p, r, N を設定する(4.3節の方法)。次に消費者選好モデルを設定する。式(5)を消費者選好モデルの形式と

4.3 普及係数の設定(式(4)の p, r, N)

分析対象製品に対する普及係数(p, r, N)の設定は、一般に製品の普及状況に応じて次のように設定する^[6]。

- (1) 製品がすでにある程度普及している場合：それまでの普及推移(X_t, n_t の実績値)から p, r, N 値を推定する。
- (2) 製品が市場に投入されたばかりであるか、まだ投入されていない場合：過去の類似製品の普及における p, r, N の値を適用する。

本研究では原則として(2)の方法で過去の製品の普及係数値を参照して設定する。

4.4 消費者選好モデルの設定(式(4)の H)

消費者層 i の製品 k に対する選好 U_{ik} は、次のように選好の要素 j の項の和で定義する。

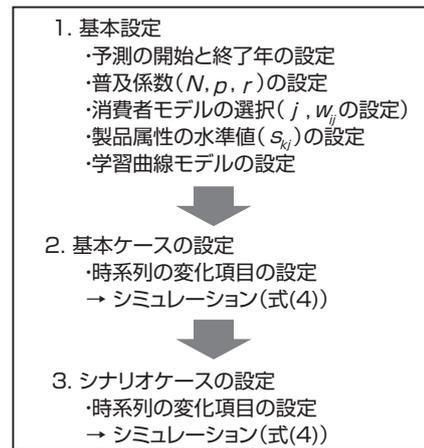


図4 分析の流れ

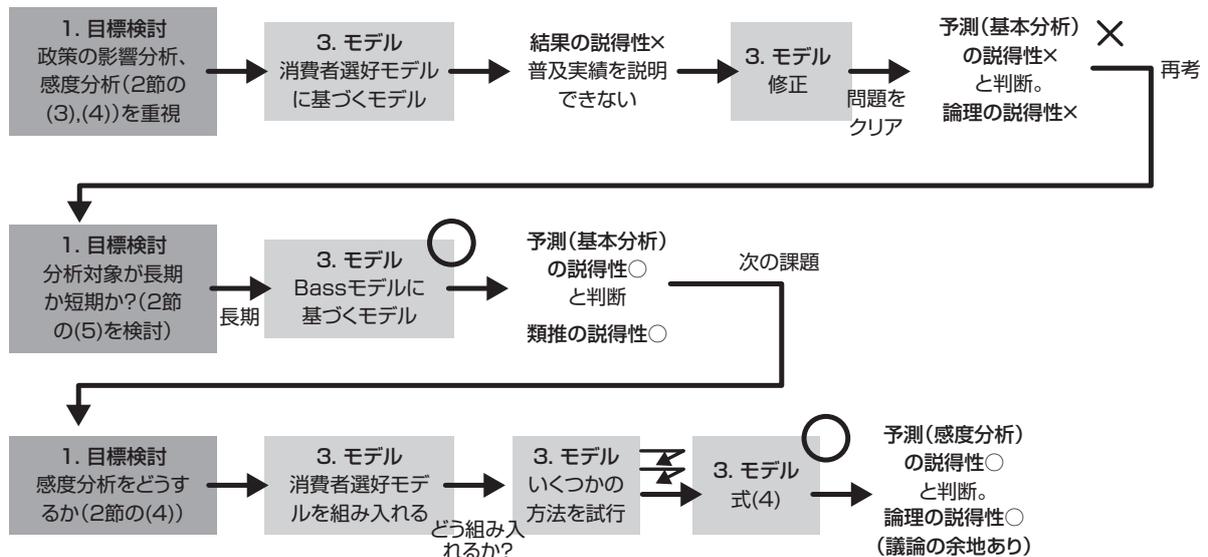


図3 モデル作成の過程

この結果(w_{ij}) と製品スペック(s_{kj}) から選好関数(式(5)の U_{ik}) を定式化し、式(4)の H 値を計算し、普及分析に用いた。7.2 節で具体的に示す。

6 ツールの作成

以上のモデルとデータに基づき分析を簡易に行うツールを作成した。図7がツール画面である。画面の左上部分で基本設定と Bass モデルの設定を行う。普及係数は数値を直接入力するか、選択肢の過去製品から選択するとその係数値が設定される。右部分で消費者選好モデルの設定とシナリオケースの設定を行う。左中央・左下に結果が出力される。

7 分析

上節で示した方法とツールを用いて、省エネ型エアコン、省エネ型冷蔵庫、ハイブリッド自動車、高効率給湯器、電球型蛍光灯、太陽光発電システムの普及分析を行った。本節ではその中で省エネ型エアコンの普及分析を示す。

エアコンは家庭の電力消費の中で最も多い約 25 % を消費している^{注2)}。エアコンは過去約 10 年でも省エネ性能が向上しており^{注3)}、省エネ型エアコンの普及は温暖化対策に効果を持つことが期待されている。

7.1 設定

分析では、従来型のエアコン (TAC) と省エネ型のエアコン (EAC) の 2 種類があると仮定し、消費者はいずれかを選択する。省エネ型エアコンが 2000 年から普及開始すると仮定し、分析期間を 2000 年から 2040 年とした。消費者の選好関数を以下の形とした。

$$U_{i,EAC} = W_i \cdot t_{EAC} \cdot t_{EAC}$$

$$U_{i,TAC} = W_i \cdot t_{TAC} \cdot t_{TAC} + W_i \cdot t_{EAC} \cdot t_{EAC} + W_i \cdot t_{EAC} \cdot t_{EAC} + W_i \cdot t_{TAC} \cdot t_{TAC} + W_i \cdot t_{EAC} \cdot t_{EAC} + W_i \cdot t_{TAC} \cdot t_{TAC}$$

(6)

省エネ型エアコンと従来型エアコンの製品スペックは、省エネルギーセンターの HP 掲載のモデルケースを参照して設定した^{注4)}。表3に示す。

省エネ型エアコンの最大普及数は家庭用エアコンの現在の普及数である約 1 億 3 千万台とした^{注5)}。革新係数と模倣係数はともに過去のエアコンの普及曲線から抽出した係数値(表2)を用いた。省エネ製品の価格は学習曲線モデル

表3 省エネ型エアコンの普及分析の設定

項目	設定値
予測開始年	2000年
予測終了年	2040年
最終普及数	1億3千万台(今日の普及数)
革新係数 (p)	0.0069(エアコンの p 値)
模倣係数 (r)	0.148(エアコンの r 値)
初期価格	従来製品: 84,000円 省エネ製品: 134,000円
学習曲線に影響する価格分	50,000円
学習曲線定数	0.1
年間電気代	従来製品: 27,000円/年 省エネ製品: 19,000円/年
環境イメージ	従来製品: 0 省エネ製品: 1
CO ₂ 削減効果	115 kg-CO ₂ /台・年

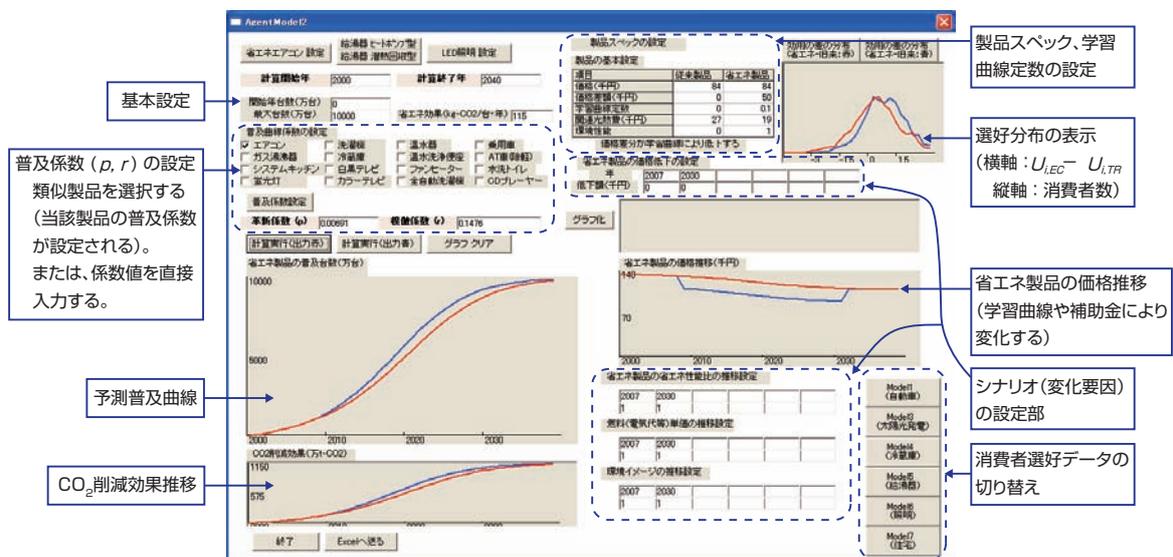


図7 普及分析ツール画面

により、省エネ製品と従来製品の価格差の5万円が学習曲線定数0.1で縮小して低下するとした。省エネ製品の普及1台あたりのCO₂削減効果は電気代差8,000円を換算して115 kg-CO₂/年とした。表3にまとめる。

シナリオケースとして、省エネ型エアコンに補助金を付与する3つのシナリオを設定した。1台あたり2万円の補助金を想定した。シナリオは、1つは2008年度から2030年度の間付与するものとし、基本ケースと比較して補助金の効果を検証する。第2と第3はそれぞれ補助金の付与期間を2008年度から2013年度、2015年度から2020年度とし、補助金付与の時期による効果を比較した。

7.2 結果

基本ケースと補助金付与ケースでの消費者選好の分布を図8に示す。基本ケースではサンプル消費者（コンジョイント分析対象者）1,112名のうち、従来型エアコンより省エネエアコンを選好する消費者（ $U_{i,EAC} - U_{i,TAC} > 0$ を満たす消費者*i*）が675名であった（ $H^0 = 675/1112 = 0.61$ ）。約6割の消費者が省エネエアコンを選好する（図8）。補助金で2万円製品価格が安くなったときの選好分布では $H_t = 751/1112 = 0.68$ であった（同図）。

これらのデータを利用して式(4)で省エネ型エアコンの普及推移をシミュレートした。結果を図9に示す。基本ケースで省エネ型製品が2020年に49%（6,400万台）、2030年に87%（1億1千万台）に達し、2040年にほぼ飽和する。普及によるCO₂削減効果は、2020年に740万t-CO₂、2040年に1,400万t-CO₂であった。補助金付与シナリオ（2008-2030）では、2020年、2030年に普及がそれぞれ57%（7,400万台）、92%（1億2千万台）に増加した。

補助金期間が2008-2013年と2015-2020年の場合では、2020年を過ぎるといずれの場合もほぼ同じ数の普及になった。しかし前者の方が普及の初期であるため、補助金を付与する台数は後者より少数で済む。付与数の合計は

前者は後者の約2/3であり、費用負担も2/3である。この結果は補助金の付与は普及の初期の方が効率的であることを示唆している。

8 結論と課題

本研究では温暖化対策に資する環境製品の社会受容モデルを構築した。本研究を発展させるとともに、本モデルを一つのコンポーネントにしたより大きな技術と社会の相互関係のモデル化の研究に発展させていくことを目指す。

本研究の課題としては1つは本研究で仮定したBassモデルと消費者選好モデルの統合の方法（式(4)）の妥当性の検証がある。統合法の妥当性を予測の精度という観点で、データに基づき検証する方法を検討する。第2は本研究の目標が長期の普及分析であったことから、本研究ではBassモデルをベースにしたモデルを構築し、普及係数（式(4)の*p, r, N*）の設定は過去の類似の製品の普及係数値を参照することとした。本研究では類似の製品を分析者が設定することとしたが、類似であることの基準があることが望ましい。係数値を参照する製品を選択する指針を検討したい。

今後、本モデルでは明示的に取り扱わなかった企業の意思決定や、政府の産業技術政策の効果、公的研究の社会影響評価^[1]等も併せて技術と社会の相互関係のモデルとして発展させていくことを目指す。

謝辞

本研究は経済産業省の平成18年度地球温暖化問題対策調査「温暖化対策の技術選択モデルに関する調査」で実施した内容に基づく。当調査研究で協働した東京大学藤本 淳教授、大阪大学 梅田 靖教授、システム技術研究所 榎屋治紀所長に謝意を表す。

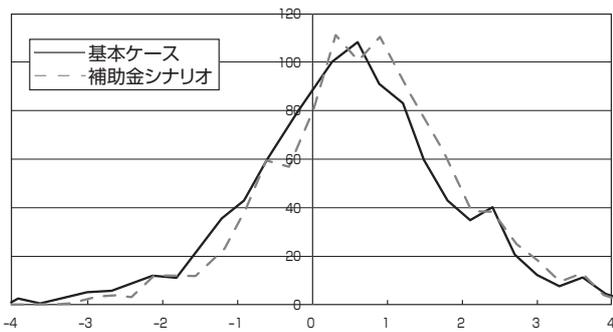


図8 消費者選好の分布
横軸： $U_{i,EAC} - U_{i,TAC}$ 縦軸：人数（計1,112名）

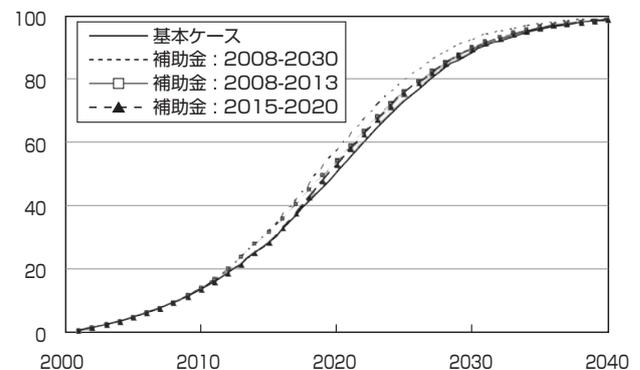


図9 省エネ型エアコンの普及分析結果
縦軸：%（100%は1億3千万台、そのときのCO₂削減効果は約1,500万t-CO₂（日本の総CO₂の1%強））

- 注1) 例としては森田他によるAIM End-use model 等。
 注2) 出典：資源エネルギー庁「平成16年度電力需給の概要」直接の出典は省エネルギーセンターHP (<http://www.eccj.or.jp/catalog/2006s/memo/3.html>)
 注3) 冷暖房兼用・壁掛け型・冷房能力2.8 kWクラス・省エネルギー型の代表機種の間年電力消費量の単純平均値は、1994年に412 kWh、2005年に227 kWhと半分近くに減った。出典：日本エネルギー経済研究所編「2006年版 エネルギー・経済統計要覧」p.101。
 注4) 省エネルギーセンターHP (<http://www.eccj.or.jp/catalog/2006s/memo/13.html>)
 注5) 普及台数は、100世帯あたりの保有台数255.5台 (2007年3月、出典：内閣府「消費動向調査」)と、日本の世帯数5,171万世帯 (2007年3月、出典：総務省「住民基本台帳」)とから約1億3000万台と推定した。

参考文献

[1] 吉川弘之, 内藤耕: 「産業科学技術」の哲学, 東京大学出版会, 東京 (2005).
 [2] 東大先端研: 平成18年度 温暖化対策の技術選択モデルに関する調査報告書, (2007).
 [3] 松本光崇, 近藤伸亮, 藤本淳, 梅田靖, 槌屋治紀, 増井慶次郎, 李賢映: クリーンエネルギー自動車の普及評価モデルの構築, エネルギー・資源, 29(3), 49-55 (2008).
 [4] F. M. Bass: A new product growth model for consumer durables, *Management Science*, 15(1), 215-227 (1969).
 [5] V. Mahajan, E. Muller and Y. Wind eds.: *New product diffusion models*, Kluwer Academic Publishers, New York (2000).
 [6] 片平秀貴: マーケティング・サイエンス, 東京大学出版会, 東京 (1987).
 [7] J. H. Roberts and G. L. Urban: Modeling multi attribute utility, risk and belief dynamics for new consumer durable brand choice, *Management Science*, 34(2), 167-185 (2000).
 [8] 長谷川貴彦, 吉田好邦, 松橋隆治: 消費者の選好を考慮した燃料電池自動車の普及可能性評価, エネルギー・資源, 27(2), 46-52 (2006).
 [9] R. Dolan and A. Jeuland: Experience curves and dynamic demand models: implications for optimal pricing strategies. *Journal of Marketing*, 45, 52-62 (1981).
 [10] 槌屋治紀, 小林紀: 学習曲線による燃料電池コストの分析, エネルギー・資源, 24(4), 57-64 (2003).
 [11] M. Matsumoto, S. Yokota, K. Naito and J. Itoh: Development of a calculation method estimating science-based innovation impact, *Proceedings of the R&D Management Conference 2008*, (2008).

執筆者略歴

松本 光崇 (まつもと みつたか)

1994年京都大学工学部卒業、1996年同修士課程修了。2002年東京工業大学博士課程修了、博士(学術)。NEC中央研究所勤務を経て、2006年産総研入所。修士課程までは人工知能分野で認知現象・言語現象のモデル化研究に従事。博士課程以降は社会現象のモデル化と応用の研究に従事。本論文ではモデル構築、ツール開発、普及分析を担当した。

近藤 伸亮 (こんどう しんすけ)

1999年東京大学大学院工学系研究科博士課程修了、博士(工学)。東京大学人工物工学研究センター、東京都立大学大学院工学研究科を経て、2005年産総研入所。環境調和設計、循環型生産システムな

どの研究に従事。本論文では消費者選好モデルの構築とコンジョイント分析を担当した。

査読者との議論

議論1 研究目標の明確化とモデルの検討過程の記述について
 質問・コメント (持丸 正明)

“構成学”としてみたとき、当該論文の特徴は、3つの技術(特にBassモデルと消費者選好モデルの2つ)を統合した点にあると理解しました。これは、アウフヘーベン型(図a)の構成学であると考えることができそうです。(小林: *Synthesiology*, 1(2), p.141 (2008))

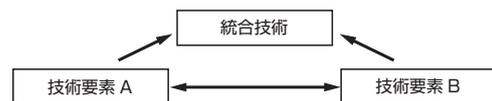
本研究論文は、この2つ(もしくは3つ)の技術を統合したという点のみならず、研究目標の設定とモデルの検討を繰り返した工程にも構成学としての情報があるように思います。*Synthesiology* 誌の趣旨は「社会的に意味のある問題を解決するための技術統合に関する知識体系のアーカイブ」にあります。第1節の最後の段落に書かれている工程は、構成学としての知識のアーカイブに値すると思います。これを、単に「何度も繰り返した」と書くだけでなく、どのような目標設定をして、それに応じてどのようなモデルを検討し、それを評価した結果として、なぜ、それを断念したか、また、どういう理由で次の目標設定をしたのかという「技術統合(構成)の検討過程」を具体的に記載していただきたいのです。すべての検討過程を記載するのは冗長であるかも知れませんが、重要な検討過程をピックアップして記述することで、「なぜ、これらのモデルを選び、組み合わせたか」「このモデルの組合せによる(当面の)技術的限界がどこにあるか」などを明らかにできると考えます。

その場合、論文の章立てをどのようにするかも難しいところです。第2節(目標の明確化)の末尾に書かれているとおり目標のうち明確に決定されていたものと自由度を持っていたものがあり、これらの自由度のある目標の設定が、第3節のモデルの統合といかに関わったのか、どのような検討過程と評価を経て、目標設定とモデルとが収斂したのかを、第4節(冒頭、もしくは、末尾)に述べて頂くというのではどうでしょうか。

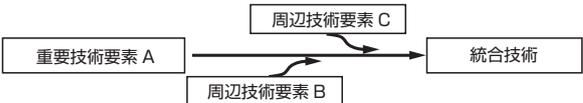
回答 (松本 光崇)

現象をモデル化する場合、特に自然現象よりも人間現象や社会現象をモデル化する場合には、現象の全側面をモデル化することはできませんから、常に「現象のどの側面に焦点を当てるのか(=目標設定)」を明確にしながらモデルを検討していくことが本質的に重要になると考えます。またその過程でモデルの良し悪しを判断する基準は最終的には「説得力」ということになるとと思いますが、自然現象の場合はモデルや理論がいかに正確に現象を説明し再現するかが説得力の拠り所になるのに対して、人間現象・社会現象の場合には実験が困難なため再現性を説得力にできないことが少なくありません。その場合に何をもってモデルの説得力とするかを考える必要があります。

1. アウフヘーベン型



2. ブレークスルー型



3. 戦略的選択型

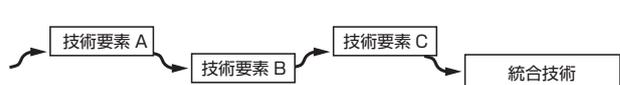


図 a 構成方法のタイプ

いただいたご指摘を踏まえ、本稿では4.1節を新たに設け、目標設定とモデル検討の過程を記述して(図3)、本研究で拠り所にした説得性についての記述を加えました。要点は、目標設定については「普及予測の対象が短期(数年スパン)か長期(数十年スパン)か」がモデル選択の判断基準になり、説得性については「類推の説得性」、この場合は、環境製品の普及速度を評価するのに、「なぜこの予測結果か?」と問われたときに、「過去の類似製品の普及速度もこれくらいであった」と回答する論理にしたという点を強調しました。

議論2 研究の目指す究極のゴール(夢)について

質問・コメント(持丸 正明)

産業技術が社会に受容されていく工程を研究対象とし、その計算論的なモデルを構築するのは意義のあることだと理解します。今回は具体的事例として経済産業省の調査事業を取り上げてありますが、そもそも、このような社会受容モデルが行き着く先(研究者の夢と社会的価値)を冒頭で示して下さい。たとえば、本論文の末尾に書かれてあるようなことです。通常の学術論文では、当該論文で解決する具体的課題の意義と困難性を冒頭に書き、末尾に今後の展望と展開を記載するのが一般的です。*Synthesiology* 誌では、あえて研究者の夢(当該論文では解決し切れていないが、将来実現したい社会像)を冒頭に描き出し、それを具体化していくステップとして、どうして当該論文のような課題設定を選んだかということを書くように推奨しております。それは、大きな夢をステップを踏んで実現していく考え方(知識体系)もまた「構成学」であると考えためです。

回答(松本 光崇)

夢として、技術と社会の相互関係をより深く理解したいという思いがあります。昨今企業では技術経営(MOT)やイノベーション経営といったことが、政策でも Science of Science Policy といったことが言われます。いずれも技術と社会の関係の理解の追求と言えます。そうした内容と密接に関連します。本研究はその中でマーケットに近い部分を扱ったものと言えます。またその夢を追求するアプローチとしては、研究テーマを一つ一つ実施しながらそれらがその大きな目標に向かって積み重なっていくという形になれば理想的であると考えています。目標につきまして本稿の冒頭に記述を加えました。

議論3 消費者選好モデルの時代依存性について

質問・コメント(持丸 正明)

消費者選好モデルの表現とそのパラメータ取得方法は有効なものであると理解しています。その上での質問です。このような消費者選好モデルは、時代依存性(社会的コンセンサスの影響)があるように思います。たとえば、「環境意識の高まり」というような社会的な時代変化が H_t の値に影響するのではないのでしょうか。

回答(松本 光崇)

ご指摘のとおり消費者選好の時代依存性は多分にあると考えます。回答1のモデル選択にもそのことが深く関係しました。ベースのモデルを消費者選好モデルから Bass モデルに変えたのも、消費者選

好が時代とともに変化するため前者をモデルのベースにするのは困難と判断したためでした。この研究では消費者選好の時代依存性についてはシナリオとして扱うことにしました。具体的には、例えば環境意識の高まりについては、消費者の製品の環境イメージに対する重要度(モデルでは式(6)の“ W_i 環境イメージ”)が高まるとして、本稿の補助金シナリオと同様の形で評価をしました。現実世界で消費者の環境意識がどの程度変化しているかという点は興味深いところです。

議論4 モデルの検証について

質問・コメント(持丸 正明)

実社会での人間集団的行動のモデルですから、その検証が難しいことはよく理解できます。まず、基本的な検証としてパラメータ感度の確認というのは、現時点でも可能な検証方法ではないでしょうか。統合モデルにおいて必要なパラメータを類似現象や実験データによって決定していますが、これらのうちどのパラメータが予測に強く影響するのか、パラメータの同定にどの程度の慎重さが必要となるのかは、シミュレーション解析できるかと思います。

もう1つの方策として、実社会ですでに実施した社会政策介入と技術普及の度合いが、本手法のモデルによってどの程度再現できるかを検証するという方法が考えられます。たとえば、カリフォルニア州で実施したハイブリッド車の道路優遇が、技術普及にどの程度影響したかを、近縁他州と比較しながら、本手法のモデルによって再現を試みるという方策です。実際に検証する(そのデータを得る)のは困難性を伴うようにも思いますが、その場合には、どういう困難性があるかを示していただけると助かります。

回答(松本 光崇)

検証については苦慮しているところです。過去の製品の普及推移と、物価統計から得た価格変化データを使って、製品価格と普及率変化の関係を統計的に抽出することも試みましたが、統計的に有意な結果が得られませんでした。パラメータ感度という点では、製品価格、ランニングコスト(電気代/ガソリン代)、環境性能向上、環境意識、の変化が製品普及に及ぼす影響を探索する作業をしました。相対的な感度は基本的にコンジョイント分析の結果に依存します。想定される変化範囲内で感度分析をした結果では、環境性能の向上が普及促進に有効であるという結果を得ました。絶対的な感度については、感覚的には本モデルは感度が鈍目なモデルであるかもしれません。結果(図9)でシナリオによってあまり変化がないことからもうかがえるかと思います。そこでご示唆をいただいたもう1つの方策です。カリフォルニア州の施策の検討は非常に興味深いものです。現在そうした政策評価の既存研究を調査しています。検証材料としては、例えば家庭用太陽光発電システムは自治体によって補助金金額が異なっていますので、その普及との関係性であるとか、また環境製品ではありませんが、自動車のETCなどは高速料金割引によって相当に強力な普及促進策を取っています。普及促進策の効果を見るには面白い事例です。検証についてはいくつかの観点から現在取り組んでいる課題です。

グリッドが実現するE-サイエンス

— 地球観測グリッド (GEO Grid) の設計と実装 —

田中 良夫

本稿では、新たな科学技術手法として注目されているE-サイエンスの実装例として、地球観測グリッド (Global Earth Observation Grid、GEO Grid) の情報処理基盤の設計と実装について報告する。GEO Gridは、グリッド技術を用いて複数の組織の有するデータや計算を統合し、仮想的な研究環境を構築して提供する。幅広い応用分野のコミュニティにグリッドを用いたE-サイエンスの実例を提示するとともに、多数のソフトウェアコンポーネントを組み合わせて大規模システムを構築する手法を示す。

キーワード: キーワード: グリッド、GEO Grid、E-サイエンス、ミドルウェア、システム構成論

How Grid enables E-Science?

– Design and implementation of the GEO Grid –

Yoshio Tanaka

In this paper, we report on the design and implementation of the GEO (Global Earth Observation) Grid IT infrastructure as an example of E-Science. Using Grid technologies, the GEO Grid provides an IT infrastructure that integrates wide varieties of data sets and computing services for the Earth science community. This paper presents an example of Grid-based E-Science and its application to a wide range of scientific communities. A methodology for system development based on many different software components is also discussed.

Keywords: Grid, GEO Grid, E-Science, middleware, software design

1 はじめに

近年、ネットワーク技術の進歩およびネットワーク基盤の普及にともない、高速ネットワークで接続された高性能計算機、データベース、大規模記憶装置、実験装置などの様々な資源を統括的に利用し、科学技術における新発見や融合研究領域などの新たな研究分野の創出を促進する科学技術研究手法であるE-サイエンスに関する研究が盛んに行われている。グリッド^[1]は、高速ネットワークで接続された様々な資源を安全に、動的に、かつ柔軟に組み合わせて利用する技術であり、E-サイエンスを支える基盤技術として期待されている。グリッドという用語が初めて使われてから約10年が経ち、グリッドの要素技術の研究開発は進み、グリッドは実証実験の段階から実用化に移る時期を迎えている。

一方、近年は地球温暖化などの環境問題、地震や洪水などの災害予測・対策、および天然資源探索などの地球観測に関する問題が重要になっている。これらの分野では、衛星データ、センサーデータや地質図などの、複数の組織が保持する複数のデータを参照し、データ解析やシミュ

レーションを実行する必要がある。データ所有機関のポリシーに従いつつ、複数のデータベースを検索して解析を行う作業は簡単ではなく、それを容易に実現するシステムの開発が期待されていた。これは、まさしくグリッドを用いて実現できるものであり、GEO (Global Earth Observation) Gridの研究開発が進められることとなった。

GEO Grid^{[2][4]}は、グリッド技術を用い、地球観測衛星データなどの大規模アーカイブおよびその高度処理を行い、分散環境下の各種観測データや地理情報システムデータと統合した処理・解析を、ユーザが手軽に扱えることを目指したシステムかつコンセプトであり、地球観測に関わる多種多様なデータや計算を研究コミュニティや事業者が安全・安心に利用できる環境の提供を目指している。産総研の有する地質情報と衛星情報との情報融合を進め、さらに広く地球観測情報との融合化を図り、また、国際連携を積極的に推進し、特にアジアにおける高度利用を重点的に展開する計画である。この際に国際的な標準動向に配慮し、情報システムとデータの国際的な相互利用性を確保することを目指している。

産業技術総合研究所 情報技術研究部門 〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1 中央第2
Information Technology Research Institute, AIST Tsukuba Central 2, Umezono 1-1-1, Tsukuba 305-8568, Japan E-mail: yoshio.tanaka@aist.go.jp

Received original manuscript October 16,2008, Revisions received December 21,2008, Accepted December 21,2008

GEO Grid はE-サイエンスの1例であるが、他にもタンパク質データベースなどバイオ情報データベースを用いて創薬を効率よく行うといったバイオ情報分野、大量の医療画像データベースを活用して癌診断を支援するシステムや医療データベースを利用して治療に役立てる次世代医療診断システムなどを開発する医療産業分野など、E-サイエンスにより技術開発を大幅に加速することができると期待される分野は多岐にわたる。

グリッドの要素技術の多くは実用に耐えるレベルに達しているが、実際にはいまだ広く利用される技術となっていないのは、以下の理由によると考える。

- ・もともと高性能計算の分野から派生したグリッドは、「スパコンを束ねて大規模計算を行う技術」というイメージが強いが、この計算グリッドにおいては、インターネットの性能がベストエフォート型であり性能が保証されないといった性能的な課題や、既存の並列プログラミング手法が耐障害性や計算機の同時確保などの問題によりグリッドには適していないこと、また、最適な計算資源を選び出すスケジューリングの技術がまだ研究段階の域を脱していないといった技術的課題など、解決すべき課題がある。
- ・「グリッドを使ったらこんなことができた」といった実例報告がまだ少なく、応用分野のコミュニティから見ると、依然として「使ってみたいがどう使うのか分からない」「どうせ使えないだろう」「何に使えるのか分からない」といった印象がある。

確かにグリッドの要素技術がすべて実用化のレベルに達しているというわけではないが、これまで開発されてきた技術を組み合わせれば多くの科学技術分野に対して新たな、かつ現実的な研究手法を提供できると考える。本研究の目的は、GEO Grid を題材としてグリッドを用いたE-サイエンス基盤を構築し、地球科学の研究者に研究環境を提供するとともに、他の応用分野も含めた幅広い科学技術分野における真の実用化に向けた課題を明確にし、その解決を図ることにある。これにより、科学技術分野におけるイノベーションの創出に寄与することを目指す。目標の達成を目指し、本研究ではGEO Gridの応用事例のシナリオに基づいて情報基盤に対する要求仕様を解析し、システムの設計と実装を行った。実際に衛星データを配信するシステムを構築し、地球科学の研究者にグリッドを用いた研究環境を提供しつつ、そこから得られる知見やフィードバックを通じて残された課題を明確にし、真の実用化に向けての道筋を立てる戦略をとった。

本稿では、GEO Grid を例にE-サイエンスにおけるセキュリティやシステム構築の実現方法および残された課題を明

確に述べる。本稿の主たる目的は、応用分野の読者に対してグリッドの実例を提示し、「何ができて何ができていないのか」を明確にすることにより、グリッドの理解を深め、グリッドの普及を図ることにある。また、情報技術分野の研究者を対象に、多数のソフトウェアコンポーネントを組み合わせる1つのシステムを構築する方法論について論じる。

GEO Grid はアプリケーション、コンテンツ、および情報基盤により構成されるが、本稿においては情報基盤の設計と実装について報告する。はじめに情報技術分野におけるシステム構築の方法論について論じる。また、GEO Grid 情報基盤に対する要求およびそれに基づく設計方針を示し、実装方法および実システムの構築を通じて得られた知見、検証結果を述べる。

2 情報基盤に対する要件

GEO Grid 情報基盤に対する要件を以下にまとめる。

(1) 大規模データの提供

衛星観測データはその運用期間を通じると数百テラバイトからペタバイト級の大きさになるが、そのような大規模データからユーザが求めるデータを迅速に見つけ出す、データサイズに対する高いスケーラビリティが要求される。

(2) 多様なデータの取扱い

衛星観測データ以外にも、気候に関する温度、湿度、雲量などの異なる物理量や異なる時空間分解能から得られたデータなど、異なる組織により提供され、様々な書式で蓄積されている多様なデータを取り扱う機能が要求される。

(3) データ提供ポリシーの尊重

データには利用に制限がかからないフリーなものも存在するが、一般的にはデータ所有者はデータアクセスの許可範囲や提供可能なデータ書式の制限など、利用許諾権とその条件を設定・変更する権限を有し、データ提供者の公開ポリシーに応じた柔軟なアクセス制御を実現する必要がある。

(4) データと計算の統合

データの形式変更や事前処理などの簡便な計算およびデータに基づいた火砕流到達範囲の計算などの大規模シミュレーションなどの計算とデータとの統合が必要である。

(5) 多様なコミュニティの支援

環境監視、災害監視、資源探査をはじめ、地球科学に関する多様なコミュニティや多数のプロジェクト研究を支援し、柔軟な構成変更および共通に利用できるデータ、計算およびツールやテンプレートになった処理フ

ローなどを共有する仕組みが要求される。

(6) 簡便性

ユーザ、データ提供者、プロジェクト管理者など、すべての参加者に対して「簡単に使える」ツール、インタフェースを提供する必要がある。また、数万規模を超えるユーザに対応しても、ユーザ管理を容易に行うことができるシステムである必要がある。

3 設計

前節において述べた要件に基づき、具体的な要素技術の選定および実装を行う前に、基本的な設計方針および利用モデルを定めた。本節では GEO Grid 情報基盤の設計方針および利用モデルについて述べる。

3.1 設計方針

要件 (2) にあるような多様なデータや計算を、要件 (3)、(4)、(5) にあるように、その提供ポリシーを尊重しつつ共有・統合し、研究コミュニティに対して提供するために、提供されるデータや計算を標準的なプロトコルやインタフェースを通じて提供される「サービス」として抽象化し、それらのサービスを動的に組み合わせることで利用環境を構築する、仮想組織 (Virtual Organization, VO) [5] の概念を GEO Grid 情報基盤の設計に導入する。世の中の多様なデータサービスや計算サービスの中で研究コミュニティが必要とするサービスが組み合わせられ、仮想的な 1 つの情報基盤として構成される研究環境が VO である。

3.2 利用モデル

図 1 に示す通り、GEO Grid 情報基盤においては、サー

ビス提供者、VO 管理者、エンドユーザ、および GEO Grid 管理者の 4 つの役割が存在する。サービス提供者はデータや計算の所有者であり、エンドユーザに対してそれらをサービスとして提供する。VO 管理者はコミュニティやプロジェクトの管理者と考えれば良く、VO の構築、VO に所属するユーザの管理、ユーザ向けポータルを構築を行なう。GEO Grid 管理者は利用可能なサービスが登録されているレジストリの管理およびそれへのアクセス制御を行なう。エンドユーザは基本的には 1 つ以上の VO に所属し、実際にサービスを利用することにより研究・調査を行う。

サービス提供者は提供するサービスの情報を GEO Grid 管理者が運用するレジストリに登録する。VO 管理者はどのようなデータ、計算が利用可能であるかレジストリを通して検索し、利用を希望するサービスがあればサービス提供者と個別に交渉する。サービス提供者は VO へのサービスの提供を許可する場合はその VO に対するアクセスを許可するべくシステムの設定を変更する。前述のようにアクセス制御はサービス提供者のポリシーに応じて VO 単位、ユーザ単位、あるいはフリーアクセスなどに設定可能である。

4 要素技術の選定と実装

前節で述べた設計方針に基づき、我々はグリッド技術を用いて GEO Grid 情報基盤を実装する。複数の組織間でサービスを連携させることを考えれば、標準に従ったセキュリティの実現が必須である。また、実装コストの削減および他システムとの相互利用性を高めるため、既存のツール、ソフトウェアを有効に利用することも重要である。本節では

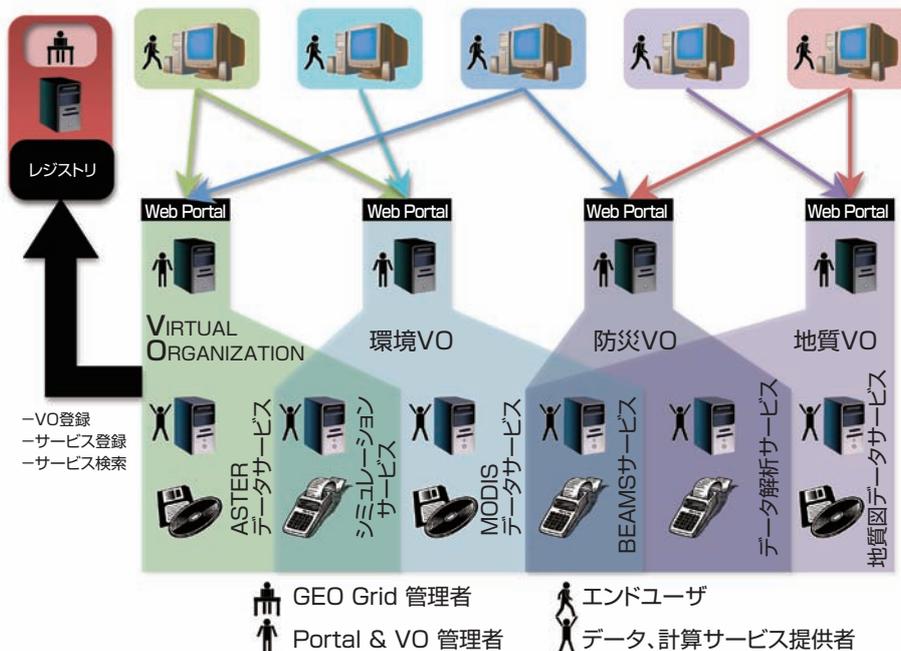


図 1 GEO Grid 情報基盤の利用モデル

GEO Grid 情報基盤の実装に際し、要素技術の選定およびその結合方法について述べる。

4.1 セキュリティ

GEO Grid 情報基盤のセキュリティは、Grid Security Infrastructure (GSI)^[6] および VO レベルの認可機構を基本とする。GSI は公開鍵暗号基盤 (Public Key Infrastructure, PKI) と X.509 証明書^[7] を用いたグリッドにおける標準的な認証基盤であり、プロキシ証明書を用いてシングルサインオンと権限委譲を実現する。GSI はグリッドセキュリティの標準技術となっており、他のシステムとの互換性や多くのグリッドミドルウェアが GSI に対応していることを考慮し、セキュリティには GSI を採用することとした。

仮想組織の構成およびそれに基づくアクセス制御については、Virtual Organization Membership Service (VOMS)^[8] を用いる。VOMS は欧州のプロジェクト Enabling Grid for E-Science in Europe (EGEE) において開発されたソフトウェアであり、VO に所属するメンバーを管理し、メンバーの登録、グループの作成、ユーザに対する役割の付加などを行なう。また、ユーザからの要求に応じて、ユーザのプロキシ証明書にユーザの VO における属性情報 (所属する VO 名、グループ名、与えられている役割など) を埋め込んだ VOMS プロキシ証明書を発行する。サービス提供者側では、ポリシーに応じた様々なアクセス制御が実現できる。

認証を受けたユーザは、通常サービス提供者側で UNIX アカウントにマップされ、UNIX アカウントの権限でアクセス制御が実現される。しかし、この方法ではすべてのユーザのエントリをサービス提供者側で管理しなければならず、サービス提供者に対する管理コストが高くなってしまふことや、ユーザ数に対してもスケラブルでないといった問題がある。そのため、VO レベルの認可機構を導入し、VO 単位での認可、VO においてユーザが所属するグループや与えられた権限に応じた認可などにより、サービス提供者の負担を軽減し、ユーザ数に対してスケラブルかつ柔軟なアクセス制御を実現する。

VO 単位のアクセス制御を実現するミドルウェアとしては、VOMS の他に PERMIS^[9] や CAS^[10] などが存在するが、プロキシ証明書に属性情報を埋め込む実装が 4.5 節で述べるアカウント管理システムとの親和性が良いこと、ユーザ管理を行うインタフェース等のツールが多々提供されていること、他のシステムに比べて広く普及しており、ソフトウェアの品質が高いことが期待されるなどの理由により VOMS を採用した。

4.2 データ・計算資源のサービス化

データや計算を標準的なプロトコルを通じて利用可能な

サービスとして抽象化し、提供するために、データや計算をラップし、サービスとして提供するミドルウェアを利用する。データのサービス化については、英国 UK-eScience およびその後継プロジェクトである Open middleware Initiative-UK で開発されている OGSA-DAI (Open Grid Service Architecture - Data Access Integration)^[11] を用い、計算のサービス化については米国 Globus Alliance により開発されている Globus Toolkit^[12] の Grid Resource Allocation Manager (GRAM) を用いる。これらはいずれも GSI および VOMS を用いた認証認可に対応している。計算をサービスとして構築する方法としては、Apache Axis 上での Java Service として実装する方法などもあるが、GSI との親和性の良さなどを考慮し、GRAM を用いて計算サービスを提供している。

OGSA-DAI、Globus Toolkit のいずれも GSI に対応したグリッドのミドルウェアとして広く普及しており、他に選択肢はないと判断できる。

衛星データや地図情報の検索結果については、Web Map Service (WMS)、Web Feature Service (WFS)、および Web Coverage Service (WCS) など、Open Geospatial Consortium (OGC)^[13] によって規定されている Web サービスによって提供されるのが一般的であるが、Apache についても VOMS を用いたアクセス制御を行うソフトウェア^[14] が提供されており、GEO Grid のセキュリティに対応可能である。

4.3 非均質データベース連携技術

OGSA-DAI を用いてデータベースをサービスとして抽象化し、適切な認証・認可に基づいて提供することが可能となるが、それだけでは非均質な複数のデータベースを統合することはできない。ユーザが必要とする機能は「複数の非均質データベースに対して一括問い合わせや分散結合を行うこと」であり、そのためのミドルウェアとして産総研で開発した Extended OGSA-DAI-DQP (Distributed Query Processing)^{[15][16]} を用いる。

4.4 大規模ストレージシステム

数百テラバイトからペタバイト級の大規模データを格納するストレージシステムについて検討する必要がある。既存のシステムでは衛星データはテープに格納されているものがほとんどであるが、データ検索の実時間性や近年のハードディスクの価格低下を考慮すると、テープデバイスの利用や商用 Storage Area Network (SAN) の利用は適切ではなく、数テラバイト程度のハードディスクを搭載したノードをネットワークで接続し、大規模ストレージを実現するクラスタファイルシステムを利用することとした。クラスタファイルシステムは、分散した複数のディスクを仮想的なファイルシステムとして提供する技術であり、商用のものやフリーソ

ソフトウェアなどいくつか存在するが、並列 IO による高いスループットおよび柔軟な複製配置による高信頼性機能を実現する、産総研で開発を行った Grid Data Farm (Gfarm)^[17]を採用した。

4.5 アカウント管理

GSIはPKIに基づく認証技術であり、ユーザは秘密鍵とユーザ証明書の管理を行う必要が生じる。しかし、証明書を取得するための特別なソフトウェアのインストールや、秘密鍵の管理を適切に行うことはユーザにとって負担であり、より簡便なインターフェースを提供することが求められていた。そこで我々は、サーバ側でユーザのアカウントおよび証明書を管理する仕組みを San Diego Supercomputer Center で開発された GAMA (Grid Account Management Architecture)^[18]を用いて実現した。GAMAはユーザに対してアカウントの作成依頼やログインなどの機能を、アカウント管理者に対してユーザ管理のための機能を、ポートレットとして提供するソフトウェアである。ユーザのアカウントはGAMAサーバによって管理され、GAMAサーバはユーザに証明書を発行するための認証局の機能も備えている。GAMAを用いることにより、ユーザは自分で秘密鍵や証明書を取得・管理することなく、ユーザ名とパスワードによる認証で GEO Grid 情報基盤にアクセスすることができる。

また、ユーザに対するポータルとして GridSphere^[19]を用いる。GridSphereはポータルアプリケーションで利用される「ポートレット」と呼ばれる小型のWebコンポーネントを作成するためのAPIとしてJava Community Processで標準化されているJSR168^[20]に基づいてポータルを構築

するためのフレームワークであり、GAMAサーバからプロキシ証明書を作成するための認証モジュールと、ポータル管理者用のポートレットが提供されている。オリジナルのGAMA認証モジュールはGAMAサーバからプロキシ証明書を取得するのみであり、VOMSとのインターフェースは提供されていないため、我々はGAMAサーバからプロキシ証明書を取得した後に、VOMSサーバに問い合わせしてVOMSプロキシ証明書を作成するようにGAMA認証モジュールを修正した。

4.6 要素技術の統合

本節で述べた各要素技術はいずれもGSIに基づくセキュリティに対応しており、アカウント管理システムにおいてVOMSに対するインターフェースを実装した以外、各ミドルウェアが提供するインターフェースを通じた統合が可能であった。

GEO Gridのように大規模なシステムの構築に際しては、すべてを自力で開発することは現実的ではなく、コアコンピタンスをしっかりとおさえつつ、利用可能な技術は積極的に利用して開発コストを軽減することが重要である。

5 実システムの構築

我々は提案アーキテクチャに基づき、衛星データの1つであるASTER (Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer)^[21]データを主要コンテンツとしたシステムを実装した(図2)。本システムは、ASTERデータ(Level 0データ)を保存、提供するGEO Grid クラスタおよびGRAMやGridFTPサーバを介してGEO Grid クラスタへのアクセスを提供するgatewayサーバ、ASTERデータのメタデータやカタログを提供す

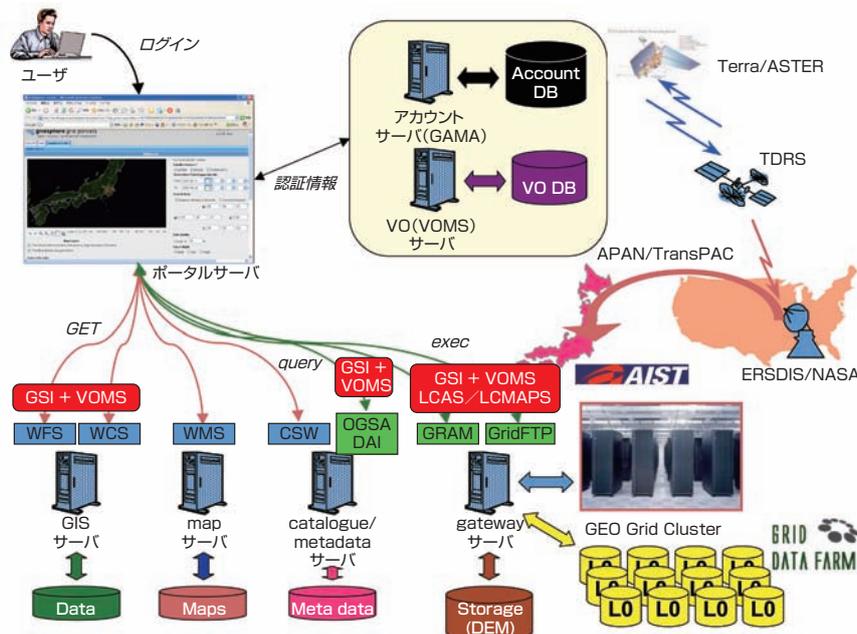


図2 GEO Grid システムの構成

るサーバ、画像データをWMSとして提供するMapサーバ、WFS、WCSなどの高次データを提供するGISサーバ、アカウント管理を行うGAMAサーバおよびVOMSサーバにより構成される。本システムにおいては、現在、環境VO、防災VO、情報VOの3つのVOが存在し、それぞれにおいて実際のユーザが利用する実運用を開始している。ASTERはNASAが打ち上げているTerraという衛星に搭載されたセンサーであるが、実際には2台のセンサーが備えられており、それらの観測結果をもとに地上の標高モデルを求めることができる。ASTERデータはTerraの打ち上げ後ERSDAC (Earth Remote Sensing Data Analysis Center, (財) 資源・環境観測解析センター) が管理するテープライブラリに保管され、有償データとしてユーザに提供されてきたが、昨年来産総研にもデータが提供され、産総研においては、ASTERデータはテープライブラリではなくクラスタファイルシステムに保存されている。利用するクラスタ(GEO Grid クラスタ)はGiga-bit Ethernetで接続される36台のdual Xeon ノードにより構成され、全体で264 TBの容量を備える。クラスタファイルシステムとしてはGfarm v1.4を用いている。現時点で約140 TBの全ASTERデータが格納され、日々NASAから約70~100 GBのデータが転送され、GEO Grid クラスタに保存されている。メタデータの管理にはPostgreSQLに対してGISの拡張を行なっているPostGISを用い、メタデータはOGSA-DAIによりデータサービスとして提供される。また、データ処理にはGiga-bit Ethernetで結合された256ノードのdual Xeonにより構成されるF32クラスタを用いている。GEO Grid クラスタとF32クラスタは10 Giga-bit Ethernetで接続されている。

また、産総研のASTERデータおよびMODIS (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer)^[22]データと、台湾のNSPO (National Space Organization) が保持するFormosat2のデータを同時に検索するDatabase連携アプリケーション「DB連携アプリケーション」を構築して実際に複数の組織に管理される複数のデータベースを統合するGEO Gridの実証実験を行った。「データの検索」「数値地形モデルへの変換」および「結果の転送」のそれぞれが個別のサービスとして実装され、それらがGSIおよびVOMSによる認証認可をベースに連携することにより上位のサービスとして提供され、統合されてVOを構成し、アプリケーションコミュニティに対して研究環境が提供されることを確認した。

また、この他にもASTERデータとフリーなセンサーデータを連携させるアプリケーションや、検索結果をWFSで返すアプリケーションなどを通じ、提案したセキュリティアーキテクチャがアプリケーションおよびサービス提供者の要求

に応じた適切なアクセス制御を実現することが確認された。

6 考察

ここでは、今回のシステム構築および実運用を通じて得られた知見、考察を記す。

各ソフトウェアコンポーネントの予備評価およびASTER Gridシステムの開発・テストを通じ、我々はGEO Grid情報基盤の設計および実装の妥当性を検証することができた。GAMAとVOMSを用いたセキュリティフレームワークにより、ユーザに対しては簡便なインタフェースを提供し、サービス提供者に対してはポリシーに応じた柔軟なアクセス制御が実現可能であることが確認された。また、VOMSを用いたVOレベルでのアクセス制御により、ユーザ数に対してスケーラブルなセキュリティ機構が実現される。GAMA、VOMS、OGSA-DAI、Globus Toolkitなど、既存のソフトウェアおよびツール群を利用することにより、少ない開発コストで実システムを構築することができた。アプリケーション用ポートレット以外に、情報基盤側で行なった開発はVOMSとGAMAのインタフェースをGridSphereに組み込む部分のみであった。すべての要素技術が標準プロトコルおよび標準インタフェースに基づいて設計・実装されることにより、多数の独立な要素技術を連携させて上位のシステムを容易に構築することができた。

グリッドの実システムの構築においては、欧州のEGEEで開発されているgLite Grid Middleware^[23]を用いた高エネルギー物理学における大規模加速器実験のデータ解析システムや、日本の超高速コンピュータ網形成プロジェクトで開発されたNAREGIミドルウェア^[24]を用いて大学・研究機関上に大規模研究グリッドを構築するCyber Science Infrastructure計画など、巨大なミドルウェアパッケージを開発・利用するものが多い。米国Earth System Grid^[25]やGEON^[26]などはGEO Gridと同様に地球観測データを統合した研究環境の構築を目指している。いずれも一部でグリッドセキュリティに基づく認証・認可を利用しているが、ほとんどはWebサービスに基づく非グリッド技術により構成される。GEO Gridのように様々なグリッドミドルウェアを用いてサービスとして提供されるデータや計算を組み合わせVOを構成し、グリッドセキュリティに基づく柔軟なアクセス制御に基づく研究環境を構築する例は独自性が高く、本稿で述べたようにすべてが標準的なセキュリティおよびプロトコルに従って実装されていればグリッドミドルウェアを連携させ、容易に大規模な実システムを構築できることを示した本研究の意義は大きい。

今回のシステム構築を通じ、今回利用した要素技術については問題なく利用できることが確認された。今後真の実

用化に向けて解決すべき課題としては、以下の5つがあげられる。

(1) ツールキットの作成

今回利用したグリッドミドルウェアの多くは、インストールおよび設定が煩雑であり、誰でも容易にインストール、利用できるというレベルにない。ユーザに対しては、ユーザ名とパスワードのみで利用可能な簡便なインタフェースを提供しているが、今後様々な応用分野への展開を図るには、サービス提供者やVO管理者などすべての参加者に対して、必要なミドルウェアセットを容易にインストール、設計できるツールキットとして提供する必要がある。

(2) より柔軟な認証機能の実現

既存の応用コミュニティには、例えば一部のバイオ情報分野におけるOpenIDの利用など、すでに独自の認証機能を採用しているものがある。既存の研究環境からE-サイエンス環境へのシームレスな移行を実現するために、OpenIDやShibboleth、Kerberos認証などの、すでに利用されている認証機構からグリッドの認証情報を生成する、より柔軟な認証機能を実現すること必要である。

(3) ワークフローの構築

応用研究者の多くは、数多くのデータに対してある決まった手続き（処理の流れ）を適用する。地震発生時の地震振動解析や液化化予測、水位が上昇したときの洪水予測など、迅速に必要なデータを取得し、多数のシミュレーションを実行するには、それらの手続きをワークフローとして構築し、利用できることが望ましい。グリッドにおいてはワークフローの先行研究も多々行われているが、GEO Gridでもワークフローの導入、構築が必要である。

(4) 高速化

大規模な画像データの処理には大規模な計算資源が必要なものが多いが、既存のソフトウェアでは画像処理に数分から数十分かかってしまう。インタラクティブなデータ配信を考えると、画像生成はせいぜい1~2分程度で終わることが望ましい。近年CELL/B.E.TMのように画像処理に適したマルチコアアーキテクチャが利用されるようになってきているが、GEO Gridにおいても最新のアーキテクチャを活用した画像処理やシミュレーションの高速化が期待される。

(5) メタスケジューラの開発

今回構築したシステムでは、シミュレーションや画像処理を行う計算サービスは単一のサイトから提供されているが、今後同一のサービスが複数のサイトから提供

されるようになった場合には、どこにどういったサービスやデータが存在するかを管理するレジストリ、サービスを提供する計算サーバの付加状況を監視するモニタリングシステム、それらの情報をもとに「最も良いと思われる」サービスを選択するメタスケジューラの開発が必要である。

これら5つの課題すべてについて研究を進めているが、(1) ~ (3) については1~2年程度を目途に実現できると考えている。(4) については個別のソフトウェアごとに高速化を行う必要があることと、商用ソフトウェアの場合はライセンスの問題でソースプログラムが提供されない場合が多いといった問題があるが、すでにCELL/B.E.TM上での画像処理ソフトウェアの高速化に関する予備評価を行い、実現可能性の目途は立てている。(5) に関してはグリッドが抱える最大の課題と考えている。グリッドの概念である「コンピュータをネットワークに接続すれば、どこかの資源を利用するかは気にせずにサービスを享受できる」世界を実現するためには、このメタスケジューラの機能が必須となるが、グリッドを構成する資源群（ネットワークや計算サーバなど）の構成や有用性が動的に変化し、「最適」の判断が計算の性質（通信量と計算量の比率など）に依存する複雑な環境上で「最適」な資源を選択することは非常に困難である。我々はGEO Gridのシナリオとしてユーザに影響を与えない範囲で制約を設けることにより、この課題を解決すべく研究を進めている。

7 研究開発の進め方

本研究は、融合領域研究として、産総研地質情報研究部門と、地質調査情報センター、環境管理技術研究部門及びグリッド研究センター（現在は情報技術研究部門）との間でニーズとシーズを持ち寄り、システムの実装方法の検討を行った。グリッド研究センターは、地質調査情報センターからグリッド研究センターへの人事異動や、防災科学研究所、宇宙航空研究開発機構、国立環境研究所など応用分野の研究者を採用するなどして、情報分野の研究者と応用分野の研究者が密に議論することによってGEO Gridの研究開発を推進する体制を強化した。

定期的にGEO Grid運営会議を開催し、GEO Gridの方針や対外機関との関係づけ、懸案事項の洗い出しおよび対処などについて議論を行うとともに、進捗管理を行った。また、グリッド研究センターだけでも、応用系と情報系を合わせると総勢20名程度となる大規模プロジェクトを円滑に推進するため、応用系と情報系のそれぞれが定期的に会議を開き、進捗管理や問題点の洗い出しおよび解決に向けた議論を行い、研究チームメンバー間での意識の共有に

努めた。両分野の研究者が同じ場所において、会議の他にも頻繁に議論、ブレイクアウトミーティングができる環境にあったことも重要であった。

また、今回は産総研だけではなく海外機関が開発したミドルウェアを多数利用した。基本的には各ミドルウェアが標準プロトコルやインタフェースを採用して実装されているが、実際にテストをするとミドルウェアの実装不備や機能不足による問題が生じたものもあった。我々は国際共同研究、グリッドの標準化団体である Open Grid Forum^[27] や国際会議等の場を通じて各ミドルウェアの開発機関と密な協力態勢をとっているため、これらの問題が出た時に迅速に対応してもらうことができた。また、こちらの要求仕様を開発元に伝え、次期バージョンに新機能を組み込んでもらったり、具体的な実装方法について助言をもらうこともできた。グリッドのシステムは非常に多くのミドルウェアを連携させて実現する場合が多く、そのすべてを自分たちで実装するのは開発コスト的にも適切ではなく、自分たちのコアコンピタンスを押しえつつ、海外機関と協力して研究開発を進める体制づくりおよび日頃の活動が重要である。

8 まとめと今後の課題

本稿では GEO Grid 情報基盤の設計と実装、および実システムの運用を通じて得られた知見について報告した。E サイエンスにおける VO の考え方やアカウント管理、認証・認可の実現方法を明確に論じた。GEO Grid 情報基盤においては、計算およびデータリソースはすべて標準的なプロトコルにより利用可能なサービスとして提供される。研究コミュニティは VO を構成し、必要なサービスを組み合わせる VO 内のユーザに提供する。VOMS 属性を用いた認可機構により、サービス提供者のポリシーに応じた柔軟なアクセス制御および VO 単位での認可による、ユーザ数に対してスケーラブルなセキュリティ基盤が実現される。

6 章で述べた課題を今後解決すべく研究開発を進めつつ、運用を通じてシステムの評価およびブラッシュアップを進めていく予定である。GEO Grid のシステム開発を開始して約 1 年半が経過し、プロトタイプを超える実用に供することができるシステムを構築することができた。しかし、今後残る課題を解決し、真の実用化に至るにはまだ 2 ～ 3 年の期間を見て研究開発を進めているところである。

謝辞

本研究は、GEO Grid プロジェクトにおいて応用分野の研究者と情報分野の研究者がシステム要件や解決方法などについて活発に意見交換を行いながら進められた。GEO Grid プロジェクトに参画する全研究者に感謝の意を表す

る。UK e-Science Centre の Neil Chue Hong 博士および OMII Europe の Valerio Venturi 博士には、OGSA-DAI についてご助言等頂いた。産業技術総合研究所 Steven Lynden 博士には、OGSA-DQP について有益な議論をして頂いた。また、Dutch National Institute for Nuclear and High Energy Physics の David Groep 博士には、VOMS、LCAS/LCMAPS、Gridsite などについて様々なご助言を頂いた。ここに感謝の意を表する。

参考文献

- [1] I. Foster and C. Kesselman Ed.: *The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure*, 2nd edition, Morgan Kaufmann Publishers (2004).
- [2] S.Sekiguchi, Y. Tanaka, I. Kojima, N. Yamamoto, S. Yokoyama, Y. Tanimura, R. Nakamura, K. Iwao and S. Tsuchida: Design principle and IT overview of GEO Grid, *IEEE Systems Journal*, 2 (3), 374-389 (2008).
- [3] 田中良夫, 山本直孝, 関口智嗣: 地球観測グリッドにおけるセキュリティ基盤の設計と実装, *情報処理学会論文誌コンピュータシステム*, 1 (2), 169-179 (2008).
- [4] 田中良夫, 小島功, 山本直孝, 横山昌平, 谷村勇輔, 関口智嗣: GEO Grid: 地球観測グリッドの設計と実装, *情報処理学会HPC研究会研究報告*, 2007 (88), 37-42 (2007).
- [5] I. Foster, C. Kesselman, J. Nick and S. Tuecke: The physiology of the Grid, *Grid Computing: Making the Global Infrastructure a Reality*, Wiley, 217-249 (2003).
- [6] B. Sundaram: Introducing GT4 Security, *IBM developer works* (2005).
- [7] [ITU-T Recommendation X.509]: Information technology - Open systems interconnection - The directory: Authentication framework, 08/05, (2005). <http://www.itu.int/rec/T-REC-X.509-200508-I>
- [8] R. Alfieri, R. Cecchini, V. Ciaschini, L. dell' Agnello, Á. Frohner, K. Lórentey and F. Spataro: From gridmapfile to VOMS: Managing authorization in a Grid environment, *Future Generation Computer Systems*, 21 (4), 549-558 (2005).
- [9] PERMIS Project, <http://sec.cs.kent.ac.uk/permis/>
- [10] Community authorization system, <http://www.globus.org/security/CAS/>
- [11] OGSA-DAI project, <http://www.ogsdai.org.uk/>
- [12] I. Foster and C. Kesselman: Globus: A metacomputing infrastructure toolkit, *Supercomputing Applications and High Performance Computing*, 11 (2), 115-128 (1997).
- [13] Open geospatial consortium (OGC), <http://www.opengeospatial.org/>
- [14] A. McNab: The GridSite Web/Grid security system, *Software: Practice and Experience*, 35(9), 827-834 (2005).
- [15] S. Lynden, A. Mukherjee, A.C. Hume, Alvaro A.A. Fernandes, N.W. Paton, R. Sakellariou and P. Watson: The design and implementation of OGSA-DQP: A service-based distributed query processor, *Future Generation Computing System*, Elsevier Science (to appear).
- [16] S. Mirza and I. Kojima: OGSA-WebDB: Enabling web database access and integration in the Grid, *in Proc. 1st SIIK workshop*, 215-224 (2006).
- [17] O. Tabebe, Y. Morita, S. Matsuoka, N. Soda and S. Sekiguchi: Grid datafarm architecture for petascale data

- intensive computing, in *Proc. International Symposium on Cluster Computing and the Grid*, 102-110 (2002).
- [18] K. Bhatia, S. Chandra, and K. Mueller: GAMA: Grid account management architecture, in *Proc. IEEE Int. Conf. EScience Grid Computing*, 413-420, (2005).
- [19] GeidSphere,
<http://www.gridisphere.org/>
- [20] JSR168,
<http://jcp.org/en/jsr/detail?id=168>.
- [21] Y. Yamaguchi, B. A. Kahle, M. Pniel, H. Tsu and T. Kawakami: Overview of advanced spaceborne thermal emission and reflection radiometer (ASTER), *IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing*, 36 (4), 1062-1071 (1998).
- [21] C. Justice, E. Vermote, J.R.G. Townshend, R. Defries, D.P. Roy, D.K. Hall, V.V. Salomonson, J. Privette, G. Riggs, A. Strahler, W. Lucht, R. Myneni, Y. Kniazihhin, S. Running, R. Nemani, Z. Wan, A. Huete, W. van Leeuwen and R. Wolfe: The moderate resolution imaging spectroradiometer (MODIS): Land remote sensing for global change research, *IEEE Trans. on Geoscience and Remote Sensing*, 36 (4), 1228-1249 (1998).
- [23] F. Gagliardi, B. Jones, F. Grey, M. Begin and M. Heikkurinen: Building an infrastructure for scientific Grid computing: Status and goals of the EGEE project, *Philosophical Transactions: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 363 (1833), 1729-1742 (2005).
- [24] National Research Grid Initiative,
<http://www.naregi.org/>
- [25] Earth System Grid,
<http://www.earthsystemgrid.org/>.
- [26] GEON,
<http://www.geogrid.org/>.
- [27] Open Grid Forum,
<http://www.ogf.org/>.

執筆者略歴

田中 良夫 (たなか よしお)

1995年慶應義塾大学後期博士課程単位取得退学。博士(工学)。1996年4月技術研究組合新情報処理開発機構。2000年4月工業技術院電子技術総合研究所。2001年4月改組により産業技術総合研究所。2002年1月同所グリッド研究センター。2008年4月同所情報技術研究部門主幹研究員。グリッドプログラミングおよびグリッドセキュリティに興味を持つ。アジア太平洋グリッドポリシー策定委員会議長、Open Grid Forum Certificate Operations Working Group 共同議長。

査読者との議論

議論1 論文の読者について

質問・コメント (大蒔 和仁)

誰に(どんな種類の人に)読ませたいのか、論文の目的が多少あまい感じがします。すでに世の中にはすぐれた機能のソフトがPDS的に落ちていたのでそれを拾ってきて組み合わせるだけでもかなりのことができ、それにコアコンピタンスを示すだけでかなりの高機能が実現できる時代である、といて多少広めのソフトウェア技術者相手に安心感を与えサンプルとしてグリッド技術を示したいのか、あるいは、応用範囲を、今は地質だが、天文や地球環境へもっと広がるはず、と訴えたいのか、ソフトウェアあるいはデータを「サービス」として前面に押し出すべき時代に入っていると主張したいのか、あるいはそれから全部なのか、「はじめに」とか「考察と結論」とかで長い文書を使って目的をもっと明確に述べてはどうか、と思います。

回答 (田中 良夫)

本論文の主題は、GEO Gridを例としてグリッド技術を用いたE-サイエンス基盤の構築例を科学技術の広い分野の研究者に対して示すことにより、グリッド技術およびそれを用いたE-サイエンス基盤の普及を促進し、科学技術におけるイノベーションの創出に寄与することにあります。また、情報技術に従事する研究者に対して、要素技術が標準的なプロトコルやAPIに従って実装されていれば、大規模なシステムを容易に実現できることを実際に示すとともに、各要素技術の開発に際しては標準化や海外機関との連携が重要であること、大規模なシステムの構築に際してはすべてを自力で開発することは現実的ではなく、コアコンピタンスをしっかりとおさえつつ、利用可能な技術は積極的に利用して開発コストを軽減することが重要であることを主張したいと考えています。

これらの主題が明確になるよう、1章に記述を追記しました。また、アブストラクトも修正しました。

議論2 「分散計算」について

質問・コメント (大蒔 和仁)

グリッド技術あるいは高速計算機をつないで、という発想は貴重で重要だと思いますが、素人から見てグリッドという概念が提唱され始めた10年ぐらい前と比べて身近になったような気があまりしていません。いやいや、それは査読者の認識不足で、当時とは雲泥の差で発展していてすぐ手が届くところまできている、というような書き方はできるものなのでしょうか。

回答 (田中 良夫)

グリッドの多くの要素技術がマチュアになっている反面、依然として身近になっていない印象を与えるのは、特に計算グリッドにおいていくつか技術的な課題が残っていること、グリッドを用いた実例、サクセスストーリーがあまり報告されていないことに原因があると考えています。しかし、使える技術を使うだけでもかなりのことができるレベルに達しており、実際にGEO Gridは既存の技術を組み合わせるだけで地球科学の研究者のかなりの要求に応えることができます。この点について、1章に記述を追加しました。この記述に続いて、議論1への回答に述べた、本研究の目的が続くようになっています。

議論3 セキュリティについて

質問・コメント (大蒔 和仁)

VO的発想で問題となるのは今も昔もセキュリティの問題であると思います。それが唯一残っている問題で、それが解決されれば曲がりなりにも動くのでしょうか。あるいは何か別のファクタが残っているのでしょうか。あるいはデジュール標準を取ると解決されるのでしょうか。特にグリッド技術の「問題点」の言及が欲しいと思います。

回答 (田中 良夫)

セキュリティについては多くの科学技術分野に対しては実用に耐えるレベルの技術が確立されていると考えています。グリッド技術の問題点は、「グリッドミドルウェアの多くが容易にインストール、設定できないこと」、「証明書の取り扱いなど、ユーザにとって使い勝手が良くないこと」、「メタスケジューラというカギとなる技術が依然として研究段階にあること」の3つが要因であると考えています。これらの問題点については、6章で「解決すべき課題」として詳しい説明を追記しました。

議論4 戦略やシナリオについて

質問・コメント (小林 直人)

グリッド技術の応用としてのGEO Gridと言うのは、地球温暖化防止、省資源、災害予測・防止、有効土地利用など持続的発展可能な社会をめざす21世紀の多くの課題解決のために、非常に有効な技術だと思います。

それを踏まえた上で、シンセシオロジーの論文では、研究目標と社会とのつながりやシナリオの重要性を強調しています。特に本論文では大きな目標概念は分かりますが具体的な研究目標が明確ではないように思います。最終的には、グリッドはグリッドと言う技術を意識せずに、多数の場所に分散している CPU やデータベース等をあたかも自分のコンピュータの内部やごく周辺にあるものとして、それを自在に駆使して情報処理を行うことにその真髄の1つがある、と理解しています。そうであるとする本研究の GEO Grid では最終目標がどこにあり、本論文ではその中でその大きな目標のどのあたりまでを狙ったのかと言う記述があるとよいと思います。またそのために取った戦略やシナリオについても是非記述を期待します。

回答 (田中 良夫)

ご指摘の通り、GEO Grid の最終目標と現状での達成度が明確ではありませんでしたので、1章に最終目標を以下の通り明記いたしました。「本研究の目的は、GEO Grid を題材としてグリッドを用いたE-サイエンス基盤を構築し、地球科学の研究者に研究環境を提供するとともに、他の応用分野も含めた幅広い科学技術分野における真の実用化に向けた課題を明確にし、その解決をはかることにある。これにより、科学技術分野におけるイノベーションの創出に寄与することを目指す。」

また、今回のシステム構築を通じて明らかにした解決すべき課題を6章で述べるとともに、8章に記述を追加いたしました。最終目標の達成に向けての戦略については、1章に記述を追加しました。

議論5 要素技術の構成方法および専門用語の説明について 質問・コメント (小林 直人)

個々の要素技術の内容とその選択理由は非常に分かりやすく書かれています。ただし、専門用語が多いので、本文中で分かりやすく説明することが必要です。一方、課題は要素技術の構成方法だと思います。要素技術は、標準プロトコルおよび標準インターフェースに基づいて設計・実装と述べられていますが、その構成におけるユニーク性・革新性・優位性が何なのかを是非記述してください。もちろんシステム構成の容易さと言う点もユニーク性、優位性の一つであると思います。また、この構成方法により確保されたセキュリティやサービスの質が GEO Grid から見て十分なものなのか、まだ多くの改良が必要なのかについても言及していただけるとよいと思います。

回答 (田中 良夫)

要素技術が標準的なプロトコルや API に従って実装されていれば、大規模なシステムを容易に実現できることを実際に示すとともに、各要素技術の開発に際しては標準化や海外機関との連携が重要であることと、大規模なシステムの構築に際してはすべてを自力で開発することは現実的ではなく、コアコンピタンスをしっかりとおさえつつ、利用可能な技術は積極的に利用して開発コストを軽減することが重要であることの主張が本研究の優位性、重要性および本論文の主題と考えています。6章にこれらのことは述べてありますが、これとは別に1章にも記述を追加しました。

ユビキタスエネルギーデバイス開発のための材料基礎解析

— リチウムイオン電池正極材料、燃料電池電極、金触媒での展開 —

香山 正憲^{*1}、秋田 知樹¹、田中 真悟¹、前田 泰¹、田中 孝治¹、岡崎 一行²、吉川 純³

ユビキタスエネルギーデバイスの鍵を握る機能材料開発では、材料基礎解析(電子顕微鏡観察、表面科学手法、第一原理計算)を有効に組み合わせることが重要である。本格研究における材料基礎解析の役割を議論し、材料開発グループとの緊密な連携研究を成功させるため様々な取り組みを行ってきた。リチウムイオン電池、燃料電池、触媒系のための独自の電顕観察技術や第一原理計算技術を構築し、材料開発に重要な貢献をするとともに、各種受賞など学術的にも高いレベルの成果が得られた。

キーワード: エネルギー環境材料、材料基礎解析、電子顕微鏡観察、第一原理計算、リチウムイオン電池、燃料電池電極、金触媒

Basic materials research for the development of ubiquitous-energy devices

– Applications to positive electrode materials of Li-ion batteries,
electrode catalysts of proton-exchange fuel cells and gold catalysts –

Masanori Kohyama^{*1}, Tomoki Akita¹, Shingo Tanaka¹, Yasushi Maeda¹,
Koji Tanaka¹, Kazuyuki Okazaki² and Jun Kikkawa³

For ubiquitous-energy devices, the development of well-performing functional materials is the key issue. Effective collaboration between development researchers and researchers carrying out basic materials analysis using electron microscopy observations, surface-science observations and theoretical calculations is of great importance. We have previously discussed the role of basic materials research in out discussion of *full research* and have made efforts to carry out a successful collaboration. To this end, we have attained valuable contributions to materials development as well as high-level scientific achievements as substantiated by numerous awards through the development of original observational and calculation techniques relating to the positive electrode material of Li-ion batteries, the electrode catalysts of proton-exchange fuel cells and gold/oxide catalysts.

Keywords: Materials for energy and environmental problems, basic materials research, electron microscope observation, first-principles calculation, lithium-ion battery, fuel-cell electrode, gold catalyst

1 はじめに

ユビキタス情報社会の進歩に伴い、携帯電話やモバイルPCのポータブル電源として、リチウムイオン電池や燃料電池が注目されている。軽量で高出力、大容量、高耐久性で環境適合型の移動型電源は、高度医療福祉社会のための各種医療機器や電動車イスなど小型移動機器、ロボット等の電源としても重要である。さらなる高出力化が達成できれば、電気自動車やハイブリッド車用電源への広範な展開も期待され、地球環境問題へのインパクトは極めて大きい。電源デバイスを支えるエネルギー貯蔵技術、水素ガス精製技術も重要である。このようなユビキタスエネルギーデバイス開発の要に位置するのが、電極材料、触媒材料、電解質や水素吸蔵材料など、優れた機能材料の開発である。対重量比の出力や安全性、環境適合性が高いハード

ルが課せられるため、機能材料開発の役割は極めて大きい。当研究部門では、機能材料開発をメインに研究開発を推進している^{[1][2]}。筆者らは、その中で、電子顕微鏡観察や表面科学手法(走査プローブ顕微鏡)によるナノ構造解析と第一原理計算などの理論計算を組み合わせた材料基礎解析を用いた研究を展開している^{[3]-[5]}。このような第1種基礎研究を、材料開発研究とうまく連携させれば、全体で大きな成果が期待できる。

しかし、材料開発と材料基礎解析の有効な連携は、一般にはそれほど容易でなく、様々な努力や試行錯誤を必要とする。これは、様々な分野の研究開発現場に共通する問題である。当グループでは、議論を重ね、各種の方策を行う中で、開発と基礎解析の連携で、いくつかの成果を得ることができた。本稿では、この間の経験や成果を紹介し、

1 産業技術総合研究所 ユビキタスエネルギー研究部門 〒563-8577 池田市緑ヶ丘1-8-31、2 大阪大学工学部 〒565-0871 吹田市山田丘2-1、3 大阪大学基礎工学部 〒560-8531 豊中市待兼山町1-3

1. Research Institute for Ubiquitous-Energy Devices, AIST Midorigaoka 1-8-31, Ikeda 563-8577, Japan *E-mail: m-kohyama@aist.go.jp, 2. Department of Mechanical Engineering, Osaka University Yamadaoka 2-1, Suita 565-0871, Japan, 3. School of Engineering Science, Osaka University Machikaneyamacho 1-3, Toyonaka 560-8531, Japan

教訓を議論する。特に、材料開発における材料基礎解析（第1種基礎研究）の役割、意義について論じる。

2 エネルギー環境材料の基礎解析の重要性

燃料電池やリチウムイオン電池、水素吸蔵デバイスや水素製造・精製装置など、多くのユビキタスエネルギーデバイスは、電極での分子の反応やイオンの出入りに伴う電子のやり取りを利用したり、エネルギー媒体の様々な反応や吸収・放出を利用するものである。ナノ粒子やナノ構造、表面・界面の特異な性質や現象が機能を支配すると考えられるが、詳細なメカニズムは完全には解明されていない。

こうしたエネルギー環境材料の構造や機能、様々な現象を、電子顕微鏡観察や第一原理計算を用いることで、実験的、理論的に解明することは、材料開発の見地から極めて重要である^{[3][5]}。例えば、優れた機能を有する材料が見つかった場合、なぜ優れた機能が発現するのかを理解しなければ、さらなる改良や発見、開発につながらない。特に、ナノ構造体の構造と機能の相関が解明できれば、ナノ構造の設計制御から飛躍的に優れた材料を開発できる可能性が広がる。また、機能材料は使用を重ねると、しばしば機能が劣化するが、微視的なレベルで何が起きているかを理解しなければ、劣化への対策や改良の方策が立てられない。経験や勘から闇雲に物質・材料を探索するよりも、物質・材料の結晶構造やナノ構造、電子構造を理解して進める方が、はるかに効率的である。もちろん、材料開発は、偶然（serendipity）が支配する場合も多い。しかし、効率的にserendipityを招く、或いはserendipityを見逃さない、という見地からも、微視的な解析を並行して進めることは不可欠である。

一方、エネルギー環境材料の基礎解析には独自の困難が存在する。機能の発現には、ガス雰囲気や電場下での吸着や反応、電子移動、酸化還元、価数変化など、複雑な反応過程や水素（プロトン）やLiイオンの物質移動が伴う。電子顕微鏡観察は、通常、超高真空下での観察であり、また、水素やLiといった軽元素の電顕観察は一般に容易ではない。現時点の第一原理計算では、大規模な反応系や物質移動・電子移動の扱いは容易ではない。エネルギー環境材料の基礎解析を進めるには、基礎解析手法自体の改良や革新も必要となる。このことが他の材料分野（例えば、半導体デバイス）に比べて基礎解析の適用が遅れている要因である。

3 材料開発と材料基礎解析の連携における問題点

ユビキタスエネルギーデバイスやそのための機能材料の研究開発現場では、基礎解析の適用により解明すべき課

題が山積している。しかし、具体的に、効率的で有意義な連携を実現するには、いくつかの問題点や困難が存在する。第1に、材料開発と基礎解析の取り組みのペース、位相が、必ずしも合わない。基礎解析の方は、解析手法の開発も関わるため、1つの課題を長期にわたって扱うことが多い。自然に別個に進める傾向が生じ、機動的な連携が阻害される。第2に、実際の材料や現象は、しばしば複雑すぎて、基礎解析の適用自体が容易でない。この点で、実材料ではなくモデル材料を扱うことも必要となり、材料開発の現場と基礎解析の間の緊密な議論が必要となる。第3に、材料開発と基礎解析の研究者の間に、目的や価値観、問題意識や知識のズレ、互いの研究内容の理解の不足がしばしば生じ、緊密な連携を阻害する傾向がある。

産総研（関西センター）ユビキタスエネルギー研究部門（2004年～）では、先行する生活環境系特別研究体開始時（2001年～）より、電子顕微鏡観察、走査プローブ顕微鏡や第一原理計算に携わる研究者でグループを編成し、材料基礎解析を本格研究の一翼として、如何に位置づけて、材料開発に貢献させるか、そのための方策を議論してきた。その理由は、第1に、前述のようにエネルギー環境材料では、ナノ構造が現象や機能の鍵を握ると考えられ、基礎的な解析を通じた設計や制御により、飛躍的な開発に繋がる可能性があること、第2に、基礎解析と開発との連携の取り組み自体に、研究方法論としての創造的な価値があることである。もちろん、第3に、研究資金を集め、大型装置を維持していくためにも、こうした連携の取り組みは有利である。

図1は、基礎解析の側からの連携の取り組みの概要を説明したものである。まず、ユニットの運営として、①開発研究と基礎解析との目的意識の共有化、②機動的な共同や緊密な議論のできる体制の構築、を進めてきた。ユニット全体のコロキウムやworking groupの開催、ユニット長やグループ間の議論を通じて推進され、誘導する予算措置もとられた。筆者ら基礎解析グループとして、これに応えつつ、本格研究の一翼としての基礎解析の役割を議論し、①死の谷を乗り越えるための解明・探索、②シーズの発見、普遍化・体系化、と定式化した。このことから、開発との具体的な連携の推進と、基礎解析グループとしての独自の継続的な体系化の活動、の両面が必要であると言える。後者の点では、ユビキタスエネルギーデバイスで機能の鍵を握る場合が多い「金属／無機ナノヘテロ界面」の学理の構築・体系化を目標に掲げた^[3]。後述の金触媒に代表される金属／酸化物ヘテロ触媒や燃料電池のPt/C触媒では、界面のヘテロ効果や金属粒子のナノサイズ効果が大きく機能に関わると考えられているが、その詳細は不明であ

り、学理の構築・体系化により、普遍性のある設計理論や指針が構築できる可能性がある。①の観点から様々な課題に機動的に対応するとともに、②のスタンスから長期的に知見を蓄積・体系化していく。後者の知見は、材料開発グループを含めた全体で共有するべきものである。

基礎解析グループの独自の達成課題として、開発グループとの連携における課題の具体化・明確化を行うとともに、第1に、実際の材料やシステムの観察技術の確立を図った。これは、後述するような燃料電池やリチウムイオン電池用の独創的な電顕観察手法の開拓などである。第2に、複雑構造の第一原理計算技術の検討と確立を図った。また、理論計算と電顕観察・表面科学手法との連携解析技術の開拓にも取り組んだ。こうしたエネルギー環境材料のための基礎解析技術の開拓は、それ自体が容易な課題ではないが、材料の諸現象や機能の解明の課題を進める中で、並行して行わねばならない。

以上の取り組みにより、本章のはじめに記した3つの問題点が全て容易に解決できるとは限らない。しかし、各自が問題点を自覚し、上の取り組みを進める中で、問題点の緩和や克服が確かに進んだと言える。次章で具体的な研究成果、5章で取り組みの教訓を論じる。

4 いくつかの顕著な成果の例

こうした取り組みを続ける中、いくつかの顕著な成果が生まれ、機能材料開発に活かされるとともに、各種受賞な

ど学術的にも高い評価を獲得した。いくつかの例を紹介する。リチウムイオン電池正極材料の例は新規材料開発に直結する成果、燃料電池のPt/C電極触媒と金/酸化物触媒の例は、材料の開発・改良とともに金属/ナノヘテロ界面の学理の構築・体系化にも大きなインパクトを持つ成果である。また、いずれも基礎解析技術を大きく進展させている。

4.1 リチウムイオン電池正極材料の大容量化メカニズム

リチウムイオン電池は、Liを含む遷移金属酸化物を正極に、炭素やLi金属、合金を負極に用いる蓄電池であり、重量比の容量や出力が従来の蓄電池よりも飛躍的に優れている。モバイル機器のみならず、自動車用への展開が期待されており、そのために更なる大容量化、高出力化、耐久性・安全性の向上が必要である。充電過程では、Liイオンが電解質を介して正極から負極に移動し、放電過程で逆に負極から正極に戻ってくる。Liイオンを高密度に何度も出し入れできる優れた正極材料の開発が最も重要である。現在、正極材料としてLiCoO₂が主に使用されているが、希少金属Coを用いずに大容量、高出力を実現する材料が期待される。産総研の田淵らは、FeとMnを含む大容量の複合酸化物Li₂MnO₃-LiFeO₂ (xLi₂MnO₃-(1-x)LiFeO₂) (容量>200 mAh/g)を開発した^[6]。この材料を構成するLi₂MnO₃とLiFeO₂は、各々単独のバルク体ではLiイオンの出入りをしない不活性物質である。なぜ、複合化すると活性化し大容量化するのか、そのメカニズムが解明さ

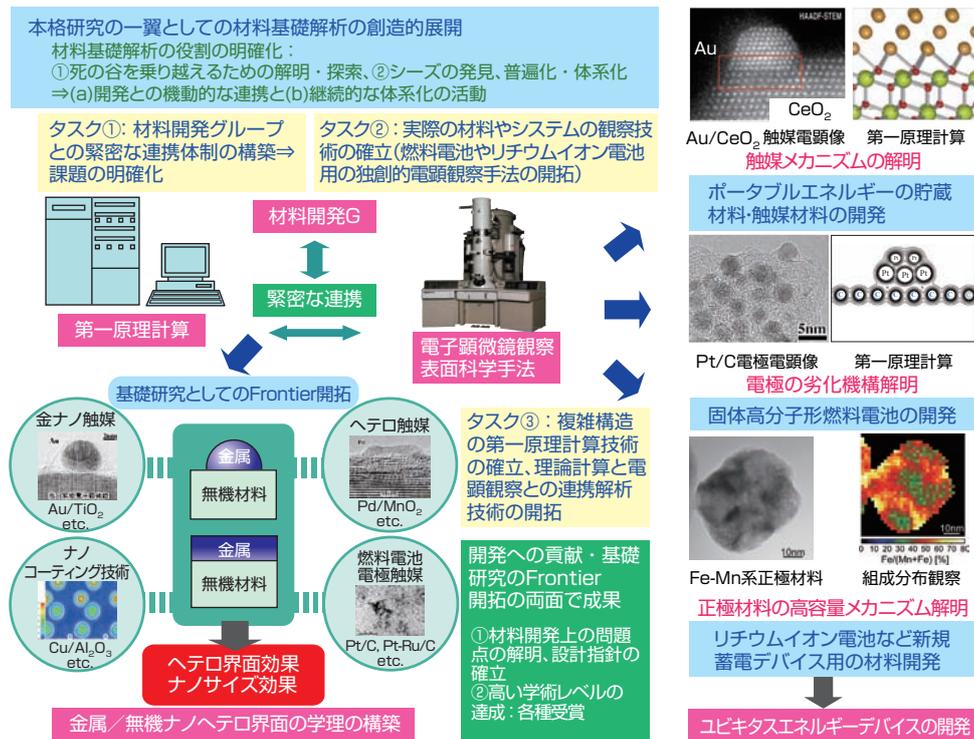


図1 ユビキタスエネルギーデバイス開発のための材料基礎解析の取り組み。

れば、更に優れた材料の開発に繋がる。

そこで、本材料の開発グループとの緊密な共同の下、電顕観察による解明に取り組んだ。まず、STEM-EELS スペクトラム・イメージング法（電子ビームの scan 位置毎に、各元素固有の電子線エネルギー損失スペクトル（EELS）データを蓄積し、元素濃度分布を定量化し、画像化する手法^[7]）とナノビーム回折法から、本材料の各粒子が、共通の酸素格子の元で Fe-rich (LiFeO₂ 的)、Mn-rich (Li₂MnO₃ 的) の化学ナノドメインを有する構造であることを発見した（図 2）^{[8][9]}。明確な相界・界面を有さないナノスケールのドメイン構造は他に例のない新発見である。二相間で格子定数差が小さく、界面近傍で原子レベルの混合があるためと考察される。従来の X 線観察等では、平均化された情報として LiFeO₂ 的な相と Li₂MnO₃ 的な相があることは推定されたが、化学ナノドメイン構造の形で存在することは予想を超えた結果である。

化学ナノドメイン構造が大容量を生むメカニズムを探るためには Li イオンの出入りの様子を充電・放電の各過程で探ることが必要である。そこで、Li イオンの実空間濃度分布を STEM-EELS スペクトラム・イメージング法で可視化する新技術を開発した。従来、Li の EELS データの解析は容易でなく、Li 濃度分析の定量解析は事実上不可能であった。試料厚さがある程度薄ければ EELS スペクトルの二次微分ピーク強度が濃度に比例すると見なせることから、データ解析法を工夫することで Li 濃度分布の定量的な可視化に成功した^[10]。これは Li イオンの実空間分布を探る世界初の手法である。

図 3 のように、電池セルでの充電と放電の各過程の正極材料に新手法を適用することで、充電過程では Fe-rich 領域から先に Li が抜け、その後、続けて Mn-rich 領域からも抜けること、放電後では確かに Li が戻っていること、しかし、容量の低下に対応して局所的に回復濃度にムラがあること等が判明した^[10]。図 4 に示すように、ナノドメイン構造になり、Li イオンの拡散に有利な層状構造の Mn-rich

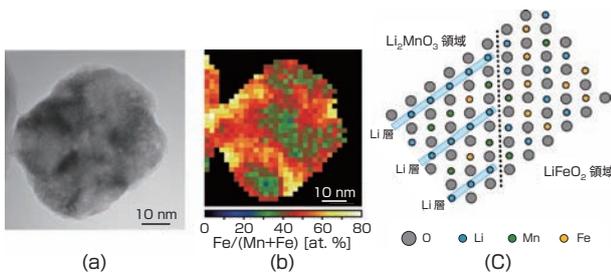


図 2 大容量のリチウムイオン電池正極材料 Li₂MnO₃-LiFeO₂ 粒子の透過電子顕微鏡像 (a)、STEM-EELS スペクトラム・イメージング法による遷移金属元素濃度分布 (b)、化学ナノドメイン構造の概念図 (c)。

領域で囲まれることで、バルクでは不活性な Fe-rich 領域が活性化し、続いて、Fe-rich 領域で Li が枯渇すると引きずられて Mn-rich 領域からも Li イオンが抜けるようになることが、明確になった。4 価の Mn からなる Li₂MnO₃ 領域での Li 引き抜きによる電荷補償は酸素が担うと考えられる。容量低下は、この電荷補償による中性酸素の離脱に起因すると考えられ、実際に酸素の濃度低下が STEM-EELS スペクトラム・イメージング法で観察された。

以上、電顕技術を駆使して、化学ナノドメイン構造を発見し、Li イオン濃度の定量的な分布可視化技術の開発に成功することで、化学ナノドメイン構造が各構成物質を活性化し、大容量化するメカニズムを明らかにすることができた。ナノ構造が具体的に正極材料の性能に深く関わるようになったことの意義は大きい。現在、こうした化学ナノドメイン構造の最適制御の観点からの材料性能の向上が図られている。以上の成果が得られた大きな要因は、

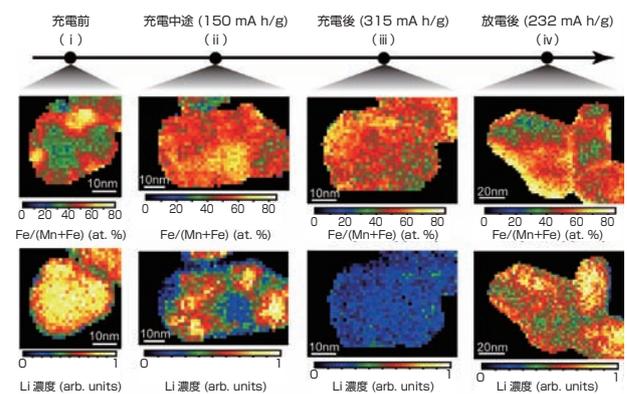


図 3 リチウムイオン電池正極材料 Li₂MnO₃-LiFeO₂ 粒子の、充電・放電の各過程での、遷移金属元素濃度分布図（上図）とリチウム元素濃度分布図（下図）。(i) の充電前試料では、粒子は Li₂MnO₃（緑・青）と LiFeO₂（黄）の化学ナノドメイン構造となっている（上図）。この段階ではリチウムイオンは、粒子全体に分布している（下図）。(ii) の 50 % 充電試料では、リチウム元素濃度分布の青の領域（下図）と遷移金属濃度分布の黄色の領域（上図）とが一致していて、充電初期にはリチウムイオンは LiFeO₂ ドメインから優先的に脱離している。(iii) の 100 % 充電の試料では、粒子全体 (Li₂MnO₃ と LiFeO₂ の全ドメイン) からリチウムイオンが脱離している（下図）。(iv) は放電後の試料の元素濃度分布であるが、粒子全体にリチウムイオンが戻っている（下図）。しかし、リチウムイオンの分布にムラがあり、リチウムが粒子全体に完全には戻っていない。

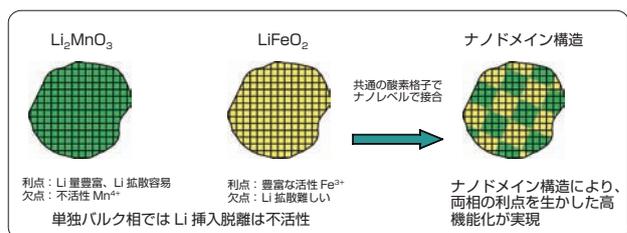


図 4 化学ナノドメイン構造による Li₂MnO₃-LiFeO₂ 系正極材料の高性能化の概念図。

Li₂MnO₃-LiFeO₂ の開発グループと緊密に連携し、問題点や課題、実験観察プランを日常的な議論の中で検討しながら進めていったことである。

4.2 燃料電池電極触媒の微視的構造と劣化機構

固体高分子形燃料電池では、炭素材料に Pt 粒子を担持させた構造 (Pt/C 電極) を電極触媒として用い、負極の Pt 粒子上で燃料の水素ガスの解離・酸化 ($H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-$) により電子を取り出し、プロトン H^+ は高分子電解質を通じて正極へ移動する。正極では、同様に Pt 粒子上でプロトンと酸素の反応で水が生成する ($1/2O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O$)。このとき炭素と導線を通して負極からの電子が使用される。水素ガス中には、しばしば CO が混入しており、それが負極の Pt 粒子の触媒活性を阻害する (CO 被毒) ため、Pt-Ru 合金粒子などが用いられる。Pt 粒子や Pt 合金粒子のサイズや分散、電極組織を制御し、希少金属 Pt の量を減らしながら反応効率を上げることが重要である。

Pt/C 電極は使用による劣化が問題であり、その機構を明らかにすることが求められている。電極触媒の開発と劣化試験を行っているグループと緊密な連携の下、電顕観察による解明を試みた^{[11]-[13]}。燃料電池の電極触媒の電顕

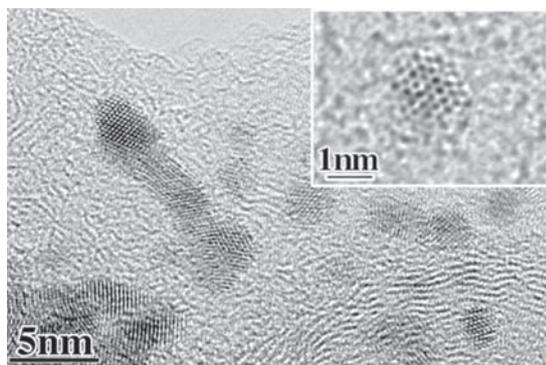


図5 PtRu/C 電極触媒の高分解能 TEM 像。

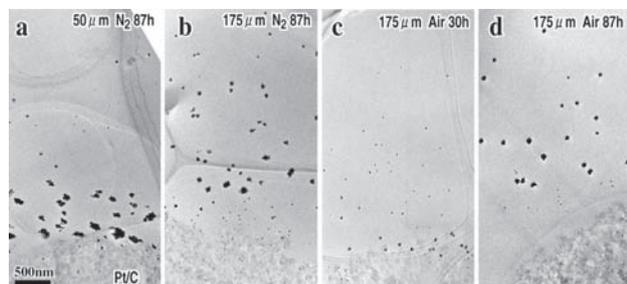


図6 Pt/C 電極 (正極) と電解質膜界面付近に析出した粒子の TEM 像。

(a) 50 μm 厚さの電解質膜を用い、Pt/C 電極に窒素を供給し 87 時間電位印加、(b) 175 μm 厚さの電解質膜、窒素を供給し 87 時間電位印加、(c) 175 μm 厚の電解質膜、空気を供給し 30 時間電位印加、(d) 175 μm 厚の電解質膜、空気を供給し 87 時間電位印加。電解質膜厚みと供給ガス、時間に応じて、析出 Pt 粒子の様子が変化している。

観察例は極めて稀である。電解質膜-電極触媒接合体をウルトラマイクロームにより薄片化して TEM 用試料を作成し、試行錯誤により最適な観察条件を探索した。図5は PtRu/C 電極触媒の典型的な高分解能透過電顕 (TEM) 像である。触媒微粒子の格子像が明瞭に得られており、良好な高分解能観察が可能であることを示している。

様々な条件で燃料電池を作動させ、劣化試験を行うと、触媒金属粒子の粒子径が大きくなること、PtRu 粒子から Ru が溶出すること、また試験条件に依存して、電解質膜中に触媒金属の粒子が析出すること等が、電顕で観察された (図6)。析出粒子は負極、正極に供給するガスの種類や電解質膜の厚みを変えることで、粒子径分布や粒子の空間分布が変化する。こうした触媒金属粒子の溶出・析出挙動が、炭素材料の酸化とともに劣化現象の一つの要因であることが初めて明らかにされた。燃料電池電極触媒の微視的構造や劣化の様子の電顕観察は、国内外に先駆けて行ったものである (各種受賞、表1)。

一方、Pt/C 電極の機能やナノ構造を理解するためには第一原理計算が重要である。様々な形態の Pt 金属や Pt クラスタと炭素 (graphene シート) との基本的な界面相互作用の第一原理計算をすすめている (図7)^[14]。graphene シートの π 結合面は反応性が小さく、Pt-C 間の相互作用 (結合) エネルギーは、Pt 原子当りでは単原子で最大、クラスターで配位数やサイズが増えるほど減り、結晶面で最小になる。こうした計算データを用いて Pt/C 電極のメズスケール組織のシミュレーションが可能である。電顕観察像と対照できる結果が得られており、金属/無機ナノヘテロ界面の学理としても重要である^[15]。

以上の成果は、具体的に燃料電池電極触媒を作成し劣化試験を行っているグループとの日常的な連携や議論により初めて可能となったものである。

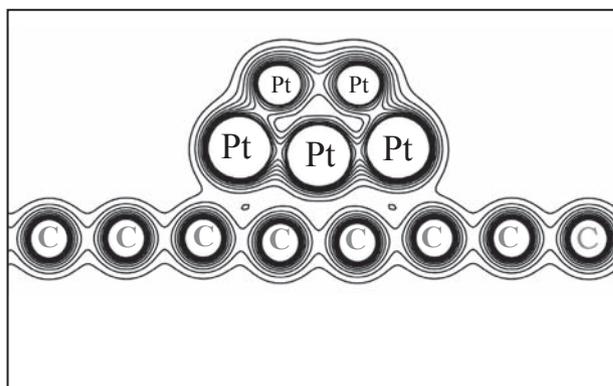


図7 Pt₁₀ クラスタ/graphene 系の第一原理計算結果。緩和構造と価電子密度分布。界面での電子移動、軌道混成は少ない。

4.3 金／酸化物ナノヘテロ触媒のメカニズム

金は一般に不活性であるが、ナノ粒子で TiO₂ や CeO₂ の酸化物表面に担持すれば、CO 低温酸化や水性ガスシフト反応（水素ガスから CO を取り除くための反応、CO+H₂O → CO₂+H₂）など特異な触媒活性を示す^[16]。不活性な金を活性化させるメカニズムが解明されれば、金属／無機ナノヘテロ触媒の設計の可能性が大きく広がる。これまで、触媒開発グループと緊密な連携の下、電顕観察、表面科学、第一原理計算を組み合わせた基礎解析を進めてきた。

Au/TiO₂ 系について、電顕観察から界面に優先方位関係が存在し、Au-TiO₂ 間の強い相互作用が推定される。走査プローブ顕微鏡観察など表面科学実験から、TiO₂ 表面が通常の stoichiometric 表面（化学量論比的表面、アニオンとカチオンが等量の表面）の場合に比べて、酸素欠損を持つ還元表面（Ti-rich 表面）で Au-TiO₂ 間相互作用が強いことが判明した。一方、第一原理計算から、界面が Ti-rich か O-rich のように、stoichiometric（化学量論比）からずれている場合に結合が強く、Au-TiO₂ 間の軌道混成や電子移動が顕著で、触媒活性に影響を与えることが示唆された^{[17][18]}。そこで、より掘り下げて、HAADF-STEM 法（絞った電子ビームを走査させ、原子からの高角散乱波で原子列の像を得る方法）による界面原子配列の詳細観察を行い、原子列の位置が同定できる詳細観察に初めて成功した。一方、こうした観察モデルに基づく界面の原子・電子構造の第一原理計算から、Ti-rich 界面や O-rich 界面の各々が雰囲気に応じて安定化しうること、Ti-rich 界面や O-rich 界面が特異な電子状態を持つことが明確となった。

一方、Au/CeO₂ 系について、(i) 電顕観察中に CeO₂ に担持した Au クラスタが層毎に順に消失し（界面 Au 第 1 層のみ残留）、(ii) 電子線を停めチャンバー内に放置しておくと同じ場所に Au クラスタが復活する、という現象が発見された^{[19][20]}。こうした雰囲気依存構造変化は触媒特性と関係し、メカニズムの解明が重要である。高温で

の CeO₂ 上 Au 粒子成長が H₂ 雰囲気下で抑制されることから、CeO₂ の表面酸素欠陥の効果が大きいことが推定される。そこで、HAADF-STEM 法を適用し、初めて詳細な界面原子配列像を得ることに成功した（図 8）^[21]。急峻な界面が存在し、Au-Ce 原子層間隔が計測できる。この観察を第一原理計算と比較することで、Ce 終端界面が形成されていることが結論できる。雰囲気依存の化学ポテンシャルを含めた理論解析から、CeO₂ 表面やバルクの酸素 vacancy への Au のトラップと Ce 終端界面の強い結合から、一連の現象が説明できた。

現時点では、Au/TiO₂ 系や Au/CeO₂ 系の触媒反応のメカニズムそのものは、完全には解明できていないが、金属／酸化物ヘテロ触媒の界面構造をこれだけの解像度で明らかにした例はない（国際会議での各種受賞、表 1）。この観察に基づく第一原理計算から、界面の stoichiometry（化学量論比）と雰囲気によるその制御が機能の鍵をにぎることが強く示唆された。次のステップとして、ガスの存在する雰囲気での電顕観察、現実的な界面モデルや周縁部モデルの分子吸着・反応パスの第一原理計算が進行中である。

以上の成果は、ユニット内外の触媒作成グループとの継続的な連携、緊密な情報交換により、課題や計画を有効に策定することで可能となったものである。

4.4 最近の各種受賞

以上のような研究活動に対して多くの賞が与えられている。表 1 に最近の一覧を示す。材料開発と緊密に連携した材料基礎解析の研究成果は多くの注目を集め、基礎科学的にも高い評価を得ていると言える。受賞理由は、①新

表 1 研究グループからの最近の主な受賞。

2004 年度	日本金属学会 2004 年秋期大会 優秀ポスター賞（電顕）市川 聡 MRS 2004 Fall Meeting Poster 賞（電顕）秋田 知樹 MRS 2004 Fall Meeting Poster 賞（電顕）市川 聡 日本 MRS 2004 シンポジウム 奨励賞（計算）田中 真悟
2005 年度	触媒討論会 優秀ポスター賞（電顕）秋田 知樹 日本 MRS 2005 シンポジウム 奨励賞（計算）田中 真悟
2006 年度	国際顕微鏡学会 ICM-16 ポスター賞（電顕）秋田 知樹 IUMRS-ICA 2006 Best Paper Award（電顕）秋田 知樹 日本金属学会金属組織写真賞 B 部門入賞（電顕）田中 孝治
2007 年度	日本顕微鏡学会第 63 回学術講演会優秀ポスター賞（電顕）吉川 純
2008 年度	第 14 回リチウム電池国際会議 Most Excellent Poster Paper 賞（電顕）吉川 純 ICC 14 Pre-Symposium Best Poster Presentation 賞（電顕）秋田 知樹

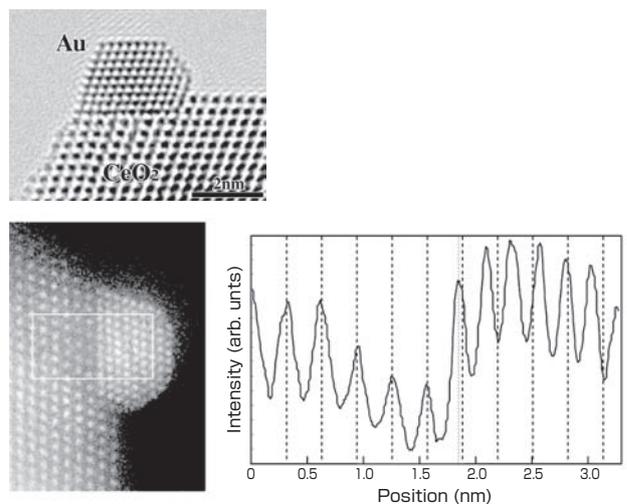


図 8 Au/CeO₂ 触媒の電子顕微鏡観察。上側の高分解能 TEM 像は、CeO₂ 上に接合した Au ナノ粒子。下側の像は、同じ構造を HAADF-STEM 観察したもの。界面に平行な各原子層に沿って原子像の強度を積分することで、原子層間隔が分析できる（下右図）。

規手法や高いレベルの基礎解析技術を築いたこと、②従来解明されていないエネルギー環境材料や金属/無機ナノヘテロ界面系の解明でフロンティアを拓いたこと、③基礎解析結果が材料開発や改良に活かされている、あるいはそれが大いに期待できること、などであろう。もちろん、純然たる基礎研究そのものではなく、開発に近いサイドでの成果や期待からの受賞と言える。

5 Discussionとまとめ

より一般的に、新材料開発という活動自体に未だに確固とした方法論や方策（王道）はないという事実があり、このことは、たいへん重いとと言える。デバイス開発の見地（第2種基礎研究）からは、様々な知見（第1種基礎研究の成果や第2種基礎研究での経験）を探り、試行錯誤で材料の開発や探索を進めざるを得ない。しかし、その過程（材料を様々に作ってみる過程）自体が、自然（物質）を相手にするため、往々にして誰も経験していない現象や謎にぶつかる。新規性の高い材料を目指す以上、これは当然のことである。その時に外部の誰かが（第1種基礎研究で）解明してくれるのを待つ、というわけにはいかない。開発者や開発者のグループで、現象を探りながら進めることが必要になる。従って、少なくとも、同じ研究組織で第1種基礎研究を併用する、そういう研究者と緊密に連携する、という方策をとるべきであり、これこそが、本格研究としての材料開発のあり方である。一方、第1種基礎研究に携わる研究者は、こうした連携活動を有効に行うためにも、解析手法自体を切磋琢磨し、新手法を開拓し、磨くと言う使命がある。飛躍的な材料開発を行うには、開発（第2種基礎研究）と解析（第1種基礎研究）の「分業」と「連携」を如何にバランスよく、有効に進めるか、ということである。

筆者らの経験は限られたものであり、問題点が全て解決されたわけではない。個人の才能に依存した面もある。現時点での教訓、意義は以下のようにまとめられる。第1に、開発グループと基礎解析グループが同じフロアや近い距離で日常的に情報交換しながら連携する組織体制、運営方針の重要性である。第2に、開発現場での最重要課題は、基礎科学的にも価値が高い新奇現象や学際的な現象に関するものが多い。開発現場と連携した基礎研究は基礎研究のレベルをむしろ上げる。もちろん、新しい解析技術の確立など、研究者側の一層の努力を必要とする。こうした展開は、新しい学問領域の創成（例えば、原子・電子レベルの電気化学、触媒化学）につながると言える。第3に、開発と基礎の共同は、開発サイドに新しい視点での材料設計や開発の方策、アイデアを提供する。もちろん、それが真に飛躍的な開発に活かされるには、引き続き様々な努力

も必要である。第4に、こうした材料開発と基礎解析の連携における継続的な経験と知識の蓄積・体系化、それを担う人材の育成は、研究機関として継承・発展されるべき「コア・コンピタンス」ではないか、と考えられる。

謝辞

本稿で紹介した研究例は、材料開発サイドの研究者と共同で行ったものである。特に、リチウムイオン電池について田淵光春氏、鹿野昌弘氏、辰巳国昭氏、燃料電池について安田和明氏（以上、産総研ユビキタスエネルギー研究部門）、金触媒について春田正毅教授（元産総研環境調和技術研究部門、現首都大学東京）、藤谷忠博氏（産総研環境化学技術研究部門）に感謝します。なお、リチウムイオン電池正極材料と燃料電池電極の研究についてはNEDO（新エネルギー・産業技術総合開発機構）、燃料電池電極の計算についてはJST（科学技術振興機構）、金触媒の研究については、科学研究費補助金およびJSTの支援を受けました。関係者、関係部局に感謝申し上げます。

参考文献

- [1] 境哲男, 小林哲彦 (監修) : ユビキタスエネルギーの最新技術, シーエムシー出版 (2006).
- [2] 小黒啓介: ユビキタスエネルギー技術の研究戦略, *マテリアルインテグレーション*, 21(2), 1 (2008).
- [3] M. Kohyama, S. Tanaka, K. Okazaki-Maeda and T. Akita: Theoretical studies of the atomic and electronic structure of nano-hetero metal/inorganic material interfaces in collaboration with electron microscopy observations, *Mater. Trans.*, 48, 675-683 (2007).
- [4] 香山正憲, 田中真悟, 前田一行, 秋田知樹, 田中孝治: 材料界面の原子配列と電子構造の第一原理計算: 電顕観察との連携によるアプローチ, *顕微鏡*, 41(3), 178-184 (2006).
- [5] 秋田知樹, 吉川純, 香山正憲: ユビキタスエネルギー材料の分析電子顕微鏡による構造解析, *マテリアルインテグレーション*, 21(2), 45-51 (2008).
- [6] M. Tabuchi, Y. Nabeshima, M. Shikano, K. Ado, H. Kageyama and K. Tatsumi: Optimizing chemical composition and preparation conditions for Fe-substituted Li_2MnO_3 positive electrode material, *J. Electrochem. Soc.*, 154, A638-648 (2007).
- [7] C. Colliex: New trends in STEM-based nano-EELS analysis, *J. Electron Microsc.*, 45, 44-50 (1996).
- [8] J. Kikkawa, T. Akita, M. Tabuchi, M. Shikano, K. Tatsumi and M. Kohyama: Fe-rich and Mn-rich nanodomains in $\text{Li}_{1.2}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.4}\text{O}_2$ positive electrode materials for lithium-ion batteries, *Appl. Phys. Lett.*, 91, 054103 (2007).
- [9] J. Kikkawa, T. Akita, M. Tabuchi, M. Shikano, K. Tatsumi and M. Kohyama: Coexistence of layered and cubic rocksalt structures with a common oxygen sub-lattice in $\text{Li}_{1.2}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.4}\text{O}_2$ particles: A transmission electron microscopy study, *J. Appl. Phys.*, 103, 104911 (2008).
- [10] J. Kikkawa, T. Akita, M. Tabuchi, M. Shikano, K. Tatsumi and M. Kohyama: Real-space observation of Li extraction/insertion in $\text{Li}_{1.2}\text{Mn}_{0.4}\text{Fe}_{0.4}\text{O}_2$ positive electrode material for Li-ion batteries, *Electrochem.*

- Solid-State Lett.*, 11, A183-A186 (2008).
- [11] A. Taniguchi, T. Akita, K. Yasuda and Y. Miyazaki: Analysis of electrocatalyst degradation in PEMFC caused by cell reversal during fuel starvation, *J. Power Sources*, 130, 42-49 (2004).
- [12] K. Yasuda, A. Taniguchi, T. Akita, T. Ioroi and Z. Siroma: Platinum dissolution and deposition in the polymer electrolyte membrane of a PEM fuel cell as studied by potential cycling, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 8, 746-752 (2006).
- [13] T. Akita, A. Taniguchi, J. Maekawa, Z. Siroma, K. Tanaka, M. Kohyama and K. Yasuda: Analytical TEM study of Pt particle deposition in the proton-exchange membrane of a membrane-electrode-assembly, *J. Power Sources*, 159, 461-467 (2006).
- [14] K. Okazaki, S. Yamakawa, R. Morikawa, T. Akita, S. Tanaka and M. Kohyama: Simulation of growth process of Pt-particle - first-principles calculations, *J. Physics: Conference Series*, 100, 72044 (2008).
- [15] S. Yamakawa, K. Okazaki, M. Kohyama and S. Hyodo: Phase-field model for deposition of platinum nanoparticle on graphite, *J. Physics: Conference Series*, 100, 72042 (2008).
- [16] M. Haruta: Size- and support-dependency in the catalysis of gold, *Catal. Today*, 36, 153-166 (1997).
- [17] K. Okazaki, S. Ichikawa, Y. Maeda, M. Haruta and M. Kohyama: Electronic structures of Au supported on TiO₂, *Appl. Catal. A*, 291, 45-54 (2005).
- [18] T. Okazawa, M. Fujiwara, T. Nishimura, T. Akita, M. Kohyama and Y. Kido: Growth mode and electronic structure of Au nano-clusters on NiO(001) and TiO₂(110), *Surf. Sci.*, 600, 1331-1338 (2006).
- [19] T. Akita, M. Okumura, K. Tanaka, M. Kohyama and M. Haruta: Analytical TEM observation of Au nanoparticles on cerium oxide, *Catal. Today*, 117, 62-68 (2006).
- [20] T. Akita, K. Tanaka, M. Kohyama and M. Haruta: Analytical TEM study on structural changes of Au particles on cerium oxide using a heating holder, *Catal. Today*, 122, 233-238 (2007).
- [21] T. Akita, K. Tanaka and M. Kohyama: TEM and HAADF-STEM study of the structure of Au nanoparticles on CeO₂, *J. Mater. Sci.*, 43, 3917-3922 (2008).

執筆者略歴

香山 正憲 (こうやま まさのり)

1985年東京大学大学院工学系研究科金属材料学専攻博士課程中退。同年工業技術院大阪工業技術試験所(現産業技術総合研究所)入所。1992年工学博士(東京大学)。2001年産総研生活環境系特別研究体ナノ界面機能科学研究グループ長、2004年産総研ユビキタスエネルギー研究部門ナノ材料科学研究グループ長、上席研究員。2001年日本金属学会功績賞、2004年英国物理学会 Fellow。金属/無機界面の第一原理計算や第一原理計算プログラムの開発、電顕観察との連携技術の研究に従事。本論文では全体の研究方向の議論や研究計画・結果の議論を先導した。

秋田 知樹 (あきた ともしき)

1998年大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻博士後期課程修了(博士(工学))。同年大阪工業技術研究所(現産業技術総合研究所)特別研究員、1999年大阪工業技術研究所入所。2001年産総研生活環境系特別研究体ナノ界面機能科学研究グループ、2004年ユビキタスエネルギー研究部門ナノ材料科学研究グループ主任研究員。分析電子顕微鏡法による機能材料(金属/無機ヘテロ触媒、燃料電池、リチウムイオン電池等)の構造解析に関する研究に従事。

本論文では主に電顕観察を担当した。

田中 真悟 (たなか しんご)

1998年大阪府立大学大学院理学系研究科物質科学専攻博士課程修了(博士(理学))。同年大阪工業技術研究所(現産業技術総合研究所)入所。2001年産総研生活環境系特別研究体ナノ界面機能科学研究グループ、2004年ユビキタスエネルギー研究部門ナノ材料科学研究グループ研究員。専門は、第一原理計算など計算材料科学。主として金属/無機ヘテロ界面(金属/セラミックス界面、ヘテロ触媒等)の第一原理計算、第一原理計算プログラムの開発等に従事。本論文では金/酸化物界面の第一原理計算を担当した。

前田 泰 (まえだ やすし)

2000年大阪大学大学院理学研究科博士課程修了(博士(理学))。同年大阪工業技術研究所(現産業技術総合研究所)入所。2001年産総研生活環境系特別研究体ナノ界面機能科学研究グループ、2007年ユビキタスエネルギー研究部門ナノ材料科学研究グループ研究員。主として走査プローブ顕微鏡によるナノヘテロ触媒や機能材料の表面構造、電子状態の解析に従事。本論文では金/無機系の走査プローブ顕微鏡観察を担当した。

田中 孝治 (たなか こうじ)

1991年東京大学大学院工学系研究科金属材料学専攻博士課程修了(工学博士)。同年日本学術振興会海外特別研究員。1994年大阪工業技術研究所(現産業技術総合研究所)入所。2001年産総研生活環境系特別研究体ナノ界面機能科学研究グループ、2004年ユビキタスエネルギー研究部門ナノ材料科学研究グループ主任研究員。主として、電子顕微鏡による構造解析、材料評価に従事。材料組織と材料物性の相関を明らかにし、材料設計理論を構築することに力を置いている。本論文では電顕観察の各種サポートを担当した。

岡崎 一行 (おかざき かずゆき)

2000年大阪府立大学大学院理学系研究科物質科学専攻博士課程修了(博士(理学))。同年JST重点研究支援協力員として大阪工業技術研究所(現産業技術総合研究所)に赴任。2005年より、JST-CREST研究員として産総研ユビキタスエネルギー研究部門ナノ材料科学研究グループに所属。2008年より、大阪大学大学院工学研究科機械工学専攻特任講師。この間、第一原理計算による貴金属/無機化合物系(金触媒や燃料電池電極触媒)の表面・界面の原子・電子構造と反応特性の研究に従事。本論文では金/酸化物界面や白金/炭素界面の第一原理計算を担当した。

吉川 純 (きかわ じゅん)

2006年大阪大学大学院理学研究科物理学専攻博士課程修了(博士(理学))。同年産総研特別研究員として、ユビキタスエネルギー研究部門ナノ材料科学研究グループに所属。2008年10月より、大阪大学大学院基礎工学研究科システム創成専攻助教。分析電子顕微鏡によるリチウムイオン電池材料やナノ構造体の研究に従事。本論文ではリチウムイオン電池正極材料の電顕観察を担当した。

査読者との議論

議論1 マネージメントへの期待について

質問・コメント(五十嵐 一男)

本論文では、同じ研究ユニット内に開発(第2種基礎研究)と解析(第1種基礎研究)に関わるグループ(人材)を配置し、それらの中で「分業」と「連携」をバランスよく、有効に進めることによって飛躍的な材料開発を行うことが可能と述べられていますが、1つの考え方として賛意を表します。これに関連して1つご意見を伺います。本論文の場合、ユニットの総意の下でなされたことと理解していますが、総意を形成するため組織を統括している長の役割も重要であると考えます。そ

ここで、総意を形成するにあたり一般的に組織の長にどのようなマネージメントを期待しますか。

回答（香山 正憲）

我々のユニットでは、当初より、「開発」と「基礎解析」を有効に連携させ、飛躍的な研究の進展を図ること、そのための方法論を確立することを目標の1つに掲げています。これは、ユニット長の意向でもあり、ユニット設計に当たって多くのメンバーで議論し、挑戦的で意義のある課題と捕らえてきました。第3章のはじめに議論しているように、「開発」と「解析」の連携には、①両者の研究のベースや位相がしばしば合わない、②実際の複雑な材料の解析は必ずしも容易ではなく、粘り強い努力が必要となる、③両者の研究者の価値観、問題意識にずれがあるなど、阻害要因があります。そうした事情を組織の長が理解し、研究者の困難や悩みに耳を傾け、辛抱強く支援すること、連携を成功させることの意義を鼓舞すること、などが望ましいと考えます。

議論2 新材料を開発するための理想的な組織・体制について

質問・コメント（村山 宣光）

材料探索からモジュール化までを視野に入れたときの、理想的な組織・体制について、ご意見をいただけないでしょうか。論文では、評価・解析グループと材料開発グループが同じ場所で研究を進めることの有効性を指摘されていますが、一方で、インターネット等を活用した距離を感じさせない研究も可能になっています。例えば、著者が所属されている産総研内の組織・体制、さらには大学、産総研のような研究独法、企業の連携において、理想的な組織・体制についてご意見をお聞かせください。

回答（香山 正憲）

一般的には、必ずしも同じ研究場所で共同研究をしなくても、様々な手段を通じて、有効な連携を実現させることは可能と考えます。また、研究課題の性質といますか、長期的に掘り下げた研究の場合には、開発と基礎が別々の場所で研究を進め、適宜共同の討議を進める、という形でよいと考えます。実際、我々もその種の共同も進めてい

ます。ただ、より緊急の集中した問題解決の取り組みや、研究組織として、本格研究を有効に遂行するという見地からは、当ユニットのような開発と解析の両者が日常的に連携できる組織の利点は大きいと考えます。例えば、上記の連携の阻害要因は、同じユニットでの日常的な議論を通じて、より緩和しやすくなります。また、特に基礎解析側にいえることですが、従来の狭い枠に安住しないで、開発側の技術的、社会的な要請に応じて、新しい課題やより困難な課題に挑戦しようとする意欲は、同じ研究組織で目的を共有し、「本格研究の一翼を担う」という高い使命感があってこそ、生まれてくるものです。

議論3 計測産業との連携について

質問・コメント（村山 宣光）

評価・解析の研究は材料開発に大きく貢献するという点は、本論文でよく理解できました。さらに、評価・解析の研究は、新しい計測技術や計測装置の開発を促し、計測産業の発展に貢献すると思います。この点について、ご意見をお聞かせください。

回答（香山 正憲）

計測技術や計測装置の開発は、材料開発の現場と結びつくことで、より促進されるといえます。今回紹介したリチウムイオン電池の正極材料の研究では、我々はリチウムイオン濃度の実空間観察技術を独自に開発しました。また、様々な触媒研究では、ガスを導入した触媒反応の「実環境下その場観察」技術開発の現場とも関わっています。もちろん、計測装置の開発自体を我々がメインで行うことはできませんが、他の研究グループや企業との共同の形で、計測装置開発への展開も考えています。

計測技術や装置を開発している企業も、実際に装置を使用する技術者や研究者が現場で扱っている物質・材料の複雑な現象を熟知しないと、優れた開発は行えません。特に原子・電子レベルの計測・評価など、高度化するほど、この傾向は強くなります。この点で、当産総研においても、材料開発やエネルギー環境技術開発の現場と、基礎解析や計測評価の研究グループとの間の研究交流や人材交流は、極めて有益と考えます。

蒸留プロセスのイノベーション

— 理想状態からの「デチューニング」によるプロセス強化 —

中岩 勝*、大森 隆夫

本稿では、プロセス強化を実現する1つの方法論として、理想状態からの「デチューニング」という概念による省エネルギー化技術開発のアプローチ法を示し、内部熱交換型蒸留塔 (HIDiC) を含む蒸留プロセスの開発を例として議論した。まず、典型的なエネルギー多消費プロセスである連続蒸留の特徴及びその理想状態である可逆蒸留操作の概念について説明した。次に、可逆蒸留を出発点として「デチューニング」により様々な省エネルギー型蒸留プロセスを導出することができることを示した。その1つであるHIDiCの特徴を他のプロセスと比較して議論し、NEDOプロジェクト等によるHIDiC技術開発の経緯と産総研の役割を論じた。

キーワード: プロセス強化、蒸留プロセス、省エネルギー、デチューニング

Innovation in distillation processes

– Process intensification for energy savings through concept of “detuning” from ideal state –

Masaru Nakaiwa* and Takao Ohmori

A methodology of process intensification was discussed through the concept of “detuning” from the ideal state, especially for the energy-saving continuous distillation processes, which are typical energy consumer in the chemical and petrochemical industries. First, the reversible distillation was shown as the thermodynamically ideal state. Then, it was indicated that several energy efficient modifications of distillation processes can be obtained by “detuning” or simplifying the reversible system. Among these modifications, an internally heat-integrated distillation column (HIDiC) was one of the most promising options. The development of the HIDiC in the national projects was reviewed and the reduction of energy consumption by the HIDiC was estimated to be 60 % of the conventional column from the results of the projects.

Keywords: Process intensification, distillation process, energy-saving, detuning

1 はじめに

化学プロセスやそれを構成する反応装置・分離装置などを研究対象とする化学工学の分野において、「プロセス強化」が新しいパラダイムとして議論されている。プロセス強化は、プロセス・インテンシフィケーション (Process Intensification, PI) の訳語である。ただし、PIの定義は現状ではそれほど明確ではない。平田が述べているように^[1]、PIを実現した結果としてプロセスの性能が飛躍的に向上する、というのが研究者の間で認められている数少ない共通認識である。オーダーを超えた、すなわち少なくとも10倍以上の飛躍的な向上が目標であり、それをクオラム・リープ (Quantum Leap) と呼んでいる。従来の技術の延長では、プロセスや装置の改善・改良にとどまり性能の向上はせいぜい数10%程度しか達成できない。クオラム・リープの実現には、

作動原理から装置のサイズや形状までも考慮した、根本的な発想の転換が必要となる。

PIの歴史を振り返ると、この用語自体は新しいものではないことがわかる。黒田と松本によれば^[2]、すでに30年以上前に英国でプラントやプロセスの安全設計・小型化にPIという言葉が使われている。ただし、英国を含めた欧州から米国へ、そしてわが国においてPIへの関心が高まったのはStankiewicz and Moulijnの記事^[3]が発端である。その後、彼らのPIについての考え方も少しずつ変わっているが^{[4][5]}、PIのキーワードとなっているのはプロセスや装置のコンパクト化・マイクロ化・工程数削減などの「小型化」・「単純化」、性能向上や省エネルギー化などの「高効率化」、反応と分離あるいは蒸留と伝熱といった複数の操作を1つの装置で行う「統合化」・「複合化」、廃棄物の削減

産業技術総合研究所 環境化学技術研究部門 〒305-8565 つくば市東 1-1-1 中央第5
Research Institute for Innovation in Sustainable Chemistry, AIST Tsukuba Central 5, Higashi 1-1-1, Tsukuba 305-8565, Japan*E-mail: nakaiwa-m@aist.go.jp

Received original manuscript October 24, 2008, Revisions received January 13, 2009, Accepted January 13, 2009

などの「安全性向上」などである。このように説明すると、PIは産総研が提唱しているミニマルマニファクチャリング (MM)^[6]と共通点が多いことがわかる。真に必要な原料や装置のみで必要な時に必要なだけ部材や製品を製造するMMの概念は、化学プロセスを対象としているPIよりも上位の概念と言うこともできる。MMでは、「省エネ・省資源」、「高効率・低コスト」、「高機能・新機能」という、時には相反するような要求を同時に満たすことを目標としているが、それはPIでもまったく同じである。

著者らは、蒸留プロセスの省エネルギー化を目的として、蒸留操作と伝熱操作を「統合化」した内部熱交換型蒸留塔 (Heat Integrated Distillation Column, HIDiC) プロセスの開発を行ってきた。基礎研究から実用化までの道のりは決して平坦ではなく、振り返ってみると本格研究の展開そのものであったとの自負がある。さらに、もちろん当初から意図したものではないが、PIの成功例の1つと位置付けることもできる。以下では、HIDiCプロセスの実用化までの過程や考え方やアプローチ方法について、PIと関連付けながら記述する。特に、ここでは熱力学的理想状態からの「デチューニング」による新規プロセスの設計・開発を、PIの一手法として提示することを試みる。

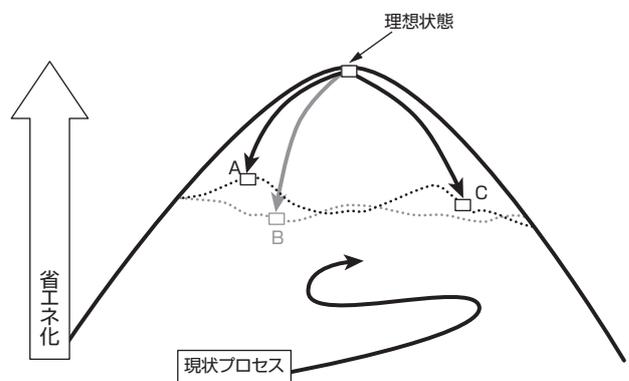
2 省エネルギー化へのアプローチ - 熱力学的理想状態と「デチューニング」

PIとしての蒸留プロセスのイノベーション・省エネルギー化を論じるために、まず「省エネルギー」の概念を確認しておきたい。「省エネ化によってエネルギー消費が20%削減された」というような記述をしばしば目にする。特にあいまいではなく、日常的な表現としては問題ないが、熱力学的には検討の余地がある。なぜなら熱力学の第一法則によれば、エネルギーは保存されるものであり、消費できるものではないからである。「小型車に買い換えたら燃費が20%良くなった」ときに削減されたものは、同じ距離を走行した場合に消費されたガソリンや軽油という燃料であり、エネルギーそのものではない。自動車では、燃料という物質の保持する化学エネルギーがエンジン (ガソリン車の場合は Otto サイクルという熱機関) により燃焼という化学反応を通じて一旦は熱となり、その一部が仕事に変換され走行に使われている。電気自動車やハイブリッド車を除いて、燃費の良いエンジンとは基本的にはこの変換効率の高いものを指している。変換効率の上限は、熱力学的な理論効率として温度等の条件により規定される。逆に言えば、現状のガソリンエンジンにおける燃料から動力への変換効率には理論的限界値が存在する。エンジンの高効率化は燃費向上のための重要なアプローチであるが、熱力学

的限界値を超える高効率化は原理的に不可能である。もう1つ例を挙げると、圧縮機を用いる冷蔵庫の動作原理は逆カルノーサイクルと呼ばれる熱機関であり、その理論効率すなわち同じ電力でどれだけ熱量を庫内から庫外に放熱できるかは、庫内冷却温度と庫外放熱温度により決まる理論的限界がある。同一の使用条件で動作する逆カルノーサイクル以上の省電力を達成することはできないのである。

以上の例を考察すると、次のように考えることができる。すなわち、省エネルギー化とは、同一の機能を発現させるために、外部から供給しなければならないエネルギーを極力少なくすることである。その際に、どこまで削減できるかはそれぞれの機能により理論的な限界がある。見方を変えたと、省エネルギー化とはいかに理論的限界に近い条件で機能を発現させていくかということになる。ここでは、理想状態のプロセスから実現可能なプロセスへの変更を「デチューニング」(detuning) と呼ぶことにする。一般的には、デチューニングはF1などのレーシングカーで培ったエンジン技術を市販車に移植する際に、コスト・耐久性・扱いやすさなどを向上させるためにエンジン性能等を下げの場合などに用いられる用語である。省エネルギーの分野ではよくターゲッティング (targeting) という言葉が使われるが、これは現状プロセスから省エネ目標を定めて、より高効率なプロセスを目指すとのニュアンスを持つ語である。本稿では、これとは逆に、あらかじめこれ以上省エネ化できない理想状態 (非現実的なイニシャルコストや装置構造が必要) を明らかにし、そこから省エネ性を多少犠牲にすることで実現可能なプロセスを具現化する、との技術開発の戦略を提示する。その点を強調するためにあえて「デチューニング」という耳慣れない言葉を使うことにする。

注意しなければならないのは、理想状態から実現可能な状態への「デチューニング」は、必ずしも一次元的ではないということである。図1は一般論として、あるプロセス



A,B,C:理想状態からのデチューニングで得られた新プロセス

図1 理想状態からのデチューニング

の省エネ化を進める際のアプローチを模式化したものである。ここでプロセスの改善・改良などによる通常の省エネ化は、山のすそ野から少しずつ山を登っていくことに相当する。これに対して「デチューニング」では、まず山の頂上を確認しておき、そこから省エネ性を勘案しつつコスト等も考慮しながら山を下りていくイメージとなる。このとき下山する経路は1つではなく、経路により降り立つ地点も変わってくる。このような省エネ化アプローチには、主として2つの特長がある。1つは、理論的限界から下りてくるため、技術開発として考えた場合に原理的に不可能な目標設定にはなり得ないことである。もう1つは、ある「デチューニング」による現実化が様々な要因で困難となったときには、山頂に戻って別の下山経路を検討することが比較的容易なことである。問題点としては、「デチューニング」の結果が現状のプロセスから大きくかけ離れたものになってしまう可能性が挙げられるが、逆に言う「不連続で急激な動的变化を伴う変革」であるPIを実現しようということにもなる。

3 「デチューニング」による蒸留プロセス省エネ化の戦略

まず前節の議論を踏まえて、蒸留プロセスの省エネルギー化の歴史を振り返ってみる。蒸留プロセスは紀元前に香料を精製するために使用されるなど、最も古くから使われている化学プロセスの1つである。その原理は加熱による溶液の蒸発と冷却による凝縮で、溶液成分の沸点差に基づいて液体を分離するというものである。操作としては、容器に仕込んだ原料液を一定時間加熱し、発生する蒸気を冷却・液化して集める、いわゆる単蒸留が行われていた。その後アルコールや酸の製造など、またイタリアのルネッサンス期には錬金術(オカルトではない自然の理を利用する技)の重要な技術として、蒸留操作は蒸留酒を始めとして様々な応用されてきた。それが18世紀から19世紀にかけて、

熱がエネルギーの1つの形態であることや蒸発潜熱の概念が明らかにされ、蒸気の持つ熱で液体を加熱可能となり、様々な試みを経て19世紀末に原油からの自動車用燃料精製のニーズにより現在の連続蒸留プロセスの基礎が確立された^{[7][8]}。この単蒸留から連続蒸留への展開は、蒸留操作については「単純化」しつつ、プロセスの性能としては高性能・連続・大量処理などの「高効率化」を実現したものであり、PIの実現であると言えることができる。蒸発潜熱という当時の最新の科学的発見が、プロセスの大きな変革をもたらしたのである。

一般的な連続蒸留塔の概略を図2に示す。原料を供給する部分より上部を濃縮部、下部を回収部と呼んでいる。濃縮部では原料より低沸点成分の濃度が高く、回収部では高沸点成分の濃度が高い。内部ではトレイまたは段と呼ばれる棚状の構造物や様々な形状の充填物により、下部より上昇する気相混合物と上部より下降する液相混合物が接触するように工夫されている。この接触により気相混合物と液相混合物の間で蒸発潜熱が移動し相変化する。この際に、発生する気相は液相よりも低沸点成分に富み、液相は気相よりも高沸点成分に富むことになる。したがって、塔の両端に向かって低沸点成分と高沸点成分を濃縮することが可能となる。このような原理から、蒸留塔では液相を分離するにもかかわらず、溶液をいったん気相に変換するために必要な蒸発潜熱を塔底のリボイラーから供給しなければならない。また塔全体にわたって物質移動のための気液接触が可能となるように、塔頂のコンデンサーで蒸気から凝縮潜熱を奪って再び液相に戻す操作も必要となる。

連続蒸留塔プロセスでは、上記のように塔全体で気液接触を行わせるために塔頂と塔底で冷却と加熱を同時に行う。熱力学的な解析によれば、図3のように蒸留塔の濃縮部で高さ方向に沿って連続的な冷却を行い、回収部で

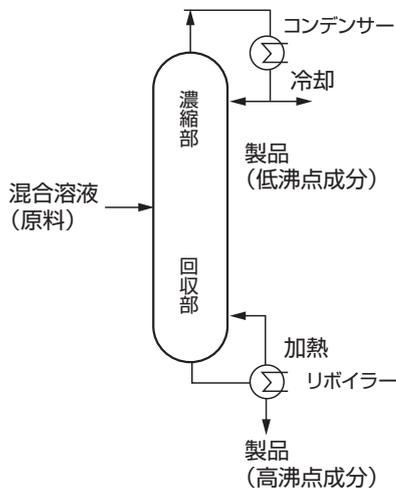


図2 通常の連続蒸留塔

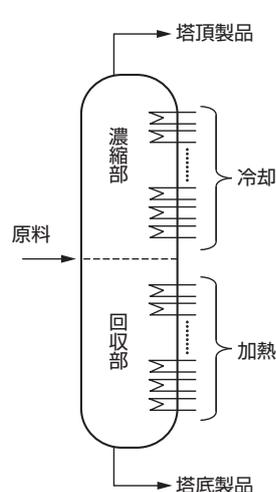


図3 可逆蒸留操作

連続的な加熱を行うと、理論的に最も効率的な蒸留操作が可能であることが示されている^{[9][10]}。この操作は可逆蒸留操作と呼ばれ、具体的には段数無限大の蒸留塔を用いて濃縮部の段ごとでは無限小の熱量による冷却を行い、回収部の段ごとでは無限小の熱量による加熱を行うことになる。これが熱力学的に理想条件での連続蒸留操作であり、蒸留塔の省エネルギー化がどのような形で進められようと、また新規な省エネルギー化手法が今後開発されるとしても、最も効率の高い操作は可逆蒸留操作である。どのような省エネルギー化技術であっても、省エネルギー化が進めば進むほど可逆蒸留操作に近づくことになる。言い換えると、蒸留プロセスの省エネルギー化とは、経済的に成立する範囲内でいかにプロセスを可逆蒸留操作からそれほど性能を落とさずに「デチューニング」するかということになる。ただし、蒸留操作の本質である「物質移動」操作に、加熱・冷却といった強制的な「熱移動」操作を持ち込むことは大きな変化を与えることになり、その影響をどのように考えるかが効果的なプロセスの達成に非常に重要となる。したがって次のステップは、この点を踏まえてどのような装置構造を採れば「デチューニング」が可能となるかについての検討であり、これはPIを実現するための1つの過程と捉えることができる。

4 「デチューニング」を実現する装置構造

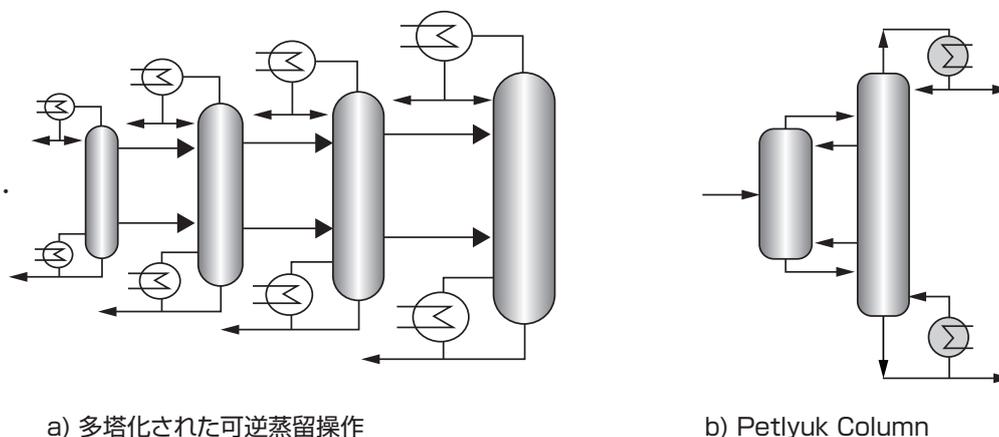
「デチューニング」を行うためには、理想状態である可逆蒸留をどのように解釈するかが重要となる。図3の可逆蒸留塔は、多数(無限個)の加熱器(リボイラー)と冷却器(コンデンサー)で構成されている装置と見なすことができる。これらを高さの異なる多数(無限)の蒸留塔に分解すると、図4a)のような構成になる。ここで、本来無限個の蒸留塔で構成される図4a)をたかだか2本の蒸留塔に「デチューニング」して「単純化」すると図4b)になる。このプロセ

スは、1960年代にPetlyukらによりその特性が研究され、一般にPetlyuk塔と呼ばれている^[11]。この考え方の延長でさらに単純化が検討され、ドイツBASF社等により開発された蒸留プロセスが欧州のプラントを中心に実用化されている。わが国では協和発酵(株)や住友重機械工業(株)により商用機が開発されている^[12]。

もう1つ別の視点で可逆蒸留操作を捉えた例を次に示す。蒸留塔では、基本的な特性として上部ほど低沸点成分の濃度が高く温度が低い。ここで、先に述べた逆カルノーサイクルの原理を用いると、低温熱源から取り出した熱を高温にして供給することが可能となる。この観点からの「デチューニング」のアプローチを図5a)に示す^[13]。圧縮機はヒートポンプの役割を果たしており、蒸留塔とヒートポンプを「統合化」したプロセスである。この図では、多数の圧縮機を用いて上部から抜き出された熱を圧縮により昇温して下部に供給している。これにより、圧縮仕事の投入を除けば可逆蒸留操作に近いプロセスとなる。そこで圧縮機は1機だけ使い、濃縮部と回収部の各1箇所のみで熱交換を行うように「デチューニング」すると図5b)となる。この図のような装置は、一般に蒸気再圧縮塔(Vapor Recompression Column, VRC)と呼ばれている。VRCは、塔頂と塔底間の温度差が比較的小さい場合に有利とされ、低濃度のエタノール濃縮などで実用化されている例がある。VRCでは、塔頂と塔底という装置内で最も温度差の大きな部分の間でのみ熱の授受を行い、しかも加熱と冷却も各1箇所のみで行っている。これにより可逆蒸留操作よりも装置を「単純化」できるが、可逆蒸留操作との乖離は大きくなり省エネ性も限定的なものとなっている。

5 より理想状態を目指したHIDIc

前節で紹介したPetlyuk塔とVRCは、それぞれ独立した省エネ蒸留のアイデアであり、図1のBやCに相当する。



a) 多塔化された可逆蒸留操作

b) Petlyuk Column

図4 多塔による可逆蒸留操作へのアプローチ

装置の基本構造はまったく異なるが、理想状態からの「デチューニング」の考え方に立てば共通した方法論に基づくものとして整理できるのである。それでは他に「デチューニング」は考えられないだろうか。VRCの「デチューニング」のポイントは、濃縮部の1箇所と回収部の1箇所を熱を移動させることであった。熱移動を行わせる箇所を1箇所ではなく複数にすれば、より理想状態に近づけることができる。しかし、それには複数個の圧縮機が必要となり現実的ではない。そこで、多数の箇所での熱移動を可能とする現実的な装置構造を検討するために、もう一度通常の連続蒸留塔(図2参照)の特性を考えてみる。通常の連続蒸留塔は、高さ方向の濃度変化により上に向かって塔内温度が連続的に低下する。この特性は可逆蒸留操作でも同じであり、濃縮部の冷却温度は回収部の加熱温度より必ず低い。したがって、濃縮部から取り出した熱をそのまま回収部の加熱に用いることはできない。図5ではこの問題を解決するために、圧縮機(ヒートポンプ)による昇温を利用している。

それでは多数箇所での熱移動をシンプルに達成するにはどうすればよいであろうか。図5a)では、濃縮部の多数の冷却点の全てが回収部の多数の加熱点の全てよりも温度が低くなっている。もし濃縮部の温度が回収部より高ければ、冷却点からの熱はそのまま加熱点に供給することができる。濃縮部の温度を高くすることは可能であろうか。蒸留分離は気液の平衡関係を利用しており、圧力を上げれば同じ組成で平衡温度を高くすることができる。したがって、濃縮部の圧力を回収部よりも高くすればよいことになる。そのためには濃縮部と回収部を分割し、濃縮部の圧力を全体で熱移動が可能となる温度まで上げればよい。こうすることで、濃縮部で取り出された熱は直接回収部に供給することが可能となる。濃縮部全体の圧力を上げるには回収部からの蒸気を圧縮すればよい。それに必要な圧縮機は1機で十分である。

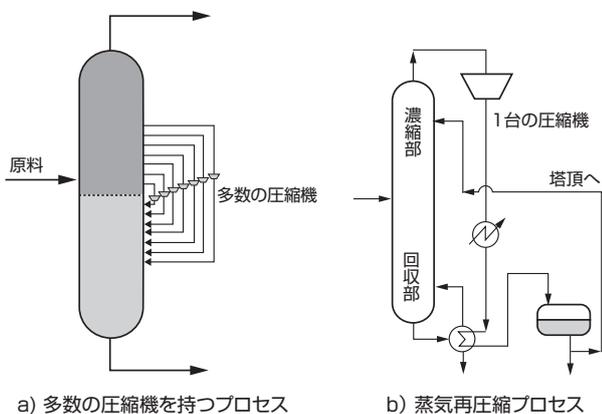


図5 多数の圧縮機による可逆蒸留操作へのアプローチ

濃縮部の温度が回収部よりも高くなれば、熱移動には様々な方法が考えられる。最もシンプルなもの、濃縮部と回収部を直接接触させる方法であろう。このように、圧縮操作を加えることにより可逆蒸留操作をほとんどそのまま具現化し、省エネ化を中心とした「高効率化」を目指したものがHIDiC(図6参照)なのである^[4]。著者らは、これもまた一種の「デチューニング」であると考えており、図1のAに相当する。また、HIDiCは蒸留と伝熱さらにヒートポンプの三者を「統合化」したプロセスと捉えることもできる。HIDiCでは、塔頂と塔底の温度差が小さく蒸留分離の困難な溶液系ほど省エネ化が図れる。比較的沸点差の小さなプロピレン/プロパン混合系では、通常の蒸留塔と比較して1/10程度のエネルギーで分離できるとの結果が得られている。表1には、HIDiCとVRC及びPetlyuk塔の特徴を簡潔にまとめて示した。表中の「イニシャルコスト」は、蒸留塔本体の製作費である。蒸留塔の建設一式で考えると、このほかに配管や計測等のコストが必要であり、本体価格差ほどの差にはならない。また、「適用性」は工業的に適用可能な溶液系の分離仕様の範囲の広さを表している。HIDiCは、塔の高さ方向の温度勾配がおおむね均一になるような系に特に向いている。石油化学工業の主力製品であるベンゼン/トルエン/キシレンの混合溶液や、粗シクロペンタン精製を含む多くの蒸留分離はこの条件にあてはまる。またPetlyuk塔は低濃度の不純物除去には向いており、VRCは沸点差の小さな溶液の分離に適用性がある。通常の蒸留塔は、これらより適用性は広く一般論としてイニシャルコストも有利な場合が多い。HIDiCは可逆蒸留操作の概念をより忠実に具現化しており、Petlyuk塔と比較すると省エネ性能・適用範囲とも上回り、またVRCの問題点である必要な圧縮による昇温幅の点で大き

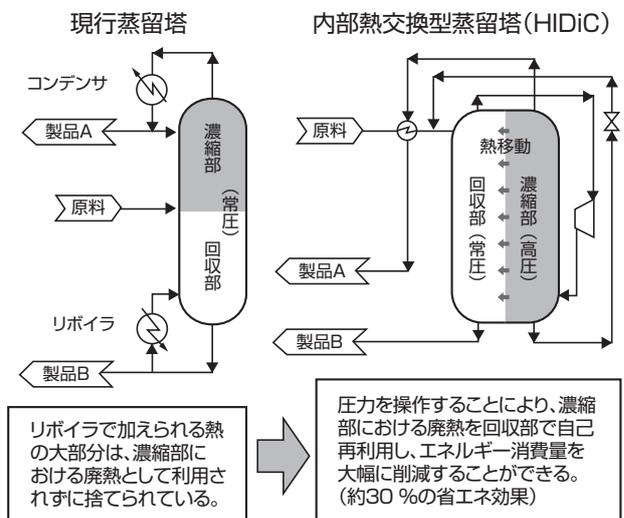


図6 内部熱交換型蒸留塔(HIDiC)

く改善されているため省エネ性能で有利となっている。分離仕様の条件にもよるが、Petlyuk 塔や VRC に対して 20% 以上の省エネ化が期待できる。

HIDiC の基本的な概念は、1970 年代に米国ノースウェスタン大学の Richard Mah 教授により空気分離等の深冷蒸留分離を対象として発表された^[15]。Mah 教授はこのシステムを SRV (Secondary Reflux and Vaporization) 蒸留と呼んでいる (図 7 参照)。ただし、この論文の中では理論的な可能性のみが示されただけである。論文の中では空気分離のような低温で沸点差の小さな系で省エネになることを示しているが、実現性についてはほとんど考慮されていなかった。Mah 教授自身、もともと実現可能性は低いと考えていたようである。実際、このアイデアについての特許は出願されておらず、したがって HIDiC 技術については初めから基本特許と呼べるものが存在していない。Mah 教授はもともと蒸留分離の専門家ではなく、グラフ理論の応用によるプロセスフローの最適化などの研究を行っていた。そして 1970 年代中ごろの第 1 次オイルショック後に、化学プラントの中で最もエネルギー多消費である蒸留プロセスに着目し、本格的に省エネルギーに関する研究を開始したと推察される。当時、蒸留塔は断熱材などで塔本体を包み、塔頂や塔底以外の部分での熱の出入りを極力小さくすることが工学的な常識であり (現在も基本的には変わっていない)、積極的に塔本体で熱を出入りさせるという操作はまったく常識外であった。1980 年代始めに Mah 教授の下で SRV 研究を行った清水和幸九州工業大学教授によれば、SRV を発表した当時の米国化学工学会 (AIChE) の反応は非常に冷たいものであり、「論文のための研究」と見なされほとんど無視されたそうである。その後、1980 年代前半に主として米国で研究論文及び特許によりいくつかの提案がなされたが、いずれもアイデアや概念の提示にとどまり、実用化を視野に入れた研究はまったく行われなかった。

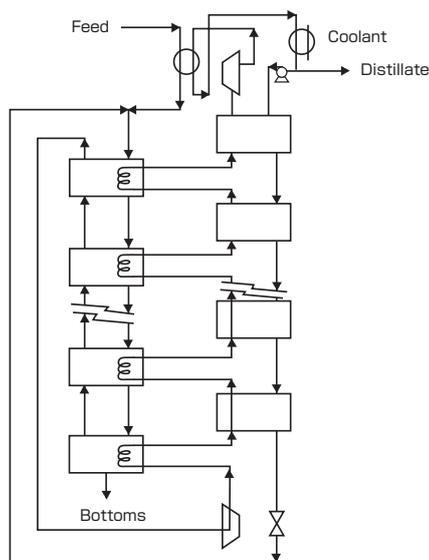
6 HIDiC 実用化への道のり

Mah 教授が最初に論文を発表してから数年後に、高松武一郎京都大学教授 (当時) がこのアイデアに注目し、プロセスの基本的な特性に関する研究を開始した。当時、

表 1 HIDiC と他の省エネ蒸留技術の比較

	省エネ性	適用性	操作範囲	イニシャルコスト
HIDiC	○	○	○	△
VRC	△	△	△	△
Petlyuk	△	×	△	○

高松教授は化学プロセスの熱力学解析やエクセルギー解析に関する研究を行っており、その過程で HIDiC の省エネルギー性の高さに着目したと思われる。1980 年代半ばより、著者らは工業技術院化学技術研究所 (物質工学工業技術研究所を経て現産総研) において、高松教授との共同研究等によりこのプロセスの特性を理論的及び実験的に解明した。著者らはまず、分離の条件と操作圧力を与えることで、塔の高さや段数及び必要な伝熱面積などを決めることができ、塔全体の設計が可能であることを理論的に示した。また、高圧側の操作圧力はできるだけ小さいほうが省エネとなるが、熱力学的には限界があり、その値は分離の条件を与えれば決まることを明らかにした。実験的には小型の装置を用いて、内部熱交換による塔底の加熱量を削減できることを実証した。ただしこの装置は圧縮機が塔本体よりも大きなものであり、圧縮効率も低く電力を含めた省エネルギー性を示すことはできなかった。工業技術院では、その時期に「スーパーヒートポンプ・エネルギー集積システム」のプロジェクトを実施しており、著者らは HIDiC 技術が広い意味でのヒートポンプ概念による産業プロセスの省エネルギー化として位置付けられるものと考えていた。1990 年代に入ると、イギリス・フランス・ハンガリー等の大学の研究グループにより実験的なアプローチを含めた研究が進められたが、実用化への見通しは得られなかった。一方、わが国では「広域エネルギー利用ネットワークシステム」プロジェクトが 1993 年から 2000 年までの期間で実施され、その中で上記の研究成果をベースに HIDiC の研究開発が、工業技術院及び新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 委託事業 (木村化工機 (株)、丸善



Mah R.S.H., et.al., AIChE Journal, Vol. 23(5), 651-658 (1977)

図 7 SRV 蒸留の概念

石油化学 (株)、関西化学機械製作 (株) の 3 社が受託により進められた。1999 年 12 月には、丸善石油化学 (株) 千葉工場内に塔径約 300 mm で高さ約 25 m のプロトタイプ実験塔が建設され、ベンゼン/トルエン系で 300 kg/h の小規模な処理量ながら、世界で初めて 100 時間以上安定した連続運転に成功した。

この成果を発展させるべく、経済産業省と NEDO により地球温暖化防止新技術プログラム/内部熱交換による省エネ蒸留技術開発プロジェクトが、著者らの 1 人をプロジェクトリーダーとして 2002 年 9 月に開始された^[16]。参加した民間企業は、石油・化学産業分野をターゲットとした木村化工機 (株)・丸善石油化学 (株)・関西化学機械製作 (株) の 3 社と、空気分離をターゲットとした日本酸素 (株) (現大陽日酸 (株)) と (株) 神戸製鋼所の 2 社である。プロジェクトでは、主に規則充填物を用いた濃縮部を胴側とし回収部をチューブ側とする図 8 a) に示すような二重管構造の基本設計について検討を行った。2003 年度末には、丸善石油化学 (株) 千葉工場に 12 成分系を対象とするパイロットプラント (図 8 b) 参照) の建設が決定された。この試験装置は、図 8 c) に示すように 7 本の二重管を束ねた形状になっており、気液の負荷に合わせて内管径を 3 段階に変化させ、各部分の塔負荷を調整するなど、PI を実現するための種々の装置上の工夫に基づいて製作が行われた。

パイロットプラントの建設は順調に進み、2005 年度には試験運転が行われた。最終的に 1000 時間の連続運転を達成し、さらに条件変動運転や外部の熱源を全く用いない運転等も行い、いずれの場合も設計時に想定した省エネ性能を実証する運転を安定的に行うことができた。運転結果で得られた省エネ率は、1 次エネルギー換算で既設蒸留

塔と比較して 62 %であった。投入電力約 30 Mcal/h に対して削減リボイラー熱量は 290 ~ 320 Mcal/h となり、投入電力量と得られた加熱量の比 (ヒートポンプの成績係数) では約 10 の高い値が得られている。NEDO プロジェクト終了後には、産総研と上記の石油・化学産業分野 3 社、及び新たに三菱化学 (株) と東洋エンジニアリング (株) の 2 社が加わった 6 者体制の共同研究 (コンソシアム) が開始され、本格的な実用化と普及体制について検討を行った。成果は各社に持ち帰られたが、まず木村化工機 (株) が 2008 年度より商用機の営業活動を開始している。一方、諸外国でも地球環境問題への対応を背景に、近年、HIDiC 研究開発が検討されており、特にオランダでは HIDiC プロセスの実用化研究が 2002 年 1 月より開始され、現在第 2 期研究開発を実施中である。このプロジェクトには、デルフト工科大学や ECN 国立研究所を中心として欧州の有力企業が参画している。

なぜわが国だけが先頭を切って実用化に目途をつけることができたのか? その解答は明確ではないが、著者らは HIDiC の持つ蒸留と熱移動を同時に達成するという特徴の実現に向けた戦術の相違にあると考えている。1980 年代の米国や 90 年代の欧州での研究では、濃縮部と回収部の熱移動をいかに大きくするか研究の主眼が置かれ、結果として物質移動すなわち蒸留性能への考慮が不足していたと考えられる。例えば、1980 年に出された米国特許では^[17]、濃縮部と回収部間の熱移動に多数のヒートパイプを用いている。これにより熱移動量は十分に確保できるであろうが、ヒートパイプによる塔内流れの阻害及び装置製作上の困難さから実現は極めて困難である。これに対してわが国では、シミュレーション技術を駆使して従来の蒸留塔

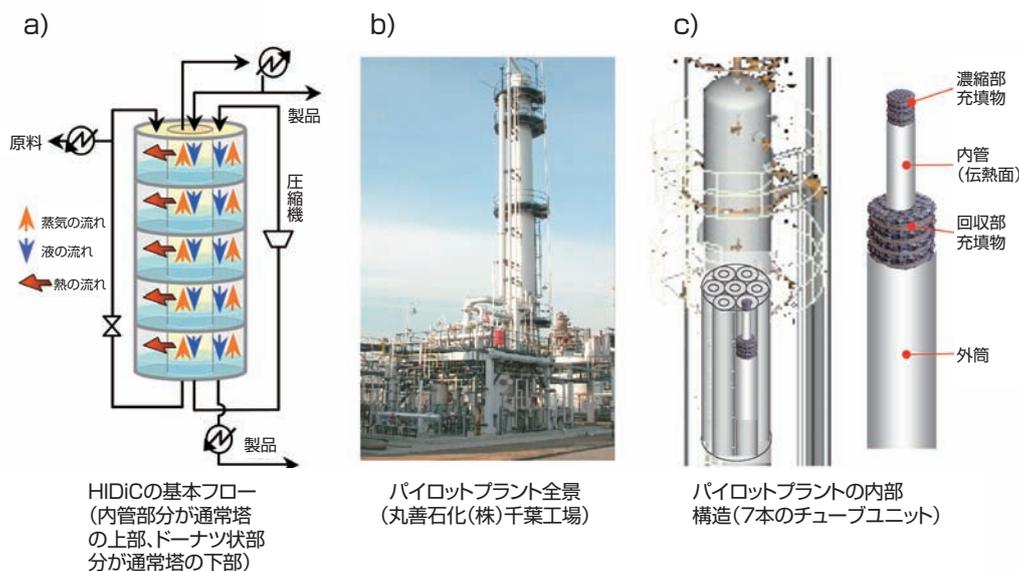


図 8 HIDiC の内部構造とパイロットプラント

と比較して蒸留性能の低下を防ぎつつ、熱移動性能に不足があれば高さ方向に塔を伸ばすことで伝熱面積を増やして補う方向で検討し、単純な二重管構造を採用して実用化に結びつけた。結局、蒸留と伝熱という2つのプロセスの「統合化」によりPIを実現したHIDiCではあるが、あくまでも蒸留塔の省エネ化が主眼であり、蒸留性能は維持しつつ伝熱を加えることによる省エネ性能向上を追及した戦術が功を奏したと考えている。

7 おわりに

本稿では、理想状態からの「デチューニング」という概念で、既存プロセスの省エネルギー化技術開発のアプローチ法を示し、著者らが進めてきた内部熱交換型蒸留塔(HIDiC)を含む蒸留プロセスに関する具体的な検討について記述した。ここで示したケースでは、a) ターゲットとなるプロセスの熱力学的(理論的)理想状態を明らかにする→b) 理想状態から実現可能な条件に「デチューニング」する→c) 「デチューニング」後の省エネ性・コスト・装置構造の実現性等を評価する→d) 結果が満足できなければ改めてb)に戻り別の「デチューニング」の道筋を探索する、という手順となっている。b)→c)→d)はループを形成し、これがPI実現の1つの道筋ではないかと考えられる。実際、HIDiCプロセスはこの概念により実用化までに至ったと考えている。以上、省エネ蒸留プロセスであるHIDiCプロセスの実用化までの過程について、PIと「デチューニング」の観点からアプローチ方法や考え方をまとめてみたが、シンセシオロジー発展の一助となれば幸いである。

参考文献

- [1] 平田雄志:プロセス開発の戦略-性能改善からプロセス強化へ-, *化学工学*, 69(3), 144-147 (2005).
- [2] 黒田千秋, 松本秀行:グリーンプロセス工学(GPE)とプロセス強化(PI), *化学工学*, 72(4), 180-183 (2008).
- [3] A. Stankiewicz and J.A. Moulijn: Process intensification: Transforming chemical engineering, *Chem. Eng. Prog.*, 96(1), 22-34 (2000).
- [4] A. Stankiewicz: Serving the triple bottom line: Process intensification role in sustainable manufacturing, *化学工学*, 69(3), 148-150 (2005).
- [5] J.A. Moulijn, A. Stankiewicz, J. Grievink and A. Gorak: Process intensification and process systems engineering: A friendly symbiosis, *Comput. Chem. Eng.*, 32(1-2), 3-11 (2008).
- [6] 五十嵐一男: 材料・製造技術の新たな取り組み, *産総研 Today*, 4(9), 4-5 (2004).
- [7] 頼実正弘: *蒸留工学*ハンドブック, 朝倉書店 (1966).
- [8] 加藤邦興: *化学機械と装置の歴史*, 産業技術センター (1978).
- [9] C.J. King: *Separation processes*, 2nd ed., McGraw Hill, New York (1980).
- [10] Z. Fonyó: Thermodynamic analysis of rectification I, Reversible model of rectification, *Intern. Chem. Eng.*, 14(1), 18-27 (1974).

- [11] F.B. Petlyuk, V.M. Platonov and I.V. Girsanov: The design of optimal rectification cascades, *Intern. Chem. Eng.*, 5(2), 309-317 (1965).
- [12] 化学工学会編: *化学工学の進歩第37集*, 楨書店 (2003).
- [13] 中岩勝: 超燃焼システム技術と自己熱利用による蒸留プロセスの省エネ技術, *日本燃焼学会誌*, 50, 235-241 (2008).
- [14] M. Nakaiwa, K. Huang, A. Endo, T. Ohmori, T. Akiya and T. Takamatsu: Internally heat-integrated distillation columns: A review, *Chem. Eng. Res. Design*, 81(1), 162-177 (2003).
- [15] R.S.H. Mah, J.J. Nicholas, Jr. and R.B. Wodnik: Distillation with secondary reflux and vaporization: A comparative evaluation, *AIChE J.*, 23(5), 651-658 (1977).
- [16] 中岩勝: 内部熱交換型蒸留塔(HIDiC)技術開発の今後の展開, *分離技術*, 36(4), 202-204 (2006).
- [17] D.J. Seader: Continuous distillation and method, *U.S. Patent* 4, 234, 391 (1980).

執筆者略歴

中岩 勝 (なかいわ まさる)

1980年京都大学工学部化学工学科卒業。同年工業技術院化学技術研究所入所。2001年から産業技術総合研究所環境調和技術研究部門熱利用化学システムグループ長。現在は、環境化学技術研究部門長。この間、米国カンザス州立大学での在外研究を含め、化学プロセスの省エネルギー化や非線形化学システムの実用などの研究に従事。本論文では、「デチューニング」を含めたHIDiCに関する部分を担当。

大森 隆夫 (おおもり たかお)

1984年京都大学大学院工学研究科化学工学専攻博士課程修了。日本学術振興会奨励研究員を経て、1985年工業技術院化学技術研究所入所。現在は、産業技術総合研究所環境化学技術研究部門主幹研究員(兼)化学システムグループ長。この間、米国ウェストバージニア大学での在外研究を含め、非線形現象、複雑系、プロセス強化等の研究に従事。本論文では、プロセス強化に関する部分と全体の構成を担当。

査読者との議論

議論1 既存装置との比較について

質問・コメント (水野 光一)

HIDiCが省エネ性や操作性に優れていること、これまでのVRCやPetlyukより優位であることは理解できます。しかし、本文中で述べられるコストなどに限界があるともいえます。例えば、既存の蒸留プロセスに比べて装置が複雑なため製作コストが高価である可能性もありますが、どのようにお考えでしょうか? 同様に、蒸留性能については本プロセスを他のプロセスと比較するとどのような差異がでるのでしょうか?

回答 (中岩 勝)

一般に蒸留塔は、分離すべき溶液の物性、どこまで製品純度を要求するか、処理量などにより装置の仕様が異なるため全てオーダーメイドであり、建設費の比較はケースバイケースになります。パイロットプラント(丸善石油化学(株)千葉工場、商業規模(原料1万2千トン/年)で12成分のガソリン留分精製)の実績ですと、HIDiC: 230,000千円という金額になります。原油価格を1バレル60ドルで試算した省エネによる年間ランニングコスト削減金額は約20,000千円です。同規模の通常塔の建設費は不明ですが、技術移転先である木村化工機(株)ではユーザーからの問い合わせに対して現時点では「従来型に比べてざっと2倍程度かかります」と回答しています。これをパイロットプラントに適用して、HIDiCと通常塔の価格差を年間ランニングコスト削減金額で除した単純投資回収年は5.75年にな

ります。パイロットプラントは温度計測等に通常塔では使用しない計測システムを導入するなど、やや特殊仕様になっており、実際の価格は多少変動するものと考えています。これらの詳細につきましては化学工学論文集 34 (4)、444 (2008) にまとめています。また、熱移動を伴わない場合の蒸留性能につきましては通常のプロセスと同程度と考えています。

議論2 理想状態とデチューニングでのエネルギー消費について

質問・コメント (水野 光一)

本研究で大幅な省エネが図られた訳ですが、エネルギー消費について理想状態と HiDiC とで差異を定量的に述べることは可能でしょうか？

回答 (中岩 勝)

これもケースバイケースですが、現時点では試算しておりません。HiDiC の理想状態は「可逆蒸留操作」ですが、断熱圧縮による気体の昇温、いわゆるヒートポンプ効果が加味されています。現時点で省エネ性はこの圧縮過程の使用エネルギーが支配的です。この過程の熱力学的理想状態は本文中にも記述しました逆カルノーサイクルです。最近の産業用圧縮式ヒートポンプのチャンピオンデータでは、実際の効率は逆カルノーサイクル効率の 50 % レベルと言われています。したがって、今後さらに使用エネルギーを少なくとも半分程度にできる可能性があると考えられます。もっと一般化して、混合物と精製物のエントロピー差で考えるとさらに 1 桁以上小さくできると思います。これらを定量化するにはエクセルギー解析などの熱力学的解析が有効です。

議論3 理想状態からのデチューニングについて

質問・コメント (立石 裕)

図 1 は概念としてわかりやすくよいと思いますが、反面、例示されている A,B,C がそれぞれどのような意味を持つのが不明です。理想状態からのデチューニングは、必ず何らかの条件設定をして近似操作をするものと理解されるので、そうした観点から説明を図の中に入れることはできないでしょうか。

回答 (中岩 勝)

図 1 は一般的な概念を述べたもので、必ずしも本稿の Petlyuk 塔や VRC と定量的に対応したものではありません。一般論であることを明確にするために、本文中の図の説明に加筆しました。

議論4 HiDiCに関する研究のポイントの説明について

質問・コメント (立石 裕)

蒸留プロセスのイノベーションという一段高い立場から HiDiC の研究開発を俯瞰するという全体的な構成はよいと思いますが、具体例としての HiDiC に関する産総研の研究のポイントの説明にもう一工夫ほしいと思いますがいかがでしょうか。理論検討、シミュレーション、実際の具体的な技術的工夫がどのように「統合」されたのかを、もう少し突っ込んで表現できないでしょうか。

回答 (中岩 勝)

産総研の貢献等に関しまして第 6 節に加筆しました。

創薬の効率を飛躍的に高めた化合物スクリーニング計算

— 3次元構造の化合物データベースの開発 —

福西 快文^{*1}、杉原 裕介²、三上 義明³、酒井 広太²、楠戸 寛³、中村 春木⁴

毎年、医薬品探索向けに数百万種類の化合物が、それらの構造式のカタログとともに販売される。我々はこれら構造式から3次元構造化合物データベースを作成するソフトウェアを開発し、2004年以降、化合物データベースの構築・配布を行ってきた。また、多数の蛋白質と、これら化合物をドッキングさせた結果もデータベース化して配布している。これらのデータベースをバーチャルスクリーニングに用いることで、我々は複数の標的蛋白質で高い確率で活性化合物を発見してきた。

キーワード: 化合物データベース、myPresto、バーチャルスクリーニング、in-silico drug screening、化合物ライブラリー

Advanced in-silico drug screening to achieve high hit ratio

– Development of 3D-compound database –

Yoshifumi Fukunishi^{*1}, Yuusuke Sugihara², Yoshiaki Mikami³,
Kohta Sakai², Hiroshi Kusudo³ and Haruki Nakamura⁴

Every year, several millions compounds for drug screening have been released by many vendors in the world, however, the structural information released on these compounds is limited to 2D. We have developed a software system to generate a database of 3D structures of these compounds and have distributed our database. We have also developed a database of protein-compound docking scores for 180 proteins for these millions compounds. Based on these databases, we have found new active compounds for many drug targets.

Keywords: Chemical compound database, myPresto, virtual screening, in-silico drug screening, compound library

1 はじめに

ポストゲノム時代の主たる目標の1つは創薬の革新であるが、遺伝子解析の爆発的な進歩に比べて創薬プロセスには困難がつきまとい、期待された成果が上がっていない。その中で、計算機薬物スクリーニング (in-silico ないしバーチャルスクリーニング (以後 VS という)) は、創薬プロセス効率化の1つの道と考えられている。VS は、医薬品の種となる分子を、既にある分子の中から選ぶ計算である。したがって、VS には、計算で扱うことのできる、分子構造の3次元化された化合物のデータベース (以後化合

物 DB という) が必須である。化合物 DB には、既に海外製品があるが、価格、品質、成果物の扱いに問題があるため自作した。手法は第4章に述べるが、化学情報学を用いたデータ重複の除去、分子力場法による3次元構造の作成と量子化学計算による原子電荷計算により化合物 DB を作成した。また、あらかじめ用意した多数の蛋白質と化合物との結合エネルギーを推算した新規な DB を開発した。これらの利用により創薬標的蛋白質に対して高い確率で活性化合物を予測できるようになった。

1 産業技術総合研究所 バイオメディカル情報研究センター 〒135-0064 江東区青海 2-41-6、2 株式会社 富士通九州システムエンジニアリング PLM ソリューション統括部ライフ・サイエンスシステム部 〒261-8588 千葉県美浜区中瀬 1-9-3 富士通幕張システムラボラトリー、3 株式会社 日立東日本ソリューションズ 計算科学ソリューション部 〒210-0007 川崎市川崎区駅前本町 12-1、4 大阪大学 蛋白質研究所 〒565-0871 吹田市山田丘 3-2

1. Biomedical Information Research Center, AIST Aomi 2-41-6, Koto-ku 135-0064, Japan *E-mail: y-fukunishi@aist.go.jp, 2. FUJITSU KYUSHU SYSTEM ENGINEERING LIMITED Life Science System Dept. PLM Solution Div., Nakase 1-9-3, Mihama-ku, Chiba 261-8588, Japan, 3. Hitachi East Japan Solutions, Ltd., Ekimaehonchou 12-1, Kawasaki-ku, Kawasaki 210-0007, Japan, 4. Institute for Protein Research, Osaka University, Yamadaoka 3-2, Suita 565-0871, Japan

Received original manuscript October 28, 2008, Revisions received December 9, 2008, Accepted December 9, 2008

2 目標

目標は、毎年市販される数百万種類の化合物をもとにして、VS で用いることができる化合物 DB を短期間に作成し、すみやかに医薬品産業界で利用可能にすることである。世界の主たる数十の試薬ベンダーは2次元の分子構造を記載した電子ファイルを試薬カタログとして配布しているが、VS では、2次元の化学構造式ではなく、3次元の立体的な分子構造が必要である。したがって、カタログ上の数百万種類の2次元構造式から3次元構造を作成し、それらをデータベース化して配布することとした。

3 価値

医薬品の開発は、いかなる手法であれ、最初は化合物データベースから標的蛋白質に結合しうるヒット化合物を探索することから始まる。現代的な創薬では、計算機を用いて化合物データベースを探索することは必須である。ここにはいくつかの問題があった。

(1) VS 用化合物 DB は、海外ソフトウェア会社により1980年ごろより医薬品メーカー向けに開発・市販されてきたが、年間1ライセンス当たり400-600万円と高価である^[1]。

(2) 化合物 DB を作成するためのソフト類も海外ソフトウェア会社より市販されている^[2]。我々もVSを行うため、高価な化合物 DB 作成ソフトなどを使ってみたが、品質に問題があり、しばしば誤った3次元分子構造を提示する、あるいは水素原子の付加に間違い・存在確率が低い構造の生成があるなどの問題があった。

(3) 化合物 DB を作成するための市販ソフトには、使用許諾条件上、生成したデータを他者に配布できない。

後に述べるように、我々は化合物 DB を元にして、蛋白質-化合物相互作用行列という新しいVS用DBを作成し、配布することが使命である。しかし、市販ソフトを用いると、この目的が達成できない。もし、化合物データ生成ソフトを自作し、さらに化合物 DB も自前で作成すれば、上記の問題が解決される。これらを配布すれば、高価なライセンス料を支払えない中小企業・アカデミック研究者にVSの利用を促し、大企業に対しても新しい高度なVS手法を普及できるなどの経済的・技術的效果が見込まれる。

4 プロセス

4.1 全体像

全体の開発プロセスを以下のように設定した。約10ステップある(図1)。試薬ベンダーから提供される2次元SDファイル^[1]には化合物の重複があるため、まず、これを除外する(例えばどのベンダーでもメタノールは売っている)。2次元構造式では通常、水素原子(H原子)が省略されてい

るためH原子を付加する。全ての原子に、原子間の距離や結合角などのパラメータを割り当てる。この情報をもとに2次元構造座標から3次元構造座標を生成し、光学異性体があれば光学異性体も発生させる。量子化学計算により原子電荷を計算し、等価な原子が等価な電荷を持つようにする。こうして生成した3次元データはリレーショナルデータベースに収録する。各ステップにつき市販ソフトが存在する場合が多く、それらの特許を回避するようにソフト開発を進めた。以下に各ステップについて述べる。

4.2 大量のデータの扱い

データは数が多いと取り扱いに困難をきたす。数百万の化合物情報は、1ファイルに格納するとファイルサイズが大きくなりすぎて計算機で扱えなくなる。1ファイルに1化合物を記載すると、計算機システムの制約上、数百万のファイルを1つのフォルダーに置くことができない。そこで、1ファイルに1化合物を記載し、1フォルダーに1万化合物程度を置き、このフォルダーを数百用意するという階層構造で数百万の化合物情報を扱うことにした。できあがりの化合物DBは64bitアーキテクチャー上で1つのリレーショナルデータベースとして保存できた。

4.3 分子の重複を除く:化合物同一性の判断

2つの分子が同一か異なるかを判定する必要がある。400万個の分子の同一性を判断する作業は400万x400万回に達するため、我々は下記に述べる高速な数段階での同一性判断法を開発した。また、速度を優先するために判断の精度を一定程度落とすことを許容した。なぜなら実際に購入した市販化合物には、構造式の同定の誤りや、品質管理の落ち度により実際の構造と異なる場合が数%ある。したがって、数学的厳密さを過度に追求しても意味がないからである。

4.3.1 擬似分子量による化学組成式の同一性判断

化学組成式は、分子に含まれる元素の種類と数を表記したものであり、メタノール(CH₃-OH)ならばC₁O₁H₄と

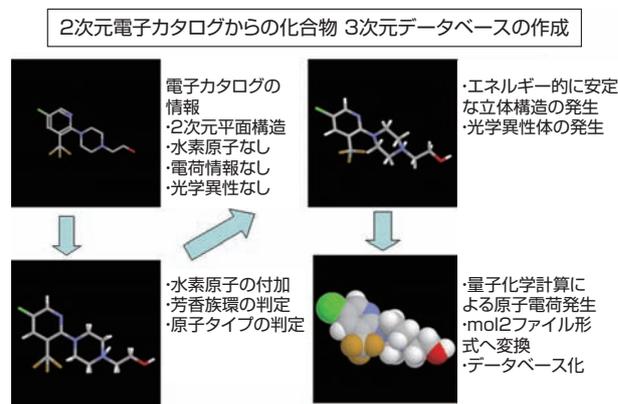


図1 化合物立体構造の作成手順

なる。化学組成式の比較は速い方法である。組成が違えば、それ以上の同一性判断をする必要はない。組成式も、文字列比較では時間がかかりすぎる。我々は、各元素について原子量を小数点以下3桁まで、近似的に末尾がゼロでない数字を入れて分子量を計算し、1分子あたり6桁の数字を割り振る手法を開発した。化学組成式の文字列比較をしなくても、分子量を1回の計算で比較することにより実用上、組成式の比較をほぼ間違いなく済ませることができた。

4.3.2 グラフ不変量による分子トポロジーの同一性判断

化学組成式が一致しても、構造式が異なる場合がある。分子のグラフを比較するにはグラフを重ね合わせればいいわけだが、分子グラフの重ね合わせ計算は計算時間が原子の数の多項式で記述できないNP (Non-deterministic Polynomial) 完全問題である。一般に、計算時間が多項式時間の場合は高速なアルゴリズムが存在するが、NP完全の場合は効率的アルゴリズムが存在せず、非常に時間がかかる^[3]。そこで我々は、分子の結合行列M (原子*i*と*j*が結合しているなら、 $M(i,j) = 1$ 、結合がなければ $M(i,j) = 0$) を用いることで分子のトポロジーを比較する方法を開発した (図2)。

分子のグラフにおいて、原子番号の順番は意味がないのでグラフの不変量を計算すればいいわけだが、結合行列はエルミート行列なので、行列固有値を求めればこれが不変量となる。グラフ不変量としては細谷インデックスなどが知られているが計算しにくい^[4]。固有値計算は原子数*N*に対して*N*³の計算量ですむので実用的である。行列の次元を半分程度に減らすためにH原子を除き、原子の種類を反映させるため、対角項には原子の原子番号を代入した。

4.3.3 幾何異性体の判別

4.3.2でグラフのトポロジーをほぼ正確に判別できるようになったが、シス/トランスなどの幾何異性体を判別できない。そこで我々は、幾何異性体を判別できるグラフ不変量を開発した。2重結合している原子*i*、*j*について、4本の結合の先にある部分グラフ断片の部分グラフ行列最大

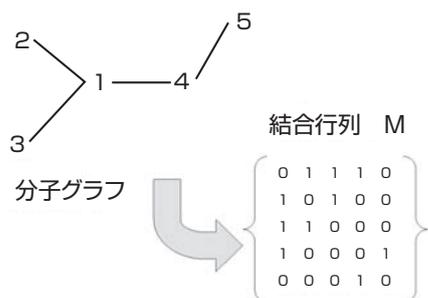


図2 分子グラフから結合行列Mの作成

固有値の順に、1、2 (1'、2') と番号を打つ (図3)。そして1→2ベクトルと、1'→2'ベクトルが平行なら*i*-*j*行列要素は+2、逆平行なら+2とすることにより、全体のグラフ行列の固有値から幾何異性体を判別できるようにした。

4.4 水素原子の付加

2次元構造式のC、N、O、Sなどの原子に対し、結合次数から不足するH原子の数を予測し、H原子を付加すべき原子と、それに隣接する原子との位置関係から、もっともらしいH原子の座標を計算して分子に加えることにした。H原子を付加するソフトウェアは、babel^[5]/openbabel^[6]など各種あるが、H付加が必ずしも正確でない。我々は、様々な官能基のH状態を調査し、真空中及び水中 (pH 7.0 近傍) で支配的イオン形をとるH付加状態を生成するようにした。分子全体の正確なイオン形の予測は困難なので、各官能基ごとに代表的イオン形を適用した。2次元化学構造は、あくまで模式図であるので、原子間距離は1 Åであったり10 Åであったりする。そこで、化学結合の平均距離が1.5 Åになるようにスケールした。

4.5 力場パラメータの付加

分子の2次元構造式から3次元構造を生成することは、分子力場によって行うことにした。我々の化合物DBは、立体構造作成のためにGeneral AM BER force field (GAFF) を用いている^[7]。開発当初 (現在もだが)、ほとんど全ての分子に対して、GAFFのパラメータが存在せず、分子構造が決められなかった。そこで我々は、結晶構造データベースCSD^[8]と、手作業で作成した660種類の分子を第一原理量子力学計算で構造最適化計算して正しい分子構造情報を得て、原子タイプ、力場パラメータ、パラメータのないとき全ての原子にパラメータが割り振られる仕掛けの追加を行い、99.9%以上の分子を扱えるようにした。また、力場パラメータの整備に加え、一般の化合物に力場パラメータを割り当てるソフトウェアtplgeneLを開発した。なお、tplgeneLは、酵素の研究のために、化学反応

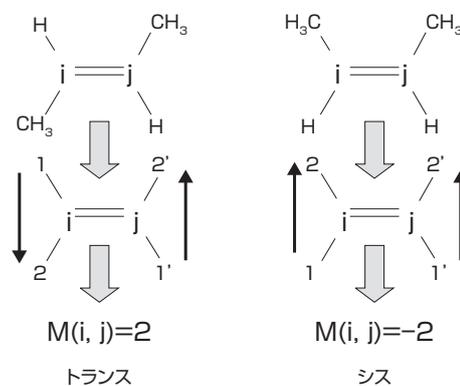


図3 幾何異性体の判別

→は、部分グラフの固有値の順を示す

遷移状態にもパラメータを割り当てる能力がある。

4.6 3次元構造の生成

分子に力場パラメータを与えられると、3次元分子構造を生成することができる。我々は、分子動力学シミュレーションソフトウェア cosgene^[9] を既に開発しており、cosgene によるエネルギー最適化で3次元構造を生成した。初期座標にランダムな変位を加えないと、(X, Y) 座標データのみの2次元構造式のままではZ軸方向の力が発生せず、3次元構造は発生できない。生成した3次元構造は構造の妥当性（原子間距離や結合角度など）をチェックするソフトにかけ、歪んだ構造を生成した場合は初期座標を作成しなおし3次元構造の生成を再試行した。

4.7 光学異性体の判定と、異性体の発生

炭素原子など結合が4本ある原子のそれぞれの化学結合に異なる分子断片が結合している場合、その中心原子が光学活性中心となる。したがって、中心原子に結合する4つの結合の先の分子断片の同一性判断が必要になる。我々の開発した手法では、中心原子の結合を切断し、その先の分子断片の同一性比較を3.2節と同様の手法で行う。中心原子が環に含まれる場合はやや複雑になるが、ほぼ同様の手法で行った。光学活性中心が1つならば、各原子の座標 (X, Y, Z) を (X, Y, -Z) とすることで鏡像体を生成できる。光学活性中心が2つ以上ある場合は、結合の付け替えをする必要があり、新たに開発したソフトウェア confgeneC でこれを行った。

4.8 量子化学計算による原子電荷の計算

量子化学計算では、分子構造に加えて、分子の電子スピンと電荷が必要である。創薬に用いる分子はラジカルであってはならず、磁性をもつ分子もまれなので、分子のスピンは0の閉殻系とした。分子の電荷は、系が安定となる電荷を化学結合から自動計算する手法を開発した。分子全体の電荷は各原子の形式電荷の和とした。たとえば、炭素原子の形式電荷は、化学結合の本数の和が4であれば0、3本であれば+1とする。窒素の電荷は、化学結合の本数の和が4であれば+1、3本であれば0とする。酸素の電荷は、化学結合の本数の和が2であれば0、1本であれば-1とする。こうして得られた形式電荷を分子全体で和をとって、分子の電荷とした。

原子電荷の計算方法にはいろいろある。Gasteiger 法^[10]では、原子に電気陰性度を振って、有機電子論にのっとって、原子同士が互いの電子を引っ張り合い、平衡状態となる電子分布を求める。荒っぽい見積もり方法で、たいていの分子で1秒未満で計算できる。半経験的量子化学計算では MOPAC^[11] の AM1 モデルと PM3 モデル（最近では PM7）が有名である。PM3 モデルは分子の生成熱を再現

するように有効ハミルトニアンをパラメータフィットした優れた手法だが、アミド結合など医薬品に普通に見られる構造を正しく計算できない。AM1 モデルは同じく有効ハミルトニアンをパラメータフィットした手法で、生成熱の予測は不正確だが、アミドなどの構造は正しく計算される。ただし、窒素を含む環構造では、場合によって不正確な場合がある。計算時間は、分子構造を固定した場合、通常、数秒-数十秒で済み、原子の大きさ N に対して計算量は N^3 に比例する程度である。電荷の精度はかなり高い。第一原理量子化学計算では、一般には RHF/6-31G* による波動関数の計算と RESP による部分原子電荷計算法が用いられる^[12]。相当正しい電荷を与えるが、分子構造を固定した場合、通常、計算時間は数分-数十分かかり、原子の大きさ N に対し、計算量は N^4 に比例する。

原子電荷は、蛋白質-化合物ドッキングで正しい計算ができなければ意味がない。そこで、132種類の蛋白質-化合物複合体のドッキング計算を、我々の蛋白質-化合物ドッキングソフト^{[[13]]} sievgene で行った^[13]。その結果、RHF/6-31G* では正しい構造が56%の確率で得られ（精度2 Å）、MOPAC AM1 電荷では2-3%劣る程度、Gasteiger 電荷でも5%劣る程度であった。1万化合物程度の小規模な薬物スクリーニング実験もシクロオキシゲナーゼ2、サーモライシンなど数標的で行ってみたが、ヒット率は電荷が正確なほど良いが、Gasteiger 電荷でも数%劣る程度であった。

数百万分子の原子電荷計算をしなければならないので、高速で計算できるに越したことはないし、RHF/6-31G* ほどの精度にこだわる必要はないことは分かったが、化合物 DB は全ての基礎となるため、MOPAC AM1 電荷を採用することにした。なお、通常 MOPAC は MOPAC 専用の入力形式を必要とするが、我々は MOPAC を改良して、創薬分野において化合物を表現する標準的な mol2 ファイル形式で入出力できるようにした。このための MOPAC の改良用パッチファイルも無償で提供している。

4.9 等価原子の判定

メチル基における3つのH原子は、化学的に等価で同じ電荷を持つようにしなければならない。原子の等価性の判断は原子電荷の計算に必要である。

任意の原子 i と原子 j とが等価であるという意味を次のように考える。原子 i と原子 j が、 $i=j$ のとき等価であることは自明である。そうでないとき、原子 i と原子 j が直接結合していないならば、原子 i に結合する全ての原子が原子 j に結合する全ての原子と等価であること、原子 i と原子 j が結合しているときは、それ以外の全ての結合する原子が互いに等価であることである。

等価原子の判定の方法は、以下の通りである。任意の原

子 i と j を選び、 i と j に「既に訪問した」という印をつける。原子が「等価」なら、「既に訪問した」と印を残す。

$i=j$ なら「等価」である。等価である場合、それ以上の検証を行わない。

i 、 j の結合が 1 本で、 i 、 j がともに既に訪問した原子に結合し、元素記号が同じなら「等価」である。

i に結合する原子 m_i と j に結合する原子 m_j の全てに対し、 m_i 、 m_j に「既に訪問した」という印を仮に付して上記の判定を行う。 m_i 、 m_j が同じでなければ、 m_i 、 m_j の「訪問」の印を解除する。すべての m_i/m_j が「等価」と判定されれば、 i と j は「等価」だとする。

原子 i 、 j から出発して等価性の判定が行われる原子を灰色の○で示し、判定が終了する原子を●で示した (図 4)。 i と j を出発した探索がぶつかる場所 (黒丸) まで調べれば良く、グラフ全体を検索しなくても良い。

4.10 データベースへの格納とファイルのダウンロード

化合物 DB の構造はリレーショナルデータベースとなっており、スキーマには、化合物 mol2 ファイルの情報 (原子名、3次元座標、原子電荷、化学結合次数など) に加え、分子量、MOPAC AM1 モデルでの HOMO/LUMO エネルギー、GBSA モデルで計算した溶媒和自由エネルギー、1 原子当たりの溶媒和自由エネルギーなどを記載した。1 原子当たりの溶媒和自由エネルギーは化合物のケミカルスペース (化合物空間) での位置を示すのに有効な情報であり、DB としては、その多様性 (収集された化合物がどれだけ多様であるか) を示す指標として用いられる^[14]。

化合物 DB からは、化合物を mol2 ファイル形式でダウンロードすることができる。

4.11 蛋白質-化合物相互作用行列の計算

化合物 DB に収録した化合物ライブラリーに対し、標的蛋白質以外に多数の蛋白質を用意し、総当たり式にドッキング計算を行い、蛋白質-化合物相互作用行列を作成してデータベース化した。この DB は以下に述べる我々の開発した薬物

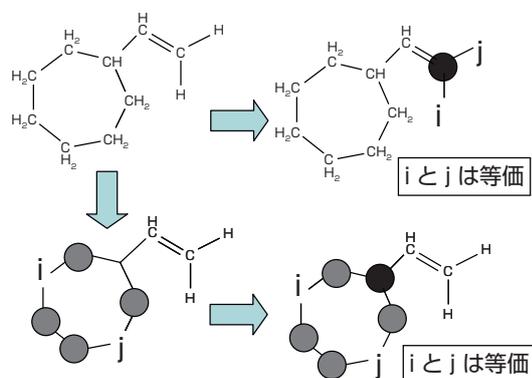


図4 等価原子の判定
●印は、訪問した原子を表す。

スクリーニング手法: multiple target screening (MTS) 法^[15]、docking score index (DSI) 法^[14] の基礎 DB となっており、我々の VS に欠かせない資源である (図 5)。

通常の VS で、標的蛋白質に結合する化合物をドッキングスコア^[13] (スコア) の強い順に選択しても、そのヒット率は低い。標的蛋白質に対し強いスコアを示す化合物を選択すると、その化合物は、他の蛋白質に対しても強いスコアを示して標的蛋白質に対して選択的に強い結合性を示しているわけではないことがしばしば見られる。MTS 法では、逆に、1 つの化合物に着目し、それがどの蛋白質に結合するのかを調べ、標的蛋白質に最も強く結合する化合物をヒット化合物の候補とする。

蛋白質-化合物相互作用行列を利用すると、スコアの精度を改善することもできる。類似性の高い蛋白質に対して同一化合物の結合自由エネルギーは、近い値をとると考えられる。詳細は文献に譲る^[16] が、蛋白質の類似度に応じて、重み付きのスコアの平均を取ることで、スコアの誤差を低減することができ、具体的には、下記の式でスコアを補正した。

$$s_a^{new\ i} = \frac{\sum_b s_b^i R_a^b}{\sum_b R_a^b} \quad (1)$$

ここで $s_a^{new\ i}$ 、 s_b^i 、 R_a^b は、それぞれ新しく定義された蛋白質 a と化合物 i のスコア、蛋白質 b と化合物 i のスコア、蛋白質 a と b の相関係数である。

また、既知の活性化合物が存在する場合、既知活性化合物が優先的に予測されるようにスコアを補正することもできる。下記の式のように、補正後のスコアをスコアの線形結合で記述し、モンテカルロ計算によってデータベースエンリッチメント^[14] が最大化されるように係数 M_a^b を決定した。

$$s_a^{new\ i} = \sum_b s_b^i M_a^b \quad (2)$$

COX-2、HIV プロテアーゼ 1 など 12 種類の標的蛋白質に対して MTS 法を適用した結果、化合物ライブラリーから予測上位 1 % の化合物を採択したとき、ランダムスクリーニングに比べて約 40 倍の発見率の向上を得ることが示された^[16]。

DSI 法は、蛋白質-化合物相互作用行列を用いて、既知の活性化合物と類似の化合物を検索する方法である。異なる化合物であっても、同一の蛋白質に強く結合する化合物は類似の化合物とみなすことができる (図 5)。DSI 法では標的蛋白質の立体構造は必要でないことから、G-protein coupled receptor (GPCR) のように立体構造未知の標的蛋

白質に対しても適用することができる。また MTS 法と同様に、DSI 法は既知化合物の発見率を最大化するようにスコアを修正する手法と組み合わせることができる。前述した蛋白質に GPCR を加えた計 14 種の標的蛋白質に対して DSI 法を適用した結果、化合物ライブラリーから予測上位 1 % の化合物を採択したとき、ランダムスクリーニングに比べて平均約 70 倍の発見率の向上を得ることが示された^[17]。

5 目標にどれだけ近づいたか

我々は現時点で当初の目標の 90 % 以上を達成したと言える。我々の最初の化合物 DB は 2004 年にリリースされ、ただちに TNF- α converting enzyme という標的蛋白質のスクリーニングに投入された。182 種類の蛋白質と 100 万化合物の蛋白質-化合物相互作用行列を用いて、MTS 法と DSI 法が適用され、900 種類の化合物を購入し、そこから 35 種類の活性化化合物を得ることができた。これは、先に行われた 10 万化合物のランダムスクリーニングで 7 種類の活性化化合物を得た結果に対して約 500 倍効率が高く、また別に行われた市販ソフト Glide によるスクリーニングで 700 種類の化合物を購入し、活性化化合物が一つも得られなかったのに比較して、格段の発見率の向上が得られた。その後、化合物 DB は毎年更新され、現在は 2007 年度版となっている。6 年間に、我々は 10 種類近くの標的蛋白質について直接スクリーニングを行ったが、いずれも数 % ~ 20 % という確率で活性化化合物が得られた。これはランダムな実験よりも数百倍から千倍以上の高い確率である。また、化合物 DB 及び蛋白質-化合物相互作用行列は、毎年製薬メーカーを中心に、国内外の 10 ないし 20 の機関に配布が続けられている。ソフトウェア類は myPresto として^[18]、化合物 DB は LigandBox として一部が公開されている^[19]。

6 やり残したこと

第一に、我々の化合物 DB は、亜鉛などの金属を含むメタロプロテアーゼの阻害剤に向いていない。分子のイオン形は水中での支配的イオン形になっているが、金属に配位するときのイオン形は異なる。水中ではチオール (-SH) は通常 -SH だが、金属に配位すると、脱 H 化した -S⁻ である。このような金属配位におけるイオン形の変化はいろいろな官能基で見られる。メタロプロテアーゼの VS において、発見率はイオン形の良し悪しに強く依存することを我々は突きとめた。そこで、メタロプロテアーゼ用の化合物 DB を開発しようとしている。

第二に、我々の化合物 DB は無機化合物を含んでいない。金属錯体のような無機化合物は一般に薬になりにくいとされ、通常、化合物 DB から除外する。しかし、近年、ペプチド以外の活性化化合物が一切知られていないインシュリン受容体蛋白質の活性化化合物として亜鉛錯体が発見されるなど、無機化合物の新たな可能性が知られるようになってきた。無機化合物の可能性を検討するためにも、無機化合物の DB 化が必要だと感じている。

第三に、我々の化合物 DB の配布は口コミにのみ依存し、論文、ホームページなどで認知されていないことである。これは、我々の化合物 DB が、商社から提供されるカタログデータに依存しているためである。カタログの配布は試薬の販売目的に限られ、試薬ベンダーの広告を貼る必要がある。ZINC^[20] は、試薬ベンダーとの直接交渉により、大学のホームページ上に試薬ベンダーの広告を張ることで、無償ダウンロードを実現している。産総研は、私企業の広告ができないことから無償ダウンロードはできず、ユーザーが独自に入手したカタログに対し、産総研がデータベース化サービスを行ったとして、化合物 DB を配布することになっている。研究助成を受ける共同研究先の社団法人から配布する手段はあるが、試薬ベンダーと交渉する力はない。産官学連携の中では、私企業との関わりは避けられない。こういった問題も将来の課題と思える。

謝辞

本研究は新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 及び経済産業省の援助によって行われた。

用語説明

用語 1: 2 次元 SD ファイル: 分子の元素名, XYZ 座標, 結合次数, 光学活性中心, 整数化した原子電荷を記載する分子を記述するファイル。

用語 2: 蛋白質-化合物ドッキングソフト: 蛋白質の立体構造に対して化合物を蛋白質表面付近に配置し、エネルギー的に安定と思われるもっともらしい蛋白質-化合物複合

化合物データベース

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	Known active compound
Target protein	-0.9	-1.2	-9.1	-3.8	-3.2	-9.9	-0.9	-3.8	-9.6	-9.2
1	-4.3	-4.4	-3.5	-2.1	-2.8	-2.8	-6.1	-2.1	-3.8	-3.3
2	-8.4	-8.1	-2.1	-7.5	-6.6	-6.6	-5.1	-7.5	-2.1	-2.5
3	-5.4	-0.2	-5.5	-0.9	-0.4	-5.4	-3.2	-0.9	-7.5	-7.2
4	-4.4	-7.5	-0.1	-8.4	-5.1	-4.4	-2.8	-4.3	-0.9	-0.2
5	-8.1	-0.9	-6.1	-8.1	-3.8	-0.4	-6.6	-8.4	-6.1	-6.6
6	-8.2	-3.3	-5.5	-5.4	-2.1	-5.5	-0.4	-8.1	-5.1	-5.4
7	-2.1	-3.2	-4.3	-4.4	-5.4	-4.3	-7.5	-5.4	-4.3	-4.4
8	-7.2	-2.8	-0.5	-7.2	-4.4	-0.6	-5.4	-4.4	-8.9	-8.1
9	-0.2	-6.6	-0.4	-0.2	-8.1	-0.7	-4.4	-0.2	-8.8	-8.2
10	-6.6	-0.4	-2.2	-6.6	-9.3	-2.2	-8.1	-8.2	-2.9	-2.1

MTS法でのヒット化合物 (化合物 1-10)
 DSI法でのヒット化合物 (化合物 1-10)
 類似化合物 (化合物 9, 10)

図5 MTS法とDSI法の概念図

表の数字は、スコア。強いスコアは濃い色で表示した。

体構造を計算により作成することを言う。薬物スクリーニングでは1化合物のドッキングを数秒～1分程度で行う。DOCK、AutoDock、myPrestoなどがある。

用語3:ドッキングスコア:ドッキングソフトによって見積もられる蛋白質-化合物の相互作用の強さの値で、通常は結合自由エネルギーに相当する。

用語4:エンリッチメント:薬物スクリーニング計算において予測化合物数に占める真のヒット化合物数の割合。通常、ランダムな実験では1万化合物に1化合物ヒットするので、もし計算で予測したヒット化合物候補100化合物中にヒットが1件あれば、ランダム実験に対するエンリッチメントは100倍となる。

参考文献

- [1] <http://www.mdl.com/jp/products/experiment/cims/index.jsp>
- [2] <http://www.molecular-networks.com/software/corina/index.html>
- [3] M. Hattori, Y. Okuno, S. Goto and M. Kanahisa: Development of a chemical structure comparison method for integrated analysis of chemical and genomic information in the metabolic pathways. *J. Am. Chem. Soc.*, 125 (39), 11853-65 (2003).
- [4] J. Gasteiger and T. Engel: *Chemoinformatics: A textbook*. WILEY-VCH: Weinheim (2003).
- [5] <http://www.lmcp.jussieu.fr/sincris-top/logiciel/prg-babel.html>
- [6] http://openbabel.org/wiki/Main_Page
- [7] J. Wang, R. M. Wolf, J. W. Caldwell, P. A. Kollman and D. A. Case: Development and testing of a general amber force field. *J. Comput. Chem.*, 25 (9), 1157-1174 (2004).
- [8] <http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd/>
- [9] Y. Fukunishi, Y. Mikami and H. Nakamura: The filling potential method: A method for estimating the free energy surface for protein-ligand docking. *J. Phys. Chem. B*, 107 (47), 13201-13210 (2003).
- [10] J. Gasteiger and M. Marsili: A new model for calculating atomic charges in molecules. *Tetrahedron Lett.*, 3181-3184 (1978).
- [11] <http://openmopac.net/index.html>
- [12] J. Wang, P. Cieplak and P.A. Kollman: How well does a restrained electrostatic potential (RESP) model perform in calculating conformational energies of organic and biological molecules? *J. Comput. Chem.*, 21 (12), 1049-1074 (2000).
- [13] Y. Fukunishi, Y. Mikami and H. Nakamura: Similarities among receptor pockets and among compounds: Analysis and application to *in silico* ligand screening. *J. Mol. Graph. and Model.*, 24 (1), 34-45 (2005).
- [14] Y. Fukunishi, Y. Mikami, K. Takedomi, M. Yamanouchi, H. Shima and H. Nakamura: Classification of chemical compounds by protein-compound docking for use in designing a focused library. *J. Med. Chem.*, 49 (2), 523-533 (2006).
- [15] Y. Fukunishi, Y. Mikami, S. Kubota and H. Nakamura: Multiple target screening method for robust and accurate *in silico* ligand screening. *J. Mol. Graph. and Model.*, 25 (1), 61-70 (2005).
- [16] Y. Fukunishi, S. Kubota and H. Nakamura: Noise reduction method for molecular interaction energy: application to *in silico* drug screening and *in silico* target protein screening. *J. Chem. Info. Mod.*, 46 (5), 2071-2084 (2006).
- [17] Y. Fukunishi, S. Hojo and H. Nakamura: An efficient *in silico* screening method based on the protein-compound affinity matrix and its application to the design of a focused library for cytochrome P450 (CYP) ligands. *J. Chem. Info. Mod.*, 46 (6), 2610-2622 (2006).
- [18] http://presto.protein.osaka-u.ac.jp/myPresto4/index_e.html
- [19] http://presto.protein.osaka-u.ac.jp/LigandBox/web_search.cgi
- [20] J. J. Irwin and B. K. Shoichet: ZINC - a free database of commercially available compounds for virtual screening. *J. Chem. Inf. Model.*, 45 (1), 177-82 (2005).

執筆者略歴

福西 快文 (ふくにし よしふみ)

1994年京都大学工学研究科博士課程修了。通商産業省工業技術院融合領域研究所非常勤職員、HFSPフェロー、Rutgers大学ポスドク、(独)理化学研究所(JSTポスドク)、(株)日立製作所などを経て、2000年より産業技術総合研究所 バイオメディシナル情報研究センター 主任研究員。専門:計算化学。本論文では、試作品の作成、各種アルゴリズムの考案、全体の設計を担当した。

杉原 裕介 (すぎはら ゆうすけ)

1996年広島大学大学院理学研究科高分子化学講座修士課程修了。1996年荒川化学工業(株)入社、2000年同退社、2001年(株)富士通九州システムエンジニアリング入社。本論文では、主にカタログからの化合物の3次元化を担当した。

三上 義明 (みかみ よしあき)

1987年(株)日立東日本ソリューションズ入社、計算科学ソリューション部所属。現在、バーチャルスクリーニングなどのシステム開発やコンサルティング業務に従事。情報処理学会会員。本論文では、主に蛋白質-化合物相互作用行列の作成を担当した。

酒井 広太 (さかい こうた)

1989年九州大学大学院理学研究科高分子化学講座修士課程修了。1989年(株)富士通九州システムエンジニアリング入社。本論文では、主にカタログからの化合物の3次元化を担当した。

楠戸 寛 (くすど ひろし)

2002年(株)日立東日本ソリューションズ入社、計算科学ソリューション部所属。現在、並列計算システムの構築や研究支援業務に従事。情報処理学会会員。本論文では、主に蛋白質-化合物相互作用行列の作成を担当した。

中村 春木 (なかむら はるき)

1980年東京大学理学研究科博士課程修了。東京大学工学部助手、蛋白工学研究所、生物分子工学研究所を経て、1999年より大阪大学蛋白質研究所教授。専門:生物物理学。本論文では、主に公開データの取り込み、全体の統括を担当した。

査読者との議論

議論1 化合物データベースの作成の意義

コメント・質問 (小野 晃)

研究目標を明確に設定し、そのための要素技術の選択のシナリオを図1のように明快に描出し、そして現実にオペレーションできるデータベースとして統合していったことは、典型的な第2種基礎研究の手法

であり、また製品化研究としても同時に、非常に優れた研究と思います。標的蛋白質が今後次第に明確にされていく中で、本データベースの価値は一層増すものと期待します。

回答（福西 快文）

化合物データベースは、人類が過去にどのような分子を合成したか・合成することができたか、という知識のプールです。直接、医薬品探索に用いるだけでなく、どのような分子が合成しやすいのか、どのような分子を人類は思いつかなかったのか、を考えたときの基礎となって新しい研究領域が開けることも期待しています。

議論2 未知化合物の予測

コメント・質問（小野 晃）

この化合物データベースは、特定の標的蛋白質と、用意された多数の化合物の間の化学的結合の強さを効率的に調べるもので、医薬品の発見率が飛躍的に向上しました。一方、この化合物データベースを使って、特定の標的蛋白質に対してより強く結合するような未知の化合物をユーザーが予測するといった使い方も可能でしょうか。

回答（福西 快文）

未知の化合物を予測できる可能性はあります。特定の標的に対し薬物探索を行った場合、そのヒット化合物群が、共通の特徴を有する化合物集団に分類される傾向がありました。これらの集団の特徴を兼ね備える未知の物質を合成デザインするという研究の方向はありうろと思います。

議論3 データベースの改良可能性

コメント・質問（小野 晃）

4.3節で述べられていますが、データの正確さを過度に追求することの無意味なことは重要な指摘と思います。その意味で、このデータベースの作成におけるいろいろなプロセスをさらに見直して、目的に対してより合理的にする余地は今後もありうろと考えてよいでしょうか。

回答（福西 快文）

データベースを目的に対してより合理的にする余地はあると考えます。現在は、分子が水中においてとりやすい分子形（水素原子のつき方など。カルボン酸なら $-\text{COOH} \rightarrow -\text{COO}^-$ ）を作成していますが、蛋白質と結合する場合は分子形が変化することが知られています。最近では、強く電荷を帯びた蛋白質ポケットを標的とする薬物ドッキング計算が難しいので話題になっています。負電荷を帯びたポケットの中ではカルボン酸が、 $-\text{COOH}$ になる場合があります。標的蛋白質に対して、可能性の高い分子形を準備することは重要になると思います。

議論4 先行する海外データベースとの比較

コメント・質問（小野 晃）

4.11節で、本データベースを使ったスクリーニングはランダムスクリーニングに対して40倍、あるいは70倍の発見率の向上が図られたとしています。一方、化合物データベースとして海外で先行的に開発されてきたものに対して本データベースは、どの程度発見率の優位性を持っていると評価されますか。

回答（福西 快文）

通常、計算による予測化合物が外れた場合、文献として公表されないため、データベースの優劣の詳細な比較は難しいです。我々の場合、計算による予測化合物を100-300種類購入した場合の活性化合物の発見率は3%-30%になります。今までに、発見率が0%であった標的は5標的の中1標的の程度です。論文で見かける発見率は高々10%で、計算による予測は2標的当たり1標的の程度で有効とされているようですので、海外での事例に比べて有効性が高いと考えられます。

議論5 互変異性体とイオン化状態の考慮

コメント・質問（広川 貴次）

本分野では、海外の市販データベースやソフトウェアが大きなシェアを占めつつありますが、ここまで高品質の化合物データベースおよび他に類を見ない独創性の高い蛋白質-化合物相互作用行列データベースが日本発で公開されていることは大変素晴らしいです。論文で記載されている各プロセスは、化合物を電子的に取り扱う際に問題となる様々な問題について十分に対応されており、研究者が安心してデータベースを利用できる優れた内容になっています。製品化研究としても高く評価できます。

化合物の水素付加について互変異性体 (Tautomer) や全体としてのイオン化状態 (pH7.0を前提としているのか等) の取り扱い、4.4節の「我々は、様々な官能基の…正確に生成するようにした。」という説明の範囲で考慮されているのでしょうか。

回答（福西 快文）

イオン化状態は、pH7.0を前提にしています。しかし、正確なpKa予測は困難なため、分子全体でのpKa予測を行うのではなく、分子に含まれる各官能基のpH7.0での代表的な構造を適用するようにしています。互変異性体も同様な取り扱いになっています。よって、科学的にはまだ厳密性は追求されていないのですが、babel/openbabelといったオープンソフトが高エネルギーな状態を頻繁に生成するのに比べると、精度は上がっています。

議論6 選択性の悪い化合物群の予測

コメント・質問（広川 貴次）

4.11節のタンパク質-化合物相互作用行列の計算の活用事例として、例えば、多くの標的蛋白質に結合しやすい選択性の悪い（良い場合もあるかも）化合物群がこのデータベースを利用して予測できるのであれば、in silico frequent hitter や in silico chemical alert for target selectivity といった独自性の高いアノテーションが考案できるのではと思います。既に実施しているかも知れませんが、その可能性について議論いただくことは可能でしょうか。

回答（福西 快文）

frequent hitter は、VSにおいて数十%も出現し、経費の無駄とスクリーニング実験の障害となっています。我々のスクリーニングでも、予測化合物の約20%が frequent hitter と報告されています。現在、文献から数十の frequent hitter とされる分子を収集し、立体構造の作成をしています (*J. Med. Chem.* 2003, vol 46, page 4477-4486, *J. Med. Chem.* 2002, vol45, page 137-142)。データが揃い、タンパク質-化合物相互作用行列の計算に混ぜることができれば、これらがどのタンパク質にも強いスコアを示すような特徴が現れるかも知れません。しかし、frequent hitter は電子顕微鏡で観察すると、多くがミセルコロイドを形成しており、ミセルがタンパク質に張り付くことで frequent hitter となるのでは、という報告もあります (*J. Med. Chem.* 2002, vol 45, page 1712-1722)。もし、単分子で存在する化合物がタンパク質に対して非選択性を示すのが frequent hitter の本質ならドッキング計算で解析が可能と思いますが、ミセル形成が frequent hitter の原因なら、無限希釈状態に相当するドッキング計算では frequent hitter を識別できない可能性があります。今のところ分子記述子を用いた溶解度予測を frequent hitter に適用してみたところ、疎水性が強い分子ほど frequent hitter であり、frequent hitter でない医薬分子と区別される傾向が見えてきました (CBI学会 2008年大会 P1-06)。水への溶解性が frequent hitter を決めているのなら、ミセル形成が主たる原因となります。ドッキング計算のほうが、より鮮明に frequent hitter を区別できる可能性は残っています。少し時間はかかりますが、本件の検討を進めたいと思います。

化合物の非選択性からくる副作用の解析については、MTS法及びDSI法での検討を行ったことがあります。今のところ、余り明確に現象が見えていません。非ステロイド系消炎鎮痛剤 (NSAID) の代表的な

標的であるCOX2と、胃粘膜保護作用を持つCOX1は、アミノ酸相同性60%の酵素であり、NSAIDがCOX2だけでなくCOX1を阻害することで胃潰瘍を引き起こすことは問題となっていました。近年、コキシブ系COX2選択性NSAIDが開発されました。そこで、COX2選択性NSAIDと非選択性NSAIDが、タンパク質-化合物相互作用行列の利用で区別できるかを検討しましたが、区別できませんでした。実は、COX2選択性は非常に微妙なもので、COX2を80%阻害する濃度

のCOX1の阻害は選択的NSAIDで20%、非選択的NSAIDで80%程度でした (*Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 1999, vol 96, page 7563-7568)。したがって、薬物選択性は程度の問題だと考えられます。強い選択性・非選択性は、タンパク質-化合物相互作用行列の利用で、区別できると考え、現在、約1500種類のタンパク質構造をドッキング計算に利用可能な形で準備しています。計算能力の問題で実際の解析はできませんが、近い将来には解析可能になると期待しています。

新ジャーナル座談会

システムデザイン工学と構成学

慶應義塾大学理工学部は1996年にシステムデザイン工学科を発足させ、10年以上にわたって工学の新しい教育を行い、卒業生の活躍が注目されています。シンセシオロジー（構成学）とシステムデザイン工学の共通点に興味を持って、編集委員会から小野委員長と赤松編集幹事が2008年11月10日横浜市の矢上キャンパスを訪問し、学科長の菱田公一教授と学科創設のキーパーソンの1人である谷下一夫教授に加わっていただき座談会を開きました。

シンセシオロジー編集委員会



座談会出席者

谷下 一夫
菱田 公一
小野 晃
赤松 幹之

慶應義塾大学理工学部教授
慶應義塾大学理工学部教授
編集委員長
編集幹事

産総研における本格研究とシンセシスの現状

小野 産総研では、2008年1月から年4回のペースで、『シンセシオロジー』というジャーナルを発刊しています。日本語では「構成学」と言っているのですが、アナリシス主流のサイエンスの世界でシンセシスに光を当てよう、というものです。2001年に産総研ができてから、従来の基礎研究である第1種基礎研究と、企業が行っている製品化研究の間を接続するものとして、第2種基礎研究を軸にしてやっていこうということが共通認識としてできてきました。このジャーナルは、第2種基礎研究の方法論を確立し、本格研究を実践し、イノベーションを加速することを目的にしています。

第1種基礎研究は、自然を対象にアナライズします。それによっていろいろな法則や定理、あるいは要素技術が得られるわけですが、それだけでは社会的な価値にまだ遠く、要素技術を統合・構成していくところが第2種基礎研究のポイントと考えています。

では、このジャーナルでは何を記述するのか。社会的な価値を持つ目標を実現するための「研究のシナリオ」と「要素技術の統合・構成のプロセス」を記述しようということです。ところが、これがなかなか書き方が難しい。社会的な価値を持つ研究目標から出発して、どのような要素技術が

必要なか選択し、もしそのようなものがなければ新たに開発していく、さらにそれらを統合・構成して社会的な価値に持っていくという循環的な作業が大事と思っています。

『シンセシオロジー』では「シナリオの提示と要素の選択」、「要素間の関係付けとそれらの統合・構成」を書いてほしいと著者をお願いしています。これまでも研究者は論文のイントロで「社会とのつながり」を書くには書いていたのですが、実際は著者は書きっ放し、査読者も読みっ放しで、そこがだめだからということでリジェクトされることはないわけです。著者の見識が窺われてイントロは読んで楽しいですし、私も一生懸命書いたほうですが、『シンセシオロジー』ではそれをシナリオとして書いてもらって査読の対象にしようということです。従来の論文と違ったオリジナリティがそこにあるだろうと思っています。

『シンセシオロジー』の評価はまだ定まっていないのですが、著者たちからは「今までの学術誌では書けないことが書けた」という意見をもらっています。このジャーナルでは1つの論文に対して査読者を2人、著者と同じ専門分野の人と他分野の人をつけますが、氏名を公表しています。査読者は、研究の内容が分野外の人にも理解できるように著者をサポートする立場です。査読者からは「シナリオが面白い」、「他分野の論文が理解できて、査読意見が言え

たことは驚き」、また、一般読者からは「査読者と著者との議論が新鮮で面白い」、産業界からは「シナリオをきちんと作って研究するという姿勢は産業界にも参考になる」というポジティブな評価をいただいています。

基礎研究の成果を社会で使うための方法論を探る

赤松 昔、応用研究と呼んでいたものに産総研の吉川理事長が「第2種基礎研究」という名前をつけた根底には、「応用研究は、既にある結果を使ってやるだけだと見られがちである。しかし、そこにも“学”はあるはず。だから、基礎研究なのである」ということがありました。

このジャーナルの狙いは、基礎研究の成果を社会に使えるようにする研究のアプローチの共通的な方法論が、論文を集めることによって見えてくるのではないだろうか、ということです。そして、要素技術的な研究の成果を社会に使うためにもどのような方法論をとればいいのかを読者である研究者が学び、次に何をやらなければいけないか、どうという観点でものを見なければいけないかということを獲得できる、そのための学術誌というふうに考えています。

それから、査読者の氏名を公表しているもう1つの理由は、どうという観点で査読、評価しているのかをオープンにすることによって、その論文がどれだけのクオリティで書かれているかを見せていこうという狙いもあります。査読者が「意外に他の分野の研究がわかる」というのは理由があって、この研究の成果を社会で使っていくためには何をやらなければいけないか、社会のニーズはどういうところにあるのかということから書くようにすると、門外漢であっても、この世界はここが大事ということがわかります。だからこそ、著者が気づけなかった観点の抜けや、論理の飛躍などがむしろ見える。そこがこのジャーナルの査読の面白いところですし、著者と査読者の協働作業でできた論文という面があるところも他の論文誌とは少し違うのかなと思っています。

要素技術がなければシンセシスはできない

菱田 共感する部分は非常にあります。プロセスをどうやって作っていくかという方法論を理解できない学術の縦割りの社会が残っているので、シンセシスカテゴリ論文を作れるくらいになってくれば、すごいものだと思います。ただ、続けていくことは大変な労力が要るなと想像します。難しいのは、要素技術とその積み重ねのメソッドロジーをどのように評価するか、そのオリジナリティをどのように評価するかということに尽きるのではないかと思います。

要素技術とシンセシスは両輪です。私は「良い畑の良いニンジン、トマト、キュウリができないとおいしいミックスジュ

スは絶対できない」とよく言うのですが、それぞれの要素を持ってきたときの方法論のどこにオリジナリティがあるのか、ここのプロセスが一番難しい。しかし、要素技術を集めたシンセシスの塊みみたいな開発プロセスの論文を書けるということはあるかもしれませんが、問題が起きたら、また要素技術に戻る、それは我々が考えているのと同じです。

小野 慶應大学ではシステムデザイン工学科を創設しましたが、ご紹介いただけますか。

慶應大学におけるシステムデザイン工学のチャレンジ

谷下 システムデザイン工学科ができたのは1996年4月ですが、80年代に機械工学教育の将来検討を進める中で、工学はある時代の特定なニーズに応じてかなり進歩するけれども、時代のニーズが変わっても普遍的な工学原理を持てる人材を出すべきだという議論がありました。当時のシステムデザイン工学科は、機械、電気、それから計測の先生がいましたが、今は建築の先生も入っています。

理念は「要素技術の工学から統合技術の工学への変革」ですが、“デザイン”という言葉は、狭い意味の“設計”ではなく、統合原理を実現するということです。小野さんが「社会とのつながりがシンセシオロジーの大事な点」とおっしゃいましたが、我々も「自然や人間・社会とシームレスな連結」を重視しています。従来の工学が持っていた現象の本質を探るアナリシスの軸、法則や理論をもとにした設計・合成主体のシンセシスの軸、もう1つはシステムを取り巻く社会の軸という、この3次元の枠の中で、今言った理念が実現できるのではないかと考えています。

今まで、エンジニアはどちらかというと与えられたスペックを満たすことを一生懸命やっていたのですけれども、自分でスペックを作れるような、提案型のエンジニアがこれから必要なのではないか、そういう観点を持てるエンジニアなら自立できるのではないかとということがもう1つのポイントです。企業の社長さんは文系が多いとよく言われますが、技術系の多くの人が社会のリーダーになってほしい。そのためには統合的な視野を持つことが大切だと考えています。



小野 晃氏

システムデザイン工学科の教育カリキュラムは、自然科学のメカニクスと人工科学の制御・情報に大きく分けられます。メカと制御・情報がイコールウエイトでわかるような人材を我々は出したいと考えています。

菱田 カリキュラムは、1年生は物理、化学、数学が基本ですが、2年生になると設計のデザイン、力学、あとは電磁気と数学です。4年生になって、例えば建築の意匠設計をやりたいという学生も電磁気から全部とらないといけない。学生にはすごく負担になるのですが、一貫して揺るぎなく、そこはやっています。片や、浅く、広くなってしまう面もありますが、足りない部分は専門課程の大学院になって絞り込むという形で、そこはある程度うまくいっています。システムデザイン工学科は、科目が多くて、厳しい先生も多いと知られていますが、人気は非常に高いです。

赤松 システムデザイン工学科の卒業生は社会でどのように活躍されていますか。

卒業生にみる「システムデザイン工学」の効果

谷下 卒業生のケーススタディを紹介します。

A君は、1期生で、今、MITでバイオの研究者です。彼は、縦割り式の分野で網羅的な知識はありませんが、どういう方向で何をやるかという判断がいい。目標設定ができますから、必要な知識を自分で身につけられる。機械工学科時代にはなかなかいなかった人材です。

B君は、ベンチャーキャピタルに就職しました。必要な基本知識を身につけるのに時間がかかるのですが、非線形的な成長をして、最終的には研究テーマのポイントをこちらが言わなくてもかなり押さえることができました。

C君は、生意気で本当に困ったのですが、センスが良く、ポイントをつかむのが上手で、ドクターの学生が長い間うまくいかなかった実験の問題点を解決しました。

「システムデザイン工学科の学生に見られる特徴」としては、幅広いカリキュラムのため、個別分野の習熟度の深さは不足していますが、必要に応じて習熟度を自主的に高められるし、全体を見通す力を持っています。また、自分の専門意識が全くないため、何でも自分の専門と思ってやってしまう。また、いろいろなことに興味を持っている人が多いです。趣味が広く、ベンチャー企業に就職する人も目立ちます。

学生からの感想を幾つか紹介しますと、

「就職活動の時に困った。人事の人が必ず出身学科について質問してくるので。機械系、電気系のどちらかと、

「環境をやりたいかったが、勉強すべきことが多く、シス

テムデザイン工学科に入ってよかったか不安になる」、

「今はたくさん引き出しを作る時期。必要になったときに専門的な勉強をすることは、そんなに難しくない」

「システムデザイン工学科の科目は、他学科に比べたら浅いのでは。そこに不安を感じる」、

「就職活動で、限られた専門知識を要求される」、

「システムデザイン工学科では、多くの高性能な筋トレの道具が揃っている感じがする」、

「システムデザイン工学科では幅広い学問を身につけるといっている一方で、専門性が不足している不安がある。特に、メディアで〈これからの時代はスペシャリスト……〉と言われると自信を持てなくなる」。

システムデザイン工学教育の成果としては、幅広い知識や視野を持つことに若者が共感していると同時に、横断型の科学技術に対する直感的な認識がありますし、能動的で、前向きで明るい学生が非常に多い。そして物事を把握する能力が抜群です。問題はいろいろあるのですが、我々はおおむね成功したと思っています。

ジェネラルな教育を経て“とがった”教育で人材を輩出する

菱田 大学ですから、アカデミアがアカデミアを作って、次に育てなければいけません。ジェネラリストの教育をした後に、とがった教育をすると、とがった子がすべてを見て、さらに自分の仕事の専門性を引っ張ることができる。初めから専門に入っていくのとはちょっと違った意味での専門性が非常に強くなって、学会の論文も非常にいいものを書いてくれるし、アクティブな人材が増えています。特にシステムデザイン工学科の1期から3期の創成期の子たちが、次の世代を担うような人材になっています。

赤松 博士課程になったときに、システムデザイン工学科出身者とそうでない出身者で違いはありますか。

谷下 『シンセシオロジー』の査読者の意見にあった「他分野の論文が理解できる」というのは、まさにシステムデ



赤松 幹之氏

ザイン工学科出身者ですね。専門的なことまでは理解できないけれども、どういう考え方なのか、どういうところが面白いのか、という理解の仕方は、縦割り式で育ってきた人とは違います。

菱田 就職についてですが、本当は「システムデザイン」で採ってほしいのですが、そういうわけにもいなくて、機械および電機系でシステムデザイン、それと建築系みたいなところも含めて、入れてもらっているというのが現状です。人事の課長以上は「結構ですね」と言うけれども、現場に行くと、例えば熱流動がちゃんとわかっている人が欲しいという話になってしまいます。しかし、それはほんの5年くらいの話で、そのあとは、みんな、システムデザインみたいなことをやっているわけです。

小野 先ほどの「スペックを作る技術者」という、まさにそういう感じがしますね。

システムデザインは演習の中で学ぶ

赤松 カリキュラムとしては、幅広く勉強することによって、新しい分野に展開できるようになっていると思うのですが、システムデザインそのものの教育というか、我々で言う「シンセシスをする」という授業もあるのですか。

菱田 秋にシステムデザイン工学演習があります。いろいろな先生がシステムデザイン工学の概念に従って演習をするという、ミニ卒論みたいなものです。この中に建築系だと意匠設計が入ってきたり、環境や都市計画などがありますが、私は風車を設計させています。コンセプトデザインをきちんと入れて、例えば地下鉄の出入りに付けて、どこから風が吹いても動くような風車を作ろうと思うと、いろいろな風車を調べなければいけない。どのくらいエネルギーがとれて、どのくらいの効率かを調べて、フードの中におさまるにはどれくらいのものを作ればいいのか。そして、実験をして、後でレポートを書かせる。

システムデザイン工学教育の真似事のようなものかもしれませんが、その周りは要素の座学が全部並んでいます。

赤松 システムデザインをすることを演習の中で学ぶということですか。

菱田 システムの方法論を教えようという話は毎回出てくるのですが、今のところ、それしかないです。

小野 それは我々の悩みと同じですね。

シンセシオロジーのロジックの1つ、「説得できるかどうか」

赤松 例えば、卒論のときに、これはシステムデザイン的に価値がある研究だという評価はどうされるのですか。

菱田 そこはなかなか難しいですが、「人をいかに説得できるか」というのは、システムデザインとしては大事なことです。アクティブで単純な解析だけではなくて、こうやって作りましたとか、こういうふうにしてインテグレーションして、こういう評価が出ましたということですね。うちの学科の卒論は、ベストプレゼンテーション賞という、アナリシスだけではない形で学生を評価する賞があります。これは「自分がちゃんと主張ができているのだ」ということで、学生は喜んでいきます。

専門集団になってしまうと、どうしても他人の評価をするのが面倒くさくなるのですが、無理してでもやらないと、先ほどのお話のイントロのバックグラウンドができてこないのです。その価値観の共有は学科の中で絶えず意識して、広げるようにしないと分野はできません。

小野 そうですね。我々も論文のリジェクトとアクセプトの境目がまだはっきりしないのです。非常に多様で、組み立てや構成の方法が人によってさまざまなために類型化できない。今の段階は、それをストックして、やがて見えてくることを期待している、という段階です。

菱田 ストックがすごく大事で、そこに集まっている人たちがどういう共通の尺度で測れるか、ということだと思います。論文を書いた人だけを評価するのか、そこに最低限のルールができるかということ、そうではないのですが、それでも最低限のものを書きながら、さらにシステムデザイン工学らしい価値観をどう評価するか。これは結構時間がかかります。それから、強引に意見をぶつけて喧嘩しなければいけません。それをやらないと同じような価値観は出てこないです。



菱田 公一氏

赤松 菱田先生がおっしゃったように、「説得できるかどうか」が大事で、それはある意味、シンセシオロジーの中のロジックの1つだと思うのです。どこに価値があるからこれをやっていったのだ、ということをはっきりと説明できるまで考えてやったかどうか、というところが1つの価値だと思うのです。システムデザインの方々に『シンセシオロジー』に投稿していただくというのもいいかもしれませんね。

次の産業に必要な基盤となる要素技術の目利き、それがシンセシオ方法論

菱田 今、日本のR&Dで一番欠けているのは、基礎研究に近い、必要な部分をきちんと押さえることだと思うのです。それをいかに技術系のトップが理解できて、会社の中にその技術を蓄積していけるかということが次の世代の産業にもものすごく効いてくる。

例えば、炭酸ガスレーザーで加工機の基盤の部分を作っていた会社がやめてしまった。金型を作っていた人たちも全部いなくなって、次に、金属加工をレーザーでやろうとしてもだれもいない。それは基盤技術をなくしてしまうことになります。また、15年前にNANDフラッシュを作ったけれども、何に使っていいのかわからないと、その研究をしていた人たちがリストラされて、今、対応できていないということもあります

次の産業育成のときに、それを支える基盤技術がどこなのかというところに目をつけて、その部分をどう評価して会社の中に残していくのか。この方法論ができれば、「そこは基盤技術として残すべきだ」と言える。それは非常に大事なことだと思います。

赤松 トヨタ自動車の梅山部長と対談したときも(本誌1巻2号、2008)、「目利きが必要だ。それが統合の1つの力になる」とおっしゃっていましたが、システムデザイン工学科の卒業生が企業の中で目利きになっていくというのはあるべき姿ですね。

菱田 経済原理だけで切ってしまうところに問題があると思います。

大学・公的研究機関と企業との連携のあり方

小野 産学連携でいえば、産総研も必ずしもうまくいっていると思えなくて、現実には産業界からの委託研究額が小さいのです。産総研の全予算が年間約1,000億円なのですが、産業界から直接研究費で来るのは全部集めても30億円くらいです。

菱田 産学連携に関して、我々は知的資産センターを作ってコンソーシアムを組んで、技術移転のほうはだいぶ進みました。ただ、産業界との連携に関しては、先生との個人的なつながりが主になります。やはり国ベースのプロジェクトでどう参画していくかという話になると思います。

赤松 『シンセシオロジー』の論文に、「産総研になって他の専門の人たちと一緒にやれたことでブレイクスルーが起きた」という話がときどき出てきます。大学も、企業連携をしたときに、専門の先生方を組み合わせるとこの企業といいことができますね、ということがマネージできるのではないですか。

菱田 そう思います。それには大学の教員たちが“おせっかい”にならないとダメなのです。「ちょっとお邪魔して、おせっかいさせてもらいますよ」というくらいの気持ちで他人を紹介するという風土を作らないとできないですね。

谷下 今、言われた、“おせっかい”というか、ざっくばらんにディスカッションできる場が意外とないような印象を受けます。企業の方が来ても、かなりスペシフィックなプログラムに関して「何か意見がありませんか」みたいなことは結構あるのですが、ジェネラルにいろいろな問題を含めて交流できるような場が欲しいですね。

菱田 企業が明日のR&Dのためだけのテーマを持ってこられると、産学連携はたぶんうまくいかないです。そこで大切なのは、やはり「目利きができる」ということです。自分だけの尺度ではなく、それ以上のものを測れるような素養のある人がメジャーを持って測って、そこでテーマを落としてくれて、育てる。そこに大卒の国の指針が入って、お金が落ちるといふふうにしなないといけないでしょうね。

だから、産業界も、自分の独自技術と、基盤になっているプラットフォームをある程度共通化しないといけないでしょう。例えば車のコンピュータのコントローラーは一緒にしましようとなってきましたね。ああいう類のことが全部でき



谷下 一夫 氏

て、その標準化の中にたぶんシンセシスの話が入ってきて、方法論が入ってくる。さらにそこを刺激する基盤技術に対してのメッセージが強く出る、その後には学術論文としてできる、というルーチングを作っていただけると非常にいいと思います。

小野 まさに産業界も競争するだけではなくて、共通の何か基盤を作る、それは自分たちだけでできなければ、大学とか公的機関と協力するといった意識がほしいですね。

産学連携は話が華やかですが、大学と我々公的機関の関係は、今まであまり議論がされてこなくて、こんなふうにお話しするのは私も初めてのような感じがしまして、共通の関心が随分たくさんあるにもかかわらず、組織として付き合うのはちょっと疎遠だったかなと思います。今後の課題ですね。

技術者が元気になる仕組みをつくる

菱田 日本の技術者が元気になる仕組みが必要だと思います。プロフェッショナルエンジニアもそうだけれども、社会のシステムを作って、そこでぐるりと回ったら、資格が得られて儲かるように欧米は作るわけです。日本は最後まで作らない。そうするとどうなるかというと、ぐるりと回らないで、途中でストンと落ちるのです。

技術者のステータスを上げるには資格が大切だと思います。典型的なのは TOEIC です。TOEIC は民間企業がやっている資格ですが、TOEIC で何点とったら、大学院の英語の試験を免除しますというところまでいきました。自分のキャリアの証しとして使えるわけです。

これは国家論になってしまうかもしれないけれども、シンセシオロジーの話と、今残さなければいけない基盤技術と、問題解決型の課題に対してどうやるか、というのはもう明らかに「環境問題に関連したエコの生命で我々はどう

やって生きていくか」ということで、そういう基盤技術は技術屋がやらなければいけないわけです。

谷下 さっきの自立型とか、提案型技術者というのは、世の中の技術者のステータスを上げるということなのです。ジャーナルもそうですね。

小野 我々は『シンセシオロジー』に大学や企業の人にも投稿してもらいたいと切に願っています。そこで企業の技術者も夢を語る。会社の枠内だけではなくて、技術者としての自身の夢を語る機会にならないかと考えています。

きょうはどうもありがとうございました。

(2008年11月10日)

略歴

谷下 一夫 (たにした かずお)

1969年慶應義塾大学工学部機械工学科卒業、1975年米国ブラウン大学大学院博士課程修了、Ph.D., 工学博士(東京工大)、1992年慶應義塾大学理工学部教授、2000年ESM2(France)招聘教授、バイオメカニクスや生物流体力学を基に新しい医療技術の開拓を目指している。特に、バイオメカニクスに基づく組織再生にも取り組んでいる。日本学術会議連携会員、日本機械学会副会長、日本機械学会フェロー、International Union of Theoretical and Applied Mechanics ; Working Party Member, Member of European Academy of Science 等、日本機械学会バイオエンジニアリング部門業績賞、功績賞、論文賞、米国脳放射線学会 MAGNA CUM LAUDE CITATION 賞。

菱田 公一 (ひしだ こういち)

1976年3月慶應義塾大学工学部機械工学科卒業、1982年3月同大大学院工学研究科博士課程修了。1982年4月に慶應義塾大学理工学部の助手に就任し1986年4月専任講師となる。その間、英国ロンドン大学インペリアルカレッジ機械工学科客員研究員として二相流のレーザー計測法の開発研究に従事、1999年4月助教授(理工学部)1997年教授となり現在に至る。専門は熱流体工学、流体計測。2004-2006年日本機械学会理事、2007年度、日本流体力学会会長などを歴任。

シンセシオロジー 創刊一周年を迎えて

シンセシオロジーを創刊してから1年が経ちました。その間4号を発行し、全部で24編の研究論文を掲載しました。これまでとは異なる表現形式でオリジナルな研究論文を書く試みをしてきたわけですが、各界の読者、著者、査読者から大変ポジティブな評価をいただいています。創刊一周年を機に編集に携わっている関係者でこの1年を振り返り、シンセシオロジーの今後を展望しました。

シンセシオロジー編集委員会



座談会出席者

吉川 弘之	産総研理事長
小野 晃	編集委員長
小林 直人	編集副委員長
矢部 彰	編集副委員長
赤松 幹之	編集幹事
内藤 耕	編集幹事

小野 『シンセシオロジー』を刊行して1年が経ちましたが、この間の活動を振り返っての印象をお伺いしたいと思います。

「変態」により進化しつづける大切さ

小林 新たな様式のジャーナルを出すことができたことはとても良かったと思います。まず、私自身は「構成とは何か」ということを問題意識としてずっと持って来ました。2008年3月にMITのリチャード・レスター教授にインタビューしたときに(1巻2号インタビュー記事参照)、『シンセシオロジー』の構成法として、3つのタイプについてお話したのですが、構成法の考え方についてこれからもっとブラッシュアップしていかなければいけないと思っています。単に、要素技術を集めて組み合わせるだけではなく、それによって何が変わったか、第1種基礎研究から第2種基礎研究にどう変質・変貌したか、ということが重要だと思います。メタモルフォーゼ(変態)という言葉があるのですが、「変態」していかなければいけないのだと思うのです。第2種基礎研究から製品化研究に行くときも「変態」しないと進化できないだろうと思います。

もう一つ、英語版と日本語版の両方を出せたことは非常に嬉しく思っております。英語なのか、日本語なのかという議論が当初ありましたが、どちらかだけではだめであると考えて両方作りました。労力は大変なのですが、今後とも

続けていきたいと思っています。

所内の機運が高まって生まれた『シンセシオロジー』

内藤 そもそも「第2種基礎研究とは何か?」ということが所内でまだ十分共有できていない時期から、第2種基礎研究と本格研究の考え方をどう整理するのかということに関わってきた者として、このジャーナルがいよいよ発刊されたというのが私の率直な感想です。

一昨年くらいから急速にこういうことをやろうという雰囲気所全体で高まって、かついろいろな方々の気持ちが一つになって、昨年1月に発刊できたということは、だれかが頑張ったからとか、組織的に動いたからということではなく、みんなの気持ちがそういう方向に動いていったということを当事者としてすごく感じました。発刊できたこと自



小林 直人 氏

体が非常に印象的で、感慨深いというのが私の率直な感想です。

「書くことの大切さ」を再認識させてくれた

赤松 ゼロからジャーナルを作ってきたわけですが、「論文とは何か」「学とは何か」ということを考える良い機会だったと思っています。既存のジャーナルであれば書くスタイルがもうできているわけですが、我々にはそのスタイルがなくて苦しみました。しかし、そのおかげで、「書く」ということを考え直し、そして、「書くことの大事さ」を改めて感じる事ができたと思うのです。

我々は、第2種基礎研究について口頭でよく議論しますが、それをある長さの文章に「ちゃんと書く」ことが必要です。「ちゃんと書く」というのは、必要なことと十分なことを過不足なく表現することによって、それによって何が足りていて、何が足りないか見えてきます。査読をしながら、何が不足していて、何が過剰なのかということが少しずつわかってきたというのが私の印象です。

産総研の死の谷を越える研究を“見える化”できる

矢部 企業やマスコミを初め外の人たちに対して、「第2種基礎研究によって死の谷を越えることができます」といつも言ってきたのですが、ジャーナルによって外に対して“見える化”ができたというふうに思っています。第2種基礎研究、本格研究を外に対して初めてお見せすることができました。

その一方、こういう成果を持っていろいろな企業を訪ねると、かなりインパクトがあります。中小企業の活性化に取り組んでいる産学官連携コーディネータがいろいろな機関にいらっしゃるのですが、「死の谷を越えるには、こういう技術のところで開発が必要なのです」と言う、「お金さえあれば、死の谷を乗り越えられると思っていました」と驚かれるのです。我々が実際に説得できる形で、この1年間示せたということは大変大きなことだったというふうに思っています。

査読とはロジックを読むこと

小野 今4人の方がおっしゃったことは、私もほんとうに同感でして、そういう思いでやってきたな、と改めて感じます。個人的には、「科学とは何か」、「研究とは何か」、「研究者とは何か」、また産総研になってからは「本格研究とは何か」ということを考えてきましたが、『シンセシオロジー』がそれらの問いに対する答えだったのだ、という思いをしていますし、そしてとても成功していると思うのです。

それから、予想もしていなかったことなのですが、他の

分野の研究論文を「読んでわかる自分」に驚いています。もちろん今でも他の分野の研究の解説や記事を読むことはありますが、他の分野の研究者が書いたオリジナルな研究論文を読んだことは今までありませんでした。学会に行っても、分科会が違えばわからない、分科会が同じでもセッションが違っていると理解できないのですが、今回、他分野の研究論文を読んでみて「わかる自分」に驚きまして、「査読意見が言える自分」にはもっと驚きまして、その驚きがまた楽しみでもありました。このことは、『シンセシオロジー』で偶然発見したように見えるのですが、実は必然ではなかったのかという気が今しています。

小林 私も他の分野の論文を読んで査読ができたということは、とても大きな驚きでした。これまで我々が何を目指しているかということを中心に議論し、共有し、積み上げてきたからこそ、そういうことができたと思うのです。一方で、著者の方が、投稿要領を見ながら非常に努力されていることが痛いほどよくわかります。ただ、私としては、第2種基礎研究はとにかく出口のほうに持っていけばいいというのではなくて、第1種基礎研究とは違うシンセシオロジーの独自性というか、オリジナリティというか、まさに第2種基礎研究におけるシンセシオロジーとは何なのか、というところをもっと考えていかなければいけないのだろうと思います。

赤松 査読できるということは、ロジックを読もうとしているからだろうと思うのです。細かい実験方法などの部分は第1種基礎研究の論文としてすでに別のところで査読されているという前提で認めると、全体として何と何を組み合わせるという結論に持っていこうとしているのかという、ある種のロジックを読めばよいこととなります。論理というものはサイエンスの根本にあるものです。デカルトまで戻るような話になりますが、近代科学が始まった時期とデカルトがいた時期はほとんど一緒でしたが、事実であるということを知るかということを知るかをデカルトは考えていたわけですね。科学的な方法論はそれが基礎になっていると思



赤松 幹之 氏

ます。現状の第1種基礎研究は、正しさを証明するロジックのところはルーチン化されているけれども、『シンセシオロジー』では改めてロジックを考えることになるし、書く方もそのロジックをどうやってつくるかと考える。理系の人間としてはロジックを理解するのは得意なほうなので、だからこそ査読ができるのではないのでしょうか。

そして、正しいことを示すロジックではなく、構成のロジックを書くということは、それを読んだ人を動かすためのロジックになっていると思います。構成のためには何をしたら良いのかという論理的正しさを示すことによって、それを真似てみようかと読者が思うのではないかと考えています。

シンセシスは論文にできる

吉川 人を動かすためのロジックというのは面白いですね。

少し歴史的に考えると、シンセシスという話は古いのです。私が研究所から大学に行ったのは1960年代なのですが、最初に設計教育をやらされました。そのとき設計教育の内容の貧弱さに驚くわけで、設計が一番大事だ、学科の教育の中心なのだとわれながら、企業が設計したいろいろなものを持ってきて、写しておけ、というだけなのです。モノをつくるという行為がそこに凝縮しているのに、教師は一言も教えることができない、というのが私の原点なのです。当時からアナリシスとシンセシスという言葉があったのですが、シンセシスをどうしたら教育できるのかと思って、私は設計学を始めました。設計学をやったおかげで、私は学会では孤立し、論文は5年間も受け付けてくれないという時代を経験したのですが、そうであればあるほど、シンセシスにこだわり続け、私は設計学をいかにして論文にできるかということに必死にやってきました。

その後、1985年に国際会議で私の設計学を初めて発表したときに、やや日本とは違って国際的に受け入れられることがわかるのです。そこから設計学という学会ができるけれども、そこでシンセシスは従来の論文の表現形式にはなじまないということが明らかになってくるのです。

もちろん、企業ではシンセシスをやっていますが、それはドキュメンテーションとしては残ってはいない。私は、「企業でやった知的行為は、製品としては残るけれども、思考過程は“雲散霧消”して、次世代に何も伝わることがない。巨大なロスを人類はしているんじゃないか」という話をしていたわけです。ところが、産総研に来たら、研究している人がいる。これは非常に驚きで、非常に印象的でした。まさにシンセシスを論文にすることが、ここならできる。逆にいえば、一人ではできない、これは共同作業なのだということが気がつくわけです。実態的な行為を通じてシンセシスは論文になっていくというプロセスを、ここへ来た最初

の年に確信するのです。

“本格研究”という言葉が発明したのはその1年後なのですが、まさにユニット構成が本格研究だったわけでしょう。それは、今から思えばすべてこの『シンセシオロジー』の背景をつくる一つの行為だったわけです。

研究者のパッションをロジカルに表現する“場”

小野 これまで論文を読んだ感想はいかがですか。

矢部 『シンセシオロジー』では、我々は著者に「どうしてその研究がうまくいったのか、そこをちゃんと強調して書いてください。そこがみんなに訴えるところであり、共通の方法論に通じるのです」と申し上げています。それを著者も感じていただいて、かなりチャレンジングに、例えばここでは人との出会いが新しいものを生み出したので、人との出会いを中心に書いてみようなど、死の谷を越えることを体系化してくれるという面が出てきています。皆さんの激励で意欲的に書いてくれているのがすごくいいなと感じます。

小野 赤松さんのおっしゃったように、ロジックは大切に、可能な限りロジカルに書く。しかし、矢部さんのおっしゃるように、チャレンジングな面があって、ロジックから少し外れたところもある。私は“パッション”と言ってしまおうのですが、今までの科学研究は、我々研究者の知的な営みの一部しか切り出していないという感じがしているのです。私たちは「意思」、「意欲」、「情熱」、「望み」を持ちながら研究しているのですが、そういうものを一切排除したところでした。これまで論文を書いてこなかった。研究者の知的営みを「総体」として表現し伝えたいという思いがありました。

赤松 ロジックと言っても必ずしもパッションを排除することになるとは思っていません。むしろ、『シンセシオロジー』の論文の面白さは、どういうふうにもロジックを組み立てて、何らかのゴールに向かっていくかという、読み物としての面白さであり、それが「書くことの大事さ」だと思うのです。



吉川 弘之 氏

吉川 一般のアナリティカルな論文だって、全部ロジックでできているわけではないですね。ニュートンのプリンキピアには、最初の3ページに等速運動の話と加速度の話と作用・反作用の法則という3原則が書いてありますが、どうしてその3つを思いついたのかということは書いていない。これはまさにシンセシスなのですね。仮説を立てて、その仮説を公理と呼び、その公理があるとうなるということで現状を説明した結果、現実的・観測的な事実と一致した、これで証明していこう、これは科学論文なのです。最初の公理や仮説を出すというのは、まさにアブダクションというか、シンセシスだけれど、それについて触れないという構造になっているわけですね。

しかし、我々はそうではなくて、ものづくりという現場では、仮説である一つのものが出てきて、検証はロジックではなくて、社会のシンセシスみたいになってきているわけで、まさに順番が違う。ジャーナルの編集方針に、「目標を書け」とあるでしょう。これは人間の行為にとって大事なのですね。だけど、一般の科学論文はそれを排除した。私は、いかに科学は人間の思考過程の一部しか表現してこなかったかと非常に実感するわけです。

サステナビリティの時代に失敗する余裕がなくなってきた

赤松 今までの工学的な意味での技術の発展は、どちらかというと失敗ベースで進んできたのだと思います。作ってみて失敗して、その方法ではだめだと気がついて、どうしようかと考える、とやってきた。でも、それでは大変な時間がかかってしまう。いま、いかにその失敗を最小限にするかということが求められていますね。

吉川 サステナビリティの時代には、失敗に対する余裕は極めてなくなってきたということでしょう。人間の行為と、人間の行為の結果のインフルエンス、人間に対するリベンジというか、返ってくるスピードが速くなってしまったわけです。誤りは許されないし、あるいは再評価しなければいけないが、時間に追われている。人間のアイデアと状況の変化が競争する時代になったのです。ですから、学問的な意味での *Synthesiology* という、非常に大きな問題を解くと同時に、現代的な要求にもマッチしていると思うのです。

赤松 少しオーバーに言うと、こういう論文を書ける人がほんとうの賢者ですね。社会が必要としている賢者が『シンセシオロジー』で表現されているはずなのです。

*Synthesiology*によって我々は社会の課題にどう貢献できるか

小林 近年の日本の研究開発効率（研究開発投資額と5年後の産業部門における付加価値総額の比）は欧米に比べて低いというデータがあります。日本の製造業はすばらしいと言われていたのに、ここに来てもがいています。我々はそれに貢献できると思っているのですが、それは社会的な課題ですね。

吉川 第2種基礎研究をやらなければ絶対だめなのですが、本格研究をやって、製品化研究をやっても、まだ使われないわけでしょう。そこに“ソシアリゼーション”という、「知識の社会化」という行為が必要で、これは本格研究の粋をはみ出していくのですね。そういう問題を *Synthesiology* という一つの思想は見せてくれた。

何が問題で投資効率が悪いのか、科学研究を一生懸命やっても、なぜ経済に反映しないのか。ある種の指標では、日本は投資の経済効率が低いのですが、それは「社会化」における企業のビヘイビアが悪いからだ、我々は言えるわけですね。出口のところまで製品化をやっている。あとは社会化、ソシアリゼーションという、私はこれを“社会技術”と呼ぶのだけれども、日本の産業の“社会技術”が未成熟だという、そこに問題があるのだと思うのです。

シンセシスのロジックの解明と死の谷を越える方法論

内藤 創刊号の研究論文のタイトルにある、「大量精製」、「アクセシブルデザイン」、「低コスト製造」、「評価戦略」、「設計販売支援」、「信頼性向上」は、普通の論文にないキーワードですね。まさしく、このキーワードにシナリオと目標の両方が込められている。10年後、20年後、このジャーナルの論文が研究の対象になって、これらのキーワードを分析することによって、研究の戦略がどのようにシフトしていったかということが見えてくるのではないかと。今後、環境問題、持続性の問題が出てくるので、こういうキーワードがたくさん出てきて、かつ問題が明らかになって収斂



内藤 耕氏

していくのではないかと思います。

それから、皆さんがおっしゃるとおり、査読者と著者が一緒になって、お互いが育て合っているという構造が重要だと思うのですが、「基礎研究」と言う以上、学んで、かつ自分が使えるようにしないといけないということですね。

赤松 そうですね、それと、この論文を読むことによって、この先、何をやっていくかということを考えられる良いセンスが育てられる。トヨタ自動車の梅山部長にインタビューした時に、「目利き」という言葉がでてきたのですが、こういう見方がある、これとこれは組み合わせられるなど、「目利き」になるために学べるものがすごくあると思います。

小林 一方で、この論文を書くためには、製品化くらいまで行っていなければいけないのだと誤解されているのではないかと思います。そうではなくて、いろいろなところで構成のステージがあって、それをいろいろなところで書いてもらうように持っていったほうがいいと思うんです。

矢部 ただ、企業の人は、成功したところまで書いてくれたものからまず受け入れると思うんですね。「こういうふうにして成功した」という、まさに死の谷を越えるあたりのうまい方法論を読むと非常に勇気づけられるのではないかと思います。きっとそういう人たちに良いメッセージをこのジャーナルは出せるのではないかという意味で、そこら辺から社会に受け入れられていくのではないかという気がすごくしますね。

吉川 この雑誌の読者の主要な部分はそういう人たちになるでしょうが、成果が出なくても論文にするという意味では、「シンセシスとは何か」ということを研究する人たちにとっても非常に価値があるわけですね。ただ、シンセシスという学問分野ができてしまうと、そこに閉じてしまうので、矢部さんが言ったようなことは非常に気をつけて意識の中に入れておかなければいけないと思いますね。

小野 この雑誌のポイントは、シナリオ作りとシンセシス（構成）にあるのですが、多くの著者の場合、シナリオは思い出せるし、今の時点でブラッシュアップもできる。ただ、シンセシスを書くのに非常に苦勞しているなという感じがします。自分のことを考えても、なぜあるときあしたのか、シンセシスの過程がはっきりとは思い出せないのです。

吉川 私はその研究をやったわけですね。ある種の設計をして、さてどういうふう考えたか、思考過程を考えると

いう研究をたくさんしたのですが、全部、失敗するんですね。要するに、自分の考えたことは完全に忘れてるわけ。そういうアブダクションというのは記憶に残らない。この『シンセシオロジー』の編集者のすばらしさは、論理構成はとりあえず置いておいて、その人に何が起こったかということ客観的に書いてくれということから始めようとした。これは、私は正解だと思っているし、覚えていることを書くしかない。着想の過程というのはものすごく難しいですね。

小野 一人で考えていて着想するだけではなく、人と議論する中で着想が生まれたり、人の研究室を見学しているときに思いついたり、いい研究グループはそういう場をすごく提供しているという気がするんです。シンセシスの創造というか、生産性の高い研究グループは産総研にはたくさんあると思っています。

矢部 『シンセシオロジー』に書かれたものをどう分析して咀嚼するか、それが我々に課せられた課題だと思っているんです。私は、何のためにこれをこうしたのか、あるいは経済性を上げるとか、環境性を保つとか、リスクをなくすとか、そういう社会面から見て分析して、提案するというプロセスがこれからすごく大事なような気がします。

赤松 これまでの第1種基礎研究では、論文を書くことが科学への寄与だったけれど、『シンセシオロジー』の論文は技術を社会で実際に使うために必要な能力を見せるための論文であるべきだと思います。企業の中でこういう論文を書くことによって、目利きであるとか、統合型のことができる人材であるということアピールして、より良いポストにつくというか、そういうふうに使われるべきはずなんですね。

特許をとるということは要素技術を作り出すセンスを証明しているだけだと思うんです。特許や要素技術の論文を出すだけでなく、それを統合するセンスを持っているということ論文に書く。そして、その結果として、社会的にちゃんと処遇されるという形にしないといけない。そういう科学



矢部 彰氏

技術社会になって行かなければならない。そういう社会システムを作ることが、広い意味での科学技術政策の中に欠けているのではないかと思うんです。

吉川 昔は、第1種基礎研究ということで研究論文を書けば、場合によっては特許もできるし、ランダムに新しい知恵を出しておけば、社会がそれをうまく吸収して使ってくれるという、一種の調和的仮説があったわけです。それは、まさにシュンペーターの言ったイノベーションだったわけですが、現在のイノベーションは急がないともう間に合わないのです。炭酸ガスを何とか減らさないと温暖化が起こって、人類が減びる。では、どうやって新しい技術をつくるのかという、まさに追い込まれたような目的が存在しているわけでしょう。

したがって、企業の人は、今、企業が必要としている緊急課題としてのイノベーションのためにこれを読みなさいということなのです。これは基礎研究という、宙に浮いたようなものがどうやって社会化にまで来るかということを見せてくれる、一つの指針なのです。研究者にとっては、科学が持つ、かつてのような自然に使われる信念から、使わ

せなければどうしようもないぞ、という信念に変わってこななければいけないというのがこの『シンセシオロジー』に論文を書くことのモチベーションだという、こういう位置づけが必要だと思うのです。

小野 ありがとうございました。企業、大学、海外からもぜひ『シンセシオロジー』に投稿していただきたいと思ひますし、書くことによって得るものが大いにあると信じています。

(2008年12月19日)



小野 晃氏

編集方針

シンセシオロジー編集委員会

本ジャーナルの目的

本ジャーナルは、個別要素的な技術や科学的知見をいかに統合して、研究開発の成果を社会で使われる形にしておくか、という科学的知の統合に関する論文を掲載することを目的とする。この論文の執筆者としては、科学技術系の研究者や技術者を想定しており、研究成果の社会導入を目指した研究プロセスと成果を、科学技術の言葉で記述したものを論文とする。従来の学術ジャーナルにおいては、科学的な知見や技術的な成果を事実（すなわち事実に知識）として記載したものが学術論文であったが、このジャーナルにおいては研究開発の成果を社会に活かすために何を行なえば良いかについての知見（すなわち当為的知識）を記載したものを論文とする。これをジャーナルの上で蓄積することによって、研究開発を社会に活かすための方法論を確立し、そしてその一般原理を明らかにすることを旨とする。さらに、このジャーナルの読者が自分たちの研究開発を社会に活かすための方法や指針を獲得することを期待する。

研究論文の記載内容について

研究論文の内容としては、社会に活かすことを目的として進めて来た研究開発の成果とプロセスを記載するものとする。研究開発の目標が何であるか、そしてその目標が社会的にどのような価値があるかを記述する（次ページに記載した執筆要件の項目1および2）。そして、目標を達成するために必要となる要素技術をどのように選定し、統合しようと考えたか、またある社会問題を解決するためには、どのような新しい要素技術が必要であり、それをどのように選定・統合しようとしたか、そのプロセス（これをシナリオと呼ぶ）を詳述する（項目3）。このとき、実際の研究に携わったものでなければ分からない内容であることを期待する。すなわち、結果としての要素技術の組合せの記載をするのではなく、どのような理由によって要素技術を選定したのか、どのような理由で新しい方法を導入したのか、について論理的に記述されているものとする（項目4）。例えば、社会導入のためには実験室的製造方法では対応できないため、社会の要請は精度向上よりも適用範囲の広さにあるため、また現状の社会制度上の制約があるため、などの理由を記載する。この時、個別の要素技術の内容の学術的詳細は既に発表済みの論文を引用する形として、重要なポイントを記載するだけで良いものとする。そして、これらの要素技術は互いにどのような関係にあり、それらを統合

するプロセスにおいて解決すべき問題は何であったか、そしてどのようにそれを解決していったか、などを記載する（項目5）。さらに、これらの研究開発の結果として得られた成果により目標にどれだけ近づけたか、またやり残したことは何であるかを記載するものとする（項目6）。

対象とする研究開発について

本ジャーナルでは研究開発の成果を社会に活かすための方法論の獲得を目指すことから、特定の分野の研究開発に限定することはしない。むしろ幅広い分野の科学技術の論文の集積をすることによって、分野に関わらない一般原理を導き出すことを狙いとしている。したがって、専門外の研究者にも内容が理解できるように記述することが必要であるとともに、その専門分野の研究者に対しても学術論文としての価値を示す内容でなければならない。

論文となる研究開発としては、その成果が既に社会に導入されたものに限定することなく、社会に活かすことを念頭において実施している研究開発も対象とする。また、既に社会に導入されているものの場合、ビジネス的に成功しているものである必要はないが、単に製品化した過程を記述するのではなく、社会への導入を考慮してどのように技術を統合していったのか、その研究プロセスを記載するものとする。

査読について

本ジャーナルにおいても、これまでの学術ジャーナルと同様に査読プロセスを設ける。しかし、本ジャーナルの査読はこれまでの学術雑誌の査読方法とは異なる。これまでの学術ジャーナルでは事実の正しさや結果の再現性など記載内容の事実性についての観点が重要視されているのに対して、本ジャーナルでは要素技術の組合せの論理性や、要素技術の選択における基準の明確さ、またその有効性や妥当性を重要視する（次ページに査読基準を記載）。

一般に学術ジャーナルに掲載されている論文の質は査読の項目や採録基準によって決まる。本ジャーナルの査読においては、研究開発の成果を社会に活かすために必要なプロセスや考え方が過不足なく書かれているかを評価する。換言すれば、研究開発の成果を社会に活かすためのプロセスを知るために必要なことが書かれているかを見るのが査読者の役割であり、論文の読者の代弁者として読者の知りたいことの記載の有無を判定するものとする。

通常の学術ジャーナルでは、公平性を保証するという理

由により、査読者は匿名であり、また査読プロセスは秘匿される。確立された学術ジャーナルにおいては、その質を維持するために公平性は重要であると考えられているからである。しかし、科学者集団によって確立されてきた事実的知識を記載する論文形式に対して、なすべきことは何であるかという当為的知識を記載する論文のあり方については、論文に記載すべき内容、書き方、またその基準などを模索していかなければならない。そのためには査読プロセスを秘匿するのではなく、公開していく方法をとる。すなわち、査読者とのやり取り中で、論文の内容に関して重要な議論については、そのやり取りを掲載することにする。さらには、論文の本文には記載できなかった著者の考えなども、査読者とのやり取りを通して公開する。このように査読プロセスに透明性を持たせ、どのような査読プロセスを経て掲載に至ったかを開示することで、ジャーナルの質を担保する。また同時に、査読プロセスを開示することによって、投稿者がこのジャーナルの論文を執筆するときの注意点を理解する助けとする。なお、本ジャーナルのように新しい論文形式を確立するためには、著者と査読者との共同作業によって論文を完成させていく必要があり、掲載された論文は著者と査読者の共同作業の結果ともいえることから、査読者氏名も公表する。

参考文献について

前述したように、本ジャーナルの論文においては、個別

の要素技術については他の学術ジャーナルで公表済みの論文を引用するものとする。また、統合的な組合せを行う要素技術について、それぞれの要素技術の利点欠点について記載されている論文なども参考文献となる。さらに、本ジャーナルの発行が蓄積されてきたのちには、本ジャーナルの掲載論文の中から、要素技術の選択の考え方や問題点の捉え方が類似していると思われる論文を引用することを推奨する。これによって、方法論の一般原理の構築に寄与することになる。

掲載記事の種類について

巻頭言などの総論、研究論文、そして論説などから本ジャーナルは構成される。巻頭言などの総論については原則的には編集委員会からの依頼とする。研究論文は、研究実施者自身が行った社会に活かすための研究開発の内容とプロセスを記載したもので、上記の査読プロセスを経て掲載とする。論説は、科学技術の研究開発のなかで社会に活かすことを目指したものを概説するなど、内容を限定することなく研究開発の成果を社会に活かすために有益な知識となる内容であれば良い。総論や論説は編集委員会が、内容が本ジャーナルに適しているか確認した上で掲載の可否を判断し、査読は行わない。研究論文および論説は、国内外からの投稿を受け付ける。なお、原稿については日本語、英語いずれも可とする。

執筆要件と査読基準

(2008.01)

項目	執筆要件	査読基準
1	研究目標 (「製品」、あるいは研究者の夢) を設定し、記述する。	研究目標が明確に記述されていること。
2	研究目標と社会とのつながり	研究目標と社会との関係が合理的に記述されていること。
3	シナリオ	道筋 (シナリオ・仮説) が合理的に記述されていること。
4	要素の選択	要素技術 (群) が明確に記述されていること。 要素技術 (群) の選択の理由が合理的に記述されていること。
5	要素間の関係と統合	要素間の関係と統合が科学技術の言葉で合理的に記述されていること。
6	結果の評価と将来の展開	研究目標の達成の度合いと将来の研究展開が客観的、合理的に記述されていること。
7	オリジナリティ	既刊の他研究論文と同じ内容の記述がないこと。

投稿規定

シンセシオロジー編集委員会

制定 2007年12月26日

改正 2008年6月18日

改正 2008年10月24日

1 投稿記事

原則として、研究論文または論説の投稿を受け付ける。

2 投稿資格

投稿原稿の著者は、本ジャーナルの編集方針にかなう内容が記載されていれば、所属機関による制限並びに科学技術の特定分野による制限も行わない。ただし、オーサーシップについて記載があること（著者全員が、本論文についてそれぞれ本質的な寄与をしていることを明記していること）。

3 原稿の書き方

3.1 一般事項

1) 投稿原稿は日本語あるいは英語で受け付ける。査読により掲載可となった論文または記事は Synthesiology (ISSN1882-6229) に掲載されるとともに、このオリジナル版の約4ヶ月後に発行される予定の英語版の Synthesiology - English edition (ISSN1883-0978) にも掲載される。このとき、原稿が英語の場合にはオリジナル版と同一のものを英語版に掲載するが、日本語で書かれている場合には、著者に英語版への掲載のための翻訳版の作成を依頼し、翻訳されたものを英語版に掲載する。

2) 原稿はワープロ等を用いて作成し、A4判縦長の用紙に印字する。表紙には記事の種類(研究論文か論説)を明記する。

3.2 原稿の構成

1) タイトル(含サブタイトル)、要旨、著者名、所属・連絡先、本文、キーワード(5つ程度)とする。

2) タイトル、要旨、著者名、所属・連絡先については日本語および英語で記載する。

3) 原稿は、図・表・写真を含め、原則として刷り上り6ページ程度とする。

4) タイトルは和文で10～20文字(英文では5～10ワード)前後とし、広い読者層に理解可能なものとする。研究論文には和文で15～25文字(英文では7～15ワード)前後のサブタイトルを付け、専門家の理解を助けるものとする。

5) 要約には、社会への導入のためのシナリオ、構成した技術要素とそれを選択した理由などの構成方法の考え方も記載する。

6) 和文要約は300文字以内とし、英文要約(125ワード程度)は和文要約の内容とする。英語論文の場合には、和文要約は省略することができる。

7) 本文は、和文の場合は9,000文字程度とし、英文の場合は刷り上りで同程度(3,400ワード程度)とする。

8) 掲載記事には著者全員の執筆者履歴(各自200文字程度。英文の場合は75ワード程度。)及びその後、本質的な寄与が何であったかを記載する。なお、その際本質的な寄与をした他の人が抜けていないかも確認のこと。

9) 研究論文における査読者との議論は査読者名を公開して行い、査読プロセスで行われた主な論点について3,000文字程度(2ページ以内)で編集委員会が編集して掲載する。

10) 原稿中に他から転載している図表等や、他の論文等からの引用がある場合には、転載許可等の明示や、参考文献リスト中へ引用元の記載等、適切な措置を行う。また、直接的な引用の場合には引用部分を本文中に記載する。

3.3 書式

1) 和文原稿の場合には以下のようにする。本文は「である調」で記述し、章の表題に通し番号をつける。段落の書き出しは1字あけ、句読点は「。」および「、」を使う。アルファベット・数字・記号は半角とする。また年号は西暦で表記する。

2) 図・表・写真についてはそれぞれ通し番号をつけ、適切な表題・説明文(20～40文字程度。英文の場合は10～20ワード程度。)を記載のうえ、本文中における挿入位置を記入する。

3) 図についてはそのまま印刷できる鮮明な原図、または画像ファイル(掲載サイズで350dpi以上)を提出する。原則は刷り上りで左右15cm以下、白黒印刷とする。

4) 写真については鮮明なプリント版(カラー可)または画像ファイル(掲載サイズで350dpi以上)で提出する。ファイルタイプ(tiff, jpeg, pdfなど)を明記する。原則は左右7.2cmの白黒印刷とする。

5) 参考文献リストは論文の参照順に記載する。

雑誌：[番号] 著者名：表題、雑誌名、巻(号)、開始ページ～終了ページ(発行年)。

書籍(単著または共著)：[番号] 著者名：書名、開始ページ～終了ページ、発行所、出版地(発行年)。

4 原稿の提出

原稿の提出は段刷文書1部および電子媒体に原稿提出チェックシートを添付のうえ、下記宛に提出する。

〒305-8568

茨城県つくば市梅園1-1-1 つくば中央第2

産業技術総合研究所 広報部出版室内

シンセシオロジー編集委員会事務局

なお、投稿原稿は原則として返却しない。

5 著者校正

著者校正は1回行うこととする。この際、印刷上の誤り以外の修正・訂正は原則として認められない。

6 内容の責任

掲載記事の内容の責任は著者にあるものとする。

7 著作権

本ジャーナルに掲載された全ての記事の著作権は産業技術総合研究所に帰属する。

問い合わせ先：

産業技術総合研究所 広報部出版室内

シンセシオロジー編集委員会事務局

電話：029-862-6217、ファックス：029-862-6212

E-mail: synthesiology@m.aist.go.jp

MESSAGES FROM THE EDITORIAL BOARD

There has been a wide gap between science and society. The last three hundred years of the history of modern science indicates to us that many research results disappeared or took a long time to become useful to society. Due to the difficulties of bridging this gap, it has been recently called the valley of death or the nightmare stage^(Note 1). Rather than passively waiting, therefore, researchers and engineers who understand the potential of the research should be active.

To bridge the gap, technology integration^(i.e. Type 2 Basic Research – Note 2) of scientific findings for utilizing them in society, in addition to analytical research, has been one of the wheels of progress^(i.e. Full Research – Note 3). Traditional journals, have been collecting much analytical type knowledge that is factual knowledge and establishing many scientific disciplines^(i.e. Type 1 Basic Research – Note 4). Technology integration research activities, on the other hand, have been kept as personal know-how. They have not been formalized as universal knowledge of what ought to be done.

As there must be common theories, principles, and practices in the methodologies of technology integration, we regard it as basic research. This is the reason why we have decided to publish “*Synthesiology*”, a new academic journal. *Synthesiology* is a coined word combining “synthesis” and “ology”. Synthesis which has its origin in Greek means integration. Ology is a suffix attached to scientific disciplines.

Each paper in this journal will present scenarios selected for their societal value, identify elemental knowledge and/or technologies to be integrated, and describe the procedures and processes to achieve this goal. Through the publishing of papers in this journal, researchers and engineers can enhance the transformation of scientific outputs into the societal prosperity and make technical contributions to sustainable development. Efforts such as this will serve to increase the significance of research activities to society.

We look forward to your active contributions of papers on technology integration to the journal.

“*Synthesiology*” Editorial Board

- Note 1** The period was named “nightmare stage” by Hiroyuki Yoshikawa, President of AIST, and historical scientist Joseph Hatvany. The “valley of death” was by Vernon Ehlers in 1998 when he was Vice Chairman of US Congress, Science and Technology Committee. Lewis Branscomb, Professor emeritus of Harvard University, called this gap as “Darwinian sea” where natural selection takes place.
- Note 2** Type 2 Basic Research
This is a research type where various known and new knowledge is combined and integrated in order to achieve the specific goal that has social value. It also includes research activities that develop common theories or principles in technology integration.
- Note 3** Full Research
This is a research type where the theme is placed within the scenario toward the future society, and where framework is developed in which researchers from wide range of research fields can participate in studying actual issues. This research is done continuously and concurrently from Type 1 Basic Research^(Note 3) to Product Realization Research^(Note 5), centered by Type 2 Basic Research^(Note 4).
- Note 4** Type 1 Basic Research
This is an analytical research type where unknown phenomena are analyzed, by observation, experimentation, and theoretical calculation, to establish universal principles and theories.
- Note 5** Product Realization Research
This is a research where the results and knowledge from Type 1 Basic Research and Type 2 Basic Research are applied to embody use of a new technology in the society.

Edited by *Synthesiology* Editorial Board

Published by National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

Synthesiology Editorial Board

Editor in Chief: A.Ono

Senior Executive Editor: N.Kobayashi, A.Yabe

Executive Editors: M.Akamatsu, K.Naito, H.Taya

Editors: A.Kageyama, K.Ohmaki, K.Igarashi, E.Tsukuda, M.Tanaka,

H.Kuriyama, Y.Owadano, T.Shimizu, H.Tateishi, M.Mochimaru,

N.Murayama, S.Togashi, K.Mizuno, H.Ichijo, A.Etori, H.Nakashima,

K.Ueda, P. Fons

Publishing Secretariat: Publication Office, Public Relations Department, AIST

Contact: *Synthesiology* Editorial Board

c/o Publication Office, Public Relations Department, AIST

Tsukuba Central 2, Umezono 1-1-1, Tsukuba 305-8568, Japan

Tel: +81-29-862-6217 Fax: +81-29-862-6212

E-mail: synthesiology@m.aist.go.jp

URL: <http://www.aist.go.jp/synthesiology>

*Reproduction in whole or in part without written permission is prohibited.

Editorial Policy

Synthesiology Editorial Board

Objective of the journal

The objective of *Synthesiology* is to publish papers that address the integration of scientific knowledge or how to combine individual elemental technologies and scientific findings to enable the utilization in society of research and development efforts. The authors of the papers are researchers and engineers, and the papers are documents that describe, using “scientific words”, the process and the product of research which tries to introduce the results of research to society. In conventional academic journals, papers describe scientific findings and technological results as facts (i.e. factual knowledge), but in *Synthesiology*, papers are the description of “the knowledge of what ought to be done” to make use of the findings and results for society. Our aim is to establish methodology for utilizing scientific research result and to seek general principles for this activity by accumulating this knowledge in a journal form. Also, we hope that the readers of *Synthesiology* will obtain ways and directions to transfer their research results to society.

Content of paper

The content of the research paper should be the description of the result and the process of research and development aimed to be delivered to society. The paper should state the goal of research, and what values the goal will create for society (Items 1 and 2, described in the Table). Then, the process (the scenario) of how to select the elemental technologies, necessary to achieve the goal, how to integrate them, should be described. There should also be a description of what new elemental technologies are required to solve a certain social issue, and how these technologies are selected and integrated (Item 3). We expect that the contents will reveal specific knowledge only available to researchers actually involved in the research. That is, rather than describing the combination of elemental technologies as consequences, the description should include the reasons why the elemental technologies are selected, and the reasons why new methods are introduced (Item 4). For example, the reasons may be: because the manufacturing method in the laboratory was insufficient for industrial application; applicability was not broad enough to stimulate sufficient user demand rather than improved accuracy; or because there are limits due to current regulations. The academic details of the individual elemental technology should be provided by citing published papers, and only the important points can be described. There should be description of how these elemental technologies

are related to each other, what are the problems that must be resolved in the integration process, and how they are solved (Item 5). Finally, there should be descriptions of how closely the goals are achieved by the products and the results obtained in research and development, and what subjects are left to be accomplished in the future (Item 6).

Subject of research and development

Since the journal aims to seek methodology for utilizing the products of research and development, there are no limitations on the field of research and development. Rather, the aim is to discover general principles regardless of field, by gathering papers on wide-ranging fields of science and technology. Therefore, it is necessary for authors to offer description that can be understood by researchers who are not specialists, but the content should be of sufficient quality that is acceptable to fellow researchers.

Research and development are not limited to those areas for which the products have already been introduced into society, but research and development conducted for the purpose of future delivery to society should also be included.

For innovations that have been introduced to society, commercial success is not a requirement. Notwithstanding there should be descriptions of the process of how the technologies are integrated taking into account the introduction to society, rather than describing merely the practical realization process.

Peer review

There shall be a peer review process for *Synthesiology*, as in other conventional academic journals. However, peer review process of *Synthesiology* is different from other journals. While conventional academic journals emphasize evidential matters such as correctness of proof or the reproducibility of results, this journal emphasizes the rationality of integration of elemental technologies, the clarity of criteria for selecting elemental technologies, and overall efficacy and adequacy (peer review criteria is described in the Table).

In general, the quality of papers published in academic journals is determined by a peer review process. The peer review of this journal evaluates whether the process and rationale necessary for introducing the product of research and development to society are described sufficiently well.

In other words, the role of the peer reviewers is to see whether the facts necessary to be known to understand the process of introducing the research finding to society are written out; peer reviewers will judge the adequacy of the description of what readers want to know as reader representatives.

In ordinary academic journals, peer reviewers are anonymous for reasons of fairness and the process is kept secret. That is because fairness is considered important in maintaining the quality in established academic journals that describe factual knowledge. On the other hand, the format, content, manner of text, and criteria have not been established for papers that describe the knowledge of “what ought to be done.” Therefore, the peer review process for this journal will not be kept secret but will be open. Important discussions pertaining to the content of a paper, may arise in the process of exchanges with the peer reviewers and they will also be published. Moreover, the vision or desires of the author that cannot be included in the main text will be presented in the exchanges. The quality of the journal will be guaranteed by making the peer review process transparent and by disclosing the review process that leads to publication.

Disclosure of the peer review process is expected to indicate what points authors should focus upon when they contribute to this journal. The names of peer reviewers will be published since the papers are completed by the joint effort of the authors and reviewers in the establishment of the new paper format for *Synthesiology*.

References

As mentioned before, the description of individual elemental technology should be presented as citation of papers published in other academic journals. Also, for elemental technologies that are comprehensively combined, papers that describe advantages and disadvantages of each elemental technology can be used as references. After many papers are accumulated through this journal, authors are recommended to cite papers published in this journal that present similar procedure about the selection of elemental technologies and the introduction to society. This will contribute in establishing a general principle of methodology.

Types of articles published

Synthesiology should be composed of general overviews such as opening statements, research papers, and editorials. The Editorial Board, in principle, should commission overviews. Research papers are description of content and the process of research and development conducted by the researchers themselves, and will be published after the peer review process is complete. Editorials are expository articles for science and technology that aim to increase utilization by society, and can be any content that will be useful to readers of *Synthesiology*. Overviews and editorials will be examined by the Editorial Board as to whether their content is suitable for the journal. Entries of research papers and editorials are accepted from Japan and overseas. Manuscripts may be written in Japanese or English.

Required items and peer review criteria (January 2008)

	Item	Requirement	Peer Review Criteria
1	Research goal	Describe research goal (“product” or researcher’s vision).	Research goal is described clearly.
2	Relationship of research goal and the society	Describe relationship of research goal and the society, or its value for the society.	Relationship of research goal and the society is rationally described.
3	Scenario	Describe the scenario or hypothesis to achieve research goal with “scientific words” .	Scenario or hypothesis is rationally described.
4	Selection of elemental technology(ies)	Describe the elemental technology(ies) selected to achieve the research goal. Also describe why the particular elemental technology(ies) was/were selected.	Elemental technology(ies) is/are clearly described. Reason for selecting the elemental technology(ies) is rationally described.
5	Relationship and integration of elemental technologies	Describe how the selected elemental technologies are related to each other, and how the research goal was achieved by composing and integrating the elements, with “scientific words” .	Mutual relationship and integration of elemental technologies are rationally described with “scientific words” .
6	Evaluation of result and future development	Provide self-evaluation on the degree of achievement of research goal. Indicate future research development based on the presented research.	Degree of achievement of research goal and future research direction are objectively and rationally described.
7	Originality	Do not describe the same content published previously in other research papers.	There is no description of the same content published in other research papers.

Instructions for Authors

“*Synthesiology*” Editorial Board

Established December 26, 2007

Revised June 18, 2008

Revised October 24, 2008

1. Types of contributions

Research papers or editorials should be submitted to the Editorial Board.

2. Qualification of contributors

There are no limitations regarding author affiliation or discipline as long as the content of the submitted article meets the editorial policy of *Synthesiology*, however, authorship should be clearly stated. (It should be clearly stated that all authors have made essential contributions to the paper.)

3. Manuscripts

3.1 General

1) Articles may be submitted in Japanese or English. Accepted articles will be published in *Synthesiology* (ISSN 1882-6229) in the language they were submitted in. All articles will also be published in *Synthesiology - English edition* (ISSN 1883-0978). The English edition will be distributed throughout the world approximately four months after the original *Synthesiology* issue is published. Articles written in English will be published in English in both the original *Synthesiology* as well as the English edition. Authors who write articles for *Synthesiology* in Japanese will be asked to provide English translations for the English edition of the journal.

2) The manuscript shall be prepared using word processors or similar devices, and printed on A4-size portrait (vertical) sheets of paper. The category of article (research paper or editorial) shall be stated clearly on the cover sheet.

3.2 Structure

1) The manuscript should include a title (including subtitle), abstract, the name(s) of author(s), institution/contact, main text, and keywords (about 5 words).

2) Title, abstract, name of author(s), and institution/contact shall be provided.

3) The length of the manuscript shall be, about 6 printed pages including figures, tables, and photographs.

4) The title should be about 10-20 Japanese characters (5-10 English words), and readily understandable for a diverse readership background. Research papers shall have subtitles of about 15-25 Japanese characters (7-15 English words) to help recognition by specialists.

5) The abstract should include the thoughts behind the integration of technological elements and the reason for their selection as well as the scenario for utilizing the research results in the society.

6) The abstract should be 300 Japanese characters or less (125 English words). The Japanese abstract may be omitted in the English edition.

7) The main text should be about 9,000 Japanese characters (3,400 English words).

8) The article submitted should be accompanied by profiles of all authors, of about 200 Japanese characters (75 English words) for each author. The essential contribution of each author to the paper should also be included. Confirm that all persons who have made essential contribution to the paper are included.

9) Discussion with reviewers regarding the research paper content shall be done openly with names of reviewers disclosed, and the Editorial Board will edit the highlights of the review process to about 3,000 Japanese characters (1,200 English words) or a maximum of 2 pages. The edited discussion will be attached to the main body of the paper as a part of the article.

10) If there are reprinted figures, graphs or citations from other papers, permission for citation, if needed, should be clearly stated and the sources should be listed in the reference list. All verbatim quotations should be placed in quotation marks or marked clearly within the paper.

3.3 Format

1) The text should be in formal style. The section and subsection chapters should be enumerated. There should be one line space at the start of paragraph.

2) Figures, tables, and photographs should be enumerated. They should have a title and an explanation (about 20-40 Japanese characters or 10-20 English words), and the position in the text should be clearly indicated.

3) For figures, clear originals that can be used for printing or image files (resolution 350 dpi or higher) should be submitted. In principle, the final print will be 15 cm x 15 cm or smaller, in black and white.

4) For photographs, clear prints (color accepted) or image files should be submitted. Image files should specify file types: tiff, jpeg, pdf, etc. explicitly

(resolution 350 dpi or higher) . In principle, the final print will be 7.2 cm x 7.2 cm or smaller, in black and white.

5) References should be listed in order of citation in the main text.

Journal – [No.] Author(s): Title of article, *Title of journal*, Volume(Issue), Starting page-Ending page (Year of publication).

Book – [No.] Author(s): *Title of book*, Starting page-Ending page, Publisher, Place of Publication (Year of publication).

4. Submission

One printed copy or electronic file of manuscript with a checklist attached should be submitted to the following address:

Synthesiology Editorial Board
c/o Publication Office, Public Relations
Department, National Institute of Advanced
Science and Technology(AIST)
Tsukuba Central 2 , 1-1-1 Umezono, Tsukuba
305-8568
E-mail: synthesiology@m.aist.go.jp

The submitted article will not be returned.

5. Proofreading

Proofreading by author(s) of articles after typesetting is complete will be done once. In principle, only correction of printing errors are allowed in the proofreading stage.

6. Responsibility

The author(s) will be solely responsible for the content of the contributed article.

7. Copyright

The copyright of the articles published in “*Synthesiology*” and “*Synthesiology English Edition*” shall belong to the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology(AIST).

Inquiries:

Synthesiology Editorial Board
c/o Publication Office, Public Relations
Department, National Institute of Advanced
Science and Technology(AIST)
Tel: +81-29-862-6217 Fax: +81-29-862-6212
E-mail: synthesiology@m.aist.go.jp

読者フォーラム

Gerard H. (Gus) Gaynor

IEEE技術経営評議会会長*、同終身フェロー

Synthesiology English editionの第1号および第2号をお送りいただきありがとうございます。私は本当に印象深く拝見しました。これは大きな試みであり、このジャーナルの進展が是非成功することを望んでいます。

私は吉川理事長のこのジャーナルの紹介記事を拝見しました。彼が概要を述べた内容は、技術を取り扱うすべての努力をもってしてもまだ実際には達成していないことなのですが、皆様方が成し遂げられることを期待しています。皆様方が第2種基礎研究として言及している研究は確かに必要であり、記事の中ではそのアプローチを、以下のように非常に明確に定義しています。

“異なる領域知識を統合あるいは必要な場合には新知識を創出し、それを使って社会的に認知可能な機能を持つ人工物（ものあるいはサービス）を実現する研究”

第2号では、MITのレスター教授へのインタビュー記事を最も興味深く読みました。卓越した質問と意見です。これはアカデミ

アと産業界をつなぐ素晴らしい機会となるでしょう。そして、それはディシプリン（専門分野）の統合を推進する機会となります。それはまたアカデミアにおいて広い基盤を持つ工学・技術とマネジメント教育に立ち返る機会を与えてくれます。

おそらく我々はそれぞれの専門分野の中でさえ、あまりにも専門化しすぎました。今、米国の電気電子工学のカリキュラムを見てみると、非常に専門的になっていることが分かります。我々は、ある場合には電気モーターの機能さえ教えずに学生を卒業させてしまいます。彼らは、機械学、動力学、流体力学、熱力学、伝熱工学やその他の工学における基礎学問に関する深い理解もっていません。

これら2号の論文はこの統合に関する議論を開始するのに貴重な材料を提供していると思います。私は皆様方が異なる専門分野の知識の統合を推進するこの試みに是非成功することを心から祈っています。

2009年1月9日

*IEEE (The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc.) は、アメリカ合衆国に本部を持つ電気・電子技術の学会。

編集後記

シンセシオロジーを創刊してから1年が経ちました。多くの方々のご協力またご支援のお陰で2年目を迎えることができました。関係された皆様に感謝する次第です。お気付きになったかと思いますが、第2巻から少し体裁を変更させていただきました。冊子ごとのページ付けを廃止して巻ごとの通しページだけにしたこと、論文の英語タイトルやアブストラクトを第1ページ目に掲載するなど、これらは科学技術振興機構（JST）で推進しているSIST（科学技術情報流通技術基準）に準拠させたもので、学術誌としての利便性が高まるものと期待しています。これからも良いことはどしどし取り入れて、刷新を進めていきたいと思っています。

この1年を振り返ろうと、シンセシオロジーの立ち上げに中心的に携わったメンバーが集まって意見交換を行ない、それを本号の記事としました。話がやや抽象的に過ぎたかもしれませんが、メンバーの熱い思いが感じられるとともに、この学術誌発刊の背景や経緯をご理解いただくことができるかと思えます。また、シンセシオロジーの英語版をお読みになったIEEE（米国電気電子学会）フェローのGaynor氏より、その感想のメールをいただきましたので、掲載いたしました。これを契機に読者フォーラムという欄を設けましたので、読者の方々から忌憚のないご意見やご感想、またシンセシオロジーに関係する書籍の紹介などをお寄せいただければと思います。

産総研のホームページからシンセシオロジーの論文がダウン

ロードできるようになっていますが、アセス件数はこの1年間で2万件以上ありました。電子版が広く活用されているようです。冊子には読者アンケートを挟み込んでありますが、これまでに返送されてきたアンケートは約7割が企業の方々からのものでした。その職種を見ますと、研究開発に携わっている方が4割弱であるとともに、管理職や営業また企画関係の方からの回答も4割ぐらいあり、技術開発のためだけでなく技術経営的な観点で読まれていることが分かり、うれしく思っています。また、当初は企業、大学、図書館などの機関宛だけに本誌をお送りしていましたが、発刊後に本誌の内容を知って購読されたいと数十名の方々から送付の依頼をいただきました。機関宛にお送りしているだけで、どのような方が読者となっているか分かりにくいので、このように購読希望をお寄せいただくと読者像が具体的にあって、編集にも張りがでてくるものです。

本号では慶應義塾大学理工学部システムデザイン工学科の谷下、菱田両教授との座談会記事を掲載しましたが、2年目は、産学・官・マスコミなどセクターを問わず、シンセシオロジーの目指すところを共有している国内外の方々との連携を強めていきたいと考えております。関心をお持ちいただける方についての情報がありましたら、お気軽に編集委員会にご連絡をいただければと思います。

（編集幹事 赤松 幹之）

Synthesiology 2巻 1号 2009年2月 印刷・発行

編集 シンセシオロジー編集委員会

発行 独立行政法人 産業技術総合研究所

シンセシオロジー編集委員会

委員長：小野 晃

副委員長：小林 直人、矢部 彰

幹事（編集及び査読）：赤松 幹之

幹事（普及）：内藤 耕

幹事（出版）：多屋 秀人

委員：景山 晃、大蒔 和仁、五十嵐 一男、佃 栄吉、田中 充、栗山 博、大和田野 芳郎、清水 敏美、立石 裕、持丸 正明、
村山 宣光、富樫 茂子、水野 光一、一條 久夫、餌取 章男、中島 秀之、上田 完次、Paul Fons

事務局：独立行政法人 産業技術総合研究所 広報部出版室内 シンセシオロジー編集委員会事務局

問い合わせ シンセシオロジー編集委員会

〒305-8568 つくば市梅園1-1-1 中央第2 産業技術総合研究所広報部出版室内

TEL：029-862-6217 FAX：029-862-6212

E-mail：synthesiology@m.aist.go.jp ホームページ <http://www.aist.go.jp/synthesiology>

●本誌掲載記事の無断転載を禁じます。