



東京工業大学 物質・情報卓越教育院

文部科学省平成30年度卓越大学院プログラム

「物質×情報＝複素人材」育成を通じた持続可能社会の創造

- ◆ TAC-MIプログラム担当教員研究最前線：P.2-P.3
- ◆ 2023年度国際フォーラム・未来社会サービス創出ワークショップ：P.4-P.9
- ◆ TAC-MI授業科目紹介 新産業創出最前線：P.10



アニオン交換膜型水電解の設計・開発

Design and development of anion-exchange membrane water electrolysis



山口 猛央

科学技術創成研究院・化学生命科学研究所 教授

2050年には再生可能エネルギーを大幅に利用した社会とするには、水素キャリアなどを利用する高度なエネルギー変換技術が必要になります。具体的には、水の電気分解（水電解）によって再生可能エネルギーを水素に変換し、貯蔵・輸送し、必要な場所・時間に燃料電池により電気を供給する技術が必要です。我々は、新しい電解質膜や電気化学触媒を開発するとともに、電池技術、電解技術を進め、次世代の水電解および燃料電池を設計・開発しています。水電解としては、効率の良い膜型水電解とし、貴金属を用いる必要の無いアニオン交換膜型水電解の開発を進めています。従来のプロトン伝導型は酸環境であり、触媒、集電体、プレートに貴金属しか使用できないのに対し、OH⁻イオンが伝導するアルカリ環境のアニオン交換膜型水電解では、殆どの卑金属が安定に使用できます。しかしながら、アルカリ中ではポリマーは分解しやすく、高耐久なアニオン交換膜が存在しませんでした。我々はアルカリ中でのアニオン交換膜の分解機構を解明し、分解しないポリフェニレン骨格を用いたアニオン交換膜の開発に成功しました[1]。また、開発したアニオン交換膜を水電解に応用したところ、80℃の純水供給で高い耐久性を示すアニオン交換膜型水電解に世界で初めて成功しました[2]。膜ができれば、次は卑金属触媒の開発ですが、卑金属触媒の素は種類が多く、全ての組み合わせを試すことは不可能です。我々は結晶構造データベースとマテリアルズインフォマティクス技術を組み合わせ、実験や量子化学計算も合わせて、短期間に、貴金属を超える卑金属触媒の開発に成功しました[3]。これら膜と触媒を合わせ、貴金属を用いない高性能水電解セルの開発も進んでいます。図1に示すように、膜、触媒、さらに膜と触媒を組み合わせた電解セルの設計・開発を、実験と計算を組み合わせ分子からデバイスまでをつなぎ、設計・開発を進めています。

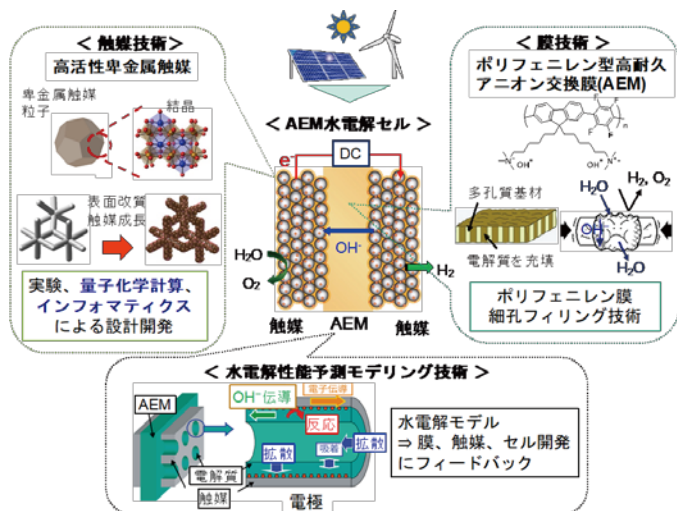


図1 アニオン交換膜(AEM)水電解の設計・開発

- [1] S. Miyaniishi, T. Yamaguchi, *Polymer Chemistry*, 11, 3812-3820 (2020).
- [2] R. Soni, S. Miyaniishi, H. Kuroki, T. Yamaguchi, *ACS Applied Energy Materials*, 4(2), 1053-1058 (2021).
- [3] Y. Sugawara, S. Ueno, K. Kamata, T. Yamaguchi, *ChemElectroChem*, 9(9), e202101679 (2022).

データ科学を活用した高熱伝導性高分子材料の創成

Designing High Thermal Conductivity Polymers: A Data-Driven Approach



早川 晃鏡

物質理工学院・材料系 教授

エネルギーの有効活用は持続可能な社会を構築する上で欠かせないテーマです。パワー半導体は、このような効率的な電力の活用と制御および変換を可能にする重要な素子です。しかしながら、電力を制御する際に発生する熱は、素子の効率を著しく低下させます。そのため、素子を放熱効率の高い冷却システムと組み合わせる必要があります。そこには絶縁性と熱伝導性に優れた接着樹脂の開発が不可欠となっています。

我々の研究室では、次世代半導体素子に関連し、超微細加工や低誘電損失を目指した多様な有機高分子材料の研究開発に注力しています。その一環として、エポキシ樹脂複合材料やポリイミドなどに代表される接着樹脂の高熱伝導化にも取り組んでいます。最近では、データ科学に基づいた仮想ライブラリを利用した効率的な分子構造の絞り込みによる材料開発を目指しています。有機高分子物質は、金属やセラミックスに比べて、熱伝導性が極端に低いですが、近年、高分子鎖の配向が熱伝導性を向上させることが明らかにされつつあります。エポキシ樹脂やポリイミドの分子鎖の配向を誘導するために、我々は液晶性を付与した材料開発を進めています。一例として、購入可能な試薬のデータベースであるZINCを基に11.5万を超えるポリイミドの仮想ライブラリを構築しました。液晶性の予測を行う機械学習モデルを適用し、約8千種類の分子構造に絞り込み、次いでモノマーの入手のしやすさや実際の合成ルートの可能性に鑑みて選別を行い、最終的には7種類のポリイミドの合成に至りました(図1)。得られたポリイミドは高温領域で液晶性を示すことが示唆され、実際に分子鎖の配列配向した高次構造が形成されることも明らかになりました。熱伝導性の指標となる熱拡散率の値も従来材料に比べて3~4倍の高い値を示すことがわかりました[1][2]。これは、将来の半導体素子周辺材料の開発に留まらず、他の産業分野への応用も期待される成果であると考えています。

本研究の成果はJST-CREST研究の一環として、本学物質理工学院材料系 森川淳子教授(代表研究者)、統計数理研究所 吉田亮教授らとの共同研究によるものです。

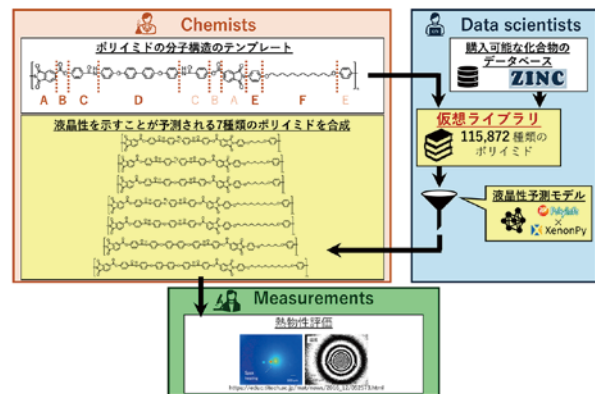


図1 データ科学を活用する高熱伝導性ポリイミドの分子構造設計

- [1] H. Maeda, T. Hayakawa et al., "Data-Driven Design and Synthesis of Liquid Crystalline Polyimides", *SPSJ Preprint*, 21J07, IPC2023 (2023).
- [2] H. Maeda, T. Hayakawa et al., *in preparation*.

スマートフォンGPSビッグデータに基づく都市動態の理解・予測

Understanding and forecasting urban dynamics with Smartphone GPS Big Data



下坂 正倫

情報理工学院・情報工学系 准教授

我々の研究グループでは、スマートフォンを代表とする携帯端末や、環境に設置したIoTセンサーから得られるセンサデータを活用して、個人レベルや群衆レベルの人の行動のモデル化や予測技術の開発に取り組んでいます。このようなモデリング技術の一つとして、スマートフォンで得られた大規模位置履歴データを活用した研究を紹介いたします。

私たちのグループはLINEヤフー株式会社と共同で、数千万ユーザの数億レコード/日の位置履歴情報を利用した、地域毎(メッシュ単位は500m~1000m)の活動人口パターンをモデル化を行っています。これらのパターンを高精度に予測するには、天候・曜日・平日/祝日、土地利用特性といったコンテキストを盛り込む必要があることがわかっています。ただし、コンテキストを盛り込むほどに性能が良くなるとは限りませんが、同時に過剰適合のリスクも高まります。また、人口パターンは地域によって異なるため、それらのパターンの学習を効率良く行う必要があります。さらに、地域メッシュのサイズを高精細にすればするほど、地域あたりのデータ(ユーザ数)が小さくなり、過剰適合のリスクが高まります。このような課題を一つ一つ解決しながら研究を進め、現在では、全国規模の地域に対して効率良く高精度にパターンをモデル化する技術に至っています[1][2]。また、スマートフォンの位置履歴情報に加え、乗換検索サービスの検索履歴を用いることで、駅周辺の混雑の「予測」も可能になります[3]。

我々の研究成果は、コロナ禍で注目された、密集地域の回避を目的とした異常混雑の可視化や、施設単位での異常混雑の提示といったサービスや「乗換検索」での異常混雑予報といったサービス[4]にも応用されています。本学の学生・教職員はじめ、読者の皆さんにも興味があれば、試しにお使いいただければと考えています。

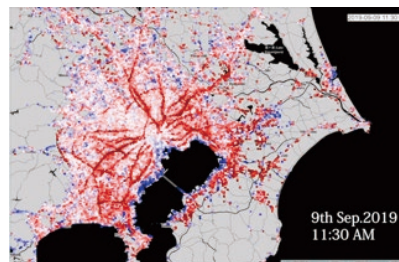


図1 [1]の手法を用いた2019年台風15号(ファクサイ・FAXAI)発生時における異常検知結果の可視化結果。

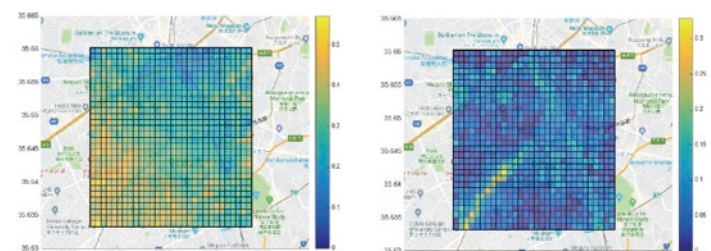


図2 [2]の手法を用いた高精細な地域メッシュ(100m)のパターン傾向解析

- [1] Masamichi Shimosaka et al. MOIRE: Mixed-Order Poisson Regression towards Fine-grained Urban Anomaly Detection at Nationwide Scale. In Proc. of 2020 IEEE Big Data.
- [2] Masamichi Shimosaka et al. Spatiality preservable factored Poisson regression for large-scale fine-grained GPS-based population analysis. In Proc. of AAAI 2019.
- [3] Soto Anno, Kota Tsubouchi, and Masamichi Shimosaka. CityOutlook: Early Crowd Dynamics Forecast towards Irregular Events Detection with Synthetically Unbiased Regression. In Proc. of ACM SIGSPATIAL 2021.
- [4] Yahoo! MAP、混雑レーダーをアップデート
<https://about.yahoo.co.jp/pr/release/2020/07/30b/>

シミュレーションと機械学習を用いて新薬開発を加速する

Accelerating drug discovery using simulation and machine learning



安尾 信明

物質情報卓越教育院 特任講師

TAC-MI特任教員の安尾です。特任教員は研究室を持っていませんが、私個人としては主に2種類の研究活動を行っています。一つは企業や他の研究室の抱える課題を機械学習やシミュレーションを活用して解決する活動で、この経験はプラクティススクールにも活用していますが、今回はもう一つの研究である薬剤の標的タンパク質に結合する新規の低分子化合物を発見する手法の研究です。新薬開発では、疾患の原因になるタンパク質に結合し、その動きを阻害する化合物を発見する必要があります。このような化合物を発見するため、シミュレーションと機械学習を活用した手法の開発を行っています。

図1は標的タンパク質の立体構造を固定し、化合物の配座を探索するドッキングシミュレーションを行うことで、ドッキングの結果から機械学習の特徴量を計算することでドッキングの予測精度を向上させる研究[1]です。通常の化合物を入力とした機械学習では、構造が類似していない化合物の予測精度が低いという問題があります。ドッキングシミュレーションで得られる立体構造を学習することで、二次元的な構造は似ていなくても、標的タンパク質に結合する可能性が高い化合物を得ることができます。

図2は生成モデルを活用して化合物の誘導体を得る研究[2]です。先述した研究では事前に列挙した化合物の一覧からしか化合物を評価できないため、まだ発見されていない新規の化合物を提案できる方法として生成モデルを利用しています。再帰的ニューラルネットワークとモンテカルロ木探索を行うことで、入力された化合物の一部を変化させた誘導体のうち、利用者が指定した性質を満たすような化合物を生成することが可能です。

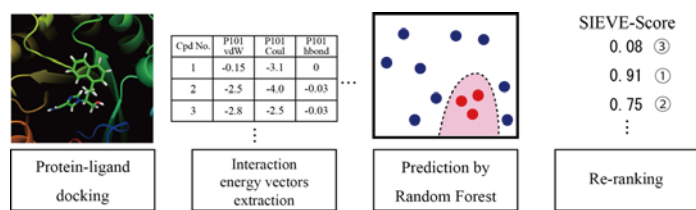


図1 立体構造を学習して化合物の活性予測を行う手法SIEVE-Score

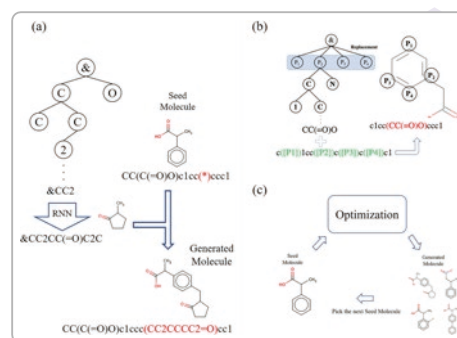


図2 モンテカルロ木探索を用いて誘導体を生合成する手法MERMAID

- [1] Yasuo, N. & Sekijima, M. Improved Method of Structure-Based Virtual Screening via Interaction-Energy-Based Learning. *J. Chem. Inf. Model.*, **59**, 3, 1050–1061 (2019). <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.8b00673>
- [2] Erikawa, D., Yasuo, N. & Sekijima, M. MERMAID: an open source automated hit-to-lead method based on deep reinforcement learning. *J. Cheminform* **13**, 94 (2021). <https://doi.org/10.1186/s13321-021-00572-6>

2023年度国際フォーラム・未来社会サービス創出ワークショップ開催報告

物質・情報卓越教育院(TAC-MI)では、12月4日(月)～8日(金)まで大磯プリンスホテル(神奈川県中郡大磯町)にて、2023年度国際フォーラム・未来社会サービス創出ワークショップを開催しました。

この国際フォーラム・未来社会サービス創出ワークショップは、本教育院が目指す「物質×情報＝複素人材」の育成のため、国際コミュニケーション力の向上と俯瞰力・リーダーシップ力を涵養することを目的とし、毎年1回開催しています。

前半12月4日～6日の国際フォーラムでは、博士後期課程1年15名と博士後期課程2年18名が海外アドバイザー教員や企業関係者、本学プログラム担当教員を前に英語での研究発表を行いました。また、物質・情報卓越教育院の海外プログラム担当者(海外アドバイザー教員)が指導する博士課程学生7名も海外から参加し、6名が研究発表を行いました。

後半12月7日～8日の未来社会サービス創出ワークショップでは、博士後期課程の学生16名が海外の学生7名とともにグループを編成し、それぞれの研究における知識・経験等を生かしながら、未来社会における課題を設定し、その解決策を討論・提案しました。

本イベントを成功に導いていただいた全ての参加者、関係者の皆様に心から感謝申し上げます。



物質・情報卓越教育院
企画・実施委員会委員長
関嶋 政和
(情報理工学院・准教授)

12月4日(月)から12月8日(金)にわたって、国際フォーラム・未来社会サービス創出ワークショップを開催し、盛況のうちに終わることが出来ました。本年は昨年に続き対面での開催を行うことができ、より白熱した議論を行うことができたと感じています。昨年度に引き続き、学生の皆さんがお互いのことをよく知った上でグループワークに取り組めるようにとの観点から、未来社会サービス創出ワークショップを国際フォーラムの後に実施いたしました。国際フォーラム

では、2日間にわたり博士後期課程1年生の学生の研究発表と博士後期課程2年生の学生さんによる自主設定論文進捗状況報告がありました。博士後期課程1年生の学生さんにとっては発表がQE(Qualifying Examination)の一部でもあり、大変緊張されたのではないかと思います。博士後期課程2年生の学生さんはさすが先輩ということもあり、「物質×情報」を自分のものとした先進的な研究内容が多く見られました。また、未来社会サービス創出ワークショップは、海外から招待した7人の学生と共に、グループワークも発表も全て英語で実施しました。初対面のメンバーと英語で討論することはとても難しかったと思いますが、皆さんよく頑張っていたと思います。5日間のイベントが大変素晴らしい会となりましたこと、お力添えを賜りました全ての皆様に厚く御礼を申し上げます。

タイムスケジュール

12月4日(月)		8:30	12月5日(火)	8:45	12月6日(水)	12月7日(木)		12月8日(金)	
9:30		9:25	海外アドバイザー講演 2名	9:40	海外アドバイザー講演 3名	9:00		9:00	
10:20	集合		国際フォーラム D1学生による研究発表		国際フォーラム D2学生による 自主設定論文進捗発表	10:30	未来社会サービス 創出ワークショップ オープニング、基調講演、特別講演		未来社会サービス 創出ワークショップ グループワーク
12:00	国際フォーラム 開会挨拶 D1学生による研究発表	11:50		11:45		12:35	未来社会サービス 創出ワークショップ グループワーク	12:00	
13:00	昼食	13:00	写真撮影	12:00	表彰式	13:35	昼食	13:00	昼食
15:25	国際フォーラム D1学生による研究発表	15:15	国際フォーラム D2学生による 自主設定論文進捗発表	14:10	学生 エキス カーション	15:35	未来社会サービス 創出ワークショップ グループワーク	13:30	発表準備
16:45	海外アドバイザー 講演 3名	16:45	海外学生による 研究発表	15:30	海外メンター 企業メンター との面談	16:35	中間発表	15:15	未来社会サービス 創出ワークショップ 発表会
17:15	宿泊者チェックイン	17:15		16:30	企業アドバイザー 連絡会	17:00	グループワーク	16:10	審査
18:30	海外メンター・ 企業メンター との面談	18:30	海外メンター・ 企業メンター との面談	18:30	国際外部評価 委員会	18:30		17:10	表彰式 閉会式
20:30	ウェルカムディナー	20:30	産学協創交流会	19:30	夕食	19:30	夕食		解散

国際フォーラム Day1,Day2,Day3 (12/4~12/6)

前半12月4日~6日の国際フォーラムでは、学生が海外アドバイザー教員や企業関係者、本学プログラム担当教員を前に英語での研究発表を行いました。3日間のフォーラムは、対面とZoomのハイブリッド形式で開催し、本プログラムの連携企業関係者や本学プログラム担当教員、TAC-MI学生など約130名が参加しました。



国際フォーラム参加者集合写真

博士後期課程1年の学生による研究発表

12月4日と5日午前に博士後期課程1年の学生15名と博士後期課程2年の学生1名が研究発表を行いました。司会進行、タイムキーピングは博士後期課程2年生が担当しました。発表は1人あたりプレゼンテーション15分、質疑応答5分の持ち時間で進行了しました。

国際フォーラムでの博士後期課程1年の研究発表は、本教育院登録学生の関門の一つである「博士論文研究基礎力審査 (Qualifying Examination)」の一部を兼ねています。この発表を行う学生は、それぞれの研究の意義と成果についてのプレゼンテーションを行い、発表後には活発な質疑応答が行われました。



博士後期課程の学生による研究発表

博士後期課程2年の学生と海外学生による研究発表

12月5日午後と6日午前には、博士後期課程2年の学生17名と海外学生6名の研究発表を行いました。発表は1人あたりプレゼンテーション7分、質疑応答4分の持ち時間で進行了しました。

博士後期課程2年の学生は自主設定論文の研究の進捗状況を発表しました。自主設定論文とは、TAC-MIで得た学修成果を活用して、専門分野の枠を超え、自らの博士論文研究とは異なる課題を自主的に設定して研究するものです。自身の専門とは異なる研究室に2週間程度滞在し研究を行う「物質情報異分野研究スキル」や海外インターンシップなどを活用して論文を作成します。博士後期課程2年の6月の成果発表会もしくは12月の国際フォーラムにて、研究の進捗状況を発表した上で、博士後期課程修了時までに研究結果を報告します。今回は6月に報告を行った学生を除く17名が進捗発表を行い、出席者からのフィードバックを受けました。

企業メンターとの面談

本教育院では、1人の学生に対して1人の企業メンターがつき、教育院登録当初から修了まで継続的に見守っていく制度があります。このフォーラムの研究発表後に、学生たちは企業メンターと面談し、研究や発表、キャリアパスなど様々なアドバイスを受けました。



企業メンター、サブメンターとの面談

海外メンターとの面談

本教育院では、海外アドバイザー教員との面談により自身の強み弱みを把握することを目的とした海外メンター制度があります。今回の国際フォーラムでは、7名の海外アドバイザー教員が参加し、学生は発表後に海外アドバイザー教員との面談を行いました。面談の中で、研究発表を行った博士後期課程の学生に対して、海外アドバイザー教員からアドバイスと励ましの言葉がありました。



海外メンターとの面談

国際フォーラム授賞式

博士後期課程1年の学生の研究発表および海外の学生の研究発表に対し、それぞれすべての発表を聞いた参加者による投票を行い、12月6日の授賞式で、最も票の多かった学生にベストプレゼンテーション賞 (Best Presentation Award) が、続いて票が多かった学生にグッドプレゼンテーション賞 (Good Presentation Award) が贈られました。



博士後期課程1年 研究発表・受賞者



ベストプレゼンテーション賞

登倉 大貴 (生命理工学院・生命理工学系)



D1学生ベストプレゼンテーション受賞者



グッドプレゼンテーション賞

樋口 龍生 (物質理工学院・材料系)
丸井 莉花 (物質理工学院・材料系)
于 佳彤 (物質理工学院・応用化学系)



D1学生グッドプレゼンテーション受賞者

海外学生 研究発表・受賞者



ベストプレゼンテーション賞

Catherine Boisvert (マギル大学 (カナダ))



海外学生ベストプレゼンテーション受賞者



グッドプレゼンテーション賞

Chaoqiuyu Wang (コーネル大学 (アメリカ))
Fathima Ridha (インド工科大学マドラス校 (インド))



海外学生グッドプレゼンテーション受賞者



Best Presentation Award

登倉 大貴
博士後期課程1年
生命理工学院 生命理工学系
ライフエンジニアリングコース

今回賞をいただき大変光栄に思います。私の専門分野は、薬物送達学です。本分野では、疾患部への薬物の送達効率を高め、副作用を抑制しつつ、治療効果を増大させることが目的となります。発表では、異分野の研究者が多くいることを踏まえ、こうした背景知識や情報技術の活用方法、研究の社会的意義が明瞭に伝わることを意識しました。今後も今回の経験を活かし、情報と物質をリンクさせた複合的視点による新たな価値創造ができるよう日々邁進していきたいと思っています。



Best Presentation Award

Catherine Boisvert
McGill University (カナダ)

It was such an honor to receive this award and, more importantly, to be invited to this wonderful forum. I really enjoyed listening to the 1st and 2nd year PhD students presenting their fascinating research. Additionally, I was impressed with how diverse and intricate the research is at TAC-MI, spanning from various types of engineering to both experimental and theoretical physics. Outside of the presentations, it was a great opportunity to experience the Japanese culture through meeting conference attendees, eating delicious food, and sightseeing around Kanagawa. I especially had so much fun during the trivia/game nights! It is safe to say that the memories and friends made during this forum will last a lifetime.

ウェルカムディナー・産学協創交流会

3日間の国際フォーラム期間中、TAC-MI 学生は食事やフリータイムの時間を使い、海外学生や海外アドバイザー教員、企業関係者との交流を深めました。初日のウェルカムディナー、2日目の産学協創交流会では、学生たちがクイズ大会を企画し、教員・学生・企業の混合チームでクイズに挑みながら、参加者全員が交流を深めました。



海外アドバイザー教員による講演



12月4日～6日の国際フォーラム期間中に、TAC-MI連携機関の海外アドバイザーである7名の先生方にご講演いただきました。



Michael Gromiha教授による講演

M. Michael Gromiha教授
インド工科大学マドラス校
(インド)
[講演タイトル]
Binding affinity of protein-carbohydrate complexes: computing meets experiments



Peter Grutter教授による講演

Peter Grutter教授
マギル大学(カナダ)
[講演タイトル]
Characterizing defects at semiconductor interfaces and 1/f noise



Sergei Kazarian教授による講演

Sergei Kazarian教授
インペリアル・カレッジ・ロンドン
(イギリス)
[講演タイトル]
ATR-FTIR spectroscopic imaging: from cancer detection to analysis of pharmaceuticals



Christopher Kemper Ober教授による講演

Christopher Kemper Ober教授
コーネル大学(アメリカ)
[講演タイトル]
Can polymer sequence play a role in photoresists for EUV lithography?



Natt Leelawat准教授による講演

Natt Leelawat准教授
チュラーロンコーン大学(タイ)
[講演タイトル]
Business Continuity Management and the Emerging Risks



LIU Wei准教授による講演

LIU Wei准教授
北京師範大学(中国)
[講演タイトル]
Psychology-Driven Interaction Design



Xu-Ming Xie教授による講演

Xu-Ming Xie教授
清華大学(中国)
[講演タイトル]
Intelligent Network Structured Flexible Materials

エクスカーション Day3(12/6)

翌日から始まるワークショップに向けて12月6日午後に、グループのメンバーの仲を深めることを目的として、バスに乗ってエクスカーションを実施しました。参加者は6グループに分かれ、小田原城と鎌倉の大仏を見学しました。



エクスカーション 小田原城

エクスカーション 旅程

13:00 ホテル出発 → バスで小田原城へ
13:30 小田原城見学
14:40 バスで移動 → 鎌倉大仏殿高德院へ
16:10 鎌倉大仏殿高德院見学
17:00 バスで移動 → 大磯プリンスホテルへ



エクスカーション 鎌倉大仏殿高德院

未来社会サービス創出ワークショップ

Day4,day5 (12/7,12/8)

4日目の12月7日(木)と5日目の12月8日(金)は、未来社会サービス創出ワークショップを開催しました。

未来社会サービス創出ワークショップは、俯瞰力・リーダーシップ力を涵養することを目的として、毎年1回開催しています。TAC-MIの学生が海外の学生とともにグループを編成し、それぞれの研究、業務における知識・経験等を生かしながら、未来社会における課題を設定し、その解決策を討論・提案します。

今年度は、本教育院の博士後期課程学生16名と海外学生7名、合計23名が参加し、「From Efficiency (効率性) to Sufficiency (充足性)」をテーマにワークショップを実施しました。ワークショップでは、人間が要因で起こる気候変動など地球環境の問題について考え、資源の循環や産業の循環など「循環」をテーマに、それらの問題を解決するためのトータルプロセスを考えました。

各グループには、グラフィックファシリテーターが1名ずつつき、議論の活性化を促し、話し合いの内容やアイデア構想をその場で分かりやすくイラストにまとめ可視化しました。

ワークショップテーマ

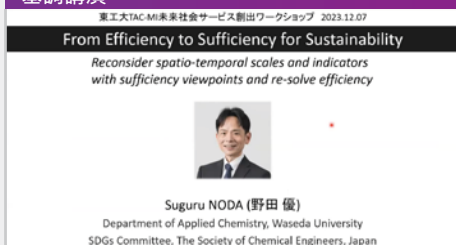
From Efficiency to Sufficiency

ワークショップ1日目(12/7)

1. テーマについて理解を深める(基調講演・特別講演)

2日間のワークショップについての趣旨説明の後、グループワークを始めるにあたり、本テーマについて理解を深めるために、企業や研究者の方をお招きし、「From Efficiency to Sufficiency」について基調講演と「循環」をテーマにした特別講演を行いました。

基調講演



早稲田大学 野田優教授による基調講演

特別講演1



東京大学 早稲田卓爾教授による特別講演

特別講演2



住友化学株式会社 佐々木義純常務執行役員による特別講演

2. チームで取り組む課題の選定

各グループに分かれてグループワークを行いました。参加者はまず初めに人間が要因で起こる気候変動など地球環境の問題について考え、Efficiencyの視点で課題を探して、ワークシートに書き出しました。出てきた課題について意見を出し合い、チームで取り組む課題を選定しました。



取り組む課題を探索。



課題について意見を出し合います。



チームで取り組む課題を決定。

3. 理想の未来を実現するための技術・サービス・仕組みを考える

課題をSufficiency視点で捉え直し、EfficiencyとSufficiencyを両立する未来社会を実現するための技術・サービス・仕組みを考えました。



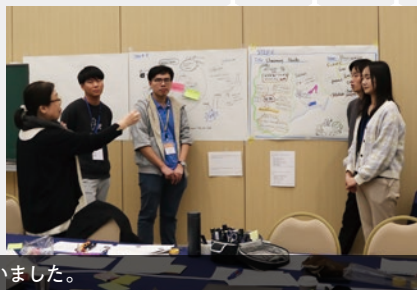
課題を分析し、理想の未来を描く。

4. 中間発表(ポスター発表)

1日目の最後には、各グループがポスター発表を行い、本学の教員や海外アドバイザーからフィードバックをもらいました。



各グループの中間発表。フィードバックをもらいました。



5. アイデアのブラッシュアップ～最終発表準備

中間発表にてフィードバックを受けた後、各グループは追加調査を行い、アイデアをブラッシュアップしました。そして、2日目は、考え出した未来を実現するための技術・サービス・仕組みについて、さらに深掘りして考え、午後の最終発表に向けて準備を進めました。



中間発表後、フィードバックを受け、アイデアをブラッシュアップ。



Graphic Recording



今回のテーマ
「From Efficiency to Sufficiency」

6. 最終発表会

2日目午後の最終発表会では、各グループが「EfficiencyとSufficiencyを両立する未来社会を実現するための技術・サービス・仕組み」についての提案を発表しました。

発表会は、対面とオンラインのハイブリッドで開催し、本学教職員のほか、本プログラムの連携企業関係者、TAC-MIの博士後期課程2年の学生など約90名が参加しました。



各グループがEfficiencyとSufficiencyを両立する未来社会を実現するための技術・サービス・仕組みを提案しました。



7. 授賞式

各チームの発表後、発表を聞いた学生以外の参加者による投票を実施し、7名の審査員による審査を経て、賞が決定しました。表彰式では、井村順一理事・副学長(教育担当)より、受賞チームが発表され、各チームの発表に対する講評とともに賞が授与されました。

井村順一理事・副学長



Originality Awardを受賞した
Group1
「Transforming shoes」



受賞理由:

このグループの提案した変形可能で自己修復する靴は、大量廃棄されている靴の問題を解決する革新的な提案です。ユーザーに力を与えるデザインは循環経済の原理に沿っており、靴の枠を超えて、驚くべき独創性と環境への配慮が示されており、オリジナリティ賞にふさわしい提案でした。



Moonshot Awardを受賞した
Group5
「Let's C.R.E.A.T.E. (Customize Realistic Electronics And Tech for Everyone)」



受賞理由:

このグループの提案したオープンアクセス ファクトリーのコンセプトは、自動リサイクル システムを備えたユーザー主導のデバイス設計を可能にし、先見性のある包括的なアプローチを示しています。彼らの提案は、特に障害のある人々にとって長期的なニーズがあるでしょう。持続可能性と費用対効果の面からも、ムーンショット賞のふさわしい提案でした。



Social Impact Awardを受賞した
Group3
「Development of the Green Mind Visualization Chip」



受賞理由:

このグループが提案した埋め込み型チップは、個人が希望に応じて自分の健康状態を医療機関に送信できるようにするもので、高齢化社会の課題に革新的に対処します。医療コミュニケーションにおけるこのユーザー中心のアプローチは、大きな社会的影響を示しており、ソーシャルインパクト賞にふさわしい提案でした。

TAC-MI授業科目紹介「新産業創出最前線」

～2023年度「物質×情報×新産業」フロンティアフォーラム～

マテリアルズ・インフォマティクス（MI）の実社会への応用や、データ科学をもとにした新産業分野の創出等、物質・情報科学と社会サービスを結びつける取り組み例を、企業、大学、研究機関の第一線で活躍する講師陣がオムニバス形式でオンラインでの講義を行いました。

本講義は、オープンセミナー「2023年度「物質×情報×新産業」フロンティアフォーラム」として、学内教職員・学生・会員企業関係者向けにも公開されました。



第1回 「ものづくりの現場から加速する人工知能の社会実装の姿」



株式会社クロスコンパス
代表取締役社長
鈴木 克信

2023年12月15日（金）13:30～15:00

人工知能の歴史が概観された後、ものづくりの現場において、職人の勘をデータとして蓄積し、従来からの評価・解析だけでなく計算科学を活用することで生産性が大幅に向上する事例が、人工知能の社会実装の姿として紹介された。日本の現場力、匠の技を生かしつつ、人手不足の影響を回避し、ものづくり大国をめざす道が示された。

第2回 「AIで広がる分子設計の可能性」

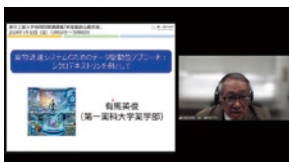


東京工業大学
情報理工学院 情報工学系
助教（現 同 准教授）
大上 雅史

2023年12月15日（金）15:15～16:45

創薬が、低分子だけでなくさまざまな分子の医薬品に拡がり、対象とする標的の多様性も広がっている。その中で、タンパク質間相互作用に着目した創薬の取り組みについて、計算機シミュレーション、AlphaFold2、深層学習を用いた相互作用予測などの実例が紹介された。更には、ChatGPTに代表される言語モデルの原理、巨大モデル化の流れが説明された。

第3回 「薬物送達システムのためのデータ駆動型アプローチ：シクロデキストリンを例として」



第一薬科大学
薬学部
教授
有馬 英俊

2024年1月12日（金）13:30～15:00

データサイエンスとAIの一般説明、AIを利用した創薬、製剤、創剤について説明がなされた後、シクロデキストリンを例に分子間力を利用した薬物送達システムの開発について紹介された。

第4回 「深層学習を用いた量子現象の解釈と機能創製」



国立研究開発法人
量子科学技術研究開発機構
量子機能創製研究センター
主任研究員 大門 俊介

2024年1月12日（金）15:15～16:45

前半は、量子コンピュータの原理、現在の主流である超伝導型素子のハードウェアの説明から、最先端の量子計算研究の動向に至るまで幅広く説明がなされた。後半は、現実の量子コンピュータへ深層強化学習を応用し、エラーを伴う現実のデバイスでも理想に近い計算結果を導く手法が紹介された。

第5回 「生成AIを用いた化合物潜在空間の構築とバーチャル化合物構造の探索」



慶應義塾大学
理工学部 生命情報学科
教授
榎原 康文

2024年1月19日（金）13:30～15:00

人工知能（AI）の歴史の簡単な紹介に始まり、機械学習を用いたタンパク質化合物相互作用システムの開発と前立腺がんへの応用が示された。続いて、生成AIによる化合物構造の設計の研究が進展していることが紹介され、化合物潜在空間を構築することで、新規薬剤候補の化合物構造の生成に成功したことが示された。

第6回 「特許制度の概要～特許権取得までのプロセスと実務上の留意点」



中村合同特許法律事務所
弁理士 博士（工学）、
独立行政法人 工業所有権情報・研修館
委託事業 知財戦略デザイナー派遣事業
知財戦略デザイナー（元特許庁審査官）
工藤 嘉晃

2024年1月19日（金）15:15～16:45

知的財産権制度の全体像の紹介があり、その中から特許制度について、出願から特許取得までの一般的な流れが説明された。更に、研究成果を特許出願する際に留意すべき点、身近にあるビジネス関連発明の特許取得の実例、AI関連発明などの特許審査の事例が紹介された。

会員企業制度

物質・情報卓越教育院では「会員企業制度」というユニークな制度を導入しています。会員企業からの意見を活動に反映させていただくと共に、メンター役をお願いすることにより、本教育院の登録学生の社会的視野を広め、複素人材としての成長に役立てます。一方、会員企業にとっては、研究者の方々が本教育院での講義、演習を受講できる機会ができ、物質・情報の分野での人材育成を進めることができます。

会員企業一覧（2024年3月1日現在）

AGC株式会社 / 曙ブレーキ工業株式会社 / 旭化成株式会社 / 浜松ホトニクス株式会社 / 出光興産株式会社 / JFEスチール株式会社 / JX金属株式会社 / 株式会社 カネカ / 花王株式会社 / 京セラ株式会社 / 三菱ケミカル株式会社 / 三菱ガス化学株式会社 / 三井金属鉱業株式会社 / 日本電子株式会社 / 日本ガイシ株式会社 / 日本特殊陶業株式会社 / 日本化薬株式会社 / 日産自動車株式会社 / パナソニック インダストリー株式会社 / 株式会社レゾナック / セイコーエプソン株式会社 / 住友電気工業株式会社 / 住友化学株式会社 / 太陽誘電株式会社 / TDK株式会社 / 戸田工業株式会社 / 株式会社 東芝 / 東ソー株式会社 / 東洋製罐グループホールディングス株式会社 /

（ローマ字アルファベット順）（引き続き、参加会員企業を募集しています。）

