

ERATO「湊離散構造処理系」プロジェクト 追跡評価報告書

1. 研究成果の発展状況や活用状況

本プロジェクトは、研究総括が 1993 年に発表した Zero-suppressed Binary Decision Diagram (ZDD) を基盤に離散構造処理技術の普及と展開を目指し、離散構造処理グループ(湊真一：北海道大学、現京都大学)、機械学習・制約充足応用グループ(津田宏治：理化学研究所、現東京大学)、統計・マイニング応用グループ(鷺尾隆：大阪大学)の 3 グループでそれぞれ研究が実施された。

プロジェクト終了後は、上記 3 グループが独自に研究を展開、発展させている。湊は、科研費学術変革領域研究(A)「離散構造処理系の基盤アルゴリズムの研究」等の研究助成金を獲得しながら、論理関数を表すデータ構造である ZSDD を開発し、また ZDD の適用をベイジアンネットワーク等へ拡大した。さらに、ノード数の大きな通信ネットワークシステムの信頼性設計、配電ネットワーク設計等へ応用した。

津田は、CREST 研究領域「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」において研究課題「離散構造統計学の創出と癌科学への展開」を推進している。また、従来法より、格段に精度の高い検定値 (P 値) を算出する新手法 LAMP (Limitless Arity Multiple-testing Procedure) の発展として LAMPLINK、MP-LAMP を開発し、ベイジアン最適化等を改良した COMBO、ChemTS 等を使って、マテリアルズ・インフォマティクス、バイオ・インフォマティクスの分野への研究に発展させた。

鷺尾も、CREST 研究領域「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」の研究課題「機械学習と最先端計測技術の融合深化による新たな計測・解析手法の展開」において、大規模な非線形系の因果関係推定の研究を行い、機械学習を使ったナノポアセンサ等で抵抗・電流パルスを分析し、単一分子を特定する技術を開発した。本研究成果により、物質・材料研究機構 (NIMS) と共同で、MEMS センサでガス種の識別を迅速に識別する技術を開発した。

本プロジェクトの研究者総数 16 名に対して、参画した企業へ戻った 3 名、ベンチャー企業へ参画した 2 名、外国へ戻った研究者 1 名 (計 6 人) を除き、10 名すべての研究者がキャリアアップした。若手研究者が着実に育つようフォローし、各方面で研究だけではなく学会活動等でも貢献し、それぞれ研究分野の中核をなすであろう人材を育成した。

2. 研究成果から生み出された科学的・技術的および社会的・経済的な波及効果

(1) 研究成果の科学的・技術的観点からの貢献

論文については、プロジェクト期間中の成果論文が 167 報であるのに対して、研究期間終了後の発展論文は 86 報である。一方、TOP10%以内の論文は、成果論文では全体の約 8%であるが発展論文では約 13%に上がった。アルゴリズム (ZDD) については、世界中に波及してお

り、ZDDに基づくアルゴリズム論文(7報)を含め、津田らのCOMBO論文は高い被引用数となっている。

本プロジェクトは基礎的な汎用アルゴリズムに関するもので、プロジェクト期間中にスマートグリッド電力網の最適構成探索で顕著な成果を出したことは高く評価できる。

湊らは、ZDD技術の改良・発展として、論理関数を表すデータ構造ZSDDとZd-DNNFを開発、厳密被覆問題に使われるKnuthのDLXのZDDによる改良等を行った。また、ZDDの適用範囲をベイジアンネットワーク、バンディット問題、ナップザック問題等へ拡大、さらに通信ネットワークシステムの信頼性設計、配電ネットワーク設計、ホットスポットクラスター検出等へ応用した。

津田らは、LAMPソフトウェアの拡張を図り、ゲノム関連解析のためのLAMPLINK、並列処理を可能にしたMP-LAMPを開発した。また、マテリアルズ・インフォマティクス、バイオ・インフォマティクスの分野へ展開させ、ベイズ最適化の応用として熱電材料の設計、また医薬品の処方や製造方法の最適化に適用した。さらに、モンテカルロ木探索アルゴリズムによって材料探索ができるMDTSソフトウェアを開発し、熱伝導の最適化問題やナノフィルムでの界面熱輸送の問題への適用、バイオ・インフォマティクス分野では、RNAの逆折りたたみのアルゴリズムMCTS-RNAの開発、有機材料の自動設計アルゴリズムChemTSの開発と公開、分子の動きの軌跡を検索するアルゴリズムTS-MDの開発を行った。

鷲尾らは、因果推論について非線形系の実用的原理・手法に関して、変数間の因果の向きに沿った非線形回帰残渣が逆向きの残渣より小さいことを証明し、改善の余地があるものの実際のデータで確認した。また大阪大学の谷口らと共同で、抵抗・電流パルスを使った計測に機械学習を適用し、ナノギャップ・ナノポアを通過するイオン電流の波形解析から単一分子を特定する計測法を確立した。

本プロジェクト終了後、井上と湊が2017年度人工知能学会の研究会優秀賞、石岡、川原、水田、湊、栗原が2018年度日本計算機統計学会の論文賞、鷲尾と原が2020年度日本顕微鏡学会の論文賞、鷲尾が2017年にIBM(米国)から2016 IBM Faculty Awardをそれぞれ受賞した。

基礎的な技術を実応用に適用するのは一般には難しく、広い範囲の応用で使われる基盤技術としてプロジェクト終了時点では定着するにはまだ至っていなかったが、LAMP法がバイオ・インフォマティクスやマテリアルズ・インフォマティクスの中で探索の高速化や並列化で使われるまでになった。また様々なセンサで使う機械学習手法として、ベンチャー企業創業に至るような段階に達した。基礎研究の成果が少し時間的な遅れをとりながら着実に実用に至るという研究パイプラインを達成できたことは、十分な波及効果として高く評価できる。マテリアルズ・インフォマティクスとバイオ・インフォマティクスは現代において世間の注目を集める分野であり、その中で湊らの研究が果たした役割は非常に大きいと言える。ZDD他の研究無くして、巨大なデータをコンパクトにまた高速に処理することは不可能であったものと思われ、その意味で本研究の波及効果は計り知れない。

(2) 研究成果の社会的・経済的観点からの貢献

プロジェクト期間中の国内出願 5 件(登録 5 件)、海外出願 1 件(登録 1 件)に対して、研究終了後は国内出願 15 件(登録 6 件)、海外出願 7 件であり、着実に出願件数が伸びている。

ZDD 構造の研究成果は、スマートグリッドを含め重要な社会インフラネットワークへの応用が期待される。またマテリアルズ・インフォマティクスとバイオ・インフォマティクスの両分野においても、社会的に高い評価を受けている。さらに、NIMS との共同研究により、臭気センサの開発に成功し、その実用化が期待されている。

本プロジェクトの研究成果から、2011 年に株式会社 Magne-Max Capital Management (湊がアドバイザー)、2017 年に MI-6 株式会社 (津田がアドバイザー)、2018 年にアイポア株式会社 (谷口が創立しその後非常勤取締役、鷺尾がアドバイザー) がそれぞれ設立され、社会実装が進められている。アイポア株式会社では、株式会社アドバンテストと共同で微粒子計測器「nanoSCOUTER」を開発し、2019 年に発売した。医薬品やバイオテクノロジー等の研究開発に始まり、将来は医療を含む幅広い分野への応用を目指している。他に、SMU と EPFL の共同研究では量子キュービット回路を最適にマッピングする技術として ZDD を使う研究を行っている。

情報発信として、日本科学未来館メディアラボでグリッドグラフを対象としたパスの数え上げに関する展示を行ったが、大きな反響があり海外からのコメントも多数寄せられた。研究者だけでなく、広く社会に数理工学の重要性を示した。

研究成果の中核となる技術は離散数学の基礎的なものであるが、アルゴリズムを実装しソフトウェアパッケージを提供する等の成果活用に向けた努力も行った。その結果、医学分野、材料分野、センシング機器分野等の広い分野における機械学習技術で活用され、短期間で重要な社会的な貢献をもたらした。

以上により研究成果の発展や活用が認められ、科学的・技術的および社会的・経済的な波及効果が十分に生み出されている。

以上