

2024（令和6）年度 秋 学 期

博 士 （工 学） 学 位 論 文
博 士 （理 学）

論文の内容の要旨および論文審査の結果の要旨

慶應義塾大学理工学部

目 次

川野 恭史	Efficiency of Training Costs in Semantic Segmentation (セマンティックセグメンテーションにおける学習効率化)	1
柴崎 圭	性能と軽量のトレードオフを考慮した画像変換深層学習ネットワークに関する研究	3
柘田 真奈	Tracking and Scene Representation for Fast-moving Cameras by Event Data Synthesis (イベントデータ合成による高速移動カメラのための運動追跡とシーン表現)	5
白 家維	Cryogenic CMOS Low-Power and High-Speed Successive Approximation Register ADC for Scalable Quantum Computer (スケーラブル量子コンピューター向けの極低温動作CMOS低電力高速逐次比較型ADC)	8
大山 裕也	効果的で安全な血管内治療を支える高機能医療ポリマー基盤材料の開発	10
俣野 眞一郎	高配向カーボンナノチューブ薄膜における異方性熱特性・発光特性と光・電子デバイス応用	12
米山 慎太郎	Covariate Selection for Estimating Population Means and Procedures for Estimating Treatment Effects When Data Are Missing Not at Random (Missing Not at Randomデータにおける母平均推定の共変量選択と処置効果の推定手順)	14
紫藤 拓巳	Exploring transparent organisms for bioimaging and establishing a basis for elucidating organismal transparency mechanism (バイオイメーシングに適した透明生物の探索および生体透明性機構解明に向けた研究基盤の構築)	16
曾家 希美	遷移金属および複合酸化物におけるスピン流と磁化ダイナミクスに関する研究	18
森谷 裕幸	Ptにおけるスピン・軌道ホール効果に関する研究	20
若林 大貴	クライオ電子顕微鏡によるグルタミン酸脱水素酵素機能発現時の過渡的準安定構造解明	22
高田 咲良	人工細胞系を用いた細胞内反応拡散波形成原理の解明	24
Fontane, Mateo Olivier Jean-Marie Michel (フォンテース, マテオ オリビエ ジョン・マリ ミシェル)	Spin-Chirality Interplay in an XXZ Ladder with Four-Spin Interaction: Duality and Topology (4スピン相互作用を有するXXZ梯子系におけるスピン・カイラリティ複合効果: 双対性とトポロジー)	26
下村 将基	AGE思考モデルに基づく機械学習を用いたテキストチャ画像生成システム	28
福崎 翔太	深層学習における二次元畳み込みフィルタの生成に関する研究	30
木下 遼太	ポリマー光導波路のCo-Packaged Opticsへの応用に関する研究	32
鈴木 智之	Efficient Video Recognition with Transformers: Tackling the Redundancy in Video (Transformerを用いた効率的動画認識: 動画の冗長性への取り組み)	34
么 振鐸	Local Mechanical Characterization and Fracture Prediction Modeling for Resistance Spot-Welded Joints of Advanced High-Strength Steel Sheets (高張力鋼板の抵抗スポット溶接部における局所力学特性評価と破壊予測手法の構築)	36
Pineda Sánchez, Alejandro Juan (ピネダ サンチェス, アレハンドロ フアン)	Identifying Community Places by Mapping Subjective Perceptions: A Case Study of Tokyo's Peripheries (主観的認識のマッピングを用いたコミュニティ空間の特定方法に関する研究: 首都圏郊外を事例として)	38
田村 正樹	Development of Orientation-Birefringence-Controlled Optical Polymers via Synthesis and Combination of Bottlebrush Polymers (ボトルブラシポリマーの合成と複合化による光学ポリマーの配向複屈折制御とその応用)	40
小島 知也	Development of bioinspired molecular systems inducing emergent dynamics of soft matter (ソフトマターの創発的なダイナミクスを誘導するバイオインスパイアード分子システムの開発)	42

細見 直希	マルチモーダル情報に基づく移動指示理解モデルの構築	44
和久井 拓	GAMPAL: A General-Purpose Anomaly Detection Mechanism for Internet Backbone Network without Labeled Data (GAMPAL:インターネットバックボーンを対象としたラベル付きデータを必要としない汎用異常検知手法)	46
田村 賢太郎	Approaches for Utilizing Quantum Computing with Limited Resources (リソースの限られた量子計算の活用手法)	49
北澤 遙一	低原子価鉄錯体触媒を用いた芳香族化合物の炭素－水素結合切断を経る炭素－炭素不飽和結合のヒドロアリール化反応に関する研究	51
栗原 悠熙	動的結晶化による Keramaphidin 類の全合成と Manadomanzamine 類の大員環骨格構築法の開発	54
鹿島 柊	Colorings of Graphs and Vertex Partitions of Graphs with Degree Conditions (グラフの彩色及び次数条件のもとでのグラフの頂点分割)	56
氏江 優希子	病原真菌と免疫細胞の共培養法による新規天然物の探索およびその産生メカニズムの解析研究	58
Wang, Zi (王 梓)	Development of Surface/Interface Sensitive <i>in situ</i> Soft X-ray Absorption Spectroscopy Techniques and Their Application to Studies on Photocatalytic System (表面・界面敏感 <i>in situ</i> 軟X線吸収分光法の開発と光触媒システムの研究への応用)	60
佐藤 航地	深層学習を用いた蛋白質の水和構造予測	63
孫 延君	Toward Dynamic and Realistic Vision-and-Language Navigation – Addressing Complex Changes in Real-World (動的かつ現実的なVision-and-Language Navigationを目指して－実世界の複雑な変化への対応)	65
遠藤 正文	Embracing Uncertainty: Resilient Robotic Autonomy for Rough Terrain Exploration (不確実性を乗り越え不整地探索のための自律移動知能)	67
神川 郁海	ハロゲン化鉛ペロブスカイト太陽電池の結晶配向制御	69
堀田 光	交互共重合体を用いた複屈折に関する研究	71
Shao, Weirong (邵 栄)	People Identification and Secondary Action Recognition Methods in Vehicles Using Depth Sensors (深度センサを用いた車両内における人物識別と二次行動認識手法)	73
山下 剛志	Fast Index-based Random Walks on Dynamic Graphs for Personalized Analysis (動的グラフにおけるパーソナライズ解析のためのインデックスを用いた高速なランダムウォーク)	76
小和口 昌愛	大規模並列計算を活用したレプリカ交換モンテカルロ法の最適化:一次相転移を示す液晶モデルへの展開	79
佐藤 碧海	分子シミュレーションを用いたグラフトナノ粒子の自己集合挙動の解明およびその応用に関する研究	81
横田 壮真	Visual Simulation of Opal Using Voronoi Tessellation and Ewald Construction (ボロノイ分割とエwaldの作図を利用したオパールビジュアルシミュレーション)	83
相澤 彩美子	多孔質体表面からの蒸発を伴う溶液浸透で生じるパターン形成	85

論文の要旨および審査結果の要旨

本報は、学位規則(昭和28年4月1日文部省令第9号)第8条による公表を目的として、本大学において2024(令和6)年度秋学期に博士の学位を授与した者の論文内容の要旨および論文審査の結果の要旨である。収録したものは次のとおり。

慶應義塾大学理工学部

学位の種類	学位記号・番号	授与年月日	氏 名
博士(工学)	甲 第 6309 号	令和 7 年 3 月 10 日	川野 恭史
博士(工学)	甲 第 6310 号	令和 7 年 3 月 10 日	柴崎 圭
博士(工学)	甲 第 6311 号	令和 7 年 3 月 10 日	栢田 真奈
博士(工学)	甲 第 6316 号	令和 7 年 3 月 10 日	白 家維
博士(工学)	甲 第 6317 号	令和 7 年 3 月 10 日	大山 裕也
博士(工学)	甲 第 6327 号	令和 7 年 3 月 10 日	俣野 眞一朗
博士(工学)	甲 第 6328 号	令和 7 年 3 月 10 日	米山 慎太郎
博士(理学)	甲 第 6329 号	令和 7 年 3 月 10 日	紫藤 拓巳
博士(工学)	甲 第 6330 号	令和 7 年 3 月 10 日	曾家 希美
博士(工学)	甲 第 6331 号	令和 7 年 3 月 10 日	森谷 裕幸
博士(理学)	甲 第 6332 号	令和 7 年 3 月 10 日	若林 大貴
博士(理学)	甲 第 6333 号	令和 7 年 3 月 10 日	高田 咲良
博士(理学)	甲 第 6334 号	令和 7 年 3 月 10 日	Fontane, Mateo Olivier Jean-Marie Michel (フォンテーヌ, マテオ オリビエ ジョン-マリ ミシェル)
博士(工学)	甲 第 6335 号	令和 7 年 1 月 29 日	下村 将基
博士(工学)	甲 第 6336 号	令和 7 年 1 月 29 日	福崎 翔太
博士(工学)	甲 第 6337 号	令和 7 年 1 月 29 日	木下 遼太
博士(工学)	甲 第 6338 号	令和 7 年 3 月 10 日	鈴木 智之
博士(工学)	甲 第 6339 号	令和 7 年 3 月 10 日	么 振鐸
博士(工学)	甲 第 6340 号	令和 7 年 1 月 29 日	Pineda Sánchez, Alejandro Juan (ピネダ サンチェス, アレハンドロ フアン)
博士(工学)	甲 第 6341 号	令和 7 年 3 月 10 日	田村 正樹
博士(工学)	甲 第 6342 号	令和 7 年 3 月 10 日	小島 知也
博士(工学)	甲 第 6343 号	令和 7 年 3 月 10 日	細見 直希
博士(工学)	甲 第 6344 号	令和 7 年 3 月 10 日	和久井 拓
博士(工学)	甲 第 6407 号	令和 7 年 3 月 10 日	田村 賢太郎
博士(理学)	甲 第 6408 号	令和 7 年 3 月 10 日	北澤 遥一
博士(理学)	甲 第 6409 号	令和 7 年 3 月 10 日	栗原 悠熙

博士(理学)	甲 第 6410 号	令和 7 年 3 月 10 日	鹿島 柁
博士(理学)	甲 第 6411 号	令和 7 年 3 月 10 日	氏江 優希子
博士(理学)	甲 第 6412 号	令和 7 年 3 月 10 日	Wang, Zi (王 梓)
博士(理学)	甲 第 6413 号	令和 7 年 3 月 10 日	佐藤 航地
博士(工学)	甲 第 6414 号	令和 7 年 3 月 10 日	孫 延君
博士(工学)	甲 第 6415 号	令和 7 年 3 月 10 日	遠藤 正文
博士(工学)	甲 第 6416 号	令和 7 年 3 月 10 日	神川 郁海
博士(工学)	甲 第 6417 号	令和 7 年 3 月 10 日	堀田 光
博士(工学)	甲 第 6418 号	令和 7 年 3 月 10 日	Shao, Weirong (邵 イ榮)
博士(工学)	甲 第 6419 号	令和 7 年 3 月 10 日	山下 剛志
博士(工学)	甲 第 6420 号	令和 7 年 3 月 10 日	小和口 昌愛
博士(工学)	甲 第 6421 号	令和 7 年 3 月 10 日	佐藤 碧海
博士(工学)	甲 第 6422 号	令和 7 年 3 月 10 日	横田 壮真
博士(工学)	甲 第 6423 号	令和 7 年 3 月 10 日	相澤 彩美子

内容の要旨

報告番号	甲 第 6309 号	氏 名	川野 恭史
主論文題名：			
Efficiency of Training Costs in Semantic Segmentation (セマンティックセグメンテーションにおける学習効率化)			
セマンティックセグメンテーションとは、画像中の全画素にクラスラベルを付与するタスクである。しかし、その学習はピクセルレベルのアノテーションと大規模な計算リソースが必要である。また、教師付き学習は事前定義されたカテゴリセットに依存しているため、予測時に珍しいクラスや完全に新しいクラスを検出することは難しいといった課題がある。本論文ではセマンティックセグメンテーションにおけるアノテーションや計算リソースなどの学習コストを効率化するための新しい手法を複数のアプローチで開拓する。本研究で提案する方法は、実際のアプリケーションにおいても有効であり、特にアノテーションのコストが高い状況や専門知識が求められる状況において、大きな利益をもたらすことが期待できる。 第1章では、セマンティックセグメンテーションの位置付けと課題を提示し、本研究の問題定義と研究目的について述べる。 第2章では、セマンティックセグメンテーションにおける学習効率化に関する既存手法を概観する。 第3章では、モデルの出力から計算できる不確実性指標を用いた Active Learning 手法によりアノテーションコストを低下させ、従来手法よりも精度と時間の面でコスト削減が可能なモデルを提案する。 第4章では、モデルの出力から計算できる不確実性を loss として最小化する新たな教師無しドメイン適応手法によりアノテーションを不要にしつつ、よりターゲットドメインに頑健なモデルになり最先端の結果を実現する。 第5章では、学習済み Diffusion モデルの内部特徴を分析し、セマンティックセグメンテーションにおける応用の可能性を探り、追加の学習やアノテーションなしで効果的なセグメンテーションを実現する新しい手法を提案して、従来手法と比較して、様々なドメインの画像に対してオープンボキャブラリセマンティックセグメンテーション性能における優位性を実証する。 第6章では、外部データベースからクラスタのカテゴリを検索することで、事前に定義されたクラスに依存せず、追加学習、アノテーション、ガイダンス不要なオープンボキャブラリセマンティックセグメンテーションを実現する新しいアプローチを提案し、従来手法と比較して、様々なドメインの画像に対してオープンボキャブラリセマンティックセグメンテーション性能における優位性を実証する。 第7章では、本研究の成果をまとめ、今後の課題について議論する。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6309 号	氏 名	川野 恭史
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学教授 博士（工学） 青木 義満			
副査 慶應義塾大学教授 工学博士 田中 敏幸			
慶應義塾大学准教授 博士（工学） 村田 真悟			
慶應義塾大学准教授 博士（工学） 五十川 麻理子			
学士（工学）、修士（工学）川野恭史君提出の学位請求論文は「Efficiency of Training Costs in Semantic Segmentation」（セマンティックセグメンテーションにおける学習効率化）と題し、7章から構成されている。 セマンティックセグメンテーションとは、画像中の全画素にクラスラベルを付与するもので、コンピュータビジョン分野において、カメラ映像からの情景認識・セマンティクス理解のための重要なタスクとなっている。しかし、学習においてはピクセルレベルのアノテーションと大規模な計算リソースが必要となっていること、教師付き学習は事前定義されたカテゴリセットに依存しているため、予測時に珍しいクラスや完全に新しいクラスを検出することが難しい、といった課題があった。本論文ではセマンティックセグメンテーションにおけるアノテーションや計算リソースなどの学習コストを効率化するための新しい手法を複数のアプローチで開拓している。本研究で提案する方法は、実際のアプリケーションにおいても有効であり、特にアノテーションのコストが高い状況や専門知識が求められる状況において、大きな利益をもたらすことが期待できる。 第1章では、セマンティックセグメンテーションの位置付けと課題を提示し、本研究の問題定義と研究目的について述べている。 第2章では、セマンティックセグメンテーションにおける学習効率化に関する既存手法を概観している。 第3章では、モデルの出力から計算できる不確実性指標を用いた Active Learning 手法によりアノテーションコストを低下させ、従来手法よりも精度と時間の面でコスト削減が可能なモデルを提案している。複数のデータセットを用いた評価実験により、提案手法の有効性を示している。 第4章では、モデルの出力から計算できる不確実性を損失関数として最小化する新たな教師無しドメイン適応手法を提案している。これにより、アノテーションを不要にしつつ、よりターゲットドメインに頑健なモデルを実現可能となることを、実証実験により示している。 第5章では、学習済み Diffusion モデルの内部特徴を分析し、セマンティックセグメンテーションにおける応用の可能性を探った上で、追加の学習やアノテーションなしで効果的なセグメンテーションを実現する新しい手法を提案している。従来手法と比較して、様々なドメインの画像データセットに対する実験により、オープンボキャブラリセマンティックセグメンテーション性能における優位性を実証している。 第6章では、外部データベースからクラスタのカテゴリを検索することで、事前に定義されたクラスに依存せず、追加学習、アノテーション、ガイダンス不要なオープンボキャブラリセマンティックセグメンテーションを実現する新規な手法を提案している。前章同様の評価実験により、従来手法と比較した際の優位性を実証している。 第7章では、本研究の成果をまとめ、今後の課題について議論している。 以上要するに、本論文は、コンピュータビジョンにおけるセマンティックセグメンテーションタスクを対象とし、アノテーションや計算リソースなどの学習コストを効率化するための新しい手法を複数のアプローチで開拓しているもので、画像工学分野において、工学上、工業上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6310 号	氏 名	柴崎 圭
主論文題名：			
性能と軽量さのトレードオフを考慮した 画像変換深層学習ネットワークに関する研究			
コンピューティング技術やビッグデータ処理技術の向上により、デジタル画像及び動画画像を変換、復元する技術の需要が高まっている。深層学習は画像の変換といった複雑なタスクに対する有効な手法であるが、計算量が多くなるという問題がある。さらに、深層学習ベースの手法は多くの場合において性能と手法の軽量さの間にトレードオフが存在する。本研究では、多様な 4 つのタスクにおいて、新規モジュールを採用したネットワークを用いることと、効果的な処理スキームや損失関数を導入するという 2 つのアプローチから、タスクごとに性能と軽量さを両立した画像変換深層学習ネットワークを提案している。 第 1 章では、研究背景及び研究目的について述べている。 第 2 章では、本研究で取り扱うデジタル動画画像や深層学習の基礎理論について説明し、第 3 章では、本研究で取り組むタスクである、フォトレタッチ、動画のノイズ除去、姿勢変換、非ペア画像変換に関する従来研究について概説している。 第 4 章では、フォトレタッチというタスクに対して、ラプラシアンピラミッドで分解された低周波画像に関して Axial Transformer を含む特徴抽出能力の高いブロックを採用した深層学習ネットワークを提案し、従来法に比べ計算量を大きく削減しつつ高性能な画像変換を達成した。 第 5 章では、動画のノイズ除去というタスクに対して、軽量で高効率であるモダン ConvBlock を採用し、3 次元畳み込みのような直接時間軸の相互作用を行うことなく、疑似的に時間的な関係性を捉える Pseudo Temporal Fusion を新たに提案することで、性能と軽量さを両立した動画のノイズ除去ネットワークを提案した。 第 6 章では、姿勢変換というタスクを「大まかな姿勢の変換」と「詳細なテクスチャの生成」という 2 つのサブタスクに分解し、それぞれを異なる適切なモジュールで処理する推論スキームを提案することで効率的な変換を実現した。 第 7 章では、非ペア画像変換というタスクに対して、訓練済みの salient object detection ネットワークで抽出された saliency domain を同時に変換する。変換後の画像だけではなく、変換した saliency domain や、それをもとにした画像の前景に対しても損失を計算することでネットワークの変換リソースを変換すべき前景に集中することが可能となり、ネットワークを軽量にしつつ高水準の変換性能を達成した。 第 8 章では、本研究によって得られた成果を結論としてまとめ、今後の展望を述べている。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6310 号	氏 名	柴崎 圭
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学教授 工学博士 池原 雅章			
副査 慶應義塾大学教授 工学博士 萩原 将文			
慶應義塾大学教授 博士（工学） 青木 義満			
慶應義塾大学教授 博士（工学） 久保 亮吾			
学士（工学）、修士（工学） 柴崎圭君提出の学位請求論文は「性能と軽量さのトレードオフを考慮した画像変換深層学習ネットワークに関する研究」と題し、8章から構成されている。 コンピューティング技術やビッグデータ処理技術の向上により、デジタル画像及び動画画像を変換、復元する技術の需要が高まっている。深層学習は画像の変換といった複雑なタスクに対する有効な手法であるが、計算量が多くなるという問題がある。さらに、深層学習ベースの手法は多くの場合において性能と手法の軽量さの間にトレードオフが存在する。本研究では、多様な4つのタスクにおいて、新規モジュールを採用したネットワークを用いることと、効果的な処理スキームや損失関数を導入するという2つのアプローチから、タスクごとに性能と軽量さを両立した画像変換深層学習ネットワークを提案している。 第1章では、研究背景及び研究目的について述べている。 第2章では、本研究で取り扱うデジタル動画画像や深層学習の基礎理論について説明し、第3章では、本研究で取り組むタスクである、フォトレタッチ、動画のノイズ除去、姿勢変換、非ペア画像変換に関する従来研究について概説している。 第4章では、フォトレタッチというタスクに対して、ラプラシアンピラミッドで分解された低周波画像に関して Axial Transformer を含む特徴抽出能力の高いブロックを採用した深層学習ネットワークを提案し、従来法に比べ計算量を大きく削減しつつ高性能な画像変換を達成している。 第5章では、動画のノイズ除去というタスクに対して、軽量で高効率であるモダン ConvBlock を採用し、3次元畳み込みのような直接時間軸の相互作用を行うことなく、疑似的に時間的な関係性を捉える Pseudo Temporal Fusion を新たに提案することで、性能と軽量さを両立した動画のノイズ除去ネットワークを提案している。 第6章では、姿勢変換というタスクを「大まかな姿勢の変換」と「詳細なテクスチャの生成」という2つのサブタスクに分解し、それぞれを異なる適切なモジュールで処理する推論スキームを提案することで効率的な変換を実現している。 第7章では、非ペア画像変換というタスクに対して、訓練済みの salient object detection ネットワークで抽出された saliency domain を同時に変換する。変換後の画像だけではなく、変換した saliency domain や、それをもとにした画像の前景に対しても損失を計算することでネットワークの変換リソースを変換すべき前景に集中することが可能となり、ネットワークを軽量にしつつ高水準の変換性能を達成している。 第8章では、本研究によって得られた成果を結論としてまとめ、今後の展望を述べている。 以上要するに、本研究は性能と軽量さのトレードオフを考慮した深層学習による画像変換方法を提案したものであり、従来法に比べ高品質な画像の変換を実現しており、画像工学分野において工学上、工業上寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6311 号	氏 名	栢田 真奈
主論文題名：			
Tracking and Scene Representation for Fast-moving Cameras by Event Data Synthesis (イベントデータ合成による高速移動カメラのための運動追跡とシーン表現)			
機械は、運転支援システムや手術支援など、私たちの日常生活に広く浸透している。これらの技術の核となるのは、機械が周囲の三次元環境を感覚データとして解釈し、カメラ「目」を使って自分自身を位置特定する能力である。 既存のフレームベースのカメラを利用するために多くの技術が開発されているが、これらの方法は密な記録システムによる制限に直面し、より高い時間的解像度をスケールすることや計算の複雑さを減らすことが難しくなる。フレームベースの記録システムは、環境を視覚化するための最も簡単な方法であり、フレームベースの画像は解釈が容易です。しかし、これらのカメラからの情報は、動きを表現する際にしばしば冗長になる。イベントベースのカメラは、網膜を模倣した生体を模倣した視覚センサーで、実際の強度画像を定期的にキャプチャするのではなく、各ピクセルの輝度変化を非同期的に報告する。この特別な動作原理により、非常に高い時間的解像度と低いデータ消費を提供し、動きのキャプチャに最適なセンサーとなっている。 本論文の目的は、イベントベースのカメラを活用して、速い動きの視覚から機械が自分自身を位置特定できるようにすることである。この目的を達成するために、本論文ではまず、イベントベースの視覚と微分可能なシーン表現を用いた速い動きの追跡について探求する。次に、イベントベースの視覚を使用した速い動きのカメラの位置特定と追跡方法を提案する。最後に、速い動きのカメラを用いた 3D シーン再構成法を紹介し、イベントベースの視覚を取り入れる。 この目標を達成するために、本論文のいくつかの重要な貢献を示す。まず、イベントデータを用いたカメラ追跡の新しいフレームワークを提案します。このフレームワークは、事前に訓練された多層パーセプトロン (MLP) を用いてイベントを合成することにより、観測されたイベントと生成されたイベントの不一致を最小化することで、カメラの位置と速度を求める。次に、ニューラルラディアンフィールド (NeRF) シーン表現を活用してイベントを合成する技術を開発する。NeRF の時間的勾配出力を観測されたイベントと整合させることにより、この方法は、入力パラメータが実際のカメラの動きと一致する場合にカメラのポーズと動きを正確に求める。第三に、本論文では、速い			

動きのカメラからの高忠実度の 3D シーン再構成法を紹介し、数分以内に結果を得ることができます。イベントベースとフレームベースの視覚を統合することで、カメラ追跡効率を向上させ、モーションブラーを排除し、より精密な 3D 表現を実現する。最後に、速い動きのカメラからの 3D シーンを再構成する方法を提案し、カメラポーズを最適化する。提案されたカメラ追跡技術とイベント強化型 3D シーン再構成戦略を活用することで、モーションブラーを伴う入力画像でも高忠実度の再構成を確保する。

結論として、本論文は、イベントベースの視覚を使用した動きの追跡、カメラの位置特定と追跡方法、ニューラルシーン表現の分野での進展を示し、速い動きの機械が自分自身を位置特定し、3D 世界を理解するための解決策を提供する。

審査の要旨

報告番号	甲 第 6311 号	氏 名	柘田 真奈
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	博士（工学） 斎藤 英雄
	副査	慶應義塾大学准教授	博士（工学） 五十川 麻理子
		慶應義塾大学教授	博士（工学） 青木 義満
		Univ. of Stuttgart	博士（工学） 森 尚平
学士（工学）、修士（工学）柘田 真奈君提出の学位請求論文は、「Tracking and Scene Representation for Fast-moving Cameras by Event Data Synthesis（イベントデータ合成による高速移動カメラのための運動追跡とシーン表現）」と題し、7章で構成されている。 カメラによる三次元環境の計測や位置姿勢の計測は、自動運転など多様な分野で利用されている。通常のフレームベースカメラでは、動きの速いシーンでモーションブラーが発生するという課題があり、高速カメラを用いてもデータ量の増加に伴う計算負荷が問題となる。一方、イベントベースカメラは、輝度変化があった画素位置と時刻を非同期で出力するため、モーションブラーの影響を受けずにマイクロ秒単位の高い時間分解能を持つデータを得ることができる。 本論文は、イベントベースカメラの高い時間分解能を活用して高速移動カメラの位置特定能力を向上させ、さらにモーションブラーを軽減しながら三次元環境を正確に再構成する技術を提案し、その有効性を評価・検証した結果をまとめたものである。 第1章では、高速移動するカメラの運動追跡とそれにより撮影された三次元シーンの形状復元問題の重要性を示し、フレームカメラに対するイベントベースカメラの優位性や有効性を指摘し、本論文の目的と位置づけを明らかにしている。 第2章では、イベントベースカメラの運動推定技術とそれに関連する三次元形状復元技術についての関連研究をサーベイしている。 第3章では、イベントデータを用いたカメラ追跡のための新しいフレームワークを提案している。このフレームワークは、事前に学習された多層パーセプトロン（MLP）を用いてイベントを生成し、観測されたイベントと生成されたイベントの差異を最小化することで、カメラの位置と速度を推定するものである。 第4章では、NeRFを用いたシーン表現によりイベントを生成し、NeRFの時間勾配出力と観測イベントを一致させることで、カメラ姿勢と動きの推定を行う技術を提案し、その有効性を検証している。 第5章では、高速移動するカメラから数分で高精細な三次元シーン再構築を実現する方法を提案し、イベントベースおよびフレームベースのビジョンを組み合わせることで、モーションブラーを排除し、より正確な三次元シーン表現を可能にしている。 第6章では、高速移動カメラの位置姿勢を全体最適化するバンドル調整を行いながら同時に三次元形状を再構築する手法を提案し、イベントデータを活用してモーションブラーのある入力画像からも高精細な再構築を実現できることを示し、その性能と有効性を検証している。 最後に第7章では、本論文の成果と結論をまとめ、提案技術の実利用の可能性や今後の研究課題について議論している。 以上、本研究は、高速運動するイベントベースカメラの位置特定・追跡手法および、それによる三次元再構築手法を新たに提案し、その優れた性能を示すものであり、工学上寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6316 号	氏 名	白 家 維
主 論 文 題 名 : Cryogenic CMOS Low-Power and High-Speed Successive Approximation Register ADC for Scalable Quantum Computer (スケーラブル量子コンピューター向けの 極低温動作 CMOS 低電力高速逐次比較型 ADC)			
量子コンピューター (QCs) は複雑な問題を解決する可能性を持っている. 誤り耐性汎用型量子コンピューター (FTQCs) を実現するためには, 量子ビットのエラー率を十分に低く抑える必要があるため, 数千から数十万以上の量子ビットが必要となる. これに伴い, 極低温 (数 mK) で動作する量子プロセッサとインターフェースするケーブルの数が増加し, 量子ビット数の増加に制限が生じる. ケーブル数を減らすために, 極低温に配置される読み取り回路は, 冷却能力の制約から超低消費電力 (1 量子ビットあたり数 mW) で動作し, 量子ビットのコヒーレンス時間の制約から検出した信号を高速 (数十 MS/s ~ 数 GS/s) にデジタル変換する A/D 変換器 (ADC) が必要となる. 本研究では, 極低温で動作する CMOS 超低消費電力かつ超高速の SAR ADC の実現に向けて方式の検討と設計を行った. 第 1 章では, 本研究の背景である量子コンピューターの進展, および量子ビットの制御と読み取り回路について概説した. 第 2 章では, 極低温 CMOS デバイスの特性について述べた. ADC アーキテクチャーを概説した後, ダイナミックコンパレータの性能について述べ, 特に消費電力と遅延時間の関係を議論した. その後, 極低温環境における SAR ADC のスイッチング方式の課題について述べた. 第 3 章では, 高速かつ低消費電力 2 段ダイナミックコンパレータを提案した. プリアンプはダイナミックバイアス技術を用いて消費電力を節約し, StrongARM ラッチを挿入することにより出力電圧差を増加させた. ラッチは入力ペアにより貫通電流が抑制された. また, 補助入力ペアを用いて利得をさらに増加させ, ラッチの速度を向上させた. 設計したコンパレータは, 遅延時間が最大 41%改善され, 消費電力が最大 57%削減された. 新たに導出した遅延解析モデルにより回路設計に対する深い理解と優れた直観的な設計指針が与えられた. 第 4 章では, ゲインブースティングダイナミック容量型プリアンプ (DCA) ベースのコンパレータを提案した. ゲインブースティング DCA は, リザーバキャパシタを電圧源として用いて独立電圧ドメインを形成し, コモンモード変動に対する耐性とダイナミックバイアスを実現した. この耐性により性能劣化が緩和され, ダイナミックバイアスにより消費電力が低減された. また, クロスカプリングペアを用いてゲインがブーストされている. ドレイン-ソース電圧の初期値を大きくすることでフルスケールの入力動作範囲を実現した. 第 5 章では, エネルギー効率の高いコモンモード電圧変動抑制 (CMVS) スwitching 方式を提案し, 10-bit, 60MS/s の SAR ADC を設計した. CMVS スwitching 方式は, 従来方式と比較してエネルギー消費を 92 %削減し, コモンモード電圧変動を V_{DD} に対して 16.6% 以下に抑えることを達成した. これにより, SAR ADC の精度が向上し, コンパレータを常に最高性能領域で動作させることが可能となった. 設計した SAR ADC は, 4 K で 14.15 fJ/conversion-step の規格化性能を達成した. 第 6 章では, 各章で得られた内容をまとめ, 将来の研究の展望を示した.			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6316 号	氏 名	白 家維
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学教授 博士（工学） 石黒 仁揮			
副査 慶應義塾大学教授 博士（工学） 中野 誠彦			
慶應義塾大学専任講師 博士（工学） 吉岡 健太郎			
慶應義塾大学名誉教授 工学博士 天野 英晴			
学士（工学）、修士（工学）白 家維君提出の学位請求論文は「Cryogenic CMOS Low-Power and High-Speed Successive Approximation Register ADC for Scalable Quantum Computer (スケーラブル量子コンピューター向けの極低温動作 CMOS 低電力高速逐次比較型 ADC)」と題し、6 章から構成されている。 量子コンピュータの実用化に向けた研究が世界的に活性化しているが、スケーラビリティの観点から、特に超伝導方式や半導体量子ドットを用いた量子ビットの量子状態の制御や読み出しのためのエレクトロニクスを CMOS 回路で集積化し、極低温で動作させるクライオ CMOS 技術の重要性が増している。希釈冷凍機の冷却能力の制約から、クライオ CMOS 回路には極限の低消費電力で低雑音、広帯域動作が要求される。また、極低温における MOSFET の特性の変化を考慮した設計が必要となる。本研究は、量子ビットの読み出し回路の中でも重要な回路ブロックである高速 ADC の設計に関して、液体ヘリウムの温度で動作をさせる場合の課題とその解決策を提案し、レイアウト寄生の影響を含むシミュレーションでその有効性を検証することを目的としている。 第 1 章は、序論であり研究の背景を述べている。誤り耐性のある量子コンピュータ実現の課題と、制御、読み出し回路へのクライオ CMOS 技術の適用に関する研究動向を述べている。 第 2 章では、極低温動作時の MOSFET のデバイス特性を説明し、ミックストシグナル CMOS 回路に適用する際の課題と先行研究例を概観している。 第 3 章では、ADC の中でも重要なブロックである比較器に関して、2 段ダイナミック比較器の初段に正帰還ラッチを付けることで、低電力特性を保ちながら動作速度を向上させる手法を提案している。動作速度の解析式を導出し、また、レイアウト寄生を含むシミュレーションを実行し、従来の回路形式に対して 65%の規格化性能指標の改善を達成している。 第 4 章では、NMOS および PMOS 双方のゲイン増強機能を有するダイナミック増幅器の利用により、入力同相電圧が変動する場合においても高速低電力動作を行う比較器回路を提案しており、シミュレーションによりグランドから電源電圧にわたる幅広い入力範囲で高速動作することを示している。 第 5 章では、内蔵 DAC の充放電電力を削減するためのスイッチングシーケンスを提案し、第 4 章で提案した比較器と組み合わせた逐次比較型 ADC を設計している。レイアウト寄生を含むシミュレーションで、4 K において 60 MS/s 動作、有効分解能 9.3 bit、消費電力 0.55 mW という低電力動作を実現している。 第 6 章は結論であり、各章のまとめ、および将来の研究の展望を述べている。 以上要するに、本研究は極低温で動作する ADC の消費電力削減、および高速化の手法を提案し、その有効性を実証したものであり、集積回路工学分野において工学上、工業上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6317 号	氏 名	大山 裕也
主論文題名：			
効果的で安全な血管内治療を支える高機能医療ポリマー基盤材料の開発			
従来の外科手術を必要とせずに、血管内から体内患部に直接治療を施せる画像下治療 (IVR: Interventional Radiology) は、患者の負担を大幅に低減でき、回復時間も短縮できる最先端医療技術である。本研究では、この IVR に応用される高機能な医療用ポリマー材料、さらには安全性を高めたトレーニングキット用材料の最適化検討を行った。 第 1 章では、IVR の手技である肝動脈化学塞栓療法とステントによる血管拡張術、液状塞栓物質による血管塞栓術について記述するとともに、本研究の目的を述べた。 第 2 章では、生分解性ポリマーであるポリエステルに機能性分子を結合できるようにするため、ポリエステル主鎖に対してアミノ基を導入した。アミノ基が保護されたモノマーに対して、反応選択性の高い酵素触媒を用いて重合を実施した。その結果、全ての繰り返し単位にアミノ基を有する分子量 10,000 以上のポリエステルを合成することができた。また、酪酸をアミノ基に結合させる反応が完全に進行したことから、今後、さまざまな機能性分子を効果的に結合できることがわかった。 第 3 章では、ステント用ポリマーコーティング材料に向けて、CT スキャンにおいて捕捉される X 線視認性と、生体内で分解する生分解性を同時に有するポリマーの開発を進めた。生分解性を有し、かつヒドロキシ基を有するポリグリセロールアジペート (PGA) に対して、X 線視認性を有するヨウ素化合物を結合させた。ここではさらに、ポリマー分子内のエステルとヨウ素原子の間に静電的相互作用であるハロゲン結合が発現することで、可逆的な架橋が形成され、ヨウ素化 PGA は弾性や延性を示した。修飾するヨウ素化合物によって、ヨウ素化 PGA の熱物性と力学物性を効率的に制御できた。ガラス転移温度においては-19.2°Cから49.6°Cの範囲を示した。 第 4 章では、NBCA (n-ブチルシアノアクリレート) の体外トレーニングキット用材料の最適化検討を行った。NBCA は、血液と反応して液体から固体となることで血管塞栓剤として用いられる。ここでは、NBCA の固化性能という側面から、血液と類似性能を示す代替血液を検討した。代替血液の NBCA 固化性能は定常流測定で評価し、1.5 g/dL 以上のアルブミン水溶液が血液と同等の NBCA 固化性能を有することを明らかにした。 第 5 章では、各章を総括するとともに今後の方針を立て、本論文の結論を述べた。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6317 号	氏 名	大山 裕也
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授 Ph. D.	堀田 篤
	副査	慶應義塾大学教授 博士（工学）	大村 亮
		慶應義塾大学教授 博士（農学）	奥田 知明
		慶應義塾大学教授 博士（工学）	宮田 昌悟
学士（工学）、修士（工学）を有する大山裕也君の学位請求論文は「効果的で安全な血管内治療を支える高機能医療ポリマー基盤材料の開発」と題し、全5章から構成されている。本研究は、工学的な視点による学術知識とその応用技術をもとに、医療現場における最先端の問題点を解決すべく、その実用現場への応用を目指した医工連携研究に深く関わっている。具体的には、患者への負担が大きい従来の外科手術を必要としない、血管内から体内患部に直接治療を施せる画像下治療 (IVR : Interventional Radiology) に関わる研究を実施している。IVR がさらに広く浸透すれば、患者の負担は大幅に低減され、その回復時間も短縮できる最先端医療技術が確立される。本研究では、この IVR に応用される高機能な医療用ポリマー材料の開発をするとともに、現場の臨床医師の手技を高めることで、手術時のミス回避して安全性を高められるトレーニングキット用材料の最適化検討が行われている。 第1章では、IVR の手技である肝動脈化学塞栓療法とステントによる血管拡張術、液状塞栓物質による血管塞栓術について記述をするとともに、本研究の目的を述べている。 第2章では、生分解性ポリマーであるポリエステルに機能性分子を結合できるようにするため、ポリエステル主鎖に対してアミノ基を効果的に導入している。アミノ基が保護されたモノマーに対して、反応選択性の高い酵素触媒を用いて重合を実施することを試みている。その結果、すべての繰り返し単位に対してアミノ基を有するモル質量 10,000 g/mol 以上のポリエステルを合成することに成功している。また、酪酸をアミノ基に結合させる反応が完全に進行したことから、今後、さまざまな機能性分子を効果的に結合できることも示している。 第3章では、ステント用ポリマーコーティング材料に向けて、CT スキャンにおいて捕捉される X 線視認性と、生体内で分解する生分解性を同時に有するポリマーの開発を進めている。生分解性を有し、かつヒドロキシ基を有するポリグリセロールアジペート (PGA) に対して、X 線視認性を有するヨウ素化合物を結合させている。ここでは、さらにポリマー分子内のエステルとヨウ素原子の間に静電的相互作用であるハロゲン結合が発現することを考察し、可逆的な架橋が形成されていることを確認している。また、ヨウ素化 PGA が弾性や延性を示すことを確かめている。修飾するヨウ素化合物によって、ヨウ素化 PGA の熱物性と力学物性を効率的に制御していて、ガラス転移温度においては -19.2℃ から 49.6℃ の範囲に存在することも示されている。 第4章では、NBCA (n-ブチルシアノアクリレート) の体外トレーニングキット用材料の最適化検討を行っている。NBCA は血液と反応し、液体から固体となることで血管塞栓剤として用いられている。ここでは、NBCA の固化性能という側面から、血液と類似性能を示す代替血液を検討している。代替血液の NBCA 固化性能は定常流測定で評価し、1.5 g/dL 以上のアルブミン水溶液が血液と同等の NBCA 固化性能を有することを明らかにしている。 第5章では、各章を総括するとともに今後の方針を立て、本論文の結論を述べている。さらには、本論文の成果が将来的に実用化へと結びつく可能性についても述べられている。 以上要するに、本論文では、IVR に応用される高機能な医療用ポリマー材料の研究と開発、さらには医療現場に従事する医師の手技を高めるトレーニングキット用材料の最適化検討が有効に行われた。外科手術を必要とせず、血管内から体内患部に直接治療を施せる IVR による患者の負担を大幅に低減でき、さらには手術後の回復時間も短縮できる最先端医療技術の発展へ大きく寄与する実用的な研究開発につながることを期待される。また、これらの技術と知見は、IVR 全般にわたる臨床症例の最適化や発展につながることを可能とし、さらに、新たな治療技術の研究迅速化と低コスト化にも寄与する可能性がある。このような研究成果から、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6327 号	氏 名	俣野 眞一郎
主論文題名：			
高配向カーボンナノチューブ薄膜における異方性熱特性・発光特性と 光・電子デバイス応用			
偏光分析技術は基礎研究の分野から工業応用と様々な場面で活用されており、偏光分析技術を用いるためには、広い波長帯域に光強度を持つ偏光光源が重要となっている。従来の偏光光源では、非偏光の熱光源に偏光子を挟む必要があり、広い波長帯域の偏光を光源からダイレクトに生成することは難しかった。そこで、本研究ではナノカーボン材料であるカーボンナノチューブ(CNT)が高密度・高配向度に整列された集合材料である CNT 配向膜に着目した。CNT は擬一次元構造を有するナノ材料であり、ナノ構造由来の熱発光が示されていた。そして、CNT 配向膜は CNT の特徴をマクロデバイスへ反映させることができる材料として注目されている。そのため、CNT 配向膜では、CNT 由来の異方的な物性が調べられてきたが、CNT 配向状態における熱発光現象は示されていなかった。そこで本博士論文では、CNT 配向膜による熱発光の調査し、光デバイスとしての特性評価を行った。 本博士論文は 7 章から構成される。第 1 章は序論として研究背景を記し、ナノカーボン材料の基礎物性やナノカーボン熱光源について述べる。第 2 章では、本研究において、CNT 配向膜のデバイス作製やデバイスの発光特性評価等のために用いた実験装置・解析手法について紹介をする。第 3 章では、CNT 配向膜の熱発光に対する光学特性の評価を行った結果を示す。当研究では、CNT 配向膜を用いて電圧印加式の発光デバイスを作製した。CNT 配向膜は固有の異方的な物性を有するため、印加電圧方向に対して配向方向が平行・垂直の関係となるような 2 種類のデバイスを用意した(以後、平行・垂直デバイスと呼ぶ)。CNT 配向膜デバイスは赤外発光を示し、スペクトル測定により赤外波長帯域に広く光強度を有する熱発光であることが示された。そして偏光依存性の測定により、CNT 配向由来の偏光熱発光をすることが示された。また、平行・垂直デバイスにおいて実験的に異なる発光分布を有することが示された。そこでシミュレーション解析をすることで、CNT 配向膜・電極の接触熱コンダクタンスが熱発光に寄与していることが示された。第 4 章では、CNT 配向膜のマイクロ偏光熱光源に対する変調特性を評価した結果を示す。当研究では、CNT 配向膜を用いて電圧印加式の $1\ \mu\text{m}^2$ マイクロ熱光源を作製した。そして、熱発光に対して時間分解光学測定を行うことで、電圧シグナルに対する応答性を評価し、応答速度が配向方向によって異なることが明らかとなった。その異方的な応答性の機序を明らかにするため、マイクロ熱発光デバイスを対象とした時間依存シミュレーションを行うことで、平行デバイスでは 20 MHz の高速変調特性を有することが示された。さらに、CNT 配向膜上の CNT 膜・電極コンタクトの影響により、異方的な応答特性を有することが明らかとなった。第 5 章では、ナノ架橋構造を組み込んだ CNT 配向膜デバイスにおける偏光熱発光の光学特性結果について示す。通常の熱発光デバイスでは、シリコン基板上に作製をしているため CNT 配向膜と基板は接触している。そのため当研究では、フッ酸プロセスによって CNT 配向膜を浮かせた架橋構造を作製し、偏光熱発光の光学測定を行なった。その結果、架橋 CNT 配向膜デバイスでは、偏光度 0.9 の高偏光度化が実現されることを示した。これは、基板発光の影響が無い CNT 配向膜からのダイレクトな偏光を示している。第 6 章では、CNT 配向膜における熱破断後の状態を分析した結果を示す。CNT 配向膜は熱耐久特性があり高温状態を維持することができ、それが熱光源としての優位性でもある。しかし、想定以上の電力を印加すると CNT 配向膜は熱破断を起こす。当研究では、熱破断後における電気特性を評価することで、従来の材料では見られない電流の回復並びにスイッチング現象が観測された。さらに、CNT 配向膜固有のパラメータである配向方向に対するスイッチング依存性を評価することにより、配向による低抵抗状態の変動が示された。第 7 章では、本研究の結論と当研究領域の今後の展望について述べる。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6327 号	氏 名	俣野 眞一郎
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授 博士（工学）	牧 英之
	副査	慶應義塾大学教授 博士（理学）	渡邊 紳一
		慶應義塾大学准教授 博士（工学）	安藤 和也
		慶應義塾大学准教授 博士（工学）	太田 泰友
学士（工学）、修士（工学）俣野眞一郎君提出の学位請求論文は、「高配向カーボンナノチューブ薄膜における異方性熱特性・発光特性と光・電子デバイス応用」と題し、全 7 章から構成されている。 偏光分析技術は基礎研究の分野から工業応用と様々な場面で活用されており、偏光分析技術を用いるためには、広い波長帯域に光強度を持つ偏光光源が重要となっている。広い波長帯域を持つ安価で小型の光源として熱光源があるが、従来の熱光源から偏光を得るには、非偏光の熱光源に偏光子を挟む必要があり、熱光源からダイレクトに生成することは難しい。そこで、本研究では、カーボンナノチューブ(CNT)が高密度・高配向度に整列された CNT 配向膜を用いて、高配向 CNT から直接偏光を発生させる技術を構築した。本著者は、CNT 配向膜が有する異方性を用いて、異方的な熱輸送特性やそれによる熱発光特性の評価とメカニズム解明を行った。 第 1 章は序論であり、ナノカーボン材料の基礎物性や熱発光について述べている。 第 2 章では、CNT 配向膜のデバイス作製やデバイスの発光特性評価等のために用いた実験装置・解析手法について述べている。 第 3 章では、CNT 配向膜の熱発光に対する光学特性の評価について述べている。本研究では、CNT 配向膜の固有な異方的物性を理解するため、印加電圧方向に対して配向方向が平行・垂直の関係となるような 2 種類の電圧印加式発光デバイス(以後、平行・垂直デバイス)を作製している。そして、CNT 配向膜熱発光は、赤外波長帯域に広く光強度を有する CNT 配向由来の偏光熱発光であることを明らかにしている。また、平行・垂直デバイスでは発光分布が異なることを実験的に示し、シミュレーション解析をすることで、CNT 配向膜・電極の接触熱コンダクタンスが熱発光に寄与していることを明らかにしている。 第 4 章では、CNT 配向膜のマイクロ偏光熱光源に対する変調特性について述べている。本研究では、CNT 配向膜を用いて電圧印加式の $1\ \mu\text{m}^2$ マイクロ熱光源を作製している。そして、熱発光に対して時間分解光学測定を行うことで、電圧シグナルに対する応答性を評価し、応答速度が配向方向によって異なることを明らかにしている。マイクロ熱発光デバイスを対象とした時間依存シミュレーションを行うことで、平行デバイスでは従来偏光光源より高速な 20 MHz の高速変調が可能であることを明らかにしている。さらに、CNT 配向膜上の CNT 膜・電極コンタクトによる異方的な応答特性を明らかにしている。 第 5 章では、ナノ架橋構造を組み込んだ CNT 配向膜デバイスにおける偏光熱発光の光学特性について述べている。架橋構造を作製した結果、架橋 CNT 配向膜デバイスでは偏光度 0.9 の高偏光度化が実現されることを明らかにしている。これは、基板発光の影響が無い CNT 配向膜からのダイレクトな偏光を表している。偏光光源の応用では発光の偏光度が重要であり、本研究では、デバイス構造によって偏光度を向上させることに成功している。 第 6 章では、CNT 配向膜における熱破断後の状態分析について述べている。熱破断後における電気特性を評価することで、従来の材料では見られない電流の回復並びにスイッチング現象を観測している。さらに、CNT 配向膜固有のパラメータである配向方向に着目してスイッチング依存性を評価することで、配向による低抵抗状態の変動を明らかにしている。 第 7 章は総括であり、本研究で得られた知見について述べている。 以上、本論文は、配向した CNT からの偏光発生技術に関する新しい知見を得たものであり、ナノカーボン材料の熱光源に関する応用物理、工学応用に貢献するものである。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6328 号	氏 名	米山 慎太郎
主論文題名： Covariate Selection for Estimating Population Means and Procedures for Estimating Treatment Effects When Data Are Missing Not at Random (Missing Not at Random データにおける母平均推定の共変量選択と 処置効果の推定手順)			
本論文は、結果変数に欠測がありそのメカニズムが Missing Not at Random (MNAR) の場合において、結果変数の母平均をバイアスと分散を小さく推定するための共変量選択、及び、処置効果を推定する方法について研究成果をまとめたものである。MNAR は観測値のみならず欠測値自身にも依存する欠測メカニズムであるが、その他の欠測メカニズムと比べ適切な調整が難しい。 第一章は序論であり、欠測データの調整法における先行研究について概観し、現状の MNAR データにおける統計的推測の問題意識について述べる。 第二章では、本論文での議論に用いる先行研究について説明する。ここでは、結果変数に MNAR の欠測がある場合の母平均推定において、共変量を条件付けたときに結果変数と条件付き独立で欠測とは関連がある変数である操作変数を用いた方法を考える。当該の先行研究は 2 段階推定手順を採用しており、まず共変量、結果変数及び操作変数を条件付けたもとの欠測確率である拡張傾向スコアを推定し、その推定値を用いて母平均の推定を行う。 第三章では、第二章で説明した 2 段階推定手順による母平均推定において、拡張傾向スコアのモデルに対する共変量選択指針の提案を行う。まず、母平均推定の一致性のために拡張傾向スコアのモデルに最小限含めるべき共変量を示す。次に、母平均推定値のバイアスと分散を小さく推定するという観点で、一致性のために最小限含めるべき共変量のみを拡張傾向スコアモデルに含めることが良い共変量選択指針であることを示す。 第四章では、結果変数に MNAR の欠測がある場合に 2 段階推定手順を用いて処置効果を推定する方法を提案する。観察研究において処置効果を推定する際は交絡変数の存在が問題になるので、欠測と交絡の調整を同時に考える必要がある。ここでは観察研究において結果変数に MNAR の欠測がある場合に、結果変数のモデリングを行うことなく、処置効果として平均処置効果や処置群・対照群での平均処置効果を推定する方法について提案する。 第五章は、結果変数に MNAR の欠測がある場合における母平均推定のための共変量選択、及び処置効果の推定手順についての議論をまとめる。また、MNAR を調整する 2 段階推定手順における課題と今後の展望についても述べる。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6328 号	氏 名	米山 慎太郎
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授 Ph. D.	南 美穂子
	副査	慶應義塾大学教授	博士（工学） 鈴木 秀男
		慶應義塾大学教授	博士（理学） 白石 博
		慶應義塾大学教授	博士（情報理工学） 小林 景
		慶應義塾大学准教授	博士（工学） 林 賢一
修士（工学）米山慎太郎 君提出の学位請求論文は，“Covariate Selection for Estimating Population Means and Procedures for Estimating Treatment Effects When Data Are Missing Not at Random”（Missing Not at Random データにおける母平均推定の共変量選択と処置効果の推定手順）と題し、本文 5 章と付録 2 章より成る。本論文は、結果変数に欠測があり、そのメカニズムが Missing Not at Random (MNAR)の場合に、結果変数の母平均推定においてバイアスと分散を小さくするための共変量の選択方針、及び、処置の有無による効果の差である処置効果をバイアスなく推定する方法についての研究成果をまとめたものである。MNAR は、欠測が観測値のみならず、欠測した値にも依存する欠測メカニズムであり、観察研究において頻繁に生じる欠測だが、その他の欠測メカニズムと比べ適切な調整が難しいため、結果変数の平均や平均処置効果の統計的推測方法に関する既存の研究は少なく、特に重要な課題である。 第一章は序論であり、欠測データの調整法に関する先行研究について概観し、現状の MNAR データに対する統計的推測の問題意識について述べている。第二章では、本論文での議論に用いる Sun et al. (2018)で提案された、結果変数に MNAR の欠測がある場合の母平均推定法を紹介している。この母平均推定法は、共変量を条件付けたときに結果変数と条件付き独立で、欠測とは関連がある変数である操作変数を用い、共変量、結果変数及び操作変数を条件付けたもとでの欠測確率である拡張傾向スコアを推定し、その推定値を用いて母平均の推定を行う 2 段階推定手順である。第三章では、第二章で説明した母平均推定法において、拡張傾向スコアを推定するモデルに対する共変量選択指針を提案している。まず、母平均推定量が一致性を持つために拡張傾向スコアのモデルに最小限含めるべき共変量の集合を示し、次に、母平均推定量のバイアスと分散を小さくするには、一致性を持つために最小限含めるべき共変量のみを拡張傾向スコアモデルに含めることが良い共変量選択指針であり、たとえ拡張傾向スコアに対する説明力があっても、最小限含めるべき共変量集合に入っていない変数を拡張傾向スコアのモデルに含めると、母平均推定量の分散を大きくする可能性があることを示している。第四章では、結果変数に MNAR の欠測がある場合に処置効果を推定する方法を提案している。観察研究において処置効果を推定する際は、交絡変数の存在が問題になるため、欠測と交絡の調整を同時に考える必要がある。そこで、欠測と処置の有無の両方に対する拡張二重傾向スコアを定義し、その推定方法、および、それを用いた平均処置効果、処置群・対照群での平均処置効果の推定量を提案している。第五章は、結果変数に MNAR の欠測がある場合における母平均推定のための共変量選択、及び処置効果の推定手順についての議論をまとめ、MNAR を調整する 2 段階推定手順における課題と今後の展望についても述べている。 このように、本論文は、結果変数に MNAR の欠測があるという現実には頻繁に発生するが、統計的推測が難しいデータに対して、母集団平均推定における変数選択の指針を与え、操作変数と拡張二重傾向スコアを用いた 2 段階推定法による平均処置効果、および、処置群・対照群での平均処置効果の推定方法を提案しており、観察研究における統計的推測の発展に大きく寄与するものである。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6329 号	氏 名	紫藤 拓巳
主論文題名：			
Exploring transparent organisms for bioimaging and establishing a basis for elucidating organismal transparency mechanism (バイオイメーシングに適した透明生物の探索および 生体透明性機構解明に向けた研究基盤の構築)			
生体内に導入した蛍光タンパク質等の可視化のために生体の透明性は極めて重要である。組織が透明であるためには光の散乱や吸収を防ぐ必要があり、固定標本においては多くの組織透明化試薬が開発されてきた。発生生物学の分野でカタユウレイボヤやマボヤはモデル生物として用いられてきたが、これらの種は比較的不透明な胚をもつため、極めて透明な胚を持つ <i>Phallsia mammillata</i> が新たにバイオイメーシングに適したモデル生物として台頭してきた。しかし本種の生息地はヨーロッパに限られ、世界中で入手可能で透明な胚をもつ種が望まれている。本研究では世界中で入手可能なバイオイメーシングに適した透明ホヤを探索すること、そして本種を用いて発生・進化の観点から生体の透明性機構を解明するための研究基盤を構築することを目的とした。生体透明度の定量測定系を構築し、ホヤ類における卵の透明度の多様さを発生および進化の観点から初めて明らかにした。また、透明性獲得・維持機構を明らかにするための基盤として、様々な条件下での卵透明度変化を測定する系を構築した。第1章は緒言である。背景として光吸収、反射、散乱といった透明度に影響を及ぼす要因を解説し、これまでに開発された組織透明化試薬や生物の透明度を計測する手法について述べた。第2章ではホヤ卵への透明度測定と系統解析より明らかにされたホヤ類における卵透明度の進化について述べた。ハイパースペクトルカメラを用いて、ホヤ卵の透明度を広波長域で定量測定する新規透明度測定法を確立した。日本沿岸から採取した複数のホヤ類の卵透過率スペクトルを比較した結果、ナツメボヤ科のホヤはおしなべて高い卵透明度を持つこと、本科に属するヨーロッパザラボヤ(<i>Ascidiella aspersa</i>)は窓ガラスと同等の約 90% の可視光透過率を示し、この高い卵透明度は幼生に引き継がれることを明らかにした。第3章では様々な環境条件や生理機能阻害時における卵透明度の変化を測定し、透明度は温度や塩濃度にそれぞれ負と正の相関をもつこと、細胞骨格、翻訳、ATP 阻害は卵透明度を低下させることを明らかにした。また主成分分析を用いて全 125 バンドの透過率スペクトルを二次元空間上にマッピングすることで、透明度の変化には複数の機序があることを示唆した。第4章は結言である。2, 3章を通じて明らかになったホヤ類における多様な卵透明度、卵透明度を左右する要因をもとに、ホヤ卵の透明性を獲得・維持する機構について議論し、ヨーロッパザラボヤのモデル生物としての応用可能性について言及した。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6329 号	氏 名	紫藤 拓巳
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学准教授 博士（理学）	堀田 耕司
	副査	慶應義塾大学教授 博士（地球環境科学）	土居 信英
		慶應義塾大学教授 博士（理学）	加納 英明
		慶應義塾大学准教授 博士（工学）	松原 輝彦
		北里大学教授 工学博士	岡 浩太郎
学士（理学）、修士（理学）紫藤拓巳君提出の学位請求論文は、「Exploring transparent organisms for bioimaging and establishing a basis for elucidating organismal transparency mechanism（バイオイメーシングに適した透明生物の探索および生体透明性機構解明に向けた研究基盤の構築）」と題し、全4章から成っている。 生体内に導入した蛍光タンパク質等の可視化のために生体の透明性は極めて重要である。組織が透明であるためには光の散乱や吸収を防ぐ必要があり、固定標本においては多くの組織透明化試薬が開発されてきた。発生生物学の分野でカタユウレイボヤやマボヤはモデル生物として用いられてきたが、これらの種は比較的不透明な胚をもつため、極めて透明な胚を持つ <i>Phallusia mammillata</i> が新たにバイオイメーシングに適したモデル生物として台頭してきた。しかし本種の生息地はヨーロッパに限られ、広く利用可能な透明な胚をもつ種の探索が求められていた。本論文ではハイパースペクトルカメラを用いた生体透明度の定量測定系を構築し、ホヤ類における卵の透明度の多様さを発生および系統の観点から初めて明らかにした。また、世界中で入手可能なバイオイメーシングに適した透明ホヤを見出した。さらに、透明性獲得・維持機構を明らかにするための基盤として、様々な条件下での卵透明度変化を解析する系を構築した。 第1章は緒言であり、本論文の背景として光吸収、反射、散乱といった透明度に影響を及ぼす要因や、これまでに開発された組織透明化試薬や生物の透明度を計測する手法について紹介し、最後に本論文の目的を述べている。 第2章では、ホヤ卵への透明度測定と系統解析により明らかにされたホヤ類における卵透明度の進化について述べている。ハイパースペクトルカメラを用いて、ホヤ卵の透明度を広波長域で定量測定する新規透明度測定法を確立し、本手法を用いて日本沿岸から採取した複数のホヤ類の卵透過率スペクトルを比較している。ナツメボヤ科のホヤはおしなべて高い卵透明度を持つこと、本科に属するヨーロッパザラボヤ (<i>Ascidella aspersa</i>) は窓ガラスと同等の約 90%の可視光透過率を示し、この高い卵透明度は幼生に引き継がれることを明らかにしている。また、本種を用いて実際に全胚の細胞膜の3Dライブイメーシングや受精に伴う Ca^{2+} 動態の可視化が可能であることを示し、本種が発生生物学における新たなモデル生物となる可能性を示している。 第3章では、様々な環境条件や生理機能阻害時における卵透明度の変化を測定し、透明度は温度や塩濃度にそれぞれ負と正の相関をもつこと、細胞骨格、翻訳、ATP 阻害は卵透明度を低下させることを明らかにしている。また、主成分分析を用いて全 125 バンドの透過率スペクトルを二次元空間上にマッピングした結果、透明度の変化には複数の機序があることを示唆している。 第4章は結言であり、ナツメボヤ科ホヤにおける高い卵透明度を獲得・維持する機構について議論し、さらに、本研究で明らかにされた、多様性に富む卵透明度をもち、かつ種間比較が容易なホヤ類は生体透明性を研究するための理想的なモデル生物であると提案している。 以上、本論文は、生体透明度の定量測定系を構築することにより、世界中で入手可能なバイオイメーシングに適したホヤを見出すことに成功し、本種を用いた透明性獲得・維持機構を明らかにするための基盤を構築したことから、生体透明性の発生的・進化的な理解に大きく貢献したといえる。この成果は、イメーシングを利用する発生生物学研究や生体透明性の理解に寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6330 号	氏 名	曾家 希美
主論文題名： 遷移金属および複合酸化物におけるスピン流と 磁化ダイナミクスに関する研究			
約 20 年前にスピンホール効果が初観測されて以来、スピン軌道トルクに関する研究が活性化しさまざまな材料・手法・応用が探求されてきた。電流・スピン流変換現象であるスピンホール効果やラシュバ・エデルシュタイン効果はそのようなスピントロニクス研究の中核を担っており、そのメカニズム解明や制御原理確立に向け活発に研究が進められてきた。しかし、これらの現象に関して数多くの議論が重ねられてきたにも関わらず、不明瞭なまま見過ごされている未解明物理が依然として存在する。今後のスピントロニクスの発展のためには、観測される現象の背後ある多様な物理を精密に切り分けた議論をすることが必要である。本研究では、電流誘起トルクに寄与する諸現象を明瞭に区別して整理することで、スピン流に関する研究においてこれまで見過ごされてきた、しかし本質的に重要な物理を明らかにする。本研究により得られる成果は、今後のスピントロニクス研究におけるより厳密で正確な議論を可能にするための基盤となる。 本論文は全 7 章で構成される。第 1 章では序論として、スピントロニクス発展の歴史的背景と本研究の目的について述べる。第 2 章では、本研究の前提知識として磁化ダイナミクスやスピントルク、電流・スピン流変換などの物理現象を説明する。第 3 章では、本研究におけるデバイス作製方法、実験方法、データ解析方法について述べる。第 4 章では、常磁性金属中のスピン流生成について述べる。窒素の導入により格子定数と抵抗率を制御した Pt 薄膜におけるスピンホール効果のクロスオーバーを観測し、内因性スピンホール効果が格子定数の変化に対して堅牢であることを示す。第 5 章では、強磁性金属中のスピン流生成について述べる。エピタキシャル強磁性体 Fe_3Si におけるスピンホール効果をスピン異常ホール効果から分離して観測し、電流・スピン流変換が磁化方向に依存せず等方的であることを示す。第 6 章では、酸化物ヘテロ構造における電流誘起トルクについて述べる。SrTiO_3 基板デバイスにおいて電流誘起トルク測定を行い、ラシュバ・エデルシュタイン効果によるスピン軌道トルクよりもリーク高周波電流によるエルステッドトルクが支配的であることを示す。第 7 章では、本研究の結論として得られた成果を集約して説明する。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6330 号	氏 名	曾家 希美
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学准教授 博士（工学） 安藤 和也			
	副査 慶應義塾大学准教授 Ph. D.	清水 智子	
	慶應義塾大学教授 博士（理学）	能崎 幸雄	
	慶應義塾大学教授 博士（工学）	海住 英生	
学士（工学）、修士（工学）曾家希美君の学位請求論文は「遷移金属および複合酸化物におけるスピン流と磁化ダイナミクスに関する研究」と題し、全 7 章より構成される。 スピントロニクスの中心的課題であるスピン流物性開拓の基盤は、スピン軌道相互作用を介して発現するスピン軌道トルクの定量である。スピン流とスピン軌道トルクに関するこれまでの研究は、強いスピンホール効果が期待される重金属に集中してきた。しかし近年、スピン流の消失が予想されていた強磁性金属におけるスピンホール効果の存在や、酸化物界面におけるラシュバ・エデルシュタイン効果の重要性が示唆されている。この進展は、スピン流およびスピン軌道トルク研究の新たな展開を期待させるとともに、その精密な理解と定量手法確立の重要性を示すものである。このような背景のもと、本研究では、遷移金属および複合酸化物が生み出すスピン流とスピン軌道トルクに注目した実験を遂行した。これにより、内因性スピンホール効果に対する格子定数および電子散乱時間の変化の影響を明らかにするとともに、強磁性金属における磁化に依存しない等方的スピンホール効果を観測し、さらにスピン軌道トルクの定量における高周波電流の空間分布の重要性を明らかにした。 本論文の第 1 章は序論であり、本研究の背景と位置づけが述べられる。第 2 章では、スピン流と磁化の相互作用、スピンホール効果およびラシュバ・エデルシュタイン効果によるスピン流の生成に関する理論が述べられる。第 3 章では、実験方法および解析手法が述べられ、試料の作製方法とスピントルク強磁性共鳴を用いた電流誘起トルクの測定手法が示される。第 4 章では、窒素導入した Pt におけるスピンホール効果に関する実験が示される。電気伝導度に対するスピンホール伝導度のスケージングが述べられ、内因性スピンホール効果が格子定数の変化に対して堅牢であることが示される。第 5 章では、強磁性金属 Fe_3Si におけるスピン流生成に関する実験が示される。2 つの異なる強磁性金属層を含むデバイスを用いることで、スピンホール効果をスピン異常ホール効果から分離できることが示され、強磁性金属中のスピンホール効果が磁化方向に依存しないことが明らかにされる。第 6 章では、酸化物 SrTiO_3 を含む素子構造におけるスピントルク強磁性共鳴に関する実験が示される。素子構造を系統的に変化させて得られた測定データの解析により、この系ではエルステッドトルクがスピントルク強磁性共鳴信号に支配的な寄与を与えることが明らかにされる。第 7 章では本研究のまとめと今後の展望が示される。 以上、本論文は、スピンホール効果によるスピン流生成とスピン軌道トルク測定に関する新しい知見を得たものであり、スピントロニクスの物理、工学応用に貢献するものである。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6331 号	氏 名	森谷 裕幸
主論文題名：			
Pt におけるスピン・軌道ホール効果に関する研究			
スピントロニクスの研究ではスピン角運動量の流れであるスピン流に関する量子物性の解明が重要な課題のひとつであり、物質中のスピン軌道相互作用を起源とするスピン流生成現象である異常ホール効果とスピンホール効果が注目を集めてきた。さらに近年では電子の軌道角運動量の流れである軌道流生成現象である軌道ホール効果の観測が軽金属で観測されたことを端として、軌道流量子物性の探索が行われ始めている。本研究では巨大なスピン軌道相互作用を有することからスピントロニクス分野で研究対象の中心となってきた Pt を用いて上記のスピン流・軌道流生成現象や輸送メカニズムの解明に際して新たな知見を与えることを目的としている。 本論文は全 7 章により構成される。第 1 章では序論として、スピントロニクス発展の経緯と本研究の目的について説明する。第 2 章では電子の有するスピン角運動量、軌道角運動量やこれら角運動量生成現象であるスピンホール効果、軌道ホール効果など本研究での前提知識となる理論、現象について説明する。第 3 章では、本研究における実験・解析方法について説明する。第 4 章では Co/Pt 二層膜構造と Co/TiN/Pt 二層膜構造における電流誘起トルクの比較から Co/Pt 界面における電流誘起トルクの寄与が存在し、TiN を挿入することにより界面寄与が低下することが明らかとなった。このことから強磁性/常磁性二層膜構造における電流誘起トルクから常磁性体のスピンホール効果を評価する際に界面寄与の評価も重要となることを提示した。第 5 章では酸化により絶縁化した Pt 薄膜のスピンホール効果を強磁性体/TiN/Pt 三層膜構造における電流誘起トルクから評価した。従来まで明らかとされていなかった絶縁領域でのスピンホール効果の系統的な観測によりスピンホール効果が異常ホール効果と同様のスケーリング則を絶縁領域でも有しており両効果が共通の起源により発現している可能性を明らかにした。第 6 章では Pt における電流-スピン変換現象を Fe/Pt ならびに Ni/Pt 二層膜構造での電流誘起トルクから評価した。Ni/Pt 構造では Fe/Pt 構造では発現しない Pt 膜厚増大に伴う電流誘起トルク効率の増大の振る舞いが観測され、Pt 中から生じている軌道ホール効果の寄与であることを示している。第 7 章では第 4 章から第 6 章までの研究により得られた成果を総括して説明する。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6331 号	氏 名	森谷 裕幸
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学准教授 博士（工学） 安藤 和也			
副査 慶應義塾大学教授 博士（工学） 牧 英之			
慶應義塾大学教授 博士（理学） 能崎 幸雄			
慶應義塾大学教授 博士（工学） 海住 英生			
学士（工学）、修士（工学）森谷裕幸君の学位請求論文は「Pt におけるスピン・軌道ホール効果に関する研究」と題し、全 7 章より構成される。 スピン軌道相互作用を基軸とする近年のスピン트로ニクスにおいて、スピンホール効果によるスピン流の生成とこれに付随する電流誘起トルクが重要な役割を果たしている。スピンホール効果の初観測以来、スピン트로ニクス研究の中心的な役割を担ってきた物質として Pt があり、これまでに蓄積された膨大な実験・理論データから、この重金属は単体金属の中で最も巨大なスピンホール効果を示すことが明らかになっている。したがって、Pt における角運動量輸送の微視的理解は、スピン트로ニクスにおける本質的課題である。本研究は、Pt をベースとしたスピン트로ニクス素子に注目し、電流誘起トルク生成における界面スピン軌道相互作用の役割を明らかにするとともに、ホッピング伝導領域におけるスピンホール効果を観測することに成功した。さらに、スピン流が角運動量輸送を支配すると考えられてきた Pt においても、軌道流が重要な役割を担う場合があることを明らかにした。 本論文の第 1 章は序論であり、本研究の背景と位置づけが述べられる。第 2 章では、スピンホール効果および軌道ホール効果、スピン流と磁化の相互作用に関する理論が述べられる。第 3 章では、実験方法および解析手法が述べられ、試料の作製方法とスピントルク強磁性共鳴および磁気光学カー効果を用いた電流誘起トルクの測定手法が示される。第 4 章では、標準的スピン트로ニクス素子である Co/Pt 構造における電流誘起トルクに関する実験が述べられ、Co/Pt 界面への TiN 層挿入によってトルク効率が著しく減少することが明らかにされる。これにより、Pt のスピンホール効果を上回る、界面ラシュバ・エデルシュタイン効果による電流誘起トルクへの寄与が示される。第 5 章では、酸化レベルを制御した Pt 酸化物のスピンホール効果に関する実験が示される。電流誘起トルクの測定から電気伝導度とスピンホール伝導度の関係が明らかにされ、バンド伝導領域だけでなくホッピング伝導領域においても、スピンホール効果は異常ホール効果と類似したスケーリングに従うことが示される。第 6 章では、Pt における軌道ホール効果に関する実験が述べられる。軌道流に対して強い応答を示す Ni を含む Ni/Pt 構造において、電流誘起トルク効率の特異な Pt 膜厚依存性が観測され、これがスピン流と軌道流による電流誘起トルクの競合によるものであることが明らかにされる。第 7 章では本研究のまとめと今後の展望が示される。 以上、本論文は、スピン트로ニクス研究の中心物質である Pt におけるスピンホール効果および軌道ホール効果に関する新たな知見を得たものであり、スピン트로ニクスの物理および工学応用への貢献が期待されるものである。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6332 号	氏 名	若林 大貴
主 論 文 題 名 :			
クライオ電子顕微鏡によるグルタミン酸脱水素酵素機能発現時の 過渡的準安定構造解明			
全ての生物は共通構造として細胞をもち、その中では様々な生体分子が協奏して機能することで、生命維持に関わるあらゆる素過程を支えている。従って、生体分子の機能発現機序の解明は、生命現象理解のために不可欠であり、生体分子の構造観察はその一助となる。生体分子の一種である酵素蛋白質は、基質分子や補酵素分子などのリガンドと構造内の活性サイトで特異的に結合し、構造変化を伴って酵素反応に最適な反応場を提供する。これにより基質分子を生成物へ変換する化学反応を触媒し、生体内の重要な機能に関わる。しかしながら、この機能発現過程において、リガンド結合と酵素の構造変化の相関や、酵素活性サイトへのリガンド結合過程は未だに不明な点が多く、直接観察した例は極めて少ない。 本研究では、酵素蛋白質の機能発現中動態およびそのリガンド結合との相関を解明することを目的とし、柔軟な構造変化を示す超高度好熱菌由来グルタミン酸脱水素酵素 (GDH) を対象とした構造解析を行った。酵素蛋白質 GDH は、同一のサブユニットが会合した六量体が機能単位である。水溶液中ではサブユニットを構成する一つのドメインが、89 番目トリプトファン側鎖の構造や水和水分子脱吸着と連動して大きく運動することが知られている。本研究で用いたクライオ電子顕微鏡による単粒子解析法は、大量の観察像から水溶液中に近い準安定構造を弁別可能である。これを X 線小角散乱測定で得られる溶液中の動態情報や X 線結晶構造解析から得られる高分解能な蛋白質水和構造を相補的に参照しながら用い、 (i) 酵素反応初期段階および定常段階、 (ii) 補酵素共存条件、 (iii) 89 番目トリプトファン残基のフェニルアラニン変異体の酵素反応定常段階 について GDH の構造解析を行った。反応中の GDH 構造解析では、機能発現中の準安定構造が同定されるとともに、反応段階に依存して、とりうる準安定構造数や反応経路が変化することが示唆された。補酵素共存下 GDH では、ドメイン運動がリガンド非結合時や反応中よりも狭い範囲に制限されており、特定の構造に対して補酵素が三つの準安定結合モードを経由しながら活性サイトへ進入する結合経路が同定された。変異体構造解析からは、トリプトファン残基周辺のアミノ酸側鎖配置および水和構造がドメイン運動を制御し、酵素活性へ間接的に大きく寄与することが示唆された。 以上の研究から、GDH についてリガンドの結合を含む機能発現に係る構造変化を統合的に理解することができた。この結果は、蛋白質の作用機序解明のために、作動中の構造解析が重要である一例であり、他の蛋白質への応用が期待される。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6332 号	氏 名	若林 大貴
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授 理学博士	中迫 雅由
	副査	慶應義塾大学教授 博士（理学）	渡邊 紳一
		慶應義塾大学教授 医学博士、博士（理学）	藤谷 洋平
		慶應義塾大学教授 博士（工学）	古川 良明
学士（理学）、修士（理学）若林大貴君提出の学位請求論文は、「クライオ電子顕微鏡によるグルタミン酸脱水素酵素機能発現時の過渡的準安定構造解明」と題し、本論七章より構成されている。 酵素蛋白質は細胞内で触媒作用や信号変換などを通して細胞の恒常性維持や細胞分裂といった生命現象を制御している。機能発現過程の酵素蛋白質は熱揺らぎによる動的構造変化を生じているため、生命現象を素過程レベルで正しく理解するためには、溶液中で酵素蛋白質の立体構造とその動態を可視化することが不可欠である。若林君は、溶液中酵素蛋白質の立体構造と動態を解析可能な手法として、クライオ電子顕微鏡法(Cryo-electron microscopy: cryoEM)に着目し、典型的な酵素蛋白質であるグルタミン酸脱水素酵素(glutamate dehydrogenase: GDH)を研究対象として、その酵素反応中および触媒反応時に出現する過渡的準安定構造を解明した。 第一章では、研究の学術的背景、cryoEM などの構造解析法と研究の位置づけを記述している。 第二章では、本研究で用いた cryoEM の基礎理論について、装置や解析方法をまとめている。また、補助的な構造解析法である放射光 X 線を用いた X 線小角散乱と低温 X 線結晶構造解析、および、酵素反応測定とその速度論的解析方法について、それぞれの概要を記述している。 第三章では、本研究の柱となる GDH 酵素反応中に出現する過渡的準安定構造を cryoEM によって可視化した結果を記している。GDH 酵素反応を、速度論的解析が可能な初期段階と、それに続く定常段階に分け、それぞれについて、GDH－補酵素－基質混合溶液に対する cryoEM 構造解析を行っている。反応初期状態については、四つの過渡的準安定構造が存在することを示し、そのうちの一つでは、酵素反応前後での構造を明らかにしている。また、定常段階では七つの準安定構造を得ている。これら準安定構造に基づいて、初期段階と定常段階での酵素反応の進行過程を再構築している。特筆すべきは、酵素反応速度論で提案された Michaelis 中間体が、複数の立体構造のアンサンブルであることを明らかにしたことであり、酵素蛋白質の動的構造研究における大きな成果である。 第四章では、GDH 酵素反応に不可欠な補酵素分子が、どのようにして活性中心付近に結合するのかを、GDH－補酵素混合溶液に対する cryoEM 観察で調べている。その結果、二つの結合経路が存在しうること、その片方の結合経路が酵素反応の開始させていることを明らかにしている。 第五章では、GDH 酵素反応に関わるドメイン運動を制御すると予想されたトリプトファン 89 をフェニルアラニンに置換した Trp89Phe 変異体について、リガンド非結合状態の X 線結晶構造解析を行い、置換に伴うアミノ酸残基側鎖と水和構造の変化を見出している。さらに、置換体－補酵素－基質混合溶液定常段階の cryoEM 観察から、Trp89Phe が過渡的準安定状態の出現頻度を大きく変化させて、酵素反応効率の低下を招くことを解明している。 第六章では、第三章から第五章の構造解析結果に基づき、過渡的準安定構造に基づいた反応過程に関する議論を展開して、従来の X 線結晶構造解析や酵素反応速度論からは論じえない新たな酵素反応描像を提案している。 最後の第七章では、本研究の成果を総括している。 以上、著者は、cryoEM を軸とした酵素蛋白質反応中の過渡的準安定構造の可視化について、これまでにない研究方法を提案するとともに、その有効性を示して、今後の酵素蛋白質の動的構造研究発展に向けてロードマップを示したものと評価できる。 本論文の骨子である第三～四章の内容は、各一報の学術論文として国際的な学術雑誌に公刊され、第五章の内容も掲載受理されており、これらの内容は、広く理学上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6333 号	氏 名	高田 咲良
主論文題名：			
人工細胞系を用いた細胞内反応拡散波形成原理の解明			
生物の細胞は細胞分裂や運動などの生命現象の位置情報を制御するため、反応拡散共役により出現する分子集団の時空間パターンである細胞内反応拡散波を利用している。しかし、細胞内反応拡散波はマイクロサイズの閉鎖空間における非平衡非線形の物理現象であり、理論による解析や従来の細胞解析のみではその制御機構や形成原理の理解は困難であった。本論文では、精製因子のみから構成される Min 波の人工細胞系を用いることでこの問題を克服し、細胞内反応拡散波の形成原理を追及した。 第 1 章では、細胞内の時空間パターンの役割や細胞というマイクロ閉鎖空間の特殊性をまとめると共に、生細胞や理論解析との比較から、精製因子による人工細胞内再構成系を用いた解析により反応拡散波の形成原理を理解することの重要性を説いた。 第 2 章では、細胞内反応拡散波に見られる進行波と振動波の 2 種類のモードがどのように選択されるか、その原理を調べた。波の動き方のモードを変化させる条件を探索した結果、Min 波を構成する因子である MinD および MinE の濃度、塩濃度、温度に依存して優勢な Min 波のモードが変化することを発見した。Min 波の分子メカニズムにおける役割を踏まえ、MinD の膜結合と解離のバランスにより Min 波のモードが決定されることを明らかにした。 第 3 章では、細胞内反応拡散波の波幅や波長、速度などの時空間特性の制御原理を検証した。まず、開放系である平面膜系と比較検証することで、空間サイズが Min 波の波長をスケールしていること、この波長スケールリングにより環境変動に対して形状や周期を安定的に保てることを見出した。また、Min 波がエネルギー源として ATP だけでなく dATP を利用できること、dATP 利用の場合は周期の短い波になるという発見から、ATP と dATP の混合比により、Min 波の周期を制御可能なことを明らかにした。 第 4 章では、これらの結果をまとめ、細胞内における Min 波の制御原理、そこから展開される細胞内時空間秩序の理解や分子ロボティクスへの応用について考察した。 まとめると、本論文では Min 波の人工細胞系を用い、細胞サイズ空間における反応拡散波のモードや時空間特性の制御原理を明らかにした。本研究は Min 波を含む細胞内時空間パターンの形成原理に貢献すると共に、材料科学への応用が期待される。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6333 号	氏 名	高田 咲良
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学准教授 博士（生命科学）	藤原 慶
	副査	慶應義塾大学教授 博士（理学）	加納 英明
		慶應義塾大学教授 工学博士	朝倉 浩一
		慶應義塾大学教授 博士（地球環境科学）	土居 信英
		慶應義塾大学准教授 博士（理学）	堀田 耕司
学士（理学）修士（理学）高田咲良君提出の学位請求論文は、「人工細胞系を用いた細胞内反応拡散波形成原理の解明」と題し、全4章から成っている。 生物の細胞においては、細胞分裂面や運動方向などの決定に分子の位置情報が重要であるが、そのメカニズムの1つに細胞内反応拡散波と呼ばれる分子集団の時空間パターン形成機構がある。しかし、細胞のような小さな空間は、有限要素性による保存則の効果や、表面積体積比の増大に基づき界面の効果が顕在化するなど、これまで反応拡散系の解析に用いられてきた開放系の空間とは一線を画する反応系である。さらに、細胞内反応拡散波はマイクロサイズの閉鎖空間における非平衡非線形の物理現象であり、理論による解析や従来の細胞解析のみではその制御機構や形成原理の理解は困難であった。本論文では、精製因子を用いて細胞内反応拡散波の1つでありバクテリアの細胞分裂面を決定する Min 波を人工細胞内において再構成した系を用いることでこの問題を克服し、細胞内反応拡散波の形成原理を追及した。 第1章では、細胞内における分子の時空間パターンが果たす役割や、細胞というマイクロ閉鎖空間の特殊性、反応拡散系の性質、人工細胞系の特徴をまとめると共に、生細胞や理論解析との比較から、精製因子による人工細胞内再構成系を用いた解析により反応拡散波の形成原理を理解する研究の重要性を説明している。 第2章では、細胞内反応拡散波に見られる進行波と振動波の2種類のモードがどのように選択されるかについて、人工細胞内再構成系を用いてその原理を調べた。波の動き方のモードを変化させる条件の解析を通し、Min 波を構成する因子である MinD および MinE の濃度、塩濃度、温度に依存して優勢な Min 波のモードが変化することを発見した。また、得られた結果と Min 波の分子メカニズムから、活性化因子に該当する MinD の膜結合と阻害因子に該当する MinE を介した MinD の膜解離とのバランスにより Min 波のモードが決定されることを明らかにした。 第3章では、細胞内反応拡散波の波幅や波長、速度などの時空間特性の制御原理を検証した。まず、開放系である平面膜系と比較検証することで、空間サイズが Min 波の波長をスケールしていることを導いた。また、この波長スケールリングにより環境変動に対して細胞内反応拡散波は空間サイズが変動した場合にも形状や周期を安定的に保てることを見出した。さらに、従来 Min 波の阻害剤と考えられていた dATP が、ATP 同様に Min 波発生のエネルギー源として利用されること、dATP 利用の場合は周期の短い波になることを発見した。これらの発見から、ATP と dATP の混合比を調節することで、Min 波の周期を制御可能であることを明らかにした。 第4章では、これらの結果をまとめ、細胞内における Min 波の制御原理について述べている。今後、人工細胞系を利用した解析により細胞内時空間秩序の理解がどのように進むか、得られた成果が分子ロボティクスのような応用分野へどのように波及しうるかについて考察している。 以上のように、本論文の成果は、理論解析や生物の細胞解析のみでは理解が困難であった、細胞サイズ空間における反応拡散波のモード選択や時空間特性の制御原理を明らかにしたものである。本論文は細胞内における分子の時空間パターンの形成原理の理解に貢献するものであり、生命が分子の集合体として組み立つ仕組みの理解に寄与するものである。 よって、本論文の著者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

Thesis Abstract

Registration Number	"KOU" No.6334	Name	Fontaine, Mateo Olivier Jean-Marie Michel
Thesis Title Spin-Chirality Interplay in an XXZ Ladder with Four-Spin Interaction: Duality and Topology			
I investigated the ground-state phase diagram of a spin-1/2 XXZ model with chirality-chirality interaction (CCI) on a two-leg ladder, considering both isotropic and weakly anisotropic cases. This model provides a minimal setup to explore the interplay between spin and chirality degrees of freedom and is potentially relevant for understanding the effects of four-spin ring exchange. Additionally, anisotropic interactions enable the emergence of various orders and symmetry-protected topological (SPT) phases on the ladder. Spin-chirality duality transformations allowed me to relate the regimes of weak and strong CCIs. By applying Abelian bosonization in combination with two types of spin-chirality dualities, I derived a comprehensive phase diagram. Furthermore, I developed a spin-1 hard-core bosons approach to analyze the phase structure around the self-dual line in the presence of strong anisotropy. I have also performed numerical simulations to validate the predicted phase diagrams and to examine the topological and critical properties. In the isotropic (Heisenberg) model with CCI, the phase diagram consists of the rung singlet (RS) phase, the Haldane phase, dimer phases, and a scalar chiral phase. Within the RS and Haldane phases, I identified eight distinct regions with dominant correlations in terms of spin, dimer, or chirality. In particular, the dominance of staggered and uniform vector chiral (VC) correlations in the RS phase for strong positive and negative CCIs can be interpreted as dual counterparts to the conventional Néel correlation. The introduction of weak XXZ anisotropy further enriches the phase structure within the region of positive CCI and antiferromagnetic rung interaction. Specifically, Néel and VC orders emerge for easy-axis anisotropy, while two distinct SPT phases emerge for easy-plane anisotropy. For strong anisotropy, a direct Gaussian transition occurs between Néel and VC or between the two SPT phases. Although both SPT phases can be viewed as twisted variants of the Haldane phase, I showed that they, along with the RS phase, can be distinguished by topological indices in the presence of specific symmetries. In these ways, I demonstrated that the combination of anisotropy and multi-spin interactions generates rich and diverse physics characterized by chirality and topology.			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6334 号	氏 名	Fontaine, Mateo Olivier Jean-Marie Michel	
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学専任講師	博士（理学）	古川 俊輔
	副査	慶應義塾大学教授	理学博士	江藤 幹雄
		慶應義塾大学教授	博士（理学）	能崎 幸雄
		慶應義塾大学教授	博士（工学）	渡辺 宙志
学士(科学技術医療)、修士(物理学) FONTAINE, Mateo Olivier Jean-Marie Michel 君提出の学位請求論文は、「Spin-Chirality Interplay in an XXZ Ladder with Four-Spin Interaction: Duality and Topology (4 スピン相互作用を有する XXZ 梯子系におけるスピン・カイラリティ複合効果：双対性とトポロジー)」と題し、全 6 章から構成されている。 一次元量子磁性体においては、基底状態（絶対零度）においても強い量子揺らぎによって磁気秩序が発達せず、無秩序な量子状態が形成されることがある。そのような無秩序状態は、対称性が課された下でトポロジーによって区別される種々の相に分類され、対称性で保護されたトポロジカル (symmetry-protected topological; SPT) 相と呼ばれる。スピン 1/2 が梯子状に並ぶスピン 1/2 梯子系は、銅酸化物などの対応物質が知られるとともに、その豊かな相構造から多くの理論的研究がなされてきた。そのような先行研究として、等方的 2 体 Heisenberg 相互作用におけるトポロジカル Haldane 相と自明な無秩序相の出現、異方的 2 体 XYZ 相互作用における 4 種の SPT 相と磁気秩序の競合、4 体リング交換相互作用によるダイマー、カイラル秩序・相関の出現などが挙げられる。しかし、Haldane 相以外の SPT 相は強い異方性の下で得られており、より現実的な弱い異方性の下でそれらの相が現れるか、他の相互作用と組み合わせることでさらに新しい SPT 相を得ることができるかは、学術的意義のある問題である。また、リング交換相互作用の下での多彩な秩序・相関について、スピン・カイラリティ双対性から一定の理解はなされていたものの、系統的な解析計算による相構造の理解はなされていなかった。 本論文は、このような問題意識の下、リング交換相互作用から本質を抽出したカイラリティ型 4 体相互作用を導入し、それが 2 体相互作用と競合するときの基底状態の相構造を調べたものである。カイラリティ型相互作用は、双対変換の下で単純な 2 体相互作用に置き換わるため、解析的な扱いがしやすい。また、カイラル秩序・相関を直接強める効果があるため、数値解析においても安定した結果を得ることができる。これらの利点を活かし、解析計算により広いパラメータ領域の相構造が定性的に導かれた後、数値計算による定量的な確認がなされている。 第 1 章は序論であり、SPT 相やスピン梯子系に関する先行研究がまとめられた後、本研究の動機となった問いが設定され、カイラリティ型 4 体相互作用を有する模型を研究する目的が述べられている。第 2 章では、背景知識として、量子スピン系の自発的対称性の破れ、SPT 相、行列積状態、トポロジカル指数、数値計算手法などがまとめられている。第 3 章では、ボゾン化による場の理論と 2 種類の双対性による基底状態相図の解析がなされている。相互作用が等方的な場合について、4 体相互作用により種々のカイラル秩序・相関が誘起される豊かな相構造が導かれている。また、弱い異方性によって 2 種類の SPT 相が誘起され、そのうちの一つ (c-Haldane*相) が時間反転対称性の下で既知の相と区別される新種のものであることが示されている。第 4 章では、スピン模型を有効ボゾン模型に書き直すことにより、自己双対面や容易軸・容易面領域における相構造が解析されている。第 5 章では、密度行列繰り込み群などによる数値計算結果がまとめられ、前章までに定性的に導かれた相図が確認されるとともに、トポロジカル指数の計算によって 2 つの SPT 相と自明相が明確に区別されるものであることが示されている。第 6 章は結論であり、本研究の成果が総括され、今後の展望が述べられている。 本研究は、量子磁性分野における重要なテーマであるカイラル秩序、トポロジカル相、多スピン相互作用に関する諸問題を理論的に解明しており、基礎研究として大きな意義がある。よって、本論文の著者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める。				

内容の要旨

報告番号	甲 第 6335 号	氏 名	下村 将基
主論文題名：			
AGE 思考モデルに基づく機械学習を用いたテキスト画像生成システム			
近年注目されているインダストリー5.0によるものづくりは、工場での自動生産技術による大量生産だけではなく、ステークホルダーのネットワーク化によるカスタマイズ生産の実現を目指している。カスタマイズ生産のためのデザインでは、ユーザの多様なニーズを反映したデザイン案を導出するために、機械学習により多様なデザイン案を自動的に導出するシステムが注目されている。同システムは、学習データに類似する多数のデザイン案を短時間で導出するうえで有効であるものの、多数の類似するデータに倣った凡庸なデザイン案や、虚偽やバイアスのあるデータに倣った不適切なデザイン案を導出する課題がある。このため、機械学習を用いたデザインにおいては、ヒト（デザイナー）が適切に介入し共創することが肝要である。本研究では、テキストをデザイン対象として、デザイン思考モデルの1つである Analysis Generation Evaluation 思考モデル（以下、AGE 思考モデル）に基づいて機械学習とヒトの共創の方法（機械学習とヒトの役割分担）を検討するとともに、それを応用したテキスト画像生成システムを構築することを目的とした。その方法として、まず、デザイン案導出における機械学習の効果と有用な提示情報について検討した。次に、AGE 思考モデルを用いて、分析と発想を機械学習が、評価をヒトがそれぞれ分担する、機械学習とヒトの共創の方法を提案した。最後に、機械学習とヒトの共創の方法に基づいて、ユーザの多様なニーズを反映したデザイン案を導出するシステムを構築した。 第1章では、機械学習を用いた既存のデザイン手法の課題を述べ、機械学習とヒトの共創と、それに基づくユーザの多様なニーズを反映したデザイン案を導出するシステムの必要性を示した。 第2章では、デザイン対象に関するテキストまたは画像情報を機械学習で選定し提示するアイデア発想支援システムの試作と、それを用いた有用性検証実験について述べた。実験の結果、機械学習および画像情報を用いる条件において、デザイン案の数が多くかつ創造性評価（流暢性、柔軟性、独創性）が高くなること、すなわち、機械学習および画像情報の有用性を示した。 第3章では、画像情報を参考にデザイン案を導出することが多いテキストをデザイン対象とするとともに、機械学習とヒトの共創の方法について AGE 思考モデルを用いて検討した。具体的には、主に帰納推論と仮説推論を用いる分析、主に仮説形成を用いる発想、主に演繹推論を用いる評価のそれぞれの思考におけるヒトと機械学習の利点・欠点を明らかにすることで、分析と発想を機械学習が行い評価をヒトが行う役割分担の優位性を示した。 第4章では、第3章で示した機械学習とヒトの共創の方法に基づく2つのテキスト画像生成システムの構築と、それらの木目調テキストデザインへの事例適用について述べた。両システムは、テキスト画像（学習データ）の画像特徴量と、多数または個々のユーザによる感性価値の官能評価を、重回帰分析またはクラスター分析によりモデル化するとともに、同モデルに基づいて抽出した学習データを用いて DCGAN がデザイン案の生成を行う。事例適用の結果、両システムが生成した木目調テキスト画像の官能評価値が、機械学習のみを用いたシステムの評価値よりも高くなること、すなわち、機械学習とヒトの共創に基づくシステムの有用性を示した。 第5章では、各章で得られた内容を総括し、本研究の成果および将来の展望について述べた。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6335 号	氏 名	下村 将基
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学准教授	博士（工学） 加藤 健郎
	副査	慶應義塾大学教授	博士（情報理工学） 尾上 弘晃
		慶應義塾大学教授	工学博士 萩原 将文
		慶應義塾大学教授	博士（工学） 竹村 研治郎
		慶應義塾大学名誉教授	博士（工学） 松岡 由幸
学士（工学）、修士（工学）下村将基君提出の学位請求論文は「AGE 思考モデルに基づく機械学習を用いたテキスト画像生成システム」と題し、5 章から構成されている。 インダストリー5.0 が目標とする、ステークホルダーのネットワーク化とそれによるカスタマイズ生産の実現のために、機械学習によりユーザの多様なニーズを反映したデザイン案の自動生成システムが注目されている。同システムは、ヒト（デザイナー）を介さずに多数のデザイン案を短時間で導出する点で有用であるものの、類似する学習データに倣った凡庸なデザイン案や、虚偽やバイアスを含む学習データに倣った不適切なデザイン案を生成する課題がある。本研究では、テキストをデザイン対象として、機械学習とヒトが共創するための適切な役割分担を明らかにするとともに、それに基づくテキスト画像生成システムを構築している。 第1章では、機械学習を用いた既存のデザイン手法の課題を述べ、機械学習とヒトの共創と、それに基づくユーザの多様なニーズを反映したデザイン案を導出するシステムの必要性を示している。 第2章では、デザイン対象に関するテキストまたは画像情報を機械学習で選定し提示するアイデア発想支援システムの試作と、それを用いた有用性検証実験について述べている。実験の結果、機械学習および画像情報を用いる条件において、デザイン案の数が多くかつ創造性評価（流暢性、柔軟性、独創性）が高くなること、すなわち、機械学習および画像情報の有用性を示している。 第3章では、画像情報を参考にデザイン案を導出することが多いテキストをデザイン対象とするとともに、機械学習とヒトの共創の方法について AGE 思考モデルを用いて検討している。具体的には、主に帰納推論と仮説推論を用いる分析、主に仮説形成を用いる発想、主に演繹推論を用いる評価のそれぞれの思考におけるヒトと機械学習の利点・欠点を明らかにすることで、分析と発想を機械学習が行い評価をヒトが行う役割分担の優位性を示している。 第4章では、第3章で示した機械学習とヒトの共創の方法に基づく2つのテキスト画像生成システムの構築と、それらの木目調テキストデザインへの事例適用について述べている。両システムは、テキスト画像（学習データ）の画像特徴量と、多数または個々のユーザによる感性価値の官能評価を、重回帰分析またはクラスター分析によりモデル化するとともに、同モデルに基づいて抽出した学習データを用いて DCGAN がデザイン案の生成を行う。事例適用の結果、両システムが生成した木目調テキスト画像の官能評価値が、機械学習のみを用いたシステムの評価値よりも高くなること、すなわち、機械学習とヒトの共創に基づくシステムの有用性を示している。 第5章では、各章の総括と、本研究の成果および将来の展望について述べている。 以上要するに、本論文は、テキストをデザイン対象とし、AGE 思考モデルに基づいて検討した機械学習とヒトの共創の方法に基づくデザインシステムを構築したものであり、デザイン科学の分野において工学上、工業上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6336 号	氏 名	福崎 翔太
主論文題名：			
深層学習における二次元畳み込みフィルタの生成に関する研究			
画像処理分野では近年深層学習が広く用いられる．深層学習によって高精度な画像処理モデルを獲得するためには，学習データセットの大規模化や，畳み込みをはじめとした計算モジュールの受容野の拡大が有効であることがわかってきたが，限られたデータや計算資源を用いて高精度に処理可能なモデルを学習することも重要である．本研究では，強い制約によって少数のデータによる学習を得意とする二次元畳み込みに着目し，畳み込みフィルタの生成によって精度や学習速度を改善する方法を提案した．畳み込みフィルタは通常学習可能なパラメータを縦横決まった数並べたものとして表現されるが，フィルタの重み値を計算で求めることによって精度や学習速度を改善することができることを示している． 第1章に，画像処理における二次元畳み込みの特徴と近年の利用状況に関する背景を概説し，研究目的と概要を述べた． 第2章では，畳み込みの定義や性質について概説したのち，本研究の主題である畳み込みフィルタの生成に関する共通事項として，学習アルゴリズムや計算コストの取り扱いを述べた． 第3章では，従来の畳み込みフィルタが潜在的に仮定している標準基底とは異なる新たな成分系を導入し，その系の成分の線形結合によってフィルタを生成することを試みた．学習済みの畳み込みフィルタの主成分を分析し，重み付き直交性を持つ Hermite 多項式を用いた成分系の定式化を行った．また，成分系における主成分の選択方法や各成分の係数の初期化に関する工夫を行った．これにより，提案した成分系の線形結合として生成されたフィルタはパラメータ数を削減しながら精度を維持できることが示された． 第4章では，処理する画像の大きさに合わせてフィルタを生成することを試みた．また，画像の大きさによらず共通のパラメータを用いることにより，小さい画像を用いた学習を実現した．従来であれば処理したい画像の大きさに学習をする必要があったが，これにより学習過程における計算コストが低くなる．また，この学習方法においては従来の学習方法よりも精度が劣化する傾向にあるが，要因を分析し改善案を提案した．これらの改善案を導入することにより，精度の劣化を引き起こすことなく高速に深層学習モデルの学習を行うことが可能であると示された． 第5章に結論として本研究の成果を要約し，今後の展望を述べた．			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6336 号	氏 名	福崎 翔太
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学教授 工学博士 池原 雅章			
副査 慶應義塾大学教授 工学博士 萩原 将文			
慶應義塾大学教授 博士（工学） 青木 義満			
慶應義塾大学教授 博士（工学） 久保 亮吾			
学士（工学）、修士（工学） 福崎翔太君提出の学位請求論文は「深層学習における二次元畳み込みフィルタの生成に関する研究」と題し、5章から構成されている。 近年、画像処理分野では深層学習が広く用いられており、深層学習によって高精度な画像処理モデルを獲得するためには、学習データセットの大規模化や、畳み込みをはじめとした計算モジュールの受容野の拡大が有効であることがわかってきた。一方限られたデータや計算資源を用いて高精度にモデルを学習することは重要である。本研究では、強い制約によって少数のデータによる学習を得意とする二次元畳み込みに着目し、畳み込みフィルタの生成によって精度や学習速度を改善する方法を提案している。畳み込みフィルタは行列として表現されるが、フィルタの重み値を計算で求めることによって精度や学習速度を改善できることを示している。さらに処理する画像の大きさに合わせてフィルタを生成することにより、精度を劣化させることなく高速な学習を可能としている。 第1章では、画像処理における二次元畳み込みの特徴と近年の深層学習に関する背景を概説し、研究目的と概要を述べている。 第2章では、畳み込みの定義や性質について概説したのち、本研究の主題である畳み込みフィルタの生成に関する共通事項として、学習アルゴリズムや計算コストの取り扱いを述べている。 第3章では、従来の畳み込みフィルタが潜在的に仮定している標準基底とは異なる新たな成分系を導入し、その系の成分の線形結合によってフィルタを生成することを試みている。学習済みの畳み込みフィルタの主成分を分析し、重み付き直交性を持つ Hermite 多項式を用いた成分系の定式化を行う。また、成分系における主成分の選択方法や各成分の係数の初期化に関する工夫を行う。これにより、提案した成分系の線形結合として生成されたフィルタはパラメータ数を削減しながら精度を維持できることを示している。 第4章では、処理する画像の大きさに合わせてフィルタを生成することを試みている。画像の大きさによらず共通のパラメータを用いることにより、小さい画像を用いた学習を実現する。従来であれば処理したい画像の大きさで学習をする必要があるが、膨大な計算コストを必要とする。提案する学習方法においては従来の学習方法よりも精度が劣化する傾向にあるが、その要因を分析し、新たに改善案を導入することにより、精度の劣化を引き起こすことなく高速に深層学習モデルの学習を行うことが可能であることを示している。 第5章に結論として本研究の成果を要約し、今後の展望を述べている。 以上要するに、本研究は深層学習における二次元畳み込みフィルタの生成法を提案したものであり、従来法に比べ学習パラメータを削減しながら高速な学習を可能としており、画像工学分野において工学上、工業上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6337 号	氏 名	木下 遼太
主論文題名：			
ポリマー光導波路の Co-Packaged Optics への応用に関する研究			
近年のインターネットを基盤とする情報化社会の進展により、データセンタ内ネットワークの伝送容量や消費電力が急速に増大している。そのため、従来の電気配線と比較して広帯域かつ低消費電力伝送を可能とする光ファイバリンクの導入が望まれている。特に、近年では Co-Packaged Optics と呼ばれる光素子の実装形態が注目を集めているが、実現のための課題に、シリコン導波路・光ファイバ間の接続技術の確立が挙げられる。両伝送路コア内の伝搬モードプロファイルの違いに起因する接続損失を低減するため、ポリマー光導波路のスポットサイズ変換素子応用が期待を集めている。しかしながら、熱源となる電子・光部品が多数実装されるデータセンタのラック内では、このポリマー光導波路が高温環境下で安定動作することが必要となる。一般に有機ポリマー材料は耐熱性が低いとみなされ、ポリマー光導波路の導入障壁となっていた。そこで本研究では、Co-Packaged Optics への応用に向けて、ポリマー光導波路と他の光素子間で生じる接続損失、ならびにその温度依存性に着目した。導波シミュレーションにより、低接続損失となるポリマー光導波路構造を設計し、その設計に基づいて実際にポリマー光導波路を作製して光学特性評価を行った。特に、ポリマー光導波路に、分布屈折率 (Graded-index : GI) 型コアを想定した計算により、ポリマー光導波路・シリコン導波路間およびポリマー光導波路・シングルモード光ファイバ (SMF) 間接続損失低減に対する GI 型コアの優位性を提案した。 第 1 章では、本研究の背景を概説し、本研究の目的を示した。 第 2 章では、光信号伝送路となる光ファイバおよび光導波路の種類と特性をまとめた。 第 3 章では、ポリマー光導波路の作製法について説明した後、矩形階段屈折率 (Step-Index : SI) 型コアを形成可能な直接露光法、水平 GI 型コアを形成可能なフォトリソ法を応用して、複数の異なるコア幅を有するポリマー光導波路を作製した。得られた光導波路の光学特性（シングルモード動作、伝搬モードプロファイルなど）を測定し、シミュレーション結果と比較することで、最適ポリマー光導波路コア構造について考察した。 第 4 章では、SMF と SiO₂ 光導波路との間にポリマー光導波路を挿入した光リンクを想定し、それらの接続損失を計算した。ポリマー光導波路のコアサイズおよび開口数を最適化することで、ポリマー光導波路両端の接続損失合計値が、屈折率分布によらず 1.0 dB 以下となり、ポリマー光導波路の挿入が、接続損失面で有効となることを示した。 第 5 章では、ポリマー材料の線膨張係数と屈折率温度依存性のパラメータを導入して、第 4 章で算出した接続損失の温度依存性を計算した。その結果、実環境温度より相当に高温 (150 °C) の条件であっても、最適に設計されたコアにより、ポリマー光導波路は、低接続損失を維持することを理論的に導出した。さらに、アディバティブ結合によるポリマー導波路・シリコン導波路間接続損失温度依存性について計算し、広い温度範囲で低損失を維持することを示した。 第 6 章は、ポリマー光導波路・光学素子間接続の低損失化、および高温下での低接続損失の維持方法について総括している。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6337 号	氏 名	木下 遼太
論文審査担当者：			
主査	慶應義塾大学教授	博士（工学）	石樽 崇明
副査	慶應義塾大学教授	博士（工学）	津田 裕之
	慶應義塾大学教授	博士（理学）	渡邊 紳一
	慶應義塾大学准教授	工学博士	二瓶 栄輔
学士（工学）、修士（工学）木下遼太君提出の学位請求論文は「ポリマー光導波路の Co-Packaged Optics への応用に関する研究」と題し、6 章から構成されている。 近年、データセンタ内ネットワークの伝送容量や消費電力が急増しており、従来の電気配線と比較して広帯域かつ低消費電力伝送を可能とする光ファイバリンクの導入が進んでいる。特に昨今、Co-Packaged Optics と呼ばれる光素子の実装方式が検討され、シリコン導波路・シングルモード光ファイバ（SMF）間の接続技術が課題となっている。その課題解決のためにポリマー光導波路の応用が期待されており、その実現には、高温環境下でのポリマー光導波路の安定動作が求められる。そこで本研究では、ポリマー光導波路と他の光素子間で生じる接続損失、およびその温度依存性に着目している。具体的には、理論解析を用いて、低接続損失を示すポリマー光導波路構造を設計し、その設計に基づいてポリマー光導波路を作製して、光学特性を評価している。 第 1 章では、本研究の背景を概説し、本研究の目的を示している。 第 2 章では、信号伝送路となる光ファイバ、光導波路の種類と特性をまとめている。 第 3 章では、ポリマー光導波路の作製法について説明した後、階段屈折率型矩形コアを形成可能な直接露光法、水平方向にのみ分布屈折率型矩形コアを形成可能なフォトリソ法を応用して、様々な構造を有するポリマー光導波路を作製している。得られた光導波路の光学特性を実測し、シミュレーション結果と比較することで、ポリマー光導波路の最適コア構造について考察している。 第 4 章では、SMF と SiO_x 光導波路の間にポリマー光導波路を挿入する実装形態を想定し、各接続損失を計算している。ポリマー光導波路のコアサイズおよび開口数を最適化することで、ポリマー光導波路両端の接続損失合計値を 1.0 dB 以下に低減できることを示し、接続損失面で、ポリマー光導波路挿入の有効性を明らかにしている。 第 5 章では、ポリマー材料の線膨張係数と屈折率温度依存性のパラメータを導入して、第 4 章で算出した接続損失の温度依存性を計算している。その結果、実環境温度に比べて、相当に高温となる条件（150℃）下でも、最適に設計されたコアにより、ポリマー光導波路が低接続損失を維持できることを理論的に導出している。さらに、アディバティブ結合によるポリマー光導波路・シリコン導波路間接続損失の温度依存性について計算し、広い温度範囲で低損失を維持できることを示している。 第 6 章では、ポリマー光導波路・光学素子間接続の低損失化、および高温下での低接続損失の維持方法について総括している。 以上要するに、本論文では、Co-Packaged Optics 応用に向けて、ポリマー光導波路に求められる特性を明らかにするとともに、ポリマー光導波路がとるべき最適構造を導出し、それらの実現可能性に関して理論と実験の双方からその有効性を実証しており、光通信工学、高分子科学分野において、工学上、工業上寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6338 号	氏 名	鈴木 智之
主論文題名：			
Efficient Video Recognition with Transformers: Tackling the Redundancy in Video (Transformer を用いた効率的動画認識：動画の冗長性への取り組み)			
動画は実世界の連続的な時間の流れの中で観測される視覚データである。コンピュータビジョン分野において、動画から解釈可能な情報を抽出する動画認識は、行動解析、危険予測、動画検索など、幅広い応用をもつ基盤技術として注目されている。一方で、その計算コストの大きさが実用や研究の障害となっている。我々は映写機の時代から、動画を画像の系列として表現・可視化してきた。そして現代の動画認識技術の主流は、同じようにコンピュータに動画を画像の系列として処理させている。しかし、動画の時間的連続性を考慮すると、動画の微小時間区間における変化は非常に小さく、これをすべて同等に処理することは非常に冗長であると考えられる。 本論文では、動画の冗長性を削減することで、動画認識の効率化を目指す。近年、動画認識において高い性能を示している Transformer をベースとするモデルを想定し、それらの内部で処理される冗長なトークンを検出・除外し、動画認識を効率化する手法を提案する。すべての時刻が観測可能なオフライン動画認識と、動画が刻一刻と観測されるオンライン動画認識の二つのシナリオに適した手法をそれぞれ提案した。いずれの設定においても、広範な実験を行い、提案手法により精度を維持しつつ、動画認識の速度を大幅に向上させることを実証した。 第1章では、動画や動画認識、動画の冗長性に関する問題を提起し、本論文の研究課題と貢献を示す。 第2章では、動画認識の歴史とその効率化の試みについて概説し、その歴史的な流れの中で本研究の位置付けを明らかにする。 第3章では、本研究の基盤となる Transformer とそれを用いた動画特徴抽出についての予備知識を説明する。 第4章では、オフライン動画認識において、動画の圧縮情報を活用して冗長トークンを検出・除外する手法を提案する。オフライン動画認識のベンチマークである行動認識において評価を行い、その効果を実験的に示す。 第5章では、圧縮情報が利用できないオンライン動画認識において、過去の情報を参照して現時刻フレームの冗長トークンを検出し、過去情報を再利用することでそれらの情報処理をスキップする手法を提案する。さらに削減対照を入力トークンだけでなく中間トークンに拡張する。オンライン動画認識における複数のタスクで評価を行い、その効果を実証する。 第6章では、本論文を総括し、今後の展望について議論する。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6338 号	氏 名	鈴木 智之
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学教授 博士（工学） 青木 義満			
副査 慶應義塾大学教授 工学博士 池原 雅章			
慶應義塾大学教授 博士（工学） 杉本 麻樹			
慶應義塾大学専任講師 博士（工学） 吉岡 健太郎			
学士（工学）、修士（工学）鈴木智之君提出の学位請求論文は「Efficient Video Recognition with Transformers: Tackling the Redundancy in Video」（Transformer を用いた効率的動画認識：動画の冗長性への取り組み）と題し、6 章から構成されている。 動画は実世界の連続的な時間の流れの中で観測される視覚データである。コンピュータビジョン分野において、動画から解釈可能な情報を抽出する動画認識は、行動解析、危険予測、動画検索など、幅広い応用をもつ基盤技術として注目されている。一方で、その計算コストの大きさが実応用上の障害となっているのが現状である。我々は映写機の時代から、動画を画像の系列として表現・可視化してきた。そして現代の動画認識技術は、同じようにコンピュータに動画を画像の系列として順次処理させるのが主流である。しかし、動画の時間的連続性を考慮すると、動画の微小時間区間における変化は非常に小さく、これをすべて同等に処理することは非常に冗長であると考えられる。 本論文は、動画の冗長性に着目し、それを削減することで、動画認識の効率化を目指している。近年、動画認識において高い性能を示している Transformer をベースとするモデルを想定し、それらの内部で処理される冗長なトークンを検出・除外することで、動画認識を効率化する手法を提案している。すべての時刻が観測可能なオフライン動画認識と、動画が刻一刻と観測されるオンライン動画認識の二つのシナリオに適した手法をそれぞれ提案している。いずれの設定においても、広範な実証実験を行い、提案手法によって精度を維持しながら、動画認識の処理速度を大幅に向上可能であることを示している。 第 1 章では、動画や動画認識、動画の冗長性に関する問題を提起し、本論文の研究課題と貢献を示している。 第 2 章では、動画認識の歴史とその効率化の試みについて概説し、その歴史的な流れの中で本研究の位置付けを明らかにしている。 第 3 章では、本研究の基盤となる Transformer とそれを用いた動画特徴抽出についての予備知識を説明している。 第 4 章では、オフライン動画認識において、動画の圧縮情報を活用して冗長トークンを検出・除外する手法を提案している。オフライン動画認識のベンチマークである行動認識において評価を行い、その効果を実験的に示している。 第 5 章では、圧縮情報が利用できないオンライン動画認識において、過去の情報を参照して現時刻フレームの冗長トークンを検出し、過去情報を再利用することでそれらの情報処理をスキップする手法を提案している。さらに削減対照を入力トークンだけでなく、中間トークンに拡張する手法を提案している。オンライン動画認識における複数のタスクにおいて提案手法の評価を行い、その有効性を実証している。 第 6 章では、本論文を総括し、今後の展望について議論している。 以上要するに、本論文は、コンピュータビジョンにおける動画認識タスクを対象に、動画の冗長性に着目することで、Transformer を用いた動画認識モデルの効率化を実現したものであり、画像工学分野において、工学上、工業上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6339 号	氏 名	么 振鐸
主論文題名： Local Mechanical Characterization and Fracture Prediction Modeling for Resistance Spot-Welded Joints of Advanced High-Strength Steel Sheets (高張力鋼板の抵抗スポット溶接部における 局所力学特性評価と破壊予測手法の構築)			
自動車車体構造に用いられている高張力鋼板は、スポット溶接部周辺の熱影響部に焼きなまし軟化が生じる。そのため、軟化部を考慮した強度予測が重要であるが、局所的な力学的特性が明確にはなっていなかった。本研究では、微小引張・せん断試験および硬さ試験から、高張力鋼板におけるスポット溶接部の局所的な力学的特性を求め、さらに、それらの相関関係を導出した。また、応力三軸度依存の破断クライテリアの推定手法を構築し、種々の応力状態下におけるスポット溶接部の破壊挙動を高精度に予測する手法を提案した。 第1章は序論であり、本研究の背景と先行研究を概説し、本研究の目的や概要を明示した。 第2章では、微小圧子押し込み試験および微小引張試験を通じて、ビッカース硬さと引張強度および最大応力時のひずみとの関係式を導出した。そして、スポット溶接部周囲の熱影響部における局所力学特性および応力三軸度依存型破壊クライテリアを同定し、有限要素解析に組み込むことで、スポット溶接された3種類の鋼板に対して、き裂発生および進展挙動を再現することができ、最大応力を6.3%以内、破断ひずみを17.2%以内で予測できることを示した。 第3章では、スポット溶接部周囲の熱影響部におけるせん断破壊挙動に着目し、せん断破壊を再現するような試験片形状および試験方法を提案した。そして、スポット溶接部から採取した微小試験片によるせん断試験を実施し、せん断負荷下における局所的な力学特性を明らかにした。さらに、第2章で提案した手法をもとに、材料の硬さから、加工強度係数および加工硬化指数を推定する実験式を導出し、有限要素解析に組み込むことで、スポット溶接された3種類の鋼板に対して、最大応力を5.4%～13.5%以内の精度で予測できることを示した。 第4章では、新たに多軸引張応力下での微小引張試験を行い、高応力三軸度下でのスポット溶接部周囲の熱影響部の破壊クライテリアを明らかにした。そして、せん断状態、単軸引張状態および多軸引張状態の微小引張・せん断試験をもとに、広範囲の応力三軸度に適用可能な応力三軸度依存型破壊クライテリアを決定した。そして、スポット溶接された3種類の鋼板に対して、せん断引張試験および十字引張試験を実施し、最大応力が7.2%、および最大荷重10.2%以内で予測できることを示した。 第5章では、各章で得られた結果と結論を総括し、本研究の結論と今後の展望についてまとめた。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6339 号	氏 名	么 振鐸
論文審査担当者：			
主査	慶應義塾大学教授	博士（工学）	大宮 正毅
副査	慶應義塾大学教授	工学博士	小茂島 潤
	慶應義塾大学教授	博士（工学）	閻 紀旺
	大阪大学教授	工学博士	麻 寧緒
学士（工学）、修士（工学）么振鐸君提出の学位請求論文は「Local Mechanical Characterization and Fracture Prediction Modeling for Resistance Spot-Welded Joints of Advanced High-Strength Steel Sheets（高張力鋼板の抵抗スポット溶接部における局所力学特性評価と破壊予測手法の構築）」と題し、5章から構成されている。 自動車車体構造に用いられている高張力鋼板は、スポット溶接部周辺の熱影響部に焼きなまし軟化が生じる。そのため、軟化部を考慮した強度予測が重要であるが、スポット溶接部周辺の局所的な力学特性が明確になっていない。そこで本研究では、微小引張試験、微小せん断試験および硬さ試験から、高張力鋼板におけるスポット溶接部の局所的な力学特性を明らかにし、加えて、応力三軸度依存型破壊クライテリアを導入することで、種々の応力状態下におけるスポット溶接部の破壊挙動を高精度に予測する手法を構築している。 第1章では、研究の背景と目的を述べ、従来の研究を概説している。 第2章では、微小圧子押し込み試験および微小引張試験を通じて、ビッカース硬さと引張強度および最大応力時のひずみとの関係式を導出している。また、スポット溶接部周囲の熱影響部における局所力学特性および応力三軸度依存型破壊クライテリアを同定し、有限要素解析に組み込むことで、スポット溶接された3種類の高張力鋼板に対して、き裂発生および進展挙動を再現し、最大応力を6.3%以内、破断ひずみを17.2%以内で予測できることを示している。 第3章では、スポット溶接部周囲の熱影響部におけるせん断破壊挙動に着目し、せん断破壊を再現する試験片形状および試験方法を提案している。また、スポット溶接部から採取した微小試験片に対してせん断試験を実施し、せん断負荷下における局所的な力学特性を明らかにしている。さらに、第2章で提案した手法をもとに、材料の硬さから、加工強度係数および加工硬化指数を推定する実験式を導出し、有限要素解析に組み込むことで、スポット溶接された3種類の高張力鋼板に対して、最大応力を13.5%以内の精度で予測できることを示している。 第4章では、新たに多軸引張応力下での微小引張試験を行い、高応力三軸度下でのスポット溶接部周囲の熱影響部の破壊クライテリアを明らかにしている。また、せん断状態、単軸引張状態および多軸引張状態の微小引張試験および微小せん断試験から、広範囲の応力三軸度に適用可能な応力三軸度依存型破壊クライテリアを決定している。加えて、スポット溶接された3種類の高張力鋼板に対して、せん断引張試験および十字引張試験を実施し、最大応力が7.2%、および最大荷重10.2%以内で予測できることを示している。 第5章では、各章で得られた結果と結論を総括し、本研究の結論と今後の展望についてまとめている。 以上要するに、本論文では高張力鋼板の抵抗スポット溶接部における局所力学特性を明らかにするとともに、それをもとに抵抗スポット溶接部の破壊予測手法を構築しており、自動車工学および材料強度学分野において、工学上、工業上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

Thesis Abstract

Registration Number	"KOU" No.6340	Name	Pineda Sánchez, Alejandro Juan
Thesis Title Identifying Community Places by Mapping Subjective Perceptions: A Case Study of Tokyo's Peripheries			
Metropolitan peripheries worldwide are facing new social and spatial challenges. After WWII, many metropolitan regions experienced rapid economic growth that triggered the hasty expansion of their peripheries over rural land to accommodate a growing population. As a result, the peripheries of these metropolitan areas transformed into sprawl: a patchy, scattered, and discontinuous urban form that often lacks clear community spaces. In addition, today, these peripheries face worsening factors like demographic decline and aging. Although these peripheries are often considered unstructured sprawl, there are spaces used informally by residents that function as community places. This thesis aims to identify these places and shed light on their character by mapping the residents' subjective perceptions. It focuses on Tokyo as a metropolis with hastily developed peripheries grappling now with the effects of population decline, a phenomenon expected to happen in many other countries in the coming decades. This thesis, organized in the following five chapters, maps community places in two peripheral cities facing these challenges. Chapter 1 introduces the research background, aims, and relevance. It also describes the thesis methodology, the selection of case studies, and the thesis structure. Chapter 2 addresses the urban growth of Tokyo's peripheries after WWII, the configuration of their urban fabric, and their current population decline through morphological and statistical maps. Chapter 3 features the first case study: Chōfu (Tokyo Prefecture). It develops a methodology to trigger conversations with local stakeholders about the places they feel attached to and could be considered community places. The results indicate that although Chōfu is usually considered a bedroom town with weak community life, there are specific places that local stakeholders consider relevant as community places, particularly informal gathering spaces like urban farms, undertrack spaces, and markets. Chapter 4 presents the second case study: Minamiashigara (Kanagawa Prefecture). Through in-depth interviews with local stakeholders, it maps relevant places neglected by tourism maps that nevertheless play a crucial role in the residents' everyday lives, like informal small green spaces between buildings and formerly abandoned houses renovated into restaurants. Chapter 5 comprises discussions and conclusions. It confirms the effectiveness of analyzing subjective perceptions of place to achieve two goals in peripheral areas: identifying community places—primarily small, informal, and seemingly ordinary gathering places—and unveiling urban nodes and structures. The chapter discusses the potential and challenges of these community places. They can play a vital role in the revitalization plans of Tokyo's peripheries, particularly those facing population decline. However, they also face challenges, such as limited access to public transportation and insufficient resources for maintenance. This section references theories from other national contexts and connects the situation in Tokyo to international urban literature, suggesting that the method of identifying community places and the ensuing discussions can serve as a reference for developing revitalization plans in other metropolitan peripheries worldwide.			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6340 号	氏 名	Pineda Sánchez, Alejandro Juan
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学准教授 博士（工学） アルマザン カバジェーロ，ホルヘ			
副査 慶應義塾大学専任講師 博士（工学） 佐野 哲史			
東京大学大学院教授 博士（環境学） 岡部 明子			
アリカンテ大学教授 Ph.D.（都市計画） マルティ・シリキアン，パブロ			
修士（工学）、ピネダ サンチェス, アレハンドロ フアン君提出の学位請求論文は「Identifying Community Places by Mapping Subjective Perceptions: A Case Study of Tokyo's Peripheries（主観的認識のマッピングを用いたコミュニティ空間の特定方法に関する研究：首都圏郊外を事例として）」と題し、5章からなっている。 世界中の大都市圏郊外は、新たな社会的・空間的課題に直面している。第二次世界大戦後、多くの大都市圏は急速な経済成長を遂げ、人口増加に伴い市街地が農地に侵食することで拡大した。その結果、これらの大都市圏の一つである首都圏の市街地は、明確なコミュニティ空間を持たないまま散在し、無秩序にスプロール化した都市形態へと変貌した。さらに現在、首都圏は人口減少や高齢化にも直面している。首都圏はしばしば無秩序なスプロールとみなされるが、住民がインフォーマルに使用するコミュニティ空間もある。本論文は、住民の主観的な認識を地図化することで、そうした空間を特定し、その特性を明らかにすることを目的としている。将来他国でも進行が予想される人口減少の影響に取り組む大都市圏の事例として、急速に発展した首都圏に焦点を当てる。本論文はこれらの課題に直面する2つの大都市圏周縁部におけるコミュニティ空間を地図化する。 第1章では、研究の背景、目的、意義、貢献を紹介し、論文の方法論、ケーススタディの選定、論文構成の概要を説明する。 第2章では、第二次世界大戦後の日本の首都圏の都市成長、その都市構造の形成、現在の人口減少を統計データと地図を用いて考察する。 第3章では、第1のケーススタディとして東京都調布市を取り上げ、地元のステークホルダーとの会話を引き出すための手法を開発し、コミュニティ空間として扱える彼らが愛着を感じる場所を探る。調布市はベッドタウンとみなされがちだが、地元のステークホルダーがコミュニティ空間として重要視している場所があり、特に都市農園、高架下空間、市場といったインフォーマルなコミュニティ空間が含まれている。 第4章では、神奈川県南足柄市を第2のケーススタディとして紹介し、地元のステークホルダーへのインタビューを通じて、観光地図には記載されていないが日常生活で重要な役割を果たしている場所を地図化する。これには、小さな緑地や、レストランとして改装された空き家などが含まれる。 第5章では、考察と結論を述べる。本章では、大都市圏郊外における場所の主観的な認識分析が、コミュニティ空間（主に小規模でインフォーマルかつ一見するとごく普通の集会所）の特定と、ノードや都市構造の解明という2つの目的に有効であることがわかる。また、これらのコミュニティ空間が持つ可能性と課題を考察し、特に人口減少に直面する首都圏郊外の都市再生計画においての重要な役割を考察しながら、公共交通機関へのアクセスが限られていることや、維持管理のための資源が不足しているといった課題も述べられている。東京の状況を国際的な都市研究文献と関連付けることで、コミュニティ空間を特定する方法とそれに続く考察が、世界中の他の大都市圏郊外の活性化計画策定の参考となりうることを示唆している。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6341 号	氏 名	田村 正樹
主論文題名： Development of Orientation-Birefringence-Controlled Optical Polymers via Synthesis and Combination of Bottlebrush Polymers (ボトルブラシポリマーの合成と複合化による光学ポリマーの配向複屈折制御とその応用)			
高性能なスマートフォンのカメラでは、高解像度の画像を得るために、配向複屈折が極めて小さな光学ポリマーが必要とされる。本論文では、ボトルブラシポリマー (BBP) を用いて光学ポリマーの配向複屈折を制御して補正する手法を研究し、この手法を通して開発された複屈折の小さな光学ポリマーについて、実際の光学設計に適用してその利点を検証した。 第 1 章では、光学ポリマーの定義・種類・開発の歴史について述べ、その課題である複屈折について提起した。そして、複屈折の現状とそれを克服する新たな手法を紹介し、本研究の目的を述べた。第 2 章では、線状ポリメチルメタクリレート (PMMA) と PMMA 側鎖からなる BBP (PMMA-BBP) をさまざまな割合で混合し、その PMMA ブレンドの配向複屈折を分析することで本手法の有効性を検証した。その結果、線状 PMMA の負の複屈折は、PMMA-BBP の正の複屈折で相殺できることがわかった。特に、線状 PMMA と PMMA-BBP のブレンド比が 73 : 27 の場合、その PMMA ブレンドサンプルの配向複屈折は、配向度に依存せず完全に補正されることを見出した。さらに、その補正の機構について考察した。第 3 章では、本手法を色分散性の大きなポリスチレン (PS) に適用し、線状 PS と PS 側鎖からなる BBP (PS-BBP) を混合することにより、PS の配向複屈折制御を検討した。PMMA と同様、線状 PS の負の複屈折は PS-BBP の正の複屈折によって相殺できることがわかった。特に、線状 PS と PS-BBP のブレンド比が 30:70 の場合、PS ブレンドサンプルは 120%のひずみ下でも極めて低い配向複屈折 $\Delta n \sim 3.9 \times 10^{-4}$ を示した。以上から、この PS ブレンドは高い色分散性と低複屈折性を合わせ持つ光学ポリマーの有望な制御手法になり得ることが示された。さらに、その PS ブレンドの光学特性および熱特性を分析した結果、線状 PS とほぼ同等の特性を有することが確認された。第 4 章では、上記 PS ブレンド (LB-PS) の有効性を評価するため、LB-PS の配向複屈折を高性能スマートフォンカメラのレンズ系で最も使用されている光学ポリマーの配向複屈折と比較した。その結果、LB-PS の複屈折はその光学ポリマーと同等かそれ以下になることがわかった。また、LB-PS をレンズ系に使用する優位性について、光学設計ソフトウェア上で設計したレンズ系の解像性能の比較により検証した。結果、LB-PS をレンズ材料として用いたレンズ系は、複屈折を考慮するしないにかかわらず、いずれにおいても高解像度を有することがわかった。以上より、LB-PS はレンズ系の色収差を補正しつつ、実用的な解像性能を向上させることが可能な優れた光学材料であることが示された。第 5 章では、各章で得られた結果を総括し、本論文の結論を述べた。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6341 号	氏 名	田村 正樹
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授 Ph. D.	堀田 篤
	副査	慶應義塾大学教授 工学博士	鈴木 哲也
		慶應義塾大学教授 博士（情報理工学）	尾上 弘晃
		慶應義塾大学准教授 博士（工学）	荒井 規允
学士（理学）、修士（理学）を有する田村正樹君の学位請求論文は「Development of Orientation-Birefringence-Controlled Optical Polymers via Synthesis and Combination of Bottlebrush Polymers (ボトルブラシポリマーの合成と複合化による光学ポリマーの配向複屈折制御とその応用)」と題し、全 5 章から構成されている。本論文は、光学分野、特に光学ポリマーに関する研究である。実用例において、高性能なスマートフォンのカメラでは、高解像度の画像を得るために配向複屈折が極めて小さな光学ポリマーが必要となっている。そこで本論文では、ボトルブラシポリマー (BBP) を用いて、光学ポリマーの配向複屈折を制御して補正する手法を検討し、この手法を通して開発された複屈折の小さな光学ポリマーについて、実際の光学設計に適用してその利点を検証している。 第 1 章では、光学ポリマーの定義やその種類、さらにはその開発の歴史について述べられ、その課題である複屈折について提起をしている。そして、複屈折の現状とその課題を克服するための新たな手法が紹介され、本研究の目的について述べられている。 第 2 章では、線状ポリメチルメタクリレート (PMMA) と PMMA 側鎖をもつボトルブラシポリマー (PMMA-BBP) をさまざまな割合で混合して、そのブレンドした PMMA の配向複屈折を分析することで本手法の有効性を検証している。その結果、線状 PMMA の負の複屈折は、PMMA-BBP の正の複屈折で相殺できることを突きとめている。特に、線状 PMMA と PMMA-BBP のブレンド比が 73 : 27 の場合において、その PMMA ブレンドサンプルの配向複屈折は、配向度に依存せずに完全に補正されることを見出した。さらに、その補正の機構についても考察している。 第 3 章では、本手法を色分散性の大きなポリスチレン (PS) に適用している。すなわち、線状 PS と PS 側鎖からなる BBP (PS-BBP) を混合することで、PS の配向複屈折制御を試みている。PMMA と同様に、線状 PS の負の複屈折は PS-BBP の正の複屈折によって相殺できることを見出した。特に、線状 PS と PS-BBP のブレンド比が 30:70 の場合、PS ブレンドサンプルは 120%のひずみ下でも極めて低い配向複屈折である $\Delta n \sim 3.9 \times 10^{-4}$ を示した。これらの結果より、この PS ブレンド手法は、高い色分散性と低複屈折性を合わせ持つ光学ポリマーの有望な制御手法になり得ることが述べられている。さらに、その PS ブレンドの光学特性および熱特性を分析した結果、線状 PS とほぼ同等の特性を有することも確認している。 第 4 章では、上記 PS ブレンド試料 (LB-PS) の有効性を評価している。すなわち、LB-PS の配向複屈折を高性能スマートフォンカメラのレンズ系で最も使用されている光学ポリマーの配向複屈折と比較している。その結果、LB-PS の複屈折はその光学ポリマーと同等か、それ以下になることがわかった。また、LB-PS をレンズ系に使用する優位性については、光学設計ソフトウェア上で設計したレンズ系の解像性能の比較により検証した。その結果、LB-PS をレンズ材料として用いたレンズ系は、複屈折を考慮するかしないかにかかわらず、いずれも高解像度を有することがわかった。以上より、LB-PS はレンズ系の色収差を補正しつつ、実用的な解像性能を向上させることが可能な優れた光学材料であることがわかった。 第 5 章では、各章で得られた結果を総括し、本論文の結論を述べるとともに本研究の今後の展望と将来性について述べている。 以上要するに、本研究は、工学的な視点による学術知識と応用技術をもとに、光学ポリマー分野において複屈折に関する最先端の問題を解決している。また、その実装応用を目指し、開発した光学ポリマーの光学設計研究も行っている。これらの技術と知見により、光学材料の最適化や最先端のレンズ等の実装光学部品への応用が大きく進むことが期待される。さらに、新たな光学材料研究領域の創出やその開発迅速化を推し進めて、材料の低コスト化にもつながる可能性がある。このような研究成果から、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6342 号	氏 名	小島 知也
主論文題名： Development of bioinspired molecular systems inducing emergent dynamics of soft matter (ソフトマターの創発的なダイナミクスを誘導する バイオインスパイアード分子システムの開発)			
生体システムでは、複数の分子が集合し化学反応ネットワークが形成されることで、生命の特徴である動的な挙動（ダイナミクス）が発現している。したがって、生命システムは化学の観点から「分子システム」と解釈することができる。このような分子システムを模倣し理解するために、これまでベシクル、コアセルバート、エマルション液滴といったソフトマターと呼ばれる柔らかい物質群を用いたバイオインスパイアード化学システムが報告されてきたが、ミクロスケールな分子の緻密な設計に基づきソフトマターの巨視的なダイナミクスを誘導することは困難であった。本研究では分子の観点から設計を行うことで、ソフトマターのダイナミクスを誘導する分子システムを開発した。 第 1 章では、ソフトマターを用いた化学システムを概括し本研究の目的を示した。 第 2 章では、多数のベシクルからなる組織様集合体の創製を目的とした。ベシクル間で働くミクロスケールな分子間相互作用を設計することにより、複数のベシクル同士の接着およびそれに伴うマクロスケールなベシクル組織の創製を達成した。 第 3 章では、第 2 章で創製したベシクル組織の形状制御困難な課題を克服すべく、組織のファイバー形状への成形を目的とした。ベシクル間で働く分子間相互作用を設計し密に詰まったベシクルを細孔から押し出すことで、ファイバー状組織の創製を達成した。 第 4 章では、ベシクル膜の透過性を制御可能な酸化還元応答性の高分子ベシクルの開発を目的とした。ベシクル膜を構成する高分子のミクロスケールな架橋反応を設計することで、マクロスケールなベシクル膜の構造変化の誘起を達成した。 第 5 章では、光照射に伴いベシクルーコアセルバート間を相転移する化学システムの開発を目的とした。光応答性両親媒性分子のミクロスケールな分子構造変化を設計することで、マクロスケールなソフトマター間の構造転移の誘起を達成した。 第 6 章では、多数のエマルション液滴による集団挙動の誘起を目的とした。光応答性界面活性剤分子のミクロスケールな分子構造変化を設計することで、液滴周囲で生じた対流間の相互作用に基づくマクロスケールな液滴間の集団挙動を達成した。 第 7 章では、本研究の結論および展望について示した。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6342 号	氏 名	小島 知也
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学准教授 博士（工学） 伴野 太祐			
副査 慶應義塾大学教授 工学博士 朝倉 浩一			
慶應義塾大学准教授 博士（工学） 荒井 規允			
慶應義塾大学教授 博士（工学） 緒明 佑哉			
学士（工学）、修士（工学） 小島知也君提出の学位請求論文は「Development of bioinspired molecular systems inducing emergent dynamics of soft matter（ソフトマターの創発的なダイナミクスを誘導するバイオインスパイアード分子システムの開発）」と題し、7章から構成されている。 第1章は序論であり、生体システムの分子システムとしての側面を俯瞰し、ソフトマターを用いた化学システムを概括したうえで、本研究の目的が述べられている。 第2章では、多細胞生物の階層性に着想を得て、人工細胞として注目されているベシクルを多数寄り集めた組織様集合体の創製を目指している。水素結合とイオン結合の組み合わせに基づく塩橋に着目し、それを介して複数のベシクル同士を接着させて、ミリメートルおよびセンチメートルサイズのベシクル型人工組織の創製を達成している。塩橋の強度はイオン化の度を調整することで制御可能であり、これによりベシクル間接着のpH変化にともなう可逆性、人工組織の自己修復特性を示すことを明らかにしている。さらに、ベシクルに磁性微粒子や光応答性分子を組み込むことで、磁石を用いたベシクル型人工組織のマニピュレーションや変形、外部ストレスに対する生存性の向上という、高次の協同的機能を有することを示している。 第3章では、第2章で創製したベシクル型人工組織の形状制御を行うべく、塩橋の性質に着目し、密に詰まったベシクルを細孔から押し出すという簡便な手法によりファイバー状のベシクル型人工組織を創製している。得られたファイバー状組織を組み合わせることで自在に形状を制御できること、ベシクル内に磁性粒子を組み込むことで磁石を用いたマニピュレーションが可能であることを示している。また、ベシクル内に多段階の酵素反応系を組み込むことで、ファイバー状組織内を化学シグナルが伝播する現象の誘導に成功している。 第4章では、ベシクルを構成する高分子に酸化還元応答性の官能基を導入することで、ベシクル膜の透過性を制御可能な機能性ベシクルの創製を行っている。還元剤存在下で高分子鎖間での酸化反応が同時に進行して膜構造が強固になるという機構を明らかにし、そのベシクル膜の構造変化にともなう還元剤濃度により内包物の放出挙動を制御することに成功している。 第5章では、光照射にともなう、膜構造を有するベシクルとそれを有しないコアセルベート間を可逆的に相転移可能な化学システムの開発を行っている。光応答性両親媒性分子の分子形状の変化により両分子集合体間の転移が誘起される機構を提案し、この相転移にともなう選択的な物質の取り込みが達成されることを見出している。 第6章では、界面活性剤水溶液中をマランゴニ対流により自己駆動するマイクロメートルサイズの液滴をプラットフォームに、光応答性分子を用いて液滴の集団挙動の誘起に成功している。光照射下での光応答性分子の異性化にともなう、液滴周囲に特異的な流れ場が生じ、その相互作用に基づいてマクロスケールな液滴の集団挙動が現れることを見出している。 第7章では、各章で得られた知見をまとめ、本研究の成果を総括している。 以上要するに、本研究は生体機能を分子化学的に模倣し、分子レベルのミクロスケールから分子集合体のマクロな機能を創発する分子システムの設計および創製を達成したものであり、超分子化学およびコロイド界面化学、機能性ソフトマテリアルの分野において工業上、工学上寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6343 号	氏 名	細見 直希
主論文題名：			
マルチモーダル情報に基づく移動指示理解モデルの構築			
本論文は、人々の自由で便利な移動を支援するエージェント（モビリティ）の基盤となる、視覚と言語を用いたマルチモーダル情報に基づく移動指示理解モデルの構築に取り組むものである。具体的には、人間が自律移動可能なモビリティに対して「黒いトラックの向かい側に停まってください」という移動指示を与えた場合に、モビリティが指示内容を適切に解釈し、黒いトラックを目印として、その向かい側の道路上における適切な目標位置や領域を予測可能なモデルの構築を目的としている。 本論文では、実世界の移動タスクに特有の問題である、(1)画像と言語のような異なるモダリティ間で情報の性質に違いがあるうえに、情報の信頼性が環境条件によって変動し得る点、(2)目標位置や領域は道路上の任意の地点に存在する可能性があり、予測のための明確な視覚的境界が存在しない点、に対処するマルチモーダル情報に基づく目標位置または領域の予測に関する手法を提案し、実験を通じてその有効性を検証している。 本論文は、全 6 章により構成される。 第 1 章では、研究の背景、目的、および論文構成を示している。 第 2 章では、言語理解および記号接地、視覚と言語を中心としたマルチモーダル情報の統合技術に関する先行する関連研究を整理し、本研究の位置づけを述べている。 第 3 章では、本論文で用いるマルチモーダル情報の統合的処理の基盤技術について詳述し、提案手法の背景にある原理および理論的根拠を示している。 第 4 章では、モビリティの目標領域を予測する Referring Navigable Region タスクを対象とし、Trimodal Navigable Region Segmentation Model (TNRSM)を提案している。実験を通じて、TNRSM がモダリティ間の情報の性質の違いを補完し、さらに、視覚に関する情報の信頼性が環境条件によって変動する問題に対して効果的に対処できることを明らかにしている。 第 5 章では、モビリティの目標位置を予測する Vision-and-Language Target Positioning タスクを対象とし、Target Regressor in Positioning (TRiP)を提案している。実験を通じて、TRiP が目標位置の予測において明確な視覚的境界が存在しない問題に効果的に対処できることを明らかにしている。 第 6 章では、本論文の総括を行い、今後の展望について述べている。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6343 号	氏 名	細見 直希
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授 博士（情報学）	杉浦 孔明
	副査	慶應義塾大学教授 博士（工学）	青木 義満
		慶應義塾大学教授 博士（工学）	今井 倫太
		慶應義塾大学教授 工学博士	斎藤 博昭
学士（工学）、修士（工学）細見直希君提出の学位請求論文は「マルチモーダル情報に基づく移動指示理解モデルの構築」と題し、全 6 章からなる。 本論文は、人々の自由で便利な移動を支援するエージェント（モビリティ）の基盤となる、視覚と言語を用いたマルチモーダル情報に基づく移動指示理解モデルの構築に取り組んだものである。具体的には、人間が自律移動可能なモビリティに対して「黒いトラックの向かい側に停まってください」という移動指示を与えた場合に、モビリティが指示内容を適切に解釈し、黒いトラックを目印として、その向かい側の道路上における適切な目標位置や領域を予測可能なモデルの構築を目的としている。 本論文では、特に実世界の移動タスクに特有の問題に対処する、マルチモーダル情報に基づく目標位置または領域の予測に関する手法を提案している。具体的には、(1)画像と言語のような異なるモダリティ間で情報の性質に違いがあるうえに、情報の信頼性が環境条件によって変動し得る点、(2)目標位置や領域は道路上の任意の地点に存在する可能性があり、予測のための明確な視覚的境界が存在しない点、に対処する手法を提案し、実験を通じてその有効性を示している。 第 1 章では、研究の背景、目的、および論文構成を示している。 第 2 章では、言語理解および記号接地、視覚と言語を中心としたマルチモーダル情報の統合的处理に関する先行研究、およびモビリティ分野における応用事例を整理し、本研究の位置づけを述べている。 第 3 章では、本論文で用いるマルチモーダル情報の統合的处理の基盤技術について詳述し、提案手法の背景にある原理および理論的根拠を示している。 第 4 章では、移動指示文と RGB 画像を入力として、モビリティの目標領域をセグメンテーションマスクとして予測する Referring Navigable Region タスクを対象とし、言語、RGB 画像、および RGB 画像から生成したセマンティックセグメンテーションマスクの 3 つのモダリティを扱う Trimodal Navigable Region Segmentation Model (TNRSM)を提案している。実験を通じて、TNRSM がモダリティ間の情報の性質の違いを補完し、さらに、視覚に関する情報の信頼性が環境条件によって変動する問題に対して効果的に対処できることを明らかにしている。 第 5 章では、移動指示文と RGB 画像を入力として、モビリティの目標位置を画像上の二次元の座標として予測する Vision-and-Language Target Positioning タスクを対象とし、移動指示で参照されるランドマークと目標位置の相対的位置関係を明示的にモデル化する Target Regressor in Positioning (TRiP)を提案している。実験を通じて、TRiP がランドマークと目標位置の相対的位置関係を考慮し、目標位置の予測において明確な視覚的境界が存在しない問題に効果的に対処できることを明らかにしている。 第 6 章では、本論文の総括を行い、今後の展望について述べている。 以上要するに、本論文は、視覚と言語を用いたマルチモーダル情報に基づく移動指示理解に関するモデルおよびその基盤技術を提案し、実験を通じてその有効性を明らかにしたものであり、工学上寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6344 号	氏 名	和久井 拓
主論文題名： GAMPAL: A General-Purpose Anomaly Detection Mechanism for Internet Backbone Network without Labeled Data (GAMPAL：インターネットバックボーンを対象とした ラベル付きデータを必要としない汎用異常検知手法)			
様々なネットワークを相互接続するインターネットバックボーンは、多様な異常事象の影響を受ける可能性がある。また、膨大なトラフィックが観測され、平常時でも変動が激しく、トラフィックの監視のみで異常事象を検知するのは難しい。 既存研究では、ネットワーク規模に対するスケーラビリティへの考慮や、トラフィックの局所性を考慮した方式が少ない。また、ラベル付きデータを用いて、異常の特徴をモデルに学習させる方式が多いが、ラベル付きデータは生成が難しく、また、検知対象がラベルで定義された異常に限定されてしまう。 本学位論文は、異常なトラフィックの挙動を汎用的に検知する GAMPAL (General-purpose Anomaly detection Mechanism using Prefix Aggregation without Labeled data) を提案する。GAMPAL はトラフィック情報として、5 タプルが共通するパケットを集約したフロー情報を採用する。膨大なフローを分析するため、BGP (Border Gateway Protocol) の経路表を用いたフロー集約方式 Prefix Aggregation を定義する。Prefix Aggregation はトラフィックの局所性に着目し、BGP における経路情報である AS path の一部が同じフローを空間的に集約する。この集約単位を PA (Prefix Aggregate) とする。また、時間的な集約のため、5 分間のタイムスロットでバイト数を集約したフローサイズの時系列データを生成する。この時系列データで、集約単位毎に予測モデルを構築する。GAMPAL は、フローサイズの予測値と実測値を比較することで、ラベル付きデータを使わずに、汎用的に異常を検知する。 本学位論文は、GAMPALv1 と GAMPALv2 を提案している。v1 では、トラフィックの様々な周期性を考慮し、LSTM-RNN (Long Short-Term Memory-Recurrent Neural Network) を用い、フローサイズの時系列データから、1 つ次のタイムスロットのフローサイズを予測するモデルを構築した。また、フローサイズの予測値と実測値の差分評価のために、2 つの時系列データの相違の割合を評価する評価指標 NSD (Normalized Summation of Difference) を定義した。評価では、実社会で発生した異常事象を題材に、1 日分のフローサイズの予測値と実測値から PA 毎に NSD を求め、全 PA の平均を算出			

した．その結果，異常のあった日は NSD の平均が大きいことを確認した．

一方，v1 には 4 つの課題があった．モデル学習と予測値算出に要する計算量が膨大であること．モデル学習に時間のセマンティクスを活用できていないこと．検知の閾値設定が困難なこと．そして，異常が検知された PA や時間帯を特定できないことである．

1 つ目と 2 つ目の課題に対し，v2 は各タイムスロットから時間に関する特徴量を抽出した時間特徴量とフローサイズの関係性をモデル化した．また，この方式に適した RFR (Random Forest Regressor) をモデルとして採用した．モデルへの入力の次元数は 288 次元から 7 次元に削減され，また RFR は LSTM-RNN よりも計算量が少ない．また，3 つ目と 4 つ目の課題に対し，v2 はモデルの予測結果から予測範囲を定義し，予測範囲と実測値の比較による異常検知を提案した．

v2 の評価でも，v1 の評価で使用した異常事象を対象に，予測範囲を算出し実測値と比較した．その結果，観測点のある大学ネットワークを宛先とするフローが属する PA では，異常のあった日のみ，実測値が予測範囲を逸脱し異常として検知された．また，ラベル付きデータを用いて生成したデータセットによる精度評価では，再現率は 93.1% を記録した．評価方式やデータは異なるが，再現率は v1 の 81.8% から向上した．また，v1 では，モデル学習と予測値算出に，GPU を用いて約 4 日要していたが，v2 では 8 コア CPU を用いて約 23 分であった．以上の評価で，GAMPAL の精度と実用性の改善を確認した．

審査の要旨

報告番号	甲 第 6344 号	氏 名	和久井 拓
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	博士（工学） 寺岡 文男
	副査	慶應義塾大学教授	博士（工学） 重野 寛
		慶應義塾大学教授	博士（工学） 西 宏章
		国立情報学研究所教授	博士（工学） 福田 健介
修士（工学）和久井拓君提出の学位請求論文は「GAMPAL: A General-Purpose Anomaly Detection Mechanism for Internet Backbone Network without Labeled Data (GAMPAL：インターネットバックボーンを対象としたラベル付きデータを必要としない汎用異常検知手法)」と題し全9章から構成される。多様なネットワークを相互に接続する大規模な主幹ネットワークであるインターネットバックボーンは、サービスの障害やサイバー攻撃など様々な異常事象の影響を受ける可能性がある。また平常時でも膨大なトラフィックが観測され変動パターンが複雑であるため、トラフィックの監視のみでの異常検知は困難である。インターネットバックボーンの安定運用のためには様々な異常事象を汎用的に検知し早期に対処する必要があるが、既存研究ではネットワーク規模に対するスケーラビリティやトラフィックの局所性を考慮した方式が少ない。またラベル付きデータを用いて異常の特徴をモデルに学習させる方式が多いが、ラベル付きデータは生成が難しい。さらに検知対象がラベルで定義された異常事象に限定される可能性がある。 第1章は本論文の序章であり、本研究の背景、目的、貢献についてまとめている。 第2章はインターネットトラフィックを対象とした異常検知技術の関連研究を取り上げ、各研究の特徴についてまとめている。 第3章は本論文で提案する汎用異常検知方式GAMPAL (General-purpose Anomaly detection Mechanism using Prefix Aggregation without Labeled data)について述べている。GAMPAL はトラフィック量を空間的に集約する Prefix Aggregation を定義し、集約単位である PA (Prefix Aggregate)毎にトラフィック量を予測するモデルを構築する。GAMPAL は異常事象がトラフィック量に与える影響に着目し、トラフィック量の予測値と実測値を比較することで汎用的に異常を検知する。 第4章は GAMPALv1 について述べている。GAMPAL v1 は LSTM-RNN (Long Short-Term Memory-Recurrent Neural Network)を採用し、トラフィック量の時系列データから、1つ次のタイムスロットのトラフィック量を予測するモデルを構築する。またトラフィック量の予測値と実測値の差分を算出するために2つの時系列データの相違の割合を評価する評価指標である NSD (Normalized Summation of Difference)を定義している。 第5章は GAMPAL の改良に向け、GAMPALv1 の課題と解決方針について述べている。 第6章は GAMPALv2 について述べている。GAMPALv2 は RFR (Random Forest Regressor)を採用し、タイムスロットの属性から生成した時間特徴量からトラフィック量を予測するモデルを構築している。また RFR の出力から予測範囲を定義し、予測範囲と実測値の比較による異常検知を提案している。 第7章は GAMPALv2 の評価として実社会で発生した異常事象を検出可能であるかを検証している。結果として、サービス障害、イベントトラフィック、DDoS (Distributed Denial of Service)攻撃について、発生した PA と時間帯の特定が可能であると結論づけている。また、精度評価用に生成したデータセットを用いて GAMPALv2 の検知精度を評価している。評価の結果、再現率(Recall)は 93.1%を達成している。 第8章は議論として、各提案の効果や考察、GAMPAL のユースケースをまとめている。 第9章は本論文の結論であり、論文を総括するとともに今後の展望について述べている。 以上、本論文は GAMPAL の提案を通じてインターネットバックボーンにおける汎用的な異常検知が可能であることを明らかにした。この貢献は工学上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6407 号	氏 名	田村 賢太郎
主論文題名：			
Approaches for Utilizing Quantum Computing with Limited Resources (リソースの限られた量子計算の活用手法)			
量子コンピュータは、従来のコンピュータでは計算困難な問題に対して効率的に解を提供する次世代の計算機として注目されている。現在、量子コンピュータの実機開発は急速に進展しており、クラウドを通じて広く利用可能な状況にある。しかし、現行の実機は量子リソースが限られており、ノイズの影響下にある制限された数の量子ビットしか使用できないため、実行可能なアルゴリズムの範囲が制約されている。現行の実機を活用するには、限られた数のノイズのある量子ビットという制約の中でできるタスクを模索する必要がある。本論文では、量子コンピュータの量子ビットを簡易にベンチマークするための手法の不足と、量子ランダムアクセスコード (QRAC) を用いた最適化アルゴリズムのノイズ耐性に関する知見の不足という 2 つの問題の解決を目的とする。これらの問題の解決により、限られたリソースを持つデバイスを活用するための知見の提供を目指す。 第 1 章では、研究背景と本論文の構成を説明する。特に、量子リソースが限られた実機の現状と課題について議論する。さらに、これらの課題を解決する上で本論文のアプローチについて述べる。 第 2 章では、本論文の前提となる量子情報と量子ノイズの理論的な基礎事項をまとめる。 第 3 章では、本論文の第一の成果として、量子コンピュータにおける量子ビットの評価手法を提案する。ノイズの影響を受ける現行の実機において、量子ビットの評価は重要な課題である。しかし、量子コンピュータ特有のタスクで量子ビットを評価する方法は確立されていなかった。本章では、量子コンピュータ特有のタスクである量子乱数生成に着目し、量子乱数生成を利用して量子ビットの安定性を評価する手法を提案する。先行研究として既存の量子ビットの評価手法や乱数生成器と検定手法を紹介し、既存の乱数検定を量子ビットの評価に用いることの問題点を明らかにする。続いて、Ramer-Douglas-Peucker (RDP) アルゴリズムを応用した安定性評価手法を提案する。さらに、提案手法の実機への適用結果を示すことで、実機の量子ビットの出力にバイアスが存在するばかりでなく、そのバイアスが時間とともに変化することを明らかにする。 第 4 章では、本論文の第二の成果として、QRAC を用いた最適化アルゴリズム (QRAO) のノイズ耐性の解析結果を示す。QRAO は問題の変数の数に対して用いる量子ビット数を減らす点で量子リソースの消費を抑えるが、そのノイズ耐性については解明されていなかった。本章では、背景として QRAC や量子組合せ最適化アルゴリズムの先行研究を紹介する。続いて、ノイズシミュレーションにより、QRAO で (3, 1)-QRAC を用いた場合の近似解の精度がイジングハミルトニアンを用いた場合と比較してノイズ耐性が高いことを示す。さらに、ノイズ耐性のメカニズムを理論的に明らかにし、正しい古典変数の読み出しに必要な測定回数を導出する。 第 5 章では、本論文のまとめと展望を述べる。 本研究の成果は、量子コンピュータの実機の安定性を簡潔に評価し適切な量子ビットやデバイスの選定を行うための手法を提供するとともに、組合せ最適化問題を解く量子アルゴリズムの設計法に関する知見を提供するものである。これらは、量子コンピュータの実用化に貢献することが期待される。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6407 号	氏 名	田村 賢太郎
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授 博士（情報理工学）	山本 直樹
	副査	慶應義塾大学教授 博士（工学）	渡辺 宙志
	副査	慶應義塾大学准教授 博士（理学）	田中 宗
	副査	慶應義塾大学教授 博士（工学）	武岡 正裕
学士（工学）、修士（工学）田村賢太郎君の学位請求論文は Approaches for Utilizing Quantum Computing with Limited Resources（リソースの限られた量子計算の活用手法）と題し、全5章より構成される。 量子コンピュータは、従来のコンピュータでは計算困難な問題に対して効率的に解を提供する次世代の計算機として注目されている。現在、量子コンピュータの実機開発は急速に進展しており、クラウドを通じて広く利用可能な状況にある。しかし、現行の実機はノイズの影響を受けており、かつ制限された数の量子ビットしか使用できないため、実行可能な量子アルゴリズムが限られている。完全な誤り訂正機能を備える大規模量子コンピュータの出現には長い時間がかかると考えられており、そのために、一般に、ノイズを正しく特定し量子アルゴリズムのノイズ耐性を解析する必要がある。本論文は、ノイズ影響下にある量子ビットの特性評価を簡易に行う手法を開発し、また、ノイズ影響を前提としたある特別な量子アルゴリズムのノイズ耐性を詳細に解析したものである。 第1章では、研究背景と本論文の構成が説明されている。特に、量子リソースが限られた実機の現状と課題についてのまとめが与えられている。そして、これらの課題の解決に向けた、本論文で得られた成果の立ち位置と意義について議論されている。 第2章では、本論文で用いられている量子情報と量子ノイズに関する基礎事項のまとめが与えられている。 第3章では、本論文の第一の成果である、量子ビットのノイズ特性評価手法が説明されている。ノイズの影響を受ける現行の実機において、量子ビットのノイズ特性を正しく評価することは重要な課題である。しかし、量子コンピュータ特有のタスクで量子ビットを評価する方法は確立されていなかった。本章で提案されている評価法は、量子コンピュータ特有のタスクである量子乱数生成における量子ビットの安定性に基づくものである。説明にあたって、まず既存の量子ビットの評価手法および乱数生成器と検定手法が紹介されており、そして既存の乱数検定を量子ビットの評価に用いることの問題点が明らかにされている。続いて、Ramer-Douglas-Peucker (RDP) アルゴリズムを応用した安定性評価手法が提案されている。そして、提案手法を実機へ適用した結果が示されている。とくに、提案手法の適用により、実機の量子ビットの出力にバイアスが存在するばかりでなく、そのバイアスが時間とともに変化することが明らかにされている。 第4章では、本論文の第二の成果として、量子ランダムアクセスコードに基づく最適化アルゴリズム(QRAO)について、ノイズ耐性を詳細に調べた結果が与えられている。QRAOは、問題の変数の数に対して少ない量子ビット数で動作する量子アルゴリズムである。これは確かに量子リソースの消費を抑えるが、そのノイズ耐性については解明されていなかった。本章では、まず背景として量子組合せ最適化アルゴリズムの先行研究が紹介されている。続いて、ノイズシミュレーションにより、(3古典ビットを1量子ビットに埋め込む)QRAOの近似解の精度が、イジングハミルトニアンを用いた場合よりも高いことが示されている。さらに、このアルゴリズムのノイズ耐性のメカニズムが理論的に明らかにされ、この結果を用いて、古典変数の読み出しに必要な測定回数が導出されている。 第5章では、本論文のまとめと展望が述べられている。 本研究の成果は、量子コンピュータの実機の安定性を簡潔に評価し、適切な量子ビットやデバイスの選定を行うための手法を提供するとともに、組合せ最適化問題を解く量子アルゴリズムの設計法に関する知見を提供するものである。これらは、量子コンピュータの実用化に貢献することが期待される。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6408 号	氏 名	北澤 瑤一
主論文題名：			
低原子価鉄錯体触媒を用いた芳香族化合物の炭素–水素結合切断を経る 炭素–炭素不飽和結合のヒドロアリール化反応に関する研究			
本研究は低原子価鉄ホスフィン錯体触媒を用いた、芳香族化合物における不活性炭素–水素（C–H）結合の切断を経る炭素–炭素不飽和結合のヒドロアリール化反応の開発を目的としている。 序論では、遷移金属触媒を用いた C–H 結合変換反応の有機合成上の重要性と課題点についてと、鉄を金属中心に持つ触媒の利用の重要性について述べている。遷移金属触媒を用いた C–H 結合の官能基化反応は、基質へあらかじめ反応活性な官能基を導入する必要がなく、短工程で官能基導入ができる環境低負荷な有機合成手法として広く研究されている。遷移金属触媒を用いた分子変換反応は有機合成における一手法として確立されており、触媒として利用できる遷移金属は多岐にわたる。一般に貴金属元素を金属中心にもつ錯体が良好な触媒能を示すため数多くの報告例がある。しかしこれらの貴金属元素は存在量が限られ高価であるのみならず、一般に毒性が高い。持続可能かつ環境低負荷な有機合成手法として利用するにあたり、安価に入手可能で豊富に存在する遷移金属を触媒として利用する反応の開発も進められている。中でも地殻中に最も豊富に存在する遷移金属である鉄を触媒に用いた C–H 結合官能基化反応の開発に関する研究がこの 10 年以上にわたり盛んに行われるようになってきている。しかしこれらの反応では、高原子価鉄塩と Grignard 試薬をはじめとする反応性の高い有機金属試薬を用いて触媒活性種を発生させており、基質適用範囲が限定的になる課題があった。単離可能で構造が明確な分子状錯体を触媒に用いる例も知られているが、反応例は限定的である。当研究室では単離可能な低原子価鉄錯体 $\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$ を触媒に用いた、ケトンのカルボニル基を配向基とする芳香族オルト位 C–H/オレフィンカップリング反応を見出した。この反応ではその他の添加剤を必要とせず、効率的にアルキル基を導入できる。同様の触媒系を用いた不活性 C–H 結合官能基化は利用が広まりつつあるが、カップリング剤として用いることのできる炭素–炭素不飽和結合は二重結合に限定されていた。そこで著者は、低原子価鉄錯体触媒系を用いた不活性 C–H 結合官能基化反応において炭素–炭素三重結合を利用可能とすべく研究に着手した。 第 1 章では、$\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$ による内部アルキンを用いた芳香族ケトンのオルト位 C–H 結合のアルケニル化反応について述べている。$\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$ と、配位子として嵩高く電子豊富なトリアルキルホスフィンである P^tBu_3 を組み合わせた触媒系を用いることで、ピバロフェノン誘導体のオルト位 C–H/アルキンカップリング反応を達成した。本触媒系では位置および立体選択的に付加が進行した 1 種類の生成物のみを与えることを見出した。反応機構についての情報を得るために行った NMR 実験の結果から、$\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$ と			

内部アルキンは速やかに反応し、アルキンが配位した鉄錯体に変換されることを示唆する結果を得た。また、この鉄アルキン錯体中間体が触媒サイクルにおける静止状態であることを示唆する結果を得た。

第 2 章では、第 1 章で見出したアルキンの鉄への配位後に C-H 結合切断が進行するという知見に基づき、内部アルキン部位を持つエンインを用いて、芳香族ケトンの C-H 結合切断を経る環化ヒドロアリール化反応の開発について述べている。本反応では sp^2 炭素間での還元的脱離が比較的遅いことを利用して、アルケン部位へのアルケニル鉄の付加反応と (アルキル) アリール鉄種からの還元的脱離を進行させることに成功している。重水素標識実験の結果から、C-H 結合切断が律速段階であることが示唆された。

第 3 章では、ジエンまたはエノン配位子として持つ新規 0 価鉄錯体の合成について述べている。第 2 章において $Fe(PMe_3)_4$ と 1,6-エンインを反応させたところ、エンインの環化を経た 1,3-ジエン錯体中間体が生成することを見出した。この知見を基に $Fe(PMe_3)_4$ を経由しない新規ジエン錯体の合成を達成した。またエノンを基質に用いた場合にも類似のエノン錯体と考えられる錯体を得られることを明らかにした。

審査の要旨

報告番号	甲 第 6408 号	氏 名	北澤 瑠一
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	博士（工学） 垣内 史敏
	副査	慶應義塾大学教授	博士（工学） 高尾 賢一
		慶應義塾大学教授	博士（理学） 大松 亨介
		慶應義塾大学准教授	博士（理学） 佐藤 隆章
		東京農工大学教授	博士（学術） 平野 雅文
学士（理学）、修士（理学）北澤瑠一君提出の学位請求論文は、「低原子価鉄錯体触媒を用いた芳香族化合物の炭素－水素結合切断を経る炭素－炭素不飽和結合のヒドロアリール化反応に関する研究」と題し、序論、本論 3 章、結論および実験項より構成されている。 不活性炭素－水素結合（以下 C-H 結合）を用いる反応は、目的化合物を短工程で得られる直截的合成手法として盛んに研究がなされている。現在では多様な分子変換反応が開発されており、有機合成反応における有用な手法となっている。しかしながら、一般に C-H 結合切断を経るアルキンとの反応の反応性は低く、C-H 結合官能基化に高い触媒活性を示す貴金属錯体を用いた場合でも反応例は少ない。安価・安全な鉄触媒に至っては、報告はほとんどない。特に、鉄ホスフィン触媒を用いたアルキンとの反応は、光照射条件下で行う反応が最近 1 例報告されたのみであり、熱的条件下で反応を達成した例は報告されていない。 序論では、鉄触媒を用いる C-H 結合官能基化の報告例と、遷移金属錯体触媒を用いる C-H 結合切断を経るアルキン類との反応の特徴と問題点について述べている。特に、当研究室で過去に開発した低原子価鉄ホスフィン ($\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$) 錯体を触媒に用いるアルケン類との反応、ならびに他の研究者による関連する研究内容を述べ、鉄ホスフィン錯体触媒を用いる芳香族ケトンとアルキンとの反応の報告例が無いことを述べている。 第 1 章では、$\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$ 錯体を触媒に用いた芳香族ケトンと内部アルキンの反応で、オルト位 C-H 結合の付加反応が進行することを述べている。生成物として位置および立体異性体が 4 種類生成することが考えられるが、著者が開発した反応系では興味深いことに 1 種類の生成物のみが得られる。$\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$ 錯体だけでも触媒活性を示すが、電子供与能が高い P^tBu_3 を触媒量添加することで、生成物の収率が向上することを見出している。また各種 NMR 実験により、反応系中ではアルキンが鉄に配位した錯体が生成した後、芳香族ケトンのオルト位 C-H 結合切断されるという興味深い結果を得ている。本検討により低原子価鉄ホスフィン錯体を触媒に用いることで、芳香族ケトンとアルキンとの反応を達成できた。しかしながら、電子求引性の CF_3 基をもつ基質は高い反応性を示すが、エステル基やアシル基、シアノ基などの電子求引基をもつ基質の反応性は低いことが分かった。 第 2 章では、第 1 章の研究の知見を基にして、1,n-エンイン ($n=6, 7$) を用いる環化ヒドロアリール化反応の開発を検討した。アルキンとの反応では C-C 結合生成段階が sp^2 炭素間で進行することが、アルケニル化の反応性が低い原因であると推測した。アルキンの代わりに 1,n-エンインを用いれば $\text{C}(\text{sp}^2)\text{--C}(\text{sp}^2)$ 間で結合生成が進行することで、還元的脱離が進行し易くなるという作業仮説の下で検討した。無置換のピバロフェノンを用いた場合でも、1,6-エンインの環化ヒドロアリール化反応は効率的に進行した。また、本反応では $\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$ 触媒を用いた芳香族ケトンとアルケンやアルキンの反応で適用できなかったアセトフェノンも利用できるなど、基質適用範囲が広いことも見出している。さらに NMR 実験により、$\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$ がエンインと反応することで速やかに新しい化学種が発生し、それが触媒反応に関与していることを示唆する結果も得ている。 第 3 章では、第 2 章で見出したエンインと $\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$ 錯体との反応で生成した錯体の構造を、各種 NMR スペクトル測定により同定した結果を述べるとともに、その錯体の合成法の開発と合成した錯体のエンインとの反応に対する触媒活性を検討した結果について述べている。$\text{Fe}(\text{PMe}_3)_4$ と 1,6-エンインの反応で、エンインの環化で生じる 5 員環構造をもつ共役ジエンが、鉄に配位した錯体を生成することを見出している。さらに、このジエン配位子が触媒反応中に鉄から解離せずに反応が進行しているという大変興味深い結果を得ている。加えて、鉄ジエン錯体の合成にも成功しており、ホスフィン配位子をもつ低原子価鉄ジエン錯体のこれまでにない合成法を開発している。 このように上記の研究成果は、有機金属化学分野ならびに有機化学分野の発展に貢献し、理化学上寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士(理学)の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6409 号	氏 名	栗原 悠熙
主論文題名： 動的結晶化による Keramaphidin 類の全合成と Manadomanzamine 類の大員環骨格構築法の開発			
Manzamine 類は、抗マラリア活性、抗結核菌活性、ヒト免疫不全ウイルスに対する抗ウイルス活性など、様々な生物活性を示し、医薬品のリード化合物として注目されている天然物群である。しかし、天然からの供給量が限られているため、創薬研究は停滞しており、多様な manzamine 類の化学合成による供給が急務である。Manzamine 類に共通して見られる構造的特徴として、中心の多環性縮環骨格と、Z 体オレフィンを含む 2 つの大環状アミン構造が挙げられる。Manzamine 類の実用的合成には、この 2 つの構造的課題をいかに解決するかが重要である。以上を背景に、本論文では、動的結晶化を用いた Diels-Alder 反応とダブル大環状アルキル化を利用した keramaphidin 類の全合成と、マクロラクタム化を基盤とした manadomanzamine 類の大員環骨格構築法の開発について述べた。 緒論では、manzamine 類の単離・構造決定、生物活性や生合成仮説について述べ、keramaphidin 類と manadomanzamine 類のこれまでの合成例についてまとめた。また、keramaphidin 類の三環性骨格構築の鍵となる動的結晶化による選択性制御法と、manzamine 類の大員環骨格の構築例について先行研究を紹介した。 本論第一章では、keramaphidin 類の全合成について述べた。初めに、Diels-Alder 反応による三環性中心骨格の構築法を開発した。本反応では、望む生成物に加えて、位置異性体が生成した。均一溶液中における速度論支配や熱力学支配に基づいた一般的な反応条件では、望みの位置選択性は発現しなかった。そこで、LiCl を用いた平衡反応と生成物の高い結晶性に着目し、動的結晶化を精査した結果、望みの生成物を単一異性体の結晶として単離できるようになった。次に、2 つの大環状アミン構造が同様な炭素鎖を有している点を利用し、ダブル大環状アルキル化を開発した。アミド基とブロモ基を 2 つずつ有する基質に対し、Cs₂CO₃ を加えて加熱すると、望む位置選択性で 2 つの大環状アミン構造が一挙に構築できた。こうして、これまでの合成例で最も工程数の少ない 12 工程にて keramaphidin B を、13 工程にて ingenamine の全合成を達成した。 本論第二章では、manadomanzamine 類の大員環骨格の構築法について述べた。Manzamine 類の中で最も複雑な構造を有する manadomanzamine 類は、中心骨格に関する合成研究は報告されているが、Z 体オレフィンを含む 2 つの大員環骨格構築に関する研究は一例も報告されていなかった。大員環構築法として一般的に利用される閉環メタセシス反応は、Z 体オレフィンの立体制御が困難なため利用できない。そこで、不安定イリドの Wittig 反応で高立体選択的に Z 体オレフィンを形成した後、マクロラクタム化を用いて 10 員環を合成した。最後に、アミド基に対する Ir 触媒を用いた還元的 Strecker 反応により、manadomanzamine 類の G 環部を合成した。また、同様の方法により、11 員環マクロラクタムを形成し、H 環部の合成に成功した。 結論では、本研究の成果を簡潔にまとめた。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6409 号	氏 名	栗原 悠熙
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学准教授 博士（理学）	佐藤 隆章
	副査	慶應義塾大学教授 博士（工学）	高尾 賢一
	副査	慶應義塾大学准教授 Ph. D.	河内 卓彌
	副査	慶應義塾大学准教授 博士（工学）	高橋 大介
学士（工学）、修士（理学）栗原悠熙君提出の学位請求論文は、「動的結晶化による Keramaphidin 類の全合成と Manadomanzamine 類の大員環骨格構築法の開発」と題し、緒論、本論二章、総括および実験編より構成されている。 Manzamine 類は、抗マラリア活性、抗結核菌活性、ヒト免疫不全ウイルスに対する抗ウイルス活性など、様々な生物活性を示し、医薬品のリード化合物として注目されている天然物群である。しかし、天然からの供給量が限られているため、創薬研究は停滞しており、多様な manzamine 類の化学合成による供給が急務である。Manzamine 類に共通して見られる構造的特徴として、中心の多環性縮環骨格と、Z 体オレフィンを含む 2 つの大環状アミン構造が挙げられる。Manzamine 類の実用的合成には、この 2 つの構造的課題をいかに解決するかが重要である。本論文では、動的結晶化を用いた Diels-Alder 反応とダブル大環状アルキル化を利用した keramaphidin 類の全合成と、マクロラクタム化を基盤とした manadomanzamine 類の大員環骨格構築法の開発について述べている。 緒論では、manzamine 類の単離・構造決定、生物活性や生合成仮説について述べ、keramaphidin 類と manadomanzamine 類のこれまでの合成例についてまとめている。また、keramaphidin 類の三環性骨格構築の鍵となる動的結晶化による選択性制御法と、manzamine 類の大員環骨格の構築例について先行研究を記載している。 本論第一章では、keramaphidin 類の全合成について述べている。初めに、Diels-Alder 反応による三環性中心骨格の構築法を開発している。本反応では、望む生成物に加えて、位置異性体が生成するが、均一溶液中における速度論支配や熱力学支配に基づいた一般的な反応条件では、望みの位置選択性は発現しない。これに対し、LiCl を用いた平衡反応と生成物の高い結晶性に着目し、望みの生成物を単一異性体の結晶として単離可能な動的結晶化に成功している。次に、2 つの大環状アミン構造が同様な炭素鎖を有している点を利用し、ダブル大環状アルキル化を開発している。アミド基とブロモ基を 2 つずつ有する基質に対し、Cs₂CO₃ を加えて加熱し、望む位置選択性で 2 つの大環状アミン構造を一挙に構築している。こうして、これまでの合成例で最も工程数の少ない 12 工程にて keramaphidin B を、13 工程にて ingenamine の全合成を達成している。 本論第二章では、manadomanzamine 類の大員環骨格の構築法について述べている。Manzamine 類の中で最も複雑な構造を有する manadomanzamine 類は、中心骨格に関する合成研究は報告されているが、Z 体オレフィンを含む 2 つの大員環骨格構築に関する研究は一例も報告されていない。大員環構築法として一般的に利用される閉環メタセシス反応は、Z 体オレフィンの立体制御が困難なため利用できない。これに対し、不安定イリドの Wittig 反応で高立体選択的に Z 体オレフィンを形成した後、マクロラクタム化を用いる 10 員環構築法を開発している。最後に、アミド基に対する Ir 触媒を用いた還元的 Strecker 反応により、manadomanzamine 類の G 環部を合成している。また、同様の方法により、11 員環マクロラクタムを形成し、H 環部の合成に成功している。 総括では、本研究の成果がまとめられており、実験編には本論文における実験操作および反応生成物のスペクトルデータ等が記述されている。 以上、著者は本研究において、manzamine 類に共通する多環性縮環骨格と、Z 体オレフィンを含む 2 つの大環状アミン構造の構築法を確立している。特に、動的結晶化を用いた選択性制御は、manzamine 類以外の様々な生物活性天然物の全合成へ応用可能であり、本手法が創薬シーズの合成における有用な合成法であることを実証している。著者のこれらの研究成果は、有機合成化学・創薬化学の進展に貢献し、理学上寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6410 号	氏 名	鹿島 柁
主論文題名：			
Colorings of Graphs and Vertex Partitions of Graphs with Degree Conditions (グラフの彩色及び次数条件のもとでのグラフの頂点分割)			
本論文では、グラフが彩色を持つための十分条件及びグラフが特定の頂点分割を持つための十分条件を、独立した二部構成で考察する。 第一部は、グラフの彩色のバリエーションとして知られているオンラインリスト彩色、odd 彩色、proper conflict-free 彩色 (PCF 彩色) に関する章からなる。 オンラインリスト彩色はリスト彩色を拡張として導入された概念であり、多くのグラフにおいてリスト彩色と似た振る舞いを行うことが知られている。第三章では完全2部グラフのオンラインリスト彩色について考察し、完全2部グラフの彩色においてはオンラインリスト彩色とリスト彩色は異なる振る舞いを行うことを示す。 Odd 彩色と PCF 彩色は、いずれも通常の彩色にさらに近傍の色の制約を加えた彩色である。第五章、第六章においては、平面的グラフ及び関連するグラフの族の odd 彩色を考察する。特に第五章では外平面的グラフが4色で odd 彩色できるための必要十分条件を与え、第六章では k-tree の odd 彩色に必要な色数の上界を与える。前者は外平面的グラフ、極大外平面的グラフの odd 彩色に関する先行研究を統合する結果となっている。 第七章においては PCF 彩色における Brooks 型の定理及び次数彩色に関して考察する。染色数と最大次数の関係式を Brooks 型の定理と呼び、多くの彩色において Brooks 型の定理が研究されてきた。本論文では PCF 彩色における次数彩色の類似を新たに導入し、外平面的グラフ、最大次数を制限したグラフ等のいくつかのグラフの族に対して上界を与える。 第二部は、グラフの新たな次数条件である「独立頂点集合上の最小次数和」の性質、及びそれをを用いた 2-proper partition (2-p.p.) 及び 2-因子の存在を保証する十分条件に関する章からなる。独立頂点集合上の最小次数和はグラフの独立数及び最小次数和の二つの側面を持つ不変量であり、既存の次数条件である最小次数、最小次数積と関係がある。その他の基本的な性質については第八章において述べる。 グラフの 2-p.p. とは、グラフの頂点集合の分割で、分割された各集合が誘導する部分グラフが 2-連結となるものである。第九章では、グラフが 2-p.p. を持つための次数条件について考察し、独立頂点集合上の最小次数和に関する十分条件を与える。この結果は先行研究による最小次数条件、最小次数和条件を拡張したものとなっている。 グラフの 2-因子とは、グラフの 2-正則な全域部分グラフであり、ハミルトン閉路との関係から多くの研究が行われてきた対象である。第十章では、グラフが 2-因子を持つための独立頂点集合上の最小次数和条件を考察し、さらにその連結成分数の上界を与える結果を示す。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6410 号	氏 名	鹿島 桓
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	理学博士 太田 克弘
	副査	慶應義塾大学教授	理学博士 田村 明久
		慶應義塾大学教授	博士（情報理工学） 垣村 尚徳
		慶應義塾大学准教授	博士（理学） 小田 芳彰
鹿島桓君の学位請求論文は、「Colorings of Graphs and Vertex Partitions of Graphs with Degree Conditions」（グラフの彩色及び次数条件のもとでのグラフの頂点分割）と題し、全 10 章よりなる．与えられたグラフに対し、隣接する頂点が異なる色となるように各頂点に色を塗ることを頂点彩色とよび、主に必要な色数の最小値が問題となる．グラフの頂点彩色問題は、平面グラフの四色定理に端を発しグラフ理論の大きな一分野をなしており、様々に拡張され研究が進んでいる．本論文の第一部では、それら拡張された頂点彩色のうち、オンラインリスト彩色、odd 彩色、proper conflict-free 彩色（PCF 彩色）の概念に焦点をあて、それらと既存の彩色との違いについて説明を進めている．一方、グラフの頂点彩色は、頂点集合を独立頂点集合へ分割する問題と言い換えられるが、第二部では別の種類の分割構造を考え、グラフがその分割を持つための次数条件について、新たな不変量を導入することにより既存の結果を包括する新しい結果を得ている． 序論である第 1 章と第 2 章では、背景となる既存研究を総括し、以降の議論で必要となる基礎概念の定義とそれらの初等的性質を与えている．第一部の第 3 章から第 7 章では、頂点彩色の様々な拡張概念を扱っている．まず第 3 章ではオンラインリスト彩色について議論している．オンラインリスト彩色の概念は、リスト彩色の拡張として導入された概念であり、その都度彩色可能な頂点集合が指定される状況で彩色することを考える．オンラインリスト彩色とリスト彩色は、しばしば同様の振る舞いをすることがあるが、本論文では、完全 2 部グラフにおいても大きく異なった振る舞いをすることを証明している．証明には巧妙な数学的帰納法が用いられている．第 4 章では odd 彩色と PCF 彩色を導入する．これらの彩色は、各頂点に対してその近傍に現れる色の状況にも制約を与える彩色の概念である．外平面的グラフが 5 色で odd 彩色できることは知られていたが、第 5 章では odd 彩色に 5 色必要な外平面的グラフを完全決定している．第 6 章では、外平面的グラフを抽象化して拡張した k-tree とよばれるグラフの族に対して、odd 彩色に必要な色数の上界を、先行研究を大きく改善した形で与えている．また第 7 章では、PCF 彩色における Brooks 型定理とその拡張を与えている．ここで Brooks 型定理とは、彩色に必要な色数の上界を、そのグラフの頂点の最大次数の式で与えるものを指す．本論文では各頂点の次数を考慮した次数彩色の概念を導入し、いくつかのグラフの族で最善の上界を与え、過去の研究で予想として述べられている問題を部分的に解決している． 第二部の第 8 章から第 10 章では、グラフの頂点集合を分割し、各分割集合が 2-連結グラフを誘導するようにする問題を扱っている．そこでは、グラフの新たな不変量として、頂点数を限定しない「独立頂点集合上の次数和」に関するものを導入し、その次数条件のもとで 2-連結グラフへの分割、連結成分数を制限した 2-因子の存在についての結果を得ている． 以上本研究は、グラフの頂点彩色問題の様々な拡張概念にアプローチし、先行研究を包括しそれらを上回る新しい定理を得て、予想として述べられている問題に進展を与えている．またグラフの頂点分割問題に対しては、新たな次数条件の概念を導入し考察している．これらは、グラフの彩色問題など構造解析に関する重要な理論的成果であり、グラフ理論に貢献するところが少なくない．国外研究者との共同研究成果もあり、これは著者が自立して研究活動を行うために必要な高度な研究能力および学識を有することを示したものとと言える．よって、本論文の著者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める．			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6411 号	氏 名	氏江 優希子
主論文題名：			
病原真菌と免疫細胞の共培養法による新規天然物の探索および その産生メカニズムの解析研究			
放線菌や真菌が有する二次代謝物生合成遺伝子の大半は実験室内の培養条件下において休眠状態であり、それらを活性化することで新規化合物が得られると考えられている。本研究では、病原微生物は免疫細胞から攻撃を受けると、生存のために化合物を生産するのではないかと仮説を立て、臨床検体から分離した病原真菌と免疫細胞との共培養により産生される化合物の探索および単離・構造決定を行った。さらに、単離した化合物の生物活性の評価およびその産生メカニズムの解析を行った。 第1章では、放線菌と真菌が生産する二次代謝物および既知の休眠生合成遺伝子活性化手法について背景を説明し、本研究の意義と目的を述べた。 第2章では、真菌 15 種 19 株と免疫細胞の共培養を行い、共培養時に特異的に産生される化合物または産生が増強する化合物を検出した。病原真菌 <i>Aspergillus niger</i> IFM 59706 とマウスマクロファージ様細胞 RAW264 との共培養時には産生が増強する化合物として aurasperone A (1) を同定した。1 は炎症応答の指標である一酸化窒素 (NO) の産生を阻害した。ガラスビーズを足場として IFM 59706 株を単培養した時にも 1 の産生が見られたことから、本株は細胞を足場として増殖し、1 を産生することが示唆された。 第3章では、共培養時に特異的に産生される化合物の単離・構造解析を行った。まず病原真菌 <i>Aspergillus fumigatus</i> IFM 60237 と RAW264 細胞を共培養することにより新規天然物として fumigatinolactone (2) を単離した。AntiSMASH 解析により化合物 2 の生合成遺伝子を予測し、RT-qPCR により共培養時にその発現が上昇することを明らかにした。続いて、病原真菌 <i>Aspergillus terreus</i> IFM 65899 とヒト単球系白血病細胞 THP-1 の共培養特異的に産生される化合物として、butyrolactone I 類縁体を単離し、butyrolactone Ia (3) と命名した。3 は NO の産生を阻害し、オートファジーを制御する作用を示すことから、免疫細胞に対する防御物質であることが示唆された。さらに、透析膜を用いた培養から IFM 65899 株と THP-1 細胞との物理的相互作用が 3 の産生に必要な可能性を示した。超音波で構造を破壊した細胞を添加した時には、化合物 3 の産生が見られなかったことから、3 の産生には細胞が構造を維持している必要があると考えられた。 第4章では、本研究で得られた知見を総括し、本研究の成果が当該分野の研究に与える影響と今後の展望について述べた。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6411 号	氏 名	氏江 優希子
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授 博士（薬学）	荒井 緑
	副査	慶應義塾大学教授 博士（理学）	宮本 憲二
		慶應義塾大学教授 博士（理学）	末永 聖武
		慶應義塾大学准教授 博士（理学）	犀川 陽子
学士（理学）・修士（理学）氏江 優希子君提出の学位請求論文は「病原真菌と免疫細胞の共培養法による新規天然物の探索およびその産生メカニズムの解析研究」と題して、4章で構成されている。放線菌や真菌が有する二次代謝物生合成遺伝子の大半は実験室内の培養条件下において休眠状態であり、それらを活性化することで医薬等に貢献し得る新規化合物が得られると考えられる。そこで本論文の著者は、病原微生物は免疫細胞から攻撃を受けると、生存のために化合物を生産するのではないかと仮説を立て、臨床検体から分離した病原真菌と免疫細胞との共培養により産生される化合物の探索および単離・構造決定を行っている。さらに、単離した化合物の生物活性の評価およびその産生メカニズムの解析を行っている。 第1章では、放線菌と真菌が生産する二次代謝物および既知の休眠生合成遺伝子活性化手法について背景が説明されており、本研究の意義と目的が述べられている。 第2章では、真菌 15 種 19 株と免疫細胞の共培養を実施し、そのうち共培養時に産生が増強する化合物について単離・構造解析を進めている。病原真菌 <i>Aspergillus niger</i> IFM 59706 とマウスマクロファージ様細胞 RAW264 との共培養時には産生が増強する化合物として aurasperone A (1) を同定し、1 は炎症応答の指標である一酸化窒素 (NO) の産生を阻害することを見いだしている。ガラスビーズを足場として IFM 59706 株を単培養した時にも 1 の産生が見られたことから、本株は細胞を足場として増殖し、1 を産生する可能性を述べている。 第3章では、共培養時に特異的に産生される化合物の単離・構造解析を行っている。まず病原真菌 <i>Aspergillus fumigatus</i> IFM 60237 と RAW264 細胞を共培養することにより新規天然物として fumigatinolactone (2) を単離し、AntiSMASH 解析により化合物 2 の生合成遺伝子を予測し、RT-qPCR により共培養時にその発現が上昇することを明らかにしている。続いて、病原真菌 <i>Aspergillus terreus</i> IFM 65899 とヒト単球系白血病細胞 THP-1 の共培養特異的に産生される化合物として、butyrolactone I 類縁体を単離し、butyrolactone Ia (3) と命名している。3 は NO の産生を阻害し、オートファジーを制御する作用を示すことから、免疫細胞に対する防御物質である可能性を述べている。さらに、透析膜を用いた培養から IFM 65899 株と THP-1 細胞との物理的相互作用が 3 の産生に必要である可能性を示している。超音波で構造を破壊した細胞を添加した時には、化合物 3 の産生が見られなかったことから、3 の産生には細胞が構造を維持している必要がある可能性を述べている。 第4章では、本研究で得られた知見が総括され、本研究の成果が当該分野の研究に与える影響と今後の展望について述べている。 本研究結果は天然物分野において休眠遺伝子活性化の新規手法を確立するとともに、病原微生物と免疫細胞の相互作用の理解を助け、生命科学研究に大いに資するものである。よって、本論文の著者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

Thesis Abstract

Registration Number	“KOU” No.6412	Name	Wang, Zi
Thesis Title Development of Surface/Interface Sensitive <i>in situ</i> Soft X-ray Absorption Spectroscopy Techniques and Their Application to Studies on Photocatalytic System			
This thesis investigates the surface reactions and the interfacial properties on photocatalyst surfaces under gas and liquid environments using <i>in situ</i> soft X-ray absorption spectroscopy (sXAS). By integrating advanced synchrotron-based techniques with new experimental setups, this work explores photoinduced charge transfer during photocatalytic water splitting under realistic working conditions and interactions at photocatalyst-water interfaces. This thesis consists of the following 6 chapters. Chapter 1: General introductions This chapter provides an overview of the scientific background relevant to this study, including heterogeneous catalysis, <i>in situ</i> X-ray absorption spectroscopy, and photocatalytic water splitting. It outlines the fundamental principles and the current challenges in the field, highlighting the importance of studying interfacial properties under operando conditions. Chapter 2: Research Methodology This chapter details the experimental and theoretical techniques employed in this study. It covers soft X-ray absorption spectroscopy (sXAS) with different measurement modes, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), and the specific synchrotron beamlines utilized for the experiments. Additionally, the chapter introduces the computational simulations performed using density functional theory (DFT) to complement the experimental observations. Chapter 3: Charge Transfer in the Co-catalyst loaded Al-doped SrTiO₃ Photocatalyst under Ambient Pressure Conditions This chapter focuses on the development of <i>in situ</i> sXAS methodologies. The newly developed conversion electron yield (CEY) cell enables direct probing of photoinduced charge transfer from the photocatalyst, Al-doped SrTiO₃, to the co-catalyst cobalt oxyhydroxide (CoOOH) at oxygen evolution reaction (OER) sites. Spectral changes observed at the Co L-edge under varying conditions reveal the critical role of water molecules and hydrogen evolution reaction (HER) sites in facilitating photoexcited hole transfer to CoOOH surfaces, thereby enhancing photocatalytic efficiency through effective charge separation.			

Chapter 4: XAS Measurement Under Liquid Condition and Water/Toluene Structure Near Au Surface

This chapter extends the surface-sensitive insights to liquid environments by introducing a solid-liquid interface-sensitive sXAS cell designed for total electron yield (TEY) and total ion yield (TIY) measurements. Systematic studies on the Au-H₂O interface demonstrate the sensitivity of sXAS spectra to both interfacial and bulk water regions across multiple detection modes, including TEY-sample side, TEY-counter electrode side, TEY-dual electrode, and TIY. The results highlight the capability of electron and ion yield modes to selectively probe interfacial and bulk regions in solid-liquid systems, providing valuable insights into surface chemistry.

Chapter 5: Solid-Liquid Interface Structure of STO and CoOOH in Liquid Water

This chapter presents further advancements in the solid-liquid interface-sensitive sXAS analysis of SrTiO₃ (STO) and CoOOH surfaces in contact with water. The findings reveal significant differences in the electronic structure of these materials under liquid conditions compared to vacuum. Specifically, CoOOH surfaces exhibit a high-spin state in liquid water, while STO surfaces show partial electron filling of *t_{2g}* orbitals due to interactions with water lone pairs. Additionally, the interfacial water structure was found to differ significantly from bulk water, displaying an ice-like structure on STO and a water structure with reduced isolated OH groups on CoOOH.

Chapter 6: Concluding Remarks

The final chapter summarizes the key findings of this thesis and highlights the contributions made to the field of photocatalysis and surface chemistry. The chapter also outlines potential future research directions aimed at further advancing synchrotron-based studies of surface reactions and interfacial properties.

審査の要旨

報告番号	甲 第 6412 号	氏 名	王 梓 (Wang, Zi)
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	博士（理学） 近藤 寛
	副査	慶應義塾大学教授	理学博士 中嶋 敦
		慶應義塾大学教授	博士（工学） 栄長 泰明
		慶應義塾大学准教授	博士（理学） 畑中 美穂
学士（理学）、修士（理学）王梓君提出の学位請求論文は「Development of Surface/Interface Sensitive <i>in situ</i> Soft X-ray Absorption Spectroscopy Techniques and Their Application to Studies on Photocatalytic System（表面・界面敏感 <i>in situ</i> 軟 X 線吸収分光法の開発と光触媒システムの研究への応用）」と題し、全 6 章より構成されている。 本論文では、軟 X 線吸収分光法（sXAS）を用いた <i>in situ</i>（その場）測定手法を開発し、作動している光触媒の活性表面への光誘起電荷移動の観測や光触媒関連材料と水との界面に特有な構造や電子状態の観測に応用した研究が述べられている。 第 1 章は序論であり、背景として、不均一触媒の反応メカニズムを調べるのによく用いられる放射光 X 線吸収分光が説明され、特に作動している触媒表面を直接観測する <i>in situ</i> sXAS の有用性が述べられている。一方で軟 X 線の透過力の低さゆえに応用への広がりには限定的で、不均一触媒の中でもエネルギー触媒として注目が集まる水分解光触媒への応用も限られている。このような背景の下、<i>in situ</i> sXAS の測定環境を水分解光触媒の実作動条件に近づけつつ、表面・界面感受性を高める高度化によって、作動環境に置かれた光触媒の基礎的性質や作動機構の理解を深めることに応用する本研究の目的が述べられている。 第 2 章では、本研究で使用する手法について述べられており、特に実験手法の基本になるシンクロトロン放射光、ビームライン、sXAS の各種測定モードについて具体的に説明されている。また、実験結果の解釈のために用いた密度汎関数理論や配位子場理論による計算シミュレーションについても簡潔に述べられている。 第 3 章では、光触媒の観測用に新たに開発した転換電子収量セルと測定に用いる SrTiO₃（STO）光触媒の合成・キャラクタリゼーションおよびそれらによる光触媒の <i>in situ</i> sXAS 観測について述べられている。この観測を通して、水分解酸素発生助触媒（CoOOH）表面に有効な光誘起ホールが移動するのに重要な要件が見出されている。 第 4 章では、固液界面の <i>in situ</i> sXAS を 4 種類の異なる検出モードで測定できるシステムを新たに製作し、金基板－水、金基板－トルエンをモデル系として系統的に測定を行った結果が述べられている。それらの結果の詳細な検討から、検出モードによって固液系の界面領域とバルク領域を選択的に解析できる能力が明らかにされている。 第 5 章では、4 章で述べられた固液界面用測定システムを用いて、水と接する STO および CoOOH の表面および界面の水の状態を調べるために行った <i>in situ</i> sXAS 測定の結果が示されている。これらの表面は液体環境下では、真空中とは異なる電子構造になることが見出されている。特に、CoOOH 表面は、真空中では Co が低スピン状態であるが、水中では表面近傍の Co が高スピン状態に変化することが初めて観測されている。また、界面の水の構造はバルク水とは大きく異なり、CoOOH との界面では水素結合していない OH 基がほとんど消失した水構造が見られ、STO との界面では氷に近い構造をとることが見出されている。 第 6 章では、本研究の主要な成果を総括し、本研究において開発した手法について、幅広い不均一触媒のメカニズム解明に展開できる可能性も含めて今後の発展の方向性が述べられている。 以上まとめると、本研究は、<i>in situ</i> sXAS を表面・界面に敏感かつ実作動条件に近い環境で測定できるように高度化し、それを作動環境に置かれた光触媒の基礎的性質や作動機構を調べる研究に応用した。本研究は、放射光軟 X 線分光の応用範囲を拡張すると共に、光触媒の作動機構の理解やそれを基にした新規光触媒の合理的デザインへの発展に貢献するものであり、放射光科学、触媒科学への学術的寄与は少なくない。 よって、本論文の著者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6413 号	氏 名	佐藤 航地
主論文題名：			
深層学習を用いた蛋白質の水和構造予測			
蛋白質は二十種類のアミノ酸が重合してできた生体分子であり、代謝反応触媒、筋収縮などの運動や免疫生体防御まで、あらゆる生命現象を担っている。蛋白質の機能発現にはその立体構造が重要であるが、水環境において特有の立体構造形成や機能発現を生じることから、蛋白質の水和構造が、蛋白質の構造形成、安定性や外部摂動による立体構造変化の理解に不可欠であると考えられている。 近年、蛋白質の構造決定手法として、結晶化を必要とせず、溶液中での構造を観察可能であることから、クライオ電子顕微鏡による単粒子解析法が進展してきた。しかし、電子に対する酸素原子の散乱断面積が小さいことに起因して、2.5 Å 程度の分解能に達しても、静電ポテンシャルマップから主鎖酸素原子や水和水分子の位置を決定することが困難であり、クライオ電子顕微鏡立体構造モデルに基づく動的解析や薬剤開発、特に分子動力学計算では、水和水分子位置予測が喫緊の課題となっている。 蛋白質の水和構造研究は、低温 X 線結晶構造解析や分子動力学計算などに基づいて展開されてきた。特に、低温 X 線結晶構造解析では、2.2 Å を超える分解能の構造モデルについて、蛋白質を水和する多数の水分子が同定されてきたことから、蛋白質 X 線結晶構造モデルを基にした水和構造解析が可能である。 本研究では、蛋白質の水和構造予測手法確立を目的として、三次元畳み込みニューラルネットワークを基に構築した深層モデルにより、多数の高分解能低温 X 線結晶構造モデルから、水和水分子周辺の蛋白質原子配置を学習した。さらに、結晶構造モデルから得られる水分子接触距離を基に、化学的特性を反映した原子種細分化を行うことで、より詳細な深層学習を行うことができた。このようにして最適化した深層モデルを用いて、蛋白質の親水性および疎水性表面、蛋白質内部に対する予測水和分布を得ることができた。また、前述の原子種別特性を踏まえ、予測水和分布を基にした水分子位置予測手法を構築することができ、その位置は結晶構造モデルに含まれるすべての水分子に対して、平均絶対偏差 0.52 Å、平均二乗偏差 0.72 Å 精度で再現するものであった。キャビティー内の水分子や複合体界面および疎水性表面の水和構造を含む予測が可能となったことから、蛋白質立体構造の安定性解明や薬剤開発、動態解析などへの活用が期待される。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6413 号	氏 名	佐藤 航地
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	理学博士 中迫 雅由
	副査	慶應義塾大学准教授	博士（理学） 山内 淳
		慶應義塾大学准教授	博士（理学） 西村 康宏
		慶應義塾大学准教授	博士（理学） 畑中 美穂
学士（理学）、修士（理学）佐藤航地君提出の学位請求論文は、「深層学習を用いた蛋白質の水和構造予測」と題し、本論十章より構成されている。 蛋白質分子は、水環境中において特定の立体構造に折りたたまれ、生理学的機能を発現している。そのため、水と蛋白質分子の境界面での相互作用形態を可視化することは、蛋白質の立体構造構築や動作の原理、蛋白質－分子相互作用、さらには、生命に何故水が必要であるのかなどを物理化学の視点から解明するために不可欠である。蛋白質の水和構造は、主として低温 X 線結晶構造解析によって得られ、膨大な構造情報が Protein Data Bank に蓄積されている。しかしながら、それらは十分に活用されてきたとは言い難い状況である。また、近年、蛋白質の立体構造解析に用いられるクライオ電子顕微鏡では、電子に対する酸素原子の散乱断面積が小さいことに起因して、水分子の同定が困難であり、水和構造予測法の開発が必要となってきた。このような背景の下、佐藤君は、蛋白質分子の内部や表面全体の水和構造を高い精度で予測するべく、三次元畳み込みニューラルネットワークを用いた人工知能（AI）を構築し、任意の蛋白質分子の内部や表面の水和構造を水和水分子位置精度 0.5 Å 以上で予測することに成功した。 第一章では、これまでの蛋白質水和構造研究に関する学術的背景と、本研究の意義についてまとめている。続く第二章では、X 線結晶構造解析の概要、蛋白質表面で見いだされた水和水分子分布の特徴、学習データ作成時の注意点などについて記述している。 第三章では、AI 構築に必要なアルゴリズム要素の概要と適用方法、学習結果の評価方法について記述し、水和構造予測で用いる AI のアーキテクチャを提案している。第四章では、水和水分子が相互作用している蛋白質の四原子種に着目した学習データ作成方法についてまとめ、アルゴリズム要素の組み合わせを変えながら構築した六種類の AI について、それらの予測性能を情報科学理論に基づいて評価している。第五章では、最良の性能を示した AI による水和構造予測結果について、学習に未使用の立体構造モデルと照合しながら、水和水分子分布確率と水和構造予測位置を評価し、構築した AI が、親水性表面のみならず、これまで困難であった疎水性表面の水和構造予測が可能であることを示している。 第六章では、AI 水和予測での位置精度のさらなる向上のために、蛋白質表面原子の化学的特性に着目した十八種類の学習データ作成を提案し、それに対応した AI を構築している。アルゴリズム要素の組み合わせを変化させて構築した 47 種類の AI について、情報科学的にその基本性能を評価し、最良の AI を採用している。第七章では、AI が与える水和水分子分布確率から最も確からしい水分子位置を高い精度で予測するアルゴリズムなどを新たに提案・実用化している。第八章では、再構築した AI を蛋白質の水和構造予測に適用して予測精度を評価し、現在、水和構造予測 AI の中で世界最高性を誇ることを明らかにしている。 第九章では、再構築した AI を膜貫通型蛋白質の水和構造や、蛋白質－薬剤分子相互作用評価に適用することを検討して、AI による蛋白質水和構造研究の将来を展望している。最後に、第十章において、本研究の成果を総括している。 以上、著者は、蛋白質科学において、重要である蛋白質の水和構造予測について、深層学習を軸とした方法を提案して実用化するとともに、その有効性を示した。その成果は、今後の蛋白質水和構造研究とそれに基づく創薬分野発展などに貢献しうるものと評価できる。 本論文の骨子である第三～五章、および、第六～八章の内容については、それぞれ一報の学術論文として国際的学術雑誌に公刊されており、それらの内容は、広く理学上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6414 号	氏 名	孫 延君
主論文題名： Toward Dynamic and Realistic Vision-and-Language Navigation – Addressing Complex Changes in Real-World (動的かつ現実的な Vision-and-Language Navigation を目指して －実世界の複雑な変化への対応)			
高齢化，危険作業の自動化といった課題に対処するため，物理的な身体を持ち実世界と相互作用するエージェントを開発する Embodied AI が注目されている．その中でも，Vision-and-Language Navigation (VLN) は目的地への移動を行うタスクであり，家庭用ロボットや自動運転への応用が期待されているが，既存の VLN タスクは静的環境を前提としており，動的要因や長期的変化を十分に反映していない．また，都市環境の連続的变化を記録したデータセットも不足している．本研究では，屋外環境での認識とナビゲーションを基に，環境認識の向上と動的環境適応の課題に挑む．具体的には，ランドマーク物体を正確に認識するナビゲーション手法を開発し，長期間にわたる街路変化を記録したデータセットを構築する．さらに，動的な交通や歩行者を考慮したナビゲーションタスクを定義し，エージェントが環境変化に適応する手法を提案する． 第 1 章では，VLN と変化認識の背景と位置付けについて述べる．現実世界の複雑な環境において，従来手法が抱える課題を明確化し，本研究の目的と解決すべき問題を提示する．特に，静的環境を前提とした既存の VLN モデルの限界や，動的および長期的変化への適応能力の欠如に焦点を当てる．第 2 章では，屋外環境におけるナビゲーションタスクにおいて，ランドマーク物体を利用した VLN モデルを提案する．エージェントが環境中の物体情報を活用することで，従来手法が回る場所や停止場所の判断ミスを改善し，ナビゲーション精度の向上を実現する．第 3 章では，長期間にわたる屋外環境の変化を認識するための新たなデータセットを構築する．本データセットは，環境の連続的かつ長期的な進化を記録し，従来の静的環境に依存するデータセットの限界を克服することを目指している．さらに，このデータセットが変化領域の分割や記述といった複数のタスクを提案する．第 4 章では，既存の VLN タスクを拡張し，動的な交通状況や天候などの要因を考慮した新たなナビゲーションタスクを定義する．また，これらの動的要因に対応可能な手法を提案し，エージェントがリアルタイムで環境の変化に適応できる能力を強化する．第 5 章では，本研究の成果をまとめ，提案手法およびデータセットが現実世界におけるナビゲーションや変化認識タスクに与える影響について議論する．さらに，今後の課題と展望について述べる．			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6414 号	氏 名	孫 延君
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学教授 博士（工学） 青木 義満			
副査 慶應義塾大学教授 工学博士 田中 敏幸			
慶應義塾大学准教授 博士（工学） 村田 真悟			
慶應義塾大学専任講師 博士（工学） 吉岡 健太郎			
学士（工学）、修士（理学）孫延君君提出の学位請求論文は「Toward Dynamic and Realistic Vision-and-Language Navigation – Addressing Complex Changes in Real-World」（動的かつ現実的な Vision-and-Language Navigation を目指して一実世界の複雑な変化への対応）と題し、5 章から構成されている。 Vision-Language Model は、視覚情報と自然言語を統合し、ロボットやエージェントの柔軟な行動を可能にする技術である。家庭用ロボットや自動運転車など、幅広い応用が期待される一方で、物体の詳細な認識や動的環境への適応に課題がある。既存の Vision-and-Language Navigation（VLN）タスクは静的環境を前提としており、動的要因や長期的変化を十分に反映していない。また、都市環境の連続的変化を記録したデータセットも不足しているのが現状である。 本論文では、屋外環境での認識およびナビゲーションを対象に、詳細な環境の認識及び動的環境に適応したナビゲーションに取り組んでいる。ランドマーク物体を正確に認識するナビゲーション手法を開発し、長期間にわたる街路変化を記録した新たなデータセットを構築している。さらに、動的な交通状況の変化を考慮したナビゲーションタスクを定義し、エージェントを動的な環境変化に適応させるための手法を提案し、その有効性を実証している。 第 1 章では、VLN と変化認識の背景と位置付けについて述べている。現実世界の複雑な環境において、従来手法が抱える課題を明確化し、本研究の目的と解決すべき問題を提示している。特に、静的環境を前提とした既存の VLN モデルの限界や、動的および長期的変化への適応能力の欠如に焦点を当てている。 第 2 章では、屋外環境におけるナビゲーションタスクにおいて、ランドマーク物体を利用した VLN モデルを提案している。エージェントが環境中の物体情報を活用することで、従来手法における停止場所の判断ミスなどを改善し、ナビゲーション精度の向上を実現している。 第 3 章では、長期間にわたる屋外環境の変化を認識するための新たなデータセットを構築している。本データセットは、環境の連続的かつ長期的な変化を記録し、従来の静的環境に依存するデータセットの限界を克服することを目指している。さらに、このデータセットを用いて、変化領域の分割や記述といった複数の新規タスクを提案している。 第 4 章では、既存の VLN タスクを拡張し、動的な交通状況や天候などの要因を考慮した新たなナビゲーションタスクを定義している。また、これらの動的要因に対応可能な手法を提案し、エージェントがリアルタイムで環境の変化に適応できる能力を実験により示している。 第 5 章では、本研究の成果をまとめ、今後の課題と展望について述べている。 以上要するに、本論文は、Vision-and-Language Navigation タスクを対象に、詳細な環境の認識及び動的環境に適応した新規のナビゲーション手法を提案したものであり、画像工学分野において、工学上、工業上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6415 号	氏 名	遠藤 正文
主論文題名：			
Embracing Uncertainty: Resilient Robotic Autonomy for Rough Terrain Exploration (不確実性を乗り越える不整地探索のための自律移動知能)			
移動ロボットによる不整地探索は人類に代わって危険な環境に踏み込み、新たな知見をもたらすことで人類社会に貢献している。持続的な探索にはロボットが環境に潜在する危険を特定し、適切な意思決定を行うための頑健な環境認識技術が重要である。一方、ロボットの環境認識には不確実性が常に存在し、これによるロボットの誤った意思決定がミッションの失敗をもたらす。安全性を確保するためこれまで過度に保守的に運用されてきた一方、このような「足枷」となるアプローチはロボットの自律性を阻害し、ミッションの遅延を引き起こす。より迅速に広範な探索を実現するためにはロボットの自律性を最大限に引き出すことが重要であり、不確実性を考慮した自律知能が鍵となる。 そこで本研究では、不確実性を「受け入れて・乗り越える」という方針に基づき移動ロボットの安全性と不整地での効率的な探索活動を両立するための自律移動技術を提案した。特に不整地走行において、障害を認識するための環境理解と経路・動作計画の実行に伴う状態遷移には顕著な不確実性が存在する。これらの不確実性を考慮しない場合、誤った意思決定により、軟弱地盤での走行不能状態や障害物との衝突などの危険な状況を招く恐れがある。この課題に対し、本研究では不確実性の定量的評価とその意思決定への活用を通じて、リスクに対して頑健かつ適応的な自律移動アルゴリズムを構築した。 第1章では、不整地探索を行う移動ロボットの自律技術に焦点を当て、本研究の背景と目的を説明した。また、本論文で扱う環境理解と状態遷移における不確実性の概念を導入し、前者を第2章から第5章で、後者を第6章で論じることを示した。 第2章では、決定論的な学習モデルを用いた走行可能性予測での不確実性の反映を目的とした、地形分類器とスリップ回帰モデルの融合手法を提案し、実機実験で取得したデータを用いてその有効性を検証した。 第3章では、学習モデルの不確実性の最小化を目的とした、確率制約下における能動学習アルゴリズムを提案し、数値解析で同手法の効果的な環境適応を検証した。 第4章では、学習モデルの予測誤りに頑健な走行可能性の予測を目的とした、学習モデルの出力の確率的融合と経路計画への活用手法を提案し、シミュレータにおいて既存手法より安全な経路計画を達成することを確認した。 第5章では、不確実性の活用とモデル適応を融合し、不確実性に包括的に対処するナビゲーション手法を提案した。走行可能性の予測誤りを引き起こす原因を模擬したデータセットにおいて数値解析を行い同手法の有効性を検証した。 第6章では、事前情報が入手不能な環境における安全な自律移動の実現を目的として、周期的な自己位置推定と連続的な動作計画を扱うタスク・動作計画手法を提案した。本手法により、状態遷移の不確実性下においても頑健かつ適応的な意思決定を実現した。 第7章では、本研究の主要な結果と貢献を要約し、今後の展望について言及した。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6415 号	氏 名	遠藤 正文
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学准教授 博士（工学）	石上 玄也
	副査	慶應義塾大学教授 博士（工学）	青木 義満
		慶應義塾大学教授 博士（工学）	高橋 正樹
		慶應義塾大学教授 博士（情報学）	杉浦 孔明
		NASA/JPL Group Supervisor Ph.D.	小野 雅裕
学士（工学）、修士（工学）、Master of Science 遠藤正文君提出の学位請求論文は、「Embracing Uncertainty: Resilient Robotic Autonomy for Rough Terrain Exploration」（不確実性を乗り越え不整地探索のための自律移動知能）と題し、7章から構成されている。 移動ロボットを用いた不整地探索において、ロボットは環境に潜在する危険を特定し、適切な意思決定を行うための頑健な環境認識技術を有する必要がある。一方、ロボットの環境認識には不確実性が常に存在するため、これが誤った意思決定を招き、ミッションの失敗をもたらしてしまう恐れがある。また、リスクを過剰に評価した保守的なロボット運用は、ロボットの自律性を阻害し、ミッションの遅延を引き起こす問題がある。よって、迅速かつ広範な探索を実現するためには、不確実性を考慮し、活用する自律知能の構築が重要である。 そこで本論文では、移動ロボットの安全性と不整地での効率的な探索活動を両立するための自律移動技術の構築を目的としている。特に、障害物認識における環境理解ならびに経路・動作計画の実行に伴う状態遷移における不確実性の定量的考慮と自律移動における意思決定への不確実性の活用を通じて、リスクに対して頑健かつ適応的に自律移動可能なアルゴリズムを提案している。 第1章では、不整地探索を行う移動ロボットの自律技術に焦点を当て、本研究の背景と目的、ならびに本論文において扱う環境理解と状態遷移における不確実性の概念を導入している。 第2章では、決定論的な学習モデルを用いた走行可能性予測に注目し、不確実性の反映を目的とした地形分類器とスリップ回帰モデルの融合手法を提案するとともに、実機実験で取得したデータを用いてその有効性を検証している。 第3章では、学習モデルの不確実性の最小化を目的として、確率制約下における能動学習アルゴリズムを提案し、数値解析により同手法の環境適応性を検証している。 第4章では、学習モデルの誤りに頑健な走行可能性の予測を目的として、学習モデルの出力の確率的融合と経路計画への活用手法を提案し、既存手法に比べてより安全な経路計画が実現できることを示している。 第5章では、不確実性の活用とモデル適応を融合し、不確実性に包括的に対処するナビゲーション手法を提案している。特に、走行可能性の予測誤りを引き起こす原因を模擬したデータセットに対して数値解析を行い、提案手法の有効性を検証している。 第6章では、事前情報が無い未知環境における安全な自律移動の実現を目的として、周期的な自己位置推定と連続的な動作計画を扱うタスク・動作計画手法を提案し、頑健かつ適応的なロボットの意思決定を実現している。 第7章では、本研究の主要な結果と貢献について総括し、今後の展望について言及している。 以上要するに、本論文は不整地探索において生じる不確実性を包括的に考慮し活用する自律移動知能を提案するものであり、ロボット工学分野において、工学上、工業上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6416 号	氏 名	神川 郁海
主論文題名：			
ハロゲン化鉛ペロブスカイト太陽電池の結晶配向制御			
ペロブスカイト太陽電池 (perovskite solar cell, PSC) は軽量かつフレキシブルな太陽電池として近年注目されている次世代型太陽電池で、発見から 15 年で変換効率は急速に向上し、2024 年現在、26.7 %を記録している。最も典型的なペロブスカイト材料のひとつがハロゲン化鉛ペロブスカイト ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, MAPbI_3) で、可視光を吸収できるバンドギャップ、厚さ数百 nm で十分光を吸収できる吸光係数、その厚さに匹敵する長いキャリア拡散長といった特性を有しており、太陽電池の光活性層として優れた材料である。一方で、PSC の性能を低下させる要因として MAPbI_3/キャリア輸送層の界面におけるキャリア再結合が挙げられる。MAPbI_3 が多くのキャリアを生成しても、キャリア再結合が起きると外部に取り出せる電流が減少してしまう。 そこで本研究では、キャリア輸送層として有機半導体バッファ層 (organic semiconductor buffer layer, OSBL) を採用し、OSBL の上に MAPbI_3 を成長させるプロセスに注目した。本研究で使用した OSBL はルブレन、ペンタセンの各単層膜と新たに提案するルブレン/ペンタセン二重層 (r/p 二重層) の 3 種類であり、ルブレンは MAPbI_3 のエピタキシャル成長を実現できる下地として、また、ペンタセンはルブレンの配向性を保証するために使用した。これらの OSBL を適切に構築して MAPbI_3 の配向制御を実現することにより、MAPbI_3/OSBL 界面の密着性を改善してキャリア再結合を抑制し、PSC の変換効率を向上させることを目的とした研究を遂行した。 第 1 章では、国際社会が抱えるエネルギー問題と、その解決のために PSC が果たす重要な役割、PSC に関する研究動向と課題点をそれぞれ概説し、本研究の目的と特徴を記した。 第 2 章では、本研究で使用した試薬と装置を紹介し、試料の作製方法について交互蒸着法、2 ステップ法を含めて示した。 第 3 章では、OSBL の詳細な成膜条件の最適化を実施した後、交互蒸着法としてヨウ化メチルアンモニウム ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$, MAI) とヨウ化鉛 ($\text{PbI}_2$) を交互に成膜することで、$\text{MAPbI}_3$ を堆積した。作製した試料の X 線回折において、MAPbI_3 に対する PbI_2 の強度比を 1 %未満に抑制でき、PbI_2 の残留がきわめて少ない MAPbI_3 の作製条件を確立した。その後、OSBL の構成が異なる 3 つの PSC を作製した結果、r/p 二重層を使用した PSC において最も優れた変換効率を得られ、PSC における OSBL の重要性を示した。 第 4 章では、OSBL 上に MAPbI_3 を堆積する新手法として、PbI_2 蒸着膜を MAI 溶液に浸漬して MAPbI_3 層を構築する 2 ステップ法を採用した。そのプロセスにおいても、PbI_2 の残留がきわめて少ない MAPbI_3 の作製条件を確立した。その後、微小角入射広角 X 線散乱法により、r/p 二重層の上に成長した MAPbI_3 が、本研究で作製した他の試料よりも高い配向性を有することを確認した。その高い配向性を有する MAPbI_3 に対して r/p 二重層を使用した PSC を作製した結果、交互蒸着法使用時よりも更に高い変換効率を得られ、2 ステップ法の有用性を示した。 第 5 章では、結論として本論文の要約と今後の展望を記した。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6416 号	氏 名	神川 郁海
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学教授 博士（工学） 野田 啓			
副査 慶應義塾大学教授 Ph. D. フォンス, ポール			
慶應義塾大学准教授 博士（工学） 田中 貴久			
慶應義塾大学准教授 Ph. D. 清水 智子			
学士（工学）、修士（工学）神川 郁海君提出の学位請求論文は「ハロゲン化鉛ペロブスカイト太陽電池の結晶配向制御」と題し、5 章から構成されている。 ペロブスカイト太陽電池は、近年注目されている次世代型太陽電池である。最も典型的なペロブスカイト材料のひとつがハロゲン化鉛ペロブスカイト（MAPbI_3）で、可視光を吸収できるバンドギャップ、厚さ数百 nm で十分光を吸収できる吸光係数、その厚さに匹敵する長い電荷キャリア拡散長といった特性を有しており、太陽電池の光活性層として優れた材料である。一方で、その光電変換性能を低下させる要因として MAPbI_3/キャリア輸送層の界面における電荷キャリアの再結合が挙げられる。そこで本研究では、キャリア輸送層として有機半導体バッファ層を採用し、その表面上に MAPbI_3 を成長させるプロセスに注目している。本研究で使した有機半導体バッファ層はルブレ、ペンタセンの各単層膜と新たに提案するルブレ/ペンタセン二重層の 3 種類であり、これらを適切に構築して MAPbI_3 の配向制御を実現することにより、MAPbI_3/有機半導体界面の密着性を改善して電荷キャリア再結合を抑制し、ペロブスカイト太陽電池の変換効率を向上させることを目的とした研究を遂行している。 第 1 章では、研究の背景と目的を述べ、従来の研究を概説している。 第 2 章では、本研究で使した試薬と装置群、ならびに試料の作製方法である交互蒸着法、2 ステップ法について記している。 第 3 章では、有機半導体バッファ層の成膜条件の最適化を実施した後、交互蒸着法としてヨウ化メチルアンモニウムとヨウ化鉛を交互に成膜することで、MAPbI_3 を堆積している。その結果、ヨウ化鉛の残留量がきわめて少ない MAPbI_3 の作製条件を確立している。その後、有機半導体バッファ層の構成が異なる 3 つの太陽電池を作製した結果、ルブレ/ペンタセン二重層を使した太陽電池において最も優れた変換効率を得られ、有機半導体バッファ層の重要性を示している。 第 4 章では、MAPbI_3 を堆積する新手法として、ヨウ化鉛蒸着膜をヨウ化メチルアンモニウム溶液に浸漬して MAPbI_3 層を構築する 2 ステップ法を採用している。そのプロセスにおいても、ヨウ化鉛の残留量がきわめて少ない MAPbI_3 の作製条件を確立している。その後、微小角入射広角 X 線散乱法により、ルブレ/ペンタセン二重層の上に成長した MAPbI_3 が、本研究で作製した他の試料よりも高い配向性を有することを確認している。その高い配向性を有する MAPbI_3 を用いて太陽電池を作製した結果、交互蒸着法使用時よりも更に高い変換効率を得られ、2 ステップ法の有用性を示している。 第 5 章では、各章で得られた成果をまとめ、本論文全体の結論を述べている。 以上要するに、本論文では有機半導体バッファ層を導入することで、ハロゲン化鉛ペロブスカイトの結晶配向制御や太陽電池としての特性向上を実験的に示し、その考察を基盤として、ペロブスカイト太陽電池の開発指針を提示しており、半導体デバイスや光エネルギー変換分野において工学上、工業上寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6417 号	氏 名	堀田 光
主論文題名：			
交互共重合体を用いた複屈折に関する研究			
スマートフォンや車用のセンサーなど、カメラの使用台数は年々上昇している。カメラに使用されているレンズは、複数枚を重ね合わせた構成にすることで高性能化することができる。光学ポリマーは、ガラス材料と比べて軽く、成形がしやすいことからカメラレンズにも使用されている一方、屈折率の異方性である複屈折の制御が求められる。複屈折は、透過する光の偏光状態を変化させる効果がある。また、複屈折の生じる光学ポリマーをレンズに使用した場合、光の振動方向によって異なる屈折率となるため、画像がにじむ、センサーの精度が低下するといったことが生じる。これまでに複屈折をゼロにするための研究が行われてきたがそのほとんどが、ランダム共重合法による光学ポリマーについてであった。そこで本研究では、これまでに検討されてきたランダム共重合体ではなく、交互共重合体を中心に複屈折性や諸物性の解明及び、解明した結果を基にゼロ・ゼロ複屈折ポリマーの設計を目的とした。 第1章は序論であり、本研究の背景としてディスプレイやレンズ向けにゼロ・ゼロ複屈折ポリマーの必要性について述べた。また、本論文の目的及び構成を示した。 第2章では、複屈折性や耐熱性、また、ポリマーを合成する手法の中で特に本論文で重要な交互共重合、比較としてランダム共重合について述べた。 第3章では、これまでに実証された複屈折の消去方法について述べ、さらに従来のゼロ・ゼロ複屈折ポリマーの設計方法について解説した。 第4章では、<i>N</i>-置換マレイミドを用いた交互共重合体の中で、<i>N</i>-置換マレイミドの置換基がアルキル基である材料を用い、ビニルモノマーとの共重合体を合成し、複屈折特性やそれ以外の光学特性、ガラス転移温度の解析を行った。 第5章では、置換基がフェニル基系の<i>N</i>-置換マレイミドの複屈折性を評価するため、合成および評価が可能なビニルモノマーの選定を行った。選定したモノマーとの交互共重合体を合成し、置換基の構造に応じた合成検討及び複屈折性の評価を行った。 第6章では、得られた知見を基に、ゼロ・ゼロ複屈折ポリマーの設計を行い、実際に作製、複屈折性や実際に光学ポリマーとしての性能として満たしているか評価を行った。<i>N</i>-置換マレイミドと、ビニルモノマーとしてスチレンとの共重合体において、実際にゼロ・ゼロ複屈折となるポリマーを合成し、さらに複屈折温度依存性がないことを示した。 第7章は結論であり、本研究で得られた成果を総括するとともに、今後の展望についてまとめた。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6417 号	氏 名	堀田 光
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	博士（工学） 片山 靖
	副査	慶應義塾大学教授	博士（工学） 緒明 佑哉
		慶應義塾大学准教授	博士（理学） 山本 崇史
		慶應義塾大学教授	博士（工学） 牧 英之
		慶應義塾大学名誉教授	工学博士 小池 康博
学士（工学）、修士（工学）堀田光君提出の学位請求論文は「交互共重合体を用いた複屈折に関する研究」と題し、7章から構成されている。 光学ポリマーは、フレキシブルであり成型し易いことから、広くディスプレイやレンズに使用されている。一方、ポリマーに固有の複屈折を如何に消去するかが長年の課題である。複屈折の生じる光学ポリマーをレンズに使用した場合、光の振動方向によって屈折率が異なるため、画像のにじみ、センサーの精度低下といった問題が生じる。これまでに光学ポリマーの複屈折を消去するための研究が行われてきたが、そのほとんどがランダム共重合法による複屈折の消去に関する研究である。 本研究では、これまでに検討されてきたランダム共重合体ではなく、交互共重合体を中心にその複屈折性や諸物性を解明し、その結果を基に配向複屈折および光弾性複屈折を消去したゼロ・ゼロ複屈折ポリマーの設計、構築ならびに評価を行っている。 第1章は序論であり、本研究の背景としてディスプレイやレンズ向けのゼロ・ゼロ複屈折ポリマーの必要性ならびに本論文の目的及び構成を示している。 第2章では、複屈折性や耐熱性、また、ポリマーを合成する手法の中で特に本論文で重要な交互共重合について、従来のランダム共重合と比較しつつ述べている。 第3章では、これまでに実証された複屈折の消去方法について述べ、さらに従来のゼロ・ゼロ複屈折ポリマーの設計方法について解説している。 第4章では、<i>N</i>-置換マレイミドを用いた交互共重合体の中で、<i>N</i>-置換マレイミドの置換基がアルキル基である材料を用い、ビニルモノマーとの共重合体を合成し、複屈折性やそれ以外の光学特性、ガラス転移温度の解析を行っている。 第5章では、置換基がフェニル基系の<i>N</i>-置換マレイミドの複屈折性を評価するため、合成に適したビニルモノマーの選定を行っている。選定したモノマーとの交互共重合体を合成し、置換基の構造に応じた合成検討及び複屈折性の評価を行っている。 第6章では、得られた知見を基に、ゼロ・ゼロ複屈折ポリマーを設計し、実際に作製し、複屈折性や光学ポリマーとしての性能を満たしているか評価している。<i>N</i>-置換マレイミドと、ビニルモノマーとしてスチレンとの共重合体において、実際にゼロ・ゼロ複屈折となるポリマーを合成し、さらに複屈折温度依存性がないことを明らかにしている。 第7章は結論であり、本研究で得られた成果を総括するとともに、今後の展望について述べている。 以上要するに、本論文は、交互共重合体を中心に複屈折性や諸物性について詳細に検討し、得られた知見を基にゼロ・ゼロ複屈折ポリマーの設計原理を構築し、その特性を実証したものであり、フォトニクスポリマー工学分野、ディスプレイ分野、レンズ分野において、工学上、工業上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

Thesis Abstract

Registration Number	“KOU” No.6418	Name	Shao, Weirong
Thesis Title			
People Identification and Secondary Action Recognition Methods Using Depth Sensors in Vehicles			
Our study focuses on exploring methods for identifying people and recognizing secondary actions using depth sensors in vehicles. With the increasing implementation of advanced driver-assistance systems (ADAS) and autonomous vehicles, accurately detecting and interpreting human presence and behavior inside and around the vehicle is crucial for ensuring safety and enhancing user experience. Depth sensors, which capture 3D spatial data, offer significant advantages in tracking movement and recognizing activities and receive little impact from changes in the external environment. This research aims to develop effective methods for people identification and secondary action recognition based on depth sensors in vehicles, contributing to safer and smarter vehicle environments. In Chapter 1, we introduce the background of depth sensor applications, as well as people identification and action recognition technologies to date. In Chapter 2, we address the limitations of traditional RGB-based people identification in vehicles by employing 3D Light Detection and Ranging (LiDAR) technology. 3D LiDAR uses infrared lasers to generate a detailed spatial representation without revealing personal details. We focus on enhancing identification accuracy by overcoming occlusion challenges in vehicle interiors, particularly for backseat passengers. Our approach includes converting LiDAR data into depth images using Dynamic Non-linear Mapping (DNLM) and employing generative image inpainting to reconstruct occluded areas. We validate the effectiveness of the YOLOv5 model in recognizing individuals from processed 3D LiDAR images, demonstrating improved accuracy and privacy protection. In Chapter 3, we address the limitations of traditional action recognition methods that rely on RGB data by utilizing a Time-of-Flight (ToF) depth sensor. ToF technology captures depth information based on light travel time, maintaining high accuracy across diverse environments, including low-light and high-glare situations. We introduce a novel deep-learning model for SA recognition. Our model leverages Convolutional Neural Networks (CNN) for feature extraction, enhanced by a Spatial Enhance Attention Mechanism (SEAM) that focuses on critical frame areas to enhance spatial feature analysis for accurate action recognition. A Bidirectional Long Short-Term Memory (Bi-LSTM) network is integrated to capture bidirectional temporal dependencies, further refining action interpretation. Evaluations on the public benchmark Drive&Act dataset demonstrate that our model outperforms existing state-of-the-art models for SA recognition. Ablation experiments confirm the superiority of depth video over conventional RGB video for SA recognition under varying lighting conditions. Our contributions showcase the potential of integrating CNN, SEAM, and Bi-LSTM to advance real-world action recognition applications			

through enhanced spatial and temporal modeling.

In Chapter 4, we improve the time sequence component with Feed-Forward Attention (FFA) based on the deep learning framework proposed in Chapter 3, by incorporating a specialized time-sequence module that enables the model to extract more relevant information within the time-allocated window for secondary actions. This enhancement has led to a notable improvement in action recognition accuracy. Additionally, we introduced advanced data augmentation and super-resolution techniques to diversify our dataset, enhancing the model's generalization and adaptability across varied scenarios

In Chapter 5, we conclude this dissertation and discuss future work.

審査の要旨

報告番号	甲 第 6418 号	氏 名	Shao, Weirong
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学教授 博士（工学） 大槻 知明			
副査 慶應義塾大学教授 工学博士 池原 雅章			
慶應義塾大学准教授 博士（工学） 五十川 麻理子			
Nanjing University of Posts and Telecommunications, Ph.D. Guan Gui			
Bachelor (Automation Control), Master (Electrical Engineering), Weirong Shao 君提出の学位請求論文は、「People Identification and Secondary Action Recognition Methods in Vehicles Using Depth Sensors (深度センサを用いた車両内における人物識別と二次行動認識手法)」と題し、全 5 章から構成されている。 近年、センサや深層学習技術、自動運転技術の進展により、車両内での人の識別や運転中の「二次行動」の認識が重要視されている。しかし、従来の RGB センサは環境光の影響を受けやすく、照度が低い状況や強い光の下で性能が低下しやすいという課題がある。また、RGB カメラは個人の詳細な情報を記録するためプライバシー保護の観点からも懸念があった。これに対して、深度センサは環境光の影響を受けにくく、顔や体の詳細を記録しないため、プライバシーを保護しつつ高精度な識別を可能にする。 本論文では、深度センサを用いて車両内の人の識別と二次行動認識の精度向上を目指し、3D LiDAR (Light Detection and Ranging)や ToF (Time-of-Flight) センサを活用した新たなアプローチを提案している。 第 1 章では、深度センサの応用の背景およびこれまでの人物識別と動作認識技術について説明している。 第 2 章では、従来の RGB ベースの人物識別の限界に対処するため、3D LiDAR 技術を用いた車両内における人物識別を提案している。特に、車内構造による視界の遮蔽問題を解決するために、動的非線形マッピング (Dynamic Non-linear Mapping: DNLM) と生成的画像補完技術を用い、LiDAR データから得られる深度画像を処理する方法を提案している。また、YOLOv5 モデルを用いた個人識別の精度向上を実証している。 第 3 章と第 4 章では、深度センサを用いた車内での二次行動認識に焦点を当てている。 第 3 章では、ToF センサを用い、光環境に左右されない車両内の二次行動認識手法を提案している。提案法は、畳み込みニューラルネットワーク (CNN) と双方向長短期記憶 (Bi-LSTM) を組み合わせ、空間的および時間的依存関係を同時に捉える構造となっている。また、空間強調注意機構 (SEAM) を導入し、重要なフレーム領域に注目することで認識精度を向上させている。 第 4 章では、車両内の二次行動認識の精度を向上させるために、時間的特徴抽出を改善する Feed-Forward Attention (FFA) を導入した手法を提案している。この改良により、二次行動の認識精度が大幅に向上している。さらに、データ拡張と超解像技術を活用してデータセットを多様化し、モデルの汎化能力を向上させている。 第 5 章は結論であり、本研究の要点と貢献を総括し、今後の展望について述べている。 以上、本論文の著者は、深度センサを用いた人物識別および二次行動認識のための新しい手法を提案し、その有効性を確認しており、工学および安全な自動運転システムの分野に寄与するところが多い。よって、本論文の著者は博士(工学)の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6419 号	氏 名	山下 剛志
主論文題名：			
Fast Index-based Random Walks on Dynamic Graphs for Personalized Analysis (動的グラフにおけるパーソナライズ解析のためのインデックスを用いた 高速なランダムウォーク)			
近年、多種多様なデジタルデータが指数的に増加している中、ユーザの興味や嗜好を柔軟に反映させたパーソナライズ解析としてグラフにおけるランダムウォーク (RW) が注目されている。 第 1 章ではランダムウォークを用いたパーソナライズ解析手法を述べる。RW はユーザの興味を表現する起点ノードと探索の範囲を制御する終了確率を入力とするグラフ演算であり、両パラメータを効果的に設定する必要がある。また、高速な演算のためには事前演算した RW の経路群を保持するインデックスの活用が重要である。 第 2 章では本博士論文における前提を整理した。具体的には、RW に基づくパーソナライズ解析手法である Personalized PageRank (PPR) を導入し、最先端の PPR の演算手法である FORA フレームワークを示す。そして、インデックスを用いた高速化手法である FORA+ を説明する。 第 3 章では本博士論文が取り組む 3 種類の課題について述べる。第 4,5,6 章においてそれぞれの課題に対する本博士論文の貢献を示す。 第 4 章では、PPR におけるパラメータの設定指針を確立する。PPR のパラメータである起点ノードの設定手法は数多く検討されてきた一方で、終了確率は盲目的に固定値に設定されてきた。そこで本博士論文では PPR 演算結果における全体重要性和起点近接性の影響を RW の平均経路長を制御する終了確率によって単調にバランスすることを検討する。映画評価データセットを用いたケーススタディでは、RW が短くなるように終了確率を設定することで起点ノードと直接関連が強いノードの評価値が単調に増加することが示された。また、統計的評価では、RW の平均経路長を 1.05 から 100 まで変化させることによって、PPR と全体重要性的ベクトルのコサイン類似度が最大で 0.003 から 0.76 まで単調に変化することが明らかになった。 第 5 章では、任意のパラメータに対する高速な RW 経路生成手法である αFlexWalk を提案する。高速な演算のためには事前実行された経路を保存するインデックスを参照することが重要であるが、インデックスを用いて出力された RW 経路の終了確率は事前			

実行時の値に制約される．そこで本博士論文ではインデックス内の経路を加工することにより任意の終了確率に対する **RW** 経路を高速に生成するアルゴリズムを提案する．具体的には，終了確率が変化すると **RW** の経路長が確率的に変化することに注目しながら，インデックス内の経路の連結・切断によって数学的に精度が保証された経路を生成する．評価では，任意の終了確率に対してインデックスを用いる提案手法はインデックスを用いない既存手法より最大で 10 倍高速であることが明らかになった．

第 6 章では，動的グラフにおける高精度な演算のための高速で軽量のインデックス管理手法を提案する．インデックス生成後にグラフが更新される場合，演算精度の保証のためには一部のインデックスを再生成することが必要であるが，その時間・空間計算コストが課題となっている．そこで本博士論文では，**PPR** 演算におけるインデックス参照は再生成後にあまりインデックスの内容が変化しないノードに集中することに注目して，グラフ更新時のインデックスの再生成を排除するインデックス管理手法を提案する．評価では，インデックス生成時からエッジ数が倍または半分になったとしても，演算精度の低下は 0.4% 以下であることが明らかになった．

最後に第 7 章では，本博士論文の結論を述べる．

審査の要旨

報告番号	甲 第 6419 号	氏 名	山下 剛志
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学准教授 博士（情報理工学）	金子 晋文
	副査	慶應義塾大学准教授 博士（理学）	小田 芳彰
		慶應義塾大学教授 博士（工学）	松谷 宏紀
		金沢工業大学講師 博士（数理学）	高井 勇輝
学士（工学）、修士（工学）を有する山下剛志君の学位請求論文は、「Fast Index-based Random Walks on Dynamic Graphs for Personalized Analysis（動的グラフにおけるパーソナライズ解析のためのインデックスを用いた高速なランダムウォーク）」と題し、全7章から構成されている。 本論文は、指数的に増加する多種多様なデジタルデータを背景に、ユーザが自身の興味や嗜好を柔軟に反映した情報探索の実現を目指している。特に汎用性の高い情報探索としてグラフ処理に注目し、その基盤技術であるランダムウォーク（RW）をパーソナライズ解析に利用するための課題に取り組んでいる。具体的には、実世界の動的グラフを想定し高速・軽量・高精度にRWに基づくパーソナライズグラフ解析の実現手法を提案している。 第1章は序論であり、研究の背景として増え続けるデジタルデータとその汎用的な利用技術としてグラフを用いたパーソナライズ情報解析の重要性と、本研究の目的を述べている。 第2章は、本研究における前提として、RWに基づくパーソナライズ解析手法である Personalized PageRank (PPR) と、最先端の PPR 演算手法である FORA を示している。 第3章は、第4章から第6章までに示される3つの課題について述べている。 第4章は、ひとつ目の課題である、PPRにおける終了確率の設定指針について述べている。具体的には、これまで盲目的に固定値に設定されてきた PPR のパラメータの一つである RW の平均経路長を決める終了確率に注目し、終了確率を PPR 演算における全体重要性和起点近接性の影響を単調にバランスするパラメータとすることを提案している。映画評価データセットを用いたケーススタディでは、RW が短くなるように終了確率を設定することで起点ノードと関連が強いノードの PPR 値が単調に増加することを示している。また、RW の平均経路長を 1.05 から 100 まで変化させることによって、PPR と全体重要性的ベクトルのコサイン類似度が最大で 0.003 から 0.76 まで単調に変化することを明らかにしている。 第5章は、二つ目の課題である、任意の終了確率に対する高速な RW 経路生成について述べている。高速な演算のためには事前実行された経路群であるインデックスを参照することが有効だが、インデックスを用いて生成した経路の終了確率は事前実行時の値に制約される。そこでインデックス内の経路を加工することにより任意の終了確率に対する経路を高速に生成するアルゴリズム α FlexWalk を提案している。具体的には、終了確率が変化すると RW の経路長が確率的に変化することに注目し、インデックス内の経路の連結・切断によって数学的に精度が保証された経路を生成する。評価ではインデックスを用いない既存手法より最大で 10 倍高速であることを示している。 第6章は、三つ目の課題である、動的グラフにおける高速で軽量のインデックス管理について述べている。インデックス生成後にグラフが更新される場合、演算精度の保証のためには劣化した一部のインデックスを再生成することが必要であるが、その時間・空間コストが課題であった。そこで、PPR 演算におけるインデックス参照は劣化しにくいノードに集中することに注目し、グラフ更新時のインデックスの再生成を排除する手法を提案している。評価では、インデックス生成時からエッジ数が倍または半分になったとしても、演算精度の低下は 0.4% 以下であることを示している。 第7章は、結論を述べている。 以上要するに、本研究は、動的グラフのパーソナライズ解析におけるパラメータ設定及び時間・空間コストの問題を解決しており、実世界アプリケーションにおけるパーソナライズの質の改善や扱えるデータサイズやクエリ数における高い規模拡張性が期待される。この貢献は工学上寄与するところが少なくない。よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6420 号	氏 名	小和口 昌愛
主論文題名： 大規模並列計算を活用したレプリカ交換モンテカルロ法の最適化： 一次相転移を示す液晶モデルへの展開			
液晶の相転移現象とは、配向と並進の自由度を持つ分子が液相と固相の両方を持つ相に転移する現象である。産業応用が進展している一方で、液晶の相転移に関する理論的メカニズムには未解明な点が多い。理論的および実験的アプローチに加えシミュレーションを用いることで、分子の配置や相互作用を詳細に解析し、相転移現象の理解が深まる。 統計力学において、相転移現象は熱力学関数の異常な挙動によって特徴付けられ、システムサイズが無限大に近づくときに厳密に現れる。相転移が発生すると熱力学関数は不連続な変化や発散を示す。例えば、一次相転移ではエンタルピーが不連続に変化し、潜熱が関与する。二次相転移では、熱容量や磁化率が相転移点で発散し、特定のべき乗則に従う臨界指数を持つ。これらの現象を理解するためには大規模システムの計算が必要であるが、次元の増加により必要な計算資源は指数関数的に増加するため困難となる。 マルコフ連鎖モンテカルロ法 (Markov-Chain Monte-Carlo, MCMC) は確率分布から直接サンプリングし、局所的な遷移ルールを通じて次の状態を生成する手法で、次元の呪いに対して比較的強い。しかし、液晶の相転移現象を正確に捉えるには、計算効率の改善が不可欠である。MCMC を改良したレプリカ交換モンテカルロ法 (Replica-Exchange Monte-Carlo Method, REMC) は、複数の系 (レプリカ) を異なる温度で同時に MCMC を行い、定期的に状態を交換することで位相空間を効率的に探索する。 本研究では、REMC および液晶相転移シミュレーションに関する課題を克服し、手法の最適化を提案する。REMC は系の平衡状態を効率的に探索するが、交換パラメータの種類や配置間隔の選定に未解決の議論がある。例えば、温度が交換パラメータの基礎概念である一方、相転移を含む系での交換確率は著しく低下する。これは一次元であれば単純な凸関数で表せる評価関数で解決可能だが、二次元以上では複雑化する。 本研究では、二次相転移と一次相転移を含む液晶モデルを対象に、REMC のパラメータ間隔最適化を行う。進化戦略アルゴリズムを用いて交換パラメータの間隔最適化を図り、ハミルトニアンレプリカ交換法を導入して一次相転移を回避する二次相転移交換軸を導入する。本博士論文では、MCMC の基本概念、REMC および拡張アンサンブル法、交換最適化アプローチの概要を説明し、得られた結果と考察を述べるものである。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6420 号	氏 名	小和口 昌愛
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授 博士（工学）	泰岡 顕治
	副査	慶應義塾大学准教授 Ph. D.	彭 林玉
		慶應義塾大学教授 博士（理学），医学博士	藤谷 洋平
		明治大学准教授 博士（理学）	光武 亜代理
学士（工学），修士（工学）小和口昌愛 君の学位請求論文は「大規模並列計算を活用したレプリカ交換モンテカルロ法の最適化：一次相転移を示す液晶モデルへの展開」と題し，9 章から構成されている。 液晶の相転移現象は，配向と並進の自由度を持つ分子が液相と固相の両方の特徴を持つ相である液晶相に転移する現象である．理論的，実験的アプローチに加えて分子シミュレーションを用いると未知の分子種の相転移点の予測や分子の配置などを詳細に解析できるため，液晶の相転移現象の理解が深まることが期待されている．相転移現象を理解するためには，相転移点近傍も含めて効率的に状態をサンプリングする必要がある．レプリカ交換モンテカルロ法(REMC)は，異なる温度の複数の系(レプリカ)の分子シミュレーションを同時に実行し，ある頻度で各系の温度を交換することにより位相空間を効率的に探索する方法である．しかし，相転移現象の計算に適用する際には，相転移点近傍で系の温度交換が起こりにくくなるという問題がある．本論文では，液晶相転移の系に関して，REMC に関するこの課題を克服する最適化の手法を提案している。 第 1 章では本論文の背景および目的，構成を，第 2 章ではマルコフ連鎖モンテカルロ法について，第 3 章では拡張アンサンブル法について，第 4 章では相転移と分子間相互作用について説明している．第 5 章から第 8 章に結果を示している。 第 5 章では，進化戦略アルゴリズムを用いて REMC の交換パラメータ分布を最適化する方法について述べている．交換パラメータが 1 つの場合は，評価関数は単純な凸関数で表現することが可能であるが，交換パラメータを複数に拡張する場合や，ハミルトニアンレプリカ交換法を用いて分子の異方性を交換パラメータとして扱う場合，評価関数はより複雑になる．こうした高次元かつ複雑な評価関数に対して，進化戦略アルゴリズムは効果的な最適化手法として機能することを示している。 第 6 章では，第 5 章で導入した進化戦略アルゴリズムを用いて REMC の温度分布を最適化した結果について述べている．従来の REMC の適用が比較的困難である Lennard-Jones ポテンシャルの液体/固体相転移と液晶のモデルである Yukawa ポテンシャルの Isotropic-Nematic 相転移を取り上げて計算している．本論文で導入した進化戦略アルゴリズムを用いた方法が，従来の方法に比べて，両系の相転移付近の状態をよくサンプリングすることを示し，この方法の有用性を示唆している。 第 7 章では，従来の REMC の適用が困難である液晶のモデルである Hess-Su ポテンシャルの Nematic-Solid 相転移に関して，進化戦略アルゴリズムに加えてハミルトニアンレプリカ交換モンテカルロ法を用いて二次相転移を起こすような交換パラメータを導入した．これにより，転移点近傍のレプリカ交換を効率よく行うことを示している。 第 8 章では，経路探索アルゴリズムによる高交換確率ルートの一括探索について述べている．本章では，事前にレプリカの数が決まっているという制約を取り除き，任意のパラメータ範囲において，特定の交換確率以上で全ての交換が発生するレプリカ数を見つけるプロセスを開発した．得られたパスはエントロピー勾配が緩やかな温度と圧力の間隔であることを示している。 最後に第 10 章で研究全体に関する結論を述べている。 以上要するに，本論文の著者は，REMC における交換パラメータの最適化において，液晶の相転移を例として進化戦略アルゴリズムを用いた研究を行った．その成果は，液晶の相転移における REMC の交換パラメータの最適化手法を提案するだけでなく，相転移計算の研究に大きく寄与するものであり，新規材料開発などにおける相転移点予測などの工学分野への応用が期待できる．よって，本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6421 号	氏 名	佐藤 碧海
主論文題名：			
分子シミュレーションを用いたグラフトナノ粒子の自己集合挙動の解明 およびその応用に関する研究			
本研究は散逸粒子動力学法(DPD)と粗視化分子動力学(MD)法を用いてグラフトナノ粒子(GNP)の自己集合構造とその物性についてまとめたものである。 第 1 章では、グラフトナノ粒子の有用性と現在の応用先について説明した。その後、自己集合構造が未だ解明されていない閉じ込め系について着目し、新たな応用先としてナノセンサと誘電材料について研究を行うことを示した。 第 2 章では DPD 法と粗視化 MD 法についてその歴史と各手法のアルゴリズムについて説明した。 第 3 章では閉じ込め系における GNP の自己集合構造を調査した。はじめに、ナノ粒子表面にグラフトするポリマーの性質を変更し、閉じ込め径毎に構造を分類した。また、閉じ込め壁面の性質を変更し、その影響についても明らかにした。 軸方向の圧力と、ナノチューブの半径とナノ粒子半径の比である L の定性的な状態図を作成し、通常の NP の自己集合構造との比較を行った。強い閉じ込め下($L \leq 1.5$)においてはポリマーや壁面の性質に関係なく一定の構造が形成された。一方でナノチューブ径が大きく、粒子配置の自由度が高い場合においては、僅かな圧力範囲において 2 つの特徴距離を有する構造が形成された。 第 4 章では GNP 二量体の粒子間距離とセンシングの標的分子の捕捉精度について調査を行った。GNP のポリマー長さ、グラフト密度に比例して粒子間距離が増加することを明らかにした。また、センサに最適な 1 nm 以内の粒子間距離に GNP を維持する条件についても明らかにした。センシングの標的分子を加えた際の捕捉率と複数の GNP が存在する系における二量体形成について検討を行い、実験における最適な GNP 構造を提案した。 第 5 章では GNP を添加したポリマーナノコンポジット材料における周波数毎の誘電特性について調査した。GNP の添加による誘電正接の低下を確認した。また、誘電正接の低減に影響のあるパラメータを明らかにした。 第 6 章では本研究の結言として、研究全体の総括を行った。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6421 号	氏 名	佐藤 碧海
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学准教授 博士（工学） 荒井 規允			
副査 慶應義塾大学教授 Ph. D. 堀田 篤			
慶應義塾大学教授 博士（工学） 斎木 敏治			
慶應義塾大学教授 博士（工学） 泰岡 顕治			
佐藤碧海君提出の学位請求論文は「分子シミュレーションを用いたグラフトナノ粒子の自己集合挙動の解明およびその応用に関する研究」と題し、全6章より構成されている。 ナノ粒子は、その自己集合構造の機能性の高さから、多くの化学、光学、医療などの工業製品に使用されている。これらの機能性はナノ粒子の自己集合形態によって変化することが明らかにされており、自己集合構造を制御することで、新たな機能性の発見や安定した製品開発が可能となるため、特に重要である。これまでに自己集合構造を制御する方法として、ナノ粒子の表面特性を変化させるアプローチが用いられており、その中でもナノ粒子表面に機能性ポリマーを付加するグラフトナノ粒子（GNP）は、多様な自己集合構造の形成因子を有することから注目を集めている。 GNP は、グラフトするポリマーの性質や長さなどのさまざまなパラメータを変更することで構造を変化させることが可能である。しかし、形成因子が多様であるがゆえに、自己集合構造との関係について未解明の部分が多い。 このような課題に対し、本論文では粗視化分子シミュレーション手法を用い、GNP の自己集合挙動を調べ、自己集合構造に影響を与える形成因子の解明とその応用に取り組んでいる。 第1章では、GNP の有用性と現在の応用分野について説明した。その後、自己集合構造が未解明である閉じ込め系に着目し、新たな応用分野としてナノセンサと誘電材料の研究を行うことを示した。 第2章では、散逸粒子動力学法と粗視化分子動力学法について、その歴史と各手法のアルゴリズムを説明した。 第3章では、閉じ込め系における GNP の自己集合構造を調査した。はじめに、ナノ粒子表面にグラフトするポリマーの性質を変更し、閉じ込め径ごとに構造を分類した。また、閉じ込め壁面の性質を変更し、その影響についても明らかにした。軸方向の圧力と、ナノチューブの半径とナノ粒子半径の比に対する定性的な状態図を作成し、通常のナノ粒子の自己集合構造との比較を行った。強い閉じ込め下では、ポリマーや壁面の性質に関係なく一定の構造が形成された。一方で、ナノチューブ径が大きく、粒子配置の自由度が高い場合には、僅かな圧力範囲において二つの特徴距離を有する構造が形成されることを示した。 第4章では、GNP 二量体の粒子間距離とセンシングの標的分子の捕捉精度について調査を行った。GNP のポリマー長さやグラフト密度が増加すると、粒子間距離も増加することを明らかにした。また、センサとして最適な 1 nm 以内の粒子間距離を維持するための条件についても明らかにした。さらに、センシングの標的分子を加えた際の捕捉率と、複数の GNP が存在する系における二量体形成について検討を行い、実験における最適な GNP 構造を提案した。 第5章では、GNP を添加したポリマーナノコンポジット材料における周波数ごとの誘電特性について調査した。GNP を添加することで誘電正接が低下することを確認した。また、誘電正接の低減に影響を持つパラメータを明らかにした。 第6章では、本研究の結論として、研究全体の総括を行った。 以上、本研究は、ポリマーをグラフトしたナノ粒子が持つ機能性材料としての可能性に関する基礎的な知見を提供し、工学分野への貢献も期待される。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6422 号	氏 名	横田 壮真
主論文題名：			
Visual Simulation of Opal Using Voronoi Tessellation and Ewald Construction (ボロノイ分割とエバルトの作図を利用したオパールの ビジュアルシミュレーション)			
宝石として利用されるオパールは、遊色効果とよばれる光学現象を発現する。遊色効果は構造色の一つであり、オパール内部の微細な規則構造に起因する。この光学特性から、オパールは古くから宝飾品として利用され、歴史的、芸術的観点から文化財としても評価されてきた。また、オパールはコロイド結晶とよばれる素材に分類されるが、コロイド結晶は特定の可視光を回折する特性をもつことから、量子情報処理や構造色ディスプレイとしての応用が見込まれており、工学的にも高い価値を有している。このように、オパールは産業、人文科学、自然科学の各分野で重要な素材である。 一方で、オパールをコンピュータグラフィックスで写実的に再現する研究は殆ど取り組まれていない。オパールは、直径が数百 nm のコロイドが多数凝集することで構成されており、その内部構造は極めて複雑である。対して、宝飾品に用いられるオパールの大きさは通常数十 mm に達し、コロイド粒子とのサイズ比は 10^5 倍程度に及ぶ。そのため、コロイド一粒ずつの積層情報を現状のコンピュータ上にモデリングすることは、メモリの制約から不可能である。したがって、適切なスケールで内部構造をモデリングする手法が求められる。また、オパール内部で複雑に回折する可視光を効率的に追跡するレンダリング手法も必要である。 本研究は、オパールの物性を調査し、オパールの視覚的特性に貢献する 4 つの要素を特定したうえで、オパールを写実的にビジュアルシミュレーションする手法を提案する。まず、オパールの内部構造を 3 次元ボロノイ図で表現する手法を提案する。ボロノイ図の表現には、符号付距離関数を用いる手法、ボクセルを用いる手法を採用し、それぞれの利点を比較する。次に、これらのモデルに対し、パストレーシング法を用いたスペクトラルレンダリングによって画像を得る。結晶の X 線構造解析で用いられるエバルトの作図に着目し、これを応用して回折を計算する手法を提案する。 本手法が提案する 7 種類のパラメタ値の組み合わせによって、汎用的なオパールのビジュアルシミュレーションが可能であることを示した。また、実物のオパールのパラメタ値を適用し、実物に則した遊色効果の再現が可能であることを示した。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6422 号	氏 名	横田 壮真
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	理学博士 藤代 一成
	副査	慶應義塾大学教授	博士（工学） 斎藤 英雄
		慶應義塾大学准教授	博士（メディアデザイン学） 杉浦 裕太
		埼玉大学教授	博士（科学） 岩崎 慶
学士（工学）、修士（工学）の横田 壮真君が提出した学位請求論文は、「Visual Simulation of Opal Using Voronoi Tessellation and Ewald Construction（ボロノイ分割とエバルトの作図を利用したオパールのビジュアルシミュレーション）」と題し、全7章から構成されている。 宝石として利用されるオパールは、遊色効果とよばれる光学現象を発現する。この特性から、オパールは産業、人文科学、自然科学の各分野で重要な素材である。一方で、オパールをコンピュータグラフィックス（CG）で写実的に再現する研究は、その内部構造の複雑さから殆ど取り組まれていなかった。本研究では、実物のオパールに対する詳細な文献調査と観察によって、オパールのビジュアルシミュレーションに必要な要素を明らかにしたうえで、遊色効果を再現するのに適切なスケールで内部構造をモデリングする手法と、オパール内部で複雑に回折する可視光を効率的に追跡するレンダリング手法を提案している。 第1章では、写実的なオパールのビジュアルシミュレーションを行うことの重要性を述べ、提案手法の目的と貢献を要約している。 第2章では、写実的な画像の合成、宝石のビジュアルシミュレーション、凝集体のレンダリング、CGにおける構造色の取り扱いに関連する各種の先行研究を広く概観し、本研究の立ち位置を明確にしている。 第3章では、現実世界におけるオパールの特性を、文献調査および機材を用いた観察による結果をもとに報告している。本研究が扱うオパールの種別を特定したあと、オパールの内部構造と遊色効果が発生する原理について説明するとともに、オパールのビジュアルシミュレーションを行うための基本方針を立てている。 第4章では、オパールの内部組織を表現するための論理的データ構造を、重み付きボロノイ分割とパーコレーションモデルを用いて表現する方法を、理論的な側面と実装的な側面から詳細に示している。また、オパールの地色を再現するためのモデリング方法についても議論している。 第5章では、大域照明計算のなかで、オパール内部で発生する光学現象を再現する手法について述べている。遊色効果を再現するために、結晶のX線構造解析で用いられるエバルトの作図を応用した局所照明計算方法を示し、オパール内部の不純物によって発生する光の吸収や散乱を計算する手法についても説明している。 第6章では、本研究の結果を示し、考察を加えている。遊色効果が再現されていることを確認し、発色が実物のオパールと一致することを実証している。また、地色のパラメタ値を変更することによって、多様なオパールを再現可能であることを示している。さらに、内部構造モデルと光学モデルの妥当性と課題、計算時間とその改善方針、本研究の成果を用いたオパールのモデリングのためのガイドライン、本研究の応用可能性について議論を展開している。 第7章では、本研究を要約し、結論を述べている。 以上要するに、本研究で提案されたオパールのビジュアルシミュレーション手法は、現実から区別のつかない写実的な画像合成法として宝飾品や人工オパールの設計支援が可能である点で、工学的に寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

内容の要旨

報告番号	甲 第 6423 号	氏 名	相澤 彩美子
主論文題名： 多孔質体表面からの蒸発を伴う溶液浸透で生じるパターン形成			
非平衡系の不可逆過程で秩序構造が出現する現象は、歴史的に多くの研究者の関心を集め、特に人工的な系を用いた非平衡現象の実験的研究は、多岐にわたる応用に貢献してきた。本論文では、工業的に重要な多孔質体への溶液浸透システムにおいて生じる非平衡現象を調査すること目的として研究を行い、多孔質体表面からの液体蒸発と浸透が同時に進行し、平衡から遠く離れた状態となることで、様々な動的挙動およびパターン形成が生じることを明らかにした。実験調査と理論解析の両面から議論を行うことで、非線形科学と工業的応用を結びつける応用への端緒を開いた。 第1章では、散逸構造を熱力学的観点から説明し、反応拡散システムと蒸発システムに代表される人工的な非平衡システムについて概説するとともに、蒸発を伴う多孔質体中の溶液浸透過程の産業的重要性、および非線形科学の観点からの研究の意義を論じた。 第2章では、揮発性の異なる2溶媒の混合溶液が多孔質体へ蒸発を伴って毛管浸透する際に生じる非線形浸透挙動について報告した。実験調査により、蒸発・浸透過程で溶媒組成の空間不均一性が増大し、浸透フロントの分岐と転移が生じることが明らかになり、現象の機構を Richards 式に基づく擬一次元モデルを用いて検討した。 第3章では、第2章で観察された浸透フロントの非線形挙動が、溶質移動の特異な非線形挙動を引き起こすことを報告した。浸透挙動及び溶質挙動に対する湿度の影響が明らかになり、溶媒の蒸発に加え、空気中の水分の凝縮が生じることで、溶質の溶解度や溶媒の極性の極端な不均一さが成長しうることが明らかになった。 第4章では、多孔質体表面からの溶媒蒸発を伴う溶液浸透過程で、溶質の析出が様々なパターンを形成することを報告した。そのうちの1つである同心円状析出パターンについて、湿度の影響を詳細に調べた。さらに、溶質析出が過飽和理論に従うと仮定した一次元モデルによってパターン形成機構を検証した。別のパターンであるフィンガリング状パターンについては、水の混入による液膜の動的な流体パターンの形成が関連している可能性を示唆した。 第5章では、本研究で得られた知見をもとに総括を述べた。			

審査の要旨

報告番号	甲 第 6423 号	氏 名	相澤 彩美子
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	工学博士 朝倉 浩一
	副査	慶應義塾大学准教授	博士（工学） 伴野 太祐
		慶應義塾大学准教授	Ph. D. 安藤 景太
		慶應義塾大学教授	医学博士、博士（理学） 藤谷 洋平
学士（工学）、修士（工学）相澤彩美子君提出の学位請求論文は「多孔質体表面からの蒸発を伴う溶液浸透で生じるパターン形成」と題し、5章から構成されている。 非平衡系中での不可逆過程の進行により秩序構造が出現する現象は散逸構造とよばれ、歴史的に多くの研究者の関心を集めてきた。中でも、人工化学系における非平衡現象についての実験研究は、近年、多岐にわたる科学技術の発展に貢献し始めている。本論文では、多孔質体中への溶液浸透システムにおいて生じる非平衡現象を解析し制御することが、工業的に重要な技術であると判断し、研究が行われている。具体的には、多孔質体中への溶液の浸透が、多孔質体表面からの蒸発を伴いながら進行し、その結果、平衡から遠く離れた状態となることで、様々な動的挙動およびパターン形成が生じることを明らかにしている。そして、これら諸現象について、実験的調査のみならず理論的解析にも取り組むことで、非平衡物理化学という学問分野と産業技術の両者を結びつけ発展させる端緒を開いていると言える。 第1章は序論であり、本研究の背景と従来の研究が概説され、目的が述べられている。現代熱力学という学問分野の発展の途で提案された散逸構造という概念を説明し、開放系にて秩序構造が発生する機構を概説し、蒸発を伴いながら多孔質体中への溶液浸透が進行する過程で発生する現象の研究について、非平衡物理化学および産業的重要性の観点から意義を論じている。 第2章では、揮発性の異なる2種の溶媒からなる二成分系溶液が、蒸発を伴いながら多孔質体中へ毛管浸透する際の挙動を観察し、また、その際に起こる表面温度の空間分布の変動の様子を追跡している。その結果として、浸透フロントが分岐し、その後に転移するという特異的な現象が発生することを見出している。さらに、このような現象が発生する機構を、Richards式に基づく擬一次元モデルを提案して考察している。 第3章では、第2章で観察された浸透フロントの非定常的挙動が、クロマトグラフィー展開に与える影響を検討している。そして、溶液蒸発時の気化熱による温度低下が周囲に存在する水蒸気の凝縮を引き起こし、そのことでさらに浸透挙動が複雑になることを見出している。また、その結果として、複数の色素をクロマトグラフィー展開した際に、色素スポットの展開の逆転現象という特異的な現象が起こることを見出している。 第4章では、多孔質体表面からの溶媒蒸発を伴う溶液浸透過程で、溶質が析出して様々な沈殿パターンが形成されることを見出している。その1つが同心円状パターンであり、溶媒の蒸発のみならず水蒸気の凝縮により、その形状が変動することが確認されている。そして、Liesegangリングの出現メカニズムを説明する過飽和理論に類似した理論モデルを提案し、実験研究で考察された内容の妥当性を検証している。さらに、フィンガリング状の沈殿パターンが生成する条件も見出し、流動パターンの発生が、沈殿パターンをこのような形状にすることを予測している。 第5章では、各章で得られた知見をまとめ、本研究の成果を総括している。 以上要するに、本研究は多孔質体表面からの蒸発を伴いながらの溶液が浸透していく過程で、その浸透挙動が複雑化し、また気化熱による温度低下で周囲の水蒸気の凝縮をも誘導し、その結果、その条件下で色素をクロマトグラフィー展開させると、展開の逆転現象や特異的な沈殿パターン形成が起こることを示したものであり、非平衡物理化学ならびにコロイド・界面科学の分野において工業上、工学上寄与するところが少なくない。 よって、本論文の著者は博士（工学）の学位を受ける資格があるものと認める。			

2025（令和7）年3月までの新制博士学位授与者数は次のとおり。

[]内は内数。当該年度学期（2024年度秋学期）授与者数。

学位の種類	課程修了によるもの (課程博士・・・甲)	論文提出によるもの (論文博士・・・乙)	計
工学博士	451	389	840
博士（工学）	1,718 [30]	319 [0]	2,037 [30]
理学博士	26	8	34
博士（理学）	487 [10]	49 [0]	536 [10]
学術博士	0	1	1
博士（学術）	1 [0]	1 [0]	2 [0]
計	2,683 [40]	767 [0]	3,450 [40]

本書に記載した論文審査担当者の所属および職位は2024（令和6）年度秋学期のものである。

2025(令和7)年6月2日 発行	
発行者	理工学研究科委員長
編集	慶應義塾大学理工学部学生課学事担当
〒223-8522 神奈川県横浜市港北区日吉3-14-1	