

受付番号 (事務局使用欄)	
------------------	--

平成 24 年度「豊田理研スカラー」応募申請書

①申請概要

所 属	東京大学大学院工学系研究科		
ふりがな 氏 名	金子 弘昌 (生年月日 1985 年 1 月 9 日)	職位	特任助教
連絡先	住所: 東京都文京区本郷 7-3-1		
	e-mail :	TEL:	

研究テーマ名称 (該当する平成 24 年度募集研究分野/課題 No.)

効率的な材料設計のための戦略的材料探索手法の開発 (課題①)

学歴, 職歴

2007 年 3 月 東京大学工学部化学システム工学科 卒業
 2007 年 4 月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻修士課程 入学
 2009 年 3 月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻修士課程 修了
 2009 年 4 月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻博士課程 入学
 2011 年 9 月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻博士課程 修了
 2011 年 10 月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻船津研究室 特任助教着任

主な論文, 著作物, 受賞等

- [1] 金子 弘昌, 船津 公人, Genetic Algorithm-based WaveLength Selection と Support Vector Regression を組み合わせた変数領域選択手法の開発, *J. Comput. Chem., Jpn.*, Accepted. (査読有)
 [2] 金子 弘昌, 船津 公人, Membrane bioreactor における膜差圧予測モデル構築手法の開発, *J. Comput. Chem., Jpn.*, Accepted. (査読有)
 [3] Kaneko H., Funatsu K., Development of High Predictive Soft Sensor Method and the Application to Industrial Polymer Processes, *Asia-Pac. J. Chem. Eng.*, Accepted. (査読有)
 [4] Kaneko H., Funatsu K., Soft Sensor Method Based on Values Predicted from Multiple Intervals of Time Difference for Improvement and Estimation of Prediction Accuracy, *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, **109**, 197-206, 2011. (査読有)
 [5] Kaneko H., Funatsu K., Development of Soft Sensor Models Based on Time Difference of Process Variables Accounting for Nonlinear Relationship between the Variables, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **50**, 10643-10651, 2011. (査読有)
 [6] Kaneko H., Funatsu K., Maintenance-Free Soft Sensor Models with Time Difference of Process Variables, *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, **107**, 312-317, 2011. (査読有)
 [7] Kaneko H., Arakawa M., Funatsu K., Applicability Domains and Accuracy of Prediction of Soft Sensor Models, *AIChE J.*, **57**, 1506-1513, 2011. (査読有)

(受賞歴) Best Presentation、○金子 弘昌、荒川 正幹、船津 公人、東京コンファレンス、2009 年 9 月
 JCAC 論文賞、金子 弘昌、荒川 正幹、船津 公人、2008 年 11 月

第 29 回情報化学討論会 ポスター賞、○金子 弘昌、荒川 正幹、船津 公人、新潟、2006 年 11 月

②研究概要

研究概要（背景、狙い、目的）

材料設計において、ある材料の物性は原料の化学構造や組成、製造条件などの様々なパラメータに左右される。このようなパラメータの候補は多数存在し、さらにはパラメータと材料物性の間の関係は複雑であるため、所望の物性を持つ材料を製造可能なパラメータを探索するには時間的および金銭的に多大なコストを要する。例えばある材料を開発する際に原料組成、反応温度、反応時間の3つのパラメータを検討する場合を考える。パラメータごとに10通りを探索すると、全てのパラメータの組は $10^3=1,000$ 通りになってしまう。従来の材料設計においては、そのような非常に多くのパラメータの組から、材料設計者の経験や、全く新規な材料の場合は勘のみを頼りにしてパラメータ候補を選択し実験するという試行錯誤をしながら最適な候補の探索が進められてきた。しかし、このような非効率な探索方法では数多くの実験を行わなければならないため開発コストが増加してしまう。そこで本研究では効率的な材料設計を目的として、材料物性が既知なデータを用いて各パラメータとその物性との間で統計的な物性予測モデルを作成し、そのモデルを解析して所望の物性を持つ材料を達成可能なパラメータの組を探索する手法を開発する。本手法の概念図を図1に示す。新たに実験された候補が目標とした物性を満たさない場合にも、そのデータを用いて適切に物性予測モデルを更新することによりモデルの予測性能を向上させることで、より少ない実験回数で目的の材料開発が達成可能になると考えられる。

本研究の目標を、様々な種類の材料設計に応用可能な汎用的な手法の開発、およびWindows上で動作する材料探索プログラムの作成と設定した。なお、最適化すべき材料物性が複数存在する場合にも対応可能にする。

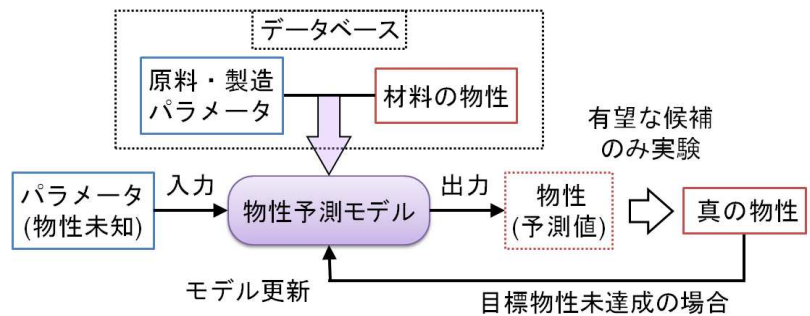


図1. 提案手法の概念図

(1) 独創性／革新性

上記の材料探索手法の中で、特に物性予測モデルの解析が重要といえる。パラメータ候補をモデルに入力することで対象物性の予測値を出力することは可能であるが、モデル構築に用いた物性既知のデータの分布密度が低い領域においては予測値の信頼性が低く、予測誤差の大きい可能性が高いといえる(図2)。そこで本研究ではモデルの適用範囲(図の色付枠内)を考慮することを提案する。材料設計にこの適用範囲を導入することは世界で初となる試みであり、範囲内のパラメータ候補のみを探索することでより確実に目的とした材料物性へ到達可能になると考えられる。

さらに本研究では、予測値のばらつきを計算することで、目的の物性領域内の材料が得られる確率を導入することを提案する(図3)。あるパラメータ候補をモデルに入力した際、たとえ予測値が目的領域から離れていてもそのばらつきが大きいと判断された場合はそれを次の実験候補とする。これにより現状得られているデータの物性値が目標領域から離れた場合でも、より領域内に入る可能性の高いパラメータ

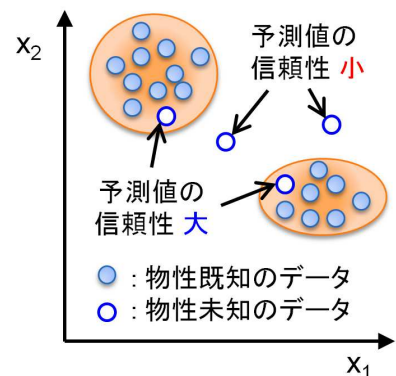


図2. モデルの適用範囲と予測値の信頼性

③研究計画

(研究概要つづき)

タ候補を探索可能といえる。上記のモデルの適用範囲と目的領域に入る確率を同時に考慮するという革新的な提案手法を用いることで、確実性が高く高効率な材料探索が可能になると考えられる。

(2) 有用性／インパクトの大きさ、

本手法は莫大なパラメータの候補群の中から、最適な組の探索を効率的に行う手法といえる。このため、基礎的な材料開発における最適な化学構造の探索から、より製造現場に近い材料設計における製造条件および実験パラメータの最適化にも用いることが可能である。さらに適用領域を限定した手法ではないため、化学、物理、薬学などの様々な分野での応用が期待される。より少ない実験回数で材料開発を達成することにより、コストの削減のみならず地球環境への影響も多大であることを確信している。

(3) アプローチの仕方／目標達成の可能性 に関する主張点

当研究室では構造物性相関、構造活性相関、実験計画などの化学情報学に関する様々な研究を長年に渡り行ってきた。その過程で物性予測モデルの構築やモデルの適用範囲についての知見も多く蓄積されており、本研究を進行するにあたり大いに役立つといえる。なお、コンピュータ上で発生させた数値シミュレーションデータを用いて提案手法を検討し従来の探索法と比較したところ、より少ない試行回数で目標達成が可能であることを確認した。この結果からも本研究の最終的な目標達成の可能性は高いと結論付けられる。

平成 24 年度研究計画 (年度目標)

まず、提案手法を整理した後に効率的に計算するためのプログラム化を行う。この際、物性予測モデル構築手法や適応範囲設定手法については逐次追加できるよう工夫する。本手法で最も重要なことは、次のパラメータ候補を選択するために各パラメータの組を順位付けする評価指標の設定である。現状、モデルの適用範囲と目的領域に入る確率を考案したが、これらの指標をどのように組み合わせ評価指標とするか検討し、同様にプログラムを作成する。

次に、数値シミュレーションデータと実データを併用して提案手法の検証を行う。まず、様々に条件を変更した数値シミュレーションデータを用いて本手法の特徴およびデータ特徴と上記の評価指標との関係に関する知見を得る。考案した指標で対応できない場合は、指標の改良や他の指標の検討を行う。この際、従来手法と比較することで提案手法の性能評価を行う。

その後、シミュレーションデータでの知見を生かし、実データを使用して提案手法の有効性を確認する。実際の材料開発を想定し、所望の物性を持つ化合物、製造条件、実験パラメータ等の探索を行う。探索性能の評価と提案手法の改善を繰り返すことで、汎用的な手法の開発を行う。なお、実データとして複数の物性の化合物ライブラリや、ある材料設計における実験データを保持している。

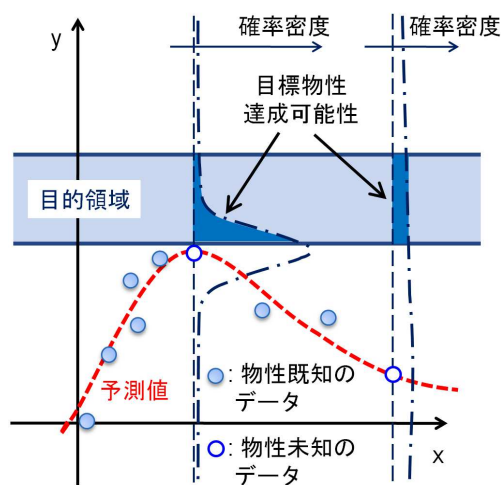


図 3. 提案手法の概念図

受付番号 (事務局使用欄)	
------------------	--

④助成金使用計画

費目別内訳（設備・什器備品・消耗品・出張旅費・委託費等、内訳別に金額を記入）

費目	金額	算出根拠等
備品購入費	200,000 円	データや結果の保存、バックアップのため、外付けハードディスク(10 万円)が必要であり、提案手法の有効性を確認するため、データベース(10 万円)が必要である。それぞれ備品購入費として計上した。
消耗品費	100,000 円	
旅費	295,000 円	研究成果を広く発表するため、論文別刷代を消耗品費として計上し、国内発表と海外発表を旅費として計上した。
その他	105,000 円	その他に研究支援経費を計上した。
合計	700,000 円	

⑤共同研究者, 研究協力者

共同研究者		
氏名	所属	職位
船津 公人	東京大学大学院工学系研究科	教授
岸尾 拓弥	東京大学大学院工学系研究科	修士課程一年
研究協力者		
氏名	所属	職位

◆個人情報の取り扱いに関して

応募申請書に記載いただいた個人情報は、選考および応募者への連絡等、事務作業に使用します。法令で認められる場合を除き、応募者の同意なく、上記目的以外に使用することはありません。

個人情報の取り扱いに関して同意します	<input checked="" type="checkbox"/>
--------------------	-------------------------------------