

矢崎科学技術振興記念財団  
『国際交流援助』申請書

2014年 4月 8日

(公財) 矢崎科学技術振興記念財団  
理事長 尾崎 護 殿

下記の通り『国際交流援助』を申請します。

氏名 金子 弘昌

<p>共著者／共同研究の相手方の共同研究者（日本語訳も併記してください） 船津公人</p>							
<p>国際会議名／共同研究機関名（日本語訳も併記してください）／学会名 4<sup>th</sup> International Conference on Engineering Optimization (第四回 エンジニアリング最適化に関する国際会議)</p>							
<p>主催機関／共同研究代表者（日本語訳も併記してください） Instituto Superior Técnico, University of Lisbon, Instituto de Engenharia Mecânica (テークニコ高等学校, リスボン大学, 機械工学協会)</p>							
<p>国際会議・共同研究の目的・ねらい 発表を通して情報科学の様々な分野の研究者と議論を交わし有用な情報を得ることが目的である。今回はビッグデータを視野に入れた最適化法の提案であり、様々な経緯を持つ研究者と議論することでビッグデータのさらなる可能性を見出すことが期待できる。</p>	<p>集会の規模（過去実績から）</p>						
	<table border="1"> <tr> <td>開催周期</td> <td>2年に一回</td> </tr> <tr> <td>参加国数</td> <td>約 30</td> </tr> <tr> <td>参加人数</td> <td>約 500</td> </tr> </table>	開催周期	2年に一回	参加国数	約 30	参加人数	約 500
	開催周期	2年に一回					
参加国数	約 30						
参加人数	約 500						
<p>開催地（国, 地名, 会場, 最寄の空港）／共同研究機関の住所（国名・都市名は必ずご記入ください） 国:ポルトガル, 都市:リスボン, 会場: テークニコ高等学校, 最寄の空港: ポルテラ空港</p>							
<p>開催日、期間／共同研究期間 2014年 9月 8日 ~ 2014年 9月 11日</p>							
<p>発表形態 ・ 会議における発表形態一覧（該当するもの全てに☑印） <input type="checkbox"/> 1. 招待講演 <input checked="" type="checkbox"/> 2. 一般講演 <input checked="" type="checkbox"/> 3. ポスター <input type="checkbox"/> 4. その他[ ] ・ 上記の中、あなたの発表形態（該当するものに☑印）（<input type="checkbox"/> 1. <input checked="" type="checkbox"/> 2. <input type="checkbox"/> 3. <input type="checkbox"/> 4. ） ・ 査読（<input checked="" type="checkbox"/> 有・<input type="checkbox"/> 無） ・ 論文集 プロシーディング（<input checked="" type="checkbox"/> 有・<input type="checkbox"/> 無） ／共同研究成果の発表予定 _____年 _____月頃 論文集発行（有・無）</p>							

発表論文要旨／共同研究要旨（内容及び意義を簡単に判りやすく記述して下さい）

タイトル: Fast optimization of hyperparameters of support vector regression model considering its predictive ability

情報科学の分野において、説明変数(入力変数)と目的変数(出力変数)との間に非線形関係が成り立つ際、各種ニューラルネットワーク・サポートベクトル回帰(support vector regression, SVR)などの非線形回帰モデル構築手法が使用される。中でも SVR は理論的な背景により注目されている手法である。SVR により非線形で複雑な回帰モデルを構築できるが、オーバーフィッティングというモデル構築時のデータには良く適合する一方で新しいデータに対する予測性能が低下してしまう問題が存在する。予測的な SVR モデルを構築するため、モデルの予測性能に対して重要な寄与をもつ三つの SVR パラメータを事前に最適化しなければならない。従来、理論的に最適化する方法や cross validation(交差検定)による最適化法が使用されてきた。理論的な方法は短時間でパラメータを設定できる一方でモデルの予測性能は考慮されていない。交差検定により予測性能を考慮できるが、検定の際に多くの SVR モデルを構築しなければならず多くの時間がかかってしまう。そこで本研究では、理論的な方法でパラメータの候補を絞った後に、交差検定による評価により最終的なパラメータの組を決定する手法を考案した。複数の科学データを用いて提案手法の検証を行ったところ、従来の 100 分の 1 以下の時間で、従来と同様かそれ以上の予測性能を持つ SVR モデルを構築できることを確認した。提案手法により驚異的なほど短時間で予測的な非線形モデルを構築できたことで、モデル構築を多く繰り返さなければならなかった従来は不可能であった、最適な入力変数の選択やアンサンブル学習などに非線形モデルを応用可能となった。さらに提案手法により複雑な非線形回帰モデルを、ビッグデータを使用する様々な回帰分析の分野に応用できるようになった。

研究業績（過去 3 年間の主な研究論文、著書、表彰等を現在から過去にさかのぼって書いてください。書ききれない場合には、同一形態のページを追加しても結構です）

・ 研究論文

- [1] **H. Kaneko**, M. Arakawa, K. Funatsu, Applicability Domains and Accuracy of Prediction of Soft Sensor Models, *AIChE Journal*, **57**(6), 1506-1513, 2011.
- [2] **H. Kaneko**, M. Arakawa, K. Funatsu, Novel Soft Sensor Method for Detecting Completion of Transition in Industrial Polymer Processes, *Computers & Chemical Engineering*, **35**(6), 1135-1142, 2011.
- [3] **H. Kaneko**, K. Funatsu, Maintenance-Free Soft Sensor Models with Time Difference of Process Variables, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **107**(2), 312-317, 2011.
- [4] **H. Kaneko**, K. Funatsu, Development of Soft Sensor Models Based on Time Difference of Process Variables with Accounting for Nonlinear Relationship, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **50**(18), 10643-10651, 2011.
- [5] **H. Kaneko**, K. Funatsu, A Soft Sensor Method Based on Values Predicted from Multiple Intervals of Time Difference for Improvement and Estimation of Prediction Accuracy, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **109**(2), 197-206, 2011.
- [6] **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, *Journal of Computer Chemistry, Japan.*, **10**(4), 122-130, 2011.
- [7] **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, *Journal of Computer Chemistry, Japan.*, **10**(4), 131-140, 2011.
- [8] 成 敬模, **金子 弘昌**, 船津 公人, 膜分離活性汚泥法における長期的膜差圧予測モデルの構築, *Journal of Computer Aided Chemistry*, **13**(1), 10-19, 2012.
- [9] 岡田 剛嗣, **金子 弘昌**, 船津 公人, モデルの予測信頼性を考慮した適応的ソフトセンサー手法の開発, *Journal of Computer Chemistry, Japan.*, **11**(1), 24-30, 2012.
- [10] **金子 弘昌**, 船津 公人, 波長領域選択手法を応用したソフトセンサー手法の開発, *Journal of Computer Chemistry, Japan.*, **11**(1), 31-42, 2012.
- [11] **H. Kaneko**, K. Funatsu, A New Process Variable and Dynamics Selection Method Based on a Genetic Algorithm-based Wavelength Selection Method, *AIChE Journal*, **58**(6), 1829-1840, 2012.

研究業績 (続き)

- [12]金 泰亨, **金子 弘昌**, 山城 直也, 船津 公人, 分離プロセスにおいて任意の圧力下で共沸有無の予測を行う統計モデルの構築, *Journal of Computer Chemistry, Japan.*, **11**(2), 112-120, 2012.
- [13]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Visualization of Models Predicting Transmembrane Pressure Jump for Membrane Bioreactor, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **51**(28), 9679-9686, 2012.
- [14]**H. Kaneko**, S. Inasawa, N. Morimoto, M. Nakamura, H. Inokuchi, Y. Yamaguchi, K. Funatsu, Statistical Approach to Constructing Predictive Models for Thermal Resistance Based on Operating Conditions, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **51**(29), 9906-9912, 2012.
- [15]**金子 弘昌**, 船津 公人, 時間差分に基づくソフトセンサー手法に関する考察および時間差分間隔の検討, *Journal of Computer Aided Chemistry*, **13**(1), 29-43, 2012.
- [16]**金子 弘昌**, 船津 公人, プロセスの動特性を考慮した非線型ソフトセンサー手法の開発, *計測自動制御学会論文集*, **49**(2), 1-8, 2013.
- [17]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Nonlinear Regression Method with Variable Region Selection and Application to Soft Sensors, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **121**(1), 26-32, 2013.
- [18]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Physical and Statistical Model for Predicting a Transmembrane Pressure Jump for a Membrane Bioreactor, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **121**(1), 66-74, 2013.
- [19]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Automatic Determination Method Based on Cross-validation for Optimal Intervals of Time Difference, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, **46**(3), 1-7, 2013.
- [20]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Classification of the Degradation of Soft Sensor Models and Discussion on Adaptive Models, *AIChE Journal*, **59**(7), 2339-2347, 2013.
- [21]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Applicability Domain of Soft Sensor Models Based on One-Class Support Vector Machine, *AIChE Journal*, **59**(6), 2046-2050, 2013.
- [22]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Discussion on Time Difference Models and Intervals of Time Difference for Application of Soft Sensors, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **52**(3), 1322-1334, 2013.
- [23]三島 和晃, **金子 弘昌**, 船津 公人, 予測性を考慮した新規回帰分析手法の開発および二酸化炭素分離回収に用いるアミン化合物の分子設計, *Journal of Computer Aided Chemistry*, **14**(1), 1-10, 2013.
- [24]岸尾 拓弥, **金子 弘昌**, 船津 公人, 効率的な材料設計のための戦略的な実験パラメータ決定手法の開発, *Journal of Computer Chemistry, Japan*, **12**(2), 113-121, 2013.
- [25]**H. Kaneko**, K. Funatsu, A Chemometric Approach to Prediction of Transmembrane Pressure in Membrane Bioreactors, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **126**(1), 30-37, 2013.
- [26]**金子 弘昌**, 船津 公人, ソフトセンサーのためのデータベース管理指標の開発, *Journal of Computer Aided Chemistry*, **14**(1), 11-22, 2013.
- [27]T. Kishio, **H. Kaneko**, K. Funatsu, Strategic Parameter Search Method Based on Prediction Errors and Data Density for Efficient Product Design, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **127**(1), 70-79, 2013.
- [28]Y. Shimoda, T. Aoyama, **H. Kaneko**, Y. Onumata, F. Okada, Effects of Experimental Method on Aggregation State and Thermal Conductivity of Carbon-nanotube-based Fluids, *International Journal of Thermophysics*, **34**(7), 1308-1324, 2013.
- [29]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Adaptive Soft Sensor Model Using Online Support Vector Regression with the Time Variable and Discussion on Appropriate Hyperparameters and Window Size, *Computers & Chemical Engineering*, **58**(1), 288-297, 2013.
- [30]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Estimation of Predictive Accuracy of Soft Sensor Models Based on Data Density, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **128**(1), 111-117, 2013.
- [31]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Criterion for Evaluating the Predictive Ability of Nonlinear Regression Models without Cross-Validation, *Journal of Chemical Information and Modeling*, **53**(9), 2341-2348, 2013. DOI: 10.1021/ci4003766.
- [32]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Database Monitoring Index for Adaptive Soft Sensors and the Application to Industrial Process, *AIChE Journal*, **60**(1), 160-169, 2014. DOI: 10.1002/aic.14260.
- [33]菅間 幸司, **金子 弘昌**, 船津 公人, 高精度な Near-Infrared Spectroscopy モデル構築を目指した新規スペクトル解析手法の開発, *Journal of Computer Aided Chemistry*, **15**(1), 1-9, 2014. DOI: 10.2751/jcac.15.1.
- [34]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Application of Online Support Vector Regression for Soft Sensors, *AIChE Journal*, **60**(2), 600-612, 2014. DOI: 10.1002/aic.14299.
- [35]**H. Kaneko**, K. Funatsu, Model for Predicting Transmembrane Pressure Jump for Various Membrane Bioreactors, *Desalination and Water Treatment*, in press.

・著書

- [36]**金子 弘昌**, 船津 公人, ソフトセンサー ～測定困難な対象を高精度で推定する技術～, シーエムシー出版, 化学分野におけるプロセスシステムの計測・モニタリング技術, 44-55.

研究業績（続き）

・表彰

- [37]平成 23 年度東京大学工学系研究科長賞, 金子 弘昌, 2012 年 3 月
- [38]2011 年度日本コンピュータ化学会吉田賞(論文賞), 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, 2012 年 5 月
- [39]2012 年度計測自動制御学会産業応用部門・奨励賞, 金子 弘昌, ソフトセンサーモデルの予測性能および適用範囲の検証, 2012 年 11 月
- [40]化学工学会第 78 年会 SIS 部会 研究奨励賞, 金子 弘昌, データ密度を考慮したソフトセンサーモデルの予測誤差の推定, 2013 年 5 月
- [41]Computers & Chemical Engineering, Most Cited Articles, 2010-2012 Articles, 2010-2012.  
Awarded to: H. Kaneko, M. Arakawa, K. Funatsu  
For the paper: Novel soft sensor method for detecting completion of transition in industrial polymer processes  
2013 年 10 月
- [42]JCAC 論文賞, 金子 弘昌, 船津 公人, 時間差分に基づくソフトセンサー手法に関する考察および時間差分間隔の検討, 2013 年 11 月