

豊橋技術科学大学長 殿

平成 9 年 2 月 26 日

審査委員長 神野清勝 印

論文審査及び最終試験の結果報告書

このことについて、下記の結果を得ましたので報告いたします。
記

学位申請者	吉田浩士	学籍番号	第 893742 号
申請学位	博士(工学)	専攻名	材料システム専攻
論文題目	計量化学における最適化問題に関する研究		
公開審査会の日	平成 9 年 2 月 19 日		
論文審査の期間	平成 9 年 1 月 22 日～平成 9 年 2 月 25 日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 9 年 2 月 19 日	最終試験の結果	合格
論文内容の要旨	<p>本論文は、計量化学の分野において定量的モデルを構築する際に必要な、1) 変数の有意性およびデータの性質に適したモデル化手法の選択、2) モデル自身の最適性、についての検討法を提案したものである。論文は5章から構成されている。</p> <p>第1章では、本研究の背景と目的が述べられている。第2章では、アルカンの沸点解析を通して1) の検討を行っている。変数としてはトポロジカルインデックス、手法としては線形および非線形のモデル化手法が検討対象となっている。第3章では、非線形性の強いデータをニューラルネットワークを用いてモデル化する場合同題点、特に現象記述のためのパラメータの有意性を確認する重要性を述べている。第4章では、導かれたモデル自身の最適化を検討するために遺伝的アルゴリズムの適用が検討されている。ここでは、非線形のモデル化手法の一つであるQuadratic Partial Least Squares (QPLS) 法の内部関係式が検討対象となっている。第5章では、本論文の総括と今後の展開について述べている。</p>		
	<p>計量化学の分野では、構造活性相関や種々の物性値予測などを対象に、化学データを多変量データとして表し、定量的なモデルを構築する研究が行われている。しかしながら、定量的なモデルを構築するためには、目的に応じた最適な変数とデータの性質に適した手法を用いることが重要である。本論文では、最適な変数や手法の検討を進める上での手順や判断基準などについて、いくつかの具体的な事例をあげて検討している。たとえば、アルカンの沸点予測モデルの構築にあたっては、アルカンの構造と沸点の関係に留意しながら、トポロジカルインデックスの構造記述子としての妥当性を主成分分析の結果をもとに確認した上で、非線形モデル化手法の一つであるQuadratic Partial Least Squares (QPLS) 法を用いた最適なモデル式の提案を行っている。また、ハロメタンの沸点予測モデルの構築にあたっては、ニューラルネットワークによるモデル化を行っているが、一方でハロゲン原子の種類とその数という離散的な構造記述子がモデル化に際して有効であることも併せて明らかにしている。さらに、導かれたモデル自身の最適化を目的に最適化手法の一つである遺伝的アルゴリズムの適用が検討され、モデルの最適化に有効な手法であることを実証した。これらの成果は学術的に高く評価できるものである。以上により、本論文は博士(工学)の学位論文に相当するものと判定した。</p>		
審査委員	神野清勝 印	山本真司 印	西山久雄 印
	船津公人 印		

(注) 論文審査の結果及び最終試験の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。