

材料システム工学専攻	学籍番号	893742
申請者氏名	吉田 浩士	

指導教官氏名	船津 公人
--------	-------

論文要旨(博士)

論文題名	計量化学における最適化問題に関する研究
------	---------------------

計量化学の分野では化学データを多変量データとして表わし、そのデータ中の規則性を見出だす研究が行なわれている。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を用い、データの性質に適した手法を用いることが重要である。しかしこれまでは化学者の経験や直感に頼る場合も多く、変数の有意性についての十分な検討が行なわれなかった。また非線形的手法を用いた場合、その手法から導かれるモデル自身の最適性についても検討する必要がある。このようにデータのモデル化には1)変数の有意性の検討、およびデータの性質に適した手法の選択、2)モデル自身の最適性の検討を行なわなければならない。本研究ではこの2つの最適化問題について検討を行なった。

1)についてはAlkaneおよびHalomethaneの沸点のモデル化について検討した。まず2章ではAlkaneの沸点解析について検討した。Alkaneの構造をトポロジカルインデックスを用いて表わした場合、主成分分析によりトポロジカルインデックスがAlkaneの構造を矛盾なく記述していることが明らかとなった。沸点のモデル化において非線形性を考慮することにより構造特徴および沸点の性質を反映したモデルを構築することができた。3章ではHalomethaneの沸点解析について検討した。Halomethaneの構造をトポロジカルインデックスで表わした場合、それぞれの構造の特徴の区別ができない。したがって構造記述子として水素に置換しているハロゲン原子の種類の数を用いた。このような離散的な記述子を検討したところ、沸点のモデル化に有意であることが明らかとなった。すなわちハロゲン原子の種類数が構造記述子として妥当であることが示された。沸点のモデル化において非線形性を考慮することにより、構造特徴および沸点の性質を反映したモデルを構築することができた。

2)についてはQuadratic Partial Least Squares(QPLS)法の内部関係式の最適化を試みた。このことについては4章で述べる。QPLS法は非線形手法としての利点のみが注目され、内部関係式の問題点についてこれまで議論されていない。従来のQPLS法のアルゴリズムは初期値に依存し、2次の内部関係式が適切に最適化されるとは限らないという欠点がある。これらの問題解決のために遺伝的アルゴリズムによるアプローチを提案した。この手法の有効性を検討するために、Auto-Ignition Temperatureのモデル化に応用し従来のQPLS法との比較を行なった。その結果、上述した問題点を解決することができ、本論文で提案した手法が明らかに有効であることが示された。