

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 4 月 27 日現在

機関番号：32682

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2022

課題番号：19K15352

研究課題名(和文)物性予測モデルの逆解析および科学的解釈に関する研究

研究課題名(英文) Research on inverse analysis and scientific interpretation of property prediction models

研究代表者

金子 弘昌 (Kaneko, Hiromasa)

明治大学・理工学部・専任准教授

研究者番号：00625171

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：分子・材料・プロセスの設計における従来の逆解析は、物性・活性 $Y$ と特徴量 $X$ との間で数理モデル $Y=f(X)$ を構築した後に、 $X$ の仮想サンプルを大量に生成し、それらをモデルに入力して $Y$ の値を予測し、予測値が良好な仮想サンプルを選択する、すなわち順解析を網羅的に繰り返す擬似的な逆解析にすぎなかった。これでは人が事前に想定した $X$ の探索範囲における $Y$ の予測にすぎず、当初想定しない条件でこそ発現する新機能の探索には全く対応できない。本研究では $Y$ から $X$ を直接予測する手法、すなわち $Y=f(X)$ を $X=g(Y)$ に変換してモデルを真の意味で逆解析する手法「直接的逆解析法」を開発し、各種分子・材料・プロセスに展開した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の成果により、科学者・開発者の創造力をつまんだ実験結果の中にある暗黙知を形式知化でき、実験結果および実験データから構築された数理モデルを化学的・工学的に理解できる形にすることが可能になる。提案手法により、どうしてその実験結果になったのか、どうしてその化学構造・実験条件・プロセス条件で物性値・活性値が得られたのか、望ましい物性値・活性値を得るためにはどのような化学構造・実験条件・プロセス条件にすればよいのか、といったことが明らかになり、科学的なメカニズムの解明に貢献する。本研究の成果により実験と統計とが融合することにより新たな科学的知識発見につながる。

研究成果の概要(英文)：Conventional inverse analysis in the design of molecules, materials and processes involves constructing mathematical model  $Y=f(X)$  between properties/activities  $Y$  and features  $X$ , then generating a large number of virtual samples of  $X$ , inputting them into mathematical model to predict the values of  $Y$  and selecting virtual samples with good prediction values. It was only a pseudo-inverse analysis, in which forward analysis was repeated exhaustively. This was nothing more than predicting  $Y$  in the search range of  $X$  assumed in advance by humans, and was not at all compatible with the search for new functions that would only emerge under conditions that were not initially assumed. In this study, a method for directly predicting the values of  $X$  from the values of  $Y$ , i.e. a method for truly inverse analysis of mathematical model by converting  $Y=f(X)$  to  $X=g(Y)$  was proposed, and the proposed method was applied to various molecules, materials and processes.

研究分野：ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクス

キーワード：適応的実験計画法 能動学習 直接的逆解析 予測精度 ベイズ最適化 分子設計 材料設計 プロセス設計

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

### 1. 研究開始当初の背景

化学の多くの分野では、情報科学的な手法を様々な問題に適用する試みがされている。定量的構造物性・活性相関においては、化学構造・実験条件  $X$  と物性・活性  $Y$  との関係を統計的に処理してモデル化する手法に関する研究が盛んに行われている。構築された物性予測モデル  $Y=f(X)$  を用いることで、まだ合成されていない材料がもつと考えられる物性値・活性値を、化学構造・実験条件のみから推定できる。これにより効率的に高機能材料設計・実験計画を達成できる。

しかし、従来のモデルは単一の物性もしくは活性しか対象にできなかった。また、物性予測モデル  $Y=f(X)$  により  $X$  から  $Y$  を予測できたとしても、その逆問題を解く、つまり物性  $Y$  からそれを達成するための化学構造・実験条件  $X$  を予測することはできない。さらに、物性予測モデルに対して批判的な立場の研究者・開発者も多い。その主な理由の1つとして、物性予測モデルがブラックボックスであることがあげられる。つまり、何か化学構造を入力したときに、その構造がもつと考えられる物性・活性などの推定値を出力することはできる一方で、モデルは化学的な現象を説明できるわけではない。実際、出力値の誤差が小さくなるようにモデルは最適化されるため、その結果得られたパラメータを解釈することは不可能である。

### 2. 研究の目的

本研究では、物性予測モデルを逆方向に解析(逆解析)することで目標の物性を満たすための化学構造情報および実験条件情報を獲得する手法、およびモデルを化学的・工学的かつ明確に解釈する手法を開発することを研究目的とする。

### 3. 研究の方法

本研究では、データ分布として確率分布を仮定したモデリングにより、入力変数(記述子)  $X$  のデータと複数の物性・活性  $Y$  のデータとを合わせて、同時確率分布を計算する。確率分布として正規分布の重ね合わせを仮定することで、expectation-maximization アルゴリズムにより解を獲得できるだけでなく、高精度に同時確率分布を表現できる。Gaussian mixture models や generative topographic mapping で検討する。

$X$  と  $Y$  の同時確率分布が得られることで、ベイズの定理および確率の乗法定理により、 $X$  が与えられたときの  $Y$  の事後分布および  $Y$  が与えられたときの  $X$  の事後分布を計算できる。前者が物性予測モデル、後者がモデルの逆解析に対応する。つまり、 $X$  もしくは  $Y$  の値が与えられれば、それを満たすための最も確率の高い  $Y$  もしくは  $X$  の値が得られる。なお同時確率分布では  $X$  と  $Y$  を明示的に分ける必要はなく、 $Y$  が複数でも全く問題ない。

### 4. 研究成果

分子設計における従来の逆解析は、物性・活性  $Y$  と特徴量  $X$  との間でモデル  $Y = f(X)$  を構築した後に、 $X$  の仮想サンプルを計算機で大量に生成し、それらをモデルに入力して  $Y$  の値を予測し、予測値が良好な仮想サンプルを選択する、すなわち順解析を網羅的に繰り返す擬似的な逆解析にすぎなかった。これでは人が事前に想定した  $X$  の探索範囲における  $Y$  を予測することにすぎず、当初想定しない条件でこそ発現する新機能の探索には全く対応できない。

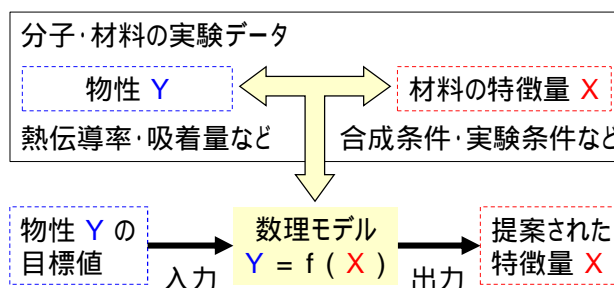


図1. 直接的逆解析法の概要

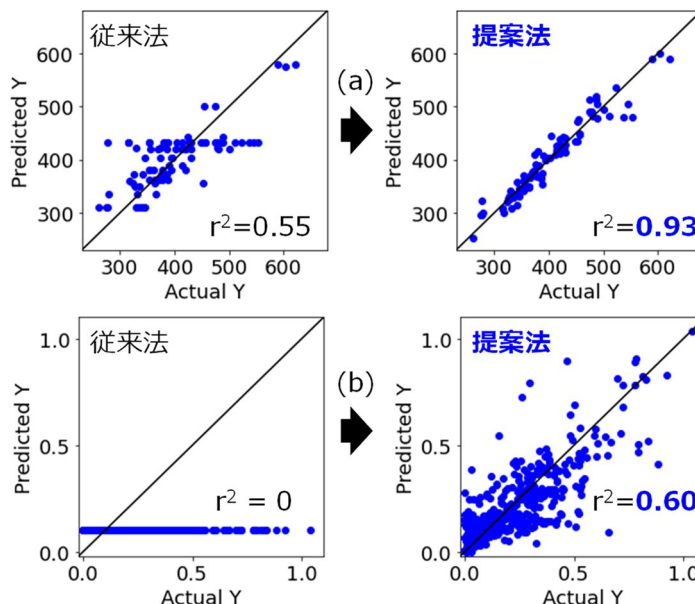


図2. 直接的逆解析法の予測精度の大幅な向上

この状況において、それまで不可能と信じられていた、 $Y$  の目標値をモデルに入力して  $X$  を予測する手法の開発に世界で初めて成功し、 $Y$  から  $X$  を直接的に提案することを実現した(Mol. Inf., 38(2019)2019)。

さらに材料開発の分野において、 $Y$  の値から  $X$  の値を直接予測する手法、すなわち  $Y=f(X)$  を  $X=g(Y)$  に変換して数理モデルを真の意味で逆解析する手法を開発した(図1)(STAM 2(2022)14)。提案法を直接的逆解析法と呼ぶ。直接的逆解析法では、材料の実験データを合成条件などの特徴量  $X$  に変換した後に、ベイズの定理と確率の乗法定理から、 $Y$  が与えられた際の  $X$  の事後確率分布を計算する。これにより  $Y$  の目標値から直接  $X$  の値を瞬時に予測できる。直接的逆解析法により様々な材料設計を達成し、例えば熱電変換材料の実験データを用いた直接的逆解析法によって熱伝導率・電気伝導率・ゼーベック係数のすべてが既存の材料を超越する革新的な熱電変換材料の合成条件(各元素の配合割合や合成温度など)の提案に成功した(Mat. Des., 196(2020)109168)。なお各元素・合成温度と材料物性の本質的な関係(物性発現のメカニズム)は非常に複雑であるが、提案法により適切なモデル化および逆解析が可能であった。多種多様な事象が複雑に絡み合うプロセスにおいても、直接的逆解析法が効果的に機能すると考えられる。

直接的逆解析法をアップデートして新規な逆解析法を開発し、分子・材料の特徴量を潜在変数  $Z$  に変換することで予測精度の大幅な向上を達成した(図2)(Chemom. Intell. Lab. Syst., 218(2021)104437)。 $r^2$  を 0.9 以上に向上させただけでなく(図5(a))、 $r^2=0$  で全く予測できない材料系においても直接的逆解析法を達成可能な精度まで引き上げ(図2(b))、分子設計・材料設計を成功に導いた。

さらに、実験と機械学習を組み合わせることで効率的に分子設計・材料設計することを目的として、分子・材料の物性が既知のデータを用いて各パラメータとその物性との間で構築された機械学習モデルを解析することで、所望の物性を持つ分子・材料を達成可能なパラメータを探索する直接的逆解析手法を開発し、実験回数の大幅な低減および既存データの  $Y$  を超越することに成功した(図3)(Chemom. Intell. Lab. Syst., 208(2021)104226)。適応的実験計画法・能動学習で有名なベイズ最適化と比較して実験回数を約3分の1に抑え(図3(a))、既存の  $Y$  を大きく上回る実験条件を設計した(図3(b))。さらに実際の流加培養バッチプロセスを対象にして、直接的逆解析法により既存の培養濃度を超越するプロセスの時間変化を設計した(図4)(Comput. Chem. Eng., 196(2023)511)。目標とする収率  $Y$  の目標値から、直接的逆解析法により基質の流量  $F$ [L/hour]の時系列データ(図4(a))および濃度  $S_f$ [L/hour]の時系列データ(図4(b))を出力したところ、 $Y$  が 1.25 以下しか存在しないプロセスにおいて、図4(c)のように 1.25 を遥かに超える  $y$  の提案および実現に成功した。

なお本研究提案は機械学習・実験・シミュレーションの融合研究とも言えるが、以前に材料設計(実験)とプロセス設計(機械学習・シミュレーション)を融合させ、 $CO_2$  から  $CO$  を生成する reverse water gas shift chemical looping (RWGS-CL) 反応およびそれを実現する RWGS-CL プロセスの同時設計に成功した(ACS Omega, 7(2022)46922)。

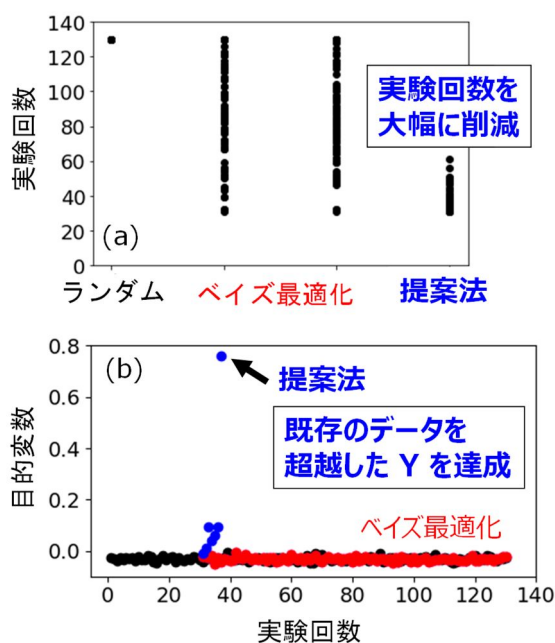


図3. 直接的逆解析法による実験回数の大幅な削減・既存データを超越する  $Y$

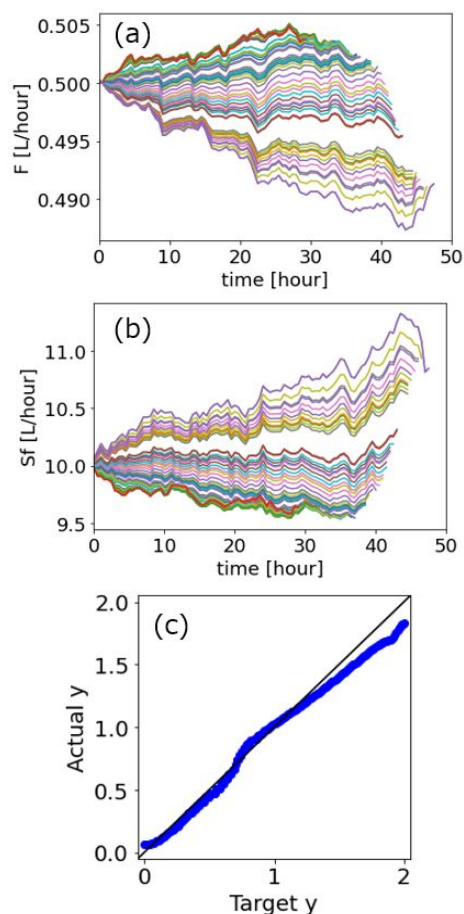


図4. 直接的逆解析の時系列データ設計

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計39件（うち査読付論文 39件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 20件）

1. 著者名 Yuyama Shunsuke, Kaneko Hiromasa	4. 巻 61
2. 論文標題 Correlation between the Metal and Organic Components, Structure Property, and Gas-Adsorption Capacity of Metal/Organic Frameworks	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 5785 ~ 5792
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.1c01205	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yamada Nobuhito, Kaneko Hiromasa	4. 巻 219
2. 論文標題 Adaptive soft sensor ensemble for selecting both process variables and dynamics for multiple process states	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems	6. 最初と最後の頁 104443 ~ 104443
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemolab.2021.104443	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 218
2. 論文標題 Lifting the limitations of Gaussian mixture regression through coupling with principal component analysis and deep autoencoding	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems	6. 最初と最後の頁 104437 ~ 104437
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemolab.2021.104437	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ebi Tomoya, Sen Abhijit, Dhital Raghu N., Yamada Yoichi M. A., Kaneko Hiromasa	4. 巻 6
2. 論文標題 Design of Experimental Conditions with Machine Learning for Collaborative Organic Synthesis Reactions Using Transition-Metal Catalysts	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 27578 ~ 27586
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c04826	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 7
2. 論文標題 Examining variable selection methods for the predictive performance of regression models and the proportion of selected variables and selected random variables	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Heliyon	6. 最初と最後の頁 e07356 ~ e07356
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.heliyon.2021.e07356	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 213
2. 論文標題 Extended Gaussian mixture regression for forward and inverse analysis	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems	6. 最初と最後の頁 104325 ~ 104325
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemolab.2021.104325	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Iwama Ryo, Kaneko Hiromasa	4. 巻 3
2. 論文標題 Design of ethylene oxide production process based on adaptive design of experiments and Bayesian optimization	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Advanced Manufacturing and Processing	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/amp2.10085	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa, Kono Shunsuke, Nojima Akihiro, Kambayashi Takuya	4. 巻 2
2. 論文標題 Transfer learning and wavelength selection method in NIR spectroscopy to predict glucose and lactate concentrations in culture media using VIP Boruta	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Analytical Science Advances	6. 最初と最後の頁 470 ~ 479
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ansa.202000177	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 35
2. 論文標題 Estimating the reliability of predictions in locally weighted partial least squares modeling	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Chemometrics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cem.3364	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Morishita Toshiharu, Kaneko Hiromasa	4. 巻 7
2. 論文標題 Development of Prediction Models for the Self-Accelerating Decomposition Temperature of Organic Peroxides	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 2429 ~ 2437
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c06481	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kanno Yasuhiro, Kaneko Hiromasa	4. 巻 7
2. 論文標題 Deep Convolutional Neural Network with Deconvolution and a Deep Autoencoder for Fault Detection and Diagnosis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 2458 ~ 2466
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c06607	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 2
2. 論文標題 True Gaussian mixture regression and genetic algorithm-based optimization with constraints for direct inverse analysis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 14 ~ 22
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2021.2024101	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 7
2. 論文標題 Genetic Algorithm-Based Partial Least-Squares with Only the First Component for Model Interpretation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 8968 ~ 8979
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c07379	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Iwama Ryo, Takizawa Koji, Shinmei Kenichi, Baba Eisuke, Yagihashi Noritoshi, Kaneko Hiromasa	4. 巻 7
2. 論文標題 Design and Analysis of Metal Oxides for CO <sub>2</sub> Reduction Using Machine Learning, Transfer Learning, and Bayesian Optimization	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 10709 ~ 10717
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c00461	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shimizu Naoto, Kaneko Hiromasa	4. 巻 196
2. 論文標題 Direct inverse analysis based on Gaussian mixture regression for multiple objective variables in material design	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials & Design	6. 最初と最後の頁 109168 ~ 109168
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.matdes.2020.109168	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nitta Fumika, Kaneko Hiromasa	4. 巻 40
2. 論文標題 Two and Three dimensional Quantitative Structure activity Relationship Models Based on Conformer Structures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Molecular Informatics	6. 最初と最後の頁 2000123 ~ 2000123
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/minf.202000123	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshihama Hiroki、Kaneko Hiromasa	4. 巻 -
2. 論文標題 Design of thermoelectric materials with high electrical conductivity, high Seebeck coefficient, and low thermal conductivity	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Analytical Science Advances	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ansa.202000114	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 35
2. 論文標題 Support vector regression that takes into consideration the importance of explanatory variables	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Chemometrics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cem.3327	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 208
2. 論文標題 Adaptive design of experiments based on Gaussian mixture regression	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems	6. 最初と最後の頁 104226 ~ 104226
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemolab.2020.104226	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 -
2. 論文標題 Estimation and visualization of process states using latent variable models based on Gaussian process	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Analytical Science Advances	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ansa.202000122	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -



1. 著者名 Shibata Kaina, Kaneko Hiromasa	4. 巻 -
2. 論文標題 Prediction of spin-spin coupling constants with machine learning in NMR	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Analytical Science Advances	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ansa.202000180	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Keigo Sato, Hiromasa Kaneko	4. 巻 18
2. 論文標題 Development of Ensemble Learning Method Considering Applicability Domains	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 187-193
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2019-0010	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Motojima Kohei, Shiratsuchi Rina, Suzuki Kitaru, Aizawa Mamoru, Kaneko Hiromasa	4. 巻 62
2. 論文標題 Machine Learning Model for Predicting the Material Properties and Bone Formation Rate and Direct Inverse Analysis of the Model for New Synthesis Conditions of Bioceramics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Industrial & Engineering Chemistry Research	6. 最初と最後の頁 5898 ~ 5906
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.iecr.3c00332	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Taniwaki Hiroaki, Kaneko Hiromasa	4. 巻 -
2. 論文標題 Retrosynthetic and Synthetic Reaction Prediction Model Based on Sequence to Sequence with Attention for Polymer Designs	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Macromolecular Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 in press
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/mats.202300011	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamakage Shuto, Kaneko Hiromasa	4. 巻 7
2. 論文標題 Design of batch process with machine learning, feature extraction, and direct inverse analysis	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Case Studies in Chemical and Environmental Engineering	6. 最初と最後の頁 100308 ~ 100308
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cscee.2023.100308	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nakamura Noriko, Hamada Risa, Kaneko Hiromasa, Ohta Seiichi	4. 巻 135
2. 論文標題 Selecting optimum miRNA panel for miRNA signature-based companion diagnostic model to predict the response of R-CHOP treatment in diffuse large B-cell lymphoma	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Bioscience and Bioengineering	6. 最初と最後の頁 341 ~ 347
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jbiosc.2023.01.005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nemoto Kohei, Kaneko Hiromasa	4. 巻 63
2. 論文標題 De Novo Direct Inverse QSPR/QSAR: Chemical Variational Autoencoder and Gaussian Mixture Regression Models	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 794 ~ 805
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.2c01298	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Morishita Toshiharu, Kaneko Hiromasa	4. 巻 8
2. 論文標題 Initial Sample Selection in Bayesian Optimization for Combinatorial Optimization of Chemical Compounds	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 2001 ~ 2009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c05145	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 6
2. 論文標題 Local interpretation of nonlinear regression model with k-nearest neighbors	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Digital Chemical Engineering	6. 最初と最後の頁 100078 ~ 100078
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.dche.2022.100078	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Daigo, Kaneko Hiromasa, Hayashi Fumitaka, Fukaishi Kohei, Yamada Tetsuya, Teshima Katsuya	4. 巻 62
2. 論文標題 Process-Informatics-Assisted Preparation of Lithium Titanate Crystals with Various Sizes and Morphologies	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Industrial & Engineering Chemistry Research	6. 最初と最後の頁 511 ~ 518
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.iecr.2c02729	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 169
2. 論文標題 Direct prediction of the batch time and process variable profiles using batch process data based on different batch times	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Computers & Chemical Engineering	6. 最初と最後の頁 108072 ~ 108072
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.compchemeng.2022.108072	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Daigo, Kaneko Hiromasa, Hayashi Fumitaka, Fukaishi Kohei, Yamada Tetsuya, Teshima Katsuya	4. 巻 62
2. 論文標題 Process-Informatics-Assisted Preparation of Lithium Titanate Crystals with Various Sizes and Morphologies	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Industrial & Engineering Chemistry Research	6. 最初と最後の頁 511 ~ 518
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.iecr.2c02729	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 169
2. 論文標題 Direct prediction of the batch time and process variable profiles using batch process data based on different batch times	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Computers & Chemical Engineering	6. 最初と最後の頁 108072 ~ 108072
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.compchemeng.2022.108072	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamada Nobuhito, Kaneko Hiromasa	4. 巻 3
2. 論文標題 Adaptive soft sensor based on transfer learning and ensemble learning for multiple process states	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Analytical Science Advances	6. 最初と最後の頁 205 ~ 211
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ansa.202200013	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Taniwaki Hiroaki, Kaneko Hiromasa	4. 巻 62
2. 論文標題 Molecular design of monomers by considering the dielectric constant and stability of the polymer	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Polymer Engineering & Science	6. 最初と最後の頁 2750 ~ 2756
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pen.26058	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamakage Shuto, Kaneko Hiromasa	4. 巻 6
2. 論文標題 Design of adaptive soft sensor based on Bayesian optimization	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Case Studies in Chemical and Environmental Engineering	6. 最初と最後の頁 100237 ~ 100237
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cscee.2022.100237	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ando Tatsuhito, Shimizu Naoto, Yamamoto Norihisa, Matsuzawa Nobuyuki N., Maeshima Hiroyuki, Kaneko Hiromasa	4. 巻 126
2. 論文標題 Design of Molecules with Low Hole and Electron Reorganization Energy Using DFT Calculations and Bayesian Optimization	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 6336 ~ 6347
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.2c05229	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Hiromasa	4. 巻 3
2. 論文標題 Cross validated permutation feature importance considering correlation between features	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Analytical Science Advances	6. 最初と最後の頁 278 ~ 287
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ansa.202200018	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Iwama Ryo, Kaneko Hiromasa	4. 巻 7
2. 論文標題 Integration of Materials and Process Informatics: Metal Oxide and Process Design for CO <sub>2</sub> Reduction	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 46922 ~ 46934
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c06008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計31件 (うち招待講演 21件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 データサイエンスによる高機能材料の設計
3. 学会等名 第4回ファインケミカルジャパン2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 機械学習に基づく分子・材料設計および金属有機構造体への応用
3. 学会等名 日本セラミックス協会 第34回秋季シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 機械学習を活用した分子・材料の物性予測
3. 学会等名 超臨界流体部会 第20回サマースクール（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 Pythonで気軽に化学・化学工学
3. 学会等名 第11回CSJ化学フェスタ2021（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 データ駆動型化学工学の進展
3. 学会等名 第50回結晶成長国内会議（JCCG-50）（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 分子・材料・プロセスを設計する直接的逆解析法の開発
3. 学会等名 令和3年度（2021年度）日本材料科学会若手研究者講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 化学業界におけるデータサイエンス
3. 学会等名 INCHEM TOKYO 2021（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 最新情報科学を活用したプロセス設計・実験計画のスマート化
3. 学会等名 第37回さんわかセミナー（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 プロセスインフォマティクスの進展
3. 学会等名 化学工学会 反応工学部会 CVD 反応分科会 第35回シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 化学プラントにおけるデータベースを利用したプロセス設計・装置設計・プロセス制御
3. 学会等名 第27回 関西地区分離技術講演会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 ケモ・マテリアルズ・プロセスインフォマティクスの直接的逆解析法による分子・材料・プロセス設計
3. 学会等名 令和3年度 第5回 食・触コンソーシアム シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 化学工学におけるデータサイエンスの研究例・活用例
3. 学会等名 令和3年度化学工学会関東支部若手の会(ChEC-East)講演会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 プロセスインフォマティクスに基づくプロセスの設計および管理
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会（招待講演）
4. 発表年 2022年



1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 データサイエンスに基づく高機能性材料の研究・開発・評価・製造の支援
3. 学会等名 2022年第1回半導体3D実装材料プロセス・インフォマティクス研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yasuhiro Kanno, Hiromasa Kaneko
2. 発表標題 Nonlinear Dynamic Feature Extraction Based on Gaussian Process Dynamical Models for Jit-Based Adaptive Soft Sensors
3. 学会等名 2019 AIChE Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoto Shimizu, Hiromasa Kaneko
2. 発表標題 Constructing Interpretable and Accurate Model Combining Decision Tree and Random Forest
3. 学会等名 2019 AIChE Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takumi Kojima, Hiromasa Kaneko
2. 発表標題 New Evaluation Method of Soft Sensors Considering Characteristics of Time Series Data
3. 学会等名 2019 AIChE Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岩間稜, 金子弘昌
2. 発表標題 ベイス最適化に基づくエチレンオキシド製造プロセスの設計
3. 学会等名 化学工学会第85年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山田信仁, 金子弘昌
2. 発表標題 プロセス変数と時間遅れを同時に最適化した適応型ソフトセンサーの開発
3. 学会等名 化学工学会第85年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山影柊斗, 金子弘昌
2. 発表標題 ベイス最適化に基づく適応型ソフトセンサー選択手法の開発
3. 学会等名 化学工学会第85年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山本統久, 金子弘昌
2. 発表標題 安全性が高い高熱伝導率を有する冷媒の設計
3. 学会等名 化学工学会第85年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 谷脇寛明, 金子弘昌
2. 発表標題 誘電率と安定性を考慮した高分子材料のモノマー設計
3. 学会等名 化学工学会第85年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 データサイエンスによる高機能材料の研究・開発・評価・製造の支援
3. 学会等名 先端化学・材料技術部会 C C 分科会 講演会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiromasa Kaneko
2. 発表標題 Molecular, Material, Product and Process Design and Process Control Based on Materials Informatics, Chemoinformatics and Process Informatics
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 データ解析および機械学習による高機能材料の研究・開発・製造の支援
3. 学会等名 日本化学会 産学交流委員会 R&D懇話会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 生成モデルによるデータの可視化・回帰分析・クラス分類・モデルの適用範囲の設定・モデルの逆解析・分子設計・材料設計
3. 学会等名 第63回日本薬学会関東支部大会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクスの進展と実現
3. 学会等名 日本結晶成長学会 新技術・新材料分科会 第2回研究会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 データサイエンス・機械学習を活用した分子・材料・プロセスの設計
3. 学会等名 日本プロセス化学会2022ウインターシンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 データサイエンスに基づく高機能性材料の研究・開発・評価・製造
3. 学会等名 第41回電子材料シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 Molecular, Material, and Process Designs with Direct Inverse Analysis
3. 学会等名 錯体化学会 第72回討論会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金子弘昌
2. 発表標題 分子設計・材料設計・プロセス設計のための直接的逆解析法
3. 学会等名 第6回 高分子学会関東支部神奈川地区講演会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計4件

1. 著者名 金子 弘昌	4. 発行年 2021年
2. 出版社 講談社	5. 総ページ数 188
3. 書名 Pythonで学ぶ実験計画法入門 ベイズ最適化によるデータ解析	

1. 著者名 化学工学会、金子 弘昌	4. 発行年 2021年
2. 出版社 丸善出版	5. 総ページ数 196
3. 書名 Pythonで気軽に化学・化学工学	

1. 著者名 金子 弘昌	4. 発行年 2019年
2. 出版社 オーム社	5. 総ページ数 240
3. 書名 化学のためのPythonによるデータ解析・機械学習入門	

1. 著者名 金子 弘昌	4. 発行年 2022年
2. 出版社 朝倉書店	5. 総ページ数 192
3. 書名 化学・化学工学のための実践データサイエンス	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------