

氏名	松井 春美
学位名	博士（システム情報科学）
学位記番号	第2号
学位授与年月日	平成19年3月19日
学位論文題目	コンビナトリアルケミストリーに基づく触媒開発について ：組合せ最適化問題と進化計算
論文審査委員	主査 小西 修 副査 三上 貞芳 副査 上野 嘉夫 副査 三木 信弘 副査 松原 仁

## 論文要旨

### 審査結果の要旨

本論文は、固体触媒開発のように評価に化学的実験が伴う組合せ最適化問題を解決するための効果的な情報処理方式について論じたものである。

固体触媒開発には元素の種類・濃度、反応温度など変数とすべき条件が多い。それらの組合せの中から最適解を求める問題（すなわち反応性の高い条件を見出す操作）は、組合せ最適化問題とみなすことができる。固体触媒開発ではさらに、化学的実験が候補の評価に不可欠である。したがって、このような問題を解決するために、迅速に有用な解を生成できるような、より良いヒューリスティックを獲得することが重要な課題である。

本論文では、このような立場から、化学的実験が不可欠な組合せ最適化問題に適応する、評価関数、進化計算、化学的実験から構成される情報処理システムの構築と検証に関する成果が述べられている。要点は以下のとおりである。

#### （1）評価関数の構築

分子レベルでの反応機構が解明されていないため、触媒反応を定式化できない。そこで、化学的実験によって得られた結果を用いて、ニューラルネットワークにより

触媒反応を近似し、評価関数とする方法が有効であることを示した。

(2) 進化計算を用いた探索

組合せ最適化問題を解くことに適した進化計算である、遺伝的アルゴリズム (GA)、免疫アルゴリズム (IA) をそれぞれ適用した。触媒反応のように多峰性関数最適化が対象である場合、局所的な準最適解を提示するGAよりも広域的に複数の解を提示できるIAの方が有効であることを示した。

(3) 対話型進化計算を用いた探索

探索手法として、IAを拡張した専門家の知識も加えた対話型免疫アルゴリズムを適用し、提示された触媒候補に対して化学的実験を行い、その結果をもとに評価関数を修正しながら有効な触媒を探索する、というサイクルを繰り返す総合的なシステムを構築し、その有効性を示した。

これらの研究成果は、実験に基づく組合せ最適化問題に対する重要な解決法を示したものであり、システム情報科学の発展に貢献するものである。以上のように、本論文は博士（システム情報科学）の学位授与に値するものと判断する。