

★ 複数の材料物性に関わる目的変数、説明変数の選択と選定のポイントを解説！

ベイズ最適化の活用事例

材料探索／物性予測／配合・プロセス条件の最適化

●発行日：2025年3月31日

●体裁：A4判 424頁

●定価：88,000円(税込)

●ISBN：978-4-86798-066-8

※大学・公的機関、医療機関の方には割引価格（アカデミック価格）で販売いたします。詳細はお問い合わせ下さい。

本書ではこんな情報を掲載しています

ぜひご試読ください

新規材料の探索、配合設計の自動化、高速化

- ・複数の材料組成比の最適化
- ・限られた実験データから目的の物性を抽出
- ・記述子の選定によるモデルの精度向上
- ・ドメイン知識の融合による未知成分の発見

プロセス、装置開発へ向けたインフォマティクスの実践

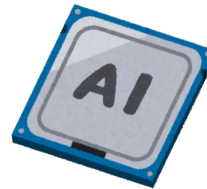
- ・熟練エンジニアの暗黙知の定量化
- ・探索空間の設定と初期データの選択
- ・温度変化、装置のばらつき、測定誤差などの対策
- ・代理モデルの選び方のコツを詳解



活用、運用事例

- ・生分解高分子のモノマー配列
- ・合成ゴムの引張強度の予測
- ・CO₂資源化触媒の開発
- ・セラミックス低温製造プロセスの開発
- ・医薬品添加物の配合探索、選定

など



※本書の目次は裏面をご覧ください。

執筆者(敬称略)

※第一著者のみ掲載

北陸先端科学技術大学院大学
三菱ケミカル(株)
東ソー(株)
(株)SCREENホールディングス
京都大学
ライオン(株)
日本ゼオン(株)
(株)東芝
龍谷大学
東洋大学
大阪大学
熊本大学
(国研)産業技術総合研究所
お茶の水女子大学
一橋大学
(国研)理化学研究所
大阪公立大学
大阪大学

本郷 研太
杉澤 宏樹
森 貴裕
仲村 武瑠
岡本 昌彦
稲垣 英輔
長岡 正宏
桐淵 大貴
芝 公仁
山田 和明
田中 冬彦
水牧 仁一朗
花岡 悟一郎
田上 湖都
天本 義史
菊地 淳
小木曾 望
金 羽晴

東京科学大学
(国研)物質・材料研究機構
石川県工業試験場
早稲田大学
(国研)産業技術総合研究所
日本大学
(地独)大阪産業技術研究所
大阪大学
新居浜工業高等専門学校
名古屋工業大学
(国研)産業技術総合研究所
日本板硝子(株)
滋賀大学
長岡技術科学大学
筑波大学
東京農工大学
東京理科大学
(国研)物質・材料研究機構

林 周斗
松田 翔一
豊田 文紫
谷口 卓也
山口 祐貴
高橋 竜太
岡崎 湧一
小野 寛太
田中 大介
加藤 央
小寺 正徳
倉上 拓真
徳田 陽明
山下 智樹
都甲 薫
粟屋 康輝
小嗣 真人
岩崎 悠真

東京科学大学
九州大学
名古屋大学
鳥取大学
早稲田大学
名古屋大学
(株)KRI
東京大学
計測エンジニアリングシステム(株)
北海道大学
大阪大学
名古屋大学
名古屋大学
名古屋工業大学
(株)MAZIN
(株)日立製作所
エトリア(株)
三菱重工業(株)

高橋 亮
嶋田 雄介
足立 吉隆
岩田 浩明
浜田 道昭
山崎 直人
中江 隆博
長藤 圭介
中野 智宏
芦刈 洋祐
岡野 泰則
黒川 康良
杓掛 健太郎
前田 佳弘
内山 祐介
佐藤 孝磨
小林 翔太
渡部 洋介

第1章 ベイズ最適化の原理とパラメータ制御、その活用

- 第1節 ベイズ統計の基礎、考え方と応用事例
- 第2節 マテリアルズインフォマティクスの
国内外の動向とベイズ最適化による計算実験
- 第3節 ベイズ最適化手法を用いた製品開発の迅速化
- 第4節 能動学習とベイズ最適化の組み合わせによる材料開発の効率化
- 第5節 ロバスト制約下におけるベイズ最適化の運用
- 第6節 ベイズ最適化によるデータベース管理システムの設定値探索
- 第7節 MATLAB/Pythonによるベイズ最適化の実装
- 第8節 ベイズ統計学に基づいた量子測定、推定の最適化
- 第9節 スペクトルデータ解析へ向けた
ベイズ推定の活用とパラメータの調整
- 第10節 秘密計算により入力データを秘匿したベイズ最適化

第2章 ベイズ最適化による高分子材料、 有機化合物の合成、開発への応用

- 第1節 高分子材料開発におけるベイズ最適化の活用
- 第2節 高圧触媒反応のハイスループット最適化
- 第3節 ベイズ最適化による
可視光ヒドロキシペルフルオロアルキル化条件の最適化
- 第4節 生分解性高分子のタフネスと分解性の両立に向けた
モノマーの配列設計
- 第5節 NMRデータサイエンスによる生分解性材料最適化
- 第6節 繊維強化複合材料積層板の強度予測へのバッチベイズ最適化の活用
- 第7節 ベイズ最適化による化学増幅型レジストの
脱保護反応における有効反応半径の推定
- 第8節 多目的バッチベイズ最適化によるタンパク質設計
- 第9節 ロボット実験とデータ科学的手法が連携した
電解液材料探索システム
- 第10節 金属空気二次電池開発に向けた固体電解質の探索と
ベイズ推定によるパラメータの最適化
- 第11節 機械学習を用いた光駆動有機結晶の設計と
高出力へ向けた条件最適化

第3章 セラミックス、ガラス材料における ベイズ最適化の活用と材料探索、物性予測

- 第1節 プロセスインフォマティクスによる
セラミックデバイスの製造とプロセスパラメータの最適化
- 第2節 コンビナトリアル手法による機能性材料の開発と
ベイズ最適との組み合わせ
- 第3節 ベイズ最適化を活用した酸化物触媒の設計
- 第4節 ブラックボックス最適化によるリットベルト解析と
複合酸化物材料の解析への応用

- 第5節 ベイズ最適化による実験条件の最適化と
セラミックスの赤色蛍光強度向上への適用
- 第6節 ベイズ最適化による組成・プロセスパラメータの調整と
新材料開発への応用
- 第7節 水電解用電極触媒開発におけるベイズ最適化の適用
- 第8節 ベイズ最適化によるゾル-ゲル反射防止膜の開発
- 第9節 ベイズ最適化を用いたガラス材料探索

第4章 ベイズ最適化を用いた金属材料の 構造探索、プロセス条件最適化

- 第1節 ベイズ最適化を用いた結晶構造探索
- 第2節 ベイズ最適化によるIII-V族半導体薄膜の熱電性能向上
- 第3節 Au原子接合の作製におけるベイズ最適化を用いた実験パラメータ探索
- 第4節 ベイズ最適化を用いた高磁気異方性材料の物性予測と創製
- 第5節 ベイズ最適化による磁性合金材料探索
- 第6節 機械学習とハイスループット第一原理計算を用いた自律的材料探索
- 第7節 超伝導材料創製プロセス開発におけるインフォマティクスの活用
- 第8節 構造金属材料研究・開発におけるベイズ最適化の適用

第5章 医薬品、バイオ分野へ向けたベイズ最適化の活用

- 第1節 医薬品添加物の材料探索へ向けたニューラルネットワークの活用
- 第2節 ベイズ最適化を用いたRNA配列デザイン
- 第3節 ベイズ最適化を駆使したスルファミドの
フロー合成における条件探索
- 第4節 抗菌スパイク粒子のガウス過程回帰を活用した合成条件最適化

第6章 プロセス設計、合成条件、装置設計の最適化へ向けた ベイズ最適化の活用

- 第1節 ベイズ最適化を用いた粉体成膜プロセスの最適化
- 第2節 流体吐出プロセスの定量評価とベイズ最適化の活用
- 第3節 シミュレーションと機械学習を用いた
分離技術プロセスのロバスト最適化
- 第4節 フロー合成におけるベイズ最適化の活用と自動合成
- 第5節 ベイズ最適化を用いた半導体材料の結晶成長条件の最適化
- 第6節 シリコン量子ドット太陽電池の効率向上へ向けた
ベイズ最適化の活用
- 第7節 制約付きベイズ最適化
- Siヘテロ接合太陽電池用アモルファスSiの製膜条件の最適化 -
- 第8節 産業用サーボにおけるパラメータ自動調整へのベイズ最適化の活用
- 第9節 ベイズ最適化による射出成形品の品質安定化
- 第10節 ベイズ最適化による連続型インクジェットプリンタの
印字品質向上に関する検討
- 第11節 異種ドメイン適応とガウス過程回帰による予測手法の確立と
ケミカルトナー製造への応用
- 第12節 生産効率向上へ向けたディスパッチングルールの
事前学習および運用

