

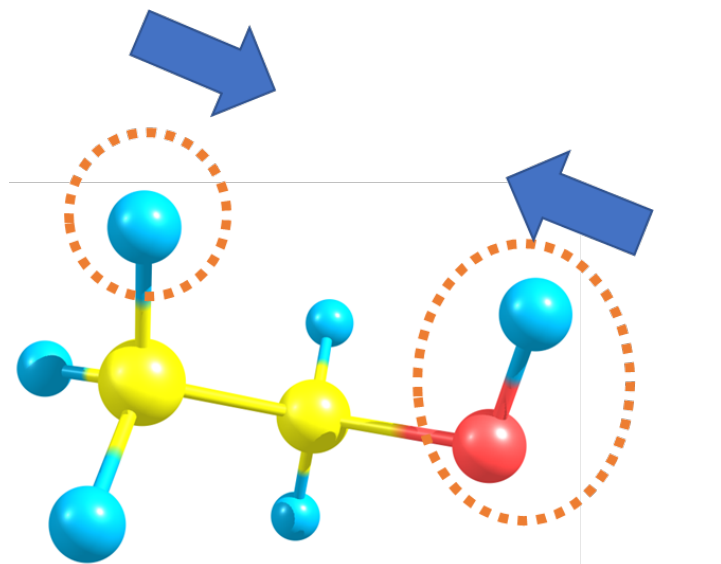
グラフ探索手法に基づく 反応経路自動探索

新領域創成科学研究科
情報メディカル生命専攻
津田研究室
中尾篤之

自己紹介

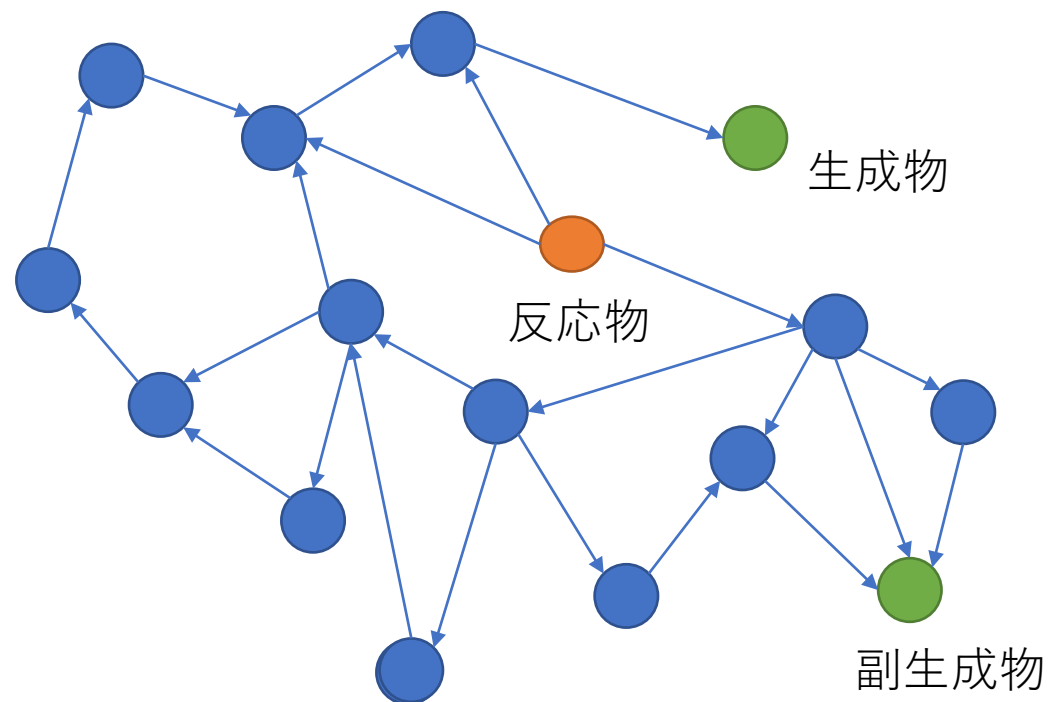
- 東京大学工学系研究科化学システム工学専攻 修士課程修了
 - リチウムイオン二次電池シミュレーションの作成
 - ベイズ最適化による最適設計探索
- 大日本印刷株式会社
 - 建材印刷の製品開発に従事
- 東京大学新領域創成科学研究科情報メディカル生命専攻 博士課程
 - AFIR法を用いた化学反応ネットワークの探索手法の開発

AFIR法とは



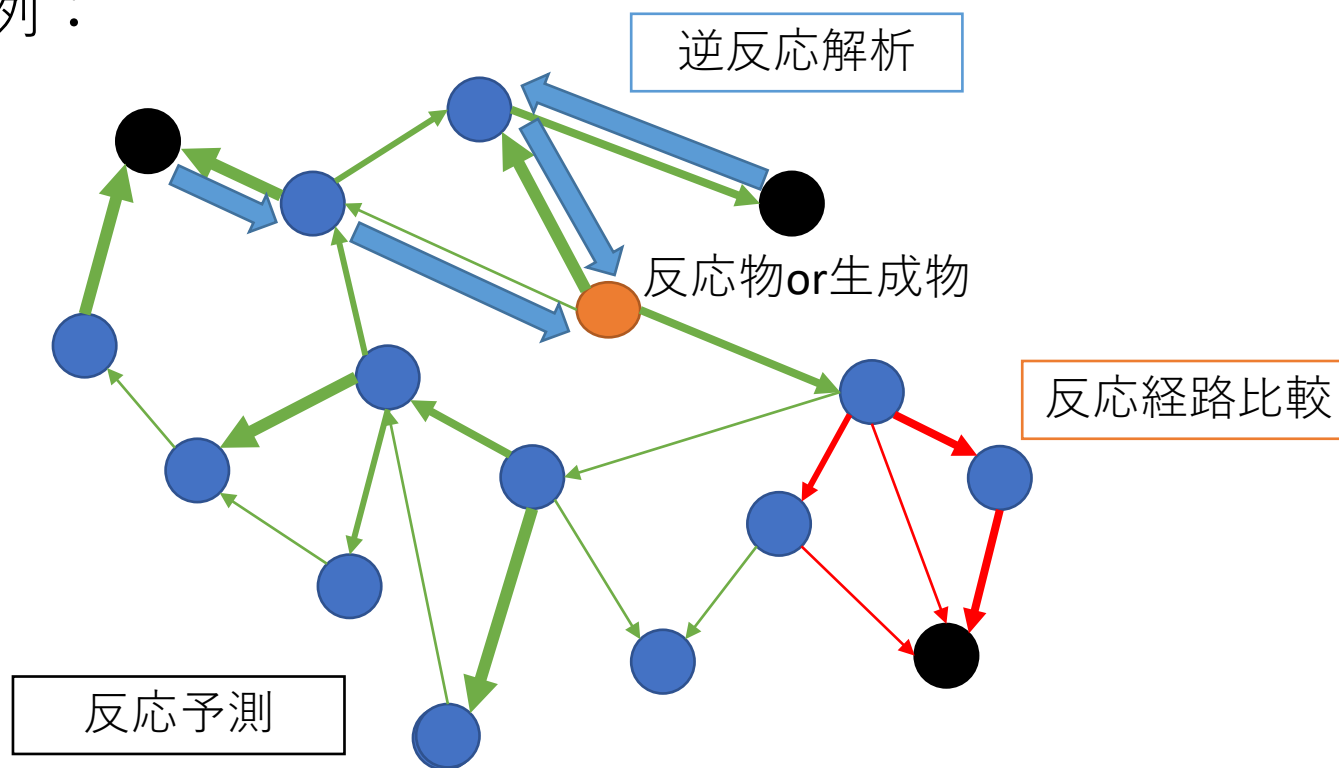
構造に人工的な力を加える
ことで化学反応を再現

素反応のネットワークにより
化学反応をシミュレーションする



化学反応ネットワーク

利用例：



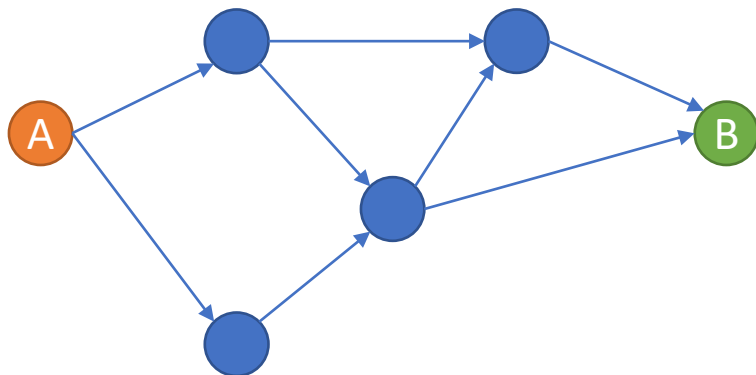
どの順番で計算を行うかのアルゴリズムは未発達



既存アルゴリズム・機械学習の活用

化学反応経路探索

- 反応 $A \rightarrow B$ についてどのような経路で反応が進むか



- 反応メカニズム解析、反応性の予測・比較

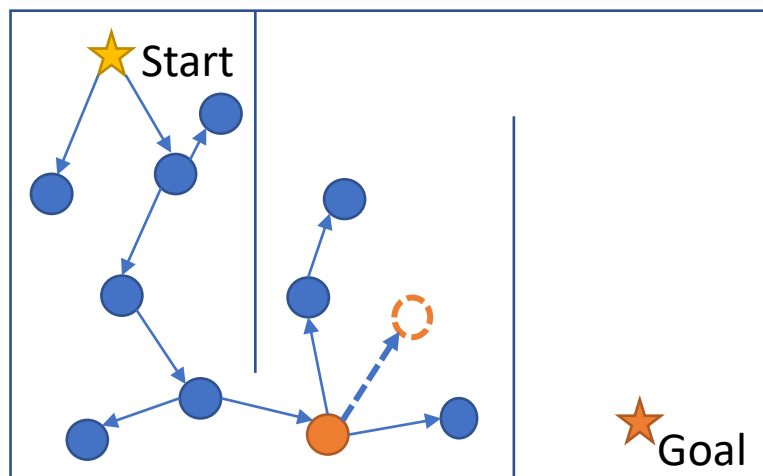
反応経路探索に適した手法の開発

パス探索アルゴリズム

反応経路比較（反応物⇒生成物が指定されている場合）のアルゴリズムを開発中

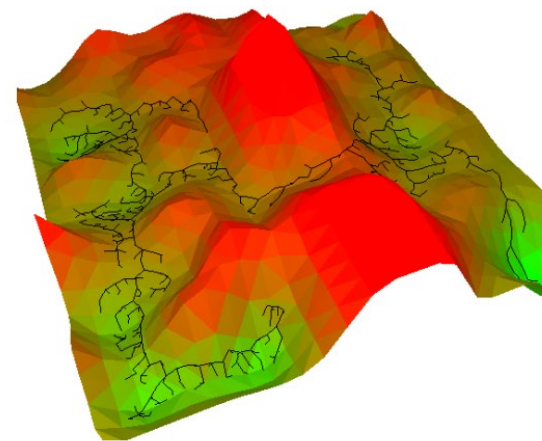
Rapidly-exploring random tree (RRT) [1]

スタートからゴールへのパスを探索
迷路探索・ロボット制御の分野で活躍



Transition-based RRT (tRRT)[2]

コストがある空間上でのパスを探索
コストをエネルギーとみなすことで
適当な反応パスを探すことができる



他分野でのパス探索アルゴリズムを反応経路探索に応用

[1] LaValle, S. M. Report No. TR 98-11, Computer Science Department, Iowa State University (1998).

[2] Jaillet, Léonard, Juan Cortés, and Thierry Siméon. 2008 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems. IEEE, 2008.

ケーススタディ

