

## GTR インターンシップ終了報告書

所属: 理学研究科 物質理学専攻 (化学系)

学年: 博士後期課程 2 年

氏名: 成田皓樹

### インターンシップ実施場所:

コニカミノルタ株式会社 東京サイト八王子 (東京都八王子市)

### 実施期間:

2022 年 1 月 11 日～2022 年 2 月 25 日

### 所感:

今回のインターンシップでは、コニカミノルタ株式会社 東京サイト八王子 要素技術開発センターにて、新規センサー分子開発と機械学習による判別分析デモンストレーションを実施した。

はじめに、プロジェクトの概要を説明していただいた。そのなかで、現状の課題とそれを解決する戦略、標的とする分子群についてご教授いただいた。また、社員の皆様と同じ空間に、専用のデスクと実験台をいただいた。

実験としては、センサー分子の合成から取り組み、数段階の有機合成とそれらの精製を行った。目的化合物は、NMR および LC-MS により同定した。小スケールの反応から開始し、反応条件や精製操作を最適化した後、グラムスケールでの合成を行った。機器や解析装置の使用方法については、社員の皆様から丁寧にご指導いただいた。

続いて、合成した一連のセンサー分子について、物性測定を行った。吸収・発光スペクトルの測定から期待した物性が発現していることを確認した。センサーとしての機能を評価するため、百種類程度の評価サンプルとセンサー分子を、それぞれ混合した際の光物性についても同様に測定を行った。

得られたデータの解析には、機械学習を用いた。これまでに Python を扱った経験は全くなかったが、社員の皆様に丁寧にご指導いただいた。また、参考書を貸していただき、測定の待ち時間等に自主的に勉強することができた。

まず、教師なし学習である主成分分析により、センサー分子が評価サンプルを分類することができるかを検討した。結果として、いくつかのグループに分類可能であることが示された。次に、教師あり学習である線形判別分析により、学習モデルの性能評価を行った。その結果、比較的高い正解率で評価サンプル



を分類可能であることがわかった。また、以前に開発された別のセンサー分子の結果を学習データに加えることで、正解率が向上することもわかった。続いて、この学習モデルを用いて、未知試料の判別テストを実施した。学習モデルには含まれていない、新たな評価サンプルを用意し、同様の測定と解析を実施した。しかし、線形判別分析による学習モデルでは、未知試料の予測は困難であることがわかった。そこで、二次判別分析やランダムフォレスト、サポートベクターマシン等の判別手法を検討し、最も高い精度の学習モデルを選択することで、未知試料の予測をある程度達成できた。

約2月間の滞在だったが、大学にいただけでは得難い経験となった。企業での研究は、大学の研究に比べ、目的意識が強く課題設定がより具体的だと感じた。また、社員同士の意識共有もより積極的であり、限られた時間のなかで成果を出すのに重要なプロセスだと感じた。今後の、自身の研究活動にも活かしていきたい。社員の皆様には、暖かく迎えていただき、研究の話だけでなく、将来設計について様々な話を聞かせていただけた。新たな知識や技術を身につけられただけでなく、研究に対する異なる視点や考え方を学ぶ貴重な機会となった。

#### **謝辞：**

本インターンシップは、コニカミノルタ株式会社 東京サイト八王子 要素技術開発センターの北弘志様および直接ご指導いただきました一杉俊平様をはじめ、社員の皆様のご指導のもと実施しました。大変丁寧なご指導をいただいたことに加え、企業での生活や寮生活についても気にかけていただきました。心より感謝申し上げます。また、今回の機会を与えてくださった山口茂弘教授、ご支援をいただいた GTR 学生支援室の皆様にも感謝申し上げます。