

AI 活用で挑む学問の革新と創成
2022 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

Phua Yin Kan

九州大学 大学院工学府
大学院生

AI 駆動型機能性高分子インフォマティクスの創成

研究成果の概要

本研究では、機能性高分子を対象とした汎用的なインフォマティクス手法の開発を目指し、高い目的物性値の予測精度及び化学的解釈性により、実験研究者の信頼を獲得可能なモデルの開発を目的とする。機能性高分子は高分子の中でも特定機能を持つものを指し、イオン伝導やガス分離等に特化した高分子が代表例である。本研究では、燃料電池用機能性高分子膜、具体的にはアニオン交換膜を構成する機能性高分子(AEM)を対象にまず実証を行う。2022年度は1) AEM データベース構築と2) 新たな説明変数の考案とその解釈性評価を実施した。

- 1) AEM の公開データベースが存在しないため、独自での構築を進め、公開論文データの抽出にてデータを集めた。2022年度終わりまでに70報の論文から計5000点弱のデータを抽出した。
- 2) 本研究では次年度以降にAEM高分子構造をグラフ表現して学習させるため、グラフ変換に際して必要となる特徴行列に含まれる説明変数の充実化及びそれらの解釈性を評価した。ここでは新たな説明変数として、実験的に化学構造の特定に用いられる核磁気共鳴(NMR)化学シフトを数値列化する方法を考案した。NMR化学シフトを説明変数に用いることのメリットは、化学シフト値と化学構造の1対1の対応が明確である点にある。実際にNMR化学シフトを説明変数に用いた機械学習モデルを構築し、SHAPによって重要説明変数を抽出したところ、容易に物性と化学構造との紐づけが可能であることが確かめられた。

以上より2022年度では、データベース構築とAEM高分子構造をグラフ表現する際の特徴行列にも利用可能な、NMR化学シフトを数値列化することに成功した。これらは、高解釈性を持つモデルの構築における重要な特徴量となりうることが期待される。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Y. K. Phua, T. Fujigaya, K. Kato. Machine learning for anion-exchange membrane used by fuel cells to determine the dominant factor controlling anion conductivity. 2022 Materials Research Society (MRS) Fall Meeting & Exhibit, DS03.15.06, Virtual, 口頭発表, December 6-8, 2022.
- 2) Y. K. Phua, 藤ヶ谷剛彦, 加藤幸一郎. 説明可能機械学習モデルによる燃料電池用アニオン交換膜のイオン伝導度予測と重要因子探索.第32回日本MRS年次大会 (The Materials Research Society of Japan), A-O6-010, 産業貿易センタービル, 口頭発表, 2022年12月5-7日.