

2023 年度年次報告書
AI 活用で挑む学問の革新と創成
2022 年度採択研究代表者

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 高分子)を対象にまず実証を行う。2023 年度は i) AEM データベース構築と ii) AEM 高分子マップ作成とその解釈性評価を実施した。

- i) 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。2023 年度終わりまでに 82 報の論文から計 5,000 点強のデータを抽出した。
- ii) 本研究では AEM のアニオン伝導度を目的変数とする予測モデルと併用可能な材料設計指針作りを目指し、教師なし学習により現在報告されている AEM 高分子のマップを作成した¹⁾。ここでは、材料分野において未報告の線形手法の主成分分析(PCA)と非線形手法の Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP)を組み合わせたモデル(PCA-UMAP デュエットモデル)を駆使して i)で構築されたデータベース内に含む 2,000 弱次元の記述子で表現した AEM 高分子構造²⁾を段階的に 2 次元まで削減し、2 次元プロットで可視化した。PCA-UMAP デュエットモデルを用いて段階的に次元削減するメリットは、異なる性質を持つ手法による削減で情報損失の抑制が図れることである。実際に PCA-UMAP デュエットモデルを用いた場合では AEM 化学構造の特徴ごとにクラスタ分けすることができた。これは、PCA や UMAP 単体では成し遂げなかったことである。

以上より 2023 年度では、データベース構築と既知の AEM 高分子構造のマップ化に成功した。これらは、予測モデルとマップの併用による材料設計を可能にし、マップをガイドラインとして使用することで有望材料を設計し、設計した高分子の性能予測を予測モデルを用いて実施する高効率な材料設計フローの確立につながると期待される。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Yin Kan Phua, Nana Terasoba, Manabu Tanaka, Tsuyohiko Fujigaya, and Koichiro Kato. Chemically Intuitive Material Design Guidelines for Anion-Exchange Membrane Polymers via Unsupervised Machine Learning. *ChemElectroChem*, e202400252 (*under review*), **2024**.
- 2) Yin Kan Phua, Tsuyohiko Fujigaya, Koichiro Kato. Predicting the anion conductivities and alkaline stabilities of anion conducting membrane polymeric materials: development of explainable machine learning models. *Science and Technology of Advanced Materials*, 24, 1, 2261833, **2023**.