

フロー合成したコポリマーに対する機械学習予測の量子化学計算による外挿性向上

(奈良先端科学技術大学院大学¹・慶應義塾大学²・JSR 株式会社³) ○高須賀 聖五¹・及川 駿登¹・吉村 誠慶²・伊藤 翔¹・原嶋 庸介¹・高山 大鑑¹・浅野 重人³・黒澤 哲³・菅原 哲徳³・畑中 美穂²・宮尾 知幸¹・松原 崇充¹・大西 裕也³・網代 広治¹・藤井 幹也¹

Extrapolation performance improvement by quantum chemical calculations for machine learning-based predictions of flow-synthesized binary copolymers (¹Nara Institute of Science and Technology, ²Keio University, ³JSR Corporation) ○Shogo Takasuka¹, Shunto Oikawa¹, Takayoshi Yoshimura², Sho Ito¹, Yosuke Harashima¹, Tomoaki Takayama¹, Shigehito Asano³, Akira Kurosawa³, Tetsunori Sugawara³, Miho Hatanaka², Tomoyuki Miyao¹, Takamitsu Matsubara¹, Yuya Ohnishi³, Hiroharu Ajiro¹, Mikiya Fujii¹

The properties of polymers are highly dependent on the combination and composition ratio of the monomers used to prepare them; however, the large number of available monomers makes an exhaustive investigation of all the possible combinations difficult. In this study, a machine learning model was constructed using experimental data of copolymers radical polymerized by flow reactor, and the prediction performance of monomer conversion and monomer composition ratio in polymers was verified. High prediction accuracy was achieved even in the molecular extrapolation region by including not only the process conditions but also the quantum chemical calculation values as explanatory variables. In particular, we found that molecular orbital energy and orbital energy gap are important factors for improving accuracy.

Keywords : Machine Learning, Materials Informatics, Polymer Science, Flow Synthesis, Quantum Chemical

ポリマーの特性は、モノマーの組合せおよび構成比率に大きく依存するが、モノマーの種類は無数にあり、全ての組合せを網羅的に探索することは困難である。本研究では、フロー合成装置にてラジカル重合したコポリマーの実験データを用いて機械学習モデルを構築し、モノマー転化率およびポリマー中モノマー組成比の予測性能について検証を行った。プロセス条件のみを用いた学習モデルでは取得データ近傍にたいしてのみにしか予測性能を有しないが、量子化学計算値を説明変数に含むことで分子外挿領域でも高い予測精度を示すことがわかった。特に、予測には分子軌道エネルギーおよびラジカル

の軌道エネルギー差が精度向上に重要な因子であることを見出した。当日はモデル化の詳細について報告する。

