

機械学習を用いたゾル-ゲル法によるポリシロキサン合成における最適条件の予測

(東理大理工) ○山本 一樹・高橋 遼二・郡司 天博

Prediction of optimal conditions for polysiloxane synthesis by sol-gel method using machine learning (*Faculty of Science and Technology, Tokyo University of Science*) ○Kazuki Yamamoto, Ryoji Takahashi, Takahiro Gunji

In the synthesis of polysiloxane by the sol-gel method, it is known that the molecular weight of the resulting polymer varies depending on various factors, such as the structure of monomer species, solvent, molar amount of water, catalyst, and temperature. However, until now, reaction conditions have been set based on the experience and intuition, and it has been necessary to conduct multiple experiments to find the optimum condition. In this study, we investigated the construction of a model to predict the optimal molecular weight by using machine learning that utilizes the data obtained so far. Random Forest (RF) algorithm showed the highest coefficient for the prediction of weight average molecular weight (M_w) for trimethoxy(methyl)silane in different molar ratio of water to monomer. Compared to the experimental value, the predicted value of M_w was relatively close.

Keywords : Sol-Gel method; Polysiloxane; Machine Learning

これまで我々は、アルコキシシラン類を用いた加水分解・重縮合（ゾル-ゲル法）により、有機溶媒に可能なポリシロキサンの合成を行ってきた。(Fig. 1) 一般的にゾル-ゲル法による重合は、モノマー種、溶媒、水、酸/塩基触媒、反応温度など様々な条件によって、得られる高分子の分子量が変わることが知られており、実験を繰り返すことで最適条件を見つけ出す必要があった。そこで本研究では、当研究室で報告している各種アルコキシシランの重合データを活用し、機械学習を用いることで、最適な分子量の予測するモデルの構築および予測を目的とした。

機械学習においてモノマー種、反応量などを説明変数、重量平均分子量(M_w)を目的変数として、Lasso 回帰、人工ニューラルネットワーク (ANN)、ランダムフォレスト (RF) の各アルゴリズムを用いて検討したところ、RF が最も高い決定係数を示した。一例としてトリメトキシ(メチル)シラン(MTMS) から得られる高分子の重量平均分子量(M_w)について、モノマーに対する加える水のモル比(H_2O/Si) の違いによる予測を行い、実験の平均値と比較したところ、Table 1 に示すように比較的近い値であった。これにより機械学習を用いた分子量予測の可能性が示された。

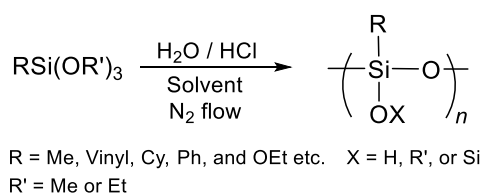


Fig. 1 Polymerization of alkoxysilanes

Table 1 Results of M_w of MTMS polymer

H_2O/Si	M_w of MTMS polymer	
	Prediction	Experiment
1.0	2120	3450
1.1	7497	7300
1.2	17457	20000