

共重合体を含むアニオン交換膜の特性・劣化を予測可能な機械学習モデルを構築 燃料電池や水電解装置の研究開発を加速させ、水素社会実現に貢献

ポイント

- ① 化学・材料研究にデータ科学手法を取り入れた研究が盛んに行われているが、機能性高分子と呼ばれる高い機能を有する高分子材料に対してデータ科学手法を取り入れた研究はほとんど行われていなかった。
- ② 本研究では、機能性高分子の中でも燃料電池や水電解装置などの中核部材であるアニオン交換膜に着目し、論文情報から単独重合体・共重合体を統一的に収録した独自データベースを構築することで、アニオン交換膜のアニオン伝導度やその劣化挙動を高精度に予測する機械学習モデルの構築に成功した。
- ③ 本研究の成果によってアニオン交換膜の課題となっているアニオン伝導度と耐久性を両立した有望材料を高効率に探索できるようになることが期待され、燃料電池や水電解装置の研究開発の加速、さらには水素社会の実現に貢献することが期待される。

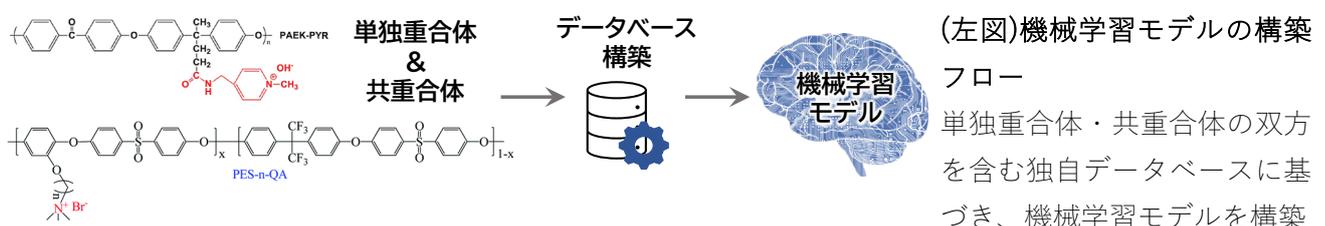
概要

従来の化学・材料研究は、実験を中心に試行錯誤を繰り返しながら実施されてきました。しかし近年のデータ科学手法の発展にともない、化学・材料とデータ科学の融合研究が盛んに行われています。しかしながら、エネルギーを始め、環境、バイオなど社会生活を支える基幹材料群である機能性高分子分野への適用は未だ殆どなされていませんでした。

九州大学大学院工学研究院の加藤幸一郎准教授、藤ヶ谷剛彦教授および同大学工学府博士課程2年のPhua Yin Kan氏の研究グループは、機能性高分子の中でも、水素社会実現の鍵と期待される燃料電池や水電解の重要部材であるアニオン交換膜に着目し、分子構造に基づいてアニオン伝導度やその劣化挙動を高精度に予測可能な機械学習モデルを構築しました。独自にアニオン交換膜データベースを論文情報に基づいて構築することで、単独重合体と共重合体の双方を予測可能としているだけでなく、アニオン交換膜作成直後および劣化試験中のアニオン伝導度経時変化の高精度予測も実現しています。

今回開発した機械学習モデルを用いることで、燃料電池や水電解装置の重要部材であるアニオン交換膜の研究開発を加速させ、水素社会の実現に貢献することが期待されます。さらに、機械学習モデルの構築方法はアニオン交換膜以外の機能性高分子にも展開可能なものであるため、様々な分野への波及効果も期待されます。

本成果は、2023年10月17日にTaylor & Francis Onlineが発行する国際学術誌「Science and Technology of Advanced Materials (STAM)」にオンライン掲載されました。



【研究の背景と経緯】

近年、データ科学手法の発展は目覚ましく、画像認識・音声認識や機械翻訳などの機械学習・人工知能は我々の生活をより便利なものへと発展させています。このデータ科学の活用の波は材料・化学分野にも押し寄せており、マテリアルズ・インフォマティクスやポリマー・インフォマティクスといった新たな研究分野となっています。これまでの材料・化学の研究は、研究者の知識・経験、鋭い洞察により推し進められてきており、ときには偶然も重なって、革新的な材料・手法が見いだされてきました。これまでの研究手法に新たにデータ科学を取り入れることで、個々の研究者の知識・経験・洞察力への依存性を軽減し、また、膨大な候補物質の中から有望候補を効率的に絞り込むことが可能になると期待されています。すでにこれらの取り組みは、無機材料や低分子材料で多くの成果を上げてきています。しかしながら、社会生活を支える基幹材料である高分子材料、中でも特に燃料電池や水電解装置で使われる高分子電解質膜などの機能性高分子は環境・エネルギー・バイオテクノロジーにおいて必須材料であるものの、データ科学手法の適用がほとんど行われていませんでした。この背景には、機能性高分子の公開データベースが無いこと、高分子材料特有の単独・共重合体（図 1）など異なる構造を一元的に表現・管理する必要があることなどが考えられます。これらの課題を解決し、機能性高分子開発にもデータ科学の活用を推進することは産業界からの期待も大きく、急務と考えられています。

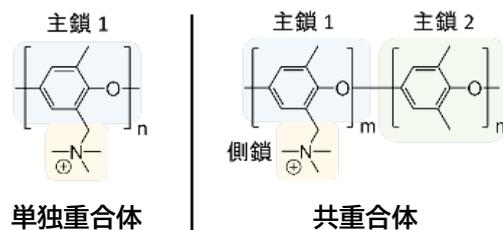


図 1 単独重合体と共重合体の模式図。単重合体は1つの主鎖に側鎖（イオン伝導性官能基を含む）を有し、共重合体は2つの主鎖の片方に側鎖を有する。

【研究の内容と成果】

我々は今回、機能性高分子の中でも燃料電池や水電解の中核となる材料である高分子電解質膜に着目しました。中でも、アニオン交換膜を題材に、62報の研究論文から高分子構造・実験条件・実験条件ごとのアニオン伝導度を抽出することで独自のデータベースを構築し、アニオン伝導度を予測可能な機械学習モデルの構築に成功しました。構築した機械学習モデルがテスト用の未知の高分子構造に対する実験値と予測値のプロットは図 2 に示しているように、 $RMSE = 0.014 \text{ S cm}^{-1}$ （アニオン交換膜の平均的なアニオン伝導度と同等以下の桁数）と高い予測精度を達成しました。アニオン交換膜には、大きく①アニオン伝導度の向上と②耐久性の向上という2つの課題がありますが、今回開発した機械学習モデルは、劣化試験時のアニオン伝導度変化も予測が可能です。また、データベースおよび機械学習モデル構築において、単独・共重合体を一元的に表現・管理する方法を合わせて考案し、これまでにない多様な材料に対応可能な機械学習モデルとなっていることも特徴です。したがって、広範な候補材料群の中から、高いアニオン伝導度を持ち劣化しにくいアニオン交換膜を効率的に探索することに役立つと期待されます。さらには、説明可能 AI (XAI) の手法の1つである SHAP を適用することで、高いアニオン伝導度に大きく影響する因子の抽出も行い、材料設計の指針を得ることに成功しました。昨今急速に発展している生成系 AI に対してこの設計指針を与えることで、優れたアニオン伝導膜材料の構造を AI によって生成することも可能になると期待されます。

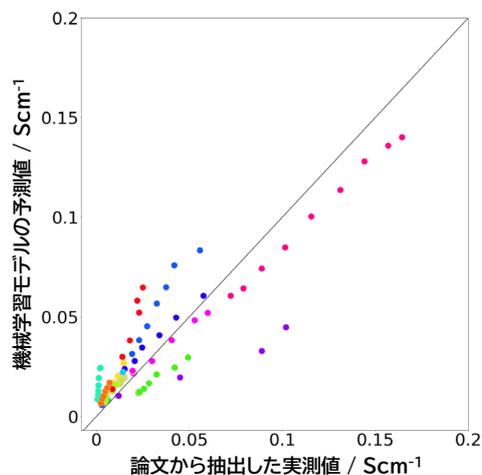


図 2 テスト用の未知のポリマーに対するアニオン伝導度の実測値と予測値

【今後の展開】

本研究で構築した機械学習モデルを使用することで、アニオン交換膜の高効率な探索が可能になると期待されます。これにより、水素社会実現の鍵と目される燃料電池や水電解の研究開発を加速できると考えられます。現在、更なるデータベースを拡張しており、予測精度の向上・適用範囲の拡大を推進中です。さらに、本研究で考案した単独・共重合体を一元的に表現・管理する方法は、アニオン交換膜に限らず広範な機能性高分子に適用可能であるため、様々な分野への展開が期待されます。

【用語解説】

(※1) アニオン交換膜

説明 イオンを選択透過させるイオン交換膜の1種であり、陽イオンを交換するものを「カチオン交換膜」、陰イオンを交換するものを「アニオン交換膜」と呼ぶ。

(※2) 水電解装置

説明 電気エネルギーにより水を水素と酸素に分離する装置。

(※3) 説明可能 AI(XAI)

説明 人工知能(AI)や機械学習モデルが導き出した解について、どのようにして出力した結論に至ったかを人間が納得可能な根拠を示す技術。

(※4) SHAP

説明 協力ゲーム理論の「Shapley value」を機械学習に応用したフレームワーク。ひとつひとつの説明変数がモデルの予測値に与える貢献度を算出可能なため、説明可能 AI の手法の1つとして注目。

【謝辞】

本研究は JSPS 科研費 (JP23H02027)、九州大学工学研究院工学研究新分野開拓助成、JST ACT-X (JPMJAX22AF)、JST 科学技術イノベーション創出に向けた大学フェロシップ創設事業 (JPMJFS2132)、九州大学ロバート・ファン/アントレプレナーシップ・センター (QREC) アカデミックチャレンジ 2021 の助成を受けたものです。

【論文情報】

掲載誌：Science and Technology of Advanced Materials (STAM)

タイトル：Predicting the Anion Conductivities and Alkaline Stabilities of Anion Conducting Membrane Polymeric Materials: Development of Explainable Machine Learning Models

著者名：Phua, Yin Kan; Fujigaya, Tsuyohiko; Kato, Koichiro

DOI：10.1080/14686996.2023.2261833

【お問合せ先】

<研究に関すること>

九州大学 大学院工学研究院応用化学部門 准教授 加藤 幸一郎 (カトウ コウイチロウ)

TEL：092-802-2922 FAX：092-802-2842

Mail：kato.koichiro.957@m.kyushu-u.ac.jp

<報道に関すること>

九州大学 広報課

TEL：092-802-2130 FAX：092-802-2139

Mail：koho@jimu.kyushu-u.ac.jp