PRESS RELEASE（2024/08/02）

# ２つの教師なし機械学習の連携によるアニオン交換膜の材料マップの作成

**～研究者による新規材料の設計を効率化し、広範囲な材料の開発加速へ貢献～**

**ポイント**

① 機能性高分子 （何らかの特別な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が増えつつあるが、物性予測精度の向上に注力したブラックボックスのモデルが多く、研究者による分子設計をサポートするようなモデル開発はほとんど行われていない。

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(※1)などの中核部材であるアニオン交換膜(※2)を対象に、既報の化学構造情報を収録した独自データベースを構築し、教師なし機械学習(※3)手法である主成分分析（PCA）(※4)と Uniform Manifold Approximation and Projection（UMAP）(※5)を連携することで世界初のアニオン交換膜材料マップの作成に成功した。

③ アニオン交換膜材料マップを用いることで構造・性能を客観的に把握することができ、研究者の知識・経験に材料マップを組み合わせることで思考を深め、新規材料の効率的な設計が期待される。さらに、マップ作成手法は他材料への応用も可能であるため、様々な材料の研究開発加速に貢献することが期待される。

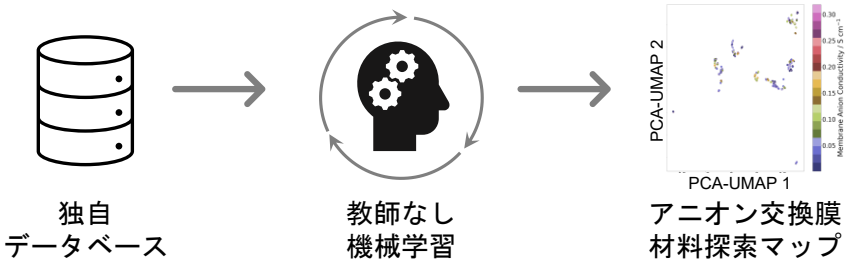
**概要**


近年のデータ科学の発展にともない、化学・材料分野でもデータ科学を融合する研究が活発に行われています。エネルギー、環境、バイオ等の多方面で社会を支える基幹材料群である機能性高分子分野への適用も研究されはじめていますが、構築された機械学習モデルの多くはブラックボックス化しており、機械学習単独での利用が想定されているため、研究者の知識・経験をサポートして新材料設計を効率化する様なモデル開発は行わ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 氏らの研究グループは、燃料電池や水電解装置の中核部品を担うアニオン交換膜材料を対象に、２つの教師なし機械学習モデルを連携させることで化学構造情報に基づく材料マップを作成しました。さらに、マップ上の各材料データ点をアニオン伝導度（アニオン交換膜の重要物性）の値に応じて色付けることで、多様なアニオン交換膜のアニオン伝導度と化学構造の特徴・関係性を明らかにし、材料マップを用いた材料設計の効率化を提案しました。

研究者は自身の知識・経験に加えて今回作成した材料マップを参照することで、化学構造と物性の関係性を俯瞰しながら自身の思考を深め、効率的に高性能な材料の設計・開発に取り掛かることができます。また、マップ作成手法は汎用性があり、様々な材料の開発を加速させる波及効果が期待できます。

本成果は、2024 年 07 月 15 日に Wiley-VCH が発行する国際学術誌「ChemElectroChem」にオンライン掲載されました。


(左図)材料マップの作成フロー
既報の化学構造を含む独自データベースを教師なし機械学習モデルに学習させ、材料探索マップを作成する。

【研究の背景と経緯】

近年、データ科学の発展に伴い、化学・材料分野においてもデータ科学手法を用いて材料開発の効率化を図るマテリアルズインフォマティクス（MI）が注目を集めています。従来の化学・材料研究では、研究者の知識・経験・鋭い洞察がイノベーションの原動力となっていました。これら研究者個人が持つ知識・経験と組み合わせることでより効率的に高性能な材料の研究・開発に資するような MI の活用が期待されています。特に、地球温暖化で持続可能社会・水素社会の実現までに残されたタイムリミットが迫ってきている昨今、水素社会実現のカギとなる燃料電池や水電解装置の中核部品を担うアニオン交換膜材料の早期実用化が望まれています。既にいくつかの研究グループから MI をアニオン交換膜材料開発に導入する試みが報告されていますが、いずれも化学構造を限定したブラックボックス化した機械学習モデルの構築に留まっており、機械学習モデルの汎用性・解釈性の面で課題がありました。我々は化学構造を限定せずに解釈可能な機械学習モデルを構築し、上記課題を解決しましたが、材料開発の効率化・高度化に資する知見は得られませんでした。MI により材料開発の効率化・高度化に資する知見を抽出し、研究者の知識・経験・洞察と融合させることによる材料開発の加速は産業界からの期待も大きく、急務と考えられています。

【研究の内容と成果】

本研究では、既報のアニオン交換膜材料の化学構造を二次元化(※6)することで材料マップの作成に成功しました（図1)。無秩序で意味をなさないマップの作成を避けるため、主成分分析（PCA）及び Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP) を組み合わせる戦略を用いました。この手法は大規模ゲノム解析などで用いられることはありましたが、材料研究への適用はこれまでありませんでした。PCA では、1,600 次元以上の数値で表現されたアニオン交換膜材料の化学構造を 32 次元に圧縮しました。続いて UMAP で二次元に圧縮することで、複雑な化学構造に含まれている情報を保持しつつ高次元空間から低次元空間への変換を実現しました。既知材料のマップ上の分布は化学構造を反映しているため、各点を目的物性値で色付けすることで目的物性と各化学構造の関係性を明らかにすることができます。本研究では目的物性をアニオン伝導度とすることで、既知のアニオン交換膜材料に対してアニオン伝導度と化学構造の特徴・関係性を明らかにしました。さらに、アニオン交換膜材料の代表的な構造から派生した 4 種類のテスト構造を入力した結果、材料マップがもつ化学構造とアニオン伝導度の特徴・関係性を解き明かす機能は未学習のアニオン交換膜材料にも適用可能であることを確認しました。これにより、研究者は自身の知識・経験・洞察だけではなく、材料マップを用いて化学構造と物性の関係性を俯瞰しながら自身の思考を深め、効率的に高性能な材料の設計・開発に取り掛かることができます。

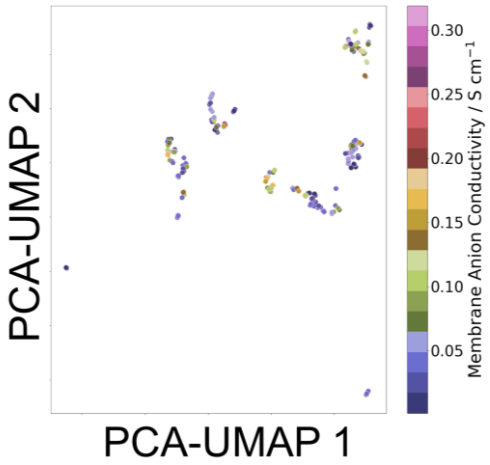


図 1　アニオン交換膜材料の材料マップ

【今後の展開】

本研究ではアニオン伝導膜材料を対象としましたが、本研究で用いた手法はどのような材料にも適用可能です。つまり、様々な材料マップの作成を可能とし、構造と物性がどのように関係しているかを俯瞰した効率的な材料開発に貢献できます。これは、化学合成を実施する回数の減少も意味し、研究開発の省資源化につながり、より良い材料をより地球にやさしく開発することにつながります。従って、今回開発された手法をベースに、今後、他の機能性高分子材料をはじめ、様々な材料に適用することによって、幅広い材料のマップ作成を進め、各材料探索マップを組み合わせて材料横断型知見の発掘も行っていきます。

【用語解説】

(※1) 水電解装置

電気エネルギーにより水を水素と酸素に分離する装置。

(※2) アニオン交換膜

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。

(※3) 教師なし機械学習

学習データに対して正解ラベルを与えない状態で学習できるモデルである。データセットの特徴的な情報を抽出することに長けている。

(※4) 主成分分析（PCA）

教師なし機械学習の一種。高次元データセットを線形的に集約して新たな変量である主成分を作成する手法である。

(※5) Uniform Manifold Approximation and Projection（UMAP）

教師なし機械学習の一種。高次元データセットを非線形的に集約して新たな変量である「埋め込み表現」を作成する手法である。

(※6) 次元

データの特徴量（＝説明変数）の数を表す。特徴量が多いデータセットは次元が高く、逆も然り。

【謝辞】

本研究は 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ーシップ創設事業(JPMJFS2132)、九州大学工学研究院工学研究新分野開拓助成、JSPS 科研費 (JP23H02027)、文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (JPMXP1122714694)、東京都立大学若手研究者等選抜型研究支援、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：ChemElectroChem

タイトル：Unsupervised Machine Learning-Derived Anion-Exchange Membrane Polymers Map: a Guideline for Polymers Exploration and Design

著者名：Phua, Yin Kan; Terasoba, Nana; Tanaka, Manabu; Fujigaya, Tsuyohiko; Kato, Koichiro

D O I ：10.1002/celc.202400252

【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

Kyushu University VISION 2030
総合知で社会変革を牽引する大学へ