

マテリアルインフォマティクスを用いた 多糖エステル誘導体の物性予測と構造シミュレーション

(東大院・農) ○熊谷美鈴、加部泰三、岩田忠久

【緒言】近年、バイオマスプラスチックの需要が高まっており、多糖はその原料として注目されている。多糖はその水酸基をエステル化することで、熱可塑性を持ち、プラスチック材料化が可能となる。また、置換度や側鎖の長さを制御したり、複数の異なる長さの側鎖を同時に組み込むことで、多様な多糖類誘導体を合成することができる。側鎖の組合せは膨大であるため、実際の化学実験の前に、構造から物性を予測することが求められる。本研究では、マテリアルズインフォマティクス (MI) の手法を用い、構造から物性を予測するモデルを構築し、高物性を持つと期待される構造の提案を行った。

【実験】3種類の多糖(セルロース、 α -1,3-グルカン、 β -1,3-グルカン)を対象とし(Fig.1)、予測する物性としては、加工条件の影響を受けずらい Tg とフィルムの破壊伸びを選んだ。モデル構築に用いた学習用データとその評価に用いたテストデータは Tg について 180 点、破壊伸びについて 161 点用意した。このうち 7 割を学習に使用

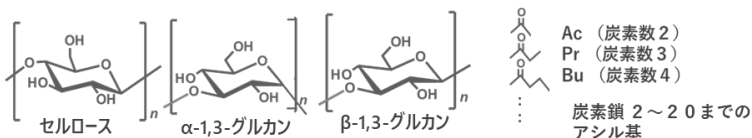


Fig.1 入力として使用した主鎖と側鎖の種類

し、3 割を学習には使用せず、構築したモデルの評価に供した。誘導体の化学構造はテキストベースのフォーマットである SMILES により表し、その際、側鎖を配置する位置をランダムに変化させることで複数の SMILES を得た。SMILES を用いて、種々の「分子記述子」と呼ばれる、分子のサイズ、分極率、官能基など、特徴を数値化した値を計算した。得られた分子記述子について、平均値をとるなどの異なる処理を行い、100 パターン以上の入力値を得た。これらを 15 種類の一般的に用いられる機械学習モデルに入力し(入力パターン 100 種以上×モデル 15 種)、モデルを学習させた。評価用のデータの化学構造を、学習用のデータと同様に変換して入力値を取得し、学習済みモデルに与えて予測値を算出した。これを実験によって実測された真のデータと比較することでモデルの予測破壊伸び精度を評価した。予測精度が最も高かったモデルを用い、Tg と破壊伸びをとともに大きくする構造の提案を試みた

【結果と考察】 Fig.2(a)に、評価用データの化学構造を用いて学習済みモデルが予測した Tg と実測値の Tg の関係を示す。同様に破壊伸びも Fig.2(b)に示す。プロットが縦軸(予想値)と横軸(実測値)の直線上に乗れば、学習済みモデルの予測精度が高いと評価される。最高精度のモデルの決定係数はそれぞれ、Tg で 0.75、破壊伸びで 0.98 であり、いずれも高精度での物性の予測が可能モデルを得た。これらのモデルを用い、Tg と破壊伸びをとともに大きくするよう、構造最適化シミュレーションを行った結果、両物性ともに高い値をもつことが期待される化合物が複数提案された(Fig.2(c))。

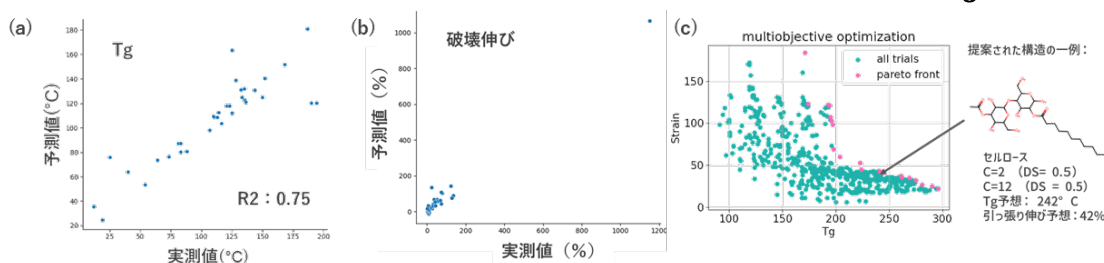


Fig.2 (a) Tgの実測値とモデルの予測値 (b) 引っ張り伸びの実測値とモデルの予測値 (c) 多目的最適化シミュレーション

Prediction of Physical Properties and Structural Simulation of Polysaccharide Ester Derivatives Using Materials Informatics, Misuzu KUMAGAI, Taizo KABE and Tadahisa IWATA: Graduate School of Agricultural and Life Sciences, University of Tokyo, 1-1-1, Yayoi, Bunkyo-ku, Tokyo, 113-8657, Japan, Tel: 03-5841-5266, Fax: 03-5841-5266, E-mail: atiwata@g.ecc.u-tokyo.ac.jp