

ポリマー・溶媒間の相溶性予測と産業応用への展開

(三菱ケミカル¹・統数研²) ○白鳥 和矢¹・Stephen Wu²・林 慶浩²・杉澤 宏樹¹・大久保 忠利¹・吉田 亮²

Predicting the miscibility between polymers and solvents and its application in industry

(¹Mitsubishi Chemical Corporation, ²The Institute of Statistical Mathematics) ○Kazuya Shiratori¹, Stephen Wu², Yoshihiro Hayashi², Hiroki Sugisawa¹, Tadamichi Okubo¹, Ryo Yoshida²

The miscibility between polymers and solvents is a critical property in applications such as plastic recycling, polymer synthesis, purification, and coating. Therefore, its prediction is valuable for industrial applications. We have developed a machine learning model to predict the Flory-Huggins χ parameter, which describes the miscibility between polymers and solvents. The challenge is the insufficient and biased experimental data. We successfully built a model applicable to a wide range of structures by training both the experimental data and simulated data simultaneously through multitask learning. Additionally, we confirmed a scaling law indicating that the prediction accuracy of experimental values improves as the amount of simulation data increases.

The developed method is not only useful for predicting miscibility, but also has the potential to be a solution to the small data problem that poses a challenge in materials informatics.

Keywords : miscibility; Flory-Huggins; multitask learning; polymer; solvent

ポリマーと溶媒間の相溶性はプラスチックリサイクル、ポリマーの合成、精製、コーティングなどの場面で重要な性質でありその予測は産業応用上有用である。そこで我々はポリマー・溶媒間の相溶性を記述する Flory-Huggins の χ パラメータをポリマーと溶媒の分子構造から機械学習により予測するモデルを構築した。モデル構築にあたっては実測のデータが少なく偏っているいわゆるスモールデータ問題が課題であったが、実測値だけでなくシミュレーションデータもマルチタスク学習で同時に学習することにより幅広い構造に適用可能なモデルの構築に成功した。さらにシミュレーションデータを増やすほど実測値の予測精度が向上するスケーリング則も確認した。

ハイスループットシミュレーションデータを用いたマルチタスク学習に基づく本手法は相溶性の予測に有用であるだけでなく、マテリアルズ・インフォマティクスにおけるスモールデータ問題の解決手段の一つとなると期待する。当日は構築したモデルの産業応用への展開についても議論する。

1) Multitask Machine Learning to Predict Polymer–Solvent Miscibility Using Flory–Huggins Interaction Parameters, Y. Aoki, S. Wu, T. Tsurimoto, Y. Hayashi, S. Minami, T. Okubo, K. Shiratori, and R. Yoshida, *Macromolecules* **2023**, 56, 5446. *J. Org. Chem.* **2010**, 75, 7644.

2) Scaling Law of Sim2Real Transfer Learning in Expanding Computational Materials Databases for Real-World Predictions, S. Minami, Y. Hayashi, S. Wu, K. Fukumizu, H. Sugisawa, M. Ishii, I. Kuwajima, K. Shiratori, and R. Yoshida, arXiv:2408.04042

3) Sample code and dataset are available: https://github.com/yoshida-lab/MTL_ChiParameter