

MERIT インターンシップ(国内)報告書

理学系研究科 化学専攻

博士課程2年 8期生

坂巻 拓海

受け入れ先

三菱ケミカル株式会社, Science & Innovation Center, Materials Design Laboratory (MDL)

概要

2021年10月1日から2021年11月5日にかけて三菱ケミカル株式会社のMaterials Design Laboratory (MDL) で「マテリアルズインフォマティクス(MI)を利用したアミン・エポキシ硬化ポリマーにおける物性予測と予測精度の向上」というテーマで実習を行った。11月4日には成果報告も行った。

背景

私が本インターンシップを決めた理由としては、以下の3点である。

- (1)今後のキャリアを考える上で、企業での研究の雰囲気を知るため。
- (2)普段は実験系の研究を行なっているが、計算系の研究に挑戦することで異なる視点から研究を展開できるのではないかと考えたため。
- (3)MIに元々興味があり、この機会を利用して挑戦してみたいと考えたため。

MDLでは、多部署が抱えている課題に対して計算科学の視点から解決方法の提案を行なっている。本インターンシップで行った実習は、エポキシ・アミンの硬化の系について、原料の構造と組成、硬化条件から物性の予測を行うことを目的とした。また、本テーマで扱っている対象物質において精度の高い予測が実現できれば、顧客が望んだ物性に対して原料とその組成の組み合わせを迅速に提案することが可能となる。

内容

本内容は社外秘になっているため、具体的な内容については記載しない。

アミン・エポキシ硬化の系では、アミンとエポキシが逐次的に反応すること

で3次元網目構造を作るものである。一般には、リニアポリマーなどの単純な構造を持つ物性予測を行う際、モノマーユニットの物性情報から容易に予測が可能であるが、本実習で行う内容では単位ユニットが存在しないため、原料の組成と構造情報から予測する必要があった。しかし、組成と構造情報から予測する際、データのまとめ方に決まった手法がなく、この手法を最適化することで予測精度が向上できると考えられる。そこで私は、アミン・エポキシの構造情報を表した記述子データの加工方法を検討することで、予測精度が向上できるのではないかと考えた。データを加工する方法として、アミンとエポキシの記述子データを1つに統合し予測を行う手法、各原料の組成データをまとめる平均化方法の最適化などの手法を検討した。また上記の検討に並行して、理解しやすい記述子データのみを抽出し物性予測を行う検討も行った。これにより、予測結果に対する化学的な洞察が得られると期待した。その結果、データ加工方法を変えたことで、以前よりも物性予測の精度を向上させることができた。また、これらの予測結果について解析したところ、物性ごとに影響を与えている特徴量の傾向を発見することができた。この結果から、化学的な洞察に基づく特徴量の取捨選択を行うことで、さらなる予測精度向上の可能性を見出すことができた。

インターンシップ期間中では、日々の議論の他に週1回数人の研究員でMIに関する情報について議論する、「MI雑談会」にも参加させてもらうことができ、非常に勉強になった。

所感

今回の実習を行うにあたって、データ処理や解析などといった全ての作業をPython上で行ない、これまでプログラミング言語の経験がなかったこともあり、最初は非常に苦戦した。しかし、本インターンシップのテーマについて直接指導してくださったMDLの研究員の方が丁寧でわかりやすく説明してくださったこともあり、1ヶ月で十分な成果を上げ、研究の方向性を提案することができた。また、今回はリモートワークの方も多く、あまり多くの人と交流はできなかったが、最終日の前日にはMDL部署での仕事の様子や実験設備などを見学することができ、企業での研究のイメージを知ることができた。

謝辞

今回分野外からの応募であったにも関わらず、快く引き受けていただき、貴重な経験を下さった研究員の白鳥さん、百瀬さんをはじめとするMDLの方々に深くお礼申し上げます。また、本インターンシップを斡旋してくださったCCMS事務局の方々、本インターンシップを快諾していただいた指導教員の中村先生、副指導教員の小林先生にも感謝申し上げます。