

アンサンブル機械学習によって生分解性ポリマーの物性を予測

—不確実性の可視化によりカーボンニュートラルと資源循環に貢献する新材料開発を加速—

1. 発表者：

福島 和樹（京都工芸繊維大学 繊維学系 教授）
伊藤 琉乃介（京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科 博士前期課程 1 回生）
佐藤（村上） 満佳子（京都工芸繊維大学 研究補助員）
天本 義史（東京大学 大学院新領域創成科学研究科 特任准教授）
伊藤 耕三（東京大学 大学院新領域創成科学研究科 特別教授）

2. 発表のポイント：

- ◆低環境負荷材料として注目される脂肪族ポリカーボネート（APC）（注 1）のデータ数が少ないガラス転移温度（Tg）（注 2）に対し、機械学習を用いることで、予測の「不確実性」を含めて算出する手法を開発しました。
- ◆複数の機械学習法と記述子を組み合わせ、上位 5 モデルを選択して統合する「アンサンブル機械学習」（注 3）により、従来の単一モデルよりも信頼性の高い予測が可能となることを明らかにしました。
- ◆本成果は、カーボンニュートラルの実現に向け、データが限られているバイオベース・生分解性ポリマーの効率的な材料設計に大きく寄与します。

3. 発表概要：

京都工芸繊維大学の繊維学系 福島和樹 教授、伊藤琉乃介 博士前期課程学生（大学院工芸科学研究科 バイオベースマテリアル学専攻）、佐藤（村上）満佳子 研究補助員、東京大学大学院新領域創成科学研究科の天本義史 特任准教授、伊藤耕三 特別教授らの研究グループは、アンサンブル機械学習を活用し、低環境負荷材料として期待される脂肪族ポリカーボネート（APC）のガラス転移温度（Tg）を高精度に予測するとともに、その予測値の信頼性を「不確実性」として定量化することに成功しました。ポリマーの物性は化学構造だけでなく、分子量分布や熱履歴など多くの要因に左右されるため、単一の予測値を得るだけでは不十分でした。本研究では、複数の機械学習モデルを組み合わせることで、予測のばらつきを可視化し、より確かな材料設計を可能にしました。AI などのデジタル技術を活用した環境低負荷材料の開発手法として、脱炭素社会の実現および資源循環型社会の構築に大きく寄与する成果です。本成果は、2026 年 6 月 16 日付で学術雑誌『Polymer Journal』にオンライン掲載されました。

本研究は、科学技術振興機構（JST）未来社会創造事業「地球規模課題である低炭素社会の実現」領域探索研究「天然分子リコンストラクトによる分解性ポリマーの高機能化」（JPMJMI21EH）、戦略的創造研究推進事業 CREST（JPMJCR24S1）、NEDO（新エネルギー・産業技術総合開発機構）ムーンショット型研究開発事業（JPNP18016）の支援により実施されました。

4. 発表内容：

研究の背景

現在、地球規模の課題である脱炭素社会の実現に向け、プラスチック材料の転換が急務となっています。その中で、脂肪族ポリカーボネート（APC）は、自然環境中での分解性が期待されるだけでなく、バイオマスや二酸化炭素を原料とした合成が可能であることから、持続可能な社会を支える低環境負荷材料として大きな注目を集めています。しかし、これまでの APC 研究は主にバイオマテリアル用途に限定されており、既存の汎用プラスチックを代替するためには、それらに匹敵する熱的・力学的特性を確保することが大きな課題となっていました。ポリマーの耐熱性や加工性を示す重要な指標の一つにガラス転移温度（Tg）がありますが、従来の APC の多くはこの Tg が低く、実用的な材料としての強度が不足していました。一般に、ポリマーの側鎖にかさ高く剛直な構造を導入することで Tg の向上が期待されますが、APC においてどのような構造が最適であるかという明確な分子設計指針はこれまで確立されていませんでした。

また、近年の材料開発では機械学習を用いた物性予測が有効な手段となっていますが、ポリマーの特性は測定条件や構造の複雑さに依存するため、単一の値を予測することには限界がありました。特に、APC のような特定の材料群については、利用可能なデータが限られており、従来の機械学習手法では高精度な予測モデルを構築することが困難であるという課題がありました。

研究内容

本研究では、この「小規模データ」という課題を克服し、高精度な物性予測を実現するため、新たな機械学習アプローチを開発しました。まず、データの不足を補うために、APC 以外の広範な一般ポリマーの Tg データを学習・検証に利用し、そこに 5 点の APC データを追加学習させました。これにより、APC 特有の化学構造の性質を反映しつつ、予測精度を大幅に向上させることに成功しました。さらに、予測の信頼性を客観的に評価するために「アンサンブル機械学習」を導入しました。本研究では、分子記述子、繰り返し単位数、末端構造、次元削減手法、および機械学習アルゴリズムを様々な組み合わせで 100 以上のモデルを構築し、その中から予測精度の高い上位 5 つのモデルを選出しました。これら複数のモデルによる予測結果を統合することで、単一のモデルでは避けられない予測の偏りを軽減しました。

本手法の最大の革新点は、単一の予測値を得るだけでなく、モデル間の予測値のばらつきを「不確実性（Uncertainty）」として定量化した点にあります。不確実性が低い予測は信頼性が高く、逆に不確実性が高い場合は、その構造が学習データから遠い「未知の領域」であることを示唆します。この手法を APC の Tg 予測に適用した結果、平均値としての予測精度が高いだけでなく、標準偏差を算出することで予測の「不確実性」を定量化できるようになりました。この不確実性の可視化技術は、従来のガウス過程回帰（GPR）やベイジニューラルネットワーク（BNN）と比較しても、化学的に類似した未知の構造群に対して、ポリマー合成を専門とする研究者が次にどの構造を合成すべきかを決定する際の強力な指針となります。

今後の展開

今後は、この不確実性を考慮した予測手法を駆使することで、本研究グループが独自に開発を進める特定の骨格を持つ APC において、高い物性値が達成されれば、従来の石油由来プラスチックに代わる新たな選択肢となることが期待されます。実用化に向けては、経済合理性を考慮した合成プロセスの効率化や高分子量化技術の確立といった課題が残されていますが、本手法による効率的な材料設計は、環境に調和する代替プラスチックとしての APC の社会実装を大きく加速させるものです。また、本予測手法は、データが少ない新規ポリマーの設計において、どの予測が信頼できるかを判断する重要な指標となります。

今後は、この手法を他の物性予測や、未知の材料空間の探索（材料設計）へと応用することで、脱炭素社会の実現および資源循環型社会の構築に貢献する革新的な材料開発を推進していきます。

5. 発表雑誌：

雑誌名：Polymer Journal

論文タイトル：Uncertainty-Aware Prediction of the Glass Transition Temperature of Aliphatic Polycarbonates Using Ensemble Machine Learning

著者：Yoshifumi Amamoto, Ryunosuke Ito, Mikako Murakami, Kohzo Ito, Kazuki Fukushima

DOI 番号：10.1038/s41428-026-01208-y

アブストラクト URL：<https://www.nature.com/articles/s41428-026-01208-y>

6. 用語解説：

注1) 脂肪族ポリカーボネート (APC)

主鎖に炭酸エステル構造を持つ高分子のうち、芳香環を含まないもの。低環境負荷や生分解性、生体適合性などの特徴を持つ。

注2) ガラス転移温度 (T_g)

高分子材料が、硬いガラス状の状態から柔らかいゴム状の状態に変化する温度のこと。

注3) アンサンブル機械学習

複数の機械学習モデルを組み合わせて学習させ、それらの予測結果を統合（平均化など）することで、単一のモデルよりも高い予測精度や安定性を得る手法。

7. 添付資料：

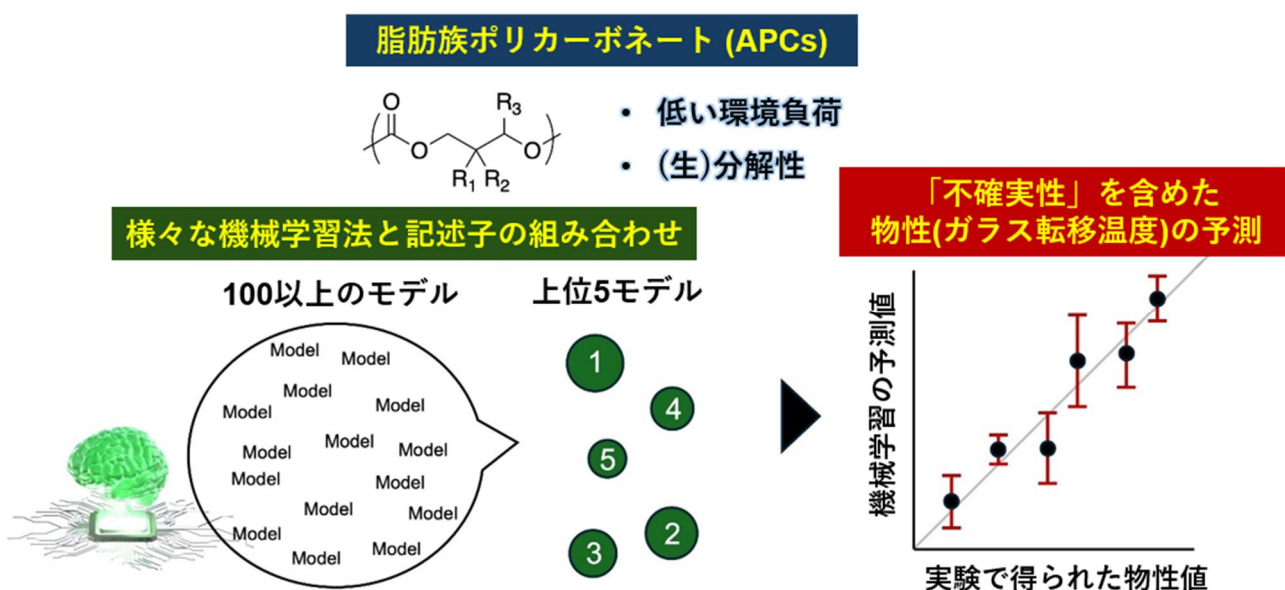


図. カーボンニュートラル実現への鍵となる脂肪族ポリカーボネートの物性を、アンサンブル機械学習により「不確実性」を含めて高精度に予測