

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

題目(和文)	
Title(English)	Prediction of Material Properties of Model Organic Biomaterials by Machine Learning
著者(和文)	KwariaRudolf Jason
Author(English)	Rudolf Jason
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第11580号, 授与年月日:2020年9月25日, 学位の種別:課程博士, 審査員:林 智広,曾根 正人,和田 裕之,柘植 丈治,石田 忠
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11580号, Conferred date:2020/9/25, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

(博士課程)

## 論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第	号	学位申請者氏名	Rudolf Jason Kwaria	
論文審査 審査員		氏名	職名	氏名	職名
	主査	林 智広	准教授	石田 忠	准教授
	審査員	曾根 正人	教授		
		和田 裕之	准教授		
柘植 丈治		准教授			

### 論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「Prediction of material properties of model organic biomaterials by machine learning」と題し、英文で書かれ、全 5 章から構成されている。

第 1 章「Introduction」では、情報科学を用いた材料設計の歴史に関してまとめている。特に、触媒、バッテリー材料、創薬など様々な材料分野における事例について紹介している。一方で、生体材料の設計への情報科学を応用例が極端に現状について述べ、その理由を、タンパク質、細胞接着、組織応答などの生体分子・細胞・組織の応答は計算科学で予測することが不可能であり、大規模なデータベースを構築することが極めて困難であることに起因すると述べている。以上の状況を、バイオマテリアル研究の計算科学との親和性の低さという観点から議論し、当該分野の現状を述べ、本研究の目的を述べている。

第 2 章「Artificial Neural Network Model」では、材料の化学構造と物性の相関を解析にもちいた人工ニューラルネットワーク (Artificial Neural Network: ANN) を用いた機械学習について述べている。ANN を用いた機械学習の基礎理論、ハイパーパラメータ、最適化方法に関して詳細に記述している。また、研究対象である自己組織化単分子膜 (Self-assembled monolayers: SAMs) を構成する分子構造を記述するための記述子の選択についても述べ、機械学習後の ANN の解析による、各記述子の重要性試験の方法についても述べている。

第 3 章「Prediction and Importance Analysis of Water Contact Angle (WCA)」では、約 100 種類の化学構造の異なる分子からなる SAM とそれらの水の静的接触角の相関を機械学習によって解析している。学習後の ANN を用いて分子構造から正確に単分子膜の静的接触角を予測可能である事を述べている。さらに、学習後の ANN を解析することで、各記述子の重要性を定量的に算出し、親水性・疎水性を決定する分子構造について議論している。

第 4 章「Prediction and Importance Analysis of Fibrinogen Adsorption」では、SAM を構成する分子の化学構造とタンパク質 (フィブリノーゲン) の吸着量の相関を機械学習によって解析している。第 3 章と同様に、タンパク質吸着を決定する要因を各記述子の重要性試験から解析することで、タンパク質吸着量の制御、抗タンパク質吸着特性発現のための条件を定量的に導出している。導出した条件は、過去に提唱された経験的法則と一致しており、抗タンパク質吸着・抗細胞接着、抗付着特性を持つ材料設計の経験的な指針が、機械学習によって定量的な形で導出されたことを報告している。さらに、本章では学習後の ANN を未知の SAM の接触角、タンパク質吸着の予測に用いた例を紹介し、本手法が材料のスクリーニングの手段として応用可能である事を実証している。

第 5 章「Conclusion」では本研究で得られた知見をまとめ、本論文と結論と共に今後の研究の展望を述べている。

以上を要するに本論文は、ANN を用いた機械学習という情報科学的な手法を用いて、単分子膜を構成する分子構造と膜の物性の相関を定量的に解析した最初の例である。特に、分子構造の記述方法、相関解析の方法の選択・改良、相関解析のための方法論の確立、材料スクリーニングのデモンストレーションまでを包括的に報告し、情報科学的な手法をバイオマテリアル (生体材料) 設計に応用した先駆的な論文であり、理学上貢献するところが大きい。本論文は博士 (理学) の学位論文として十分な価値があるものと認められる。

注意: 「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチポジトリ (T2R2) にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。