

変分オートエンコーダを用いた高分子三次元構造の生成

Generation of High Molecular Three-Dimensional Structure with Variational Auto Encoder

名古屋大学¹, 名古屋大学未来社会創造機構² ○(M1)松永 晃宏¹, 一木 輝久²Nagoya Univ.¹, Innovation for Future Society Inst. in Nagoya Univ.², [○]Matsunaga Akihiro¹,
Ichiki Akihisa²E-mail: Matsunaga.akihiro@a.mbox.nagoya-u.ac.jp

高分子材料はマイクロ構造の違いがその物性に大きな影響を及ぼす。これにより、分子構造からの物性予測が困難なため、分子動力学計算によるマイクロ構造の作成が必要だが、スケールの大きいシミュレーションには莫大な時間がかかる。本研究では、変分オートエンコーダと呼ばれる機械学習手法を用いて、粗視化分子動力学シミュレーションによる高分子構造から異なる分子構造の高分子マイクロ構造を生成するモデルを作成した。

1. はじめに

固体高分子型燃料電池(PEFC)に用いられる高分子電解質膜(イオン交換膜)のプロトン伝導性は燃料電池の性能を決める因子として重要であり、一般にプロトン伝導性(水の拡散性と相関がある)は電解質膜の作るマイクロ相分離構造(メソ構造)と相関があると考えられている[1]。このように、メソ構造が物性に影響するため複雑な高分子物性は分子構造のみからでは予測できない。そこで本研究では変分オートエンコーダ(Variational Auto Encoder, VAE)を用いてメソ構造を生成する機械学習モデルを作成した。

2. データと手法

学習する構造データは散逸粒子動力学法(Dissipative Particle Dynamics, DPD)を用いて計算・生成した。ここで、高分子の粗視化をする際に PEFC に利用される nafion から分割して、三つのセグメントとして扱った。

VAE とは画像から画像を生成するニューラルネットワークの一種であり、画像の特徴量を表す圧縮次元における変数群(潜在変数)がガウス分布に従うように学習することで、潜在変数の可視化や画像の解釈性向上を目的とする。データを画像形式にするため、セグメント密度場に変換した。膨潤度計算は高分子濃度を用いるため問題ないものとした[1]。

3. 結果と考察

六種類の分子構造からシミュレーションしたデータを用いており、メソ構造の違いを図 1 に示す。また、VAE を用いて圧縮した低次元空間を図 2 に示す。各点が学習に用いた各構造を表しており種類ごとに色分けしてあり、次元圧縮によるメソ構造の類似性が低次元空間で表現できたといえる。このとき、図 2 の値から三次元構造を生成することができる。

この潜在変数から立体構造の生成にかかる時間はごく短いので生成と物性計算を高速に行うことで、実際に作成すべき構造を決める指標となるだろう。

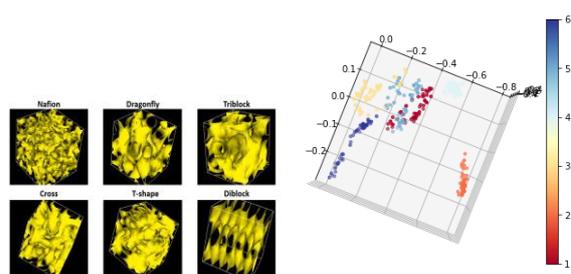


図 1

図 2

謝辞

本研究を行うにあたって、名古屋大学、川角昌弥先生にも助言を頂いたことを、ここに感謝申し上げます。

参考文献

[1]Kinjo Tomoyuki et al., Japanese Journal of Polymer Science Technology, 67, 3, 187-191 (2010)