

先端科学技術研究科 修士論文要旨

所属研究室 (主指導教員)	計算システムズ生物学 (金谷 重彦 (教授))		
学籍番号	1911089	提出日	令和 3年 1月 25日
学生氏名	高下 大貴		
論文題目	Embedding of Molecular Structure Using Molecular Hypergraph Variational Autoencoder with Metric Learning 距離学習を伴う分子ハイパーグラフ変分オートエンコーダを用いた分子構造に対する滑らかな埋め込み表現の抽出		
要旨			
深層学習を用いた分子探索の目標は、所望の物性値を持つ分子構造を深層学習モデルに直接予測させることである。このため基本的となるアプローチとして、分子構造とその分子の持つ物理的特性の間に成り立つ関係性を多次元のベクトル空間(Cheical Space)に埋め込み、そのCheical Space上で所望の物性値(Target Property)に基づいた分子構造の探索・最適化を行う。本研究ではCheical Space上で隣接する分子の構造類似性とTarget Property間の対応関係に一貫性を持たせ、Cheical Space上の物理的特性・構造的特徴が滑らかに変動するような分子構造の埋め込みモデルを紹介する。この手法は分子構造を学習させる変分オートエンコーダ(VAE)と任意のTarget Propertyの距離情報を活用した深層距離学習を組み合わせた学習手法であり、分子構造が滑らかに埋め込まれたCheical SpaceをVAE潜在空間に表現する。また、分子構造の埋め込み表現がどのくらい滑らかであるかを自由エネルギーに基づいた統計的評価手法で評価を行い本手法の有効性を示す。本研究の提案手法は、Cheical Space上の局所空間で分子を探索する局所的最適化問題に有効であり、従来手法と比較して出発分子の構造・物理的特性を出来るだけ保存した状態で所望の物性に基づいた最適化が可能になることを実証する。			