



リアルタイム物性予測を用いた VR 型材料分子設計システム

VR-based material molecule design system using real-time physical property prediction

松田健郎, 梶田晴司

Kenroh MATSUDA, and Seiji KAJITA

株式会社豊田中央研究所

(〒480-1192 愛知県長久手市横道 41-1, l6034@mosk.tytlabs.co.jp, fine-controller@mosk.tytlabs.co.jp)

概要: 本研究では, 高性能かつ実現性の高い材料設計のため, リアルタイムで物性値がフィードバックされる仮想実験環境を開発する. 近年, 機械学習を活用した材料開発「マテリアルズ・インフォマティクス (MI)」が注目されている. これは新規材料の物性を既存材料データから予測することで, 高性能な材料を効率的に探索する手法論である. しかし現行の MI では, 合成プロセスなどの考慮は難しく, 実現性の低い材料も提示してしまうことが課題である. そこで, VR によって仮想実験室を作成し, MI による物性予測と設計者の合成容易性の知見を有機的に結びつけることで, 材料開発の試行錯誤を高速化するシステムを構築した.

キーワード: 没入型可視化, 機械学習, ゲーミフィケーション

1. はじめに

近年, 機械学習を活用した材料開発「マテリアルズ・インフォマティクス (MI)」が注目されている. 既存材料の実験・計算データを基に物性予測モデルを構築し, 新規材料の物性を予測することで, 高性能な材料を効率的に探索することが出来る. しかし, 条件の揃った合成プロセスデータの収集が難しいため合成容易性の予測は課題が多い. そのため, 高性能であるが合成しにくい材料が見つかることも多い. また, 従来型の実験による材料開発は, 設計者の知見に基づく試行錯誤によって, 複数の判断基準 (目標性能や合成プロセスの容易さなど) をバランスする材料を探索する. そのため, 年単位の開発期間が必要となることが多い. MI と設計者の知見を融合することで, 高性能かつ実現性の高い材料を効率的に探索することが可能となると考えるが, 設計者自身が MI を熟知しているとは限らない.

一方, HMD 型やスマートフォン装着型といった手軽に利用できる VR 環境が急速に普及した. これにより, 企業での活用例 (会議システム, トレーニングシステムなど) も増加している. 創薬分野では, 科学者や研究者, 医薬品開発者向けに, VR 空間で分子構造を可視化し, 多人数で分析・議論・設計することが可能な「Nanome」が提案されている[1]. しかし既存の VR システムには MI による人間へのサポートは実装されていない.

本研究では, リアルタイムで物性値がフィードバックされる仮想実験環境として「VR 型材料設計システム」を開発する. このシステムでは, 材料分子の構造を変更するた

びに物性値を予測して表示する. また, 分子を表現した 3D-CG モデルを「手」で掴み, 動かすといった直感的な材料設計を実現する.

2. 機械学習による物性予測モデルの構築

2.1 目的変数と説明変数

目的変数は, エンジンオイルが 100℃のときの粘度[cP]とした. これは, 52922 種のオイル分子に対して分子動力学シミュレーションで求めた計算値である[2].

説明変数は, オイル分子の構造記述子とした. リアルタイム物性予測のためには, 分子構造変更後の説明変数も短時間で取得する必要がある. そこで, 創薬分野で活用されている RDKit を使用した[3]. RDKit はオープンソースの Python ライブラリであり, 分子構造を基に約 200 項目の記述子を取得できる. ここから変数選択を行い, 83 項目の記述子を使用した.

2.2 機械学習

物性予測モデルの構築には LightGBM を使用した[4]. これは, 決定木ベースの学習アルゴリズムを使用する勾配ブースティングフレームワークである. モデル構築に掛かる時間が短く, 予測精度も高いが, 過学習しやすいことが知られている. そこで, ハイパーパラメータ最適化に Optuna を使用した[5]. これは, オープンソースのハイパーパラメータ自動最適化フレームワークであり, Tree-structured Parzen Estimator というベイズ最適化アルゴリズムの一種を利用している.

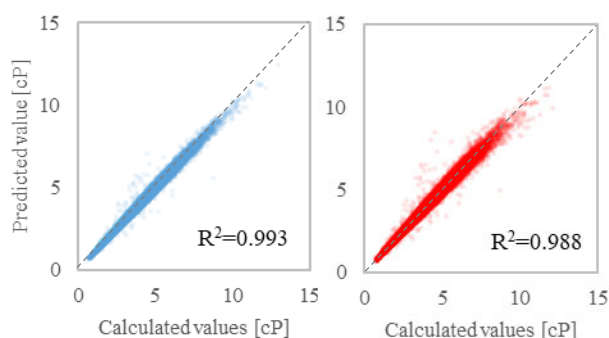


図 1: エンジンオイル(100°C)の粘度[cP]の予測結果。
左:教師データ, 右:テストデータ, 評価指標:決定係数 R^2 。

2.3 予測精度の評価

エンジンオイル(100°C)の粘度[cP]の予測結果を図 1 に示す。教師データ, テストデータのどちらも決定係数 R^2 が 0.99 前後となり, 予測精度および汎化性の高い予測モデルが構築できた。

3. VR 型材料設計システムの構築

3.1 システムの構成

直感的な材料設計を実現するため, 図 2 のような構成とした。VR システム本体は Unity 2017.4.35f で構築した。映像出力には Acer 社の Windows Mixed Reality ヘッドセット AH101 を使用し, その前面に Ultraleap 社の Leap motion を取り付けることで, 設計者の手の形や動きを VR システムに入力する。この入力を基に, VR システム内に配置されたボタンやハンドジェスチャによる操作で, 分子構造を設計する。

3.2 VR 空間での分子設計例

本システムによる分子設計例を図 3 に示す。52922 分子の物性計算値や構造記述子が保存されたデータベース (DB) から分子構造を読み込むと, 3D-CG モデルと物性計算値が表示される。このモデルに構造変更を加えると, MOL 形式の構造データを自動生成し, Python スクリプトに送信する。Python スクリプトでは, 受信データを基に Rdkit で構造記述子を算出し, 同じ構造の分子が DB 内に

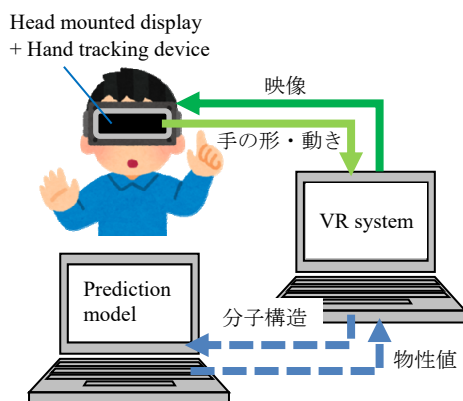


図 2: 試作した VR 型材料設計システムの基本構成。矢印の内, 実線は有線接続, 破線はネットワーク接続を表す。

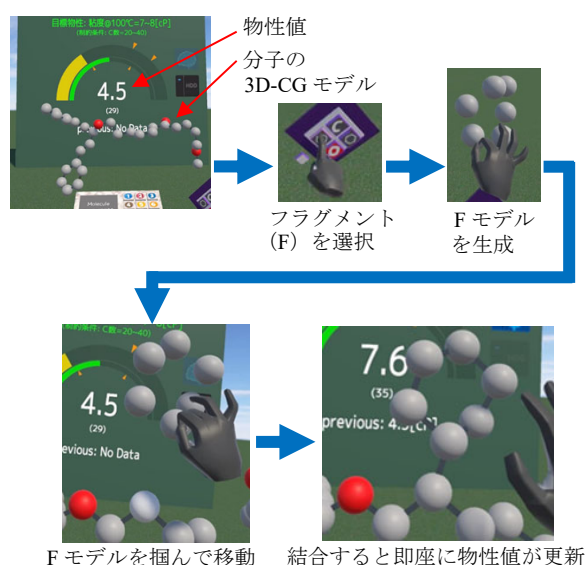


図 3: 分子設計例

存在するか判断する。存在した場合は計算値, 存在しない場合は LightGBM モデルの予測値を VR システムに送信し, 物性値を更新する。構造変更から物性値更新までに要する時間は 1 秒程度のため, リアルタイムで物性評価ができる。

3.3 システムの評価

本システムを弊社の有機化学者が体験後, 評価した。結果, 「頭の中で描いた分子の検証がすぐにできるため, チャレンジしやすい」「研究者同士のディスカッションツールにも良い」といった有用性を示すコメントを得た。

4. まとめ

本研究では, 高性能かつ実現性の高い材料設計のため, リアルタイムで物性値がフィードバックされる仮想実験環境として VR 型材料設計システムを試作した。今後は, 触覚・力覚提示技術の導入で設計者の没入感を向上し, インスピレーション喚起効果を評価する。

参考文献

- [1] Laura J. Kingsley, Vincent Brunet, Gerald Lelais, Steve McCloskey, Kelly Milliken, Edgardo Leija, Stephen R. Fuhs, Kai Wang, Edward Zhou, Glen Spraggon : Development of a virtual reality platform for effective communication of structural data in drug discovery, Journal of Molecular Graphics and Modelling, Vol. 89, pp. 234-241, 2019.
- [2] Seiji Kajita, Tomoyuki Kinjo, Tomoki Nishi : Autonomous molecular design by Monte-Carlo tree search and rapid evaluations using molecular dynamics simulations, Communications Physics 3, No. 77, pp.1-11, 2020.
- [3] https://www.rdkit.org/docs_jp/Getting_Started_with_RDKit_in_Python_jp.html
- [4] <https://lightgbm.readthedocs.io/en/latest/>
- [5] <https://preferred.jp/ja/projects/optuna/>