

AI 活用で挑む学問の革新と創成
2021 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

安倍 悠朔

早稲田大学 大学院創造理工学研究科
大学院生

分子パターンの自在制御に向けた自己組織化のスパースモデリング

研究成果の概要

本研究は、実験科学的アプローチと情報科学的アプローチを組み合わせ、実験プロセスを最適化することで、自己組織化現象による機能性分子の配列パターンを自在に制御する方法論を構築することを目的とした研究である。自己組織化を用いた機能性分子の配列化技術は簡便に微細なパターンを作製できるという特長があるが、多数の実験条件を最適化しないと所望のパターンを構築することができないという課題がある。そこで本研究ではスパースモデリングをはじめとした情報科学的モデリング手法を用いることで、パターンと実験条件の関係をモデル化する。特に、2022年度はニューラルネットワークとシミュレーションを用いて、機能性分子のパターンの電子顕微鏡画像から、パターンの特徴づけをするモデルを開発した。ニューラルネットワークでモデルを構築するためには多数の教師データが必要であるため、実験だけで十分なデータ量を確保することは難しい。そこで、まずシミュレーションを用いて疑似電子顕微鏡画像を用意し、それらの画像とニューラルネットワークで粗モデルを構築した。次に、実験で撮影した電子顕微鏡画像を用いて粗モデルの精度を向上させることで、少ない実験データから高精度なモデルを構築することを実現した。本モデルを用いることで、電子顕微鏡画像から分子間相互作用パラメータとブレンド比という、自己組織化現象において重要なパラメータを推定することに成功した。そして、これらのパラメータを用いることで、様々な形状のパターンを特徴づけて分類することに成功した。さらに、本モデルによって明らかになったパターンとパラメータの関係を踏まえることで、従来と比べて最適な実験条件を探索するために要する時間が短縮されたことから、従来は作製できていなかった配列パターンを作製することにも成功した。本成果によって得られた知見は所望の機能を有する材料を効率的かつ効果的に創成する礎となることが期待される。