

2023 年度年次報告書
信頼される AI の基盤技術
2021 年度採択研究代表者

横川 大輔

東京大学 大学院総合文化研究科
准教授

化学的知見を生かした転送性の高い特徴量の抽出と利用

研究成果の概要

本研究課題は「化学的知見を生かした転送性の高い特徴量の抽出と利用」であり、得られた結果に対する説明性の解明に重きを置いている。2023年度は、①本研究課題で開発した新規学習モデルの性能に関する検討、②Integrated Gradients による開発したモデルの説明性に関する検討を主に行なった。以下ではそれぞれについて詳しく説明する。

①本研究課題で開発した新規学習モデルの性能に関する検討

本研究では、分子の結合をエッジに、原子をノードとみなしたグラフ理論を用いてモデルを構築した。これまでもグラフ理論を用いたモデルはいくつも開発されており、それらの多くは、正規化隣接行列を用いた畳み込みを利用している。その中で、Kipf らが開発した Graph Convolutional Network (GCN) は様々なシステムに適用されている。正規化隣接行列は、ある特徴ベクトルにかけることで、着目する原子の周りの原子の影響を取り込むことができる一方で、遠方の原子の影響を取り込むために畳み込み層を厚くすると、どの原子上の特徴ベクトルも似通った値になってしまう問題があった。そこで我々は、重要なパスだけを取り込むことができる行列を提案し、さらに畳み込み層は第1層だけにするモデルを構築した(文献1)。これにより、遠方の原子の影響を取り込んでも、特徴ベクトルが似通った値になることは無くなった。2023年度は、GCN と詳細な比較を行うことで、性能の違いなどを詳しく検討した。

②Integrated Gradients による開発したモデルの説明性に関する検討

機械学習で構築したモデルの説明性は、これまでも様々な研究者によって検討されている。本研究課題では、広く用いられている Integrated Gradients を用いた解析を行うことで、得られた各原子の寄与度が、化学者が学習で得た化学的知識と似通っていることを明らかにした(文献2)。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Feature selection in molecular graph neural networks based on quantum chemical approaches”
Daisuke Yokogawa, Kayo Suda, *Digital Discovery*, **2**, 1089–1097 (2023).
- 2) “Interpretable Attribution Assignment for Octanol–Water Partition Coefficient”
Daisuke Yokogawa, Kayo Suda, *J. Phys. Chem. B*, **127**, 7004–7010 (2023).