

人工知能で新規反応探索や機能性分子設計

◆合成ロボットを用いた新規反応探索に機械学習を応用

化学分野の研究開発にコンピュータを利用しようとする歴史は古く、既に、1960年代に、半経験的量子化学プログラムの開発と配布や、民間企業も巻き込んだ有機化合物合成経路探索プログラムの開発が行われていた。近年、人工知能が急速な発展を見せる中、機械学習や深層学習といった人工知能の手法を化学分野の研究開発にも応用しようという動きが活発になっている。

18年7月、英国のグラスゴー大学の研究グループは、流路系の反応装置に構造解析装置（核磁気共鳴と質量分析）を組み合わせた高速合成ロボットを用いて得られた結果を機械学習することで、化合物の反応性を予測することが可能であると発表した。全部で969の組み合わせがある反応条件の中の一部の結果を機械学習することで、より反応性が高い条件を予測することができる。他の研究グループが発表している鈴木・宮浦カップリングの条件検討結果にも人工知能による解析を適用し、反応条件探索に対する有用性を示している。

◆深層学習と量子化学計算を用いて機能性分子を設計

18年8月、理化学研究所と物質・材料研究機構などの共同研究グループは、深層学習と量子化学計算を用いた分子設計に関する発表を行った。公開されているデータベース中の13,000化合物に対して深層学習を行った結果に基づき、特定の波長の光を吸収する3,200の候補化合物を選別した。それらの化合物が吸収する光の波長を量子化学計算して、候補を86化合物に絞った。その内、合成法が知られている6化合物を合成して、1化合物を除く5化合物が目的とする物性を持つことが確認され、深層学習と量子化学計算を用いた手法の有用性が示された。

人工知能が化学分野に応用され始めたのは、コンピュータが発達し、各種のプログラムが整備されたことに加え、反応や分析などに使われる実験装置の微量化、自動化、高速化が進んだためである。積極的に数多くのデータを取得し、それを有効活用するという新たな研究開発スタイルが可能になったことで、化学分野での人工知能の応用が現実的なものになってきた。

【戸潤一孔】