

# E1-07 有機合成を支援する AI 手法の深化

宮尾知幸 (奈良先端大)

Artificial intelligence (AI) 技術の急速な発展は、研究方法、データベース構築やデータ解析方法など様々な観点から自然科学において多大な影響を与えている。学術変革領域「デジタル有機合成」では実験化学と情報科学の融合を目的とした(共同)研究を通して有機合成のデジタル化を推進する。特に A0 3 班は「AI 手法の深化」を目指し、フロー合成や新奇反応開発など有機合成のために役に立つ AI 手法を開発する。本発表では、計画班として領域に参画した小島(京大医)、松原(京大工)、武田(静大)、矢田(産総研)、宮尾の研究内容を紹介する。

逆(順)合成経路設計においては、「データ駆動有機合成経路・反応予測モデルの構築」(小島)に取り組む。特に、実験条件や触媒を考慮した逆合成経路設計システムの構築や及びデータの少ない特定の構造に対しても精度が高くなるシステム構築を目的とする。既存のデータ駆動による逆合成経路システムは、反応に関連する化合物の類似性に基づく経路提案であるため、大量の反応データ(データベース: Reaxys database, CAS database, Pistachio database)が必要になり、特定の(特に新奇な)反応に対しての予測精度が低い。実験化学者の知識を導入したモデルによりこの状況の克服を目指す。加えて、構築したシステムをツールとして実装することで、反応開発を行う研究者が容易に使用できる状況を目指す。

反応条件を迅速に決定するために「機械学習による複数反応条件の迅速最適化」(武田)を行う。機械学習を利用したベイズ最適化は、反応経路開発のみならず材料開発など様々な分野に適用されているが、収率や選択率などの目的とするパラメタに対する表現方法や基質の多様性の考慮など、有機合成における特有の課題も存在する。最終的には、モデリングを通して有機化学者の暗黙的知識を明示化するが目的である。

化学反応のメカニズムに合わせた分子表現の開発にも取り組む。反応中心や遷移状態に焦点を当てた特徴量開発は、定量的構造反応相関モデル構築における最重要トピックでありつづけている。このような反応表現開発には(矢田、松原、宮尾)がそれぞれ化学や情報科学の視点から取り組む。

化学における最終的な目的は「望ましい特性を持つ物質を産み出す」ことである。そのために、開発した分子表現を利用し、特性を予測する機械学習モデルを構築し、モデルを逆解析し物質を提案するアプローチが考えられる。特に有機金属触媒を対象として、自動設計技術を開発し革新的触媒の設計・開発を目指す(矢田)。加えて、実際のフロー合成を対象とした自動合成装置のデバイス開発することで、ハードとソフトの融合にも取り組む(松原)。

現在進行中のプロジェクトであるが、このような研究や研究成果を元に様々な研究開発が派生し、有機合成のデジタル化が加速することを期待する。

## PROFILE

宮尾知幸 (奈良先端科学技術大学院大学 データ駆動型サイエンス創造センター・先端科学技術研究科 准教授)

2010 年東京大学大学院工学系研究科 修士課程修了後、株式会社 DIAM アセットマネジメント(現:アセットマネジメント One)を経て、2016 年東京大学大学院工学系研究科 博士課程修了。2014 年から 2015 年にかけて ETH Zurich にて Academic guest として、また 2016 年から 2018 年までボン大学 Scientific staff として、一貫してケモインフォマティクスに関する研究に従事する。2018 年より奈良先端大 データ駆動型サイエンス創造センター 准教授に就任し、現在に至る。専門はケモインフォマティクス