



研究領域名 デジタル化による高度精密有機合成の新展開

九州大学・大学院薬学研究院・教授

おおしま たかし
大嶋 孝志

領域番号：21A204 研究者番号：10313123

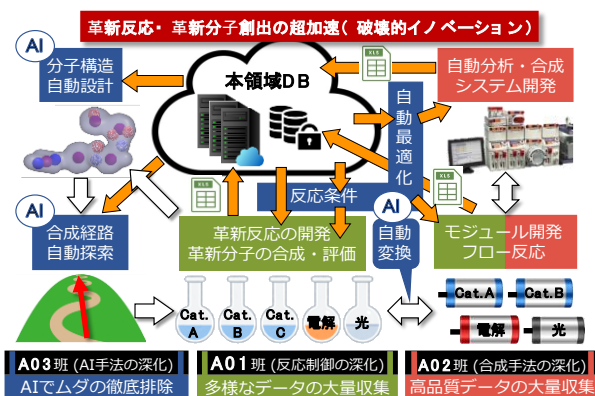
【本研究領域の目的】

日本の基幹産業の一翼を担う有機合成化学は、入手容易かつ安価な有機原料から、医薬、農薬、機能性材料などの超付加価値を有する高次複雑系分子を創成する、まさに現代の錬金術と言われるモノづくりを支える学術基盤であり、日本が世界を牽引してきた。現在、有機合成化学の分野にもデジタル化という大きな変革の波が押し寄せている。人工知能（AI）は既に生命科学や材料科学などの分野で大きな成果を上げている。有機合成化学の分野でもAIの技術に期待が寄せられ、反応条件最適化や合成経路探索などへの機械学習（ML）の利用が進められているものの、その利用はまだまだ限定的である。これは、ML（特に深層学習）に必要なデータ数が膨大であること、高精度な機械学習モデル構築には反応の本質を掴んだ特徴量が必要であること、データの精度が実験者の環境や技量に大きく左右されることなどのデータの量と質に関わる問題の他に、有機合成の多様性（分子構造・変換反応の多様さ・複雑さ）に現在の機械学習の手法・特徴量（記述子）が十分に対応できていないためである。そこで本研究領域は、有機合成に破壊的イノベーションを起こす「デジタル有機合成（実験科学と情報科学の異分野融合）」の基盤を築くことを目的とし、有機合成の多様性に対応した独自のデジタル化プラットフォーム（PF）を構築する。

【本研究領域の内容】

本研究領域は、A01班（AI支援による反応制御の深化）、A02班（AI支援による合成手法の深化）、A03班（有機合成を支援するAI手法の深化）の3班体制で、有機合成化学の変革を行う（右上図）。具体的には、①反応条件最適化、②合成経路探索、③高次複雑系分子設計の三つの自動化システムを開発し、革新的な基礎反応の発掘や開発効率の超加速化を実証する。また、④バッチ反応からフロー反応への変換法の開発、そして⑤自律的な条件最適化ユニットを組み込んだ自動合成システムを構築し、⑥多段階分子変換反応に展開することで、本プラットフォームの産業的実用性も示す。さらに、自動化法開発の基盤となる、有機化学の機械学習に最適化した本研究領域独自のデータベース（DB）の構築を行う。

領域研究の推進には実験科学（有機合成化学）と情報科学をいかにして機能的に融合させるかが鍵であり、MLのための信頼性の高い反応データを迅速に集積することと、MLによって予測・考案された分子、反応条件、反応経路を、実際に実験によって実証することが重要である。A01、A02班はDBへのデータ提供やAIやMLの活用に積極的に取り組み、A03班は実験グループと共同で研究に取り組む。



【期待される成果と意義】

情報科学を駆動に、実験科学によって新学理の創出に挑戦する。まず、高度な選択性制御法などの革新反応開発の超加速化に挑戦する。研究現場で発掘したキラリと光る原石を、AI支援により磨き上げ、世に送り出す。また、これまで有機化学の常識を基に説明がなされてきた反応制御因子を、AIによる客観的な解析を導入することで、全く新しい反応制御因子（新原理）を顕実化させる。さらに、「誰でも、好きな化合物を、好きなときに作れる」理想的な自動合成装置の開発を行う。フロー型の合成装置をインライン分析装置と組み合わせ、ここに自律的な反応条件の自動最適化システムを組み込むことで理想的な自動合成装置となる。情報科学においては、有機合成の多様性（分子構造・変換反応の多様さ）に対応した分子・反応の表現法（記述子）の開発し、有機合成のデジタル化の基盤を構築する。

本取組みは、省労力、短時間、低コストにつながり、人間知能はより創造的な作業に集中できるようになる。基礎と応用の両面で有機合成化学という学問分野に変革をもたらすものである。

【キーワード】

人工知能（Artificial Intelligence）：データから特徴を分析し機械的に人間の経験に則る予測・判断をするプログラム

機械学習（Machine Learning）：予測・判断をパターン認識により自動学習するアルゴリズム

深層学習（Deep Learning）：人間の脳神経回路をモデルにしたニューラルネットワークを利用し、膨大なデータから効率的に学習。

人工知能 ⊃ 機械学習 ⊃ 深層学習の関係性がある。

【領域設定期間と研究経費】

令和3年度－7年度 1,155,800 千円

【ホームページ等】

URL: <https://digi-tos.jp>, E-mail: admin@digi-tos.jp