

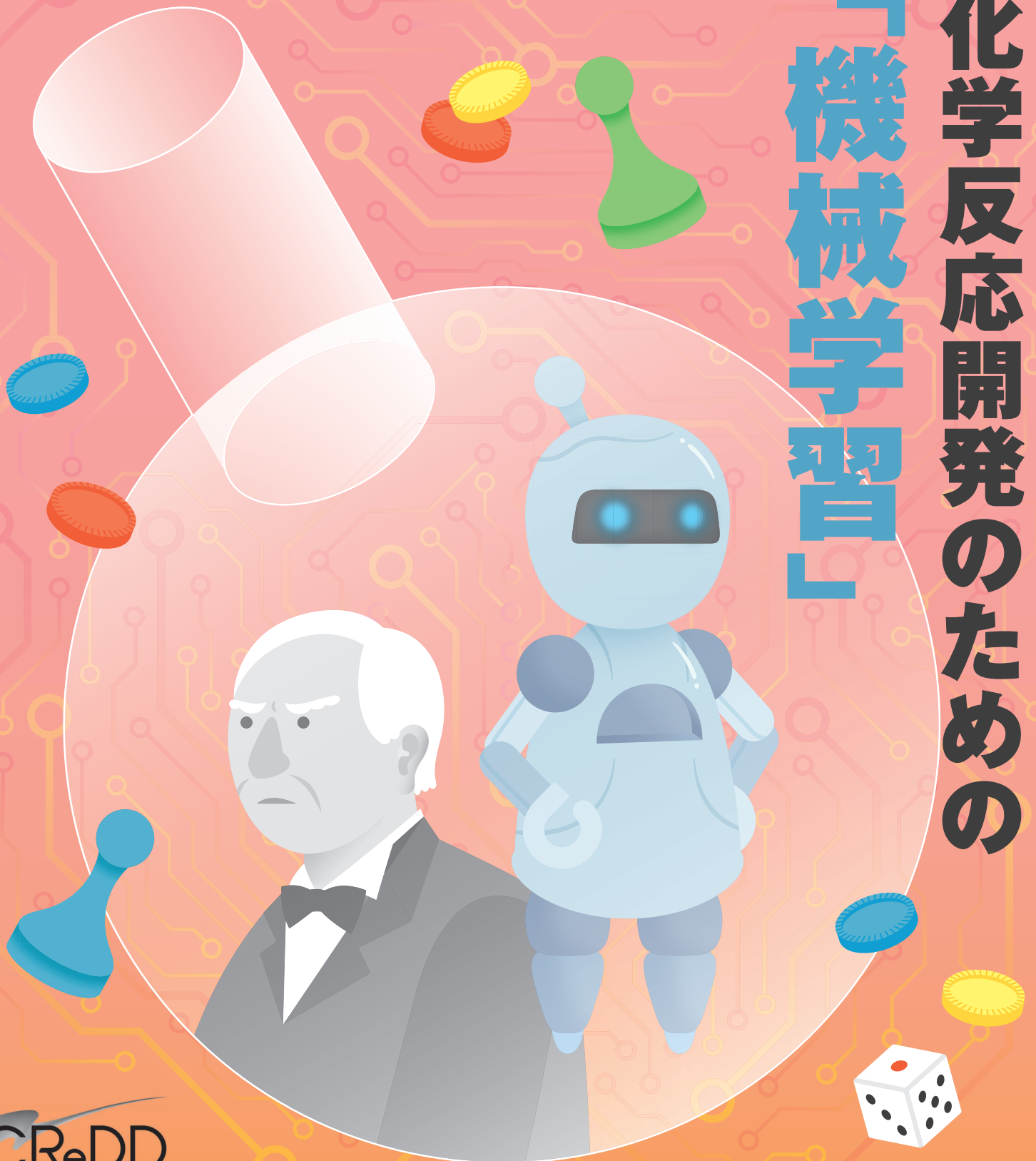
第13号

2023年9月発行

カタリスト

北海道大学化学反応創成研究拠点(ICReDD)が発行する、化学反応を楽しく学べるニュースポスター

化学反応開発のための
「機械学習」



化学反応開発のための 「機械学習」

今や人工知能(AI)は私たちの日常生活の一部となり、翻訳や画像のデザインのほか、チャットサービスのように人間の会話を模倣することも可能になりました。AIは化学の世界でも応用され始めています。その一つとして、膨大なデータから機械が自動的に学習し、データの中にあるパターンやルールを見つけ出す「機械学習」という技術を用いて化合物を分析し、特定の性質を持つ材料や触媒の識別に役立てています。

1. パターン認識

「1, 2, 3, 4...」という数字のリストを見て、次の数字は？と尋ねられたら、あなたは何を予想するでしょうか？「5」と答えるのが自然な回答でしょう。私たち人間の脳は様々なパターンを認識し、これらのパターンに基づいて将来をどのように予測するかを学びます。経験を積み重ねるにつれ、身の回りの事象に対する期待値も変化します。たとえば、いつも時間通りに来る友人が、ある時から遅れて来るようになったとき、当初私たちの頭の中にあった「今日もあの人は時間通りに来るだろう」という予測は正確ではなくなります。すると脳は、「もしかしたら遅れて来るかもしれない。ただし遅れたとしても5分程度だろう」というように期待値を調整し、さらに正確な予測ができるよう働きます。経験が多ければ多いほど、つまり、データが多ければ多いほど、より正確な予測ができるようになります。しかし、人が処理できるデータ量には限りがあるので、機械が大きな助けとなります。

2. 機械を訓練する

コンピュータは人間の脳と同じではないものの、脳の学習の仕組みを真似るように教え込むことができます。そのための一般的な方法の一つが機械学習における「教師あり学習」と呼ばれるものです。機械にはまず、入力データに基づく予測結果を出力するモデルを作るための、調整可能な方程式が与えられます。次に、入力データとその予測結果が既にセットになった、つまり正解のわかっている既存のデータ(訓練データ)を大量に読み込ませることで「訓練」し、パターンを学習させます。その過程で機械は自分の予測する出力データがより訓練データの正解に沿うよう、方程式を少しずつ調整しながら予測モデルを構築します。こうして訓練されたモデルは、さらに別の既存データセットでテストされ、モデルの予測結果と、既存データの実測の結果が比較されます。これらを経て正確性が得られて初めて、そのモデルは未知のデータを評価するために使用できるようになるのです。

Start
かつての研究の進め方

ICReDDでの研究の進め方

AFIR法
自動化学合成ロボット
AFIR法や自動化学合成ロボットによって膨大なデータの蓄積が可能に。

3の次は?
分子の特徴を覚えよ

4
選択性の高い触媒は?

Column
1万通りのうまくいかない方法
発明王と呼ばれるエジソンは、「私は失敗したことがない。ただ、1万通りのうまくいかない方法を見つけただけだ」と言ったといわれています。1つの成功の前には、数えきれないほどのうまくいかなかった道のりがあつたのですが、機械学習にとってはこの「1万通りのうまくいかない方法」のデータが、成功パターンを見つけ出すための非常に重要な訓練データになります。

Back to the start
1万回繰り返して次へ進む

成功です!
よし

Goal
ハイコレ

“ 私は失敗したことがない。ただ、1万通りのうまくいかない方法を見つけただけだ。 ”

“ 1万通りのうまくいかない方法からパターンを見つけます! ”

3. 化学における機械学習

未知のデータを評価する機械学習は、化学の分野において、新しい分子や材料の性質を特定する場面に応用され始めています。この場合、分子の構造を入力データとし、その分子の性質が出力データの値となります。機械はまず、実験によって実際に測定された入力データと出力データのセットで訓練され、分子の構造とその性質の間にある関係性のパターンを識別します。そうして正確なモデルが得られれば、化学者が求める性質を持つ分子がどれなのかを素早く特定することができるようになります。ですが、正確な分子を予測するためには、依然として大量の実験データが必要です。機械学習の化学への応用は、訓練データの量が十分でないために制限されています。

4. 自動的な発見へ

ICReDDでは、2つの方法でこのデータ不足に取り組んでいます。第一に、自動化学合成ロボットを利用して実験データの収集を加速させることです。研究者たちはこの効率的なデータ収集の方法を利用し、新しい医薬品や他の機能性分子の設計において重要な特性である「高い選択性」を持つ新しい触媒を特定する機械学習モデルを構築することができました。第二に、反応経路自動探索法を使って計算された大量のデータを訓練データに使い、パターンを見つけ出す方法も探求しています。ICReDDは、自動化学合成ロボットと反応経路自動探索法による計算から多くの訓練データを短時間に収集し、機械学習を用いてパターンを見つけ出すことで、新しい化学反応の設計と発見をさらに加速させる取り組みを行っています。

CHALLENGE!

カタリストを読んで
チャレンジしてみよう!

クイズに
チャレンジ

- Q 機械学習モデルが入力データと出力データを分析することにより予測の精度を上げていくプロセスを_____と呼びます。
- A 暗記 B 訓練
C 練習 D 応用

クイズの答えはInstagramのハイライトで公開しています。ぜひチャレンジしてみてください。 #ReactWithUs

@ICReDDconnect



ICReDDCONNECT

◎新たに着任した研究者



周 順

研究テーマ

有機触媒、不斉触媒



藤原 政司

研究テーマ

装置とデータ管理



向峯 あかり

研究テーマ

ケミカルバイオロジー、
光化学



ナジハジ・マルトン

研究テーマ

有機・有機金属化学、
触媒

◎代表的な論文 (2023年6月から2023年8月まで)

計算を用いた低温メタン燃焼の触媒設計

(MANABIYA 修了者: 安村)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/9620>



化学反応創成プラットフォーム「SCAN」を開発～化学反応を自在に設計する～

(原測、前田、高橋)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/9540>

卵巣がんに対する新しいバイオマーカーとして期待～ポリケトン鎖修飾ナノワイヤを用いた新たなエクソソーム捕捉法を開発～

(猪熊)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/9530>



空中超音波で液滴をジャンプさせるマイクロ流体操作基盤を開発

(長田)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/9604>



インディゴを利用する光応答性分子の開発指針

(ファン)

<https://doi.org/10.1002/chem.202300981>

◎アウトリーチ

- ・研究所・センター等合同一般公開 (体験コーナー、サイエンストーク)
- ・日本化学会 夢・化学-21 (体験入学)
- ・オープンキャンパス (見学ツアー)
- ・サイエンスアイ (見学ツアー)
- ・土佐塾中学・高等学校からの研究室訪問
- ・駐日欧州連合特命全権大使の来訪
- ・マンスリー ニュースポストカード
- ・クォーターリー ニュースポスター カタリスト12号



研究所・センター等合同一般公開 体験コーナー



サイエンスアイ 見学ツアー

◎特別行事

- ・ICReDD 新棟落成記念式典



マンスリーニュースポストカード



カタリスト第12号

研究者紹介

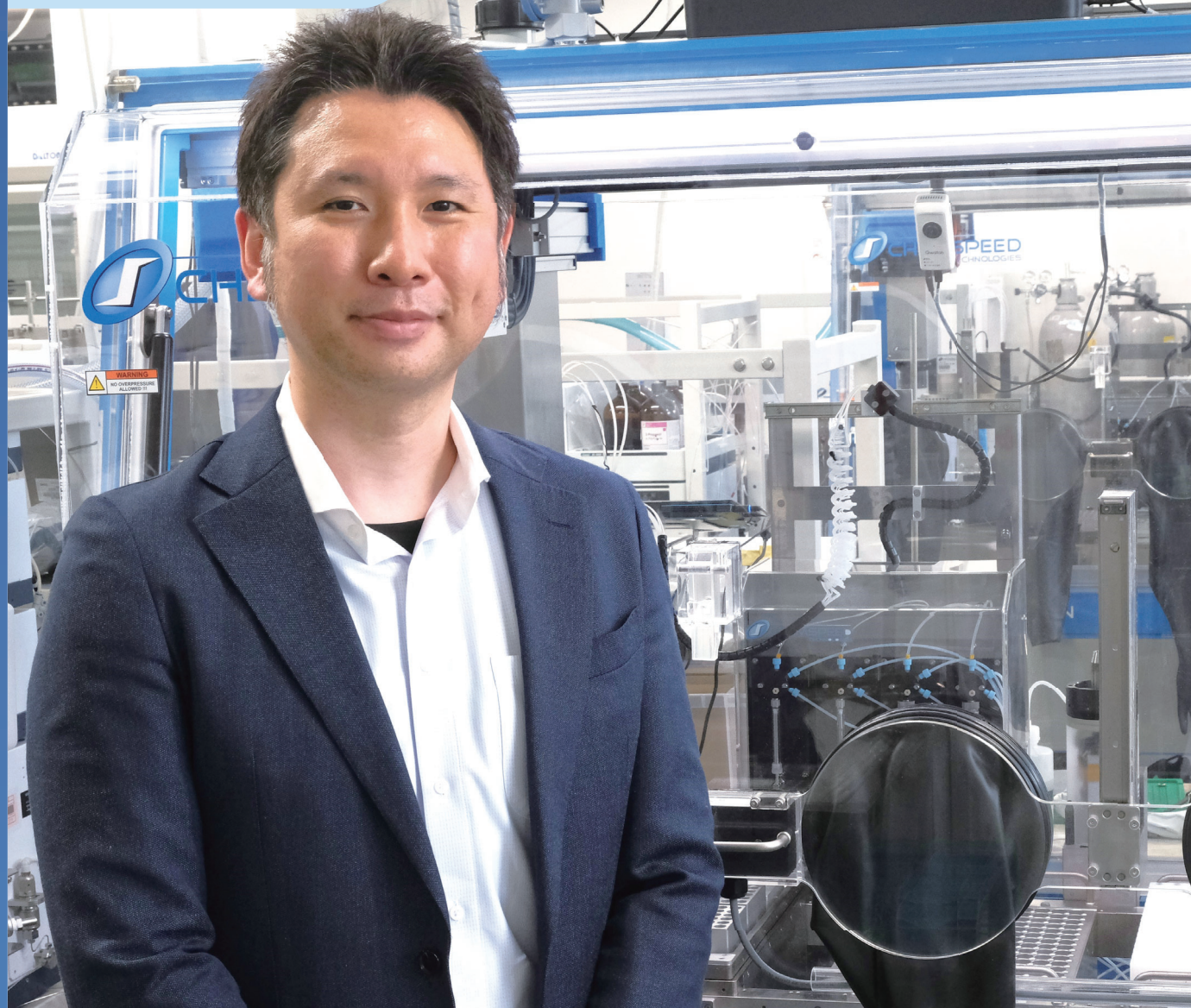
vol.13

長田 裕也

Yuuya Nagata

略歴

ICReDD 特任准教授。2008年京都大学大学院工学研究科高分子化学専攻にて博士号を取得。2008年4月京都大学大学院工学研究科高分子化学専攻博士研究員、2008年5月京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻 助教を経て2019年12月より現職。



長田裕也特任准教授は、自動化学合成ロボットを用いた新反応・新材料の開発を行っています。
特に、理論化学および情報科学と自動合成技術の融合による
新合成手法の開拓の研究を行っています。

代表的な論文

Commun. Chem. 2022, 5, 158;
Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e20221865;
Org. Biomol. Chem. 2023, 21, 3132



ICReDDについて

新しい化学反応の開発は、人類の繁栄や環境問題と密接に関わっています。その代表的な例は、2010年にノーベル化学賞を受賞したクロスカップリング反応です。この反応は医薬品の約20%、液晶や有機EL材料のほぼ全ての生産に利用されており、年間約60兆円規模の産業に関わっています。これは、新しい化学反応の開発が社会にいかにか大きな影響をもたらすかを示すわかりやすい例です。北海道大学に設置された化学反応創成研究拠点(ICReDD)は、その名の通り化学反応開発を専門とする、WPIの拠点です。化学反応を自在に設計することを目標に、異なる分野の研究者がそれぞれの強みを活かし、協力し合いながら分野融合型の研究を行っていることが大きな特徴の1つです。化学反応の自在設計には、あらゆる段階における横断的な異分野連携が必要となりますが、この新たな融合研究を推進するために誕生したのがICReDDです。化学反応という自然界の基本的なプロセスを研究するためには、量子化学計算、情報技術、最新の実験技術、先端材料の開発など分野ごとに分かれて研究するのではなく、真に融合された新たな研究技術が必要不可欠なのです。

🕒 今年の夏、ICReDDは小中高生向けのアウトリーチイベントに参加しました。(上)一般公開イベントのサイエンストークでは、ICReDDの長谷川靖哉教授が、魔法使いの衣装を着て化学と蛍光の魔法について講演しました。(下)日本化学会 夢・化学-21(二日体験入学イベント)では、高校生が中島祐准教授の指導の下でハイドロゲル材料を作る実験をしました。

カタリストとは

「カタリスト」とは触媒のことです。化学で使用される触媒とは、反応をより速く起こさせるために使われます(例:分子を結合させる、反応の障壁を減らす、分子を活性化させる、など)。このポスターを通して、読者の方が日常に無数に存在する化学反応と私たちの生活を結び付け、化学反応や化学といったものが私たちの世界と実際にはどのように関わっているのかを、新しい視点で気づくためのお手伝いができればと考えています。そして、「カタリスト」で私たちのことをもっと知ってもらい、読者の皆さんと私たちの間に新たな関係(化学反応)を築ききっかけ(触媒)を提供できればと思っています。#ReactWithUs

React With Us!

最新情報を入手するには、
ICReDDのSNSをフォローしてください。
@ICReDDconnect



カタリスト 第13号 2023年9月発行

発行所
北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD/アイクレッド)
〒001-0021 北海道札幌市北区北21条西10丁目

☎ 011-706-9646 (広報担当)
✉ public_relations@icredd.hokudai.ac.jp
🌐 <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/>

