

## Deep learning の発展と化学反応への応用

(株式会社 Preferred Networks<sup>1</sup>) 中郷 孝祐

Recent progress of deep learning and its application to chemical synthesis (<sup>1</sup>*Preferred Networks, Inc.*) Kosuke Nakago<sup>1</sup>

Recent high attention for deep learning opened the door for its application to various fields. In the first half, various types of neural networks are explained to apply specific domains, for images, natural languages, and graphs. In the latter half, how to apply these deep learning techniques to chemical synthesis is introduced. Also, some industrial movement, e.g. automation of chemical synthesis, is mentioned at last.

*Keywords : Deep Learning, Machine Learning, Chemical Reaction, Retrosynthesis*

近年、深層学習の発展が著しく、様々な分野への適用が進んできている。前半では、深層学習がその技術適用を広げていく上で、画像・自然言語・グラフそれぞれに特化したニューラルネットワークが開発されてきたことを紹介する。後半ではこれらの深層学習技術が、どのように化学反応の順合成・逆合成予測や関連アプリケーションに応用されているかを紹介し、最後に合成の全自動化などの産業的な動向についても触れる。