

機械学習による化学・化学工学データの解析および分子設計・材料設計

(明治大理工) 金子 弘昌

Machine Learning for Chemical and Chemical Engineering Data Analysis and Molecular Design and Materials Design (*Department of Applied Chemistry, Meiji University*) ○ Hiromasa Kaneko

In Data Chemical Engineering Laboratory (Kaneko Laboratory) <https://datachemeng.com/>, datasets of various functional materials are analyzed with machine learning, hidden relationships among them are modeled, and promising chemical structures, materials and products are designed based on the models. This talk describes how machine learning can support the research, development, evaluation, and manufacture of highly functional materials, and presents research examples in the field of chemoinformatics and materials informatics.

Keywords : Chemoinformatics; Materials Informatics; Process Informatics; Molecular Design; Material Design

近年、化学の分野や産業全般においてデータが蓄積されつつあり、そのデータを解析する動きが活発になっている。しかし、研究室での実験結果、高機能性材料などの開発データ、化学・産業プラントにおいて様々な製品を製造する際のデータなど、蓄積されたデータを十分に活用しきれていない状況も存在する。データ化学工学研究室 <https://datachemeng.com/> では、医薬品・高分子化合物をはじめとして様々な高機能化合物・材料のデータをコンピュータで人工知能・機械学習等により解析し、その中に隠れている関係性を見つけモデル化し、そのモデルにもとづいて未知の化学構造・材料・製品を評価したり、設計したりしている。例えば高機能性材料を開発する際、化合物データを用いて化学構造と物性・活性・特性との間の関係をモデル化することで、化合物を合成したり合成後に物性値を測定したりする前に、化学構造から物性値を推定でき、逆に良好な物性値をもつ化学構造の設計もできる。さらに、各種装置や化学プラントにおいて高い品質の製品を安定的に製造するため、測定が困難なプロセス変数の値をプロセスデータから予測して管理・制御する技術を開発している。

本講演ではデータサイエンスにより高機能材料の研究・開発・評価・製造を支援する方法を解説し、以下のようなケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクス分野における様々な研究事例について紹介する。