材料業界における分子自動設計の活用

（MI-6株式会社[1]）入江 満[1]

Application of automated de novo molecular design in chemical industry

([1]*MI-6 Ltd.*) Mitsuru Irie [1]

Recent developments in computer science and computing environment have accelerated the application of machine learning and mathematical optimization techniquesa across academia/industry, and the same trend is occurring in chemistry and materials research. In particular, the application of data science approaches to materials design is called "Materials Informatics (MI)".

MI-6 Ltd., as a startup dedicated to MI, has been applying MI methods in various materials development projects. Among the many MI methods, one of the most interesting targets is the automated de novo molecular design.

Although the automated molecular design has been studied for a long time in the field of drug discovery, there are not many examples of its application in the field of materials. In addition, there are many settings that are not appropriate as benchmarks for molecular design in the field of materials, such as the target molecule being small and the evaluation function being drug-likeness. In this presentation, I would like to discuss the current status of and barriers to the automated molecular design in the chemical and materials industries, along with application examples.

Keywords：*Materials Informatics, De novo molecular design, Machine learning, Experimental design, Cheminformatics*

近年の計算機科学や演算能力の発展、蓄積データの大規模化により、学術/産業の垣根を超えて機械学習や数理最適化技術の応用が加速しており、化学・材料研究においても同様の流れにある。特に機械学習を含むデータ科学的アプローチの材料設計への応用は「マテリアルズ・インフォマティクス（MI）」と呼ばれる。

MI-6株式会社は、MI専業スタートアップとして様々な材料開発のプロジェクトにおいてMIの手法を適用してきた。数あるMI手法の中でも、興味を集める対象の一つに新規分子の自動設計がある。

アルゴリズムによる分子の自動設計は、創薬分野において長く研究されてきたものの、化学・材料分野での実応用事例は多くない。また創薬分野での自動分子設計の研究では、対象分子が低分子であったり、評価関数がdrug-likenessであったりと、化学・材料分野での分子設計におけるベンチマークとして相応しいとはいえない設定が多い。そこで、本講演では化学・材料産業における分子設計の自動化の現状や障壁を、応用事例と共に議論したい。

© The Chemical Society of Japan