

AI 利用を意識した化学データの戦略的収集と戦略的創出

(産総研触媒化学融合研究セ) ○佐藤 一彦

Strategy for Generating and Collecting Chemical Data Applicable to Chemical research with Artificial Intelligence (*Interdisciplinary Research Center for Catalytic Chemistry, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)*) ○Kazuhiko Sato

Chemical information and data are valuable resources for chemical innovation. As a national strategy, it is important to collect chemical data generated in the universities and the research institutes, and construct a high-quality database that includes reproducible data which do not depend on the researchers. In this presentation, importance of the strategically generation and collection of high-quality data, the construction, the management and the utilization of the reliable database, which are directed toward the chemical innovation by artificial intelligence, will be discussed.

Keywords : database; chemical innovation; artificial intelligence

化学情報・データは、これからの化学技術革新を生み出す貴重な資源である。国として、研究・教育機関に散在する化学データをデータベースとして集約し、広くより機能的に活用するための施策が重要である。そのためには、教育・研究機関における統一的な電子実験ノートの導入、得られるデータベースの構造化を早急に行い、その情報の有効活用を推進すべきである。また、誰が行っても再現性よく同じ結果が得られるデータの蓄積が質の高いデータベース構築の大前提であり、そのためには実験・分析の自動化が望ましい。新たな物質・材料の物性や機能と構造、構造と合成法、さらに合成法と生産プロセス間の関係について、ネガティブデータを含めた新規データベースとして戦略的に収集・創出し、それを重要な資源として管理、有効活用していく仕組みを構築することが重要である。そのためには、高分子、製薬、機能性材料等の分野で化学に特化したデータベースの構築法や活用法の開発や、高度な分析機器と自動合成機能を融合させ質の良いデータを提供できる高機能物質合成システムの開発などを通して、情報化時代の化学に携わる広い分野の研究者の研究力強化を支援する組織（新化学創成センター）を設置すべきである¹⁾。

1) 日本学術会議 提言「化学・情報科学の融合による新化学創成に向けて」(令和2年7月7日), 化学委員会化学企画分科会, P12.