

合成化学者が合成化学に AI を活用するためには？

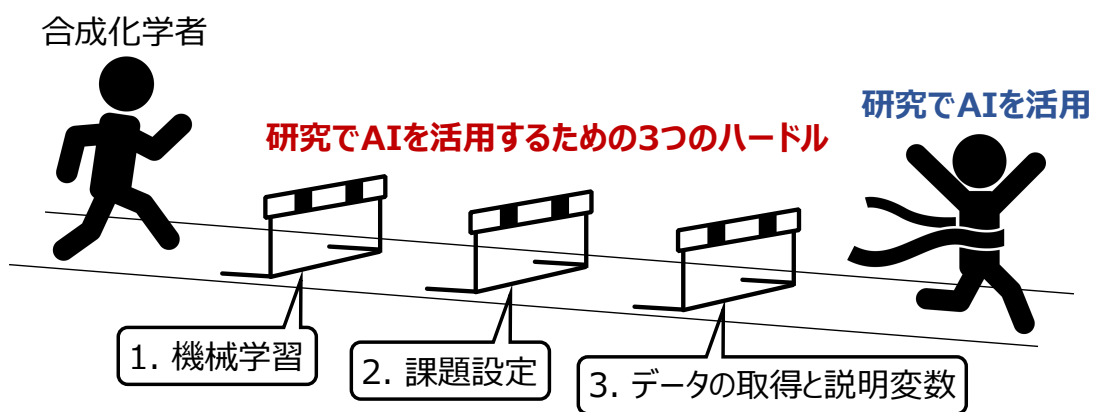
(産総研 触媒化学融合研究セ) ○矢田 陽

How can synthetic chemists perform Artificial Intelligence in synthetic chemistry? (Interdisciplinary Research Center for Catalytic Chemistry (IRC3), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST))○Akira Yada

Considering the future of synthetic chemistry, the use of artificial intelligence (AI) technologies such as machine learning in synthetic chemistry research is becoming essential. However, many researchers still have questions about using AI in their chemistry, how many hurdles there are, and how big they are to introducing AI in the first step. This lecture will present what is necessary for synthetic chemists to utilize AI technologies for their research based on the speaker's experience.

Keywords : Machine learning; Artificial intelligence; Organic synthesis; Catalyst; Chemist

合成化学の将来を考えた時、合成化学研究に機械学習等の人工知能(AI)技術を活用することは必要不可欠となりつつある。しかし、どのように研究に活用すれば良いのか、そもそも AI 導入にどれくらいのハードルがありそれを乗り越えるのがどれくらい困難なのか、などの疑問を持っている研究者が未だに多い。講演者は、合成化学者が AI 技術を活用していく上で 3 つの超えるべきハードルがあると考えている。1 つ目は機械学習のハードル、2 つ目は課題設定のハードル、3 つ目はデータの取得と説明変数である。本講演では、これら 3 つのハードルを超えて合成化学者が自らの研究に機械学習等の AI 技術を活用していくために必要なことについて、講演者の体験に基づいて紹介する¹⁻²⁾。



1) Machine Learning Approach for Prediction of Reaction Yield with Simulated Catalyst Parameters, A. Yada, K. Nagata, Y. Ando, T. Matsumura, S. Ichinoseki, K. Sato, *Chem. Lett.* **2018**, 47, 284.

2) Ensemble Learning Approach with LASSO for Predicting Catalytic Reaction Rates, A. Yada, T. Matsumura, Y. Ando, K. Nagata, S. Ichinoseki, K. Sato, *Synlett* **2021**, 32, 1843.