

ERATO 前田化学反応創成知能プロジェクト中間評価概要書

【研究総括】前田 理（北海道大学 化学反応創成研究拠点 拠点長／大学院理学研究院 教授）

【副研究総括】

岩田 覚（東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授／北海道大学 化学反応創成研究拠点 特任教授）

【評価委員】（敬称略、五十音順）

今井 浩（委員長；東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授）

上田 修功（理化学研究所 革新知能統合研究センター 副センター長／NTT コミュニケーション科学基礎研究所 フェロー）

金田 千穂子（東北大学 国際集積エレクトロニクス研究開発センター 教授）

知京 豊裕（副委員長；物質・材料研究機構 外部連携部門 部門長）

侯 召民（理化学研究所 環境資源科学研究センター 副センター長）

吉澤 一成（九州大学 先導物質化学研究所 所長）

Feliu Maseras（Institute of Chemical Research of Catalonia Group Leader）

【プロジェクトの概要】

計算化学分野で開発された反応経路自動探索技術（AFIR 法）と数理情報学分野で発展してきた組合せ最適化技術を基盤とし、量子化学計算、情報科学、さらにはマテリアルズ・インフォマティクスの技術を統合することで、化学反応における「原子の動きの全貌」を予測し、人類に化学反応を提案する「化学反応創成知能」の創出を目指している。

【研究プロジェクト（領域）の設定および運営に対して】

本 ERATO プロジェクトでは、AFIR 法を更に発展させた反応経路自動探索の効率化・高速化とそれを使った新しい触媒の発見という野心的な目標を設定し、前田研究総括・岩田副研究総括の強いリーダーシップのもと、量子化学・有機合成・ロボティクス・機械学習といった異分野のメンバーが相互に協力し合い、ゼロからの化学反応予測技術の創出、未知の化学反応の提案、有機合成実験による実証等、データ駆動型研究を高いレベルで実現している。また、化学反応予測において、反応経路探索での強化学習、さらに反応速度定数行列縮約（RCMC）法での劣モジュラ最適化法の順序最適化等の導入等、オリジナリティある試みも行われている。

更に、ロボット合成装置等の最先端技術を導入して研究の高速化を図るのみならず、リモート有機合成システムやリモートコミュニケーションツール等を整備し、実験の自動化等、研究を円滑に進めることのできる環境も整備された。デジタルトランスフォーメーションの活用や若手研究者の積極的な登用に成功した、世界で先端を行く研究環境を構築している。

【研究の達成状況および得られた研究成果】

本プロジェクトでは、前田研究総括が開発してきた未知の化学反応をコンピュータで系統的に探索する AFIR 法をベースに、化学反応を収率も含め自動予測する技術を確立した。その一つの研究成果である、ジフルオログリシン誘導体の新たな合成法の発見は、本予測技術の有用性を実証し、Nature Synthesis など一流の国際学術誌に掲載されるなど、研究成果の明確なエビデンスとして蓄積され、有機合成におけるイノベーションとして高く評価できる。今後は、本予測技術の研究対象を新たな触媒反応、例えば遷移金属触媒へ広げ、学術的または産業的価値の高い反応がプロジェクト期間内に開発される

ことが望まれる。

その他、AFIR 法によって得られた結果のデータベース化、データ活用のデータプラットフォーム SCAN の開発、量子化学計算を行うことなく反応経路ネットワークを構築する反応性予測 AI の開発、ロボット合成技術等一連の開発も順調であり、反応予測からロボット合成までを自動化するシステムも着実に構築していると思慮する。特に、AFIR 法の効率化に向け、グラフニューラルネットワーク(GNN)などデータ科学手法や、反応経路ネットワークにおける反応収率を計算するための数理モデルである RCMC 法の高速度化技法の導入は、注目に値する。

【研究成果の科学技術、社会・経済への貢献】

AFIR 法と RCMC 法の組み合わせによるシミュレーション(順方向・逆方向の二種類のオン・ザ・フライ速度論シミュレーション)技術を世界に先駆けて実現している点で、科学技術への貢献度は大きく、注目度の高いジャーナルに公開され、国内外で高く評価されている。複数のグループ間で、本プロジェクトの研究成果である化学反応データベースと予測技術を基にした分野融合研究が進められており、新たなデータ駆動型化学の潮流を生み出すポテンシャルが感じられる。量子化学的逆合成解析 QCaRA やプラットフォーム SCAN 等も、国内外の研究コミュニティへの貢献のみならず、研究成果の社会実装を見据えた取り組みが見られ評価できる。反応性予測 AI が完成すれば、反応設計の効率化による様々な反応設計のオンデマンド化・安価な製造が実現し、経済効果も大きく社会・経済への貢献が十分期待できる。あとは、本 AI の有効性を示す新材料の発見、学術的・産業的価値の高い反応の開発が待たれる。研究で得られた特許を基本特許とし、企業との連携などを行いながら周辺特許を固める等、特許戦略が今後の課題として挙げられる。

プラットフォーム SCAN に関しては、社会実装を見据えた取り組み中であると評価するものの、本プロジェクト終了後のメンテナンスについて、本プロジェクト実施期間中に十分検討しておくべきである。今後、産業界との連携もより一層に強化することが望まれる。

【その他特記すべき事項】

若手研究者の登用・活動支援・キャリアアップ支援が積極的に行われ、次世代のリーダーと期待される若い研究者が昇格あるいは定年制研究者として栄転した点は高く評価できる。また、多数のプレスリリース、国際会議での基調講演、Nature 広報誌での特集企画など、アウトリーチ活動も積極的に行っている。RCMC 法の高速度化の応用数理国際会議 ICIAM での招待講演、ベンジャミン・リスト教授(2021 年にノーベル賞を受賞)も参加している WPI-ICReDD とも連携が進められており、国際連携として高く評価できる。

その一方、プロジェクト終了後の展開について、ややおぼろげな印象を受ける。若手に引き継ぐ、企業に運営の一部を委託する、起業・NPO 化する等あらゆる選択肢があると思われる。目指すべき将来の姿や社会への展開の可能性を複数の企業との共同研究の中で示し、将来において化学・医薬系産業等の社会貢献がなされることを期待したい。

以上を総合すると、本プロジェクトは全体的に順調な進捗にあり、戦略目標「実験とデータ科学等の融合による革新的材料開発手法の構築」および「数理学と情報科学連携・融合による情報活用基盤の創出と社会への展開」の達成に資する十分な成果が得られていると評価できる。

以上