「デジタル有機合成」 ～研究環境・研究マインドの変革～

九州大学大学院薬学研究院教授 大嶋 孝志
Takashi Ohshima

有機合成(実験科学)とデータサイエンス(情報科学)の異分野融合によって、有機合成に破壊的イノベーションを起こすことを目的とする、学術変革領域研究(A)「デジタル有機合成」が2021年9月に発足しました。この巻頭言の執筆のご依頼を頂いたのは、まだヒアリング前の時期でしたので、無事に採択され、こうして紹介できることをとても嬉しく思っています。

本領域は「有機合成の基礎研究の底上げに寄与したい」という思いからスタートしました。アカデミアの研究環境が大きく変化する中で、どうすれば多くの研究者にとって役に立つ領域になりえるか、領域の立ち上げメンバーで様々なアイデア出しを行いました。そして、「個別の内容に特化した領域研究ではなく、個々の研究者が持っているキラリと光る原石を、迅速に磨き上げ世に送り出すことを可能とするプラットフォーム(PF)を構築しよう」という考えに至りました。それが独自のデータベース(DB)の構築を基盤とした「デジタル有機合成 PF」です(詳細は領域 HP を御覧ください <https://digi-tos.jp>)。

現在、様々な分野で人工知能(AI)の技術に期待が寄せられ、特に生命科学や材料科学などの分野でその取り組みが加速し大きな成果を挙げています。有機合成化学の分野でも、反応条件最適化や合成経路探索などへの機械学習(ML)の利用が進められているものの、残念ながらその利用はいまだ限定的です。ではなぜ有機合成化学の分野でAIの利用が遅れているのでしょうか？ その主な要因は、① MLには大量の実験データが必要であること、② データの精度が実験者の技量に大きく左右されること、といったデータの量と質の問題の他に、③ 有機合成の多様性に現在の ML の手法・特徴量が十分に対応できていないことに由来します。また実際の研究現場でも、「AIは本当に役に立つの?」とか「興味はあるが取っ掛かりがなく、どうやって利用したらよいの?」と思われる方が多いのではないのでしょうか。

それに対し私達は、吉田潤一先生が立ち上げられた新学術領域「反応集積化」でフロー反応に出会い・学び、続いて深瀬浩一先生の「中分子戦略」で中分子合成にフロー

反応を活用すべく様々な検討を行う中で、フロー反応が ML にとっても親和性が高いことを認識し、実際に、ML を利用することで、僅かなデータから極めて効率的に反応条件最適化が可能であることを経験しました。さらに、吉田先生が有機合成化学協会の会長の時に立ち上げられた「AIと有機合成化学」研究部会を通じて、有機合成化学における AI 活用の可能性を議論してきたことが、本異分野融合領域を立ち上げる礎となりました。今振り返ると、吉田先生がここに至るまでの道を最初から示してくださっていたのではないかと感じるばかりです。本領域の立ち上げをお知らせできないことが残念ですが、吉田先生の先見の明に感謝するとともに、領域研究終了後も日本の有機合成化学の発展に寄与する「デジタル有機合成 PF」の基盤をしっかりと構築することで、恩返しをしたいと思っています。

私達の取り組みは、これまで有機合成化学の発展を支えてきた従来型の研究手法を否定するものではありません。実際、AIは魔法の道具でも万能ツールでもなく、できること・できないこと、得意なもの・不得意なものがあります。しかしながら、労働者人口の減少、働き方改革などに伴う労働環境の変化、コロナ禍等での研究活動の制限などの問題に直面し、今「研究環境の変革」に取り組まないと手遅れになるという危機感を強く持っています。本領域研究を通じて wet と dry の研究バランスの最適化を行い、「研究マインドの変革」とともに「研究環境の変革」を進めていきたいと思っています。特に日本の未来を担う若い研究者の柔軟かつ大胆なアイデアがいかに発揮される場にしたいと思っています。

個人的には、新しいおもちゃを与えられた子供のように、MLをいじりまくってワクワク感が止まりません。この感覚、学生時代に出会った計算化学と似ています。当時「そんな実際の研究に役に立つの?」と言われた計算化学が、今や必須の研究手法になったように、MLも将来有機合成化学者の基本スキルとなると思っています。実験化学者が日常の研究生活の中で普通に ML を使いこなしている姿を夢見しています。

(2021年10月19日受理)