

MERIT インターンシップ（国内）報告書

工学系研究科 化学システム工学専攻

船津・小寺研究室 博士課程1年

MERIT 7期生 井上 貴央

受け入れ先

株式会社 Preferred Networks

実施期間

2019/08/07 ~ 2019/09/20

テーマ

化学構造生成モデルにおける目的物性値を持つ化合物の効率的な探索方法

テーマ設定の背景

構造生成器は、コンピュータ上で化学構造を発生させるプログラムであり、創薬や材料設計の現場で新規の機能性有機化合物を探索するツールとして活用されている。

構造生成器の利用法としては、生成した化学構造群を別途用意した物性値予測モデルを通して、所望の物性値を満たすものを候補構造群として採用する、といったバーチャルスクリーニングが主である。実用的には、化合物の満たすべき条件は複数個あることが普通であり、すべての指標が最適になるように構造設計することは難しい。しかし、すべての指標が最適ではないにせよ、すべての条件を同時に満たす化学構造群を効率よく探索する必要がある。

インターンシップ内容

所望の条件をすべて満たす化学構造群を発見する問題は、多目的最適化問題として定式化することができる。多目的最適化問題を解くことで、一方の指標について改善しようとするとき別の指標を改悪せざるを得ないといった、Pareto最適解と呼ばれる解を得ることを目指してインターンを行った。複数のPareto最適解が得られれば、この中からすべての条件を同時に満たす化学構造の候補を得ることができると期待される。インターンでは、多目的最適化を行うためのコードを書いて計算機実験を行うことで、本問題設定における多目的最適化の有用性を確認した。

所感

自分の研究では構造生成器の設計を行っているが、今回のインターンシップでは構造生成器の利用についてのケーススタディを行った。関連しているものの触れたことがない分野ではあったが、アルゴリズムの実装や実験を通して様々な知見が得られた。さらに、構造生成器の利用を見据えたテーマで研究をすることで、自分の研究分野の実社会との関連性を再確認することができ、自分の研究の方向性について再考する良い機会となった。

また、自分の研究スタイルを見直すのにも役に立ったと思う。とくに今回のインターンでは、自分のテーマについてディスカッションをする場面が多く、必ずしも研究分野が一致しない他人との活発なディスカッションにより研究を深めることの大切さを再確認した。

謝辞

本インターンシップにおいて直接ご指導いただきました武本 瑞貴 様と石谷 隆一郎 様をはじめとして、Chemチームの皆様へ深くお礼申し上げます。また、今回のインターンシップの機会を与えていただきました指導教員の船津 公人 教授、およびMERITプログラムにもこの場を借りて感謝いたします。