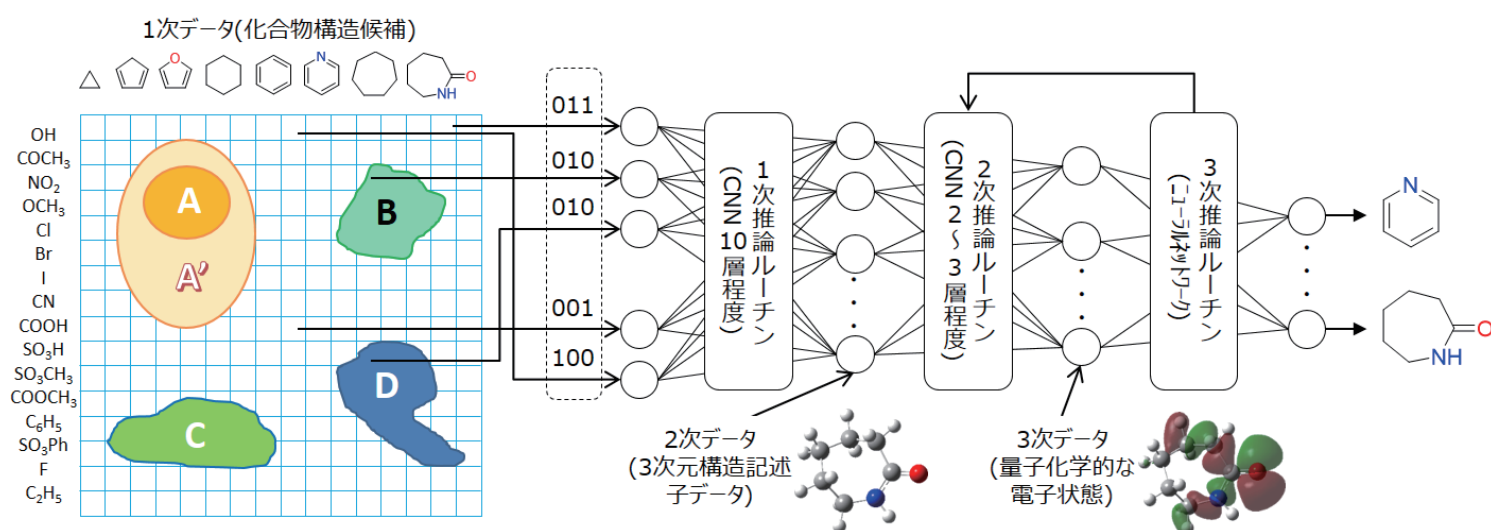


研究拠点群形成プロジェクト

深層学習の予測に基づいた新規機能性化合物創成と検証

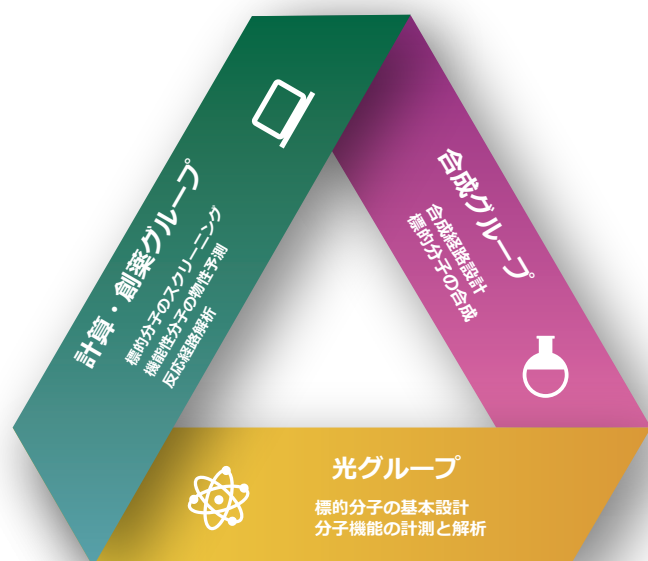
研究概要

本研究プロジェクトでは、深層学習(ディープラーニング)・計算化学・有機合成化学の融合により、機能性分子の設計~検証までを一括して実現するイノベーションサイクル研究拠点形成を行っています。深層学習を用いることにより、多くの実験事実を、新規機能性化合物への創成へ繋げ、実際に合成して、それらの機能を科学計測またはバイオアッセイにより評価することを行っています。これにより「機能分子創成イノベーションサイクル」が実現されます。



研究実施体制

3つの研究グループを設けて、創薬に繋がる化学物質や太陽エネルギー変換に有効な色素分子などの機能性分子の開発に取り組んでいます。



深層学習とは？

深層学習(ディープラーニング)は、複数のニューラルネットワークを階層的に組み合わせたモデルを用いて機械学習させることで、より複雑な情報の認識や分類を行うことを目的としたものです。

本研究プロジェクトでは、深層学習のモデルとして畳み込みニューラルネットワーク(CNN)を利用し、数百以上の化学構造記述子と分子機能を結びつけることで、新規機能性化合物の創成を行っています。

