

実験・理論・計算が融合したケム・インフォマティクス研究

研究代表者 清野 淳司

(先進理工学部 化学・生命化学科 准教授)

1. 研究課題

理論・計算・実験化学と機械学習をはじめとするインフォマティクスの融合を図ることにより、計算化学と実験化学の間のギャップを埋め、計算化学の社会実装を加速させる。さらに、これまでの研究手法では困難であった化学分野の諸問題を解決へと導き、新たな研究領域ケム・インフォマティクスを定着させる。2025年度は以下のテーマに関して研究を行った。(1) 機械学習ポテンシャル由来の局所記述子を用いた分子物性予測システム、(2) AI エージェントと知識グラフによる対話型電子実験ノートの開発、(3) 化学法則の自律探索に向けた協調型 AI エージェントによるシンボリック回帰システム。

2. 主な研究成果

2.1 機械学習ポテンシャル由来の局所記述子を用いた分子物性予測システム

所望の分子物性を有する材料を効率的に設計するためには、AI を用いた高精度な物性予測が重要である。本研究では、機械学習ポテンシャルが獲得した局所的な原子環境表現を、3次元構造を直接扱うグラフニューラルネットワーク (GNN) に導入することで、有機分子および遷移金属錯体に対する多様な物性を高精度に予測可能なモデルを開発した。

本システムの流れを図1に示す。Preferred Potential (PFP) により得られる原子ごとの局所記述子をノード特徴量として使い、距離情報や記述子間の類似度に基づく特徴をエッジ特徴量として構築し、同変性 GNN (EGNN) に入力した。得られた集約表現に基づき分子全体の物性を予測するとともに、各原子の特徴量から局所的な物性の推定にも対応可能な設計とした。

本手法 EGNN-PFP を用いて、有機小分子および金属錯体分子に対して、双極子モーメントや HOMO-LUMO ギャップなどの分子全体の物性、および NMR 核磁気遮蔽定数などの各原子に対応する局所物性の予測に適用し、その有効性が示された。特に遷移金属錯体では、全体の精度が顕著に向上した (図2)。

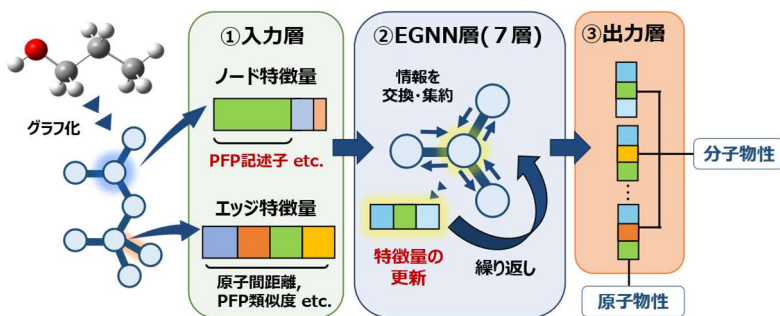


Fig. 1 本システムの概要

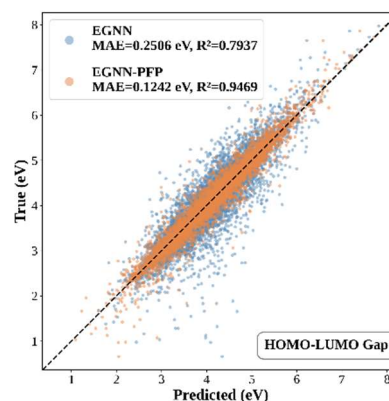


Fig. 2 遷移金属錯体における HOMO-LUMO ギャップの予測精度

2.2 AI エージェントと知識グラフによる対話型電子実験ノートの開発

化学実験に関する知識やノウハウは実験者個人の経験に依存しやすく、研究室内での技術継承や他者による再現性の確保が重要な課題となっている。本研究では、大規模言語モデル (LLM) による自然言語処理、AI エージェントによる自律処理、知識グラフによる構造化を統合し、実験計画から記録、データ再利用までを一貫して支援する対話型電子実験ノート (ELN) の新たな枠組みを提案した。このシステムは簡便に記録を残すことと、再利用可能な形で情報を蓄積することを両立した次世代電子実験ノートの基盤技術となりうる。

本システムの概略を図 3 に示す。ユーザー (研究者) は Web アプリケーションのインターフェースを通じて、対話的に各機能进行操作する。本システムでは文献収集から実験データ整理までの各段階において、ユーザーとの対話を担う AI エージェント、知識グラフを構築・検索する AI エージェントなど、複数のエージェントが協調して動作し、文献、実験データ、ユーザー入力などの分散した多様な情報を、知識グラフとして統合・管理する。開発したプロトタイプシステムの機能検証のために、特定の有機化合物の合成をデモンストレーションに設定し、その有効性が示された (図 4)。

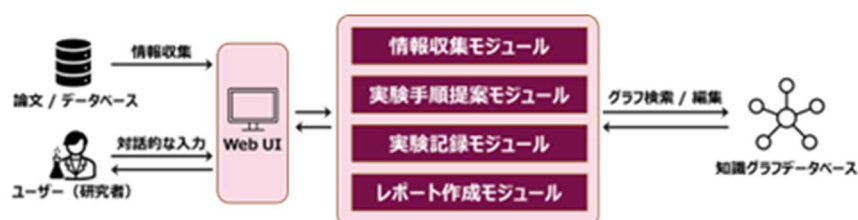


Fig. 3 システムの全体像

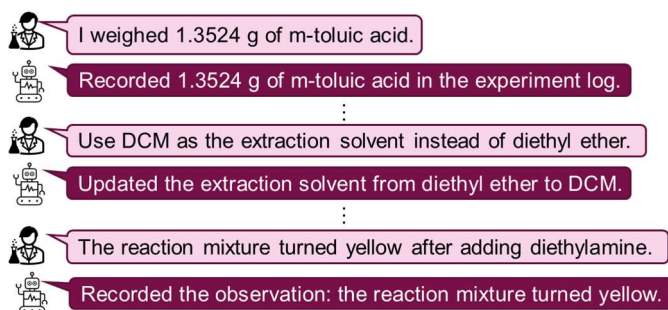


Fig.4 ユーザーとエージェント間の入出力例

2.3 化学法則の自律探索に向けた協調型 AI エージェントによるシンボリック回帰システム

近年、化学分野ではデータ駆動型モデリングが広く利用されているが、高精度モデルのブラックボックス化により物理化学的解釈が困難となる課題がある。この課題に対し、支配的な法則を直接導出可能なシンボリック回帰が注目されている。当研究室では、シンボリック回帰アルゴリズムの性能比較や係数最適化による性能向上を通じて、アルゴリズム選択やパラメータ設定の重要性を示してきた。一方で、実行には専門知識を要する課題が残されていた。本研究では、AI エージェントに基づき、データ前処理、特徴量生成、数式探索、解釈、レポート作成までを複数エージェントが協調して自律実行するワークフローを構築し、属人性低減と化学法則探索の自動化を目指した。

研究で実装したワークフローの全体像を図 5 に示す。本研究では、マルチエージェントフレーム

ワーク CrewAI を使い、化学法則の自律的探索を目的としたシンボリック回帰ワークフローを構築した。本ワークフローでは、各工程を専門 AI エージェントが分担・協調することで、自律的な数式探索を実現した。アトキンス物理化学の教科書に記載された初等関数で表現可能な化学法則 48 種から構成されるベンチマークデータセットの PySR ライブラリを用いた自動導出において、本手法と人間が手作業で行った場合の導出成功数を比較した。手作業では 32 種 (66.7%) で導出に成功したのに対し、本手法は探索空間を効率的に制御することで 37 種 (77.1%) で成功し、ベースラインを上回った。

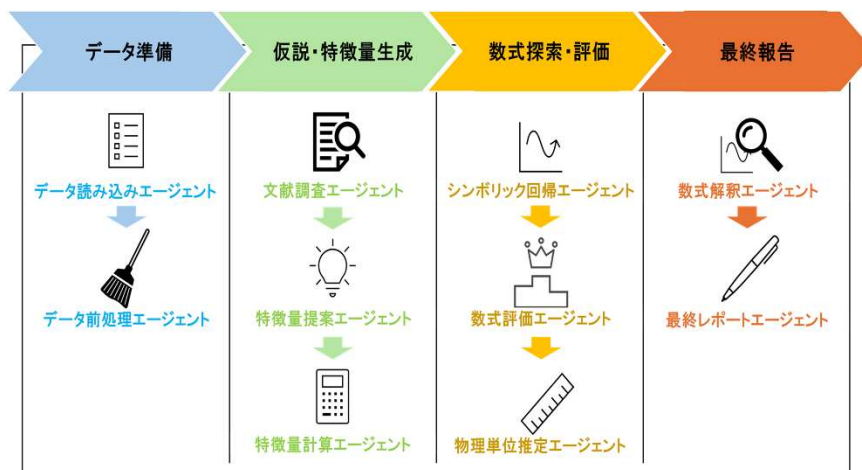


Fig.5 シンボリック回帰における AI エージェント協調ワークフローの構成

3. 共同研究者

寺田 泰比古 (先進理工学部・化学・生命化学科・教授)
 中尾 洋一 (先進理工学部・化学・生命化学科・教授)
 町田 光史 (先進理工学部・化学・生命化学科・講師 (任期付))
 神平 梨絵 (理工学術院総合研究所・次席研究員 (研究院講師))
 中野 匡彦 (理工学術院総合研究所・招聘研究員)
 中嶋 裕也 (理工学術院総合研究所・客員次席研究員)
 速水 雅生 (理工学術院総合研究所・嘱託)

4. 研究業績

4.1 学術論文

- (1) “Computational Chemical Analysis of the Molecular Mechanisms of Proteins Involved in Chromosome Segregation”, Marina Awaji, Yuichiro Asai, Koh Fukuchi, Yasuhiko Terada, Junji Seino, *J. Comput. Chem. Jpn.* 24, 102 (2025)
- (2) “Impact of Local Descriptors Derived from Machine Learning Potentials in Graph Neural Networks for Molecular Property Prediction”, Ryoichi Uchiyama, Yuya Nakajima, Yuta Tanaka, Junji Seino, *arXiv:2602.03046* (2026)
- (3) “AI エージェントと知識グラフに基づく化学研究のための対話型電子実験ノートの開発”、門脇陽七詩、中野匡彦、清野淳司、人工知能学会全国大会論文集 第 40 回 (2026)、受理

4.2 記事・寄稿

(1) “ケモインフォマティクスと量子化学” (巻頭言)、清野淳司、日本化学会情報化学部会誌、43, 1 (2025)

(2) “生成系 AI による化学探究の深化”、清野淳司、化学と教育、『ヘッドライン:第 32 回化学教育フォーラム: AI は化学探究活動を変えられるか?』、受理

4.3 招待講演

(1) “Systematic Accuracy Assessment of Quantum Chemical Calculations Using Machine Learning”, Junji Seino, Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC11), April, 2025, Kobe (Japan)

(2) “AI 技術と化学データに基づく明示的な化学法則の自動抽出”、清野淳司、化学工学会第 56 回秋季大会、2025 年 9 月、芝浦工業大学豊洲キャンパス

(3) “ホワイトボックス型 AI による分子物性予測と化学原理の抽出”、清野淳司、新化学技術推進協会 (JACI) 戦略委員会 勉強会、2025 年 12 月、新化学技術推進協会会議室

(4) “生成系 AI による化学探究の深化”、清野淳司、日本化学会第 106 春季年会 第 32 回化学教育フォーラム「AI は化学探究活動を変えられるか?」、2026 年 3 月、日本大学船橋キャンパス

4.4 受賞・表彰

(1) 日本コンピュータ化学会 2025 年奨学賞、増田幹太

“知識グラフと機械学習を利用した抗がん活性化合物提案システムの開発”

(2) 日本コンピュータ化学会 2025 年優秀ポスター賞、玉江結々葉

“係数最適化手法を導入した遺伝的プログラミングの開発と化学法則への適用”

(3) 第 48 回ケモインフォマティクス討論会 優秀ポスター賞、吉田大晟

“化学法則の自律的探索を指向したエージェント型シンボリック回帰ワークフローの実装”

4.5 学会および社会的活動

(1) ENEOS 株式会社との共同研究「Matlantis の活用による種々の実験スペクトル予測手法の開発・拡張」、清野淳司 (研究代表、2025 年度)

(2) 文部科学省科学研究費助成金 若手研究「機械学習を利用した量子化学計算誤差データベースの開発」、中嶋裕也 (研究代表、2024 年度-2026 年度)

(3) 日本化学会ケモインフォマティクス部会 幹事、2024 年-現在

(4) 15th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics (REHE2026), Local organization committee member

5. 研究活動の課題と展望

2.1 で開発した分子物性予測システムについては、現在対象としている物性に加え、量子化学計算によって算出可能な電子状態や反応性など多様な分子物性へ適用範囲を拡張することで、材料・創薬分野における高速な分子設計および材料探索への応用を目指す。さらに、予測精度と解釈性を両立した汎用的な分子物性予測基盤として発展させる予定である。2.2 の対話型電子実験ノートについては、実際の研究現場における利便性や操作性の向上が重要であるため、多くの実験化学者から意見を収集し、機能改善を進める必要がある。今後は学会発表や論文投稿を通じて外部研究者との連携を進め、日本語・音声入力への対応や知識グラフとの連携強化など、実験支援機能の高度化を目指す。2.3 の協調型 AI エージェントによるシンボリック回帰システムについては、化学法則探索や材料設計など様々な系へ適用し、有効性および汎用性を体系的に検証する必要がある。