

立教大学学術推進特別重点資金（立教 S F R）

大学院学生研究

2 0 2 5 年度研究成果報告書

研究科名	立教大学大学院 人工知能科学 研究科 人工知能科学 専攻		
研究代表者 (2026 年 3 月現在 のものを記入)	在籍課程・学年	氏 名	
	☐ 博士前期課程 年 ☒ 博士後期課程 1 年	出口 裕希	
指導教員	所属部局・職名	氏 名	
	人工知能科学研究科 准教授	瀧 雅人	
自然・人文・社会の別	☒ 自然 ・ 人文 ・ 社会	個人・共同の別	☒ 個人 ・ 共同 名
研究課題	深層学習を利用した所望の性質を有する化学物質のデザイン		
研究組織 (共同研究者が いる場合のみ、 2026 年 3 月現在 のものを記入)	在籍研究科・専攻・課程・学年	氏 名	
研究期間	2 0 2 5 年度		
研究経費 (1 円単位)	(支出金額) 198,700 円 / (採択金額) 200,000 円		

研究の概要 (200～300 字で記入、図・グラフ等は使用しないこと。)
当該研究の研究目的を含むこと。 本研究では、深層学習と量子アニーリングを活用することにより、指定した物性値を満たす新規化学分子を自動設計する手法を開発する。低分子の化学空間は膨大であり網羅的な探索は計算上不可能なため、物性から分子を逆デザインする技術の確立が求められている。本研究では、SMILES のような文字列としての分子表現と、言語モデルとしての深層学習を組み合わせることで、一つの物性条件から多様な分子を生成可能にするとともに、少量データでも新たな物性値へ柔軟に対応できるモデルを構築する。製薬・工業・農業分野への応用を通じ、分子開発の低コスト・高速化を目指す。
キーワード (研究内容をよく表しているものを 3 項目以内で記入。)
[マテリアルズインフォマティクス] [量子アニーリング] [分子生成モデル]

研究成果の概要 (図・グラフ等は使用しないこと。)

以下の視点を含めて記載のこと。

- ・当該研究は何をどこまで明らかにできたのか (できなかったのか)。
- ・何をもって研究成果 (経過) を達成できた (できなかった) と考えられるのか。
自身が設定した研究目的・目標に照らして、その根拠がわかるよう記載のこと。

当該研究は何をどこまで明らかにできたのか (できなかったのか)

本研究では、物性を起点に分子を生成する深層学習モデルの構築において、過度に学習データセットに依存しないアーキテクチャを作成可能であることを明らかにした。

従来の研究手法では、分子生成モデルは特定の分子物性に対し、訓練データを大量に用意し、事前に定義した物性条件を満たす分子を生成する手法に留まっていた。そのため、新たな物性に対する分子を生成するためには、改めて訓練データを用意し、モデルを 1 から再訓練する必要があった。近年のモデルの肥大化を考慮すると容易な作業ではない。また、現実世界の物性データは多量に用意することが困難な場合も多く、再訓練そのものが困難な場合もあった。

本研究では、所望の物性から分子を探索する過程を深層学習モデルから切り離すことにより、再訓練のコストを大幅に削減しながら、分子生成の性能を担保することに成功した。具体的には、分子生成を量子アニーリングで行う手法の提案により、深層学習モデルを単純な Encoder-Decoder モデルの設計とした。これにより、新たな分子物性の追加は、Head の転移学習によって可能であり、少ない訓練データであっても一定の性能を出すことに成功した。

何をもって研究成果 (経過) を達成できた (できなかった) と考えられるのか。

本研究では、上記に示した手法により、所望の物性を有する分子を生成することに成功したため、研究成果を達成したものと考えている。新規なアーキテクチャの提案にとどまらず、定性 (分子構造、物性分布のヒートマップ)、定量 (新規な分子割合、目標を満たす分子の割合、分子構造の妥当性) 的な観点での評価により、妥当な分子が生成されていることが示されている。

特に、目標物性を単純に満たすだけでなく、生成された分子の 95%以上が世の中で報告されていない新規分子であることも特筆すべき点である。この点は当初の目標を超えており、マテリアルズインフォマティクスにおける研究分野における新たな視点の提供としても貢献できたと考える。

研究成果の概要 (つづき)

※この(様式2)に記入の成果の公開を見合わせる必要がある場合は、その理由及び差控え期間等を記入した調書(A4縦型横書き1枚・自由様式)を添付すること。

研究発表 (研究によって得られた研究成果を発表した①～④について、該当するものを記入してください。該当するものが多い場合は主要なものを抜粋してください。なお、成果発表を確認できる資料を合わせて研究成果報告書提出フォームより提出してください(紙媒体等、研究成果報告書提出フォームから提出できない場合は、別途リサーチ・イニシアティブセンターへ提出してください)。

①雑誌論文(著者名、論文標題、雑誌名、巻号、発行年、ページ)

②図書(著者名、出版社、書名、発行年、総ページ数)

③シンポジウム・公開講演会等の開催(会名、開催日、開催場所)

④その他(学会発表、研究報告書の印刷等)

※修士論文・博士論文は含みません。

① 雑誌論文 について査読中

- 著者名 : Yuki Deguchi, Masato Taki
- 論文標題 : A property-agnostic framework for scalable molecular inverse design via quantum annealing
- 雑誌名 : Digital Discovery

※ジャーナル都合により査読が遅延中。ジャーナルの Editor からのメールを提出する