

(第3種郵便物認可)

サイ・テク  
こらむ ● 知と技の発信

【547】

埼玉大学・理工学研究の現場

化学反応とは分子同士が出合い、化学結合の組み換えが起こる現象である。われわれの身体をつくっているタンパク質や、われわれの身の回りにある材料などは、全て何らかの化学反応を利用してつくられている。しかし、化学反応が実際にどのように起こっているのかを原子レベルで時々刻々と知ることはかなり難しい。分子は極端に小さい上に、分子を構成する原子が動く時間スケールは $10^{-15}$ 秒

10<sup>-12</sup>秒(フェムト秒からピコ秒)と大変短いからである。私たちの研究室では、コンピュータを使って化学反応を「観る」という研究を行っている。実は原子や分子の動きを決めているのは、その中にある多くの電子である。電子の運動は量子力学の方程式で書くことができる。もちろん、その方程式は複雑すぎて厳密には解けないのであるが、コンピュータを使って解けるような近似的な

化学研究と人工知能  
高柳 敏幸 教授

ば、現実な計算時間で何とか答えが得られるようになる。こうして方程式を解くことによって、電子や原子がどのように動いて化学反応が起っているのかをコンピュータを通して「観る」ことができようになるのである。

しかし、化学反応は極めて複雑な過程であるため、コンピュータの性能が上がれば上がっただけ、新しい複雑な課題に挑戦している。そのような意味ではまだまだコンピュータの性能は向上し

がどのように起こっているかを解析させるわけである。このようなことをしていると、サイエンス研究の方法自体が変化している気がしている。以前であれば、研究者が何らかの仮説を立てて、それを裏証すべく研究をするのである

私がコンピュータを使って化学反応の研究を始めてからすでに30年以上が経過した。言うまでもないがコンピュータの性能はものすごく向上した。30年前であればスーパーコンピュータでも何カ月もかかったような計算も、今なら数秒ですべて済んでしまつてあ

「ここ数年でわれわれの研究分野で大きく変化したことは、人工知能の一技術である機械学習がかなり浸透してきたことである。コンピュータが出力する膨大なデータは機械学習と極めて相性が良い。膨大なデータをコンピュータに解析させることで、化学反応

が、今は実験や計算をしてデータを集め、それをコンピュータに解析させるのが主流になりつつある。つまり、膨大なデータからコンピュータに仮説を立てさせていると言っても良いであろう。それを人が解釈するのである。このような手法はデータ駆動型科学と呼ぶのであるが、われわれの分野でも、研究手法が確実にそのような方向へと変わりつつあると感じている。

たかやなぎ・としゆき 1990年理学博士。日本原子力研究所(現、日本原子力研究開発機構)を経て、2004年より埼玉大。専門は理論化学、計算化学、化学反応動力学。