

# AI/MIと有機化学・材料

AI (人工知能)や MI (マテリアルインフォマティクス)は基礎科学研究のみならず、産業界においても広く利用され始めています。第105回目となる産研テクノサロンでは、最先端の AI や MI の化学・材料への利用として、有機合成化学から産業界を含めた実例を取りあげ、今後さらに期待される AIや MI の産業界における実用化への展開をご紹介します。

## [開催日]

2022年12月19日(月) 13:30~16:50 参加無料

## [開催場所]

大阪大学産業科学研究所 管理棟1階 講堂(60名まで) + Zoom (90名まで)

## [プログラム]

13:30-13:40 開会挨拶

大阪大学産業科学研究所 戦略室・特任教授 小倉 基次(総合司会)

13:40-14:05 講演①

「デジタル有機合成」の基盤となる特色あるデータベース構築の取り組み

九州大学 大学院薬学研究院 創薬科学部門 医薬化学講座 教授 大嶋 孝志 先生

14:05-14:30 講演②

「機械学習を活用する精密有機合成反応条件の最適化」

大阪大学 産業科学研究所 機能物質化学研究分野 准教授 滝澤 忍 先生

14:30-14:50 休憩・講師との名刺交換会

14:50-15:15 講演③

「大規模第一原理DFT計算による材料解析」

物質・材料研究機構(NIMS) 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点(MANA)

ナノセオリー分野 量子物性シミュレーショングループ 主幹研究員 中田 彩子 先生

15:15-15:40 講演④

「革新的超高速 AI 分子シミュレーターの触媒探索への応用」

ENEOS 株式会社 中央技術研究所 先進技術研究所

MI 技術グループ 矢山 由洋 先生

15:40-16:00 休憩

16:00-16:25 講演⑤

「創薬化学におけるAI活用の現状と展望」

塩野義製薬創薬化学研究所 ケモインフォマティクスグループ 小倉 圭司 先生

16:25-16:50 講演者を交えたオンライン意見交換会、閉会挨拶

大阪大学産業科学研究所 戦略室・特任教授 小倉 基次

ハイブリッド開催  
(阪大産研+ZOOM)



お申込みは  
こちらから!

・ 申込フォーム(Google) <https://forms.gle/1VHfkW2bU6zLCD6M7>

Webサイト: [https://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/air/techno\\_salon/techno\\_salon.html](https://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/air/techno_salon/techno_salon.html)

申し込み・問い合わせ 大阪大学 産業科学研究所 戦略室

(TEL/FAX:06-6879-8448/E-mail:[air-office@sanken.osaka-u.ac.jp](mailto:air-office@sanken.osaka-u.ac.jp))

主催:大阪大学 産業科学研究所/一般財団法人大阪大学産業科学研究協会/

人と知と物質で未来を創るクロスオーバー・アライアンス:物質・デバイス領域共同研究拠点

共催:文部科学省科学研究費助成事業「学術変革研究A:デジタル化による高度精密有機合成の新展開」(<https://digi-tos.jp/>)/

大阪大学 産業科学研究所 産業科学AIセンター

後援:一般社団法人 日本電気計測器工業会

# 第105回 (2022年度第3回) 産研テクノサロン「AI/MIと有機化学・材料」

## 13:40-14:05 講演①「「デジタル有機合成」の基盤となる特色あるデータベース構築の取り組み」

九州大学 大学院薬学研究院 創薬科学部門 医薬化学講座 教授 大嶋 孝志 先生

【講演概要】 有機合成とデータサイエンスの異分野融合に取り組む「デジタル有機合成」の鍵は、有機化学の機械学習に最適化された独自の特色あるデータベースの構築である。本講演では、データベース構築に向けた我々の取り組みを紹介したい。

## 14:05-14:30 講演②「機械学習を活用する精密有機合成反応条件の最適化」

大阪大学 産業科学研究所 機能物質化学研究分野 准教授 滝澤 忍 先生

【講演概要】 有機合成反応開発において効率的かつ高収率にて目的化合物を得るためには、反応条件を網羅的に探索し、最適化する必要がある。しかし、反応パラメータが多くなるとその探索数は指数関数的に増加し、熟練者の経験に基づく逐次網羅的スクリーニングでも多大な時間・労力・資源・エネルギー・経済的コストを要する。本講演では、バイズ最適化による多次元パラレル探索を基軸とする最少実験試行数での反応条件最良化について紹介する。

## 14:50-15:15 講演③「大規模第一原理DFT計算による材料解析」

物質・材料研究機構(NIMS) 国際ナノアーキテククス研究拠点(MANA)

ナノセオリー分野 量子物性シミュレーショングループ 主幹研究員 中田 彩子 先生

【講演概要】 我々のグループでは、数千原子以上を含む大規模系を取り扱うための第一原理DFT計算プログラムCONQUESTを開発している。複雑界面やアモルファスなど複雑、大規模な非周期構造を持つ材料の原子レベルでの構造、電子状態の詳細な解析において大規模DFT計算は非常に有力なツールである。本発表では、我々の計算手法や複雑材料への応用例を簡単に紹介するとともに、大規模DFT計算と機械学習手法との連携に関する展望を述べる。

## 15:15-15:40 講演④「革新的超高速 AI 分子シミュレーターの触媒探索への応用」

ENEOS 株式会社 中央技術研究所 先進技術研究所 MI 技術グループ 矢山 由洋 先生

【講演概要】 材料の研究開発において、分子シミュレーション技術が広く活用されています。これは、メカニズムなど材料の本質に迫る有効な方法である一方、計算に多くの時間を要するという課題がありました。そこで従来の分子シミュレーション結果を AI で学習した超高速 AI分子シミュレーターを開発しました。

本発表では、カーボンニュートラル燃料の一つであるアンモニアに着目します。開発したシミュレーターを用いて、アンモニア合成反応の経路探索をした事例をご紹介します。

## 16:00-16:25 講演⑤「創薬化学におけるAI活用の現状と展望」

塩野義製薬創薬化学研究所 ケモインフォマティクスグループ 小倉 圭司 先生

【講演概要】 人工知能 (Artificial Intelligence: AI)は、様々な産業で社会実装に向けた検証が行われている。製薬業界においても新薬開発の効率化・成功確度の向上を目的にAI活用の検証が進んでいる。近年の急速な深層学習技術の発展により、創薬研究で求められる多くのタスクがAIで実施できるようになり、分子設計と予測モデルを組み合わせた効率的な化合物探索事例も報告されつつある。本発表では近年のAI創薬の動向に加えて塩野義製薬における研究事例を含めて紹介したい。

「参加申込書」 第105回(2022年度第3回)産研テクノサロン 2022年12月19日(月) 締切:2022年12月16日

|               |        |                                  |
|---------------|--------|----------------------------------|
| ふりがな<br>参加者氏名 | TEL    |                                  |
|               | FAX    |                                  |
| 会社・団体名        | 希望参加方式 | いずれかに○をお付けください<br>会場での聴講 Webでの聴講 |
| ご所属・役職等       | E-mail | Web接続情報をお送りしますので、間違いのないようご記入ください |
| 産研テクノサロン      | 会員 非会員 |                                  |

\* 今後はE-mailでご案内いたします。

\* ご記入いただいた情報は、各種連絡・情報提供のために利用することをはじめ、講師には参加者名簿として開示することがあります。