

「AIと有機合成化学」第3回公開講演会

主催 有機合成化学協会 共催 早稲田大学理工学術院総合研究所

日時:2019年1月31日(木)

会場:早稲田大学国際会議場[東京都新宿区西早稲田 1-20-14]

交通:東京メトロ東西線「早稲田駅」下車徒歩 10 分

公益社団法人有機合成化学協会におきましては2018年2月より「AIと有機合成化学」研究部会を設立、有機合成におけるAIの利用を学術・技術の両面から検討する試みを始めました。今後も定期的な講演会・研究会を開催し協会員同士の情報交換を図り、これからの社会に広く貢献していく有機合成化学の未来のかたちを探ります。今回も有機合成化学におけるAIの利用にいち早く取り組まれている先生方にご講演をお願いし、「AIと有機合成化学」第3回公開講演会を開催いたします。有機合成化学協会の会員の皆様だけでなく広い分野の方々のご参加をお待ちいたしております。

【プログラム】※下記の時間は質疑応答を含む／敬称略

第I部 話題提供・講演(於;国際会議場 井深大ホール)

13:00～13:05 開会の挨拶:有機合成化学協会事業委員長／東レ(株)医薬研究所副所長 林 亮司

講演(1)「創薬研究の最前線」(13:05～14:05)

(帝人ファーマ株式会社生物医学総合研究所上席研究員) 上村みどり

「適切な薬剤を適切な量、適切な時間」に使うことはまさに、自分や家族が病気になった際に患者が望む理想の医療をうけるという意味で非常に大切な概念である。そのためにも、臨床現場におけるビッグデータをもとにしたAIを利用するさまざまな取り組みが我が国においても始まっている。ドラッグデザインにおいても、より効率的に既存の手法をリストラクチャリングすることで臨床での薬効予測を高めることでコストの削減を可能とする。

講演(2)「人工知能(AI)と統計モデル」(14:05～15:05)

(株式会社ワイハット代表取締役社長) 梶山昌之

人工知能(AI)の本質はどのようなものとお考えでしょうか。また、AIを有機合成化学に活用する方法を検討中の方も多いと思います。しかしながら、AIと機械学習はなにが違うのか、機械学習と統計モデルの違いは何かについて疑問を持っている方も多いのが現状です。また、どのような課題に対してAIが適しているのかは良く知られていません。本講演では、これらの疑問について解説します。さらに、AIの活用事例を紹介し、AIによりもたらされる未来について考えます。

休憩15:05～15:30

講演(3)「反応経路自動探索を用いる機構解析と機械学習による効率的な材料探索」(15:30～16:30)

(奈良先端科学技術大学院大学研究推進機構特任准教授) 畑中美穂

データ駆動型科学の機運の高まりとともに、材料科学分野における様々なデータベースが構築されてきている。しかし、着目したい材料の機能や物性のデータが揃っていないことを鑑みると、既存のデータベースやインフォマティクスの技術を効果的に活用し、少ないデータを元に、機能・物性予測を可能にする方法論を確立することも重要な戦略の一つであると言える。講演では、少数のデータから、メカニズムの情報を取り入れつつ、適切な材料を探索する試みを紹介する。

講演(4)「データ駆動による新材料の発見」(16:30~17:30)

(京都大学大学院工学研究科教授) 田中 功

近年、実験や理論計算で大量のデータの収集が可能となり、またそれらを活用するためのデータ科学手法に大きな進歩が見られている。演者らは、網羅的な第一原理計算をもとに、超低熱伝導度材料、光触媒材料等について、効率的に候補材料を見つけ出すことに成功した。また無機物質の結晶構造データベース ICSD 収録の既知化合物データをもとに、第一原理計算や記述子を使用せずに安定な未知化合物が存在する化学組成を予測する推薦システムを構築した。これらの成果について紹介する。

※第Ⅱ部:情報交換会(於;国際会議場 3F会議室) 17:45~19:00

第Ⅰ部を踏まえて、さらに講師の先生方との個別の質疑応答や討論等をこの場で行う予定にしております。

参加費

第Ⅰ部(話題提供・講演)

本会会員(企業関係)5,000円/本会会員(大学・官公庁関係)3,000円/会員外15,000円

本会会員(学生)1,000円/会員外(学生)2,000円

第Ⅱ部(情報交換会)

おひとりにつき 5,000円

定員と申込方法 第Ⅰ部=200名/定員になり次第締め切らせて頂きます。

第Ⅱ部=80名/定員になり次第締め切らせて頂きます。

本会のインターネットホームページ(<https://www.ssocj.jp/>)からお申込み下さい。

なお送金方法は郵便振替(00100-1-157690)、銀行振込(みずほ銀行神田支店普通預金 NO.1620638・公益社団法人有機合成化学協会)にて必ず事前にお問い合わせいたします。

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台 1-5(化学会館内)

(公社)有機合成化学協会 AI講演会係(電話 03-3292-7621)(FAX 03-3292-7622)

e-mail:syn.org.chem@tokyo.email.ne.jp