

**「化学データサイエンスおよび人工知能討論、勉強会」立ち上げ会：  
計算毒性学研究会主催**  
**“Chemical Data Science and Artificial Intelligence Discussion, Work Shop”  
Kick-off Meeting:**  
**Organized by the Computational Toxicology Study Group**

**開催趣旨：**

データサイエンスや人工知能関連技術は化合物を中心とした多種多様な分野でも適用が拡大している。化合物を中心とした関連分野は化合物全般に及ぶだけでなく、化合物を利用する様々な分野での適用がされている。医／農薬開発、毒性（生体／生態（環境））予測、物性／機能性化合物開発、動物実験代替法と様々である。また、データサイエンスや人工知能技術は化合物のみならず、種々画像データや機器スペクトルデータ、さらには遺伝子／タンパクデータ等の様々な種類のデータを用いたデータ解析にも重要な役割を果たす。

データサイエンスや人工知能は上記に加えて様々な研究分野に適用可能である。コンピュータの様々な進歩にも支えられて、従来とは次元の異なる成果を提供する可能性がある。

本フォーカストセッションでは、化学分野でのデータサイエンスや人工知能適用技術であるケモメトリックスの研究実施として、機能性化合物等に適用した事例についての発表をいただく。また、創薬分野にデータサイエンスや人工知能を適用した事例に関する情報も発表される。

今回のデータサイエンスや人工知能の急速な発展と適用分野の広がり、CPU 自体の変革を導き出しつつある。自分の PC が「インテル AI 入っている？」となるかもしれない・・・。

**モデレーター：** 湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta  
株式会社インシリコデータ In Silico Data, Ltd.  
植沢 芳広 Yoshihiro Uesawa  
明治薬科大学 Meiji Pharmaceutical University  
金子 弘昌 Kaneko Hiromasa  
明治大学 理工学部 応用化学科

**1. 人工知能を活用した分子設計・材料設計**

**金子 弘昌 Kaneko Hiromasa**  
明治大学 理工学部 応用化学科  
Meiji University Department of Applied Chemistry School of Science and Technology

[データ化学工学研究室（金子研究室）](#)では、医薬品をはじめとして様々な高機能性材料のデータを機械学習等により解析し、その中に隠れている関係性をモデル化し、そのモデルに基づいた未知の化学構造・材料・製品の評価および設計を実施している。本講演では機械学習により高機能性材料の研究・開発を支援する方法を解説し、ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス分野における研究事例について紹介する。

**2. はじめての AI 創薬と Elix における事例紹介**

**結城 伸哉 Shinya Yuki**  
株式会社 Elix Elix, Inc.

**3. 富士通が考えるニューノーマル時代の研究スタイル**

**古田 一匡 Kazumasa Furuta**  
富士通株式会社 Fujitsu Ltd.

**4. インテルの AI に向けての取り組み**

**大内山 浩 Hiroshi Ouchiya**  
インテル株式会社 Intel K.K.

近年、AI の社会実装、事業実装が進み、あらゆる場所でこの新しいテクノロジーの恩恵を受けるようになってきました。インテルは、既に“どこにでもある”インテル CPU の上で皆様が当たり前のように AI を動かすことを追求し続け、日々製品の強化・改良を進めております。本講演ではハードウェア、ソフトウェア、お客様事例を交えてインテルが AI に対してどのような取り組みを行っているかをお話しします。