

▶▶ これまでの例会

(公社) 日本分析化学会 高分子分析研究懇談会 会員各位

高分子分析研究懇談会
運営委員長 渡辺 健市

第390回例会開催のご案内

第390回例会を下記のように開催致します。万障繰り合わせの上、是非ご出席下さいますようご案内申し上げます。会場は交通アクセスの良い御茶ノ水駅前となっております。また、今回は3件の講演を行い、特集として「AI」を用いたご研究をされている先生にお願いしました。例会後には、年末開催のため会員相互の懇親を深めるための交流会も企画いたします。尚、非会員の方も1回は例会への体験参加が可能です。多くの皆様の積極的なご参加をお待ちしております。

記

主催 (公社) 日本分析化学会 高分子分析研究懇談会

日時 2017年12月13日 (水) 12時30分 ~ 17時05分

場所 例会：明治大学 紫紺館 4F S5, S6, S7会議室

(電話03-3296-4727, JR御茶ノ水駅から徒歩5分)

交流会：ナポリの下町食堂 お茶の水店

(電話 03-3291-3601、ニュー駿河台ビル B1F)



開会のあいさつ (12:30 ~ 12:35)

(豊田合成) 渡辺 健市

講演 1 (12:35 ~ 13:35)

「帰納的・演繹的計算科学アプローチとしての機械学習とシミュレーション」

(理研) 菊地 淳

IoT計測によるデータベース化と、蓄積したビッグデータからの機械学習は、分析科学と計算科学を繋ぐ重要手法となっている。卓上型や高温超電導磁石の小型NMR装

置流通が、今後のIoT品質管理に期待される1)。さらに計測再現性と機関間互換性に優れたNMR情報はデータベース化する意義も高く2)、情報技術者の育成も必要である。こうした人材をNMRラボに配置することで、種々の多変量解析の利用3)や機械学習アルゴリズムの導入4)も可能になる。こうした帰納的アプローチと、量子化学計算や分子動力学シミュレーションによる演繹的アプローチ5)の両面から、NMR計算科学は重要情報を提供できる。

文献：1) Chikayama et al. (2016) *Metabolites*, 6, 36; Kikuchi et al. (revised) *Prog. NMR Spectrosc.* 2) Kikuchi et al. (2016) *Anal. Chem.* 88, 659; Kikuchi & Yamada (in press) *Analyst*. 3) Ito et al. (2014) *Anal. Chem.* 86, 1098; Motegi et al. (2015) *Sci. Rep.* 5, 15710; Shiokawa et al. (2016) *Anal. Chem.* 88, 2714. 4) Tsutsui et al. (2017) *J. Comp. Aid Chem.* 18, 31; Date & Kikuchi (revised) *Anal. Chem*; Shiokawa et al. (revised) *Sci. Rep.* 5) Komatsu et al. (2016) *Angew. Chem. Int. Ed.* 55, 6000; Ito et al. (2016) *ACS Chem. Biol.* 11, 1030; Chikayama et al. (2016) *J. Phys. Chem.* 120, 3479.

ワークショップ 1 (13:35 ~ 14:05)

「緩和時間測定と分子動力学シミュレーションを用いた

易接着フィルムのなじみ性発現機構解析」

(日立化成) 岩本 浩介

易接着フィルムは常温で簡単に貼って、糊残りなく剥がせるという利便性によって需要が拡大している。この粘着剤の重要な特性として、なじみ性(濡れ性)がある。なじみ性が良いと、弱い力の印加でも短時間で被着体の凹凸に追従し粘着力を発揮できる。我々は、粘着剤の共重合モノマのエチレンオキサイド(EO)鎖の長さを変化させるとなじみ性が大きく変化することを見出した。本研究では、その機構解明を目的として、NMRを用いた樹脂部分構造の緩和時間測定でEO鎖の分子運動性を数値化し、さらに分子シミュレーションを複合的に用いることで、ある長さのEO鎖末端の高い運動性の挙動がなじみ性に関係していることを示した。

休憩 (14:05 ~ 14:20)

講演 2 (14:20 ~ 15:20)

「質量分析器データの多次元データ解析による香り印象の予測・再現」

(東工大) 中本 高道

質量分析器データに対して自己組織化マップや深層学習を適用し、官能検査で得られた香りの印象を予測する手法を提案し、従来の線形手法に比べて良好な予測結果が得られた。その際、次元圧縮を行う2つのオートエンコーダを使用する方法を提案している。また、オートエンコーダによる質量分析器データの次元圧縮を行うが、データ間の類似性を評価する距離関数の検討について述べる。さらに、質量分析器データから非負値行列因子分解法 (Nonnegative Matrix Factorization, NMF法) を用い、少ない数の要素臭を構成する手法及び再現マススペクトルとその再現臭の官能検査による評価について紹介する。

ワークショップ 2 (15:20 ~ 15:50)

「有機化合物のスペクトルデータベース (SDBS)

—利便性の向上を目指した取り組み—

(産総研) 齋藤 剛

有機化合物のスペクトルデータベース (SDBS) は、1980年代に構築に関わる研究が始まって以来、現在も¹H NMR、¹³C NMR、IR及びMSのスペクトル収集、評価、公開作業などを中心に活動を継続している。1997年よりインターネットで公開しているSDBSのスペクトルデータは、これまで独自の化合物検索を利用して特定された化合物を通してのみスペクトルを参照することができたが、現在、すべての化合物とスペクトルに対してランディングページを用意し、外部の検索ツールを利用したスペクトルの検索ができるように準備を進めている。本講演では、SDBSスペクトルデータの概要の解

説及びユーザの利便性向上を目指した取り組みなどを示したい。

休憩 (15:50 ~ 16:05)

講演3 (16:05 ~ 17:05)

「理論分子科学と京コンピュータ」

(理研) 中嶋 隆人

われわれは、予測性を備えた理論先導の科学を確立し、大規模で複雑な分子系の反応・性質・機能をミクロの立場から理論先導で解明するために、京やポスト京コンピュータを利用した次世代の理論分子科学の基盤構築を目指している。そのため、京をはじめとするスーパーコンピュータの並列計算環境を有効に活用できる分子科学計算ソフトウェア「NTChem」の開発を行っている。「NTChem」は既存の計算機能を有するだけではなく、独自に提案した量子化学的計算手法を利用することができ、適用できる科学的問題が大幅に広がることが大きな特徴である。また、京コンピュータを利用したマテリアルズインフォマティクスにより、太陽電池や人工光合成材料に対し実験に先立ったシミュレーション設計を行っている。本発表では、NTChemと材料シミュレーションの取り組みについて紹介する。

交流会(17:15 ~ 19:00) ナポリの下町食堂お茶の水店

(住所：千代田区神田駿河台2-1-45 ニュー駿河台ビルB1F)

参加費は会員2,000円、非会員(体験参加者)は4,000円です。

立食形式の交流会です。講師を囲んで、あるいは会員相互で自由な意見交換を行います。是非、ご参加下さい。

申込方法 参加希望者は、12/6(水)までに、研究懇談会ホームページ (<http://www.pacd.jp/index.html>) の「参加申込フォーム」に必要事項をご記入のうえ、お申し込み下さい。
→参加登録は**終了しました**から

申込先、問い合わせ先

帝人(株) 構造解析センター 菅沼 こと

[電話：042-586-8121, FAX：042-586-8123, E-mail: pacd-reikai-info@pacd.jp]