

☆ 「少ないデータ」「不均一なデータ」から、化学物質の未知の領域をいかに予測するか？

☆ どんなデータが必要か？ 解析手法の応用事例は？ 予測精度はどの程度になるか？

# ケモインフォマティクスにおける データ収集の最適化と解析手法

～ 組成予測や化学構造の生成、合成経路探索や反応条件最適化、毒性評価 ～

● 発刊：2023年4月28日

● 体裁：A4判 657頁

● 定価：88,000円(税込)

● ISBN：978-4-86104-944-6

※大学、公的機関、医療機関の方には割引価格（アカデミック価格）で販売いたします。詳しくはお問い合わせください。



Webブックもあります。詳しくはHPにて！

→ [https://www.gijutu.co.jp/doc/b\\_2196.htm](https://www.gijutu.co.jp/doc/b_2196.htm)

## 本書のポイント

- 【1】 化学構造の表現・数値化と記述子の設計法** —最新の分子記述子、その種類と活用法
- 【2】 データ収集・データベース構築での留意点** —解析の精度向上やデータ取得コストに留意したデータ収集、実験回数最適化
- 【3】 データセットの作成と各種解析手法の活用事例**  
—解析をスムーズに行うためのデータセット作成、データ可視化・低次元化、クラスタリング、クラス分類、線形回帰、非線形回帰  
—非線形データ解析・モデリング、ハイパーパラメータ最適化 —スパースモデリング、ベイズ最適化、少ないデータ対策
- 【4】 機械学習の具体的活用とその事例**  
—転移学習の活用事例 —過学習に留意した最適なモデル構築 —説明可能AI、Python、KNIME、量子コンピュータの活用
- 【5】 合成経路探索・反応条件の最適化**  
—AIによる合成条件推薦システム、逆合成解析、触媒選択、フロー合成の条件最適化、物質合成パラメータの最適化
- 【6】 化学物質・材料設計や医薬品開発への活用**  
—化学物質・材料設計分野：スパースモデリングによる特徴量エンジニアリング、ベイズ最適化によるポリマー設計、ハイスループット材料合成  
—医薬品開発分野：創薬リード探索、化学構造の生成、タンパク質の配列設計、代謝物構造推定、DB（メタボローム、医薬品安全性情報など）の活用
- 【7】 化学物質の毒性評価** —オープンデータベースの活用、QSAR解析
- 【8】 分析インフォマティクスとの連携・活用** —HPLC分析メソッド開発、NMR化学シフト予測の高精度化、TOF-SIMS解析

※ 各章・節立ては裏面をご覧ください

## 執筆者(敬称略)

奈良先端科学技術大学院大学  
熊本大学  
(国研)産業技術総合研究所  
三井化学(株)  
(株)キャトルアイ・サイエンス  
大阪大学  
摂南大学  
北海道大学  
北海道大学  
北海道大学  
大阪電気通信大学  
奈良先端科学技術大学院大学  
滋賀大学  
奈良先端科学技術大学院大学  
名古屋大学  
豊橋技術科学大学  
豊橋技術科学大学  
豊橋技術科学大学  
豊橋技術科学大学  
奈良先端科学技術大学院大学  
城西大学

宮尾知幸  
杉本学  
安藤康伸  
向田志保  
上島豊  
小野寛太  
河合健太郎  
岩佐豪  
小林正人  
武次徹也  
森田成昭  
金谷重彦  
江崎剛史  
船津公人  
松井孝太  
後藤仁志  
五十幡康弘  
加藤凱生  
立花尚登  
井上泰彰  
寺前裕之

ケモインフォ(株)  
旭化成ファーマ(株)  
旭化成ファーマ(株)  
高度情報科学技術研究機構  
(国研)産業技術総合研究所  
岡山県立大学  
(株)メドインフォ  
(国研)理化学研究所  
大阪大学  
(株)Transition  
(株)Transition  
北里大学  
京都大学  
(国研)産業技術総合研究所  
(国研)理化学研究所  
京都大学  
京都大学  
北海道大学  
北海道大学  
静岡大学  
(国研)物質・材料研究機構  
東京大学  
東レ(株)

藤秀義  
下田嵩央  
山口貴也  
河東田道夫  
椿真史  
野田祐輔  
奇山陽二郎  
佐藤朋広  
金銅  
山口徹  
堀憲次  
若杉昌輝  
林博之  
矢田陽  
山口滋  
竹邊日和  
松原誠二郎  
永木愛一郎  
岡本和紘  
間瀬暢之  
大久保勇男  
Mikk Lippmaa  
山本海

筑波大学  
(一財)アイソトープセンター  
東京理科大学  
東京理科大学  
東京理科大学  
(国研)物質・材料研究機構  
京都大学  
京都大学大学院  
(国研)物質・材料研究機構  
(株)レゾナック  
(株)レゾナック  
(国研)物質・材料研究機構  
慶應義塾大学  
(株)インシリコデータ  
日本たばこ産業(株)  
明治薬科大学  
(一財)化学物質評価研究機構  
(一財)化学物質評価研究機構  
(国研)産業技術総合研究所  
静岡県立大学  
京都大学  
(株)理論創薬研究所

五十嵐康彦  
森分博紀  
秋津貴城  
中根大輔  
滝口裕司  
小原真司  
小野寺陽平  
永持仁  
岩崎悠真  
南拓也  
中陳巧勤  
長田貴弘  
緒明佑哉  
湯田浩太郎  
黒崎宏太  
植沢芳広  
赤堀有美  
林多恵  
竹下潤一  
吉成浩一  
掛谷秀昭  
吉森篤史

梅津光央  
齋藤裕  
亀田倫史  
津田宏治  
山本博之  
村上洋一  
長尾知生子  
水口賢司  
東田欣也  
米澤朋起  
池田和由  
櫻井望  
重田晋照  
原田隆平  
満田祐樹  
高橋輝行  
水牧仁一朗  
溝口照康  
柴田基洋  
鈴木政明  
鈴地淳  
青柳里果

## 第1章 化学構造の表現・数値化と記述子の設計・活用

- 1節 説明変数選定と記述子の設計法
- 2節 分子記述子の種類と活用法

## 第2章 データ収集・データベース構築での留意点

- 1節 精度向上のためのデータ収集で考えなければいけないこと
- 2節 データ取得コストに留意したデータ収集での留意点
- 3節 R & D部門におけるデータ共有システムの構築とその活用方法
- 4節 ハイスループット実験による効率的で生産性の高いデータ収集法

## 第3章 データセットの作成と各種解析手法の活用事例

- 1節 データ解析をスムーズに行うためのデータセット作成の留意点
- 2節 計算化学研究におけるスパースモデリングの応用
- 3節 次元削減によるデータセットの可視化と主成分分析
- 4節 データセットの構築法とデータの関係性の視覚化
- 5節 「線形回帰モデル」と「非線形回帰モデル」によるデータ解析での留意点
- 6節 非線形データ解析・モデリングと外挿性改善  
～Random Forestに外挿性を付与する～
- 7節 ベイズ最適化による効率的実験計画とデータ解析
- 8節 ハイパーパラメータの最適化の事例
- 9節 Rでのケモインフォマティクスの実践事例

## 第4章 機械学習の具体的活用とその事例

- 1節 ケモインフォマティクスにおける機械学習モデルの種類と具体的活用法
- 2節 Pythonのケモインフォマティクスでの活用
- 3節 KNIMEを活用したデータ処理・ケモインフォマティクスの事例紹介
- 4節 量子コンピュータのケモインフォマティクスへの応用
- 5節 機械学習のためのデータの预处理での留意点
- 6節 過学習に留意した最適な機械学習モデルの構築
- 7節 少ない実験回数で予測精度の高い機械学習モデルの開発
- 8節 転移学習を用いたデータ解析のポイント
- 9節 「説明可能なAI」による複雑分子系の状態間遷移における遷移状態の解明

## 第5章 化学物質の合成経路探索・反応条件最適化への活用事例

- 1節 反応条件最適化へのケモインフォマティクスの応用
- 2節 機械学習や深層学習を用いた合成容易性予測モデルの開発動向
- 3節 AIによる合成条件推薦システムの構築
- 4節 触媒選択へのケモインフォマティクスの応用
- 5節 量子化学計算により収集した触媒活性を用いた機械学習
- 6節 AIによる逆合成解析の経路探索の手法と活用
- 7節 AIによるフロー合成の反応条件最適化
- 8節 フロー合成の反応条件最適化への機械学習の活用
- 9節 機械学習による意思決定とデータ解釈：物質合成パラメータの最適化とin situ測定結果の自動解析

## 第6章 化学物質・材料設計への活用事例

- 1節 インフォマティクスによる材料組成の予測・最適化
- 2節 マテリアルズインフォマティクスにおけるスパースモデリングを用いた特徴量エンジニアリングの展開
- 3節 社会実装を目指した強誘電体・誘電体材料のマテリアルズインフォマティクス
- 4節 ケモインフォマティクスを用いた3次元立体構造と電子的な特性～単分子磁石サレン希土類錯体の探索研究に取り組むまでに～
- 5節 材料の物性予測へむけた非晶質物質の量子ビーム構造解析
- 6節 機械学習と離散最適化に基づく新規物質設計
- 7節 自律材料探索AIを用いた材料設計の事例
- 8節 ベイズ最適化によるポリマーの効率的設計
- 9節 実証実験でのコンビナトリアル手法の活用とハイスループット材料合成
- 10節 ケモインフォマティクスを用いた層状物質のはく離挙動の制御

## 第7章 化学物質の毒性評価手法とその事例

- 1節 ケモインフォマティクスを用いた化合物毒性予測での記述子設計とデータ解析
- 2節 安全性評価に活用できるオープンデータベースとその活用
- 3節 QSAR解析による毒性評価
- 4節 インビボ毒性試験データベースを用いた反復投与毒性のインシリコ予測
- 5節 毒性発現機構を考慮した一般化学品の毒性予測システムの開発～AI-SHIPS～

## 第8章 医薬品開発への活用事例

- 1節 創薬リード探索へのケモインフォマティクスの活用
- 2節 ケモインフォマティクスとAIによる化学構造の生成
- 3節 少ない実験データとベイズ最適化による機能タンパク質の配列設計
- 4節 質量分析インフォマティクスとケモインフォマティクスによる代謝物構造推定
- 5節 創薬研究に有用なデータベースとその活用のポイント
- 6節 医薬品安全性情報DBのインフォマティクスへの活用
- 7節 化合物ライブラリーの情報検索におけるポイント
- 8節 化合物同定のためのメタボロームデータベースの活用
- 9節 第一原理計算と分子動力学計算による膜透過性の評価・推定

## 第9章 分析インフォマティクスとの連携・活用事例

- 1節 機械学習によるスペクトルデータ解析
- 2節 内殻電子励起スペクトル (ELNES/XANES) の理論計算と機械学習を用いた解析
- 3節 AIによるHPLC分析メソッド開発の事例
- 4節 AIによるNMRパラメータ予測とプロセスインフォマティクスへの活用
- 5節 機械学習によるTOF-SIMS スペクトル解析

詳細な目次・内容の確認、  
購入や試読のお申込みはこちらから



### <申込要領>

●本書籍は一般書店では取り扱いをいたしておりません。  
右記申込書に必要事項をご記入の上、郵送又はFAXにてお送りください。  
ホームページからも申込みできます。 <http://www.gijutu.co.jp/>  
お申込みを確認でき次第、書籍・請求書をご送付いたします。

### ●支払方法

銀行振込または現金書留にてお願いいたします。  
郵便振替はございません。 振込手数料はご負担ください。  
銀行振込の場合、原則として領収書の発行はいたしません。

### ●お申込・お問い合わせ先

 **技術情報協会**  
TECHNICAL INFORMATION INSTITUTE CO.,LTD.

〒141-0031  
東京都品川区西五反田2-29-5  
日幸五反田ビル8F  
TEL : 03-5436-7744 (代)  
FAX : 03-5436-7745 [申込専用]

「ケモインフォマティクス」(No.2196) 申込冊数 冊

定価：88,000円(税込)

|     |  |  |        |
|-----|--|--|--------|
| 会社名 |  |  |        |
| 所属  |  |  |        |
| 氏名  |  |  | e-mail |
| 住所  |  |  |        |
| TEL |  |  | FAX    |

今後、定期的な案内を希望されない場合、案内方法に×印をお願いいたします。

(現在案内が届いている方も再度ご指示ください) [ 郵送(宅配便) ・ FAX ・ e-mail ]

【個人情報の利用目的】・商品の受付、商品発送、事務処理、アフターサービスのため  
・今後の新商品・新サービスに関するご案内のため