

第 73 回応用物理学会春季学術講演会 シンポジウム報告

T16「ナノバイオテクノロジー分野におけるインフォマティクス技術の応用」報告

日時： 2026 年 3 月 15 日（日） 13:30 ~ 16:20

会場： 東京科学大学 WL1_301 室

企画母体： 有機分子・バイオエレクトロニクス分科会

世話人： 望月祐志（立教大）* 住友弘二（兵庫県大） 手老龍吾（豊橋技大）
有馬祐介（九大）

1. はじめに

機械学習・AI の材料科学分野における応用分野として、マテリアルズインフォマティクスが確かな一角を占めるに至っています。一方、ナノバイオテクノロジー分野でも 2024 年度のノーベル化学賞がタンパク質の構造構築に関する AI システムの開発に与えられており、特に AlphaFold は使い勝手が良いため、理論・計算の研究者だけでなく、構造生物学や創薬系の実験研究者もツールとして利用が進みつつあります。

本シンポジウムでは、ナノバイオテクノロジーやソフトマテリアル分野でインフォマティクス活用を先導的に行っている研究者による 6 件の招待講演、3 件の一般講演が行われ、質疑応答を通じて議論が深められました。

2. 各講演のダイジェスト

（招待）林慶浩 氏（統計数理研究所）【PolyOmics:Sim2Real 機械学習のための大規模高分子計算データベース】

「富岳」上で高分子の分子動力学(MD)シミュレーションを自動化する RadonPy を用いて、10 万以上のポリマー種に対して 43 種の多様な物性値を収録するデータベース PolyOmics を開発し、理論計算と実験のギャップを埋める simulation-to-real (Sim2Real) 転移学習の文脈で利活用しつつある現状を紹介されました。その中では、事前学習に用いた計算データサイズ n の増加に伴い、実験値予測の汎化誤差 E がべき乗則 ($E=Dn^{-\alpha}+C$) に従って単調に減少する「スケーリング則」の重要性が例示されました。

（招待）林智広 氏（東京科学大学）【機械学習を用いた生物吸着を忌避する表面設計および界面分子プロセスの解析】

最初の事例は、医療器具での血栓形成に関わるフィブリノーゲンの自己組織化単分子膜 (SAM) 上への吸着を抑制する問題への人工ニューラルネットワーク (ANN) の利用で、SAM 素材の末端部の違いによる差と共に、タンパク質側で吸着に関わる記述子が示されました。次

の事例は、全反射型赤外分光(ATR-IR)による抗付着性膜界面の水和状態の検討で、分子軌道(MO)計算による振動モード解析を連携させた研究で水素結合状態のバルク水との違いが鍵であることが明示されました。

(一般) 山内仁喬 氏 (Matlantis (株)) 【汎用機械学習力場を用いた酵素反応機構と自由エネルギー解析】

機械学習系のポテンシャル(MLIP)の中で、Matlantis 社の PFP は元素のカバー率も多く、その高速性を活かして材料系への適用事例が多数報告されています。今回は、バイオ系の問題として PET 樹脂分解酵素の反応解析にアンブレラサンプリングを組み合わせて適用した成功例を発表されました。

(一般) 奥脇弘次 氏 (大阪大学&JSOL (株)) 【フラグメント分子軌道法による生体分子の網羅的量子化学計算データの収集と手法開発】

フラグメント分子軌道(FMO)計算は、タンパク質の相互作用エネルギー算定に好適で、FMO DD コンソーシアムではデータベース (DB) に結果を蓄積して公開しています。今回は、畳込み構造に関する SCOP2 の整備状況について相互作用の内訳 (PIEDA) を含めての紹介となりました。

(一般) 土居英男 氏 (立教大学) 【SCOP2 データベースに基づくタンパク質内相互作用エネルギーの予測】

上記 SCOP2 の相互作用エネルギーデータは{6-31G*, 6-31G**, cc-pVDZ}の各基底関数で算出されたものでした。これを計算コストが数分の 1 以下となる 3-21G 基底による FMO サロゲートモデリングでどこまで精確に予測できるかを検証した結果を紹介し、cc-pVDZ の精度の低下、Cys-Cys 系での学習データの不足などを示しました。

(招待) 加藤幸一郎 氏 (九州大学) 【ナノバイオ界面にも適用可能な分子シミュレーションとデータ科学の融合手法の構築】

最初の話題は、FMO 計算由来の粗視化パラメータを用いる散逸粒子動力学 (DPD) シミュレーションで{Nafion, Aquivion, Flemion}を扱い、パーシステントホモロジー (PH) で得られる指標を記述子として用いる水和構造の解析例で、Flemion では相対的にイオン電導度が低くなる理由が説明されました。2 つめの話題は、FMO の結果データから演繹される機械学習力場の開発で、対象系の分極や非局在化が考慮された有効電荷の導出のメリットが例示されましたが、今後は、サロゲートモデルも視野に入れているとのことでした。

(招待) 泰岡顕治 氏 (慶應義塾大学) 【分子シミュレーションの高速化と自動解析に向けた機械学習の活用】

Wasserstein 距離を基準とする敵対的生成ネットワーク (GAN) を利用し、本来は長時間の算定を要する統計量を短時間の MD シミュレーションから精度良く予測する MD-GAN を最初に紹介されました。次に、MD 結果の統計的な解釈の自動化を、アミノ酸の水和構造を例に示されました。続いて、潤滑剤が示すせん断速度に依存した粘度変化と分子運動の関係、タイヤに接する氷の表面に形成される擬似液体層の温度依存挙動に関する MD 解析も例示されました。全体として、MD シミュレーションの産業利用への可能性が感じられる内容でした。

(招待) 吉川元起 氏 (物質材料研究機構) 【AI 嗅覚センサによるニオイ分子識別】

ニオイの検出と識別は、実用的にも注目される応用物理の技術です。膜型表面応力センサ (MSS) と機械学習を組み合わせ、ニオイ分子の特定指標の定量的な推定、解析結果の感応膜設計へのフィードバックによって、検出の感度と選択性を最適化するアプローチを示された後、説明可能 AI (XAI) による識別変数の同定と可視的把握、ロバストな特徴量設計を話されました。応用では、酪農分野 (牛乳)、医療分野 (呼気) を例示されました。

(招待) 谷口正輝 氏 (大阪大学) 【ナノ・量子・AI を駆使した単一分子識別】

独自のナノギャップを用いたトンネル電流計測を基盤とする生体分子シークエンサーに AI と量子計算を融合した単一分子識別技術を、DNA・RNA・ペプチド配列の識別に適用した様々な応用例と共にご講演いただきました。特に、塩基ユニットのエピジェネティックな化学修飾まで判定できる高い解像度は強いインプレッションを与えました。さらに、IBM の量子コンピュータ実機を用いて検出信号の量子的重ね合わせを直接処理する最新技術は今後の発展が期待されるものでした。

3. おわりに

昨秋の T19 シンポジウム「ナノバイオテクノロジー分野における実験と分子シミュレーションのインタープレイ」と同じく、今回も実験とシミュレーションのご講演が上手くバランスしたシンポジウムとなりました。「富岳」の後継機として 2030 年に稼働予定の「富岳 NEXT」を意識し、AI for Science (AI4S) が文部科学省、理研を中心に唱えられており、AI やデータ科学の実践的な活用が進んでいくものと考えられます。今後も、折を見てこうしたシンポジウムを企画させていただければ幸いです。