

# 令和 8 年度

## 学校推薦型選抜 I (一般枠)

### 小論文問題紙

工学科 化学生命プログラム

#### 【小論文テーマ】

コンピュータシミュレーションを活用することにより、電気回路や機械部品などは試作を経ることなく、開発や性能評価を行うことが可能となっている。一方、こうした製造技術を支えるには、物質や材料の研究開発が欠かせない。この際、原子・分子スケールのふるまい（構造や動きなど）を調べるシミュレーションは重要な役割を担うが、その実行には高性能コンピュータを必要とし、結果を得るまでに長い時間がかかる。

最近では情報技術の進歩により、物質や材料を探求する化学分野でシミュレーションの適用が急速に広がっている。例えば、病気の原因となるタンパク質を標的とした医薬品開発では、タンパク質の立体構造に高い結合親和性を示す治療薬の候補をシミュレーションによって予測する。これは創薬における主要な戦略の一つで、多数の化合物から有望な候補を迅速に絞り込むことができる。

さらに、ビッグデータや人工知能 (AI) を活用し、電池や高分子などの材料機能と化学構造式を結びつける推論モデルを構築することで、新材料の探索や既存材料の性能改善に成功した例が報告されている。また、特定の機能を発現する物質や材料の合成条件を最適化する場面でも、AI の適用が進みつつある。

化学分野の研究開発にシミュレーションや AI などの情報科学的アプローチを適用することの意義や想定される問題点について、800 字以内で述べなさい。

#### 【注意】

- (1) すべての解答紙左上にある受験番号欄に受験番号のみを記入することにし、氏名および題目は記入しないでください。
- (2) 解答紙(400 字詰め原稿用紙)は、No.1 に続けて No.2 を使用してください。
- (3) 本紙(問題紙)は持ち帰ってください。

宮崎大学工学部