

# データ駆動型化学の展開

## ～インフォマティクスの基礎と材料設計への応用～

**講師：船津 公人氏**  
**東京大学 工学系研究科化学システム工学専攻 教授**

データ駆動型化学を実践する上でのデータの見方や取り扱いの考え方を、事例を通して理解することを目的とする。分子設計、材料設計、そしてプロセスの監視と制御までを扱うことで、データ解析が拓く可能性を概観する。

【講師経歴】昭和53年 九州大学理学部化学科卒業、昭和55年 九州大学大学院理学研究科化学専攻修士課程修了、昭和58年 九州大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了 理学博士、昭和59年 豊橋技術科学大学工学部物質工学系助手、昭和63年 同 知識情報工学系助手、平成4年 同 助教授、平成16年～ 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻教授、現在に至る  
 平成23年 ストラスブール大学招聘教授  
 平成29年10月～ 奈良先端科学技術大学院大学・データ駆動型サイエンス創造センター研究ディレクター

【受賞】・アメリカ化学会 Herman Skolnik 賞 (2018年9月)

[http://www.t.u-tokyo.ac.jp/foe/topics/setnws\\_201810021050114857435259.html](http://www.t.u-tokyo.ac.jp/foe/topics/setnws_201810021050114857435259.html)

・Molecular Informatics, Best paper Award 2017 (2018年1月)、・化学工学会 SIS 部会技術賞 (2016年9月)  
 ・日本コンピュータ化学会賞 (2003年5月)、・日本化学会・Bulletin of Chemical Society of Japan (BCSJ)論文賞 (2001年3月)  
 ・受賞対象論文: Bull. Chem. Soc. Jpn., 73, 1955-1965 (2000)、・日本科学技術情報センター 丹羽賞・学術賞 (昭和63年4月) 「化学研究における情報管理および設計支援システムの開発」

【主な研究】・ケモインフォマティクス利用による、分子・薬物設計、材料設計 (プロセス条件も含む)、構造解析、合成経路設計、化学プラントなどを対象とした監視と制御のためのソフトセンサー開発

【プロフィール】「何を作るか、それをどのように作るか、そのものは確かにできたか」と言う広い意味での分子設計トータルシステムの研究開発を長年手がけてきた。このために必要な情報化学的手法の研究や計算化学との連携、化学情報の体系的な利用法について研究を展開している。また、化学工学・プロセスシステム工学における、ソフトセンサー研究を通してプロセスの監視と制御へのケモインフォマティクスの展開も進めている。

開催日時	2020年1月22日(水) 12:30～16:30	【会場】
受講料	46,000円(＋税) ※資料付 * メルマガ登録者は41,000円(＋税) * アカデミック価格は24,000円(＋税)	ちよだプラットフォームスクウェア 503会議室 〒101-0054 東京都千代田区神田錦町3-21

\*アカデミック価格:学校教育法にて規定された国、地方公共団体、および学校法人格を有する大学、大学院の教員、学生に限ります。

★【メルマガ会員特典】2名以上同時申込で申込者全員メルマガ会員登録をしていただいた場合、2名目は無料、3名目以降は半額です。  
 ★【セミナー参加対象者】・マテリアルズインフォマティクスなど、インフォマティクスに興味のある研究開発企画、技術企画、新事業企画などの担当者 (化学や材料系で研究系・技術系) ・マテリアルズインフォマティクスなど、インフォマティクスに興味のある研究者・技術者 (特に化学や材料系) ・特に、インフォマティクスに興味があるが、数式は苦手と感じている方

### 【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

- インフォマティクスとは何か  
インフォマティクスの概要
  - 2 バイオインフォマティクス
  - 3 ケモインフォマティクス
  - 4 マテリアルズインフォマティクス
- データ解析の基礎
  - 2.1 データ解析の基礎
  - 2.2 扱うデータの特性把握
- インフォマティクスとは
  - 3.1 データのモデル化
  - 3.2 モデルの逆解析
- 分子設計の事例紹介
- 有機材料の設計 (ポリマーアロイ) の事例紹介
- 触媒設計の事例紹介
- (マテリアルズ) インフォマティクスを実践するには何が必要か
  - 7.1 データベース
  - 7.2 ソフトウェア
  - 7.3 化学・材料とAIの両方の知識と経験?
- 少ない実験データ・少ない実験回数での目的物性実現の方法
- ソフトセンサー
- プロセスインフォマティクス
- 今後の展望と課題、海外の動向

弊社記入欄		セミナー申込書			
セミナー名	データ駆動型化学の展開 ～インフォマティクスの基礎と材料設計への応用～				
所定の事項にご記入下さい メルマガ会員、登録希望の場合は○ ↓	会社名 (団体名)	住所 〒		TEL :	FAX :
会員登録済み	新規登録希望	部署	役職	氏名	E-mail :
お支払方法	銀行振込・その他			お支払予定	年 月 日頃

■申込方法: セミナー申込書にご記入の上 FAX または E-mail (re@cmcre.com) でお申し込みください。  
 ■セミナーお申込み後のキャンセルは基本的にお受けしておりません。ご都合により出席できなくなった場合は代理の方がご出席ください。  
 ■申込先: (株)シーエムシー・リサーチ 東京都千代田区神田錦町 2-7 TEL03-3293-7053  
 ■本セミナーの関連情報は、弊社HPでもご覧になれます。⇒ <http://www.cmcre.com>

参加申込 FAX 番号  
**03-3291-5789**